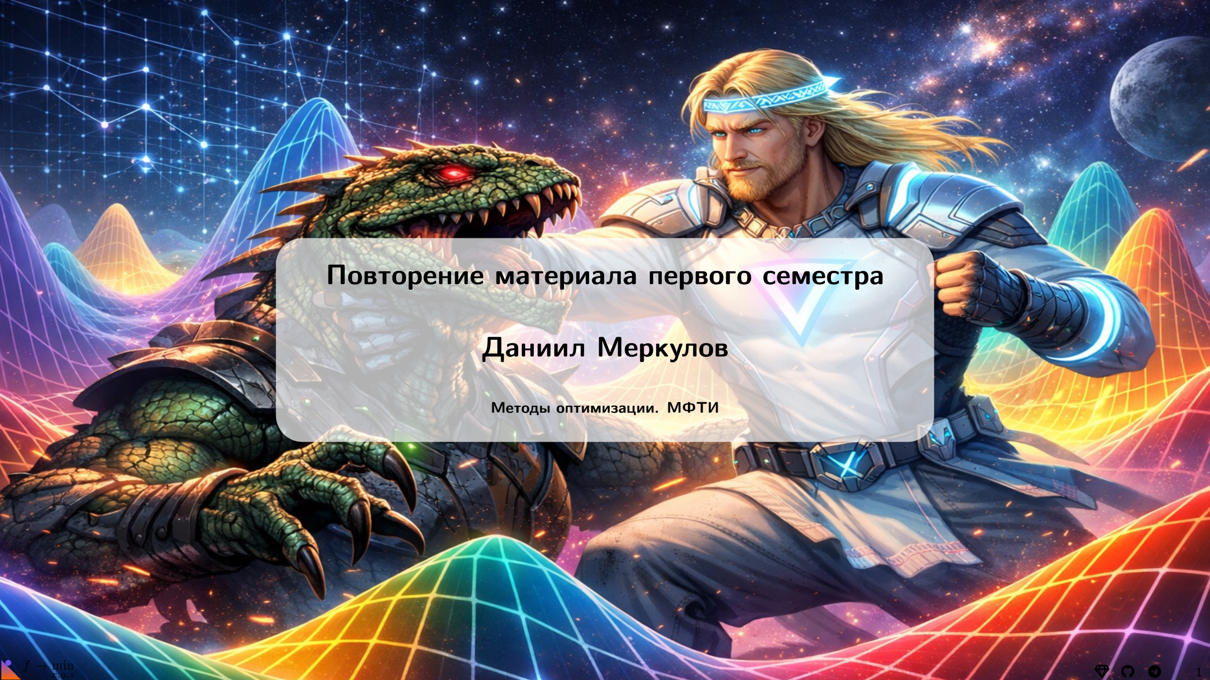


Повторение материала первого семестра

Даниил Меркулов

Методы оптимизации. МФТИ

Линейная алгебра (Лекция 1)

Векторы и матрицы

Векторные нормы:

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$ — ℓ_1-норма

Векторы и матрицы

Векторные нормы:

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$ — ℓ_1-норма
- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$ — евклидова норма

Векторы и матрицы

Векторные нормы:

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ — ℓ_1-норма
- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ — евклидова норма
- $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$ — ℓ_∞-норма

Векторы и матрицы

Векторные нормы:

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ — ℓ_1-норма
- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ — евклидова норма
- $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$ — ℓ_∞-норма
- $\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{1/p}$ — ℓ_p-норма

Векторы и матрицы

Векторные нормы:

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ — ℓ_1-норма
- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ — евклидова норма
- $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$ — ℓ_∞-норма
- $\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{1/p}$ — ℓ_p-норма

Векторы и матрицы

Векторные нормы:

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ — ℓ_1-норма
- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ — евклидова норма
- $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$ — ℓ_∞-норма
- $\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{1/p}$ — ℓ_p-норма

Неравенство Гёльдера: $|\langle x, y\rangle| \leq \|x\|_p \|y\|_q$, где $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$

Матричные нормы:

- $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{ij}^2} = \sqrt{\text{tr}(A^T A)}$ — норма Фробениуса

Векторы и матрицы

Векторные нормы:

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ — ℓ_1-норма
- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ — евклидова норма
- $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$ — ℓ_∞-норма
- $\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{1/p}$ — ℓ_p-норма

Неравенство Гёльдера: $|\langle x, y\rangle| \leq \|x\|_p \|y\|_q$, где $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$

Матричные нормы:

- $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{ij}^2} = \sqrt{\mathrm{tr}(A^T A)}$ — норма Фробениуса
- $\|A\|_* = \sum_i \sigma_i(A)$ — ядерная норма

Векторы и матрицы

Векторные нормы:

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ — ℓ_1-норма
- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ — евклидова норма
- $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$ — ℓ_∞-норма
- $\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{1/p}$ — ℓ_p-норма

Неравенство Гёльдера: $|\langle x, y\rangle| \leq \|x\|_p \|y\|_q$, где $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$

Матричные нормы:

- $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{ij}^2} = \sqrt{\mathrm{tr}(A^T A)}$ — норма Фробениуса
- $\|A\|_* = \sum_i \sigma_i(A)$ — ядерная норма
- $\|A\|_2 = \sigma_{\max}(A)$ — спектральная норма

Векторы и матрицы

Векторные нормы:

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ — ℓ_1-норма
- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ — евклидова норма
- $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$ — ℓ_∞-норма
- $\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{1/p}$ — ℓ_p-норма

Неравенство Гёльдера: $|\langle x, y\rangle| \leq \|x\|_p \|y\|_q$, где $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$

Матричные нормы:

- $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{ij}^2} = \sqrt{\text{tr}(A^T A)}$ — норма Фробениуса
- $\|A\|_* = \sum_i \sigma_i(A)$ — ядерная норма
- $\|A\|_2 = \sigma_{\max}(A)$ — спектральная норма

Векторы и матрицы

Векторные нормы:

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ — ℓ_1-норма
- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ — евклидова норма
- $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$ — ℓ_∞-норма
- $\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{1/p}$ — ℓ_p-норма

Неравенство Гёльдера: $|\langle x, y\rangle| \leq \|x\|_p \|y\|_q$, где $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$

Матричные нормы:

- $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{ij}^2} = \sqrt{\mathrm{tr}(A^T A)}$ — норма Фробениуса
- $\|A\|_* = \sum_i \sigma_i(A)$ — ядерная норма
- $\|A\|_2 = \sigma_{\max}(A)$ — спектральная норма

Индуцированная норма: $\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$

Собственные значения и SVD

Спектральное разложение (для симметричных матриц $A = A^T$):

$$A = Q\Lambda Q^T, \quad Q^T Q = I$$

где $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ — собственные значения.

Собственные значения и SVD

Спектральное разложение (для симметричных матриц $A = A^T$):

$$A = Q\Lambda Q^T, \quad Q^T Q = I$$

где $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ — собственные значения.
Положительная определённость: $A \succ 0 \Leftrightarrow \lambda_i > 0 \ \forall i$

Собственные значения и SVD

Спектральное разложение (для симметричных матриц $A = A^T$):

$$A = Q\Lambda Q^T, \quad Q^T Q = I$$

где $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ — собственные значения.
Положительная определённость: $A \succ 0 \Leftrightarrow \lambda_i > 0 \ \forall i$
Число обусловленности: $\kappa(A) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$

Сингулярное разложение (SVD):

$$A = U\Sigma V^T$$

где U, V — ортогональные, $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$

Собственные значения и SVD

Спектральное разложение (для симметричных матриц $A = A^T$):

$$A = Q\Lambda Q^T, \quad Q^T Q = I$$

где $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ — собственные значения.

Положительная определённость: $A \succ 0 \Leftrightarrow \lambda_i > 0 \ \forall i$

Число обусловленности: $\kappa(A) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$

Сингулярное разложение (SVD):

$$A = U\Sigma V^T$$

где U, V — ортогональные, $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$

Низкоранговое приближение (теорема Эккарта-Янга):

$$\min_{\text{rank}(B)\le k} \|A - B\|_F = \sqrt{\sum_{i>k} \sigma_i^2}$$

Собственные значения и SVD

Спектральное разложение (для симметричных матриц $A = A^T$):

$$A = Q\Lambda Q^T, \quad Q^T Q = I$$

где $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ — собственные значения.

Положительная определённость: $A \succ 0 \Leftrightarrow \lambda_i > 0 \ \forall i$

Число обусловленности: $\kappa(A) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$

Сингулярное разложение (SVD):

$$A = U\Sigma V^T$$

где U, V — ортогональные, $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$

Низкоранговое приближение (теорема Эккарта-Янга):

$$\min_{\text{rank}(B)\le k} \|A - B\|_F = \sqrt{\sum_{i>k} \sigma_i^2}$$

LoRA: $W = W_0 + BA$, где $B \in \mathbb{R}^{m\times r}$, $A \in \mathbb{R}^{r\times n}$, $r \ll \min(m, n)$

Задача (след и собственные значения)

Упростите выражение:

$$\operatorname{tr}\left((A + \lambda I)^{-1} A\right), \quad \text{где } A \in \mathbb{S}^n_{++}, \lambda > 0$$

Задача (след и собственные значения)

Упростите выражение:

$$\operatorname{tr}\left((A+\lambda I)^{-1}A\right), \quad \text{где } A \in \mathbb{S}^n_{++}, \lambda > 0$$

Решение: Пусть $A = Q\Lambda Q^T$ — спектральное разложение. Тогда:

$$(A+\lambda I)^{-1} = Q(\Lambda+\lambda I)^{-1}Q^T$$

Задача (след и собственные значения)

Упростите выражение:

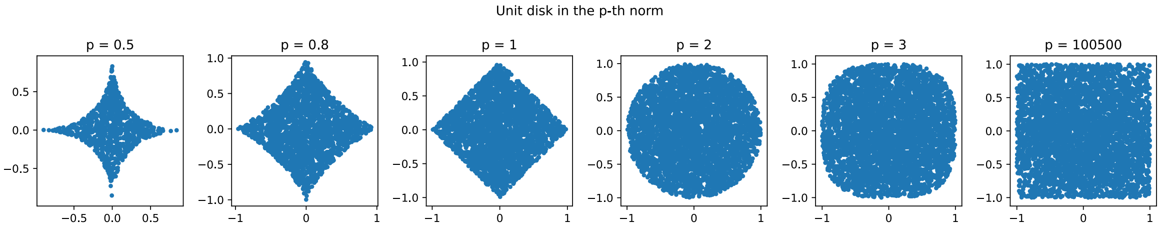
$$\operatorname{tr}\left((A+\lambda I)^{-1}A\right), \quad \text{где } A \in \mathbb{S}^n_{++}, \lambda > 0$$

Решение: Пусть $A = Q\Lambda Q^T$ — спектральное разложение. Тогда:

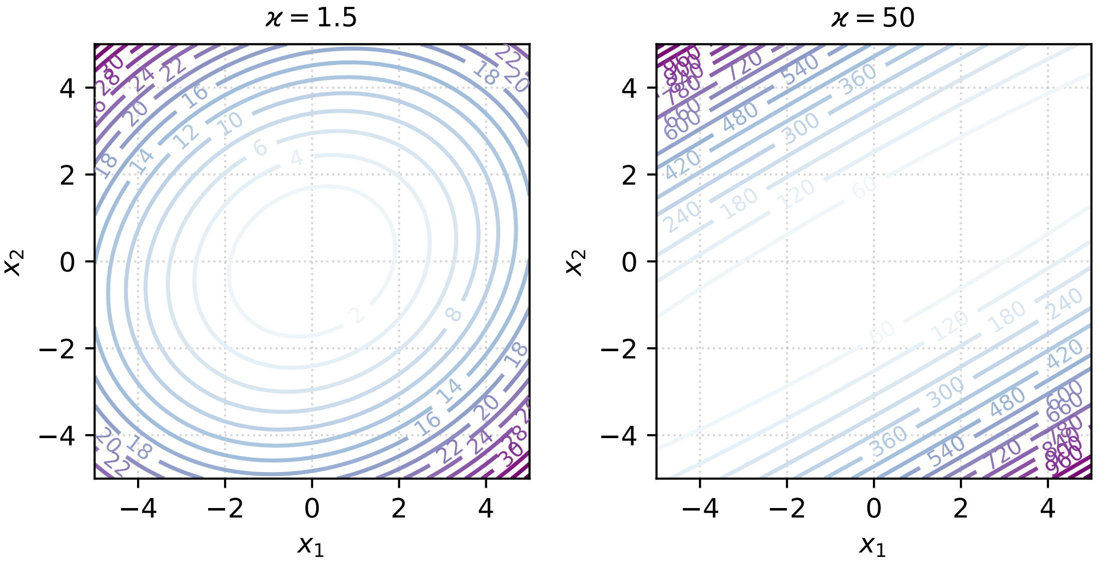
$$(A+\lambda I)^{-1} = Q(\Lambda+\lambda I)^{-1}Q^T$$

$$\operatorname{tr}\left((A+\lambda I)^{-1}A\right) = \operatorname{tr}\left((\Lambda+\lambda I)^{-1}\Lambda\right) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\lambda_i}{\lambda_i+\lambda}$$

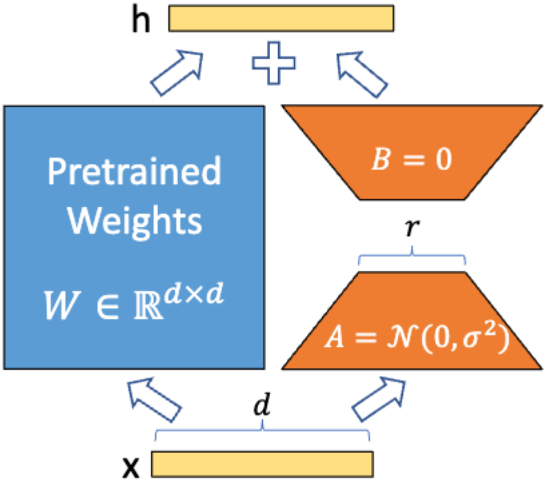
Шары в разных нормах



Число обусловленности (геометрическая интерпретация)



LoRA: Low-Rank Adaptation



Автоматическое дифференцирование (Лекция 2)

Градиент, гессиан, якобиан

Градиент $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$:

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^T$$

Градиент, гессиан, якобиан

Градиент $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$:

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^T$$

Гессиан:

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

Якобиан $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$:

$$J_f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Градиент, гессиан, якобиан

Градиент $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$:

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^T$$

Гессиан:

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

Якобиан $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$:

$$J_f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Цепное правило:

$$J_{f \circ g}(x) = J_f(g(x)) \cdot J_g(x)$$

Аппроксимации Тейлора

Первый порядок (линейное приближение вблизи x_0):

$$f_{x_0}^I(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T(x - x_0)$$

Аппроксимации Тейлора

Первый порядок (линейное приближение вблизи x_0):

$$f_{x_0}^I(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T(x - x_0)$$

Второй порядок (квадратичное приближение вблизи x_0):

$$f_{x_0}^{II}(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T(x - x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T\nabla^2 f(x_0)(x - x_0)$$

Задача (градиент и гессиан)

Рассмотрим квадратичную функцию $f(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 4x_2^2)$, $x \in \mathbb{R}^2$.

1) Найдите градиент и гессиан $\nabla^2 f(x)$.

Задача (градиент и гессиан)

Рассмотрим квадратичную функцию $f(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 4x_2^2)$, $x \in \mathbb{R}^2$.

1) Найдите градиент и гессиан $\nabla^2 f(x)$.
2) Найдите константу сильной выпуклости μ и константу гладкости L.

Задача (градиент и гессиан)

Рассмотрим квадратичную функцию $f(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 4x_2^2)$, $x \in \mathbb{R}^2$.

1) Найдите градиент и гессиан $\nabla^2 f(x)$.
2) Найдите константу сильной выпуклости μ и константу гладкости L.

Задача (градиент и гессиан)

Рассмотрим квадратичную функцию $f(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 4x_2^2)$, $x \in \mathbb{R}^2$.

1) Найдите градиент и гессиан $\nabla^2 f(x)$.
2) Найдите константу сильной выпуклости μ и константу гладкости L.

Решение: $\nabla f(x) = (x_1, 4x_2)^T$, $\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$

Задача (градиент и гессиан)

Рассмотрим квадратичную функцию $f(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 4x_2^2)$, $x \in \mathbb{R}^2$.

1) Найдите градиент и гессиан $\nabla^2 f(x)$.
2) Найдите константу сильной выпуклости μ и константу гладкости L.

Решение: $\nabla f(x) = (x_1, 4x_2)^T$, $\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$

Собственные числа гессиана: 1 и 4. Следовательно, $\mu = 1$, $L = 4$.

