



## Консультация

Даня Меркулов, Петр Остроухов

Оптимизация для всех! ЦУ



## Скорость сходимости

Линейная сходимость последовательности  $r_k$  определяется следующим образом:

### i Definition

Последовательность  $\{r_k\}_{k=m}^{\infty}$  сходится линейно с параметром  $0 < q < 1$ , если существует константа  $C > 0$  такая, что:

$$r_k \leq Cq^k, \quad \text{for all } k \geq m.$$

Если такое  $q$  существует, то последовательность называется линейно сходящейся. Точная нижняя граница всех  $q$ , удовлетворяющих неравенству, называется константой линейной сходимости последовательности.

### i Definition

Если последовательность  $r_k$  сходится к нулю, но не имеет линейной сходимости, то сходимость называется сублинейной. Иногда мы можем рассмотреть следующий частный случай сублинейной сходимости:

$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Ck^q,$$

где  $q < 0$  и  $0 < C < \infty$ . Интуитивно, сублинейная сходимость означает, что последовательность сходится медленнее любой геометрической прогрессии.

## Скорость сходимости

Сходимость последовательности  $\{r_k\}_{k=m}^{\infty}$  называется **сверхлинейной**, если она сходится к нулю быстрее любой линейно сходящейся последовательности.

### Definition

- Последовательность  $\{r_k\}_{k=m}^{\infty}$  сходится **сверхлинейно**, если она сходится линейно с параметром  $q = 0$ .

## Скорость сходимости

Сходимость последовательности  $\{r_k\}_{k=m}^{\infty}$  называется **сверхлинейной**, если она сходится к нулю быстрее любой линейно сходящейся последовательности.

### Definition

- Последовательность  $\{r_k\}_{k=m}^{\infty}$  сходится **сверхлинейно**, если она сходится линейно с параметром  $q = 0$ .
- Для  $p > 1$ , последовательность  $\{r_k\}_{k=m}^{\infty}$  сходится **сверхлинейно порядка  $p$** , если существует  $C > 0$  и  $0 < q < 1$  такая, что:

$$r_k \leq Cq^{k^p}, \quad \text{for all } k \geq m.$$

Последовательность называется **сходящейся квадратично**, если

$$r_k \leq Cq^{2^k}, \quad \text{for all } k \geq m,$$

## Скорость сходимости

Сходимость последовательности  $\{r_k\}_{k=m}^{\infty}$  называется **сверхлинейной**, если она сходится к нулю быстрее любой линейно сходящейся последовательности.

### i Definition

- Последовательность  $\{r_k\}_{k=m}^{\infty}$  сходится **сверхлинейно**, если она сходится линейно с параметром  $q = 0$ .
- Для  $p > 1$ , последовательность  $\{r_k\}_{k=m}^{\infty}$  сходится **сверхлинейно порядка  $p$** , если существует  $C > 0$  и  $0 < q < 1$  такая, что:

$$r_k \leq Cq^{k^p}, \quad \text{for all } k \geq m.$$

Последовательность называется **сходящейся квадратично**, если

$$r_k \leq Cq^{2^k}, \quad \text{for all } k \geq m,$$

- Для  $p > 1$ , последовательность  $\{r_k\}_{k=m}^{\infty}$  сходится **сверхлинейно порядка  $p$** , если существует  $C > 0$  такая, что:

$$r_k \leq Cr_{k-1}^p, \quad \text{for all } k \geq m.$$

Когда  $p = 2$ , это называется **квадратичной сходимостью**.

## Важный пример

Предположим, что  $x^* = 1.23456789$  (истинное решение), и  $x = 1.234$   $r_k = \|x - x^*\| = 0.00056789 \leq 10^{-3}$ .

1. После первой итерации:

$$r_{k+1} \approx r_k^2 \leq (10^{-3})^2 = 10^{-6}.$$

Теперь ошибка равна  $10^{-6}$ , и мы имеем 6 правильных значащих цифр ( $x = 1.23456$ ).

## Важный пример

Предположим, что  $x^* = 1.23456789$  (истинное решение), и  $x = 1.234$   $r_k = \|x - x^*\| = 0.00056789 \leq 10^{-3}$ .

1. После первой итерации:

$$r_{k+1} \approx r_k^2 \leq (10^{-3})^2 = 10^{-6}.$$

Теперь ошибка равна  $10^{-6}$ , и мы имеем 6 правильных значащих цифр ( $x = 1.23456$ ).

2. После второй итерации:

$$r_{k+2} \approx r_{k+1}^2 = (10^{-6})^2 = 10^{-12}.$$

Теперь ошибка равна  $10^{-12}$ , и мы имеем 12 правильных значащих цифр (1.234567890123).

## Скорость сходимости



## Задача. Знайте свое скалярное произведение.

Упростите следующее выражение:

$$\sum_{i=1}^n \langle S^{-1}a_i, a_i \rangle,$$

где  $S = \sum_{i=1}^n a_i a_i^T$ ,  $a_i \in \mathbb{R}^n$ ,  $\det(S) \neq 0$

## Задача. Простая, но важная идея о матричных вычислениях.

Предположим, у вас есть следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где  $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  - случайные квадратные плотные матрицы, и  $x \in \mathbb{R}^n$  - вектор. Вам нужно вычислить  $b$ .

Какой способ лучше всего использовать?

1.  $A_1 A_2 A_3 x$  (слева направо)

Проверьте простой  код после вашего интуитивного ответа.

## Задача. Простая, но важная идея о матричных вычислениях.

Предположим, у вас есть следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где  $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  - случайные квадратные плотные матрицы, и  $x \in \mathbb{R}^n$  - вектор. Вам нужно вычислить  $b$ .

Какой способ лучше всего использовать?

1.  $A_1 A_2 A_3 x$  (слева направо)
2.  $(A_1 (A_2 (A_3 x)))$  (справа налево)

Проверьте простой  код после вашего интуитивного ответа.

## Задача. Простая, но важная идея о матричных вычислениях.

Предположим, у вас есть следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где  $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  - случайные квадратные плотные матрицы, и  $x \in \mathbb{R}^n$  - вектор. Вам нужно вычислить  $b$ .

Какой способ лучше всего использовать?

1.  $A_1 A_2 A_3 x$  (слева направо)
2.  $(A_1 (A_2 (A_3 x)))$  (справа налево)
3. Не имеет значения

Проверьте простой  код после вашего интуитивного ответа.

## Задача. Простая, но важная идея о матричных вычислениях.

Предположим, у вас есть следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где  $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  - случайные квадратные плотные матрицы, и  $x \in \mathbb{R}^n$  - вектор. Вам нужно вычислить  $b$ .

Какой способ лучше всего использовать?

1.  $A_1 A_2 A_3 x$  (слева направо)
2.  $(A_1 (A_2 (A_3 x)))$  (справа налево)
3. Не имеет значения
4. Результаты первых двух вариантов не будут одинаковыми.

Проверьте простой  код после вашего интуитивного ответа.

## Лекция 2. Одномерная оптимизация. Градиент. Гессиан. Матрично-векторное дифференцирование.

## Градиент, Гессиан

Пусть  $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , тогда вектор, который содержит все первые частные производные:

$$\nabla f(x) = \frac{df}{dx} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

называется градиентом функции  $f(x)$ . Этот вектор указывает направление наискорейшего возрастания.

Пусть  $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , тогда матрица, содержащая все вторые частные производные:

$$f''(x) = \nabla^2 f(x) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}$$

называется Гессианом.

## Якобиан

Обобщением понятия градиента на случай многомерной функции  $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  является следующая матрица:

$$J_f = f'(x) = \frac{df}{dx^T} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_n} & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Она содержит информацию о скорости изменения функции по отношению к ее входу.

# Итог

$$f(x) : X \rightarrow Y; \quad \frac{\partial f(x)}{\partial x} \in G$$

X	Y	G	Name
$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}$	$f'(x)$ (производная)
$\mathbb{R}^n$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}^n$	$\frac{\partial f}{\partial x_i}$ (градиент)
$\mathbb{R}^n$	$\mathbb{R}^m$	$\mathbb{R}^{n \times m}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$ (якобиан)

## Аппроксимации Тейлора

- Если  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  - дифференцируемая функция, то ее аппроксимация первого порядка задается следующим образом:

$$f_{x_0}^I(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T(x - x_0)$$

где:  $f(x_0)$  - значение функции в точке  $x_0$ .  $\nabla f(x_0)$  - градиент функции в точке  $x_0$ .

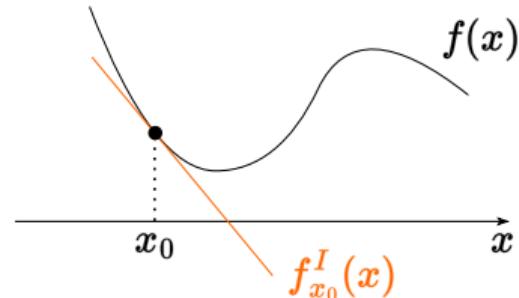
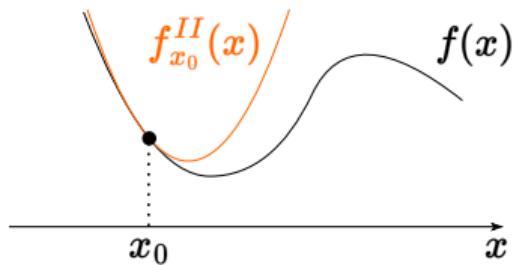


Рис. 2: Аппроксимация Тейлора первого порядка в окрестности точки  $x_0$



## Аппроксимации Тейлора

- Если  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  - дифференцируемая функция, то ее аппроксимация первого порядка задается следующим образом:

$$f_{x_0}^I(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T(x - x_0)$$

где:  $f(x_0)$  - значение функции в точке  $x_0$ .  $\nabla f(x_0)$  - градиент функции в точке  $x_0$ .

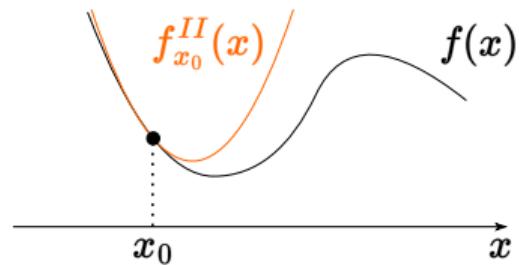
- Для дважды дифференцируемой функции  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , ее аппроксимация второго порядка, строящаяся вблизи некоторой точки  $x_0$ , задается следующим образом:

$$f_{x_0}^{II}(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T(x - x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T \nabla^2 f(x_0)(x - x_0)$$

где  $\nabla^2 f(x_0)$  - гессиан функции  $f$  в точке  $x_0$ .



Рис. 2: Аппроксимация Тейлора первого порядка в окрестности точки  $x_0$



## Матрично-векторное дифференцирование через дифференциал

После получения дифференциальной записи  $df$  мы можем получить градиент, используя следующую формулу:

$$df(x) = \langle \nabla f(x), dx \rangle$$

## Матрично-векторное дифференцирование через дифференциал

После получения дифференциальной записи  $df$  мы можем получить градиент, используя следующую формулу:

$$df(x) = \langle \nabla f(x), dx \rangle$$

Далее, если у нас есть дифференциал в такой форме и мы хотим вычислить вторую производную матричной/векторной функции, мы рассматриваем “старый”  $dx$  как константу  $dx_1$ , затем вычисляем  $d(df) = d^2f(x)$

$$d^2f(x) = \langle \nabla^2 f(x)dx_1, dx \rangle = \langle H_f(x)dx_1, dx \rangle$$

## Пример

### Example

Найти  $df, \nabla f(x)$ , если  $f(x) = \ln\langle x, Ax \rangle$ .

## Пример

### Example

Найти  $df, \nabla f(x)$ , если  $f(x) = \ln\langle x, Ax \rangle$ .

- Заметим, что  $A$  должна быть положительно определенной, потому что  $\langle x, Ax \rangle$  аргумент логарифма и для любого  $x$  формула должна быть положительной. Таким образом,  $A \in \mathbb{S}_{++}^n$ . Давайте сначала найдем дифференциал:

$$\begin{aligned} df &= d(\ln\langle x, Ax \rangle) = \frac{d(\langle x, Ax \rangle)}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle dx, Ax \rangle + \langle x, d(Ax) \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \\ &= \frac{\langle Ax, dx \rangle + \langle x, Adx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle Ax, dx \rangle + \langle A^T x, dx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle (A + A^T)x, dx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} \end{aligned}$$

## Пример

### Example

Найти  $df, \nabla f(x)$ , если  $f(x) = \ln\langle x, Ax \rangle$ .

- Заметим, что  $A$  должна быть положительно определенной, потому что  $\langle x, Ax \rangle$  аргумент логарифма и для любого  $x$  формула должна быть положительной. Таким образом,  $A \in \mathbb{S}_{++}^n$ . Давайте сначала найдем дифференциал:

$$\begin{aligned} df &= d(\ln\langle x, Ax \rangle) = \frac{d(\langle x, Ax \rangle)}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle dx, Ax \rangle + \langle x, d(Ax) \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \\ &= \frac{\langle Ax, dx \rangle + \langle x, Adx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle Ax, dx \rangle + \langle A^T x, dx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle (A + A^T)x, dx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} \end{aligned}$$

- Наша основная цель - получить форму  $df = \langle \cdot, dx \rangle$

$$df = \left\langle \frac{2Ax}{\langle x, Ax \rangle}, dx \right\rangle$$

Таким образом, градиент равен  $\nabla f(x) = \frac{2Ax}{\langle x, Ax \rangle}$

## Линейный поиск: унимодальная функция

- Задача одномерного линейного поиска:  $\min_{\alpha \in \mathbb{R}} f(\alpha)$  (пример - поиск оптимального размера шага градиентного спуска).

## Линейный поиск: унимодальная функция

- Задача одномерного линейного поиска:  $\min_{\alpha \in \mathbb{R}} f(\alpha)$  (пример - поиск оптимального размера шага градиентного спуска).
- Функция  $f(\alpha)$  предполагается унимодальной на выбранном интервале, то есть имеет единственный локальный (и глобальный) минимум.

## Линейный поиск: унимодальная функция

- Задача одномерного линейного поиска:  $\min_{\alpha \in \mathbb{R}} f(\alpha)$  (пример - поиск оптимального размера шага градиентного спуска).
- Функция  $f(\alpha)$  предполагается унимодальной на выбранном интервале, то есть имеет единственный локальный (и глобальный) минимум.
- Метод дихотомии сужает интервал  $[a, b]$ , пока его длина не станет меньше заданной точности, требуя два новых значения функции на шаг.

## Линейный поиск: унимодальная функция

- Задача одномерного линейного поиска:  $\min_{\alpha \in \mathbb{R}} f(\alpha)$  (пример - поиск оптимального размера шага градиентного спуска).
- Функция  $f(\alpha)$  предполагается унимодальной на выбранном интервале, то есть имеет единственный локальный (и глобальный) минимум.
- Метод дихотомии сужает интервал  $[a, b]$ , пока его длина не станет меньше заданной точности, требуя два новых значения функции на шаг.
- Метод золотого сечения переиспользует одно из предыдущих значений, сокращая интервал в 0.618 раз на итерацию и снижая число вычислений  $f$ .

## Неточный линейный поиск

Нам не всегда нужно точно решать задачу минимизации. Иногда, достаточно найти приближенное решение. Такое часто встречается в задаче выбора шага метода оптимизации

$$x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k)$$
$$\alpha = \operatorname{argmin} f(x_{k+1})$$

## Неточный линейный поиск

Нам не всегда нужно точно решать задачу минимизации. Иногда, достаточно найти приближенное решение. Такое часто встречается в задаче выбора шага метода оптимизации

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k - \alpha \nabla f(x_k) \\ \alpha &= \operatorname{argmin} f(x_{k+1})\end{aligned}$$

Рассмотрим скалярную функцию  $\phi(\alpha)$  в точке  $x_k$ :

$$\phi(\alpha) = f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)), \alpha \geq 0$$

## Неточный линейный поиск

Нам не всегда нужно точно решать задачу минимизации. Иногда, достаточно найти приближенное решение. Такое часто встречается в задаче выбора шага метода оптимизации

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k - \alpha \nabla f(x_k) \\ \alpha &= \operatorname{argmin} f(x_{k+1})\end{aligned}$$

Рассмотрим скалярную функцию  $\phi(\alpha)$  в точке  $x_k$ :

$$\phi(\alpha) = f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)), \alpha \geq 0$$

Первое приближение  $\phi(\alpha)$  в окрестности  $\alpha = 0$  равно:

$$\phi(\alpha) \approx \phi_0^I(\alpha) = f(x_k) - \alpha \nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k)$$



Рис. 4: иллюстрация аппроксимации тейлора  $\phi_0^i(\alpha)$

## Неточный линейный поиск. Условия Гольдштейна

Рассмотрим две линейные скалярные функции  $\phi_1(\alpha)$  и  $\phi_2(\alpha)$ :

$$\phi_1(\alpha) = f(x_k) - c_1 \alpha \|\nabla f(x_k)\|^2$$

$$\phi_2(\alpha) = f(x_k) - c_2 \alpha \|\nabla f(x_k)\|^2$$

## Неточный линейный поиск. Условия Гольдштейна

Рассмотрим две линейные скалярные функции  $\phi_1(\alpha)$  и  $\phi_2(\alpha)$ :

$$\phi_1(\alpha) = f(x_k) - c_1 \alpha \|\nabla f(x_k)\|^2$$

$$\phi_2(\alpha) = f(x_k) - c_2 \alpha \|\nabla f(x_k)\|^2$$

Условия Гольдштейна-Армихо находят функцию  $\phi(\alpha)$  между  $\phi_1(\alpha)$  и  $\phi_2(\alpha)$ . Обычно  $c_1 = \rho$  и  $c_2 = 1 - \rho$ , с  $\rho \in (0, 0.5)$ .

Ограничение только сверху задает условие Армихо (достаточного убывания).



Рис. 5: Иллюстрация условий Гольдштейна

## Неточный линейный поиск. Условие ограничения на кривизну

Чтобы избежать слишком коротких шагов, мы вводим  
второй критерий:

$$-\nabla f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))^T \nabla f(x_k) \geq c_2 \nabla f(x_k)^T (-\nabla f(x_k))$$

## Неточный линейный поиск. Условие ограничения на кривизну

Чтобы избежать слишком коротких шагов, мы вводим второй критерий:

$$-\nabla f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))^T \nabla f(x_k) \geq c_2 \nabla f(x_k)^T (-\nabla f(x_k))$$

для некоторого  $c_2 \in (c_1, 1)$ . Здесь  $c_1$  из условия Армихо.

Левая часть является производной  $\nabla_\alpha \phi(\alpha)$ , гарантирующей, что наклон  $\phi(\alpha)$  в целевой точке не менее чем в  $c_2$  раз больше начального наклона  $\nabla_\alpha \phi(\alpha)(0)$ .

