

Нижние оценки для градиентного спуска. Ускоренный градиентный спуск. Момент. Ускорение Нестерова

Даня Меркулов

1 Сходимость градиентного спуска

$$\text{Градиентный спуск:} \quad \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

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

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:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= f(x_{k_\varepsilon}) - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^{k_\varepsilon} (f(x_0) - f^*) \\ &\leq \exp\left(-k_\varepsilon \frac{\mu}{L}\right) (f(x_0) - f^*) \\ k_\varepsilon &\geq \nu \log \frac{f(x_0) - f^*}{\varepsilon} = \mathcal{O}\left(\nu \log \frac{1}{\varepsilon}\right) \end{aligned}$$

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

2 Нижние оценки

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

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая) ¹	гладкая & выпуклая ²	гладкая & сильно выпуклая
$f(x_k) - f^* = \Omega\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$	$\min_{0 \leq i \leq k} \ \nabla f(x_i)\ = \Omega\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$	$f(x_k) - f^* = \Omega\left(\frac{1}{k^2}\right)$	$f(x_k) - f^* = \Omega\left(\left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^{2k}\right)$
$k_\varepsilon = \Omega\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$k_\varepsilon = \Omega\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$k_\varepsilon = \Omega\left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right)$	$k_\varepsilon = \Omega\left(\sqrt{\kappa} \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

2.1 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

$$\begin{aligned} x_{k+1} &\in x_0 + \text{Lin}\{\nabla f(x_0), \nabla f(x_1), \dots, \nabla f(x_k)\} & f - \text{гладкая} \\ x_{k+1} &\in x_0 + \text{Lin}\{g_0, g_1, \dots, g_k\}, \text{ где } g_i \in \partial f(x_i) & f - \text{негладкая} \end{aligned} \tag{1}$$

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.

2.2 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:

$$f(x_k) - f^* \geq \frac{3L\|x_0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- 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 .

¹Carmon, Duchi, Hinder, Sidford, 2017

²Nemirovski, Yudin, 1979

- 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:
 - Нижняя оценка не является точной.
 - Метод градиентного спуска не является оптимальным для этой задачи.**

2.3 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

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

- 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:

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \\ x_4^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{cases} 2x_1^* - x_2^* = 1 \\ -x_{i-1}^* + 2x_i^* - x_{i+1}^* = 0, \quad i = 2, \dots, n-1 \\ -x_{n-1}^* + 2x_n^* = 0 \end{cases}$$

- 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

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

2.4 Гладкий случай (доказательство)

- Предположим, что мы начинаем с $x_0 = 0$. Запросив у оракула градиент, мы получаем $g_0 = -\frac{L}{4}e_1$. 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 оракул возвращает градиент $g_1 = \frac{L}{4}(Ax_1 - e_1)$. 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.

$$x_k = \begin{bmatrix} \bullet \\ \bullet \\ \vdots \\ \bullet \\ 0 \\ k+1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Однако, поскольку каждая итерация x_k , произведенная нашим методом, лежит в $S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ (т.е. имеет нули в координатах $k+1, \dots, n$), 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 $f(x^*)$.

- 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

$$f(x_k) \geq f(\tilde{x}_k).$$

- Следовательно,

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

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

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

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x_0 - x^*\|_2$:

$$\begin{aligned} \|x_0 - x^*\|_2^2 &= \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 \\ &= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^n i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^n i^2 \\ &\leq n - \frac{2}{n+1} \cdot \frac{n(n+1)}{2} + \frac{1}{(n+1)^2} \cdot \frac{(n+1)^3}{3} \\ &\stackrel{n=2k+1}{=} \frac{n+1}{3} \cdot \frac{2(k+1)}{3}. \end{aligned}$$

- Следовательно,

$$k+1 \geq \frac{3}{2} \|x_0 - x^*\|_2^2 = \frac{3}{2} R^2 \tag{3}$$

Заметим, что

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

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 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.

2.5 Нижние оценки для гладкого случая

Гладкий выпуклый случай

Существует L -гладкая выпуклая функция f , такая, что любой метод в форме 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 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:

$$\begin{aligned}\|x_k - x^*\|_2 &\geq \left(\frac{\sqrt{\varkappa} - 1}{\sqrt{\varkappa} + 1} \right)^k \|x_0 - x^*\|_2 \\ f(x_k) - f^* &\geq \frac{\mu}{2} \left(\frac{\sqrt{\varkappa} - 1}{\sqrt{\varkappa} + 1} \right)^{2k} \|x_0 - x^*\|_2^2\end{aligned}$$

3 Ускорение для квадратичных функций

3.1 Результат сходимости для квадратичных функций

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

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

Theorem

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

$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq \left(\frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1} \right)^k \|x_0 - x^*\|_2 \quad f(x_{k+1}) - f(x^*) \leq \left(\frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1} \right)^{2k} (f(x_0) - f(x^*))$$

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

3.2 Число обусловленности κ



3.3 Ускорение из первых принципов

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

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.

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

3.3.1 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 $[\mu, L]$.

