Quasi-Newton Methods

Laboratory work 3

Leontev Taras, Shpileva Anastasiya, Maria Okorochkova

Gauss-Newton, Powell Dog Leg, BFGS, L-BFGS

Department of Computer Technologies
University ITMO
Teacher Kazankov VK. 11.06.2023

1 Gauss-Newton and Powell Dog Leg

1.1 Gauss-Newton

Мы хотим научиться минимизировать функции такого вида:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} r_i(x)^2$$

тут r - квадраты расстояние до целевой функции (кривой).

$$r_i = y_i - p(t_i)$$

Эта задача решается методом Ньютона.

$$x^{k+1} = x^k - (\nabla^2 f(x^k))^{-1} \nabla f(x^k)$$

Но мы столкнемся с тем, что вычисления Гессиана не дешево а также, что наш спуск сильно зависит от выбранной нами начальной точки. Давайте попробуем выразить Гессиан и Градиент через матрицу Якоби.

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} r_i(x)^2$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \cdot 2 \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial r_i}{\partial x_j} r_i$$

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial r_0}{\partial x_0} & \cdots & \frac{\partial r_0}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial r_m}{x_0} & \cdots & \frac{\partial r_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} r_0 \\ \vdots \\ r_m \end{pmatrix}$$

$$\nabla f(x) = J_r^T r, \; J_r = [\frac{\partial r_i}{\partial x_j}] \; i = 1..m, \; j = 1..n$$

Чтобы получить Гессиан надо продифференцировать еще раз.

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial r_i}{\partial x_j} \cdot r_i$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_j \partial x_k} = \sum_{i=1}^{m} (\frac{\partial r_i}{\partial x_j} \frac{\partial r_i}{\partial x_k} + r_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial x_j \partial x_k})$$

Откуда получаем

$$\nabla^2 f = J_r^T J_r + Q$$

$$Q = \sum_{i=1}^{m} r_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial x_j \partial x_k}$$

В методе Гаусса-Ньютона мы упускаем Q

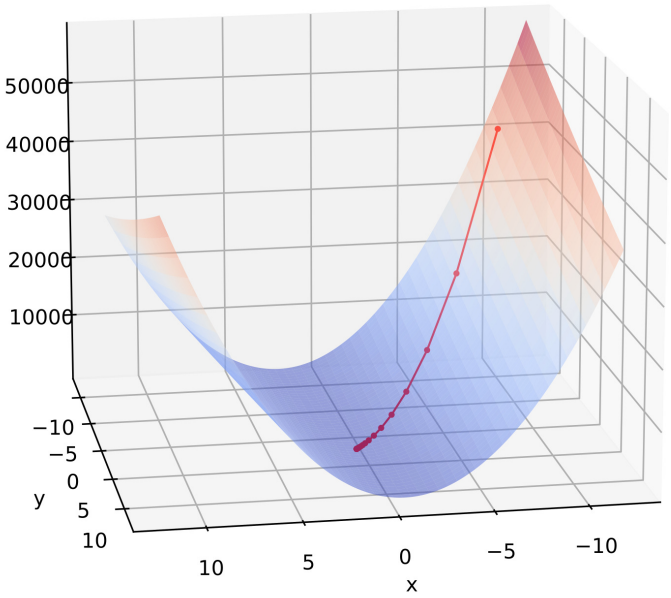
$$\nabla^2 f \approx J_r^T J_r$$

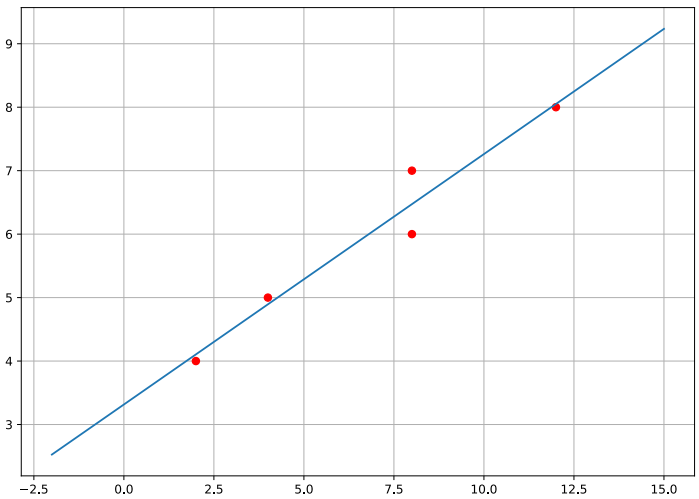
Подставляя в формулу из метода Ньютона получаем

