

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

Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ

Проекция

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

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

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

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

- **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 $y \in \mathbb{R}^n$ до замкнутого множества $S \subset \mathbb{R}^n$:

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

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

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

- **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 $y \in \mathbb{R}^n$ до замкнутого множества $S \subset \mathbb{R}^n$:

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

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

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

- **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

i Theorem

Пусть $S \subseteq \mathbb{R}^n$ — замкнутое и выпуклое множество, и пусть $x \in S, y \in \mathbb{R}^n$.
Тогда

$$\langle y - \text{proj}_S(y), x - \text{proj}_S(y) \rangle \leq 0, \quad (1)$$

$$\|x - \text{proj}_S(y)\|^2 + \|y - \text{proj}_S(y)\|^2 \leq \|x - y\|^2. \quad (2)$$

💡 Нерастягивающее отображение

Отображение (функция) f называется **нерастягивающим**, если оно является L -Липшицевым с константой $L \leq 1$ ¹. 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.

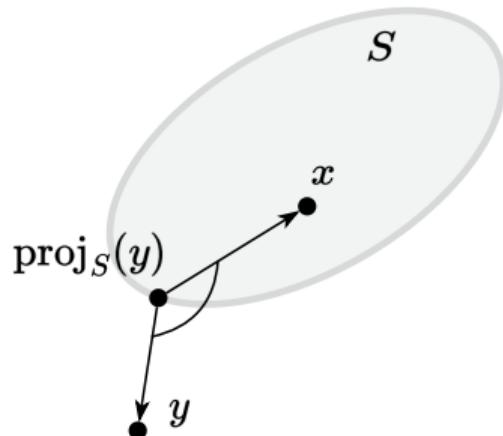


Рис. 1: Тупой или прямой угол должен получаться для любой точки $x \in S$

¹ Нерастягивающее становится сжимающим, если $L < 1$.

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 :

$$M = U\Sigma V^\top, \text{ где}$$

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r), \quad \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0.$$

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 :

$$M = U\Sigma V^\top, \text{ где}$$

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r), \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0.$$

- 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 σ'_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 :

$$M = U\Sigma V^\top, \text{ где}$$

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r), \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0.$$

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 σ'_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 :

$$M = U\Sigma V^\top, \text{ где}$$

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r), \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0.$$

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 σ'_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 спектралекс

Спектралекс — 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».

Спектралекс — 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

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

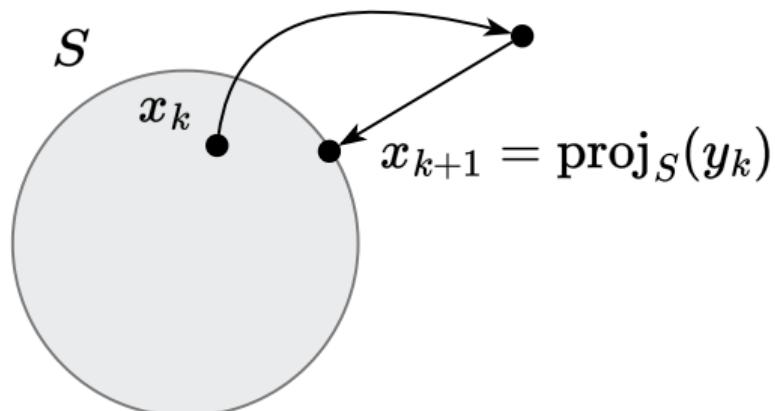
Идея метода проекции градиента

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

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

Adversarial Attacks.

