ЦЕНТРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Одномерная оптимизация. Матрично-векторное дифференцирование

МЕТОДЫ ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

НЕДЕЛЯ 2

Даня Меркулов

Пётр Остроухов

Матрично-векторное дифференцирование. Линейный поиск

Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ

Напоминание с лекции

Вспоминаем теорию. Дифференциал

- Дифференциал $df(x)[\cdot] : U \to V$ в точке $x \in U$ для $f(\cdot) : U \to V$:

$$f(x+h) - f(x) = \underbrace{df(x)[h]}_{\text{дифференциал}} + \overline{o}(||h||)$$

$U \to V$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}^n$	$\mathbb{R}^{n\times m}$
$\mathbb{R}$	$f'(x)dx$	$\nabla f(x)dx$	$\nabla f(x)dx$
$\mathbb{R}^n$	$\nabla f(x)^T dx$	$J(x)dx$	—
$\mathbb{R}^{n\times m}$	$tr(\nabla f(X)^T dX)$	—	—

Вспоминаем теорию. Дифференциал

- Дифференциал $df(x)[\cdot] : U \to V$ в точке $x \in U$ для $f(\cdot) : U \to V$:

$$f(x+h) - f(x) = \underbrace{df(x)[h]}_{\text{дифференциал}} + \bar{o}(||h||)$$

- Каноническая форма дифференциала:

$U \to V$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}^n$	$\mathbb{R}^{n \times m}$
$\mathbb{R}$	$f'(x)dx$	$\nabla f(x)dx$	$\nabla f(x)dx$
$\mathbb{R}^n$	$\nabla f(x)^T dx$	$J(x)dx$	—
$\mathbb{R}^{n \times m}$	$tr(\nabla f(X)^T dX)$	—	—

Вспоминаем теорию. Правила дифференцирования

- Полезные правила дифференцирования и стандартные производные:

Правила дифференцирования	Производные стандартных функций
$dA = 0$	$d(\langle A,\, X\rangle) = \langle A,\, dX\rangle$
$d(\alpha X) = \alpha(dX)$	$d(\langle Ax,\, x\rangle) = \langle (A + A^T)x,\, dx\rangle$
$d(AXB) = A(dX)B$	$d(Det(X)) = Det(X)\langle X^{-T},\, dX\rangle$
$d(X + Y) = dX + dY$	$d(X^{-1}) = -X^{-1}(dX)X^{-1}$
$d(X^T) = (dX)^T$	
$d(XY) = (dX)Y + X(dY)$	
$d(\langle X,\, Y\rangle) = \langle dX,\, Y\rangle + \langle X,\, dY\rangle$	
$d\left(\frac{X}{\phi}\right) = \frac{\phi dX - (d\phi)X}{\phi^2}$	

Вспоминаем теорию. Дифференциал и градиент / гессиан

Градиент можно найти по следующей формуле:

$$df(x) = \langle \nabla f(x), dx \rangle$$

Вспоминаем теорию. Дифференциал и градиент / гессиан

Градиент можно найти по следующей формуле:

$$df(x) = \langle \nabla f(x), dx \rangle$$

Тогда, если у нас есть дифференциал в форме выше и мы хотим вычислить вторую производную матричной/векторной функции, мы рассматриваем “старый” dx как константу dx_1, затем вычисляем $d(df) = d^2 f(x)$

Вспоминаем теорию. Дифференциал и градиент / гессиан

Градиент можно найти по следующей формуле:

$$df(x) = \langle \nabla f(x), dx \rangle$$

Тогда, если у нас есть дифференциал в форме выше и мы хотим вычислить вторую производную матричной/векторной функции, мы рассматриваем “старый” dx как константу dx_1, затем вычисляем $d(df) = d^2 f(x)$

$$d^2 f(x) = \langle \nabla^2 f(x) dx_1, dx \rangle = \langle H_f(x) dx_1, dx \rangle$$

Вспоминаем теорию. Линейный поиск

- Методы локализации решения:

