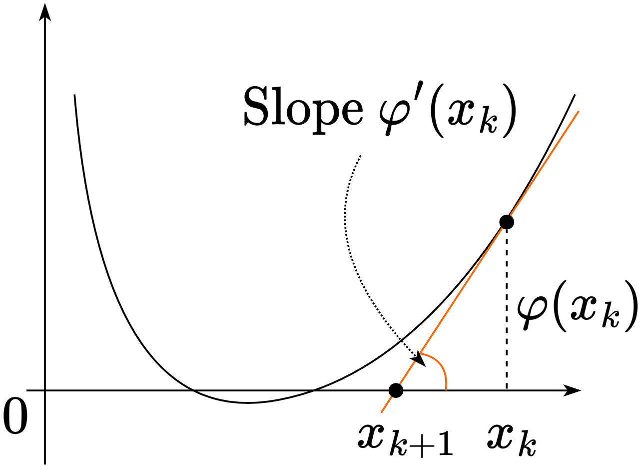
Метод Ньютона и квазиньютоновские методы

Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ

Идея метода Ньютона для нахождения корней функции



Рассмотрим функцию $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Мы хотим найти корень уравнения $\varphi(x) = 0$. Основная идея заключается в том, чтобы построить линейное приближение в точке x_k и найти его корень, который будет новой точкой итерации:

$$\varphi'(x_k) = \frac{\varphi(x_k)}{x_{k+1} - x_k}$$

Мы получаем итерационную схему:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\varphi(x_k)}{\varphi'(x_k)}.$$

Теперь, если мы рассмотрим $\varphi(x) \equiv \nabla f(x)$, это станет методом оптимизации Ньютона:

$$x_{k+1} = x_k - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k)$$

Пример метода линеаризации Ньютона

Question

Примените метод Ньютона для нахождения корня уравнения $\varphi(t) = 0$ и определите область сходимости:

$$\varphi(t) = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}$$

Пример метода линеаризации Ньютона

Question

Примените метод Ньютона для нахождения корня уравнения $\varphi(t) = 0$ и определите область сходимости:

$$\varphi(t) = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}$$

1. Найдем производную:

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

Пример метода линеаризации Ньютона

Question

Примените метод Ньютона для нахождения корня уравнения $\varphi(t) = 0$ и определите область сходимости:

$$\varphi(t) = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}$$

1. Найдем производную:

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

2. Тогда итерация метода принимает вид:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\varphi(x_k)}{\varphi'(x_k)} = x_k - x_k(x_k^2+1) = -x_k^3$$

Пример метода линеаризации Ньютона

Question

Примените метод Ньютона для нахождения корня уравнения $\varphi(t) = 0$ и определите область сходимости:

$$\varphi(t) = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}$$

1. Найдем производную:

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

2. Тогда итерация метода принимает вид:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\varphi(x_k)}{\varphi'(x_k)} = x_k - x_k(x_k^2+1) = -x_k^3$$

Легко видеть, что метод сходится только если $|x_0| < 1$, подчеркивая **локальный** характер метода Ньютона.

Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации

Пусть у нас есть функция $f(x)$ и некоторая точка x_k. Рассмотрим квадратичное приближение этой функции в окрестности x_k:

$$f^{II}_{x_k}(x) = f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k\rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x_k)(x - x_k), x - x_k\rangle.$$

Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации

Пусть у нас есть функция $f(x)$ и некоторая точка x_k. Рассмотрим квадратичное приближение этой функции в окрестности x_k:

$$f^{II}_{x_k}(x) = f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k\rangle + \frac{1}{2}\langle \nabla^2 f(x_k)(x - x_k), x - x_k\rangle.$$

Идея метода заключается в том, чтобы найти точку x_{k+1}, которая минимизирует функцию $f^{II}(x)$, т.е. $\nabla f^{II}(x_{k+1}) = 0$.

$$\begin{aligned}
x_{k+1} &= \arg\min_x \left\{ f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k\rangle + \frac{1}{2}\left\langle \nabla^2 f(x_k)(x - x_k), x - x_k\right\rangle \right\} \\
\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) &= \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0 \\
\nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) &= -\nabla f(x_k) \\
\left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) &= -\left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k) \\
x_{k+1} &= x_k - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k).
\end{aligned}$$

Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации

Пусть у нас есть функция $f(x)$ и некоторая точка x_k. Рассмотрим квадратичное приближение этой функции в окрестности x_k:

