



بهینه سازی مبانی بهینه سازی نامقید روش های نیوتن و شبکه نیوتن

محسن هوشمند
دانشکده تکنولوژی اطلاعات و علم رایانه
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

روش‌های تاکنون

گرادیان نزولی مبتنی بر مشتق مرتبه اول

$$\begin{aligned}x_{i+1} &= x_i - \alpha_i (\nabla f(x_i)) \Leftarrow \text{گن} \\x_{i+1} &= x_i + \alpha_i (-\nabla f(x_i) + \beta_i p_i) \Leftarrow \text{گم}\end{aligned}$$

روشی مبتنی بر مشتق مرتبه دوم

▪ ماتریس هسی

$$x_{i+1} = x_i - \alpha_i H^{-1} \nabla f(x_i) \Leftarrow \text{نیوتن}$$

روش‌های تاکنون

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i \boldsymbol{p}_i$$

تاکنون

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i - \alpha_i V_i \nabla f(\boldsymbol{x}_i)^T$$

$$V_i = I$$

؟ □

$$V_i = H^{-1}$$

؟ □

روش نیوتن

$$f(\mathbf{x}_i + \mathbf{p}_i) \approx f(\mathbf{x}_i) + \nabla f(\mathbf{x}_i)^T \mathbf{p}_i + \frac{1}{2} \mathbf{p}_i^T \nabla^2 f(\mathbf{x}_i) \mathbf{p}_i$$

$$f(\mathbf{x}_i + \mathbf{p}_i) \approx \underbrace{f(\mathbf{x}_i) + \mathbf{g}_i^T \mathbf{p}_i + \frac{1}{2} \mathbf{p}_i^T \mathbf{H}_i \mathbf{p}_i}_{q(\mathbf{p})}$$

روش نیوتن: \mathbf{p} کاہنده تقریب درجه دو (

$$\nabla q(\mathbf{p}_i) = \mathbf{g} + \mathbf{H}\mathbf{p}_i = \mathbf{0}$$

معادله نیوتن

$$\mathbf{H}\mathbf{p} = -\mathbf{g}$$

$$\mathbf{p}_i = -\mathbf{H}_i^{-1} \mathbf{g}_i$$

جهت نیوتن \mathbf{p}_k

روش شبې نیوتن

و دیویدن

- آزمایشگاه ملی آرگونه
- در دهه ۳۰ شمسی
- اولین شماره سیام درباره بهینه‌سازی در سال ۱۳۷۰ شمسی

بین روشن تندترین نزول و روشن نیوتن

غیرعملی بودن محاسبه ماتریس هسی

تقریب ماتریس وارون هسی

روش شبہ نیوتن - الگوریتم

مرحله i -ام

$$\mathbf{p}_i = -B_i^{-1} \mathbf{g}_i$$

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_{i+1} &= \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i \\ \mathbf{g}_{i+1} &= \nabla f(\mathbf{x}_{i+1})\end{aligned}$$

$$B_{i+1} \propto (B_i, \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i, \mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i)$$

روش شبې نیوتن

ماتریس هسى

- هزینه بالا يا غیرممکنى محاسبه دقیق هسى

چگونه؟

▪ تقریبی هسى

▪ B_i دارای اطلاع

▪ استفاده از نو کردن مناسب

▪ بروز کردن ماتریس در هر تکرار با استفاده از اطلاع مرتبه اول

▪ استفاده از منحنی اندازه‌گیری شده در طول قدم فعلی

روش شبې نیوتن

$$m_i(\mathbf{p}) = f_i + \mathbf{p}^T \nabla f_i + \mathbf{p}^T B_i \mathbf{p}$$

