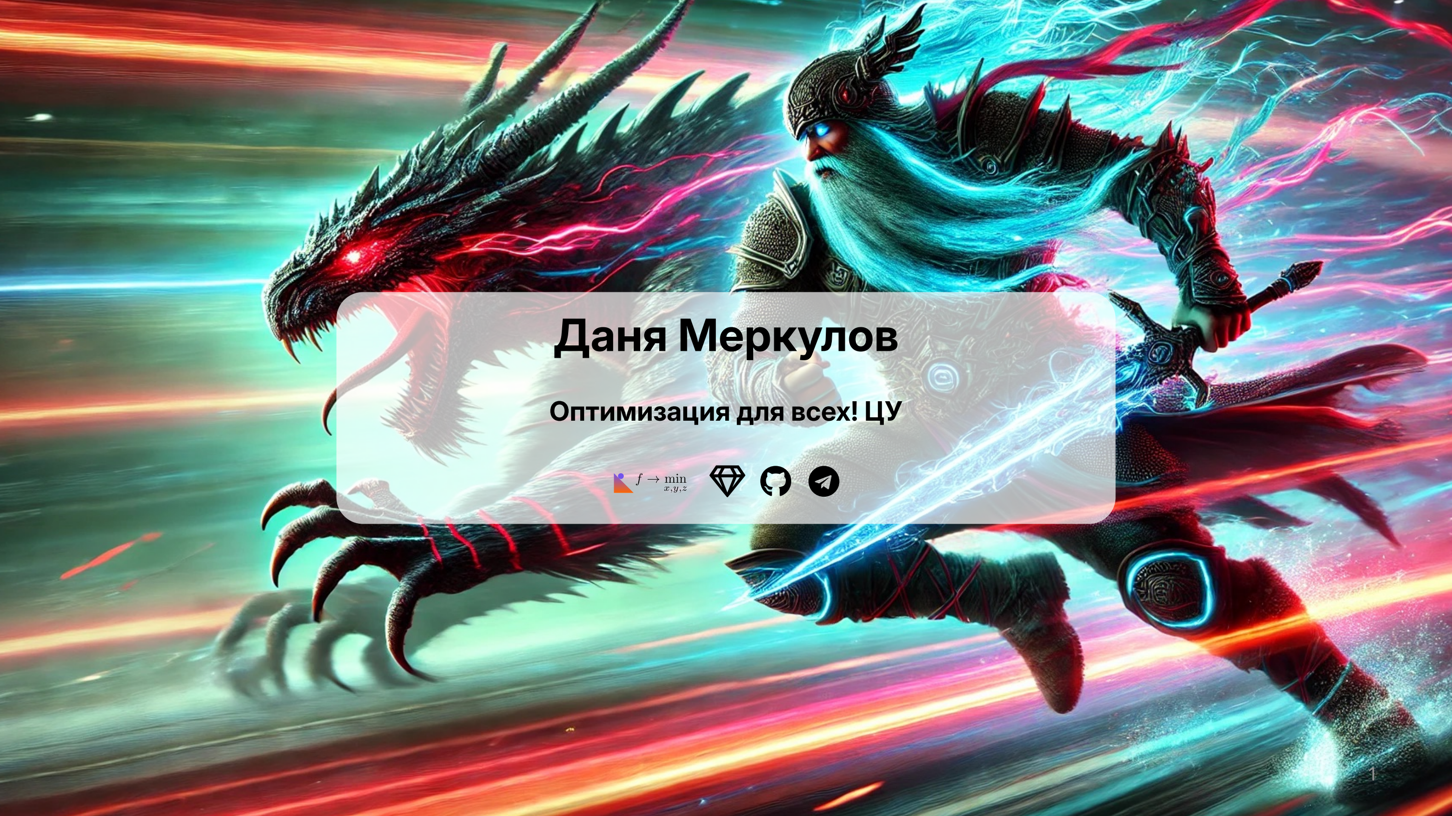
ЦЕНТРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Ускоренные градиентные методы

МЕТОДЫ ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

НЕДЕЛЯ 8

Даня Меркулов
Пётр Остроухов



Даня Меркулов

Оптимизация для всех! ЦУ

$f \to \min\limits_{x,y,z}$

Сходимость градиентного спуска

Градиентный спуск: $\min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ $\qquad x^{k+1} = x^k - \alpha^k \nabla f(x^k)$

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая)	гладкая & выпуклая	гладкая & сильно выпуклая
$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$\min\limits_{0 \le i \le k} \|\nabla f(x^i)\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$	$\|x^k - x^*\|^2 = \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\varkappa \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

Сходимость градиентного спуска

Градиентный спуск: $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ $\qquad x^{k+1} = x^k - \alpha^k \nabla f(x^k)$

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая)	гладкая & выпуклая	гладкая & сильно выпуклая
$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$\min_{0 \le i \le k} \|\nabla f(x^i)\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$	$\|x^k - x^*\|^2 = \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\varkappa \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

Для гладкой сильно выпуклой функции мы имеем:

$$f(x^k) - f^* \le \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k \left(f(x^0) - f^*\right).$$

Сходимость градиентного спуска

Градиентный спуск: $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \qquad x^{k+1} = x^k - \alpha^k \nabla f(x^k)$

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая)	гладкая & выпуклая	гладкая & сильно выпуклая
$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$\min_{0 \le i \le k} \|\nabla f(x^i)\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$	$\|x^k - x^*\|^2 = \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\varkappa \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

Для гладкой сильно выпуклой функции мы имеем:

$$f(x^k) - f^* \le \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k (f(x^0) - f^*).$$

Обратите внимание, что для любого x, поскольку e^{-x} выпуклая и $1 - x$ является её касательной в точке $x = 0$, мы имеем:

$$1 - x \le e^{-x}$$

Сходимость градиентного спуска

Градиентный спуск: $\min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \qquad x^{k+1} = x^k - \alpha^k \nabla f(x^k)$

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая)	гладкая & выпуклая	гладкая & сильно выпуклая
$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$\min\limits_{0 \le i \le k} \|\nabla f(x^i)\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$	$\|x^k - x^*\|^2 = \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\varkappa \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

Для гладкой сильно выпуклой функции мы имеем:

$$f(x^k) - f^* \le \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k (f(x^0) - f^*).$$

Обратите внимание, что для любого x, поскольку e^{-x} выпуклая и $1 - x$ является её касательной в точке $x = 0$, мы имеем:

$$1 - x \le e^{-x}$$

Наконец:

$$\varepsilon = f(x^{k_\varepsilon}) - f^*$$

Сходимость градиентного спуска

Градиентный спуск: $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ $\qquad x^{k+1} = x^k - \alpha^k \nabla f(x^k)$

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая)	гладкая & выпуклая	гладкая & сильно выпуклая
$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$	$\min_{0 \le i \le k} \|\nabla f(x^i)\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$	$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$	$\|x^k - x^*\|^2 = \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k\right)$
$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$	$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\varkappa \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

Для гладкой сильно выпуклой функции мы имеем:

$$f(x^k) - f^* \le \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k (f(x^0) - f^*).$$

Обратите внимание, что для любого x, поскольку e^{-x} выпуклая и $1 - x$ является её касательной в точке $x = 0$, мы имеем:

$$1 - x \le e^{-x}$$

Наконец:

$$\varepsilon = f(x^{k_\varepsilon}) - f^* \le \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^{k_\varepsilon} (f(x^0) - f^*)$$

Сходимость градиентного спуска

Градиентный спуск: $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ $\qquad x^{k+1} = x^k - \alpha^k \nabla f(x^k)$

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая)	гладкая & выпуклая	гладкая & сильно выпуклая
$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$	$\min_{0 \le i \le k} \|\nabla f(x^i)\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$	$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$	$\|x^k - x^*\|^2 = \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k\right)$
$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$	$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\varkappa \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

Для гладкой сильно выпуклой функции мы имеем:

$$f(x^k) - f^* \le \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k (f(x^0) - f^*).$$

Обратите внимание, что для любого x, поскольку e^{-x} выпуклая и $1 - x$ является её касательной в точке $x = 0$, мы имеем:

$$1 - x \le e^{-x}$$

Наконец:

$$\begin{aligned} \varepsilon = f(x^{k_\varepsilon}) - f^* &\le \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^{k_\varepsilon} (f(x^0) - f^*) \\ &\le \exp\left(-k_\varepsilon \frac{\mu}{L}\right) (f(x^0) - f^*) \end{aligned}$$

Сходимость градиентного спуска

Градиентный спуск: $\min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \qquad x^{k+1} = x^k - \alpha^k \nabla f(x^k)$

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая)	гладкая & выпуклая	гладкая & сильно выпуклая
$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$\min\limits_{0 \leq i \leq k} \|\nabla f(x^i)\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$f(x^k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$	$\|x^k - x^*\|^2 = \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\varkappa \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

Для гладкой сильно выпуклой функции мы имеем:

$$
f(x^k) - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k (f(x^0) - f^*).
$$

Обратите внимание, что для любого x, поскольку e^{-x} выпуклая и $1 - x$ является её касательной в точке $x = 0$, мы имеем:

$$
1 - x \leq e^{-x}
$$

Наконец:

$$
\begin{aligned}
\varepsilon = f(x^{k_\varepsilon}) - f^* &\leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^{k_\varepsilon} (f(x^0) - f^*) \\
&\leq \exp\left(-k_\varepsilon \frac{\mu}{L}\right) (f(x^0) - f^*) \\
k_\varepsilon \geq \varkappa \log \frac{f(x^0) - f^*}{\varepsilon} &= \mathcal{O}\left(\varkappa \log \frac{1}{\varepsilon}\right)
\end{aligned}
$$

Сходимость градиентного спуска

Вопрос: Можно ли добиться лучшей скорости сходимости, используя только информацию первого порядка?

Сходимость градиентного спуска

Вопрос: Можно ли добиться лучшей скорости сходимости, используя только информацию первого порядка? **Да, можно.**

Нижние оценки

Нижние оценки

Для нижних оценок пишут $\Omega\left(\cdot\right)$ вместо $\mathcal{O}\left(\cdot\right)$.

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая)[1]	гладкая & выпуклая[2]	гладкая & сильно выпуклая
$f(x^k) - f^* = \Omega\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \Omega\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$\min\limits_{0 \leq i \leq k} \|\nabla f(x^i)\| = \Omega\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \Omega\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$	$f(x^k) - f^* = \Omega\left(\frac{1}{k^2}\right)$ $k_\varepsilon = \Omega\left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right)$	$f(x^k) - f^* = \Omega\left(\left(\frac{\sqrt{\varkappa}-1}{\sqrt{\varkappa}+1}\right)^{2k}\right)$ $k_\varepsilon = \Omega\left(\sqrt{\varkappa}\log\frac{1}{\varepsilon}\right)$

[1] Carmon, Duchi, Hinder, Sidford, 2017

[2] Nemirovski, Yudin, 1979

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

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

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k - \alpha^k \nabla f(x^k) \\ &= x^{k-1} - \alpha^{k-1} \nabla f(x^{k-1}) - \alpha^k \nabla f(x^k) \end{aligned}$$

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

$$
\begin{aligned}
x^{k+1} &= x^k - \alpha^k \nabla f(x^k) \\
&= x^{k-1} - \alpha^{k-1} \nabla f(x^{k-1}) - \alpha^k \nabla f(x^k) \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

$$
\begin{aligned}
x^{k+1} &= x^k - \alpha^k \nabla f(x^k) \\
&= x^{k-1} - \alpha^{k-1} \nabla f(x^{k-1}) - \alpha^k \nabla f(x^k) \\
&\;\vdots \\
&= x^0 - \sum_{i=0}^{k} \alpha^{k-i} \nabla f(x^{k-i})
\end{aligned}
$$

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

$$
\begin{aligned}
x^{k+1} &= x^k - \alpha^k \nabla f(x^k) \\
&= x^{k-1} - \alpha^{k-1} \nabla f(x^{k-1}) - \alpha^k \nabla f(x^k) \\
&\;\vdots \\
&= x^0 - \sum_{i=0}^{k} \alpha^{k-i} \nabla f(x^{k-i})
\end{aligned}
$$

Рассмотрим семейство методов первого порядка, где

$$
\begin{aligned}
x^{k+1} &\in x^0 + \text{Lin}\left\{\nabla f(x^0), \nabla f(x^1), \ldots, \nabla f(x^k)\right\} && f \text{ — гладкая} \\
x^{k+1} &\in x^0 + \text{Lin}\left\{g_0, g_1, \ldots, g_k\right\} \text{, где } g_i \in \partial f(x^i) && f \text{ — негладкая}
\end{aligned}
\tag{1}
$$

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

$$
\begin{aligned}
x^{k+1} &= x^k - \alpha^k \nabla f(x^k) \\
&= x^{k-1} - \alpha^{k-1} \nabla f(x^{k-1}) - \alpha^k \nabla f(x^k) \\
&\;\;\vdots \\
&= x^0 - \sum_{i=0}^{k} \alpha^{k-i} \nabla f(x^{k-i})
\end{aligned}
$$

Рассмотрим семейство методов первого порядка, где

$$
\begin{aligned}
& x^{k+1} \in x^0 + \text{Lin} \left\{ \nabla f(x^0), \nabla f(x^1), \dots, \nabla f(x^k) \right\} && f \text{ — гладкая} \\
& x^{k+1} \in x^0 + \text{Lin} \left\{ g_0, g_1, \dots, g_k \right\} \text{, где } g_i \in \partial f(x^i) && f \text{ — негладкая}
\end{aligned} \tag{1}
$$

Чтобы построить нижнюю оценку, нам нужно найти функцию f из соответствующего класса, такую, что любой метод из семейства (1) будет работать не быстрее этой нижней оценки.

Гладкий случай

ℹ Theorem

Существует L-гладкая и выпуклая функция f, такая, что любой метод (1) для всех k, $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$f(x^k) - f^* \geq \frac{3L\|x^0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

Гладкий случай

Theorem

Существует L-гладкая и выпуклая функция f, такая, что любой метод (1) для всех k, $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$
f(x^k) - f^* \geq \frac{3L\|x^0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}
$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f, на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.

Гладкий случай

Theorem

Существует L-гладкая и выпуклая функция f, такая, что любой метод (1) для всех k, $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$
f(x^k) - f^* \geq \frac{3L\|x^0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}
$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f, на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.
- Ключом к доказательству является явное построение специальной функции f.

Гладкий случай

Theorem

Существует L-гладкая и выпуклая функция f, такая, что любой метод (1) для всех k, $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$
f(x^k) - f^* \geq \frac{3L\|x^0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}
$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f, на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.
- Ключом к доказательству является явное построение специальной функции f.
- Обратите внимание, что эта граница $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ не соответствует скорости градиентного спуска $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$. Два возможных варианта:

Гладкий случай

Theorem

Существует L-гладкая и выпуклая функция f, такая, что любой метод (1) для всех k, $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$f(x^k) - f^* \geq \frac{3L\|x^0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f, на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.
- Ключом к доказательству является явное построение специальной функции f.
- Обратите внимание, что эта граница $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ не соответствует скорости градиентного спуска $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$. Два возможных варианта:
    a. Нижняя оценка не является точной.

Гладкий случай

Theorem

Существует L-гладкая и выпуклая функция f, такая, что любой метод (1) для всех k, $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$f(x^k) - f^* \geq \frac{3L\|x^0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f, на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.
- Ключом к доказательству является явное построение специальной функции f.
- Обратите внимание, что эта граница $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ не соответствует скорости градиентного спуска $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$. Два возможных варианта:
  a. Нижняя оценка не является точной.
  b. Метод градиентного спуска не является оптимальным для этой задачи.

Гладкий случай

Theorem

Существует L-гладкая и выпуклая функция f, такая, что любой метод (1) для всех k, $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$
f(x^k) - f^* \geq \frac{3L\|x^0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}
$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f, на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.
- Ключом к доказательству является явное построение специальной функции f.
- Обратите внимание, что эта граница $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ не соответствует скорости градиентного спуска $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$. Два возможных варианта:
    a. Нижняя оценка не является точной.
    b. **Метод градиентного спуска не является оптимальным для этой задачи.**

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$
A = \begin{bmatrix}
2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
-1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\
0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2
\end{bmatrix}
$$

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$
A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}
$$

- Обратите внимание, что

$$
x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,
$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Пример, когда $n = 3$:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k+1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$
A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}
$$

- Обратите внимание, что

$$
x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,
$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Пример, когда $n = 3$:

$$
A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}
$$

Нижняя оценка:

$$
\begin{aligned}
x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1 x_2 - 2x_2 x_3 \\
&= x_1^2 + x_1^2 - 2x_1 x_2 + x_2^2 + x_2^2 - 2x_2 x_3 + x_3^2 + x_3^2 \\
&= x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2 \geq 0
\end{aligned}
$$

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Пример, когда $n = 3$:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Нижняя оценка:

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1 x_2 - 2x_2 x_3 \\ &= x_1^2 + x_1^2 - 2x_1 x_2 + x_2^2 + x_2^2 - 2x_2 x_3 + x_3^2 + x_3^2 \\ &= x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2 \geq 0 \end{aligned}$$

Верхняя оценка

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1 x_2 - 2x_2 x_3 \\ &\leq 4(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \\ 0 &\leq 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 + 2x_1 x_2 + 2x_2 x_3 \\ 0 &\leq x_1^2 + x_1^2 + 2x_1 x_2 + x_2^2 + x_2^2 + 2x_2 x_3 + x_3^2 + x_3^2 \\ 0 &\leq x_1^2 + (x_1 + x_2)^2 + (x_2 + x_3)^2 + x_3^2 \end{aligned}$$

Наихудшая функция Нестерова

- Определим следующую L-гладкую выпуклую функцию: $f(x) = \frac{L}{4}\left(\frac{1}{2}x^T A x - e_1^T x\right) = \frac{L}{8}x^T A x - \frac{L}{4}e_1^T x$.

