Convergencia de Búsqueda en Línea

Alan Reyes-Figueroa

Métodos Numéricos II (Aula 28) 24.octubre.2024

Estudiamos ahora la convergencia global para el caso del algoritmo de búsqueda en línea, usando las condiciones de Wolfe o de Goldstein. La propiedad clave es estudiar el ángulo entre $\mathbf{d}_k$ y $-\nabla f(\mathbf{x}_k)$:

$$\cos\varphi_k = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d}_k}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||\,||\mathbf{d}_k||}.$$

El siguiente resultado cuantifica el efecto de elgir apropiadamente el tamaño de paso α_k. También describe qué tan lejos $\mathbf{d}_k$ puede desviarse de $-\nabla f(\mathbf{x}_k)$, y aún producir convergencia global.

Teorema (Zoutendijk)

Sea $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ diferenciable, con ∇f Lipschitz sobre un abierto U que contiene al conjunto de subnivel $S_{f_0} = \{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n:\ f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_0)\}$, con constante de Lipschitz γ. Entonces

$$\sum_{k\geq 0} \cos^2\varphi_k\,||\nabla f(\mathbf{x}_k)||^2 < \infty,$$

si $\mathbf{x}_k$ se construye con descenso y búsqueda en línea usando Wolfe-Backtracking.

Prueba: De la segunda condición de Wolfe (6),

$$\nabla f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k)^T \mathbf{d}_k \geq c_2 \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k,$$

tenemos que

$$\big(\nabla f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k) - \nabla f(\mathbf{x}_k)\big)^T \mathbf{d}_k \geq c_2 \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k - \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k = (c_2 - 1) \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k.$$

Por otro lado, la condición de Lipschitz (+ Cauchy-Schwarz) implican

$$\begin{aligned} \big(\nabla f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k) - \nabla f(\mathbf{x}_k)\big)^T \mathbf{d}_k &\leq ||\nabla f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k)^T - \nabla f(\mathbf{x}_k)|| \cdot ||\mathbf{d}_k|| \\ &\leq \gamma\, ||\alpha_k \mathbf{d}_k|| \cdot ||\mathbf{d}_k|| = \gamma\, \alpha_k ||\mathbf{d}_k||^2. \end{aligned}$$

Combinando ambos resultados,

$$\alpha_k \geq \frac{\big(\nabla f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k) - \nabla f(\mathbf{x}_k)\big)^T \mathbf{d}_k}{\gamma\, ||\mathbf{d}_k||^2} \geq \frac{(c_2 - 1)\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k}{\gamma\, ||\mathbf{d}_k||^2}.$$

Sustituyendo esta última desigualdad en la primer condición de Wolfe, obtenemos

$$f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k) \leq f(\mathbf{x}_k) + c_1 \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k \leq f(\mathbf{x}_k) - \tfrac{c_1(1-c_2)}{\gamma\, ||\mathbf{d}_k||^2} \big(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k\big)^2.$$

Búsqueda en Línea

Haciendo $A = \frac{c_1(1-c_2)}{\gamma}$, podemos escribir lo anterior como

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq f(\mathbf{x}_k) - A\cos^2\varphi_k\,||\nabla f(\mathbf{x}_k)||^2, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Sumando sobre todos los índices $\leq k$, resulta

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq f(\mathbf{x}_0) - A\sum_{j=0}^{k}\cos^2\varphi_j\,||\nabla f(\mathbf{x}_j)||^2, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Como f es limitada inferiormente, si b es una cota inferior para f, entonces $f(\mathbf{x}_0) - f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_0) - b < \infty$. Luego,

$$A\sum_{j=0}^{k}\cos^2\varphi_j\,||\nabla f(\mathbf{x}_j)||^2 \leq f(\mathbf{x}_0) - f(\mathbf{x}_{k+1}) < \infty, \qquad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Tomando $k \to \infty$, la serie $\sum_{j=0}^{\infty}\cos^2\varphi_j\,||\nabla f(\mathbf{x}_j)||^2$ converge. $\square$