Forward и Backward mode AD

Forward mode (прямой проход):

- Вычисляет $J_f \cdot v$ за один проход

Backward mode (обратный проход):

Forward и Backward mode AD

Forward mode (прямой проход):

- Вычисляет $J_f \cdot v$ за один проход
- Эффективен когда $n \ll m$ (мало входов)

Backward mode (обратный проход):

Forward и Backward mode AD

Forward mode (прямой проход):

- Вычисляет $J_f \cdot v$ за один проход
- Эффективен когда $n \ll m$ (мало входов)
- Используется в JVP (Jacobian-vector product)

Backward mode (обратный проход):

Forward и Backward mode AD

Forward mode (прямой проход):

- Вычисляет $J_f \cdot v$ за один проход
- Эффективен когда $n \ll m$ (мало входов)
- Используется в JVP (Jacobian-vector product)

Backward mode (обратный проход):

- Вычисляет $v^T \cdot J_f$ за один проход

Forward и Backward mode AD

Forward mode (прямой проход):

- Вычисляет $J_f \cdot v$ за один проход
- Эффективен когда $n \ll m$ (мало входов)
- Используется в JVP (Jacobian-vector product)

Backward mode (обратный проход):

- Вычисляет $v^T \cdot J_f$ за один проход
- Эффективен когда $n \gg m$ (много входов)

Forward и Backward mode AD

Forward mode (прямой проход):

- Вычисляет $J_f \cdot v$ за один проход
- Эффективен когда $n \ll m$ (мало входов)
- Используется в JVP (Jacobian-vector product)

Backward mode (обратный проход):

- Вычисляет $v^T \cdot J_f$ за один проход
- Эффективен когда $n \gg m$ (много входов)
- Используется в VJP (vector-Jacobian product)

Forward и Backward mode AD

Forward mode (прямой проход):

- Вычисляет $J_f \cdot v$ за один проход
- Эффективен когда $n \ll m$ (мало входов)
- Используется в JVP (Jacobian-vector product)

Backward mode (обратный проход):

- Вычисляет $v^T \cdot J_f$ за один проход
- Эффективен когда $n \gg m$ (много входов)
- Используется в VJP (vector-Jacobian product)
- **Backpropagation** в нейросетях!

Forward и Backward mode AD

Forward mode (прямой проход):

- Вычисляет $J_f \cdot v$ за один проход
- Эффективен когда $n \ll m$ (мало входов)
- Используется в JVP (Jacobian-vector product)

Backward mode (обратный проход):

- Вычисляет $v^T \cdot J_f$ за один проход
- Эффективен когда $n \gg m$ (много входов)
- Используется в VJP (vector-Jacobian product)
- **Backpropagation** в нейросетях!

Forward и Backward mode AD

Forward mode (прямой проход):

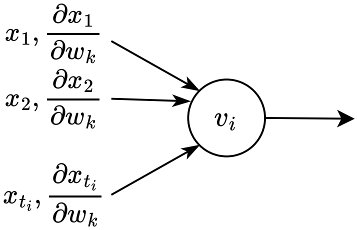
- Вычисляет $J_f \cdot v$ за один проход
- Эффективен когда $n \ll m$ (мало входов)
- Используется в JVP (Jacobian-vector product)

Backward mode (обратный проход):

- Вычисляет $v^T \cdot J_f$ за один проход
- Эффективен когда $n \gg m$ (много входов)
- Используется в VJP (vector-Jacobian product)
- **Backpropagation** в нейросетях!

Для $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ (типичная функция потерь): backward mode вычисляет полный градиент за $O(1)$ проходов, forward mode — за $O(n)$ проходов.

Forward mode AD

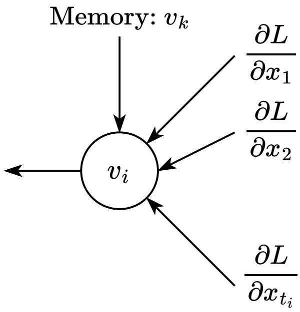


$$
v_i = v_i(x_1, \ldots, x_{t_i})
$$

$$
\frac{\partial v_i}{\partial w_k} = \sum_{j=1}^{t_i} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial w_k}
$$

Backward mode AD (Backpropagation)

$$\frac{\partial L}{\partial v_i} = \sum_{j=1}^{t_i} \frac{\partial L}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial v_i}$$



Выпуклость (Лекция 3)

Выпуклые множества и функции

Выпуклое множество: S выпукло, если

$$\forall x, y \in S, \alpha \in [0,1] : \alpha x + (1-\alpha)y \in S$$

Выпуклые множества и функции

Выпуклое множество: S выпукло, если

$$\forall x, y \in S, \alpha \in [0,1] : \alpha x + (1-\alpha) y \in S$$

Примеры:

- Полупространство $\{x : a^T x \leq b\}$

Выпуклая функция: f выпукла, если dom f выпуклая и

$$f(\alpha x + (1-\alpha) y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$$

Выпуклые множества и функции

Выпуклое множество: S выпукло, если

$$\forall x, y \in S, \alpha \in [0,1] : \alpha x + (1-\alpha)y \in S$$

Примеры:

- Полупространство $\{x : a^T x \leq b\}$
- Шар $\{x : \|x - c\| \leq r\}$

Выпуклая функция: f выпукла, если dom f выпуклая и

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$$

Выпуклые множества и функции

Выпуклое множество: S выпукло, если

$$\forall x, y \in S, \alpha \in [0,1] : \alpha x + (1-\alpha)y \in S$$

Примеры:

- Полупространство $\{x : a^T x \leq b\}$
- Шар $\{x : \|x - c\| \leq r\}$
- Конус $\{x : \|x\| \leq t\}$

Выпуклая функция: f выпукла, если $\mathrm{dom}\ f$ выпуклая и

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$$

Выпуклые множества и функции

Выпуклое множество: S выпукло, если

$$\forall x, y \in S, \alpha \in [0,1] : \alpha x + (1-\alpha)y \in S$$

Примеры:

- Полупространство $\{x : a^T x \leq b\}$
- Шар $\{x : \|x - c\| \leq r\}$
- Конус $\{x : \|x\| \leq t\}$

Выпуклая функция: f выпукла, если dom f выпуклая и

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$$

Выпуклые множества и функции

Выпуклое множество: S выпукло, если

$$\forall x, y \in S, \alpha \in [0,1] : \alpha x + (1-\alpha)y \in S$$

Примеры:

- Полупространство $\{x : a^T x \leq b\}$
- Шар $\{x : \|x - c\| \leq r\}$
- Конус $\{x : \|x\| \leq t\}$

Выпуклая функция: f выпукла, если dom f выпуклая и

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$$

Примеры:

- $f(x) = \|x\|_p$ для $p \geq 1$

Выпуклые множества и функции

Выпуклое множество: S выпукло, если

$$\forall x, y \in S, \alpha \in [0,1] : \alpha x + (1-\alpha)y \in S$$

Примеры:

- Полупространство $\{x : a^T x \leq b\}$
- Шар $\{x : \|x - c\| \leq r\}$
- Конус $\{x : \|x\| \leq t\}$

Выпуклая функция: f выпукла, если dom f выпуклая и

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$$

Примеры:

- $f(x) = \|x\|_p$ для $p \geq 1$
- $f(x) = e^x$, $f(x) = -\log x$

Выпуклые множества и функции

Выпуклое множество: S выпукло, если

$$\forall x, y \in S, \alpha \in [0,1] : \alpha x + (1-\alpha) y \in S$$

Примеры:

- Полупространство $\{x : a^T x \leq b\}$
- Шар $\{x : \|x - c\| \leq r\}$
- Конус $\{x : \|x\| \leq t\}$

Выпуклая функция: f выпукла, если dom f выпуклая и

$$f(\alpha x + (1-\alpha) y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$$

Примеры:

- $f(x) = \|x\|_p$ для $p \geq 1$
- $f(x) = e^x$, $f(x) = -\log x$
- $f(x) = x^T A x$ при $A \succeq 0$

Критерии выпуклости

Первый дифференциальный критерий (для дифференцируемых):

$$f(y) \geq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle \quad \forall x, y$$

Критерии выпуклости

Первый дифференциальный критерий (для дифференцируемых):

$$f(y) \geq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle \quad \forall x, y$$

Второй дифференциальный критерий (для дважды дифференцируемых):

$$\nabla^2 f(x) \succeq 0 \quad \forall x$$

Критерии выпуклости

Первый дифференциальный критерий (для дифференцируемых):

$$f(y) \geq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle \quad \forall x, y$$

Второй дифференциальный критерий (для дважды дифференцируемых):

$$\nabla^2 f(x) \succeq 0 \quad \forall x$$

Сильная выпуклость (μ-strong convexity):

$$f(y) \geq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{\mu}{2}\|y - x\|^2$$

или $\nabla^2 f(x) \succeq \mu I$ для всех x.

Задача (доказательство выпуклости)

Докажите, что функция LASSO выпуклая:

$$
f(x) = \|Ax - b\|_2^2 + \lambda \|x\|_1, \quad \lambda > 0
$$

Задача (доказательство выпуклости)

Докажите, что функция LASSO выпуклая:

$$f(x) = \|Ax - b\|_2^2 + \lambda\|x\|_1, \quad \lambda > 0$$

Решение:

- $f_1(x) = \|Ax - b\|_2^2$ — выпуклая, т.к. $\nabla^2 f_1(x) = 2A^T A \succeq 0$

Задача (доказательство выпуклости)

Докажите, что функция LASSO выпуклая:

$$f(x) = \|Ax - b\|_2^2 + \lambda \|x\|_1, \quad \lambda > 0$$

Решение:

- $f_1(x) = \|Ax - b\|_2^2$ — выпуклая, т.к. $\nabla^2 f_1(x) = 2A^T A \succeq 0$

Задача (доказательство выпуклости)

Докажите, что функция LASSO выпуклая:

$$f(x) = \|Ax - b\|_2^2 + \lambda \|x\|_1, \quad \lambda > 0$$

Решение:

- $f_1(x) = \|Ax - b\|_2^2$ — выпуклая, т.к. $\nabla^2 f_1(x) = 2A^T A \succeq 0$
- $f_2(x) = \lambda \|x\|_1$ — выпуклая как норма, умноженная на $\lambda > 0$

Задача (доказательство выпуклости)

Докажите, что функция LASSO выпуклая:

$$f(x) = \|Ax - b\|_2^2 + \lambda\|x\|_1, \quad \lambda > 0$$

Решение:

- $f_1(x) = \|Ax - b\|_2^2$ — выпуклая, т.к. $\nabla^2 f_1(x) = 2A^T A \succeq 0$
- $f_2(x) = \lambda\|x\|_1$ — выпуклая как норма, умноженная на $\lambda > 0$

Задача (доказательство выпуклости)

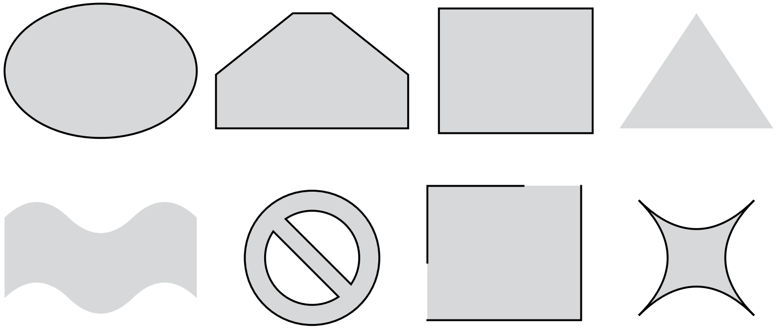
Докажите, что функция LASSO выпуклая:

$$f(x) = \|Ax - b\|_2^2 + \lambda\|x\|_1, \quad \lambda > 0$$

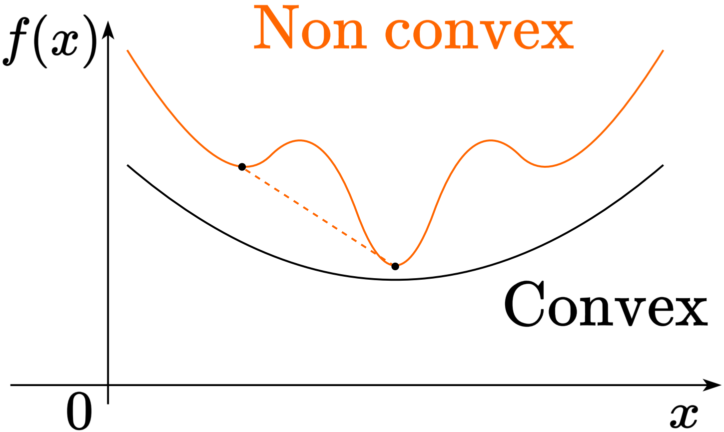
Решение:

- $f_1(x) = \|Ax - b\|_2^2$ — выпуклая, т.к. $\nabla^2 f_1(x) = 2A^T A \succeq 0$
- $f_2(x) = \lambda\|x\|_1$ — выпуклая как норма, умноженная на $\lambda > 0$
- $f(x) = f_1(x) + f_2(x)$ — выпукла как сумма выпуклых функций.

Выпуклые и невыпуклые множества



Выпуклая и невыпуклая функции



Сопряжённые множества и функции (Лекция 4)

Двойственный конус

Двойственный конус:

$$K^* = \{y : \langle x, y \rangle \geq 0 \ \forall x \in K\}$$

Двойственный конус

Двойственный конус:

$$K^* = \{y : \langle x, y \rangle \geq 0 \ \forall x \in K\}$$

Примеры:

- $(K^*)^* = K$ для замкнутого выпуклого K

Нормальный конус:

$$N_S(x) = \{g : \langle g, y - x \rangle \leq 0 \ \forall y \in S\}$$

Двойственный конус

Двойственный конус:

$$K^* = \{y : \langle x, y\rangle \geq 0 \ \forall x \in K\}$$

Примеры:

- $(K^*)^* = K$ для замкнутого выпуклого K
- $(\mathbb{R}^n_+)^* = \mathbb{R}^n_+$ (самодвойственный)

Нормальный конус:

$$N_S(x) = \{g : \langle g, y - x\rangle \leq 0 \ \forall y \in S\}$$

Двойственный конус

Двойственный конус:

$$K^* = \{y : \langle x, y \rangle \geq 0 \ \forall x \in K\}$$

Примеры:

- $(K^*)^* = K$ для замкнутого выпуклого K
- $(\mathbb{R}^n_+)^* = \mathbb{R}^n_+$ (самодвойственный)
- Конус Лоренца самодвойственный

Нормальный конус:

$$N_S(x) = \{g : \langle g, y - x \rangle \leq 0 \ \forall y \in S\}$$

Двойственный конус

Двойственный конус:

$$K^* = \{y : \langle x, y \rangle \geq 0 \ \forall x \in K\}$$

Примеры:

- $(K^*)^* = K$ для замкнутого выпуклого K
- $(\mathbb{R}^n_+)^* = \mathbb{R}^n_+$ (самодвойственный)
- Конус Лоренца самодвойственный

Нормальный конус:

$$N_S(x) = \{g : \langle g, y - x \rangle \leq 0 \ \forall y \in S\}$$

Двойственный конус

Двойственный конус:

$$K^* = \{y : \langle x, y\rangle \geq 0 \ \forall x \in K\}$$

Примеры:

- $(K^*)^* = K$ для замкнутого выпуклого K
- $(\mathbb{R}^n_+)^* = \mathbb{R}^n_+$ (самодвойственный)
- Конус Лоренца самодвойственный

Нормальный конус:

$$N_S(x) = \{g : \langle g, y - x\rangle \leq 0 \ \forall y \in S\}$$

Для выпуклого S и $x^* \in S$:

$$x^* \text{ — минимум } f \text{ на } S \Leftrightarrow -\nabla f(x^*) \in N_S(x^*)$$

Сопряжённая функция (преобразование Лежандра)

$$f^*(y) = \sup_x \left(\langle y, x\rangle - f(x)\right)$$

Сопряжённая функция (преобразование Лежандра)

$$f^*(y) = \sup_x \left(\langle y, x \rangle - f(x) \right)$$

Свойства:

- f^* всегда выпуклая (даже если f не выпуклая)

Сопряжённая функция (преобразование Лежандра)

$$f^*(y) = \sup_x \left(\langle y, x\rangle - f(x)\right)$$

Свойства:

- f^* всегда выпуклая (даже если f не выпуклая)
- $(f^*)^* = f$ для выпуклых замкнутых f

Сопряжённая функция (преобразование Лежандра)

$$f^*(y) = \sup_x \left(\langle y, x \rangle - f(x) \right)$$

Свойства:

- f^* всегда выпуклая (даже если f не выпуклая)
- $(f^*)^* = f$ для выпуклых замкнутых f
- Неравенство Юнга-Фенхеля: $f(x) + f^*(y) \geq \langle x, y \rangle$

Сопряжённая функция (преобразование Лежандра)

$$f^*(y) = \sup_x (\langle y, x\rangle - f(x))$$

Свойства:

- f^* всегда выпуклая (даже если f не выпуклая)
- $(f^*)^* = f$ для выпуклых замкнутых f
- Неравенство Юнга-Фенхеля: $f(x) + f^*(y) \geq \langle x, y\rangle$

Сопряжённая функция (преобразование Лежандра)

$$f^*(y) = \sup_x \left(\langle y, x \rangle - f(x) \right)$$

Свойства:

- f^* всегда выпуклая (даже если f не выпуклая)
- $(f^*)^* = f$ для выпуклых замкнутых f
- Неравенство Юнга-Фенхеля: $f(x) + f^*(y) \geq \langle x, y \rangle$

Примеры:

- $f(x) = \frac{1}{2}\|x\|_2^2 \Rightarrow f^*(y) = \frac{1}{2}\|y\|_2^2$

Сопряжённая функция (преобразование Лежандра)

$$f^*(y) = \sup_x \left(\langle y, x\rangle - f(x)\right)$$

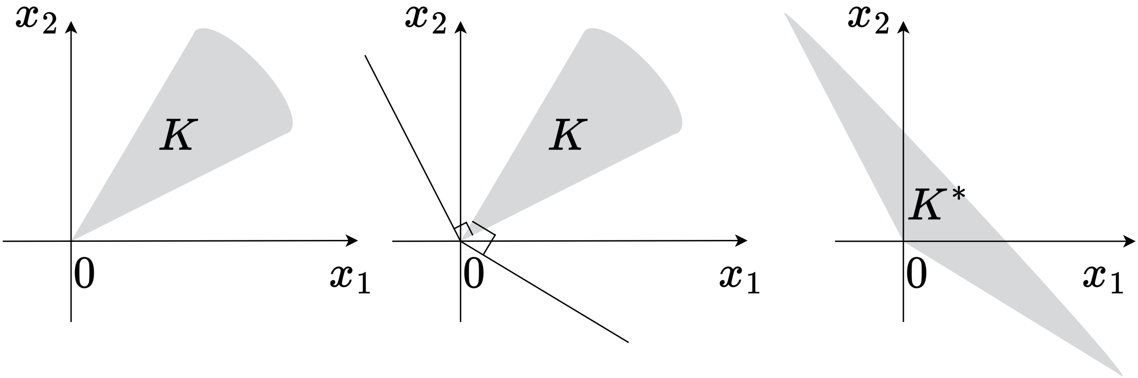
Свойства:

- f^* всегда выпуклая (даже если f не выпуклая)
- $(f^*)^* = f$ для выпуклых замкнутых f
- Неравенство Юнга-Фенхеля: $f(x) + f^*(y) \geq \langle x, y\rangle$

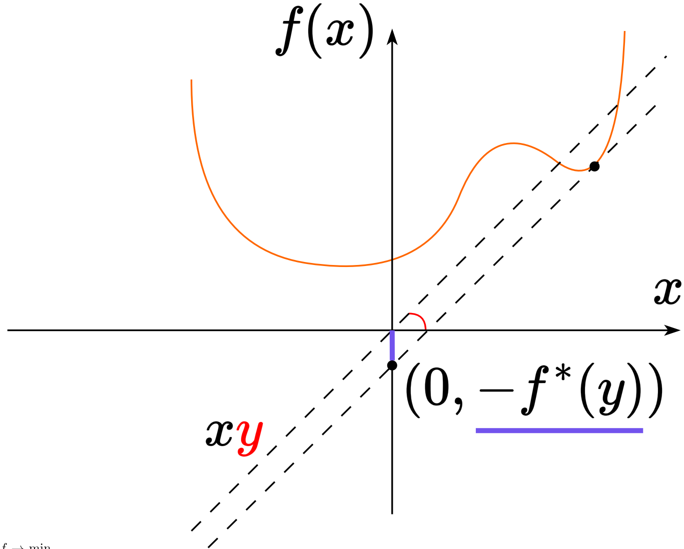
Примеры:

- $f(x) = \frac{1}{2}\|x\|_2^2 \Rightarrow f^*(y) = \frac{1}{2}\|y\|_2^2$
- $f(x) = \|x\|_p \Rightarrow f^*(y) = \mathbb{I}_{\|y\|_q \leq 1}$, где $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$

Двойственные конусы



Сопряжённая функция (геометрическая интерпретация)



Субградиент (Лекция 5)

Субдифференциал

Для выпуклой f, **субградиент** в точке x:

$$g \in \partial f(x) \Leftrightarrow f(y) \geq f(x) + \langle g, y - x \rangle \quad \forall y$$

Субдифференциал

Для выпуклой f, **субградиент** в точке x:

$$g \in \partial f(x) \Leftrightarrow f(y) \geq f(x) + \langle g, y - x \rangle \quad \forall y$$

Субдифференциал $\partial f(x)$ — множество всех субградиентов.

Субдифференциал

Для выпуклой f, **субградиент** в точке x:

$$g \in \partial f(x) \Leftrightarrow f(y) \geq f(x) + \langle g, y - x \rangle \quad \forall y$$

Субдифференциал $\partial f(x)$ — множество всех субградиентов.

Свойства:

- Если f дифференцируема в x, то $\partial f(x) = \{\nabla f(x)\}$

Субдифференциал

Для выпуклой f, **субградиент** в точке x:

$$g \in \partial f(x) \Leftrightarrow f(y) \geq f(x) + \langle g, y - x \rangle \quad \forall y$$

Субдифференциал $\partial f(x)$ — множество всех субградиентов.

Свойства:

- Если f дифференцируема в x, то $\partial f(x) = \{\nabla f(x)\}$
- $\partial f(x)$ — выпуклое замкнутое множество

Субдифференциал

Для выпуклой f, **субградиент** в точке x:

$$g \in \partial f(x) \Leftrightarrow f(y) \geq f(x) + \langle g, y - x \rangle \quad \forall y$$

Субдифференциал $\partial f(x)$ — множество всех субградиентов.

Свойства:

- Если f дифференцируема в x, то $\partial f(x) = \{\nabla f(x)\}$
- $\partial f(x)$ — выпуклое замкнутое множество
- $0 \in \partial f(x^*) \Leftrightarrow x^*$ — глобальный минимум

Правила вычисления субдифференциала

Сумма: $\partial(f + g)(x) = \partial f(x) + \partial g(x)$

Правила вычисления субдифференциала

Сумма: $\partial(f+g)(x) = \partial f(x) + \partial g(x)$

Скалярное умножение: $\partial(\alpha f)(x) = \alpha \cdot \partial f(x)$ при $\alpha > 0$

Правила вычисления субдифференциала

Сумма: $\partial(f+g)(x) = \partial f(x) + \partial g(x)$

Скалярное умножение: $\partial(\alpha f)(x) = \alpha \cdot \partial f(x)$ при $\alpha > 0$

Цепное правило (аффинная композиция):

$$\partial(f(Ax+b))(x) = A^T \partial f(Ax+b)$$

Правила вычисления субдифференциала

Сумма: $\partial(f+g)(x) = \partial f(x) + \partial g(x)$

Скалярное умножение: $\partial(\alpha f)(x) = \alpha \cdot \partial f(x)$ при $\alpha > 0$

Цепное правило (аффинная композиция):

$$\partial(f(Ax+b))(x) = A^T \partial f(Ax+b)$$

Пример: $f(x) = |x|$

$$\partial f(x) = \begin{cases} \{1\}, & x > 0 \\ [-1, 1], & x = 0 \\ \{-1\}, & x < 0 \end{cases}$$

Задача (субдифференциал)

Рассмотрим функцию $f(x) = \max(e^{x_1}, 1) + 2|x_2|$, $x \in \mathbb{R}^2$.

1) Найдите $\partial f(x)$ в точке $x = (1, -2)$.

Задача (субдифференциал)

Рассмотрим функцию $f(x) = \max(e^{x_1}, 1) + 2|x_2|$, $x \in \mathbb{R}^2$.

1) Найдите $\partial f(x)$ в точке $x = (1, -2)$.
2) Найдите $\partial f(x)$ в точке $x = (0, 0)$.

Задача (субдифференциал)

Рассмотрим функцию $f(x) = \max(e^{x_1}, 1) + 2|x_2|$, $x \in \mathbb{R}^2$.

1) Найдите $\partial f(x)$ в точке $x = (1, -2)$.
2) Найдите $\partial f(x)$ в точке $x = (0, 0)$.

Задача (субдифференциал)

Рассмотрим функцию $f(x) = \max(e^{x_1}, 1) + 2|x_2|$, $x \in \mathbb{R}^2$.

1) Найдите $\partial f(x)$ в точке $x = (1, -2)$.
2) Найдите $\partial f(x)$ в точке $x = (0, 0)$.

Решение: 1) В точке $(1, -2)$: $e^1 > 1$, поэтому $\partial_1 f = \{e\}$; $x_2 < 0$, поэтому $\partial_2 f = \{-2\}$.

$$\partial f(1, -2) = \{(e, -2)^T\}$$

Задача (субдифференциал)

Рассмотрим функцию $f(x) = \max(e^{x_1}, 1) + 2|x_2|$, $x \in \mathbb{R}^2$.

1) Найдите $\partial f(x)$ в точке $x = (1, -2)$.
2) Найдите $\partial f(x)$ в точке $x = (0, 0)$.

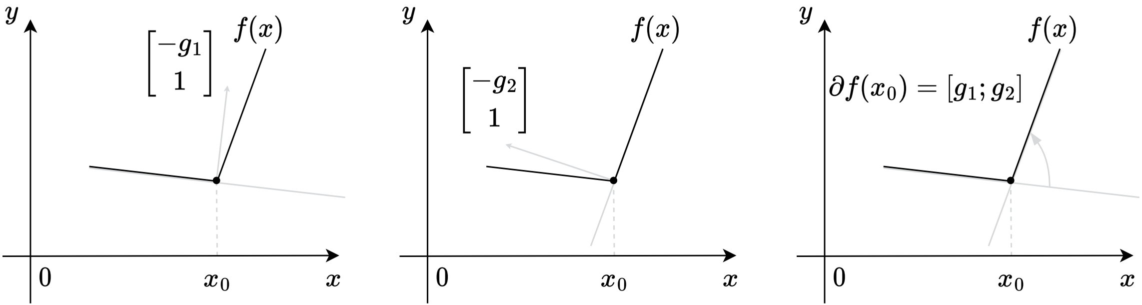
Решение: 1) В точке $(1, -2)$: $e^1 > 1$, поэтому $\partial_1 f = \{e\}$; $x_2 < 0$, поэтому $\partial_2 f = \{-2\}$.

$$\partial f(1, -2) = \{(e, -2)^T\}$$

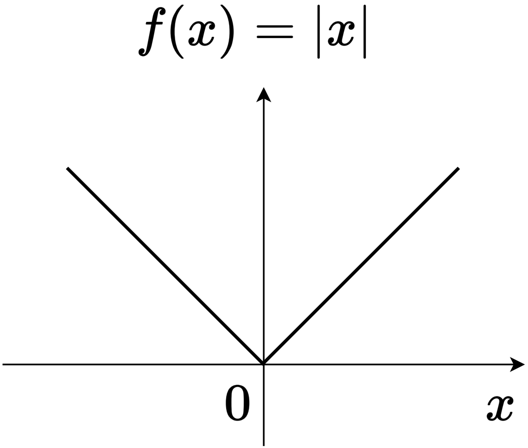
2) В точке $(0, 0)$: $e^0 = 1$, обе функции активны в $\max$, поэтому $\partial_1 f = [0, 1]$; $x_2 = 0$, поэтому $\partial_2 f = [-2, 2]$.

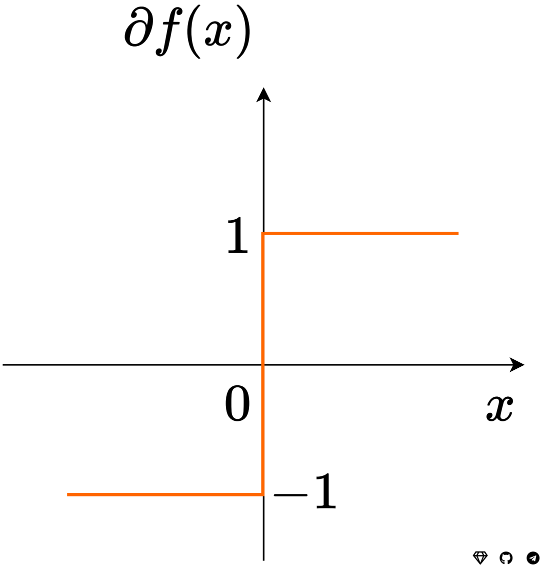
$$\partial f(0, 0) = [0, 1] \times [-2, 2]$$

Субдифференциал — множество всех субградиентов



Субдифференциал $|x|$





Условия оптимальности, ККТ (Лекция 6)

Лагранжиан и условия ККТ

Рассмотрим задачу:

$$
\begin{aligned}
&\min_x f(x) \\
\text{s.t. } & g_i(x) \leq 0, \; i = 1, \ldots, m \\
& h_j(x) = 0, \; j = 1, \ldots, p
\end{aligned}
$$

Лагранжиан и условия ККТ

Рассмотрим задачу:

$$
\begin{split}
& \min_x f(x) \\
\text{s.t. } & g_i(x) \leq 0, \; i = 1, \ldots, m \\
& h_j(x) = 0, \; j = 1, \ldots, p
\end{split}
$$

Лагранжиан:

$$
L(x, \lambda, \nu) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^p \nu_j h_j(x)
$$

Условия Каруша-Куна-Таккера (ККТ)

Необходимые условия оптимальности для x^*:

Условия Каруша-Куна-Таккера (KKT)

Необходимые условия оптимальности для x^*:

1. **Стационарность:** $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$

Условия Каруша-Куна-Таккера (KKT)

Необходимые условия оптимальности для x^*:

1. **Стационарность:** $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$

Условия Каруша-Куна-Таккера (ККТ)

Необходимые условия оптимальности для x^*:

1. **Стационарность:** $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
2. **Прямая допустимость:** $g_i(x^*) \leq 0$, $h_j(x^*) = 0$

Условия Каруша-Куна-Таккера (ККТ)

Необходимые условия оптимальности для x^*:

1. **Стационарность:** $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
2. **Прямая допустимость:** $g_i(x^*) \leq 0$, $h_j(x^*) = 0$

Условия Каруша-Куна-Таккера (ККТ)

Необходимые условия оптимальности для x^*:

1. **Стационарность:** $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
2. **Прямая допустимость:** $g_i(x^*) \leq 0$, $h_j(x^*) = 0$
3. **Двойственная допустимость:** $\lambda_i^* \geq 0$

Условия Каруша-Куна-Таккера (ККТ)

Необходимые условия оптимальности для x^*:

1. **Стационарность:** $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
2. **Прямая допустимость:** $g_i(x^*) \leq 0$, $h_j(x^*) = 0$
3. **Двойственная допустимость:** $\lambda_i^* \geq 0$

Условия Каруша-Куна-Таккера (ККТ)

Необходимые условия оптимальности для x^*:

1. **Стационарность:** $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
2. **Прямая допустимость:** $g_i(x^*) \leq 0$, $h_j(x^*) = 0$
3. **Двойственная допустимость:** $\lambda_i^* \geq 0$
4. **Дополняющая нежёсткость:** $\lambda_i^* g_i(x^*) = 0$

Условия Каруша-Куна-Таккера (ККТ)

Необходимые условия оптимальности для x^*:

1. **Стационарность:** $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
2. **Прямая допустимость:** $g_i(x^*) \leq 0$, $h_j(x^*) = 0$
3. **Двойственная допустимость:** $\lambda_i^* \geq 0$
4. **Дополняющая нежёсткость:** $\lambda_i^* g_i(x^*) = 0$

Условия Каруша-Куна-Таккера (ККТ)

Необходимые условия оптимальности для x^*:

1. **Стационарность:** $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
2. **Прямая допустимость:** $g_i(x^*) \leq 0$, $h_j(x^*) = 0$
3. **Двойственная допустимость:** $\lambda_i^* \geq 0$
4. **Дополняющая нежёсткость:** $\lambda_i^* g_i(x^*) = 0$

Для выпуклых задач ККТ условия **достаточны** при выполнении условия регулярности (например, условие Слейтера).

Задача (условия ККТ)

Найдите минимум функции:

$$f(x,y) = \frac{1}{2}x^TAx + b^Tx + \frac{1}{2}\|y\|_2^2 \to \min_{x+y=c}$$

где $A \succ 0$.

Задача (условия ККТ)

Найдите минимум функции:

$$f(x,y) = \frac{1}{2}x^TAx + b^Tx + \frac{1}{2}\|y\|_2^2 \to \min_{x+y=c}$$

где $A \succ 0$.

Решение: Лагранжиан: $L = \frac{1}{2}x^TAx + b^Tx + \frac{1}{2}y^Ty + \nu^T(x+y-c)$

Задача (условия ККТ)

Найдите минимум функции:

$$f(x,y) = \frac{1}{2}x^TAx + b^Tx + \frac{1}{2}\|y\|_2^2 \to \min_{x+y=c}$$

где $A \succ 0$.

Решение: Лагранжиан: $L = \frac{1}{2}x^TAx + b^Tx + \frac{1}{2}y^Ty + \nu^T(x+y-c)$

Условия оптимальности: $Ax + b + \nu = 0$, $y + \nu = 0$, $x + y = c$

Задача (условия ККТ)

Найдите минимум функции:

$$
f(x,y) = \frac{1}{2}x^TAx + b^Tx + \frac{1}{2}\|y\|_2^2 \to \min_{x+y=c}
$$

где $A \succ 0$.