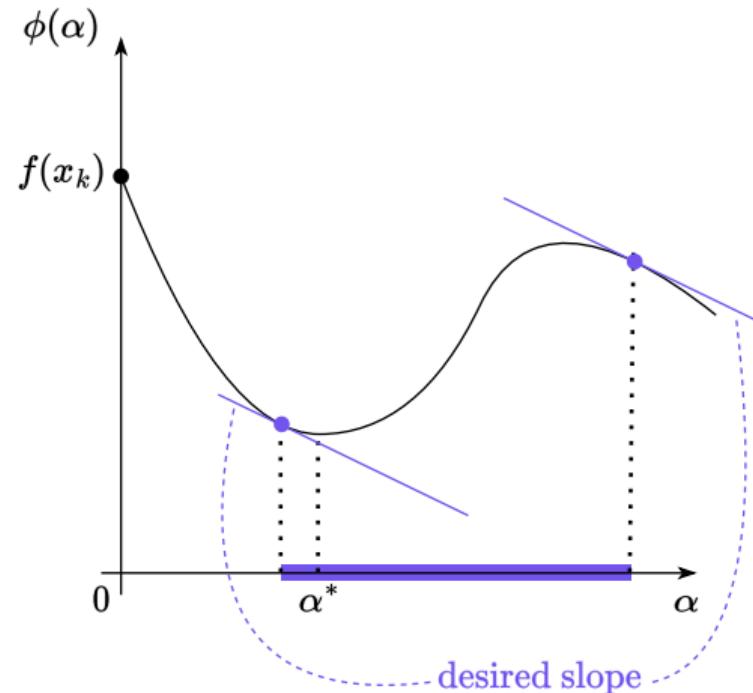


Рис. 6: Иллюстрация условия ограничения на кривизну

## Неточный линейный поиск. Условия Вульфа

$$\begin{aligned} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)) &\leq f(x_k) - c_1 \cdot \alpha \nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k), \\ -\nabla f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))^T \nabla f(x_k) &\geq c_2 \nabla f(x_k)^T (-\nabla f(x_k)) \end{aligned}$$

Вместе, условие Армихо и ограничение на кривизну образуют условия Вульфа.

### Theorem

Пусть

1.  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  непрерывно дифференцируема,  
 $\phi(\alpha) = f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$ .

Тогда для  $0 < c_1 < c_2 < 1$ , существуют интервалы шагов, удовлетворяющие условиям Вульфа.

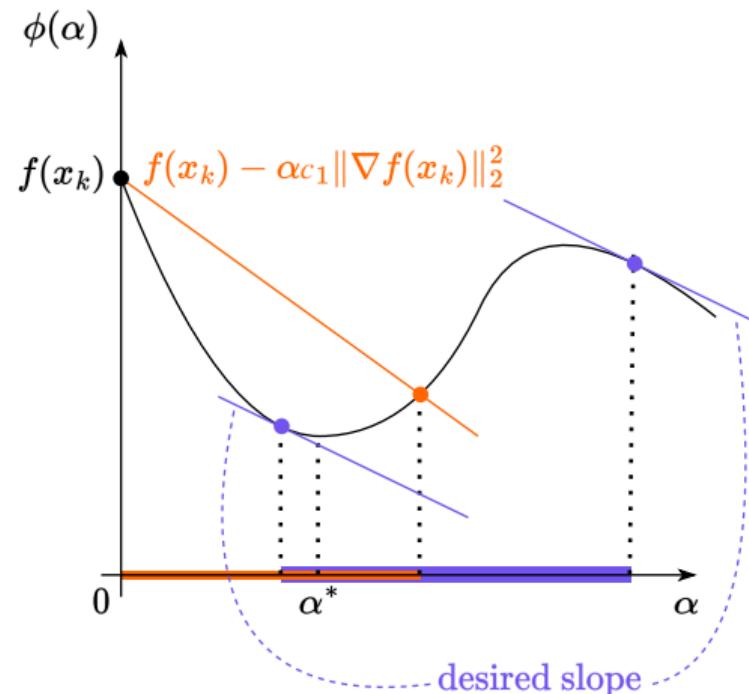


Рис. 7: Иллюстрация условий Вульфа

## Неточный линейный поиск. Условия Вульфа

$$\begin{aligned} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)) &\leq f(x_k) - c_1 \cdot \alpha \nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k), \\ -\nabla f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))^T \nabla f(x_k) &\geq c_2 \nabla f(x_k)^T (-\nabla f(x_k)) \end{aligned}$$

Вместе, условие Армихо и ограничение на кривизну образуют условия Вульфа.

### Theorem

Пусть

1.  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  непрерывно дифференцируема,  
 $\phi(\alpha) = f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$ .
2.  $\nabla f(x_k)^T p_k < 0$ , где  $p_k = -\nabla f(x_k)$ , делая  
 $p_k$  направлением спуска.

Тогда для  $0 < c_1 < c_2 < 1$ , существуют интервалы шагов, удовлетворяющие условиям Вульфа.

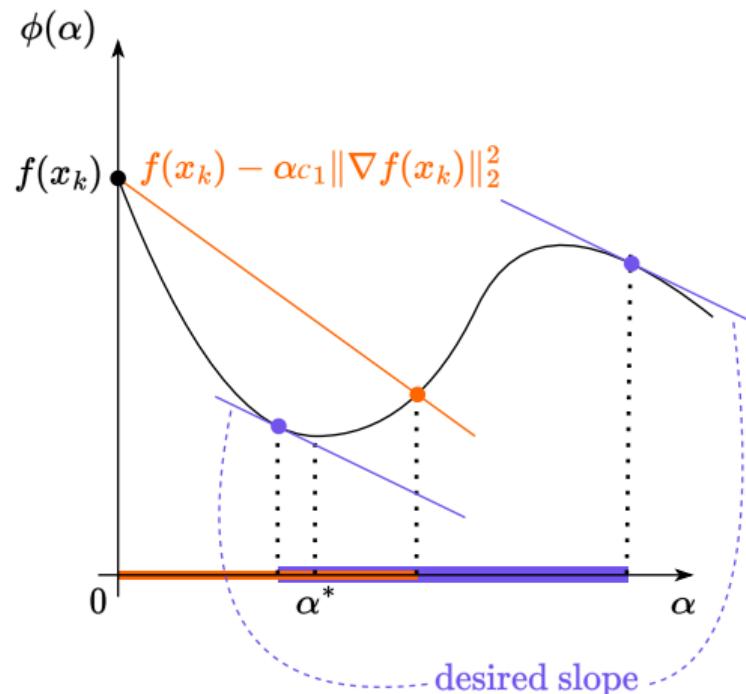


Рис. 7: Иллюстрация условий Вульфа

## Неточный линейный поиск. Условия Вульфа

$$\begin{aligned} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)) &\leq f(x_k) - c_1 \cdot \alpha \nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k), \\ -\nabla f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))^T \nabla f(x_k) &\geq c_2 \nabla f(x_k)^T (-\nabla f(x_k)) \end{aligned}$$

Вместе, условие Армихо и ограничение на кривизну образуют условия Вульфа.

### Theorem

Пусть

1.  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  непрерывно дифференцируема,  
 $\phi(\alpha) = f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$ .
2.  $\nabla f(x_k)^T p_k < 0$ , где  $p_k = -\nabla f(x_k)$ , делая  
 $p_k$  направлением спуска.
3.  $f$  ограничена снизу вдоль луча  
 $\{x_k + \alpha p_k \mid \alpha > 0\}$

Тогда для  $0 < c_1 < c_2 < 1$ , существуют  
интервалы шагов, удовлетворяющие условиям  
Вульфа.



Рис. 7: Иллюстрация условий Вульфа

## Неточный линейный поиск: бэктрекинг

- Алгоритм стартует с некоторого большого  $\alpha_0$  и параметров  $\beta \in (0, 1)$ ,  $c_1 \in (0, 1)$ .

## Неточный линейный поиск: бэктрекинг

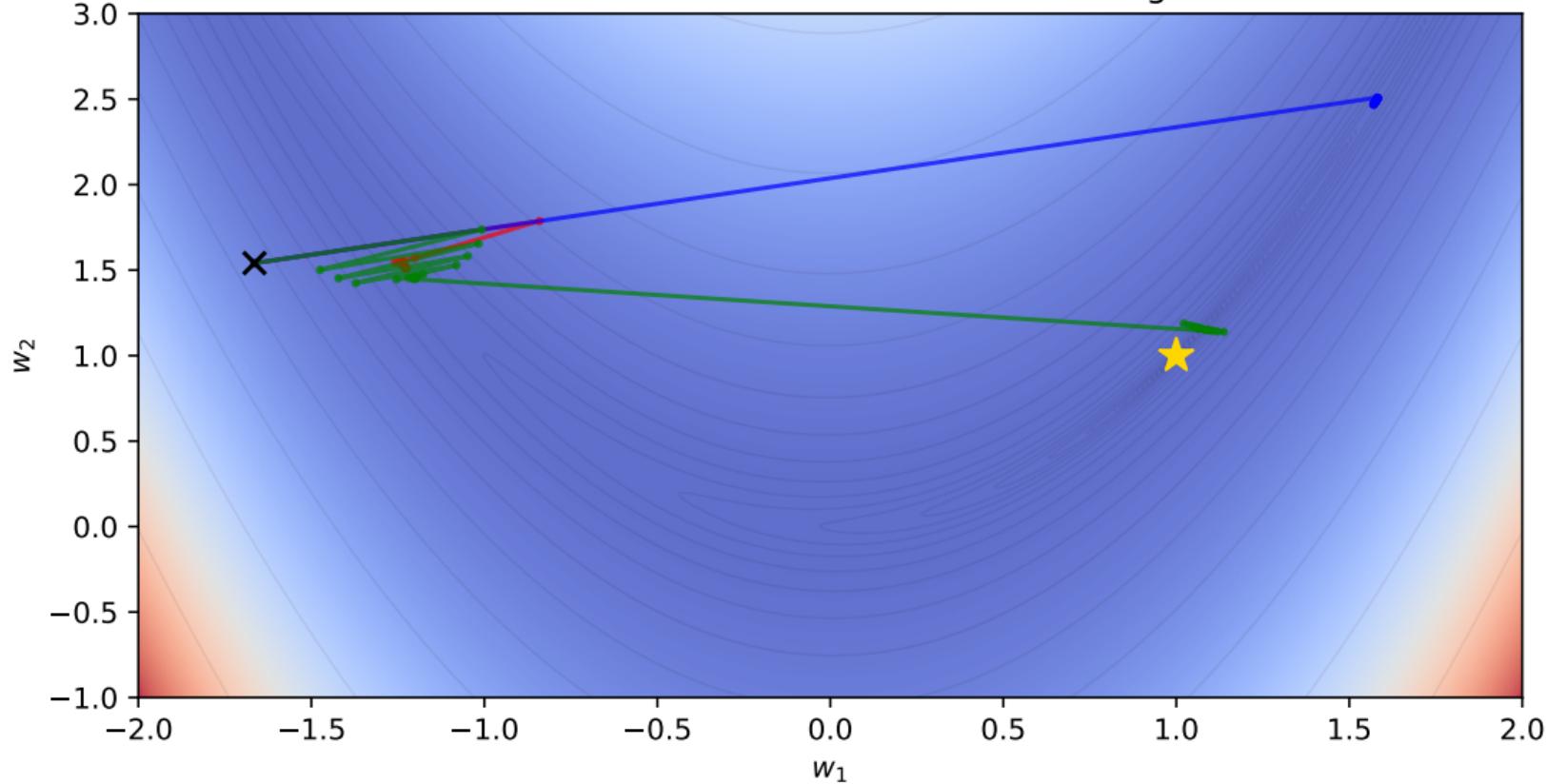
- Алгоритм стартует с некоторого большого  $\alpha_0$  и параметров  $\beta \in (0, 1)$ ,  $c_1 \in (0, 1)$ .
- Пока условие (например, Армихо) нарушено, заменяем  $\alpha \leftarrow \beta\alpha$  и пересчитываем  $f(x_k + \alpha p_k)$ .

## Неточный линейный поиск: бэктрекинг

- Алгоритм стартует с некоторого большого  $\alpha_0$  и параметров  $\beta \in (0, 1)$ ,  $c_1 \in (0, 1)$ .
- Пока условие (например, Армихо) нарушено, заменяем  $\alpha \leftarrow \beta\alpha$  и пересчитываем  $f(x_k + \alpha p_k)$ .
- Метод экономичен, так как требует по одному вычислению  $f$  на итерацию и быстро подбирает подходящий шаг.

## Градиентный спуск с линейным поиском

Gradient Descent with different line search algorithms



## Линейный поиск. Пример 1: Сравнение методов (Colab ♣)

$$f_1(x) = x(x - 2)(x + 2)^2 + 10$$

$$[a, b] = [-3, 2]$$

Случайный поиск: 72 вызова функции. 36 итераций.  $f_1^* = 0.09$

Метод дихотомии: 23 вызова функции. 13 итераций.  $f_1^* = 10.00$

Золотое сечение: 19 вызова функции. 18 итераций.  $f_1^* = 10.00$

Параболический поиск: 20 вызова функции. 17 итераций.

$$f_1^* = 10.00$$

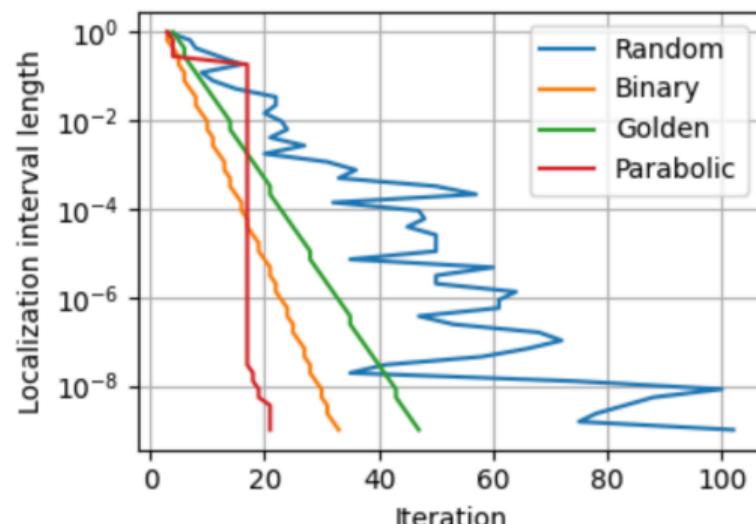
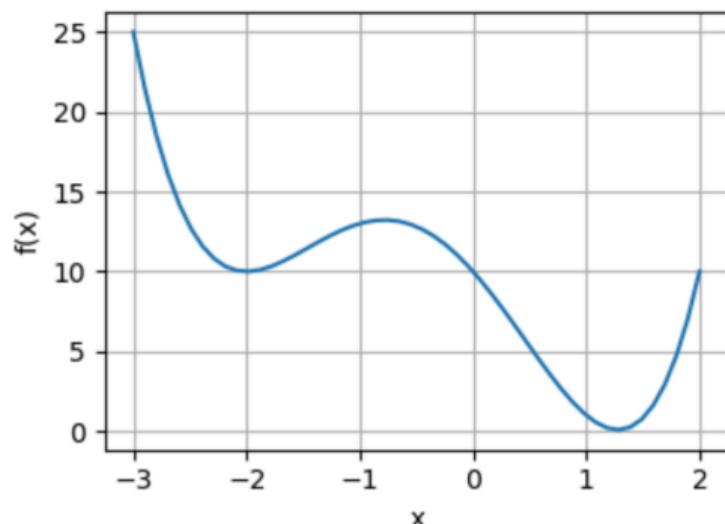


Рис. 8: Сравнение различных методов линейного поиска с  $f_1$

## Линейный поиск. Пример 2: Сравнение методов (Colab ♣)

$$f_2(x) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{x^2 e^{-\frac{x^2}{8}}}{8}$$

$$[a, b] = [0, 6]$$

Случайный поиск: 68 вызова функции. 34 итераций.  $f_2^* = 0.71$

Метод дихотомии: 23 вызова функции. 13 итераций.  $f_2^* = 0.71$

Золотое сечение: 20 вызова функции. 19 итераций.  $f_2^* = 0.71$

Параболический поиск: 17 вызова функции. 14 итераций.

$$f_2^* = 0.71$$



Рис. 9: Сравнение различных методов линейного поиска с  $f_2$

## Линейный поиск. Пример 3: Сравнение методов (Colab ♣)

$$f_3(x) = \sin\left(\sin\left(\sin\left(\sqrt{\frac{x}{2}}\right)\right)\right)$$

$$[a, b] = [5, 70]$$

Случайный поиск: 66 вызовов функции. 33 итерации.  $f_3^* = 0.25$

Метод дихотомии: 32 вызова функции. 17 итераций.  $f_3^* = 0.25$

Золотое сечение: 25 вызова функции. 24 итераций.  $f_3^* = 0.25$

Параболический поиск: 103 вызова функции. 100 итераций.

$$f_3^* = 0.25$$



Рис. 10: Сравнение различных методов линейного поиска с  $f_3$

## Лекция 3. Автоматическое дифференцирование

## Почему нужны градиенты

- Хотим решить

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d} f(x)$$

где  $d$  достигает миллиардов и каждая оценка  $f(x)$  дорога.

## Почему нужны градиенты

- Хотим решить

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d} f(x)$$

где  $d$  достигает миллиардов и каждая оценка  $f(x)$  дорога.

- Методы нулевого порядка, опирающиеся только на значения функции, в таких задачах быстро упираются в «проклятие размерности»: их скорость деградирует до  $\mathcal{O}(n/k)$  против  $\mathcal{O}(1/k)$  у градиентных методов.

## Почему нужны градиенты

- Хотим решить

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d} f(x)$$

где  $d$  достигает миллиардов и каждая оценка  $f(x)$  дорога.

- Методы нулевого порядка, опирающиеся только на значения функции, в таких задачах быстро упираются в «проклятие размерности»: их скорость деградирует до  $\mathcal{O}(n/k)$  против  $\mathcal{O}(1/k)$  у градиентных методов.
- В сильно выпуклом случае сходимость безградиентных схем замедляется с  $(1 - \frac{\mu}{L})^k$  до  $(1 - \frac{\mu}{nL})^k$ , а даже лучшие двухточечные оценки не дают зависимости лучше, чем  $\sqrt{n}$ .

## Почему нужны градиенты

- Хотим решить

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d} f(x)$$

где  $d$  достигает миллиардов и каждая оценка  $f(x)$  дорога.

- Методы нулевого порядка, опирающиеся только на значения функции, в таких задачах быстро упираются в «проклятие размерности»: их скорость деградирует до  $\mathcal{O}(n/k)$  против  $\mathcal{O}(1/k)$  у градиентных методов.
- В сильно выпуклом случае сходимость безградиентных схем замедляется с  $(1 - \frac{\mu}{L})^k$  до  $(1 - \frac{\mu}{nL})^k$ , а даже лучшие двухточечные оценки не дают зависимости лучше, чем  $\sqrt{n}$ .
- Отсюда мотивация: научиться вычислять полный градиент  $\nabla_w L$  и переходить к методам первого порядка, которые масштабируются лучше в больших задачах.

