

Градиентный спуск. Теоремы сходимости в  
гладком случае (выпуклые, сильно  
выпуклые, PL). Верхние и нижние оценки  
сходимости.

Даня Меркулов, Петр Остроухов

Оптимизация для всех! ЦУ

## Повторение

# Виды выпуклости

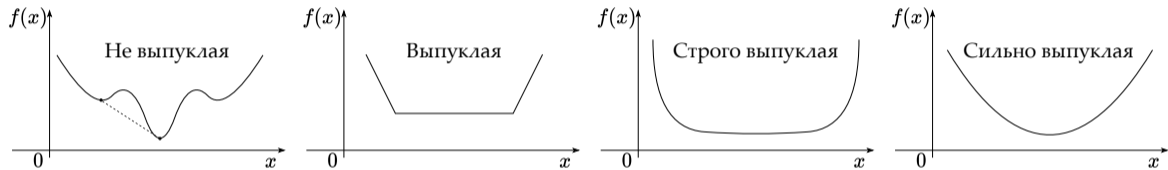


Рис. 1: Примеры выпуклых функций

## Гладкость

**Определение:** Будем говорить, что функция  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  является  $L$ -гладкой, если  $\forall x, y \in \mathbb{R}^n$  выполнено:

$$\|\nabla f(y) - \nabla f(x)\| \leq L\|y - x\|$$

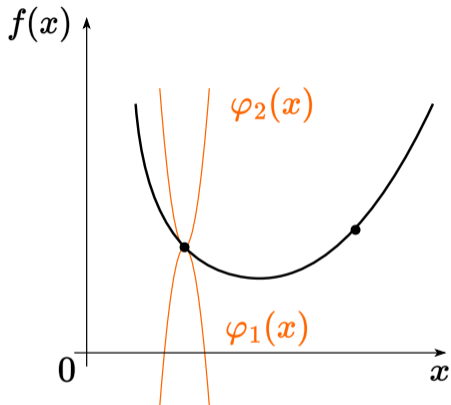
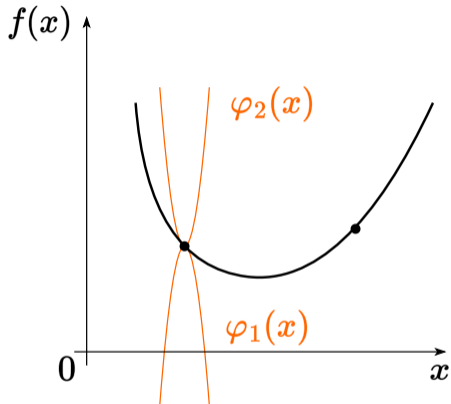


Рис. 2: Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

## Гладкость



**Определение:** Будем говорить, что функция  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  является  $L$ -гладкой, если  $\forall x, y \in \mathbb{R}^n$  выполнено:

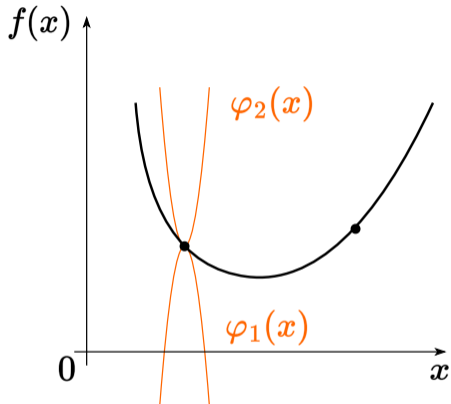
$$\|\nabla f(y) - \nabla f(x)\| \leq L\|y - x\|$$

Обратим внимание, что значение константы гладкости (Липшицевости градиента) зависит от выбора нормы. Если  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  - непрерывно дифференцируема и градиент Липшицев с константой  $L$ , то  $\forall x, y \in \mathbb{R}^n$ :