Búsqueda en Línea

Obs! Un resultado similar se obtiene para las condiciones fuertes de Wolfe, y para las condiciones de Goldstein. En todos los casos, la selección del tamaño de paso implica la **condición de Zoutendijk**:

$$\sum_{k\geq 0} \cos^2 \varphi_k ||\nabla f(\mathbf{x}_k)||^2 < \infty.$$

La condición de Zoutendijk implica que $\lim_{k\to\infty} \cos^2 \varphi_k ||\nabla f(\mathbf{x}_k)||^2 = 0$, y portanto

$$\lim_{k\to\infty} \cos \varphi_k ||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| = 0.$$

Si la elección de $\mathbf{d}_k$ asegura en cada paso que el ángulo φ_k está lejos de 90°, entonces existe $\delta > 0$ tal que

$$\cos \varphi_k \geq \delta > 0, \quad \forall k \geq 0.$$

De ahí, $\delta \lim_{k\to\infty} ||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| \leq \lim_{k\to\infty} \cos \varphi_k ||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| = 0 \implies \lim_{k\to\infty} ||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| = 0.$

Corolario (Convergencia Global Wolfe/Goldstein-Backtracking)

Si $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es diferenciable, con ∇f Lipschitz en el conjunto de subnivel $S_{f_0} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_0)\}$, con f limitada inferiormente; y la dirección de descenso $\mathbf{d}_k$ se elige de modo que $\cos\varphi_k \geq \delta > 0$, para todo $k \geq 0$, entonces el algoritmo de Backtracking con condiciones de Wolfe (o de Goldstein) converge a un punto estacionario $\mathbf{x}^*$, con $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$. $\square$

Observaciones:

- Para métodos de búsqueda en línea, la convergencia global (*i.e.* $\nabla f(\mathbf{x}_k) \to \mathbf{0}$ es el mejor resultado de convergencia que puede obtenerse.
- No se puede garantizar convergencia a un mínimo de f, sólo a un punto estacionario. Salvo que se introduzca alguna condición sobre la curvatura sobre $\mathbf{d}_k$ (*e.g.* curvatura positiva o convexidad en la dirección de $\mathbf{d}_k$, a partir del Hessiano $D^2f(\mathbf{x}_k)$), puede fortalecerse el resultado anterior para asegurar convergencia a un mínimo.

Búsqueda en Línea

Para los métodos de tipo Newton o quasi-Newton,

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - B_k^{-1}\nabla f(\mathbf{x}_k),$$

suponga que B_k es positiva definida y con número de condición limitado

$$\kappa = \kappa(B_k) = ||B_k|| \cdot ||B_k^{-1}|| \leq M, \quad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Entonces de las propiedades de norma matricial, $||A\mathbf{x}|| \leq ||A|| \cdot ||\mathbf{x}||$, y de Cauchy-Schwarz $|\mathbf{y}^T\mathbf{x}| \leq ||\mathbf{x}|| \cdot ||\mathbf{y}||$, tenemos

$$\begin{aligned}\cos\varphi_k = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d}_k}{||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| \cdot ||\mathbf{d}_k||} &= \frac{|\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\mathbf{d}_k|}{||B_k\mathbf{d}_k|| \cdot ||B_k^{-1}\nabla f(\mathbf{x}_k)||} \geq \frac{||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| \cdot ||\mathbf{d}_k||}{||B_k|| \cdot ||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| \cdot ||B_k^{-1}|| \cdot ||\mathbf{d}_k||} \\ &\geq \frac{1}{||B_k|| \cdot ||B_k^{-1}||} = \frac{1}{M}.\end{aligned}$$

Luego, de la condición de Zoutendijk, tenemos

Corolario (Convergencia Global de los métodos quasi-Newton)

Sea $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ diferenciable, con ∇f Lipschitz en el conjunto de subnivel $S_{f_0} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_0)\}$, y con f limitada inferiormente. Si para todo $k \in \mathbb{N}$, B_k es positiva definida y tiene número de condición limitado $\kappa(B_k) \leq M$, y α_k satisface las condiciones de Wolfe o de Goldstein, entonces la iteración

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k, B_k^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k),$$

satisface $\lim_{k\to\infty} ||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| = 0$, *y el método converge a un punto estacionario.* $\square$

Para otros métodos como el gradiente conjugado, veremos que es posible probar la condición débil $\liminf_{k\to\infty} ||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| = 0$, y que sólo una subsecuencia de gradientes converge a 0.