Наихудшая функция Нестерова

- Определим следующую L-гладкую выпуклую функцию: $f(x) = \frac{L}{4}\left(\frac{1}{2}x^T A x - e_1^T x\right) = \frac{L}{8}x^T A x - \frac{L}{4}e_1^T x$.
- Оптимальное решение x^* удовлетворяет $Ax^* = e_1$, и решение этой системы уравнений дает:

$$
\begin{bmatrix}
2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
-1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\
0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}
\qquad
\begin{cases}
2x_1^* - x_2^* = 1 \\
-x_{i-1}^* + 2x_i^* - x_{i+1}^* = 0, \ i = 2, \ldots, n-1 \\
-x_{n-1}^* + 2x_n^* = 0
\end{cases}
$$

Наихудшая функция Нестерова

- Определим следующую L-гладкую выпуклую функцию: $f(x) = \frac{L}{4}\left(\frac{1}{2}x^T A x - e_1^T x\right) = \frac{L}{8}x^T A x - \frac{L}{4}e_1^T x.$
- Оптимальное решение x^* удовлетворяет $Ax^* = e_1$, и решение этой системы уравнений дает:

$$
\begin{bmatrix}
2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
-1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\
0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}
\qquad
\begin{cases}
2x_1^* - x_2^* = 1 \\
-x_{i-1}^* + 2x_i^* - x_{i+1}^* = 0, \ i = 2, \dots, n-1 \\
-x_{n-1}^* + 2x_n^* = 0
\end{cases}
$$

- Гипотеза: $x_i^* = a + bi$ (вдохновлённая физикой). Проверьте, что выполнено второе уравнение, в то время как a и b вычисляются из первого и последнего уравнений.

Наихудшая функция Нестерова

- Определим следующую L-гладкую выпуклую функцию: $f(x) = \frac{L}{4}\left(\frac{1}{2}x^T Ax - e_1^T x\right) = \frac{L}{8}x^T Ax - \frac{L}{4}e_1^T x.$
- Оптимальное решение x^* удовлетворяет $Ax^* = e_1$, и решение этой системы уравнений дает:

$$
\begin{bmatrix}
2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
-1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\
0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}
\qquad
\begin{cases}
2x_1^* - x_2^* = 1 \\
-x_{i-1}^* + 2x_i^* - x_{i+1}^* = 0, \ i = 2, \ldots, n-1 \\
-x_{n-1}^* + 2x_n^* = 0
\end{cases}
$$

- Гипотеза: $x_i^* = a + bi$ (вдохновлённая физикой). Проверьте, что выполнено второе уравнение, в то время как a и b вычисляются из первого и последнего уравнений.
- Решение:

$$
x_i^* = 1 - \frac{i}{n+1},
$$

Наихудшая функция Нестерова

- Определим следующую L-гладкую выпуклую функцию: $f(x) = \frac{L}{4}\left(\frac{1}{2}x^T A x - e_1^T x\right) = \frac{L}{8}x^T A x - \frac{L}{4}e_1^T x.$
- Оптимальное решение x^* удовлетворяет $Ax^* = e_1$, и решение этой системы уравнений дает:

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \begin{cases} 2x_1^* - x_2^* = 1 \\ -x_{i-1}^* + 2x_i^* - x_{i+1}^* = 0, \ i = 2, \dots, n-1 \\ -x_{n-1}^* + 2x_n^* = 0 \end{cases}$$

- Гипотеза: $x_i^* = a + bi$ (вдохновлённая физикой). Проверьте, что выполнено второе уравнение, в то время как a и b вычисляются из первого и последнего уравнений.
- Решение:

$$x_i^* = 1 - \frac{i}{n+1},$$

- И значение функции равно

$$f(x^*) = \frac{L}{8}x^{*T} A x^* - \frac{L}{4}\langle x^*, e_1 \rangle = -\frac{L}{8}\langle x^*, e_1 \rangle = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right).$$

Гладкий случай (доказательство)

- Предположим, что мы начинаем с $x^0 = 0$. Запросив у оракула градиент, мы получаем $g_0 = -e_1$. Тогда, x^1 должен лежать на линии, генерируемой e_1. В этой точке все компоненты x^1 равны нулю, кроме первой, поэтому

$$x^1 = \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Гладкий случай (доказательство)

- Предположим, что мы начинаем с $x^0 = 0$. Запросив у оракула градиент, мы получаем $g_0 = -e_1$. Тогда, x^1 должен лежать на линии, генерируемой e_1. В этой точке все компоненты x^1 равны нулю, кроме первой, поэтому

$$x^1 = \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- На второй итерации мы снова запрашиваем у оракула градиент и получаем $g_1 = Ax^1 - e_1$. Тогда, x^2 должен лежать на линии, генерируемой e_1 и $Ax^1 - e_1$. Все компоненты x^2 равны нулю, кроме первых двух, поэтому

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow x^2 = \begin{bmatrix} \bullet \\ \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Гладкий случай (доказательство)

- Предположим, что мы начинаем с $x^0 = 0$. Запросив у оракула градиент, мы получаем $g_0 = -e_1$. Тогда, x^1 должен лежать на линии, генерируемой e_1. В этой точке все компоненты x^1 равны нулю, кроме первой, поэтому

$$x^1 = \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- На второй итерации мы снова запрашиваем у оракула градиент и получаем $g_1 = Ax^1 - e_1$. Тогда, x^2 должен лежать на линии, генерируемой e_1 и $Ax^1 - e_1$. Все компоненты x^2 равны нулю, кроме первых двух, поэтому

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow x^2 = \begin{bmatrix} \bullet \\ \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- Из-за структуры матрицы A можно показать, что после k итераций все последние $n-k$ компоненты x^k равны нулю.

$$x^{(k)} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} \bullet \\ \bullet \\ \vdots \\ \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ k \\ k+1 \\ \vdots \\ n \end{array}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Предположим, что мы начинаем с $x^0 = 0$. Запросив у оракула градиент, мы получаем $g_0 = -e_1$. Тогда, x^1 должен лежать на линии, генерируемой e_1. В этой точке все компоненты x^1 равны нулю, кроме первой, поэтому

$$x^1 = \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- На второй итерации мы снова запрашиваем у оракула градиент и получаем $g_1 = Ax^1 - e_1$. Тогда, x^2 должен лежать на линии, генерируемой e_1 и $Ax^1 - e_1$. Все компоненты x^2 равны нулю, кроме первых двух, поэтому

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow x^2 = \begin{bmatrix} \bullet \\ \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- Из-за структуры матрицы A можно показать, что после k итераций все последние $n-k$ компоненты x^k равны нулю.

$$x^{(k)} = \begin{bmatrix} \bullet \\ \bullet \\ \vdots \\ \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ k \\ k+1 \\ \vdots \\ n \end{array}$$

- Однако, поскольку каждая итерация x^k, произведенная нашим методом, лежит в $S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \ldots, e_k\}$ (т.е. имеет нули в координатах $k+1, \ldots, n$), она не может "достичь" полного оптимального вектора x^*. Другими словами, даже если бы мы выбрали лучший возможный вектор из S_k, обозначаемый

$$\tilde{x}^k = \arg\min_{x \in S_k} f(x),$$

значение функции в нём $f(\tilde{x}^k)$ будет выше, чем $f(x^*)$.

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x^k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ и $\tilde{x}^k$ является лучшим возможным приближением к x^* в S_k, мы имеем

$$f(x^k) \geq f(\tilde{x}^k).$$

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x^k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \ldots, e_k\}$ и $\tilde{x}^k$ является лучшим возможным приближением к x^* в S_k, мы имеем

$$f(x^k) \geq f(\tilde{x}^k).$$

- Следовательно,

$$f(x^k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}^k) - f(x^*).$$

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x^k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \ldots, e_k\}$ и $\tilde{x}^k$ является лучшим возможным приближением к x^* в S_k, мы имеем
$$f(x^k) \geq f(\tilde{x}^k).$$
- Следовательно,
$$f(x^k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}^k) - f(x^*).$$
- Аналогично, для оптимума исходной функции, мы имеем $\tilde{x}_i^k = 1 - \frac{i}{k+1}$ и $f(\tilde{x}^k) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$.

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x^k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \ldots, e_k\}$ и $\tilde{x}^k$ является лучшим возможным приближением к x^* в S_k, мы имеем

$$f(x^k) \geq f(\tilde{x}^k).$$

- Следовательно,

$$f(x^k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}^k) - f(x^*).$$

- Аналогично, для оптимума исходной функции, мы имеем $\tilde{x}_i^k = 1 - \frac{i}{k+1}$ и $f(\tilde{x}^k) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$.
- Теперь мы имеем:

$$f(x^k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}^k) - f(x^*) \tag{2}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x^k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \ldots, e_k\}$ и $\tilde{x}^k$ является лучшим возможным приближением к x^* в S_k, мы имеем

$$f(x^k) \geq f(\tilde{x}^k).$$

- Следовательно,

$$f(x^k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}^k) - f(x^*).$$

- Аналогично, для оптимума исходной функции, мы имеем $\tilde{x}_i^k = 1 - \frac{i}{k+1}$ и $f(\tilde{x}^k) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$.
- Теперь мы имеем:

$$\begin{aligned} f(x^k) - f(x^*) &\geq f(\tilde{x}^k) - f(x^*) \\ &= -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right) - \left(-\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)\right) \end{aligned} \tag{2}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x^k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \ldots, e_k\}$ и $\tilde{x}^k$ является лучшим возможным приближением к x^* в S_k, мы имеем

$$f(x^k) \geq f(\tilde{x}^k).$$

- Следовательно,

$$f(x^k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}^k) - f(x^*).$$

- Аналогично, для оптимума исходной функции, мы имеем $\tilde{x}_i^k = 1 - \frac{i}{k+1}$ и $f(\tilde{x}^k) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$.
- Теперь мы имеем:

$$\begin{aligned} f(x^k) - f(x^*) &\geq f(\tilde{x}^k) - f(x^*) \\ &= -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right) - \left(-\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)\right) \\ &= \frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{n+1}\right) = \frac{L}{8}\left(\frac{n-k}{(k+1)(n+1)}\right) \end{aligned} \tag{2}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x^k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \ldots, e_k\}$ и $\tilde{x}^k$ является лучшим возможным приближением к x^* в S_k, мы имеем

$$f(x^k) \geq f(\tilde{x}^k).$$

- Следовательно,

$$f(x^k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}^k) - f(x^*).$$

- Аналогично, для оптимума исходной функции, мы имеем $\tilde{x}_i^k = 1 - \frac{i}{k+1}$ и $f(\tilde{x}^k) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$.
- Теперь мы имеем:

$$\begin{aligned}
f(x^k) - f(x^*) &\geq f(\tilde{x}^k) - f(x^*) \\
&= -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right) - \left(-\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)\right) \\
&= \frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{n+1}\right) = \frac{L}{8}\left(\frac{n-k}{(k+1)(n+1)}\right) \\
&\overset{n=2k+1}{=} \frac{L}{16(k+1)}
\end{aligned} \tag{2}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x^0 - x^*\|_2$:

$$\|x^0 - x^*\|_2^2 = \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x^0 - x^*\|_2$:

$$
\begin{aligned}
\|x^0 - x^*\|_2^2 = \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 &= \sum_{i=1}^{n} \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 \\
&= n - \frac{2}{n+1}\sum_{i=1}^{n} i + \frac{1}{(n+1)^2}\sum_{i=1}^{n} i^2
\end{aligned}
$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x^0 - x^*\|_2$:

$$
\begin{aligned}
\|x^0 - x^*\|_2^2 = \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 &= \sum_{i=1}^{n} \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 \\
&= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^{n} i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^{n} i^2 \\
&\leq n - \frac{2}{n+1} \cdot \frac{n(n+1)}{2} + \frac{1}{(n+1)^2} \cdot \frac{(n+1)^3}{3}
\end{aligned}
$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x^0 - x^*\|_2$:

$$
\begin{aligned}
\|x^0 - x^*\|_2^2 = \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 &= \sum_{i=1}^{n} \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 \\
&= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^{n} i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^{n} i^2 \\
&\leq n - \frac{2}{n+1} \cdot \frac{n(n+1)}{2} + \frac{1}{(n+1)^2} \cdot \frac{(n+1)^3}{3} \\
&= \frac{n+1}{3} \overset{n=2k+1}{=} \frac{2(k+1)}{3}.
\end{aligned}
$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x^0 - x^*\|_2$:

$$
\begin{aligned}
\|x^0 - x^*\|_2^2 = \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 &= \sum_{i=1}^{n} \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 \\
&= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^{n} i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^{n} i^2 \\
&\leq n - \frac{2}{n+1} \cdot \frac{n(n+1)}{2} + \frac{1}{(n+1)^2} \cdot \frac{(n+1)^3}{3} \\
&= \frac{n+1}{3} \overset{n=2k+1}{=} \frac{2(k+1)}{3}.
\end{aligned}
$$

- Следовательно,

$$
k + 1 \geq \frac{3}{2} \|x^0 - x^*\|_2^2 = \frac{3}{2} R^2 \tag{3}
$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x^0 - x^*\|_2$:

$$\|x^0 - x^*\|_2^2 = \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2$$
$$= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^{n} i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^{n} i^2$$
$$\leq n - \frac{2}{n+1} \cdot \frac{n(n+1)}{2} + \frac{1}{(n+1)^2} \cdot \frac{(n+1)^3}{3}$$
$$= \frac{n+1}{3} \overset{n=2k+1}{=} \frac{2(k+1)}{3}.$$

- Следовательно,

$$k + 1 \geq \frac{3}{2}\|x^0 - x^*\|_2^2 = \frac{3}{2}R^2 \tag{3}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x^0 - x^*\|_2$:

$$\|x^0 - x^*\|_2^2 = \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2$$
$$= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^{n} i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^{n} i^2$$
$$\leq n - \frac{2}{n+1} \cdot \frac{n(n+1)}{2} + \frac{1}{(n+1)^2} \cdot \frac{(n+1)^3}{3}$$
$$= \frac{n+1}{3} \overset{n=2k+1}{=} \frac{2(k+1)}{3}.$$

Заметим, что

$$\sum_{i=1}^{n} i = \frac{n(n+1)}{2}$$
$$\sum_{i=1}^{n} i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$$
$$\leq \frac{(n+1)^3}{3}$$

- Следовательно,

$$k + 1 \geq \frac{3}{2}\|x^0 - x^*\|_2^2 = \frac{3}{2}R^2 \qquad (3)$$

Гладкий случай (доказательство)

Наконец, используя (2) и (3), мы получаем:

$$
f(x^k) - f(x^*) \geq \frac{L}{16(k+1)} = \frac{L(k+1)}{16(k+1)^2}
$$

Гладкий случай (доказательство)

Наконец, используя (2) и (3), мы получаем:

$$
\begin{aligned}
f(x^k) - f(x^*) &\geq \frac{L}{16(k+1)} = \frac{L(k+1)}{16(k+1)^2} \\
&\geq \frac{L}{16(k+1)^2} \frac{3}{2} R^2
\end{aligned}
$$

Гладкий случай (доказательство)

Наконец, используя (2) и (3), мы получаем:

$$
\begin{aligned}
f(x^k) - f(x^*) &\geq \frac{L}{16(k+1)} = \frac{L(k+1)}{16(k+1)^2} \\
&\geq \frac{L}{16(k+1)^2} \frac{3}{2} R^2 \\
&= \frac{3LR^2}{32(k+1)^2}
\end{aligned}
$$

Гладкий случай (доказательство)

Наконец, используя (2) и (3), мы получаем:

$$
\begin{aligned}
f(x^k) - f(x^*) &\geq \frac{L}{16(k+1)} = \frac{L(k+1)}{16(k+1)^2} \\
&\geq \frac{L}{16(k+1)^2} \frac{3}{2} R^2 \\
&= \frac{3LR^2}{32(k+1)^2}
\end{aligned}
$$

Это завершает доказательство с желаемой скоростью $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.

