# Метод Ньютона. Квазиньютоновские методы. Матрица предобработки Методы оптимизации

Александр Безносиков

Московский физико-технический институт

10 октября 2024



• Рассмотрим задачу поиска «корня» функции:

Найти 
$$t^*$$
, что  $\varphi(t^*)=0$ ,

где 
$$\varphi:\mathbb{R} \to \mathbb{R}.$$

• Рассмотрим задачу поиска «корня» функции:

Найти 
$$t^*$$
, что  $\varphi(t^*)=0$ ,

где 
$$\varphi:\mathbb{R} \to \mathbb{R}.$$

ullet Пусть мы находимся в точке  $t^0$  и хотим найти такую поправку  $\Delta t$ , что  $t^0 + \Delta t pprox t^*$ .

• Рассмотрим задачу поиска «корня» функции:

Найти 
$$t^*$$
, что  $\varphi(t^*)=0$ ,

где  $\varphi:\mathbb{R} \to \mathbb{R}.$ 

- Пусть мы находимся в точке  $t^0$  и хотим найти такую поправку  $\Delta t$ , что  $t^0 + \Delta t pprox t^*$ .
- Разложим в ряд:

$$\varphi(t^0 + \Delta t) = \varphi(t^0) + \varphi'(t^0)\Delta t + o(\Delta t).$$

• Рассмотрим задачу поиска «корня» функции:

Найти 
$$t^*$$
, что  $arphi(t^*)=0,$ 

где  $\varphi: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ .

- Пусть мы находимся в точке  $t^0$  и хотим найти такую поправку  $\Delta t$ , что  $t^0 + \Delta t pprox t^*$ .
- Разложим в ряд:

$$\varphi(t^0 + \Delta t) = \varphi(t^0) + \varphi'(t^0)\Delta t + o(\Delta t).$$

ullet Так как мы хотим  $t^0 + \Delta t pprox t^*$ , то

$$\varphi(t^0 + \Delta t) \approx \varphi(t^*) = 0 \implies \varphi(t^0) + \varphi'(t^0) \Delta t \approx 0.$$

## Задача поиска нуля: метод Ньютона

• Из  $\varphi(t^0) + \varphi'(t^0) \Delta t \approx 0$  получаем:

$$\Delta t pprox -rac{arphi(t^0)}{arphi'(t^0)}.$$

# Задача поиска нуля: метод Ньютона

• Из  $arphi(t^0) + arphi'(t^0) \Delta t pprox 0$  получаем:

$$\Delta t pprox -rac{arphi(t^0)}{arphi'(t^0)}.$$

• Значит получаем новую точку  $t^1 = t^0 + \Delta t$ . Откуда получается итеративный метод:

$$\left| t^{k+1} = t^k - rac{arphi(t^k)}{arphi'(t^k)} 
ight|$$

• Этот метод называется методом Ньютона. Его предложил во второй половине 17го века тот самый Ньютон.

• Вопрос: какие есть вопросы к интуиции получения итерации метода Ньютона?

• Вопрос: какие есть вопросы к интуиции получения итерации метода Ньютона? Важно, что  $t^0$  из «хорошей окрестности»  $t^*$ .

- Вопрос: какие есть вопросы к интуиции получения итерации метода Ньютона? Важно, что  $t^0$  из «хорошей окрестности»  $t^*$ .
- Рассмотрим

$$\varphi(t) = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}.$$

Вопрос: какое решение?

- Вопрос: какие есть вопросы к интуиции получения итерации метода Ньютона? Важно, что  $t^0$  из «хорошей окрестности»  $t^*$ .
- Рассмотрим

$$\varphi(t) = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}.$$

**Вопрос:** какое решение?  $t^* = 0$ .

- Вопрос: какие есть вопросы к интуиции получения итерации метода Ньютона? Важно, что  $t^0$  из «хорошей окрестности»  $t^*$ .
- Рассмотрим

$$\varphi(t) = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}.$$

**Вопрос:** какое решение?  $t^* = 0$ .

• Производная:  $\varphi'(t) = \frac{1}{(1+t^2)^{3/2}}$ .

- Вопрос: какие есть вопросы к интуиции получения итерации метода Ньютона? Важно, что  $t^0$  из «хорошей окрестности»  $t^*$ .
- Рассмотрим

$$\varphi(t) = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}.$$

**Вопрос:** какое решение?  $t^* = 0$ .

• Производная:  $arphi'(t) = rac{1}{(1+t^2)^{3/2}}.$  Откуда итерация метода Ньютона

$$t^{k+1} = t^k - \frac{\varphi(t^k)}{\varphi'(t^k)} = -(t^k)^3.$$

- Вопрос: какие есть вопросы к интуиции получения итерации метода Ньютона? Важно, что  $t^0$  из «хорошей окрестности»  $t^*$ .
- Рассмотрим

$$\varphi(t)=\frac{t}{\sqrt{1+t^2}}.$$

**Вопрос:** какое решение?  $t^* = 0$ .

ullet Производная:  $arphi'(t)=rac{1}{(1+t^2)^{3/2}}.$  Откуда итерация метода Ньютона

$$t^{k+1}=t^k-\frac{\varphi(t^k)}{\varphi'(t^k)}=-(t^k)^3.$$

• Вопрос: что можем сказать о сходимости к решению?