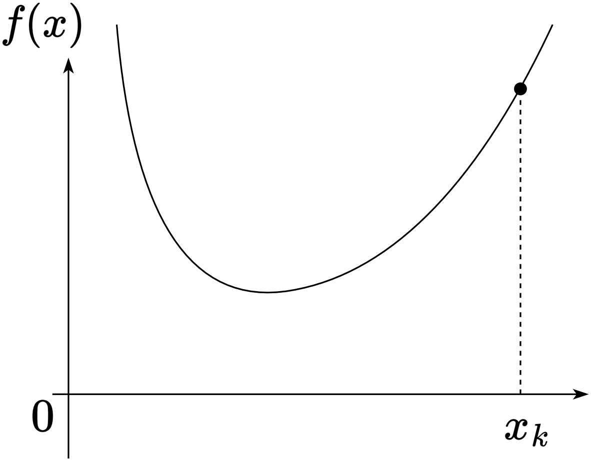
$$f^{II}_{x_k}(x) = f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k\rangle + \frac{1}{2}\langle \nabla^2 f(x_k)(x-x_k), x-x_k\rangle.$$

Идея метода заключается в том, чтобы найти точку x_{k+1}, которая минимизирует функцию $f^{II}(x)$, т.е. $\nabla f^{II}(x_{k+1}) = 0$.

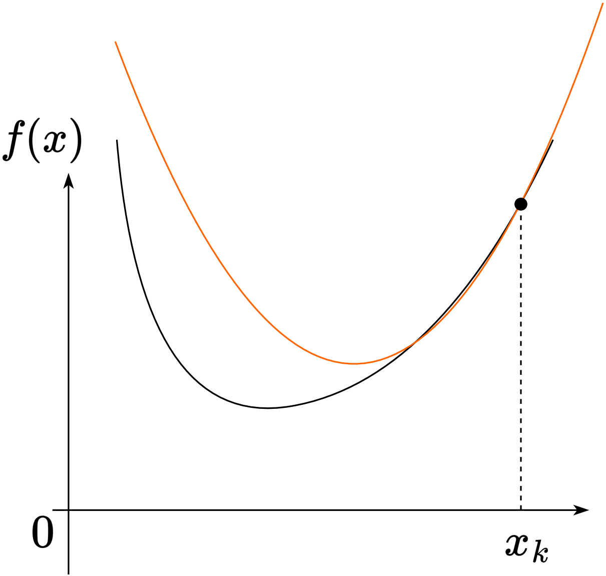
$$\begin{aligned}
x_{k+1} &= \arg\min_x \left\{ f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k\rangle + \frac{1}{2}\left\langle \nabla^2 f(x_k)(x-x_k), x-x_k\right\rangle \right\} \\
\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) &= \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0 \\
\nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) &= -\nabla f(x_k) \\
\left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) &= -\left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k) \\
x_{k+1} &= x_k - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k).
\end{aligned}$$

Обратите внимание на ограничения, связанные с необходимостью невырожденности (для существования метода) и положительной определенности (для гарантии сходимости) гессиана.

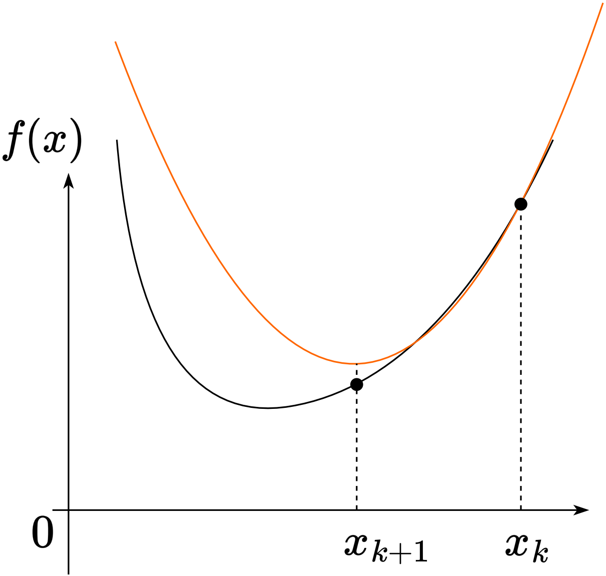
Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



