МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ

Table of Contents

Семинар 13. Метод Ньютона и Гаусса-Ньютона

Школьная формула Тейлора для скалярной функции скалярного аргумента:

$$f(x+p) = f(x) + \frac{df}{dx}(x)p + \frac{1}{2}\frac{d^2 f}{dx^2}(x)p^2 + \ldots$$

Функция предполагается бесконечно дифференцируемой

Формулы Тейлора для разложения скалярной функции векторного аргумента $f(\vec{x})$ в окрестности точки $\vec{x}$:

$f(\vec{x} + \vec{p}) = f(\vec{x}) + \nabla f(\vec{x} + t\vec{p}) \cdot \vec{p}$ где $t \in (0,1)$, если функция дифференцируема

$f(\vec{x} + \vec{p}) = f(\vec{x}) + \nabla f(\vec{x}) \cdot \vec{p} + \frac{1}{2}\vec{p} \cdot \nabla^2 f(x + t\vec{p}) \cdot \vec{p}$ где $t \in (0,1)$, если функция дважды дифференцируема

Необходимое (но не достаточное) условие локального минимума:

$\nabla f(\vec{x}^*) = \vec{0}$ - равенство градиента нулю

Условия второго порядка

Рассмотрим поведение квадратичной формы (скалярная функция векторного аргумента):

$F(\vec{x}) = \vec{g}^T\vec{x} + \vec{x}^T A \vec{x}$, где A - некоторая матрица произвольная

Когда $F(\vec{x}) > 0$ для любого $\vec{x}$ матрица называется Aположительно-определенной.

```
cd(get_folder())
clearvars
a11 = 1.03;
a12 = -2.3;
a21 = -2.6;
a22 = 0.65;
```

```
b1 = -0.98;
b2 = -7.41;
A = [a11,a12;a21,a22];
b = [b1;b2];
make_positive=true;
if make_positive
    A = A'*A % эта операция делает матрицу положительно определенной
end
```

```
A = 2×2
    7.8209   -4.0590
   -4.0590    5.7125
```

```
is_positive = make_positive;
% проверка на то, является ли матрица А положительно определенной, зачем?
if ~make_positive
    if isequal(A',A) % проверка является ли матрица симметричной
        check_A=A;
    else % матрица не симметрична
        check_A = (A' + A)/2;
    end
    try chol(check_A) % пробуем разложение холецкого (если матрица не ПО то ошибка)
         disp('Матрица А положительно определенная')
    catch ME
         disp('Матрица А не положительно определенная')
    end
end
f = @(x)b'*x(:) + transpose(x(:))*A*x(:); % функция - квадратичная форма
df = @(x) num_grad_dual(f,x); % функция численного расчета градиента (возвращает
вектор)
df_abs = @(x) norm(df(x));% функция расчета модуля градиента
%d2f = @(x) num_hess_dual(df,x)
%d2f([1,2])



ax = get_next_ax();
```

```
fig1
```

```
fsurf(@(x,y) f([x;y]),[-1,1]) % функции fsurf и fcontour строят поверхность и контур
```

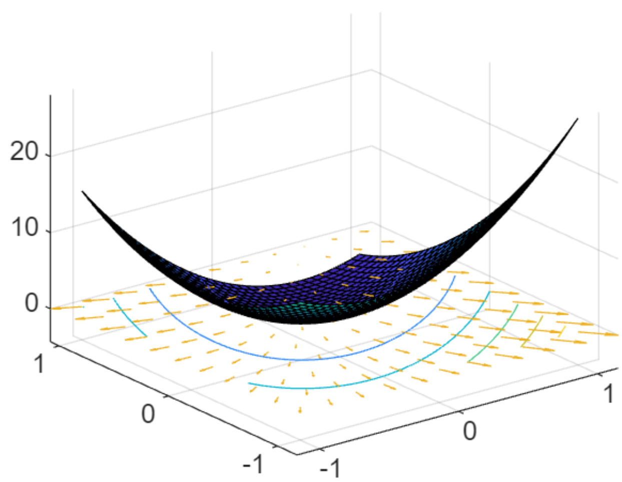
```
Warning: Function behaves unexpectedly on array inputs. To improve performance, properly vectorize your
function to return an output with the same size and shape as the input arguments.
```

```
% функции, которая принимает два скалярных аргумента
hold(ax,"on")
fcontour(ax,@(x,y) f([x;y]),[-1,1])
```

```
Warning: Function behaves unexpectedly on array inputs. To improve performance, properly vectorize your
function to return an output with the same size and shape as the input arguments.
```

```
hold(ax,"off")
```