- Вопрос: какие есть вопросы к интуиции получения итерации метода Ньютона? Важно, что  $t^0$  из «хорошей окрестности»  $t^*$ .
- Рассмотрим

$$\varphi(t)=\frac{t}{\sqrt{1+t^2}}.$$

**Вопрос:** какое решение?  $t^* = 0$ .

ullet Производная:  $arphi'(t)=rac{1}{(1+t^2)^{3/2}}.$  Откуда итерация метода Ньютона

$$t^{k+1}=t^k-\frac{\varphi(t^k)}{\varphi'(t^k)}=-(t^k)^3.$$

- Вопрос: что можем сказать о сходимости к решению?
  - ullet  $|t^0| < 1$  есть сходимость

- Вопрос: какие есть вопросы к интуиции получения итерации метода Ньютона? Важно, что  $t^0$  из «хорошей окрестности»  $t^*$ .
- Рассмотрим

$$\varphi(t)=\frac{t}{\sqrt{1+t^2}}.$$

**Вопрос:** какое решение?  $t^* = 0$ .

• Производная:  $arphi'(t) = rac{1}{(1+t^2)^{3/2}}.$  Откуда итерация метода Ньютона

$$t^{k+1}=t^k-\frac{\varphi(t^k)}{\varphi'(t^k)}=-(t^k)^3.$$

- Вопрос: что можем сказать о сходимости к решению?
  - ullet  $|t^0| < 1$  есть сходимость
  - ullet  $|t^0|=1$  колеблемся в точках -1 и 1

- Вопрос: какие есть вопросы к интуиции получения итерации метода Ньютона? Важно, что  $t^0$  из «хорошей окрестности»  $t^*$ .
- Рассмотрим

$$\varphi(t)=\frac{t}{\sqrt{1+t^2}}.$$

**Вопрос:** какое решение?  $t^* = 0$ .

ullet Производная:  $arphi'(t)=rac{1}{(1+t^2)^{3/2}}.$  Откуда итерация метода Ньютона

$$t^{k+1}=t^k-\frac{\varphi(t^k)}{\varphi'(t^k)}=-(t^k)^3.$$

- Вопрос: что можем сказать о сходимости к решению?
  - $|t^0| < 1$  есть сходимость
  - ullet  $|t^0|=1$  колеблемся в точках -1 и 1
  - ullet  $|t^0| > 1$  расходимся

- Вопрос: какие есть вопросы к интуиции получения итерации метода Ньютона? Важно, что  $t^0$  из «хорошей окрестности»  $t^*$ .
- Рассмотрим

$$\varphi(t)=\frac{t}{\sqrt{1+t^2}}.$$

**Вопрос:** какое решение?  $t^* = 0$ .

• Производная:  $arphi'(t) = rac{1}{(1+t^2)^{3/2}}.$  Откуда итерация метода Ньютона

$$t^{k+1} = t^k - \frac{\varphi(t^k)}{\varphi'(t^k)} = -(t^k)^3.$$

- Вопрос: что можем сказать о сходимости к решению?
  - $|t^0| < 1$  есть сходимость
  - ullet  $|t^0|=1$  колеблемся в точках -1 и 1
  - ullet  $|t^0| > 1$  расходимся
- Ключевая особенность метода Ньютона локальная сходимость (только в окрестности решения).

## Метод Ньютона: оптимизация

• Рассмотрим задачу безусловную оптимизации с выпуклой дважды непрерывно дифференцируемой целевой функцией:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x).$$

• Вопрос: для такой задачи мы тоже ищем 0, но чего?

## Метод Ньютона: оптимизация

• Рассмотрим задачу безусловную оптимизации с выпуклой дважды непрерывно дифференцируемой целевой функцией:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x).$$

• Вопрос: для такой задачи мы тоже ищем 0, но чего?  $\nabla f(x^*) = 0$ .

#### Метод Ньютона: оптимизация

• Рассмотрим задачу безусловную оптимизации с выпуклой дважды непрерывно дифференцируемой целевой функцией:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x).$$

• Вопрос: для такой задачи мы тоже ищем 0, но чего?  $\nabla f(x^*) = 0$ . Откуда метод Ньютона для задачи оптимизации

#### Алгоритм 3 Метод Ньютона

**Вход:** стартовая точка  $x^0 \in \mathbb{R}^d$ , количество итераций K

- 1: **for** k = 0, 1, ..., K 1 **do**
- 2: Вычислить  $\nabla f(x^k)$ ,  $\nabla^2 f(x^k)$
- 3:  $x^{k+1} = x^k (\nabla^2 f(x^k))^{-1} \nabla f(x^k)$
- 4: end for

Выход:  $x^K$ 

 Градиентный спуск работает с линейной аппроксимацией в текущей точке, метод Ньютона — с квадратичной:

$$f(x) \approx f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle x - x^k, \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) \rangle.$$

 Градиентный спуск работает с линейной аппроксимацией в текущей точке, метод Ньютона — с квадратичной:

$$f(x) \approx f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle x - x^k, \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) \rangle.$$

Минимизируем квадратичную аппроксимацию по x:

 Градиентный спуск работает с линейной аппроксимацией в текущей точке, метод Ньютона — с квадратичной:

$$f(x) \approx f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle x - x^k, \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) \rangle.$$

Минимизируем квадратичную аппроксимацию по x:  $\nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) = 0$ .

 Градиентный спуск работает с линейной аппроксимацией в текущей точке, метод Ньютона — с квадратичной:

$$f(x) \approx f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle x - x^k, \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) \rangle.$$

 Градиентный спуск работает с линейной аппроксимацией в текущей точке, метод Ньютона — с квадратичной:

$$f(x) \approx f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle x - x^k, \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) \rangle.$$

Минимизируем квадратичную аппроксимацию по x:  $\nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)(x-x^k) = 0$ . Откуда получаем следующую точку метода:  $x^{k+1} = x^k - \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k)$ .