$\nabla^2 f(x_i)$ از B_i تخمینی از

▪ ماتریس مثبت معین متقارن

▪ بروز شدن مقدار ماتریس در هر تکرار

$$\nabla m_i(\mathbf{p}) = \nabla f_i + B_i \mathbf{p}$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{0}$$

$$m_i(\mathbf{0}) = f_i$$

$$\nabla m_i(\mathbf{0}) = \nabla f_i$$

$m_i(\mathbf{p})$ تابع درجه دو کوز

▪ کمینه‌ساز تابع

$$\mathbf{p}_i = -B_i^{-1} \nabla f_i$$

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$$

▪ مشابه روش نیوتن

با تخمین به جای مقدار معکوس هسی

روش شبې نیوتن - ادامه

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i = \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{s}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i = \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{g}_i = \nabla f(\mathbf{x}_i)$$

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i$$

چگونه؟

دارای اطلاع B_i

نو کردن مناسب با استفاده از اطلاعات قبلی

محاسبه B_{i+1}

$$\nabla f(\mathbf{x}_{i+1}) = \nabla f(\mathbf{x}_i) - B_{i+1} \mathbf{s}_i$$

یا

$$B_{i+1} \mathbf{s}_i = \nabla f(\mathbf{x}_{i+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_i)$$

معروف به «معادله وتر» (نمايش‌های دیگر)

$$B_{i+1} \mathbf{s}_i = \mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i$$

$$B_{i+1} \mathbf{s}_i = \mathbf{y}_i$$

روش شبې نیوتن - ادامه

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i \boldsymbol{p}_i$$

$$\boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i = \alpha_i \boldsymbol{p}_i$$

$$\boldsymbol{s}_i = \boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{x}_i = \alpha_i \boldsymbol{p}_i$$

$$\boldsymbol{g}_i = \nabla f(\boldsymbol{x}_i)$$

$$\boldsymbol{y}_i = \boldsymbol{g}_{i+1} - \boldsymbol{g}_i$$

$$B_{i+1} \boldsymbol{s}_i = \boldsymbol{y}_i$$

همچنین خواهان

تقارن B_{i+1}

اختلاف کم با B_i B_{i+1}

B_{i+1} مثبت معین، آن گاه B_i مثبت معین

روش شبې نیوتن - نوکردن متقارن رتبه-یک

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i = \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{s}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i = \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{g}_i = \nabla f(\mathbf{x}_i)$$

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i$$

$$B_{i+1} \mathbf{s}_i = \mathbf{y}_i$$

$$B_{i+1} = B_i + a \mathbf{u} \mathbf{u}^T$$

نو کردن با ماتریس رتبه یک

$a = -1$ یا $a = +1$

انتخاب a و \mathbf{u} به نحوی که برآورده‌ساز معادله وتر باشد

$$\begin{aligned} B_{i+1} \mathbf{s}_i &= \mathbf{y}_i \implies B_i \mathbf{s}_i + a \mathbf{u} \mathbf{u}^T \mathbf{s}_i = \mathbf{y}_i \\ &\implies (a \mathbf{u}^T \mathbf{s}_i) \mathbf{u} = \mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i \end{aligned}$$

$\mathbf{u}^T \mathbf{s}_i$ صرفا ضریب، پس جابجاپذیر

پس \mathbf{u} ضریبی از

$$\mathbf{u} = \zeta (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)$$

$$\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i = a \zeta^2 (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i) (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)^T \mathbf{s}_i$$

$$\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i = a \zeta^2 [\mathbf{s}_i^T (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)] (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)$$

روش شبې نیوتن - نوکردن متقارن رتبه-یک

$$\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i = a\zeta^2 (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i) (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)^T \mathbf{s}_i$$
$$\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i = a\zeta^2 [\mathbf{s}_i^T (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)] (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)$$

a ▪

▪ برابر علامت
[$\mathbf{s}_i^T (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)$] ▪

ζ ▪

▪ $\pm [\mathbf{s}_i^T (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)]^{-\frac{1}{2}}$ ▪

