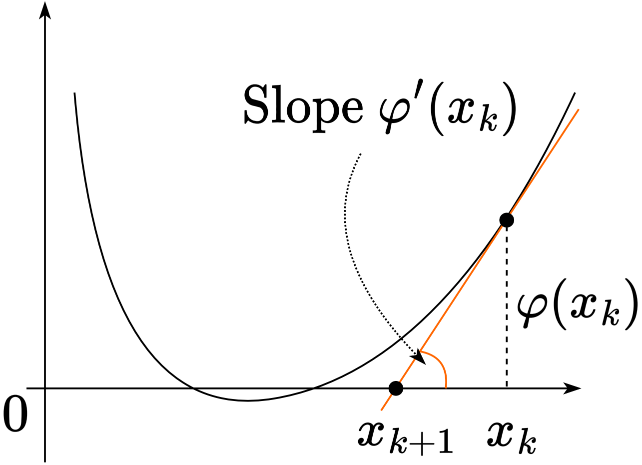
# Метод Ньютона и квазиньютоновские методы

**Даня Меркулов**

**Оптимизация для всех! ЦУ**

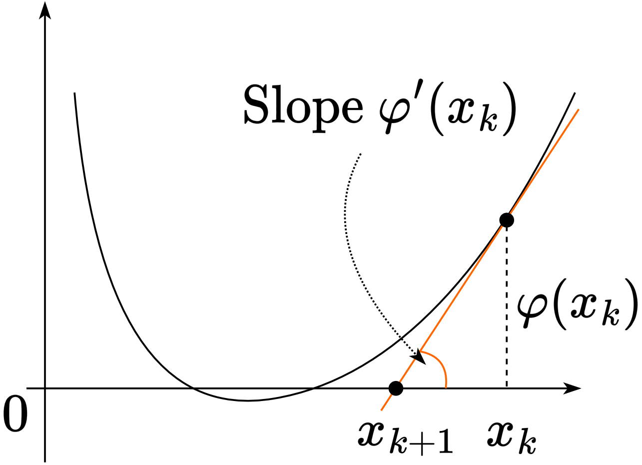
# Метод Ньютона

# Идея метода Ньютона для нахождения корней функции



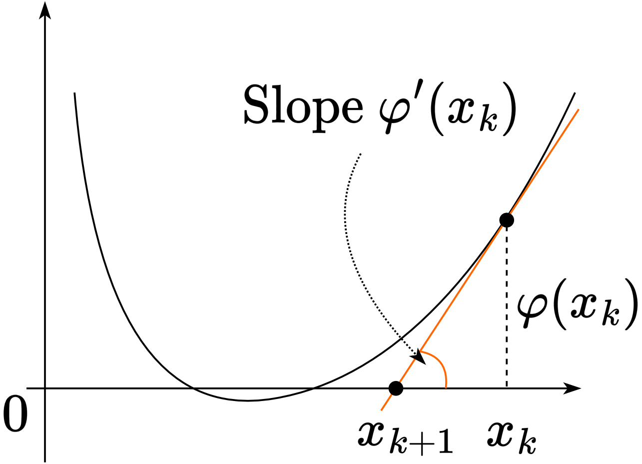

Рассмотрим функцию $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

# Идея метода Ньютона для нахождения корней функции




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

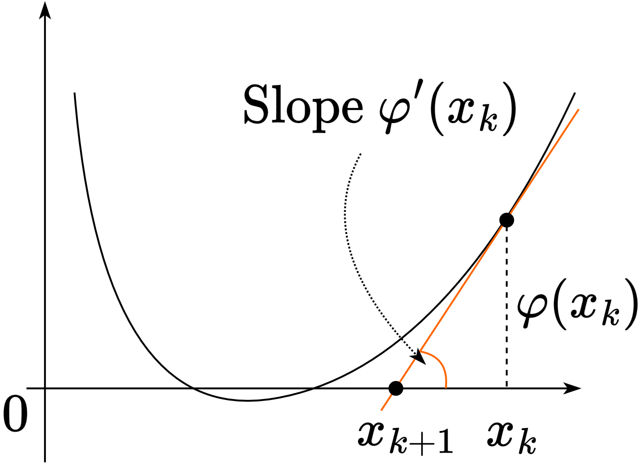
# Идея метода Ньютона для нахождения корней функции




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

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

# Идея метода Ньютона для нахождения корней функции



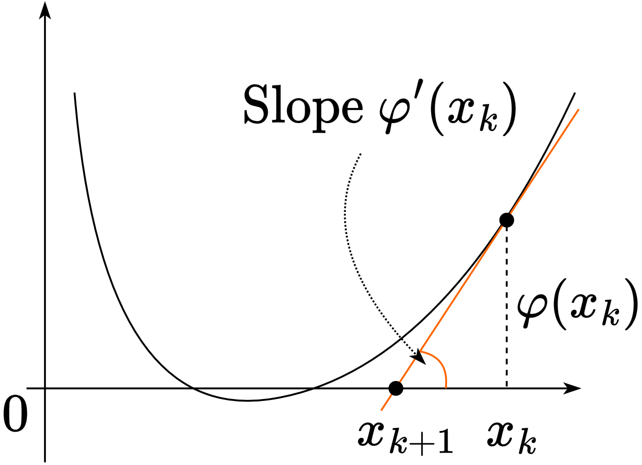

Рассмотрим функцию $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

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:

# Идея метода Ньютона для нахождения корней функции




Рассмотрим функцию $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

Основная идея заключается в том, чтобы построить линейное приближение в точке $x_k$ и найти его корень, который будет новой точкой итерации:

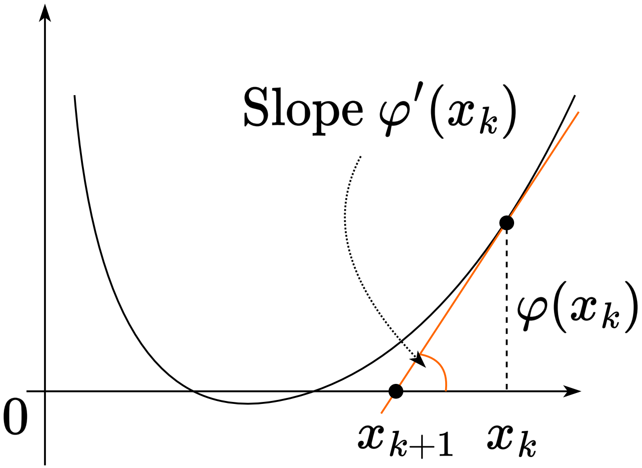
$$
\varphi'(x_k) = \frac{\varphi(x_k)}{x_{k+1} - x_k}
$$

Мы получаем итерационную схему:

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

[1] Мы фактически решаем задачу нахождения стационарных точек $\nabla f(x) = 0$

# Идея метода Ньютона для нахождения корней функции




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

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

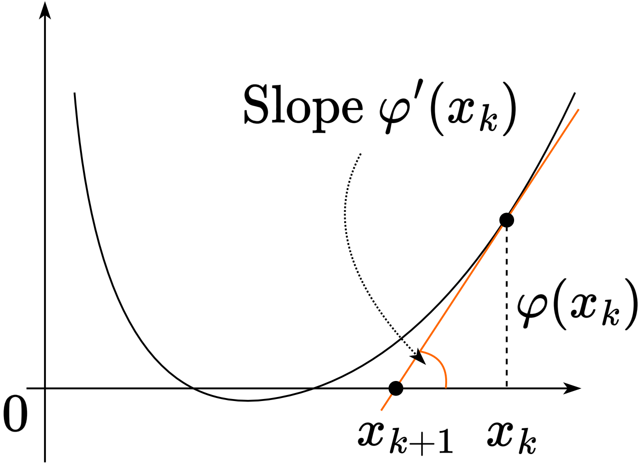
Мы получаем итерационную схему:

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

Этот метод станет методом оптимизации Ньютона в случае $f'(x) = \varphi(x)$[1]:

[1] Мы фактически решаем задачу нахождения стационарных точек $\nabla f(x) = 0$

# Идея метода Ньютона для нахождения корней функции




Рассмотрим функцию $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

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:

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

Этот метод станет методом оптимизации Ньютона в случае $f'(x) = \varphi(x)$[1]:

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

[1] Мы фактически решаем задачу нахождения стационарных точек $\nabla f(x) = 0$

# 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 $x_k$:

# 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 $f^{II}_{x_k}(x)$, т.е. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

# 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 $f^{II}_{x_k}(x)$, т.е. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

$$\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0$$

# 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 $f^{II}_{x_k}(x)$, т.е. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

$$
\begin{aligned}
\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) &= \nabla f(x_{k}) + \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0 \\
\nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) &= -\nabla f(x_{k})
\end{aligned}
$$

# 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 $f^{II}_{x_k}(x)$, т.е. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

$$
\begin{aligned}
\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) &= \nabla f(x_{k}) + \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0 \\
\nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) &= -\nabla f(x_{k}) \\
\left[ \nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) &= -\left[ \nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_{k})
\end{aligned}
$$

# 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 $f^{II}_{x_k}(x)$, т.е. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

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

# 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 $f^{II}_{x_k}(x)$, т.е. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

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

# 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 $x_k$:

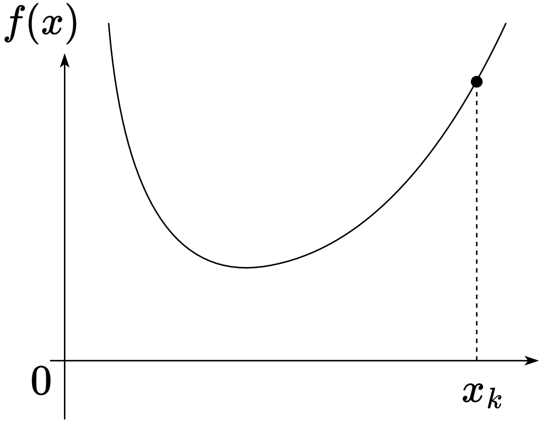
$$f^{II}_{x_k}(x) = f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k\rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x_k)(x - x_k), x - x_k\rangle.$$

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

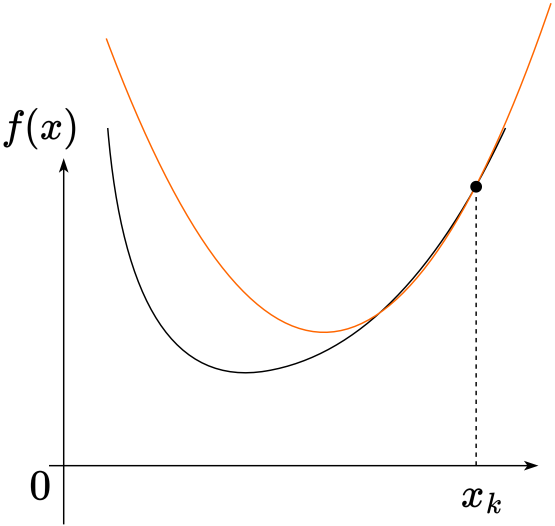
$$\begin{aligned}
\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) &= \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0 \\
\nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) &= -\nabla f(x_k) \\
\left[ \nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) &= -\left[ \nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k) \\
x_{k+1} &= x_k - \left[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

Необходимо отметить ограничения, связанные с необходимостью невырожденности (для существования метода) и положительной определенности (для гарантии сходимости) гессиана.