 Метод Ньютона использует оракул второго порядка: требует вычисление гессиана.

 Градиентный спуск работает с линейной аппроксимацией в текущей точке, метод Ньютона — с квадратичной:

$$f(x) \approx f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle x - x^k, \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) \rangle.$$

- Метод Ньютона использует оракул второго порядка: требует вычисление гессиана.
- Стоимость итерации значительно возрастает (по сравнению с градиентным спуском) не только из-за гессиана, но и его обращения.

 Градиентный спуск работает с линейной аппроксимацией в текущей точке, метод Ньютона — с квадратичной:

$$f(x) \approx f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle x - x^k, \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) \rangle.$$

- Метод Ньютона использует оракул второго порядка: требует вычисление гессиана.
- Стоимость итерации значительно возрастает (по сравнению с градиентным спуском) не только из-за гессиана, но и его обращения. Вопрос: за сколько итераций метод Ньютона сойдется для квадратичной задачи с положительно определенной матрицей?

 Градиентный спуск работает с линейной аппроксимацией в текущей точке, метод Ньютона — с квадратичной:

$$f(x) \approx f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle x - x^k, \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) \rangle.$$

- Метод Ньютона использует оракул второго порядка: требует вычисление гессиана.
- Стоимость итерации значительно возрастает (по сравнению с градиентным спуском) не только из-за гессиана, но и его обращения. Вопрос: за сколько итераций метод Ньютона сойдется для квадратичной задачи с положительно определенной матрицей? за 1 (но дорогую).

 То, что для квадратичной задачи метод Ньютона сходится за 1 итерацию, наталкивает на мысль о том, что при всех своих минусах (локальная сходимость, дороговизна итерации) ключевым плюсом является скорость сходимости.

- То, что для квадратичной задачи метод Ньютона сходится за 1 итерацию, наталкивает на мысль о том, что при всех своих минусах (локальная сходимость, дороговизна итерации) ключевым плюсом является скорость сходимости.
- Пусть целевая функция в задаче безусловной минимизации является дважды непрерывно дифференцируемой,  $\mu$ -сильно выпуклой и имеет M-Липшицев гессиан, т.е. для любых  $x,y\in\mathbb{R}^d$  справедливо:

$$\nabla^2 f(x) \succeq \mu I$$
,  $\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\|_2 \le M \|x - y\|_2$ .

В случае матрицы  $\|\cdot\|_2$  – спектральная норма (согласованная норма с евклидовой для векторов).

• Доказываем сходимость.

• Доказываем сходимость. Будем изучать, как меняется расстояние до решения:

$$x^{k+1} - x^* = x^k - \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k) - x^*.$$

• Доказываем сходимость. Будем изучать, как меняется расстояние до решения:

$$x^{k+1} - x^* = x^k - \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k) - x^*.$$

 Снова вспомним формулу Ньютона-Лейбница для интеграла вдоль кривой:

$$\nabla f(x^k) - \nabla f(x^*) = \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*))(x^k - x^*) d\tau$$

• Доказываем сходимость. Будем изучать, как меняется расстояние до решения:

$$x^{k+1} - x^* = x^k - \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k) - x^*.$$

 Снова вспомним формулу Ньютона-Лейбница для интеграла вдоль кривой:

$$\nabla f(x^{k}) - \nabla f(x^{*}) = \int_{0}^{1} \nabla^{2} f(x^{*} + \tau(x^{k} - x^{*}))(x^{k} - x^{*}) d\tau$$

Зная, что  $abla f(x^*) = 0$ , получим

$$x^{k+1} - x^* = x^k - x^* - \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*))(x^k - x^*) d\tau.$$

• Продолжаем и используем «умную единицу»:

$$x^{k+1} - x^* = x^k - x^* - \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*))(x^k - x^*) d\tau$$

$$= \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla^2 f(x^k)(x^k - x^*)$$

$$- \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*))(x^k - x^*) d\tau.$$

• Продолжаем и используем «умную единицу»:

$$x^{k+1} - x^* = x^k - x^* - \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*))(x^k - x^*) d\tau$$

$$= \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla^2 f(x^k)(x^k - x^*)$$

$$- \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*))(x^k - x^*) d\tau.$$

• Заметим, что  $x^k - x^*$  можно вынести за пределы интеграла:

$$x^{k+1} - x^* = \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla^2 f(x^k) (x^k - x^*)$$
$$- \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \left(\int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*)) d\tau\right) (x^k - x^*).$$

• Введем обозначение  $G_k = \nabla^2 f(x^k) - \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*)) d\tau$ :

$$x^{k+1} - x^* = (\nabla^2 f(x^k))^{-1} G_k(x^k - x^*).$$

• Введем обозначение  $G_k = \nabla^2 f(x^k) - \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*)) d au$ :

$$x^{k+1} - x^* = \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} G_k(x^k - x^*).$$

• Перейдем к оценке нормы расстояния:

$$||x^{k+1} - x^*||_2 = \left\| \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} G_k(x^k - x^*) \right\|_2$$

• Введем обозначение  $G_k = \nabla^2 f(x^k) - \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*)) d\tau$ :

$$x^{k+1} - x^* = \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} G_k(x^k - x^*).$$

• Перейдем к оценке нормы расстояния:

$$||x^{k+1} - x^*||_2 = \left\| \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} G_k(x^k - x^*) \right\|_2$$