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



Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

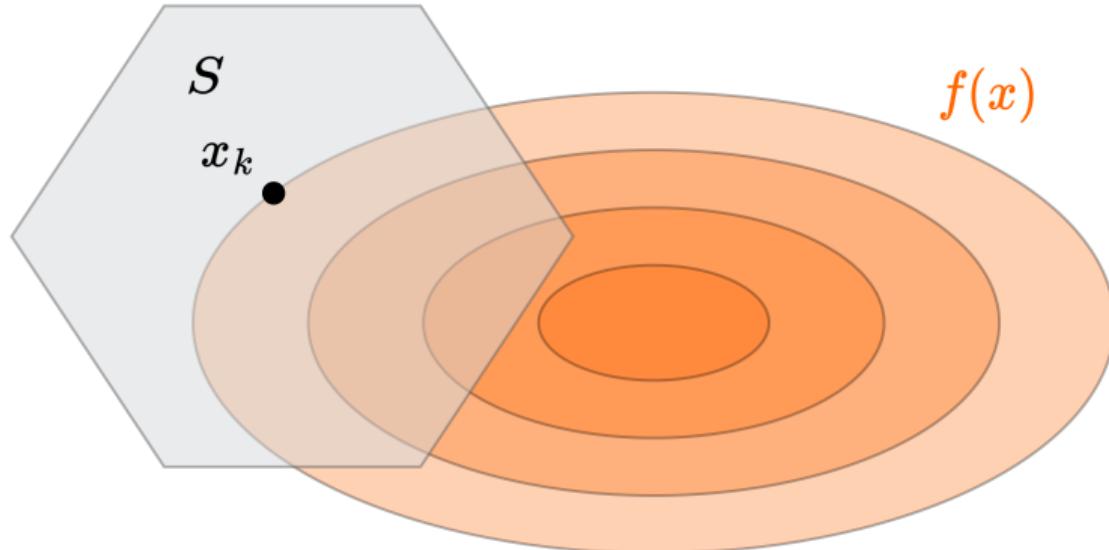


Рис. 3: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

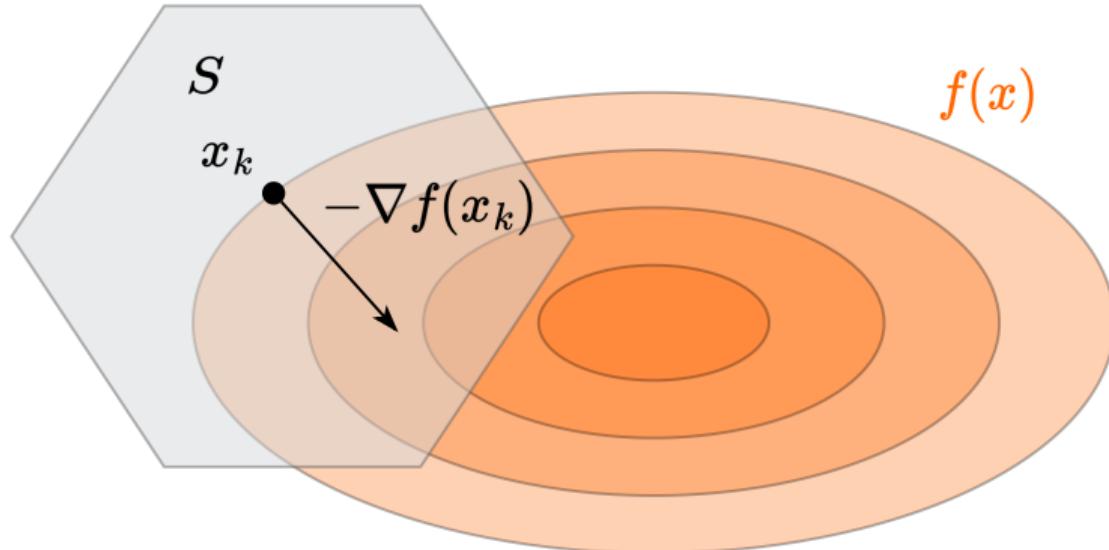


Рис. 4: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

