Il metodo di Newton

Enrico Bertolazzi

Metodo di Newton

Scelta del punto iniziale: $\mathbf{x}_0$

Ciclo: per k = 0, 1, 2, ...

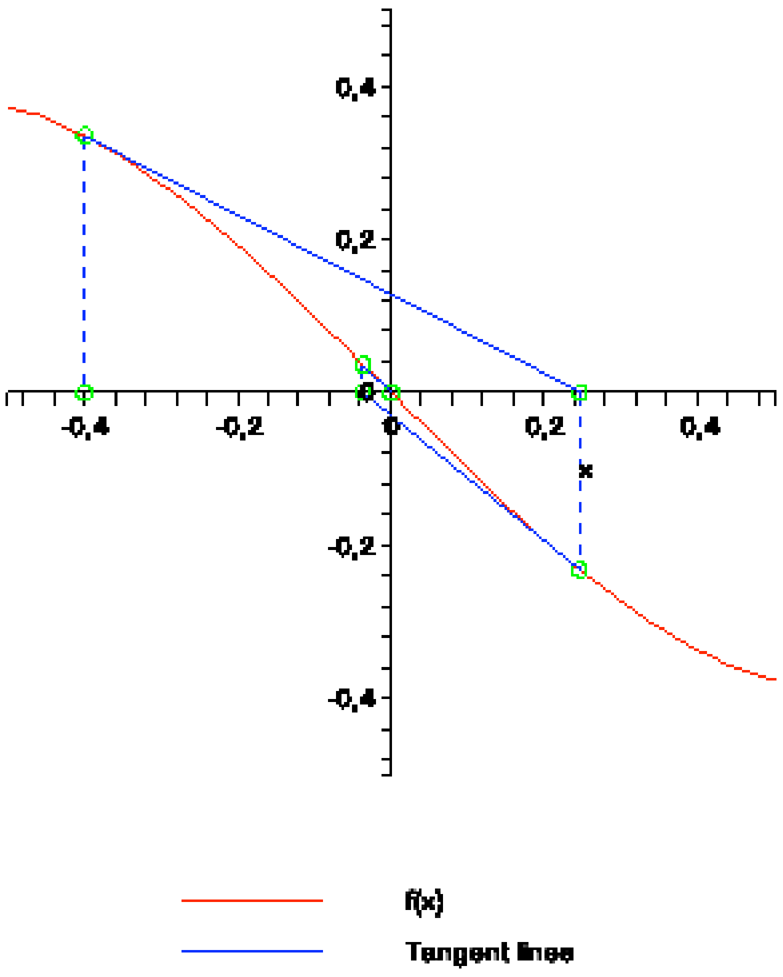
Calcolo direzione avanzamento $\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)\mathbf{s}_k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$

Aggiorna approssimazione della radice $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k$

Possibili criteri di terminazione: $\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| = \|\mathbf{s}_k\| < \epsilon$ $\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| < \epsilon$