 Пользуемся, что спектральная норма матрицы согласована с евклидовой вектора:

$$||x^{k+1} - x^*||_2 \le ||(\nabla^2 f(x^k))^{-1} G_k||_2 ||x^k - x^*||_2$$

$$\le ||(\nabla^2 f(x^k))^{-1}||_2 ||G_k||_2 ||x^k - x^*||_2.$$

• С предыдущего слайда:

$$||x^{k+1} - x^*||_2 \le \left\| \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \right\|_2 ||G_k||_2 ||x^k - x^*||_2.$$

• С предыдущего слайда:

$$||x^{k+1}-x^*||_2 \le ||(\nabla^2 f(x^k))^{-1}||_2 ||G_k||_2 ||x^k-x^*||_2.$$

• Вопрос: как оценить  $\left\| \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \right\|_2$ ?

• С предыдущего слайда:

$$||x^{k+1}-x^*||_2 \le ||(\nabla^2 f(x^k))^{-1}||_2 ||G_k||_2 ||x^k-x^*||_2.$$

• Вопрос: как оценить  $\left\| \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \right\|_2$ ? Мы знаем, что  $\nabla^2 f(x) \succeq \mu I$ , а значит  $\frac{1}{\mu} I \succeq \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1}$ ,

• С предыдущего слайда:

$$||x^{k+1} - x^*||_2 \le \left\| \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \right\|_2 ||G_k||_2 ||x^k - x^*||_2.$$

• Вопрос: как оценить  $\left\| \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \right\|_2$ ? Мы знаем, что  $\nabla^2 f(x) \succeq \mu I$ , а значит  $\frac{1}{\mu} I \succeq \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1}$ , откуда  $\left\| \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \right\|_2 \leq \frac{1}{\mu}$  и  $\|x^{k+1} - x^*\|_2 \leq \frac{1}{\mu} \|G_k\|_2 \|x^k - x^*\|_2$ .

• С предыдущего слайда:

$$||x^{k+1} - x^*||_2 \le \left\| \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \right\|_2 ||G_k||_2 ||x^k - x^*||_2.$$

• Вопрос: как оценить  $\left\| \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \right\|_2$ ? Мы знаем, что  $\nabla^2 f(x) \succeq \mu I$ , а значит  $\frac{1}{\mu} I \succeq \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1}$ , откуда  $\left\| \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \right\|_2 \leq \frac{1}{\mu}$  и  $\|x^{k+1} - x^*\|_2 \leq \frac{1}{\mu} \|G_k\|_2 \|x^k - x^*\|_2$ .

• Осталось оценить  $||G_k||_2$ .



• Оцениваем  $||G_k||_2$ :

$$||G_{k}||_{2} = ||\nabla^{2} f(x^{k}) - \int_{0}^{1} \nabla^{2} f(x^{*} + \tau(x^{k} - x^{*})) d\tau||_{2}$$

$$= ||\int_{0}^{1} (\nabla^{2} f(x^{k}) - \nabla^{2} f(x^{*} + \tau(x^{k} - x^{*}))) d\tau||_{2}$$

$$\leq \int_{0}^{1} ||\nabla^{2} f(x^{k}) - \nabla^{2} f(x^{*} + \tau(x^{k} - x^{*}))||_{2} d\tau$$

$$\leq \int_{0}^{1} M(1 - \tau) ||x^{k} - x^{*}||_{2} d\tau$$

$$= M||x^{k} - x^{*}||_{2} \int_{0}^{1} (1 - \tau) d\tau = \frac{M}{2} ||x^{k} - x^{*}||_{2}.$$

• Подставляем оценку на  $\|G_k\|_2$ :

$$||x^{k+1} - x^*||_2 \le \frac{M}{2\mu} ||x^k - x^*||_2^2.$$

• Подставляем оценку на  $\|G_k\|_2$ :

$$||x^{k+1} - x^*||_2 \le \frac{M}{2\mu} ||x^k - x^*||_2^2.$$

Теорема об оценке сходимости метода Ньютона для  $\mu$ -сильно выпуклых функций с M-Липшецевым гессианом

Пусть задача безусловной оптимизации с  $\mu$ -сильно выпуклой целевой функцией f с M-Липшецевыми гессианом решается методом Ньютона. Тогда справедлива следующая оценка сходимости за 1 итерацию

$$||x^{k+1} - x^*||_2 \le \frac{M}{2\mu} ||x^k - x^*||_2^2.$$

• Подставляем оценку на  $\|G_k\|_2$ :

$$||x^{k+1} - x^*||_2 \le \frac{M}{2\mu} ||x^k - x^*||_2^2.$$

Теорема об оценке сходимости метода Ньютона для  $\mu$ -сильно выпуклых функций с M-Липшецевым гессианом

Пусть задача безусловной оптимизации с  $\mu$ -сильно выпуклой целевой функцией f с M-Липшецевыми гессианом решается методом Ньютона. Тогда справедлива следующая оценка сходимости за 1 итерацию

$$||x^{k+1} - x^*||_2 \le \frac{M}{2\mu} ||x^k - x^*||_2^2.$$

Мы уже знаем, что такого рода оценки дают квадратичную скорость сходимости.

• Сходимость, как и в случае первородного метода Ньютона, является локальной.

