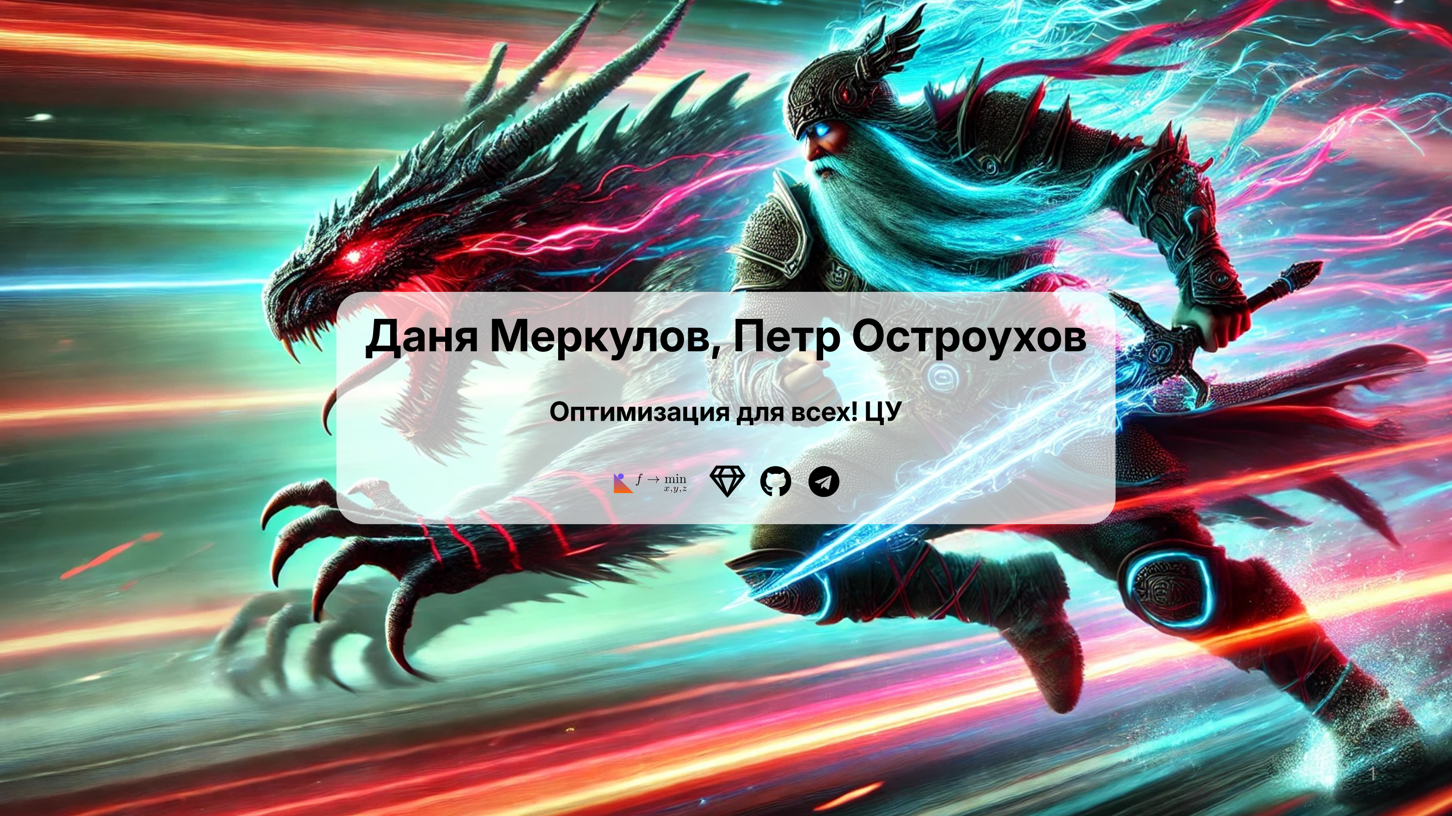


Даня Меркулов, Петр Остроухов

Оптимизация для всех! ЦУ

$f \to \min\limits_{x,y,z}$

Лекция 1. Вспоминаем линал, скорости сходимости.

Скорость сходимости

Линейная сходимость последовательности r_k определяется следующим образом:

Definition

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

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

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

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:

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

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:

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

Последовательность называется **сходящейся квадратично**, если

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

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 ($x = 1.23456$).

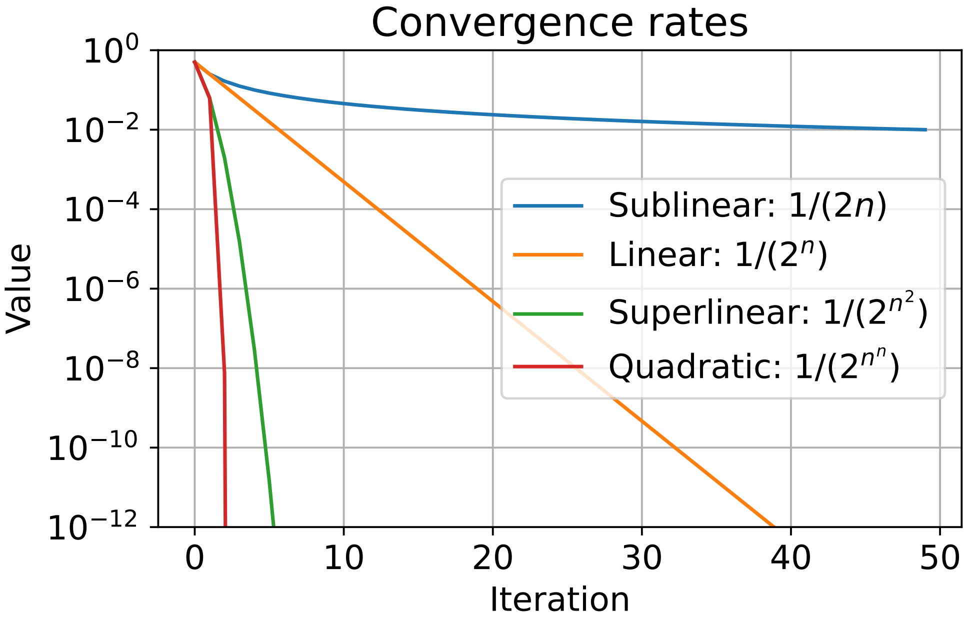
Важный пример

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

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. $\left(A_1 \left(A_2 \left(A_3 x\right)\right)\right)$ (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. $\left(A_1 \left(A_2 \left(A_3 x\right)\right)\right)$ (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. $\left(A_1 \left(A_2 \left(A_3 x\right)\right)\right)$ (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 $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, 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 $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, 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 $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ является следующая матрица:

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

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

Итог

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

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

Аппроксимации Тейлора

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

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

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

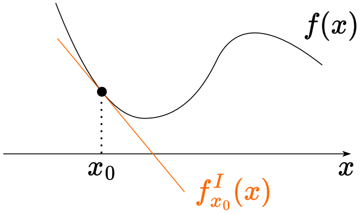


Рисунок 2. Аппроксимация Тейлора первого порядка в окрестности точки x_0

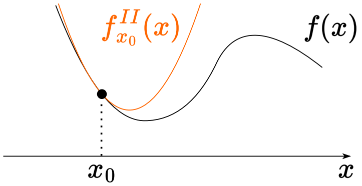


Рисунок 3. Аппроксимация Тейлора

Аппроксимации Тейлора

- Если $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ - 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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, 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.

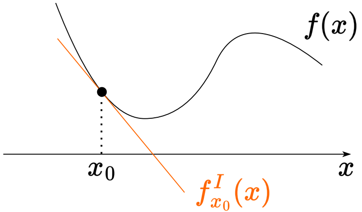


Рисунок 2. Аппроксимация Тейлора первого порядка в окрестности точки x_0

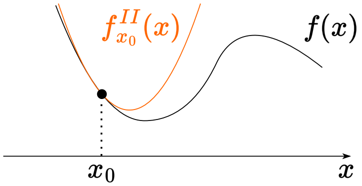


Рисунок 3. Аппроксимация Тейлора

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 $d(df) = d^2 f(x)$

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

Пример

Example

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

Пример

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

1. 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:

$$
df = d\left(\ln\langle x, Ax\rangle\right) = \frac{d\left(\langle x, Ax\rangle\right)}{\langle x, Ax\rangle} = \frac{\langle dx, Ax\rangle + \langle x, d(Ax)\rangle}{\langle x, Ax\rangle} =
$$

$$
= \frac{\langle Ax, dx\rangle + \langle x, Adx\rangle}{\langle x, Ax\rangle} = \frac{\langle Ax, dx\rangle + \langle A^T x, dx\rangle}{\langle x, Ax\rangle} = \frac{\langle (A + A^T)x, dx\rangle}{\langle x, Ax\rangle}
$$

Пример

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

1. 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:

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

2. 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 $\nabla f(x) = \dfrac{2Ax}{\langle x, Ax\rangle}$

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

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

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

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

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

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

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:

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

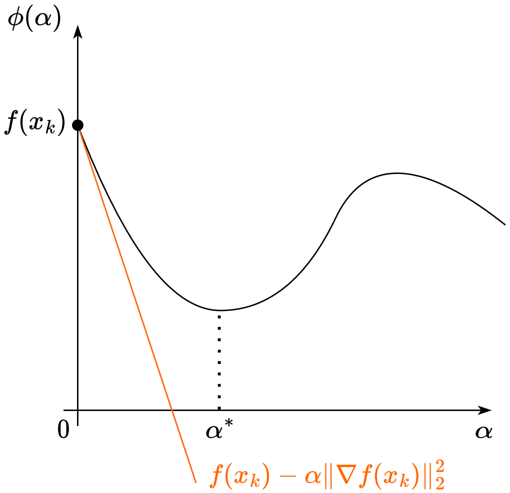


Рисунок 4. иллюстрация аппроксимации тейлора $\phi_0^i(\alpha)$

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).

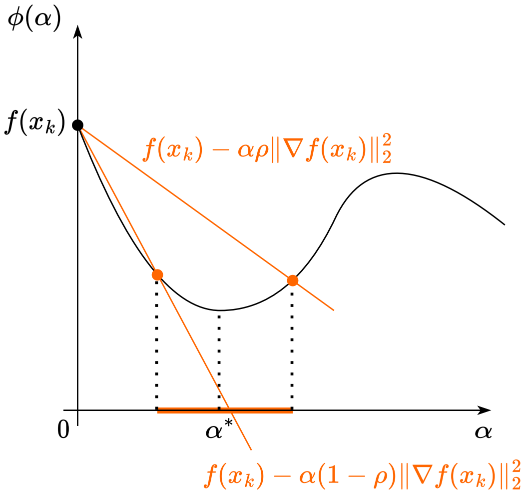


Рисунок 5. Иллюстрация условий Гольдштейна

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 $\nabla_\alpha \phi(\alpha)(0)$.

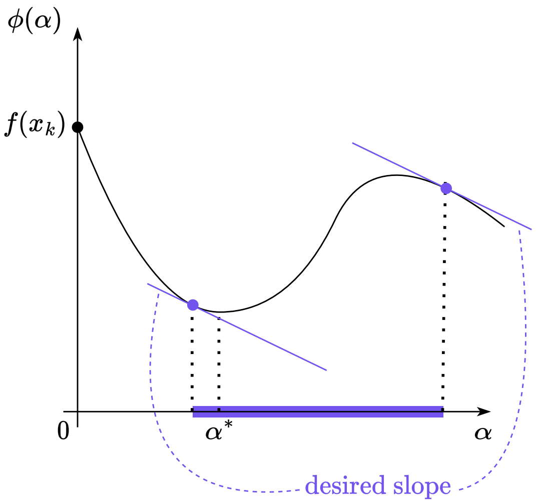


Рисунок 6. Иллюстрация условия ограничения на кривизну

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. $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 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.

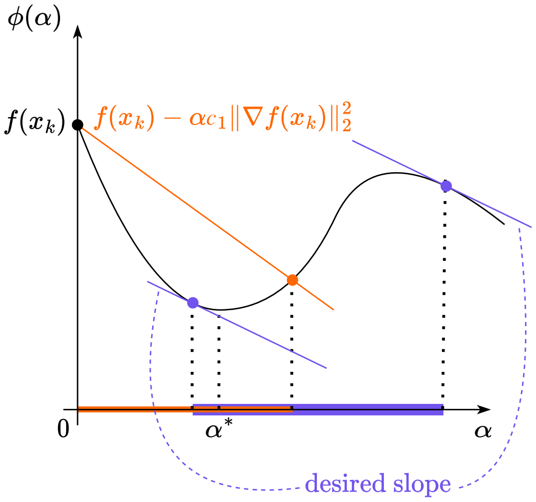


Рисунок 7. Иллюстрация условий Вульфа

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. $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 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.

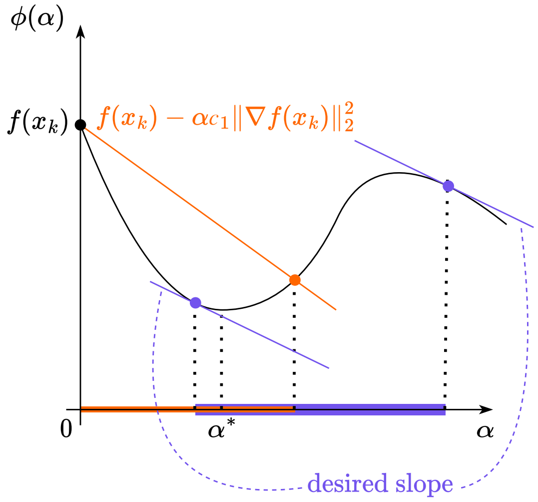


Рисунок 7. Иллюстрация условий Вульфа

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. $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 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.

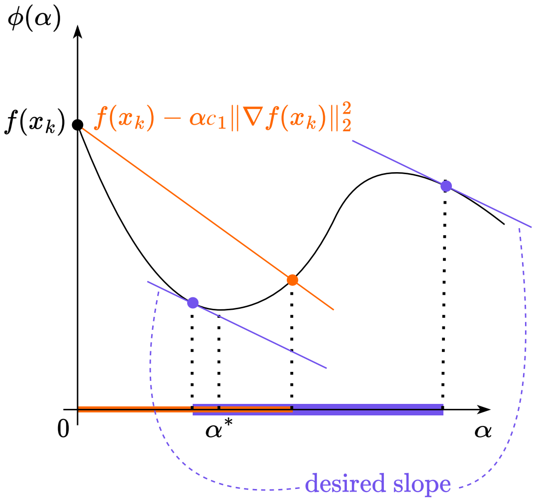


Рисунок 7. Иллюстрация условий Вульфа

Неточный линейный поиск: бэктрекинг

- Алгоритм стартует с некоторого большого α_0 и параметров $\beta \in (0, 1)$, $c_1 \in (0, 1)$.