3.4 Наивное полиномиальное решение

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

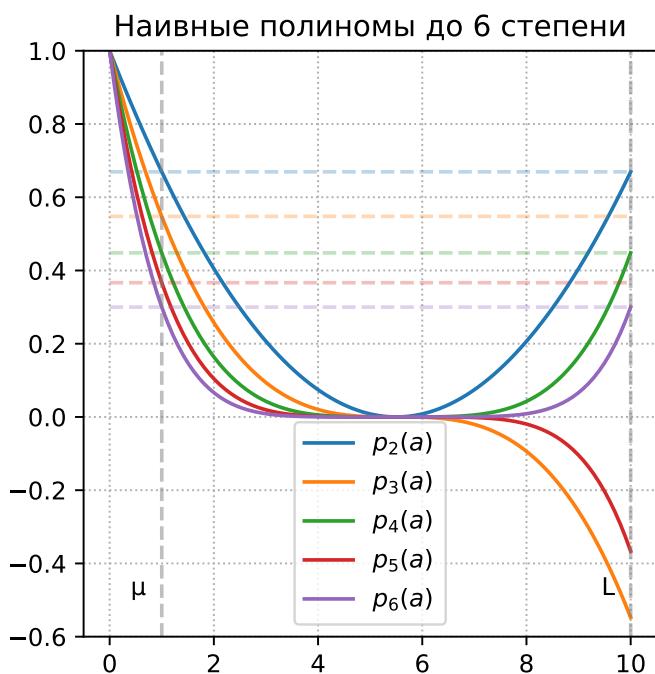
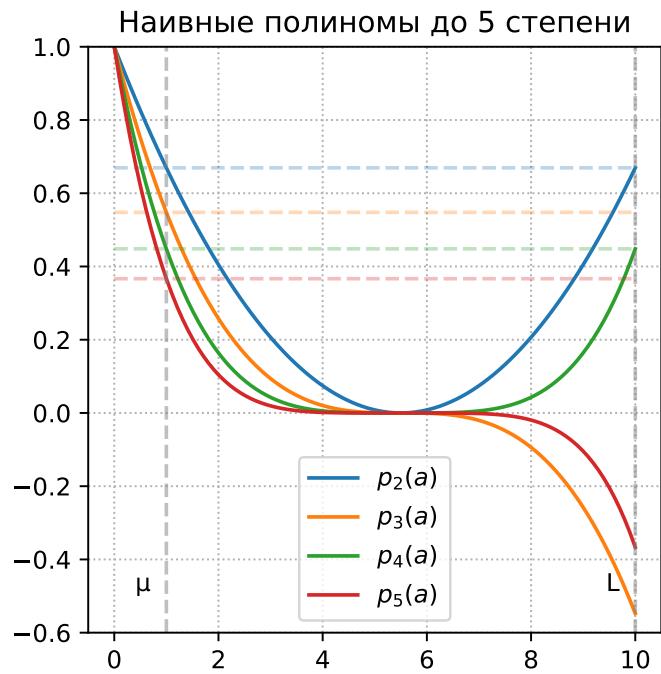
$$\|e_k\| \leq \left(\frac{\nu - 1}{\nu + 1}\right)^k \|e_0\|$$

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 $\mu = 1$ и $L = 10$ так, что $\nu = 10$. Следовательно, соответствующий интервал равен $[1, 10]$.

Можем ли мы сделать лучше? Ответ — да.





3.5 Полиномы Чебышева

Полиномы Чебышёва дают оптимальный ответ на поставленный вопрос. При соответствующем шкалировании они минимизируют абсолютное значение на заданном интервале $[\mu, L]$, одновременно

удовлетворяя нормировочному условию $p(0) = 1$.

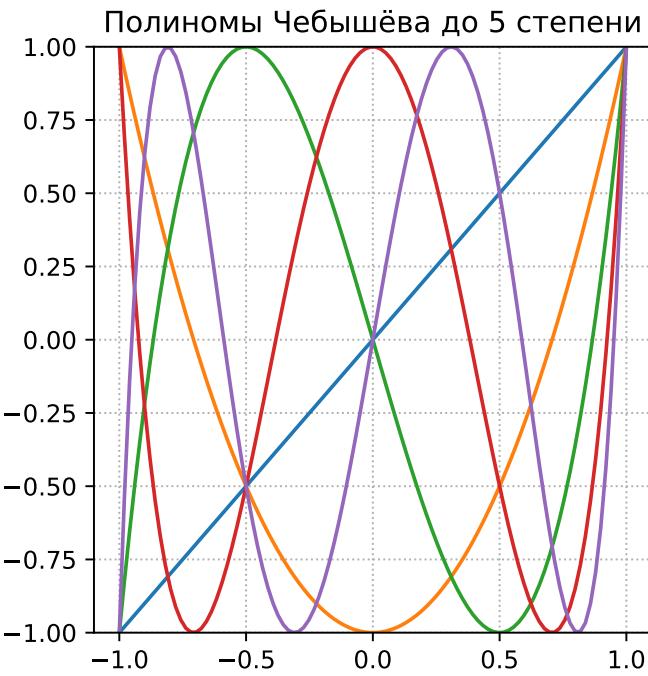
$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \quad k \geq 2.$$

Давайте построим стандартные полиномы Чебышёва (без масштабирования):





3.6 Отшкалированные полиномы Чебышёва

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

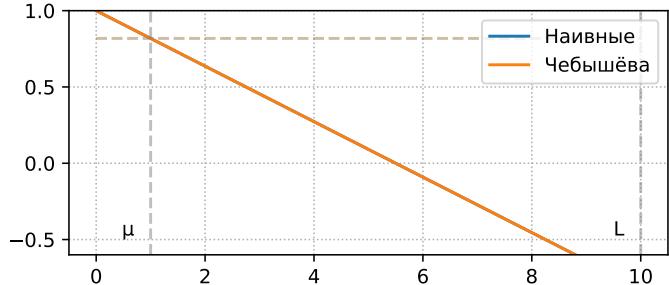
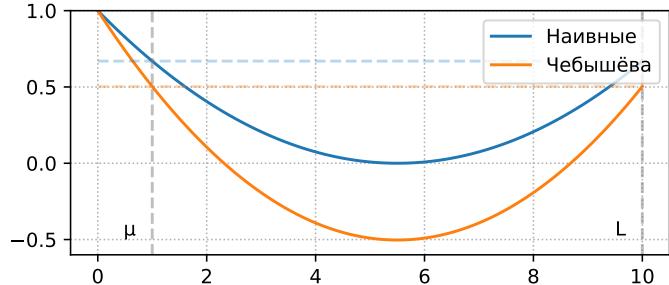
В нашем анализе ошибок мы требуем, чтобы полином был равен 1 в 0 (т.е. $p_k(0) = 1$). После применения преобразования значение T_k в точке, соответствующей $a = 0$, может не быть 1. Следовательно, мы умножаем на обратную величину T_k в точке

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

Построим отшаклированные 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 $[\mu, L]$.

Полиномы степени 1

Полиномы степени 2

Полиномы степени 3

Полиномы степени 4

Полиномы степени 5

Полиномы степени 6

Полиномы степени 7

Полиномы степени 8

Полиномы степени 9

Полиномы степени 10


3.7 Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Мы можем видеть, что максимальное значение полинома Чебышёва на интервале $[\mu, L]$ достигается на концах отрезка в точках $a = \mu$ и $a = L$. 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:

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

Именно в этот момент явно возникнет ускорение. Мы ограничим значение $\|P_k(A)\|_2$ сверху величиной $\left(\frac{1}{1+\sqrt{\epsilon}}\right)^k$. Для этого детально изучим величину $|T_k(1+\epsilon)|$.