• Сходимость, как и в случае первородного метода Ньютона, является локальной. А именно, чтобы гарантировать  $\|x^1-x^*\|_2<\|x^0-x^*\|_2$ , нужно предположить, что

$$||x^0 - x^*||_2 < \frac{2\mu}{M}.$$

• Сходимость, как и в случае первородного метода Ньютона, является локальной. А именно, чтобы гарантировать  $\|x^1-x^*\|_2<\|x^0-x^*\|_2$ , нужно предположить, что

$$||x^0 - x^*||_2 < \frac{2\mu}{M}.$$

• Поймем насколько быстро сходится метод. Пусть M=2,  $\mu=1$ , а  $\|x^0-x^*\|_2=rac{1}{2}.$ 

• Сходимость, как и в случае первородного метода Ньютона, является локальной. А именно, чтобы гарантировать  $\|x^1-x^*\|_2<\|x^0-x^*\|_2$ , нужно предположить, что

$$||x^0 - x^*||_2 < \frac{2\mu}{M}.$$

• Поймем насколько быстро сходится метод. Пусть M=2,  $\mu=1$ , а  $\|x^0-x^*\|_2=\frac{1}{2}$ . Тогда мы можем гарантировать, что  $\|x^1-x^*\|_2\leq \frac{1}{2^2}$ ,

• Сходимость, как и в случае первородного метода Ньютона, является локальной. А именно, чтобы гарантировать  $\|x^1-x^*\|_2<\|x^0-x^*\|_2$ , нужно предположить, что

$$||x^0 - x^*||_2 < \frac{2\mu}{M}.$$

• Поймем насколько быстро сходится метод. Пусть M=2,  $\mu=1$ , а  $\|x^0-x^*\|_2=\frac{1}{2}$ . Тогда мы можем гарантировать, что  $\|x^1-x^*\|_2\leq \frac{1}{2^2}$ ,  $\|x^2-x^*\|_2\leq \frac{1}{(2^2)^2}$  и так далее.

• Пытаемся решить проблему локальной сходимости. Действуем по аналогии с градиентным спуском. Вопрос: идеи?

- Пытаемся решить проблему локальной сходимости. Действуем по аналогии с градиентным спуском. Вопрос: идеи?
- Идея первая шаг:

$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \nabla f(x^k).$$

Такой метод называется демпфированный метод Ньютона.

- Пытаемся решить проблему локальной сходимости. Действуем по аналогии с градиентным спуском. Вопрос: идеи?
- Идея первая шаг:

$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \nabla f(x^k).$$

Такой метод называется демпфированный метод Ньютона. Вопрос: как выбирать шаг?

- Пытаемся решить проблему локальной сходимости. Действуем по аналогии с градиентным спуском. Вопрос: идеи?
- Идея первая шаг:

$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k \left( \nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \nabla f(x^k).$$

Такой метод называется демпфированный метод Ньютона. **Вопрос:** как выбирать шаг? Много разных способов, например, на прошлой лекции обсуждали линейный поиск: arg min $_{\gamma} f(x^k + \gamma p_k)$ , где  $p_k = -\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k)$ .

• Идея вторая – «оценки сверху». В основе анализа градиентного спуска лежала оптимизация «оценки сверху» на функцию:

$$x^{k+1} = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left( f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{L}{2} \|x - x^k\|_2^2 \right).$$

• Идея вторая – «оценки сверху». В основе анализа градиентного спуска лежала оптимизация «оценки сверху» на функцию:

$$x^{k+1} = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left( f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{L}{2} \|x - x^k\|_2^2 \right).$$

**Вопрос**: чему равно  $x^{k+1}$ ?

• Идея вторая – «оценки сверху». В основе анализа градиентного спуска лежала оптимизация «оценки сверху» на функцию:

$$x^{k+1} = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left( f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{L}{2} \|x - x^k\|_2^2 \right).$$

Вопрос: чему равно  $x^{k+1}$ ?  $x^{k+1} = x^k - \frac{1}{L} \nabla f(x^k)$ .

 Идея вторая – «оценки сверху». В основе анализа градиентного спуска лежала оптимизация «оценки сверху» на функцию:

$$x^{k+1} = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left( f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{L}{2} ||x - x^k||_2^2 \right).$$

**Вопрос:** чему равно  $x^{k+1}$ ?  $x^{k+1} = x^k - \frac{1}{L}\nabla f(x^k)$ . Запишем, похожее для аппроксимации 2-го порядка:

$$\begin{split} x^{k+1} &= \arg\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left( f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle \right. \\ &+ \frac{1}{2} \langle x - x^k, \nabla^2 f(x^k) (x - x^k) \rangle + \frac{M}{6} \|x - x^k\|_2^3 \right). \end{split}$$

Здесь M – константа Липшица гессиана. Такой метод называется кубический метод Ньютона.

• Запишем метод Ньютона следующим образом:

$$x^{k+1} = x^k - H_k \nabla f(x^k).$$

• Запишем метод Ньютона следующим образом:

$$x^{k+1} = x^k - H_k \nabla f(x^k).$$

В случае метода Ньютона вместо  $H_k$  стоит  $(\nabla^2 f(x^k))^{-1}$ .

• Хочется заменить  $\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1}$  на что-то более дешевое с точки зрения вычислений.

• Запишем метод Ньютона следующим образом:

$$x^{k+1} = x^k - H_k \nabla f(x^k).$$

В случае метода Ньютона вместо  $H_k$  стоит  $\left( 
abla^2 f(x^k) \right)^{-1}$ .

- Хочется заменить  $\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1}$  на что-то более дешевое с точки зрения вычислений.
- Идея выудить какие-то свойства, присущие гессиану.