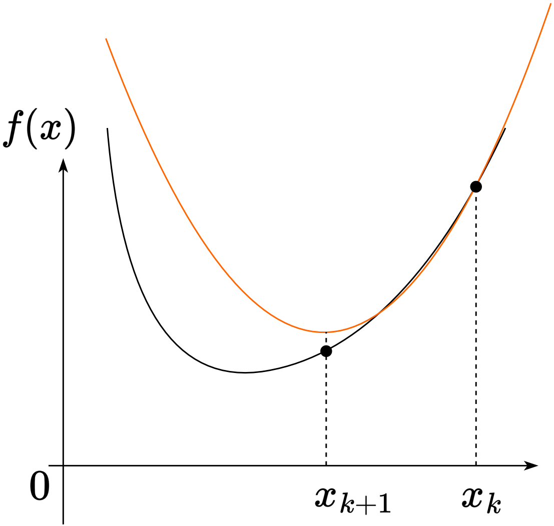
# Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



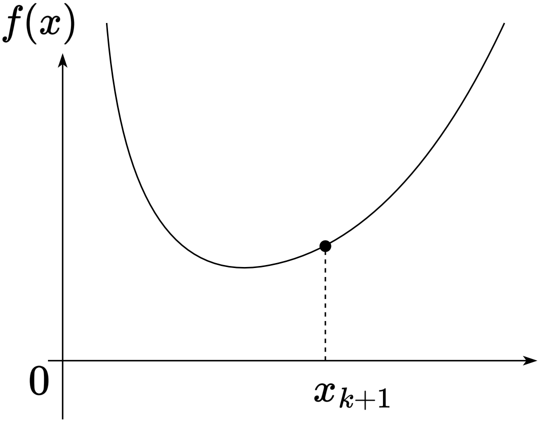
# Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



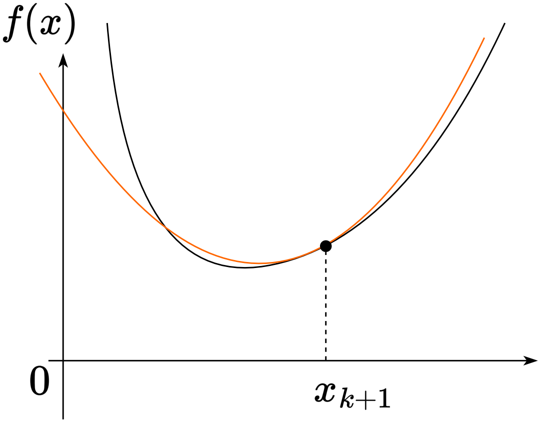
# Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



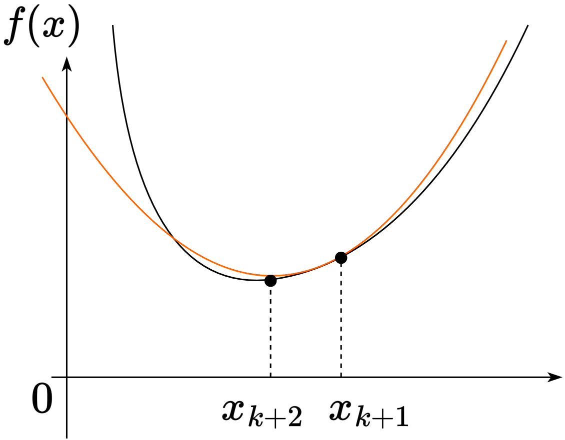
# Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



# Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



# Метод Ньютона как оптимизация локальной квадратичной аппроксимации



# Сходимость

**Theorem**

Пусть $f(x)$ — сильно выпуклая дважды непрерывно дифференцируемая функция на $\mathbb{R}^n$, для второй производной которой выполняются неравенства: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Пусть также гессиан функции $M$-липшицев. Тогда метод Ньютона сходится локально к решению с квадратичной скоростью, т.е. при $\|x_0 - x^*\| < \frac{2\mu}{3M}$:

$$
\|x_{k+1} - x^*\| \leq \frac{3M}{2\mu} \|x_k - x^*\|^2
$$

# Сходимость

**Theorem**

Пусть $f(x)$ — сильно выпуклая дважды непрерывно дифференцируемая функция на $\mathbb{R}^n$, для второй производной которой выполняются неравенства: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Пусть также гессиан функции $M$-липшицев. Тогда метод Ньютона сходится локально к решению с квадратичной скоростью, т.е. при $\|x_0 - x^*\| < \frac{2\mu}{3M}$:

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \frac{3M}{2\mu}\|x_k - x^*\|^2$$

**Доказательство**

# Сходимость

**Theorem**

Пусть $f(x)$ — сильно выпуклая дважды непрерывно дифференцируемая функция на $\mathbb{R}^n$, для второй производной которой выполняются неравенства: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Пусть также гессиан функции $M$-липшицев. Тогда метод Ньютона сходится локально к решению с квадратичной скоростью, т.е. при $\|x_0 - x^*\| < \frac{2\mu}{3M}$:

$$
\|x_{k+1} - x^*\| \leq \frac{3M}{2\mu} \|x_k - x^*\|^2
$$

**Доказательство**

1. Мы будем использовать формулу Ньютона-Лейбница

$$
\nabla f(x_k) - \nabla f(x^*) = \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))(x_k - x^*) d\tau
$$

# Сходимость

**Theorem**

Пусть $f(x)$ — сильно выпуклая дважды непрерывно дифференцируемая функция на $\mathbb{R}^n$, для второй производной которой выполняются неравенства: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Пусть также гессиан функции $M$-липшицев. Тогда метод Ньютона сходится локально к решению с квадратичной скоростью, т.е. при $\|x_0 - x^*\| < \frac{2\mu}{3M}$:

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \frac{3M}{2\mu} \|x_k - x^*\|^2$$

**Доказательство**

1. Мы будем использовать формулу Ньютона-Лейбница

$$\nabla f(x_k) - \nabla f(x^*) = \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))(x_k - x^*) d\tau$$

2. Мы будем отслеживать расстояние до решения

# Сходимость

**Theorem**

Пусть $f(x)$ — сильно выпуклая дважды непрерывно дифференцируемая функция на $\mathbb{R}^n$, для второй производной которой выполняются неравенства: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Пусть также гессиан функции $M$-липшицев. Тогда метод Ньютона сходится локально к решению с квадратичной скоростью, т.е. при $\|x_0 - x^*\| < \frac{2\mu}{3M}$:

$$
\|x_{k+1} - x^*\| \leq \frac{3M}{2\mu} \|x_k - x^*\|^2
$$

**Доказательство**

1. Мы будем использовать формулу Ньютона-Лейбница

$$
\nabla f(x_k) - \nabla f(x^*) = \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))(x_k - x^*) d\tau
$$

2. Мы будем отслеживать расстояние до решения

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

# Сходимость

**Theorem**

Пусть $f(x)$ — сильно выпуклая дважды непрерывно дифференцируемая функция на $\mathbb{R}^n$, для второй производной которой выполняются неравенства: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq LI_n$. Пусть также гессиан функции $M$-липшицев. Тогда метод Ньютона сходится локально к решению с квадратичной скоростью, т.е. при $\|x_0 - x^*\| < \frac{2\mu}{3M}$:

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \frac{3M}{2\mu}\|x_k - x^*\|^2$$

**Доказательство**

1. Мы будем использовать формулу Ньютона-Лейбница

$$\nabla f(x_k) - \nabla f(x^*) = \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))(x_k - x^*)d\tau$$

2. Мы будем отслеживать расстояние до решения

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

$$= x_k - x^* - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))(x_k - x^*)d\tau$$

# Сходимость

3.

$$
= \left(I - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) d\tau\right)(x_k - x^*) =
$$

# Сходимость

3.

$$
= \left( I - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) d\tau \right) (x_k - x^*) =
$$

$$
= \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \left( \nabla^2 f(x_k) - \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) d\tau \right) (x_k - x^*) =
$$

# Сходимость

3.

$$
\begin{aligned}
&= \left(I - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))d\tau\right)(x_k - x^*) = \\
&= \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \left(\nabla^2 f(x_k) - \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))d\tau\right)(x_k - x^*) = \\
&= \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \left(\int_0^1 \left(\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))d\tau\right)\right)(x_k - x^*) =
\end{aligned}
$$

# Сходимость

3.
$$
\begin{aligned}
&= \left(I - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))d\tau\right)(x_k - x^*) = \\
&= \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \left(\nabla^2 f(x_k) - \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))d\tau\right)(x_k - x^*) = \\
&= \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \left(\int_0^1 (\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))d\tau)\right)(x_k - x^*) = \\
&= \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} G_k(x_k - x^*)
\end{aligned}
$$

## Сходимость

3.

$$
\begin{aligned}
&= \left(I - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) d\tau\right)(x_k - x^*) = \\
&= \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \left(\nabla^2 f(x_k) - \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) d\tau\right)(x_k - x^*) = \\
&= \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \left(\int_0^1 \left(\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) d\tau\right)\right)(x_k - x^*) = \\
&= \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} G_k (x_k - x^*)
\end{aligned}
$$

4. Введём:

$$
G_k = \int_0^1 \left(\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) d\tau\right).
$$

# Сходимость

5. Попробуем оценить размер $G_k$ с помощью $r_k = \|x_k - x^*\|$:

# Сходимость

5. Попробуем оценить размер $G_k$ с помощью $r_k = \|x_k - x^*\|$:

$$\|G_k\| = \left\| \int_0^1 \left(\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)\right) d\tau \right\| \leq$$

# Сходимость

5. Попробуем оценить размер $G_k$ с помощью $r_k = \|x_k - x^*\|$:

$$
\|G_k\| = \left\| \int_0^1 \left( \nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) d\tau \right) \right\| \leq
$$

$$
\leq \int_0^1 \left\| \nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) \right\| d\tau \leq \qquad \text{(Липшицевость гессиана)}
$$

# Сходимость

5. Попробуем оценить размер $G_k$ с помощью $r_k = \|x_k - x^*\|$:

$$
\|G_k\| = \left\| \int_0^1 (\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) d\tau) \right\| \leq
$$

$$
\leq \int_0^1 \left\| \nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) \right\| d\tau \leq \qquad \text{(Липшицевость гессиана)}
$$

$$
\leq \int_0^1 M \|x_k - x^* - \tau(x_k - x^*)\| d\tau = \int_0^1 M \|x_k - x^*\| (1 - \tau) d\tau = \frac{r_k}{2} M,
$$

# Сходимость

5. Попробуем оценить размер $G_k$ с помощью $r_k = \|x_k - x^*\|$:

$$\|G_k\| = \left\|\int_0^1 (\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))d\tau)\right\| \leq$$

$$\leq \int_0^1 \left\|\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*))\right\| d\tau \leq \qquad \text{(Липшицевость гессиана)}$$

$$\leq \int_0^1 M\|x_k - x^* - \tau(x_k - x^*)\|d\tau = \int_0^1 M\|x_k - x^*\|(1-\tau)d\tau = \frac{r_k}{2}M,$$

6. Получаем:

$$r_{k+1} \leq \left\|\left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1}\right\| \cdot \frac{r_k}{2} M \cdot r_k$$

и нам нужно оценить норму обратного гессиана

## Сходимость

7. Из липшицевости и симметричности гессиана:

# Сходимость

7. Из липшицевости и симметричности гессиана:

$$\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^*) \succeq -Mr_k I_n$$

# Сходимость

7. Из липшицевости и симметричности гессиана:

$$\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^*) \succeq -Mr_k I_n$$
$$\nabla^2 f(x_k) \succeq \nabla^2 f(x^*) - Mr_k I_n$$

## Сходимость

7. Из липшицевости и симметричности гессиана:

$$
\begin{aligned}
\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^*) &\succeq -M r_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq \nabla^2 f(x^*) - M r_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq \mu I_n - M r_k I_n
\end{aligned}
$$

# Сходимость

7. Из липшицевости и симметричности гессиана:

$$
\begin{aligned}
\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^*) &\succeq -Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq \nabla^2 f(x^*) - Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq \mu I_n - Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq (\mu - Mr_k) I_n
\end{aligned}
$$

## Сходимость

7. Из липшицевости и симметричности гессиана:

$$
\begin{aligned}
\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^*) &\succeq -Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq \nabla^2 f(x^*) - Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq \mu I_n - Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq (\mu - Mr_k) I_n
\end{aligned}
$$

8. Из сильной выпуклости следует, что $\nabla^2 f(x_k) \succ 0$, i.e. $r_k < \frac{\mu}{M}$.

$$
\begin{aligned}
\left\| \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \right\| &\leq (\mu - Mr_k)^{-1} \\
r_{k+1} &\leq \frac{r_k^2 M}{2(\mu - Mr_k)}
\end{aligned}
$$

# Сходимость

7. Из липшицевости и симметричности гессиана:

$$
\begin{aligned}
\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^*) &\succeq -Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq \nabla^2 f(x^*) - Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq \mu I_n - Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq (\mu - Mr_k) I_n
\end{aligned}
$$

8. Из сильной выпуклости следует, что $\nabla^2 f(x_k) \succ 0$, i.e. $r_k < \frac{\mu}{M}$.

$$
\begin{aligned}
\left\| \left[ \nabla^2 f(x_k) \right]^{-1} \right\| &\leq (\mu - Mr_k)^{-1} \\
r_{k+1} &\leq \frac{r_k^2 M}{2(\mu - Mr_k)}
\end{aligned}
$$