Вспоминаем теорию. Линейный поиск

- Методы локализации решения:
  - Метод дихотомии

Вспоминаем теорию. Линейный поиск

- Методы локализации решения:
  - Метод дихотомии
  - Метод золотого сечения

Вспоминаем теорию. Линейный поиск

- Методы локализации решения:
    - Метод дихотомии
    - Метод золотого сечения
- Неточный линейный поиск:

Вспоминаем теорию. Линейный поиск

- Методы локализации решения:
  - Метод дихотомии
  - Метод золотого сечения
- Неточный линейный поиск:
  - Условие достаточного убывания

Вспоминаем теорию. Линейный поиск

- Методы локализации решения:
  - Метод дихотомии
  - Метод золотого сечения
- Неточный линейный поиск:
  - Условие достаточного убывания
  - Условия Гольдштейна

Вспоминаем теорию. Линейный поиск

- Методы локализации решения:
  - Метод дихотомии
  - Метод золотого сечения
- Неточный линейный поиск:
  - Условие достаточного убывания
  - Условия Гольдштейна
  - Условие ограничения на кривизну

Вспоминаем теорию. Линейный поиск

- Методы локализации решения:
  - Метод дихотомии
  - Метод золотого сечения
- Неточный линейный поиск:
  - Условие достаточного убывания
  - Условия Гольдштейна
  - Условие ограничения на кривизну
  - Идея заключается в использовании бэктрекинга для нахождения шага, удовлетворяющего условию Армихо.

Задачи на матрично-векторное дифференцирование

Матрично-векторное дифференцирование. Задача 1

Example

Найдите $\nabla f(x)$, если $f(x) = \dfrac{1}{2}x^T A x + b^T x + c$.

Матрично-векторное дифференцирование. Задача 2

Example

Найдите $\nabla f(X)$, если $f(X) = tr(AX^{-1}B)$

Матрично-векторное дифференцирование. Задача 3

Example

Найдите градиент $\nabla f(x)$ и гессиан $\nabla^2 f(x)$, если $f(x) = \frac{1}{3}\|x\|_2^3$

Примеры линейного поиска

Линейный поиск. Пример 1: Сравнение методов (Colab ♣)

$$f_1(x) = x(x-2)(x+2)^2 + 10$$
$$[a, b] = [-3, 2]$$

Случайный поиск: 72 вызова функции. 36 итераций. $f_1^* = 0.09$
Метод дихотомии: 23 вызова функции. 13 итераций. $f_1^* = 10.00$
Золотое сечение: 19 вызова функции. 18 итераций. $f_1^* = 10.00$
Параболический поиск: 20 вызова функции. 17 итераций. $f_1^* = 10.00$

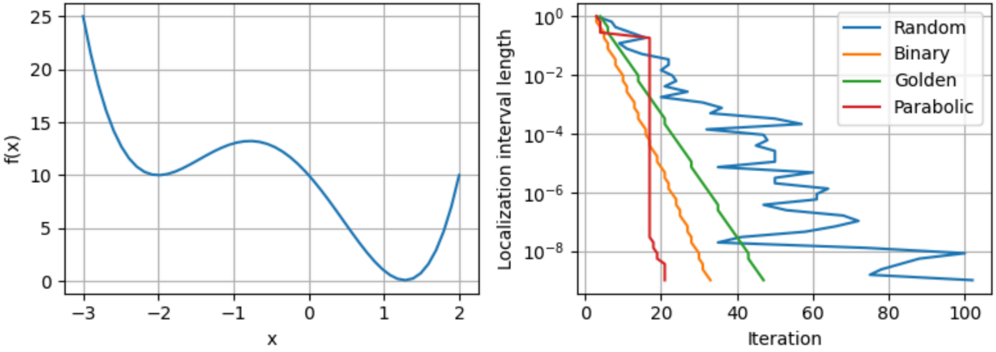


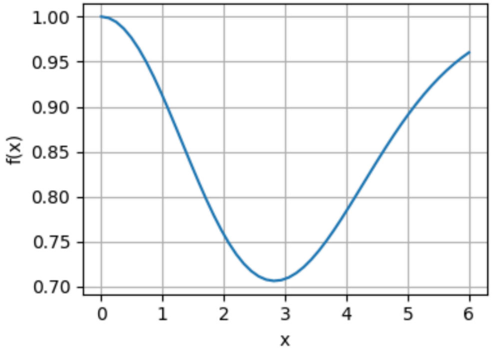
Рисунок 1. Сравнение различных методов линейного поиска с f_1