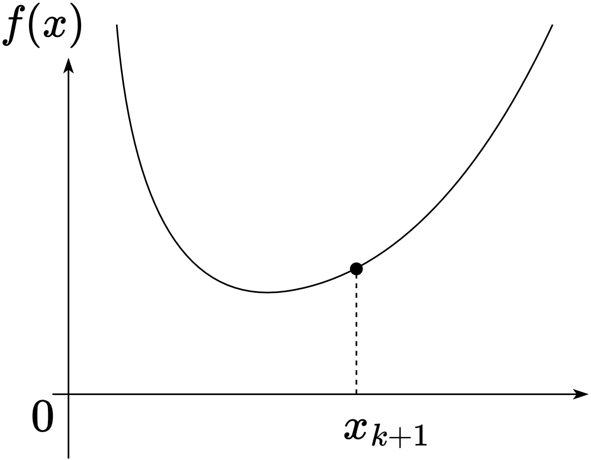
Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



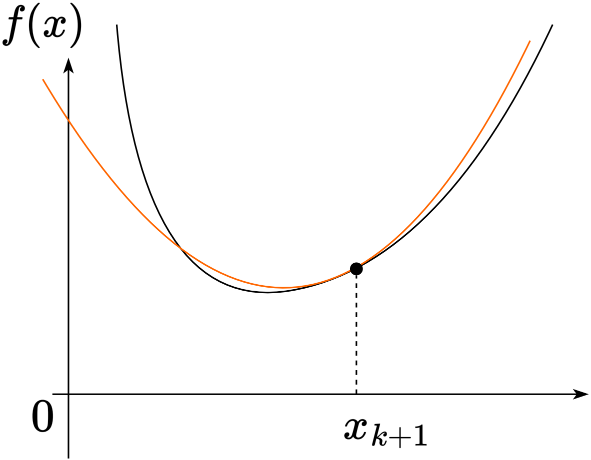
Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



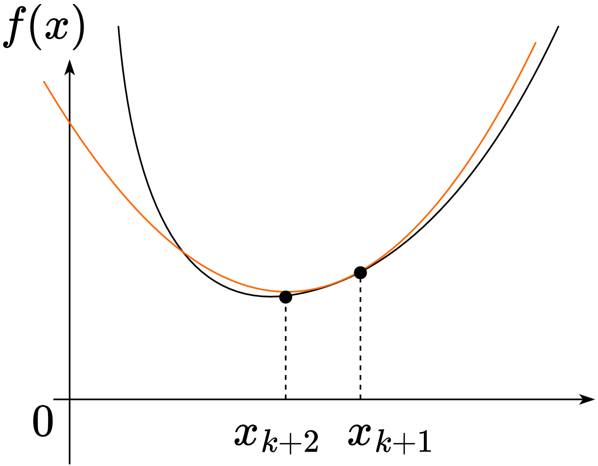
Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



Метод Ньютона vs градиентный спуск

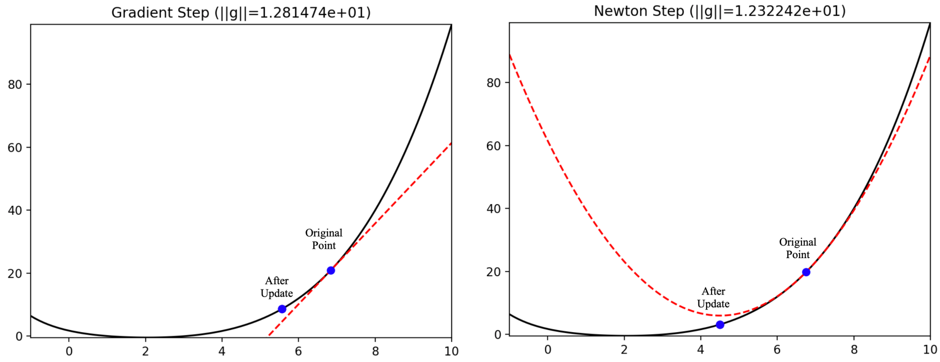


Рис. 7: Функция потерь изображена черным, аппроксимация в виде пунктирной красной линии

Градиентный спуск $\equiv$ линейное приближение

Метод Ньютона $\equiv$ квадратичное приближение

Сходимость

Theorem

Пусть $f(x)$ — сильно выпуклая дважды непрерывно дифференцируемая функция на $\mathbb{R}^n$, для второй производной которой выполняются неравенства: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Тогда метод Ньютона с постоянным шагом

$$
x_{k+1} = x_k - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k)
$$

локально сходится к решению с суперлинейной скоростью. Если, в дополнение, гессиан является M-липшицевым, то этот метод локально сходится к x^* с квадратичной скоростью:

$$
\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq \frac{M \|x_k - x^*\|_2^2}{2\left(\mu - M \|x_k - x^*\|_2\right)}
$$