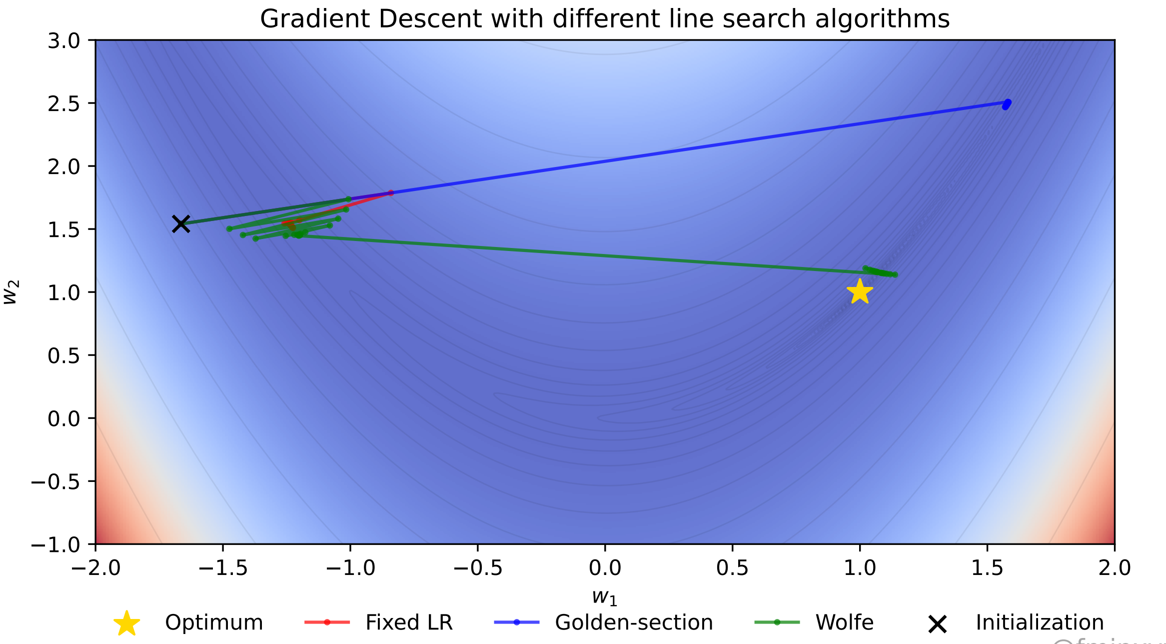
Неточный линейный поиск: бэктрекинг

- Алгоритм стартует с некоторого большого α_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 α_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



@fminxyz

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. $f_1^* = 10.00$

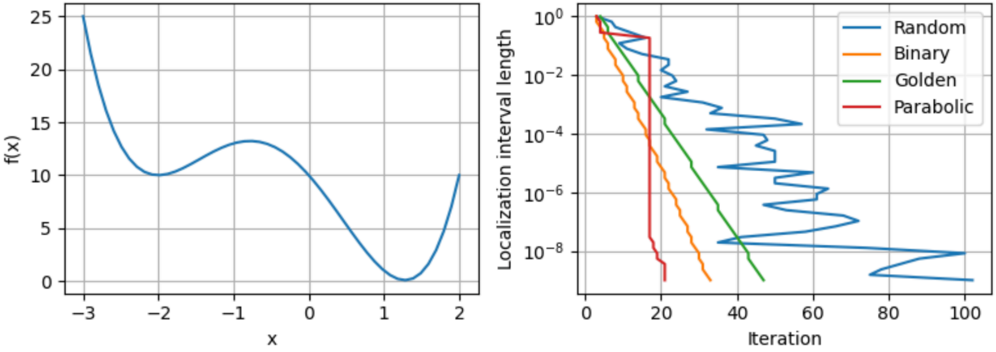


Рисунок 8. Сравнение различных методов линейного поиска с f_1

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. $f_2^* = 0.71$

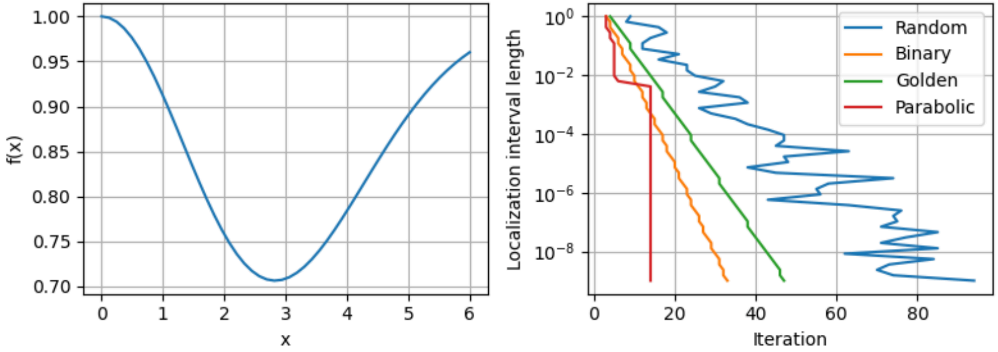


Рисунок 9. Сравнение различных методов линейного поиска с f_2

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. $f_3^* = 0.25$

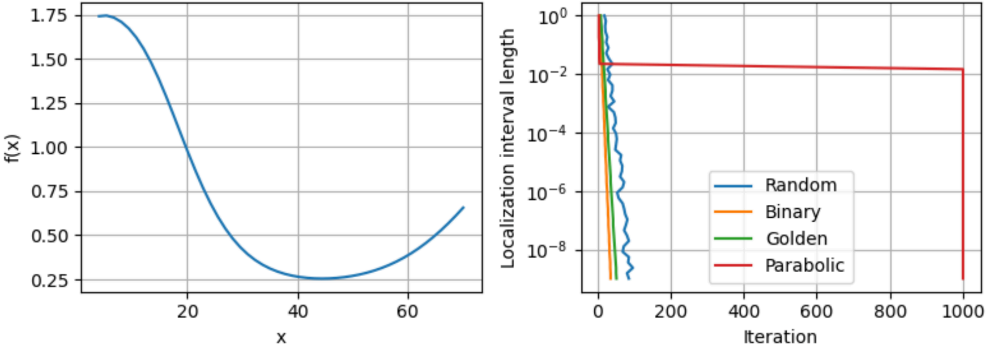


Рисунок 10. Сравнение различных методов линейного поиска с f_3

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 $\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k$ до $\left(1 - \frac{\mu}{nL}\right)^k$, 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 $\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k$ до $\left(1 - \frac{\mu}{nL}\right)^k$, 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:

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

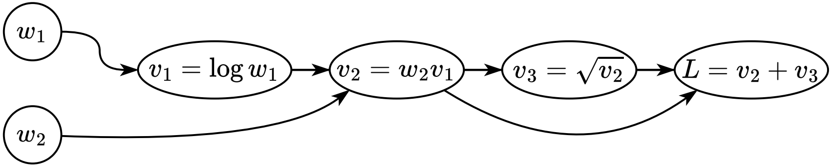


Рисунок 11. Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

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:

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

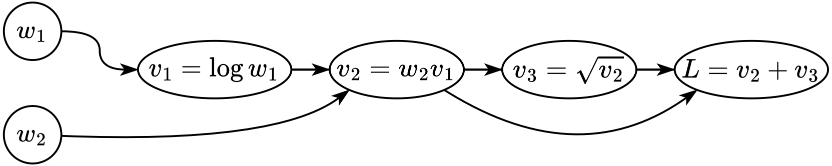


Рисунок 11. Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

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

Прямой режим автоматического дифференцирования

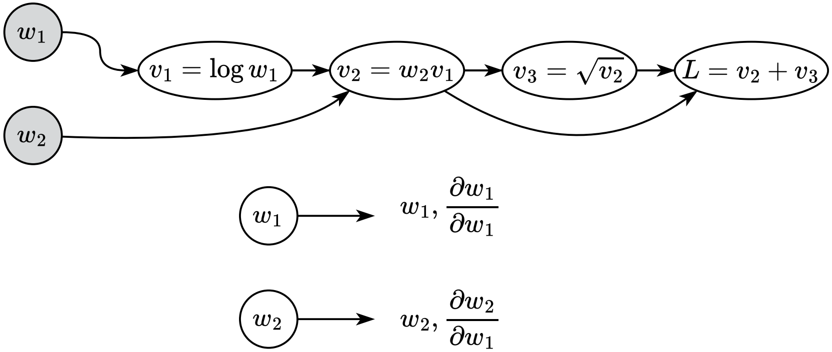


Рисунок 12. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$w_1 = w_1, w_2 = w_2$

Прямой режим автоматического дифференцирования

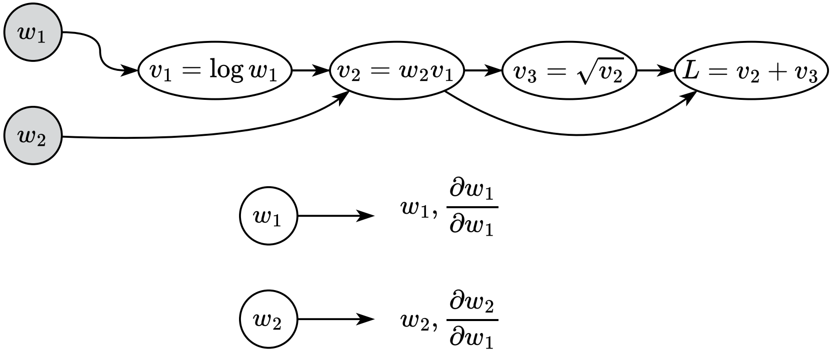


Рисунок 12. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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

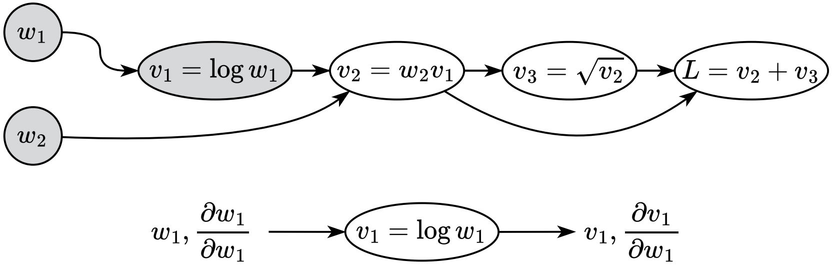


Рисунок 13. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

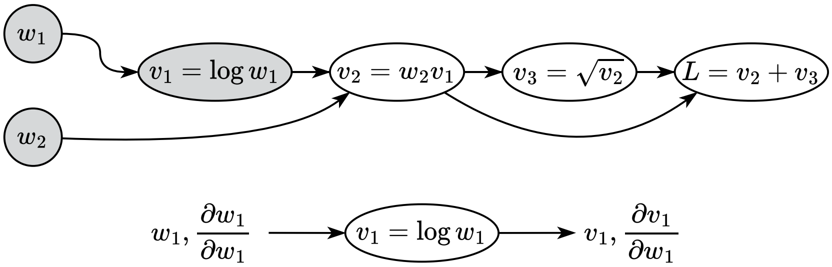


Рисунок 13. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_1 = \log w_1$

Прямой режим автоматического дифференцирования

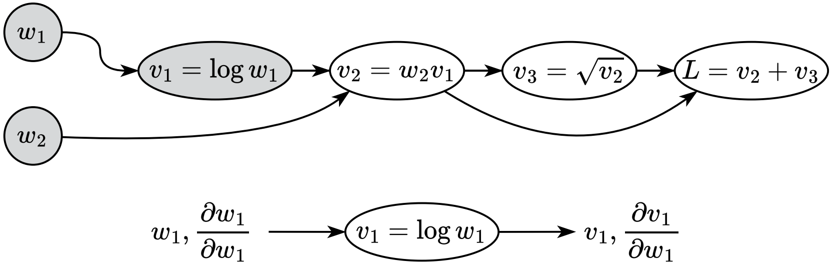


Рисунок 13. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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

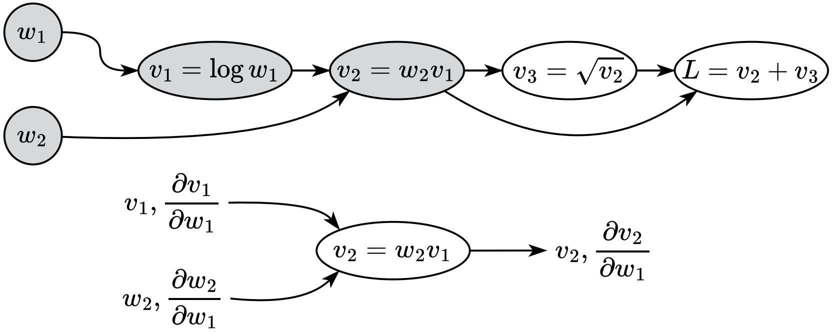


Рисунок 14. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

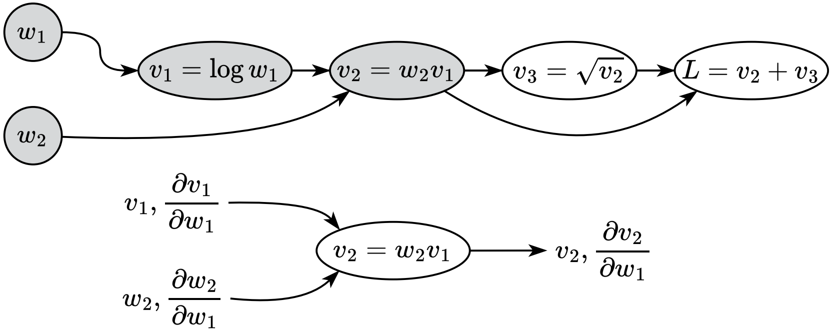


Рисунок 14. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_2 = w_2 v_1$

Прямой режим автоматического дифференцирования

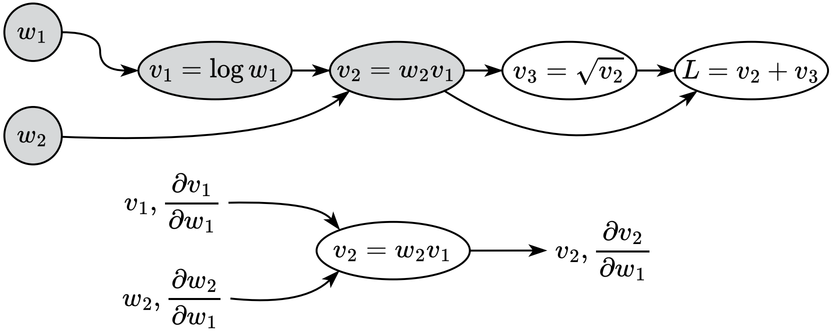


Рисунок 14. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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

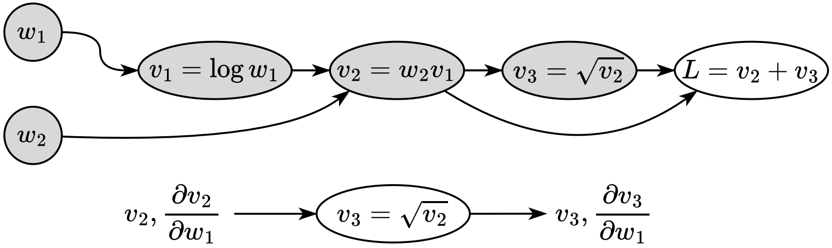


Рисунок 15. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

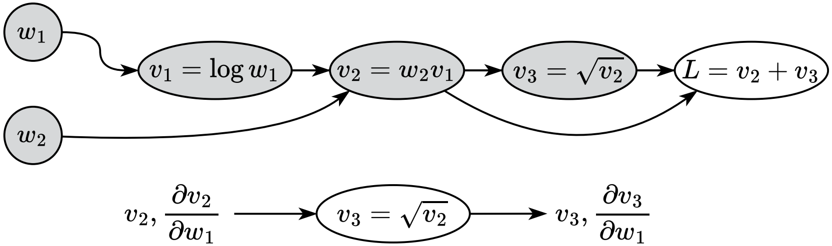


Рисунок 15. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$v_3 = \sqrt{v_2}$