Usando la condición de Zoutendijk, aún es posible probar algo útil:

<u>Prueba</u>: Suponga que $\liminf_{k\to\infty} ||\nabla f(\mathbf{x}_k)|| = \gamma > 0$. Entonces existe $k_0 \in \mathbb{N}$ tal que

Búsqueda en Línea

$$\nabla f(\mathbf{x}_k) \geq \gamma, \qquad \text{para } k \geq ¿0.$$

Como

$$\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2 \varphi_k ||\nabla f(\mathbf{x}_k)||^2 < \infty \quad \Longrightarrow \quad \lim_{k \to \infty} \cos^2 \varphi_k ||\nabla f(\mathbf{x}_k)||^2 = 0,$$

luego se tiene que $\cos^2 \varphi_k \to 0$, y portanto $\cos \varphi_k \to 0$.

Para mostrar tal afirmación, basta que una subsecuencia $\{\cos \varphi_{k_j}\}$ esté limitada lejos de 0. $\square$

Definición

Sea $\{\mathbf{x}_k\} \subset \mathbb{R}^n$ una secuencia de puntos tales que $\mathbf{x}_k \to \mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$, para la cual existen constantes $M > 0$, $\alpha > 0$, tales que

$$\frac{||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*||}{||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||^\alpha} \leq M, \qquad \textit{para todo } k \in \mathbb{N}, \tag{1}$$

o equivalentemente

$$||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*|| \leq M\,||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||^\alpha, \qquad \textit{para todo } k \in \mathbb{N}. \tag{2}$$

*Decimos que $\{\mathbf{x}_k\}$ converge a $\mathbf{x}^*$ **con orden** α, o que $\{\mathbf{x}_k\}$ tiene **orden de convergencia** α.*

- Si $\alpha = 1$, decimos que $\{\mathbf{x}_k\}$ tiene convergencia lineal.
- Si $\alpha = 2$, decimos que $\{\mathbf{x}_k\}$ tiene convergencia cuadrática.
- Si $0 < \alpha < 1$, decimos que $\{\mathbf{x}_k\}$ tiene convergencia sub-lineal.
- Si $1 < \alpha < 2$, decimos que $\{\mathbf{x}_k\}$ tiene convergencia super-lineal.

Búsqueda en Línea

Hemos visto que tomar $\mathbf{d}_k$ de modo que $\cos\varphi_k$ sea mayor que cierta constante $\delta > 0$. Sin embargo estos criterios no son deseables por varias razones:

- impiden una tasa de convergencia rápida,
- mala elección de δ en caso de Hessianos mal condicionados,
- estos test angulares destruyen las propiedades de invarianza en los métodos quasi-Newton.

Tasa de Convergencia para Descenso Gradiente:

Consideremos el caso ideal donde la función objetivo es cuadrática

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T Q\mathbf{x} - \mathbf{b}^T\mathbf{x},$$

con $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simétrica y positiva definida. El gradiente es $\nabla f(\mathbf{x}) = Q\mathbf{x} - \mathbf{b}$, y en el mínimo global $\mathbf{x}^*$, se satisface $Q\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$.
Calculamos el tamaño de paso óptimo α_k que minimiza la función

$$\varphi(\alpha) = f(\mathbf{x}_k - \alpha\nabla f(\mathbf{x}_k)).$$

$$\begin{aligned} \varphi'(\alpha) &= Df\left(\mathbf{x}_k - \alpha\nabla f(\mathbf{x}_k)\right)\left(-\nabla f(\mathbf{x})\right) \;=\; \left[Q\left(\mathbf{x}_k - \alpha\nabla\left(\mathbf{x}_k\right)\right) - \mathbf{b}\right]\left(-\nabla f(\mathbf{x}_k)\right) \\ &= -\nabla f(_k)^T\left(Q\mathbf{x}_k - \alpha Q\,\nabla f(\mathbf{x}_k) - \mathbf{b}\right) \;=\; -\nabla f(_k)^T\left(\nabla f(\mathbf{x}_k) - \alpha Q\,\nabla f(\mathbf{x}_k)\right) \;=\; 0. \end{aligned}$$