Решение: Лагранжиан: $L = \frac{1}{2}x^TAx + b^Tx + \frac{1}{2}y^Ty + \nu^T(x+y-c)$

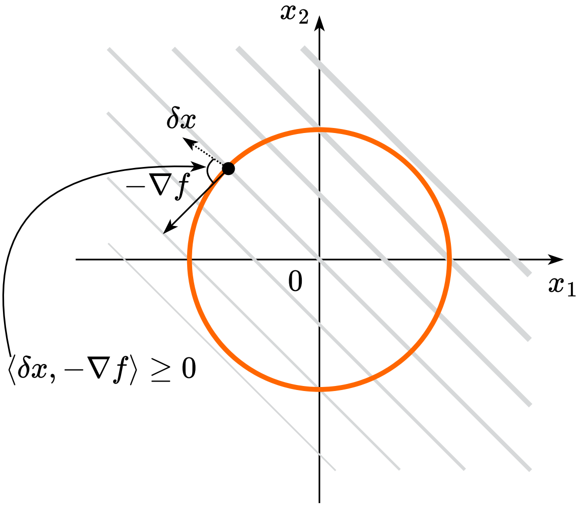
Условия оптимальности: $Ax + b + \nu = 0$, $y + \nu = 0$, $x + y = c$

Из $y = -\nu$ и $x = -A^{-1}(b+\nu)$, подставляя в ограничение:

$$
\nu = -(A^{-1} + I)^{-1}(c + A^{-1}b)
$$

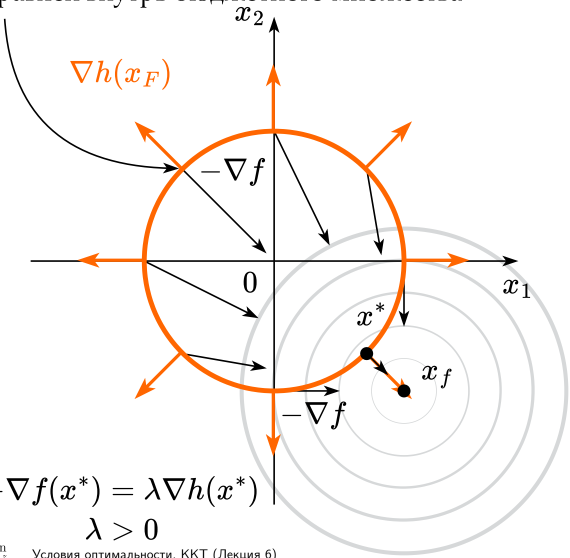
ККТ для задачи с ограничением-равенством

Мы хотим: $f(x_F + \delta x) \leq f(x_F)$



KKT для задачи с ограничением-неравенством

Не является локальным минимумом, т.к. $-\nabla f(x)$ направлен внутрь бюджетного множества



$$-\nabla f(x^*) = \lambda \nabla h(x^*)$$
$$\lambda > 0$$

Двойственность (Лекция 7)

Двойственная задача Лагранжа

Двойственная функция:

$$g(\lambda, \nu) = \inf_x L(x, \lambda, \nu)$$

Двойственная задача Лагранжа

Двойственная функция:

$$g(\lambda, \nu) = \inf_x L(x, \lambda, \nu)$$

Двойственная задача:

$$\max_{\lambda, \nu} g(\lambda, \nu) \quad \text{s.t.} \quad \lambda \geq 0$$

Двойственная задача Лагранжа

Двойственная функция:

$$g(\lambda, \nu) = \inf_x L(x, \lambda, \nu)$$

Двойственная задача:

$$\max_{\lambda,\nu} g(\lambda, \nu) \quad \text{s.t.} \quad \lambda \geq 0$$

Слабая двойственность: $d^* \leq p^*$ (всегда)

Двойственная задача Лагранжа

Двойственная функция:

$$g(\lambda, \nu) = \inf_x L(x, \lambda, \nu)$$

Двойственная задача:

$$\max_{\lambda,\nu} g(\lambda, \nu) \quad \text{s.t.} \quad \lambda \geq 0$$

Слабая двойственность: $d^* \leq p^*$ (всегда)

Сильная двойственность: $d^* = p^*$ (при условиях регулярности)

Условие Слейтера

Условие Слейтера: Существует $\tilde{x}$ такое, что:

- $g_i(\tilde{x}) < 0$ для всех i (строгое неравенство)

Условие Слейтера

Условие Слейтера: Существует $\tilde{x}$ такое, что:

- $g_i(\tilde{x}) < 0$ для всех i (строгое неравенство)
- $h_j(\tilde{x}) = 0$ для всех j

Условие Слейтера

Условие Слейтера: Существует $\tilde{x}$ такое, что:

- $g_i(\tilde{x}) < 0$ для всех i (строгое неравенство)
- $h_j(\tilde{x}) = 0$ для всех j

Условие Слейтера

Условие Слейтера: Существует $\tilde{x}$ такое, что:

- $g_i(\tilde{x}) < 0$ для всех i (строгое неравенство)
- $h_j(\tilde{x}) = 0$ для всех j

Теорема: Для выпуклой задачи при выполнении условия Слейтера выполняется сильная двойственность.

Условие Слейтера

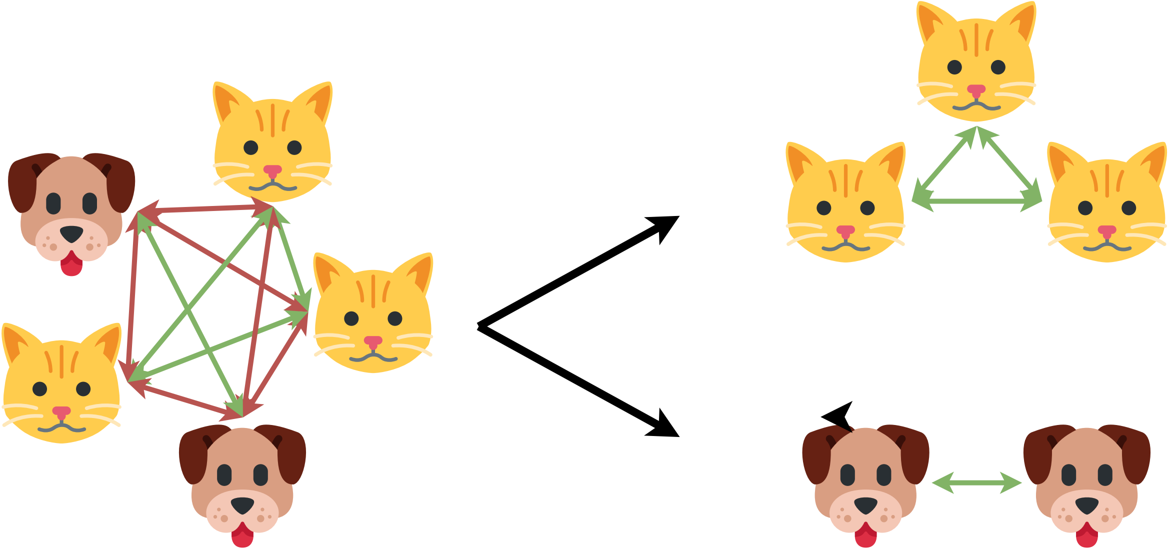
Условие Слейтера: Существует $\tilde{x}$ такое, что:

- $g_i(\tilde{x}) < 0$ для всех i (строгое неравенство)
- $h_j(\tilde{x}) = 0$ для всех j

Теорема: Для выпуклой задачи при выполнении условия Слейтера выполняется сильная двойственность.

Важно: Двойственная функция $g(\lambda, \nu)$ всегда вогнутая, двойственная задача — всегда выпуклая.

Двухстороннее разбиение: сильная двойственность для невыпуклой задачи



Линейное программирование (Лекция 8)

Задача LP

Стандартная форма:

$$
c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax = b, \; x \geq 0
$$

Задача LP

Стандартная форма:

$$c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax = b,\ x \geq 0$$

Каноническая форма:

$$c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax \leq b$$

Задача LP

Стандартная форма:

$$c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax = b,\ x \geq 0$$

Каноническая форма:

$$c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax \leq b$$

Свойства:

- Допустимое множество — полиэдр (выпуклый многогранник)

Задача LP

Стандартная форма:

$$c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax = b,\ x \geq 0$$

Каноническая форма:

$$c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax \leq b$$

Свойства:

- Допустимое множество — полиэдр (выпуклый многогранник)
- Оптимум достигается в вершине полиэдра

Задача LP

Стандартная форма:

$$c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax = b,\ x \geq 0$$

Каноническая форма:

$$c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax \leq b$$

Свойства:

- Допустимое множество — полиэдр (выпуклый многогранник)
- Оптимум достигается в вершине полиэдра
- Решение: симплекс-метод или методы внутренней точки

Симплекс-метод (идея)

1. Начинаем с базисного допустимого решения (вершины)

Симплекс-метод (идея)

1. Начинаем с базисного допустимого решения (вершины)
2. Находим улучшающее направление вдоль ребра

Симплекс-метод (идея)

1. Начинаем с базисного допустимого решения (вершины)
2. Находим улучшающее направление вдоль ребра
3. Переходим к соседней вершине

Симплекс-метод (идея)

1. Начинаем с базисного допустимого решения (вершины)
2. Находим улучшающее направление вдоль ребра
3. Переходим к соседней вершине
4. Повторяем до достижения оптимума

Симплекс-метод (идея)

1. Начинаем с базисного допустимого решения (вершины)
2. Находим улучшающее направление вдоль ребра
3. Переходим к соседней вершине
4. Повторяем до достижения оптимума

Симплекс-метод (идея)

1. Начинаем с базисного допустимого решения (вершины)
2. Находим улучшающее направление вдоль ребра
3. Переходим к соседней вершине
4. Повторяем до достижения оптимума

Сложность:

- В худшем случае экспоненциальная

Симплекс-метод (идея)

1. Начинаем с базисного допустимого решения (вершины)
2. Находим улучшающее направление вдоль ребра
3. Переходим к соседней вершине
4. Повторяем до достижения оптимума

Сложность:

- В худшем случае экспоненциальная
- На практике обычно $O(m)$ итераций

Симплекс-метод (идея)

1. Начинаем с базисного допустимого решения (вершины)
2. Находим улучшающее направление вдоль ребра
3. Переходим к соседней вершине
4. Повторяем до достижения оптимума

Сложность:

- В худшем случае экспоненциальная
- На практике обычно $O(m)$ итераций
- LP разрешима за полиномиальное время (методы внутренней точки)

Двойственность в LP (Лекция 9)

Прямая и двойственная задачи LP

Прямая задача:

$$
c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax \leq b
$$

Прямая и двойственная задачи LP

Прямая задача:

$$c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax \leq b$$

Двойственная задача:

$$b^T y \to \max \quad \text{s.t.} \quad A^T y = c, \; y \geq 0$$

Прямая и двойственная задачи LP

Прямая задача:

$$c^T x \to \min \quad \text{s.t.} \quad Ax \leq b$$

Двойственная задача:

$$b^T y \to \max \quad \text{s.t.} \quad A^T y = c, \; y \geq 0$$

Сильная двойственность для LP: Если прямая задача имеет решение, то двойственная тоже, и $c^T x^* = b^T y^*$.

Теорема о максимальном потоке и минимальном разрезе

Max-flow min-cut: В задаче о максимальном s-t потоке в сети:

$$\text{Максимальный s-t поток} = \text{Минимальная пропускная способность s-t разреза}$$

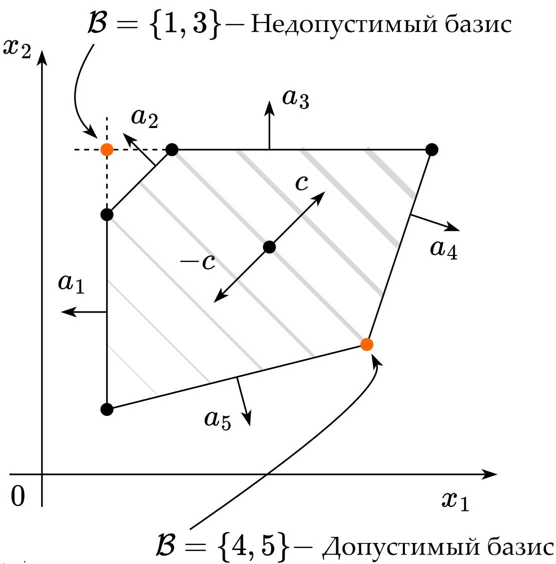
Теорема о максимальном потоке и минимальном разрезе

Max-flow min-cut: В задаче о максимальном s-t потоке в сети:

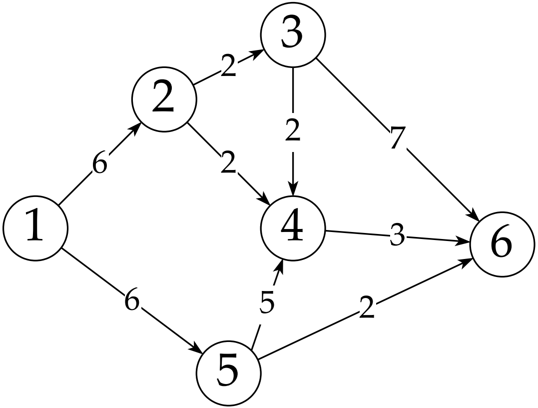
$$\text{Максимальный s-t поток} = \text{Минимальная пропускная способность s-t разреза}$$

Это следствие сильной двойственности LP!

Геометрия линейного программирования



Максимальный поток в сети



Скорость сходимости (Лекция 10)

Классификация скоростей сходимости

Последовательность $\{x_k\}$ сходится к x^* со скоростью:

Классификация скоростей сходимости

Последовательность $\{x_k\}$ сходится к x^* со скоростью:

Сублинейная: $\|x_k - x^*\| \leq O(1/k^\alpha)$, $\alpha > 0$

Классификация скоростей сходимости

Последовательность $\{x_k\}$ сходится к x^* со скоростью:

Сублинейная: $\|x_k - x^*\| \leq O(1/k^\alpha)$, $\alpha > 0$

Линейная (геометрическая): $\|x_{k+1} - x^*\| \leq q\|x_k - x^*\|$, $q \in (0, 1)$

Классификация скоростей сходимости

Последовательность $\{x_k\}$ сходится к x^* со скоростью:

Сублинейная: $\|x_k - x^*\| \leq O(1/k^\alpha)$, $\alpha > 0$

Линейная (геометрическая): $\|x_{k+1} - x^*\| \leq q\|x_k - x^*\|$, $q \in (0, 1)$

Суперлинейная: $\lim_{k \to \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0$

Классификация скоростей сходимости

Последовательность $\{x_k\}$ сходится к x^* со скоростью:

Сублинейная: $\|x_k - x^*\| \leq O(1/k^\alpha)$, $\alpha > 0$

Линейная (геометрическая): $\|x_{k+1} - x^*\| \leq q\|x_k - x^*\|$, $q \in (0, 1)$

Суперлинейная: $\lim_{k\to\infty} \frac{\|x_{k+1}-x^*\|}{\|x_k-x^*\|} = 0$

Квадратичная: $\|x_{k+1} - x^*\| \leq C\|x_k - x^*\|^2$

Одномерный поиск

Методы одномерной оптимизации:

- Дихотомия (бисекция)

Одномерный поиск

Методы одномерной оптимизации:

- Дихотомия (бисекция)
- Метод золотого сечения

Одномерный поиск

Методы одномерной оптимизации:

- Дихотомия (бисекция)
- Метод золотого сечения
- Метод парабол

Одномерный поиск

Методы одномерной оптимизации:

- Дихотомия (бисекция)
- Метод золотого сечения
- Метод парабол

Одномерный поиск

Методы одномерной оптимизации:

- Дихотомия (бисекция)
- Метод золотого сечения
- Метод парабол

Условия Вольфе (для выбора шага):

1. **Armijo:** $f(x_k + \alpha d_k) \leq f(x_k) + c_1 \alpha \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle$

где $0 < c_1 < c_2 < 1$.

Одномерный поиск

Методы одномерной оптимизации:

- Дихотомия (бисекция)
- Метод золотого сечения
- Метод парабол

Условия Вольфе (для выбора шага):

1. **Armijo:** $f(x_k + \alpha d_k) \leq f(x_k) + c_1 \alpha \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle$
2. **Кривизна:** $\langle \nabla f(x_k + \alpha d_k), d_k \rangle \geq c_2 \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle$

где $0 < c_1 < c_2 < 1$.

Задача (скорости сходимости)

Напишите асимптотическую верхнюю оценку числа итераций для достижения $f(x) - f^* \leq \varepsilon$:

1) Субградиентный метод, f выпукла, $\|\partial f(x)\|_2 \leq G$

Задача (скорости сходимости)

Напишите асимптотическую верхнюю оценку числа итераций для достижения $f(x) - f^* \leq \varepsilon$:

1) Субградиентный метод, f выпукла, $\|\partial f(x)\|_2 \leq G$
2) Градиентный спуск, f L-гладкая и μ-сильно выпукла

Задача (скорости сходимости)

Напишите асимптотическую верхнюю оценку числа итераций для достижения $f(x) - f^* \leq \varepsilon$:

1) Субградиентный метод, f выпукла, $\|\partial f(x)\|_2 \leq G$
2) Градиентный спуск, f L-гладкая и μ-сильно выпукла
3) Heavy Ball для μ-сильно выпуклой квадратичной функции

Задача (скорости сходимости)

Напишите асимптотическую верхнюю оценку числа итераций для достижения $f(x) - f^* \leq \varepsilon$:

1) Субградиентный метод, f выпукла, $\|\partial f(x)\|_2 \leq G$
2) Градиентный спуск, f L-гладкая и μ-сильно выпукла
3) Heavy Ball для μ-сильно выпуклой квадратичной функции
4) Метод дихотомии для унимодальной функции

Задача (скорости сходимости)

Напишите асимптотическую верхнюю оценку числа итераций для достижения $f(x) - f^* \leq \varepsilon$:

1) Субградиентный метод, f выпукла, $\|\partial f(x)\|_2 \leq G$
2) Градиентный спуск, f L-гладкая и μ-сильно выпукла
3) Heavy Ball для μ-сильно выпуклой квадратичной функции
4) Метод дихотомии для унимодальной функции

Задача (скорости сходимости)

Напишите асимптотическую верхнюю оценку числа итераций для достижения $f(x) - f^* \leq \varepsilon$:

1) Субградиентный метод, f выпукла, $\|\partial f(x)\|_2 \leq G$
2) Градиентный спуск, f L-гладкая и μ-сильно выпукла
3) Heavy Ball для μ-сильно выпуклой квадратичной функции
4) Метод дихотомии для унимодальной функции

Решение:

1) $N = \mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ — сублинейная

Задача (скорости сходимости)

Напишите асимптотическую верхнюю оценку числа итераций для достижения $f(x) - f^* \leq \varepsilon$:

1) Субградиентный метод, f выпукла, $\|\partial f(x)\|_2 \leq G$
2) Градиентный спуск, f L-гладкая и μ-сильно выпукла
3) Heavy Ball для μ-сильно выпуклой квадратичной функции
4) Метод дихотомии для унимодальной функции

Решение:

1) $N = \mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ — сублинейная
2) $N = \mathcal{O}(\kappa \log(1/\varepsilon))$ — линейная

Задача (скорости сходимости)

Напишите асимптотическую верхнюю оценку числа итераций для достижения $f(x) - f^* \leq \varepsilon$:

1) Субградиентный метод, f выпукла, $\|\partial f(x)\|_2 \leq G$
2) Градиентный спуск, f L-гладкая и μ-сильно выпукла
3) Heavy Ball для μ-сильно выпуклой квадратичной функции
4) Метод дихотомии для унимодальной функции

Решение:

1) $N = \mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ — сублинейная
2) $N = \mathcal{O}(\kappa \log(1/\varepsilon))$ — линейная
3) $N = \mathcal{O}(\sqrt{\kappa} \log(1/\varepsilon))$ — ускоренная линейная

Задача (скорости сходимости)

Напишите асимптотическую верхнюю оценку числа итераций для достижения $f(x) - f^* \leq \varepsilon$:

1) Субградиентный метод, f выпукла, $\|\partial f(x)\|_2 \leq G$
2) Градиентный спуск, f L-гладкая и μ-сильно выпукла
3) Heavy Ball для μ-сильно выпуклой квадратичной функции
4) Метод дихотомии для унимодальной функции

Решение:

1) $N = \mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ — сублинейная
2) $N = \mathcal{O}(\kappa \log(1/\varepsilon))$ — линейная
3) $N = \mathcal{O}(\sqrt{\kappa} \log(1/\varepsilon))$ — ускоренная линейная
4) $N = \mathcal{O}(\log(1/\varepsilon))$ — логарифмическая

Градиентный спуск (Лекция 11)

Метод градиентного спуска

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

Метод градиентного спуска

$$
x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)
$$

Теорема (сходимость для L-гладких выпуклых функций):

При $\alpha = \frac{1}{L}$:

$$
f(x_k) - f^* \leq \frac{L\|x_0 - x^*\|^2}{2k}
$$

Метод градиентного спуска

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

Теорема (сходимость для L-гладких выпуклых функций):

При $\alpha = \frac{1}{L}$:

$$f(x_k) - f^* \leq \frac{L\|x_0 - x^*\|^2}{2k}$$

Теорема (сходимость для сильно выпуклых функций):

При $\alpha = \frac{1}{L}$ для μ-сильно выпуклых:

$$\|x_k - x^*\|^2 \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k \|x_0 - x^*\|^2$$

Задача (градиентный спуск для Ridge регрессии)

Выпишите итерацию градиентного спуска и оценку скорости сходимости для:

$$
\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2 + \lambda \|x\|_2^2
$$

Задача (градиентный спуск для Ridge регрессии)

Выпишите итерацию градиентного спуска и оценку скорости сходимости для:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2 + \lambda \|x\|_2^2$$

Решение: $\nabla f(x) = 2(A^T A + \lambda I)x - 2A^T b$

Задача (градиентный спуск для Ridge регрессии)

Выпишите итерацию градиентного спуска и оценку скорости сходимости для:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2 + \lambda \|x\|_2^2$$

Решение: $\nabla f(x) = 2(A^T A + \lambda I)x - 2A^T b$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha[(A^T A + \lambda I)x_k - A^T b]$$

Задача (градиентный спуск для Ridge регрессии)

Выпишите итерацию градиентного спуска и оценку скорости сходимости для:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax-b\|_2^2 + \lambda\|x\|_2^2$$

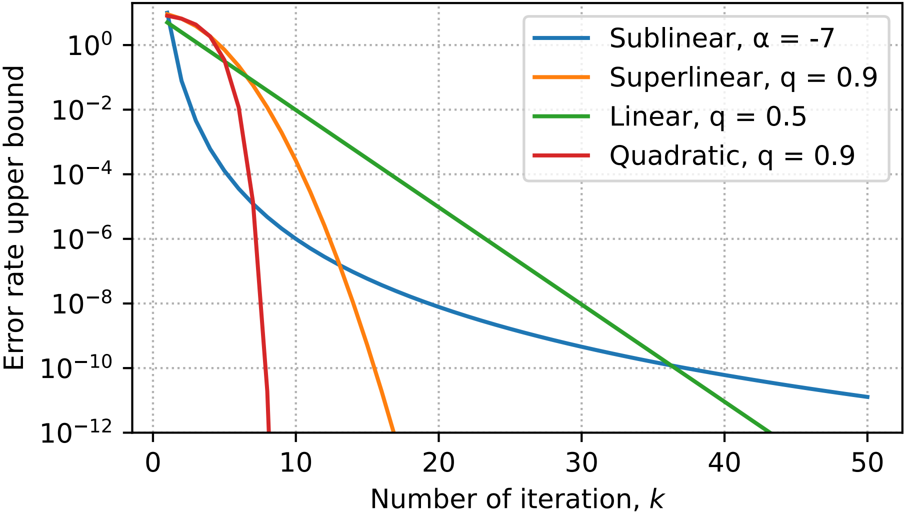
Решение: $\nabla f(x) = 2(A^TA+\lambda I)x - 2A^Tb$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha[(A^TA+\lambda I)x_k - A^Tb]$$

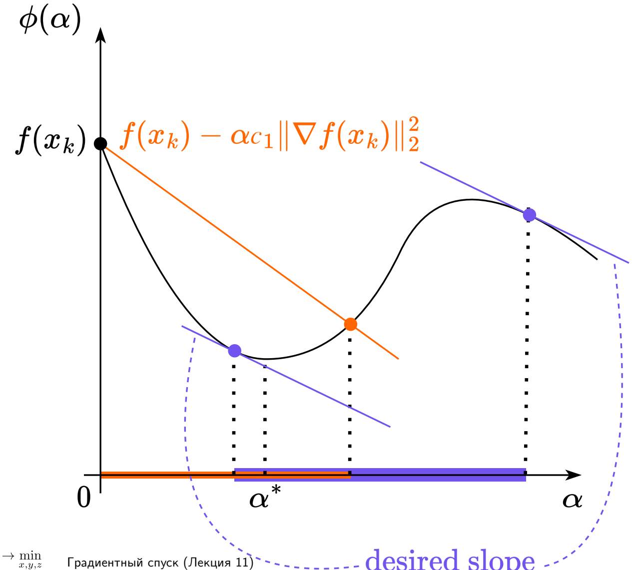
Число обусловленности: $\kappa = \frac{\lambda_{\max}(A^TA)+\lambda}{\lambda_{\min}(A^TA)+\lambda}$

Скорость сходимости: $\|x_k - x^*\| \leq \left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^k \|x_0 - x^*\|$

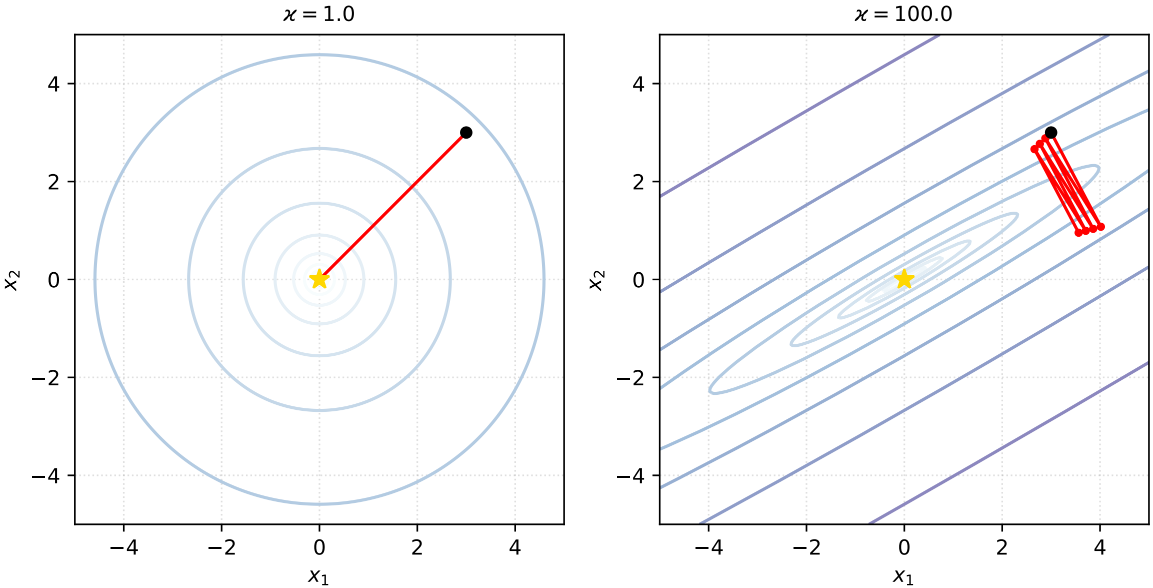
Типы скоростей сходимости



Условия Вольфе



Влияние числа обусловленности на градиентный спуск



Нижние оценки и ускорение (Лекция 12)

Нижние оценки для методов первого порядка

Теорема (Нестеров): Для любого метода первого порядка существует L-гладкая μ-сильно выпуклая функция такая, что:

$$
f(x_k) - f^* \geq \frac{\mu}{2} \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^{2k} \|x_0 - x^*\|^2
$$

Нижние оценки для методов первого порядка

Теорема (Нестеров): Для любого метода первого порядка существует L-гладкая μ-сильно выпуклая функция такая, что:

$$f(x_k) - f^* \geq \frac{\mu}{2}\left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^{2k}\|x_0 - x^*\|^2$$

Сравните с GD: $\left(1 - \frac{1}{\kappa}\right)^k$ vs оптимальное $\left(1 - \frac{2}{\sqrt{\kappa}}\right)^k$

Ускоренный градиентный метод Нестерова

$$
\begin{aligned}
y_k &= x_k + \frac{k-1}{k+2}(x_k - x_{k-1}) \\
x_{k+1} &= y_k - \frac{1}{L}\nabla f(y_k)
\end{aligned}
$$

Ускоренный градиентный метод Нестерова

$$
\begin{aligned}
y_k &= x_k + \frac{k-1}{k+2}(x_k - x_{k-1}) \\
x_{k+1} &= y_k - \frac{1}{L}\nabla f(y_k)
\end{aligned}
$$

Теорема: Для L-гладких выпуклых функций:

$$
f(x_k) - f^* \leq \frac{2L\|x_0 - x^*\|^2}{(k+1)^2}
$$

Ускоренный градиентный метод Нестерова

$$
\begin{aligned}
y_k &= x_k + \frac{k-1}{k+2}(x_k - x_{k-1}) \\
x_{k+1} &= y_k - \frac{1}{L}\nabla f(y_k)
\end{aligned}
$$

Теорема: Для L-гладких выпуклых функций:

$$
f(x_k) - f^* \leq \frac{2L\|x_0 - x^*\|^2}{(k+1)^2}
$$

Это **оптимальная** скорость для методов первого порядка!

Метод тяжёлого шарика (Heavy Ball)

$$
x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k) + \beta (x_k - x_{k-1})
$$

Метод тяжёлого шарика (Heavy Ball)

$$
x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k) + \beta(x_k - x_{k-1})
$$

Оптимальные параметры для квадратичных функций:

$$
\alpha = \frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad \beta = \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1}\right)^2
$$

Задача (Heavy Ball)

Для $f(x) = \frac{\lambda}{2}x^2$ ($\lambda > 0$, $x \in \mathbb{R}$) и Heavy Ball $x_{k+1} = x_k - \alpha\nabla f(x_k) + \beta(x_k - x_{k-1})$:

1) Запишите итерацию в матричном виде $\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ x_k \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} x_k \\ x_{k-1} \end{pmatrix}$

Задача (Heavy Ball)

Для $f(x) = \frac{\lambda}{2}x^2$ ($\lambda > 0$, $x \in \mathbb{R}$) и Heavy Ball $x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k) + \beta(x_k - x_{k-1})$:

1) Запишите итерацию в матричном виде $\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ x_k \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} x_k \\ x_{k-1} \end{pmatrix}$
2) При $\alpha = 1/\lambda$ найдите собственные числа T. При каких β метод сходится?

Задача (Heavy Ball)

Для $f(x) = \frac{\lambda}{2}x^2$ ($\lambda > 0$, $x \in \mathbb{R}$) и Heavy Ball $x_{k+1} = x_k - \alpha\nabla f(x_k) + \beta(x_k - x_{k-1})$:

1) Запишите итерацию в матричном виде $\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ x_k \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} x_k \\ x_{k-1} \end{pmatrix}$
2) При $\alpha = 1/\lambda$ найдите собственные числа T. При каких β метод сходится?

Задача (Heavy Ball)

Для $f(x) = \frac{\lambda}{2}x^2$ ($\lambda > 0$, $x \in \mathbb{R}$) и Heavy Ball $x_{k+1} = x_k - \alpha\nabla f(x_k) + \beta(x_k - x_{k-1})$:

1) Запишите итерацию в матричном виде $\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ x_k \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} x_k \\ x_{k-1} \end{pmatrix}$
2) При $\alpha = 1/\lambda$ найдите собственные числа T. При каких β метод сходится?

Решение: 1) $T = \begin{pmatrix} 1 - \alpha\lambda + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. При $\alpha = 1/\lambda$: $T = \begin{pmatrix} \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Задача (Heavy Ball)

Для $f(x) = \frac{\lambda}{2}x^2$ ($\lambda > 0$, $x \in \mathbb{R}$) и Heavy Ball $x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k) + \beta(x_k - x_{k-1})$:

1) Запишите итерацию в матричном виде $\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ x_k \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} x_k \\ x_{k-1} \end{pmatrix}$
2) При $\alpha = 1/\lambda$ найдите собственные числа T. При каких β метод сходится?

Решение: 1) $T = \begin{pmatrix} 1 - \alpha\lambda + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. При $\alpha = 1/\lambda$: $T = \begin{pmatrix} \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

2) Характеристическое уравнение: $r^2 - \beta r + \beta = 0$, откуда $r_{1,2} = \frac{\beta \pm \sqrt{\beta^2 - 4\beta}}{2}$

Условие сходимости $|r_{1,2}| < 1$ выполняется при $-\frac{1}{2} < \beta < 1$.

Метод сопряжённых градиентов (Лекция 13)

Идея метода

Для квадратичной функции $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$, $A \succ 0$:

Идея метода

Для квадратичной функции $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$, $A \succ 0$:

A-**сопряжённость (ортогональность):**

$$\langle d_i, d_j \rangle_A = d_i^T A d_j = 0 \quad \text{для } i \neq j$$

Идея метода

Для квадратичной функции $f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x$, $A \succ 0$:

A-**сопряжённость (ортогональность):**

$$\langle d_i, d_j \rangle_A = d_i^T A d_j = 0 \quad \text{для } i \neq j$$

Теорема: Метод сопряжённых градиентов сходится **не более чем за** n **итераций** для квадратичной функции в $\mathbb{R}^n$.

Алгоритм сопряжённых градиентов

1. $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$

Алгоритм сопряжённых градиентов

1. $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$
2. Для $k = 0, 1, \ldots$:

Алгоритм сопряжённых градиентов

1. $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$
2. Для $k = 0, 1, \ldots$:
    - $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T A d_k}$

Алгоритм сопряжённых градиентов

1. $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$
2. Для $k = 0, 1, \ldots$:
    - $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T A d_k}$
    - $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

Алгоритм сопряжённых градиентов

1. $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$
2. Для $k = 0, 1, \ldots$:
    - $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T A d_k}$
    - $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
    - $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$

Алгоритм сопряжённых градиентов

1. $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$
2. Для $k = 0, 1, \ldots$:
    - $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T A d_k}$
    - $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
    - $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$
    - $\beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$

Алгоритм сопряжённых градиентов

1. $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$
2. Для $k = 0, 1, \ldots$:
   - $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T A d_k}$
   - $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
   - $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$
   - $\beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$
   - $d_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k d_k$

Алгоритм сопряжённых градиентов

1. $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$
2. Для $k = 0, 1, \ldots$:
    - $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T A d_k}$
    - $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
    - $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$
    - $\beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$
    - $d_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k d_k$

Алгоритм сопряжённых градиентов

1. $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$
2. Для $k = 0, 1, \ldots$:
    - $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T A d_k}$
    - $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
    - $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$
    - $\beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$
    - $d_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k d_k$

Преимущества:

- Не нужно хранить матрицу A (только умножение Av)

Алгоритм сопряжённых градиентов

1. $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$
2. Для $k = 0, 1, \ldots$:
    - $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T A d_k}$
    - $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
    - $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$
    - $\beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$
    - $d_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k d_k$

Преимущества:

- Не нужно хранить матрицу A (только умножение Av)
- Для разреженных систем: $O(n)$ операций на итерацию

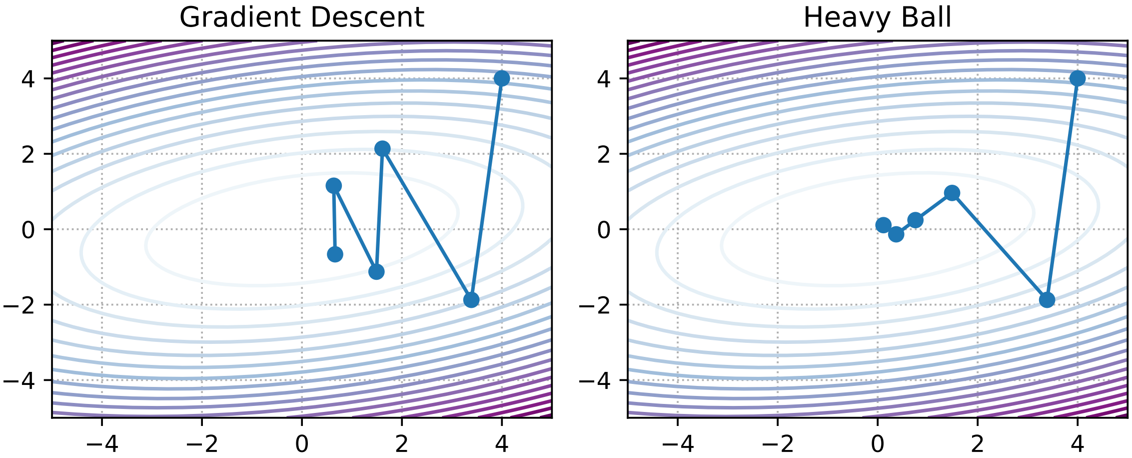
Алгоритм сопряжённых градиентов

1. $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$
2. Для $k = 0, 1, \ldots$:
   - $\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T A d_k}$
   - $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
   - $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$
   - $\beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$
   - $d_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k d_k$