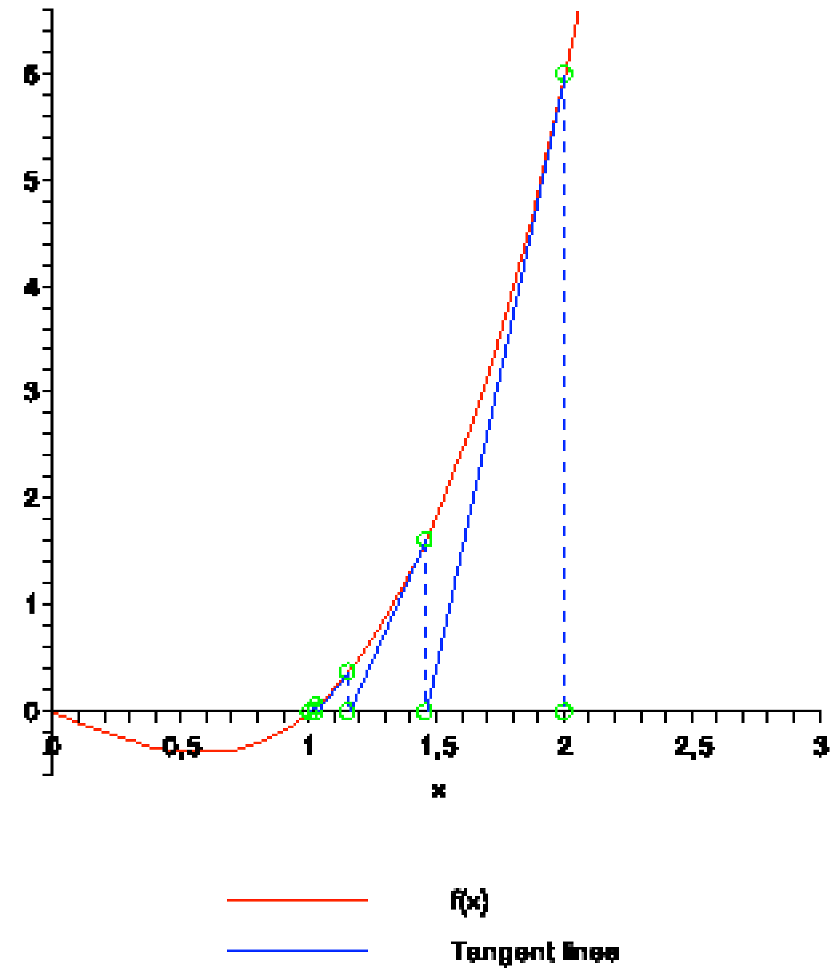
Proprietà del metodo di Newton

Esempio: $f(x) = x^3 - x \quad x_0 = -0.4$



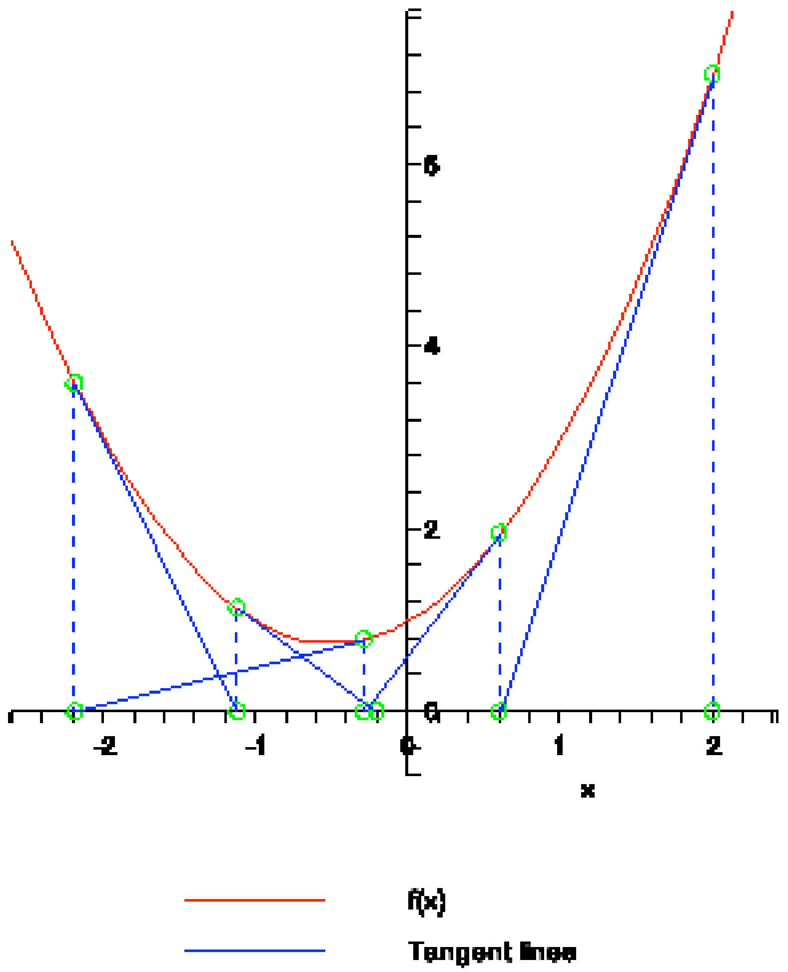
$$f(x) = x^3 - x$$

Esempio: $f(x) = x^3 - x \qquad x_0 = 2$

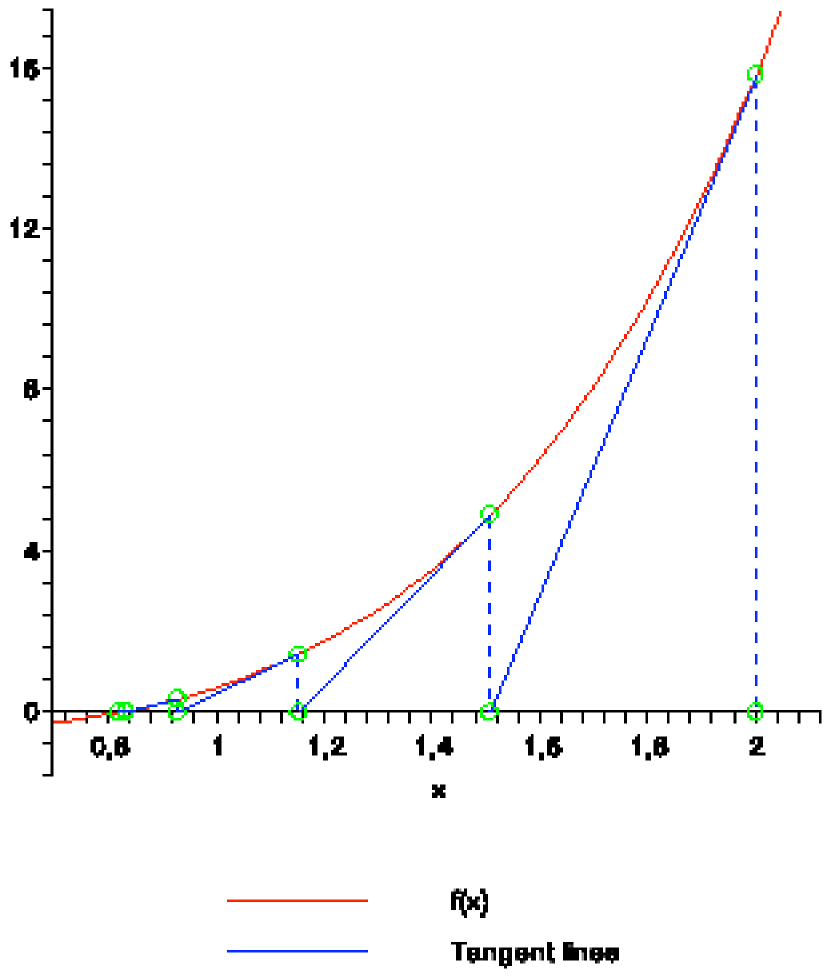


Esempio: $f(x) = x^2 + x + 1 \qquad x_0 = 2$

$$f(x) = x^2 + x + 1$$



Esempio: $f(x) = x^4 - \exp(-x) \qquad x_0 = 2$



$$f(x) = x^4 - \exp(-x)$$

Metodo di Broyden (1965)

Scelta del punto e dello Jacobiamo approssimato iniziale: $\mathbf{x}_0 \quad \mathbf{B}_0$

Ciclo: per k = 0, 1, 2, ...