9. Потребуем, чтобы верхняя оценка на $r_{k+1}$ была меньше $r_k$, учитывая, что $0 < r_k < \frac{\mu}{M}$:

$$
\begin{aligned}
\frac{r_k^2 M}{2(\mu - Mr_k)} &< r_k \\
\frac{M}{2(\mu - Mr_k)} r_k &< 1 \\
Mr_k &< 2(\mu - Mr_k) \\
3Mr_k &< 2\mu \\
r_k &< \frac{2\mu}{3M}
\end{aligned}
$$

# Сходимость

7. Из липшицевости и симметричности гессиана:

$$
\begin{aligned}
\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^*) &\succeq -Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq \nabla^2 f(x^*) - Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq \mu I_n - Mr_k I_n \\
\nabla^2 f(x_k) &\succeq (\mu - Mr_k) I_n
\end{aligned}
$$

8. Из сильной выпуклости следует, что $\nabla^2 f(x_k) \succ 0$, i.e. $r_k < \frac{\mu}{M}$.

$$
\left\| \left[ \nabla^2 f(x_k) \right]^{-1} \right\| \leq (\mu - Mr_k)^{-1}
$$

$$
r_{k+1} \leq \frac{r_k^2 M}{2(\mu - Mr_k)}
$$

9. Потребуем, чтобы верхняя оценка на $r_{k+1}$ была меньше $r_k$, учитывая, что $0 < r_k < \frac{\mu}{M}$:

$$
\begin{aligned}
\frac{r_k^2 M}{2(\mu - Mr_k)} &< r_k \\
\frac{M}{2(\mu - Mr_k)} r_k &< 1 \\
Mr_k &< 2(\mu - Mr_k) \\
3Mr_k &< 2\mu \\
r_k &< \frac{2\mu}{3M}
\end{aligned}
$$

10. Возвращаясь к оценке невязки на $k+1$-ой итерации, получаем:

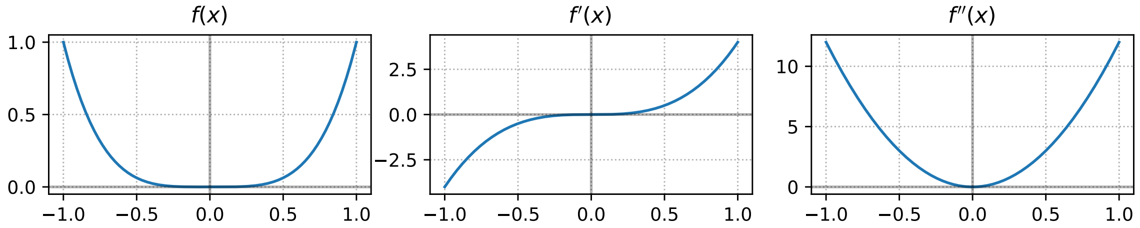
$$
r_{k+1} \leq \frac{r_k^2 M}{2(\mu - Mr_k)} < \frac{3Mr_k^2}{2\mu}
$$

Таким образом, мы получили важный результат: метод Ньютона для функции с липшицевым положительно определённым гессианом сходится **квадратично** вблизи решения.

# Свойства метода Ньютона

# Отсутствие квадратичной сходимости, если некоторые предположения нарушаются

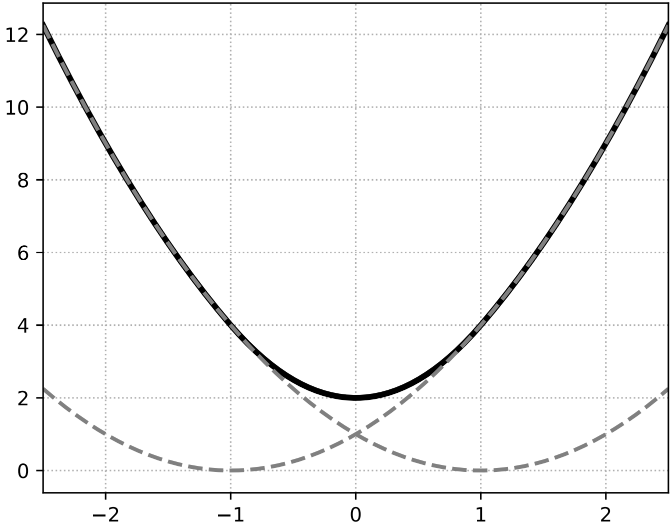
$$f(x) = x^4 \qquad f'(x) = 4x^3 \qquad f''(x) = 12x^2$$




$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)} = x_k - \frac{4x_k^3}{12x_k^2} = x_k - \frac{1}{3}x_k = \frac{2}{3}x_k,$$

сходится линейно к $0$, единственному решению задачи, с линейной скоростью.

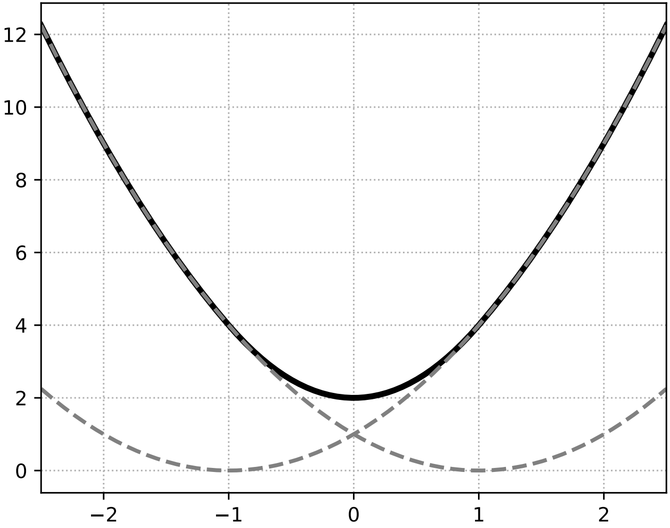
# Локальная сходимость метода Ньютона для гладкой сильно выпуклой $f(x)$




$$f(x) = \begin{cases} (x-1)^2, & x \leq -1 \\ 2x^2 + 2, & -1 < x < 1 \\ (x+1)^2, & x \geq 1 \end{cases}$$

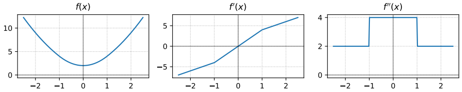
Эта функция сильно выпукла, но вторая производная не является липшицевой.

# Локальная сходимость метода Ньютона для гладкой сильно выпуклой $f(x)$

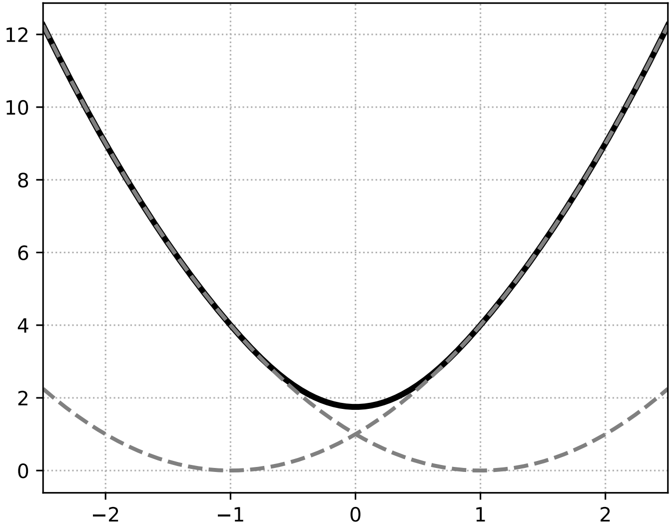



$$
f(x) = \begin{cases} (x-1)^2, & x \leq -1 \\ 2x^2 + 2, & -1 < x < 1 \\ (x+1)^2, & x \geq 1 \end{cases}
$$

Эта функция сильно выпукла, но вторая производная не является липшицевой.

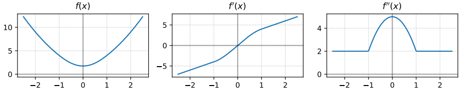


# Локальная сходимость метода Ньютона даже если $\nabla^2 f$ липшицев

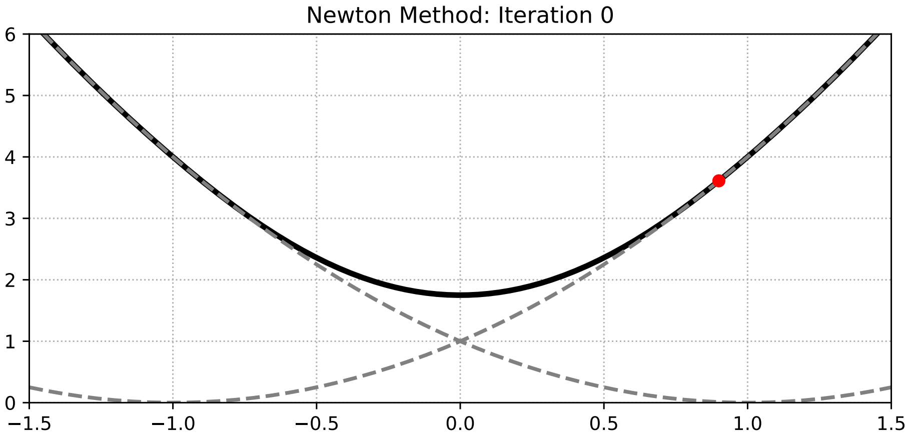



$$f(x) = \begin{cases} (x-1)^2, & x \leq -1 \\ -\frac{1}{4}x^4 + \frac{5}{2}x^2 + \frac{7}{4}, & -1 < x < 1 \\ (x+1)^2, & x \geq 1 \end{cases}$$

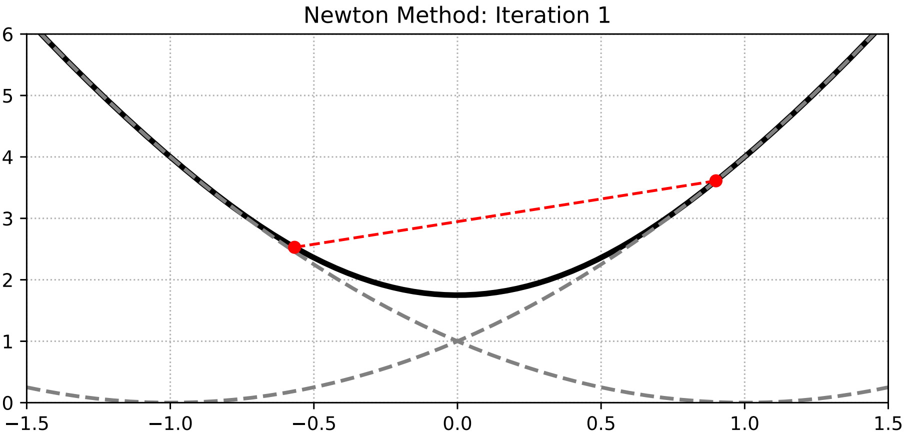
Эта функция сильно выпукла и вторая производная является липшицевой.