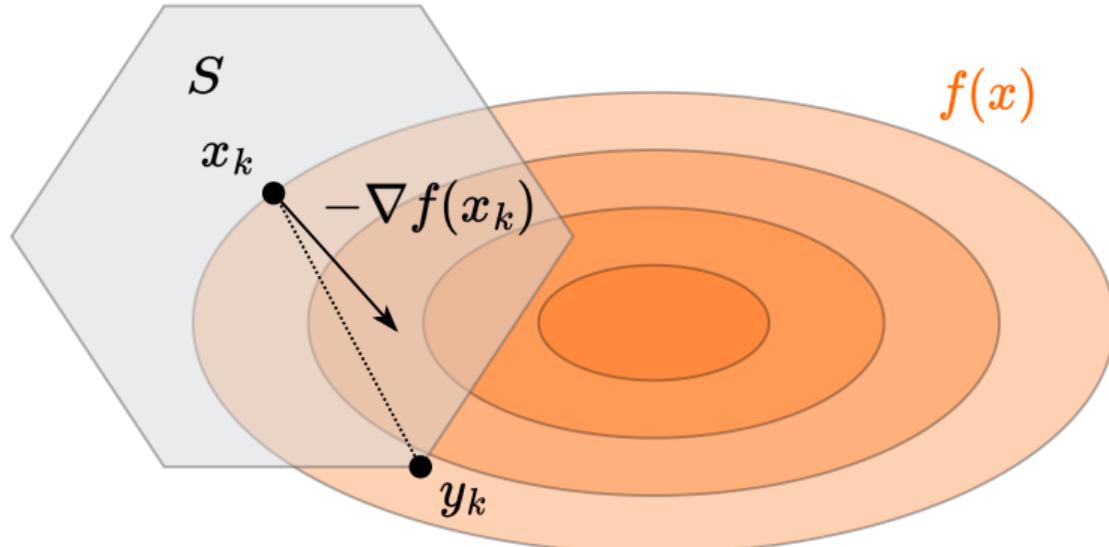


Рис. 5: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

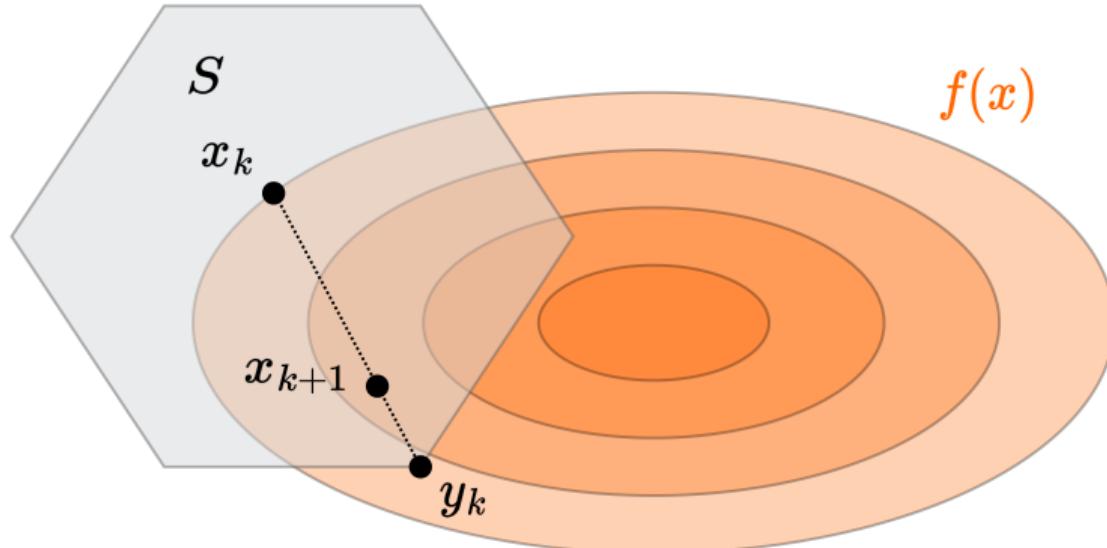


Рис. 6: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

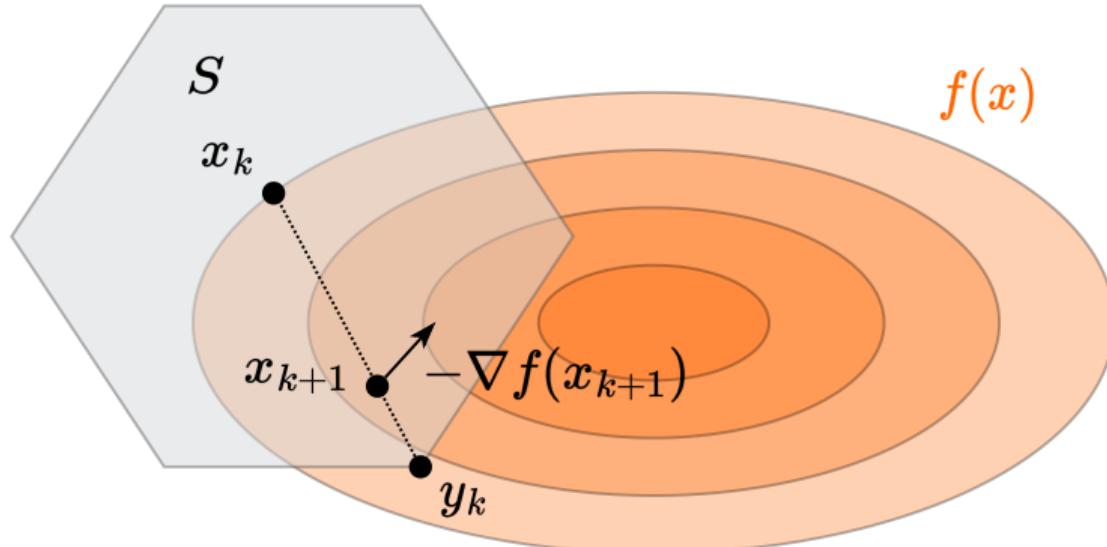


