



Нижние оценки для градиентного спуска.
Ускорение с помощью полиномов
Чебышёва

Даниил Меркулов

Методы оптимизации. МФТИ

Повторение

Результаты сходимости градиентного спуска для гладких функций

Градиентный спуск:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \quad \lambda(\nabla^2 f(x)) \in [\mu, L], \nu = \frac{L}{\mu}$$

выпуклая (негладкая)

$$f(x_k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$$

$$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$$

гладкая (невыпуклая)

$$\min_{0 \leq i \leq k} \|\nabla f(x_i)\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$$

$$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$$

гладкая & выпуклая

$$f(x_k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$$

$$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$$

гладкая & сильно выпуклая

$$\|x_k - x^*\|^2 = \mathcal{O}\left((1 - \frac{\mu}{L})^k\right)$$

$$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\nu \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$$

Результаты сходимости градиентного спуска для гладких функций

Градиентный спуск:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \quad \lambda(\nabla^2 f(x)) \in [\mu, L], \nu = \frac{L}{\mu}$$

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая)	гладкая & выпуклая	гладкая & сильно выпуклая
$f(x_k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$\min_{0 \leq i \leq k} \ \nabla f(x_i)\ = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$f(x_k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$	$\ x_k - x^*\ ^2 = \mathcal{O}\left((1 - \frac{\mu}{L})^k\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\nu \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

Для гладких сильно выпуклых функций имеем:

$$f(x^k) - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k (f(x^0) - f^*).$$

Заметим, что для любого x , вследствие того, что e^{-x} выпукла и $1 - x$ - его касательная в точке $x = 0$,
имеем:

$$1 - x \leq e^{-x}$$

Результаты сходимости градиентного спуска для гладких функций

Градиентный спуск:

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

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

$$\lambda(\nabla^2 f(x)) \in [\mu, L], \nu = \frac{L}{\mu}$$

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая)	гладкая & выпуклая	гладкая & сильно выпуклая
$f(x_k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$\min_{0 \leq i \leq k} \ \nabla f(x_i)\ = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$f(x_k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$	$\ x_k - x^*\ ^2 = \mathcal{O}\left((1 - \frac{\mu}{L})^k\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\nu \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

Для гладких сильно выпуклых функций имеем:

$$f(x^k) - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k (f(x^0) - f^*).$$

Заметим, что для любого x , вследствие того, что e^{-x} выпукла и $1 - x$ - его касательная в точке $x = 0$, имеем:

$$1 - x \leq e^{-x}$$

В конечном итоге имеем:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= f(x^{k_\varepsilon}) - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^{k_\varepsilon} (f(x^0) - f^*) \\ &\leq \exp\left(-k_\varepsilon \frac{\mu}{L}\right) (f(x^0) - f^*) \\ k_\varepsilon &\geq \nu \log \frac{f(x^0) - f^*}{\varepsilon} = \mathcal{O}\left(\nu \log \frac{1}{\varepsilon}\right) \end{aligned}$$

Результаты сходимости градиентного спуска для гладких функций

Градиентный спуск:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \quad \lambda(\nabla^2 f(x)) \in [\mu, L], \nu = \frac{L}{\mu}$$

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая)	гладкая & выпуклая	гладкая & сильно выпуклая
$f(x_k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$\min_{0 \leq i \leq k} \ \nabla f(x_i)\ = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$f(x_k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$	$\ x_k - x^*\ ^2 = \mathcal{O}\left((1 - \frac{\mu}{L})^k\right)$ $k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\nu \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

Для гладких сильно выпуклых функций имеем:

$$f(x^k) - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k (f(x^0) - f^*).$$

Заметим, что для любого x , вследствие того, что e^{-x} выпукла и $1 - x$ - его касательная в точке $x = 0$, имеем:

$$1 - x \leq e^{-x}$$

В конечном итоге имеем:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= f(x^{k_\varepsilon}) - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^{k_\varepsilon} (f(x^0) - f^*) \\ &\leq \exp\left(-k_\varepsilon \frac{\mu}{L}\right) (f(x^0) - f^*) \\ k_\varepsilon &\geq \nu \log \frac{f(x^0) - f^*}{\varepsilon} = \mathcal{O}\left(\nu \log \frac{1}{\varepsilon}\right) \end{aligned}$$

Question: Можно ли быстрее, используя лишь информацию первого порядка (градиенты)?

Результаты сходимости градиентного спуска для гладких функций

Градиентный спуск:

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

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

$$\lambda(\nabla^2 f(x)) \in [\mu, L], \nu = \frac{L}{\mu}$$

выпуклая (негладкая)

$$f(x_k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$$

$$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$$

гладкая (невыпуклая)

$$\min_{0 \leq i \leq k} \|\nabla f(x_i)\| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$$

$$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$$

гладкая & выпуклая

$$f(x_k) - f^* = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$$

$$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$$

гладкая & сильно выпуклая

$$\|x_k - x^*\|^2 = \mathcal{O}\left((1 - \frac{\mu}{L})^k\right)$$

$$k_\varepsilon = \mathcal{O}\left(\nu \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$$

Для гладких сильно выпуклых функций имеем:

$$f(x^k) - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k (f(x^0) - f^*).$$

В конечном итоге имеем:

$$\varepsilon = f(x^{k_\varepsilon}) - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^{k_\varepsilon} (f(x^0) - f^*)$$

$$\leq \exp\left(-k_\varepsilon \frac{\mu}{L}\right) (f(x^0) - f^*)$$

$$k_\varepsilon \geq \nu \log \frac{f(x^0) - f^*}{\varepsilon} = \mathcal{O}\left(\nu \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$$