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

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

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,

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

5. Наконец, мы получаем:

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

3.8 Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускоренного алгоритма. Переформулируя рекурсию в терминах наших отшкалированных 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:

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

3.9 Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

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

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

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

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 $e_{k+1} = x_{k+1}$.

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

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

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

3.10 Ускорение из первых принципов

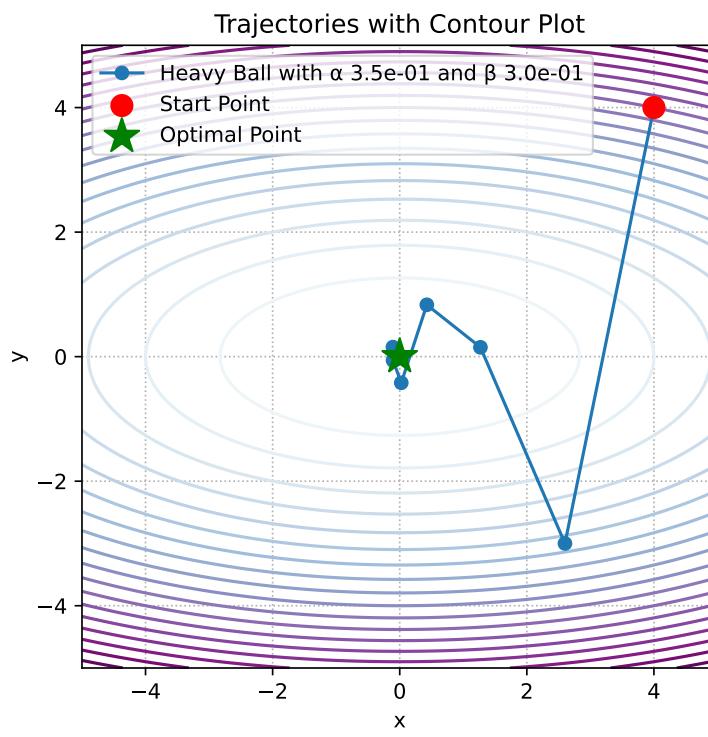


4 Метод тяжёлого шарика

4.1 Колебания и ускорение



4.2 Метод тяжёлого шарика Поляка



Давайте представим идею момента (импульса, тяжёлого шарика), предложенную Б.Т. Поляком в 1964 году. Обновление метода тяжёлого шарика 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:

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

4.3 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.

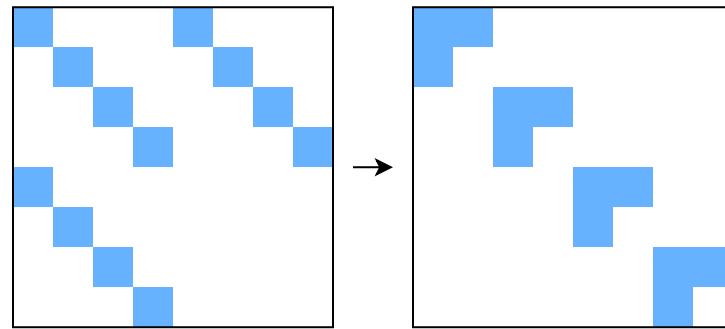


Рисунок 1: Иллюстрация перестановки матрицы M

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

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.

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.

4.4 Сходимость метода тяжёлого шарика для квадратичной функции

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. $\beta \geq (1 - \sqrt{\alpha\lambda_i})^2$.

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

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

Theorem

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

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

сходится линейно:

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

4.5 Глобальная сходимость метода тяжёлого шарика³

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

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

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

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

Theorem

Предположим, что f является гладкой и сильно выпуклой и что

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

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

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

где $q \in [0, 1)$.

4.6 Итоги по методу тяжёлого шарика

- Обеспечивает ускоренную сходимость для сильно выпуклых квадратичных задач.
- Локально ускоренная сходимость была доказана в оригинальной статье.
- Недавно⁴ 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).

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

⁴Provably non-accelerations of the heavy-ball method

5 Ускоренный градиентный метод Нестерова

5.1 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

$$\begin{array}{ll} x^+ = x - \alpha \nabla f(x) & \text{Градиентный шаг} \\ d_k = \beta_k(x_k - x_{k-1}) & \text{Импульс} \end{array}$$

Тогда мы можем записать:

$$\begin{array}{ll} x_{k+1} = x_k^+ & \text{Градиентный спуск} \\ x_{k+1} = x_k^+ + d_k & \text{Метод тяжёлого шарика} \\ x_{k+1} = (x_k + d_k)^+ & \text{Ускоренный градиентный метод Нестерова} \end{array}$$

Polyak momentum



Nesterov momentum



5.2 Сходимость для выпуклых функций

Theorem

Предположим, что $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 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:

$$\text{Обновление градиента: } x_{k+1} = y_k - \frac{1}{L} \nabla f(y_k)$$

$$\text{Вес экстраполяции: } \lambda_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4\lambda_k^2}}{2}$$

$$\gamma_k = \frac{\lambda_k - 1}{\lambda_{k+1}}$$

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

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

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

5.3 Ускоренная сходимость для сильно выпуклых функций

Theorem

Предположим, что $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 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:

$$\text{Обновление градиента: } x_{k+1} = y_k - \frac{1}{L} \nabla f(y_k)$$

$$\text{Экстраполяция: } y_{k+1} = x_{k+1} - \gamma (x_{k+1} - x_k)$$

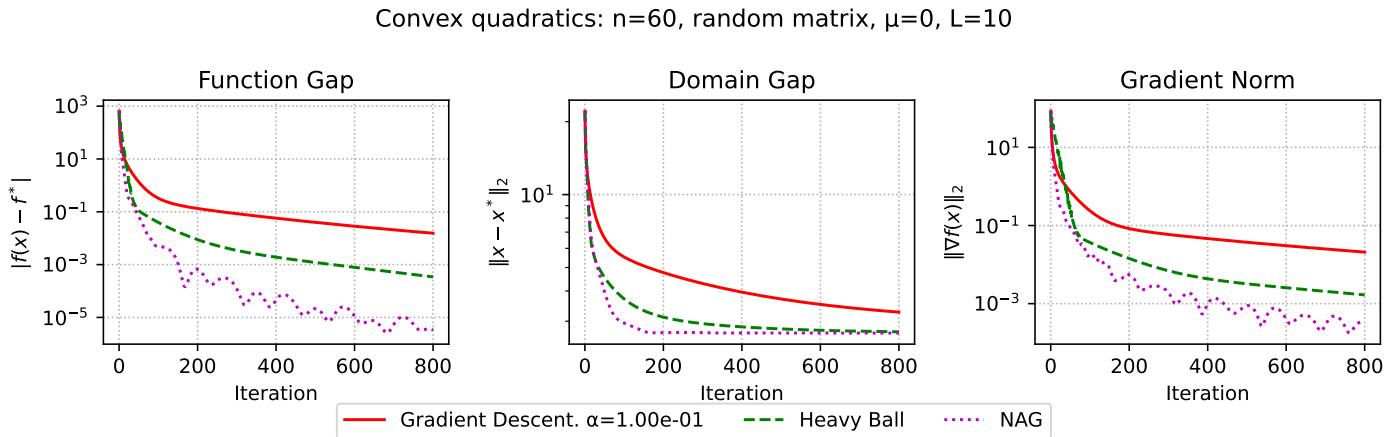
$$\text{Вес экстраполяции: } \gamma = \frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}}$$