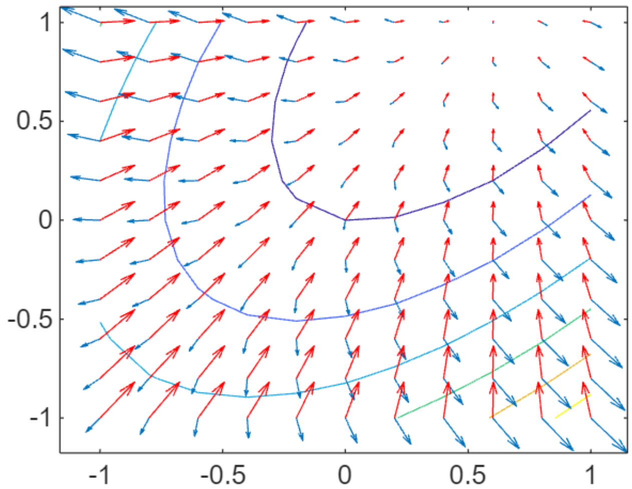
```
% теперь построим градиент
spacing = 0.2;
[X,Y] = meshgrid(-1:spacing:1,-1:spacing:1);
U = X;V=X;F_value=X;G_module = X;
U2 = X;V2=X;
for ii =1:size(X,1)
    for jj=1:size(Y,2)
        x = X(ii,jj);y = Y(ii,jj);
        G_value = df([x;y]);
        %H_value = d2f([x;y]); % hessian matrix
        NEWTON_STEP = -A\G_value;
        F_value(ii,jj) = f([x;y]);
        G_module(ii,jj) = sqrt(G_value'*G_value);
        U(ii,jj) = G_value(1);
        V(ii,jj) = G_value(2);
        U2(ii,jj) = NEWTON_STEP(1);
        V2(ii,jj) = NEWTON_STEP(2);
    end
end
hold(ax,"on")
q = quiver(ax,X,Y,U,V);
hold(ax,"off")
```




```
% тоже самое, только на плоскости
ax = get_next_ax();
```

fig2

```
contour(ax,X,Y,F_value);
hold(ax,"on")
quiver(ax,X,Y,U,V)
quiver(ax,X,Y,U2,V2,'r')
hold(ax,"off")
```



Положительно определенной называется матрица A для которой:

$\vec{x}^T A \vec{x} > 0$ для любого вектора $\vec{x}$, как определить является ли матрица положительно определенной:

Например, симметричная положительно определенная матрица имеет положительные собственные значения.

Симметричная положительно определенная матрица может быть разложена в разложение Холецкого:

$A = R^T R$, где R - верхняя треугольная матрица.

$det(A) > 0$ ($A = QR => det(A) = det(R) = \sum_i R_{ii}$

Итерационная оптимизация

Посмотрим еще раз на формулу Тейлора второго порядка с точки зрения применимости для вычисления шага метода оптимизации

$$f(\vec{x}_k + \vec{p}) = f(\vec{x}_k) + \nabla f(\vec{x}_k) \cdot \vec{p} + \frac{1}{2}\vec{p} \cdot \nabla^2 f(\vec{x}_k + t\vec{p}) \cdot \vec{p} \text{ где } t \in (0, 1)$$

Стратегия **line-search**:

$\vec{p} = -\alpha \frac{\nabla f}{||\nabla f||}$ - величина шага подбирается

Теперь предположим, что t выражении выше равно нулю, то есть функция полностью описывается разложением второго порядка в некоторой области, это стратегия **trust-region**:

$$f(\vec{x}_k + \vec{p}) = f(\vec{x}_k) + \nabla f(\vec{x}_k) \cdot \vec{p} + \frac{1}{2}\vec{p} \cdot \nabla^2 f(\vec{x}_k + t\vec{p}) \cdot \vec{p} \equiv m_k(\vec{x} + \vec{p})$$

Перепишем ее, чтобы не путаться:

$m_k(\vec{p}) = m_0 + \vec{g}_k^T \vec{p} + \frac{1}{2} \vec{p}^T B_k \vec{p}$

$\vec{g}_k$ и B_k просто постоянные вектор и матрица, чтобы найти экстремум надо приравнять градиент к нулю:

$\nabla_p m_k(\vec{p}) = \vec{g}_k^T + B_k \vec{p} = 0$, это дает

$\vec{p} = -B_k^{-1} \vec{g}$

Например, если $B_k = \nabla^2 f(\vec{x}_k)$ это называется шагом Ньютона, а метод оптимизации - Newton trust region.