$$x^{k+1} = x^k - (J_r(x^k)^T J_r(x^k))^{-1} \cdot J_r(x^k)^T r(x^k)$$

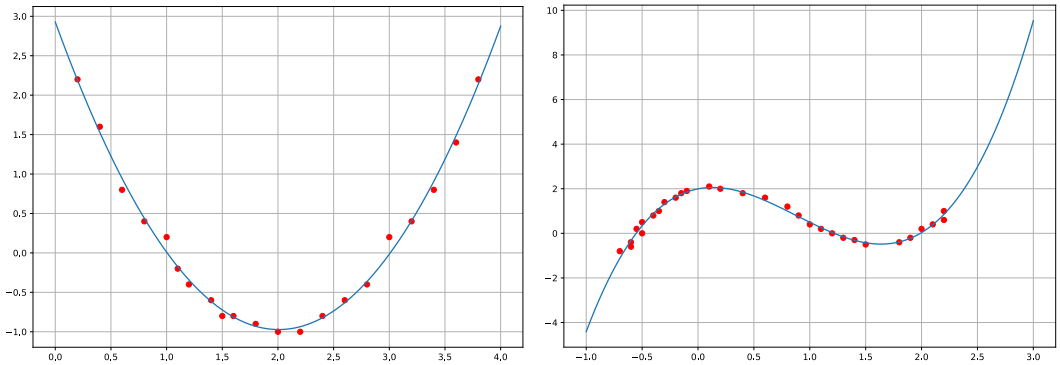
По хорошему еще стоит добавить коэффициент обучения

$$x^{k+1} = x^k - \alpha \cdot (J_r(x^k)^T J_r(x^k))^{-1} \cdot J_r(x^k)^T r(x^k)$$





Basic Linear Regression



Quadratic and Cubic Regressions

1.2 Powell Dog Leg

Для начала давайте поговорим о том, что такое Trust Region. Доверительная область - это область вокруг текущей точки, в которой мы считаем, что находится минимум функции. В этой области осуществляется поиск новых точек, которые могут быть более оптимальные чем текущая. Она задается радиусом и центром (для начала радиус берется очень большой, чтобы покрыть большую область поскольку таким образом увеличивается вероятность, что мы найдем оптимальные для нас стартовые точки).

Как она изменяется? В процессе работы алгоритма, если находится новая оптимальная точка, то доверительная область (этот круг) сдвигается к ней, если нет, то уменьшается радиус круга и снова ищется оптимальная точка.

Проблемы такой стратегии: зацикливание. Алгоритм может зациклиться при уменьшении радиуса круга, когда новой оптимальной точки не появляется. Эта проблема решается установлением нижнего предела для радиуса, при котором алгоритм закончит работу. Trust-region метод использует квадратичную модель. На каждой итерации шаг вычисляется путем решения следующей квадратичной задачи:

$$m_k(p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{1}{2} \cdot p^T H p$$

Хотим делать шаг с одной стороны находя минимум этой модели, но с другой стороны, не выходить за пределы нашего доверительного региона, так как за его пределами приближение может работать довольно-таки плохо. Таким образом минимизировать $\min_{\|p\| \leq \Delta_k} m(p)$, где Δ_k - радиус доверительного региона. P^U - минимум вдоль навправления градиента, p^H - минимум квадратичной модели.