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

Рис. 2: Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

# Гладкость



**Определение:** Будем говорить, что функция  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  является  $L$ -гладкой, если  $\forall x, y \in \mathbb{R}^n$  выполнено:

$$\|\nabla f(y) - \nabla f(x)\| \leq L\|y - x\|$$

Обратим внимание, что значение константы гладкости (Липшицевости градиента) зависит от выбора нормы. Если  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  - непрерывно дифференцируема и градиент Липшицев с константой  $L$ , то  $\forall x, y \in \mathbb{R}^n$ :

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

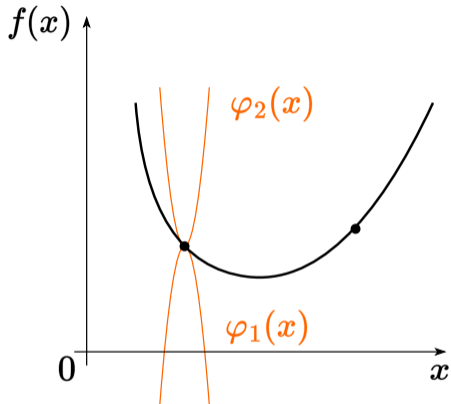
Если зафиксируем  $x_0 \in \mathbb{R}^n$ , то:

$$\varphi_1(x) = f(x_0) + \langle \nabla f(x_0), x - x_0 \rangle - \frac{L}{2} \|x - x_0\|^2$$

$$\varphi_2(x) = f(x_0) + \langle \nabla f(x_0), x - x_0 \rangle + \frac{L}{2} \|x - x_0\|^2$$

Рис. 2: Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

# Гладкость



**Определение:** Будем говорить, что функция  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  является  $L$ -гладкой, если  $\forall x, y \in \mathbb{R}^n$  выполнено:

$$\|\nabla f(y) - \nabla f(x)\| \leq L\|y - x\|$$

Обратим внимание, что значение константы гладкости (Липшицевости градиента) зависит от выбора нормы. Если  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  - непрерывно дифференцируема и градиент Липшицев с константой  $L$ , то  $\forall x, y \in \mathbb{R}^n$ :

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

Если зафиксируем  $x_0 \in \mathbb{R}^n$ , то:

$$\varphi_1(x) = f(x_0) + \langle \nabla f(x_0), x - x_0 \rangle - \frac{L}{2} \|x - x_0\|^2$$

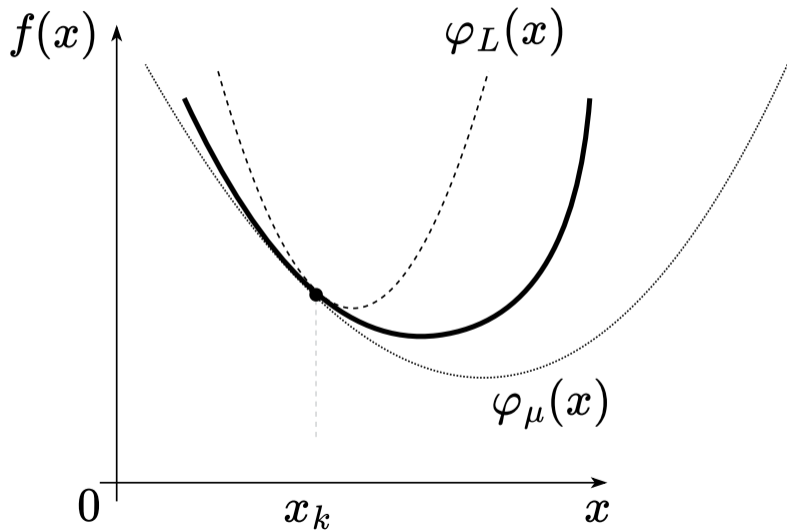
$$\varphi_2(x) = f(x_0) + \langle \nabla f(x_0), x - x_0 \rangle + \frac{L}{2} \|x - x_0\|^2$$