Направление убывания:

Антиградиент направлен в сторону убывания, но не только он, туда направлен любой вектор, который образует тупой угол с направлением градиента:

$\vec{g} \cdot \vec{p} < 0$

Если $\vec{p} = -\alpha \frac{\vec{g}}{||\vec{g}||}$ - градиентный метод с линейным поиском:

$-\alpha \frac{\vec{g} \cdot \vec{g}}{||\vec{g}||} < 0$ если скорость обучения положительна!

Если $\vec{p} = -B_k^{-1} \vec{g}$ - метод второго порядка:

$-\vec{g} \cdot B_k^{-1} \cdot \vec{g} < 0$

Если матрица B_k положительно определенная, то и обратная будет положительно определенной, а это автоматически означает выполнение неравенства.

Таким образом, положительная определенность матрицы B_k является необходимым условием того, чтобы алгоритм двигался в сторону уменьшения функции.

Методы второго порядка для задачи наименьших квадратов

Теперь посчитаем матрицу Гесса для конкретного типа функции невязки, а именно - суммы квадратов

Задача метода наименьших квадратов, состоит в том, чтобы минимизировать квадрат модуля ошибки между результатами измерений и предсказанием модели:

$\Phi(\vec{x}) = \frac{1}{2} \vec{r} \cdot \vec{r}$

Квадрат модуля - скалярное произведение вектора самого на себя, вектор ошибки "живет" в пространстве с базисными векторами $\widehat{e}_j$, размерность этого пространства равна количеству экспериментальных точек. Вектор $\overrightarrow{x}$ - это вектор параметров оптимизации, он "живет" в пространстве с базисными векторами $\widehat{x}_i$. Размерность этого пространства равна количеству переменных оптимизации.

Базисные вектора у нас взаимноортогональны и имеют единичную длину, то есть, их скалярное произведение:

$\widehat{e}_i \cdot \widehat{e}_j$ равно нулю, если $i \neq j$ и единице, если $i = j$, тоже самое и для векторов пространства $\widehat{x}_i$.
Также мы считаем, что базисные вектора одинаковы в любой точке пространства и они не зависят от переменных оптимизации.

В соотвествии с формулой для градиента:

$$\overleftrightarrow{J} = \nabla \overrightarrow{r} = \sum_{i,j} \frac{\partial r_j}{\partial x_i} \widehat{x}_i \widehat{e}_j$$

Координаты этой диады - матрица Якоби.

Таким образом, матрица Якоби - это матрица, в которой элемент, стоящий на ***i***-й строке ***j***-го столбца - это значение производной ***j***-й координаты вектора ошибки по ***i***-й переменной оптимизации:

$$J_{ij} = \frac{\partial r_j}{\partial x_i}$$

В частности, градиент скалярного вектора самого на себя будет:

$$\nabla(\overrightarrow{r} \cdot \overrightarrow{r}) = 2((\nabla \overrightarrow{r}) \cdot \overrightarrow{r})$$

Тогда градиент квадратичной невязки:

$$\nabla \Phi(\overrightarrow{x}) = (\nabla \overrightarrow{r}) \cdot \overrightarrow{r}$$

Посчитаем вторую производную:

$$\nabla^2 \Phi(\overrightarrow{x}) = \nabla(\nabla \Phi(\overrightarrow{x})) = \nabla((\nabla \overrightarrow{r}) \cdot \overrightarrow{r})$$

$$\nabla((\nabla \overrightarrow{r}) \cdot \overrightarrow{r}) = \sum_k \widehat{x}_k \frac{\partial}{\partial x_k} [\sum_{i,j} \frac{\partial r_j}{\partial x_i} \widehat{x}_i \widehat{e}_j \cdot \sum_m r_m \widehat{e}_m] = \sum_k \widehat{x}_k \frac{\partial}{\partial x_k} [\sum_{i,j} \frac{\partial r_j}{\partial x_i} \widehat{x}_i r_j] = \sum_j \sum_k \sum_i \widehat{x}_k \widehat{x}_i \frac{\partial^2 r_j}{\partial x_k \partial x_i} r_j + [\sum_{i,k} \widehat{x}_k \widehat{x}_i \sum_j \frac{\partial r_j}{\partial x_i} \frac{\partial r_j}{\partial x_k}]$$

Таким образом, градиент - это вектор, размер которого равен числу переменных оптимизации (**Px1**), матрица Якоби - это матрица , размер которой равен (**PxN**)*, а матрица Гесса - это квадратная матрица (**PxP**).