Luego

$$\alpha_k = \frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\nabla f(\mathbf{x}_k)}{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q\,\nabla f(\mathbf{x}_k)}.$$

Usando este tamaño de paso óptimo, la iteración de descenso máximo resulta

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \left(\frac{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\nabla f(\mathbf{x}_k)}{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q\,\nabla f(\mathbf{x}_k)}\right)\nabla f(\mathbf{x}_k). \tag{3}$$

Como $\nabla f(\mathbf{x}_k) = Q\mathbf{x}_k - \mathbf{b}$, la ecuación (3) produce una fórmula cerrada para $\mathbf{x}_{k+1}$.

Para calcular la tasa de convergencia, usamos la norma $||\mathbf{x}||_Q^2 = \mathbf{x}^T Q\mathbf{x}$. De $Q\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$,

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{2}||\mathbf{x} - \mathbf{x}^*||_Q^2 &= \tfrac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T Q(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \;=\; \tfrac{1}{2}\mathbf{x}^T Q\mathbf{x} - \mathbf{x}^T Q\mathbf{x}^* + \tfrac{1}{2}(\mathbf{x}^*)^T Q\mathbf{x}^* \\ &= \tfrac{1}{2}\mathbf{x}^T Q\mathbf{x} - \mathbf{x}^T Q\mathbf{x}^* - \tfrac{1}{2}(\mathbf{x}^*)^T Q\mathbf{x}^* + (\mathbf{x}^*)^T Q\mathbf{x}^* \;=\; \tfrac{1}{2}\mathbf{x}^T Q\mathbf{x} - \mathbf{b}^T\mathbf{x} - \tfrac{1}{2}(\mathbf{x}^*)^T Q\mathbf{x}^* + \mathbf{b}^T\mathbf{x}^* \\ &= f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^*). \end{aligned}$$

Búsqueda en Línea

Esta norma mide la diferencia entre el valor actual de f y el valor óptimo. Ahora, como $\nabla f(\mathbf{x}_k) = Q\mathbf{x}_k - \mathbf{b} = Q(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)$, entonces

$$
\begin{aligned}
||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*||_Q^2 - ||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||_Q^2 &= 2\big(f(\mathbf{x}_{k+1} - f(\mathbf{x}^*)\big) - 2\big(f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*)\big) \;=\; 2\big(f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)\big) \\
&= (\mathbf{x}_{k+1}^T Q\mathbf{x}_{k+1} - 2\mathbf{b}^T\mathbf{x}_{k+1}) - (\mathbf{x}_k^T Q\mathbf{x}_k - 2\mathbf{b}^T\mathbf{x}_k) \\
&= \big(\mathbf{x}_k - \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_k)\big)^T Q\big(\mathbf{x}_k - \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_k)\big) - 2\mathbf{b}^T\big(\mathbf{x}_k - \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_k)\big) \\
&\quad -\mathbf{x}_k^T Q\mathbf{x}_k + 2\mathbf{b}^T\mathbf{x}_k \\
&= \mathbf{x}_k^T Q\mathbf{x}_k - 2\alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q\mathbf{x}_k + \alpha_k^2 \nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q\nabla f(\mathbf{x}_k) \\
&\quad +2\alpha_k \mathbf{b}^T\nabla f(\mathbf{x}_k) - \mathbf{x}_k^T Q\mathbf{x}_k \\
&= \alpha_k^2 \nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q\nabla f(\mathbf{x}_k) - 2\alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \underbrace{(Q\mathbf{x}_k - \mathbf{b})}_{=\nabla f(\mathbf{x}_k)} \\
&= -\frac{\big(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T\nabla f(\mathbf{x}_k)\big)^2}{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q\nabla f(\mathbf{x}_k)}.
\end{aligned}
$$