Линейный поиск. Пример 2: Сравнение методов (Colab ♣)

$$f_2(x) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{x^2 e^{-\frac{x^2}{8}}}{8}$$

$$[a, b] = [0, 6]$$

Случайный поиск: 68 вызова функции. 34 итераций. $f_2^* = 0.71$
Метод дихотомии: 23 вызова функции. 13 итераций. $f_2^* = 0.71$
Золотое сечение: 20 вызова функции. 19 итераций. $f_2^* = 0.71$
Параболический поиск: 17 вызова функции. 14 итераций. $f_2^* = 0.71$



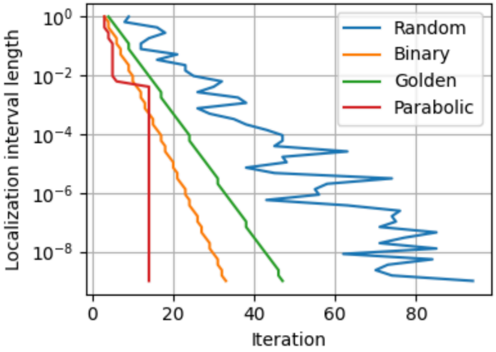


Рисунок 2. Сравнение различных методов линейного поиска с f_2

Линейный поиск. Пример 3: Сравнение методов (Colab ♣)

$$f_3(x) = \sin\left(\sin\left(\sin\left(\sqrt{\frac{x}{2}}\right)\right)\right)$$

$$[a, b] = [5, 70]$$

Random search: 66 function calls. 33 iterations. $f_3^* = 0.25$
Метод дихотомии: 32 вызова функции. 17 итераций. $f_3^* = 0.25$
Золотое сечение: 25 вызова функции. 24 итераций. $f_3^* = 0.25$
Параболический поиск: 103 вызова функции. 100 итераций. $f_3^* = 0.25$

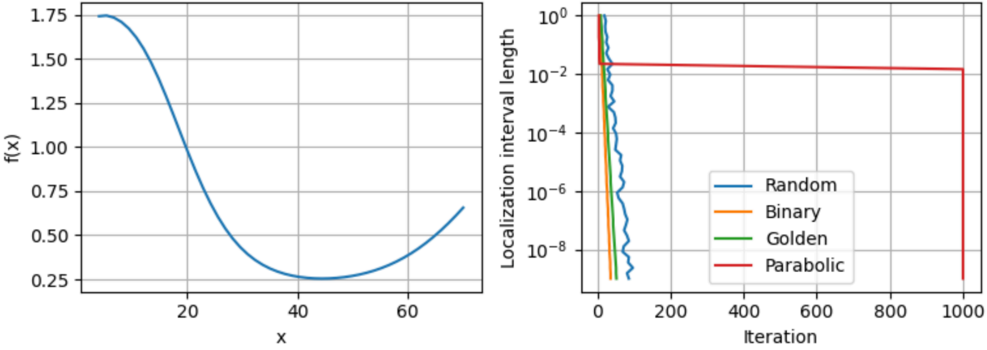


Рисунок 3. Сравнение различных методов линейного поиска с f_3

Линейный поиск. Пример 4: Метод Брента

- Параболическая интерполяция + Золотое сечение = Метод Брента

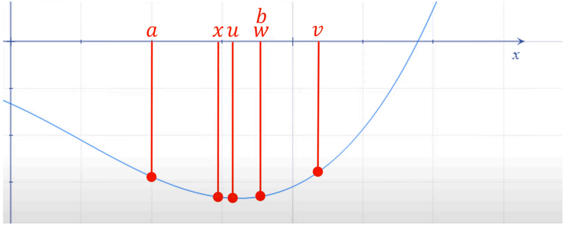


Рисунок 4. Идея метода Брента

Линейный поиск. Пример 4: Метод Брента

- Параболическая интерполяция + Золотое сечение = Метод Брента
- Основная идея метода заключается в отслеживании значения оптимизируемой скалярной функции в шести точках a, b, x, w, v, u

