ЦЕНТРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

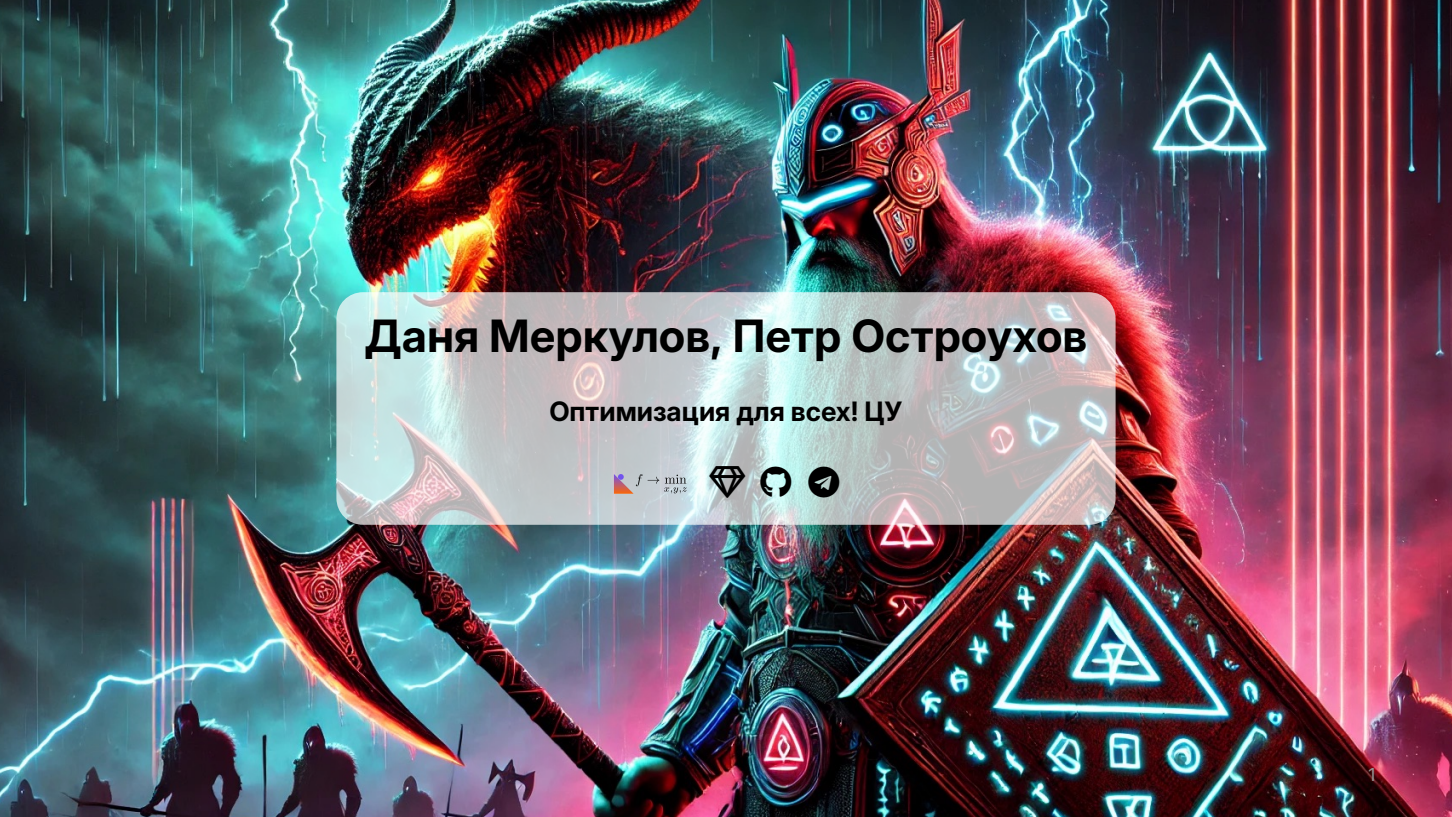
Градиентный спуск

МЕТОДЫ ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

НЕДЕЛЯ 7

Даня Меркулов

Пётр Остроухов


Даня Меркулов, Петр Остроухов
Оптимизация для всех! ЦУ
$f \to \min_{x,y,z}$

Повторение

Виды выпуклости

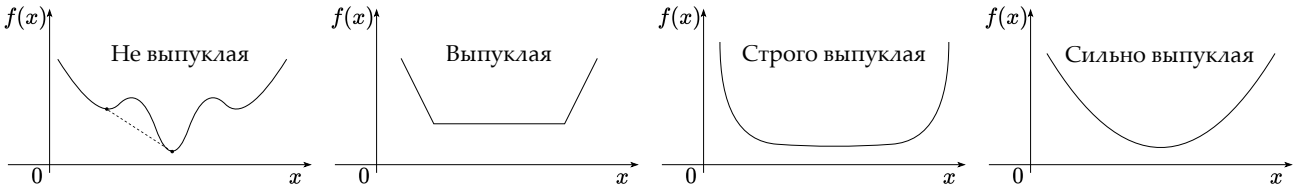


Рисунок 1. Примеры выпуклых функций

Гладкость

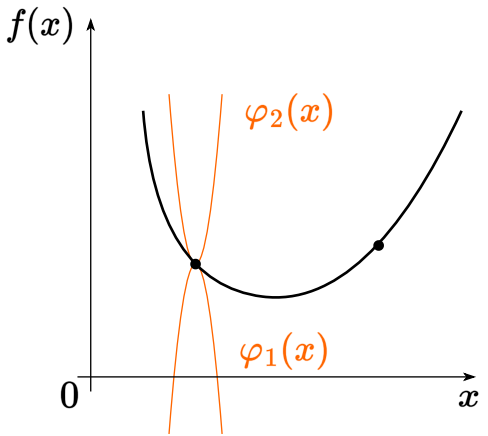


Рисунок 2. Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

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

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

Гладкость

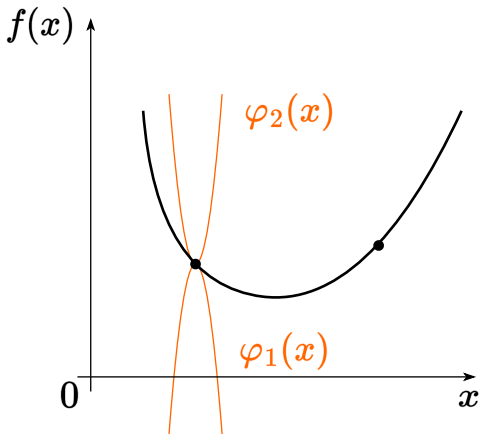


Рисунок 2. Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

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

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

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

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

Гладкость

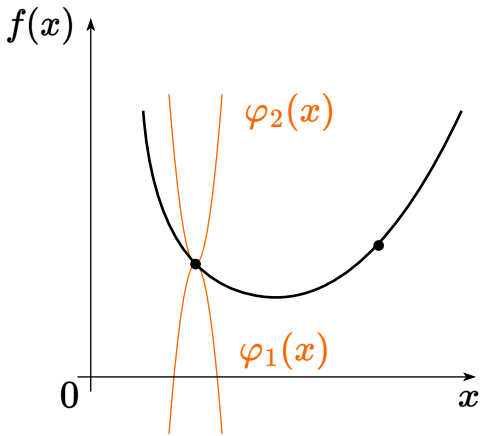


Рисунок 2. Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

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

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

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