• Запишем метод Ньютона следующим образом:

$$x^{k+1} = x^k - H_k \nabla f(x^k).$$

В случае метода Ньютона вместо  $H_k$  стоит  $\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1}$ .

- Хочется заменить  $\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1}$  на что-то более дешевое с точки зрения вычислений.
- Идея выудить какие-то свойства, присущие гессиану.
- Связь градиента и гессиана:

$$abla f(x^k) = 
abla f(x^{k+1}) + 
abla^2 f(x^{k+1})(x^k - x^{k+1}) + o(\|x^{k+1} - x^k\|_2)$$
 или  $abla f(x^k) - 
abla f(x^{k+1}) \approx 
abla^2 f(x^{k+1})(x^k - x^{k+1}).$  Откуда  $x^{k+1} - x^k \approx (
abla^2 f(x^{k+1}))^{-1} (
abla f(x^k) - 
abla f(x^k) + o(\|x^{k+1} - x^k\|_2).$ 

• Запишем метод Ньютона следующим образом:

$$x^{k+1} = x^k - H_k \nabla f(x^k).$$

В случае метода Ньютона вместо  $H_k$  стоит  $\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1}$ .

- Хочется заменить  $\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1}$  на что-то более дешевое с точки зрения вычислений.
- Идея выудить какие-то свойства, присущие гессиану.
- Связь градиента и гессиана:

$$abla f(x^k) = 
abla f(x^{k+1}) + 
abla^2 f(x^{k+1})(x^k - x^{k+1}) + o(\|x^{k+1} - x^k\|_2)$$
или  $abla f(x^k) - 
abla f(x^{k+1}) \approx 
abla^2 f(x^{k+1})(x^k - x^{k+1}).$  Откуда  $x^{k+1} - x^k \approx (
abla^2 f(x^{k+1}))^{-1}(
abla f(x^{k+1}) - 
abla f(x^{k+1}))$ . Заменим  $abla^2 f(x^{k+1})^{-1}$  на  $abla_{k+1}$ , введем обозначения  $abla^k = x^{k+1} - x^k$  и  $abla^k = 
abla f(x^k)^k = 
abla f(x^k$ 

$$s^k = H_{k+1} y^k$$

• Квазиньютоновское уравнение:

$$s^k = H_{k+1}y^k$$

ullet Еще потребуем, чтобы  $H_{k+1}$  была симметричной:  $H_{k+1}^T = H_{k+1}$ .

$$s^k = H_{k+1}y^k$$

- ullet Еще потребуем, чтобы  $H_{k+1}$  была симметричной:  $H_{k+1}^T = H_{k+1}.$
- Вопрос: сколько решений имеет система уравнений  $s^k = H_{k+1} y^k$  относительно  $H_{k+1}$  при условии, что  $H_{k+1}^T = H_{k+1}$ ?

$$s^k = H_{k+1}y^k$$

- ullet Еще потребуем, чтобы  $H_{k+1}$  была симметричной:  $H_{k+1}^T = H_{k+1}.$
- Вопрос: сколько решений имеет система уравнений  $s^k = H_{k+1} y^k$  относительно  $H_{k+1}$  при условии, что  $H_{k+1}^T = H_{k+1}$ ? d уравнений, d+d(d-1)/2 уравнений. Можно урешаться.

$$s^k = H_{k+1} y^k$$

- ullet Еще потребуем, чтобы  $H_{k+1}$  была симметричной:  $H_{k+1}^T = H_{k+1}.$
- Вопрос: сколько решений имеет система уравнений  $s^k = H_{k+1} y^k$  относительно  $H_{k+1}$  при условии, что  $H_{k+1}^T = H_{k+1}$ ? d уравнений, d+d(d-1)/2 уравнений. Можно урешаться. Нужно еще сузить правила поиска  $H_{k+1}$ .

 Идея первая – одно-ранговая (дешевая с точки зрения вычислений) добавка:

$$H_{k+1} = H_k + \mu_k q^k (q^k)^T,$$

где  $\mu_k \in \mathbb{R}$  и  $q^k \in \mathbb{R}^d$  нужно подобрать.

 Идея первая – одно-ранговая (дешевая с точки зрения вычислений) добавка:

$$H_{k+1} = H_k + \mu_k q^k (q^k)^T,$$

где  $\mu_k \in \mathbb{R}$  и  $q^k \in \mathbb{R}^d$  нужно подобрать.

• Подбираем исходя из квазиньютоновского уравнения:

$$s^{k} = H_{k+1}y^{k} = H_{k}y^{k} + \mu_{k}q^{k}(q^{k})^{T}y^{k}$$
  
=  $H_{k}y^{k} + \mu_{k}\left((q^{k})^{T}y^{k}\right)q^{k}$ 

 Идея первая – одно-ранговая (дешевая с точки зрения вычислений) добавка:

$$H_{k+1} = H_k + \mu_k q^k (q^k)^T,$$

где  $\mu_k \in \mathbb{R}$  и  $q^k \in \mathbb{R}^d$  нужно подобрать.

• Подбираем исходя из квазиньютоновского уравнения:

$$s^{k} = H_{k+1}y^{k} = H_{k}y^{k} + \mu_{k}q^{k}(q^{k})^{T}y^{k}$$
  
=  $H_{k}y^{k} + \mu_{k}\left((q^{k})^{T}y^{k}\right)q^{k}$ 

Откуда

$$\mu_k\left((q^k)^T y^k\right) q^k = s^k - H_k y^k$$

• С предыдущего слайда:

$$\mu_k\left((q^k)^T y^k\right) q^k = s^k - H_k y^k$$

• **Вопрос**: что можно сказать про вектор  $q^k$ ?