Рис. 2: Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

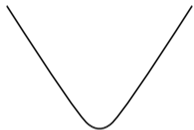
Это две параболы, и для них верно, что

$$\varphi_1(x) \leq f(x) \leq \varphi_2(x) \quad \forall x$$

## Гладкость и сильная выпуклость



# Гладкость и сильная выпуклость



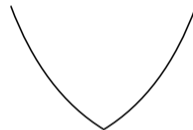
Гладкая  
Выпуклая



Гладкая  
 $\mu$  - сильно выпуклая



Негладкая  
Выпуклая



Негладкая  
 $\mu$  - сильно выпуклая

## Градиентный спуск

# Направление локального наискорейшего спуска

Рассмотрим линейное приближение дифференцируемой функции  $f$  вдоль направления  $h$ , где  $\|h\|_2 = 1$ :

# Направление локального наискорейшего спуска

Рассмотрим линейное приближение дифференцируемой функции  $f$  вдоль направления  $h$ , где  $\|h\|_2 = 1$ :

$$f(x + \alpha h) = f(x) + \alpha \langle \nabla f(x), h \rangle + o(\alpha)$$

## Направление локального наискорейшего спуска

Рассмотрим линейное приближение дифференцируемой функции  $f$  вдоль направления  $h$ , где  $\|h\|_2 = 1$ :

$$f(x + \alpha h) = f(x) + \alpha \langle \nabla f(x), h \rangle + o(\alpha)$$

Хотим, чтобы  $h$  было направлением убывания:

$$f(x + \alpha h) - f(x) < 0$$

$$\alpha \langle \nabla f(x), h \rangle + o(\alpha) < 0$$

## Направление локального наискорейшего спуска

Рассмотрим линейное приближение дифференцируемой функции  $f$  вдоль направления  $h$ , где  $\|h\|_2 = 1$ :

$$f(x + \alpha h) = f(x) + \alpha \langle \nabla f(x), h \rangle + o(\alpha)$$

Хотим, чтобы  $h$  было направлением убывания:

$$f(x + \alpha h) - f(x) < 0$$

$$\alpha \langle \nabla f(x), h \rangle + o(\alpha) < 0$$

Переходя к пределу при  $\alpha \rightarrow 0$ :

$$\langle \nabla f(x), h \rangle < 0$$

## Направление локального наискорейшего спуска

Рассмотрим линейное приближение дифференцируемой функции  $f$  вдоль направления  $h$ , где  $\|h\|_2 = 1$ :

$$f(x + \alpha h) = f(x) + \alpha \langle \nabla f(x), h \rangle + o(\alpha)$$

Хотим, чтобы  $h$  было направлением убывания:

$$f(x + \alpha h) - f(x) < 0$$

$$\alpha \langle \nabla f(x), h \rangle + o(\alpha) < 0$$

Переходя к пределу при  $\alpha \rightarrow 0$ :

$$\langle \nabla f(x), h \rangle < 0$$

Более того, мы хотим, чтобы разность  $f(x) - f(x + \alpha h)$  была максимальна:

$$h = \arg \max_h (-\langle \nabla f(x), h \rangle) = \arg \min_h \langle \nabla f(x), h \rangle.$$

Также из неравенства Коши–Буняковского получаем:

$$|\langle \nabla f(x), h \rangle| \leq \|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2$$

$$\langle \nabla f(x), h \rangle \geq -\|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2 = -\|\nabla f(x)\|_2$$

## Направление локального наискорейшего спуска

Рассмотрим линейное приближение дифференцируемой функции  $f$  вдоль направления  $h$ , где  $\|h\|_2 = 1$ :

$$f(x + \alpha h) = f(x) + \alpha \langle \nabla f(x), h \rangle + o(\alpha)$$

Хотим, чтобы  $h$  было направлением убывания:

$$f(x + \alpha h) - f(x) < 0$$

$$\alpha \langle \nabla f(x), h \rangle + o(\alpha) < 0$$

Переходя к пределу при  $\alpha \rightarrow 0$ :

$$\langle \nabla f(x), h \rangle < 0$$

Более того, мы хотим, чтобы разница  $f(x) - f(x + \alpha h)$  была максимальна:

$$h = \arg \max_h (-\langle \nabla f(x), h \rangle) = \arg \min_h \langle \nabla f(x), h \rangle.$$

Также из неравенства Коши–Буняковского получаем:

$$|\langle \nabla f(x), h \rangle| \leq \|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2$$

$$\langle \nabla f(x), h \rangle \geq -\|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2 = -\|\nabla f(x)\|_2$$

Таким образом, направление антиградиента

$$h = \arg \min_h \langle \nabla f(x), h \rangle = -\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|_2}$$

представляет собой направление **наискорейшего локального убывания** функции  $f$ .