Нижние оценки для гладкого случая

Гладкий выпуклый случай

Существует L-гладкая выпуклая функция f, такая, что любой [метод в форме@eq-fom] для всех k, $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$
f(x^k) - f^* \geq \frac{3L\|x^0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}
$$

Гладкий сильно выпуклый случай

Для любого x^0 и любого $\mu > 0$, $\varkappa = \frac{L}{\mu} > 1$, существует L-гладкая и μ-сильно выпуклая функция f, такая, что для любого метода в форме 1 выполняются неравенства:

$$
\|x^k - x^*\|_2 \geq \left(\frac{\sqrt{\varkappa} - 1}{\sqrt{\varkappa} + 1} \right)^k \|x^0 - x^*\|_2
$$

$$
f(x^k) - f^* \geq \frac{\mu}{2} \left(\frac{\sqrt{\varkappa} - 1}{\sqrt{\varkappa} + 1} \right)^{2k} \|x^0 - x^*\|_2^2
$$

Ускорение для квадратичных функций

Результат сходимости для квадратичных функций

Предположим, что мы решаем задачу минимизации сильно выпуклой квадратичной функции, с помощью метода градиентного спуска:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x \qquad x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f(x^k).$$

Результат сходимости для квадратичных функций

Предположим, что мы решаем задачу минимизации сильно выпуклой квадратичной функции, с помощью метода градиентного спуска:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x \qquad x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f(x^k).$$

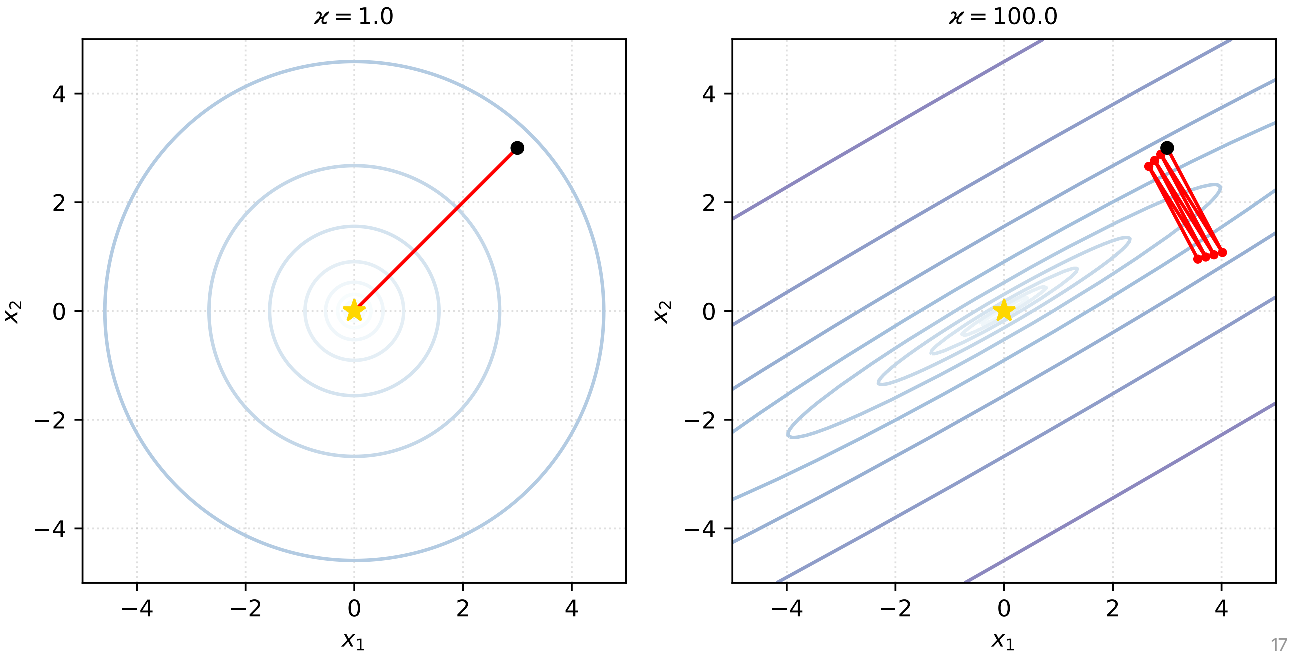
Theorem

Градиентный спуск с шагом $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$ сходится к оптимальному решению x^* со следующей гарантией:

$$\|x^{k+1} - x^*\|_2 \leq \left(\frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1}\right)^k \|x^0 - x^*\|_2 \qquad f(x^{k+1}) - f(x^*) \leq \left(\frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1}\right)^{2k} (f(x^0) - f(x^*))$$

где $\varkappa = \frac{L}{\mu}$ является числом обусловленности A.

Число обусловленности $\varkappa$



Ускорение из первых принципов

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x \qquad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Пусть x^* будет единственным решением системы линейных уравнений $Ax = b$ и пусть $e_k = x_k - x^*$, где $x_{k+1} = x_k - \alpha_k(Ax_k - b)$ определяется рекурсивно, начиная с некоторого x_0, а α_k — шаг, который мы определим позже.

$$e_{k+1} = (I - \alpha_k A)e_k.$$

Ускорение из первых принципов

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x \qquad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Пусть x^* будет единственным решением системы линейных уравнений $Ax = b$ и пусть $e_k = x_k - x^*$, где $x_{k+1} = x_k - \alpha_k(Ax_k - b)$ определяется рекурсивно, начиная с некоторого x_0, а α_k — шаг, который мы определим позже.

$$e_{k+1} = (I - \alpha_k A)e_k.$$

Полиномы

Вышеуказанный расчет дает нам $e_k = p_k(A)e_0$,
где p_k является полиномом

$$p_k(a) = \prod_{i=1}^{k}(1 - \alpha_i a).$$

Ускорение из первых принципов

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x \qquad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Пусть x^* будет единственным решением системы линейных уравнений $Ax = b$ и пусть $e_k = x_k - x^*$, где $x_{k+1} = x_k - \alpha_k(Ax_k - b)$ определяется рекурсивно, начиная с некоторого x_0, а α_k — шаг, который мы определим позже.

$$e_{k+1} = (I - \alpha_k A)e_k.$$

Полиномы

Вышеуказанный расчет дает нам $e_k = p_k(A)e_0$,
где p_k является полиномом

$$p_k(a) = \prod_{i=1}^{k}(1 - \alpha_i a).$$

Мы можем ограничить норму ошибки как

$$\|e_k\| \leq \|p_k(A)\| \cdot \|e_0\|.$$

Ускорение из первых принципов

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x \qquad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Пусть x^* будет единственным решением системы линейных уравнений $Ax = b$ и пусть $e_k = x_k - x^*$, где $x_{k+1} = x_k - \alpha_k(Ax_k - b)$ определяется рекурсивно, начиная с некоторого x_0, а α_k — шаг, который мы определим позже.

$$e_{k+1} = (I - \alpha_k A)e_k.$$

Полиномы

Вышеуказанный расчет дает нам $e_k = p_k(A)e_0$, где p_k является полиномом

$$p_k(a) = \prod_{i=1}^{k}(1 - \alpha_i a).$$

Мы можем ограничить норму ошибки как

$$\|e_k\| \leq \|p_k(A)\| \cdot \|e_0\|.$$

Поскольку A является симметричной матрицей с собственными значениями в $[\mu, L]$,:

$$\|p_k(A)\| \leq \max_{\mu \leq a \leq L} |p_k(a)|.$$

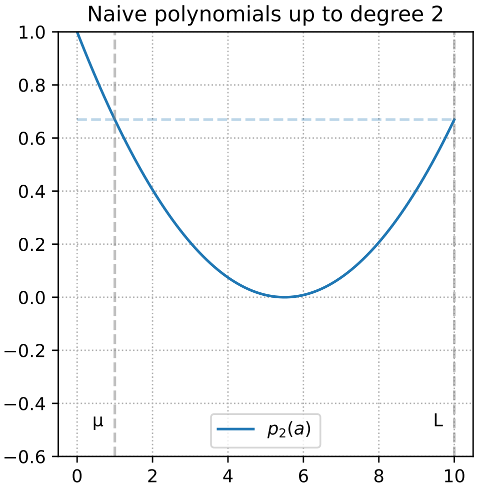
Это приводит к интересной постановке задачи: среди всех полиномов, удовлетворяющих $p_k(0) = 1$, мы ищем полином, значение которого как можно меньше отклоняется от нуля на интервале $[\mu, L]$.

Наивное полиномиальное решение

Наивное решение состоит в том, чтобы выбрать равномерный шаг $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$. Благодаря этому $|p_k(\mu)| = |p_k(L)|$.

$$\|e_k\| \leq \left(\frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1}\right)^k \|e_0\|$$

Это точно та же скорость, которую мы доказали в предыдущей лекции для любой гладкой и сильно выпуклой функции.
Давайте посмотрим на этот полином поближе. На правом рисунке мы выбираем $\alpha = 1$ и $\beta = 10$ так, что $\varkappa = 10$.
Следовательно, соответствующий интервал равен $[1, 10]$.
Можем ли мы сделать лучше? Ответ — да.

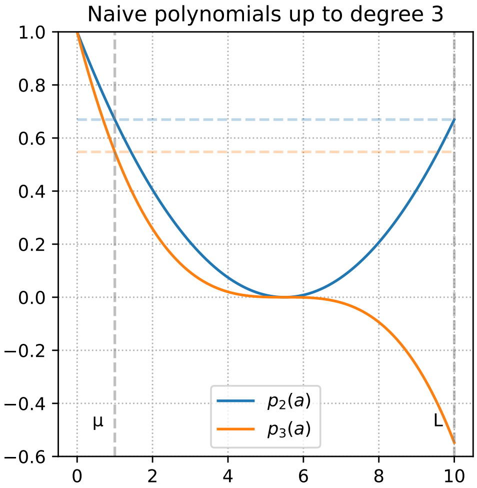


Наивное полиномиальное решение

Наивное решение состоит в том, чтобы выбрать равномерный шаг $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$. Благодаря этому $|p_k(\mu)| = |p_k(L)|$.

$$\|e_k\| \leq \left(\frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1}\right)^k \|e_0\|$$

Это точно та же скорость, которую мы доказали в предыдущей лекции для любой гладкой и сильно выпуклой функции. Давайте посмотрим на этот полином поближе. На правом рисунке мы выбираем $\alpha = 1$ и $\beta = 10$ так, что $\varkappa = 10$. Следовательно, соответствующий интервал равен $[1, 10]$. Можем ли мы сделать лучше? Ответ — да.

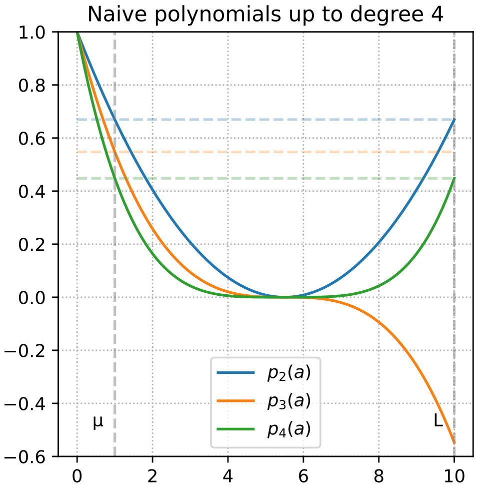


Наивное полиномиальное решение

Наивное решение состоит в том, чтобы выбрать равномерный шаг $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$. Благодаря этому $|p_k(\mu)| = |p_k(L)|$.

$$\|e_k\| \leq \left(\frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1}\right)^k \|e_0\|$$

Это точно та же скорость, которую мы доказали в предыдущей лекции для любой гладкой и сильно выпуклой функции. Давайте посмотрим на этот полином поближе. На правом рисунке мы выбираем $\alpha = 1$ и $\beta = 10$ так, что $\varkappa = 10$. Следовательно, соответствующий интервал равен $[1, 10]$. Можем ли мы сделать лучше? Ответ — да.

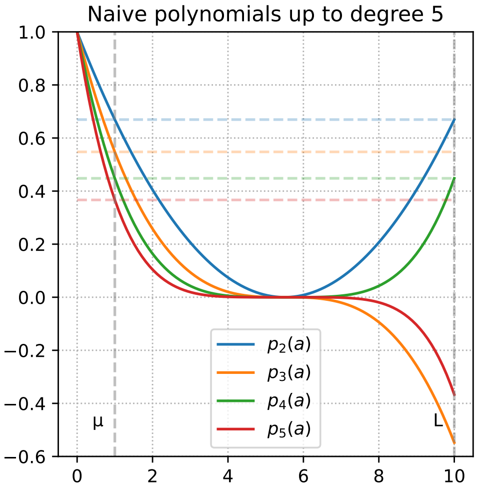


Наивное полиномиальное решение

Наивное решение состоит в том, чтобы выбрать равномерный шаг $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$. Благодаря этому $|p_k(\mu)| = |p_k(L)|$.

$$\|e_k\| \leq \left(\frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1}\right)^k \|e_0\|$$

Это точно та же скорость, которую мы доказали в предыдущей лекции для любой гладкой и сильно выпуклой функции. Давайте посмотрим на этот полином поближе. На правом рисунке мы выбираем $\alpha = 1$ и $\beta = 10$ так, что $\varkappa = 10$. Следовательно, соответствующий интервал равен $[1, 10]$. Можем ли мы сделать лучше? Ответ — да.

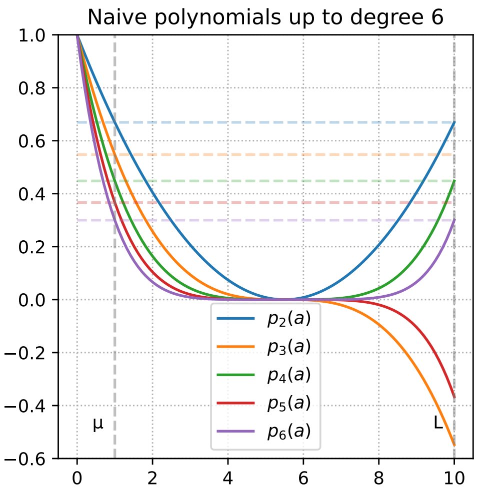


Наивное полиномиальное решение

Наивное решение состоит в том, чтобы выбрать равномерный шаг $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$. Благодаря этому $|p_k(\mu)| = |p_k(L)|$.

$$\|e_k\| \leq \left(\frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1}\right)^k \|e_0\|$$

Это точно та же скорость, которую мы доказали в предыдущей лекции для любой гладкой и сильно выпуклой функции. Давайте посмотрим на этот полином поближе. На правом рисунке мы выбираем $\alpha = 1$ и $\beta = 10$ так, что $\varkappa = 10$. Следовательно, соответствующий интервал равен $[1, 10]$. Можем ли мы сделать лучше? Ответ — да.

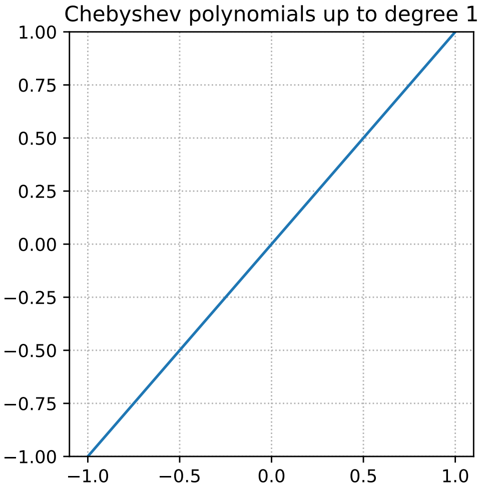


Полиномы Чебышева

Полиномы Чебышёва дают оптимальный ответ на поставленный вопрос. При соответствующем масштабировании они минимизируют абсолютное значение на заданном интервале $[\mu, L]$, одновременно удовлетворяя нормировочному условию $p(0) = 1$.

$$
\begin{aligned}
T_0(x) &= 1 \\
T_1(x) &= x \\
T_k(x) &= 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \qquad k \geq 2.
\end{aligned}
$$

Давайте построим стандартные полиномы Чебышёва (без масштабирования):

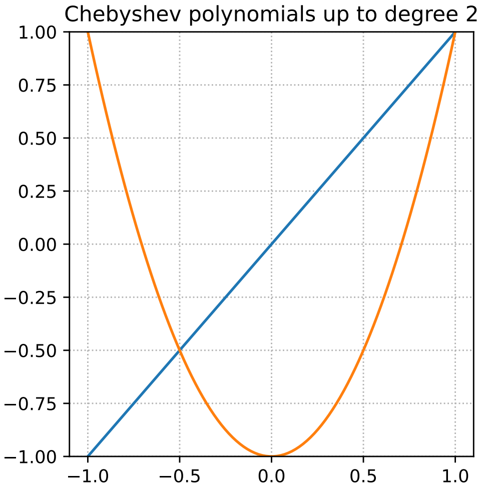


Полиномы Чебышева

Полиномы Чебышёва дают оптимальный ответ на поставленный вопрос. При соответствующем масштабировании они минимизируют абсолютное значение на заданном интервале $[\mu, L]$, одновременно удовлетворяя нормировочному условию $p(0) = 1$.

$$
\begin{aligned}
&T_0(x) = 1 \\
&T_1(x) = x \\
&T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \qquad k \geq 2.
\end{aligned}
$$

Давайте построим стандартные полиномы Чебышёва (без масштабирования):

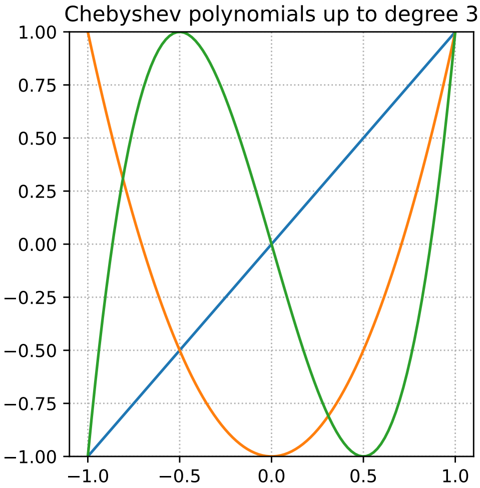


Полиномы Чебышева

Полиномы Чебышёва дают оптимальный ответ на поставленный вопрос. При соответствующем масштабировании они минимизируют абсолютное значение на заданном интервале $[\mu, L]$, одновременно удовлетворяя нормировочному условию $p(0) = 1$.