• С предыдущего слайда:

$$\mu_k\left((q^k)^T y^k\right) q^k = s^k - H_k y^k$$

• **Bonpoc**: что можно сказать про вектор  $q^k$ ? Коллинеарен  $s^k - H_k y^k$ .

• С предыдущего слайда:

$$\mu_k\left((q^k)^T y^k\right) q^k = s^k - H_k y^k$$

• **Вопрос**: что можно сказать про вектор  $q^k$ ? Коллинеарен  $s^k - H_k v^k$ . Пусть

$$q^k = s^k - H_k y^k,$$

тогда

$$\mu_k = \frac{1}{(q^k)^T y^k}.$$

• Получаем SR1 способ подсчета матриц *H*:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(s^k - H_k y^k)(s^k - H_k y^k)^T}{(s^k - H_k y^k)^T y^k}$$

• Посмотрим на задачу поиска  $H_{k+1}$ , как на задачу поиска «близкой» к  $H_k$  матрицы с точки зрения оптимизации:

$$H_{k+1} = \arg \min_{H \in \mathbb{R}^{d \times d}} ||H - H_k||^2$$

$$s.t. \ s^k = Hy^k$$

$$H^T = H$$

• Посмотрим на задачу поиска  $H_{k+1}$ , как на задачу поиска «близкой» к  $H_k$  матрицы с точки зрения оптимизации:

$$H_{k+1} = \arg\min_{H \in \mathbb{R}^{d \times d}} \|H - H_k\|^2$$
  
 $s.t. \ s^k = Hy^k$   
 $H^T = H$ 

• Норма в задачи оптимизации может быть любая. В зависимости от нормы будут получаться разные квазиньютоновские методы.

21 / 24

# Квазиньютоновские методы: BFGS

• Посмотрим на задачу поиска  $H_{k+1}$ , как на задачу поиска «близкой» к  $H_k$  матрицы с точки зрения оптимизации:

$$H_{k+1} = \arg\min_{H \in \mathbb{R}^{d \times d}} \|H - H_k\|^2$$

$$s.t. \ s^k = Hy^k$$

$$H^T = H$$

- Норма в задачи оптимизации может быть любая. В зависимости от нормы будут получаться разные квазиньютоновские методы.
- Рассмотрим взвешенную норму Фробениуса  $\|A\|_W = \|W^{1/2}AW^{1/2}\|_F$ , где должно выполняться  $Wy^k = s^k$ . Такой выбор дает метод BFGS:

$$H_{k+1} = (I - \rho_k s^k (y^k)^T) H_k (I - \rho_k y^k (s^k)^T) + \rho_k s^k (s^k)^T$$
, где  $\rho_k = \frac{1}{(y^k)^T s^k}$ 

• До такой формулы можно дойти по-другому.

• До такой формулы можно дойти по-другому. Рассмотрим  $B_{k+1} = H_{k+1}^{-1}$ . Для B квазиньютоновское уравнение выглядит как  $B_{k+1} s^k = y^k$ 

- До такой формулы можно дойти по-другому. Рассмотрим  $B_{k+1} = H_{k+1}^{-1}$ . Для B квазиньютоновское уравнение выглядит как  $B_{k+1} s^k = v^k$
- Для  $B_{k+1}$  можно написать SR1 пересчет матрицы:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y^k - B_k s^k)(y^k - B_k s^k)^T}{(y^k - B_k s^k)^T s^k}$$

- До такой формулы можно дойти по-другому. Рассмотрим  $B_{k+1} = H_{k+1}^{-1}$ . Для B квазиньютоновское уравнение выглядит как  $B_{k+1}s^k = v^k$
- Для  $B_{k+1}$  можно написать SR1 пересчет матрицы:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y^k - B_k s^k)(y^k - B_k s^k)^T}{(y^k - B_k s^k)^T s^k}$$

• Смотрим на вид  $B_{k+1}$  и делаем из нее двухранговое изменение:

$$B_{k+1} = B_k + \mu_{k,1} y^k (y^k)^T + \mu_{k,2} B_k y^k (B_k y^k)^T$$

- До такой формулы можно дойти по-другому. Рассмотрим  $B_{k+1} = H_{k+1}^{-1}$ . Для B квазиньютоновское уравнение выглядит как  $B_{k+1}s^k = v^k$
- Для  $B_{k+1}$  можно написать SR1 пересчет матрицы:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y^k - B_k s^k)(y^k - B_k s^k)^T}{(y^k - B_k s^k)^T s^k}$$

- Смотрим на вид  $B_{k+1}$  и делаем из нее двухранговое изменение:  $B_{k+1} = B_k + \mu_{k-1} v^k (v^k)^T + \mu_{k-2} B_k v^k (B_k v^k)^T$
- Как и в SR1 можно подогнать  $\mu_{k,1}$  и  $\mu_{k,2}$ :

$$B_{k+1} = B_k + \frac{y^k (y^k)^T}{(y^k)^T s^k} + \frac{B_k s^k (B_k s^k)^T}{(s^k)^T B_k s^k}$$

• До такой формулы можно дойти по-другому. Рассмотрим  $B_{k+1} = H_{k+1}^{-1}$ . Для B квазиньютоновское уравнение выглядит как  $B_{k+1}s^k = v^k$ 

• Для  $B_{k+1}$  можно написать SR1 пересчет матрицы:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y^k - B_k s^k)(y^k - B_k s^k)^T}{(y^k - B_k s^k)^T s^k}$$