نو کردن با ماتریس رتبه یک

$$B_{i+1} = B_i + \alpha \mathbf{u} \mathbf{u}^T$$

$$\mathbf{u} = \zeta (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)$$

نتیجه: نوکردن متقارن رتبه-یک برآورده کننده معادله وتر

$$B_{i+1} = B_i + a\zeta^2 (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i) (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)^T$$

روش شبې نیوتن - نوکردن متقارن رتبه-یک

$$\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i = a\zeta^2 (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i) (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)^T \mathbf{s}_i$$
$$\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i = a\zeta^2 [\mathbf{s}_i^T (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)] (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)$$

$$[a \cdot [\mathbf{s}_i^T (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)] \cdot \zeta \cdot \pm [\mathbf{s}_i^T (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)]^{\frac{1}{2}}]$$

نوکردن با ماتریس رتبه یک

$$B_{i+1} = B_i + \alpha \mathbf{u} \mathbf{u}^T$$

$$\mathbf{u} = \zeta (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)$$

نتیجه: نوکردن متقارن رتبه-یک برآورده کننده معادله وتر

$$B_{i+1} = B_i + \frac{(\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i) (\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)^T}{(\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)^T \mathbf{s}_i}$$

نوکردن متقارن رتبه-یک (مر-۱-ادامه)

در واقع به دنبال معکوس B_{i+1}

قضیه معادله شرمن-موریسن-وودباری

اگر $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ و $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ و $A + \mathbf{u}\mathbf{v}^T$ ناتکین باشد، آن‌گاه معکوس آن برابر است با

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

اثبات- تمرین

نوکردن متقارن رتبه-یک (مر-۱-ادامه)

در واقع به دنبال معکوس B_{i+1}

تعمیم قضیه معادله شرمن-موریسن-وودباری

اگر $I + V^T A^{-1} U$ و $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ آن‌گاه UV^T معکوس‌پذیر خواهد بود اگر و فقط اگر $U, V \in \mathbb{R}^{n \times d}$ معکوس‌پذیر باشد. در این صورت:

$$(A + UV^T)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(I + V^T A^{-1} U)^{-1}V^T A^{-1}$$

نوکردن متقارن رتبه-یک (مر-۱-ادامه)

$$B_{i+1} = B_i + \frac{(\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)(\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)^T}{(\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)^T \mathbf{s}_i}$$

در واقع به دنبال معکوس
قضیه معادله شرمن-موریسن-وودباری

اگر $A + \mathbf{u}\mathbf{v}^T$ و $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ و $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ناتکین باشد، آن‌گاه معکوس آن برابر است با

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

$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$ آن‌گاه $M_r^{-1} B^\rho$ یا معکوس B

$$x_{i+1} - x_i = \alpha_i p_i$$

$$s_i = x_{i+1} - x_i = \alpha_i p_i$$

$$g_i = \nabla f(x_i)$$

$$y_i = g_{i+1} - g_i$$

$$B_{i+1} s_i = y_i$$

$$B_{i+1}^\rho = B_i^\rho + \frac{(s_i - B_i^\rho y_i)(s_i - B_i^\rho y_i)^T}{(s_i - B_i^\rho y_i)^T y_i}$$

نوکردن متقارن رتبه-یک (مر-۱-دامه)

$$B_{i+1} = B_i + \frac{(\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)(\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)^T}{(\mathbf{y}_i - B_i \mathbf{s}_i)^T \mathbf{s}_i}$$

آنگاه مر-۱^{*} یا معکوس B^{\dagger} :

$$B_{i+1}^{\dagger} = B_i^{\dagger} + \frac{(\mathbf{s}_i - B_i^{\dagger} \mathbf{y}_i)(\mathbf{s}_i - B_i^{\dagger} \mathbf{y}_i)^T}{(\mathbf{s}_i - B_i^{\dagger} \mathbf{y}_i)^T \mathbf{y}_i}$$

نوکردن متقارن رتبه-یک (مر-۱-ادامه)

