

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

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

| $U \rightarrow V$ | \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 $df(x)[\cdot] : U \rightarrow V$ в точке $x \in U$ для $f(\cdot) : U \rightarrow V$:

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

- Каноническая форма дифференциала:

| $U \rightarrow V$ | \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 |
|---|---|
| $dA = 0$ | $d(\langle A, X \rangle) = \langle A, dX \rangle$ |
| $d(\alpha X) = \alpha(dX)$ | $d(\langle Ax, x \rangle) = \langle (A + A^T)x, dx \rangle$ |
| $d(AXB) = A(dX)B$ | $d(\text{Det}(X)) = \text{Det}(X) \langle X^{-T}, dX \rangle$ |
| $d(X + Y) = dX + dY$ | $d(X^{-1}) = -X^{-1}(dX)X^{-1}$ |
| $d(X^T) = (dX)^T$ | |
| $d(XY) = (dX)Y + X(dY)$ | |
| $d(\langle X, Y \rangle) = \langle dX, Y \rangle + \langle X, dY \rangle$ | |
| $d\left(\frac{X}{\phi}\right) = \frac{\phi dX - (d\phi)X}{\phi^2}$ | |

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 $d(df) = d^2f(x)$

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 $d(df) = d^2f(x)$

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

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



i Example

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

Матрично-векторное дифференцирование. Задача 2



i Example

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

Матрично-векторное дифференцирование. Задача 3



i 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

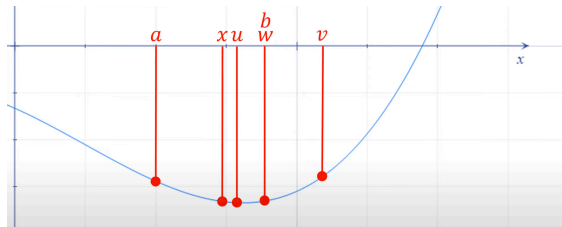


Рисунок 4. Идея метода Брента

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 $f(x) \leq f(w) \leq f(v)$



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 $f(x) \leq f(w) \leq f(v)$
- 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

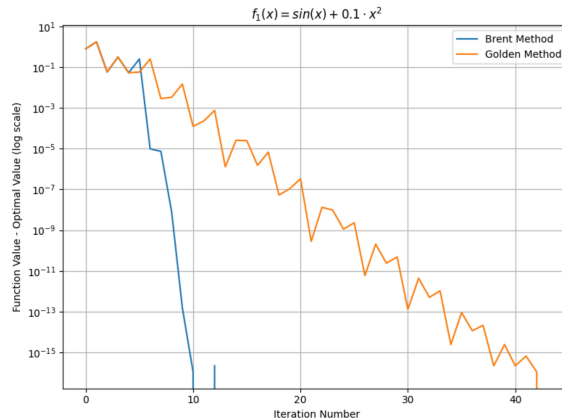


Рисунок 5. Пример работы метода Брента

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