## Прямой режим автоматического дифференцирования

Чтобы глубже понять идею автоматического дифференцирования, рассмотрим простую функцию для вычисления производных:

$$L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}$$

## Прямой режим автоматического дифференцирования

Чтобы глубже понять идею автоматического дифференцирования, рассмотрим простую функцию для вычисления производных:

$$L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}$$

Давайте нарисуем *вычислительный граф* этой функции:

$$L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}$$

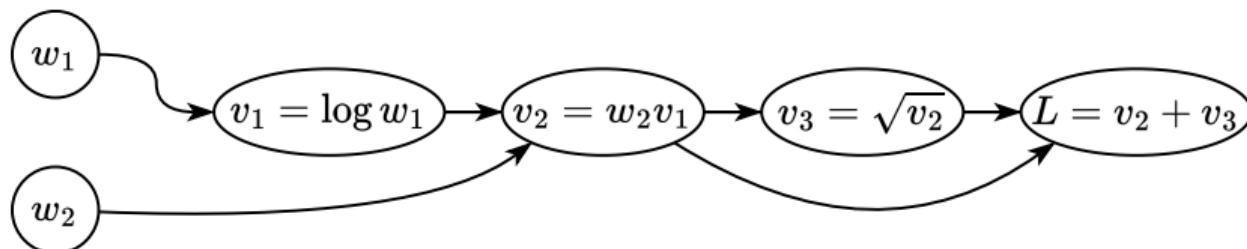


Рис. 11: Иллюстрация вычислительного графа для функции  $L(w_1, w_2)$

## Прямой режим автоматического дифференцирования

Чтобы глубже понять идею автоматического дифференцирования, рассмотрим простую функцию для вычисления производных:

$$L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}$$

Давайте нарисуем *вычислительный граф* этой функции:

$$L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}$$

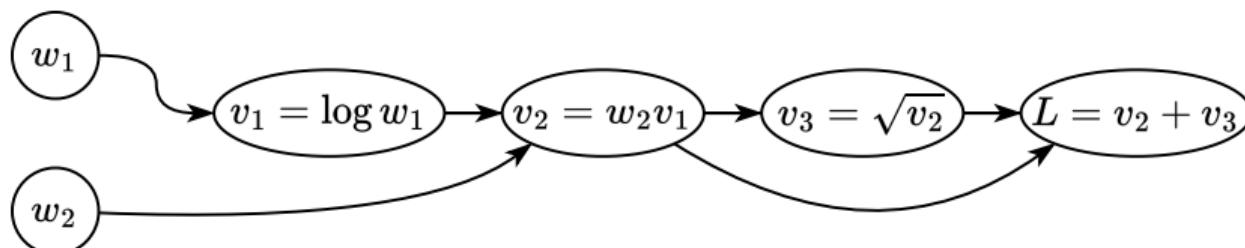


Рис. 11: Иллюстрация вычислительного графа для функции  $L(w_1, w_2)$

Давайте пойдем от начала графа к концу и вычислим производную  $\frac{\partial L}{\partial w_1}$ .

## Прямой режим автоматического дифференцирования



$$w_1 \rightarrow w_1, \frac{\partial w_1}{\partial w_1}$$

$$w_2 \rightarrow w_2, \frac{\partial w_2}{\partial w_1}$$

Рис. 12: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

### Функция

$$w_1 = w_1, w_2 = w_2$$

## Прямой режим автоматического дифференцирования



Рис. 12: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

### Функция

$$w_1 = w_1, w_2 = w_2$$

### Производная

$$\frac{\partial w_1}{\partial w_1} = 1, \frac{\partial w_2}{\partial w_1} = 0$$

## Прямой режим автоматического дифференцирования



Рис. 13: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

# Прямой режим автоматического дифференцирования



Рис. 13: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

## Функция

$$v_1 = \log w_1$$

# Прямой режим автоматического дифференцирования

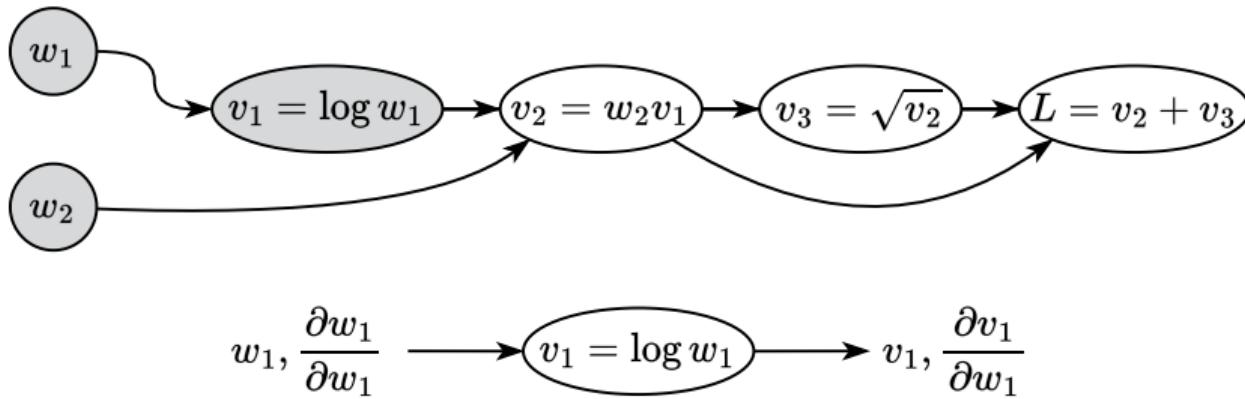


Рис. 13: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

## Функция

$$v_1 = \log w_1$$

## Производная

$$\frac{\partial v_1}{\partial w_1} = \frac{\partial v_1}{\partial w_1} \frac{\partial w_1}{\partial w_1} = \frac{1}{w_1} 1$$

## Прямой режим автоматического дифференцирования

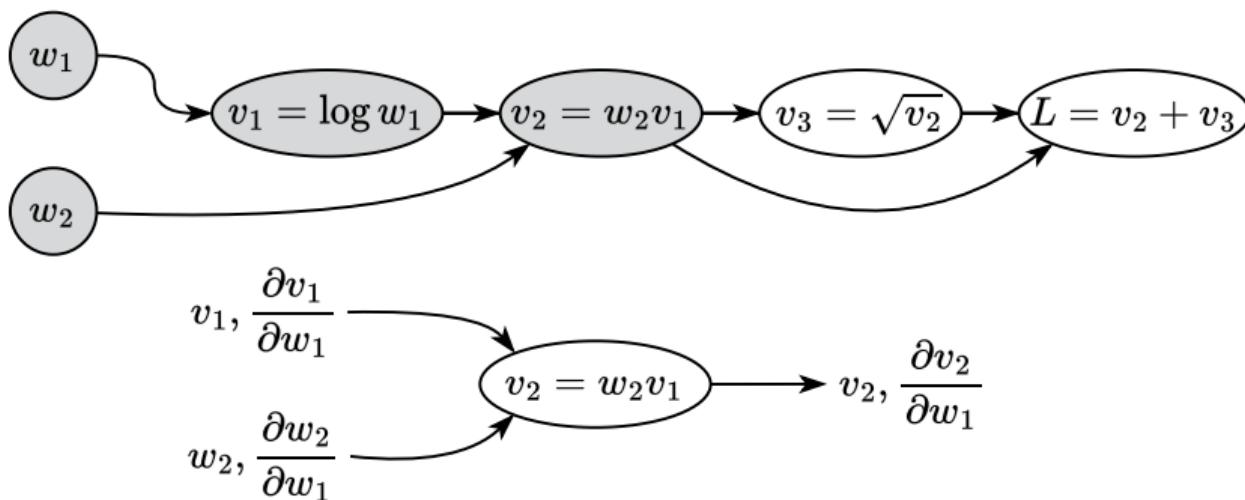


Рис. 14: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

## Прямой режим автоматического дифференцирования

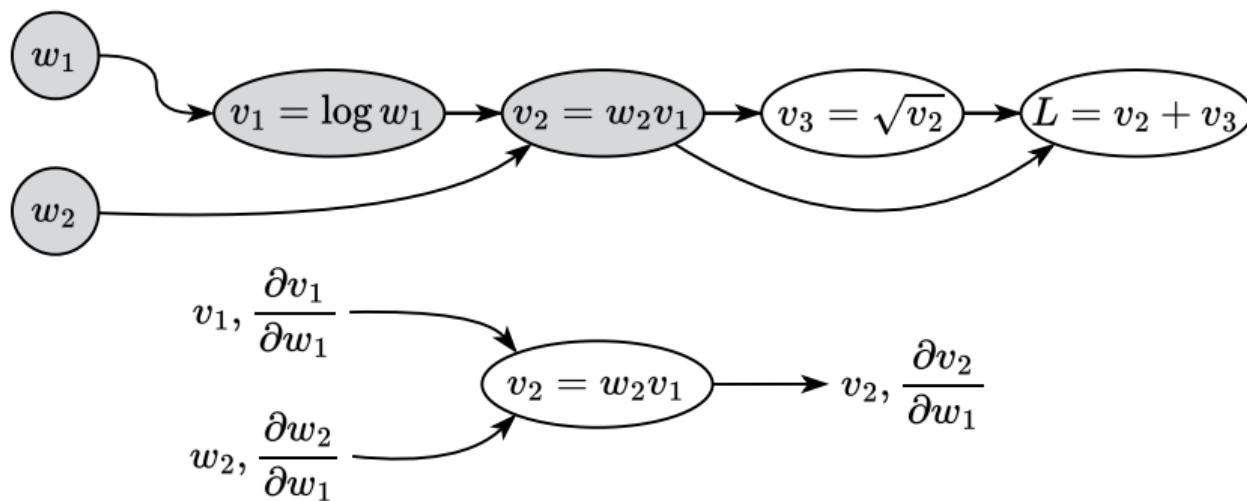


Рис. 14: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

## Функция

$$v_2 = w_2 v_1$$

# Прямой режим автоматического дифференцирования



Рис. 14: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

## Функция

$$v_2 = w_2 v_1$$

## Производная

$$\frac{\partial v_2}{\partial w_1} = \frac{\partial v_2}{\partial v_1} \frac{\partial v_1}{\partial w_1} + \frac{\partial v_2}{\partial w_2} \frac{\partial w_2}{\partial w_1} = w_2 \frac{\partial v_1}{\partial w_1} + v_1 \frac{\partial w_2}{\partial w_1}$$

## Прямой режим автоматического дифференцирования

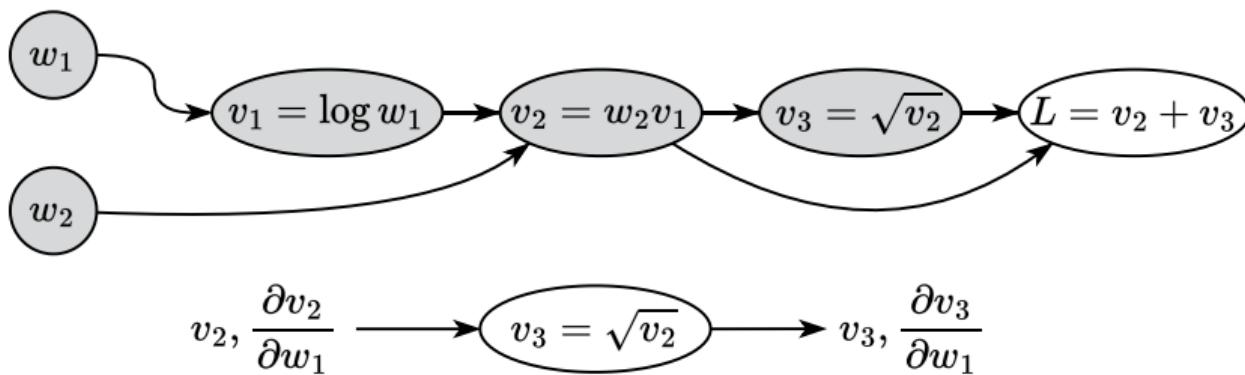


Рис. 15: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

## Прямой режим автоматического дифференцирования



Рис. 15: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

### Функция

$$v_3 = \sqrt{v_2}$$

# Прямой режим автоматического дифференцирования



Рис. 15: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$$v_3 = \sqrt{v_2}$$

Производная

$$\frac{\partial v_3}{\partial w_1} = \frac{\partial v_3}{\partial v_2} \frac{\partial v_2}{\partial w_1} = \frac{1}{2\sqrt{v_2}} \frac{\partial v_2}{\partial w_1}$$

## Прямой режим автоматического дифференцирования



Рис. 16: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

## Прямой режим автоматического дифференцирования



Рис. 16: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

### Функция

$$L = v_2 + v_3$$

## Прямой режим автоматического дифференцирования

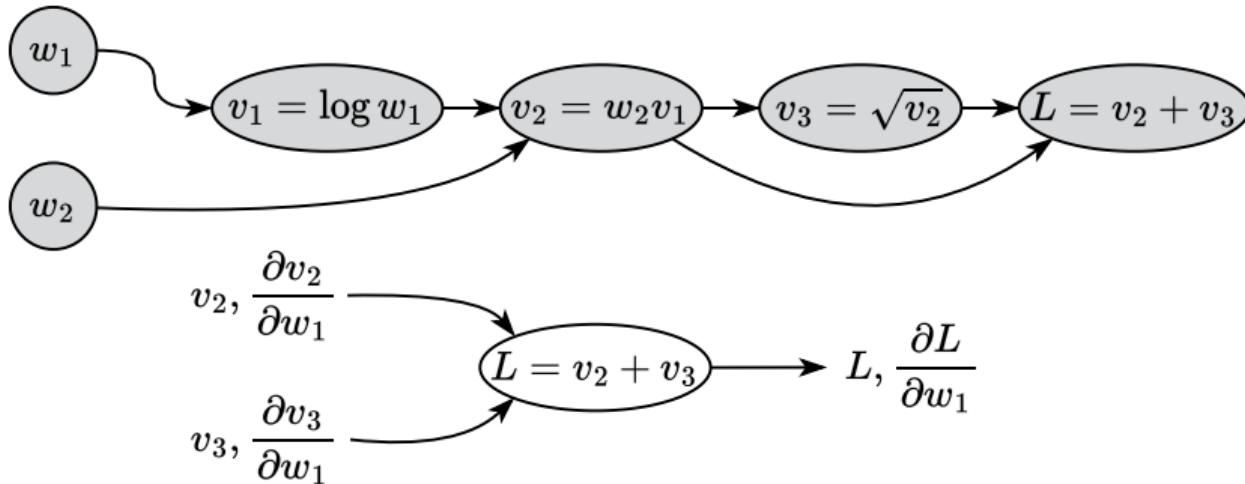


Рис. 16: Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$$L = v_2 + v_3$$

Производная

$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = \frac{\partial L}{\partial v_2} \frac{\partial v_2}{\partial w_1} + \frac{\partial L}{\partial v_3} \frac{\partial v_3}{\partial w_1} = 1 \frac{\partial v_2}{\partial w_1} + 1 \frac{\partial v_3}{\partial w_1}$$

## Обратный режим автоматического дифференцирования

Мы рассмотрим ту же функцию с вычислительным графом:

$$L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}$$

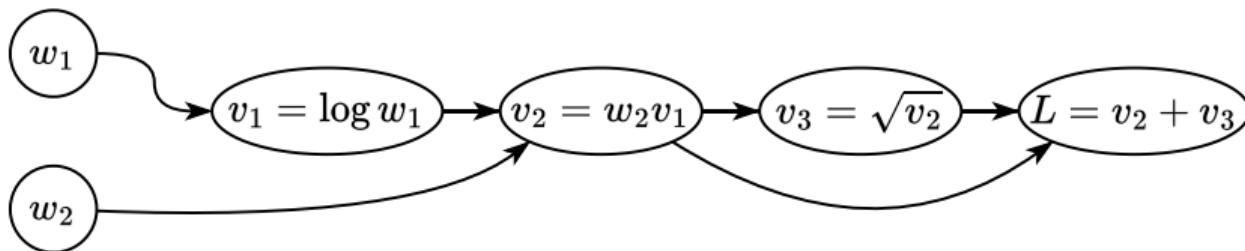


Рис. 17: Иллюстрация вычислительного графа для функции  $L(w_1, w_2)$

## Обратный режим автоматического дифференцирования

Мы рассмотрим ту же функцию с вычислительным графом:

$$L(w_1, w_2) = w_2 \log w_1 + \sqrt{w_2 \log w_1}$$



Рис. 17: Иллюстрация вычислительного графа для функции  $L(w_1, w_2)$

Предположим, что у нас есть некоторые значения параметров  $w_1, w_2$  и мы уже выполнили прямой проход (т.е. вычисление значений всех промежуточных узлов вычислительного графа). Предположим также, что мы как-то сохранили все промежуточные значения  $v_i$ . Давайте пойдем от конца графа к началу и вычислим производные  $\frac{\partial L}{\partial w_1}, \frac{\partial L}{\partial w_2}$ :

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 18: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 18: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 18: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

## Производные

$$\frac{\partial L}{\partial L} = 1$$

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования

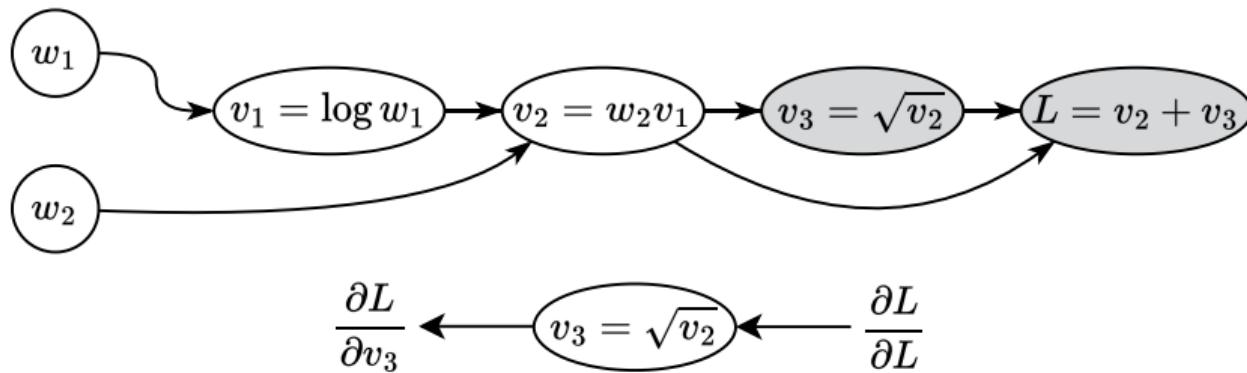


Рис. 19: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 19: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 19: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

## Производные

$$\frac{\partial L}{\partial v_3} = \frac{\partial L}{\partial L} \frac{\partial L}{\partial v_3} = \frac{\partial L}{\partial L} 1$$

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 20: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования

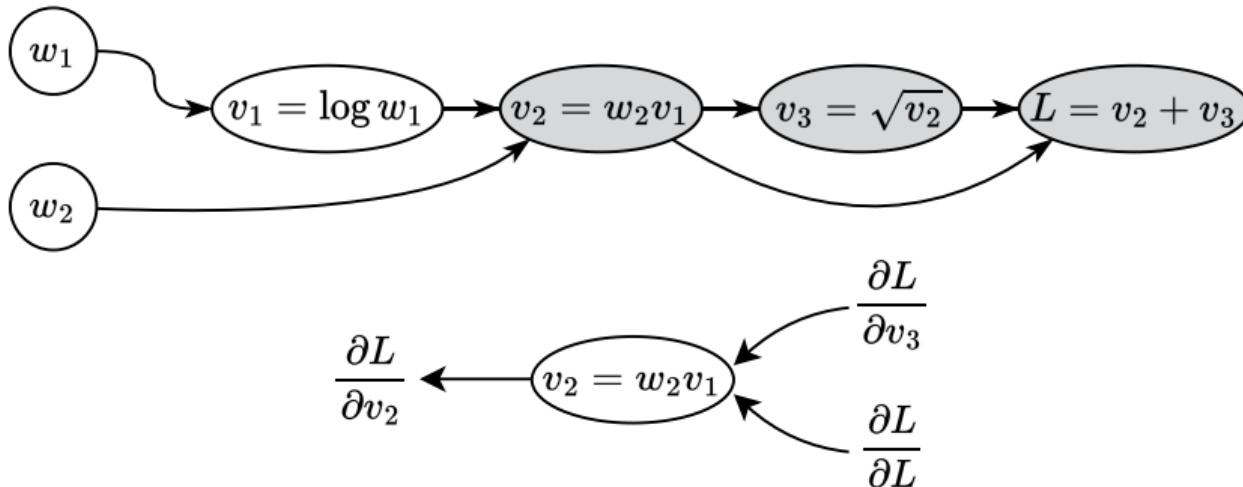


Рис. 20: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

## Производные

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 20: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