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

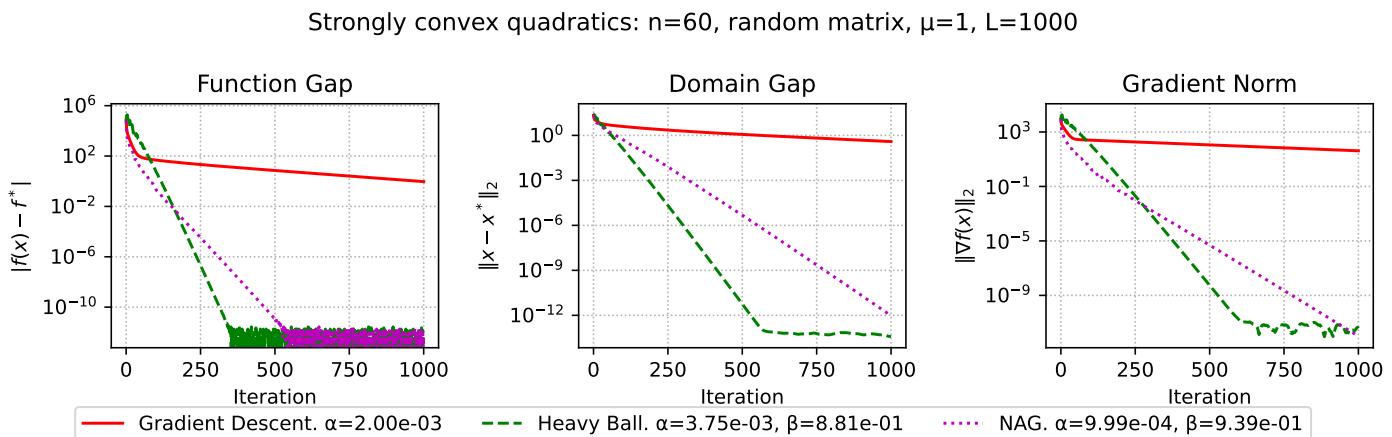
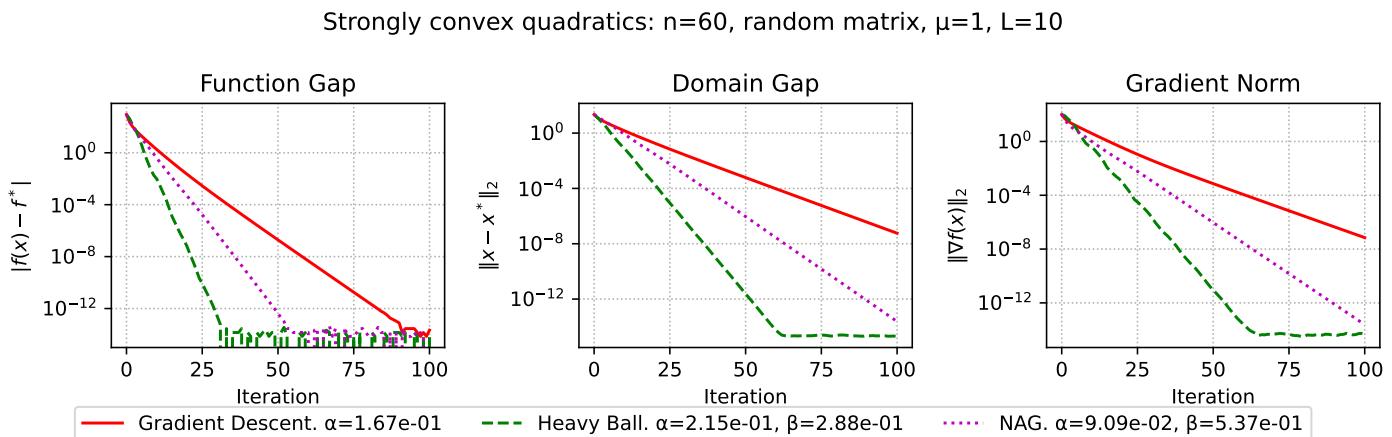
$$f(x_k) - f^* \leq \frac{\mu + L}{2} \|x_0 - x^*\|_2^2 \exp\left(-\frac{k}{\sqrt{\mu}}\right)$$

6 Численные эксперименты

6.1 Выпуклая квадратичная задача (линейная регрессия)



6.2 Сильно выпуклая квадратичная задача (регуляризованная линейная регрессия)