امکان صفر بودن $\mathbf{s}_i^T \mathbf{s}_i$

عدم رعایت مثبت معین بودن

$$B_{i+1}^\rho = B_i^\rho + \frac{(\mathbf{s}_i - B_i^\rho \mathbf{y}_i)(\mathbf{s}_i - B_i^\rho \mathbf{y}_i)^T}{(\mathbf{s}_i - B_i^\rho \mathbf{y}_i)^T \mathbf{y}_i}$$

۱-

روش‌های نوکردن تکراری شبه‌نیوتن دیگر

$$B_{i+1}^{\rho} = B_i^{\rho} + \frac{(\mathbf{s}_i - B_i^{\rho} \mathbf{y}_i)(\mathbf{s}_i - B_i^{\rho} \mathbf{y}_i)^T}{(\mathbf{s}_i - B_i^{\rho} \mathbf{y}_i)^T \mathbf{y}_i}$$

روش‌های نوکردن تکراری شبه‌نیوتن دیگر

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i = \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{s}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i = \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{g}_i = \nabla f(\mathbf{x}_i)$$

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i$$

$$B_{i+1} \mathbf{s}_i = \mathbf{y}_i$$

دیویدن-فلچر-پاول DFP

$$B_{i+1}^{\hat{\rho}} = B_i^{\hat{\rho}} - \frac{B_i^{\hat{\rho}} \mathbf{y}_i \mathbf{y}_i^T B_i^{\hat{\rho}}}{\mathbf{y}_i^T B_i^{\hat{\rho}} \mathbf{y}_i} + \frac{\mathbf{s}_i \mathbf{s}_i^T}{\mathbf{y}_i^T \mathbf{s}_i}$$

روش‌های نوکردن تکراری شبه‌نیوتن دیگر

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i = \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{s}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i = \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{g}_i = \nabla f(\mathbf{x}_i)$$

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i$$

$$B_{i+1} \mathbf{s}_i = \mathbf{y}_i$$

$$B_{i+1}^{\hat{\rho}} = (I - \gamma_i \mathbf{s}_i \mathbf{y}_i^T) B_i^{\hat{\rho}} (I - \gamma_i \mathbf{y}_i \mathbf{s}_i^T) + \gamma_i \mathbf{s}_i \mathbf{s}_i^T$$

برویدن-فلچر-گولدفرب-شانو BFGS

$$\gamma_i = \frac{1}{\mathbf{y}_i^T \mathbf{s}_i}$$

\mathbf{s}_i یا \mathbf{p}_i

روش‌های جستجو خط

روش‌های جستجو خط

$$\begin{aligned}
 \mathbf{x}_{i+1} &= \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i \\
 \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i &= \alpha_i \mathbf{p}_i \\
 \mathbf{s}_i &= \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i = \alpha_i \mathbf{p}_i \\
 \mathbf{g}_i &= \nabla f(\mathbf{x}_i) \\
 \mathbf{y}_i &= \mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i \\
 B_{i+1} \mathbf{s}_i &= \mathbf{y}_i \\
 \gamma_i &= \frac{1}{\mathbf{y}_i^T \mathbf{s}_i}
 \end{aligned}$$

۱- مر

$$B_{i+1}^\rho = B_i^\rho + \frac{(\mathbf{s}_i - B_i^\rho \mathbf{y}_i)(\mathbf{s}_i - B_i^\rho \mathbf{y}_i)^T}{(\mathbf{s}_i - B_i^\rho \mathbf{y}_i)^T \mathbf{y}_i}$$

دفپ

$$B_{i+1}^\rho = B_i^\rho - \frac{B_i^\rho \mathbf{y}_i \mathbf{y}_i^T B_i^\rho}{\mathbf{y}_i^T B_i^\rho \mathbf{y}_i} + \frac{\mathbf{s}_i \mathbf{s}_i^T}{\mathbf{y}_i^T \mathbf{s}_i}$$