## Направление локального наискорейшего спуска

Рассмотрим линейное приближение дифференцируемой функции  $f$  вдоль направления  $h$ , где  $\|h\|_2 = 1$ :

$$f(x + \alpha h) = f(x) + \alpha \langle \nabla f(x), h \rangle + o(\alpha)$$

Хотим, чтобы  $h$  было направлением убывания:

$$f(x + \alpha h) - f(x) < 0$$

$$\alpha \langle \nabla f(x), h \rangle + o(\alpha) < 0$$

Переходя к пределу при  $\alpha \rightarrow 0$ :

$$\langle \nabla f(x), h \rangle < 0$$

Более того, мы хотим, чтобы разность  $f(x) - f(x + \alpha h)$  была максимальна:

$$h = \arg \max_h (-\langle \nabla f(x), h \rangle) = \arg \min_h \langle \nabla f(x), h \rangle.$$

Также из неравенства Коши–Буняковского получаем:

$$|\langle \nabla f(x), h \rangle| \leq \|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2$$

$$\langle \nabla f(x), h \rangle \geq -\|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2 = -\|\nabla f(x)\|_2$$

Таким образом, направление антиградиента

$$h = \arg \min_h \langle \nabla f(x), h \rangle = -\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|_2}$$

представляет собой направление **наискорейшего локального убывания** функции  $f$ .

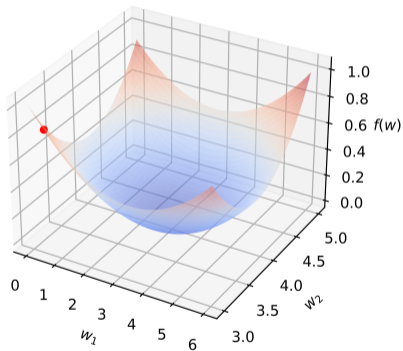
Итерация метода имеет вид:

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

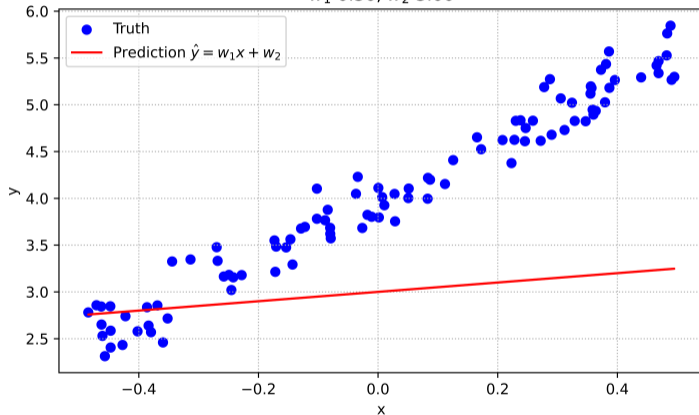
# Сходимость алгоритма градиентного спуска

Код для построения анимации ниже. Сходимость существенно зависит от выбора шага  $\alpha$ :

Loss value 0.87



$w_1$  0.50,  $w_2$  3.00



## Точный линейный поиск (метод наискорейшего спуска)

$$\alpha_k = \arg \min_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f(x^k - \alpha \nabla f(x^k))$$

Подход скорее теоретический, чем практический: он удобен для анализа сходимости, но точный линейный поиск часто затруднён, если вычисление функции занимает слишком много времени или стоит слишком дорого.