Strongly convex quadratics: n=1000, random matrix, $\mu=1$, L=1000

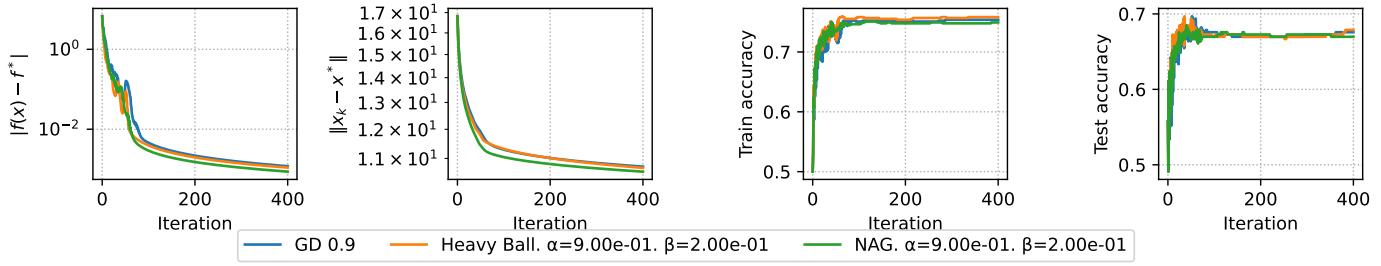


6.3 Выпуклая бинарная логистическая регрессия

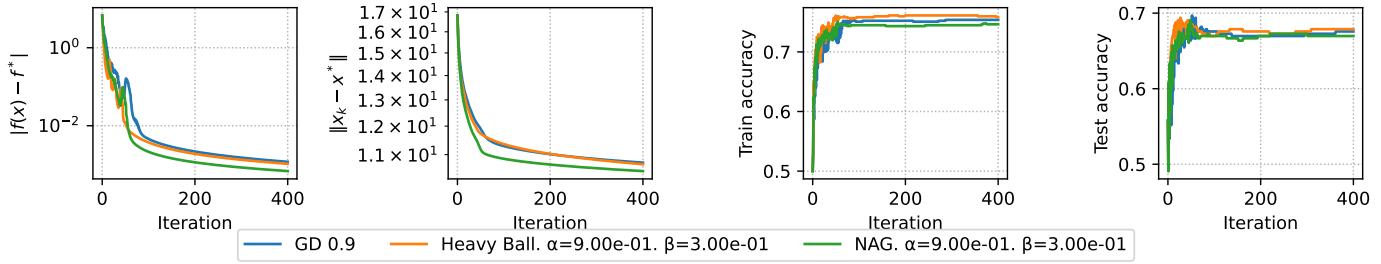
Convex binary logistic regression. mu=0.

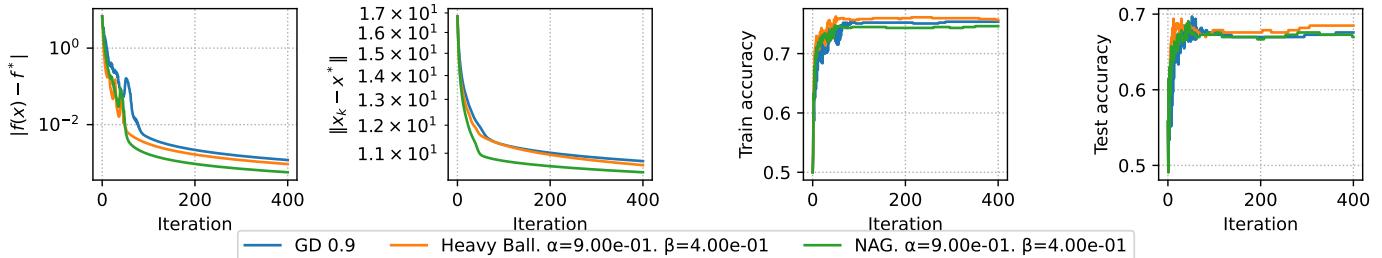
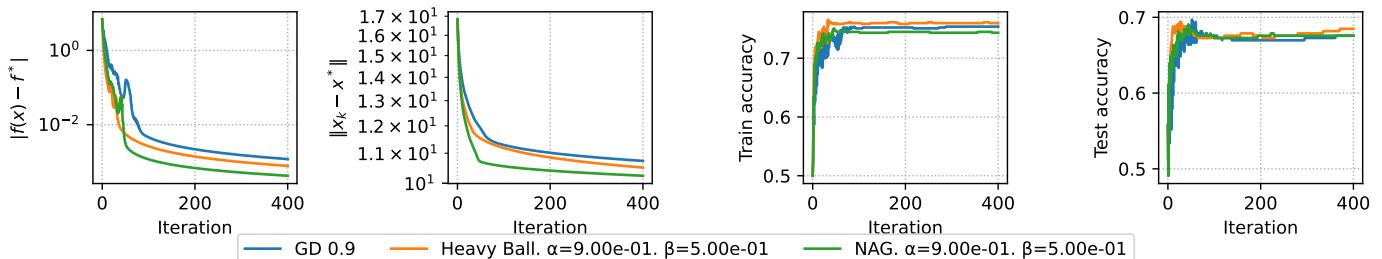
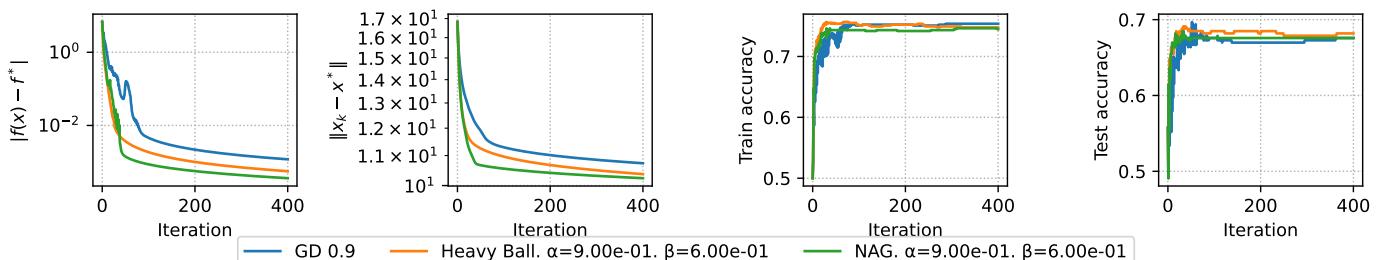
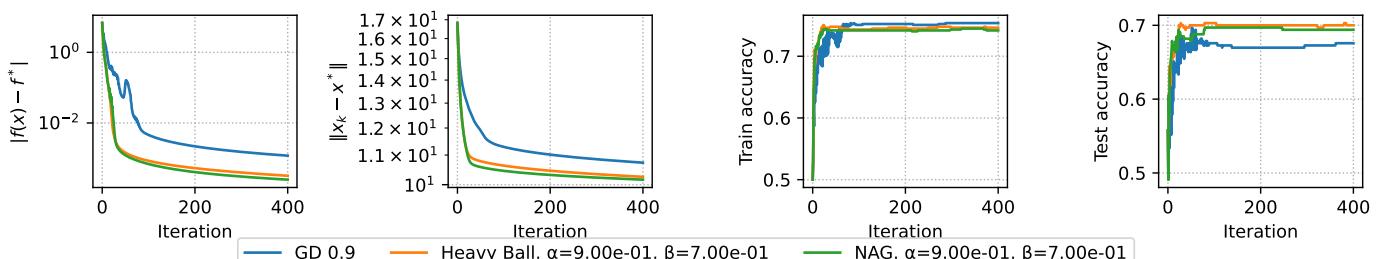
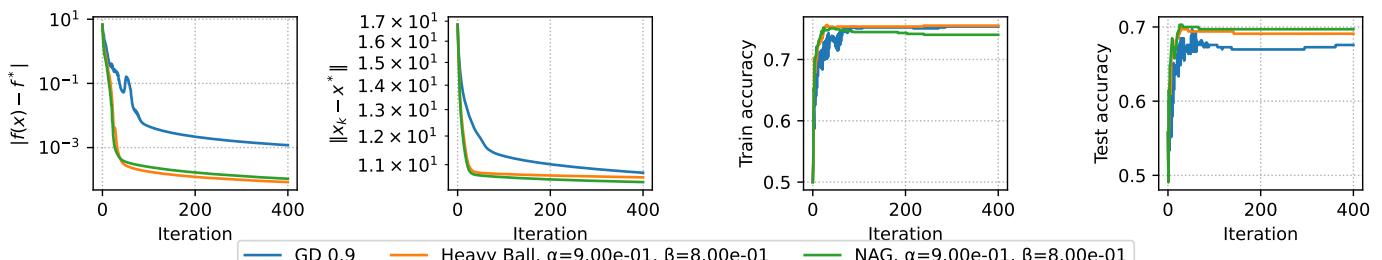