Búsqueda en Línea

y como

$$||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||_Q^2 = (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)^T Q(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) = \nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q^{-1} Q Q^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k) = \nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k),$$

entonces

$$\begin{aligned}
||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*||_Q^2 &= +||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||_Q^2 + \left(||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*||_Q^2 - ||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||_Q^2\right) \\
&= \nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k) - \frac{\left(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \nabla f(\mathbf{x}_k)\right)^2}{\nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q \nabla f(\mathbf{x}_k)} \\
&= \left(1 - \frac{\left(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \nabla f(\mathbf{x}_k)\right)^2}{(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q \nabla f(\mathbf{x}_k))(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k))}\right) (\nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k)) \\
&= \left(1 - \frac{\left(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \nabla f(\mathbf{x}_k)\right)^2}{(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q \nabla f(\mathbf{x}_k))(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k))}\right) ||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||_Q^2. \qquad (4)
\end{aligned}$$

Esta ecuación describe la tasa exacta de descenso de f en cada iteración. El término entre paréntesis es difícil de interpretar, y es más útil acotar éste por una condición más simple.

Teorema (Desigualdad de Kantorovich)

Sea $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simétrica y positiva definida, con autovalores $\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_n > 0$. Para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, vale

$$\frac{(\mathbf{x}^T\mathbf{x})^2}{(\mathbf{x}^TQ\mathbf{x})(\mathbf{x}^TQ^{-1}\mathbf{x})} \geq \frac{4\lambda_1\lambda_n}{(\lambda_1+\lambda_n)^2}.$$

<u>Prueba</u>: Por el Teorema Espectral, Q admite una descomposición $Q = U\Lambda U^T$, con $\Lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ y $U \in O(n)$ ortogonal.

Haciendo el cambio de coordenadas $\mathbf{y} = U^T\mathbf{x}$, tenemos

$$\mathbf{y}^T\mathbf{y} = \mathbf{x}^TUU^T\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\mathbf{x}, \quad \mathbf{x}^TQ\mathbf{x} = \mathbf{x}^TU\Lambda U^T\mathbf{x} = \mathbf{y}^T\Lambda\mathbf{y}, \quad \mathbf{x}^TQ^{-1}\mathbf{x} = \mathbf{x}^TU\Lambda^{-1}U^T\mathbf{x} = \mathbf{y}^T\Lambda^{-1}\mathbf{y}. \tag{5}$$

En este nuevo sistema coordenado, la expresión en el lado izquierdo de (5) es

$$\frac{(\mathbf{x}^T\mathbf{x})^2}{(\mathbf{x}^TQ\mathbf{x})(\mathbf{x}^TQ^{-1}\mathbf{x})} = \frac{(\mathbf{y}^T\mathbf{y})^2}{(\mathbf{y}^T\Lambda\mathbf{y})(\mathbf{y}^T\Lambda^{-1}\mathbf{y})} = \frac{\left(\sum_i y_i^2\right)^2}{\left(\sum_i \lambda_i y_i\right)^2\left(\sum_i y_i^2/\lambda_i\right)^2}.$$

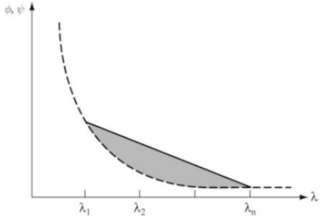
Búsqueda en Línea

Haciendo $z_i = y_i^2 / \sum_j y_j^2$ (normalización en los y_j^2), tenemos

$$\frac{(\mathbf{x}^T\mathbf{x})^2}{(\mathbf{x}^T Q\mathbf{x})(\mathbf{x}^T Q^{-1}\mathbf{x})} = \frac{(\sum_i y_i^2)^2}{(\sum_i \lambda_i y_i)^2)(\sum_i y_i^2/\lambda_i)^2} = \frac{1/\sum_i \lambda_i z_i}{\sum_i z_i/\lambda_i} = \frac{u(\mathbf{z})}{v(\mathbf{z})}.$$

Así, la expresión de interés es cociente de dos funciones convexas: una combinación de los λ_i; la otra, combinación de los $1/\lambda_i$. Consideramos la función $\frac{1}{\lambda}$. Como $\lambda_n \leq \sum_i z_i\lambda_i \leq \lambda_1$, entonces $u(\mathbf{z}) = 1/\sum_i z_i\lambda_i$ es un punto arriba de esa curva.