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

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

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

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

Гладкость

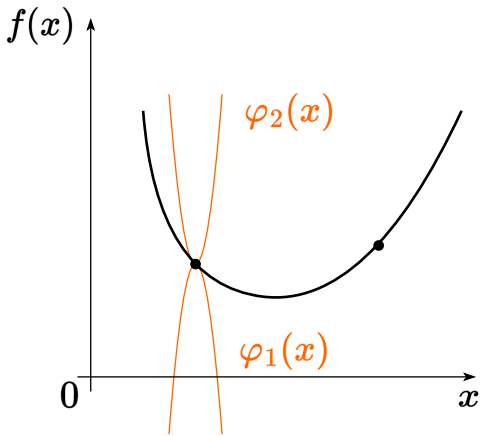


Рисунок 2. Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

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

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

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

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

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

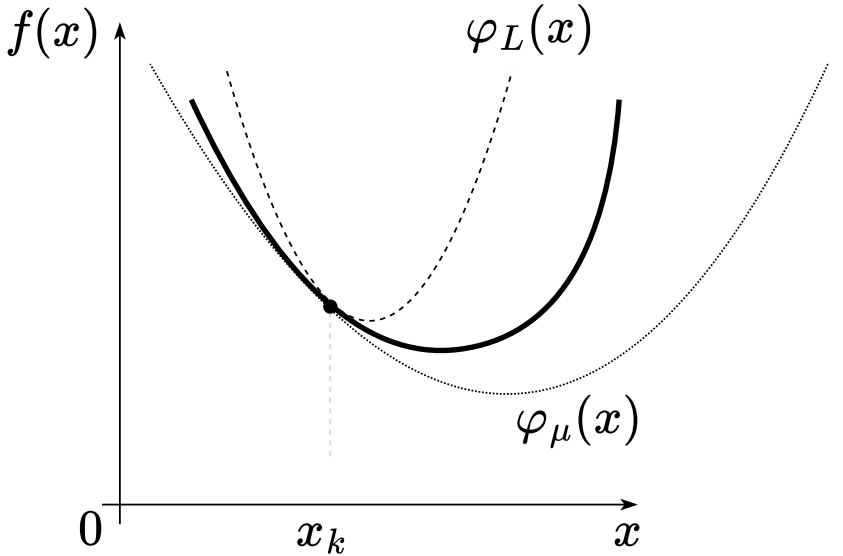
$$\varphi_1(x) = f(x_0) + \langle f(x_0), x - x_0\rangle - \frac{L}{2}\|x - x_0\|^2$$

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

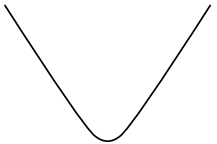
Это две параболы, и для них верно, что

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

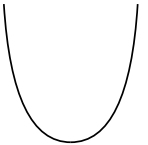
Гладкость и сильная выпуклость



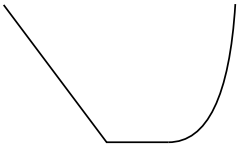
Гладкость и сильная выпуклость



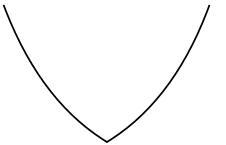
Гладкая
Выпуклая



Гладкая
μ - сильно выпуклая



Негладкая
Выпуклая



Негладкая
μ - сильно выпуклая

Градиентный спуск

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 $\alpha \to 0$:

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

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 $\alpha \to 0$:

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

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:

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

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 $\alpha \to 0$:

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

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:

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

Таким образом, направление антиградиента

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

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

Направление локального наискорейшего спуска

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

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

Хотим, чтобы h было направлением убывания:

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

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

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

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

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

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

Также из неравенства Коши–Буняковского получаем:

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

Таким образом, направление антиградиента

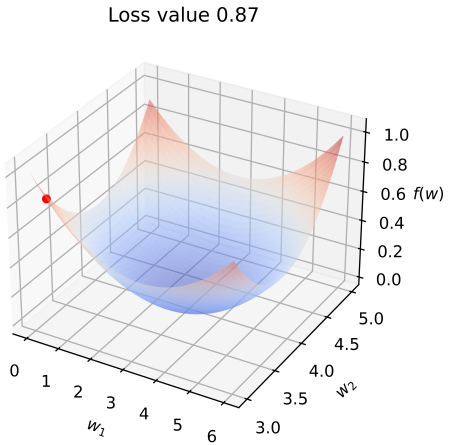
$$h = \arg\min_h \langle \nabla f(x), h \rangle = -\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|_2}$$

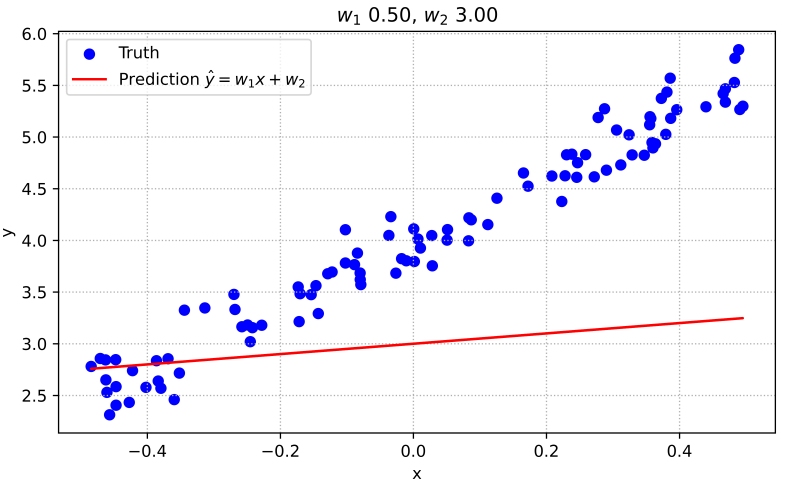
представляет собой направление **наискорейшего локального** убывания функции f.
Итерация метода имеет вид:

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

Сходимость алгоритма градиентного спуска

Код для построения анимации ниже. Сходимость существенно зависит от выбора шага α:





Точный линейный поиск (метод наискорейшего спуска)

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

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 α_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)

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

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 α_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)

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

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 α_k даёт

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

Условия оптимальности:

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

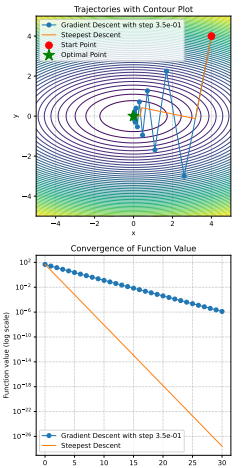


Рисунок 3.
Наискорейший спуск

Открыть в Colab ♣

Экстра: Дифференциальное уравнение градиентного потока

Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

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

Экстра: Дифференциальное уравнение градиентного потока

Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

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

Дискретизируем его на равномерной сетке с шагом α:

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

Экстра: Дифференциальное уравнение градиентного потока

Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

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

Дискретизируем его на равномерной сетке с шагом α:

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

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

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

являющееся точной формулой обновления градиентного спуска.
Открыть в Colab ♣

Экстра: Дифференциальное уравнение градиентного потока

Рассмотрим дифференциальное уравнение градиентного потока:

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

Дискретизируем его на равномерной сетке с шагом α:

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

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

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

являющееся точной формулой обновления градиентного спуска.
Открыть в Colab ♣

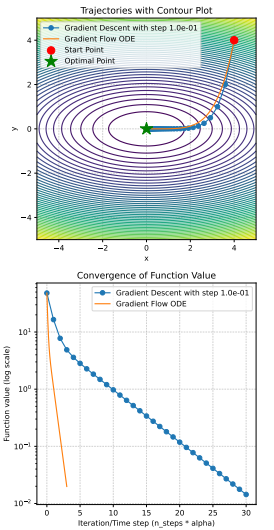


Рисунок 4. Траектория градиентного потока