Прямой режим автоматического дифференцирования

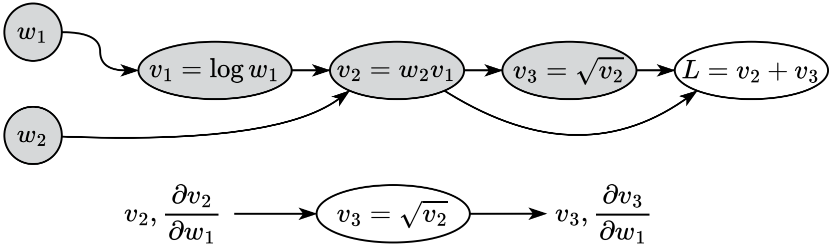


Рисунок 15. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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

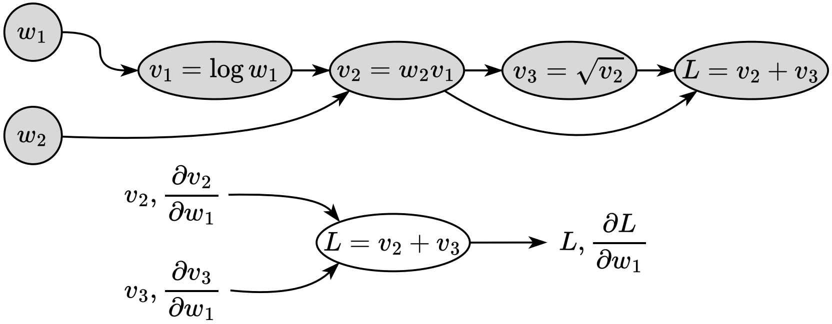


Рисунок 16. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Прямой режим автоматического дифференцирования

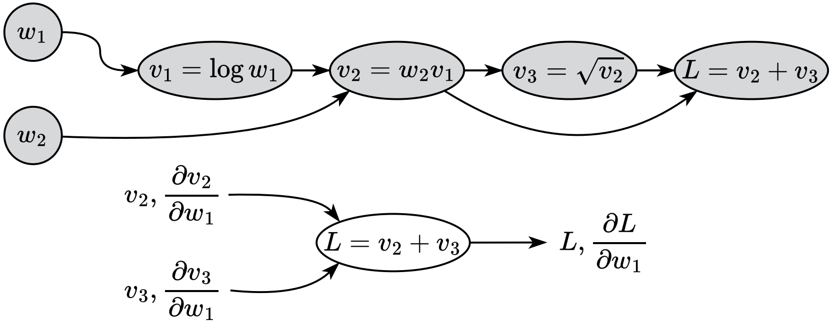


Рисунок 16. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

Функция

$L = v_2 + v_3$

Прямой режим автоматического дифференцирования

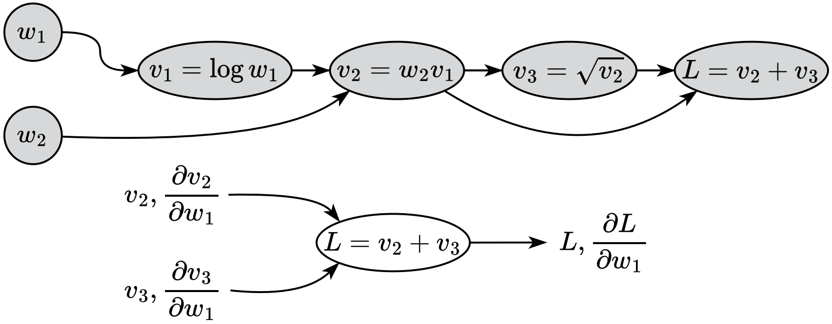


Рисунок 16. Иллюстрация прямого режима автоматического дифференцирования

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:

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

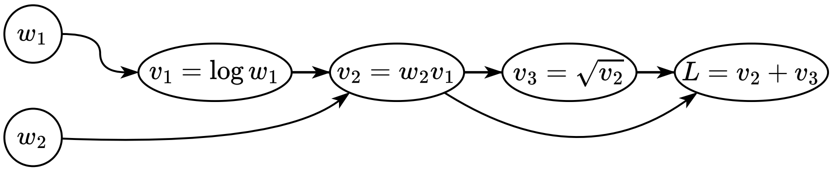


Рисунок 17. Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

Обратный режим автоматического дифференцирования

Мы рассмотрим ту же функцию с вычислительным графом:

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

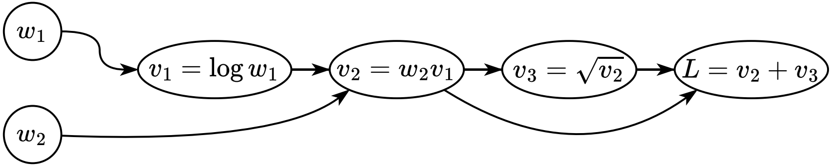


Рисунок 17. Иллюстрация вычислительного графа для функции $L(w_1, w_2)$

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 $\dfrac{\partial L}{\partial w_1}, \dfrac{\partial L}{\partial w_2}$:

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

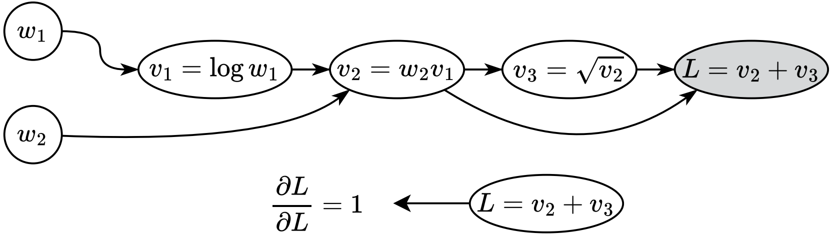


Рисунок 18. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

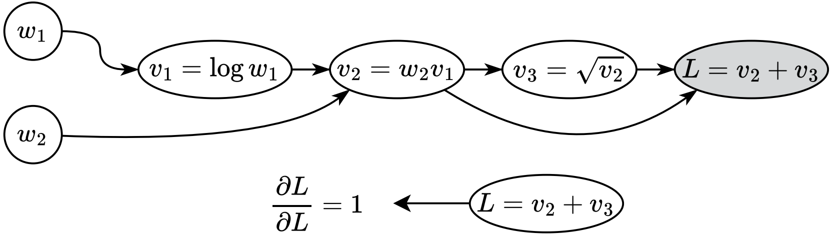


Рисунок 18. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

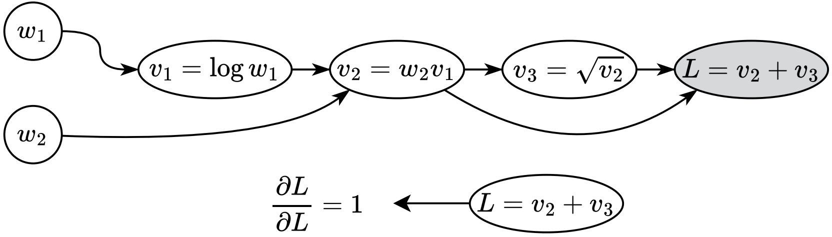


Рисунок 18. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

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

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

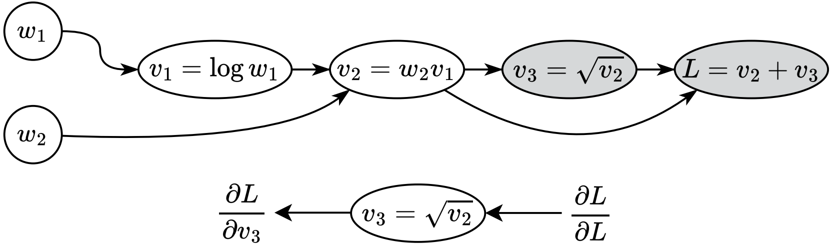


Рисунок 19. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

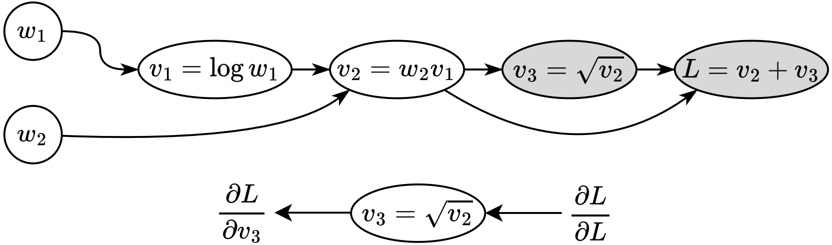


Рисунок 19. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

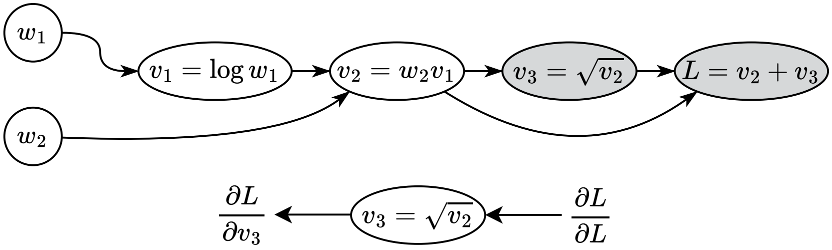


Рисунок 19. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

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

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

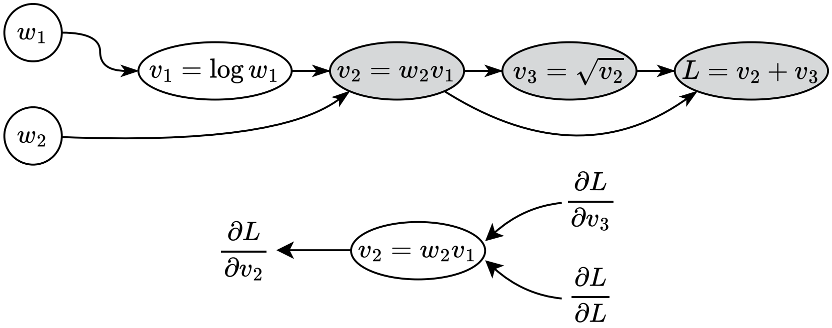


Рисунок 20. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

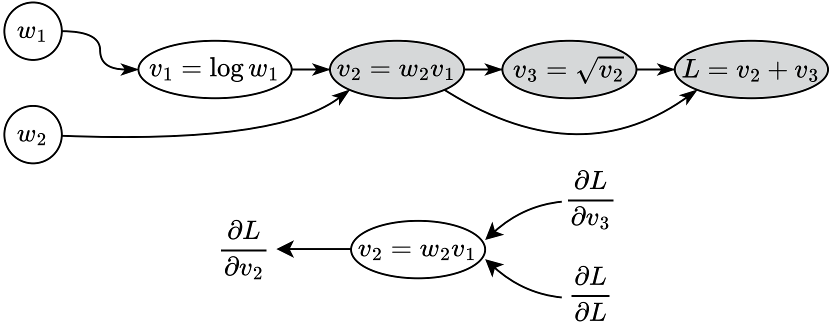


Рисунок 20. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

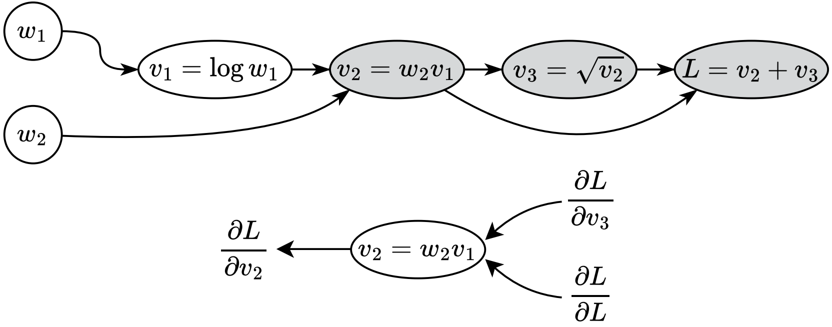


Рисунок 20. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

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

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

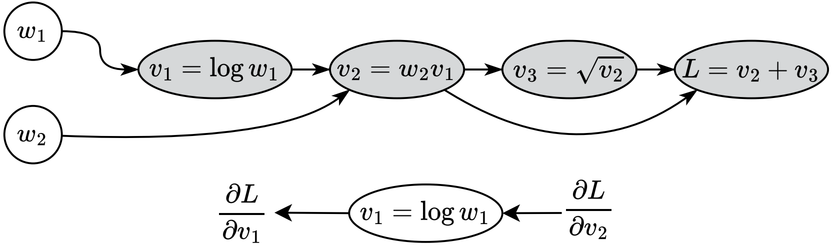


Рисунок 21. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

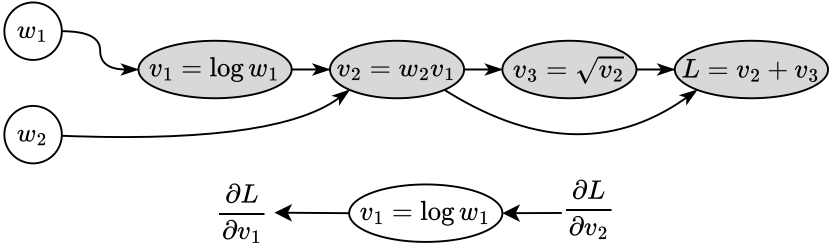


Рисунок 21. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

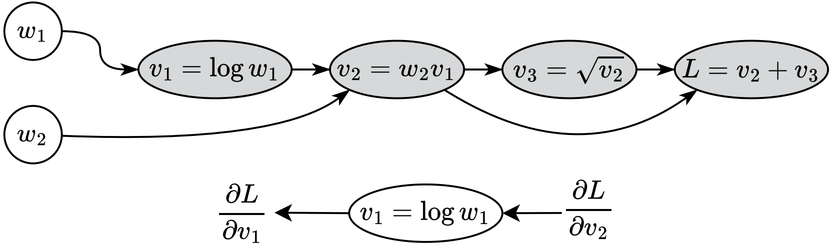


Рисунок 21. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

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

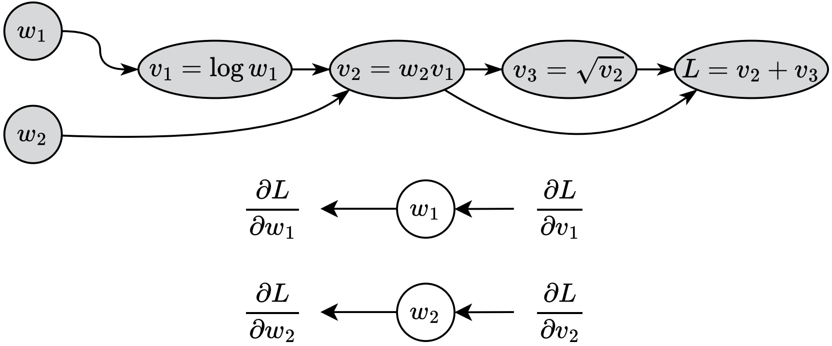


Рисунок 22. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

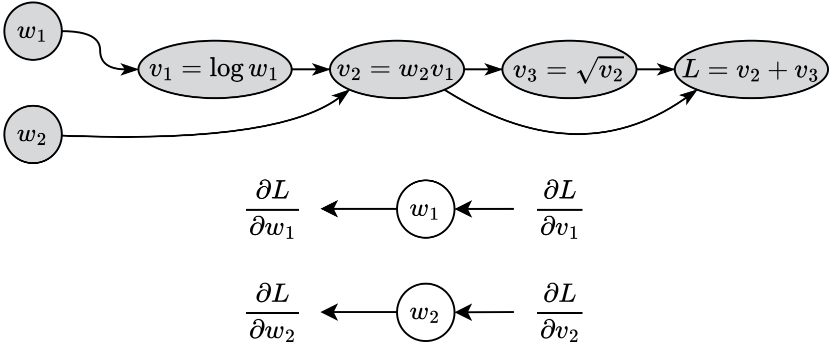


Рисунок 22. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

Пример обратного режима автоматического дифференцирования

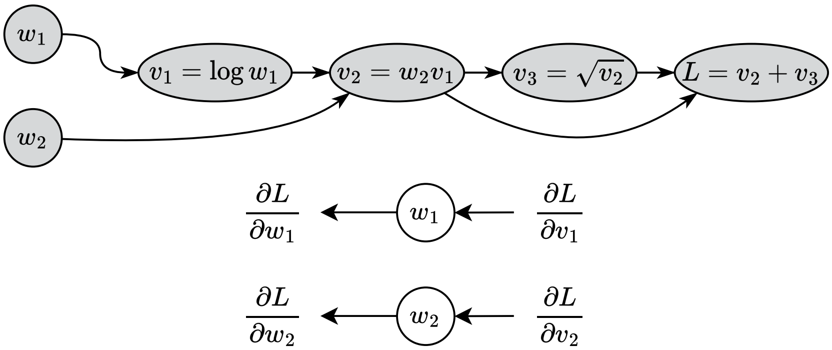


Рисунок 22. Иллюстрация обратного режима автоматического дифференцирования

Производные

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

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

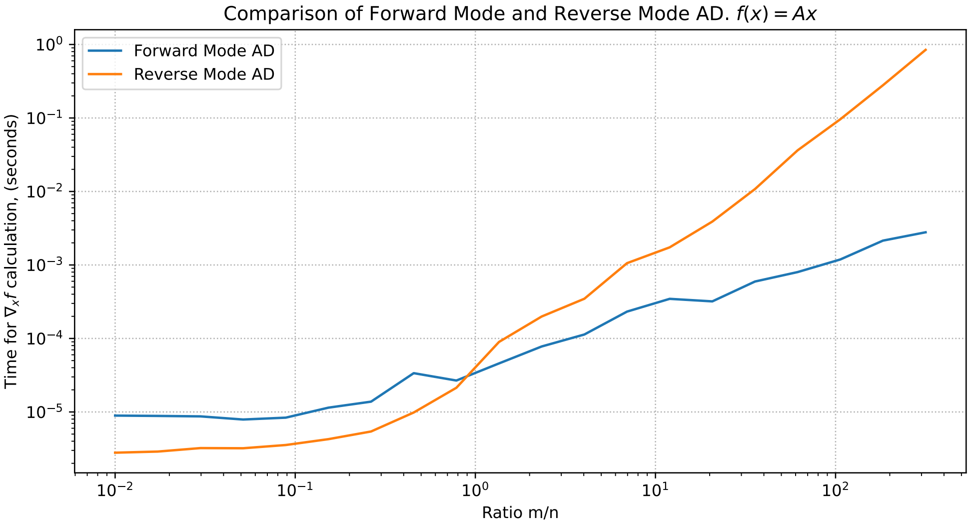


Рисунок 23. ♣ График иллюстрирует идею выбора между режимами автоматического дифференцирования. Размерность входа $n = 100$ фиксирована, измерено время вычисления якобиана в зависимости от соотношения размерностей выхода и входа для разных размерностей выхода m.

Чекпоинтинг

Анимация вышеуказанных подходов

Пример использования контрольных точек градиента

[1] ZeRO: Memory Optimizations Toward Training Trillion Parameter Models

Чекпоинтинг

Анимация вышеуказанных подходов

Пример использования контрольных точек градиента

В качестве примера рассмотрим обучение **GPT-2**[1]:

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

[1] ZeRO: Memory Optimizations Toward Training Trillion Parameter Models

Чекпоинтинг

Анимация вышеуказанных подходов

Пример использования контрольных точек градиента

В качестве примера рассмотрим обучение **GPT-2**[1]:

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

[1] 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

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

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

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

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:** 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 $S = \left\{s \mid s = c_1 x + c_2 y,\ x \in S_x,\ y \in S_y,\ c_1, c_2 \in \mathbb{R}\right\}$ выпукло

Проверка выпуклости множества и сохраняющие операции

- **Как проверить выпуклость:**
  - По определению
  - Операции, сохраняющие выпуклость:
    1. Пусть $S_x,\ S_y$ выпуклы, тогда $S = \left\{s \mid s = c_1 x + c_2 y,\ x \in S_x,\ y \in S_y,\ c_1, c_2 \in \mathbb{R}\right\}$ 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 $S = \left\{s \mid s = c_1 x + c_2 y,\ x \in S_x,\ y \in S_y,\ c_1, c_2 \in \mathbb{R}\right\}$ выпукло
    2. Пересечение любого числа выпуклых множеств
    3. $S \subseteq \mathbb{R}^n$ выпукло $\quad\rightarrow\quad f(S) = \{f(x) \mid x \in S\}$ выпукло $\quad (f(x) = \mathbf{A}x + \mathbf{b})$

Выпуклые функции, неравенство Йенсена, надграфик

Definition

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

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

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

Definition

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

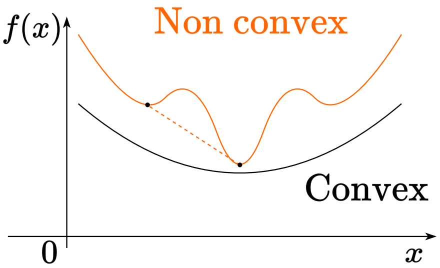


Рисунок 24. Разница между выпуклой и невыпуклой функцией

Выпуклые функции, неравенство Йенсена, надграфик

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 (эпиграф):** epi$(f) = \{(x,t) : f(x) \leq t\}$; f выпукла $\Leftrightarrow$ epi(f) выпукл.

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

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

Definition

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

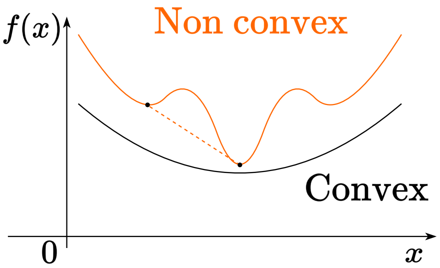


Рисунок 24. Разница между выпуклой и невыпуклой функцией

Пример. Функция максимального собственного значения матрицы является выпуклой.

Example

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

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

Definition

- **Критерий 1-го порядка:** Пусть $f : S \to \mathbb{R}$ 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)

Definition

- **Критерий 1-го порядка:** Пусть $f : S \to \mathbb{R}$ 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 $f : S \to \mathbb{R}$ 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 μ-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 $\mu > 0$.

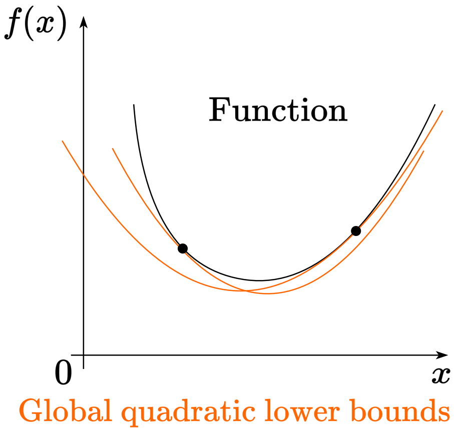


Рисунок 25. Сильно выпуклая функция не меньше некоторой параболы в любой точке

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

Definition

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

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

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

Definition

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

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

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

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

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-Лоясиевича. Линейная сходимость градиентного спуска без выпуклости

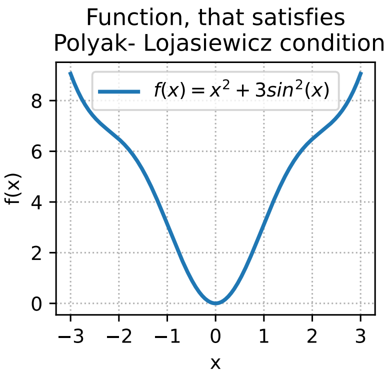
Неравенство PL выполняется, если выполняется следующее условие для некоторого $\mu > 0$,

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

При выполнении условия PL алгоритм градиентного спуска имеет линейную сходимость.

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

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



Условие Поляка-Лоясиевича. Линейная сходимость градиентного спуска без выпуклости

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

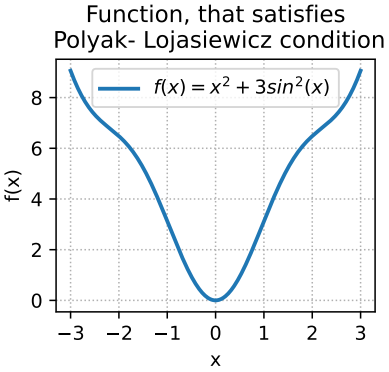
$$\|\nabla f(x)\|^2 \geq 2\mu(f(x) - f^*) \forall x$$

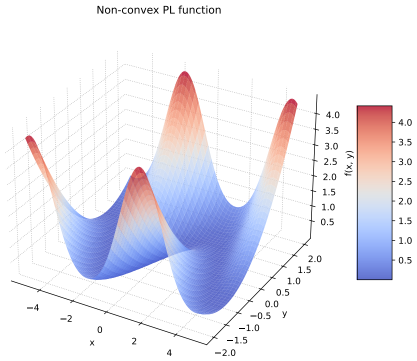
При выполнении условия PL алгоритм градиентного спуска имеет линейную сходимость.

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

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

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





Метод наименьших квадратов aka линейная регрессия

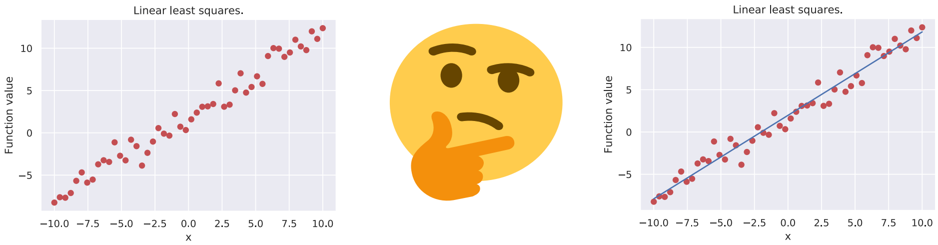


Рисунок 28. Иллюстрация

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:

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

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 [2]

1. Является ли эта задача выпуклой? Сильно выпуклой?

[2] 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.

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

Примечание: С этой модификацией целевая функция становится μ-сильно выпуклой.

Посмотрите на код

Наиболее важная разница между выпуклостью и сильной выпуклостью

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

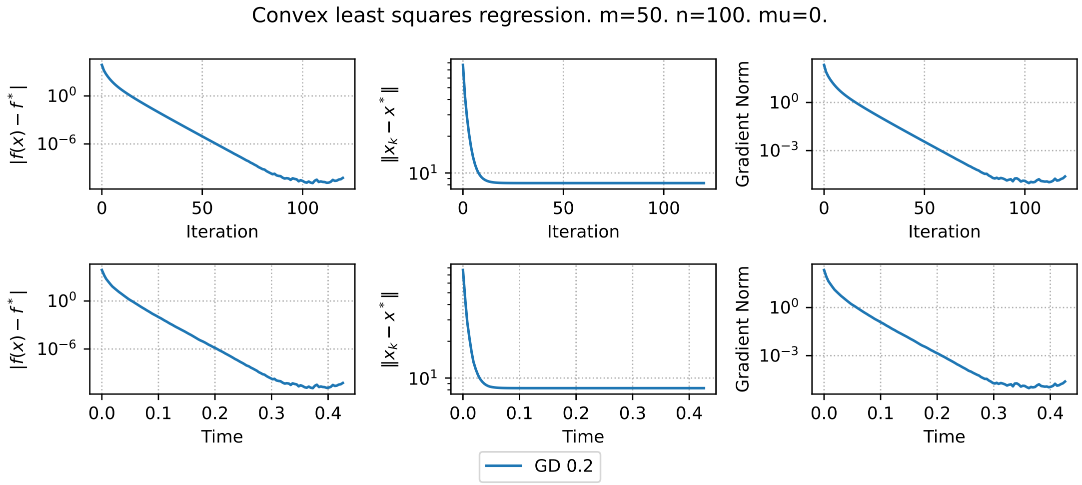


Рисунок 29. Выпуклая задача не имеет сходимости по аргументу

Наиболее важная разница между выпуклостью и сильной выпуклостью

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

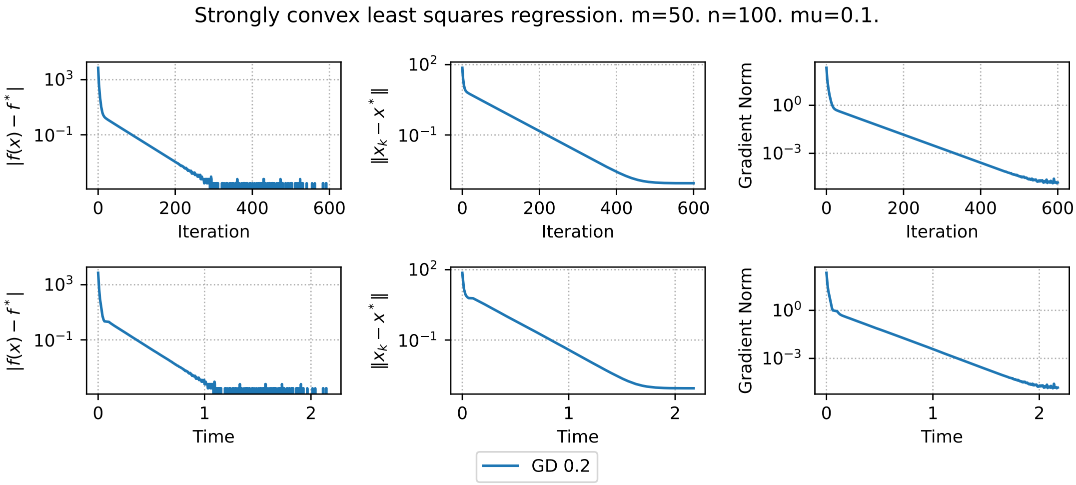


Рисунок 30. Но если добавить даже небольшую регуляризацию, вы гарантируете сходимость по аргументу