Por otro lado, $v(\mathbf{z}) = \sum_i z_i/\lambda_i$ es una combinación conveza de puntos sobre esa curva $\Rightarrow$ el valor está restricto al área sombreada.



Búsqueda en Línea

Para $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ fijo, el mínimo de $\frac{u(\mathbf{z})}{v(\mathbf{z})}$ correspode a un valor $\lambda = t\lambda_1 + (1-t)\lambda_n$, con $0 \leq t \leq 1$. Usndo la relación $\frac{t}{\lambda_1} + \frac{1-t}{\lambda_n} = \frac{t\lambda_n + (1-t)\lambda_1}{\lambda_1\lambda_n}$, podemos escribir

$$\frac{u(\mathbf{z})}{v(\mathbf{z})} \geq \liminf_{\lambda_1 \leq \lambda \leq \lambda_n} \frac{1/(t\lambda_1 + (1-t)\lambda_n)}{(t\lambda_n + (1-t)\lambda_1)/\lambda_1\lambda_n}.$$

El mínimo de esta relación se alcanza cuando $t = \frac{1}{2}$ (basta derivar en t!). Así,

$$\lambda = \frac{\lambda_1 + \lambda_n}{2} \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{u(\mathbf{z})}{v(\mathbf{z})} \geq \frac{2/(\lambda_1 + \lambda_n)}{(\lambda_1 + \lambda_n)/2\lambda_1\lambda_n} = \frac{4\lambda_1\lambda_n}{(\lambda_1 + \lambda_n)^2}. \square$$

Teorema (Error en Descenso Gradiente, caso cuadrático)

Sea $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T Q\mathbf{x} - \mathbf{b}^T\mathbf{x}$, con $Q \succ 0$ y autovalores $\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_n > 0$. Para todo $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, el método de descenso gradiente converge a un mínimo $\mathbf{x}^*$ de f. Más aún, si se toma α_k el tamaño de paso óptimo, entonces

$$||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*||_Q^2 \leq \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_n}{\lambda_1 + \lambda_n}\right)^2 ||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||_Q^2. \tag{6}$$

Prueba: De la observación anterior (4), y la desigualdad de Kantorovich (5),

$$
\begin{aligned}
||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*||_Q^2 &\leq \left(1 - \frac{(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \nabla f(\mathbf{x}_k))^2}{(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q \nabla f(\mathbf{x}_k))(\nabla f(\mathbf{x}_k)^T Q^{-q} \nabla f(\mathbf{x}_k))}\right) ||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||_Q^2 \\
&\leq \left(1 - \frac{4\lambda_1\lambda_n}{(\lambda_1+\lambda_n)^2}\right) ||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||_Q^2 = \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_n}{\lambda_1 + \lambda_n}\right)^2 ||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||_Q^2. \square
\end{aligned}
$$

Observaciones:

- La convergencia se sigue del hecho que $\left(\frac{\lambda_1-\lambda_n}{\lambda_1+\lambda_n}\right)^2 < 1$. (Recordar el Teorema de Punto Fijo de Banach, para contracciones). En consecuencia $||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||_Q \to 0$.
- La tasa de convergencia depende sólo de la cantidad $r = \frac{\lambda_n}{\lambda_1}$, pues

$$\left(\frac{\lambda_1-\lambda_n}{\lambda_1+\lambda_n}\right)^2 = \left(\frac{1-r}{1+r}\right)^2.$$

- La ecuación (6) indica que el método converge linealmente a convergencia a una tasa menor que $\left(\frac{1-r}{1+r}\right)^2$. Cuando $\lambda_1 = \lambda_n$, el método converge en 1 paso.

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Búsqueda en Línea

Para funciones no cuadráticas, establecemos estimativas para cuando $D^2 f$ es limitada inferiormente y superiormente, es positiva definida y $aI \leq D^2 f(\mathbf{x}) \leq AI$.