Сходимость

Theorem

Пусть $f(x)$ — сильно выпуклая дважды непрерывно дифференцируемая функция на $\mathbb{R}^n$, для второй производной которой выполняются неравенства: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Тогда метод Ньютона с постоянным шагом

$$
x_{k+1} = x_k - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k)
$$

локально сходится к решению с суперлинейной скоростью. Если, в дополнение, гессиан является M-липшицевым, то этот метод локально сходится к x^* с квадратичной скоростью:

$$
\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq \frac{M \|x_k - x^*\|_2^2}{2\left(\mu - M\|x_k - x^*\|_2\right)}
$$

"**Локальная сходимость**" означает, что скорость сходимости, описанная выше, гарантируется только если начальная точка достаточно близка к точке минимума, в частности $\|x_0 - x^*\| < \frac{2\mu}{3M}$

Аффинная инвариантность

Question

Рассмотрим функцию $f(x)$ и преобразование с обратимой матрицей A. Давайте выясним, как изменится итерационный шаг метода Ньютона после применения преобразования.

Аффинная инвариантность

Question

Рассмотрим функцию $f(x)$ и преобразование с обратимой матрицей A. Давайте выясним, как изменится итерационный шаг метода Ньютона после применения преобразования.

1. Пусть $x = Ay$ и $g(y) = f(Ay)$.

Аффинная инвариантность

Question

Рассмотрим функцию $f(x)$ и преобразование с обратимой матрицей A. Давайте выясним, как изменится итерационный шаг метода Ньютона после применения преобразования.

1. Пусть $x = Ay$ и $g(y) = f(Ay)$.
2. Рассмотрим квадратичное приближение:

$$g(y+u) \approx g(y) + \langle g'(y), u \rangle + \frac{1}{2} u^\top g''(y) u \to \min_u$$

$$u^* = -\left(g''(y)\right)^{-1} g'(y) \quad y_{k+1} = y_k - \left(g''\left(y_k\right)\right)^{-1} g'\left(y_k\right)$$

Аффинная инвариантность

Question

Рассмотрим функцию $f(x)$ и преобразование с обратимой матрицей A. Давайте выясним, как изменится итерационный шаг метода Ньютона после применения преобразования.

1. Пусть $x = Ay$ и $g(y) = f(Ay)$.
2. Рассмотрим квадратичное приближение:

$$g(y+u) \approx g(y) + \langle g'(y), u\rangle + \frac{1}{2}u^\top g''(y)u \to \min_u$$

$$u^* = -\left(g''(y)\right)^{-1} g'(y) \quad y_{k+1} = y_k - \left(g''\left(y_k\right)\right)^{-1} g'\left(y_k\right)$$

3. Подставим явные выражения для $g''\left(y_k\right), g'\left(y_k\right)$:

$$y_{k+1} = y_k - \left(A^\top f''\left(Ay_k\right)A\right)^{-1} A^\top f'\left(Ay_k\right) = y_k - A^{-1}\left(f''\left(Ay_k\right)\right)^{-1} f'\left(Ay_k\right)$$

Аффинная инвариантность

Question

Рассмотрим функцию $f(x)$ и преобразование с обратимой матрицей A. Давайте выясним, как изменится итерационный шаг метода Ньютона после применения преобразования.

1. Пусть $x = Ay$ и $g(y) = f(Ay)$.
2. Рассмотрим квадратичное приближение:

$$g(y+u) \approx g(y) + \langle g'(y), u \rangle + \frac{1}{2} u^\top g''(y) u \to \min_u$$

$$u^* = -\left(g''(y)\right)^{-1} g'(y) \quad y_{k+1} = y_k - \left(g''\left(y_k\right)\right)^{-1} g'\left(y_k\right)$$

3. Подставим явные выражения для $g''\left(y_k\right), g'\left(y_k\right)$:

$$y_{k+1} = y_k - \left(A^\top f''\left(Ay_k\right) A\right)^{-1} A^\top f'\left(Ay_k\right) = y_k - A^{-1} \left(f''\left(Ay_k\right)\right)^{-1} f'\left(Ay_k\right)$$

4. Таким образом, шаг метода преобразуется линейным преобразованием **таким же образом**, как и координаты:

$$Ay_{k+1} = Ay_k - \left(f''\left(Ay_k\right)\right)^{-1} f'\left(Ay_k\right) \quad x_{k+1} = x_k - \left(f''\left(x_k\right)\right)^{-1} f'\left(x_k\right)$$

Сводка метода Ньютона

Pros

- квадратичная сходимость вблизи решения
- высокая точность полученного решения
- аффинная инвариантность

