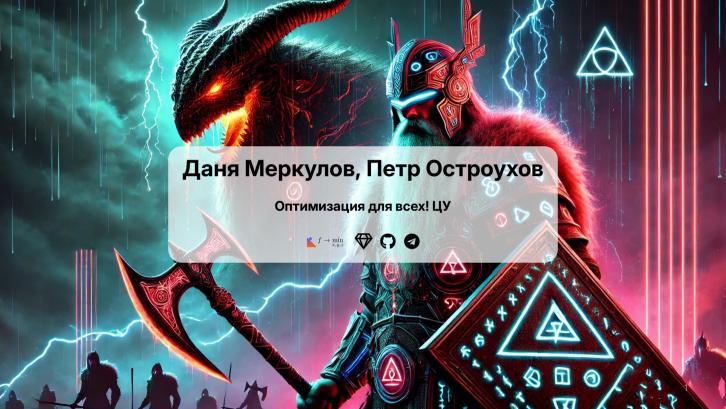


Градиентный спуск

МЕТОДЫ ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

НЕДЕЛЯ 7





Повторение

Виды выпуклости



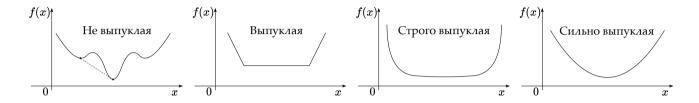


Рисунок 1. Примеры выпуклых функций



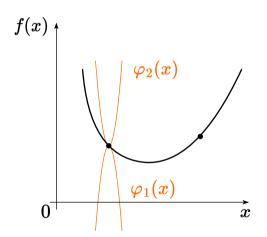


Рисунок 2. Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

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

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



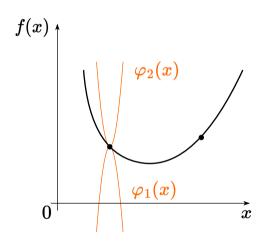


Рисунок 2. Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

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

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

Обратим внимание, что значение константы гладкости (Липшицевости градиента) зависит от выбора нормы.

Если $f:\mathbb{R}^n o \mathbb{R}$ - непрерывно дифференцируема и градиент Липшицев с константой L , то $\forall x,y \in \mathbb{R}^n$:

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



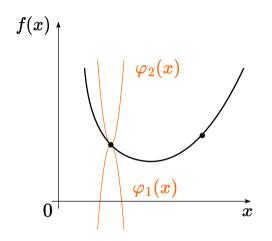


Рисунок 2. Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

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

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

Обратим внимание, что значение константы гладкости (Липшицевости градиента) зависит от выбора нормы.

Если $f:\mathbb{R}^n o \mathbb{R}$ - непрерывно дифференцируема и градиент Липшицев с константой L , то $\forall x,y \in \mathbb{R}^n$:

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

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

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

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



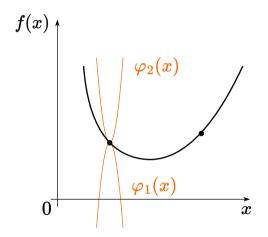


Рисунок 2. Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

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

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

Обратим внимание, что значение константы гладкости (Липшицевости градиента) зависит от выбора нормы.

Если $f:\mathbb{R}^n o \mathbb{R}$ - непрерывно дифференцируема и градиент Липшицев с константой L, то $\forall x,y \in \mathbb{R}^n$:

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

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

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

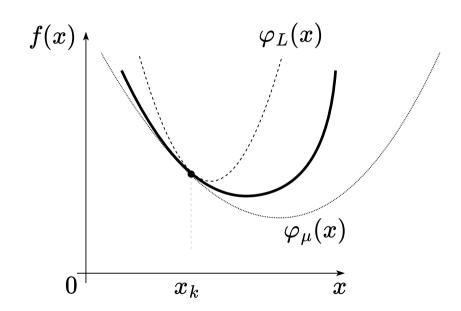
$$\varphi_2(x) = f(x_0) + \langle f(x_0), x - x_0 \rangle + \frac{L}{2} \|x - x_0\|^2$$