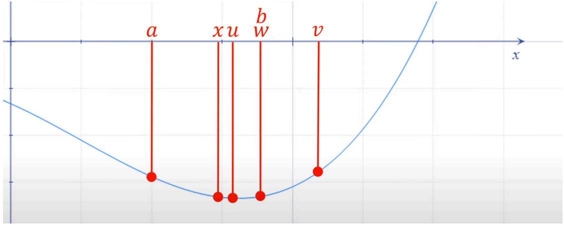


Рисунок 4. Идея метода Брента

Линейный поиск. Пример 4: Метод Брента

- Параболическая интерполяция + Золотое сечение = Метод Брента
- Основная идея метода заключается в отслеживании значения оптимизируемой скалярной функции в шести точках a, b, x, w, v, u
- $[a, b]$ — интервал локализации в текущей итерации

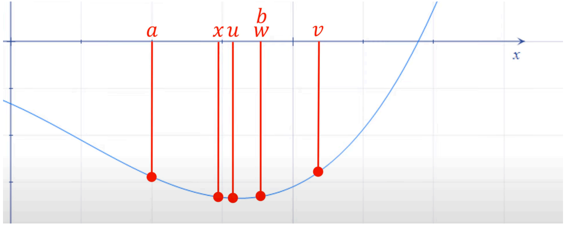


Рисунок 4. Идея метода Брента

Линейный поиск. Пример 4: Метод Брента

- Параболическая интерполяция + Золотое сечение = Метод Брента
- Основная идея метода заключается в отслеживании значения оптимизируемой скалярной функции в шести точках a, b, x, w, v, u
- $[a, b]$ — интервал локализации в текущей итерации
- Точки x, w и v такие, что выполняется неравенство $f(x) \leqslant f(w) \leqslant f(v)$

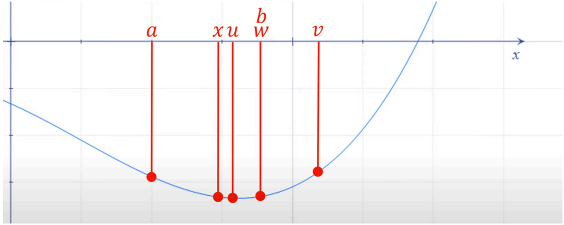


Рисунок 4. Идея метода Брента

Линейный поиск. Пример 4: Метод Брента

- Параболическая интерполяция + Золотое сечение = Метод Брента
- Основная идея метода заключается в отслеживании значения оптимизируемой скалярной функции в шести точках a, b, x, w, v, u
- $[a, b]$ — интервал локализации в текущей итерации
- Точки x, w и v такие, что выполняется неравенство $f(x) \leqslant f(w) \leqslant f(v)$
- u — минимум параболы, построенной на точках x, w и v, или точка золотого сечения наибольшего из отрезков$[a, x]$ и $[x, b]$.

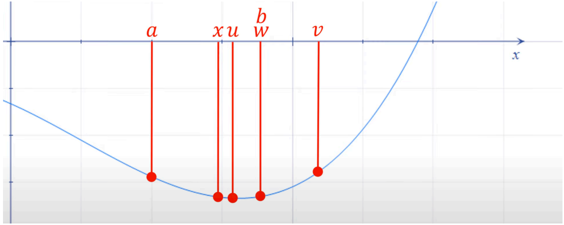


Рисунок 4. Идея метода Брента

Линейный поиск. Пример 5: Метод Брента

Парабола строится только если точки x, w и v различны, и ее вершина u^* берется как точка u только если