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_k(x) &= 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \qquad k \geq 2. \end{aligned}$$

Давайте построим стандартные полиномы Чебышёва (без масштабирования):

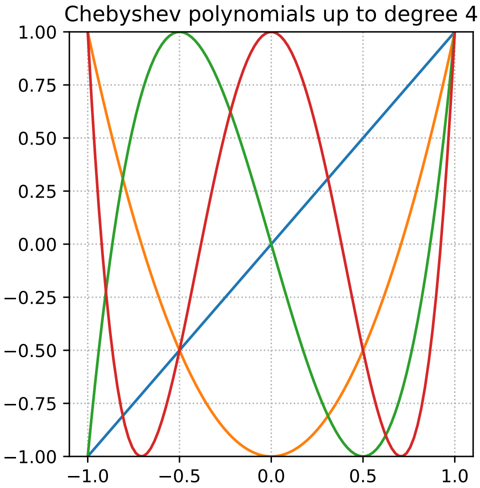


Полиномы Чебышева

Полиномы Чебышёва дают оптимальный ответ на поставленный вопрос. При соответствующем масштабировании они минимизируют абсолютное значение на заданном интервале $[\mu, L]$, одновременно удовлетворяя нормировочному условию $p(0) = 1.$

$$
\begin{aligned}
T_0(x) &= 1 \\
T_1(x) &= x \\
T_k(x) &= 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \qquad k \geq 2.
\end{aligned}
$$

Давайте построим стандартные полиномы Чебышёва (без масштабирования):

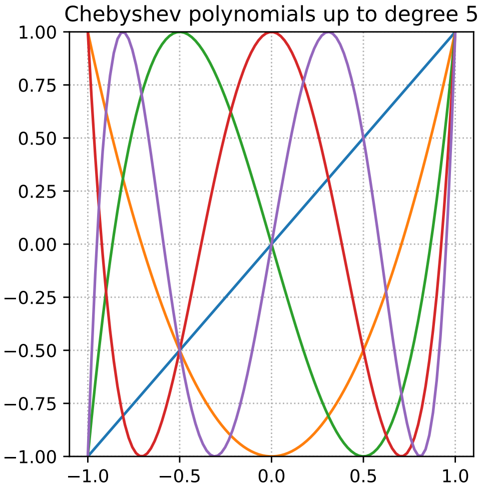


Полиномы Чебышева

Полиномы Чебышёва дают оптимальный ответ на поставленный вопрос. При соответствующем масштабировании они минимизируют абсолютное значение на заданном интервале $[\mu, L]$, одновременно удовлетворяя нормировочному условию $p(0) = 1.$

$$
\begin{aligned}
T_0(x) &= 1 \\
T_1(x) &= x \\
T_k(x) &= 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \qquad k \geq 2.
\end{aligned}
$$

Давайте построим стандартные полиномы Чебышёва (без масштабирования):



Отшкалированные полиномы Чебышёва

Оригинальные полиномы Чебышёва определены на интервале $[-1, 1]$. Чтобы использовать их для наших целей, мы должны отшкалировать их на интервал $[\mu, L]$.

Отшкалированные полиномы Чебышёва

Оригинальные полиномы Чебышёва определены на интервале $[-1, 1]$. Чтобы использовать их для наших целей, мы должны отшкалировать их на интервал $[\mu, L]$.

Мы будем использовать следующее аффинное преобразование:

$$x = \frac{L + \mu - 2a}{L - \mu}, \quad a \in [\mu, L], \quad x \in [-1, 1].$$

Обратите внимание, что $x = 1$ соответствует $a = \mu$, $x = -1$ соответствует $a = L$ и $x = 0$ соответствует $a = \frac{\mu+L}{2}$. Это преобразование гарантирует, что поведение полинома Чебышёва на интервале $[-1, 1]$ транслируется на интервал $[\mu, L]$.

Отшкалированные полиномы Чебышёва

Оригинальные полиномы Чебышёва определены на интервале $[-1, 1]$. Чтобы использовать их для наших целей, мы должны отшкалировать их на интервал $[\mu, L]$.

Мы будем использовать следующее аффинное преобразование:

$$x = \frac{L + \mu - 2a}{L - \mu}, \quad a \in [\mu, L], \quad x \in [-1, 1].$$

Обратите внимание, что $x = 1$ соответствует $a = \mu$, $x = -1$ соответствует $a = L$ и $x = 0$ соответствует $a = \frac{\mu+L}{2}$. Это преобразование гарантирует, что поведение полинома Чебышёва на интервале $[-1, 1]$ транслируется на интервал $[\mu, L]$.

В нашем анализе ошибок мы требуем, чтобы полином был равен 1 в 0 (т.е. $p_k(0) = 1$). После применения преобразования значение T_k в точке, соответствующей $a = 0$, может не быть 1. Следовательно, мы умножаем на обратную величину T_k в точке

$$\frac{L + \mu}{L - \mu}, \qquad \text{что обеспечивает} \qquad P_k(0) = T_k\left(\frac{L + \mu - 0}{L - \mu}\right) \cdot T_k\left(\frac{L + \mu}{L - \mu}\right)^{-1} = 1.$$

Отшкалированные полиномы Чебышёва

Оригинальные полиномы Чебышёва определены на интервале $[-1,1]$. Чтобы использовать их для наших целей, мы должны отшкалировать их на интервал $[\mu, L]$.

Мы будем использовать следующее аффинное преобразование:

$$x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}, \quad a \in [\mu, L], \quad x \in [-1,1].$$

Обратите внимание, что $x = 1$ соответствует $a = \mu$, $x = -1$ соответствует $a = L$ и $x = 0$ соответствует $a = \frac{\mu+L}{2}$. Это преобразование гарантирует, что поведение полинома Чебышёва на интервале $[-1,1]$ транслируется на интервал $[\mu, L]$.

В нашем анализе ошибок мы требуем, чтобы полином был равен 1 в 0 (т.е. $p_k(0) = 1$). После применения преобразования значение T_k в точке, соответствующей $a = 0$, может не быть 1. Следовательно, мы умножаем на обратную величину T_k в точке

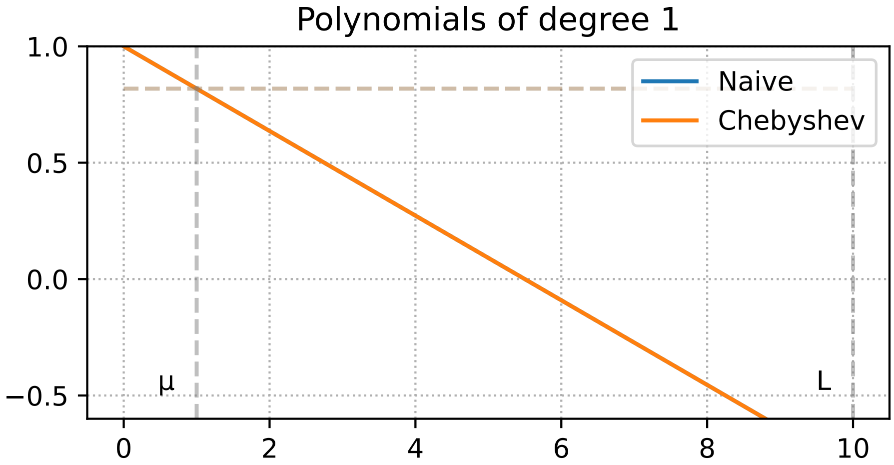
$$\frac{L+\mu}{L-\mu}, \qquad \text{что обеспечивает} \qquad P_k(0) = T_k\left(\frac{L+\mu-0}{L-\mu}\right) \cdot T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1} = 1.$$

Построим отшкалированные полиномы Чебышёва

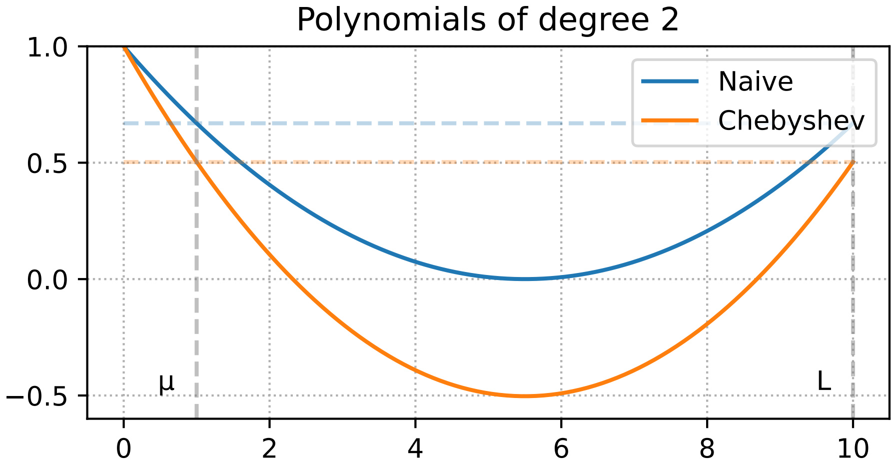
$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) \cdot T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

и увидим, что они больше подходят для нашей задачи, чем наивные полиномы на интервале $[\mu, L]$.

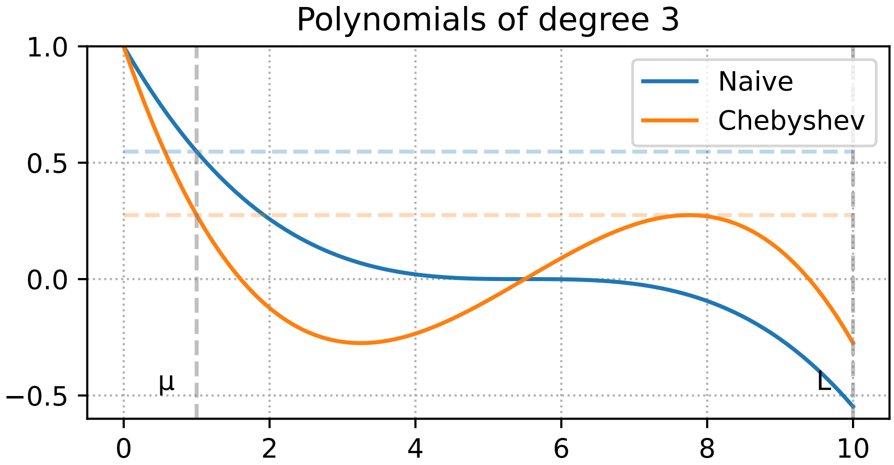
Отшкалированные полиномы Чебышёва



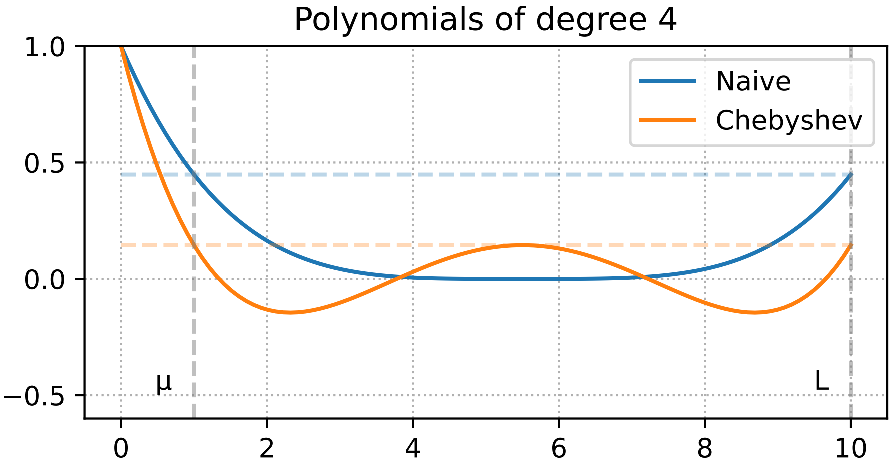
Отшкалированные полиномы Чебышёва



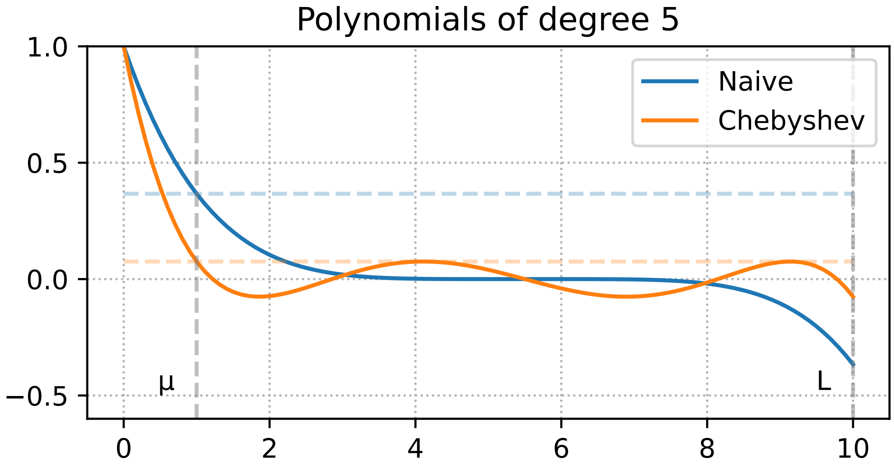
Отшкалированные полиномы Чебышёва



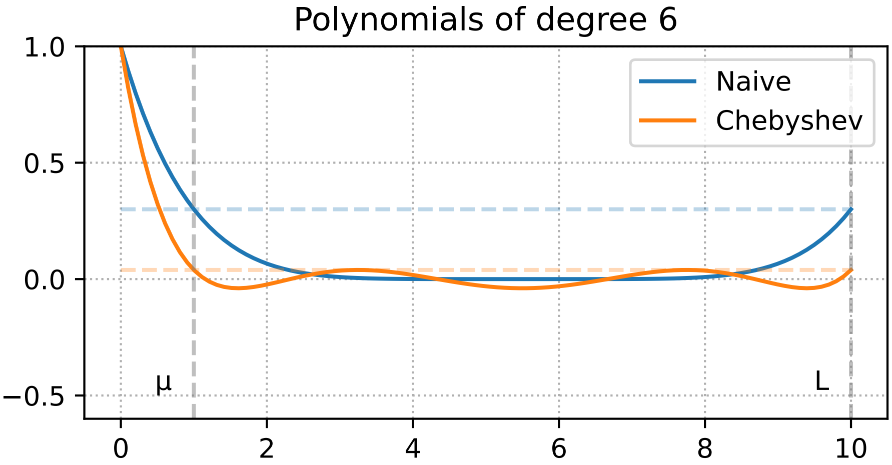
Отшкалированные полиномы Чебышёва



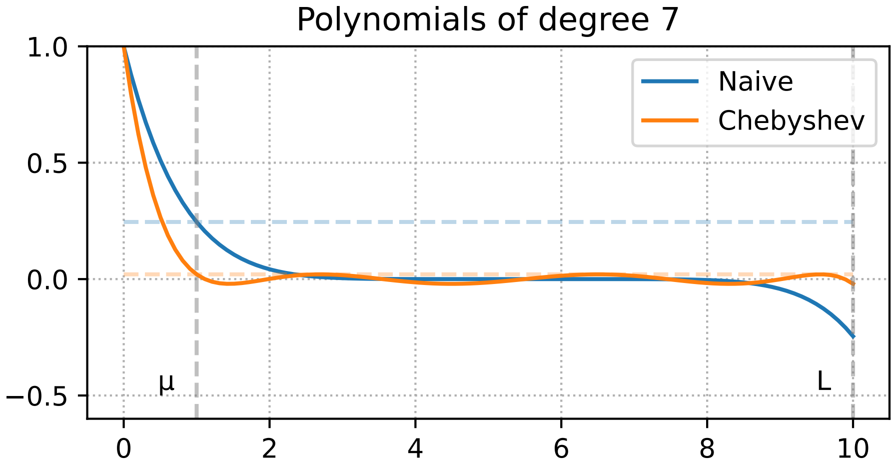
Отшкалированные полиномы Чебышёва



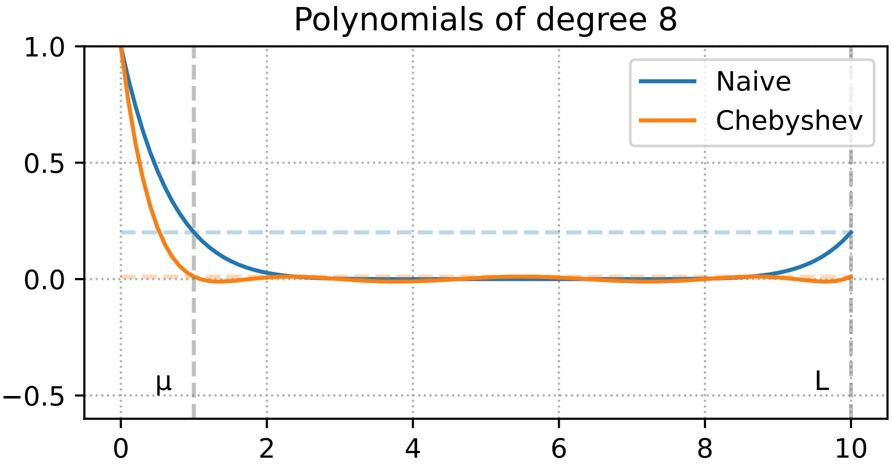
Отшкалированные полиномы Чебышёва



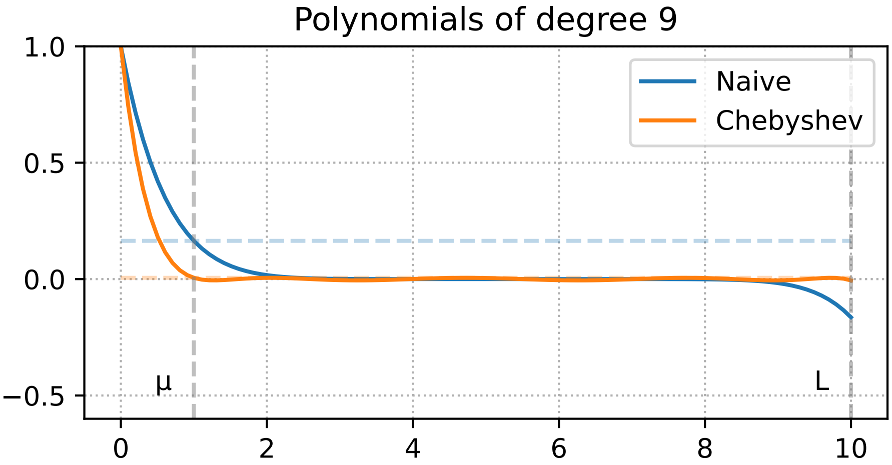
Отшкалированные полиномы Чебышёва



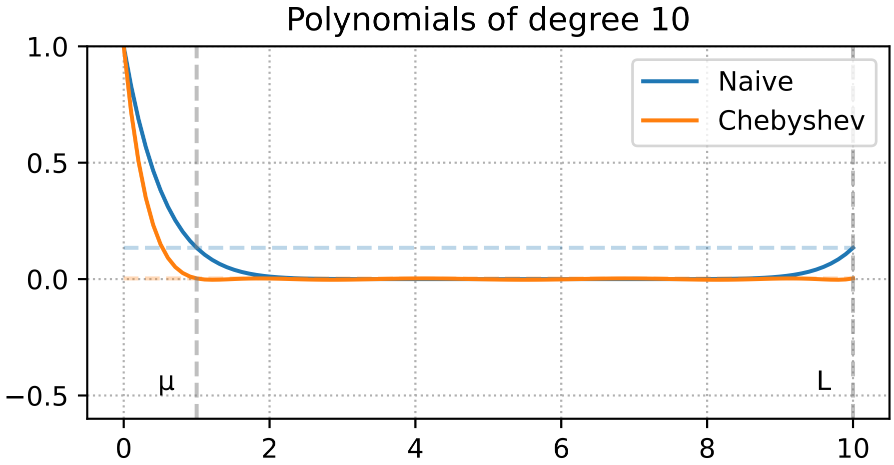
Отшкалированные полиномы Чебышёва



Отшкалированные полиномы Чебышёва



Отшкалированные полиномы Чебышёва



Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Мы можем видеть, что максимальное значение полинома Чебышёва на интервале $[\mu, L]$ достигается в точке $a = \mu$. Следовательно, мы можем использовать следующую верхнюю оценку:

$$
\|P_k(A)\|_2 \leq P_k(\mu) = T_k \left(\frac{L + \mu - 2\mu}{L - \mu} \right) \cdot T_k \left(\frac{L + \mu}{L - \mu} \right)^{-1} = T_k \left(1\right) \cdot T_k \left(\frac{L + \mu}{L - \mu} \right)^{-1} = T_k \left(\frac{L + \mu}{L - \mu} \right)^{-1}
$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Мы можем видеть, что максимальное значение полинома Чебышёва на интервале $[\mu, L]$ достигается в точке $a = \mu$. Следовательно, мы можем использовать следующую верхнюю оценку:

$$\|P_k(A)\|_2 \leq P_k(\mu) = T_k\left(\frac{L+\mu-2\mu}{L-\mu}\right) \cdot T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1} = T_k(1) \cdot T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1} = T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