Матрица вторых производных для квадратичной невязки состоит из двух слагаемых, первое - это сумма N матриц размером PxP вторых производных каждой из координаты вектора ошибки :

$$H_2 = \sum_j h_j r_j$$

$$
\text{где } h_j = r_j\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 r_j}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 r_j}{\partial x_1 \partial x_k} & \cdots & \frac{\partial^2 r_j}{\partial x_1 \partial x_P} \\ \cdots & \cdots & \frac{\partial^2 r_j}{\partial x_k \partial x_i} & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial^2 r_j}{\partial x_P \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 r_j}{\partial x_P \partial x_k} & \cdots & \frac{\partial^2 r_j}{\partial x_P \partial x_P} \end{bmatrix}
$$

Второе слагаемое - это перекрестные произведения первых производных:

$$H_a = JJ^T$$

В этом легко убедиться:

$$\overleftrightarrow{J} \cdot \overleftrightarrow{J}^T = \sum_{i,j} \frac{\partial r_j}{\partial x_i} \widehat{x}_i \widehat{e}_j \cdot \sum_{k,m} \widehat{e}_m \widehat{x}_k \frac{\partial r_m}{\partial x_k} = \sum_{i,j} \frac{\partial r_j}{\partial x_i} \widehat{x}_i \widehat{e}_j \cdot \sum_{k,m} \widehat{e}_m \widehat{x}_k \frac{\partial r_m}{\partial x_k}$$

$$\nabla^2 \Phi(\vec{x}) = \nabla(\nabla \Phi(\vec{x})) = \nabla[(\nabla \vec{r}) \cdot \vec{r}] = (\nabla \nabla \vec{r}) \cdot \vec{r} + (\nabla \vec{r}) \cdot (\vec{r} \nabla)$$

$$\nabla \nabla \vec{r} = \widehat{x}_i \widehat{x}_k \frac{\partial^2 r_j}{\partial x^i \partial x^k} \widehat{e}^j \text{ - тензор третьего ранга}$$

$$(\nabla \nabla \vec{r}) \cdot \vec{r} = \widehat{x}_i \widehat{x}_j \frac{\partial^2 r_j}{\partial x^k \partial x^i} \widehat{e}_j \cdot \widehat{e}_k r^k = \widehat{x}_i \widehat{x}_j \frac{\partial^2 r_j}{\partial x^k \partial x^i} r^j$$

Если в формуле для матрицы Гесса ограничиться только первыми производными, то есть, положить:

$$\nabla^2 \Phi(\vec{x}) \simeq JJ^T$$

То мы получим метод Гаусса-Ньютона, его достоинство в том, матрица JJ^T всегда положительно определена (при условии, что она не сингулярна!), а это, как мы видели выше признак того, что шагая в данном направлении, мы будем двигаться в сторону убывания функции.

*матрицу Якоби часто вводят в транспонированной форме относительно того как ввели мы, что удобнее с вычислительной точки зрения так как, как правило, **P<<N,** а в основном языки column-oriented.

Пример. Задача линейной регрессии

Рассмотрим на конкретном примере - задаче линейной регрессии.

$$\Phi(\vec{x}) = \frac{1}{2} \vec{r} \cdot \vec{r}$$

Вектор ошибки регрессии (раньше он обозначался $\vec{\epsilon}$):

$$\vec{r} = X\vec{b} - \vec{y}$$

Скалярная функция невязки для нее - это, соотвественно, квадрат модуля вектора ошибки.