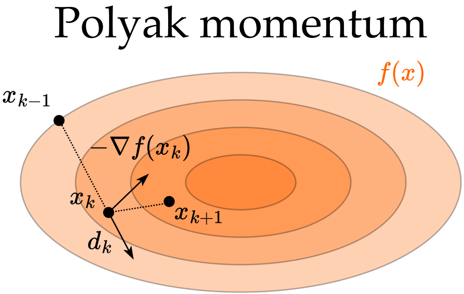
Преимущества:

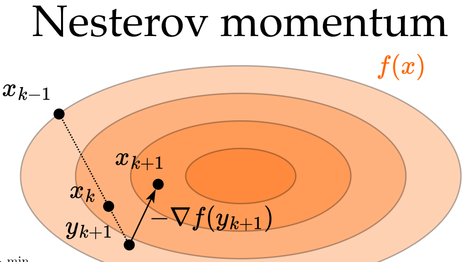
- Не нужно хранить матрицу A (только умножение Av)
- Для разреженных систем: $O(n)$ операций на итерацию
- На практике сходится быстрее, чем за n итераций

Градиентный спуск vs Метод тяжёлого шарика

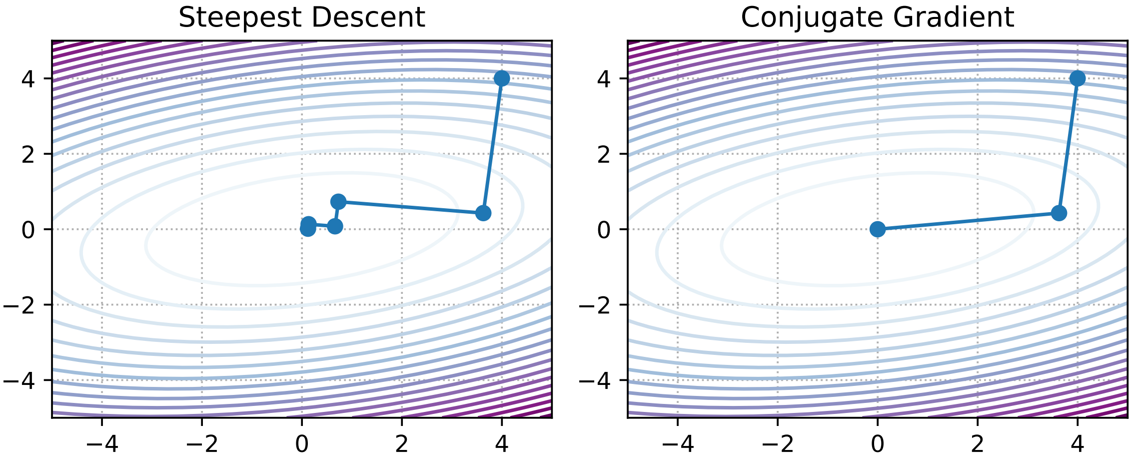


Ускоренный градиентный метод

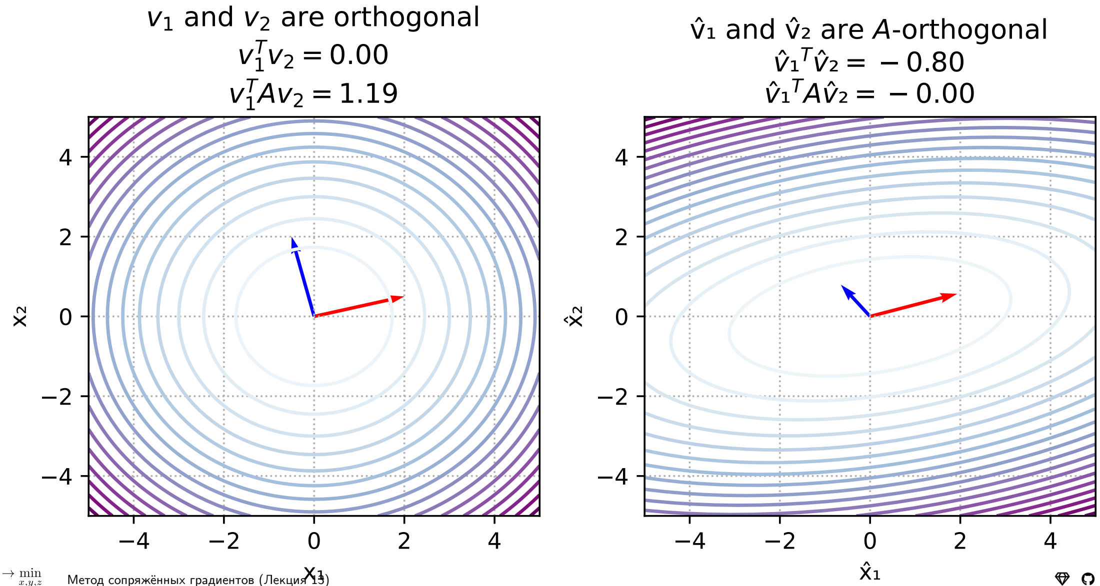




Градиентный спуск vs Метод сопряжённых градиентов

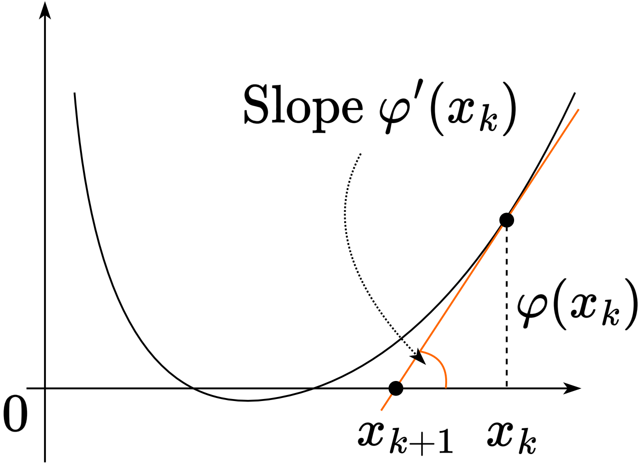


A-ортогональность



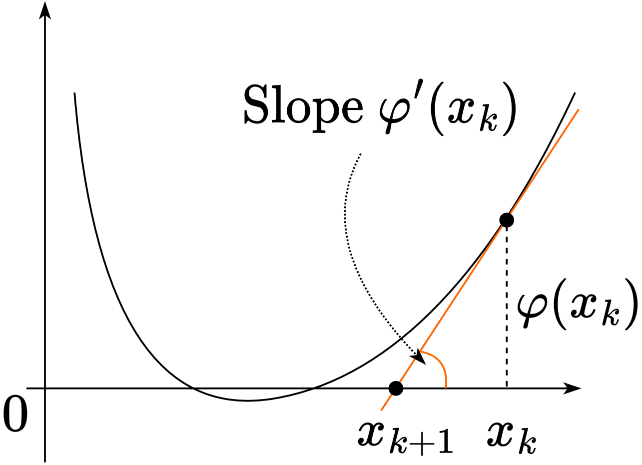
Newton method

Idea of Newton method of root finding



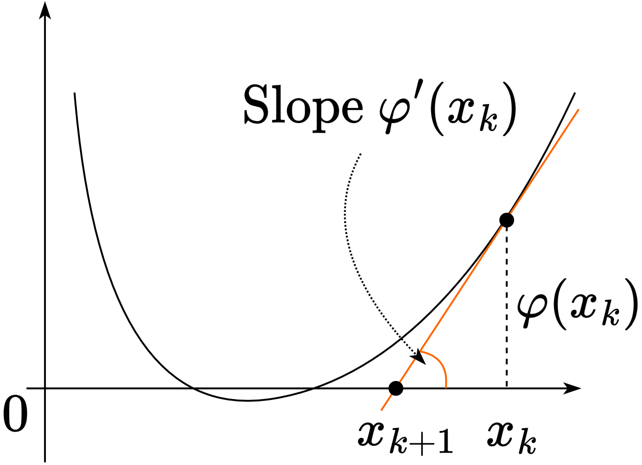
Consider the function $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

Idea of Newton method of root finding



Consider the function $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
The whole idea came from building a linear approximation at the point x_k and find its root, which will be the new iteration point:

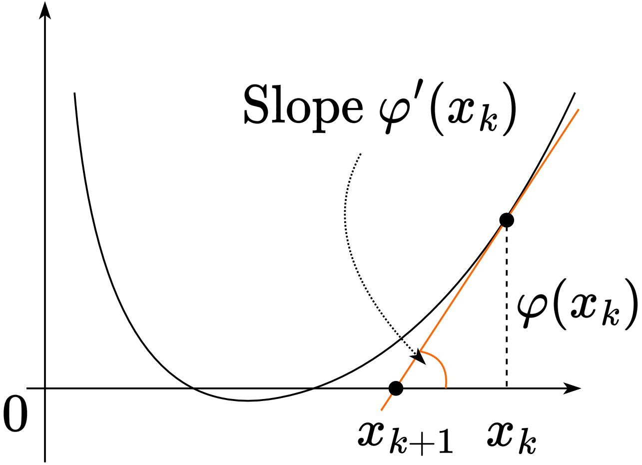
Idea of Newton method of root finding



Consider the function $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
The whole idea came from building a linear approximation at the point x_k and find its root, which will be the new iteration point:

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

Idea of Newton method of root finding

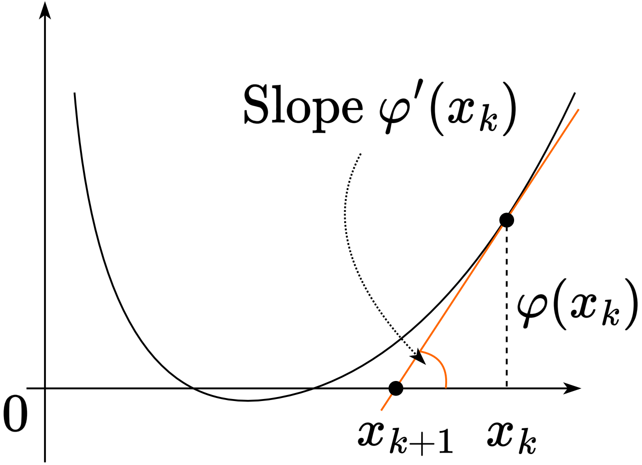


Consider the function $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
The whole idea came from building a linear approximation at the point x_k and find its root, which will be the new iteration point:

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

We get an iterative scheme:

Idea of Newton method of root finding



Consider the function $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
The whole idea came from building a linear approximation at the point x_k and find its root, which will be the new iteration point:

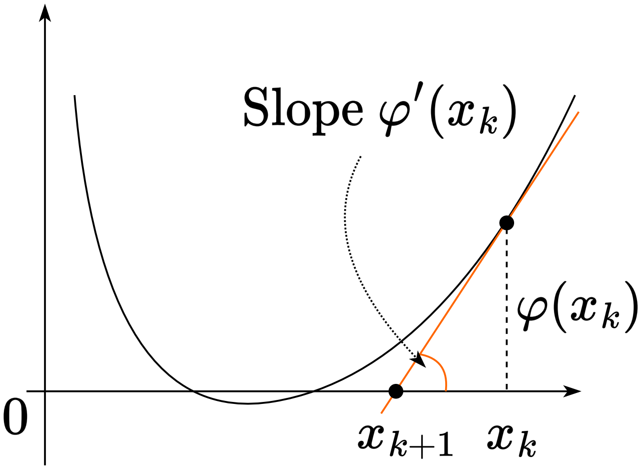
$$\varphi'(x_k) = \frac{\varphi(x_k)}{x_{k+1} - x_k}$$

We get an iterative scheme:

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

[1] Literally we aim to solve the problem of finding stationary points $\nabla f(x) = 0$

Idea of Newton method of root finding



Consider the function $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
The whole idea came from building a linear approximation at the point x_k and find its root, which will be the new iteration point:

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

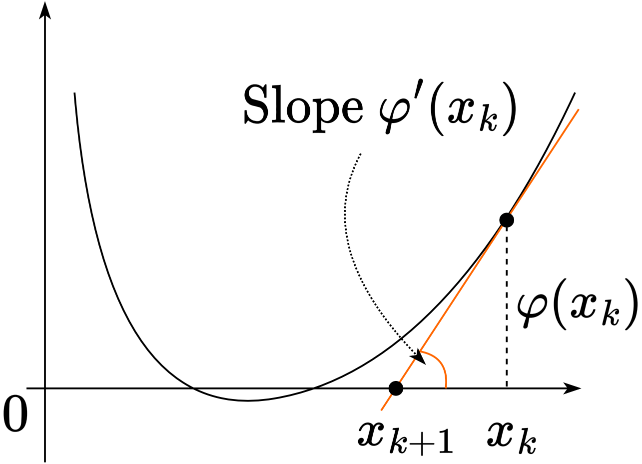
We get an iterative scheme:

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

Which will become a Newton optimization method in case $f'(x) = \varphi(x)$[1]:

[1] Literally we aim to solve the problem of finding stationary points $\nabla f(x) = 0$

Idea of Newton method of root finding



Consider the function $\varphi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
The whole idea came from building a linear approximation at the point x_k and find its root, which will be the new iteration point:

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

We get an iterative scheme:

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

Which will become a Newton optimization method in case $f'(x) = \varphi(x)$[1]:

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

[1] Literally we aim to solve the problem of finding stationary points $\nabla f(x) = 0$

Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer

Let us now have the function $f(x)$ and a certain point x_k. Let us consider the quadratic approximation of this function near x_k:

Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer

Let us now have the function $f(x)$ and a certain point x_k. Let us consider the quadratic approximation of this function near x_k:

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

Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer

Let us now have the function $f(x)$ and a certain point x_k. Let us consider the quadratic approximation of this function near x_k:

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

The idea of the method is to find the point x_{k+1}, that minimizes the function $f^{II}_{x_k}(x)$, i.e. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer

Let us now have the function $f(x)$ and a certain point x_k. Let us consider the quadratic approximation of this function near x_k:

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

The idea of the method is to find the point x_{k+1}, that minimizes the function $f^{II}_{x_k}(x)$, i.e. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

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

Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer

Let us now have the function $f(x)$ and a certain point x_k. Let us consider the quadratic approximation of this function near x_k:

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

The idea of the method is to find the point x_{k+1}, that minimizes the function $f^{II}_{x_k}(x)$, i.e. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

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

Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer

Let us now have the function $f(x)$ and a certain point x_k. Let us consider the quadratic approximation of this function near x_k:

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

The idea of the method is to find the point x_{k+1}, that minimizes the function $f^{II}_{x_k}(x)$, i.e. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

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

Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer

Let us now have the function $f(x)$ and a certain point x_k. Let us consider the quadratic approximation of this function near x_k:

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

The idea of the method is to find the point x_{k+1}, that minimizes the function $f^{II}_{x_k}(x)$, i.e. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

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

Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer

Let us now have the function $f(x)$ and a certain point x_k. Let us consider the quadratic approximation of this function near x_k:

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

The idea of the method is to find the point x_{k+1}, that minimizes the function $f^{II}_{x_k}(x)$, i.e. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

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

Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer

Let us now have the function $f(x)$ and a certain point x_k. Let us consider the quadratic approximation of this function near x_k:

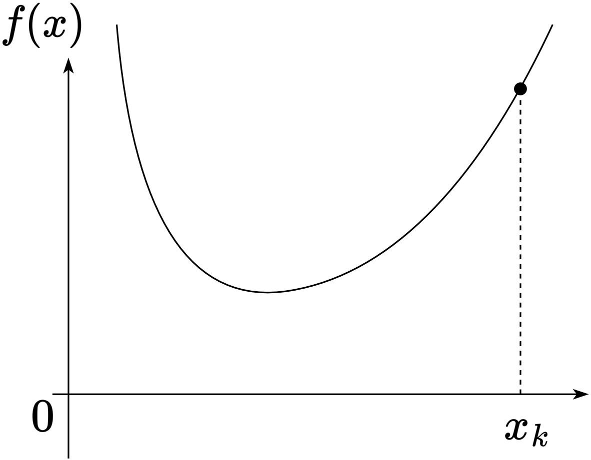
$$f^{II}_{x_k}(x) = f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k\rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x_k)(x-x_k), x-x_k\rangle.$$

The idea of the method is to find the point x_{k+1}, that minimizes the function $f^{II}_{x_k}(x)$, i.e. $\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) = 0$.

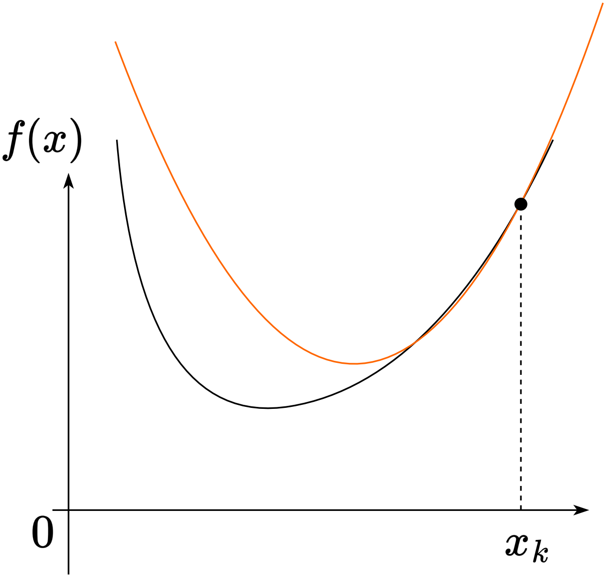
$$\begin{aligned}
\nabla f^{II}_{x_k}(x_{k+1}) &= \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0 \\
\nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) &= -\nabla f(x_k) \\
\left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) &= -\left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k) \\
x_{k+1} &= x_k -\left[\nabla^2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

Let us immediately note the limitations related to the necessity of the Hessian's non-degeneracy (for the method to exist), as well as its positive definiteness (for the convergence guarantee).