Búsqueda en línea exacta:

Para cualquier $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$, $\alpha > 0$, tenemos

$$f(\mathbf{x}_k - \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_k)) \leq f(\mathbf{x}_k) - \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \nabla f(\mathbf{x}_k) + \frac{A\alpha^2}{2} \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \nabla f(\mathbf{x}_k). \tag{7}$$

Minimizando ambos lados respecto de α, la desigualdad se mantiene. Del lado derecho $\nabla_\alpha = (A\alpha - 1)\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \nabla f(\mathbf{x}_k) = \mathbf{0} \;\Rightarrow\; \alpha = \frac{1}{A}$. Así,

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq (\mathbf{x}_k) - \frac{1}{2A} ||\nabla f(\mathbf{x}_k)||^2.$$

Restando el valor óptimo $f^* = f(\mathbf{x}^*)$ en ambos lados,

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) - f^* \leq f(\mathbf{x}_k) - f^* - \frac{1}{2A} ||\nabla f(\mathbf{x}_k)||^2. \tag{8}$$

Haciendo lo mismo para $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}_k) - \nabla f(\mathbf{x}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) + \frac{a}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)$, y minimizando ambos lados, resulta $\nabla_\alpha = \nabla f(\mathbf{x}_k) - a(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) = \mathbf{0} \;\Rightarrow\; \mathbf{x} = \mathbf{x}_k - \frac{1}{a} \nabla f(\mathbf{x}_k) =$. De ahí que

$$f^* \geq f(\mathbf{x}_k) - \frac{1}{2a} ||\nabla f(\mathbf{x}_k)||^2. \tag{9}$$

Búsqueda en Línea

Despejando $-||\nabla f(\mathbf{x}_k)||^2$ en (9) y sustituyendo en (8), resulta

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) - f^* \leq f(\mathbf{x}_k) - f^* - \tfrac{1}{2A}(2a)(f^* - f(\mathbf{x}_k)) \leq \big(1 - \tfrac{a}{A}\big)(f(\mathbf{x}_k) - f^*).$$

Portanto, obtenemos

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) - f^* \leq \big(1 - \tfrac{a}{A}\big)(f(\mathbf{x}_k) - f^*). \tag{10}$$

Otros casos:

En el caso de descenso gradiente con la condición de Armijo:

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) - f^* \leq \big(1 - \tfrac{2c_1 a\rho}{A}\big)(f(\mathbf{x}_k) - f^*). \tag{11}$$

En el caso de descenso gradiente con la dirección de Newton:

Teorema (Convergencia del método de Newton)

Sea $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ clase C^2, con $D^2 f$ Lipschitz de constante L en una vecindad U del mínimo $\mathbf{x}^*$, con $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ y $D^2 f(\mathbf{x}^*) \succ 0$. En la iteración de descenso gradiente con la dirección de Newton, tenemos:

1. si $\mathbf{x}_0$ está suficientemente cerca de $\mathbf{x}^*$ ($\mathbf{x}_0 \in U$), entonces $\mathbf{x}_k \to \mathbf{x}^*$,
2. la tasa de convergencia de $\{\mathbf{x}_k\}$ es cuadrática, con

$$||\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*|| \leq \widetilde{L}||\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*||^2, \qquad \text{con } \widetilde{L} = L\,||D^2 f(\mathbf{x}^*)^{-1}||. \tag{12}$$

3. la secuencia $\{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||\}$ converge cuadráticamente a 0.

En el caso de descenso los métodos quasi-Newton:

Teorema (Convergencia de los métodos quasi-Newton)

Sea $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ clase C^2, y considere la iteración $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - B_k^{-1}\nabla f(\mathbf{x}_k)$, con tamaño de paso $\alpha_k = 1$. Suponga que $\mathbf{x}_k \to \mathbf{x}^*$, con $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ y $D^2 f(\mathbf{x}^*) \succ 0$. Entonces el método converge super-linealmente si, y sólo si,

$$\lim_{k\to\infty} \frac{||B_k - D^2 f(\mathbf{x}_k)B_k^{-1}\nabla f(\mathbf{x}_k)||}{||B_k^{-1}\nabla f(\mathbf{x}_k)||} = 0. \tag{13}$$