Сводка метода Ньютона

Pros

- квадратичная сходимость вблизи решения
- высокая точность полученного решения
- аффинная инвариантность

Cons

- отсутствие глобальной сходимости
- необходимо хранить гессиан на каждой итерации: $\mathcal{O}(n^2)$ памяти
- необходимо решать линейные системы: $\mathcal{O}(n^3)$ операций
- гессиан может быть вырожден
- гессиан может не быть положительно определен $\to$ направление $-(f''(x))^{-1}f'(x)$ может не быть убывающим

Сводка метода Ньютона

Pros

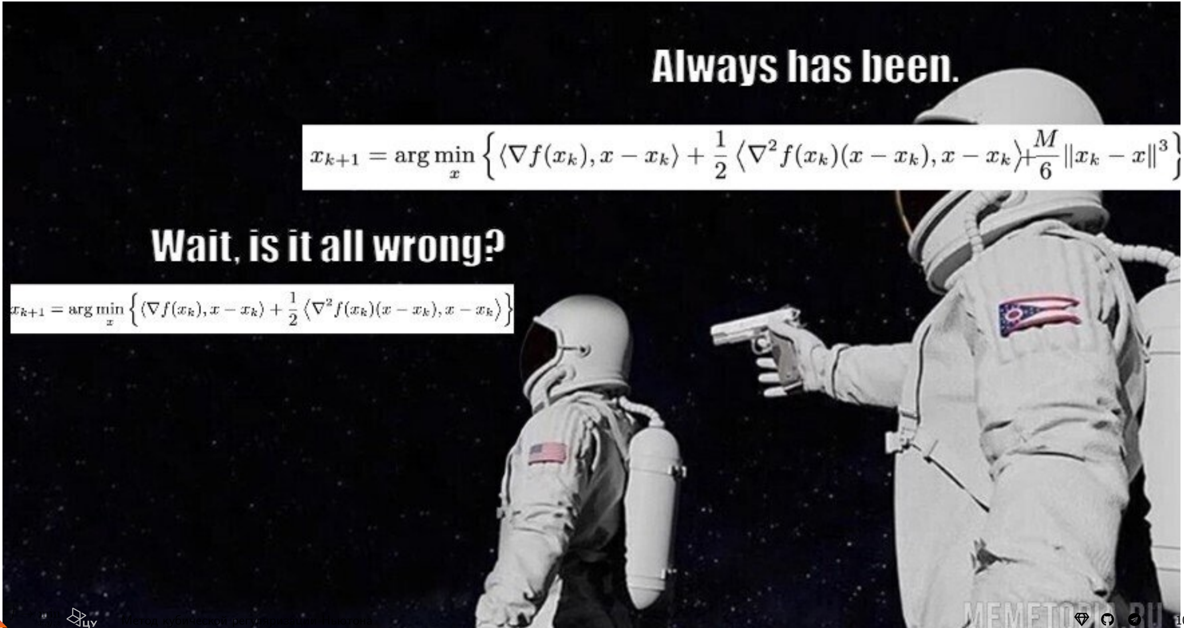
- квадратичная сходимость вблизи решения
- высокая точность полученного решения
- аффинная инвариантность

Cons

- отсутствие глобальной сходимости
- необходимо хранить гессиан на каждой итерации: $\mathcal{O}(n^2)$ памяти
- необходимо решать линейные системы: $\mathcal{O}(n^3)$ операций
- гессиан может быть вырожден
- гессиан может не быть положительно определен $\to$ направление $-(f''(x))^{-1}f'(x)$ может не быть убывающим

Метод кубической регуляризации Ньютона и квазиньютоновские методы частично решают эти проблемы!

Немного базы.



Интуитивно о том, как улучшить метод Ньютона

Gradient Descent recap

Пусть f имеет L-липшицевый градиент, тогда

$$
f(y) \leq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{L}{2} \|y - x\|^2 .
$$

Тогда каждый шаг градиентного спуска для функции f с L-липшицевым градиентом является минимизацией мажорирующего параболоида:

$$
\begin{aligned}
x_{k+1} &= \arg\min_x \left\{ f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \frac{L}{2} \|x - x_k\|^2 \right\} \\
&= x_k - \frac{1}{L} \nabla f(x_k).
\end{aligned}
$$

Интуитивно о том, как улучшить метод Ньютона

Gradient Descent recap

Пусть f имеет L-липшицевый градиент, тогда

$$f(y) \leq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{L}{2} \|y - x\|^2 .$$

Тогда каждый шаг градиентного спуска для функции f с L-липшицевым градиентом является минимизацией мажорирующего параболоида:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= \arg\min_x \left\{ f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \frac{L}{2} \|x - x_k\|^2 \right\} \\ &= x_k - \frac{1}{L} \nabla f(x_k). \end{aligned}$$

Но если функция f имеет M-липшицевый гессиан, то легко показать, что

$$f(y) \leq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x)(y - x), y - x \rangle + \frac{M}{6} \|y - x\|^3 .$$

Что если мы используем ту же логику, что и в градиентном спуске для функции с M-липшицевым гессианом?

