

# Градиентные методы для условных задач

МЕТОДЫ ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

НЕДЕЛЯ 11

Даня Меркулов

# **Условные градиентные методы. Метод проекции градиента. Метод Франк–Вульфа.**

## **Семинар**

**Оптимизация для всех! ЦУ**



# Повтор лекции. Проекция

# Проекция

Расстояние  $d$  от точки  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  до замкнутого множества  $S \subset \mathbb{R}^n$ :

$$d(\mathbf{y}, S, \|\cdot\|) = \inf\{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \mid \mathbf{x} \in S\}.$$

Мы будем фокусироваться на **евклидовой проекции** (возможны и другие варианты) точки  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  на множество  $S \subseteq \mathbb{R}^n$ . Это точка  $\text{proj}_S(\mathbf{y}) \in S$  такая, что

$$\text{proj}_S(\mathbf{y}) = \underset{\mathbf{x} \in S}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2.$$

- **Достаточное условие существования проекции.** Если  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  — замкнутое множество, то проекция на множество  $S$  существует для любой точки.

# Проекция

Расстояние  $d$  от точки  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  до замкнутого множества  $S \subset \mathbb{R}^n$ :

$$d(\mathbf{y}, S, \|\cdot\|) = \inf\{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \mid \mathbf{x} \in S\}.$$

Мы будем фокусироваться на **евклидовой проекции** (возможны и другие варианты) точки  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  на множество  $S \subseteq \mathbb{R}^n$ . Это точка  $\text{proj}_S(\mathbf{y}) \in S$  такая, что

$$\text{proj}_S(\mathbf{y}) = \underset{\mathbf{x} \in S}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2.$$

- **Достаточное условие существования проекции.** Если  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  — замкнутое множество, то проекция на множество  $S$  существует для любой точки.
- **Достаточное условие единственности проекции.** Если  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  — замкнутое выпуклое множество, то проекция на множество  $S$  единственна для любой точки.

# Проекция

Расстояние  $d$  от точки  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  до замкнутого множества  $S \subset \mathbb{R}^n$ :

$$d(\mathbf{y}, S, \|\cdot\|) = \inf\{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \mid \mathbf{x} \in S\}.$$

Мы будем фокусироваться на **евклидовой проекции** (возможны и другие варианты) точки  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  на множество  $S \subseteq \mathbb{R}^n$ . Это точка  $\text{proj}_S(\mathbf{y}) \in S$  такая, что

$$\text{proj}_S(\mathbf{y}) = \underset{\mathbf{x} \in S}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2.$$

- **Достаточное условие существования проекции.** Если  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  — замкнутое множество, то проекция на множество  $S$  существует для любой точки.
- **Достаточное условие единственности проекции.** Если  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  — замкнутое выпуклое множество, то проекция на множество  $S$  единственна для любой точки.
- Если множество открыто, и точка лежит вне этого множества, то её проекция на это множество может не существовать.

# Проекция

Расстояние  $d$  от точки  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  до замкнутого множества  $S \subset \mathbb{R}^n$ :

$$d(\mathbf{y}, S, \|\cdot\|) = \inf\{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \mid \mathbf{x} \in S\}.$$

Мы будем фокусироваться на **евклидовой проекции** (возможны и другие варианты) точки  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  на множество  $S \subseteq \mathbb{R}^n$ . Это точка  $\text{proj}_S(\mathbf{y}) \in S$  такая, что

$$\text{proj}_S(\mathbf{y}) = \underset{\mathbf{x} \in S}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2.$$

- **Достаточное условие существования проекции.** Если  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  — замкнутое множество, то проекция на множество  $S$  существует для любой точки.
- **Достаточное условие единственности проекции.** Если  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  — замкнутое выпуклое множество, то проекция на множество  $S$  единственна для любой точки.
- Если множество открыто, и точка лежит вне этого множества, то её проекция на это множество может не существовать.
- Если точка лежит внутри множества, то её проекция — это сама точка.

