Метод Ньютона. Квазиньютоновские методы. Матрица предобработки

Методы оптимизации

Александр Безносиков

Московский физико-технический институт

5 октября 2023

ФПМИ

Задача поиска нуля

- Рассмотрим задачу поиска «корня» функции:

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

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

Задача поиска нуля

- Рассмотрим задачу поиска «корня» функции:

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

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

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

$$\underbrace{\varphi(t^0 + \Delta t)}_{\substack{\approx t^* \\ 0}} = \varphi(t^0) + \varphi'(t^0)\Delta t + o(\Delta t)$$

$$\approx \varphi(t^0) + \varphi'(t^0)\Delta t$$

$$\Delta t = -\frac{\varphi(t^0)}{\varphi'(t^0)}$$

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

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

Задача поиска нуля

- Рассмотрим задачу поиска «корня» функции:

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

  где $\varphi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
- Пусть мы находимся в точке t^0 и хотим найти такую поправку Δt, что $t^0 + \Delta t \approx t^*$.
- Разложим в ряд:

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

Задача поиска нуля

- Рассмотрим задачу поиска «корня» функции:

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

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

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

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

- Так как мы хотим $t^0 + \Delta t \approx t^*$, то

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

Задача поиска нуля: метод Ньютона

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

$$\Delta t \approx \frac{\varphi(t^0)}{\varphi'(t^0)}.$$

Задача поиска нуля: метод Ньютона

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

$$\Delta t \approx \frac{\varphi(t^0)}{\varphi'(t^0)}.$$

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

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

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

Метод Ньютона: локальная сходимость

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

Метод Ньютона: локальная сходимость

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

Метод Ньютона: локальная 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? $\varphi(0) = 0$

Метод Ньютона: локальная 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? $t^* = 0$.

Метод Ньютона: локальная 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: $\varphi'(t) = \frac{1}{(1+t^2)^{3/2}}$.

$$t^{k+1} = t^k - \frac{\varphi(t^k)}{\varphi'(t^k)} = t^k - \frac{\frac{t^k}{\cancel{\sqrt{1+(t^k)^2}}}}{\frac{1}{(1+(t^k)^2)^{\cancel{3}/2}}} = t^k - t^k(1+(t^k)^2) = -(t^k)^3$$

Метод Ньютона: локальная 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: $\varphi'(t) = \frac{1}{(1+t^2)^{3/2}}$. Откуда итерация метода Ньютона
$$t^{k+1} = t^k - \frac{\varphi(t^k)}{\varphi'(t^k)} = -(t^k)^3.$$

1) $|t^0| < 1$

2) $|t^0| = 1$

3) $|t^0| > 1$

Метод Ньютона: локальная 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: $\varphi'(t) = \frac{1}{(1+t^2)^{3/2}}$. 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?

Метод Ньютона: локальная 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: $\varphi'(t) = \frac{1}{(1+t^2)^{3/2}}$. 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

Метод Ньютона: локальная 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: $\varphi'(t) = \frac{1}{(1+t^2)^{3/2}}$. 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
  - $|t^0| = 1$ — колеблемся в точка -1 и 1

Метод Ньютона: локальная 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: $\varphi'(t) = \frac{1}{(1+t^2)^{3/2}}$. 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
  - $|t^0| = 1$ — колеблемся в точка -1 и 1
  - $|t^0| > 1$ — расходимся

Метод Ньютона: локальная 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: $\varphi'(t) = \frac{1}{(1+t^2)^{3/2}}$. 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
  - $|t^0| = 1$ — колеблемся в точка -1 и 1
  - $|t^0| > 1$ — расходимся
- Ключевая особенность метода Ньютона — локальная сходимость (только в окрестности решения).

Метод Ньютона: оптимизация

- Рассмотрим задачу безусловную задачу 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?

$$\varphi(t^*) = 0 \longrightarrow \nabla f(x^*) = 0$$

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

Метод Ньютона: оптимизация

- Рассмотрим задачу безусловную задачу 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 задачу 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** $k = 0, 1, \ldots, K-1$ **do**

2: Вычислить $\nabla f(x^k)$, $\nabla^2 f(x^k)$

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

4: **end for**

Выход: x^K

Метод Ньютона и градиентный спуск

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

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

$$\nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)(x^* - x^k) = 0$$

$$x^* = x^{k+1}$$

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

Метод Ньютона и градиентный спуск

- 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:

Метод Ньютона и градиентный спуск

- 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:
  $\nabla f(x^k) = \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) = 0.$

Метод Ньютона и градиентный спуск

- 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 и градиентный спуск

- 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.