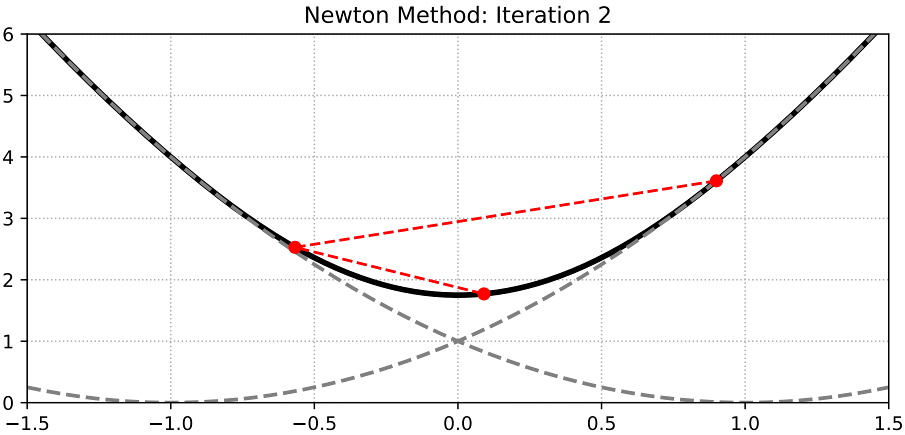
# Локальная сходимость метода Ньютона. Хорошая инициализация



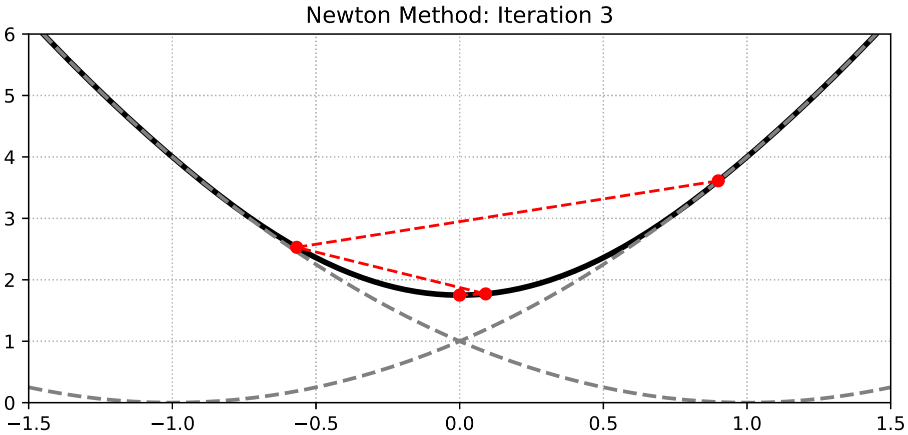
# Локальная сходимость метода Ньютона. Хорошая инициализация



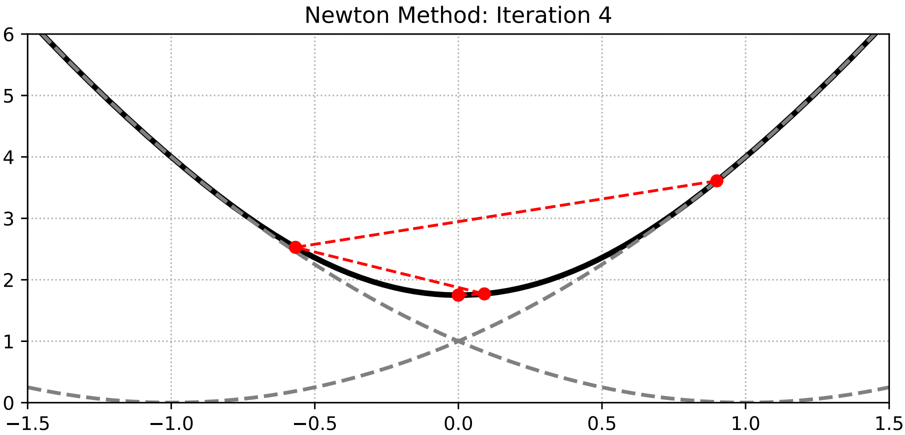
# Локальная сходимость метода Ньютона. Хорошая инициализация



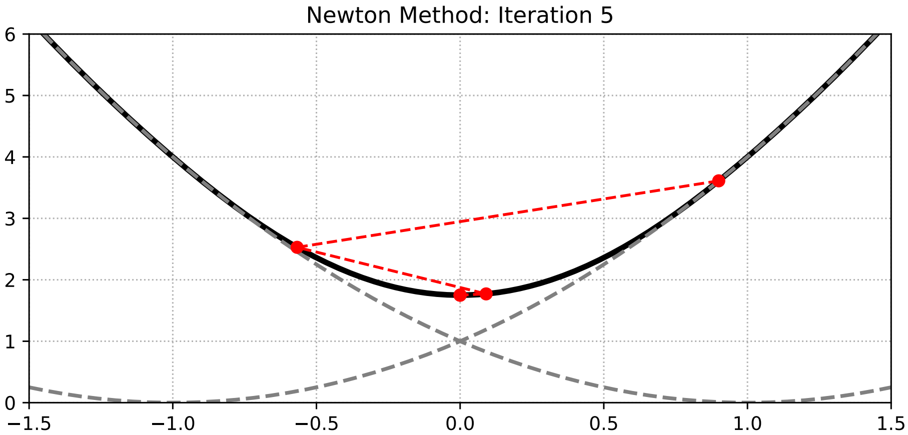
# Локальная сходимость метода Ньютона. Хорошая инициализация



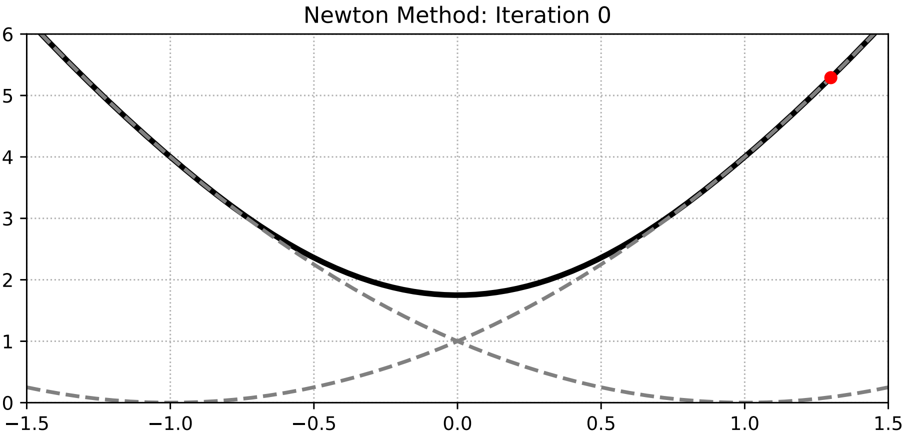
# Локальная сходимость метода Ньютона. Хорошая инициализация



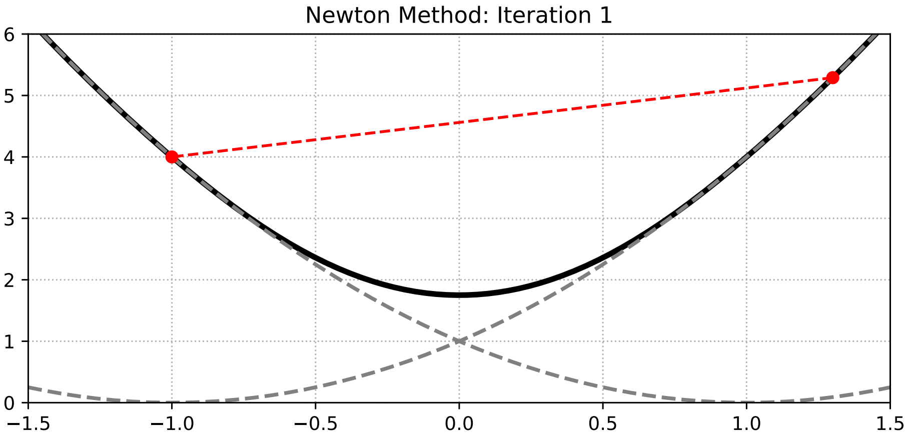
# Локальная сходимость метода Ньютона. Хорошая инициализация



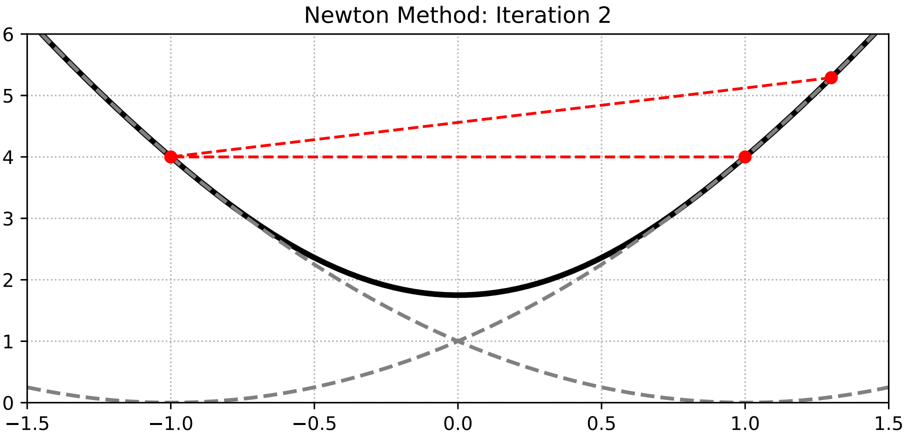
# Локальная сходимость метода Ньютона. Плохая инициализация



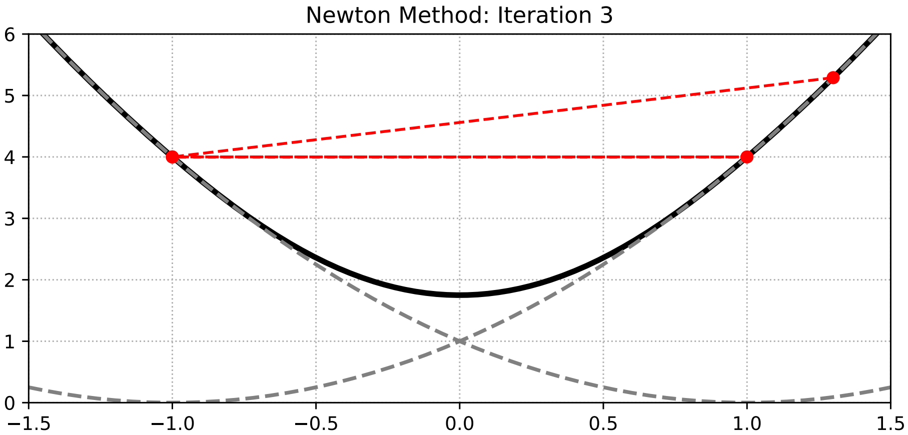
# Локальная сходимость метода Ньютона. Плохая инициализация



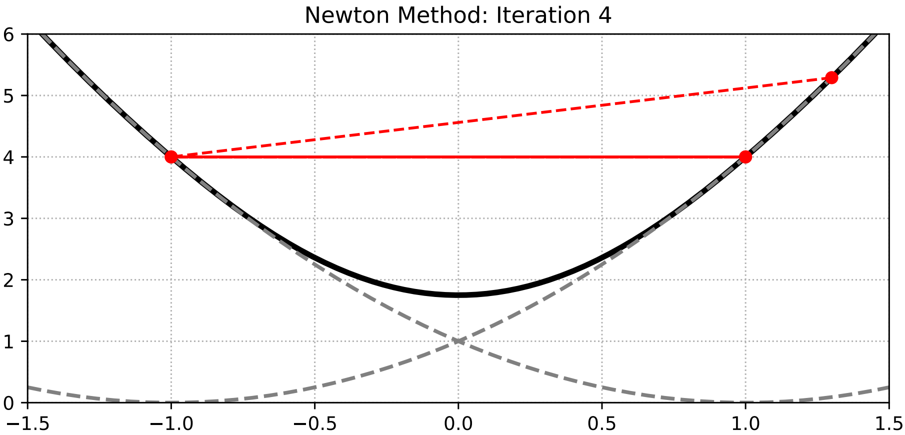
# Локальная сходимость метода Ньютона. Плохая инициализация



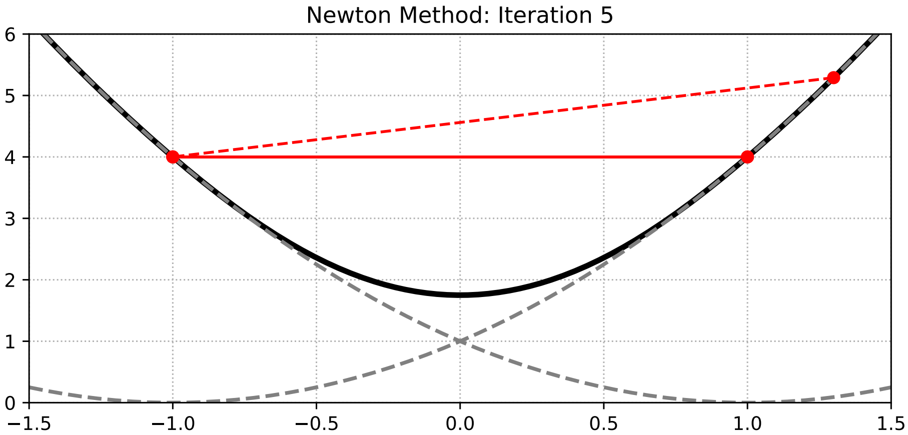
# Локальная сходимость метода Ньютона. Плохая инициализация