Метод кубической регуляризации Ньютона

Пусть f имеет M-липшицевый гессиан, тогда

$$f(y) \leq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x)(y - x), y - x \rangle + \frac{M}{6} \|y - x\|^3 .$$

Минимизируя правую часть этого неравенства, мы приходим к методу кубической регуляризации Ньютона

$$x_{k+1} = \arg\min_x \left\{ f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x_k)(x - x_k), x - x_k \rangle + \frac{M}{6} \|x - x_k\|^3 \right\} . \tag{1}$$

Вопрос

Какие проблемы вы видите в (1)?

Метод кубической регуляризации Ньютона

Пусть f имеет M-липшицевый гессиан, тогда

$$f(y) \leq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x)(y - x), y - x \rangle + \frac{M}{6} \|y - x\|^3 .$$

Минимизируя правую часть этого неравенства, мы приходим к методу кубической регуляризации Ньютона

$$x_{k+1} = \arg\min_x \left\{ f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x_k)(x - x_k), x - x_k \rangle + \frac{M}{6} \|x - x_k\|^3 \right\} . \qquad (1)$$

! Challenges

1. Мы не можем получить явные выражения для x_{k+1} (без argmin) из (1) как в градиентном спуске.
2. Подзадача внутри (1) может быть невыпуклой.

Метод кубической регуляризации Ньютона

Пусть f имеет M-липшицевый гессиан, тогда

$$f(y) \leq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x)(y - x), y - x \rangle + \frac{M}{6} \|y - x\|^3 .$$

Минимизируя правую часть этого неравенства, мы приходим к методу кубической регуляризации Ньютона

$$x_{k+1} = \arg\min_x \left\{ f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x_k)(x - x_k), x - x_k \rangle + \frac{M}{6} \|x - x_k\|^3 \right\} . \tag{1}$$

Challenges

1. Мы не можем получить явные выражения для x_{k+1} (без argmin) из (1) как в градиентном спуске.
2. Подзадача внутри (1) может быть невыпуклой.

Solutions

1. Мы можем использовать численные методы с быстрой сходимостью
2. Подзадача эквивалентна задаче одномерной оптимизации с выпуклыми ограничениями. [a]
3. Подзадачу можно сделать выпуклой с помощью правильного коэффициента регуляризации. [b]

[a] Nesterov, Y. (2018). Lectures on convex optimization. Springer.
[b] Nesterov, Y. (2021). Implementable tensor methods in unconstrained convex optimization. Mathematical Programming.

Сходимость [1]

Theorem

Пусть $f(x)$ — μ-сильно выпуклая функция с M-липшицевым гессианом. Тогда, метод кубической регуляризации Ньютона (1) сходится глобально суперлинейно как

$$f(x_{k+1}) - f^* \leq \gamma_k (f(x_k) - f^*), \;\; \gamma_k \to 0.$$

[1] Kamzolov, D., et al. (2024). Optami: Global superlinear convergence of high-order methods. ICLR 2025.

Интуиция квазиньютоновских методов

Для классической задачи безусловной оптимизации $f(x) \to \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}$ общий схема итерационного метода записывается как:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$$

Интуиция квазиньютоновских методов

Для классической задачи безусловной оптимизации $f(x) \to \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}$ общий схема итерационного метода записывается как:

$$
x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k
$$

В методе Ньютона направление d_k (направление Ньютона) устанавливается решением линейной системы на каждом шаге:

$$
B_k d_k = -\nabla f(x_k), \quad B_k = \nabla^2 f(x_k)
$$

Интуиция квазиньютоновских методов

Для классической задачи безусловной оптимизации $f(x) \to \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}$ общий схема итерационного метода записывается как:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$$

В методе Ньютона направление d_k (направление Ньютона) устанавливается решением линейной системы на каждом шаге:

$$B_k d_k = -\nabla f(x_k), \quad B_k = \nabla^2 f(x_k)$$

т.е. на каждой итерации необходимо **вычислить** гессиан и градиент и **решить** линейную систему.