Рис. 7: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

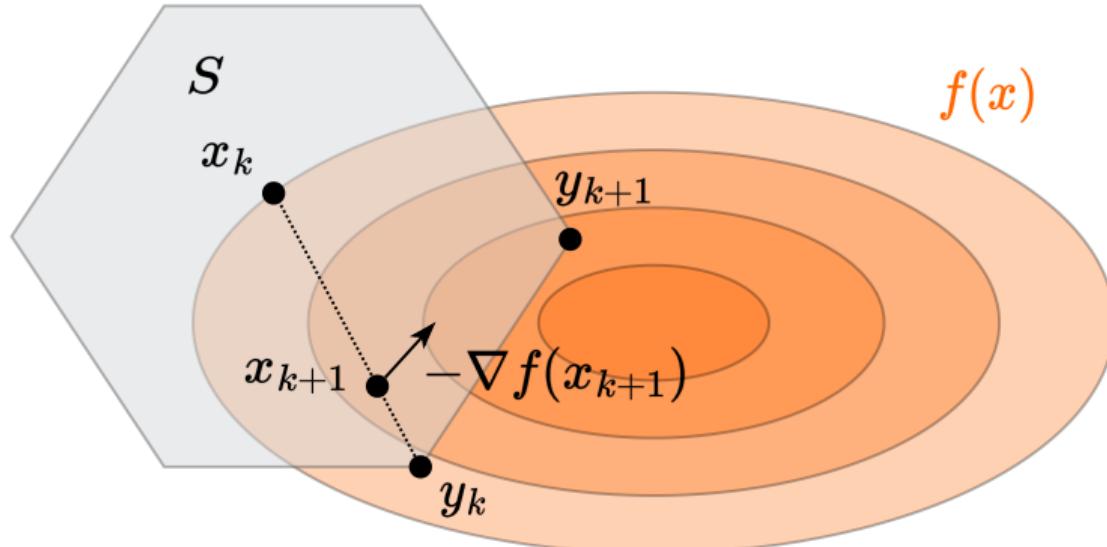


Рис. 8: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

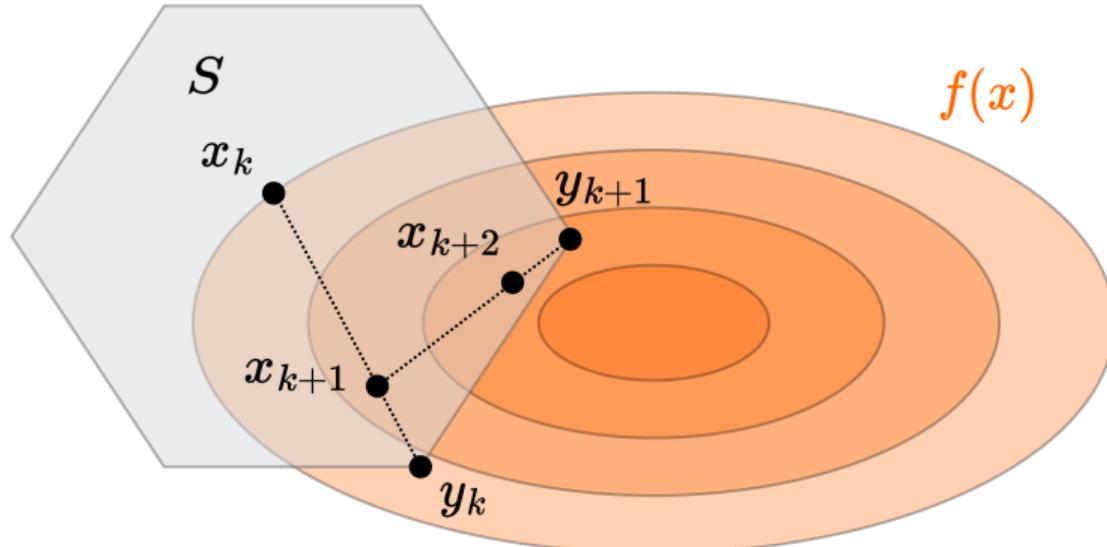


Рис. 9: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

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