Метод Ньютона и градиентный спуск

- 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.
- Стоимость итерации значительно возрастает (по сравнению с градиентным спуском) не только из-за гессиана, но и его обращения.

Метод Ньютона и градиентный спуск

- 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:

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

  $\frac{1}{2} x^T A x - bx$

  $\in S^d_{++}$

- Метод Ньютона использует оракул второго порядка: требует вычисление гессиана.

  $x^{k+1} = x^k - A^{-1}(Ax^k - b) = A^{-1} b$

- 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? 1

Метод Ньютона и градиентный спуск

- 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.
- 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).

Метод Ньютона: сходимость

- 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.

Метод Ньютона: сходимость

- 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, μ-сильно выпуклой и имеет M-Липшицев гессиан, т.е. для любых $x, y \in \mathbb{R}^d$ справедливо:

$\sqrt{\lambda(A^T A)}$

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

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

$\sup\limits_{\|x\|_2 = 1} \|Ax\|_2$

$\|\nabla^2 f(x)\|_2 \geq \mu$

Метод Ньютона: сходимость

- Доказываем сходимость.

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

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

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

$$\nabla f(x^*) = 0$$

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

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

Метод Ньютона: сходимость

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

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

- Снова вспомним формулу Ньютона-Лейбница для интеграла вдоль кривой:

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

Метод Ньютона: сходимость

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

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

- 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 $\nabla f(x^*) = 0$, получим

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

Метод Ньютона: сходимость

- Продолжаем и используем «умную единицу»:

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

Метод Ньютона: сходимость

- Продолжаем и используем «умную единицу»:

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

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

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

Метод Ньютона: сходимость

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

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

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

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

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

$$\left(\nabla^2 f(x)\right)^{-1} \preceq \frac{1}{\mu} I$$

$$\le \frac{1}{\mu} \|G_k\|_2 \|x^k - x^*\|_2$$

Метод Ньютона: сходимость

- 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:

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

Метод Ньютона: сходимость

- 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:

$$\begin{aligned}
\|x^{k+1} - x^*\|_2 &\leq \left\| \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} G_k \right\|_2 \|x^k - x^*\|_2 \\
&\leq \left\| \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \right\|_2 \|G_k\|_2 \|x^k - x^*\|_2.
\end{aligned}$$

Метод Ньютона: сходимость

- С предыдущего слайда:

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

Метод Ньютона: сходимость

- С предыдущего слайда:

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

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

Метод Ньютона: сходимость

- С предыдущего слайда:

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

- **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 $\frac{1}{\mu} I \succeq \left(\nabla^2 f(x^k) \right)^{-1}$,

Метод Ньютона: сходимость

- С предыдущего слайда:

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

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

$$\|x^{k+1} - x^*\|_2 \leq \frac{1}{\mu} \|G_k\|_2 \|x^k - x^*\|_2.$$

Метод Ньютона: сходимость

- С предыдущего слайда:

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

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

$$\|x^{k+1} - x^*\|_2 \leq \frac{1}{\mu} \|G_k\|_2 \|x^k - x^*\|_2.$$

- Осталось оценить $\|G_k\|_2$.

$$\|G_k\|_2 = \left\| \nabla^2 f(x^k) - \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*))\, d\tau \right\|_2$$

$$= \left\| \int_0^1 \left(\nabla^2 f(x^k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*)) \right) d\tau \right\|_2$$

$$\leq \int_0^1 \left\| \nabla^2 f(x^k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*)) \right\|_2 d\tau$$

$$\leq \int_0^1 M(1-\tau) \|x^k - x^*\|_2 \, d\tau$$

$$= M \|x^k - x^*\|_2 \int_0^1 (1-\tau)\, d\tau = \frac{M}{2} \|x^k - x^*\|_2$$

Метод Ньютона: сходимость

- Оцениваем $\|G_k\|_2$:

$$\begin{aligned}
\|G_k\|_2 &= \left\| \nabla^2 f(x^k) - \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*)) d\tau \right\|_2 \\
&= \left\| \int_0^1 \left(\nabla^2 f(x^k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*)) \right) d\tau \right\|_2 \\
&\leq \int_0^1 \left\| \nabla^2 f(x^k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x^k - x^*)) \right\|_2 d\tau \\
&\leq \int_0^1 M(1 - \tau) \|x^k - x^*\|_2 d\tau \\
&= M \|x^k - x^*\|_2 \int_0^1 (1 - \tau) d\tau = \frac{M}{2} \|x^k - x^*\|_2.
\end{aligned}$$