$$p^U = -\frac{\nabla f^T \nabla f}{\nabla f^T H \nabla f}$$

$$p^H = -\frac{\nabla f}{H}$$

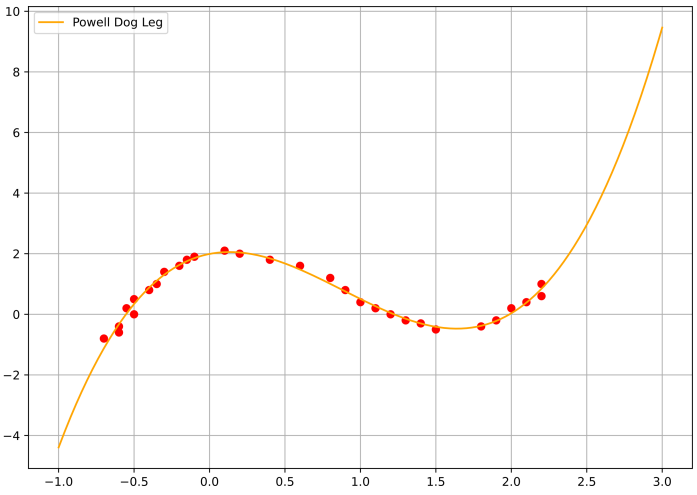
1. Если вся собачья нога находится внутри доверительного региона, то мы шагаем туда. Если нет, то хотим найти пересечение ломанной с нашей сферой.

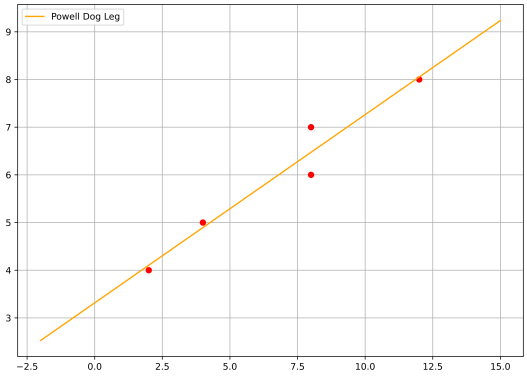
2. Если p^U находится на расстоянии больше чем наш радиус, то находим их пересечение. Если меньше, то пересекаем отрезок между p^U и p^H со сферой.

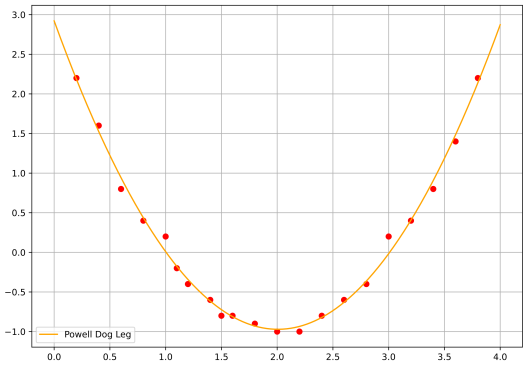
Первая проблема, которая возникает при определении trust-region алгоритма — это выбор стратегии для поиска оптимального trust-region радиуса на каждой итерации. Выбор основывается на сходстве функции m_k и целевой функции f на предыдущей итерации. Далее мы определяем следующее соотношение:

$$rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + p_k)}{m_k(0) - m_k(p_k)}$$

Если ρ_k отрицательное или близкое к 0, мы уменьшаем размер trust-region области, так как модель плохо отражает целевую функцию. Если ρ_k большое, тогда модель хорошо соответствует целевой функции. В данном случае следует расширить trust-region на следующей итерации.







2 Broyden Fletcher Goldfarb Shanno

2.1 Theory

BFGS - Квази-Ньютоновский метод, это значит, что нам не нужен Гессиан, который, как мы знаем достаточно дорого считается. Мы введем матрицу B, которую мы будем обновлять на каждом шаге, она будет служить нашим приближением к гессиану H

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k B_k^{-1} \nabla f(x^k)$$

Понятно, что если мы вместо B подставим гессиан, мы получим всем известный метод Ньютона, наш алгоритм будет основан на том, что нам не надо тратить много вычислений на Гессиан, мы не будем сходится квадратично, как в методе Ньютона, но и не будем сходиться линейно, как в обычном градиентном спуске.