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

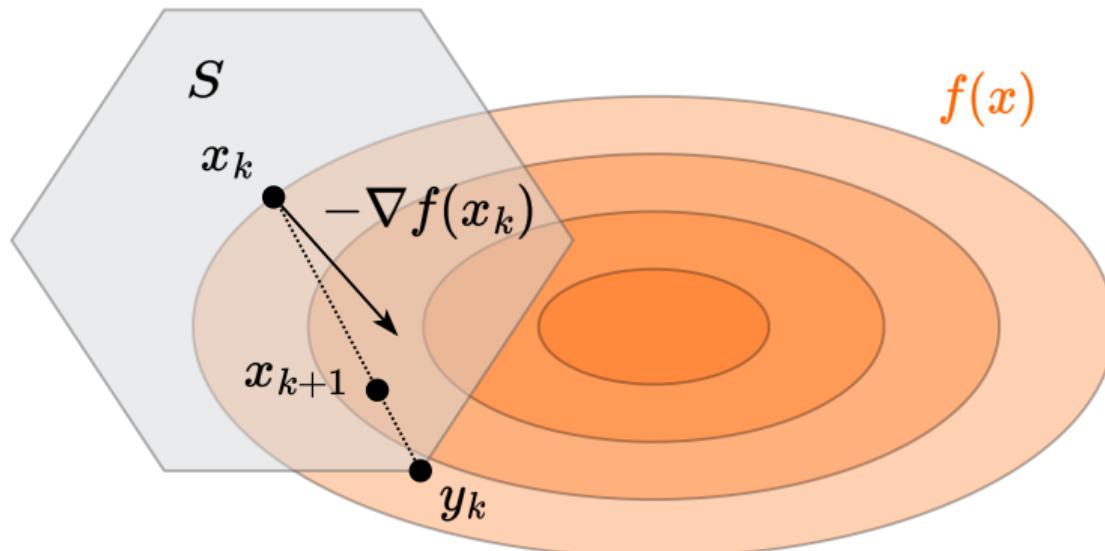


Рис. 10: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

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 μ -сильно выпуклых функций — $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$.