## Производные

$$\frac{\partial L}{\partial v_2} = \frac{\partial L}{\partial v_3} \frac{\partial v_3}{\partial v_2} + \frac{\partial L}{\partial L} \frac{\partial L}{\partial v_2} = \frac{\partial L}{\partial v_3} \frac{1}{2\sqrt{v_2}} + \frac{\partial L}{\partial L} 1$$

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 21: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 21: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 21: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

## Производные

$$\frac{\partial L}{\partial v_1} = \frac{\partial L}{\partial v_2} \frac{\partial v_2}{\partial v_1} = \frac{\partial L}{\partial v_2} w_2$$

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 22: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования

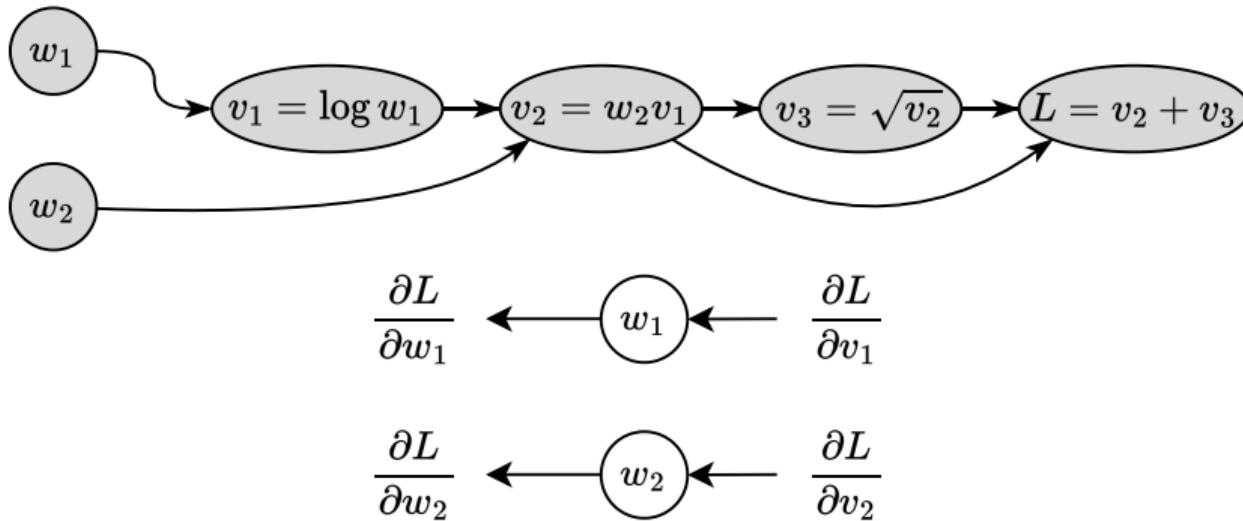


Рис. 22: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

## Пример обратного режима автоматического дифференцирования



Рис. 22: Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

## Производные

$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = \frac{\partial L}{\partial v_1} \frac{\partial v_1}{\partial w_1} = \frac{\partial L}{\partial v_1} \frac{1}{w_1} \quad \frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial v_2} \frac{\partial v_2}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial v_1} v_1$$

## Обратный режим автоматического дифференцирования

### Question

Обратите внимание, что для того же количества вычислений, что и в прямом режиме, мы получаем полный вектор градиента  $\nabla_w L$ . Какова стоимость ускорения?

# Обратный режим автоматического дифференцирования

## Question

Обратите внимание, что для того же количества вычислений, что и в прямом режиме, мы получаем полный вектор градиента  $\nabla_w L$ . Какова стоимость ускорения?

**Ответ** Обратите внимание, что для использования обратного режима AD вам нужно хранить все промежуточные вычисления из прямого прохода. Эта проблема может быть частично решена с помощью чекпоинтинга, при котором мы сохраняем только часть промежуточных значений, а остальные пересчитываем заново по мере необходимости. Это позволяет значительно уменьшить объём требуемой памяти при обучении больших моделей машинного обучения.

# Choose your fighter



Рис. 23: ♣ График иллюстрирует идею выбора между режимами автоматического дифференцирования. Размерность входа  $n = 100$  фиксирована, измерено время вычисления якобиана в зависимости от соотношения размерностей выхода и входа для разных размерностей выхода  $m$ .

## Чекпоинтинг

Анимация вышеуказанных подходов 

Пример использования контрольных точек градиента 

---

<sup>1</sup>ZeRO: Memory Optimizations Toward Training Trillion Parameter Models

## Чекпоинтинг

Анимация вышеуказанных подходов 

Пример использования контрольных точек градиента 

В качестве примера рассмотрим обучение **GPT-2**<sup>1</sup>:

- Активации в простом режиме могут занимать гораздо больше памяти: для последовательности длиной 1К и размера батча 32, 60 GB нужно для хранения всех промежуточных активаций.

---

<sup>1</sup>ZeRO: Memory Optimizations Toward Training Trillion Parameter Models

## Чекпоинтинг

Анимация вышеуказанных подходов 

Пример использования контрольных точек градиента 

В качестве примера рассмотрим обучение **GPT-2**<sup>1</sup>:

- Активации в простом режиме могут занимать гораздо больше памяти: для последовательности длиной 1К и размера батча 32, 60 GB нужно для хранения всех промежуточных активаций.
- Чекпоинтинг может снизить потребление до 8 GB, пересчитывая их (33% дополнительных вычислений)

---

<sup>1</sup>ZeRO: Memory Optimizations Toward Training Trillion Parameter Models

## Лекция 4. Выпуклость. Выпуклые множества. Выпуклые функции. Сильно выпуклые функции. Условие Поляка - Лоясиевича.

# Аффинное множество, конус, выпуклый конус, выпуклое множество, выпуклая комбинация, оболочка

## i Definition

- **Аффинное множество:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta \in \mathbb{R} \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$  (прямая, проходящая через две точки принадлежит  $A$ )

# Аффинное множество, конус, выпуклый конус, выпуклое множество, выпуклая комбинация, оболочка

## Definition

- **Аффинное множество:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta \in \mathbb{R} \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$  (прямая, проходящая через две точки принадлежит  $A$ )
- **Выпуклое множество:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta \in [0, 1] \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$  (для любых двух точек из множества отрезок между ними тоже принадлежит этому множеству)

# Аффинное множество, конус, выпуклый конус, выпуклое множество, выпуклая комбинация, оболочка

## Definition

- **Аффинное множество:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta \in \mathbb{R} \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$  (прямая, проходящая через две точки принадлежит  $A$ )
- **Выпуклое множество:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta \in [0, 1] \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$  (для любых двух точек из множества отрезок между ними тоже принадлежит этому множеству)
- **Конус:**  $\forall x \in S, \forall \alpha \geq 0 \Rightarrow \alpha x \in S$  (луч, проходящий через точку из начала координат, принадлежит множеству)

# Аффинное множество, конус, выпуклый конус, выпуклое множество, выпуклая комбинация, оболочка

## i Definition

- **Аффинное множество:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta \in \mathbb{R} \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$  (прямая, проходящая через две точки принадлежит  $A$ )
- **Выпуклое множество:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta \in [0, 1] \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$  (для любых двух точек из множества отрезок между ними тоже принадлежит этому множеству)
- **Конус:**  $\forall x \in S, \forall \alpha \geq 0 \Rightarrow \alpha x \in S$  (луч, проходящий через точку из начала координат, принадлежит множеству)
- **Выпуклый конус:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta_1, \theta_2 \geq 0 \Rightarrow \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 \in S$  (конус, который еще и выпуклый)

# Аффинное множество, конус, выпуклый конус, выпуклое множество, выпуклая комбинация, оболочка

## i Definition

- **Аффинное множество:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta \in \mathbb{R} \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$  (прямая, проходящая через две точки принадлежит  $A$ )
- **Выпуклое множество:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta \in [0, 1] \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$  (для любых двух точек из множества отрезок между ними тоже принадлежит этому множеству)
- **Конус:**  $\forall x \in S, \forall \alpha \geq 0 \Rightarrow \alpha x \in S$  (луч, проходящий через точку из начала координат, принадлежит множеству)
- **Выпуклый конус:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta_1, \theta_2 \geq 0 \Rightarrow \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 \in S$  (конус, который еще и выпуклый)
- **Выпуклая комбинация:**  $\sum_i \theta_i x_i$ , где  $\theta_i \geq 0, \sum_i \theta_i = 1$ .

# Аффинное множество, конус, выпуклый конус, выпуклое множество, выпуклая комбинация, оболочка

## i Definition

- **Аффинное множество:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta \in \mathbb{R} \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$  (прямая, проходящая через две точки принадлежит  $A$ )
- **Выпуклое множество:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta \in [0, 1] \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$  (для любых двух точек из множества отрезок между ними тоже принадлежит этому множеству)
- **Конус:**  $\forall x \in S, \forall \alpha \geq 0 \Rightarrow \alpha x \in S$  (луч, проходящий через точку из начала координат, принадлежит множеству)
- **Выпуклый конус:**  $\forall x_1, x_2 \in S, \forall \theta_1, \theta_2 \geq 0 \Rightarrow \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 \in S$  (конус, который еще и выпуклый)
- **Выпуклая комбинация:**  $\sum_i \theta_i x_i$ , где  $\theta_i \geq 0, \sum_i \theta_i = 1$ .
- **Выпуклая оболочка:**  $\text{conv}(S) = \{\sum_i \theta_i x_i | x_i \in S, \theta_i \geq 0, \sum_i \theta_i = 1\}$  (обвыпукливание множества: для любых двух точек из множества включить отрезок между ними).

## Проверка выпуклости множества и сохраняющие операции

- Как проверить выпуклость:

# Проверка выпуклости множества и сохраняющие операции

- Как проверить выпуклость:
  - По определению

# Проверка выпуклости множества и сохраняющие операции

- **Как проверить выпуклость:**
  - По определению
  - Операции, сохраняющие выпуклость:

# Проверка выпуклости множества и сохраняющие операции

- **Как проверить выпуклость:**

- По определению
- Операции, сохраняющие выпуклость:

1. Пусть  $S_x, S_y$  выпуклы, тогда  $S = \{s \mid s = c_1x + c_2y, x \in S_x, y \in S_y, c_1, c_2 \in \mathbb{R}\}$  выпукло

# Проверка выпуклости множества и сохраняющие операции

- **Как проверить выпуклость:**

- По определению
- Операции, сохраняющие выпуклость:

1. Пусть  $S_x, S_y$  выпуклы, тогда  $S = \{s \mid s = c_1x + c_2y, x \in S_x, y \in S_y, c_1, c_2 \in \mathbb{R}\}$  выпукло
2. Пересечение любого числа выпуклых множеств

# Проверка выпуклости множества и сохраняющие операции

- **Как проверить выпуклость:**

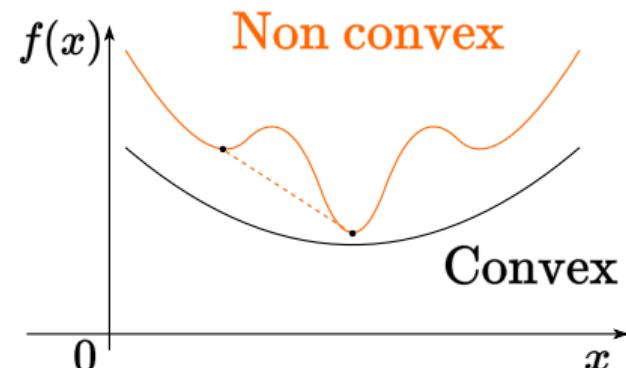
- По определению
- Операции, сохраняющие выпуклость:

1. Пусть  $S_x, S_y$  выпуклы, тогда  $S = \{s \mid s = c_1x + c_2y, x \in S_x, y \in S_y, c_1, c_2 \in \mathbb{R}\}$  выпукло
2. Пересечение любого числа выпуклых множеств
3.  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  выпукло  $\rightarrow f(S) = \{f(x) \mid x \in S\}$  выпукло ( $f(x) = \mathbf{A}x + \mathbf{b}$ )

# Выпуклые функции, неравенство Йенсена, надграфик

## i Definition

- **Выпуклая функция:**  $\forall x, y \in S \subseteq \mathbb{R}^n$ , где  $S$  выпукло,  $\theta \in [0, 1] \Rightarrow f(\theta x + (1 - \theta)y) \leq \theta f(x) + (1 - \theta)f(y)$ .



**Неравенство Йенсена:** если  $f$  выпукла,  $\theta_i \geq 0$ ,  $\sum_i \theta_i = 1$ , то

$$f\left(\sum_i \theta_i x_i\right) \leq \sum_i \theta_i f(x_i).$$

Рис. 24: Разница между выпуклой и невыпуклой функцией

## i Definition

Функция называется **строго выпуклой**, если в определении выпуклой функции неравенство строгое. Пример:  $f(x) = x^4$ .

# Выпуклые функции, неравенство Йенсена, надграфик

## i Definition

- **Выпуклая функция:**  $\forall x, y \in S \subseteq \mathbb{R}^n$ , где  $S$  выпукло,  $\theta \in [0, 1] \Rightarrow f(\theta x + (1 - \theta)y) \leq \theta f(x) + (1 - \theta)f(y)$ .
- **Надграфик (эпиграфик):**  $\text{epi}(f) = \{(x, t) : f(x) \leq t\}$ ;  $f$  выпукла  $\Leftrightarrow \text{epi}(f)$  выпукл.

**Неравенство Йенсена:** если  $f$  выпукла,  $\theta_i \geq 0$ ,  $\sum_i \theta_i = 1$ , то

$$f \left( \sum_i \theta_i x_i \right) \leq \sum_i \theta_i f(x_i).$$

## i Definition

Функция называется **строго выпуклой**, если в определении выпуклой функции неравенство строгое. Пример:  $f(x) = x^4$ .

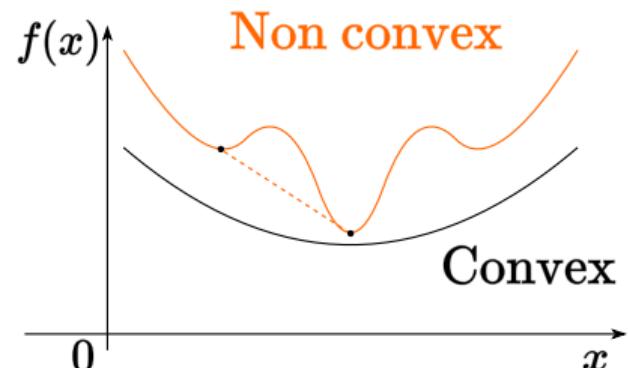


Рис. 24: Разница между выпуклой и невыпуклой функцией

**Пример. Функция максимального собственного значения матрицы является выпуклой.**

**i Example**

Покажите, что  $f(A) = \lambda_{max}(A)$  - выпукла, если  $A \in S_+^n$ .

# Дифференциальные критерии выпуклости (1-й и 2-й порядок)

## i Definition

- **Критерий 1-го порядка:** Пусть  $f : S \rightarrow \mathbb{R}$  дифференцируема, где  $S$  выпукла. Тогда

$$f(x) \text{ выпукла} \Leftrightarrow f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^\top (y - x) \quad \forall x, y.$$

# Дифференциальные критерии выпуклости (1-й и 2-й порядок)

## i Definition

- **Критерий 1-го порядка:** Пусть  $f : S \rightarrow \mathbb{R}$  дифференцируема, где  $S$  выпукла. Тогда

$$f(x) \text{ выпукла} \Leftrightarrow f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^\top (y - x) \quad \forall x, y.$$

- **Критерий 2-го порядка:** Пусть  $f : S \rightarrow \mathbb{R}$  дважды дифференцируема, где  $S$  выпукло. Тогда

$$f(x) \text{ выпукла} \Leftrightarrow \nabla^2 f(x) \succeq 0 \quad \forall x.$$

# Сильная выпуклость

## Definition

$f(x)$ , определенная на выпуклом множестве  $S \subseteq \mathbb{R}^n$ , называется  $\mu$ -сильно выпуклой (сильно выпуклой) на  $S$ , если:

$$f(\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1-\lambda)f(x_2) - \frac{\mu}{2} \lambda(1-\lambda) \|x_1 - x_2\|^2$$

для любых  $x_1, x_2 \in S$  и  $0 \leq \lambda \leq 1$  для некоторого  $\mu > 0$ .



Рис. 25: Сильно выпуклая функция не меньше некоторой параболы в любой точке

# Дифференциальные критерии сильной выпуклости (1-й и 2-й порядок)

## Definition

- **Критерий 1-го порядка:** Пусть  $f : S \rightarrow \mathbb{R}$  дифференцируема, где  $S$  выпукло. Тогда для некоторого  $\mu > 0$

$$f(x) \text{ } \mu\text{-сильно выпукла} \Leftrightarrow f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^\top (y - x) + \frac{\mu}{2} \|x - y\|^2 \quad \forall x, y.$$

# Дифференциальные критерии сильной выпуклости (1-й и 2-й порядок)

## Definition

- **Критерий 1-го порядка:** Пусть  $f : S \rightarrow \mathbb{R}$  дифференцируема, где  $S$  выпукло. Тогда для некоторого  $\mu > 0$

$$f(x) \text{ } \mu\text{-сильно выпукла} \Leftrightarrow f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^\top (y - x) + \frac{\mu}{2} \|x - y\|^2 \quad \forall x, y.$$

- **Критерий 2-го порядка:** Пусть  $f : S \rightarrow \mathbb{R}$  дважды дифференцируема, где  $S$  выпукло. Тогда для некоторого  $\mu > 0$

$$f(x) \text{ } \mu\text{-сильно выпукла} \Leftrightarrow \nabla^2 f(x) \succeq \mu I \quad \forall x.$$

## Пример. Квадратичная функция.

### Example

Покажите, что  $f(x) = x^\top Ax$ , где  $A \succeq 0$  - выпукла на  $\mathbb{R}^n$ . Является ли она сильно выпуклой?

## Условие Поляка-Лоясевича. Линейная сходимость градиентного спуска без выпуклости

Неравенство PL выполняется, если выполняется следующее условие для некоторого  $\mu > 0$ ,

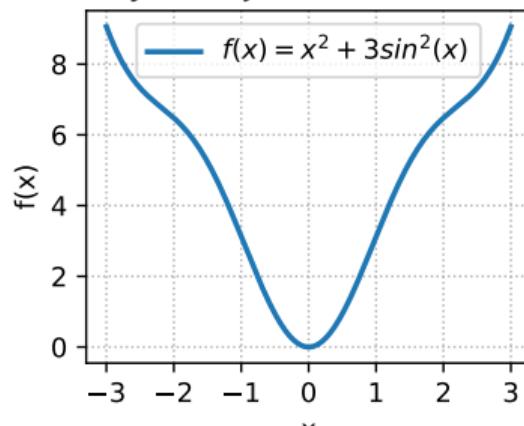
$$\|\nabla f(x)\|^2 \geq 2\mu(f(x) - f^*) \forall x$$

При выполнении условия PL алгоритм градиентного спуска имеет линейную сходимость.

Следующие функции удовлетворяют условию PL, но не являются выпуклыми.  Ссылка на код

$$f(x) = x^2 + 3 \sin^2(x)$$

Function, that satisfies  
Polyak-Lojasiewicz condition



## Условие Поляка-Лоясевича. Линейная сходимость градиентного спуска без выпуклости

Неравенство PL выполняется, если выполняется следующее условие для некоторого  $\mu > 0$ ,

$$\|\nabla f(x)\|^2 \geq 2\mu(f(x) - f^*) \forall x$$

При выполнении условия PL алгоритм градиентного спуска имеет линейную сходимость.