Наиболее важная разница между выпуклостью и сильной выпуклостью

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

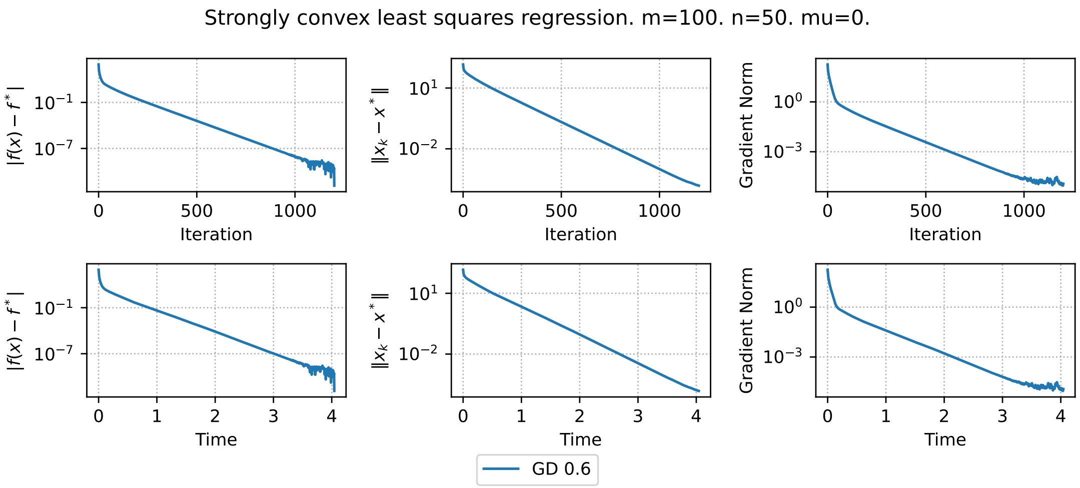


Рисунок 31. Другой способ обеспечить сходимость в предыдущей задаче - поменять местами значения размерности задачи

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

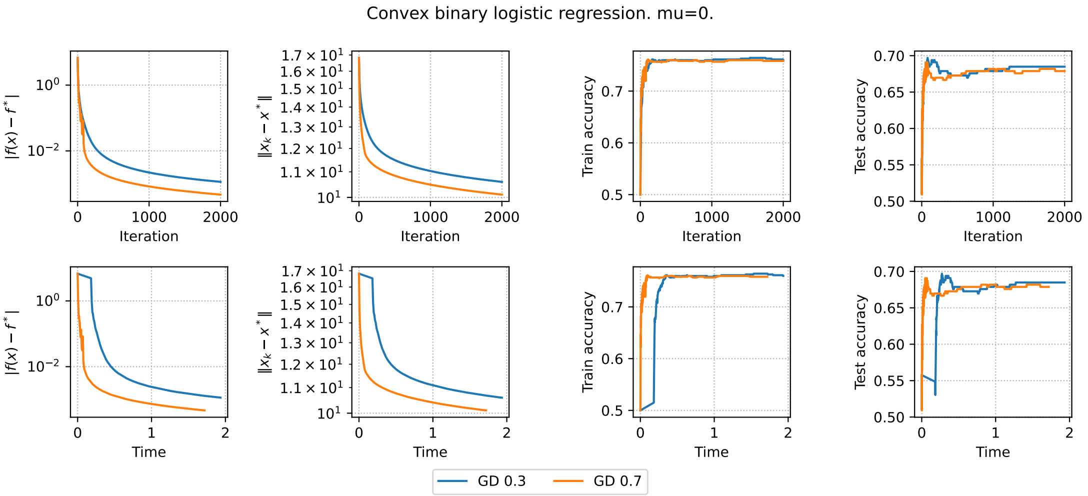


Рисунок 32. Лишь небольшая точность может быть достигнута с сублинейной сходимостью

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

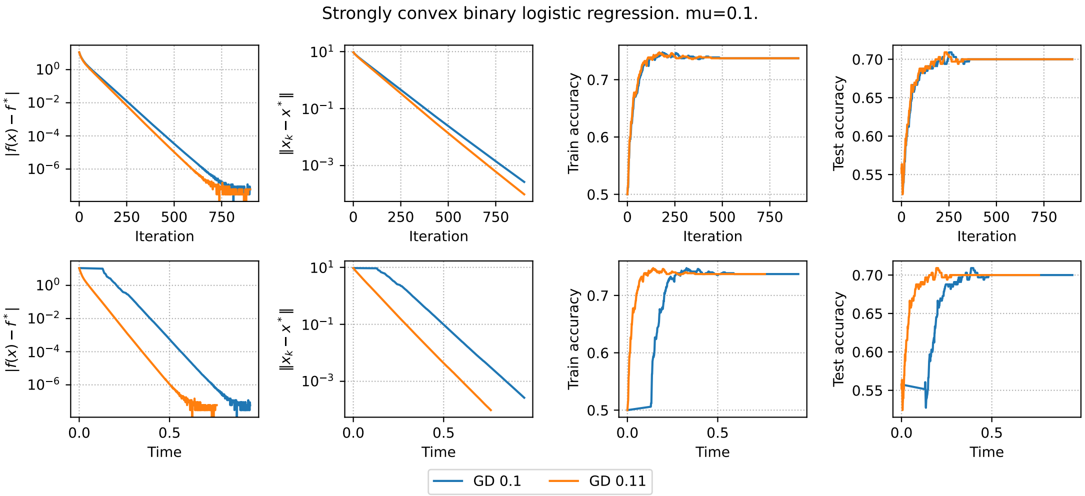


Рисунок 33. Сильная выпуклость обеспечивает линейную сходимость

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

Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

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

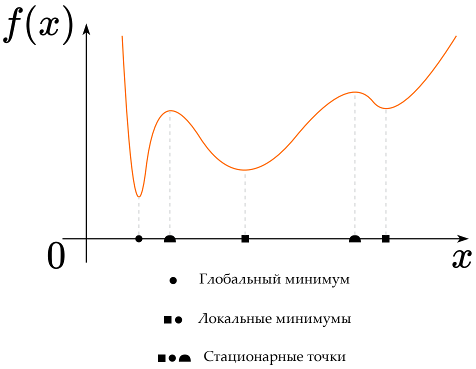


Рисунок 34. Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

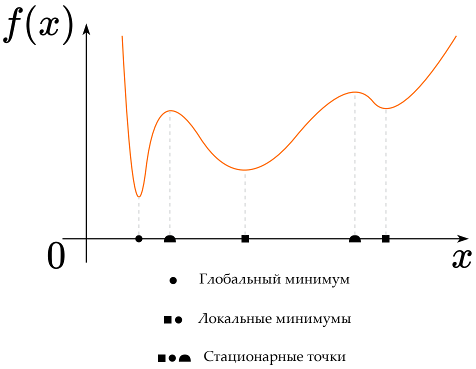


Рисунок 34. Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

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

Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

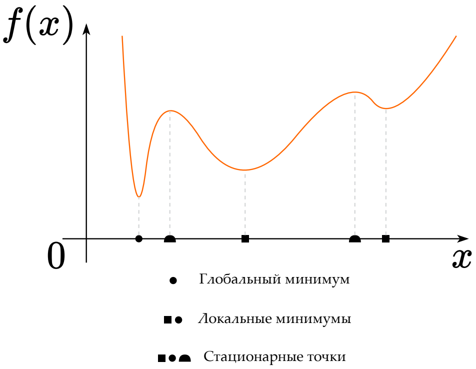


Рисунок 34. Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

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**: $x^* \in S$.

Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

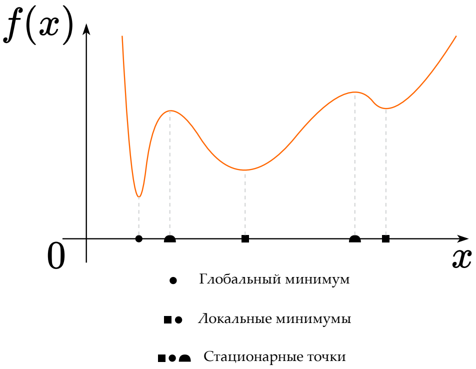


Рисунок 34. Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

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 $x \in S$.

Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

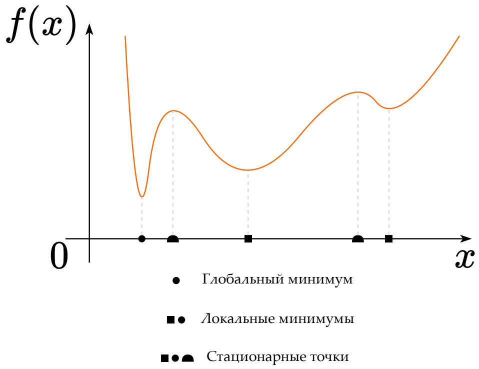


Рисунок 34. Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

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 $x \in N \cap S$.

Постановка задачи. Бюджетное множество, критические точки.

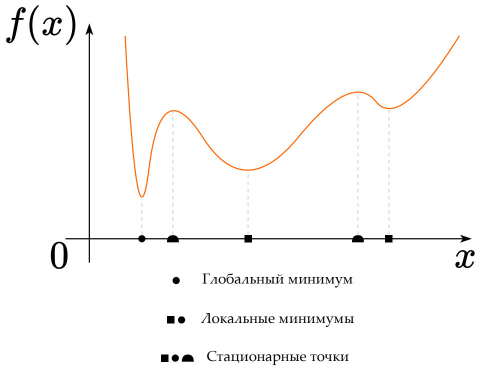


Рисунок 34. Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

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 $x \in N \cap S$.
- 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.

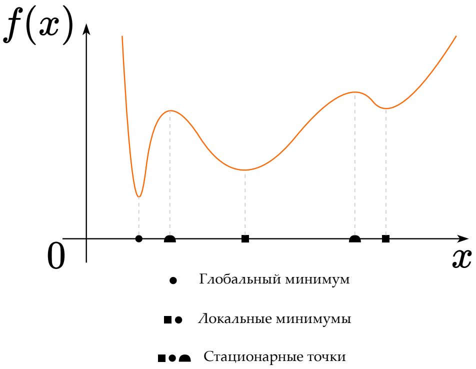


Рисунок 34. Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

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 $x \in N \cap S$.
- 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 $\nabla f(x^*) = 0, \quad \nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$ - **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 $\nabla f(x^*) = 0, \quad \nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$ - **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 $\nabla f(x^*) = 0, \quad \nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$ - **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 $\nabla f(x^*) = 0, \quad \nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$ - **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 $\nabla f(x^*) = 0, \quad \nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$ - **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.

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

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.

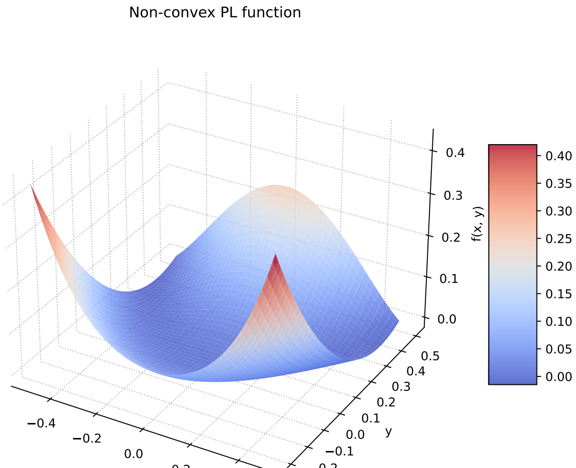
Безусловная оптимизация. Необходимые и достаточные условия экстремума.

- **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 $\nabla f(x^*) = 0, \quad \nabla^2 f(x^*) \succ 0 \Rightarrow x^*$ - **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.

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

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.



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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.
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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.
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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. 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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.
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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.
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

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

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

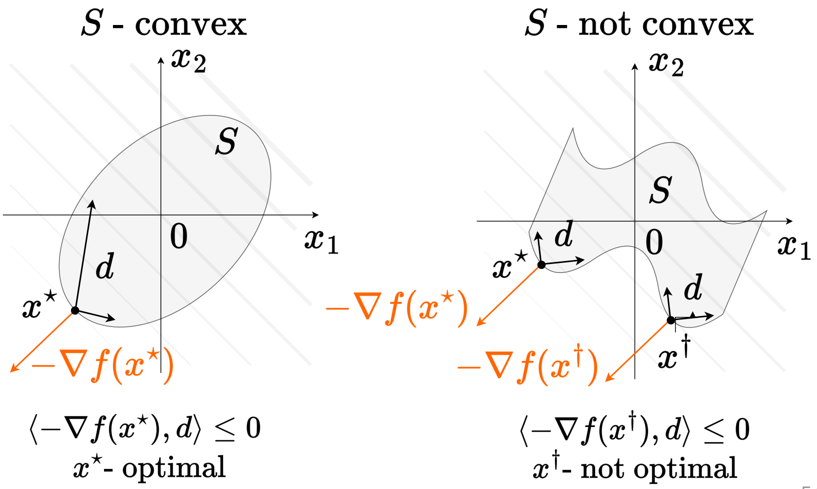


Рисунок 35. Общее условие локальной оптимальности первого порядка

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 $f(x) : S \to \mathbb{R}$ — 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 $f(x) : S \to \mathbb{R}$ — 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 $f(x) : S \to \mathbb{R}$ — 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 $f(x) : S \to \mathbb{R}$ — 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

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

$$\text{s.t. } h(x) = 0$$

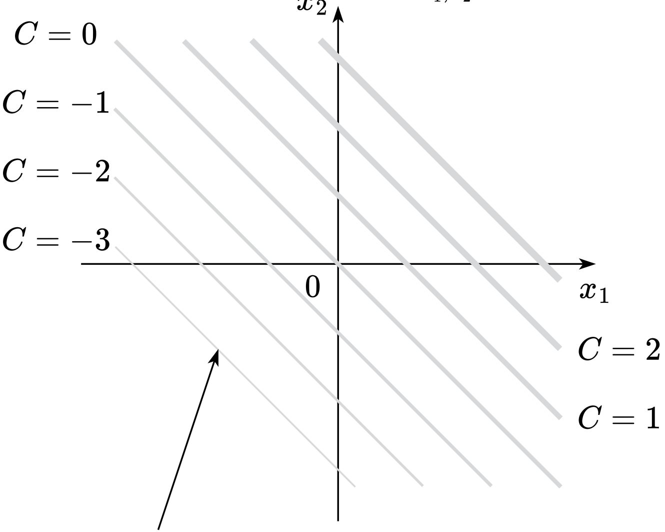
Задачи с ограничениями-равенствами

$$
f(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^n}
$$
$$
\text{s.t. } h(x) = 0
$$