Метод Ньютона: сходимость

- Подставляем оценку на $\|G_k\|_2$:

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

Метод Ньютона: сходимость

- Подставляем оценку на $\|G_k\|_2$:

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

Теорема об оценке сходимости метода Ньютона для μ-сильно выпуклых функций с M-Липшецевым гессианом

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

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

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

Метод Ньютона: сходимость

- Подставляем оценку на $\|G_k\|_2$:

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

Теорема об оценке сходимости метода Ньютона для μ-сильно выпуклых функций с M-Липшецевым гессианом

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

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

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

Метод Ньютона: сходимость

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

Метод Ньютона: сходимость

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

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

Метод Ньютона: сходимость

- Сходимость, как и в случае первородного метода Ньютона, является локальной. А именно, что 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 $\|x^0 - x^*\|_2 = \frac{1}{2}$.

Метод Ньютона: сходимость

- Сходимость, как и в случае перворожденного метода Ньютона, является локальной. А именно, что 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 $\|x^1 - x^*\|_2 \leq \frac{1}{2^2}$,

Метод Ньютона: сходимость

- Сходимость, как и в случае перворoдного метода Ньютона, является локальной. А именно, что 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.

квадратичная

Метод Ньютона: модификации

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

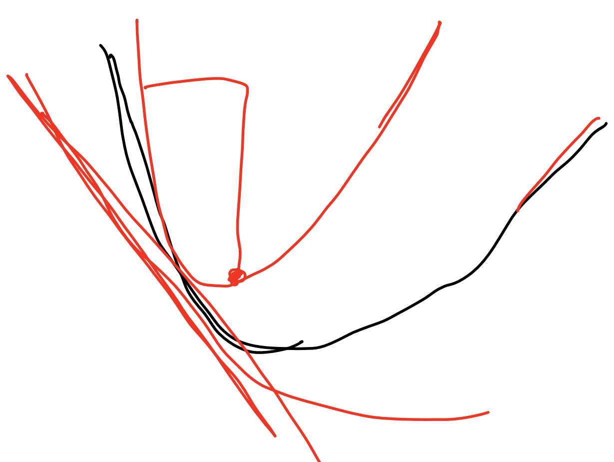
Метод Ньютона: модификации

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

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

Такой метод называется демпфированный метод Ньютона.

$$x^{k+1} = x^k + \gamma_k p_k$$



Метод Ньютона: модификации

- 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?

Метод Ньютона: модификации

- 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:
$\arg\min_\gamma (x^k + \gamma p_k)$, где $p_k = -\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k)$.

Метод Ньютона: модификации

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

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

Метод Ньютона: модификации

- 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}?

Метод Ньютона: модификации

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

Метод Ньютона: модификации

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

$f(x) \leq$

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

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:

$f(x) \leq$

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

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

Квазиньютоновское уравнение

- Запишем метод Ньютона следующим образом:

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

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

Квазиньютоновское уравнение

- Запишем метод Ньютона следующим образом:

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

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.

$$\nabla f(x^k) \approx \nabla f(x^{k+1}) + \nabla^2 f(x^{k+1})(x^k - x^{k+1})$$

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

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

$$H_{k+1}^T = H_{k+1}$$

Квазиньютоновское уравнение

- Запишем метод Ньютона следующим образом:

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

  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.

Квазиньютоновское уравнение

- Запишем метод Ньютона следующим образом:
$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k H_k \nabla f(x^k).$$
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:
$$\nabla f(x^k) = \nabla f(x^{k+1}) + \nabla^2 f(x^{k+1})(x^k - x^{k+1}) + o(\|x^{k+1} - x^k\|_2)$$
или $\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k+1}) \approx \nabla^2 f(x^{k+1})(x^k - x^{k+1})$. Откуда $x^{k+1} - x^k \approx (\nabla^2 f(x^{k+1}))^{-1}(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))$.