Convex binary logistic regression. mu=0.



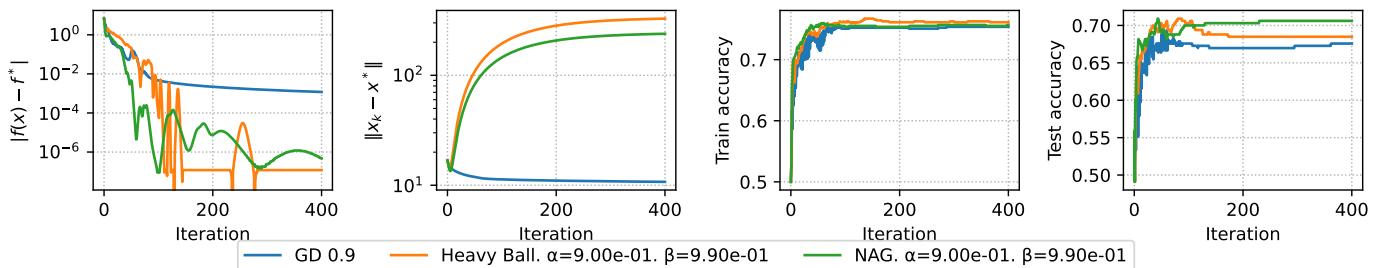
Convex binary logistic regression. mu=0.



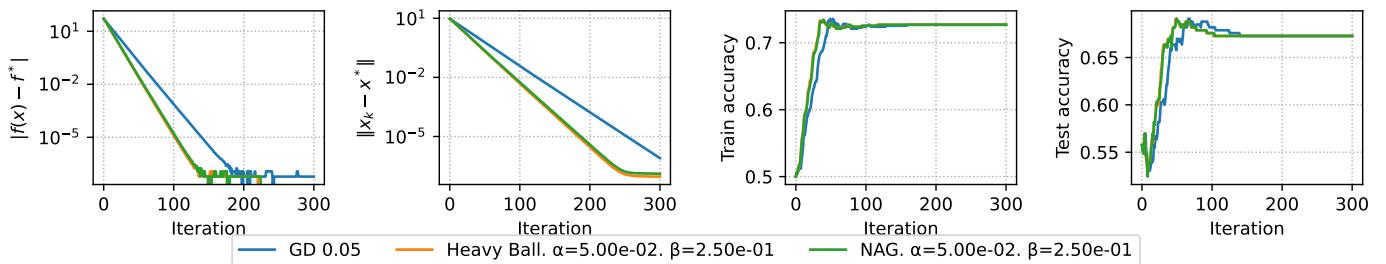
Convex binary logistic regression. $\mu=0$.

 Convex binary logistic regression. $\mu=0$.

 Convex binary logistic regression. $\mu=0$.

 Convex binary logistic regression. $\mu=0$.

 Convex binary logistic regression. $\mu=0$.


Convex binary logistic regression. $\mu=0$.

 Convex binary logistic regression. $\mu=0$.

 Convex binary logistic regression. $\mu=0$.


6.4 Сильно выпуклая бинарная логистическая регрессия

 Strongly convex binary logistic regression. $\mu=1$.


Strongly convex binary logistic regression. mu=1.



Strongly convex binary logistic regression. mu=1.



Strongly convex binary logistic regression. mu=1.



6.5 Нижние оценки для методов I порядка ([Источник](#))