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

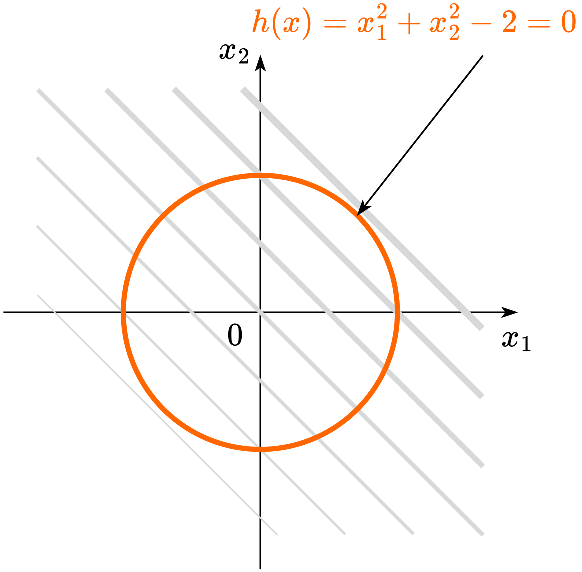
Задачи с ограничениями-равенствами

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

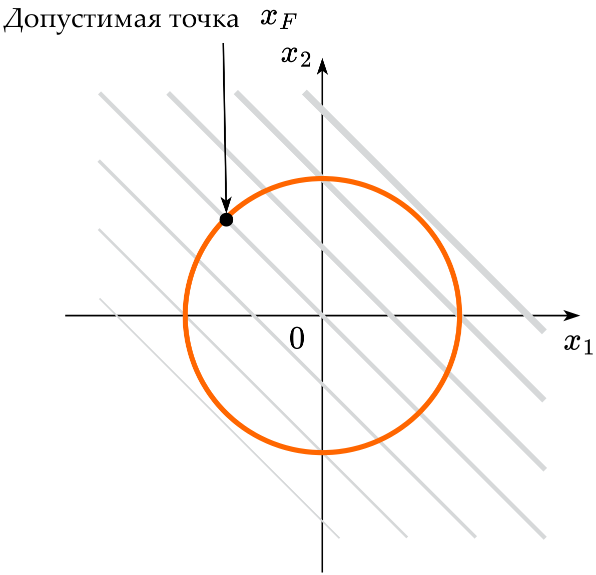


$$f(x) = x_1 + x_2 = C$$

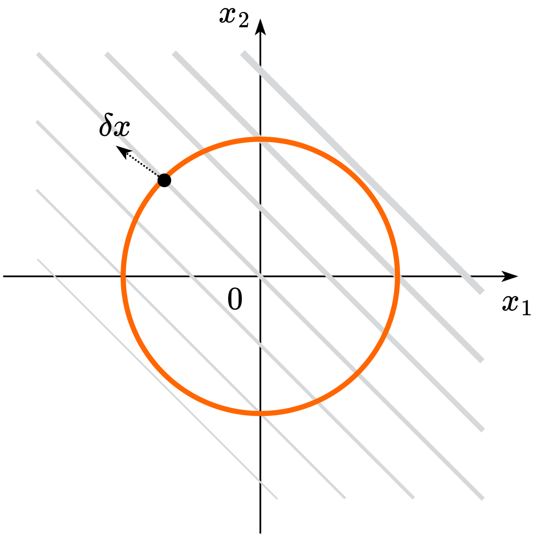
Задачи с ограничениями-равенствами



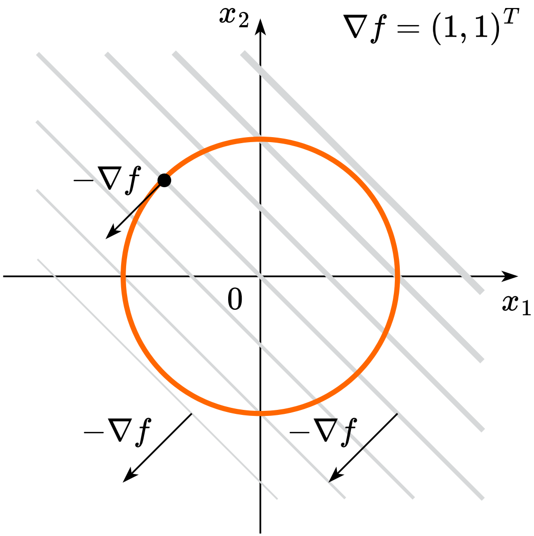
Задачи с ограничениями-равенствами



Задачи с ограничениями-равенствами

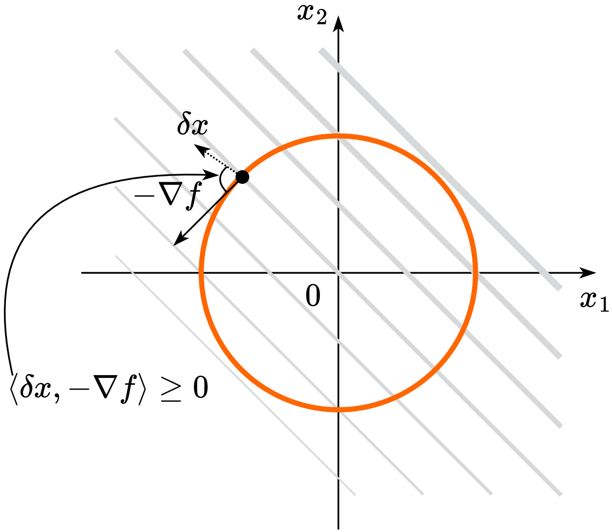


Задачи с ограничениями-равенствами



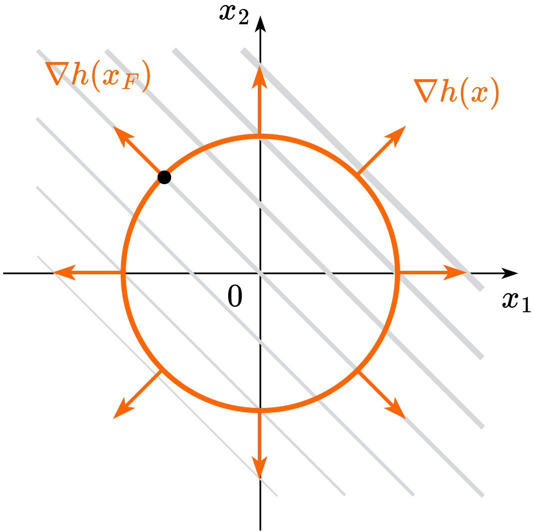
Задачи с ограничениями-равенствами

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

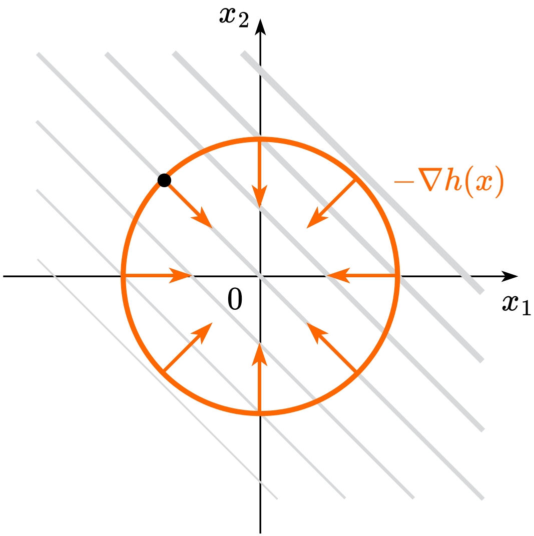


Задачи с ограничениями-равенствами

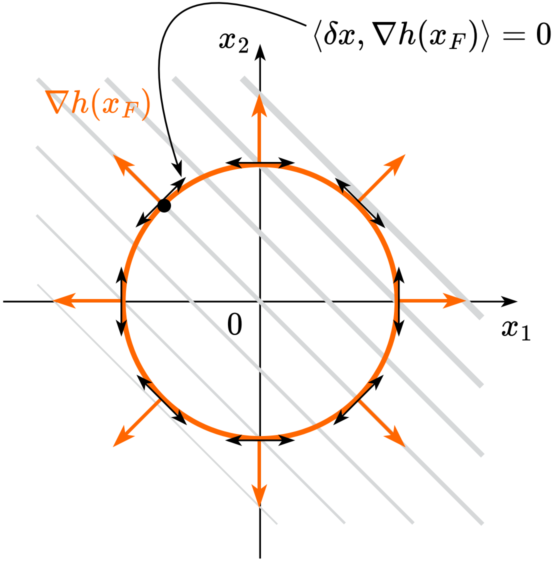
$$\nabla h = (2x_1, 2x_2)^T$$



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:

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

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

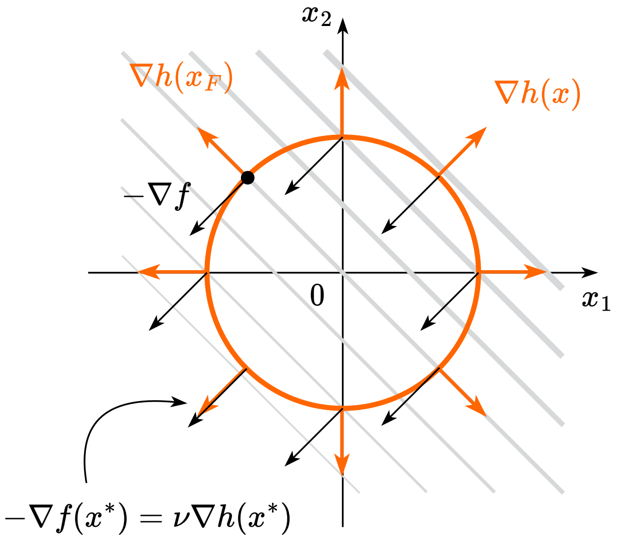
Предположим, что в процессе такого движения мы пришли в точку, где

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

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

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

$$
\begin{split}
& f(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\
\text{s.t. } & h_i(x) = 0, \; i = 1, \ldots, p
\end{split} \tag{ECP}
$$

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

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.

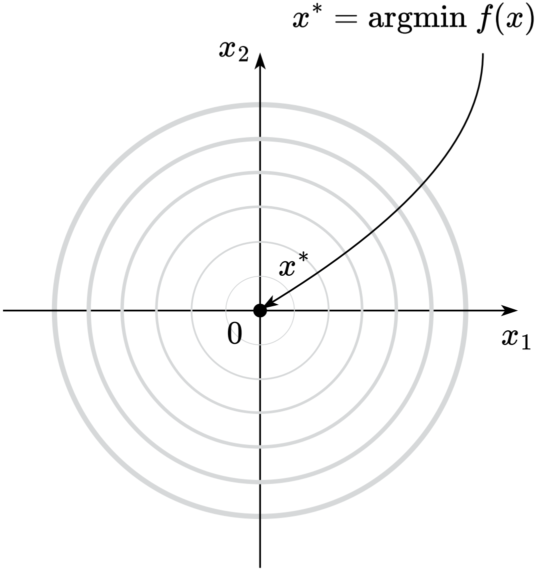
$$f(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$

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

Рассмотрим на примере

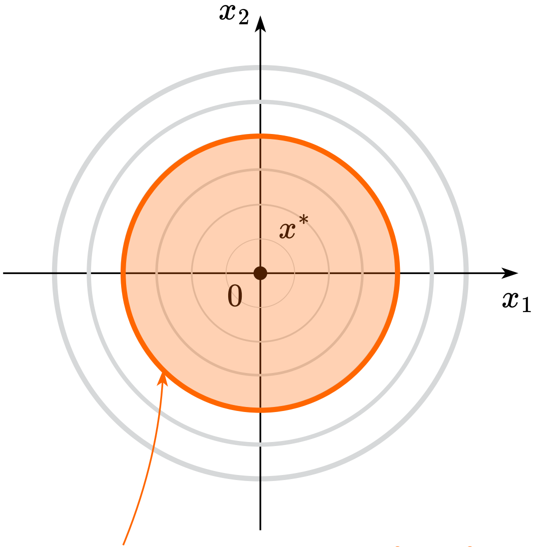
$$f(x) = x_1^2 + x_2^2 \quad g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1$$

Задачи с ограничениями-неравенствами



Линии уровня $f(x) = x_1^2 + x_2^2 = C$

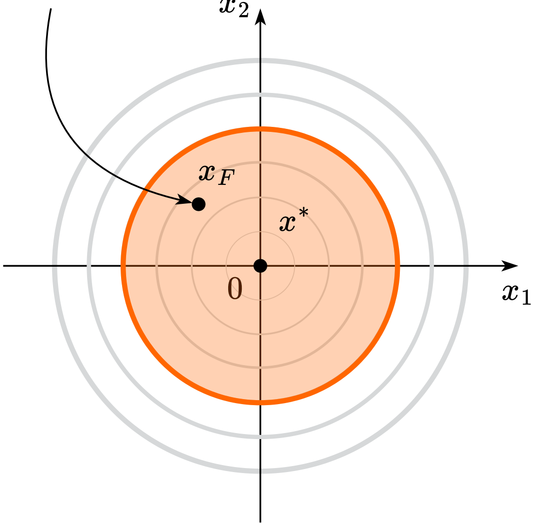
Задачи с ограничениями-неравенствами



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

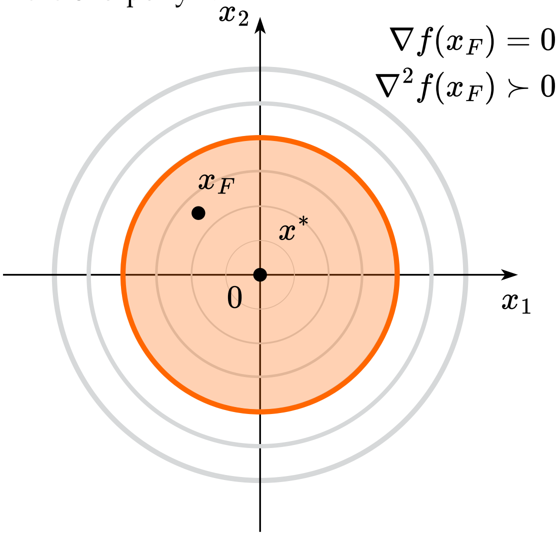
Задачи с ограничениями-неравенствами

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.