Calcolo direzione avanzamento $\mathbf{s}_k$ $\qquad \mathbf{B}_k \mathbf{s}_k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$

Aggiorna approssimazione della radice $\qquad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k$

Calcola B_{k+1}

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})\mathbf{s}_k^T}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{s}_k}$$

Possibili criteri di arresto: $\qquad \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| = \|\mathbf{s}_k\| < \epsilon \qquad \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| < \epsilon$

Proprietà del metodo di Broyden

- **Broyden, Dennis, Moré; On the local and superlinear convergence of quasi-Newton methods. J. Inst. Math. Appl. [1973]:** dimostrano che il metodo di Broyden è localmente convergente e superlineare, cioè:

$$\lim_{k \mapsto \infty} \frac{\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_\star\|}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_\star\|} = 0$$

- **Gay; Some convergence properties of Broyden's method. SIAM J. Numer. Anal. [1979]:** dimostra che il metodo di Broyden converge in al piu 2n passi se F(x) = Ax-b, cioè il problema è lineare. Inoltre prova che il metodo in generale è 2n-passi quadratico, cioè

$$\|\mathbf{x}_{k+2n} - \mathbf{x}_\star\| \leq C \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_\star\|^2$$

Perchè B_k è definito così ? (1/3)

- Il metodo di Broyden nasce da una analogia con il metodo delle secanti per le equazioni scalari:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{\dfrac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}}$$

- Il metodo delle secanti può essere riscritto nel seguente modo:

$$x_{k+1} = x_k - B_k^{-1} f(x_k)$$

$$B_{k+1} = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{x_{k+1} - x_k}$$

Perchè B_k è definito così ? (2/3)

- Un analogo matriciale della $B_{k+1} = \dfrac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{x_{k+1} - x_k}$ è l'eqazione delle secanti:

$$\mathbf{B}_{k+1}(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$$

- Il problema è che questa relazione non determina in modo univoco la matrice $\mathbf{B}_{k+1}$

- L'idea del metodo di Broyden è quella di costruire $\mathbf{B}_{k+1}$ a partire dalla matrice $\mathbf{B}_k$ facendo il "minimo" dei cambiamenti in modo da soddisfare l'equazione delle secanti. Ad esempio con una perturbazione di rango 1: $\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \mathbf{u}\mathbf{v}^T$

Perchè B_k è definito così ? (3/3)

- Per determinare i vettori u e v basta usare la equazione delle secanti: $(\mathbf{B}_k + \mathbf{u}\mathbf{v}^T)(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$
- Ponendo $\mathbf{y}_k = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ e $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$ otteniamo

$$(\mathbf{B}_k + \mathbf{u}\mathbf{v}^T)\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k$$

- Ricaviamo la matrice u in funzione di v: $\mathbf{u} = \dfrac{\mathbf{y}_k - \mathbf{B}_k\mathbf{s}_k}{\mathbf{v}^T\mathbf{s}_k}$
- E dalla relazione $\mathbf{y}_k - \mathbf{B}_k\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k + \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})$ si semplifica in:

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\mathbf{v}^T\mathbf{s}_k}\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})$$

- Scegliendo $\mathbf{v} = \mathbf{s}_k$ otteniamo il metodo di Broyden “classico”

Altre varianti di Broyden

- Scegliendo il vettore u in maniera diversa si ottengono metodi "diversi"
- Ad esempio scegliendo il vettore $\mathbf{v} = \mathbf{e}_{i_k}$ dove $(\mathbf{s}_k)_{i_k} = \pm \|\mathbf{s}_k\|_\infty$ si ottiene il metodo "column-updating"
-