Используя определение числа обусловленности $\varkappa = \frac{L}{\mu}$, мы получаем:

$$\|P_k(A)\|_2 \leq T_k\left(\frac{\varkappa+1}{\varkappa-1}\right)^{-1} = T_k\left(1 + \frac{2}{\varkappa-1}\right)^{-1} = T_k\left(1+\epsilon\right)^{-1}, \quad \epsilon = \frac{2}{\varkappa-1}.$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Мы можем видеть, что максимальное значение полинома Чебышёва на интервале $[\mu, L]$ достигается в точке $a = \mu$. Следовательно, мы можем использовать следующую верхнюю оценку:

$$\|P_k(A)\|_2 \leq P_k(\mu) = T_k\left(\frac{L+\mu-2\mu}{L-\mu}\right) \cdot T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1} = T_k(1) \cdot T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1} = T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

Используя определение числа обусловленности $\varkappa = \frac{L}{\mu}$, мы получаем:

$$\|P_k(A)\|_2 \leq T_k\left(\frac{\varkappa+1}{\varkappa-1}\right)^{-1} = T_k\left(1 + \frac{2}{\varkappa-1}\right)^{-1} = T_k(1+\epsilon)^{-1}, \quad \epsilon = \frac{2}{\varkappa-1}.$$

Следовательно, нам нужно оценить значение T_k в $1+\epsilon$. Именно в этот момент явно возникает ускорение. Мы будем ограничивать это значение сверху величиной $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon}}\right)$.

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1+\epsilon)|$ снизу.

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1+\epsilon)|$ снизу.

1. Для любого $x \geq 1$, полиномы Чебышёва первого рода могут быть записаны как

$$
\begin{aligned}
T_k(x) &= \text{cosh}\left(k\,\text{arccosh}(x)\right) \\
T_k(1+\epsilon) &= \text{cosh}\left(k\,\text{arccosh}(1+\epsilon)\right).
\end{aligned}
$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1+\epsilon)|$ снизу.

1. Для любого $x \geq 1$, полиномы Чебышёва первого рода могут быть записаны как

$$
\begin{aligned}
T_k(x) &= \cosh\left(k \operatorname{arccosh}(x)\right) \\
T_k(1+\epsilon) &= \cosh\left(k \operatorname{arccosh}(1+\epsilon)\right).
\end{aligned}
$$

2. Помните, что:

$$
\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \operatorname{arccosh}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2-1}).
$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1+\epsilon)|$ снизу.

1. Для любого $x \geq 1$, полиномы Чебышёва первого рода могут быть записаны как

$$
\begin{aligned}
T_k(x) &= \cosh\left(k \operatorname{arccosh}(x)\right) \\
T_k(1+\epsilon) &= \cosh\left(k \operatorname{arccosh}(1+\epsilon)\right).
\end{aligned}
$$

2. Помните, что:

$$
\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \operatorname{arccosh}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}).
$$

3. Теперь, пусть $\phi = \operatorname{arccosh}(1+\epsilon)$,

$$
e^{\phi} = 1 + \epsilon + \sqrt{2\epsilon + \epsilon^2} \geq 1 + \sqrt{\epsilon}.
$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1+\epsilon)|$ снизу.

1. Для любого $x \geq 1$, полиномы Чебышёва первого рода могут быть записаны как

$$T_k(x) = \cosh\left(k \operatorname{arccosh}(x)\right)$$
$$T_k(1+\epsilon) = \cosh\left(k \operatorname{arccosh}(1+\epsilon)\right).$$

2. Помните, что:

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \operatorname{arccosh}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2-1}).$$

3. Теперь, пусть $\phi = \operatorname{arccosh}(1+\epsilon)$,

$$e^{\phi} = 1 + \epsilon + \sqrt{2\epsilon + \epsilon^2} \geq 1 + \sqrt{\epsilon}.$$

4. Следовательно,

$$\begin{aligned} T_k(1+\epsilon) &= \cosh\left(k \operatorname{arccosh}(1+\epsilon)\right) \\ &= \cosh\left(k\phi\right) \\ &= \frac{e^{k\phi} + e^{-k\phi}}{2} \geq \frac{e^{k\phi}}{2} \\ &= \frac{\left(1+\sqrt{\epsilon}\right)^k}{2}. \end{aligned}$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1+\epsilon)|$ снизу.

1. Для любого $x \geq 1$, полиномы Чебышёва первого рода могут быть записаны как

$$\begin{aligned} T_k(x) &= \cosh\left(k \operatorname{arccosh}(x)\right) \\ T_k(1+\epsilon) &= \cosh\left(k \operatorname{arccosh}(1+\epsilon)\right). \end{aligned}$$

2. Помните, что:

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \operatorname{arccosh}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}).$$

3. Теперь, пусть $\phi = \operatorname{arccosh}(1+\epsilon)$,

$$e^{\phi} = 1 + \epsilon + \sqrt{2\epsilon + \epsilon^2} \geq 1 + \sqrt{\epsilon}.$$

4. Следовательно,

$$\begin{aligned} T_k(1+\epsilon) &= \cosh\left(k \operatorname{arccosh}(1+\epsilon)\right) \\ &= \cosh\left(k\phi\right) \\ &= \frac{e^{k\phi} + e^{-k\phi}}{2} \geq \frac{e^{k\phi}}{2} \\ &= \frac{\left(1+\sqrt{\epsilon}\right)^k}{2}. \end{aligned}$$

5. Наконец, мы получаем:

$$\begin{aligned} \|e_k\| &\leq \|P_k(A)\|\|e_0\| \leq \frac{2}{\left(1+\sqrt{\epsilon}\right)^k}\|e_0\| \\ &\leq 2\left(1 + \sqrt{\frac{2}{\varkappa - 1}}\right)^{-k}\|e_0\| \\ &\leq 2\exp\left(-\sqrt{\frac{2}{\varkappa - 1}}k\right)\|e_0\| \end{aligned}$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускорения. Переформулируя рекурсию в терминах наших масштабированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускорения. Переформулируя рекурсию в терминах наших масштабированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускорения. Переформулируя рекурсию в терминах наших масштабированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

$$T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_k(a) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускорения. Переформулируя рекурсию в терминах наших масштабированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$
T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)
$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$
P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}
$$

$$
T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_k(a) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)
$$

$$
T_{k-1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k-1}(a) T_{k-1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)
$$

$$
T_{k+1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k+1}(a) T_{k+1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)
$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускорения. Переформулируя рекурсию в терминах наших масштабированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

$$T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_k(a) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k-1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k-1}(a) T_{k-1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k+1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k+1}(a) T_{k+1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$P_{k+1}(a)t_{k+1} = 2\frac{L+\mu-2a}{L-\mu} P_k(a)t_k - P_{k-1}(a)t_{k-1}, \text{ где } t_k = T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускорения. Переформулируя рекурсию в терминах наших масштабированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

$$T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_k(a) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k-1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k-1}(a) T_{k-1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k+1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k+1}(a) T_{k+1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$P_{k+1}(a)t_{k+1} = 2\frac{L+\mu-2a}{L-\mu} P_k(a)t_k - P_{k-1}(a)t_{k-1}, \text{ где } t_k = T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu-2a}{L-\mu} P_k(a)\frac{t_k}{t_{k+1}} - P_{k-1}(a)\frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускорения. Переформулируя рекурсию в терминах наших масштабированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right)T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

$$T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_k(a)T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k-1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k-1}(a)T_{k-1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k+1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k+1}(a)T_{k+1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$P_{k+1}(a)t_{k+1} = 2\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}P_k(a)t_k - P_{k-1}(a)t_{k-1}, \text{ где } t_k = T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}P_k(a)\frac{t_k}{t_{k+1}} - P_{k-1}(a)\frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}$$

Поскольку мы имеем $P_{k+1}(0) = P_k(0) = P_{k-1}(0) = 1$, получаем рекуррентную формулу вида:

$$P_{k+1}(a) = (1-\alpha_k a)P_k(a) + \beta_k\left(P_k(a) - P_{k-1}(a)\right).$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1 + \beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1+\beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1+\beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

$$\begin{cases} \beta_k = \dfrac{t_{k-1}}{t_{k+1}}, \\ \alpha_k = \dfrac{4}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}}, \\ 1+\beta_k = 2\dfrac{L+\mu}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}} \end{cases}$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$
P_{k+1}(a) = (1+\beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),
$$

$$
P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)
$$

$$
\begin{cases}
\beta_k = \dfrac{t_{k-1}}{t_{k+1}}, \\
\alpha_k = \dfrac{4}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}}, \\
1+\beta_k = 2\dfrac{L+\mu}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}}
\end{cases}
$$

Мы почти закончили :) Помним, что $e_{k+1} = P_{k+1}(A)e_0$. Также обратим внимание, что мы работаем с квадратичной задачей, поэтому мы можем предположить $x^* = 0$ без ограничения общности. В этом случае $e_0 = x_0$ и $e_{k+1} = x_{k+1}$.

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1+\beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

$$\begin{cases} \beta_k = \dfrac{t_{k-1}}{t_{k+1}}, \\ \alpha_k = \dfrac{4}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}}, \\ 1+\beta_k = 2\dfrac{L+\mu}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}} \end{cases}$$

Мы почти закончили :) Помним, что $e_{k+1} = P_{k+1}(A)e_0$. Также обратим внимание, что мы работаем с квадратичной задачей, поэтому мы можем предположить $x^* = 0$ без ограничения общности. В этом случае $e_0 = x_0$ и $e_{k+1} = x_{k+1}$.

$$x_{k+1} = P_{k+1}(A)x_0$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1+\beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

$$\begin{cases} \beta_k = \dfrac{t_{k-1}}{t_{k+1}}, \\ \alpha_k = \dfrac{4}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}}, \\ 1+\beta_k = 2\dfrac{L+\mu}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}} \end{cases}$$

Мы почти закончили :) Помним, что $e_{k+1} = P_{k+1}(A)e_0$. Также обратим внимание, что мы работаем с квадратичной задачей, поэтому мы можем предположить $x^* = 0$ без ограничения общности. В этом случае $e_0 = x_0$ и $e_{k+1} = x_{k+1}$.

$$x_{k+1} = P_{k+1}(A)x_0 = (I - \alpha_k A)P_k(A)x_0 + \beta_k\left(P_k(A) - P_{k-1}(A)\right)x_0$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1+\beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

$$\begin{cases} \beta_k = \dfrac{t_{k-1}}{t_{k+1}}, \\ \alpha_k = \dfrac{4}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}}, \\ 1+\beta_k = 2\dfrac{L+\mu}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}} \end{cases}$$

Мы почти закончили :) Помним, что $e_{k+1} = P_{k+1}(A)e_0$. Также обратим внимание, что мы работаем с квадратичной задачей, поэтому мы можем предположить $x^* = 0$ без ограничения общности. В этом случае $e_0 = x_0$ и $e_{k+1} = x_{k+1}$.

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= P_{k+1}(A)x_0 = (I - \alpha_k A)P_k(A)x_0 + \beta_k\left(P_k(A) - P_{k-1}(A)\right)x_0 \\ &= (I - \alpha_k A)x_k + \beta_k\left(x_k - x_{k-1}\right) \end{aligned}$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1+\beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

$$\begin{cases} \beta_k = \dfrac{t_{k-1}}{t_{k+1}}, \\ \alpha_k = \dfrac{4}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}}, \\ 1+\beta_k = 2\dfrac{L+\mu}{L-\mu}\dfrac{t_k}{t_{k+1}} \end{cases}$$

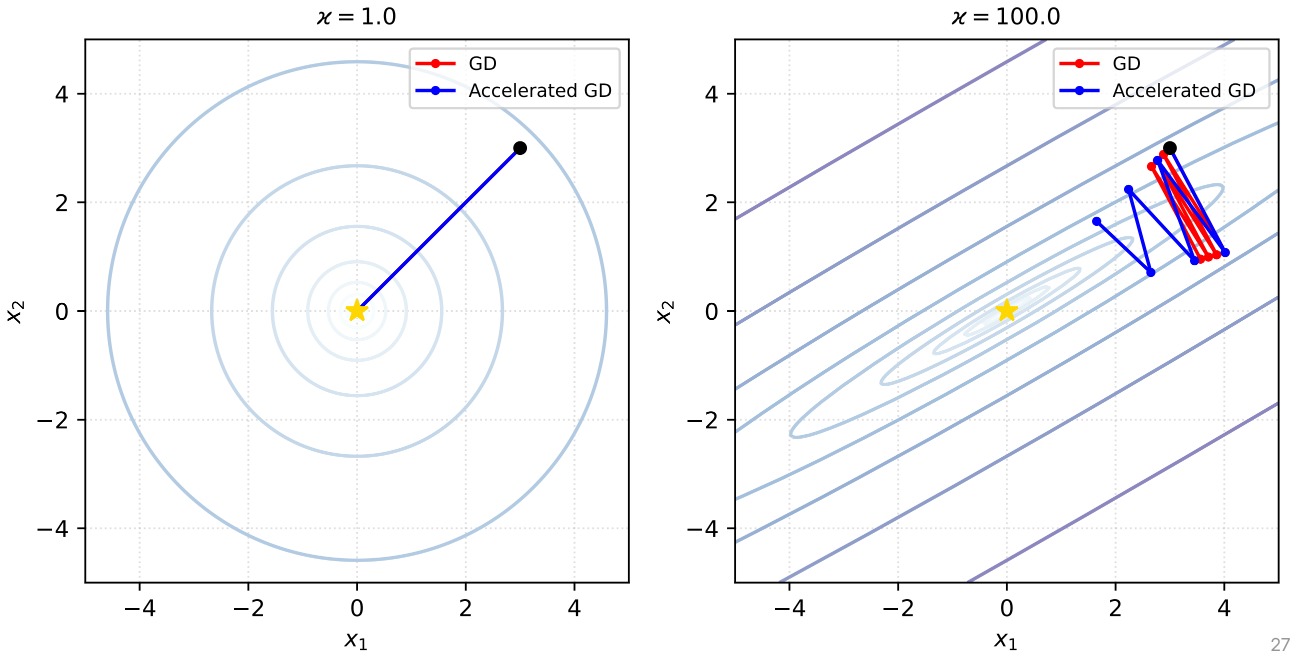
Мы почти закончили :) Помним, что $e_{k+1} = P_{k+1}(A)e_0$. Также обратим внимание, что мы работаем с квадратичной задачей, поэтому мы можем предположить $x^* = 0$ без ограничения общности. В этом случае $e_0 = x_0$ и $e_{k+1} = x_{k+1}$.