# Проекция

## Нерастворимое отображение

Отображение (функция)  $f$  называется **нерастворимым**, если оно является  $L$ -Липшицевым с константой  $L \leq 1$ <sup>1</sup>. То есть для любых двух точек  $x, y \in \text{dom } f$  выполнено

$$\|f(x) - f(y)\| \leq L\|x - y\|, \quad \text{где } L \leq 1.$$

Это означает, что расстояние между образами точек не больше (и может быть меньше), чем расстояние между исходными точками.

---

Нерастворимое становится сжимающим, если  $L < 1$ .



Рисунок 1. Тупой или прямой угол должен получаться для любой точки  $x \in S$

# Задачи

# Задача. Проекция на неотрицательный ортант

Пусть  $\mathcal{S}$  — неотрицательный ортант. Найдите проекцию

$$\text{proj}_{\mathcal{S}}(\mathbf{y}) = \arg \min_{\mathbf{x} \geq 0} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2,$$

где  $\mathbf{x} \geq 0$  означает, что  $\mathbf{x}$  лежит в неотрицательном ортанге

$$\mathcal{S} = \{\mathbf{x} \mid x_i \geq 0 \ \forall i\}.$$

Что если  $\mathcal{S} = \{x \mid l \leq x \leq u\}$  (покоординатные нижние и верхние границы)?

# Задача. Проекция на множество 1-Липшицевых матриц

Скажем, что матрица  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  является  **$L$ -Липшицевой** (относительно евклидовой нормы), если для любых двух векторов  $x, y \in \mathbb{R}^n$  выполнено

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2.$$

Множество всех таких матриц обозначим

$$\mathcal{L}_L = \{A \in \mathbb{R}^{m \times n} \mid A \text{--- } L\text{-Липшицева}\}.$$

Теперь зафиксируем самый простой случай:  $L = 1$  и будем мерить расстояние между матрицами в **норме Фробениуса**:

$$\|X - M\|_F^2 = \sum_{i,j} (X_{ij} - M_{ij})^2.$$

**Задача.** По данной матрице  $M \in \mathbb{R}^{m \times n}$  найти матрицу  $X \in \mathcal{L}_1$ , которая ближе всего к  $M$  в норме Фробениуса для случая  $L = 1$ :

$$\min_{X \in \mathcal{L}_1} \frac{1}{2} \|X - M\|_F^2.$$

# Решение

- Для линейного отображения  $A$  константа Липшица по евклидовой норме равна **операторной норме**:

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2 \quad \forall x, y \iff \|A\|_2 \leq L,$$

где  $\|A\|_2$  — спектральная норма (наибольшее сингулярное значение).

В нашем случае  $L = 1$ , значит

$$\mathcal{L}_1 = \{A \mid \|A\|_2 \leq 1\}.$$

# Решение

- Для линейного отображения  $A$  константа Липшица по евклидовой норме равна **операторной норме**:

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2 \quad \forall x, y \iff \|A\|_2 \leq L,$$

где  $\|A\|_2$  — спектральная норма (наибольшее сингулярное значение).

В нашем случае  $L = 1$ , значит

$$\mathcal{L}_1 = \{A \mid \|A\|_2 \leq 1\}.$$

- Запишем сингулярное разложение матрицы  $M$ :  $M = U\Sigma V^\top$ , где  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$ ,  $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0$ .

# Решение

- Для линейного отображения  $A$  константа Липшица по евклидовой норме равна **операторной норме**:

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2 \quad \forall x, y \iff \|A\|_2 \leq L,$$

где  $\|A\|_2$  — спектральная норма (наибольшее сингулярное значение).

В нашем случае  $L = 1$ , значит

$$\mathcal{L}_1 = \{A \mid \|A\|_2 \leq 1\}.$$

- Запишем сингулярное разложение матрицы  $M$ :  $M = U\Sigma V^\top$ , где  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$ ,  $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0$ .
- Так как норма в минимизируемой функции является инвариантной к умножению на ортогональную матрицу, то можем искать  $X$  в виде  $X = U\Sigma'V^\top$  и подбираем новые сингулярные числа  $\sigma'_i$  так, чтобы

$$\|X\|_2 = \max_i \sigma'_i \leq 1$$

# Решение

1. Для линейного отображения  $A$  константа Липшица по евклидовой норме равна **операторной норме**:

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2 \quad \forall x, y \iff \|A\|_2 \leq L,$$

где  $\|A\|_2$  — спектральная норма (наибольшее сингулярное значение).