# Локальная сходимость метода Ньютона. Плохая инициализация



# Локальная сходимость метода Ньютона. Плохая инициализация



# Проблемы метода Ньютона

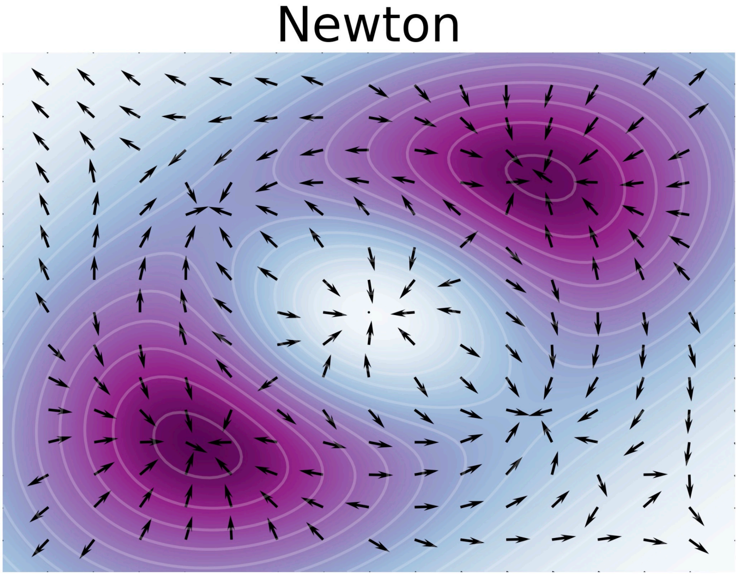



Рис. 1: Animation

# Проблемы метода Ньютона

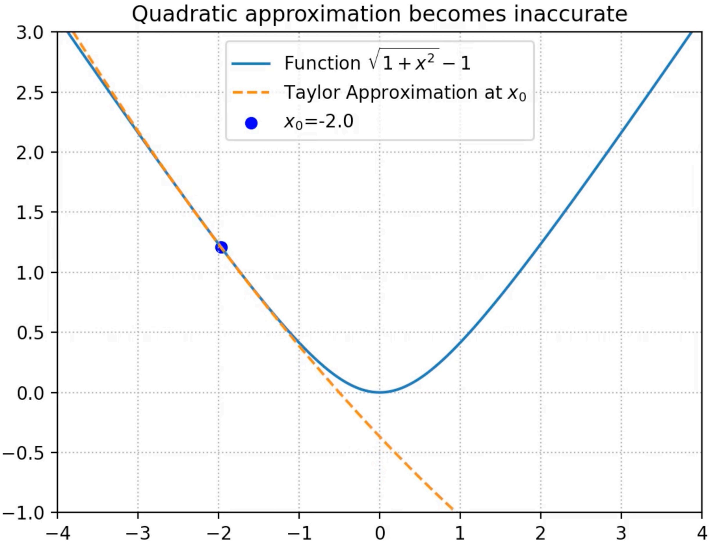



Рис. 2: Animation

# Метод Ньютона для квадратичной задачи (линейной регрессии)

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} x^\top A x - b^\top x, \qquad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad \lambda(A) \in [\mu; L].$$

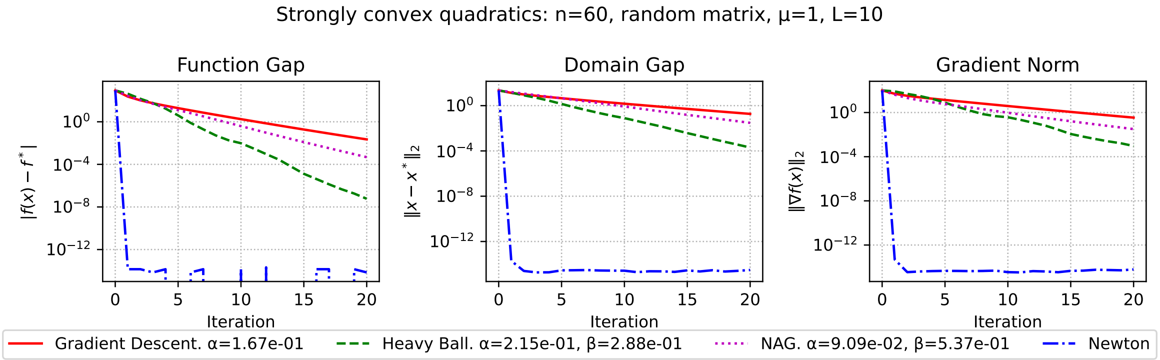



Рис. 3: Так как задача - квадратичная, то метод Ньютона сходится за один шаг.

# Метод Ньютона для квадратичной задачи (линейной регрессии)

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} x^\top A x - b^\top x, \qquad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad \lambda(A) \in [\mu; L].$$

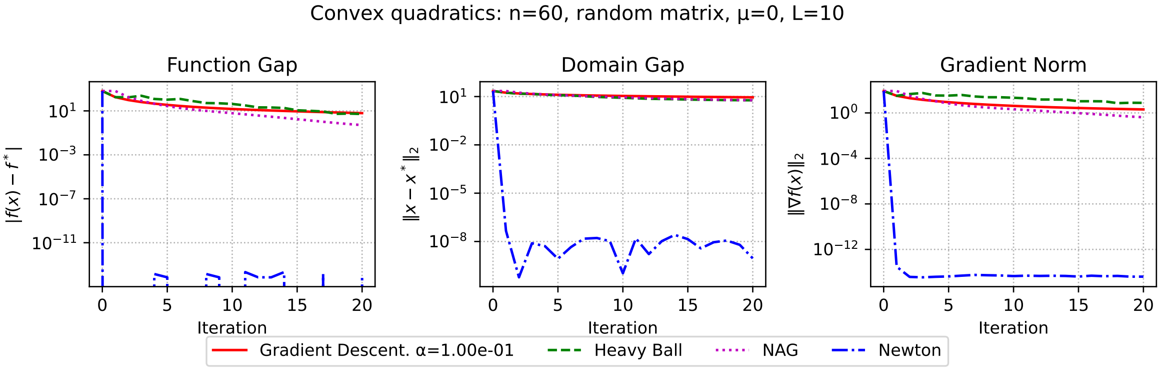



Рис. 4: В этом случае метод Ньютона тоже крайне быстро сходится, однако, отметим, что это происходит благодаря тому, что минимальное собственное число гессиана не $0$, а около $10^{-8}$. Если применять метод Ньютона в наивной форме с обращением матрицы, то получится ошибка, так как матрица вырождена. На практике все равно можно использовать метод, если для направления итерации решать линейную систему $\nabla^2 f(x_k) d_k = -\nabla f(x_k)$ методом наименьших квадратов.

# Метод Ньютона для квадратичной задачи (линейной регрессии)

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} x^\top A x - b^\top x, \qquad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad \lambda(A) \in [\mu; L].$$

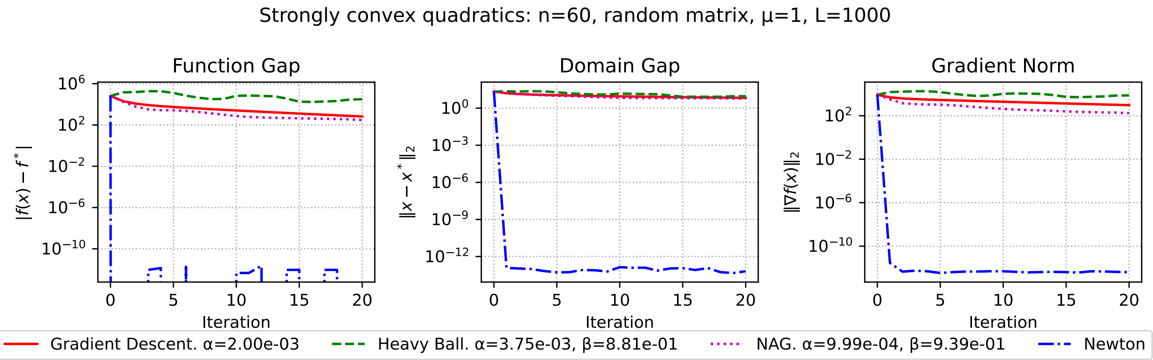



Рис. 5: Здесь число обусловленности гессиана в $1000$ раз больше, чем в предыдущем случае, и метод Ньютона сходится за $1$ итерацию.

# Метод Ньютона для задачи бинарной логистической регрессии

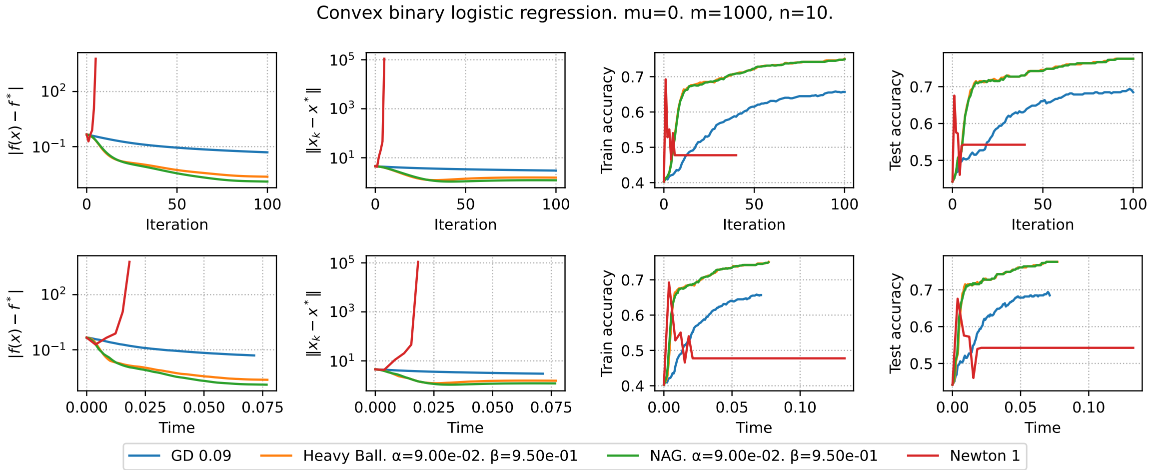



Рис. 6: Наблюдается расходимость метода Ньютона. Сразу отметим, что в задаче нет регуляризации и гарантии сильной выпуклости. А также нет гарантий того, что мы инициализируем метод в окрестности решения.

# Метод Ньютона для задачи бинарной логистической регрессии

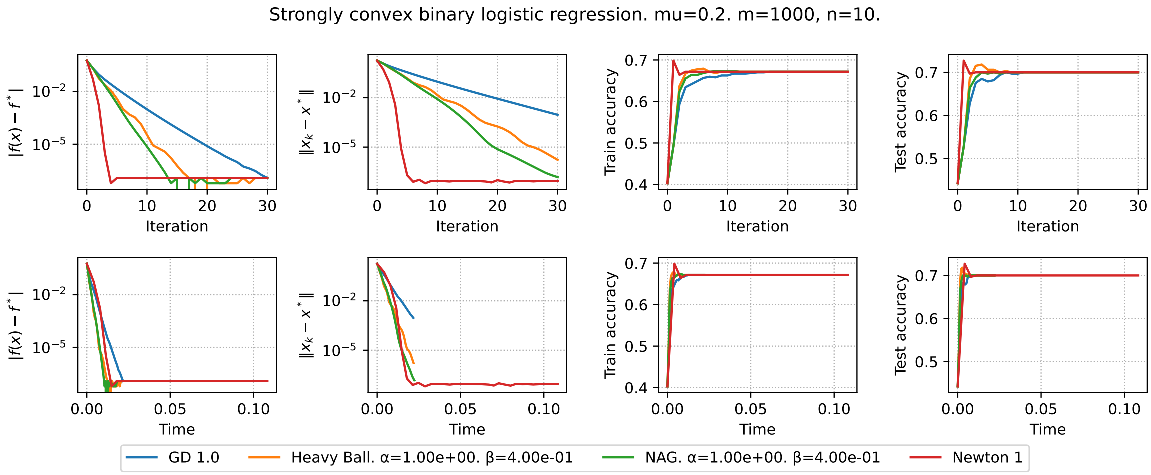



Рис. 7: Добавление регуляризации гарантирует сильную выпуклость, наблюдается сходимость метода Ньютона.