Квазиньютоновское уравнение

- Запишем метод Ньютона следующим образом:

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

  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:

$$\nabla f(x^k) = \nabla f(x^{k+1}) + \nabla^2 f(x^{k+1})(x^k - x^{k+1}) + o(\|x^{k+1} - x^k\|_2)$$

  или $\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k+1}) \approx \nabla^2 f(x^{k+1})(x^k - x^{k+1})$. Откуда $x^{k+1} - x^k \approx (\nabla^2 f(x^{k+1}))^{-1}(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))$. Заменим на $(\nabla^2 f(x^{k+1}))^{-1}$ на H_{k+1}, введем обозначения $s^k = x^{k+1} - x^k$ и $y^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$:

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

Квазиньютоновское уравнение

- Квазиньютоновское уравнение:

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

Квазиньютоновское уравнение

- Квазиньютоновское уравнение:

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

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

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

d уравнений $\quad O(d^2)$

Квазиньютоновское уравнение

- Квазиньютоновское уравнение:

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

- 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 $H_{k+1}^T = H_{k+1}$?

Квазиньютоновское уравнение

- Квазиньютоновское уравнение:

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

- 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.

Квазиньютоновское уравнение

- Квазиньютоновское уравнение:

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

- 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}.

Квазиньютоновские методы: SR1/Broyden

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

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

$O(d^2)$

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

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

$$\underbrace{\mu_k ((q^k)^T y^k)}_{\in \mathbb{R}} q^k = s^k - H_k y^k$$

1

$$q^k \parallel s^k - H_k y^k$$

$$q^k = s^k - H_k y^k \qquad \mu = \frac{1}{(q^k)^T y^k}$$

Квазиньютоновские методы: SR1/Broyden

- 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:

$$\begin{aligned} s^k =& H_{k+1} y^k = H_k y^k + \mu_k q^k (q^k)^T y^k \\ =& H_k y^k - \mu_k \left((q^k)^T y^k \right) q^k \end{aligned}$$

Квазиньютоновские методы: SR1/Broyden

- 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:

$$\begin{aligned} s^k =& H_{k+1} y^k = H_k y^k + \mu_k q^k (q^k)^T y^k \\ =& H_k y^k - \mu_k \left((q^k)^T y^k \right) q^k \end{aligned}$$

Откуда

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

Квазиньютоновские методы: SR1/Broyden

- 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?

Квазиньютоновские методы: SR1/Broyden

- 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 $s^k - H_k y^k$.

Квазиньютоновские методы: SR1/Broyden

- 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 $s^k - H_k y^k$. 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:

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

$O(d^2)$

Квазиньютоновские методы: BFGS

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

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

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

$$H^T = H$$

Квазиньютоновские методы: BFGS

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

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

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

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 будет 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:

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

Квазиньютоновские методы: BFGS

- До такой формулы можно дойти по-другому.

Квазиньютоновские методы: BFGS

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

Квазиньютоновские методы: BFGS

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

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

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

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

$$\underline{y^k (y^k)^T} \qquad \underline{B_k s^k (B_k s^k)^T}$$

Квазиньютоновские методы: BFGS

- До такой формулы можно дойти по-другому. Рассмотрим $B_{k+1} = H_{k+1}^{-1}$. Для B квазиньютоновское уравнение выглядит как
$$B_{k+1}s^k = y^k$$
- 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:
$$B_{k+1} = B_k + \mu_{k,1} y^k (y^k)^T + \mu_{k,2} B_k y^k (B_k y^k)^T$$

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

Квазиньютоновские методы: BFGS

- До такой формулы можно дойти по-другому. Рассмотрим $B_{k+1} = H_{k+1}^{-1}$. Для B квазиньютоновское уравнение выглядит как
$$B_{k+1}s^k = y^k$$
- 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 $\mu_{k,2}$:
$$B_{k+1} = B_k + \frac{y^k (y^k)^T}{(y^k)^T s^k} + \frac{B_k y^k (B_k y^k)^T}{(s^k)^T B_k s^k}$$