В нашем случае  $L = 1$ , значит

$$\mathcal{L}_1 = \{A \mid \|A\|_2 \leq 1\}.$$

2. Запишем сингулярное разложение матрицы  $M$ :  $M = U\Sigma V^\top$ , где  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$ ,  $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0$ .

3. Так как норма в минимизируемой функции является инвариантной к умножению на ортогональную матрицу, то можем искать  $X$  в виде  $X = U\Sigma'V^\top$  и подбираем новые сингулярные числа  $\sigma'_i$  так, чтобы

$$\|X\|_2 = \max_i \sigma'_i \leq 1$$

4. Тогда минимизируемая функция:

$$\begin{aligned} \|X - M\|_F^2 &= \langle X - M, X - M \rangle \\ &= \langle U\Sigma'V^\top - U\Sigma V^\top, U\Sigma'V^\top - U\Sigma V^\top \rangle = \\ &= \langle U(\Sigma' - \Sigma)V^\top, U(\Sigma' - \Sigma)V^\top \rangle = \\ &= V(\Sigma' - \Sigma)^T U^T U(\Sigma' - \Sigma)V^\top = \\ &= V(\Sigma' - \Sigma)^2 V^\top = \\ &= \|(\Sigma' - \Sigma)V^\top\|_F^2 = \\ &= \|(\Sigma' - \Sigma)\|_F^2 = \\ &= \sum_i (\sigma'_i - \sigma_i)^2 \rightarrow \min. \end{aligned}$$

# Решение

1. Для линейного отображения  $A$  константа Липшица по евклидовой норме равна **операторной норме**:

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2 \quad \forall x, y \iff \|A\|_2 \leq L,$$

где  $\|A\|_2$  — спектральная норма (наибольшее сингулярное значение).

В нашем случае  $L = 1$ , значит

$$\mathcal{L}_1 = \{A \mid \|A\|_2 \leq 1\}.$$

2. Запишем сингулярное разложение матрицы  $M$ :  $M = U\Sigma V^\top$ , где  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$ ,  $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0$ .

3. Так как норма в минимизируемой функции является инвариантной к умножению на ортогональную матрицу, то можем искать  $X$  в виде  $X = U\Sigma'V^\top$  и подбираем новые сингулярные числа  $\sigma'_i$  так, чтобы

$$\|X\|_2 = \max_i \sigma'_i \leq 1$$

4. Тогда минимизируемая функция:

$$\begin{aligned} \|X - M\|_F^2 &= \langle X - M, X - M \rangle \\ &= \langle U\Sigma'V^\top - U\Sigma V^\top, U\Sigma'V^\top - U\Sigma V^\top \rangle = \\ &= \langle U(\Sigma' - \Sigma)V^\top, U(\Sigma' - \Sigma)V^\top \rangle = \\ &= V(\Sigma' - \Sigma)^T U^T U(\Sigma' - \Sigma)V^\top = \\ &= V(\Sigma' - \Sigma)^2 V^\top = \\ &= \|(\Sigma' - \Sigma)V^\top\|_F^2 = \\ &= \|(\Sigma' - \Sigma)\|_F^2 = \\ &= \sum_i (\sigma'_i - \sigma_i)^2 \rightarrow \min. \end{aligned}$$

5. Задача распадается **покоординатно**:

$$\min_{\sigma'_i \leq 1} (\sigma'_i - \sigma_i)^2 \implies \sigma'_i = \min(\sigma_i, 1).$$

# Задача. Проекция на спектраплекс

**Спектраплекс** — это спектраэдр, определённый как множество

$$\mathcal{S} := \{X \in \mathbb{S}_+^n : \text{Tr } X = 1\},$$

где  $\mathbb{S}_+^n$  — множество симметричных положительно полуопределённых матриц размера  $n \times n$ .

Spectraplex = «spectra» + «simplex», в смысле «собственные значения лежат в симплексе».

Спектраплекс — это «полуопределённый» аналог симплекса.

**Вопрос.** По данной матрице  $Z \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , как найти проекцию  $Z$  на множество  $\mathcal{S}$ ?