Особенности метода Франк–Вульфа

- Скорость сходимости метода Франк–Вульфа для μ -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 μ -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.

Метод субградиентного спуска: линейная аппроксимация + проксимальность

Вспомним шаг SubGD с субградиентом g_k :

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

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

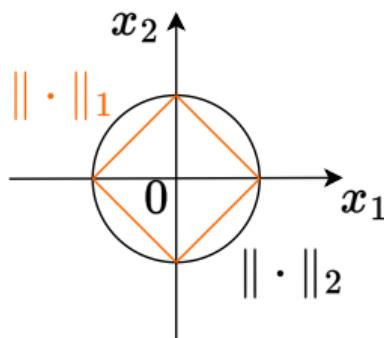


Рис. 11: $\|\cdot\|_1$ не сферически симметрична

Пример. Плохая обусловленность

Рассмотрим функцию

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

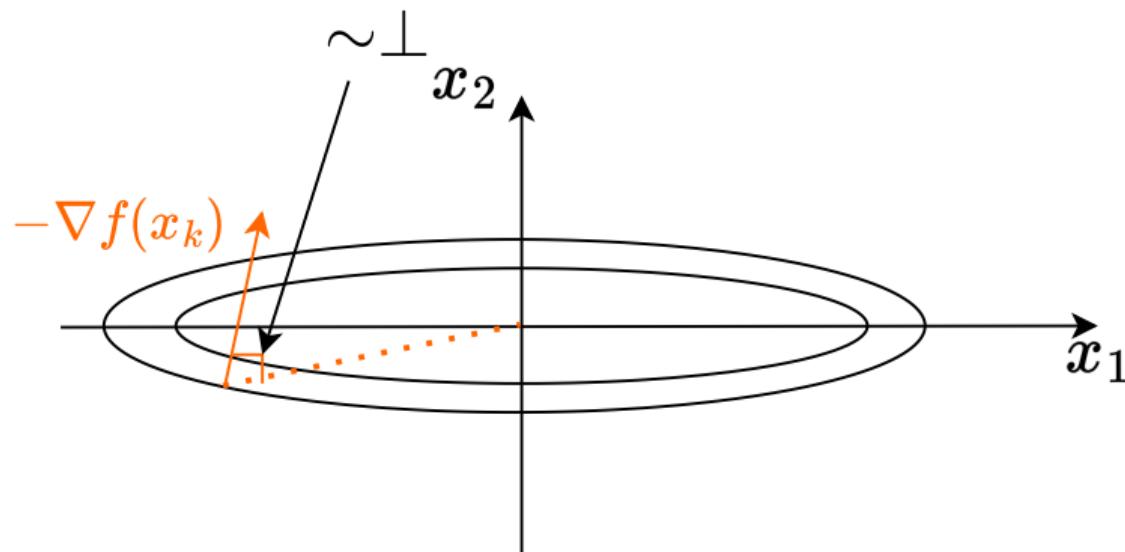


Рис. 12: Плохо обусловленная задача в норме $\|\cdot\|_2$

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

$$\nabla f(x_k) = \begin{pmatrix} \frac{2x_1}{100} & 2x_2 \cdot 100 \end{pmatrix}^\top \Big|_{(-10 \quad -0.1)^\top} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{5} & -20 \end{pmatrix}^\top.$$

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:

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

на другой:

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

где в этом примере

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

Более общая идея — заменить квадратичную форму на произвольную функцию $B_\phi(x, y)$, 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

Примеры для зеркального спуска были взяты из  лекции.