بفگش

$$B_{i+1}^\rho = (I - \gamma_i \mathbf{s}_i \mathbf{s}_i^T) B_i^\rho (I - \gamma_i \mathbf{y}_i \mathbf{y}_i^T) + \gamma_i \mathbf{s}_i \mathbf{s}_i^T$$

الگوريتم

مقداردهی اولیه

$$B_0^{\rho} = I$$

$$B_0^{\rho} = H^{-1}$$

اگر تابع درجه دو باشد

- ماتریس هسی دقیق بعد از n مرحله به دست خواهد آمد

$$B_0^{\rho} = I$$

اگر تابع غیردرجه دو

- شن معمولاً سریعتر از گم
- عدم نیاز به جستجو خط کامل

الگوريتم

انتخاب x_0 و ϵ

محاسبه ماتریس وارون هسی $B_0^{\hat{P}}$

$i = 0$

تازمان $\|\nabla f_i\| > \epsilon$
▪ محاسبه جهت جستجو

$$p_i = -B_i^{\hat{P}} \nabla f_i$$

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$$

يافتن α_i با جستجوی خط تا يافتن مقدار برآورده کننده شرط وولف

$$s_i = x_{i+1} - x_i$$

$$y_i = \nabla f_{i+1} - \nabla f_i$$

$$\gamma_i = \frac{1}{y_i^T s_i}$$

$$B_{i+1}^{\hat{P}} = (I - \gamma_i s_i y_i^T) B_i^{\hat{P}} (I - \gamma_i y_i s_i^T) + \gamma_i s_i s_i^T$$

$$i = i + 1$$

خانواده بریدون

$$B_{i+1} = B_i - \frac{B_i s_i s_i^T B_i}{s_i^T B_i s_i} + \frac{y_i y_i^T}{y_i^T s_i} + \phi_i(s_i^T B_i s_i) v_i v_i^T$$

$$v_i = \frac{y_i}{y_i^T s_i} - \frac{B_i s_i}{s_i^T B_i s_i}$$

برویدن-فلچر-گولدفرب-شانو
 $\phi_i = 0$ ▪

دیویدن-فلچر-پاول DFP
 $\phi_i = 1$ ▪

خانواده بریدون

ترکیب

$$B_{i+1} = (1 - \phi_i)B_{i+1}^{BFGS} + \phi_i B_{i+1}^{DFP}$$

برویدن-فلچر-گولدفرب-شانو

$$\phi_i = 0$$

داویدون-فلچر-پاول DFP

$$\phi_i = 1$$

شبه نیوتن

هزینه بالا یا غیرممکنی محاسبه دقیق هسی
تقریبی هسی

بروز کردن ماتریس در هر تکرار با استفاده از اطلاع مرتبه اول
مزایا

- صرفا استفاده از مشتق مرتبه اول
- ماتریس تقریب وارون هسی مثبت معین
- نشان گر نزول
- $O(n^3)$ ضرب به ازای هر مرحله

معایب

- امکان نبود جهت نزول
- امکان دقیق نبودن تخمین هسی

منابع

[نازهہ]

[لوئنبرگ]

[فلچر]

What are the differences between the different gradient-based numerical optimization methods?, <https://scicomp.stackexchange.com/questions/26960/what-are-the-differences-between-the-different-gradient-based-numerical-optimiza>

W. Hager, H. Zhang, "A Survey Of Nonlinear Conjugate Gradient Methods," Pac. J. Optim. 2, No. 1, 35-58, 2006.

"Conjugate Gradient," <https://bookdown.org/rdpeng/advstatcomp/conjugate-gradient.html>

M. Zibulevsky, "Method of Conjugate Gradients," https://www.youtube.com/watch?v=hZVK_PGE0_I

"Proving the Vector Projection Formula," <https://www.youtube.com/watch?v=MdfArHIKWZc>

"Orthogonal Projections," <http://mathonline.wikidot.com/orthogonal-projections>