Следующие функции удовлетворяют условию PL, но не являются выпуклыми.  Ссылка на код

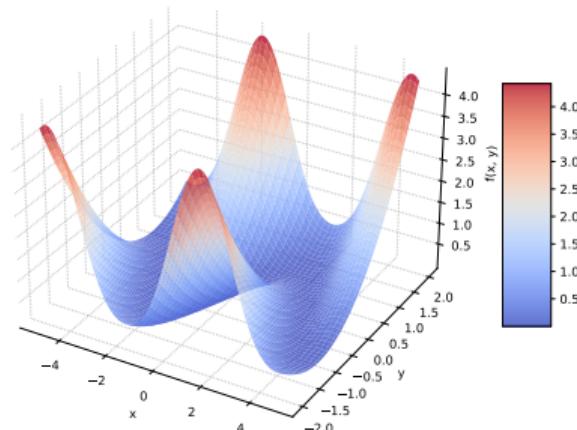
$$f(x) = x^2 + 3 \sin^2(x)$$

Function, that satisfies  
Polyak-Lojasiewicz condition



$$f(x, y) = \frac{(y - \sin x)^2}{2}$$

Non-convex PL function



# Метод наименьших квадратов aka линейная регрессия



Рис. 28: Иллюстрация

В задаче линейной регрессии у нас есть измерения  $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$  и  $y \in \mathbb{R}^m$  и мы ищем вектор  $\theta \in \mathbb{R}^n$  такой, что  $X\theta$  близок к  $y$ . Близость определяется как сумма квадратов разностей:

$$\sum_{i=1}^m (x_i^\top \theta - y_i)^2 = \|X\theta - y\|_2^2 \rightarrow \min_{\theta \in \mathbb{R}^n}$$

Например, рассмотрим набор данных, содержащий  $m$  пользователей, каждый из которых представлен  $n$  признаками. Каждая строка  $x_i^\top$  матрицы признаков  $X$  соответствует признакам пользователя  $i$ , а соответствующий элемент  $y_i$  вектора откликов  $y$  представляет собой измеряемую величину, которую мы хотим предсказать на основе  $x_i^\top$ , например, расходы на рекламу. Предсказание значения осуществляется по формуле  $x_i^\top \theta$ .

# Метод наименьших квадратов aka линейная регрессия<sup>2</sup>

1. Является ли эта задача выпуклой? Сильно выпуклой?

<sup>2</sup>Посмотрите на пример реальных данных линейной задачи метода наименьших квадратов

## $l_2$ -регуляризованный метод наименьших квадратов

Сделать задачу сильно-выпуклой, а не (строго-)выпуклой, можно, добавив  $l_2$ -штраф, также известный как регуляризация Тихонова,  $l_2$ -регуляризация или демпфирование весов.

$$\|X\theta - y\|_2^2 + \frac{\mu}{2} \|\theta\|_2^2 \rightarrow \min_{\theta \in \mathbb{R}^n}$$

Примечание: С этой модификацией целевая функция становится  $\mu$ -сильно выпуклой.

Посмотрите на код

# Наиболее важная разница между выпуклостью и сильной выпуклостью

$$f(x) = \frac{1}{2m} \|Ax - b\|_2^2 + \frac{\mu}{2} \|x\|_2^2 \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m$$

Convex least squares regression. m=50. n=100. mu=0.



Рис. 29: Выпуклая задача не имеет сходимости по аргументу

## Наиболее важная разница между выпуклостью и сильной выпуклостью

$$f(x) = \frac{1}{2m} \|Ax - b\|_2^2 + \frac{\mu}{2} \|x\|_2^2 \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m$$

Strongly convex least squares regression. m=50. n=100. mu=0.1.



Рис. 30: Но если добавить даже небольшую регуляризацию, вы гарантируете сходимость по аргументу

## Наиболее важная разница между выпуклостью и сильной выпуклостью

$$f(x) = \frac{1}{2m} \|Ax - b\|_2^2 + \frac{\mu}{2} \|x\|_2^2 \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m$$

Strongly convex least squares regression. m=100. n=50. mu=0.



Рис. 31: Другой способ обеспечить сходимость в предыдущей задаче - поменять местами значения размерности задачи

Для сходимости к решению с высокой точностью необходима сильная выпуклость (или выполнение условия Поляка-Лоясевича).

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



Рис. 32: Лишь небольшая точность может быть достигнута с сублинейной сходимостью

Для сходимости к решению с высокой точностью необходима сильная выпуклость (или выполнение условия Поляка-Лоясевича).

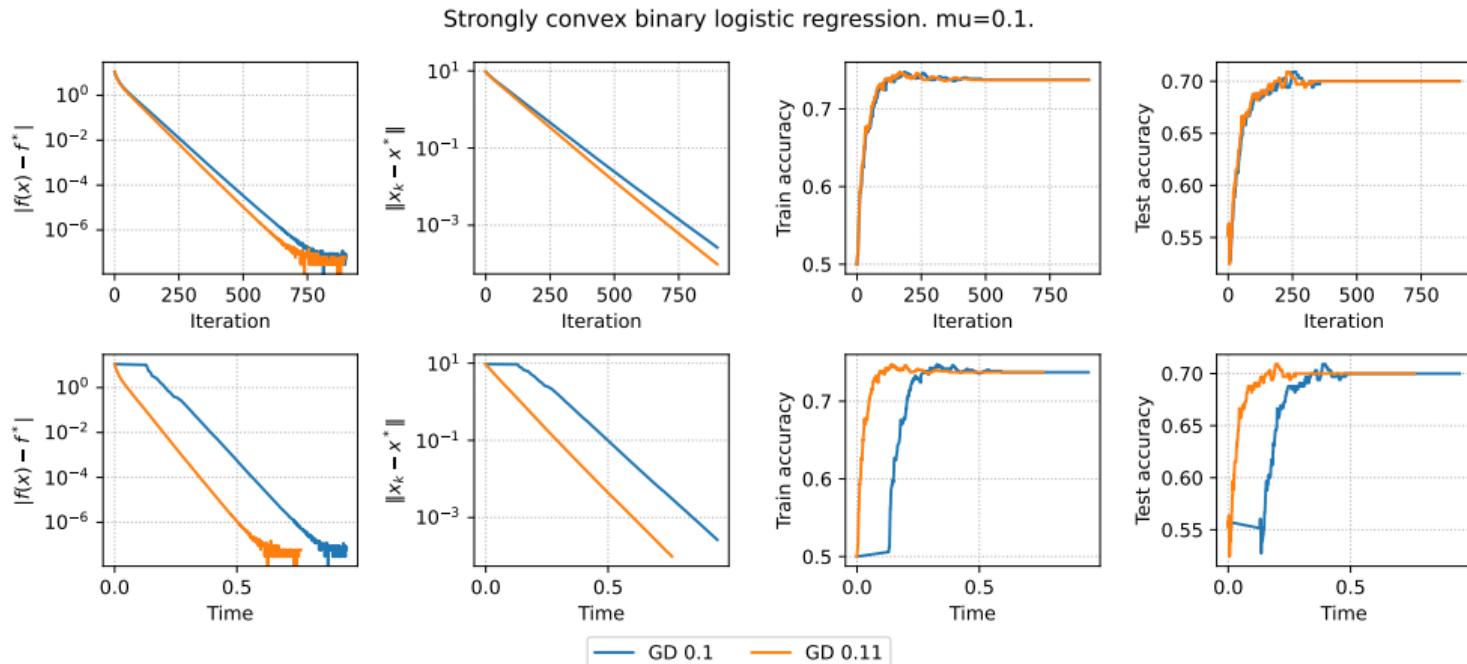


Рис. 33: Сильная выпуклость обеспечивает линейную сходимость

## Лекция 5. Условия оптимальности. Функция Лагранжа. Задачи с ограничениями. ККТ.

## Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in S}$$



Рис. 34: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

## Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in S}$$



Множество  $S$  обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

Рис. 34: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

## Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in S}$$



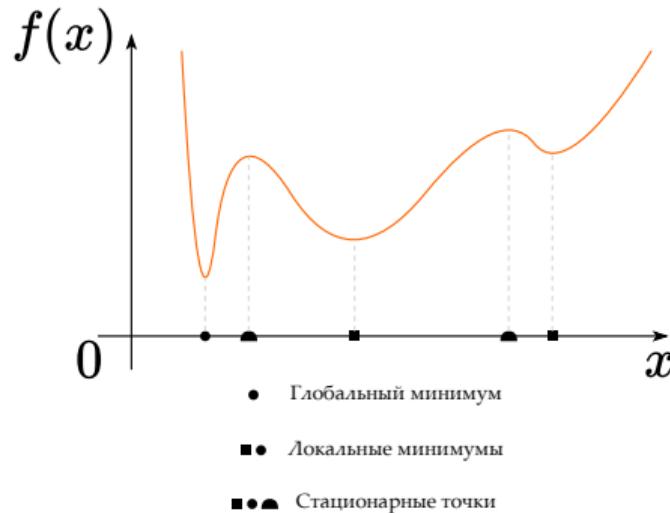
Множество  $S$  обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

Мы говорим, что задача имеет решение, если бюджетное множество, в котором достигается минимум или инфимум данной функции, **не пусто**:  $x^* \in S$ .

Рис. 34: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

## Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in S}$$



Множество  $S$  обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

Мы говорим, что задача имеет решение, если бюджетное множество, в котором достигается минимум или инфимум данной функции, **не пусто**:  $x^* \in S$ .

- Точка  $x^*$  является **глобальным минимумом**, если  $f(x^*) \leq f(x)$  для всех  $x \in S$ .

Рис. 34: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

## Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in S}$$



Множество  $S$  обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

Мы говорим, что задача имеет решение, если бюджетное множество, в котором достигается минимум или инфимум данной функции, **не пусто**:  $x^* \in S$ .

- Точка  $x^*$  является **глобальным минимумом**, если  $f(x^*) \leq f(x)$  для всех  $x \in S$ .
- Точка  $x^*$  является **локальным минимумом**, если существует окрестность  $N$  точки  $x^*$  такая, что  $f(x^*) \leq f(x)$  для всех  $x \in N \cap S$ .

Рис. 34: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

## Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in S}$$



Рис. 34: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

Множество  $S$  обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

Мы говорим, что задача имеет решение, если бюджетное множество, в котором достигается минимум или инфимум данной функции, **не пусто**:  $x^* \in S$ .

- Точка  $x^*$  является **глобальным минимумом**, если  $f(x^*) \leq f(x)$  для всех  $x \in S$ .
- Точка  $x^*$  является **локальным минимумом**, если существует окрестность  $N$  точки  $x^*$  такая, что  $f(x^*) \leq f(x)$  для всех  $x \in N \cap S$ .
- Точка  $x^*$  является **строгим локальным минимумом**, если существует окрестность  $N$  точки  $x^*$  такая, что  $f(x^*) < f(x)$  для всех  $x \in N \cap S$  с  $x \neq x^*$ .

## Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in S}$$



Рис. 34: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

Множество  $S$  обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

Мы говорим, что задача имеет решение, если бюджетное множество, в котором достигается минимум или инфимум данной функции, **не пусто**:  $x^* \in S$ .

- Точка  $x^*$  является **глобальным минимумом**, если  $f(x^*) \leq f(x)$  для всех  $x \in S$ .
- Точка  $x^*$  является **локальным минимумом**, если существует окрестность  $N$  точки  $x^*$  такая, что  $f(x^*) \leq f(x)$  для всех  $x \in N \cap S$ .
- Точка  $x^*$  является **строгим локальным минимумом**, если существует окрестность  $N$  точки  $x^*$  такая, что  $f(x^*) < f(x)$  для всех  $x \in N \cap S$  с  $x \neq x^*$ .
- Мы называем точку  $x^*$  **стационарной точкой** (или **критической точкой**), если  $\nabla f(x^*) = 0$ . Любой локальный минимум дифференцируемой функции должен быть стационарной точкой.

## Безусловная оптимизация. Необходимые и достаточные условия экстремума.

- **Необходимое условие оптимальности (I).**  $x^*$  - локальный минимум  $f(x)$  и  $f$  дифференцируема в некоторой окрестности  $x^* \Rightarrow \nabla f(x^*) = 0$

Заметим, что если  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$   
(гессиан положительно полуопределён), то мы не  
можем быть уверены, что  $x^*$  является локальным  
минимумом.

## Безусловная оптимизация. Необходимые и достаточные условия экстремума.

- **Необходимое условие оптимальности (I).**  $x^*$  - локальный минимум  $f(x)$  и  $f$  дифференцируема в некоторой окрестности  $x^*$   $\Rightarrow \nabla f(x^*) = 0$
- **Достаточные условия оптимальности (II).** Пусть  $\nabla^2 f$  непрерывна в открытой окрестности  $x^*$ , и выполнено  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$  - строгий локальный минимум  $f(x)$ .

Заметим, что если  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$   
(гессиан положительно полуопределён), то мы не  
можем быть уверены, что  $x^*$  является локальным  
минимумом.

## Безусловная оптимизация. Необходимые и достаточные условия экстремума.

- **Необходимое условие оптимальности (I).**  $x^*$  - локальный минимум  $f(x)$  и  $f$  дифференцируема в некоторой окрестности  $x^*$   $\Rightarrow \nabla f(x^*) = 0$
- **Достаточные условия оптимальности (II).** Пусть  $\nabla^2 f$  непрерывна в открытой окрестности  $x^*$ , и выполнено  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$  - строгий локальный минимум  $f(x)$ .
- Для выпуклых функций необходимое условие становится достаточным.

Заметим, что если  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$   
(гессиан положительно полуопределён), то мы не  
можем быть уверены, что  $x^*$  является локальным  
минимумом.

## Безусловная оптимизация. Необходимые и достаточные условия экстремума.

- **Необходимое условие оптимальности (I).**  $x^*$  - локальный минимум  $f(x)$  и  $f$  дифференцируема в некоторой окрестности  $x^*$   $\Rightarrow \nabla f(x^*) = 0$
- **Достаточные условия оптимальности (II).** Пусть  $\nabla^2 f$  непрерывна в открытой окрестности  $x^*$ , и выполнено  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$  - строгий локальный минимум  $f(x)$ .
- Для выпуклых функций необходимое условие становится достаточным.

Заметим, что если  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$   
(гессиан положительно полуопределён), то мы не  
можем быть уверены, что  $x^*$  является локальным  
минимумом.

## Безусловная оптимизация. Необходимые и достаточные условия экстремума.

- **Необходимое условие оптимальности (I).**  $x^*$  - локальный минимум  $f(x)$  и  $f$  дифференцируема в некоторой окрестности  $x^*$   $\Rightarrow \nabla f(x^*) = 0$
- **Достаточные условия оптимальности (II).** Пусть  $\nabla^2 f$  непрерывна в открытой окрестности  $x^*$ , и выполнено  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$  - строгий локальный минимум  $f(x)$ .
- Для выпуклых функций необходимое условие становится достаточным.

Заметим, что если  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$   
(гессиан положительно полуопределён), то мы не  
можем быть уверены, что  $x^*$  является локальным  
минимумом.

$$f(x, y) = (2x^2 - y)(x^2 - y)$$

## Безусловная оптимизация. Необходимые и достаточные условия экстремума.

- **Необходимое условие оптимальности (I).**  $x^*$  - локальный минимум  $f(x)$  и  $f$  дифференцируема в некоторой окрестности  $x^*$   $\Rightarrow \nabla f(x^*) = 0$
- **Достаточные условия оптимальности (II).** Пусть  $\nabla^2 f$  непрерывна в открытой окрестности  $x^*$ , и выполнено  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$  - строгий локальный минимум  $f(x)$ .
- Для выпуклых функций необходимое условие становится достаточным.

Заметим, что если  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$   
(гессиан положительно полуопределен), то мы не  
можем быть уверены, что  $x^*$  является локальным  
минимумом.

$$f(x, y) = (2x^2 - y)(x^2 - y)$$

Если точка начинает движение в начале координат  $(0, 0)$  вдоль любой прямой линии, то значение  $(2x^2 - y)(x^2 - y)$  будет увеличиваться в начале движения. Тем не менее,  $(0, 0)$  не является локальным минимумом функции, потому что движение вдоль параболы, такой как  $y = \sqrt{2}x^2$ , приведет к уменьшению значения функции.

## Безусловная оптимизация. Необходимые и достаточные условия экстремума.

- **Необходимое условие оптимальности (I).**  $x^*$  - локальный минимум  $f(x)$  и  $f$  дифференцируема в некоторой окрестности  $x^*$   $\Rightarrow \nabla f(x^*) = 0$
- **Достаточные условия оптимальности (II).** Пусть  $\nabla^2 f$  непрерывна в открытой окрестности  $x^*$ , и выполнено  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$  - **строгий локальный минимум**  $f(x)$ .
- Для выпуклых функций необходимое условие становится достаточным.

Заметим, что если  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$  (гессиан положительно полуопределен), то мы не можем быть уверены, что  $x^*$  является локальным минимумом.

$$f(x, y) = (2x^2 - y)(x^2 - y)$$

Если точка начинает движение в начале координат  $(0, 0)$  вдоль любой прямой линии, то значение  $(2x^2 - y)(x^2 - y)$  будет увеличиваться в начале движения. Тем не менее,  $(0, 0)$  не является локальным минимумом функции, потому что движение вдоль параболы, такой как  $y = \sqrt{2}x^2$ , приведет к уменьшению значения функции.

Non-convex PL function



## Условная оптимизация. Идея необходимого условия экстремума.

Вектор  $d \in \mathbb{R}^n$  является допустимым направлением в точке  $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$ , если малые шаги вдоль  $d$  не выводят нас за пределы  $S$ .

## Условная оптимизация. Идея необходимого условия экстремума.

Вектор  $d \in \mathbb{R}^n$  является допустимым направлением в точке  $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$ , если малые шаги вдоль  $d$  не выводят нас за пределы  $S$ .

Пусть  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  и функция  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ .

Предположим, что  $x^* \in S$  является точкой локального минимума для  $f$  над  $S$ , и предположим далее, что  $f$  непрерывно дифференцируема в окрестности  $x^*$ .

## Условная оптимизация. Идея необходимого условия экстремума.

Вектор  $d \in \mathbb{R}^n$  является допустимым направлением в точке  $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$ , если малые шаги вдоль  $d$  не выводят нас за пределы  $S$ .

Пусть  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  и функция  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ .

Предположим, что  $x^* \in S$  является точкой локального минимума для  $f$  над  $S$ , и предположим далее, что  $f$  непрерывно дифференцируема в окрестности  $x^*$ .

1. Тогда для любого допустимого направления  $d \in \mathbb{R}^n$  в  $x^*$  выполняется  $\nabla f(x^*)^\top d \geq 0$ .

## Условная оптимизация. Идея необходимого условия экстремума.

Вектор  $d \in \mathbb{R}^n$  является допустимым направлением в точке  $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$ , если малые шаги вдоль  $d$  не выводят нас за пределы  $S$ .

Пусть  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  и функция  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ .

Предположим, что  $x^* \in S$  является точкой локального минимума для  $f$  над  $S$ , и предположим далее, что  $f$  непрерывно дифференцируема в окрестности  $x^*$ .

1. Тогда для любого допустимого направления  $d \in \mathbb{R}^n$  в  $x^*$  выполняется  $\nabla f(x^*)^\top d \geq 0$ .
2. Если, кроме того,  $S$  выпукло, то

$$\nabla f(x^*)^\top (x - x^*) \geq 0, \forall x \in S.$$

## Условная оптимизация. Идея необходимого условия экстремума.

Вектор  $d \in \mathbb{R}^n$  является допустимым направлением в точке  $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$ , если малые шаги вдоль  $d$  не выводят нас за пределы  $S$ .

Пусть  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  и функция  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ .

Предположим, что  $x^* \in S$  является точкой локального минимума для  $f$  над  $S$ , и предположим далее, что  $f$  непрерывно дифференцируема в окрестности  $x^*$ .

1. Тогда для любого допустимого направления  $d \in \mathbb{R}^n$  в  $x^*$  выполняется  $\nabla f(x^*)^\top d \geq 0$ .
2. Если, кроме того,  $S$  выпукло, то

$$\nabla f(x^*)^\top (x - x^*) \geq 0, \forall x \in S.$$

## Условная оптимизация. Идея необходимого условия экстремума.

Вектор  $d \in \mathbb{R}^n$  является допустимым направлением в точке  $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$ , если малые шаги вдоль  $d$  не выводят нас за пределы  $S$ .

Пусть  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  и функция  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ .

Предположим, что  $x^* \in S$  является точкой локального минимума для  $f$  над  $S$ , и предположим далее, что  $f$  непрерывно дифференцируема в окрестности  $x^*$ .

1. Тогда для любого допустимого направления  $d \in \mathbb{R}^n$  в  $x^*$  выполняется  $\nabla f(x^*)^\top d \geq 0$ .
2. Если, кроме того,  $S$  выпукло, то

$$\nabla f(x^*)^\top (x - x^*) \geq 0, \forall x \in S.$$



Рис. 35: Общее условие локальной оптимальности первого порядка

## Важные свойства выпуклого случая

Следует отметить, что в **выпуклом** случае (то есть при **выпуклых**  $f$  и  $S$ ) необходимое условие становится достаточным.

## Важные свойства выпуклого случая

Следует отметить, что в **выпуклом** случае (то есть при **выпуклых**  $f$  и  $S$ ) необходимое условие становится достаточным.

Еще один важный результат для выпуклого случая звучит следующим образом: если  $f(x) : S \rightarrow \mathbb{R}$  — выпуклая функция, определённая на выпуклом множестве  $S$ , то:

## Важные свойства выпуклого случая

Следует отметить, что в **выпуклом** случае (то есть при **выпуклых**  $f$  и  $S$ ) необходимое условие становится достаточным.

Еще один важный результат для выпуклого случая звучит следующим образом: если  $f(x) : S \rightarrow \mathbb{R}$  — выпуклая функция, определённая на выпуклом множестве  $S$ , то:

- Любой локальный минимум является глобальным.

## Важные свойства выпуклого случая

Следует отметить, что в **выпуклом** случае (то есть при **выпуклых**  $f$  и  $S$ ) необходимое условие становится достаточным.

Еще один важный результат для выпуклого случая звучит следующим образом: если  $f(x) : S \rightarrow \mathbb{R}$  — выпуклая функция, определённая на выпуклом множестве  $S$ , то:

- Любой локальный минимум является глобальным.
- Множество локальных (= глобальных) минимумов  $S^*$  **выпукло**.

## Важные свойства выпуклого случая

Следует отметить, что в **выпуклом** случае (то есть при **выпуклых**  $f$  и  $S$ ) необходимое условие становится достаточным.

Еще один важный результат для выпуклого случая звучит следующим образом: если  $f(x) : S \rightarrow \mathbb{R}$  — выпуклая функция, определённая на выпуклом множестве  $S$ , то:

- Любой локальный минимум является глобальным.
- Множество локальных (= глобальных) минимумов  $S^*$  **выпукло**.
- Если  $f(x)$  — строго или сильно выпуклая функция, то  $S^*$  содержит только одну точку:  $S^* = \{x^*\}$ .

## Задачи с ограничениями-равенствами

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } h(x) &= 0 \end{aligned}$$

## Задачи с ограничениями-равенствами

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } h(x) &= 0 \end{aligned}$$

Мы попробуем проиллюстрировать подход к решению этой задачи через простой пример с  $f(x) = x_1 + x_2$  и  $h(x) = x_1^2 + x_2^2 - 2$ .

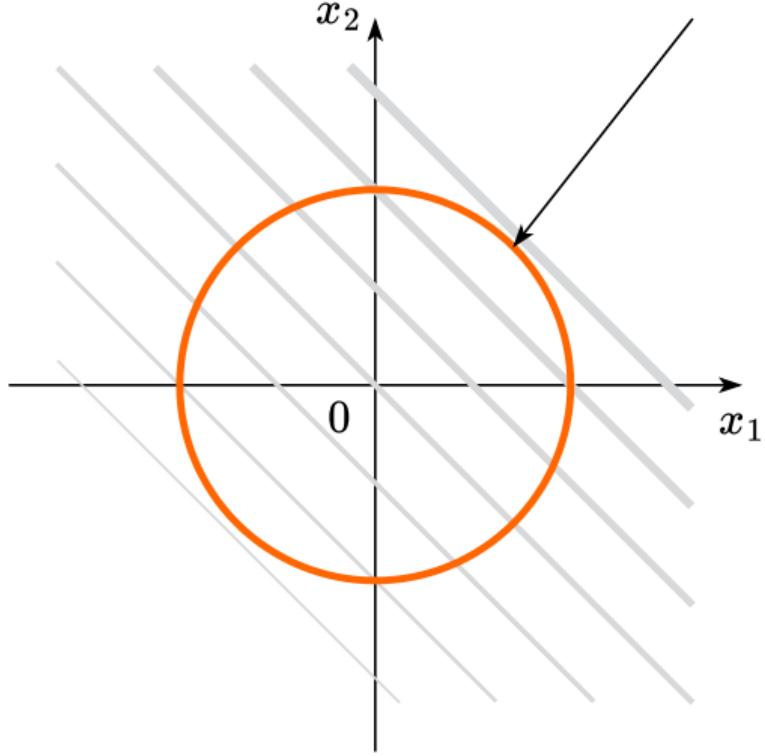
## Задачи с ограничениями-равенствами

$$f(x) = x_1 + x_2 \rightarrow \min_{x_1, x_2 \in \mathbb{R}^2}$$



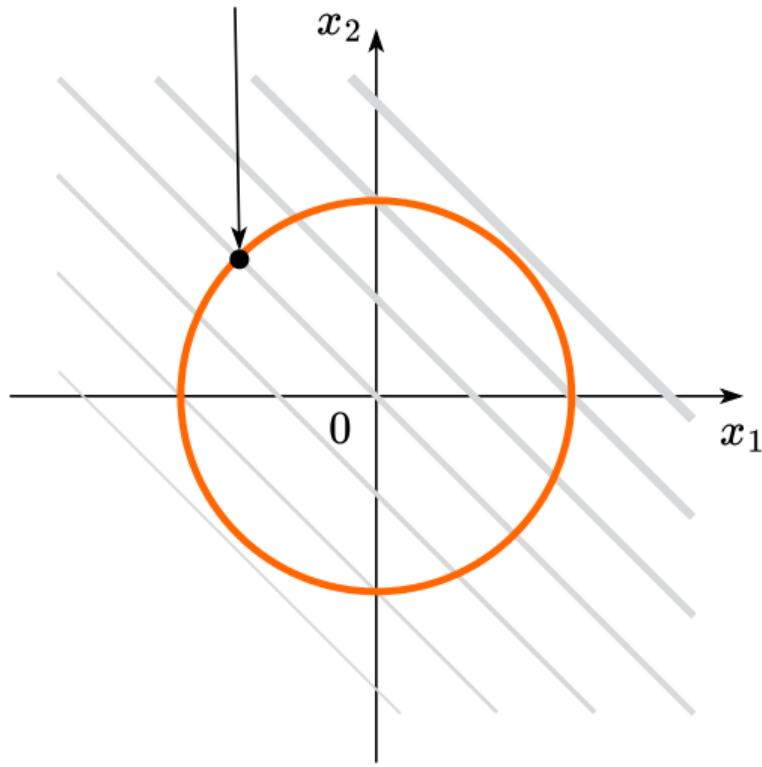
## Задачи с ограничениями-равенствами

$$h(x) = x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0$$



## Задачи с ограничениями-равенствами

Допустимая точка  $x_F$



## Задачи с ограничениями-равенствами



## Задачи с ограничениями-равенствами



## Задачи с ограничениями-равенствами

Мы хотим:  $f(x_F + \delta x) \leq f(x_F)$

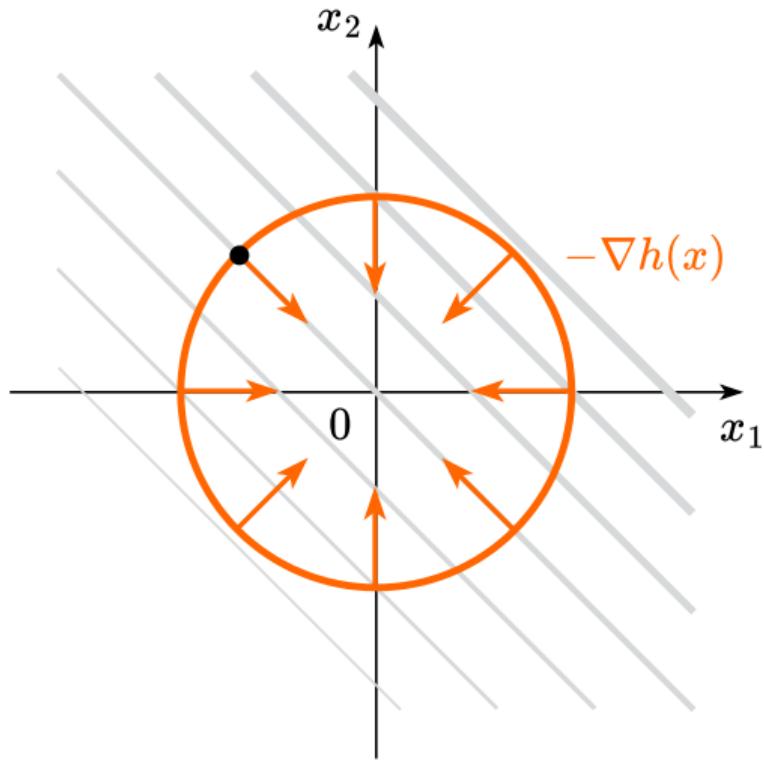


## Задачи с ограничениями-равенствами

$$\nabla h = (2x_1, 2x_2)^T$$



## Задачи с ограничениями-равенствами



## Задачи с ограничениями-равенствами



## Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от  $x_F$  вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

## Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от  $x_F$  вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

## Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от  $x_F$  вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x_F) \rangle > 0$$

## Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от  $x_F$  вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x_F) \rangle > 0$$

Предположим, что в процессе такого движения мы пришли в точку, где

## Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от  $x_F$  вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x_F) \rangle > 0$$

Предположим, что в процессе такого движения мы пришли в точку, где

$$-\nabla f(x) = \nu \nabla h(x)$$

## Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от  $x_F$  вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x_F) \rangle > 0$$

Предположим, что в процессе такого движения мы пришли в точку, где

$$-\nabla f(x) = \nu \nabla h(x)$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x) \rangle = \langle \delta x, \nu \nabla h(x) \rangle = 0$$

## Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от  $x_F$  вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x_F) \rangle > 0$$

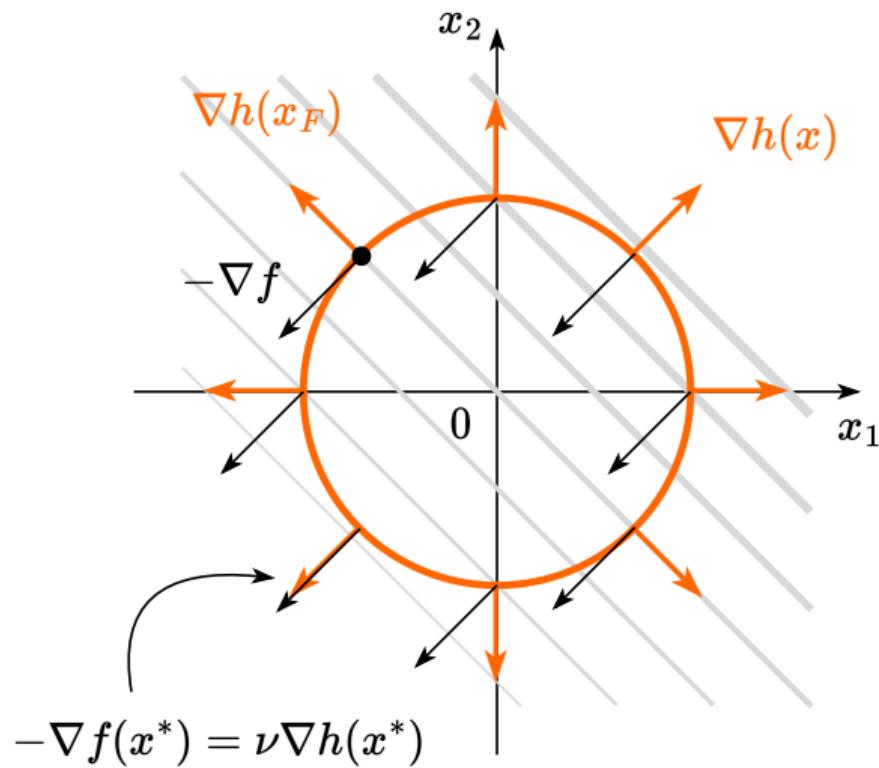
Предположим, что в процессе такого движения мы пришли в точку, где

$$-\nabla f(x) = \nu \nabla h(x)$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x) \rangle = \langle \delta x, \nu \nabla h(x) \rangle = 0$$

Тогда мы достигли такой точки допустимого множества, из которой нельзя уменьшить значение функции при допустимых малых сдвигах. Это и есть условие локального минимума в задаче с ограничением.

## Задачи с ограничениями-равенствами



## Лагранжиан и его связь с необходимыми условиями

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } h_i(x) &= 0, \quad i = 1, \dots, p \end{aligned} \tag{ECP}$$

$$L(x, \nu) = f(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x) = f(x) + \nu^\top h(x)$$

Пусть  $f(x)$  и  $h_i(x)$  дважды дифференцируемы в точке  $x^*$  и непрерывно дифференцируемы в некоторой окрестности  $x^*$ . Условия локального минимума для  $x \in \mathbb{R}^n, \nu \in \mathbb{R}^p$  записываются как

Необходимые условия

$$\nabla_x L(x^*, \nu^*) = 0$$

$$\nabla_\nu L(x^*, \nu^*) = 0$$

## Пример. Задача наименьших квадратов

### Example

Поставим задачу оптимизации и решим ее для линейной системы  $Ax = b$ ,  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  для трех случаев (предполагая, что матрица имеет полный ранг):

- $m < n$

## Задачи с ограничениями-неравенствами.

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$

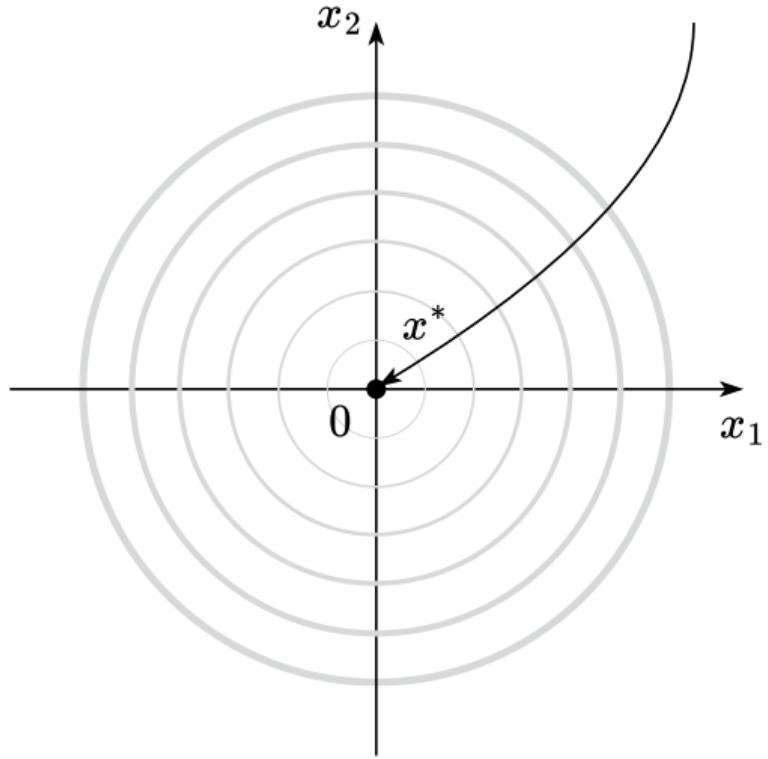
$$\text{s.t. } g(x) \leq 0$$

Рассмотрим на примере

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2 \quad g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1$$

## Задачи с ограничениями-неравенствами

$$x^* = \operatorname{argmin} f(x)$$



$$\text{Линии уровня } f(x) = x_1^2 + x_2^2 = C$$

## Задачи с ограничениями-неравенствами



Бюджетное множество  $g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1 \leq 0$

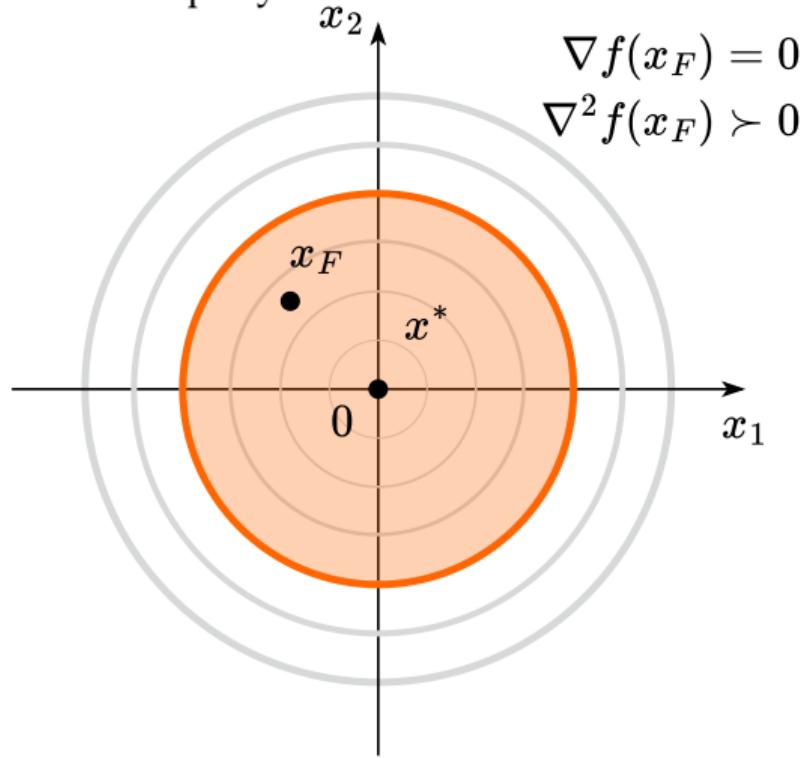
## Задачи с ограничениями-неравенствами

Как понять, что некоторая допустимая  
точка является локальным минимумом?