В методе BFGS используется данное приближение

$$B_{k+1}(x^{k+1} - x^k) = \nabla f(x^k + 1) - \nabla f(x^k)$$

К сожалению при $n > 1$ у нас на руках неопределенная система, в том плане, что $\frac{n(n+1)}{2}$ переменных в B, а всего n уравнений. Чтобы разрешить нашу проблему BFGS предлагает нам добавить несколько ограничений.

$$min||B_{k+1} - B_k||$$

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

$$B_{k+1}\Delta x_k = y_k \ , \ y_k = \nabla f(x^k + 1) - \nabla f(x^k)$$

Эти ограничения в совокупности обеспечивают, что полученная матрица B будет симметричной и положительно определенной, и что B_{k+1} будет не сильно отличаться от B_k. И того, мы получаем

$$B_{k+1} = B_k + \alpha uu^T + \beta vv^T$$

где α и β - скаляры, а u и v - ветторы. Подставим $u = y_k$ и $v = B_k s_k$ где $s_k = x^{k+1} - x^k$

$$B_{k+1} = B_k + \alpha y_k y_k^T + \beta B_k s_k s_k^T B_k$$

$$y_k = B_{k+1}s_k = B_k s_k + \alpha y_k y_k^T s_k + \beta B_k s_k s_k^T B_k s_k$$

Домножив на s_k мы получили y_k. Мы теперь можем подогнать α и β такими, чтобы выходило ровно y_k. Чтобы все сокращалось подставим $\alpha = \frac{1}{y_k^T s_k}$ и $\beta = -\frac{1}{s_k^T B_k s_k}$

$$y_k = B_k s_k + \frac{1}{y_k^T s_k} y_k y_k^T s_k + -\frac{1}{s_k^T B_k s_k} B_k s_k s_k^T B_k s_k$$

$$y_k = y_k$$

И того, подставив данные о α и β в формулу приближения Гессиана получаем

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

Получается на каждой итерации нашего алгоритма мы сперва ищем шаг s_k

$$B_k s_k = -\nabla f(x^k)$$

Двигаемся на шаг

$$x^{k+1} = x^k + s_k$$

Вычисляем изменение значения функции y_k

$$y_k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$$

И наконец, получив s_k, y_k обновляем приближение к Гессиану

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

Можно заметить, что мы упускаем, что-то важное... Квази-Ньютоновские алгоритмы имеют вид

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k B_k^{-1} \nabla f(x^k)$$

Получается на каждой итерации нам нужно находить обратную к B, это куб операций на каждой итерации, поэтому давайте, оптимизируем и вместо того, чтобы на каждом шаге вычислять B_k будем вычислять B_k^{-1}

Выберем какое-то начальное положение x_0 и начальное приближение к Гессе, пусть это будет единичная матрица $H = I$, на каждой итерации

$$s_k = -H_k \nabla f(x^k)$$

Обновляем положение

$$x^{k+1} = x^k + s_k$$

Вычисляем изменение значения функции y_k

$$y_k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$$

Обновляем приближение к матрице обратной Гессиану

$$H_{k+1} = (I - s_k \rho_k y_k^T) H_k (I - \rho_k y_k s_k^T) + \rho_k s_k s_k^T \ , \ \rho_k = \frac{1}{y_k^T s_k}$$

3 L-BFGS

L в LBFGS означает - limited memory, то есть ограничение по памяти. Вместо того, чтобы, как в обычном BFGS хранить Гессиан, как матрицу n на n будем хранить несколько векторов, которые нам будут говорить о его виде.

Мы будем хранить пары состоящие из y_k и s_k, запись из предыдущих пунктов к $x^{k+1} - x^k$ и $\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$. Что не менее важно, мы будем хранить последние m штук, это нам поможет и с памятью, и, возможно, со сходимостью, ибо у нас данные о Гессиане будут более актуальными.

$$H_{k+1} = (I - s_k \rho_k y_k^T) H_k (I - \rho_k y_k s_k^T) + \rho_k s_k s_k^T \ , \ \rho_k = \frac{1}{y_k^T s_k}$$

$$H_k = (I - s_{k-1} \rho_{k-1} y_{k-1}^T) H_{k-1} (I - \rho_{k-1} y_{k-1} s_{k-1}^T) + \rho_{k-1} s_{k-1} s_{k-1}^T$$

$$\vdots$$

$$H_1 = (I - s_0 \rho_0 y_0^T) H_0 (I - \rho_0 y_0 s_0^T) + \rho_0 s_0 s_0^T \ , \ H_0 = I$$

В итоге получается, что затраты на память у нас буду линейные, и наиболее актульный Гессиан, что является причиной широкой распространнености данного метода.