Интуиция квазиньютоновских методов

Для классической задачи безусловной оптимизации $f(x) \to \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}$ общий схема итерационного метода записывается как:

$$
x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k
$$

В методе Ньютона направление d_k (направление Ньютона) устанавливается решением линейной системы на каждом шаге:

$$
B_k d_k = -\nabla f(x_k), \quad B_k = \nabla^2 f(x_k)
$$

т.е. на каждой итерации необходимо **вычислить** гессиан и градиент и **решить** линейную систему.

Обратите внимание, что если мы возьмем одну матрицу $B_k = I_n$ как B_k на каждом шаге, мы точно получим метод градиентного спуска.

Общий схема квазиньютоновских методов основана на выборе матрицы B_k так, чтобы она в некотором смысле стремилась к истинному значению гессиана $\nabla^2 f(x_k)$ при $k \to \infty$.

Шаблон квазиньютоновского метода

Пусть $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. Для $k = 1, 2, 3, \ldots$, повторяем:

1. Найти $d_k : B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Обновить $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Вычислить B_{k+1} из B_k

Шаблон квазиньютоновского метода

Пусть $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. Для $k = 1, 2, 3, \ldots$, повторяем:

1. Найти $d_k : B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Обновить $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Вычислить B_{k+1} из B_k

Разные квазиньютоновские методы реализуют шаг 3 по-разному. Как мы увидим, часто мы можем вычислить $(B_{k+1})^{-1}$ из $(B_k)^{-1}$.

Шаблон квазиньютоновского метода

Пусть $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. Для $k = 1, 2, 3, \ldots$, повторяем:

1. Найти $d_k : B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Обновить $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Вычислить B_{k+1} из B_k

Разные квазиньютоновские методы реализуют шаг 3 по-разному. Как мы увидим, часто мы можем вычислить $(B_{k+1})^{-1}$ из $(B_k)^{-1}$.

Основная идея: Поскольку B_k уже содержит информацию о гессиане, используем подходящее обновление матрицы для формирования B_{k+1}.

Шаблон квазиньютоновского метода

Пусть $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. Для $k = 1, 2, 3, \ldots$, повторяем:

1. Найти $d_k : B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Обновить $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Вычислить B_{k+1} из B_k

Разные квазиньютоновские методы реализуют шаг 3 по-разному. Как мы увидим, часто мы можем вычислить $(B_{k+1})^{-1}$ из $(B_k)^{-1}$.

Основная идея: Поскольку B_k уже содержит информацию о гессиане, используем подходящее обновление матрицы для формирования B_{k+1}.

Разумное требование для B_{k+1} (вдохновленное методом секущих):

$$
\begin{aligned}
\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) &= B_{k+1}(x_{k+1} - x_k) \\
g_k &= B_{k+1} s_k
\end{aligned}
$$

Шаблон квазиньютоновского метода

Пусть $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. Для $k = 1, 2, 3, \ldots$, повторяем:

1. Найти $d_k : B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Обновить $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Вычислить B_{k+1} из B_k

Разные квазиньютоновские методы реализуют шаг 3 по-разному. Как мы увидим, часто мы можем вычислить $(B_{k+1})^{-1}$ из $(B_k)^{-1}$.

Основная идея: Поскольку B_k уже содержит информацию о гессиане, используем подходящее обновление матрицы для формирования B_{k+1}.

Разумное требование для B_{k+1} (вдохновленное методом секущих):

$$
\begin{aligned}
\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) &= B_{k+1}(x_{k+1} - x_k) \\
g_k &= B_{k+1} s_k
\end{aligned}
$$

Помимо уравнения секущей, мы хотим:

- B_{k+1} должна быть симметричной
- B_{k+1} должна быть "близка" к B_k
- $B_k \succ 0 \Rightarrow B_{k+1} \succ 0$

Задача 1: Симметричное одноранговое (SR1) обновление

Попробуем обновление с матрицей единичного ранга:

$$B_{k+1} = B_k + auu^T$$

Question

Какие a и u мы можем выбрать? Как будет выглядеть обновление B_{k+1}?

Задача 1: Симметричное одноранговое (SR1) обновление

Попробуем обновление с матрицей единичного ранга:

$$B_{k+1} = B_k + auu^T$$

Question

Какие a и u мы можем выбрать? Как будет выглядеть обновление B_{k+1}?