- $u^* \in [a, b]$

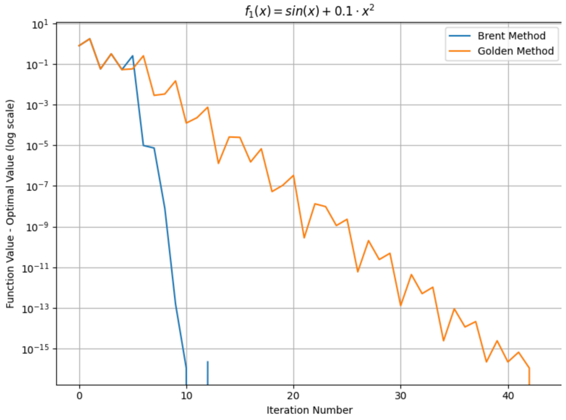


Рисунок 5. Пример работы метода Брента

Линейный поиск. Пример 5: Метод Брента

Парабола строится только если точки x, w и v различны, и ее вершина u^* берется как точка u только если

- $u^* \in [a, b]$
- u^* не более половины длины шага, предшествующего предыдущему, от точки x

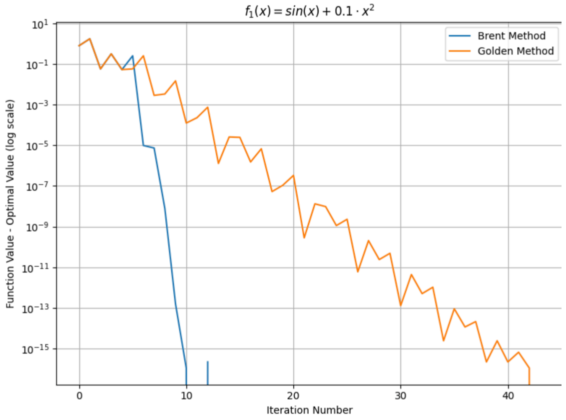


Рисунок 5. Пример работы метода Брента

Линейный поиск. Пример 5: Метод Брента

Парабола строится только если точки x, w и v различны, и ее вершина u^* берется как точка u только если

- $u^* \in [a, b]$
- u^* не более половины длины шага, предшествующего предыдущему, от точки x
- Если условия выше не выполняются, то точка u находится из золотого сечения

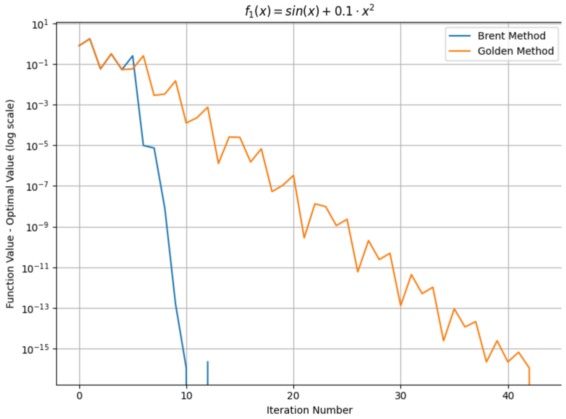


Рисунок 5. Пример работы метода Брента

Линейный поиск. Пример 5: Метод Брента

Парабола строится только если точки x, w и v различны, и ее вершина u^* берется как точка u только если

- $u^* \in [a, b]$
- u^* не более половины длины шага, предшествующего предыдущему, от точки x
- Если условия выше не выполняются, то точка u находится из золотого сечения
- Пример в Colab ♣

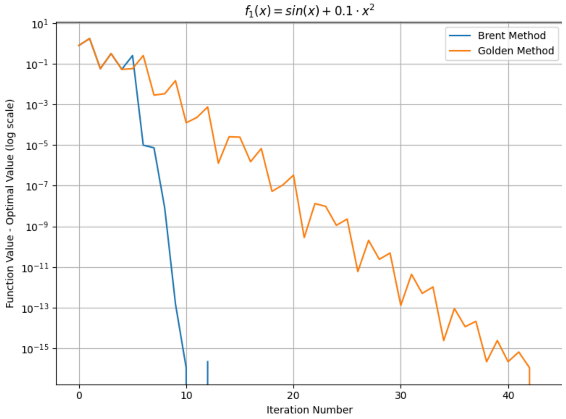


Рисунок 5. Пример работы метода Брента