## Задачи с ограничениями-неравенствами

Просто! Проверим достаточные условия  
локального экстремума



## Задачи с ограничениями-неравенствами

Таким образом, если ограничения типа неравенства неактивны в условной задаче, то мы можем решать задачу без ограничений. Однако так бывает не всегда. Рассмотрим второй простой пример.

$$f(x) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 + 1)^2 \quad g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1$$

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } g(x) &\leq 0 \end{aligned}$$

## Задачи с ограничениями-неравенствами

$$f(x) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 + 1)^2 = C$$



## Задачи с ограничениями-неравенствами

Бюджетное множество  $g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1 \leq 0$



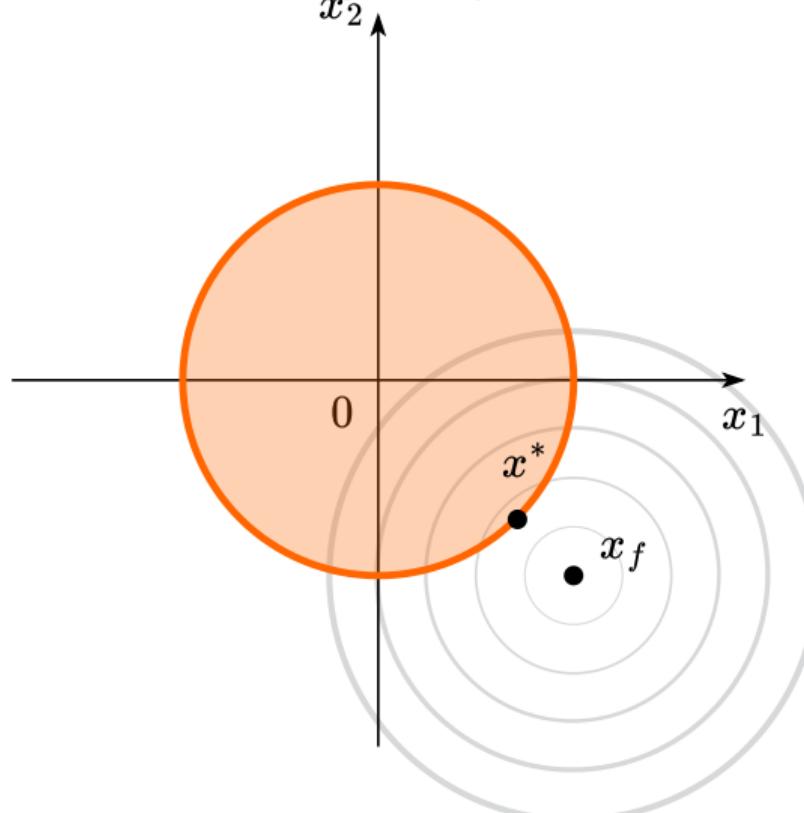
## Задачи с ограничениями-неравенствами

Как понять, что некоторая допустимая  
точка является локальным минимумом?



## Задачи с ограничениями-неравенствами

Не так просто! Даже градиент  
в оптимальной точке не равен нулю 😭

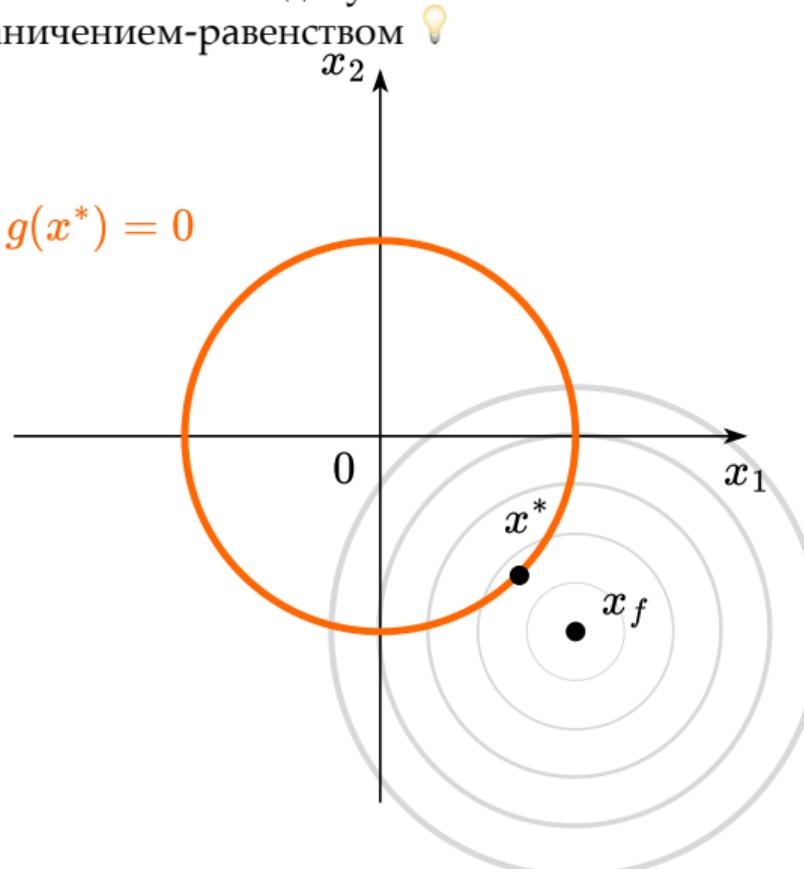


## Задачи с ограничениями-неравенствами

Фактически имеем задачу  
с ограничением-равенством

$x_2$

$$g(x^*) = 0$$

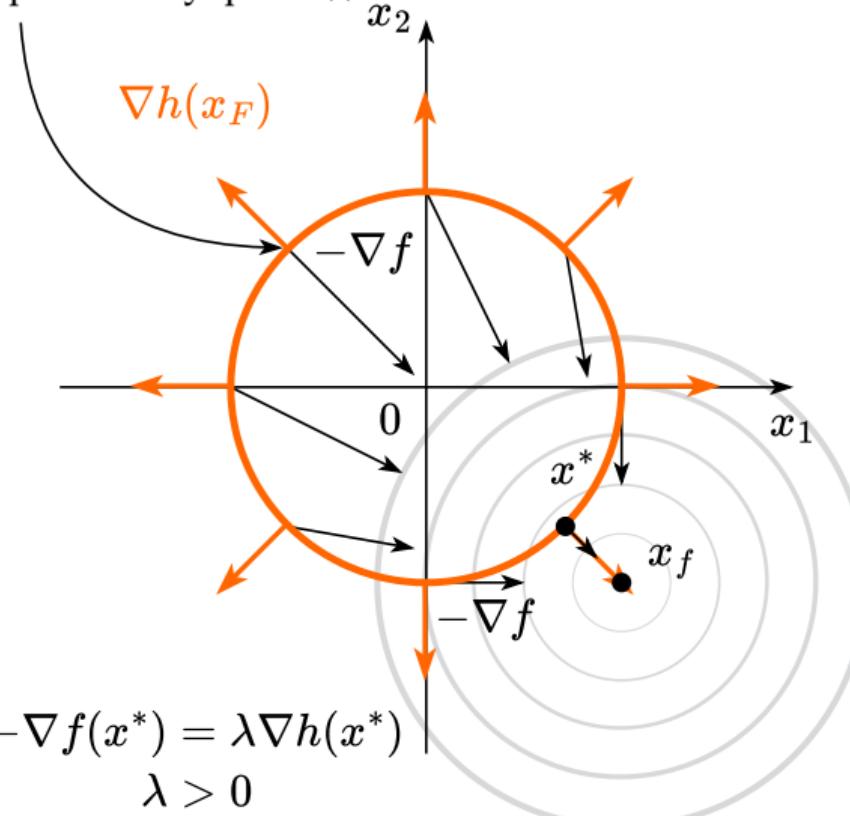


## Задачи с ограничениями-неравенствами



## Задачи с ограничениями-неравенствами

Не является локальным минимумом, т.к.  $-\nabla f(x)$  направлен внутрь бюджетного множества



## Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } g(x) &\leq 0 \end{aligned}$$

Хотим проверить, является ли некоторый  $x^*$  точкой локального минимума. Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$  неактивно:  $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) < 0$

## Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } g(x) &\leq 0 \end{aligned}$$

Хотим проверить, является ли некоторый  $x^*$  точкой локального минимума. Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$  неактивно:  $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) < 0$
- $\nabla f(x^*) = 0$

## Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } g(x) &\leq 0 \end{aligned}$$

Хотим проверить, является ли некоторый  $x^*$  точкой локального минимума. Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$  неактивно:  $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) < 0$
- $\nabla f(x^*) = 0$
- $\nabla^2 f(x^*) \succ 0$

## Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } g(x) &\leq 0 \end{aligned}$$

Хотим проверить, является ли некоторый  $x^*$  точкой локального минимума. Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$  неактивно:  $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) < 0$
- $\nabla f(x^*) = 0$
- $\nabla^2 f(x^*) \succ 0$

## Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } g(x) &\leq 0 \end{aligned}$$

Хотим проверить, является ли некоторый  $x^*$  точкой локального минимума. Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$  неактивно:  $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) < 0$
- $\nabla f(x^*) = 0$
- $\nabla^2 f(x^*) \succ 0$

$g(x) \leq 0$  активно:  $g(x^*) = 0$

- $g(x^*) = 0$

## Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } g(x) &\leq 0 \end{aligned}$$

Хотим проверить, является ли некоторый  $x^*$  точкой локального минимума. Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$  неактивно:  $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) < 0$
- $\nabla f(x^*) = 0$
- $\nabla^2 f(x^*) \succ 0$

$g(x) \leq 0$  активно:  $g(x^*) = 0$

- $g(x^*) = 0$
- Необходимые условия:  $-\nabla f(x^*) = \lambda \nabla g(x^*), \lambda > 0$

# Лагранжиан для задач с ограничениями-неравенствами

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$

$$\text{s.t. } g(x) \leq 0$$

Определим функцию Лагранжа:

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$$

Классические условия

Каруша-Куна-Таккера для локального  
минимума  $x^*$ , сформулированные при  
некоторых условиях *регулярности*:

# Лагранжиан для задач с ограничениями-неравенствами

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$

s.t.  $g(x) \leq 0$

Пусть  $x^*$  является локальным минимумом для описанной выше задачи и задача *регулярна*, то существует единственный множитель Лагранжа  $\lambda^*$  такой, что:

$$(1) \quad \nabla_x L(x^*, \lambda^*) = 0$$

$$(2) \quad \lambda^* \geq 0$$

$$(3) \quad \lambda^* g(x^*) = 0$$

$$(4) \quad g(x^*) \leq 0$$

Определим функцию Лагранжа:

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$$

Классические условия

Каруша-Куна-Таккера для локального минимума  $x^*$ , сформулированные при некоторых условиях *регулярности*:

## Общая формулировка

$$\begin{aligned} f_0(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } f_i(x) &\leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ h_j(x) &= 0, \quad j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если  $f_i(x), i = 0, \dots, n$  выпуклы, а  $h_j(x), j = 1, \dots, m$  аффинны, такая задача называется **задачей выпуклого программирования**.

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x)$$

Пусть  $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$  является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции  $f_0, f_i, h_i$  дифференцируемы.

- $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$

## Общая формулировка

$$\begin{aligned} f_0(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } f_i(x) &\leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ h_j(x) &= 0, \quad j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если  $f_i(x), i = 0, \dots, n$  выпуклы, а  $h_j(x), j = 1, \dots, m$  аффинны, такая задача называется **задачей выпуклого программирования**.

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x)$$

Пусть  $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$  является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции  $f_0, f_i, h_i$  дифференцируемы.

- $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\nabla_\nu L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$

## Общая формулировка

$$\begin{aligned} f_0(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } f_i(x) &\leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ h_j(x) &= 0, \quad j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если  $f_i(x), i = 0, \dots, n$  выпуклы, а  $h_j(x), j = 1, \dots, m$  аффинны, такая задача называется **задачей выпуклого программирования**.

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x)$$

Пусть  $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$  является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции  $f_0, f_i, h_i$  дифференцируемы.

- $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\nabla_\nu L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\lambda_i^* \geq 0, i = 1, \dots, m$

## Общая формулировка

$$\begin{aligned} f_0(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } f_i(x) &\leq 0, i = 1, \dots, m \\ h_j(x) &= 0, j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если  $f_i(x), i = 0, \dots, n$  выпуклы, а  $h_j(x), j = 1, \dots, m$  аффинны, такая задача называется **задачей выпуклого программирования**.

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x)$$

Пусть  $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$  является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции  $f_0, f_i, h_i$  дифференцируемы.

- $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\nabla_\nu L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\lambda_i^* \geq 0, i = 1, \dots, m$
- $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m$

## Общая формулировка

$$\begin{aligned} f_0(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } f_i(x) &\leq 0, i = 1, \dots, m \\ h_j(x) &= 0, j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если  $f_i(x), i = 0, \dots, n$  выпуклы, а  $h_j(x), j = 1, \dots, m$  аффинны, такая задача называется **задачей выпуклого программирования**.

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x)$$

Пусть  $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$  является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции  $f_0, f_i, h_i$  дифференцируемы.

- $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\nabla_\nu L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\lambda_i^* \geq 0, i = 1, \dots, m$
- $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m$
- $f_i(x^*) \leq 0, i = 1, \dots, m$

## Общая формулировка

$$\begin{aligned} f_0(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } f_i(x) &\leq 0, i = 1, \dots, m \\ h_j(x) &= 0, j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если  $f_i(x), i = 0, \dots, n$  выпуклы, а  $h_j(x), j = 1, \dots, m$  аффинны, такая задача называется **задачей выпуклого программирования**.

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x)$$

Пусть  $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$  является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции  $f_0, f_i, h_i$  дифференцируемы.

- $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\nabla_\nu L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\lambda_i^* \geq 0, i = 1, \dots, m$
- $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m$
- $f_i(x^*) \leq 0, i = 1, \dots, m$

## Общая формулировка

$$\begin{aligned} f_0(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } f_i(x) &\leq 0, i = 1, \dots, m \\ h_j(x) &= 0, j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если  $f_i(x), i = 0, \dots, n$  выпуклы, а  $h_j(x), j = 1, \dots, m$  аффинны, такая задача называется **задачей выпуклого программирования**.

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x)$$

Пусть  $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$  является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции  $f_0, f_i, h_i$  дифференцируемы.

- $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
  - $\nabla_\nu L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
  - $\lambda_i^* \geq 0, i = 1, \dots, m$
  - $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m$
  - $f_i(x^*) \leq 0, i = 1, \dots, m$
- **Условие Слейтера.** Если задачи выпуклого программирования существует точка  $x$  такая, что  $h(x) = 0$  и  $f_i(x) < 0$  (существует строго допустимая точка), и условия Каруша—Куна—Таккера становятся **необходимыми и достаточными**.

## Общая формулировка

$$\begin{aligned} f_0(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } f_i(x) &\leq 0, i = 1, \dots, m \\ h_j(x) &= 0, j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если  $f_i(x), i = 0, \dots, n$  выпуклы, а  $h_j(x), j = 1, \dots, m$  аффинны, такая задача называется **задачей выпуклого программирования**.

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x)$$

Пусть  $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$  является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции  $f_0, f_i, h_i$  дифференцируемы.

- $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
  - $\nabla_\nu L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
  - $\lambda_i^* \geq 0, i = 1, \dots, m$
  - $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m$
  - $f_i(x^*) \leq 0, i = 1, \dots, m$
- **Условие Слейтера.** Если задачи выпуклого программирования существует точка  $x$  такая, что  $h(x) = 0$  и  $f_i(x) < 0$  (существует строго допустимая точка), и условия Каруша—Куна—Таккера становятся **необходимыми и достаточными**.
  - Существуют и другие условия регулярности, но они дают только **необходимость ККТ**.

## Пример.

### Question

Функция  $f : E \rightarrow \mathbb{R}$  определена как

$$f(x) = \ln(-Q(x))$$

где  $E = \{x \in \mathbb{R}^n : Q(x) < 0\}$  и

$$Q(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax + b^\top x + c$$

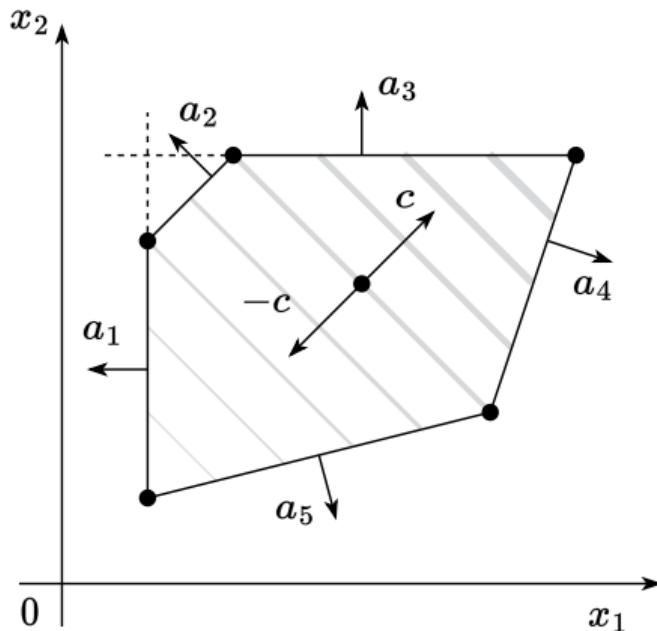
с  $A \in \mathbb{S}_{++}^n$ ,  $b \in \mathbb{R}^n$ ,  $c \in \mathbb{R}$ .

Найдите точку максимума  $x^*$  функции  $f$ .

## Лекция 6. Линейное программирование. Симплекс-метод.

# Постановка задачи линейного программирования

Задача ЛП в базовой (канонической) форме



$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\ \text{s.t. } & Ax \leq b \end{aligned} \tag{LP.Basic}$$

$c \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}^m, A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , где неравенства — покомпонентные.

# Постановка задачи линейного программирования

Задача ЛП в базовой (канонической) форме



$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x$$

$$\text{s.t. } Ax \leq b$$

(LP.Basic)

$c \in \mathbb{R}^n$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$ ,  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , где неравенства — покомпонентные.

Задача ЛП в стандартная форма.

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x$$

$$\text{s.t. } Ax = b$$

$$x_i \geq 0, i = 1, \dots, n$$

(LP.Standard)

$c \in \mathbb{R}^n$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$  и матрица  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ .

## Пример: задача о диете



Белки

Жиры

Углеводы

Калории

Витамин D

Количество на 100г

$W \in \mathbb{R}^{n \times p}$

$c \in \mathbb{R}^p$ , цена за 100г

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} c^T x$$

$r \in \mathbb{R}^n$ , ограничения

$$Wx \succeq r$$

$x \in \mathbb{R}^p$ , количество продуктов

$$x \succeq 0$$

## Пример: задача о диете



Белки

Жиры

Углеводы

Калории

Витамин D

Количество на 100г

$$W \in \mathbb{R}^{n \times p}$$

$$c \in \mathbb{R}^p, \text{ цена за 100г}$$

$$r \in \mathbb{R}^n, \text{ ограничения}$$

$$x \in \mathbb{R}^p, \text{ количество продуктов}$$

Представьте, что вам нужно составить план диеты из некоторых продуктов: бананы, пироги, курица, яйца, рыба. Каждый из продуктов имеет свой вектор питательных веществ. Таким образом, все питательные вещества можно представить в виде матрицы  $W$ .