Тип задачи	Критерий	Нижняя оценка	Верхняя оценка	Ссылка (Ниж.)	Ссылка (Верх.)
L -гладкая выпуклая	Зазор оптимальности	$\Omega(\sqrt{L} \varepsilon^{-1})$	✓ (точное совпадение)	[1], Теорема 2.1.7	[1], Теорема 2.2.2
L -гладкая μ -сильно выпуклая	Зазор оптимальности	$\Omega(\sqrt{\mu} \log \frac{1}{\varepsilon})$	✓	[1], Теорема 2.1.13	[1], Теорема 2.2.2
Негладкая G -липшицева выпуклая	Зазор оптимальности	$\Omega(G^2 \varepsilon^{-2})$	✓ (точное совпадение)	[1], Теорема 3.2.1	[1], Теорема 3.2.2
Негладкая G -липшицева μ -сильно выпуклая	Зазор оптимальности	$\Omega(G^2 (\mu\varepsilon)^{-1})$	✓	[1], Теорема 3.2.5	[3], Теорема 3.9
L -гладкая выпуклая (сходимость по функции)	Стационарность	$\Omega(\sqrt{D L} \varepsilon^{-1})$	✓ (с точностью до логарифмического множителя)	[2], Теорема 1	[2], Приложение A.1
L -гладкая выпуклая (сходимость по аргументу)	Стационарность	$\Omega(\sqrt{D L} \varepsilon^{-1/2})$	✓	[2], Теорема 1	[6], Раздел 6.5
L -гладкая невыпуклая	Стационарность	$\Omega(\Delta L \varepsilon^{-2})$	✓	[5], Теорема 1	[7], Теорема 10.15
Негладкая G -липшицева ρ -слабо выпуклая (WC)	Квазистационарность	Неизвестно	$\mathcal{O}(\varepsilon^{-4})$	/	[8], Следствие 2.2
L -гладкая μ -PL	Зазор оптимальности	$\Omega(\mu \log \frac{1}{\varepsilon})$	✓	[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: $f(x_k) - f^* \leq \varepsilon$
- Стационарность: $\|\nabla f(x_k)\| \leq \varepsilon$
- Квазистационарность: $\|\nabla f_\lambda(x_k)\| \leq \varepsilon$, где $f_\lambda(x) = \inf_{y \in \mathbb{R}^n} (f(y) + \frac{1}{2\lambda} \|y - x\|^2)$
- Липшицевость функции: $|f(x) - f(y)| \leq G\|x - y\| \forall x, y \in \mathbb{R}^n$
- Липшицевость градиента (L -гладкость): $\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\| \forall x, y \in \mathbb{R}^n$
- μ -сильная выпуклость: $f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) - \frac{\mu}{2}\lambda(1 - \lambda)\|x - y\|^2$
- ρ -слабо выпуклая функция: $f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) + \rho\lambda(1 - \lambda)\|x - y\|^2 \forall x, y \in \mathbb{R}^n$
- Число обусловленности: $\kappa = \frac{L}{\mu}$
- Зазор в начальной точке: $f(x_0) - f^* \leq \Delta$
- Зазор по аргументу: $D = \|x_0 - x^*\|$

7 Задачи на дом

1. **Локальная сходимость метода тяжелого шарика.** [20 баллов] Мы будем работать с методом тяжелого шарика

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

Известно, что для квадратичных функций оптимальный выбор гиперпараметров равен $\alpha^* = \frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}$, $\beta^* = \frac{(\sqrt{L} - \sqrt{\mu})^2}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}$, который обеспечивает ускоренную линейную сходимость для сильно выпуклой квадратичной функции.

Рассмотрим следующую непрерывно дифференцируемую, сильно выпуклую с параметром μ , и гладкую с параметром L функцию:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{25}{2}x^2, & \text{if } x < 1 \\ \frac{1}{2}x^2 + 24x - 12, & \text{if } 1 \leq x < 2 \\ \frac{25}{2}x^2 - 24x + 36, & \text{if } x \geq 2 \end{cases} \quad \nabla f(x) = \begin{cases} 25x, & \text{if } x < 1 \\ x + 24, & \text{if } 1 \leq x < 2 \\ 25x - 24, & \text{if } x \geq 2 \end{cases}$$

1. Как доказать, что данная функция является выпуклой? Сильно выпуклой? Гладкой?
2. Найдите константы μ и L для данной функции.

3. Постройте график функции для $x \in [-4, 4]$.
4. Запустите метод тяжелого шарика для функции с оптимальными гиперпараметрами $\alpha^* = \frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}$, $\beta^* = \frac{(\sqrt{L} - \sqrt{\mu})^2}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}$ для квадратичной функции, начиная с $x_0 = 3.5$. Если вы все сделали правильно, вы должны получить что-то вроде

(heavy_ball_conv.mp4)

Вы можете использовать следующий код для построения:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.animation as animation
from IPython.display import HTML

# Gradient of the function
def grad_f(x):
    ...

# Heavy Ball method implementation
def heavy_ball_method(alpha, beta, x0, num_iterations):
    x = np.zeros(num_iterations + 1)
    x_prev = x0
    x_curr = x0 # Initialize x[1] same as x[0] to start the algorithm
    for i in range(num_iterations):
        x[i] = x_curr
        x_new = x_curr - alpha * grad_f(x_curr) + beta * (x_curr - x_prev)
        x_prev = x_curr
        x_curr = x_new
    x[num_iterations] = x_curr
    return x

# Parameters
L = ...
mu = ...
alpha_star = ...
beta_star = ...
x0 = ...
num_iterations = 30

# Generate the trajectory of the method
trajectory = heavy_ball_method(alpha_star, beta_star, x0, num_iterations)

# Setup the figure and axes for the animation
fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2, figsize=(7, 3.5))
fig.suptitle("Heavy ball method with optimal hyperparameters * *")

# Function for updating the animation
def update(i):
    ax1.clear()
    ax2.clear()
```

```
# Plot f(x) and trajectory
x_vals = np.linspace(-4, 4, 100)
f_vals = np.piecewise(x_vals, [x_vals < 1, (x_vals >= 1) & (x_vals < 2), x_vals >= 2],
                      [lambda x: 12.5 * x**2, lambda x: .5 * x**2 + 24 * x - 12, lambda x: 12 * x])
ax1.plot(x_vals, f_vals, 'b-')
ax1.plot(traj[:i], [12.5 * x**2 if x < 1 else .5 * x**2 + 24 * x - 12 if x < 2 else 12 * x for x in traj[:i]])
# Add vertical dashed lines at x=1 and x=2 on the left subplot
ax1.axvline(x=1, color='navy', linestyle='--')
ax1.axvline(x=2, color='navy', linestyle='--')

# Plot function value from iteration
f_trajectory = [None for x in traj]
f_trajectory[:i] = [12.5 * x**2 if x < 1 else .5 * x**2 + 24 * x - 12 if x < 2 else 12 * x for x in traj[:i]]
ax2.plot(range(len(traj)), f_trajectory, 'ro-')
ax2.set_xlim(0, len(traj))
ax2.set_ylim(min(f_vals), max(f_vals))
# Add horizontal dashed lines at f(1) and f(2) on the right subplot
f_1 = 12.5 * 1.0**2
f_2 = .5 * 2.**2 + 24 * 2. - 12
ax2.axhline(y=f_1, color='navy', linestyle='--')
ax2.axhline(y=f_2, color='navy', linestyle='--')

# ax1.set_title("Function f(x) and Trajectory")
ax1.set_xlabel("x")
ax1.set_ylabel("f(x)")
ax1.grid(linestyle=":")

# ax2.set_title("Function Value from Iteration")
ax2.set_xlabel("Iteration")
ax2.set_ylabel("f(x)")
ax2.grid(linestyle=":")

plt.tight_layout()