Это две параболы, и для них верно, что

$$\varphi_1(x) \leqslant f(x) \leqslant \varphi_2(x) \; \forall x$$

Гладкость и сильная выпуклость





Гладкость и сильная выпуклость

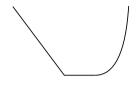




Гладкая Выпуклая



Гладкая μ - сильно выпуклая



Негладкая Выпуклая



Негладкая μ - сильно выпуклая



Градиентный спуск



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



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

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



Рассмотрим линейное приближение дифференцируемой функции f вдоль направления h_i 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:

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

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



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 lpha o 0:

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



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 lpha o 0:

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

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

$$h = \arg\max_{h} \left(- \langle \nabla f(x), h \rangle \right) = \arg\min_{h} \langle \nabla f(x), h \rangle.$$

Также из неравенства Коши-Буняковского получаем:

$$\begin{split} |\langle \nabla f(x), h \rangle| &\leq \|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2 \\ \langle \nabla f(x), h \rangle &\geq -\|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2 = -\|\nabla f(x)\|_2 \end{split}$$



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 lpha o 0:

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

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

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

Также из неравенства Коши-Буняковского получаем:

$$\begin{split} |\langle \nabla f(x), h \rangle| &\leq \|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2 \\ \langle \nabla f(x), h \rangle &\geq -\|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2 = -\|\nabla f(x)\|_2 \end{split}$$

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.



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 lpha o 0:

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

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

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

Также из неравенства Коши-Буняковского получаем:

$$\begin{split} |\langle \nabla f(x), h \rangle| &\leq \|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2 \\ \langle \nabla f(x), h \rangle &\geq -\|\nabla f(x)\|_2 \|h\|_2 = -\|\nabla f(x)\|_2 \end{split}$$

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.

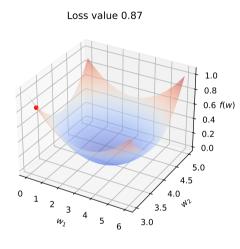
Итерация метода имеет вид:

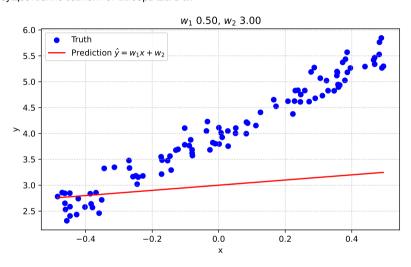
$$x^{k+1} = x^k - \alpha \, \nabla f(x^k)$$

Сходимость алгоритма градиентного спуска



 \clubsuit Код для построения анимации ниже. Сходимость существенно зависит от выбора шага lpha:





Точный линейный поиск (метод наискорейшего спуска)



$$\alpha_k = \operatorname*{arg\,min}_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f\big(x^k - \alpha \, \nabla f(x^k)\big)$$

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 α_k даёт

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

Точный линейный поиск (метод наискорейшего спуска)

$$\alpha_k = \operatorname*{arg\,min}_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f\big(x^k - \alpha \, \nabla f(x^k)\big)$$

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 α_k даёт

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

Условия оптимальности:

Точный линейный поиск (метод наискорейшего спуска)



$$\alpha_k = \operatorname*{arg\,min}_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f\big(x^k - \alpha \, \nabla f(x^k)\big)$$

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 α_k даёт

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

Условия оптимальности:

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

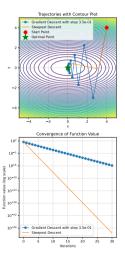


Рисунок 3. Наискорейший спуск

Открыть в Colab 🜲



Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

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



Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

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

Дискретизируем его на равномерной сетке с шагом α :

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



Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

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

Дискретизируем его на равномерной сетке с шагом α :

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

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 🐥



Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

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

Дискретизируем его на равномерной сетке с шагом α :

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

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 \clubsuit