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} c^T x$$

$$Wx \succeq r$$

$$x \succeq 0$$

## Пример: задача о диете



Белки

Жиры

Углеводы

Калории

Витамин D

Количество на 100г

$W \in \mathbb{R}^{n \times p}$

$c \in \mathbb{R}^p$ , цена за 100г

$r \in \mathbb{R}^n$ , ограничения

$x \in \mathbb{R}^p$ , количество продуктов

Представьте, что вам нужно составить план диеты из некоторых продуктов: бананы, пироги, курица, яйца, рыба. Каждый из продуктов имеет свой вектор питательных веществ. Таким образом, все питательные вещества можно представить в виде матрицы  $W$ . Предположим, что у нас есть вектор требований для каждого питательного вещества  $r \in \mathbb{R}^n$ . Нам нужно найти самую дешёвую диету, которая удовлетворяет всем требованиям:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} c^T x$$

$$Wx \succeq r$$

$$x \succeq 0$$

## Пример: задача о диете



Белки

Жиры

Углеводы

Калории

Витамин D

$c \in \mathbb{R}^p$ , цена за 100г

$r \in \mathbb{R}^n$ , ограничения

$x \in \mathbb{R}^p$ , количество продуктов

Количество на 100г

$W \in \mathbb{R}^{n \times p}$

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} c^T x$$

$$Wx \succeq r$$

$$x \succeq 0$$

Представьте, что вам нужно составить план диеты из некоторых продуктов: бананы, пироги, курица, яйца, рыба. Каждый из продуктов имеет свой вектор питательных веществ. Таким образом, все питательные вещества можно представить в виде матрицы  $W$ . Предположим, что у нас есть вектор требований для каждого питательного вещества  $r \in \mathbb{R}^n$ . Нам нужно найти самую дешёвую диету, которая удовлетворяет всем требованиям:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} c^T x$$

$$\text{s.t. } Wx \succeq r$$

$$x_i \geq 0, i = 1, \dots, p$$

Open In Colab

## Симплекс-метод. Основная идея.

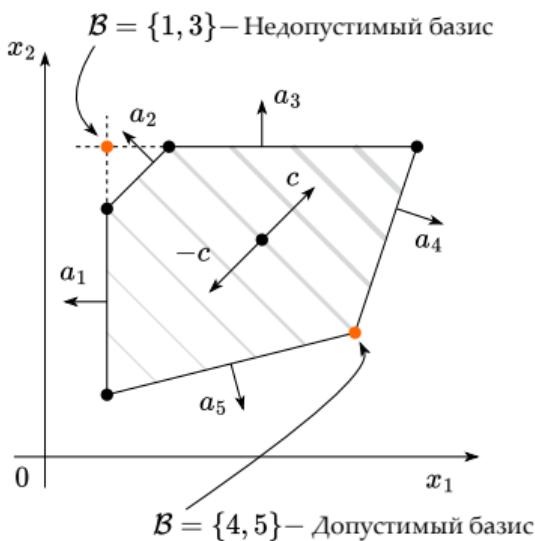


$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\ \text{s.t. } & Ax \leq b \end{aligned} \tag{LP.Basic}$$

- Определение: **базис**  $\mathcal{B}$  — это подмножество  $n$  (целых) чисел между 1 и  $m$ , такое что  $\text{rank } A_{\mathcal{B}} = n$ .

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

## Симплекс-метод. Основная идея.



$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\ \text{s.t. } & Ax \leq b \end{aligned} \tag{LP.Basic}$$

- Определение: **базис**  $\mathcal{B}$  — это подмножество  $n$  (целых) чисел между 1 и  $m$ , такое что  $\text{rank } A_{\mathcal{B}} = n$ .
- Обратите внимание, что мы можем связать подматрицу  $A_{\mathcal{B}}$  и соответствующую правую часть  $b_{\mathcal{B}}$  с базисом  $\mathcal{B}$ .

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

## Симплекс-метод. Основная идея.



$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\ \text{s.t. } & Ax \leq b \end{aligned} \tag{LP.Basic}$$

- Определение: **базис**  $\mathcal{B}$  — это подмножество  $n$  (целых) чисел между 1 и  $m$ , такое что  $\text{rank } A_{\mathcal{B}} = n$ .
- Обратите внимание, что мы можем связать подматрицу  $A_{\mathcal{B}}$  и соответствующую правую часть  $b_{\mathcal{B}}$  с базисом  $\mathcal{B}$ .
- Также мы можем получить точку пересечения всех этих гиперплоскостей из базиса:  $x_{\mathcal{B}} = A_{\mathcal{B}}^{-1} b_{\mathcal{B}}$ .

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

## Симплекс-метод. Основная идея.



$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\ \text{s.t. } & Ax \leq b \end{aligned} \tag{LP.Basic}$$

- Определение: **базис**  $\mathcal{B}$  — это подмножество  $n$  (целых) чисел между 1 и  $m$ , такое что  $\text{rank } A_{\mathcal{B}} = n$ .
- Обратите внимание, что мы можем связать подматрицу  $A_{\mathcal{B}}$  и соответствующую правую часть  $b_{\mathcal{B}}$  с базисом  $\mathcal{B}$ .
- Также мы можем получить точку пересечения всех этих гиперплоскостей из базиса:  $x_{\mathcal{B}} = A_{\mathcal{B}}^{-1} b_{\mathcal{B}}$ .
- Если  $Ax_{\mathcal{B}} \leq b$ , то базис  $\mathcal{B}$  является **допустимым**.

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

## Симплекс-метод. Основная идея.



$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\ \text{s.t. } & Ax \leq b \end{aligned} \tag{LP.Basic}$$

- Определение: **базис**  $\mathcal{B}$  — это подмножество  $n$  (целых) чисел между 1 и  $m$ , такое что  $\text{rank } A_{\mathcal{B}} = n$ .
- Обратите внимание, что мы можем связать подматрицу  $A_{\mathcal{B}}$  и соответствующую правую часть  $b_{\mathcal{B}}$  с базисом  $\mathcal{B}$ .
- Также мы можем получить точку пересечения всех этих гиперплоскостей из базиса:  $x_{\mathcal{B}} = A_{\mathcal{B}}^{-1} b_{\mathcal{B}}$ .
- Если  $Ax_{\mathcal{B}} \leq b$ , то базис  $\mathcal{B}$  является **допустимым**.
- Базис  $\mathcal{B}$  оптимальен, если  $x_{\mathcal{B}}$  является решением задачи LP.Inequality.

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

# Симплекс-метод. Основная идея.

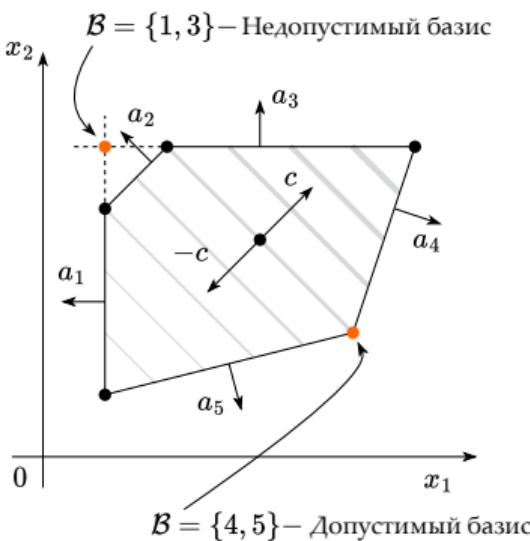


$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\ \text{s.t. } & Ax \leq b \end{aligned} \tag{LP.Basic}$$

- Определение: **базис**  $\mathcal{B}$  — это подмножество  $n$  (целых) чисел между 1 и  $m$ , такое что  $\text{rank } A_{\mathcal{B}} = n$ .
- Обратите внимание, что мы можем связать подматрицу  $A_{\mathcal{B}}$  и соответствующую правую часть  $b_{\mathcal{B}}$  с базисом  $\mathcal{B}$ .
- Также мы можем получить точку пересечения всех этих гиперплоскостей из базиса:  $x_{\mathcal{B}} = A_{\mathcal{B}}^{-1} b_{\mathcal{B}}$ .
- Если  $Ax_{\mathcal{B}} \leq b$ , то базис  $\mathcal{B}$  является **допустимым**.
- Базис  $\mathcal{B}$  оптимальен, если  $x_{\mathcal{B}}$  является решением задачи LP.Inequality.
- $x_{\mathcal{B}}$  называют **базисной точкой** или базисным решением (иногда её тоже называют **базисом**).

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

# Симплекс-метод. Основная идея.



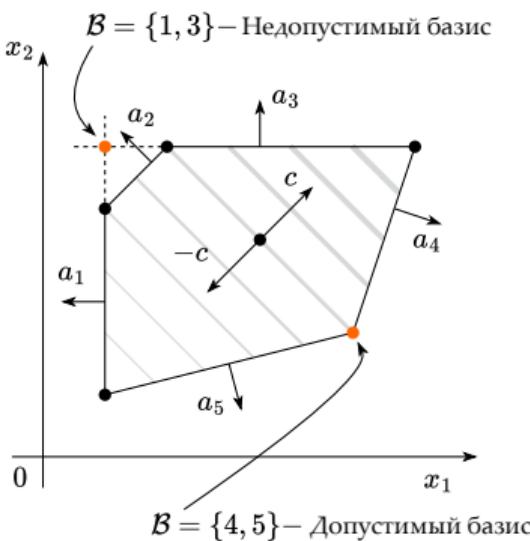
$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\ \text{s.t. } & Ax \leq b \end{aligned} \tag{LP.Basic}$$

- Определение: **базис**  $\mathcal{B}$  — это подмножество  $n$  (целых) чисел между 1 и  $m$ , такое что  $\text{rank } A_{\mathcal{B}} = n$ .
- Обратите внимание, что мы можем связать подматрицу  $A_{\mathcal{B}}$  и соответствующую правую часть  $b_{\mathcal{B}}$  с базисом  $\mathcal{B}$ .
- Также мы можем получить точку пересечения всех этих гиперплоскостей из базиса:  $x_{\mathcal{B}} = A_{\mathcal{B}}^{-1} b_{\mathcal{B}}$ .
- Если  $Ax_{\mathcal{B}} \leq b$ , то базис  $\mathcal{B}$  является **допустимым**.
- Базис  $\mathcal{B}$  оптимальен, если  $x_{\mathcal{B}}$  является решением задачи LP.Inequality.
- $x_{\mathcal{B}}$  называют **базисной точкой** или базисным решением (иногда её тоже называют **базисом**).

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

- Убедитесь, что вы находитесь в вершине.

# Симплекс-метод. Основная идея.



$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\ \text{s.t. } & Ax \leq b \end{aligned} \tag{LP.Basic}$$

- Определение: **базис**  $\mathcal{B}$  — это подмножество  $n$  (целых) чисел между 1 и  $m$ , такое что  $\text{rank } A_{\mathcal{B}} = n$ .
- Обратите внимание, что мы можем связать подматрицу  $A_{\mathcal{B}}$  и соответствующую правую часть  $b_{\mathcal{B}}$  с базисом  $\mathcal{B}$ .
- Также мы можем получить точку пересечения всех этих гиперплоскостей из базиса:  $x_{\mathcal{B}} = A_{\mathcal{B}}^{-1} b_{\mathcal{B}}$ .
- Если  $Ax_{\mathcal{B}} \leq b$ , то базис  $\mathcal{B}$  является **допустимым**.
- Базис  $\mathcal{B}$  оптимальен, если  $x_{\mathcal{B}}$  является решением задачи LP.Inequality.
- $x_{\mathcal{B}}$  называют **базисной точкой** или базисным решением (иногда её тоже называют **базисом**).

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

- Убедитесь, что вы находитесь в вершине.
- Проверьте оптимальность.

# Симплекс-метод. Основная идея.



$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\ \text{s.t. } & Ax \leq b \end{aligned} \tag{LP.Basic}$$

- Определение: **базис**  $\mathcal{B}$  — это подмножество  $n$  (целых) чисел между 1 и  $m$ , такое что  $\text{rank } A_{\mathcal{B}} = n$ .
- Обратите внимание, что мы можем связать подматрицу  $A_{\mathcal{B}}$  и соответствующую правую часть  $b_{\mathcal{B}}$  с базисом  $\mathcal{B}$ .
- Также мы можем получить точку пересечения всех этих гиперплоскостей из базиса:  $x_{\mathcal{B}} = A_{\mathcal{B}}^{-1} b_{\mathcal{B}}$ .
- Если  $Ax_{\mathcal{B}} \leq b$ , то базис  $\mathcal{B}$  является **допустимым**.
- Базис  $\mathcal{B}$  оптимальен, если  $x_{\mathcal{B}}$  является решением задачи LP.Inequality.
- $x_{\mathcal{B}}$  называют **базисной точкой** или базисным решением (иногда её тоже называют **базисом**).

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

- Убедитесь, что вы находитесь в вершине.
- Проверьте оптимальность.
- Если необходимо, перейдите к другой вершине (измените базис).

# Симплекс-метод. Основная идея.



$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\ \text{s.t. } & Ax \leq b \end{aligned}$$

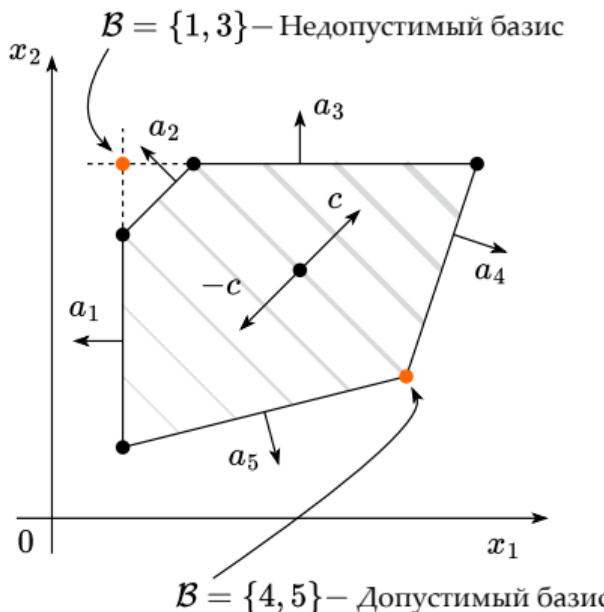
(LP.Basic)

- Определение: **базис**  $\mathcal{B}$  — это подмножество  $n$  (целых) чисел между 1 и  $m$ , такое что  $\text{rank } A_{\mathcal{B}} = n$ .
- Обратите внимание, что мы можем связать подматрицу  $A_{\mathcal{B}}$  и соответствующую правую часть  $b_{\mathcal{B}}$  с базисом  $\mathcal{B}$ .
- Также мы можем получить точку пересечения всех этих гиперплоскостей из базиса:  $x_{\mathcal{B}} = A_{\mathcal{B}}^{-1} b_{\mathcal{B}}$ .
- Если  $Ax_{\mathcal{B}} \leq b$ , то базис  $\mathcal{B}$  является **допустимым**.
- Базис  $\mathcal{B}$  оптимальен, если  $x_{\mathcal{B}}$  является решением задачи LP.Inequality.
- $x_{\mathcal{B}}$  называют **базисной точкой** или базисным решением (иногда её тоже называют **базисом**).

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

- Убедитесь, что вы находитесь в вершине.
- Проверьте оптимальность.
- Если необходимо, перейдите к другой вершине (измените базис).
- Повторяйте, пока не сойдёtesь.

# Оптимальный базис



## Оптимальный базис



Поскольку у нас есть базис, мы можем разложить наш целевой вектор  $c$  в этом базисе и найти скалярные коэффициенты  $\lambda_B$ :

$$\lambda_B^T A_B = c^T \leftrightarrow \lambda_B^T = c^T A_B^{-1}$$

# Оптимальный базис



Поскольку у нас есть базис, мы можем разложить наш целевой вектор  $c$  в этом базисе и найти скалярные коэффициенты  $\lambda_{\mathcal{B}}$ :

$$\lambda_{\mathcal{B}}^T A_{\mathcal{B}} = c^T \leftrightarrow \lambda_{\mathcal{B}}^T = c^T A_{\mathcal{B}}^{-1}$$

## i Theorem

Если все компоненты  $\lambda_{\mathcal{B}}$  неположительны и  $\mathcal{B}$  допустим, то  $\mathcal{B}$  оптimalен.

# Экспоненциальная сходимость



- Много прикладных задач может быть сформулировано в виде задач линейного программирования.

# Экспоненциальная сходимость



- Много прикладных задач может быть сформулировано в виде задач линейного программирования.
- Симплекс-метод прост в своей основе, но в худшем случае может работать экспоненциально долго.

## Примеры задач линейного программирования. Различные приложения

Посмотрите на различные практические приложения задач линейного программирования и симплекс-метода в  Related Collab Notebook.

## Лекция 7. Градиентный спуск. Скорости сходимости.

## Виды выпуклости



Рис. 57: Примеры выпуклых функций

# Гладкость

## Definition

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

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

# Гладкость

## Definition

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.

# Дифференциальные критерии $L$ -гладкости (1 и 2 порядка)

## Definition

- **Критерий 1-го порядка:** Пусть  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  дифференцируема. Тогда

$$f(x) \text{ } L\text{-гладкая} \Leftrightarrow |f(y) - f(x) - \langle \nabla f(x), y - x \rangle| \leq \frac{L}{2} \|y - x\|^2, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$$

# Дифференциальные критерии $L$ -гладкости (1 и 2 порядка)

## Definition

- **Критерий 1-го порядка:** Пусть  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  дифференцируема. Тогда

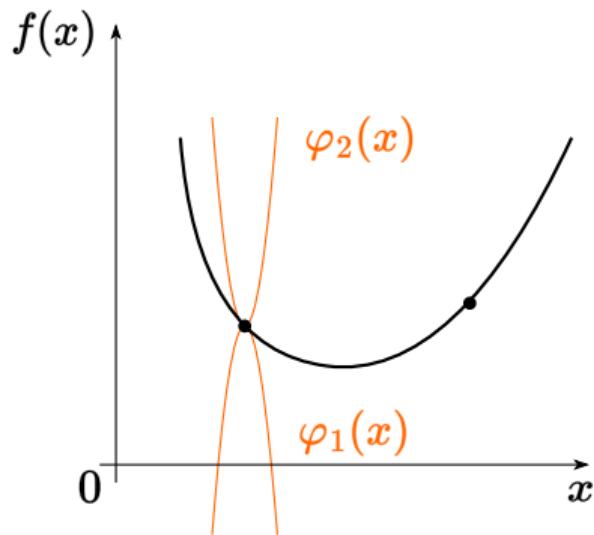
$$f(x) \text{ } L\text{-гладкая} \Leftrightarrow |f(y) - f(x) - \langle \nabla f(x), y - x \rangle| \leq \frac{L}{2} \|y - x\|^2, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$$

- **Критерий 2-го порядка:** Пусть  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  дифференцируема. Тогда

$$f(x) \text{ } L\text{-гладкая} \Leftrightarrow \nabla^2 f(x) \preceq LI, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

## Липшицева парабола

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



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

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

Рис. 58: Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

## Липшицева парабола

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

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



Рис. 58: Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

## Гладкость и сильная выпуклость



## 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 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:

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

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

## 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:

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

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 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:

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

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  $\alpha$ :



## 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

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

## 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

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

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

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

Условия оптимальности:

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



Рис. 59: Наискорейший спуск

Открыть в Colab ♣

# Сходимости в гладком выпуклом случае

## ■ Theorem

Предположим, что  $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  является **выпуклой и  $L$ -гладкой** функцией, для некоторого  $L > 0$ . Пусть  $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$  — последовательность итераций, сгенерированная методом градиентного спуска из точки  $x^0$  с постоянным шагом  $\alpha$ , удовлетворяющим  $0 < \alpha \leq \frac{1}{L}$ . Тогда для всех  $k \in \mathbb{N}$  справедливо:

$$f(x^k) - f(x) \leq \frac{\|x^0 - x\|^2}{2\alpha k}.$$

## Сходимость в гладком случае с выполнением условия PL

### i Theorem

Рассмотрим задачу

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x)$$

и предположим, что  $f$  является **PL-функцией с константой  $\mu$  и  $L$ -гладкой**, для некоторых  $L \geq \mu > 0$ . Рассмотрим последовательность  $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ , сгенерированную методом градиентного спуска из точки  $x^0$  с постоянным шагом  $\alpha$ , удовлетворяющим  $0 < \alpha \leq \frac{1}{L}$ . Пусть  $f^* = \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x)$ . Тогда:

$$f(x^k) - f^* \leq (1 - \alpha\mu)^k (f(x^0) - f^*).$$

### i Уведомление

Так как для сильно-выпуклой дифференцируемой функции выполняется условие PL, на такой задача сходимость будет такой же.

# Код

Примеры:  code snippet.