4 Compare and Contrast

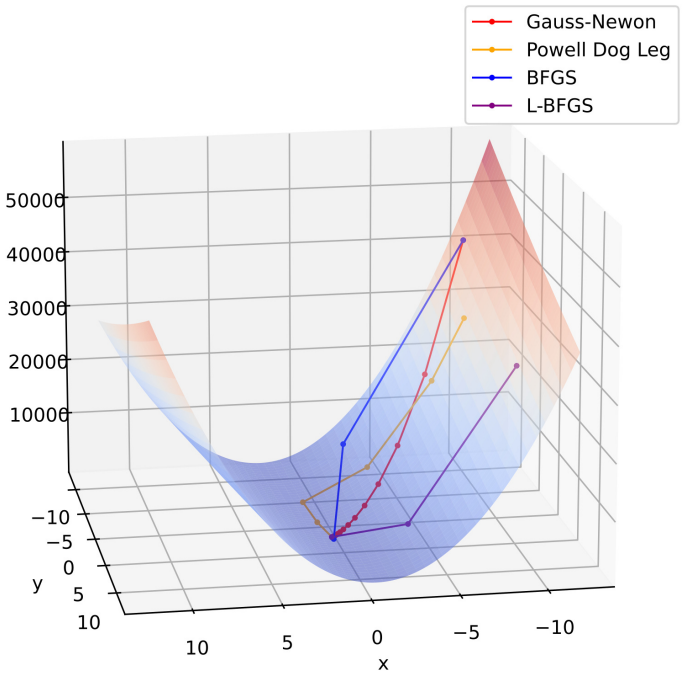
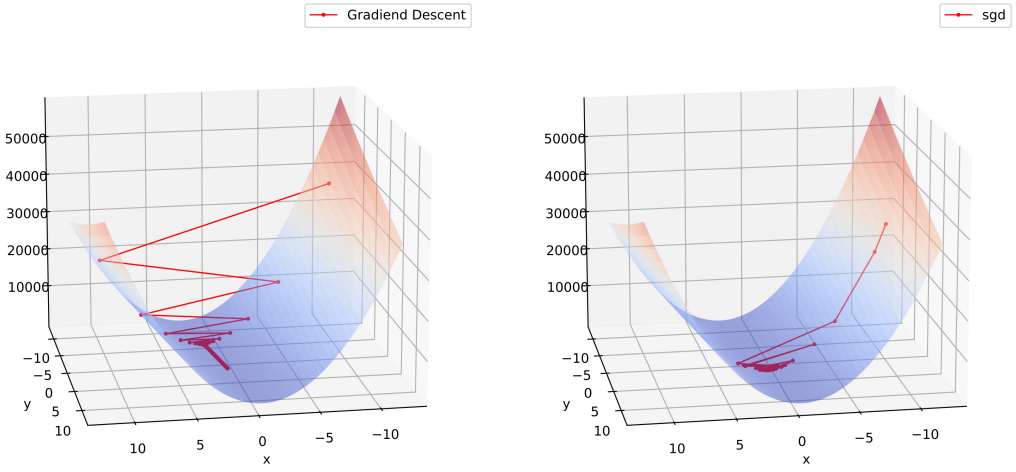
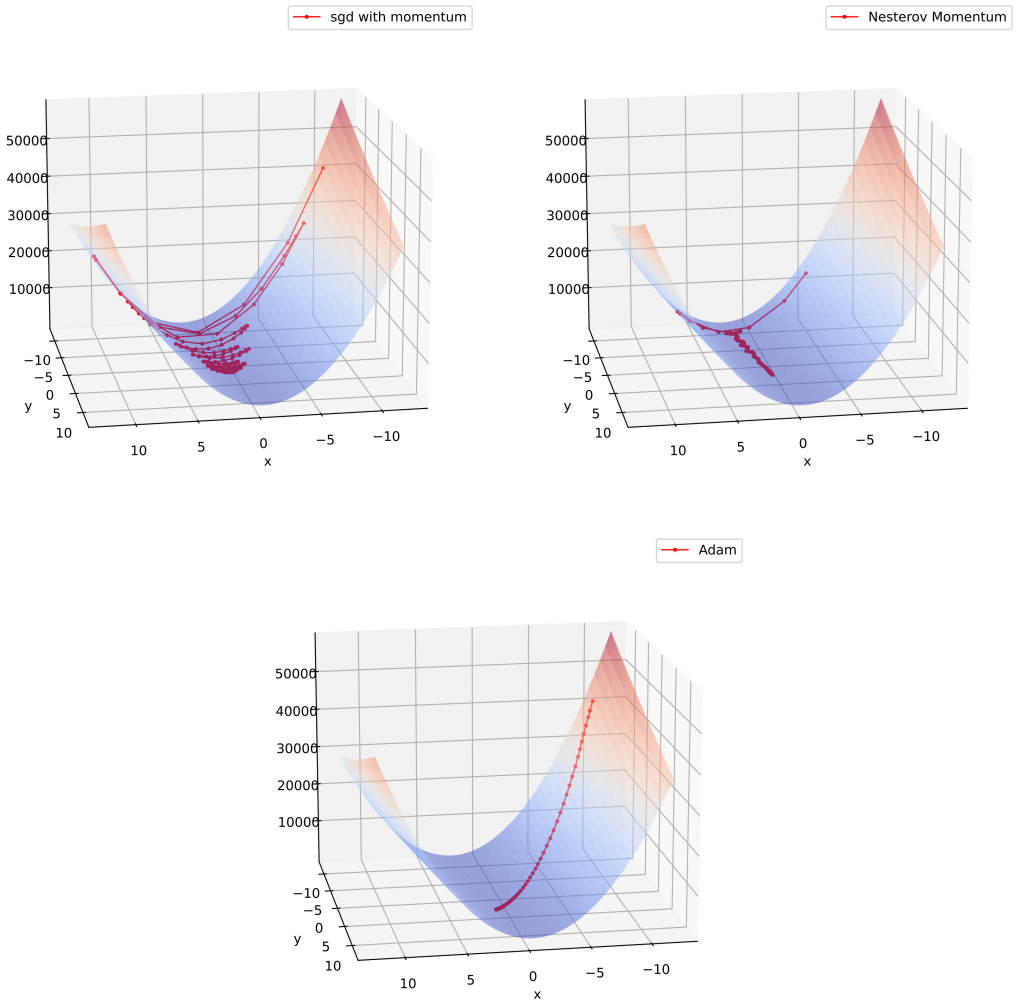