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= P_{k+1}(A)x_0 = (I - \alpha_k A)P_k(A)x_0 + \beta_k\left(P_k(A) - P_{k-1}(A)\right)x_0 \\ &= (I-\alpha_k A)x_k + \beta_k\left(x_k - x_{k-1}\right) \end{aligned}$$

Для квадратичной задачи мы имеем $\nabla f(x_k) = Ax_k$, поэтому мы можем переписать обновление как:

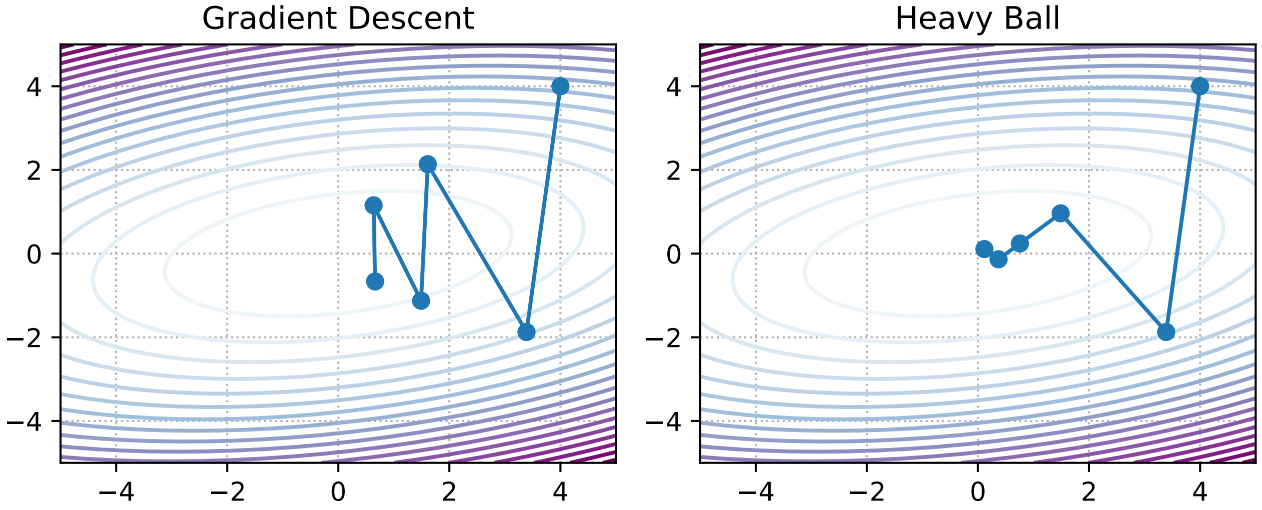
$$\boxed{x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) + \beta_k\left(x_k - x_{k-1}\right)}$$

Ускорение из первых принципов

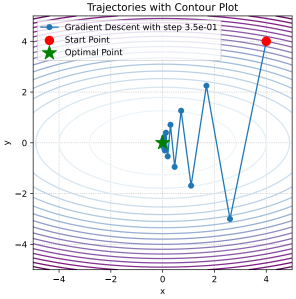


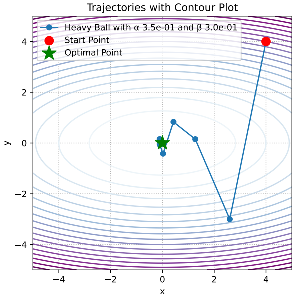
Метод тяжёлого шарика

Колебания и ускорение



Метод тяжёлого шарика Поляка

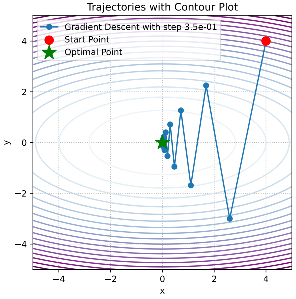


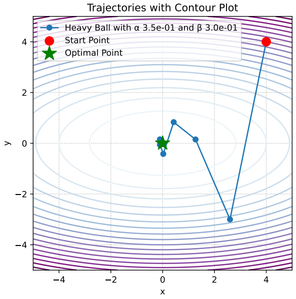


Давайте представим идею импульса, предложенную Б.Т. Поляком в 1964 году. Вспомним, что обновление импульса имеет вид

$$x^{k+1} = x^k - \alpha \nabla f(x^k) + \beta (x^k - x^{k-1}).$$

Метод тяжёлого шарика Поляка





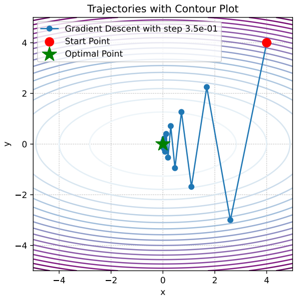
Давайте представим идею импульса, предложенную Б.Т. Поляком в 1964 году. Вспомним, что обновление импульса имеет вид

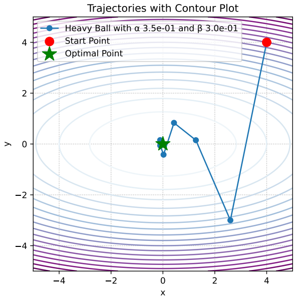
$$x^{k+1} = x^k - \alpha \nabla f(x^k) + \beta(x^k - x^{k-1}).$$

В нашем (квадратичном) случае это

$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k - \alpha \Lambda \hat{x}_k + \beta(\hat{x}_k - \hat{x}_{k-1}) = (I - \alpha\Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}$$

Метод тяжёлого шарика Поляка





Давайте представим идею импульса, предложенную Б.Т. Поляком в 1964 году. Вспомним, что обновление импульса имеет вид

$$x^{k+1} = x^k - \alpha \nabla f(x^k) + \beta(x^k - x^{k-1}).$$

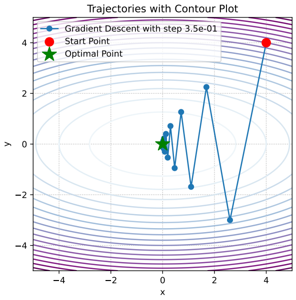
В нашем (квадратичном) случае это

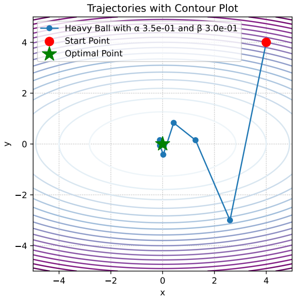
$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k - \alpha \Lambda \hat{x}_k + \beta(\hat{x}_k - \hat{x}_{k-1}) = (I - \alpha\Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}$$

Это можно переписать как

$$\begin{aligned} \hat{x}_{k+1} &= (I - \alpha\Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}, \\ \hat{x}_k &= \hat{x}_k. \end{aligned}$$

Метод тяжёлого шарика Поляка





Давайте представим идею импульса, предложенную Б.Т. Поляком в 1964 году. Вспомним, что обновление импульса имеет вид

$$x^{k+1} = x^k - \alpha \nabla f(x^k) + \beta(x^k - x^{k-1}).$$

В нашем (квадратичном) случае это

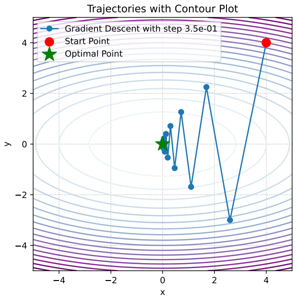
$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k - \alpha\Lambda\hat{x}_k + \beta(\hat{x}_k - \hat{x}_{k-1}) = (I - \alpha\Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta\hat{x}_{k-1}$$

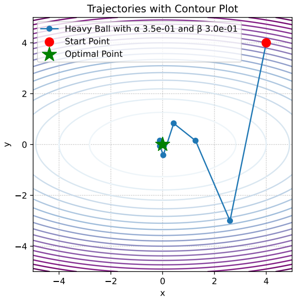
Это можно переписать как

$$\begin{aligned} \hat{x}_{k+1} &= (I - \alpha\Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta\hat{x}_{k-1}, \\ \hat{x}_k &= \hat{x}_k. \end{aligned}$$

Давайте введем следующее обозначение: $\hat{z}_k = \begin{bmatrix} \hat{x}_{k+1} \\ \hat{x}_k \end{bmatrix}$. Следовательно, $\hat{z}_{k+1} = M\hat{z}_k$, где матрица итерации M имеет вид:

Метод тяжёлого шарика Поляка





Давайте представим идею импульса, предложенную Б.Т. Поляком в 1964 году. Вспомним, что обновление импульса имеет вид

$$x^{k+1} = x^k - \alpha \nabla f(x^k) + \beta (x^k - x^{k-1}).$$

В нашем (квадратичном) случае это

$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k - \alpha \Lambda \hat{x}_k + \beta(\hat{x}_k - \hat{x}_{k-1}) = (I - \alpha\Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}$$

Это можно переписать как

$$\begin{aligned} \hat{x}_{k+1} &= (I - \alpha\Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}, \\ \hat{x}_k &= \hat{x}_k. \end{aligned}$$

Давайте введем следующее обозначение: $\hat{z}_k = \begin{bmatrix} \hat{x}_{k+1} \\ \hat{x}_k \end{bmatrix}$. Следовательно, $\hat{z}_{k+1} = M \hat{z}_k$, где матрица итерации M имеет вид:

$$M = \begin{bmatrix} I - \alpha\Lambda + \beta I & -\beta I \\ I & 0_d \end{bmatrix}.$$

Сведение к скалярному случаю

Обратим внимание, что M является матрицей $2d \times 2d$ с четырьмя блочно-диагональными матрицами размера $d \times d$ внутри. Это означает, что мы можем изменить порядок координат, чтобы сделать M блочно-диагональной. Обратите внимание, что в уравнении ниже матрица M обозначает то же самое, что и в обозначении выше, за исключением описанной перестановки строк и столбцов. Мы используем эту небольшую перегрузку обозначений для простоты.

Сведение к скалярному случаю

Обратим внимание, что M является матрицей $2d \times 2d$ с четырьмя блочно-диагональными матрицами размера $d \times d$ внутри. Это означает, что мы можем изменить порядок координат, чтобы сделать M блочно-диагональной. Обратите внимание, что в уравнении ниже матрица M обозначает то же самое, что и в обозначении выше, за исключением описанной перестановки строк и столбцов. Мы используем эту небольшую перегрузку обозначений для простоты.

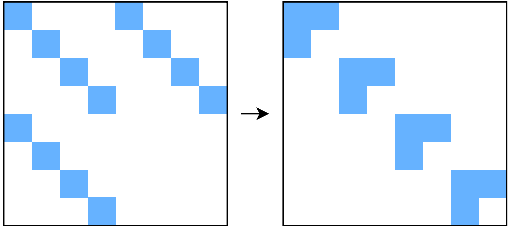


Рисунок 1. Иллюстрация переупорядочения матрицы M

$$
\begin{bmatrix} \hat{x}_k^{(1)} \\ \vdots \\ \hat{x}_k^{(d)} \\ \hat{x}_{k-1}^{(1)} \\ \vdots \\ \hat{x}_{k-1}^{(d)} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \hat{x}_k^{(1)} \\ \hat{x}_{k-1}^{(1)} \\ \vdots \\ \hat{x}_k^{(d)} \\ \hat{x}_{k-1}^{(d)} \end{bmatrix} \qquad M = \begin{bmatrix} M_1 & & & \\ & M_2 & & \\ & & \ldots & \\ & & & M_d \end{bmatrix}
$$

где $\hat{x}_k^{(i)}$ является i-й координатой вектора $\hat{x}_k \in \mathbb{R}^d$ и M_i обозначает 2×2 матрицу. Переупорядочение позволяет нам исследовать динамику метода независимо от размерности. Асимптотическая скорость сходимости $2d$-мерной последовательности векторов $\hat{z}_k$ определяется наихудшей скоростью сходимости среди его блока координат. Следовательно, достаточно исследовать оптимизацию в одномерном случае.

Сведение к скалярному случаю

Для i-й координаты, где λ_i — i-е собственное значение матрицы A, имеем:

$$M_i = \begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Сведение к скалярному случаю

Для i-й координаты, где λ_i — i-е собственное значение матрицы A, имеем:

$$M_i = \begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Метод будет сходиться, если $\rho(M) < 1$, и оптимальные параметры могут быть вычислены путем оптимизации спектрального радиуса

$$\alpha^*, \beta^* = \arg\min_{\alpha,\beta} \max_{i} \rho(M_i), \quad \alpha^* = \frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad \beta^* = \left(\frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}}\right)^2.$$

Сведение к скалярному случаю

Для i-й координаты, где λ_i — i-е собственное значение матрицы A, имеем:

$$M_i = \begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Метод будет сходиться, если $\rho(M) < 1$, и оптимальные параметры могут быть вычислены путем оптимизации спектрального радиуса

$$\alpha^*, \beta^* = \arg\min_{\alpha,\beta} \max_{i} \rho(M_i), \quad \alpha^* = \frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad \beta^* = \left(\frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}} \right)^2.$$

Можно показать, что для таких параметров матрица M имеет комплексные собственные значения, которые образуют комплексно-сопряжённую пару, поэтому расстояние до оптимума (в этом случае $\|z_k\|$) обычно не убывает монотонно.

Квадратичная сходимость метода тяжёлого шарика

Мы можем явно вычислить собственные значения M_i:

$$\lambda^M_1, \lambda^M_2 = \lambda \left(\begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) = \frac{1 + \beta - \alpha\lambda_i \pm \sqrt{(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta}}{2}.$$

Квадратичная сходимость метода тяжёлого шарика

Мы можем явно вычислить собственные значения M_i:

$$\lambda_1^M, \lambda_2^M = \lambda\left(\begin{bmatrix} 1-\alpha\lambda_i+\beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\right) = \frac{1+\beta-\alpha\lambda_i \pm \sqrt{(1+\beta-\alpha\lambda_i)^2-4\beta}}{2}.$$

Когда α и β оптимальны (α^*, β^*), собственные значения являются комплексно-сопряженной парой $(1+\beta-\alpha\lambda_i)^2-4\beta \leq 0$, т.е. $\beta \geq (1-\sqrt{\alpha\lambda_i})^2$.

Квадратичная сходимость метода тяжёлого шарика

Мы можем явно вычислить собственные значения M_i:

$$\lambda^M_1, \lambda^M_2 = \lambda \left(\begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) = \frac{1+\beta - \alpha\lambda_i \pm \sqrt{(1+\beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta}}{2}.$$

Когда α и β оптимальны (α^*, β^*), собственные значения являются комплексно-сопряженной парой $(1+\beta-\alpha\lambda_i)^2 - 4\beta \leq 0$, т.е. $\beta \geq (1 - \sqrt{\alpha\lambda_i})^2$.

$$\text{Re}(\lambda^M) = \frac{L + \mu - 2\lambda_i}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad \text{Im}(\lambda^M) = \frac{\pm 2\sqrt{(L - \lambda_i)(\lambda_i - \mu)}}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad |\lambda^M| = \frac{L - \mu}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}.$$

Квадратичная сходимость метода тяжёлого шарика

Мы можем явно вычислить собственные значения M_i:

$$\lambda_1^M, \lambda_2^M = \lambda\left(\begin{bmatrix} 1-\alpha\lambda_i+\beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\right) = \frac{1+\beta-\alpha\lambda_i \pm \sqrt{(1+\beta-\alpha\lambda_i)^2 - 4\beta}}{2}.$$

Когда α и β оптимальны (α^*, β^*), собственные значения являются комплексно-сопряженной парой $(1+\beta-\alpha\lambda_i)^2 - 4\beta \leq 0$, т.е. $\beta \geq (1-\sqrt{\alpha\lambda_i})^2$.

$$\text{Re}(\lambda^M) = \frac{L+\mu-2\lambda_i}{(\sqrt{L}+\sqrt{\mu})^2}, \quad \text{Im}(\lambda^M) = \frac{\pm 2\sqrt{(L-\lambda_i)(\lambda_i-\mu)}}{(\sqrt{L}+\sqrt{\mu})^2}, \quad |\lambda^M| = \frac{L-\mu}{(\sqrt{L}+\sqrt{\mu})^2}.$$

И скорость сходимости не зависит от шага и равна $\sqrt{\beta^*}$.

Квадратичная сходимость метода тяжёлого шарика

Theorem

Предположим, что f является μ-сильно выпуклой и L-гладкой квадратичной функцией. Тогда метод тяжёлого шарика с параметрами

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

сходится линейно:

$$
\|x_k - x^*\|_2 \leq \left(\frac{\sqrt{\varkappa} - 1}{\sqrt{\varkappa} + 1}\right)^k \|x_0 - x^*\|
$$

Глобальная сходимость метода тяжёлого шарика [3]

Theorem

Предположим, что f является гладкой и выпуклой и что

$$
\beta \in [0, 1), \quad \alpha \in \left(0, \frac{2(1-\beta)}{L}\right).
$$

Тогда последовательность $\{x_k\}$, генерируемая итерациями тяжёлого шарика, удовлетворяет

$$
f(\overline{x}_T) - f^\star \leq \begin{cases} \frac{\|x_0 - x^\star\|^2}{2(T+1)}\left(\frac{L\beta}{1-\beta} + \frac{1-\beta}{\alpha}\right), & \text{if } \alpha \in (0, \dfrac{1-\beta}{L}], \\ \frac{\|x_0 - x^\star\|^2}{2(T+1)(2(1-\beta)-\alpha L)}\left(L\beta + \frac{(1-\beta)^2}{\alpha}\right), & \text{if } \alpha \in [\dfrac{1-\beta}{L}, \dfrac{2(1-\beta)}{L}), \end{cases}
$$

где $\overline{x}_T$ среднее Чезаро последовательности итераций, т.е.

$$
\overline{x}_T = \frac{1}{T+1} \sum_{k=0}^{T} x_k.
$$

[3] Глобальная сходимость метода тяжёлого шарика для выпуклой оптимизации, Euhanna Ghadimi et al.

Глобальная сходимость метода тяжёлого шарика [4]

Theorem

Предположим, что f является гладкой и сильно выпуклой и что

$$\alpha \in (0, \frac{2}{L}), \quad 0 \leq \beta < \frac{1}{2}\left(\frac{\mu\alpha}{2} + \sqrt{\frac{\mu^2\alpha^2}{4} + 4(1 - \frac{\alpha L}{2})}\right).$$

Тогда последовательность $\{x_k\}$, генерируемая итерациями тяжёлого шарика, сходится линейно к единственному оптимальному решению $x^\star$. В частности,

$$f(x_k) - f^\star \leq q^k(f(x_0) - f^\star),$$

где $q \in [0, 1)$.

[4] Глобальная сходимость метода тяжёлого шарика для выпуклой оптимизации, Euhanna Ghadimi et al.

Итоги по методу тяжёлого шарика

- Обеспечивает ускоренную сходимость для сильно выпуклых квадратичных задач.