Иными словами, нужно решить задачу

$$\arg \min_{X \succeq 0, \text{Tr } X=1} \frac{1}{2} \|X - Z\|_F^2.$$

# **Повтор лекции. Метод проекции градиента (PGD)**

# Идея метода проекции градиента

$$x_{k+1} = \text{proj}_S(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)) \Leftrightarrow y_k = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k), \\ x_{k+1} = \text{proj}_S(y_k).$$

Ниже можно найти пример использования этого метода для атаки нейросети (adversarial attack):

Adversarial Attacks.

$$y_k = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$



Рисунок 2. Иллюстрация алгоритма метода проекции градиента

# Повтор лекции. Метод Франк–Вульфа

# Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея



Рисунок 3. Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

# Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея



Рисунок 4. Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

# Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея



Рисунок 5. Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

# Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея



Рисунок 6. Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

# Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея



Рисунок 7. Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

# Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея



Рисунок 8. Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

# Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея



Рисунок 9. Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

# Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

$$y_k = \arg \min_{x \in S} f_{x_k}^I(x) = \arg \min_{x \in S} \langle \nabla f(x_k), x \rangle,$$

$$x_{k+1} = \gamma_k x_k + (1 - \gamma_k) y_k.$$



Рисунок 10. Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

# Скорости сходимости

# Скорость сходимости в гладком выпуклом случае

## Theorem

Пусть  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  — выпуклая  $L$ -гладкая функция. Пусть  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  — замкнутое выпуклое множество, и пусть существует минимизатор  $x^*$  функции  $f$  на  $S$ .

- **Метод проекции градиента** с шагом  $\frac{1}{L}$  достигает следующей оценки после итерации  $k > 0$ :

$$f(x_k) - f^* \leq \frac{L\|x_0 - x^*\|_2^2}{2k}.$$

# Скорость сходимости в гладком выпуклом случае

## Theorem

Пусть  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  — выпуклая  $L$ -гладкая функция. Пусть  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  — замкнутое выпуклое множество, и пусть существует минимизатор  $x^*$  функции  $f$  на  $S$ .

- **Метод проекции градиента** с шагом  $\frac{1}{L}$  достигает следующей оценки после итерации  $k > 0$ :

$$f(x_k) - f^* \leq \frac{L\|x_0 - x^*\|_2^2}{2k}.$$

- **Метод Франк–Вульфа** достигает следующей оценки после итерации  $k > 0$ :

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

# Особенности метода Франк–Вульфа

- Скорость сходимости метода Франк–Вульфа для  $\mu$ -сильно выпуклых функций —  $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ .

# Особенности метода Франк–Вульфа

- Скорость сходимости метода Франк–Вульфа для  $\mu$ -сильно выпуклых функций —  $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ .
- В базовой форме метод не работает для негладких функций. Но существуют модификации, которые с этим справляются.

# Особенности метода Франк–Вульфа

- Скорость сходимости метода Франк–Вульфа для  $\mu$ -сильно выпуклых функций —  $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ .
- В базовой форме метод не работает для негладких функций. Но существуют модификации, которые с этим справляются.
- Метод Франк–Вульфа корректно работает для любой нормы.



# Бонус: Зеркальный спуск

# Метод субградиентного спуска: линейная аппроксимация + проксимальность

Вспомним шаг SubGD с субградиентом  $g_k$ :

$$x_{k+1} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \underbrace{f(x_k) + g_k^\top (x - x_k)}_{\text{линейная аппроксимация } f} + \underbrace{\frac{1}{2\alpha} \|x - x_k\|_2^2}_{\text{проксимальный член}}$$

$$\Leftrightarrow x_{k+1} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \alpha g_k^\top x + \frac{1}{2} \|x - x_k\|_2^2.$$

Идея зеркального спуска: заменить евклидову проксимальность  $\|x - x_k\|_2^2$  на другую, более подходящую для задачи меру близости.



