

# Матрично-векторное дифференцирование. Линейный поиск

Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ



## Вспоминаем теорию. Дифференциал

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

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

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

## Вспоминаем теорию. Дифференциал

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

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

- 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

$$\begin{aligned} dA &= 0 \\ d(\alpha X) &= \alpha(dX) \\ d(AXB) &= A(dX)B \\ d(X + Y) &= dX + dY \\ d(X^T) &= (dX)^T \\ d(XY) &= (dX)Y + X(dY) \\ d(\langle X, Y \rangle) &= \langle dX, Y \rangle + \langle X, dY \rangle \\ d\left(\frac{X}{\phi}\right) &= \frac{\phi dX - (d\phi)X}{\phi^2} \end{aligned}$$

### Производные стандартных функций

$$\begin{aligned} d(\langle A, X \rangle) &= \langle A, dX \rangle \\ d(\langle Ax, x \rangle) &= \langle (A + A^T)x, dx \rangle \\ d(Det(X)) &= Det(X)\langle X^{-T}, dX \rangle \\ d(X^{-1}) &= -X^{-1}(dX)X^{-1} \end{aligned}$$

## 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

## Example

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

## Матрично-векторное дифференцирование. Задача 2

### Example

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

## 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.

$$f_1^* = 10.00$$

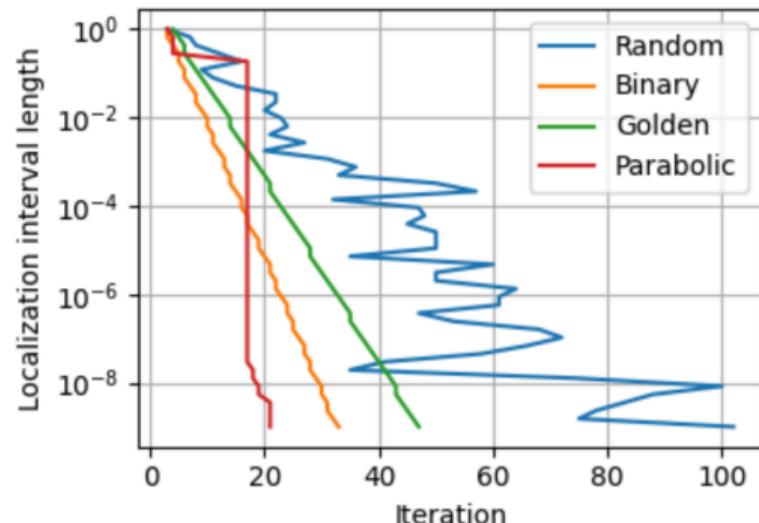


Рис. 1: Сравнение различных методов линейного поиска с  $f_1$

## 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.

$$f_2^* = 0.71$$



Рис. 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.  
 $f_3^* = 0.25$

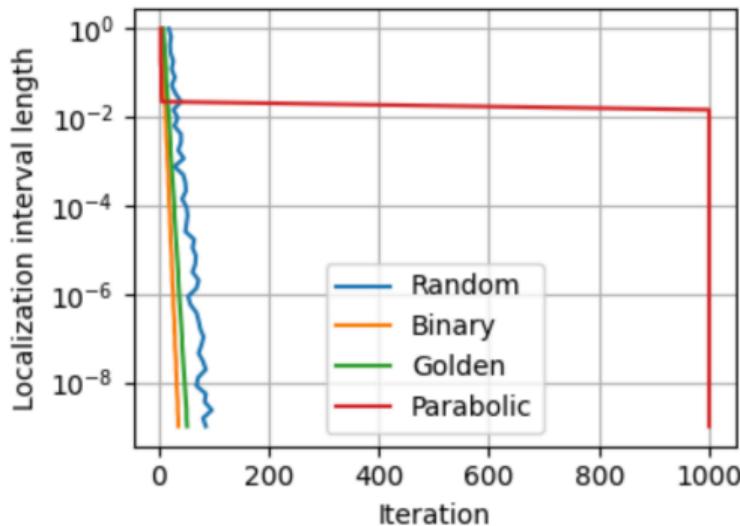
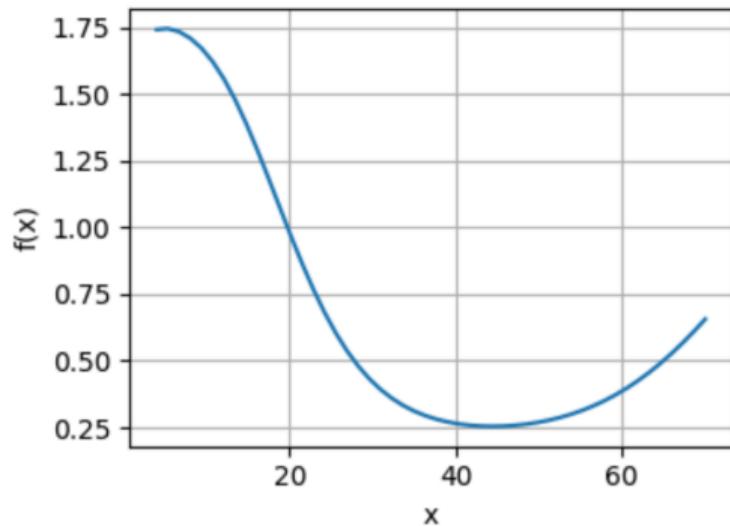