# Метод Ньютона для задачи бинарной логистической регрессии

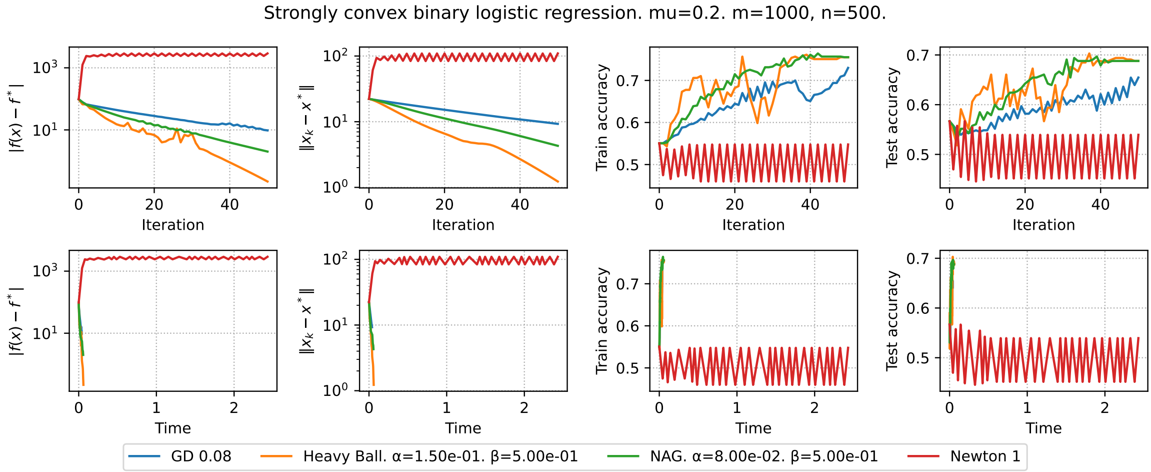



Рис. 8: Увеличим размерность в 50 раз и наблюдаем расходимость метода Ньютона. Это можно связать с тем, что мы инициализируем метод в точке, далекой от решения

# Метод Ньютона для задачи бинарной логистической регрессии

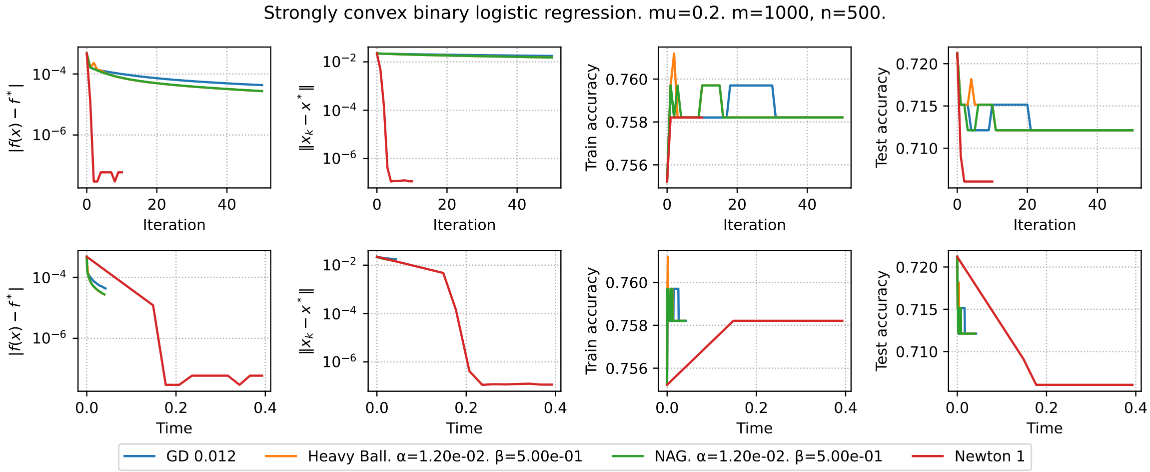



Рис. 9: Не меняя задачу, изменим начальную точку и наблюдаем квадратичную сходимость метода Ньютона. Однако, обратите внимание на время работы. Уже при небольшой размерности, метод Ньютона работает значительно дольше, чем градиентные методы.

# Задача нахождения аналитического центра многогранника

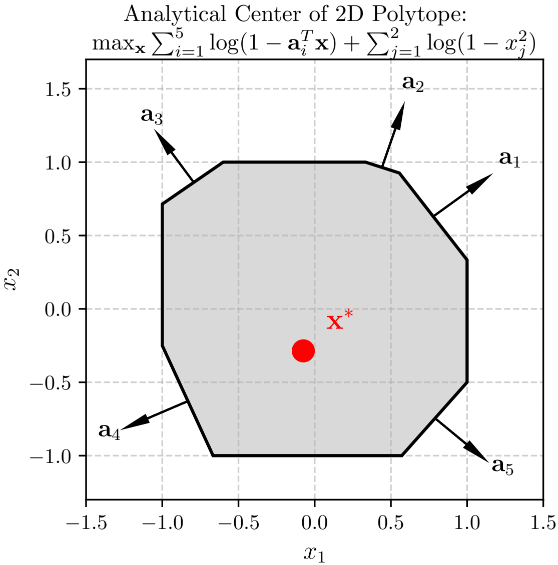
Найти точку $x \in \mathbb{R}^n$, которая максимизирует сумму логарифмов расстояний до границ политопа:

$$\max_x \sum_{i=1}^m \log(1 - a_i^T x) + \sum_{j=1}^n \log(1 - x_j^2)$$

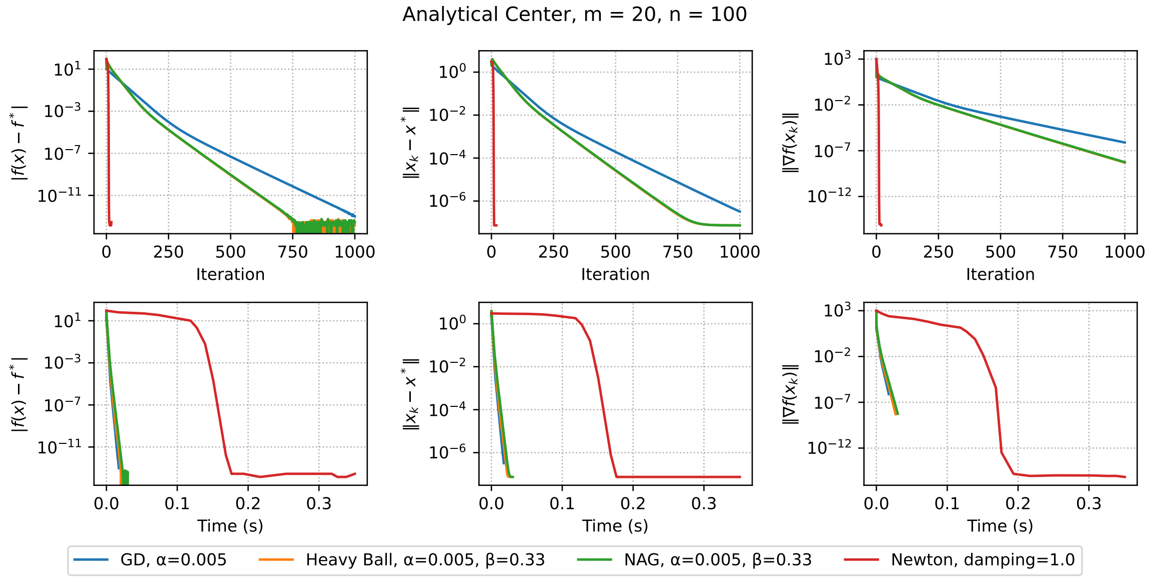
или, эквивалентно, минимизирует:

$$\min_x - \sum_{i=1}^m \log(1 - a_i^T x) - \sum_{j=1}^n \log(1 - x_j^2)$$

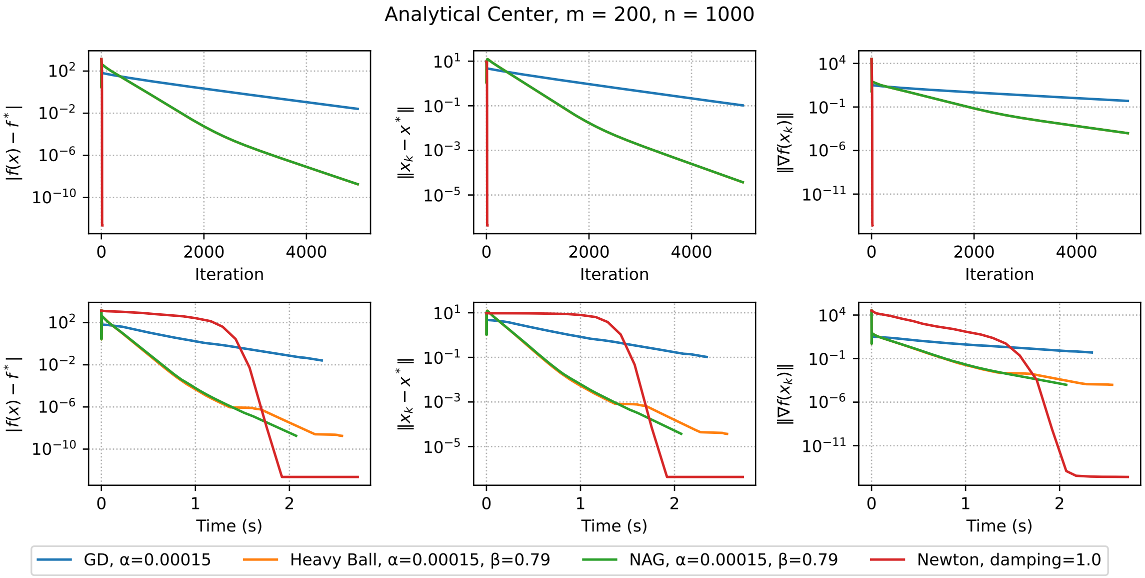
при ограничениях: - $a_i^T x < 1$ для всех $i = 1, \ldots, m$, где $a_i$ - строки матрицы $A^T$ - $|x_j| < 1$ для всех $j = 1, \ldots, n$
Аналитический центр многогранника - это точка, которая максимально удалена от всех границ многогранника в смысле логарифмического барьера. Эта концепция широко используется в методах внутренней точки для выпуклой оптимизации.



# Задача нахождения аналитического центра многогранника



# Задача нахождения аналитического центра многогранника



# Аффинная инвариантность метода Ньютона

Важным свойством метода Ньютона является **аффинная инвариантность**. Пусть дана функция $f$ и невырожденная матрица $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, пусть $x = Ay$, и пусть $g(y) = f(Ay)$. Заметим, что $\nabla g(y) = A^T \nabla f(x)$ и $\nabla^2 g(y) = A^T \nabla^2 f(x) A$. Шаги Ньютона на $g$ выражаются как:

$$
y_{k+1} = y_k - \left(\nabla^2 g(y_k)\right)^{-1} \nabla g(y_k)
$$

# Аффинная инвариантность метода Ньютона

Важным свойством метода Ньютона является **аффинная инвариантность**. Пусть дана функция $f$ и невырожденная матрица $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, пусть $x = Ay$, и пусть $g(y) = f(Ay)$. Заметим, что $\nabla g(y) = A^T \nabla f(x)$ и $\nabla^2 g(y) = A^T \nabla^2 f(x) A$. Шаги Ньютона на $g$ выражаются как:

$$
y_{k+1} = y_k - \left(\nabla^2 g(y_k)\right)^{-1} \nabla g(y_k)
$$

Раскрывая это, мы получаем:

$$
y_{k+1} = y_k - \left(A^T \nabla^2 f(A y_k) A\right)^{-1} A^T \nabla f(A y_k)
$$

# Аффинная инвариантность метода Ньютона

Важным свойством метода Ньютона является **аффинная инвариантность**. Пусть дана функция $f$ и невырожденная матрица $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, пусть $x = Ay$, и пусть $g(y) = f(Ay)$. Заметим, что $\nabla g(y) = A^T \nabla f(x)$ и $\nabla^2 g(y) = A^T \nabla^2 f(x) A$. Шаги Ньютона на $g$ выражаются как:

$$y_{k+1} = y_k - \left(\nabla^2 g(y_k)\right)^{-1} \nabla g(y_k)$$

Раскрывая это, мы получаем:

$$y_{k+1} = y_k - \left(A^T \nabla^2 f(Ay_k) A\right)^{-1} A^T \nabla f(Ay_k)$$

Используя свойство обратной матрицы $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$, это упрощается до:

$$y_{k+1} = y_k - A^{-1} \left(\nabla^2 f(Ay_k)\right)^{-1} \nabla f(Ay_k)$$
$$Ay_{k+1} = Ay_k - \left(\nabla^2 f(Ay_k)\right)^{-1} \nabla f(Ay_k)$$