Интересное теоретическое свойство этого метода заключается в том, что градиенты на соседних итерациях ортогональны. Условие оптимальности по  $\alpha_k$  даёт

$$\left. \frac{d}{d\alpha} f(x^k - \alpha \nabla f(x^k)) \right|_{\alpha=\alpha_k} = 0.$$

## Точный линейный поиск (метод наискорейшего спуска)

$$\alpha_k = \arg \min_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f(x^k - \alpha \nabla f(x^k))$$

Подход скорее теоретический, чем практический: он удобен для анализа сходимости, но точный линейный поиск часто затруднён, если вычисление функции занимает слишком много времени или стоит слишком дорого.

Интересное теоретическое свойство этого метода заключается в том, что градиенты на соседних итерациях ортогональны. Условие оптимальности по  $\alpha_k$  даёт

$$\left. \frac{d}{d\alpha} f(x^k - \alpha \nabla f(x^k)) \right|_{\alpha=\alpha_k} = 0.$$

Условия оптимальности:

# Точный линейный поиск (метод наискорейшего спуска)

$$\alpha_k = \arg \min_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f(x^k - \alpha \nabla f(x^k))$$

Подход скорее теоретический, чем практический: он удобен для анализа сходимости, но точный линейный поиск часто затруднён, если вычисление функции занимает слишком много времени или стоит слишком дорого.

Интересное теоретическое свойство этого метода заключается в том, что градиенты на соседних итерациях ортогональны. Условие оптимальности по  $\alpha_k$  даёт

$$\left. \frac{d}{d\alpha} f(x^k - \alpha \nabla f(x^k)) \right|_{\alpha=\alpha_k} = 0.$$

Условия оптимальности:

$$\nabla f(x^{k+1})^\top \nabla f(x^k) = 0$$

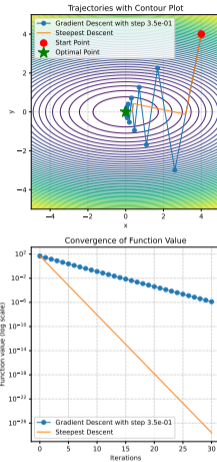



Рис. 3: Наискорейший спуск

Открыть в Colab 

## Экстра: Дифференциальное уравнение градиентного потока

Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

$$\frac{dx}{dt} = -\nabla f(x(t)). \quad (\text{GF})$$

## Экстра: Дифференциальное уравнение градиентного потока

Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

$$\frac{dx}{dt} = -\nabla f(x(t)). \quad (\text{GF})$$

Дискретизируем его на равномерной сетке с шагом  $\alpha$ :

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

## Экстра: Дифференциальное уравнение градиентного потока

Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

$$\frac{dx}{dt} = -\nabla f(x(t)). \quad (\text{GF})$$

Дискретизируем его на равномерной сетке с шагом  $\alpha$ :


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

где  $x^k \equiv x(t_k)$  и  $\alpha = t_{k+1} - t_k$  — шаг сетки.

Отсюда получаем выражение для  $x^{k+1}$ :

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

являющееся точной формулой обновления градиентного спуска.

Открыть в Colab 

## Экстра: Дифференциальное уравнение градиентного потока

Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

$$\frac{dx}{dt} = -\nabla f(x(t)). \quad (\text{GF})$$

Дискретизируем его на равномерной сетке с шагом  $\alpha$ :

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

где  $x^k \equiv x(t_k)$  и  $\alpha = t_{k+1} - t_k$  — шаг сетки.

Отсюда получаем выражение для  $x^{k+1}$ :

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

являющееся точной формулой обновления градиентного спуска.

Открыть в Colab ♣

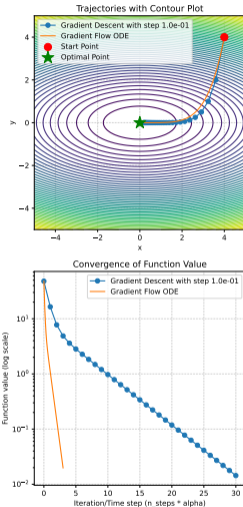


Рис. 4: Траектория градиентного потока