Рис. 3: Сравнение различных методов линейного поиска с  $f_3$

## Линейный поиск. Пример 4: Метод Брента

- Параболическая интерполяция + Золотое сечение  
= Метод Брента



Рис. 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  $a, b, x, w, v, u$



Рис. 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



Рис. 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  $f(x) \leq f(w) \leq f(v)$

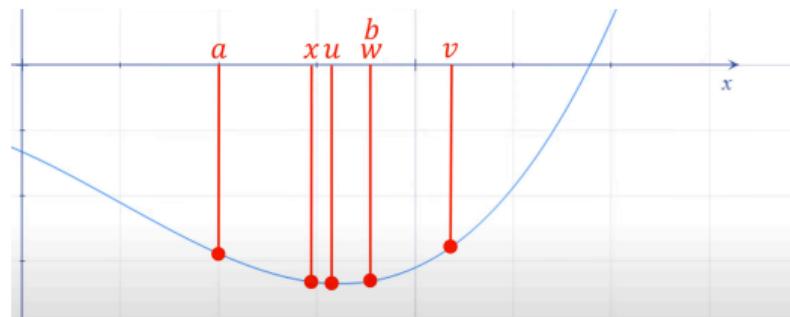


Рис. 4: Идея метода Брента

## 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  $[x, b]$ .

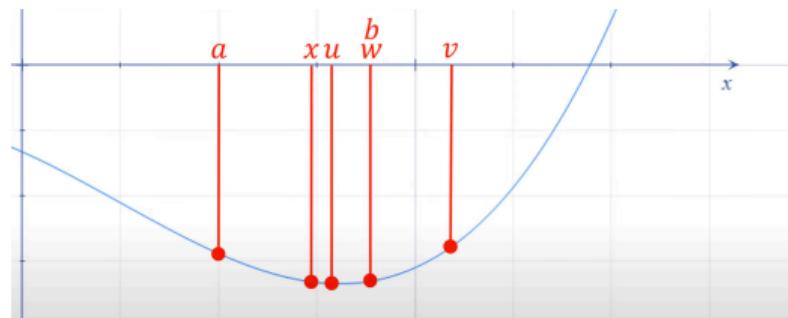


Рис. 4: Идея метода Брента

## 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

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

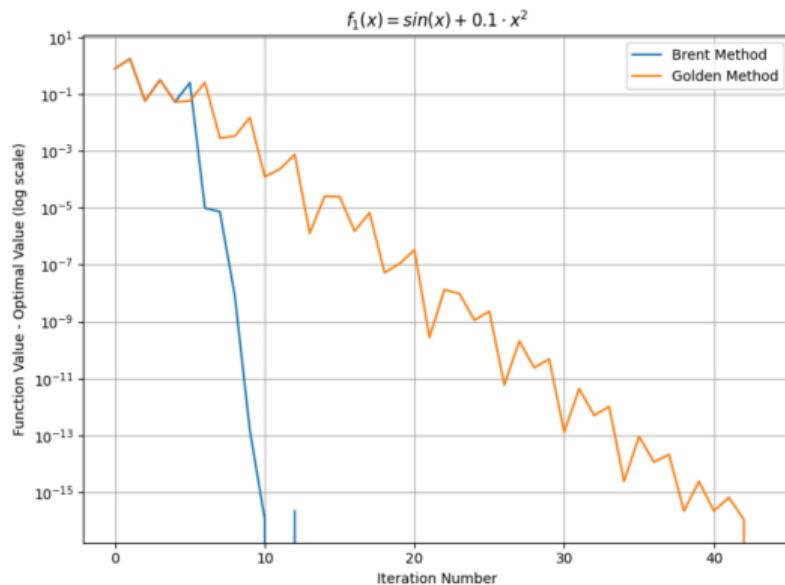


Рис. 5: Пример работы метода Брента

## 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  $x$



Рис. 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

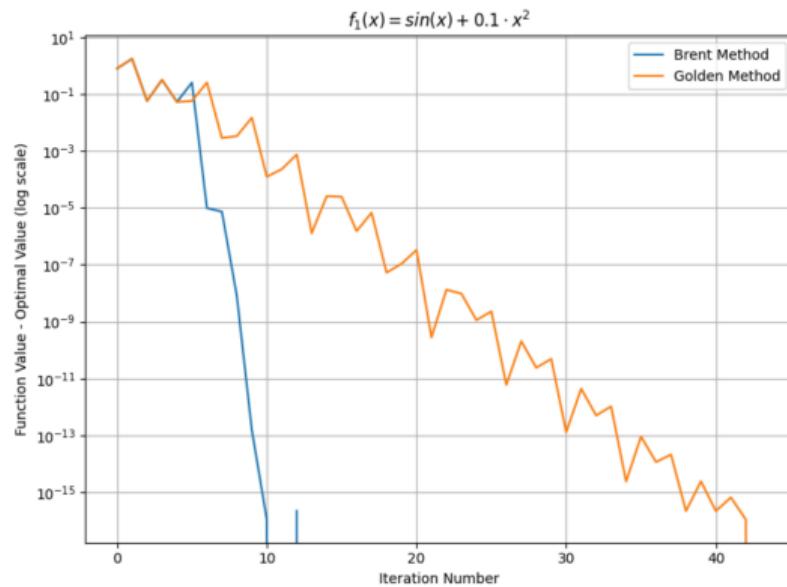


Рис. 5: Пример работы метода Брента

## 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 ♣



Рис. 5: Пример работы метода Брента