Квазиньютоновские методы: BFGS

- До такой формулы можно дойти по-другому. Рассмотрим $B_{k+1} = H_{k+1}^{-1}$. Для B квазиньютоновское уравнение выглядит как
$$B_{k+1}s^k = y^k$$
- 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 $\mu_{k,2}$:
$$B_{k+1} = B_k + \frac{y^k (y^k)^T}{(y^k)^T s^k} + \frac{B_k y^k (B_k y^k)^T}{(s^k)^T B_k s^k}$$
- Если теперь обратить B_{k+1} (формула Шермана-Маррисона-Вудберри), то получится выражение для H_{k+1}

Квазиньютоновские методы: BFGS

- **Вопрос:** чтобы посчитать новую матрицу нужно $O(d^2)$ операций (не учитывая подсчет градиентов). Кажется, что BFGS подсчет дороже (есть перемнножение трех ~~матриц~~). Так ли это?

$$H_{k+1} = (I - \rho_k s^k (y^k)^T) H_k (I - \rho_k y^k (s^k)^T) + \underbrace{\rho_k s^k (s^k)^T}_{O(d^2)}$$

$$\underbrace{s^k (y^k)^T H_k}_{O(d^2)}$$

$O(d^2)$

Квазиньютоновские методы: BFGS

- **Вопрос:** чтобы посчитать новую матрицу нужно $O(d^2)$ операций (не учитывая подсчет градиентов). Кажется, что BFGS подсчет дороже (есть перемнножение 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).

Квазиньютоновские методы: BFGS

- **Вопрос:** чтобы посчитать новую матрицу нужно $O(d^2)$ операций (не учитывая подсчет градиентов). Кажется, что BFGS подсчет дороже (есть перемнножение 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 инициализация матрицы H_0 достаточно брать равно единичной. Есть и более хитрые способы, но особо разницы не чувствует все работает хорошо.

Метод Ньютона и квазиньютоновские методы

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

Метод Ньютона и квазиньютоновские методы

- 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.

Метод Ньютона и квазиньютоновские методы

- 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?

Метод Ньютона и квазиньютоновские методы

- 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

- 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.

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

- Постоянную матрицу: $B_k = B$.

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

- Постоянную матрицу: $B_k = B$.
- Аппроксимацию гессиана:

$$D_k = \mathrm{diag}\left(u_k \odot \overset{2}{\nabla} f(x^k) u_k \right),$$

здесь $\odot$ покомпонентное произведение векторов, компоненты вектора u_k берутся независимые случайные величины равные -1 и 1 с вероятностью $1/2$.

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

- Постоянную матрицу: $B_k = B$.
- Аппроксимацию гессиана:

$$D_k = \operatorname{diag}\left(u_k \odot \nabla^2 f(x^k) u_k\right),$$

здесь $\odot$ покомпонентное произведение векторов, компоненты вектора u_k берутся независимые случайные величины равные -1 и 1 с вероятностью $1/2$. **Вопрос:** что можно сказать про $\mathbb{E} D_k$?

$$\begin{pmatrix} \nabla f_{11}(x)\underbrace{u_1^2}_{1} + \nabla f_{12}(x)\underbrace{u_1 u_2}_{0} + \dots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

- Постоянную матрицу: $B_k = B$.
- Аппроксимацию гессиана:

$$D_k = \mathrm{diag}\left(u_k \odot \nabla f(x^k) u_k\right),$$

здесь $\odot$ покомпонентное произведение векторов, компоненты вектора u_k берутся независимые случайные величины равные -1 и 1 с вероятностью $1/2$. **Вопрос:** что можно сказать про $\mathbb{E} D_k$? $\mathbb{E} D_k = \mathrm{diag}(\nabla^2 f(x^k))$.

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

- Постоянную матрицу: $B_k = B$.
- Аппроксимацию гессиана:

$$D_k = \operatorname{diag}\left(u_k \odot \nabla f(x^k) u_k\right),$$

  здесь $\odot$ покомпонентное произведение векторов, компоненты вектора u_k берутся независимые случайные величины равные -1 и 1 с вероятностью $1/2$. **Вопрос:** что можно сказать про $\mathbb{E} D_k$? $\mathbb{E} D_k = \operatorname{diag}(\nabla^2 f(x^k))$. **Вопрос:** хорошая ли эта аппроксимация?