Riscrittura del metodo di Broyden

- Il metodo di Broyden precedentemente descritto necessita della soluzione di un sistema lineare con $\mathbf{B}_k$ matrice dei coefficienti
- La soluzione del sistema lineare può essere molto costosa sia in termini di occupazione di memoria che di tempo di CPU.
- Si può riscrivere il metodo di Broyden in funzione di $\mathbf{H}_k = \mathbf{B}_k^{-1}$
- Il metodo riscritto in funzione di $\mathbf{H}_k$ risolve il problema della efficienza (soluzione del sistema lineare) ma non risolve il problema della occupazione di memoria specialmente nel caso di sistemi di grandi e grandissime dimensione
- Il problema della occupazione di memoria verrà parzialmente risolto tramite la riscrittura di $\mathbf{H}_k$ come prodotto di matrici semplici

La formula di Sherman-Morrison

E' possibile scrivere l'inversa di una matrice perturbata da una matrice di rango 1 con una formula esplicita.

$$(\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{1}{\alpha}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}$$

dove

$$\alpha = 1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}$$

Applicazione

Data la formula di aggiornamento

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})\mathbf{s}_k^T}{\mathbf{s}_k^T\mathbf{s}_k}$$

usando la formula di Sherman-Morrison

$$\mathbf{B}_{k+1}^{-1} = \mathbf{B}_k^{-1} - \frac{1}{\beta_k}\mathbf{B}_k^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})\mathbf{s}_k^T\mathbf{B}_k^{-1} \qquad \beta_k = \mathbf{s}_k^T\mathbf{s}_k + \mathbf{s}_k^T\mathbf{B}_k^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})$$

reinterpretando la formula per $\mathbf{H}_k = \mathbf{B}_k^{-1}$

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k - \frac{1}{\beta_k}\mathbf{H}_k\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})\mathbf{s}_k^T\mathbf{H}_k \qquad \beta_k = \mathbf{s}_k^T\mathbf{s}_k + \mathbf{s}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})$$

Metodo di Broyden (1965) - versione 2

Scelta del punto e dello Jacobiamo inverso approssimato iniziale: $\mathbf{x}_0 \quad \mathbf{B}_0$

Ciclo: per k = 0, 1, 2, ...

Calcolo direzione avanzamento $\mathbf{s}_k = -\mathbf{H}_k \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$

Aggiorna approssimazione della radice $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k$

Aggiorna la matrice H

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{H}_k \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})$$

$$\beta_k = \mathbf{s}_k^T (\mathbf{s}_k + \mathbf{z}_k)$$

$$\mathbf{H}_{k+1} = \left(\mathbf{I} - \beta_k^{-1} \mathbf{z}_k \mathbf{s}_k^T\right) \mathbf{H}_k$$

Possibili criteri di terminazione: $\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| = \|\mathbf{s}_k\| < \epsilon \qquad \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| < \epsilon$

Riscrittura di H_k

La espressione

$$\mathbf{H}_{k+1} = \left(\mathbf{I} - \beta_k^{-1}\mathbf{z}_k\mathbf{s}_k^T\right)\mathbf{H}_k$$

usata ripetutamente permette di scrivere H_k come segue

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_k &= \left(\mathbf{I} - \beta_{k-1}^{-1}\mathbf{z}_{k-1}\mathbf{s}_{k-1}^T\right)\mathbf{H}_{k-1} \\
&= \left(\mathbf{I} - \beta_{k-1}^{-1}\mathbf{z}_{k-1}\mathbf{s}_{k-1}^T\right)\left(\mathbf{I} - \beta_{k-2}^{-1}\mathbf{z}_{k-2}\mathbf{s}_{k-2}^T\right)\mathbf{H}_{k-2} \\
&= \left(\mathbf{I} - \beta_{k-1}^{-1}\mathbf{z}_{k-1}\mathbf{s}_{k-1}^T\right)\cdots\left(\mathbf{I} - \beta_1^{-1}\mathbf{z}_1\mathbf{s}_1^T\right)\left(\mathbf{I} - \beta_0^{-1}\mathbf{z}_0\mathbf{s}_0^T\right)\mathbf{H}_0
\end{aligned}$$