Сходимость SR1

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

называется симметричным одноранговым (SR1) обновлением или методом Бройдена.

Theorem

Пусть

- f — дважды непрерывно дифференцируемая функция, имеет единственную стационарную точку x^*,
- $\nabla^2 f(x) \preceq B_0$, $\nabla^2 f(x)$ — липшицева в окрестности x^*,
- последовательность матриц $\{B_k\}$ ограничена в норме,
- $|(g_k - B_k s_k)^T s_k| \geq r \|s_k\| \|g_k - B_k s_k\|, \; 0 < r \ll 1.$

Тогда в SR1 $x_k \to x^*$ суперлинейно.

SR1 с обратным обновлением

Как мы можем решить

$$B_{k+1} d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}),$$

чтобы сделать следующий шаг? Помимо распространения B_k на B_{k+1}, давайте распространим обратные, т.е. $C_k = B_k^{-1}$ на $C_{k+1} = (B_{k+1})^{-1}$.

Формула Шермана-Моррисона:

Формула Шермана-Моррисона утверждает:

$$(A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1} u v^T A^{-1}}{1 + v^T A^{-1} u}$$

SR1 с обратным обновлением

Как мы можем решить

$$B_{k+1} d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}),$$

чтобы сделать следующий шаг? Помимо распространения B_k на B_{k+1}, давайте распространим обратные, т.е. $C_k = B_k^{-1}$ на $C_{k+1} = (B_{k+1})^{-1}$.

Формула Шермана-Моррисона:

Формула Шермана-Моррисона утверждает:

$$(A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^TA^{-1}}{1 + v^TA^{-1}u}$$

Таким образом, для обновления SR1, обратная матрица также легко обновляется:

$$C_{k+1} = C_k + \frac{(s_k - C_k g_k)(s_k - C_k g_k)^T}{(s_k - C_k g_k)^T g_k}$$

В общем, SR1 прост и дешев, но у него есть ключевой недостаток: он не сохраняет положительную определенность.

Обновление Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)

Попробуем теперь двухранговое обновление:

$$B_{k+1} = B_k + auu^T + bvv^T.$$

Сходимость BFGS

$$
B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{g_k g_k^T}{s_k^T g_k}
$$

называется обновлением Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно (BFGS).

Theorem

Пусть $f(x)$ — дважды непрерывно дифференцируемая функция, имеет липшицевый гессиан в x^* и дополнительно $\sum_{k=1}^{\infty} \|x_k - x^*\| \leq \infty$. Тогда в BFGS $x_k \to x^*$ суперлинейно.

BFGS обновление с инверсией

Формула Вудбери

Формула Вудбери, обобщение формулы Шермана-Моррисона, дается как:

$$(A + UCV)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(C^{-1} + VA^{-1}U)^{-1}VA^{-1}$$

BFGS обновление с инверсией

Формула Вудбери

Формула Вудбери, обобщение формулы Шермана-Моррисона, дается как:

$$(A + UCV)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(C^{-1} + VA^{-1}U)^{-1}VA^{-1}$$

Применяя к нашему случаю, мы получаем двухранговое обновление на обратной матрице C:

$$C_{k+1} = C_k + \frac{(s_k - C_k g_k)s_k^T}{g_k^T s_k} + \frac{s_k(s_k - C_k g_k)^T}{g_k^T s_k} - \frac{(s_k - C_k g_k)^T g_k}{(g_k^T s_k)^2} s_k s_k^T$$

$$C_{k+1} = \left(I - \frac{s_k g_k^T}{g_k^T s_k}\right) C_k \left(I - \frac{g_k s_k^T}{g_k^T s_k}\right) + \frac{s_k s_k^T}{g_k^T s_k}$$

Эта формулировка гарантирует, что обновление BFGS, хоть и объемное, остается вычислительно эффективным, требуя $O(n^2)$ операций. Важно, что обновление BFGS сохраняет положительную определенность. Помните, это означает $B_k \succ 0 \Rightarrow B_{k+1} \succ 0$. Эквивалентно, $C_k \succ 0 \Rightarrow C_{k+1} \succ 0$

Основная идея L-BFGS

- L-BFGS не хранит полную матрицу B_k (C_k), вместо этого она хранит две последовательности векторов длины $m : m < n$
- память уменьшается с $O(n^2)$ до $O(mn)$, делая его более подходящим для высокоразмерных задач

Вычислительные эксперименты

- Вычислительные эксперименты для квазиньютоновских методов, CG и GD
- Вычислительные эксперименты для методов Ньютона и квазиньютоновских методов .