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

- Постоянную матрицу: $B_k = B$.
- Аппроксимацию гессиана:

$$D_k = \mathrm{diag}\left(u_k \odot \nabla f(x^k) u_k\right),$$

здесь $\odot$ покомпонентное произведение векторов, компоненты вектора u_k берутся независимые случайные величины равные -1 и 1 с вероятностью $1/2$. **Вопрос:** что можно сказать про $\mathbb{E} D_k$? $\mathbb{E} D_k = \mathrm{diag}(\nabla^2 f(x^k))$. **Вопрос:** хорошая ли эта аппроксимация? Не особо, $\mathbb{E}$ – это хорошо, но разброс может быть огромным.

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

- Постоянную матрицу: $B_k = B$.
- Аппроксимацию гессиана:

$$D_k = \operatorname{diag}\left(u_k \odot \nabla f(x^k) u_k\right),$$

здесь $\odot$ покомпонентное произведение векторов, компоненты вектора u_k берутся независимые случайные величины равные -1 и 1 с вероятностью $1/2$. **Вопрос:** что можно сказать про $\mathbb{E} D_k$? $\mathbb{E} D_k = \operatorname{diag}(\nabla^2 f(x^k))$. **Вопрос:** хорошая ли эта аппроксимация? Не особо, $\mathbb{E}$ – это хорошо, но разброс может быть огромным. Поэтому делают так

$$B_{k+1} = (1 - \beta_k) B_k + \beta_k D_k,$$

где $\beta_k \in (0; 1)$ (часто β_k близко к 0).

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

- Постоянную матрицу: $B_k = B$.
- Аппроксимацию гессиана:

$$D_k = \mathrm{diag}\left(u_k \odot \nabla f(x^k) u_k\right),$$

здесь $\odot$ покомпонентное произведение векторов, компоненты вектора u_k берутся независимые случайные величины равные -1 и 1 с вероятностью $1/2$. **Вопрос:** что можно сказать про $\mathbb{E} D_k$? $\mathbb{E} D_k = \mathrm{diag}(\nabla^2 f(x^k))$. **Вопрос:** хорошая ли эта аппроксимация? Не особо, $\mathbb{E}$ – это хорошо, но разброс может быть огромным. Поэтому делают так

$$B_{k+1} = (1-\beta_k) B_k + \beta_k D_k,$$

где $\beta_k \in (0;1)$ (часто β_k близко к 0). Такой подход помогает бороться со стохастикой. Мы аккумулируем апроксимации D_k, предполагая, что гессиан меняется слабо. С другой стороны все более старые апроксимации гессиана забываются.

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

- RMSProp:

$$B_{k+1} = (1-\beta)B_k + \beta D_k \quad D_k = \operatorname{diag}\left(f(x^k) \odot \nabla f(x^k)\right)$$

$\begin{pmatrix} 2 \\ 200 \end{pmatrix}$ $B_k = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 200 \end{pmatrix}$ $x_1^2 + 100x_2^2$ $1;1$

$2;200$

- Adam:

$$B_{k+1} = (1-\beta_k)B_k + \beta_k D_k \quad D_k = \operatorname{diag}\left(f(x^k) \odot \nabla f(x^k)\right),$$

β

где $\beta_k = \frac{\beta - \beta^{k+1}}{1-\beta^{k+1}}$. Лучше на начальных итерация из-за подбора β_k, который меньше «доверяет» начальным аппроксимациям.

Вопрос: чем может помочь такого рода предобработка? подумайте о квадратичной задаче с диагональной матрицей.

Предобработчки/Шкалирования

Что еще можно брать вместо гессиана: $x^{k+1} = x^k - \gamma_k (B_k)^{-1} \nabla f(x^k)$?

- RMSProp:

$$B_{k+1} = (1-\beta) B_k + \beta D_k \quad D_k = \mathrm{diag}\left(f(x^k) \odot \nabla f(x^k)\right)$$

- Adam:

$$B_{k+1} = (1-\beta_k) B_k + \beta_k D_k \quad D_k = \mathrm{diag}\left(f(x^k) \odot \nabla f(x^k)\right),$$

  где $\beta_k = \frac{\beta - \beta^{k+1}}{1-\beta^{k+1}}$. Лучше на начальных итерация из-за подбора β_k, который меньше «доверяет» начальным аппроксимациям.

Вопрос: чем может помочь такого рода предобработка? подумайте о квадратичной задаче с диагональной матрицей. А исчерпывающий теоретический ответ, почему условный Adam работает хорошо, не знает никто.