# Create the animation
ani = animation.FuncAnimation(fig, update, frames=num_iterations, repeat=False, interval=100)
HTML(ani.to_jshtml())
```

5. Измените начальную точку на $x_0 = 3.4$. Что вы видите? Как можно назвать такое поведение метода?
6. Измените гиперпараметры $\alpha^{\text{Global}} = \frac{2}{L}$, $\beta^{\text{Global}} = \frac{\mu}{L}$ и запустите метод снова с $x_0 = 3.4$. Проверьте, что вы получили ускоренную сходимость.

Контекст: этот контрпример был предоставлен в [статье](#), в то время как глобальная сходимость метода тяжелого шарика для общей гладкой сильно выпуклой функции была введена в другой [статье](#). Недавно было [предложено](#), что метод тяжелого шарика (НВ) доказуемо не достигает ускоренной сходимости на гладких сильно выпуклых задачах.

2. [40 points] В этой задаче мы будем работать с ускоренными методами, применяемыми к задаче логистической регрессии. Хорошее визуальное введение по теме доступно [здесь](#).

Логистическая регрессия является стандартной моделью в задачах классификации. Для простоты рассмотрим только случай бинарной классификации. Интуитивно, задача формулируется следующим образом: Есть обучающая выборка $\{(a_i, b_i)\}_{i=1}^m$, состоящая из m векторов $a_i \in \mathbb{R}^n$ (относящихся к признакам) и соответствующих чисел $b_i \in \{-1, 1\}$ (относящихся к классам или меткам). Цель состоит в том, чтобы построить алгоритм $b(\cdot)$, который для любого нового вектора признаков a автоматически определяет его класс $b(a) \in \{-1, 1\}$.

В модели логистической регрессии класс определяется на основе знака линейной комбинации компонентов вектора a с некоторыми фиксированными коэффициентами $x \in \mathbb{R}^n$:

$$b(a) := \text{sign}(\langle a, x \rangle).$$

Коэффициенты x являются параметрами модели и подбираются путем решения следующей оптимизационной задачи:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left(\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \ln(1 + \exp(-b_i \langle a_i, x \rangle)) + \frac{\lambda}{2} \|x\|^2 \right), \quad (\text{LogReg})$$

где $\lambda \geq 0$ является коэффициентом регуляризации (параметром модели).

1. Будет ли задача LogReg выпуклой для $\lambda = 0$? Каков градиент целевой функции? Будет ли она сильно выпуклой? Что будет, если вы добавите регуляризацию с $\lambda > 0$?
2. Мы будем работать с реальными данными для A и b : возьмите датасет mushrooms. Будьте осторожны, вам нужно будет предсказать, является ли гриб ядовитым или съедобным. Плохая модель может привести к смерти в этом упражнении.

```
import requests
from sklearn.datasets import load_svmlight_file

# URL of the file to download
url = 'https://cu25.fmin.xyz/files/mushrooms.txt'

# Download the file and save it locally
response = requests.get(url)
dataset = 'mushrooms.txt'

# Ensure the request was successful
if response.status_code == 200:
    with open(dataset, 'wb') as f:
        f.write(response.content)

    # Load the dataset from the downloaded file
    data = load_svmlight_file(dataset)
    A, b = data[0].toarray(), data[1]
    n, d = A.shape

    print("Data loaded successfully.")
    print(f"Number of samples: {n}, Number of features: {d}")
else:
    print(f"Failed to download the file. Status code: {response.status_code}")
```

3. Разделите данные на две части: обучение и тест. Мы будем обучать модель на A_{train}, b_{train} и измерять точность модели на A_{test}, b_{test} .

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
# Split the data into training and test sets
A_train, A_test, b_train, b_test = train_test_split(A, b, test_size=0.2, random_state=214)
```

4. Для обучения A_{train}, b_{train} , оцените константы μ, L задачи оптимизации. Используйте одно и то же маленькое значение λ для всех экспериментов
5. Используя градиентный спуск с шагом $\frac{1}{L}$, обучите модель. Постройте график: точность в зависимости от номера итерации.

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

Зафиксируйте шаг $\alpha = \frac{1}{L}$ и найдите различные значения импульса β от -1 до 1 . Выберите свой собственный критерий сходимости и постройте сходимость для нескольких значений импульса на одном графике. Сходится ли она всегда монотонно?

6. Для лучшего значения импульса β , постройте зависимость точности модели на тестовой выборке от времени работы метода. Добавьте на тот же график сходимость градиентного спуска с шагом $\frac{1}{L}$. Сделайте вывод. Убедитесь, что вы используете одно и то же значение λ для обоих методов.
7. Решите задачу логистической регрессии с использованием метода Нэстера.

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

Зафиксируйте шаг $\frac{1}{L}$ и найдите различные значения импульса β от -1 до 1 . Проверьте также значения импульса равные $\frac{k}{k+3}, \frac{k}{k+2}, \frac{k}{k+1}$ (k - число итераций), и если вы решаете сильно выпуклую задачу, также $\frac{\sqrt{L}-\sqrt{\mu}}{\sqrt{L}+\sqrt{\mu}}$. Постройте сходимость метода в зависимости от числа итераций (выберите свой собственный критерий сходимости) для различных значений импульса. Сходится ли она всегда монотонно?

8. Для лучшего значения импульса β , постройте зависимость точности модели на тестовой выборке от времени работы метода. Добавьте этот график к графикам для тяжелого шарика и градиентного спуска из предыдущих шагов. Сделайте вывод.
9. Теперь мы отбросим оценку значения L и будем пытаться сделать его адаптивным. Давайте сделаем выбор константы L адаптивным.

$$f(y) \leq f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), y - x^k \rangle + \frac{L}{2} \|x^k - y\|_2^2$$

В частности, процедура может работать так:

```
def backtracking_L(f, grad, x, h, L0, rho, maxiter=100):
    L = L0
    fx = f(x)
    gradx = grad(x)
    iter = 0
    while iter < maxiter :
```

```
y = x - 1 / L * h
if f(y) <= fx - 1 / L gradx.dot(h) + 1 / (2 * L) h.dot(h):
    break
else:
    L = L * rho

iter += 1
return L
```

Что должно быть взято как h ? Должно ли ρ быть больше или меньше 1? Должно ли L_0 быть больше или меньше? Постройте график, аналогичный тому, что был в предыдущем шаге для L , вычисленного адаптивно (6 строк - GD, HB, NAG, GD adaptive L, HB adaptive L, NAG adaptive L)