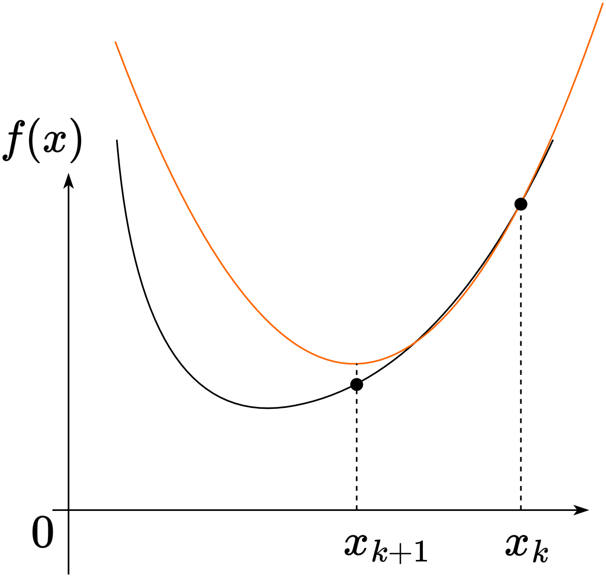
Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer



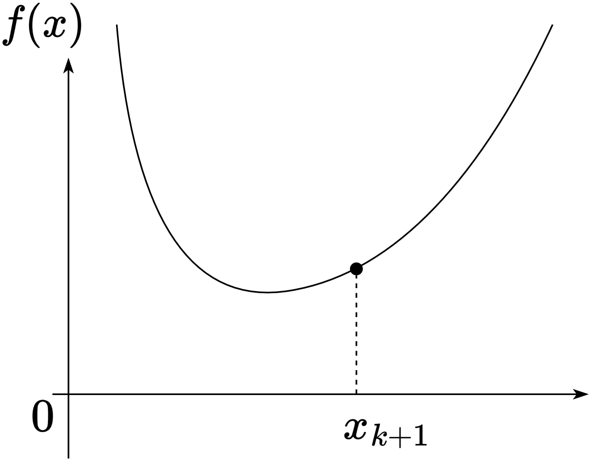
Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer



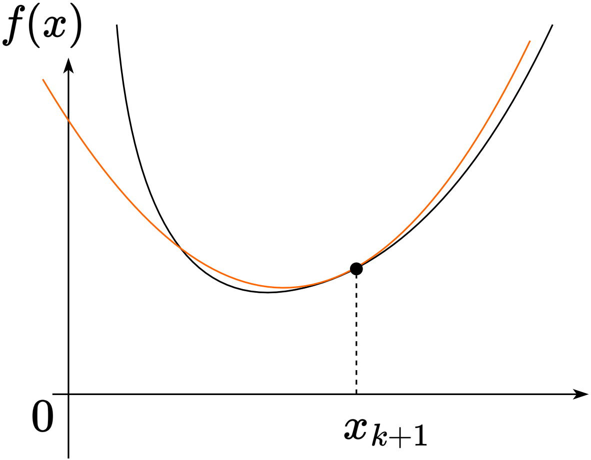
Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer



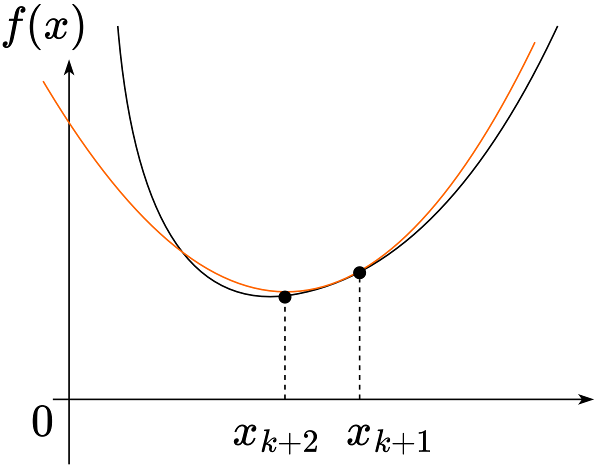
Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer



Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer



Newton method as a local quadratic Taylor approximation minimizer



Convergence

Theorem

Let $f(x)$ be a strongly convex twice continuously differentiable function at $\mathbb{R}^n$, for the second derivative of which inequalities are executed: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Then Newton's method with a constant step locally converges to solving the problem with superlinear speed. If, in addition, Hessian is M-Lipschitz continuous, then this method converges locally to x^* at a quadratic rate.

Convergence

> **Theorem**
>
> Let $f(x)$ be a strongly convex twice continuously differentiable function at $\mathbb{R}^n$, for the second derivative of which inequalities are executed: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Then Newton's method with a constant step locally converges to solving the problem with superlinear speed. If, in addition, Hessian is M-Lipschitz continuous, then this method converges locally to x^* at a quadratic rate.

Proof

Convergence

Theorem

Let $f(x)$ be a strongly convex twice continuously differentiable function at $\mathbb{R}^n$, for the second derivative of which inequalities are executed: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Then Newton's method with a constant step locally converges to solving the problem with superlinear speed. If, in addition, Hessian is M-Lipschitz continuous, then this method converges locally to x^* at a quadratic rate.

Proof

1. We will use Newton-Leibniz formula

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

Convergence

Theorem

Let $f(x)$ be a strongly convex twice continuously differentiable function at $\mathbb{R}^n$, for the second derivative of which inequalities are executed: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Then Newton's method with a constant step locally converges to solving the problem with superlinear speed. If, in addition, Hessian is M-Lipschitz continuous, then this method converges locally to x^* at a quadratic rate.

Proof

1. We will use Newton-Leibniz formula

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

2. Then we track the distance to the solution

Convergence

Theorem

Let $f(x)$ be a strongly convex twice continuously differentiable function at $\mathbb{R}^n$, for the second derivative of which inequalities are executed: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Then Newton's method with a constant step locally converges to solving the problem with superlinear speed. If, in addition, Hessian is M-Lipschitz continuous, then this method converges locally to x^* at a quadratic rate.

Proof

1. We will use Newton-Leibniz formula

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

2. Then we track the distance to the solution

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

Convergence

Theorem

Let $f(x)$ be a strongly convex twice continuously differentiable function at $\mathbb{R}^n$, for the second derivative of which inequalities are executed: $\mu I_n \preceq \nabla^2 f(x) \preceq L I_n$. Then Newton's method with a constant step locally converges to solving the problem with superlinear speed. If, in addition, Hessian is M-Lipschitz continuous, then this method converges locally to x^* at a quadratic rate.

Proof

1. We will use Newton-Leibniz formula

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

2. Then we track the distance to the solution

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

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

Convergence

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

Convergence

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

Convergence

3.

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

Convergence

3.

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

Convergence

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. We have introduced:

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

Convergence

5. Let's try to estimate the size of G_k:

where $r_k = \|x_k - x^*\|$.

Convergence

5. Let's try to estimate the size of G_k:

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

where $r_k = \|x_k - x^*\|$.

Convergence

5. Let's try to estimate the size of G_k:

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

$$\leq \int_0^1 \left\| \nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) \right\| d\tau \leq \qquad \text{(Hessian's Lipschitz continuity)}$$

where $r_k = \|x_k - x^*\|$.

Convergence

5. Let's try to estimate the size of G_k:

$$
\begin{aligned}
\|G_k\| = \left\| \int_0^1 \left(\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)\right) d\tau \right\| \leq \\
\leq \int_0^1 \left\| \nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) \right\| d\tau \leq \qquad \text{(Hessian's Lipschitz continuity)} \\
\leq \int_0^1 M\|x_k - x^* - \tau(x_k - x^*)\| d\tau = \int_0^1 M\|x_k - x^*\|(1-\tau) d\tau = \frac{r_k}{2} M,
\end{aligned}
$$

where $r_k = \|x_k - x^*\|$.

Convergence

5. Let's try to estimate the size of G_k:

$$
\begin{aligned}
\|G_k\| = \left\| \int_0^1 \left(\nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) d\tau \right) \right\| \leq \\
\leq \int_0^1 \left\| \nabla^2 f(x_k) - \nabla^2 f(x^* + \tau(x_k - x^*)) \right\| d\tau \leq \qquad \text{(Hessian's Lipschitz continuity)} \\
\leq \int_0^1 M \|x_k - x^* - \tau(x_k - x^*)\| d\tau = \int_0^1 M \|x_k - x^*\| (1 - \tau) d\tau = \frac{r_k}{2} M,
\end{aligned}
$$

where $r_k = \|x_k - x^*\|$.

6. So, we have:

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

and we need to bound the norm of the inverse hessian

Convergence

7. Because of Hessian's Lipschitz continuity and symmetry:

Convergence

7. Because of Hessian's Lipschitz continuity and symmetry:

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

Convergence

7. Because of Hessian's Lipschitz continuity and symmetry:

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

Convergence

7. Because of Hessian's Lipschitz continuity and symmetry:

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

Convergence

7. Because of Hessian's Lipschitz continuity and symmetry:

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

Convergence

7. Because of Hessian's Lipschitz continuity and symmetry:

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

Convexity implies $\nabla^2 f(x_k) \succ 0$, i.e. $r_k < \frac{\mu}{M}$.

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

Convergence

7. Because of Hessian's Lipschitz continuity and symmetry:

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

Convexity implies $\nabla^2 f(x_k) \succ 0$, i.e. $r_k < \frac{\mu}{M}$.

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

8. The convergence condition $r_{k+1} < r_k$ imposes additional conditions on $r_k:\quad r_k < \frac{2\mu}{3M}$

   Thus, we have an important result: Newton's method for the function with Lipschitz positive-definite Hessian converges **quadratically** near ($\|x_0 - x^*\| < \frac{2\mu}{3M}$) to the solution.

Affine Invariance of Newton's Method

An important property of Newton's method is **affine invariance**. Given a function f and a nonsingular matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, let $x = Ay$, and define $g(y) = f(Ay)$. Note, that $\nabla g(y) = A^T \nabla f(x)$ and $\nabla^2 g(y) = A^T \nabla^2 f(x) A$. The Newton steps on g are expressed as:

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

Affine Invariance of Newton's Method

An important property of Newton's method is **affine invariance**. Given a function f and a nonsingular matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, let $x = Ay$, and define $g(y) = f(Ay)$. Note, that $\nabla g(y) = A^T \nabla f(x)$ and $\nabla^2 g(y) = A^T \nabla^2 f(x) A$. The Newton steps on g are expressed as:

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

Expanding this, we get:

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

Affine Invariance of Newton's Method

An important property of Newton's method is **affine invariance**. Given a function f and a nonsingular matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, let $x = Ay$, and define $g(y) = f(Ay)$. Note, that $\nabla g(y) = A^T \nabla f(x)$ and $\nabla^2 g(y) = A^T \nabla^2 f(x) A$. The Newton steps on g are expressed as:

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

Expanding this, we get:

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

Using the property of matrix inverse $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$, this simplifies to:

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

Affine Invariance of Newton's Method

An important property of Newton's method is **affine invariance**. Given a function f and a nonsingular matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, let $x = Ay$, and define $g(y) = f(Ay)$. Note, that $\nabla g(y) = A^T \nabla f(x)$ and $\nabla^2 g(y) = A^T \nabla^2 f(x) A$. The Newton steps on g are expressed as:

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

Expanding this, we get:

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

Using the property of matrix inverse $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$, this simplifies to:

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

Thus, the update rule for x is:

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

Affine Invariance of Newton's Method

An important property of Newton's method is **affine invariance**. Given a function f and a nonsingular matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, let $x = Ay$, and define $g(y) = f(Ay)$. Note, that $\nabla g(y) = A^T \nabla f(x)$ and $\nabla^2 g(y) = A^T \nabla^2 f(x) A$. The Newton steps on g are expressed as:

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

Expanding this, we get:

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

Using the property of matrix inverse $(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$, this simplifies to:

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

Thus, the update rule for x is:

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

This shows that the progress made by Newton's method is independent of problem scaling. This property is not shared by the gradient descent method!

Summary

What's nice:

- quadratic convergence near the solution x^*

Summary

What's nice:

- quadratic convergence near the solution x^*
- affine invariance

Summary

What's nice:

- quadratic convergence near the solution x^*
- affine invariance
- the parameters have little effect on the convergence rate

Summary

What's nice:

- quadratic convergence near the solution x^*
- affine invariance
- the parameters have little effect on the convergence rate

Summary

What's nice:

- quadratic convergence near the solution x^*
- affine invariance
- the parameters have little effect on the convergence rate

What's not nice:

- it is necessary to store the (inverse) hessian on each iteration: $\mathcal{O}(n^2)$ memory

Summary

What's nice:

- quadratic convergence near the solution x^*
- affine invariance
- the parameters have little effect on the convergence rate

What's not nice:

- it is necessary to store the (inverse) hessian on each iteration: $\mathcal{O}(n^2)$ memory
- it is necessary to solve linear systems: $\mathcal{O}(n^3)$ operations

Summary

What's nice:

- quadratic convergence near the solution x^*
- affine invariance
- the parameters have little effect on the convergence rate

What's not nice:

- it is necessary to store the (inverse) hessian on each iteration: $\mathcal{O}(n^2)$ memory
- it is necessary to solve linear systems: $\mathcal{O}(n^3)$ operations
- the Hessian can be degenerate at x^*

Summary

What's nice:

- quadratic convergence near the solution x^*
- affine invariance
- the parameters have little effect on the convergence rate

What's not nice:

- it is necessary to store the (inverse) hessian on each iteration: $\mathcal{O}(n^2)$ memory
- it is necessary to solve linear systems: $\mathcal{O}(n^3)$ operations
- the Hessian can be degenerate at x^*
- the hessian may not be positively determined $\to$ direction $-(f''(x))^{-1}f'(x)$ may not be a descending direction

Задача (метод Ньютона)

Пусть $f(x) = e^{x_1} + x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 - x_2$. Найдите x_1 методом Ньютона, если $x_0 = (0, 0)^T$.

Задача (метод Ньютона)

Пусть $f(x) = e^{x_1} + x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 - x_2$. Найдите x_1 методом Ньютона, если $x_0 = (0, 0)^T$.

Решение: $\nabla f(x) = (e^{x_1} + 2x_1 - 2, 2x_2 - 1)^T$, $\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} e^{x_1} + 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

Задача (метод Ньютона)

Пусть $f(x) = e^{x_1} + x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 - x_2$. Найдите x_1 методом Ньютона, если $x_0 = (0,0)^T$.

Решение: $\nabla f(x) = (e^{x_1} + 2x_1 - 2, 2x_2 - 1)^T$, $\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} e^{x_1} + 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

В точке $x_0 = (0,0)^T$: $\nabla f(x_0) = (-1,-1)^T$, $\nabla^2 f(x_0) = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

Задача (метод Ньютона)

Пусть $f(x) = e^{x_1} + x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 - x_2$. Найдите x_1 методом Ньютона, если $x_0 = (0,0)^T$.

Решение: $\nabla f(x) = (e^{x_1} + 2x_1 - 2, 2x_2 - 1)^T$, $\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} e^{x_1} + 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

В точке $x_0 = (0,0)^T$: $\nabla f(x_0) = (-1,-1)^T$, $\nabla^2 f(x_0) = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

$$x_1 = x_0 - [\nabla^2 f(x_0)]^{-1} \nabla f(x_0) = \begin{pmatrix} 1/3 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

Newton method problems

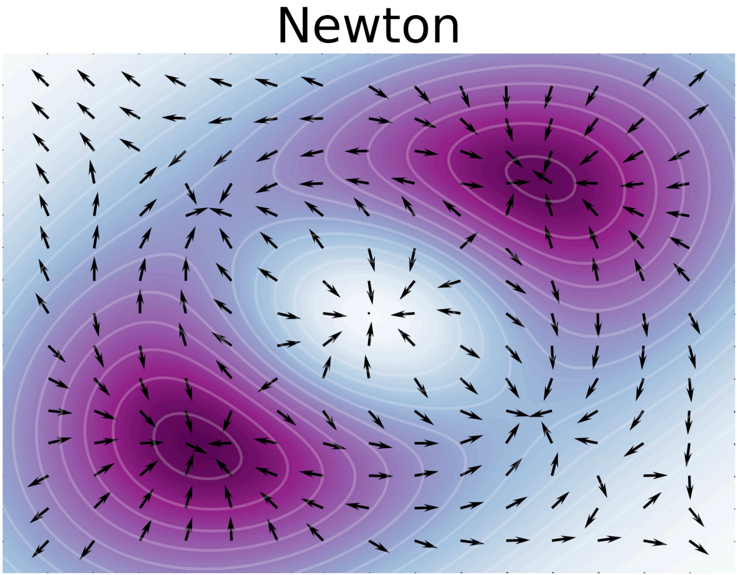


Рис. 7: Animation

Newton method problems

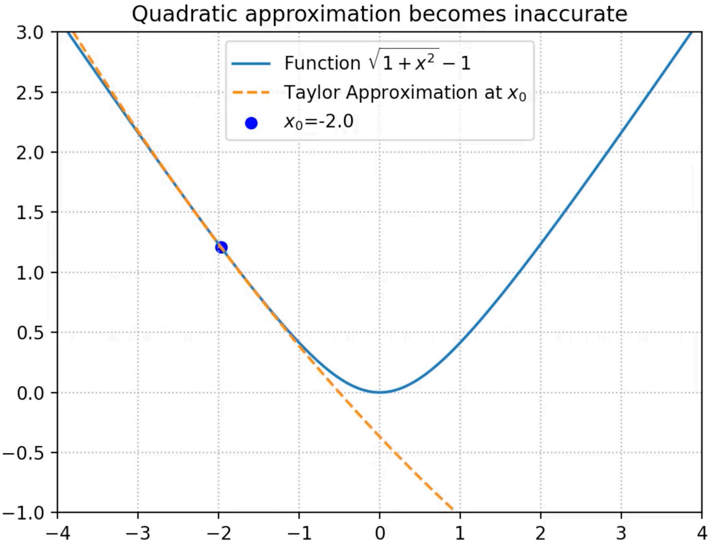


Рис. 8: Animation

The idea of adapive metrics

Given $f(x)$ and a point x_0. Define $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ as the set of points with distance ε to x_0. Here we presume the existence of a distance function $d(x, x_0)$.