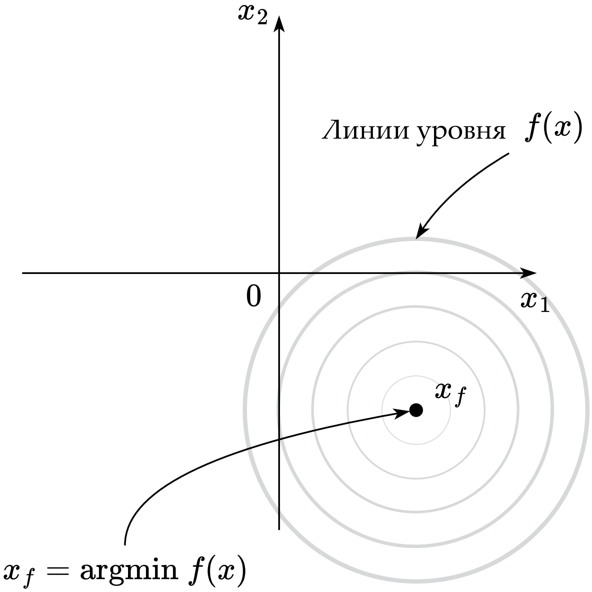
$$f(x) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 + 1)^2 \quad g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1$$

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

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

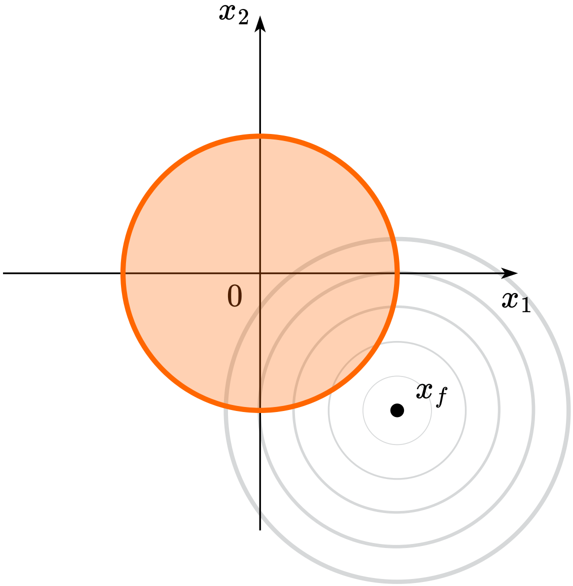
Задачи с ограничениями-неравенствами

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



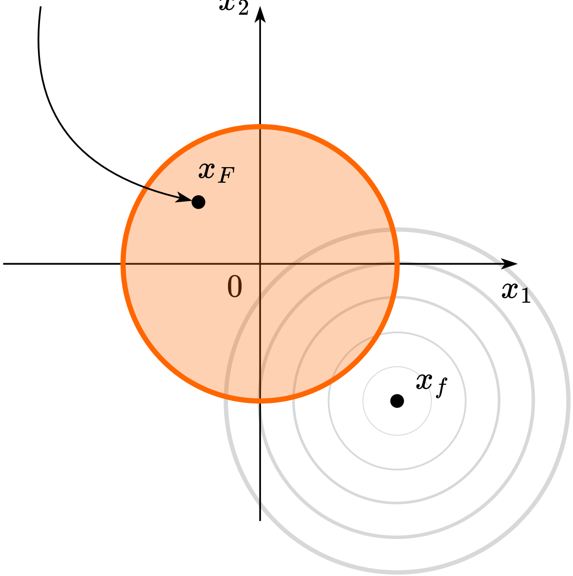
Задачи с ограничениями-неравенствами

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



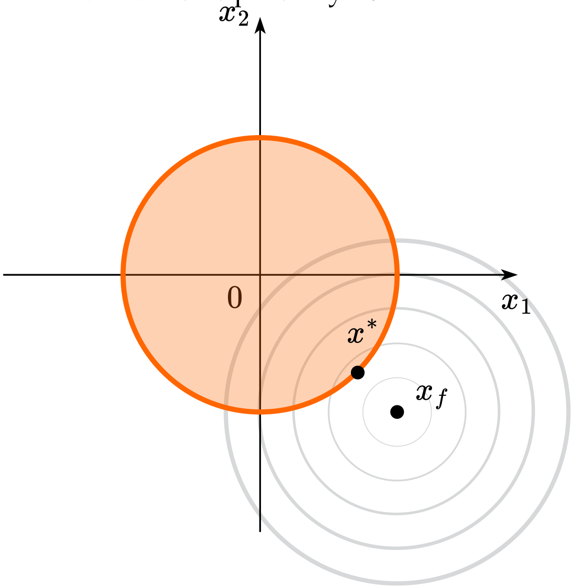
Задачи с ограничениями-неравенствами

Как понять, что некоторая допустимая точка является локальным минимумом?



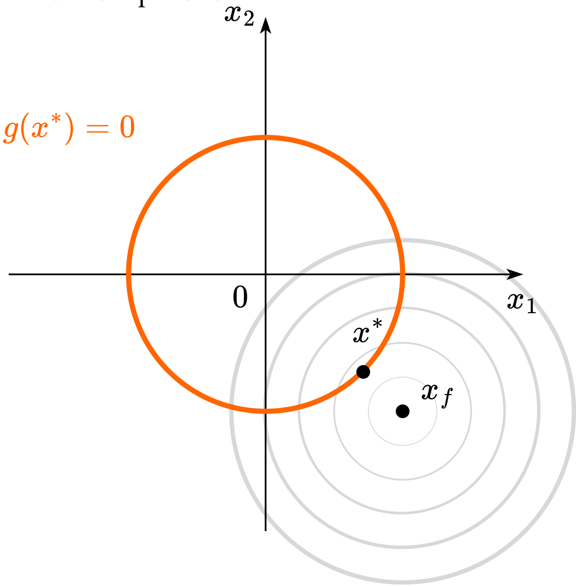
Задачи с ограничениями-неравенствами

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

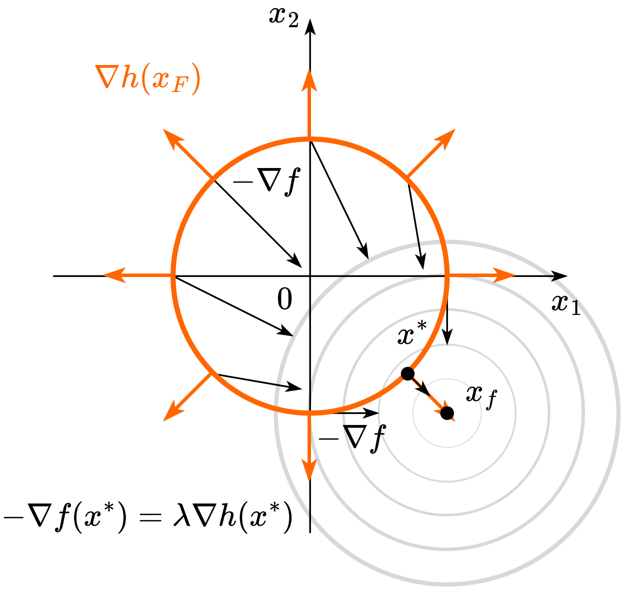


Задачи с ограничениями-неравенствами

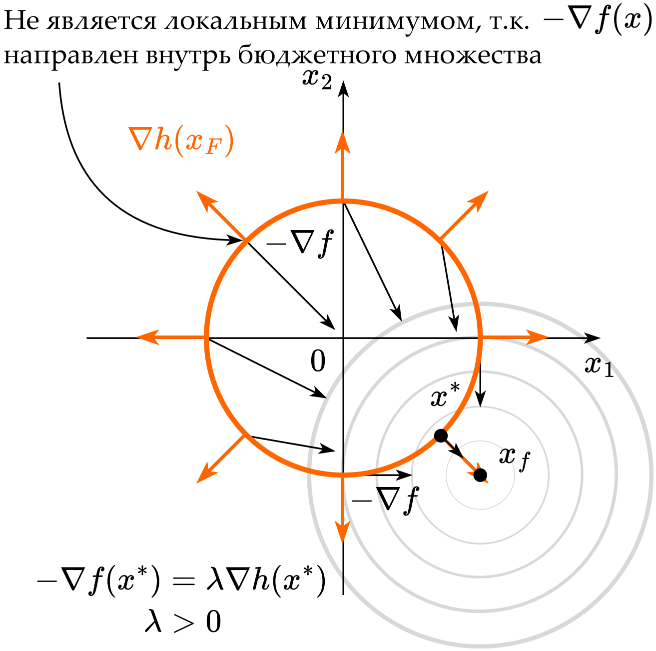
Фактически имеем задачу
с ограничением-равенством 💡



Задачи с ограничениями-неравенствами



Задачи с ограничениями-неравенствами



Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

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

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:

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

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

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:

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

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

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:

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

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

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:

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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*:

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

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

$$(2)\ \lambda^* \ge 0$$

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

$$(4)\ g(x^*) \le 0$$

Общая формулировка

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

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^*, (λ^*, ν^*) 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

$$f_0(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$
$$\text{s.t. } f_i(x) \le 0,\ i = 1, \dots, m$$
$$h_j(x) = 0,\ j = 1, \dots, p$$

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если $f_i(x), i = 0, ..., n$ выпуклы, а $h_j(x), j = 1, ..., m$ 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^*, (λ^*, ν^*) 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

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

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^*, (λ^*, ν^*) является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

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

Общая формулировка

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

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^*, (λ^*, ν^*) 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

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

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если $f_i(x), i = 0, \ldots, n$ выпуклы, а $h_j(x), j = 1, \ldots, m$ 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^*, (λ^*, ν^*) является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

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

Общая формулировка

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

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^*, (λ^*, ν^*) является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

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

Общая формулировка

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

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если $f_i(x), i = 0, ..., n$ выпуклы, а $h_j(x), j = 1, ..., m$ 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^*, (λ^*, ν^*) является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

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

- **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

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

Данная формулировка является **общей задачей математического программирования**. Если $f_i(x), i = 0, \ldots, n$ выпуклы, а $h_j(x), j = 1, \ldots, m$ 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^*, (λ^*, ν^*) является решением **регулярной** задачи математического программирования. Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

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

- **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 $f : E \to \mathbb{R}$ определена как

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

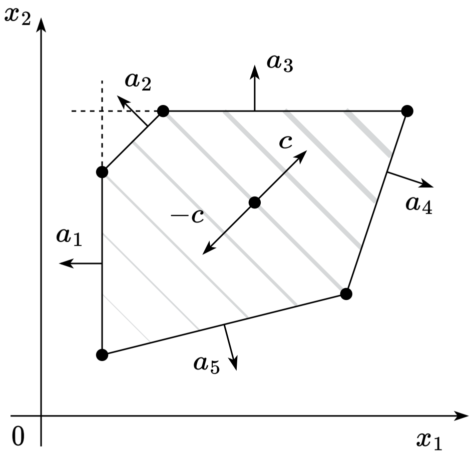
где $E = \{x \in \mathbb{R}^n : Q(x) < 0\}$ и

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

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

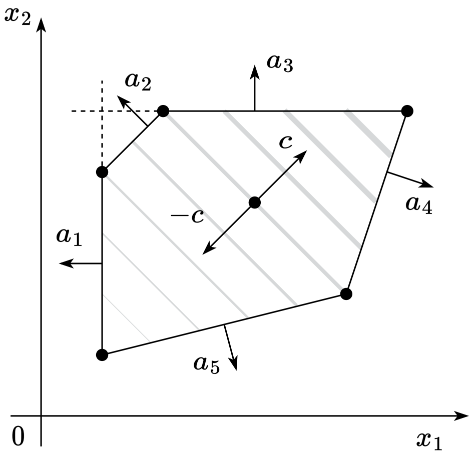


Задача ЛП в базовой (канонической) форме

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

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

Постановка задачи линейного программирования



Задача ЛП в базовой (канонической) форме

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

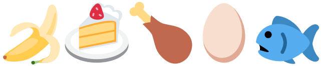
$c \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, где неравенства — покомпонентные.

Задача ЛП в стандартная форме.

$$
\begin{aligned}
&\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\
&\text{s.t. } Ax = b \\
&x_i \geq 0, \; i = 1, \dots, n
\end{aligned}
\tag{LP.Standard}
$$

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

Пример: задача о диете



$$\begin{array}{r} \text{Белки} \\ \text{Жиры} \\ \text{Углеводы} \\ \text{Калории} \\ \text{Витамин D} \end{array} \left[\begin{array}{c} \text{Количество на 100г} \\ W \in \mathbb{R}^{n \times p} \end{array} \right]$$

$c \in \mathbb{R}^p$, цена за 100г

$r \in \mathbb{R}^n$, ограничения

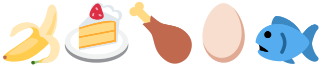
$x \in \mathbb{R}^p$, количество продуктов

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

$$Wx \succeq r$$

$$x \succeq 0$$

Пример: задача о диете



$$\begin{array}{r|c|}
\text{Белки} & \\
\text{Жиры} & \\
\text{Углеводы} & \text{Количество на 100г} \\
 & W \in \mathbb{R}^{n \times p} \\
\text{Калории} & \\
\text{Витамин D} & \\
\end{array}$$

$c \in \mathbb{R}^p$, цена за 100г

$r \in \mathbb{R}^n$, ограничения

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

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

$$Wx \succeq r$$

$$x \succeq 0$$

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.

Пример: задача о диете

🍌 🍰 🍗 🥚 🐟

$$
\begin{array}{l}
\text{Белки} \\ \text{Жиры} \\ \text{Углеводы} \\ \text{Калории} \\ \text{Витамин D}
\end{array}
\left[
\begin{array}{c}
\text{Количество на 100г} \\
W \in \mathbb{R}^{n \times p}
\end{array}
\right]
$$

$c \in \mathbb{R}^p$, цена за 100г

$r \in \mathbb{R}^n$, ограничения

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

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

$$
Wx \succeq r
$$

$$
x \succeq 0
$$

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:

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

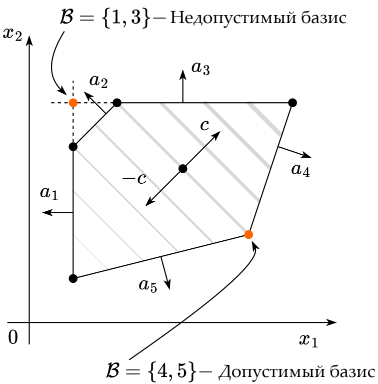
$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} c^T x$$
$$Wx \succeq r$$
$$x \succeq 0$$

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:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} c^\top x$$
$$\text{s.t. } Wx \succeq r$$
$$x_i \geq 0, \; i = 1, \dots, p$$

Open In Colab

Симплекс-метод. Основная идея.

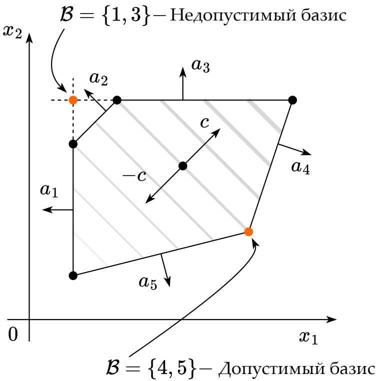


$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \qquad \text{(LP.Basic)}$$
$$\text{s.t. } Ax \leq b$$

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

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

Симплекс-метод. Основная идея.

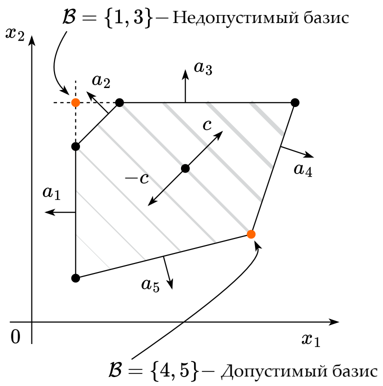


$$
\begin{aligned}
&\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\
&\text{s.t. } Ax \leq b
\end{aligned}
\tag{LP.Basic}
$$

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

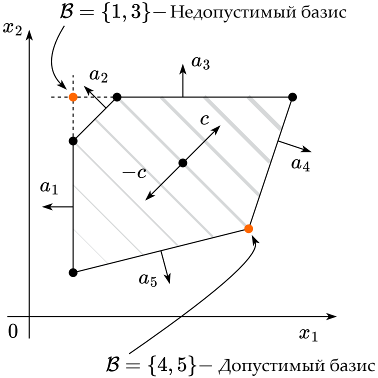


$$
\begin{aligned}
&\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\
&\text{s.t. } Ax \leq b
\end{aligned}
\tag{LP.Basic}
$$

- 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.