Prodotto di H_k per un vettore

dalla relazione

$$(\mathbf{I} - \alpha \mathbf{u}\mathbf{v}^T)\mathbf{a} = \mathbf{a} - (\alpha \mathbf{v}^T \mathbf{a})\mathbf{u}$$

possiamo scrivere il seguente algoritmo per calcolare $\mathbf{H}_k \mathbf{a}$

Algoritmo 1

calcola:	$\mathbf{b} \leftarrow \mathbf{H}_0 \mathbf{a}$
per i = 0, 1, 2, ..., k-1	$\mathbf{b} \leftarrow \mathbf{b} - \beta_i^{-1}(\mathbf{s}_i^T \mathbf{b})\mathbf{z}_i$

il vettore $\mathbf{b}$ **contiene il prodotto** $\mathbf{H}_k \mathbf{a}$

Metodo di Broyden (1965) - versione 3

Scelta del punto e dello Jacobiamo inverso approssimato iniziale: $\mathbf{x}_0 \quad \mathbf{H}_0$

Ciclo: per k = 0, 1, 2, ...

Calcolo la direzione avanzamento con l'algoritmo 1 $\quad \mathbf{s}_k = -\mathbf{H}_k \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$

Aggiorna approssimazione della radice $\quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k$

Aggiorna il vettore z_k usando l'algoritmo 1 $\quad \mathbf{z}_k = \mathbf{H}_k \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})$

$$\beta_k = \mathbf{s}_k^T (\mathbf{s}_k + \mathbf{z}_k)$$

Possibili criteri di arresto: $\quad \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| = \|\mathbf{s}_k\| < \epsilon \qquad \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| < \epsilon$

Osservazione

Date le seguenti uguaglianze:

$$\mathbf{s}_k = -\mathbf{H}_k\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \qquad \mathbf{z}_k = \mathbf{H}_k\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})$$

$$\mathbf{H}_{k+1} = \left(\mathbf{I} - \beta_k^{-1}\mathbf{z}_k\mathbf{s}_k^T\right)\mathbf{H}_k \qquad \beta_k = \mathbf{s}_k^T\mathbf{s}_k + \mathbf{s}_k^T\mathbf{z}_k$$

possiamo scrivere

$$\begin{aligned}\mathbf{s}_{k+1} &= -\left(\mathbf{I} - \beta_k^{-1}\mathbf{z}_k\mathbf{s}_k^T\right)\mathbf{H}_k\mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1}) = \left(\beta_k^{-1}\mathbf{z}_k\mathbf{s}_k^T - \mathbf{I}\right)\mathbf{z}_k \\ &= \left(\beta_k^{-1}(\mathbf{s}_k^T\mathbf{z}_k) - 1\right)\mathbf{z}_k = -(\mathbf{s}_k^T\mathbf{s}_k)\beta_k^{-1}\mathbf{z}_k\end{aligned}$$

Metodo di Broyden (1965) - versione 3 (bis)

Scelta del punto e dello Jacobiamo inverso approssimato iniziale: $\mathbf{x}_0 \quad \mathbf{H}_0$

calcola: $\mathbf{s}_0 = -\mathbf{H}_0 \mathbf{F}(\mathbf{x}_0)$

Ciclo: per k = 0, 1, 2, ...

Aggiorna approssimazione della radice $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k$

Aggiorna il vettore z_k usando l'algoritmo 1 $\mathbf{z}_k = \mathbf{H}_k \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1})$

Aggiorna il vettore s_{k+1}

$$\alpha_k = \mathbf{s}_k^T \mathbf{s}_k$$

$$\beta_k = \alpha_k + \mathbf{s}_k^T \mathbf{z}_k$$

$$\mathbf{s}_{k+1} = -\alpha_k \beta_k^{-1} \mathbf{z}_k$$

Possibili criteri di arresto: $\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| = \|\mathbf{s}_k\| < \epsilon \qquad \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| < \epsilon$

Esempio di soluzione con Broyden