The idea of adapive metrics

Given $f(x)$ and a point x_0. Define $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ as the set of points with distance ε to x_0. Here we presume the existence of a distance function $d(x, x_0)$.

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

The idea of adapive metrics

Given $f(x)$ and a point x_0. Define $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ as the set of points with distance ε to x_0. Here we presume the existence of a distance function $d(x, x_0)$.

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

Then, we can define another *steepest descent* direction in terms of minimizer of function on a sphere:

The idea of adapive metrics

Given $f(x)$ and a point x_0. Define $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ as the set of points with distance ε to x_0. Here we presume the existence of a distance function $d(x, x_0)$.

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

Then, we can define another *steepest descent* direction in terms of minimizer of function on a sphere:

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

The idea of adapive metrics

Given $f(x)$ and a point x_0. Define $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ as the set of points with distance ε to x_0. Here we presume the existence of a distance function $d(x, x_0)$.

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

Then, we can define another *steepest descent* direction in terms of minimizer of function on a sphere:

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

Let us assume that the distance is defined locally by some metric A:

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

The idea of adapive metrics

Given $f(x)$ and a point x_0. Define $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ as the set of points with distance ε to x_0. Here we presume the existence of a distance function $d(x, x_0)$.

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

Then, we can define another *steepest descent* direction in terms of minimizer of function on a sphere:

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

Let us assume that the distance is defined locally by some metric A:

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

Let us also consider first order Taylor approximation of a function $f(x)$ near the point x_0:

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

Now we can explicitly pose a problem of finding s, as it was stated above.

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

The idea of adapive metrics

Given $f(x)$ and a point x_0. Define $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ as the set of points with distance ε to x_0. Here we presume the existence of a distance function $d(x, x_0)$.

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

Then, we can define another *steepest descent* direction in terms of minimizer of function on a sphere:

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

Let us assume that the distance is defined locally by some metric A:

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

Let us also consider first order Taylor approximation of a function $f(x)$ near the point x_0:

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

Now we can explicitly pose a problem of finding s, as it was stated above.

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

Using equation (1 it can be written as:

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

The idea of adapive metrics

Given $f(x)$ and a point x_0. Define $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ as the set of points with distance ε to x_0. Here we presume the existence of a distance function $d(x, x_0)$.

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

Then, we can define another *steepest descent* direction in terms of minimizer of function on a sphere:

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

Let us assume that the distance is defined locally by some metric A:

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

Let us also consider first order Taylor approximation of a function $f(x)$ near the point x_0:

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

Now we can explicitly pose a problem of finding s, as it was stated above.

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

Using equation (1 it can be written as:

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

Using Lagrange multipliers method, we can easily conclude, that the answer is:

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

The idea of adapive metrics

Given $f(x)$ and a point x_0. Define $B_\varepsilon(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^n : d(x, x_0) = \varepsilon^2\}$ as the set of points with distance ε to x_0. Here we presume the existence of a distance function $d(x, x_0)$.

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

Then, we can define another *steepest descent* direction in terms of minimizer of function on a sphere:

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

Let us assume that the distance is defined locally by some metric A:

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

Let us also consider first order Taylor approximation of a function $f(x)$ near the point x_0:

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

Now we can explicitly pose a problem of finding s, as it was stated above.

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

Using equation (1 it can be written as:

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

Using Lagrange multipliers method, we can easily conclude, that the answer is:

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

Which means, that new direction of steepest descent is nothing else, but $A^{-1} \nabla f(x_0)$.

. . . Indeed, if the space is isotropic and $A = I$, we immediately have gradient descent formula, while Newton method uses local Hessian as a metric matrix.

Quasi-Newton methods

Quasi-Newton methods intuition

For the classic task of unconditional optimization $f(x) \to \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}$ the general scheme of iteration method is written as:

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

Quasi-Newton methods intuition

For the classic task of unconditional optimization $f(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^n}$ the general scheme of iteration method is written as:

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

In the Newton method, the d_k direction (Newton's direction) is set by the linear system solution at each step:

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

Quasi-Newton methods intuition

For the classic task of unconditional optimization $f(x) \to \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}$ the general scheme of iteration method is written as:

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

In the Newton method, the d_k direction (Newton's direction) is set by the linear system solution at each step:

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

i.e. at each iteration it is necessary to **compute** hessian and gradient and **solve** linear system.

Quasi-Newton methods intuition

For the classic task of unconditional optimization $f(x) \to \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}$ the general scheme of iteration method is written as:

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

In the Newton method, the d_k direction (Newton's direction) is set by the linear system solution at each step:

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

i.e. at each iteration it is necessary to **compute** hessian and gradient and **solve** linear system.

Note here that if we take a single matrix of $B_k = I_n$ as B_k at each step, we will exactly get the gradient descent method.

The general scheme of quasi-Newton methods is based on the selection of the B_k matrix so that it tends in some sense at $k \to \infty$ to the truth value of the Hessian $\nabla^2 f(x_k)$.

Quasi-Newton Method Template

Let $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. For $k = 1, 2, 3, \dots$, repeat:

1. Solve $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$

Quasi-Newton Method Template

Let $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. For $k = 1, 2, 3, \dots$, repeat:

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

Quasi-Newton Method Template

Let $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. For $k = 1, 2, 3, \dots$, repeat:

1. Solve $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Update $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Compute B_{k+1} from B_k

Quasi-Newton Method Template

Let $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. For $k = 1, 2, 3, \dots$, repeat:

1. Solve $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Update $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Compute B_{k+1} from B_k

Quasi-Newton Method Template

Let $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. For $k = 1, 2, 3, \dots$, repeat:

1. Solve $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Update $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Compute B_{k+1} from B_k

Different quasi-Newton methods implement Step 3 differently. As we will see, commonly we can compute $(B_{k+1})^{-1}$ from $(B_k)^{-1}$.

Quasi-Newton Method Template

Let $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. For $k = 1, 2, 3, \ldots$, repeat:

1. Solve $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Update $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Compute B_{k+1} from B_k

Different quasi-Newton methods implement Step 3 differently. As we will see, commonly we can compute $(B_{k+1})^{-1}$ from $(B_k)^{-1}$.

Basic Idea: As B_k already contains information about the Hessian, use a suitable matrix update to form B_{k+1}.

Quasi-Newton Method Template

Let $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. For $k = 1, 2, 3, \dots$, repeat:

1. Solve $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Update $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Compute B_{k+1} from B_k

Different quasi-Newton methods implement Step 3 differently. As we will see, commonly we can compute $(B_{k+1})^{-1}$ from $(B_k)^{-1}$.

Basic Idea: As B_k already contains information about the Hessian, use a suitable matrix update to form B_{k+1}.

Reasonable Requirement for B_{k+1} (motivated by the secant method):

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

Quasi-Newton Method Template

Let $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. For $k = 1, 2, 3, \ldots$, repeat:

1. Solve $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Update $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Compute B_{k+1} from B_k

Different quasi-Newton methods implement Step 3 differently. As we will see, commonly we can compute $(B_{k+1})^{-1}$ from $(B_k)^{-1}$.

Basic Idea: As B_k already contains information about the Hessian, use a suitable matrix update to form B_{k+1}.

Reasonable Requirement for B_{k+1} (motivated by the secant method):

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

In addition to the secant equation, we want:

- B_{k+1} to be symmetric

Quasi-Newton Method Template

Let $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. For $k = 1, 2, 3, \dots$, repeat:

1. Solve $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Update $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Compute B_{k+1} from B_k

Different quasi-Newton methods implement Step 3 differently. As we will see, commonly we can compute $(B_{k+1})^{-1}$ from $(B_k)^{-1}$.

Basic Idea: As B_k already contains information about the Hessian, use a suitable matrix update to form B_{k+1}.

Reasonable Requirement for B_{k+1} (motivated by the secant method):

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

In addition to the secant equation, we want:

- B_{k+1} to be symmetric
- B_{k+1} to be "close" to B_k

Quasi-Newton Method Template

Let $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \succ 0$. For $k = 1, 2, 3, \ldots$, repeat:

1. Solve $B_k d_k = -\nabla f(x_k)$
2. Update $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
3. Compute B_{k+1} from B_k

Different quasi-Newton methods implement Step 3 differently. As we will see, commonly we can compute $(B_{k+1})^{-1}$ from $(B_k)^{-1}$.

Basic Idea: As B_k already contains information about the Hessian, use a suitable matrix update to form B_{k+1}.

Reasonable Requirement for B_{k+1} (motivated by the secant method):

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

In addition to the secant equation, we want:

- B_{k+1} to be symmetric
- B_{k+1} to be "close" to B_k
- $B_k \succ 0 \Rightarrow B_{k+1} \succ 0$

Symmetric Rank-One Update

Let's try an update of the form:

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

Symmetric Rank-One Update

Let's try an update of the form:

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

The secant equation $B_{k+1} d_k = \Delta y_k$ yields:

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

Symmetric Rank-One Update

Let's try an update of the form:

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

The secant equation $B_{k+1}d_k = \Delta y_k$ yields:

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

This only holds if u is a multiple of $\Delta y_k - B_k d_k$. Putting $u = \Delta y_k - B_k d_k$, we solve the above,

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

Symmetric Rank-One Update

Let's try an update of the form:

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

The secant equation $B_{k+1}d_k = \Delta y_k$ yields:

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

This only holds if u is a multiple of $\Delta y_k - B_k d_k$. Putting $u = \Delta y_k - B_k d_k$, we solve the above,

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

which leads to

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

called the symmetric rank-one (SR1) update or Broyden method.

Symmetric Rank-One Update with inverse

How can we solve

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

in order to take the next step? In addition to propagating B_k to B_{k+1}, let's propagate inverses, i.e., $C_k = B_k^{-1}$ to $C_{k+1} = (B_{k+1})^{-1}$.

Sherman-Morrison Formula:

The Sherman-Morrison formula states:

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

Thus, for the SR1 update, the inverse is also easily updated:

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

In general, SR1 is simple and cheap, but it has a key shortcoming: it does not preserve positive definiteness.

Davidon-Fletcher-Powell Update

We could have pursued the same idea to update the inverse C:

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

Davidon-Fletcher-Powell Update

We could have pursued the same idea to update the inverse C:

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

Multiplying by Δy_k, using the secant equation $d_k = C_k \Delta y_k$, and solving for a, b, yields:

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

Woodbury Formula Application

Woodbury then shows:

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

This is the Davidon-Fletcher-Powell (DFP) update. Also cheap: $O(n^2)$, preserves positive definiteness. Not as popular as BFGS.

Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update

Let's now try a rank-two update:

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

Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update

Let's now try a rank-two update:

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

The secant equation $\Delta y_k = B_{k+1} d_k$ yields:

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

Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update

Let's now try a rank-two update:

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

The secant equation $\Delta y_k = B_{k+1} d_k$ yields:

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

Putting $u = \Delta y_k$, $v = B_k d_k$, and solving for a, b we get:

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

called the Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) update.

Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update with inverse

Woodbury Formula

The Woodbury formula, a generalization of the Sherman-Morrison formula, is given by:

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

Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update with inverse

Woodbury Formula

The Woodbury formula, a generalization of the Sherman-Morrison formula, is given by:

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

Applied to our case, we get a rank-two update on the inverse C:

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

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

This formulation ensures that the BFGS update, while comprehensive, remains computationally efficient, requiring $O(n^2)$ operations. Importantly, BFGS update preserves positive definiteness. Recall this means $B_k \succ 0 \Rightarrow B_{k+1} \succ 0.$ Equivalently, $C_k \succ 0 \Rightarrow C_{k+1} \succ 0$

Code

- Open In Colab

Code

- Open In Colab
- Comparison of quasi Newton methods

Code

- Open In Colab
- Comparison of quasi Newton methods
- Some practical notes about Newton method

Задача

Рассмотрим квадратичную функцию

$$f(x) = 4x_1^2 + 2x_2^2, \qquad x = (x_1, x_2)^\top \in \mathbb{R}^2.$$

Найдите константу сильной выпуклости μ и константу гладкости L функции f.

Задача

Рассмотрим квадратичную функцию $f(x) = \lambda x^2$ (где $\lambda > 0$, $x \in \mathbb{R}$). Ускоренный градиентный метод Нестерова задаётся итерацией

$$x_{k+1} = y_k - \alpha \nabla f(y_k),$$
$$y_{k+1} = x_{k+1} + \beta \left(x_{k+1} - x_k\right),$$

где $\alpha > 0$ — шаг, $\beta \in \mathbb{R}$ — параметр «инерции».

1. Выпишите итерацию метода в виде умножения вектора состояния на предыдущей итерации на матрицу

$$\begin{pmatrix} y_{k+1} \\ x_{k+1} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} y_k \\ x_k \end{pmatrix},$$

явно указав элементы матрицы T через λ, α и β.

Задача

Рассмотрим квадратичную функцию $f(x) = \lambda x^2$ (где $\lambda > 0$, $x \in \mathbb{R}$). Ускоренный градиентный метод Нестерова задаётся итерацией

$$
\begin{aligned}
x_{k+1} &= y_k - \alpha \nabla f(y_k), \\
y_{k+1} &= x_{k+1} + \beta \left(x_{k+1} - x_k \right),
\end{aligned}
$$

где $\alpha > 0$ — шаг, $\beta \in \mathbb{R}$ — параметр «инерции».

1. Выпишите итерацию метода в виде умножения вектора состояния на предыдущей итерации на матрицу
$$
\begin{pmatrix} y_{k+1} \\ x_{k+1} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} y_k \\ x_k \end{pmatrix},
$$
явно указав элементы матрицы T через λ, α и β.
2. Запишите явно вид матрицы T при $\alpha = \frac{1}{\lambda}$. Запишите характеристический полином для поиска собственных чисел матрицы T в этом случае $p(\lambda) = \det(T - \lambda I)$.

Задача

Рассмотрим квадратичную функцию $f(x) = \lambda x^2$ (где $\lambda > 0$, $x \in \mathbb{R}$). Ускоренный градиентный метод Нестерова задаётся итерацией

$$
\begin{aligned}
x_{k+1} &= y_k - \alpha \nabla f(y_k), \\
y_{k+1} &= x_{k+1} + \beta\,(x_{k+1} - x_k),
\end{aligned}
$$

где $\alpha > 0$ — шаг, $\beta \in \mathbb{R}$ — параметр «инерции».

1. Выпишите итерацию метода в виде умножения вектора состояния на предыдущей итерации на матрицу

   $$\begin{pmatrix} y_{k+1} \\ x_{k+1} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} y_k \\ x_k \end{pmatrix},$$

   явно указав элементы матрицы T через λ, α и β.
2. Запишите явно вид матрицы T при $\alpha = \frac{1}{\lambda}$. Запишите характеристический полином для поиска собственных чисел матрицы T в этом случае $p(\lambda) = \det(T - \lambda I)$.
3. Найдите значения β, при которых метод будет сходиться с этим шагом.\ *Примечание:* Для сходимости итерационного процесса нужно, чтобы оба собственных числа по модулю были < 1 (спектральный радиус $\rho(T) < 1$). Можно это сделать, найдя $\lambda_1(\beta), \lambda_2(\beta)$ явно и найти такие β, чтобы $|\lambda_1(\beta)| < 1, |\lambda_2(\beta)| < 1$. Мы предлагаем воспользоваться готовым результатом, который называется критерий Жюри для полинома второго порядка. Пусть характеристический многочлен имеет вид $p(\lambda) = \lambda^2 + a_1\lambda + a_2$. Тогда спектральный радиус будет меньше единицы тогда и только тогда, когда:

   $$|a_2| < 1 \qquad 1 + a_1 + a_2 > 0 \qquad 1 - a_1 + a_2 > 0$$

Задача

Пусть $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ - симметричная положительно определенная матрица, $b \in \mathbb{R}^n$. Найдите минимум функции:

$$f(x, y) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + \frac{1}{2} \|y\|_2^2 \to \min_{x+y=c}$$

где $c \in \mathbb{R}^n$ - заданный вектор. Выпишите явно решение (x^*, y^*).

Задача

Упростите выражение:

$$\text{tr}\left((A+\lambda I)^{-1}A\right), \quad \text{где } A \in \mathbb{S}^n_{++}, \lambda > 0$$

Выразите ответ через собственные значения матрицы A.

Задача

Предложите метод решения задачи наименьших квадратов с регуляризацией:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2 + \lambda \|x\|_2^2$$

где $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ (не обязательно квадратная), $\lambda > 0$. Опишите один итерационный метод оптимизации для её решения и приведите оценку скорости сходимости.

Задача

Докажите, что функция

$$f(x) = \log\left(\sum_{i=1}^{n} e^{x_i}\right)$$

выпуклая, используя любой дифференциальный критерий выпуклости.

Задача

Пусть $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$, где $\text{rk} X = n$, $\Omega \in \mathbb{S}^m_{++}$, и $W \in \mathbb{R}^{k \times n}$. Найдите матрицу $G \in \mathbb{R}^{k \times m}$, являющуюся решением следующей задачи оптимизации:

$$f(G) = \text{tr}\left(G \Omega G^\top\right) \to \min_{GX = W}$$