• Смотрим на вид  $B_{k+1}$  и делаем из нее двухранговое изменение:

$$B_{k+1} = B_k + \mu_{k,1} y^k (y^k)^T + \mu_{k,2} B_k y^k (B_k y^k)^T$$

• Как и в SR1 можно подогнать  $\mu_{k,1}$  и  $\mu_{k,2}$ :

$$B_{k+1} = B_k + \frac{y^k (y^k)^T}{(y^k)^T s^k} + \frac{B_k s^k (B_k s^k)^T}{(s^k)^T B_k s^k}$$

• Если теперь обратить  $B_{k+1}$  (формула Шермана-Маррисона-Вудберри), то получится выражение для  $H_{k+1}$ 

• Вопрос: чтобы посчитать новую матрицу нужно  $O(d^2)$  операций (не учитывая подсчет градиентов). Кажется, что BFGS подсчет дороже (есть перемножение трех матриц). Так ли это?  $H_{k+1} = (I - \rho_k s^k (y^k)^T) H_k (I - \rho_k y^k (s^k)^T) + \rho_k s^k (s^k)^T$ 

- Вопрос: чтобы посчитать новую матрицу нужно  $O(d^2)$  операций (не учитывая подсчет градиентов). Кажется, что BFGS подсчет дороже (есть перемножение трех матриц). Так ли это?  $H_{k+1} = (I \rho_k s^k (y^k)^T) H_k (I \rho_k y^k (s^k)^T) + \rho_k s^k (s^k)^T$
- Нужно раскрыть скобки в матричном умножении. В подсчете  $s^k(y^k)^T H_k$  нужно сначала умножить  $(y^k)^T H_k$ , а потом вектор на вектор. Аналогично для  $H_k y^k (s^k)^T$ . Получается, что сложность BFGS есть  $O(d^2)$  операций (не учитывая подсчет градиентов).

- Вопрос: чтобы посчитать новую матрицу нужно  $O(d^2)$  операций (не учитывая подсчет градиентов). Кажется, что BFGS подсчет дороже (есть перемножение трех матриц). Так ли это?  $H_{k+1} = (I \rho_k s^k (y^k)^T) H_k (I \rho_k y^k (s^k)^T) + \rho_k s^k (s^k)^T$
- Нужно раскрыть скобки в матричном умножении. В подсчете  $s^k(y^k)^T H_k$  нужно сначала умножить  $(y^k)^T H_k$ , а потом вектор на вектор. Аналогично для  $H_k y^k (s^k)^T$ . Получается, что сложность BFGS есть  $O(d^2)$  операций (не учитывая подсчет градиентов).
- При инициализации матрицу  $H_0$  достаточно брать равно единичной. Есть и более хитрые способы, но особо разницы не чувствует все работает хорошо.

• Квазиньютоновские методы не требуют подсчет гессиана и его обращение. Сложность всех арифметических операций на одной итерации  $O(d^2)$ , что дешевле обращения гессиана за  $O(d^3)$ .

- Квазиньютоновские методы не требуют подсчет гессиана и его обращение. Сложность всех арифметических операций на одной итерации  $O(d^2)$ , что дешевле обращения гессиана за  $O(d^3)$ .
- Квазиньютоновские методы имеют глобальную сверхлинейную скорость сходимости. Это медленнее, чем метод Ньютона, но не нужна «хорошая» окрестность решения.

- Квазиньютоновские методы не требуют подсчет гессиана и его обращение. Сложность всех арифметических операций на одной итерации  $O(d^2)$ , что дешевле обращения гессиана за  $O(d^3)$ .
- Квазиньютоновские методы имеют глобальную сверхлинейную скорость сходимости. Это медленнее, чем метод Ньютона, но не нужна «хорошая» окрестность решения.
- Квазиньютоновские методы используют только градиент, но в теории сходятся быстрее ускоренного градиентного метода. Вопрос: почему так, ведь метод Нестерова оптимальный?

- Квазиньютоновские методы не требуют подсчет гессиана и его обращение. Сложность всех арифметических операций на одной итерации  $O(d^2)$ , что дешевле обращения гессиана за  $O(d^3)$ .
- Квазиньютоновские методы имеют глобальную сверхлинейную скорость сходимости. Это медленнее, чем метод Ньютона, но не нужна «хорошая» окрестность решения.
- Квазиньютоновские методы используют только градиент, но в теории сходятся быстрее ускоренного градиентного метода. Вопрос: почему так, ведь метод Нестерова оптимальный? Смотри определения класса задач, для которого метод Нестерова оптимальный: не разрешены векторные произведения.

- Квазиньютоновские методы не требуют подсчет гессиана и его обращение. Сложность всех арифметических операций на одной итерации  $O(d^2)$ , что дешевле обращения гессиана за  $O(d^3)$ .
- Квазиньютоновские методы имеют глобальную сверхлинейную скорость сходимости. Это медленнее, чем метод Ньютона, но не нужна «хорошая» окрестность решения.
- Квазиньютоновские методы используют только градиент, но в теории сходятся быстрее ускоренного градиентного метода. Вопрос: почему так, ведь метод Нестерова оптимальный? Смотри определения класса задач, для которого метод Нестерова оптимальный: не разрешены векторные произведения.
- Метод Ньютона и квазиньютоновские методы на практике быстро находят точный локальный миннимум. Их спокойно можно использовать в качестве «дорешивателей». Квазиньютоновские методы и как «стартовый» метод.