Рисунок 11.  $\|\cdot\|_1$  не сферически симметрична

# Пример. Плохая обусловленность

Рассмотрим функцию

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 \cdot \frac{1}{100} + x_2^2 \cdot 100.$$



Рисунок 12. Плохо обусловленная задача в норме  $\|\cdot\|_2$

# Пример. Плохая обусловленность

Пусть мы находимся в точке  $x_k = (-10 \quad -0.1)^\top$ . Метод градиентного спуска:  $x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k)$ , где

$$\nabla f(x_k) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 100 \end{pmatrix} \Bigg|_{(-10 \quad -0.1)^\top} = \begin{pmatrix} \frac{1}{5} \\ -20 \end{pmatrix}^\top.$$

**Проблема:** из-за сильной вытянутости линий уровня направление движения  $(x_{k+1} - x_k)$  оказывается почти перпендикулярно вектору  $(x^* - x_k)$ . **Решение:** поменять проксимальный член:

$$x_{k+1} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \underbrace{f(x_k) + g_k^\top (x - x_k)}_{\text{линейная аппроксимация } f} + \underbrace{\frac{1}{2\alpha} (x - x_k)^\top \mathcal{I} (x - x_k)}_{\text{проксимальный член}}$$

на другой:

$$x_{k+1} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \underbrace{f(x_k) + g_k^\top (x - x_k)}_{\text{линейная аппроксимация } f} + \underbrace{\frac{1}{2\alpha} (x - x_k)^\top \mathcal{Q} (x - x_k)}_{\text{проксимальный член}},$$

где в этом примере

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{50} & 0 \\ 0 & 200 \end{pmatrix}.$$

Более общая идея — заменить квадратичную форму на произвольную функцию  $\mathcal{B}_\phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ , измеряющую «близость»  $x$  и  $y$ .

# Пример. Плохая обусловленность

Найдём  $x_{k+1}$  для **нового** алгоритма:

$$\alpha \nabla f(x_k) + \begin{pmatrix} \frac{1}{50} & 0 \\ 0 & \frac{1}{200} \end{pmatrix} (x - x_k) = 0.$$

Решая это уравнение относительно  $x$ , получаем

$$x_{k+1} = x_k - \alpha \begin{pmatrix} 50 & 0 \\ 0 & \frac{1}{200} \end{pmatrix} \nabla f(x_k) = (-10 \ -0.1)^\top - \alpha(-10 \ -0.1)^\top.$$

**Наблюдение.** Меняя проксимальный член, мы **меняем направление** приращения  $x_{k+1} - x_k$ .

Иначе говоря, если мы измеряем расстояние «по-новому», мы тем самым **меняем Липшицевость** функции (константу Липшица относительно новой нормы).

## Question

Чему равна константа Липшица функции  $f$  в точке  $(1 \ 1)^\top$  относительно нормы

$$\|z\|_A^2 = z^\top \begin{pmatrix} 50 & 0 \\ 0 & \frac{1}{200} \end{pmatrix} z?$$



# Пример. Robust Regression (устойчивая регрессия)

Квадратичная ошибка  $\|Ax - b\|_2^2$  очень чувствительна к выбросам.

**Вместо этого** можно рассматривать

$$\min_x \|Ax - b\|_1.$$

Эта задача тоже **выпуклая**.

Посчитаем константу Липшица  $L$  для  $f(x) = \|Ax - b\|_1$ :

$$|\|Ax - b\|_1 - \|Ay - b\|_1| \leq L\|x - y\|_2.$$

Для упрощения возьмём  $A = I$ ,  $b = 0$ , то есть  $f(x) = \|x\|_1$ .

Возьмём  $x = \mathbf{1}_d$ ,  $y = (1 + \varepsilon)\mathbf{1}_d$ :

$$|\|x\|_1 - \|y\|_1| = |n - (1 + \varepsilon)n| = \varepsilon n \leq L\|x - y\|_2 = L\|\mathbf{1}_d - \varepsilon\mathbf{1}_d\|_2 = L\sqrt{n\varepsilon^2} = L\varepsilon\sqrt{n}.$$

Итак, получаем  $L = \sqrt{n}$ . Видно, что  $L$  зависит от размерности.

## Question

Покажите, что если  $\|\nabla f(x)\|_\infty \leq 1$ , то  $\|\nabla f(x)\|_2 \leq \sqrt{n}$ .



# Литература

# Литература

Примеры для зеркального спуска были взяты из  лекции.