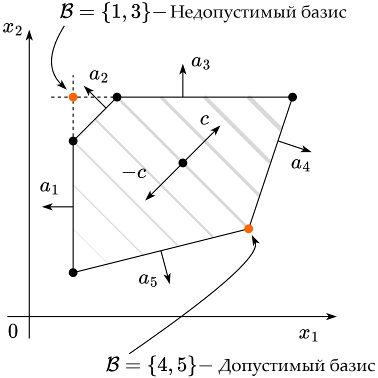


$$
\begin{aligned}
&\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\
&\text{s.t. } Ax \leq b
\end{aligned}
\tag{LP.Basic}
$$

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

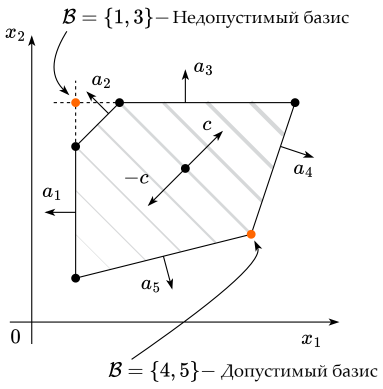


$$
\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \quad \text{s.t. } Ax \leq b \tag{LP.Basic}
$$

- Определение: **базис** $\mathcal{B}$ — это подмножество n (целых) чисел между 1 и m, такое что 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: $x_{\mathcal{B}} = A^{-1}_{\mathcal{B}} b_{\mathcal{B}}$.
- Если $Ax_{\mathcal{B}} \leq b$, то базис $\mathcal{B}$ является **допустимым**.
- Базис $\mathcal{B}$ оптимален, если $x_{\mathcal{B}}$ является решением задачи LP.Inequality.

Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

Симплекс-метод. Основная идея.

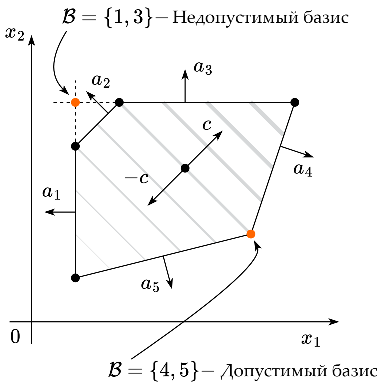


$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \quad \text{s.t. } Ax \leq b \tag{LP.Basic}$$

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



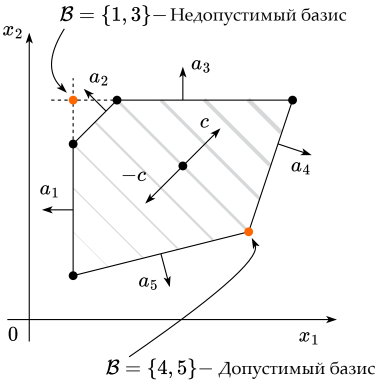
$$
\begin{aligned}
\min_{x \in \mathbb{R}^n} \; & c^\top x \\
\text{s.t. } & Ax \leq b
\end{aligned}
\tag{LP.Basic}
$$

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



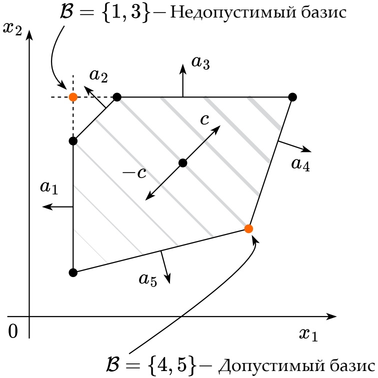
$$
\begin{aligned}
&\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\
&\text{s.t. } Ax \leq b
\end{aligned}
\tag{LP.Basic}
$$

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



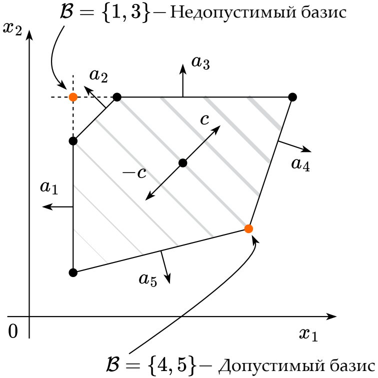
$$
\begin{aligned}
&\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\
&\text{s.t. } Ax \leq b
\end{aligned}
\tag{LP.Basic}
$$

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



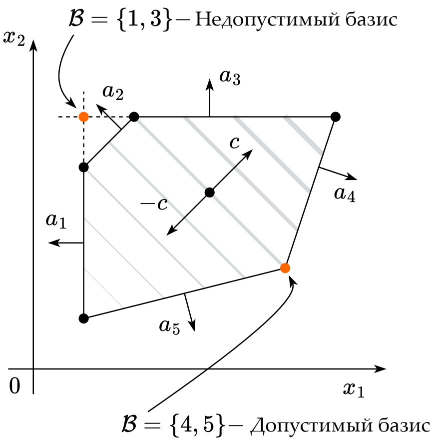
$$
\begin{aligned}
&\min_{x \in \mathbb{R}^n} c^\top x \\
&\text{s.t. } Ax \leq b
\end{aligned}
\tag{LP.Basic}
$$

- Определение: **базис** $\mathcal{B}$ — это подмножество n (целых) чисел между 1 и m, такое что 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 $\mathcal{B}$ оптимален, если $x_{\mathcal{B}}$ является решением задачи LP.Inequality.
- $x_{\mathcal{B}}$ называют **базисной точкой** или базисным решением (иногда её тоже называют **базисом**).

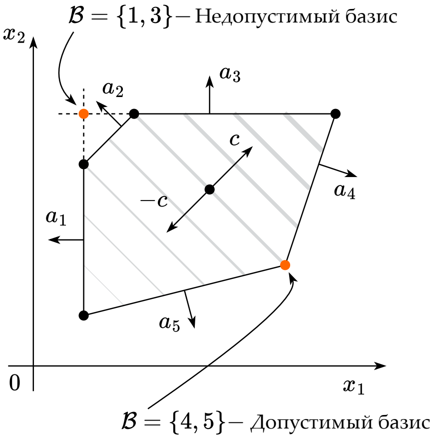
Верхнеуровневая идея симплекс-метода:

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

Оптимальный базис



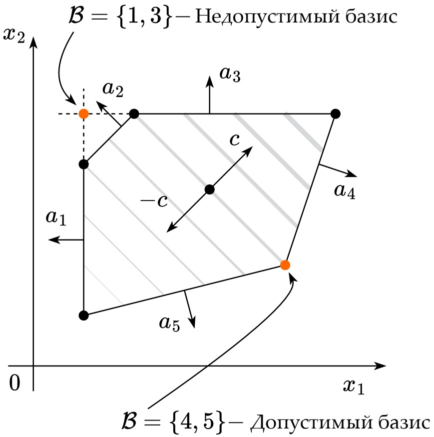
Оптимальный базис



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

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

Оптимальный базис



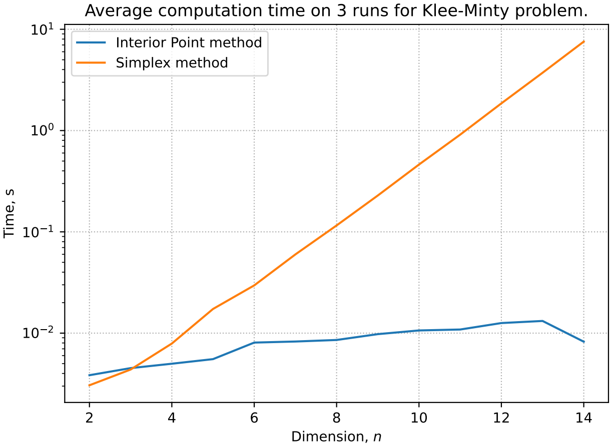
Поскольку у нас есть базис, мы можем разложить наш целевой вектор c в этом базисе и найти скалярные коэффициенты $\lambda_{\mathcal{B}}$:

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

Theorem

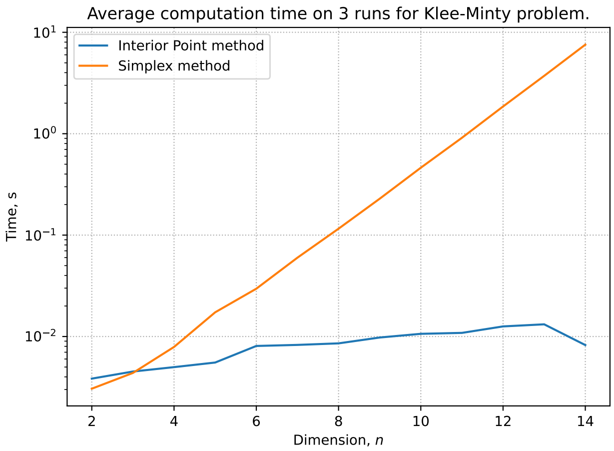
Если все компоненты $\lambda_{\mathcal{B}}$ неположительны и $\mathcal{B}$ допустим, то $\mathcal{B}$ оптимален.

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

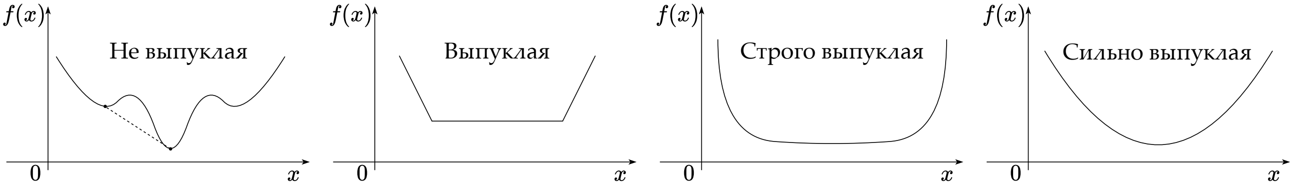


Рисунок 57. Примеры выпуклых функций

Гладкость

ℹ Definition

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

Definition

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.

Дифференциальные критерии L-гладкости (1 и 2 порядка)

Definition

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

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

Дифференциальные критерии L-гладкости (1 и 2 порядка)

Definition

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

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

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

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

Липшицева парабола

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

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

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

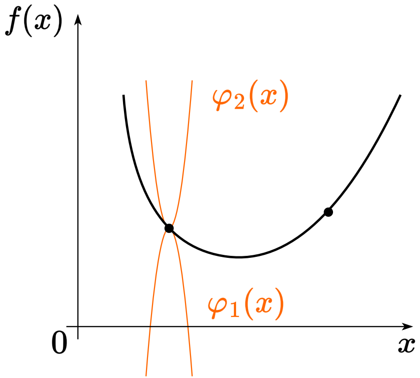


Рисунок 58. Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

Липшицева парабола

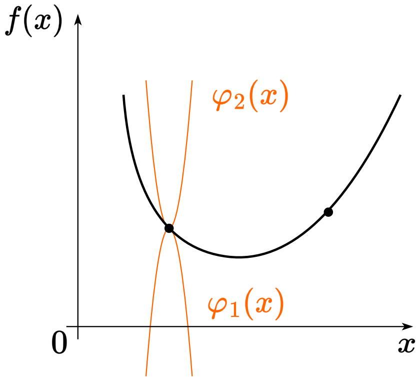


Рисунок 58. Иллюстрация Липшицевых парабол, между которыми зажата гладкая функция. Чаще нас интересует мажорирующая из них.

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

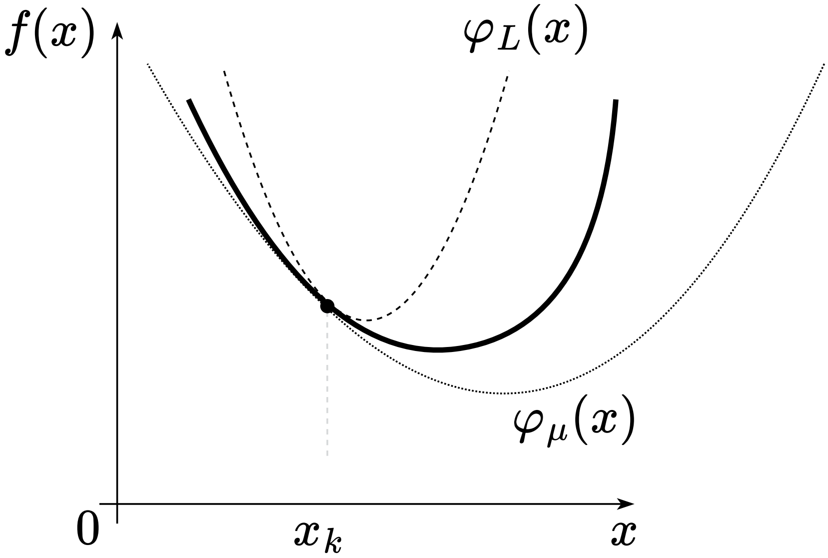
$$\varphi_1(x) = f(x_0) + \langle f(x_0), x - x_0 \rangle - \frac{L}{2}\|x - x_0\|^2$$

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

Это две параболы, и для них верно, что

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

Гладкость и сильная выпуклость



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:

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

Также из неравенства Коши–Буняковского получаем:

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

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:

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

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

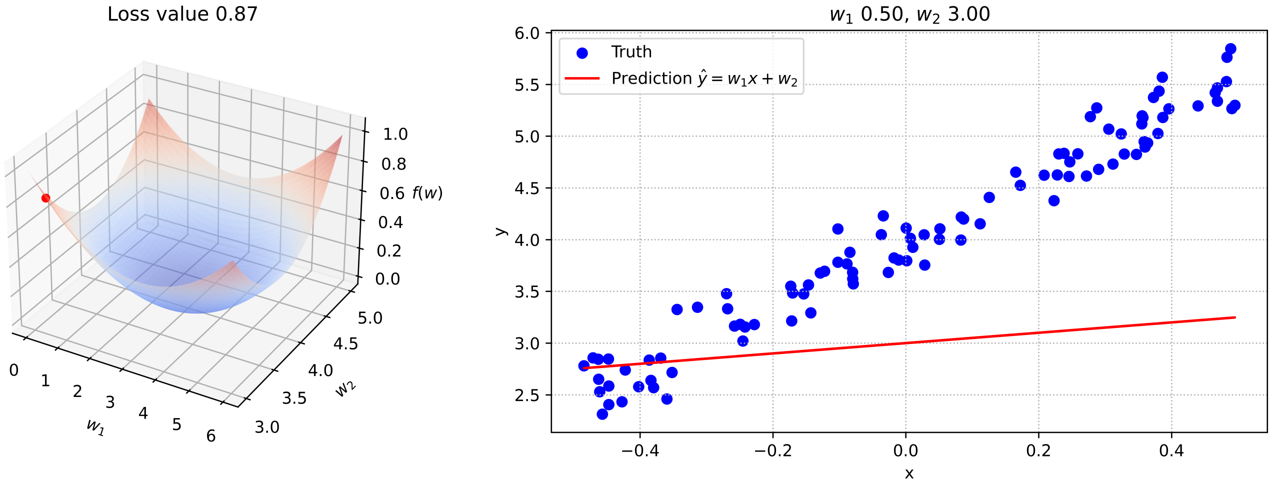
$$h = \arg\min_h \langle \nabla f(x), h\rangle = -\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|_2}$$

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)

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

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 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)

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

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)

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

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:

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

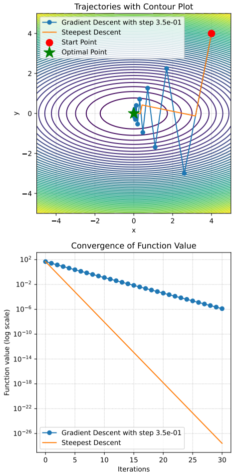


Рисунок 59. Наискорейший спуск

Открыть в Colab ♣

Сходимости в гладком выпуклом случае

Theorem

Предположим, что $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 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 α, 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

Theorem

Рассмотрим задачу

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

и предположим, что f является **PL-функцией с константой** μ **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 α, удовлетворяющим $0 < \alpha \leq \frac{1}{L}$. Пусть $f^* = \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x)$. Тогда:

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

Уведомление

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

Код

Примеры: code snippet.