Функция невязки в матричной записи:

$$\Phi(\overrightarrow{b}) = \frac{1}{2}\overrightarrow{r}^T\overrightarrow{r} = ||X\overrightarrow{b} - \overrightarrow{y}||^2 = (X\overrightarrow{b} - \overrightarrow{y})^T(X\overrightarrow{b} - \overrightarrow{y}) = \overrightarrow{y}^T\overrightarrow{y} - 2\overrightarrow{y}^T X\overrightarrow{b} + \overrightarrow{b}^T X^T X\overrightarrow{b}$$

Сравним матрицу Якоби с выражением для матрицы предикторов линейной регрессии, видно, что:

$J = X^T$

$$\nabla_b\Phi(\overrightarrow{b}) = \nabla_b\overrightarrow{r} \cdot \overrightarrow{r} = \overleftrightarrow{J} \cdot \overrightarrow{r} \qquad (1)$$

В матричной форме это выражение имеет вид:

$$\nabla\Phi(\overrightarrow{b}) = X^T(X\overrightarrow{b} - \overrightarrow{y})$$

$\nabla^2\Phi(\overrightarrow{b}) = JJ^T = X^TX$ - гессиан состоит только из первых производных и он постоянный, то есть, не зависит от $\overrightarrow{b}$

$\nabla^2\Phi(\overrightarrow{b})$ - всегда положительно определенная и симметричная

Направления градиентного поиска на k-й итерации:

$$\overrightarrow{p}_k = -\alpha X^T(X\overrightarrow{b_k} - \overrightarrow{y})$$

Шаг метода ньютона:

$$\overrightarrow{p}_k = -(X^TX)^{-1}X^T\overrightarrow{r}_k = -(X^TX)^{-1}X^T(X\overrightarrow{b}_k - \overrightarrow{y}) = \overrightarrow{b}_k + (X^TX)^{-1}X^T\overrightarrow{y}$$

Шаг метода Гаусса-Ньютона - решение подзадачи линейной регрессии

Это интересный момент, с одной стороны, мы видим, что для задачи линейной регрессии шаг метода Ньютона совпадает с шагом метода Гаусса-Ньютона (так как все вторые производные равны нулю), это дает нам нормальное уравнение, с другой стороны, мы видим, что метод Гаусса-Ньютона (когда мы используем аппроксимацию Гессиана $H \simeq JJ^T$) по сути сводит нелинейную задачу к решению задачи линейной регрессии для нахождения шага в окрестности текущей точки итерационной оптимизации, где роль матрицы предикторов играет транспонированная матрица Якоби, рассчитанная в данной точке. То есть, так как шаг метода Гаусса-Ньютона дается выражением:

$$\overrightarrow{p}_k = -(JJ^T)^{-1}J\overrightarrow{r} = -(J^T)^{\dagger}\overrightarrow{r}$$

Которое совпадает с решением задачи линейной оптимизации следующего вида:

$$J^T\overrightarrow{p}_k = -\overrightarrow{r}$$

Причем, для решения данной подзадачи мы можем исопльзовать арсенал методов линейной оптимизации, например использовать QR-факторизацию или SVD разложение, как мы это делали для линейной регресии, нам не нужно реально считать аппроксимацию матрицы Гесса, нам достаточно посчитать только матрицу Якоби и при помощи QR факториции решить уравнение.

ДАЛЬШЕ ИДЕТ БЛОК ФУНКЦИЙ

```
function folder = get_folder()
% функция смотрит какой файл открыт в редакторе в настоящий момент и
% возвращает путь к данному файлу
    folder = fileparts(matlab.desktop.editor.getActiveFilename);
end

function [y,p] = persistent_func(f,dx)
% функция сдвигает фазу аргумента функции f на величину dx
    persistent x
    persistent animated_Line axes_handle; % при первом пуске persistent переменная
[]
    if isempty(x)
        x =-dx; % обнуляем сдвиг в начальный момент
    end
    if isempty(animated_Line)
        axes_handle
= axes(figure(10),"XTickMode","manual","YTickMode","manual","XLim",[0,2*pi],"YLim",
[-1 1]);
        animated_Line = animatedline(axes_handle,"Marker","o","LineStyle","none");
    end
    x=x+dx;
    y = f(x);
    addpoints(animated_Line,x,y);
    drawnow
end

function [new_ax,fig_handle] = get_next_ax(index)
% функция, которая возвращает новые оси на новой фигуре
    arguments
        index = []
    end
    persistent N;
    if isempty(index)
        if isempty(N)
            N=1;
        else
            N  = N+1;
        end
        fig_handle = figure(N);
        clf(fig_handle);
        new_ax = axes(fig_handle);
        disp("fig"+ N)
    else
        fig_handle = figure(index);
```

```
        clf(fig_handle);
        new_ax = axes(fig_handle);
    end
end
```