Итоги по методу тяжёлого шарика

- Обеспечивает ускоренную сходимость для сильно выпуклых квадратичных задач.
- Локально ускоренная сходимость была доказана в оригинальной статье.

Итоги по методу тяжёлого шарика

- Обеспечивает ускоренную сходимость для сильно выпуклых квадратичных задач.
- Локально ускоренная сходимость была доказана в оригинальной статье.
- Недавно [5] было доказано, что глобального ускорения сходимости для метода не существует.

[5] Provable non-accelerations of the heavy-ball method

Итоги по методу тяжёлого шарика

- Обеспечивает ускоренную сходимость для сильно выпуклых квадратичных задач.
- Локально ускоренная сходимость была доказана в оригинальной статье.
- Недавно [5] было доказано, что глобального ускорения сходимости для метода не существует.
- Метод не был чрезвычайно популярен до ML-бума.

[5] Provable non-accelerations of the heavy-ball method

Итоги по методу тяжёлого шарика

- Обеспечивает ускоренную сходимость для сильно выпуклых квадратичных задач.
- Локально ускоренная сходимость была доказана в оригинальной статье.
- Недавно [5] было доказано, что глобального ускорения сходимости для метода не существует.
- Метод не был чрезвычайно популярен до ML-бума.
- Сейчас он фактически является стандартом для практического ускорения методов градиентного спуска, в том числе для невыпуклых задач (обучение нейронных сетей).

[5] Provable non-accelerations of the heavy-ball method

Ускоренный градиентный метод Нестерова

Концепция ускоренного градиентного метода Нестерова

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

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

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

Концепция ускоренного градиентного метода Нестерова

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

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

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

Давайте определим следующие обозначения

$$x^+ = x - \alpha \nabla f(x)$$ Градиентный шаг

$$d_k = \beta_k (x_k - x_{k-1})$$ Импульс

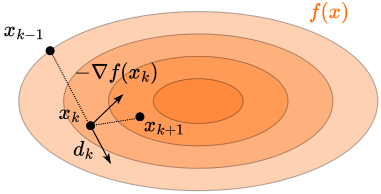
Тогда мы можем записать:

$$x_{k+1} = x_k^+$$ Градиентный спуск

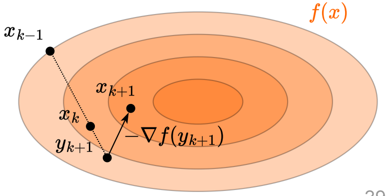
$$x_{k+1} = x_k^+ + d_k$$ Метод тяжёлого шарика

$$x_{k+1} = (x_k + d_k)^+$$ Ускоренный градиентный метод Нестерова

Polyak momentum



Nesterov momentum



Сходимость в общем случае

Theorem

Предположим, что $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ является выпуклой и L-гладкой. Ускоренный градиентный метод Нестерова (NAG) предназначен для решения задачи минимизации, начиная с начальной точки $x_0 = y_0 \in \mathbb{R}^n$ и $\lambda_0 = 0$. Алгоритм выполняет следующие шаги:

$$
\begin{aligned}
&\textbf{Обновление градиента:} && y_{k+1} = x_k - \frac{1}{L}\nabla f(x_k) \\
&\textbf{Экстраполяция:} && x_{k+1} = (1-\gamma_k)y_{k+1} + \gamma_k y_k \\
&\textbf{Вес экстраполяции:} && \lambda_{k+1} = \frac{1+\sqrt{1+4\lambda_k^2}}{2} \\
&\textbf{Вес экстраполяции:} && \gamma_k = \frac{1-\lambda_k}{\lambda_{k+1}}
\end{aligned}
$$

Последовательность $\{f(y_k)\}_{k\in\mathbb{N}}$, генерируемая алгоритмом, сходится к оптимальному значению f^* со скоростью $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$, в частности:

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

Сходимость в общем случае

Theorem

Предположим, что $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ является μ-сильно выпуклой и L-гладкой. Ускоренный градиентный метод Нестерова (NAG) предназначен для решения задачи минимизации, начиная с начальной точки $x_0 = y_0 \in \mathbb{R}^n$ и $\lambda_0 = 0$. Алгоритм выполняет следующие шаги:

Обновление градиента: $$y_{k+1} = x_k - \frac{1}{L}\nabla f(x_k)$$

Экстраполяция: $$x_{k+1} = (1+\gamma_k)y_{k+1} - \gamma_k y_k$$

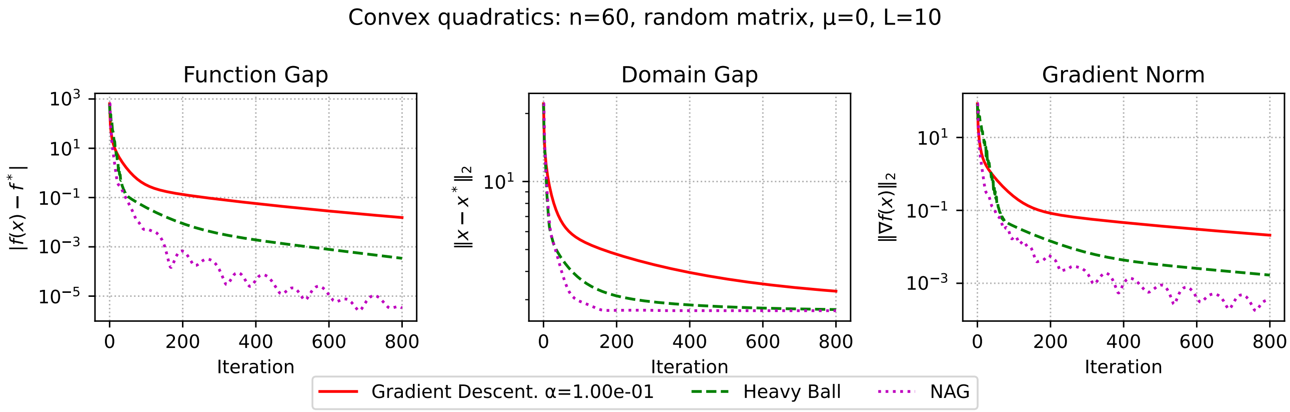
Вес экстраполяции: $$\gamma_k = \frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}}$$

Последовательность $\{f(y_k)\}_{k\in\mathbb{N}}$, генерируемая алгоритмом, сходится к оптимальному значению f^* линейно:

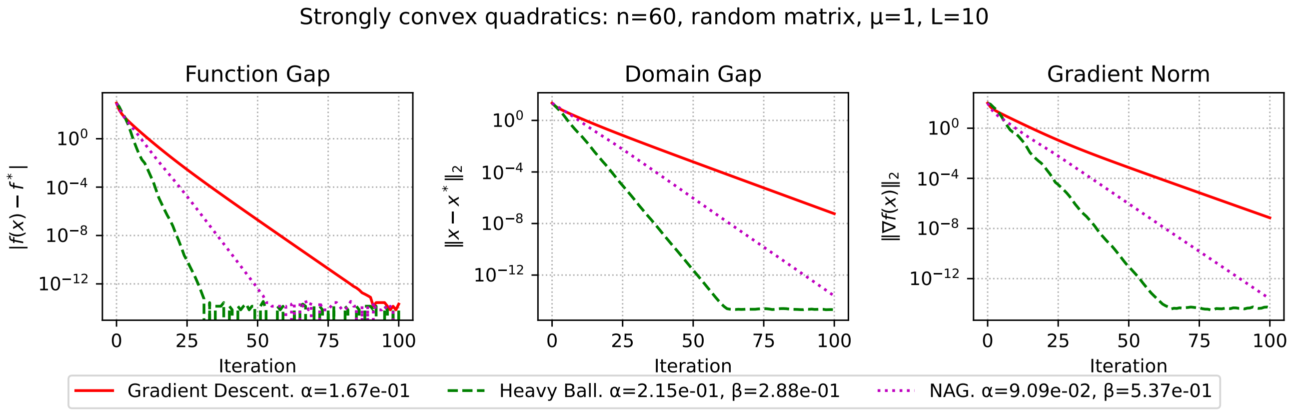
$$f(y_k) - f^* \leq \frac{\mu + L}{2}\|x_0 - x^*\|_2^2 \,\text{exp}\left(-\frac{k}{\sqrt{\varkappa}}\right)$$

Численные эксперименты

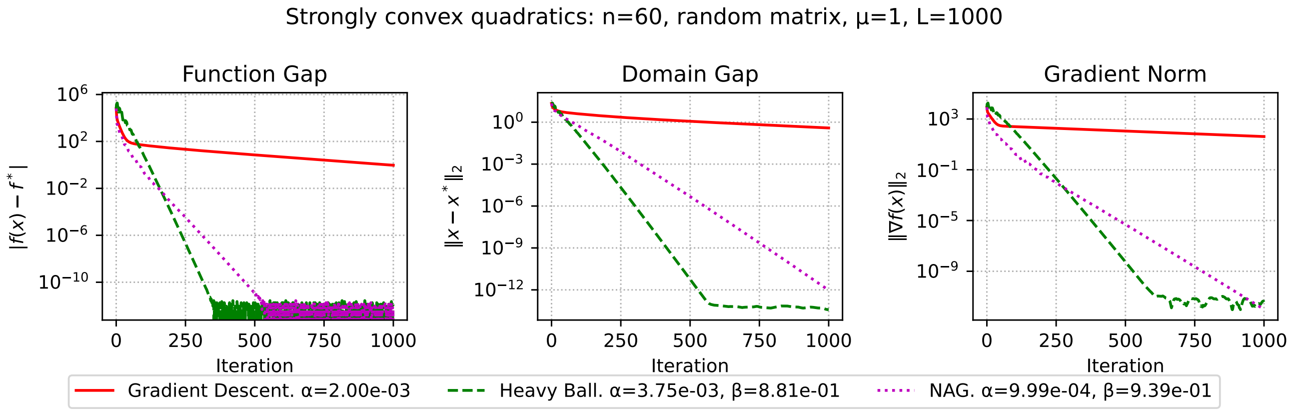
Выпуклая квадратичная задача (линейная регрессия)



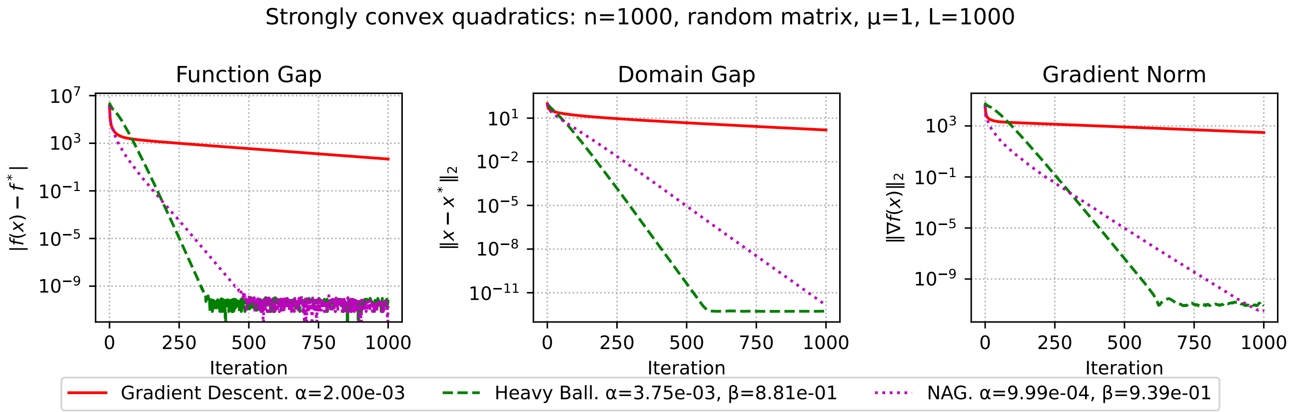
Сильно выпуклая квадратичная задача (регуляризованная линейная регрессия)



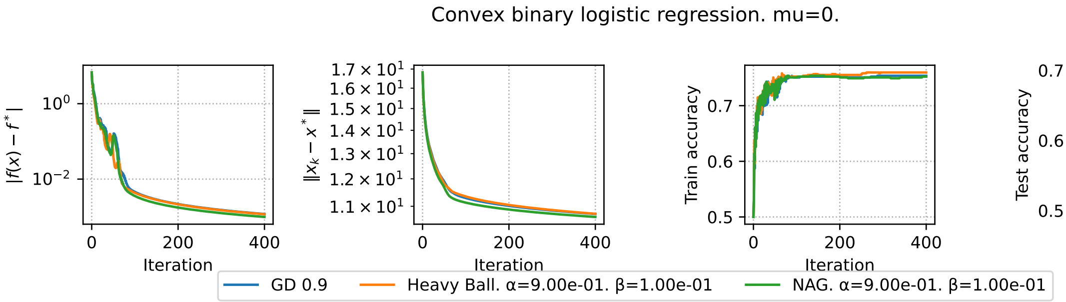
Сильно выпуклая квадратичная задача (регуляризованная линейная регрессия)



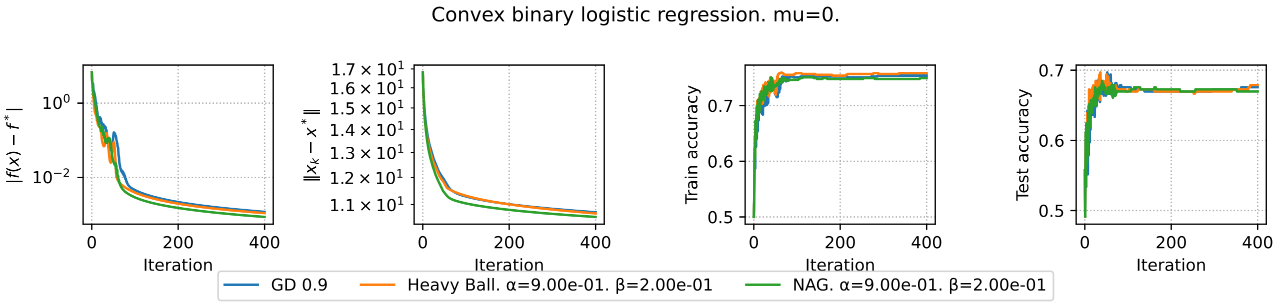
Сильно выпуклая квадратичная задача (регуляризованная линейная регрессия)



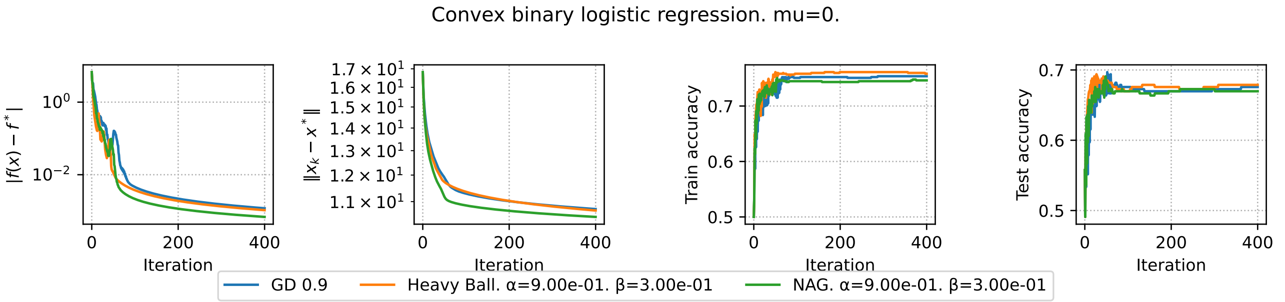
Выпуклая бинарная логистическая регрессия



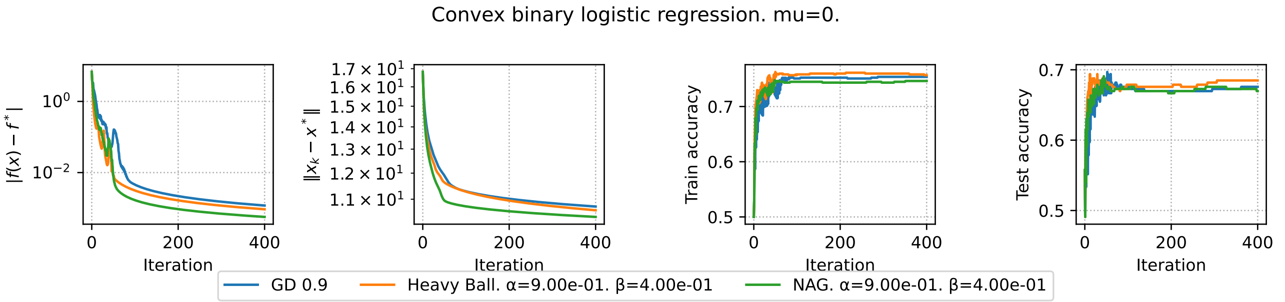
Выпуклая бинарная логистическая регрессия



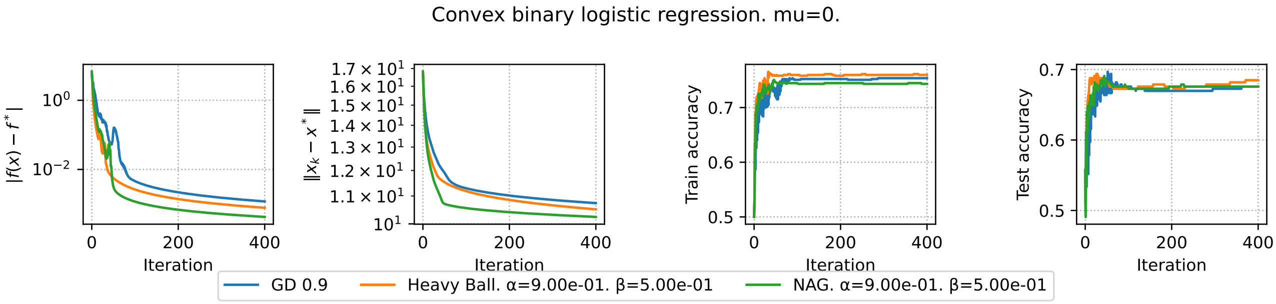
Выпуклая бинарная логистическая регрессия