Рис. 1: All Methods side-by-side

Посмотрим на работу методов из предыдущих работ, то есть градиентный спуск, сгд, моментум, адам итп.





На графиках мы явно наблюдаем приемущество Квази-Ньютоновских алгоритмов, но это и не удивительно, мы смотрим на приближение гессиана, что позволяет нам понять на сколько мы можем шагнуть, поэтому сходимость не линейная, а суперлинейная. В методе Ньютона, у нас квадратичная сходимость, но мы на точное вычисление Гессиана будем тратить много ресурсов.

Gauss-Newton	PDL	BFGS	L- BFGS
(0.393342, 3.314003)	(0.394736, 3.315789)	(0.394736, 3.315789)	(0.394498, 3.317877)

Таблица 1: Convergence 1

Gradiend Descent	SGD	Adam	Nesterov
(0.394571, 3.317834)	(0.510510, 2.851005)	(0.341868, 3.321072)	(0.344294, 3.592078)

Таблица 2: Convergence 2

Gauss-Newton	PDL	BFGS	L-BFGS
1036562900	1251134567	2205300	2892300

Таблица 3: Time (ns) 1

Gradiend Descent	SGD	Adam	Nesterov
932050900	883746000	933071400	1020918400

Таблица 4: Time (ns) 2

Gauss-Newton	PDL	BFGS	L-BFGS
130	132	291	156

Таблица 5: Memory (MiB) 1

Gradiend Descent	SGD	Adam	Nesterov
270.2	261.36	264.62	262.61

Таблица 6: Memory (MiB) 2

5 Conclusion

Были исследованы методы Гаусса-Ньютона, Powell Dog Leg, BFGS и L-BFGS для нелинейной регрессии. Также мы сравнили эффективность этих алгоритмов между собой и с алгоритмами из предыдущих работ.