# Аффинная инвариантность метода Ньютона

Важным свойством метода Ньютона является **аффинная инвариантность**. Пусть дана функция $f$ и невырожденная матрица $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, пусть $x = Ay$, и пусть $g(y) = f(Ay)$. Заметим, что $\nabla g(y) = A^T \nabla f(x)$ и $\nabla^2 g(y) = A^T \nabla^2 f(x) A$. Шаги Ньютона на $g$ выражаются как:

$$y_{k+1} = y_k - \left(\nabla^2 g(y_k)\right)^{-1} \nabla g(y_k)$$

Раскрывая это, мы получаем:

$$y_{k+1} = y_k - \left(A^T \nabla^2 f(Ay_k) A\right)^{-1} A^T \nabla f(Ay_k)$$

Используя свойство обратной матрицы $(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$, это упрощается до:

$$y_{k+1} = y_k - A^{-1} \left(\nabla^2 f(Ay_k)\right)^{-1} \nabla f(Ay_k)$$

$$Ay_{k+1} = Ay_k - \left(\nabla^2 f(Ay_k)\right)^{-1} \nabla f(Ay_k)$$

Таким образом, правило обновления для $x$ выглядит так:

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

# Аффинная инвариантность метода Ньютона

Важным свойством метода Ньютона является **аффинная инвариантность**. Пусть дана функция $f$ и невырожденная матрица $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, пусть $x = Ay$, и пусть $g(y) = f(Ay)$. Заметим, что $\nabla g(y) = A^T \nabla f(x)$ и $\nabla^2 g(y) = A^T \nabla^2 f(x) A$. Шаги Ньютона на $g$ выражаются как:

$$y_{k+1} = y_k - \left(\nabla^2 g(y_k)\right)^{-1} \nabla g(y_k)$$

Раскрывая это, мы получаем:

$$y_{k+1} = y_k - \left(A^T \nabla^2 f(Ay_k) A\right)^{-1} A^T \nabla f(Ay_k)$$

Используя свойство обратной матрицы $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$, это упрощается до:

$$y_{k+1} = y_k - A^{-1} \left(\nabla^2 f(Ay_k)\right)^{-1} \nabla f(Ay_k)$$

$$Ay_{k+1} = Ay_k - \left(\nabla^2 f(Ay_k)\right)^{-1} \nabla f(Ay_k)$$

Таким образом, правило обновления для $x$ выглядит так:

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

Это показывает, что итерация метода Ньютона, не зависит от масштаба задачи. У градиентного спуска такого свойства нет!

## Summary

Плюсы:

- Квадратичная сходимость вблизи решения $x^*$

Минусы:

# Summary

Плюсы:

- Квадратичная сходимость вблизи решения $x^*$
- Аффинная инвариантность

Минусы:

## Summary

Плюсы:

- Квадратичная сходимость вблизи решения $x^*$
- Аффинная инвариантность
- Отсутствие параметров у метода

Минусы:

## Summary

Плюсы:

- Квадратичная сходимость вблизи решения $x^*$
- Аффинная инвариантность
- Отсутствие параметров у метода
- Сходимость можно сделать глобальной, если использовать демпфированный метод Ньютона (добавить процедуру линейного поиска и шага метода)

Минусы:

# Summary

Плюсы:

- Квадратичная сходимость вблизи решения $x^*$
- Аффинная инвариантность
- Отсутствие параметров у метода
- Сходимость можно сделать глобальной, если использовать демпфированный метод Ньютона (добавить процедуру линейного поиска и шага метода)

Минусы:

- Необходимо хранить (обратный) гессиан на каждой итерации: $\mathcal{O}(n^2)$ памяти

# Summary

Плюсы:

- Квадратичная сходимость вблизи решения $x^*$
- Аффинная инвариантность
- Отсутствие параметров у метода
- Сходимость можно сделать глобальной, если использовать демпфированный метод Ньютона (добавить процедуру линейного поиска и шага метода)

Минусы:

- Необходимо хранить (обратный) гессиан на каждой итерации: $\mathcal{O}(n^2)$ памяти
- Необходимо решать линейные системы: $\mathcal{O}(n^3)$ операций

# Summary

Плюсы:

- Квадратичная сходимость вблизи решения $x^*$
- Аффинная инвариантность
- Отсутствие параметров у метода
- Сходимость можно сделать глобальной, если использовать демпфированный метод Ньютона (добавить процедуру линейного поиска и шага метода)

Минусы:

- Необходимо хранить (обратный) гессиан на каждой итерации: $\mathcal{O}(n^2)$ памяти
- Необходимо решать линейные системы: $\mathcal{O}(n^3)$ операций
- Гессиан может быть вырожденным в $x^*$

# Summary

Плюсы:

- Квадратичная сходимость вблизи решения $x^*$
- Аффинная инвариантность
- Отсутствие параметров у метода
- Сходимость можно сделать глобальной, если использовать демпфированный метод Ньютона (добавить процедуру линейного поиска и шага метода)

Минусы:

- Необходимо хранить (обратный) гессиан на каждой итерации: $\mathcal{O}(n^2)$ памяти
- Необходимо решать линейные системы: $\mathcal{O}(n^3)$ операций
- Гессиан может быть вырожденным в $x^*$
- Гессиан может не быть положительно определенным $\to$ направление $-(f''(x))^{-1}f'(x)$ может не быть направлением спуска

# Квазиньютоновские методы

# Идея адаптивных метрик

Пусть дана функция $f(x)$ и точка $x_0$. Определим $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ как множество точек с расстоянием $\varepsilon$ до $x_0$. Здесь мы предполагаем существование функции расстояния $d(x, x_0)$.

# Идея адаптивных метрик

Пусть дана функция $f(x)$ и точка $x_0$. Определим $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ как множество точек с расстоянием $\varepsilon$ до $x_0$. Здесь мы предполагаем существование функции расстояния $d(x, x_0)$.

$$
x^* = \text{arg} \min_{x \in B_\varepsilon(x_0)} f(x)
$$

## Идея адаптивных метрик

Пусть дана функция $f(x)$ и точка $x_0$. Определим $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ как множество точек с расстоянием $\varepsilon$ до $x_0$. Здесь мы предполагаем существование функции расстояния $d(x, x_0)$.

$$
x^* = \text{arg} \min_{x \in B_\varepsilon(x_0)} f(x)
$$

Далее, мы можем определить другое направление *наискорейшего спуска* в терминах минимизатора функции на сфере:

# Идея адаптивных метрик

Пусть дана функция $f(x)$ и точка $x_0$. Определим $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ как множество точек с расстоянием $\varepsilon$ до $x_0$. Здесь мы предполагаем существование функции расстояния $d(x, x_0)$.

$$
x^* = \text{arg} \min_{x \in B_\varepsilon(x_0)} f(x)
$$

Далее, мы можем определить другое направление *наискорейшего спуска* в терминах минимизатора функции на сфере:

$$
s = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{x^* - x_0}{\varepsilon}
$$

# Идея адаптивных метрик

Пусть дана функция $f(x)$ и точка $x_0$. Определим $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ как множество точек с расстоянием $\varepsilon$ до $x_0$. Здесь мы предполагаем существование функции расстояния $d(x, x_0)$.

$$
x^* = \text{arg} \min_{x \in B_\varepsilon(x_0)} f(x)
$$

Далее, мы можем определить другое направление *наискорейшего спуска* в терминах минимизатора функции на сфере:

$$
s = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{x^* - x_0}{\varepsilon}
$$

Предположим, что расстояние локально определяется некоторой метрикой $A$:

$$
d(x, x_0) = (x - x_0)^\top A (x - x_0)
$$

# Идея адаптивных метрик

Пусть дана функция $f(x)$ и точка $x_0$. Определим $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ как множество точек с расстоянием $\varepsilon$ до $x_0$. Здесь мы предполагаем существование функции расстояния $d(x, x_0)$.

$$
x^* = \text{arg} \min_{x \in B_\varepsilon(x_0)} f(x)
$$

Далее, мы можем определить другое направление *наискорейшего спуска* в терминах минимизатора функции на сфере:

$$
s = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{x^* - x_0}{\varepsilon}
$$

Предположим, что расстояние локально определяется некоторой метрикой $A$:

$$
d(x, x_0) = (x - x_0)^\top A (x - x_0)
$$

Далее рассмотрим первый порядок аппроксимации функции $f(x)$ в окрестности точки $x_0$:

$$
f(x_0 + \delta x) \approx f(x_0) + \nabla f(x_0)^\top \delta x \tag{1}
$$

Теперь мы можем сформулировать задачу нахождения $s$, как это было сказано выше.

$$
\min_{\delta x \in \mathbb{R}^{\ltimes}} f(x_0 + \delta x)
$$

$$
\text{s.t. } \delta x^\top A \delta x = \varepsilon^2
$$

# Идея адаптивных метрик

Пусть дана функция $f(x)$ и точка $x_0$. Определим $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ как множество точек с расстоянием $\varepsilon$ до $x_0$. Здесь мы предполагаем существование функции расстояния $d(x, x_0)$.

$$
x^* = \text{arg} \min_{x \in B_\varepsilon(x_0)} f(x)
$$

Далее, мы можем определить другое направление *наискорейшего спуска* в терминах минимизатора функции на сфере:

$$
s = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{x^* - x_0}{\varepsilon}
$$

Предположим, что расстояние локально определяется некоторой метрикой $A$:

$$
d(x, x_0) = (x - x_0)^\top A (x - x_0)
$$

Далее рассмотрим первый порядок аппроксимации функции $f(x)$ в окрестности точки $x_0$:

$$
f(x_0 + \delta x) \approx f(x_0) + \nabla f(x_0)^\top \delta x \tag{1}
$$

Теперь мы можем сформулировать задачу нахождения $s$, как это было сказано выше.

$$
\begin{aligned}
&\min_{\delta x \in \mathbb{R}^{\ltimes}} f(x_0 + \delta x) \\
&\text{s.t. } \delta x^\top A \delta x = \varepsilon^2
\end{aligned}
$$

Используя уравнение 1, получаем:

$$
\begin{aligned}
&\min_{\delta x \in \mathbb{R}^{\ltimes}} \nabla f(x_0)^\top \delta x \\
&\text{s.t. } \delta x^\top A \delta x = \varepsilon^2
\end{aligned}
$$

# Идея адаптивных метрик

Пусть дана функция $f(x)$ и точка $x_0$. Определим $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ как множество точек с расстоянием $\varepsilon$ до $x_0$. Здесь мы предполагаем существование функции расстояния $d(x, x_0)$.

$$
x^* = \text{arg} \min_{x \in B_\varepsilon(x_0)} f(x)
$$

Далее, мы можем определить другое направление *наискорейшего спуска* в терминах минимизатора функции на сфере:

$$
s = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{x^* - x_0}{\varepsilon}
$$

Предположим, что расстояние локально определяется некоторой метрикой $A$:

$$
d(x, x_0) = (x - x_0)^\top A (x - x_0)
$$

Далее рассмотрим первый порядок аппроксимации функции $f(x)$ в окрестности точки $x_0$:

$$
f(x_0 + \delta x) \approx f(x_0) + \nabla f(x_0)^\top \delta x \tag{1}
$$

Теперь мы можем сформулировать задачу нахождения $s$, как это было сказано выше.

$$
\begin{aligned}
&\min_{\delta x \in \mathbb{R}^{\ltimes}} f(x_0 + \delta x) \\
&\text{s.t. } \delta x^\top A \delta x = \varepsilon^2
\end{aligned}
$$

Используя уравнение 1, получаем:

$$
\begin{aligned}
&\min_{\delta x \in \mathbb{R}^{\ltimes}} \nabla f(x_0)^\top \delta x \\
&\text{s.t. } \delta x^\top A \delta x = \varepsilon^2
\end{aligned}
$$