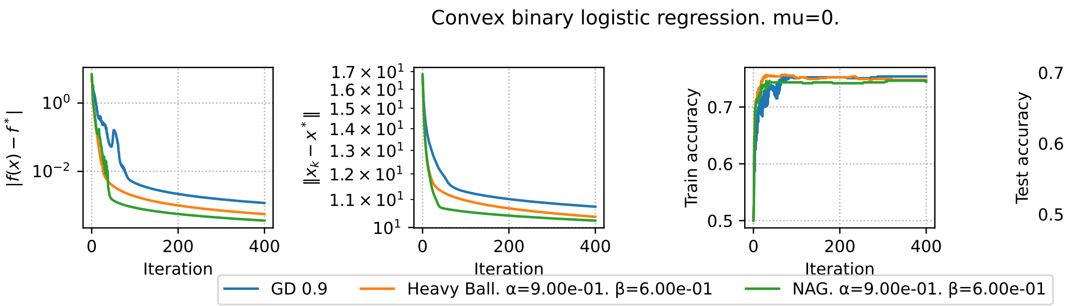
Выпуклая бинарная логистическая регрессия



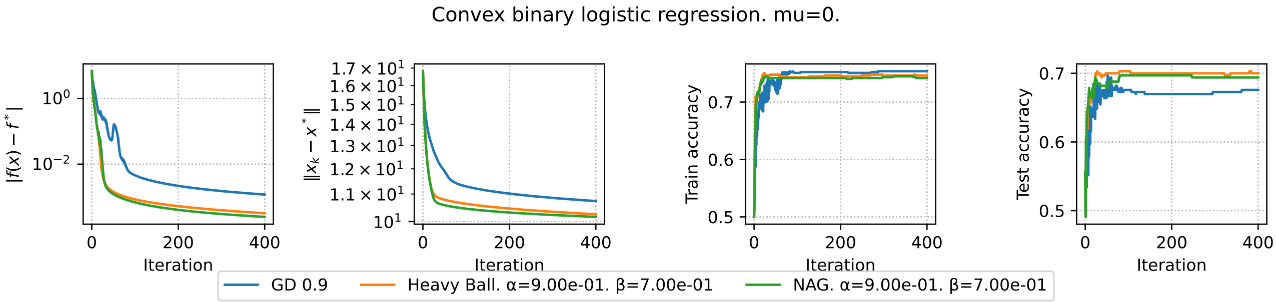
Выпуклая бинарная логистическая регрессия



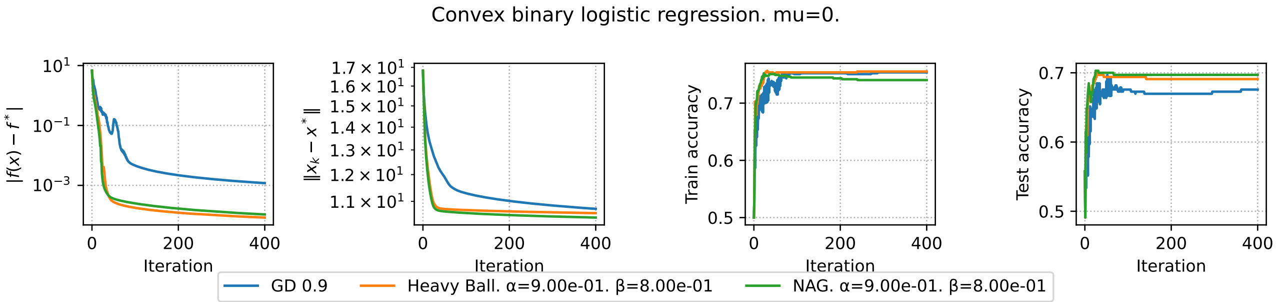
Выпуклая бинарная логистическая регрессия



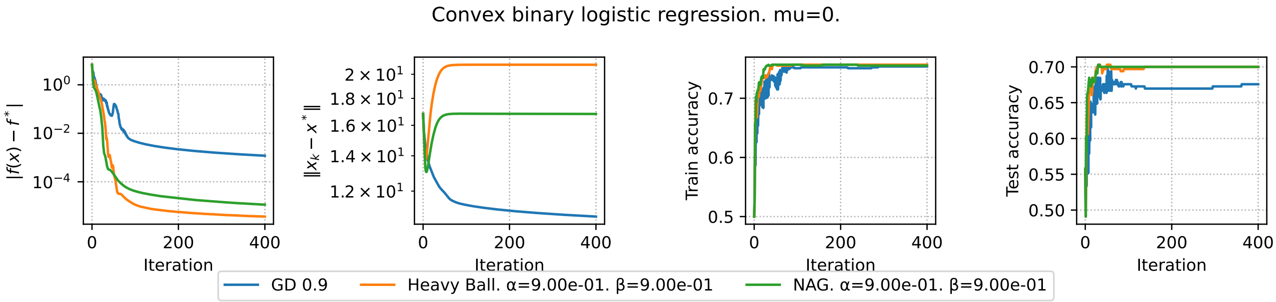
Выпуклая бинарная логистическая регрессия



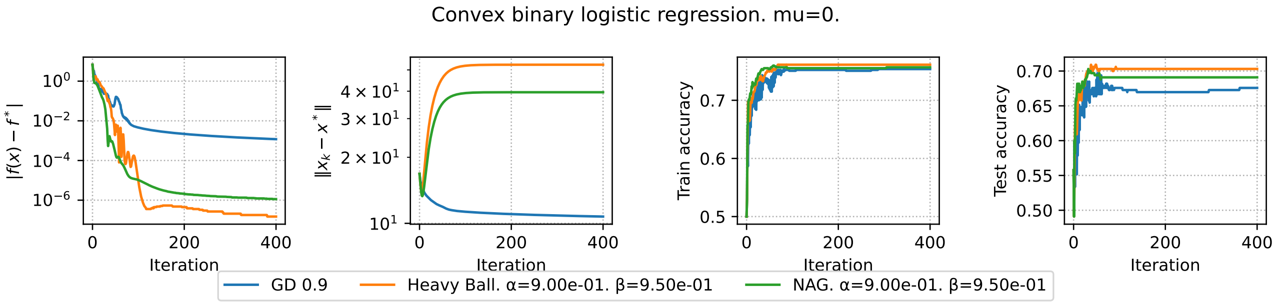
Выпуклая бинарная логистическая регрессия



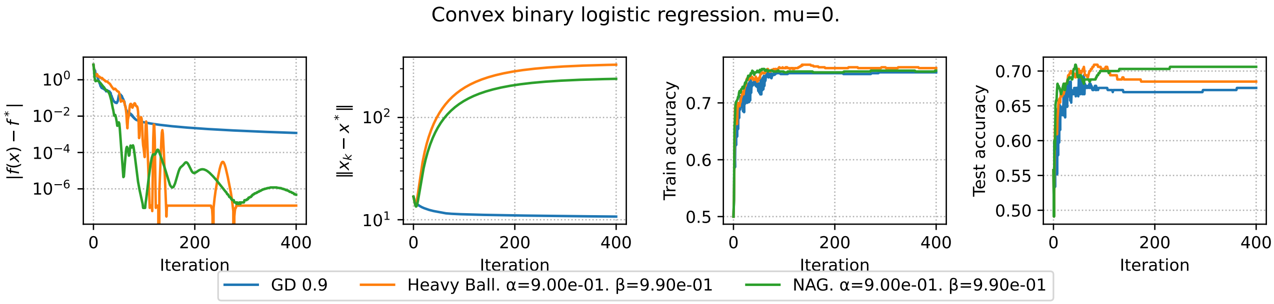
Выпуклая бинарная логистическая регрессия



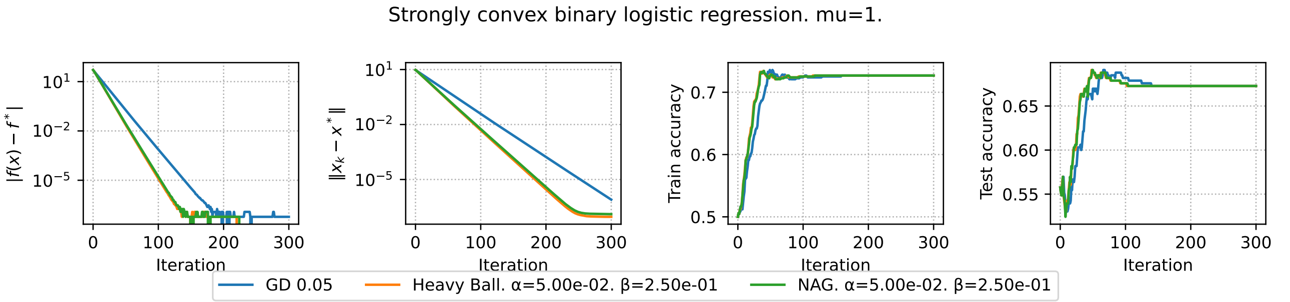
Выпуклая бинарная логистическая регрессия



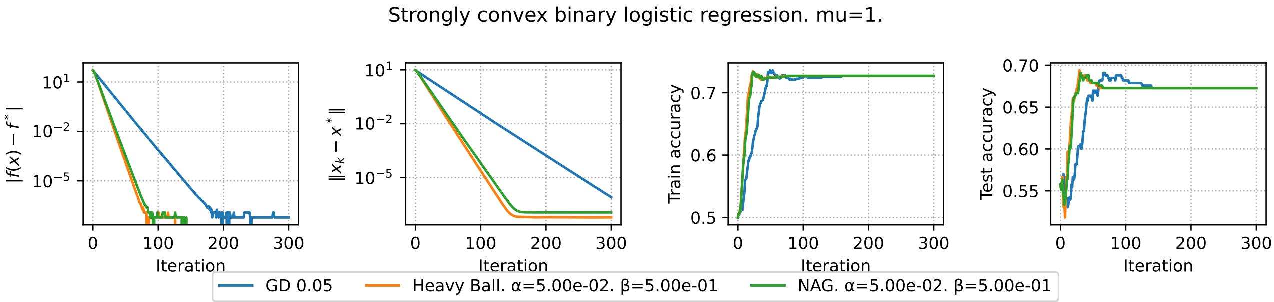
Выпуклая бинарная логистическая регрессия



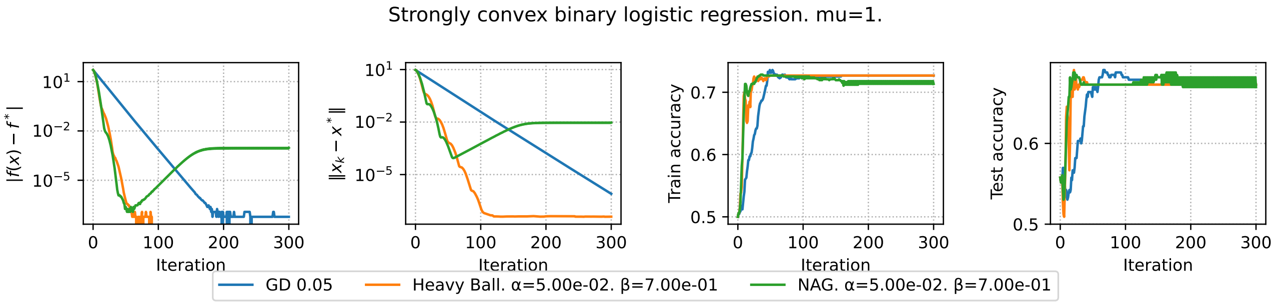
Сильно выпуклая бинарная логистическая регрессия



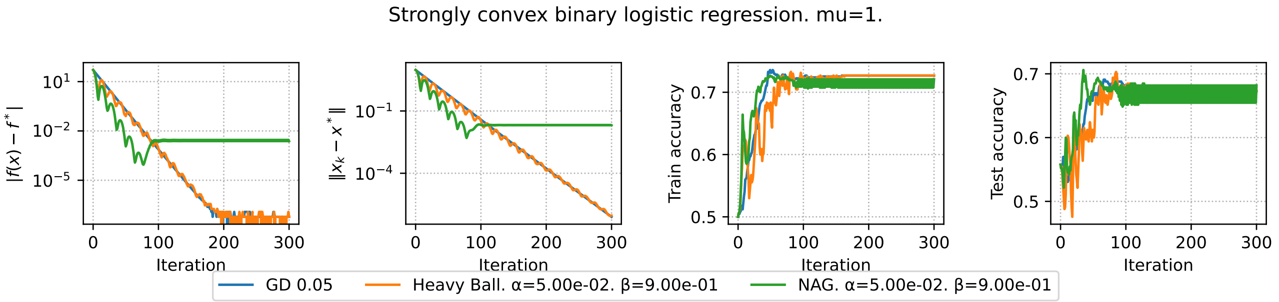
Сильно выпуклая бинарная логистическая регрессия



Сильно выпуклая бинарная логистическая регрессия



Сильно выпуклая бинарная логистическая регрессия



Нижние оценки для методов I порядка (источник)

Тип задачи	Критерий	Нижняя оценка	Верхняя оценка	Ссылка (Ниж.)	Ссылка (Верх.)
L-гладкая выпуклая	Зазор оптимальности	$\Omega\left(\sqrt{L\,\varepsilon^{-1}}\right)$	✔(точное совпадение)	[1], Теорема 2.1.7	[1], Теорема 2.2.2
L-гладкая μ-сильно выпуклая	Зазор оптимальности	$\Omega\left(\sqrt{\kappa}\ \log\frac{1}{\varepsilon}\right)$	✔	[1], Теорема 2.1.13	[1], Теорема 2.2.2
Негладкая G-липшицева выпуклая	Зазор оптимальности	$\Omega\left(G^2\,\varepsilon^{-2}\right)$	✔(точное совпадение)	[1], Теорема 3.2.1	[1], Теорема 3.2.2
Негладкая G-липшицева μ-сильно выпуклая	Зазор оптимальности	$\Omega\left(G^2\,(\mu\varepsilon)^{-1}\right)$	✔	[1], Теорема 3.2.5	[3], Теорема 3.9
L-гладкая выпуклая (сходимость по функции)	Стационарность	$\Omega\left(\sqrt{\Delta L}\,\varepsilon^{-1}\right)$	✔(с точностью до логарифмического множителя)	[2], Теорема 1	[2], Приложение A.1
L-гладкая выпуклая (сходимость по аргументу)	Стационарность	$\Omega\left(\sqrt{DL}\,\varepsilon^{-1/2}\right)$	✔	[2], Теорема 1	[6], Раздел 6.5
L-гладкая невыпуклая	Стационарность	$\Omega\left(\Delta L\,\varepsilon^{-2}\right)$	✔	[5], Теорема 1	[7], Теорема 10.15
Негладкая G-липшицева ρ-слабо выпуклая (WC)	Квази-стационарность	Неизвестно	$\mathcal{O}\left(\varepsilon^{-4}\right)$	/	[8], Следствие 2.2
L-гладкая μ-PL	Зазор оптимальности	$\Omega\left(\kappa\ \log\frac{1}{\varepsilon}\right)$	✔	[9], Теорема 3	[10], Теорема 1

Источники:

- [1] - Lectures on Convex Optimization, Y. Nesterov.
- [2] - Lower bounds for finding stationary points II: first-order methods, Y. Carmon, J.C. Duchi, O. Hinder, A. Sidford.
- [3] - Convex optimization: Algorithms and complexity, S. Bubeck, others.
- [4] - Optimizing the efficiency of first-order methods for decreasing the gradient of smooth convex functions D. Kim, J.A. Fessler.
- [5] - Lower bounds for finding stationary points I, Y. Carmon, J.C. Duchi, O. Hinder, A. Sidford.
- [6] - Optimizing the efficiency of first-order methods for decreasing the gradient of smooth convex functions, D. Kim, J.A. Fessler.
- [7] - First-order methods in optimization, A. Beck. SIAM. 2017.
- [8] - Stochastic subgradient method converges at the rate $ O (k^{-1/4}) $ on weakly convex functions, D. Davis, D. Drusvyatskiy.
- [9] - On the lower bound of minimizing Polyak-Lojasiewicz functions, P. Yue, C. Fang, Z. Lin.
- [10] - Linear convergence of gradient and proximal-gradient methods under the Polyak-Lojasiewicz condition, H. Karimi, J. Nutini, M. Schmidt.

Обозначения:

- Зазор оптимальности: $f(x_k) - f^* \le \varepsilon$
- Стационарность: $\|\nabla f(x_k)\| \le \varepsilon$
- Квази-стационарность: $\|\nabla f(x_k)\| \le \varepsilon$
- Липшицевость функции: $f(x) - f(y) \le G\|x - y\| \forall x,\ y \in \mathbb{R}^n$
- Липшицевость градиента (L-гладкость): $\nabla f(x) - \nabla f(y) \le L\|x - y\| \forall x,\ y \in \mathbb{R}^n$
- μ-сильная выпуклость: $f(\lambda x + (1-\lambda)y) \le \lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) - \frac{\mu}{2}\lambda(1-\lambda)\|x - y\|^2$
- ρ-слабо выпуклая функция: $f(\lambda x + (1-\lambda)y) \le \lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) + \rho\lambda(1-\lambda)\|x - y\|^2 \forall x,\ y \in \mathbb{R}^n$
- Число обусловленности: $\kappa = \frac{L}{\mu}$
- Зазор в начальной точке: $f(x_0) - f^* \le \Delta$
- Зазор по аргументу: $D = \|x_0 - x^*\|$