Используя метод множителей Лагранжа:

$$
\delta x = -\frac{2\varepsilon^2}{\nabla f(x_0)^\top A^{-1} \nabla f(x_0)} A^{-1} \nabla f
$$

# Идея адаптивных метрик

Пусть дана функция $f(x)$ и точка $x_0$. Определим $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ как множество точек с расстоянием $\varepsilon$ до $x_0$. Здесь мы предполагаем существование функции расстояния $d(x, x_0)$.

$$
x^* = \text{arg} \min_{x \in B_\varepsilon(x_0)} f(x)
$$

Далее, мы можем определить другое направление *наискорейшего спуска* в терминах минимизатора функции на сфере:

$$
s = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{x^* - x_0}{\varepsilon}
$$

Предположим, что расстояние локально определяется некоторой метрикой $A$:

$$
d(x, x_0) = (x - x_0)^\top A (x - x_0)
$$

Далее рассмотрим первый порядок аппроксимации функции $f(x)$ в окрестности точки $x_0$:

$$
f(x_0 + \delta x) \approx f(x_0) + \nabla f(x_0)^\top \delta x \tag{1}
$$

Теперь мы можем сформулировать задачу нахождения $s$, как это было сказано выше.

$$
\begin{aligned}
&\min_{\delta x \in \mathbb{R}^k} f(x_0 + \delta x) \\
&\text{s.t. } \delta x^\top A \delta x = \varepsilon^2
\end{aligned}
$$

Используя уравнение 1, получаем:

$$
\begin{aligned}
&\min_{\delta x \in \mathbb{R}^k} \nabla f(x_0)^\top \delta x \\
&\text{s.t. } \delta x^\top A \delta x = \varepsilon^2
\end{aligned}
$$

Используя метод множителей Лагранжа:

$$
\delta x = - \frac{2 \varepsilon^2}{\nabla f(x_0)^\top A^{-1} \nabla f(x_0)} A^{-1} \nabla f
$$

Новое направление наискорейшего спуска : $A^{-1} \nabla f(x_0)$.

# Идея адаптивных метрик

Пусть дана функция $f(x)$ и точка $x_0$. Определим $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ как множество точек с расстоянием $\varepsilon$ до $x_0$. Здесь мы предполагаем существование функции расстояния $d(x, x_0)$.

$$
x^* = \text{arg} \min_{x \in B_\varepsilon(x_0)} f(x)
$$

Далее, мы можем определить другое направление *наискорейшего спуска* в терминах минимизатора функции на сфере:

$$
s = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{x^* - x_0}{\varepsilon}
$$

Предположим, что расстояние локально определяется некоторой метрикой $A$:

$$
d(x, x_0) = (x - x_0)^\top A (x - x_0)
$$

Далее рассмотрим первый порядок аппроксимации функции $f(x)$ в окрестности точки $x_0$:

$$
f(x_0 + \delta x) \approx f(x_0) + \nabla f(x_0)^\top \delta x \tag{1}
$$

Теперь мы можем сформулировать задачу нахождения $s$, как это было сказано выше.

$$
\begin{aligned}
&\min_{\delta x \in \mathbb{R}^{\ltimes}} f(x_0 + \delta x) \\
&\text{s.t. } \delta x^\top A \delta x = \varepsilon^2
\end{aligned}
$$

Используя уравнение 1, получаем:

$$
\begin{aligned}
&\min_{\delta x \in \mathbb{R}^{\ltimes}} \nabla f(x_0)^\top \delta x \\
&\text{s.t. } \delta x^\top A \delta x = \varepsilon^2
\end{aligned}
$$

Используя метод множителей Лагранжа:

$$
\delta x = -\frac{2\varepsilon^2}{\nabla f(x_0)^\top A^{-1} \nabla f(x_0)} A^{-1} \nabla f
$$

Новое направление наискорейшего спуска : $A^{-1} \nabla f(x_0)$.

Действительно, если пространство изотропно и $A = I$, мы сразу получаем формулу градиентного спуска, в то время как метод Ньютона использует локальный гессиан как матрицу метрик.

# Интуиция квазиньютоновских методов

Для классической задачи безусловной оптимизации $f(x) \to \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}$ общий алгоритм 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 алгоритм 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 алгоритм 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 алгоритм 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 единичную матрицу $B_k = I_n$ в качестве $B_k$ на каждом шаге, мы получим точно метод градиентного спуска.

Общий алгоритм квазиньютоновских методов основан 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 $k = 1, 2, 3, \dots$, повторяем:

1. Решить $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$

# Шаблон квазиньютоновского метода

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

1. Решить $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Обновить $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

# Шаблон квазиньютоновского метода

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

1. Решить $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
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 $k = 1, 2, 3, \dots$, повторяем:

1. Решить $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
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. Решить $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
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. Мы скоро увидим, что обычно 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. Решить $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
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. Мы скоро увидим, что обычно 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. Решить $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
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. Мы скоро увидим, что обычно 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):

$$
\begin{gathered}
\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) = B_{k+1}(x_{k+1} - x_k) = B_{k+1} d_k \\
\Delta y_k = B_{k+1} \Delta x_k
\end{gathered}
$$

# Шаблон квазиньютоновского метода

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

1. Решить $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
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. Мы скоро увидим, что обычно 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):

$$
\begin{gathered}
\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) = B_{k+1}(x_{k+1} - x_k) = B_{k+1} d_k \\
\Delta y_k = B_{k+1} \Delta x_k
\end{gathered}
$$

Помимо уравнения секущей, мы хотим:

- $B_{k+1}$ симметричная

# Шаблон квазиньютоновского метода

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

1. Решить $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
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. Мы скоро увидим, что обычно 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):

$$\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) = B_{k+1}(x_{k+1} - x_k) = B_{k+1} d_k$$
$$\Delta y_k = B_{k+1} \Delta x_k$$

Помимо уравнения секущей, мы хотим:

- $B_{k+1}$ симметричная
- $B_{k+1}$ близка к $B_k$

# Шаблон квазиньютоновского метода

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

1. Решить $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
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. Мы скоро увидим, что обычно 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):

$$
\begin{gathered}
\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) = B_{k+1}(x_{k+1} - x_k) = B_{k+1} d_k \\
\Delta y_k = B_{k+1} \Delta x_k
\end{gathered}
$$

Помимо уравнения секущей, мы хотим:

- $B_{k+1}$ симметричная
- $B_{k+1}$ близка к $B_k$
- $B_k \succ 0 \Rightarrow B_{k+1} \succ 0$

# Симметричное одноранговое обновление

Попробуем обновление вида:

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

# Симметричное одноранговое обновление

Попробуем обновление вида:

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

Уравнение секущей $B_{k+1}d_k = \Delta y_k$ дает:

$$(au^T d_k)u = \Delta y_k - B_k d_k$$

# Симметричное одноранговое обновление

Попробуем обновление вида:

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

Уравнение секущей $B_{k+1}d_k = \Delta y_k$ дает:

$$(au^T d_k)u = \Delta y_k - B_k d_k$$

Это верно только если $u$ является кратным $\Delta y_k - B_k d_k$. Положив $u = \Delta y_k - B_k d_k$, мы решаем уравнение,

$$a = \frac{1}{(\Delta y_k - B_k d_k)^T d_k},$$

# Симметричное одноранговое обновление

Попробуем обновление вида:

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

Уравнение секущей $B_{k+1}d_k = \Delta y_k$ дает:

$$(au^T d_k)u = \Delta y_k - B_k d_k$$

Это верно только если $u$ является кратным $\Delta y_k - B_k d_k$. Положив $u = \Delta y_k - B_k d_k$, мы решаем уравнение,

$$a = \frac{1}{(\Delta y_k - B_k d_k)^T d_k},$$

что приводит к

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(\Delta y_k - B_k d_k)(\Delta y_k - B_k d_k)^T}{(\Delta y_k - B_k d_k)^T d_k}$$

Это называется симметричным одноранговым (SR1) обновлением или методом Бройдена.

# Симметричное одноранговое обновление с инверсией

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 инверсии, т.е. $C_k = B_k^{-1}$ на $C_{k+1} = (B_{k+1})^{-1}$.

## Формула Шермана-Моррисона:

Формула Шермана-Моррисона утверждает:

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

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

$$C_{k+1} = C_k + \frac{(d_k - C_k \Delta y_k)(d_k - C_k \Delta y_k)^T}{(d_k - C_k \Delta y_k)^T \Delta y_k}$$

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

# Обновление Давидона-Флетчера-Пауэлла

Мы могли бы продолжить ту же идею для обновления обратной матрицы $C$:

$$
C_{k+1} = C_k + auu^T + bvv^T.
$$

# Обновление Давидона-Флетчера-Пауэлла

Мы могли бы продолжить ту же идею для обновления обратной матрицы $C$:

$$C_{k+1} = C_k + auu^T + bvv^T.$$

Умножая на $\Delta y_k$, используя уравнение секущей $d_k = C_k \Delta y_k$ и решая для $a$, $b$, получаем:

$$C_{k+1} = C_k - \frac{C_k \Delta y_k \Delta y_k^T C_k}{\Delta y_k^T C_k \Delta y_k} + \frac{d_k d_k^T}{\Delta y_k^T d_k}$$

## Применение формулы Вудбери

Вудбери показывает:

$$B_{k+1} = \left( I - \frac{\Delta y_k d_k^T}{\Delta y_k^T d_k} \right) B_k \left( I - \frac{d_k \Delta y_k^T}{\Delta y_k^T d_k} \right) + \frac{\Delta y_k \Delta y_k^T}{\Delta y_k^T d_k}$$

Это обновление Давидона-Флетчера-Пауэлла (DFP). Также дешево: $O(n^2)$, но сохраняет положительную определенность. Не так популярно, как BFGS.

# Обновление Бройдена-Флетчера-Гольдштейна-Шенно

Попробуем теперь двухранговое обновление:

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

# Обновление Бройдена-Флетчера-Гольдштейна-Шенно

Попробуем теперь двухранговое обновление:

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

Уравнение секущей $\Delta y_k = B_{k+1} d_k$ дает:

$$\Delta y_k - B_k d_k = (au^T d_k)u + (bv^T d_k)v$$

# Обновление Бройдена-Флетчера-Гольдштейна-Шенно

Попробуем теперь двухранговое обновление:

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

Уравнение секущей $\Delta y_k = B_{k+1} d_k$ дает:

$$
\Delta y_k - B_k d_k = (au^T d_k)u + (bv^T d_k)v
$$

Положив $u = \Delta y_k$, $v = B_k d_k$ и решая для $a$, $b$, получаем:

$$
B_{k+1} = B_k - \frac{B_k d_k d_k^T B_k}{d_k^T B_k d_k} + \frac{\Delta y_k \Delta y_k^T}{d_k^T \Delta y_k}
$$

Это обновление Бройдена-Флетчера-Гольдштейна-Шенно (BFGS).

# Обновление Бройдена-Флетчера-Гольдштейна-Шенно с инверсией

## Формула Вудбери

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

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

# Обновление Бройдена-Флетчера-Гольдштейна-Шенно с инверсией

## Формула Вудбери

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

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

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

$$C_{k+1} = C_k + \frac{(d_k - C_k\Delta y_k)d_k^T}{\Delta y_k^T d_k} + \frac{d_k(d_k - C_k\Delta y_k)^T}{\Delta y_k^T d_k} - \frac{(d_k - C_k\Delta y_k)^T \Delta y_k}{(\Delta y_k^T d_k)^2} d_k d_k^T$$

$$C_{k+1} = \left(I - \frac{d_k \Delta y_k^T}{\Delta y_k^T d_k}\right) C_k \left(I - \frac{\Delta y_k d_k^T}{\Delta y_k^T d_k}\right) + \frac{d_k d_k^T}{\Delta y_k^T d_k}$$

Эта формулировка обеспечивает, что обновление BFGS, оставаясь достаточно общим, сохраняет вычислительную эффективность и требует $O(n^2)$ операций. Важно, что обновление BFGS сохраняет положительную определенность: $B_k \succ 0 \Rightarrow B_{k+1} \succ 0$. Эквивалентно, $C_k \succ 0 \Rightarrow C_{k+1} \succ 0$

# Код

- Открыть в Colab

# Код

- Открыть в Colab
- Сравнение квазиньютоновских методов

# Код

- Открыть в Colab
- Сравнение квазиньютоновских методов
- Некоторые практические замечания о методе Ньютона