Заметим, что для любого x , вследствие того, что e^{-x} выпукла и $1 - x$ - его касательная в точке $x = 0$, имеем:

$$1 - x \leq e^{-x}$$

Question: Можно ли быстрее, используя лишь информацию первого порядка (градиенты)? **Да, можно.**

Нижние оценки для произвольных методов I порядка на классе гладких функций

Произвольный метод I порядка: $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad x_{k+1} = x_k - \sum_{i=0}^k \alpha_i \nabla f(x_i) \quad \lambda(\nabla^2 f(x)) \in [\mu, L], \varkappa = \frac{L}{\mu}$

выпуклая (негладкая)	гладкая (невыпуклая) ¹	гладкая & выпуклая ²	гладкая & сильно выпуклая
$f(x_k) - f^* = \Omega\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \Omega\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$\min_{0 \leq i \leq k} \ \nabla f(x_i)\ = \Omega\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ $k_\varepsilon = \Omega\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$	$f(x_k) - f^* = \Omega\left(\frac{1}{k^2}\right)$ $k_\varepsilon = \Omega\left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right)$	$f(x_k) - f^* = \Omega\left(\left(\frac{\sqrt{\varkappa}-1}{\sqrt{\varkappa}+1}\right)^{2k}\right)$ $k_\varepsilon = \Omega\left(\sqrt{\varkappa} \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$

¹Carmon, Duchi, Hinder, Sidford, 2017

²Nemirovski, Yudin, 1979

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \\&= x_{k-1} - \alpha_{k-1} \nabla f(x_{k-1}) - \alpha_k \nabla f(x_k)\end{aligned}$$

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \\&= x_{k-1} - \alpha_{k-1} \nabla f(x_{k-1}) - \alpha_k \nabla f(x_k) \\&\quad \vdots\end{aligned}$$

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \\&= x_{k-1} - \alpha_{k-1} \nabla f(x_{k-1}) - \alpha_k \nabla f(x_k) \\&\quad \vdots \\&= x_0 - \sum_{i=0}^k \alpha_{k-i} \nabla f(x_{k-i})\end{aligned}$$

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \\&= x_{k-1} - \alpha_{k-1} \nabla f(x_{k-1}) - \alpha_k \nabla f(x_k) \\&\quad \vdots \\&= x_0 - \sum_{i=0}^k \alpha_{k-i} \nabla f(x_{k-i})\end{aligned}$$

Рассмотрим семейство методов первого порядка, где

$$\begin{aligned}x_{k+1} &\in x_0 + \text{Lin}\{\nabla f(x_0), \nabla f(x_1), \dots, \nabla f(x_k)\} && f \text{ — гладкая} \\x_{k+1} &\in x_0 + \text{Lin}\{g_0, g_1, \dots, g_k\}, \text{ где } g_i \in \partial f(x_i) && f \text{ — негладкая}\end{aligned}\tag{1}$$

Чёрный ящик

Итерация градиентного спуска:

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \\&= x_{k-1} - \alpha_{k-1} \nabla f(x_{k-1}) - \alpha_k \nabla f(x_k) \\&\quad \vdots \\&= x_0 - \sum_{i=0}^k \alpha_{k-i} \nabla f(x_{k-i})\end{aligned}$$

Рассмотрим семейство методов первого порядка, где

$$\begin{aligned}x_{k+1} &\in x_0 + \text{Lin}\{\nabla f(x_0), \nabla f(x_1), \dots, \nabla f(x_k)\} && f \text{ — гладкая} \\x_{k+1} &\in x_0 + \text{Lin}\{g_0, g_1, \dots, g_k\}, \text{ где } g_i \in \partial f(x_i) && f \text{ — негладкая}\end{aligned}\tag{1}$$

Чтобы построить нижнюю оценку, нам нужно найти функцию f из соответствующего класса, такую, что любой метод из семейства (1) будет работать не быстрее этой нижней оценки.

Гладкий случай

Theorem

Существует L -гладкая и выпуклая функция f , такая, что любой метод (1) для всех k , $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$f(x_k) - f^* \geq \frac{3L\|x_0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

Гладкий случай

Theorem

Существует L -гладкая и выпуклая функция f , такая, что любой метод (1) для всех k , $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$f(x_k) - f^* \geq \frac{3L\|x_0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f , на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.

Гладкий случай

Theorem

Существует L -гладкая и выпуклая функция f , такая, что любой метод (1) для всех k , $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$f(x_k) - f^* \geq \frac{3L\|x_0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f , на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.
- Ключом к доказательству является явное построение специальной функции f .

Гладкий случай

Theorem

Существует L -гладкая и выпуклая функция f , такая, что любой метод (1) для всех k , $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$f(x_k) - f^* \geq \frac{3L\|x_0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f , на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.
- Ключом к доказательству является явное построение специальной функции f .
- Обратите внимание, что эта граница $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ не соответствует скорости градиентного спуска $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$. Два возможных варианта:

Гладкий случай

Theorem

Существует L -гладкая и выпуклая функция f , такая, что любой метод (1) для всех k , $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$f(x_k) - f^* \geq \frac{3L\|x_0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f , на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.
- Ключом к доказательству является явное построение специальной функции f .
- Обратите внимание, что эта граница $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ не соответствует скорости градиентного спуска $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$. Два возможных варианта:
 - а. Нижняя оценка не является точной.

Гладкий случай

Theorem

Существует L -гладкая и выпуклая функция f , такая, что любой метод (1) для всех k , $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$f(x_k) - f^* \geq \frac{3L\|x_0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f , на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.
- Ключом к доказательству является явное построение специальной функции f .
- Обратите внимание, что эта граница $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ не соответствует скорости градиентного спуска $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$. Два возможных варианта:
 - Нижняя оценка не является точной.
 - Метод градиентного спуска не является оптимальным для этой задачи.

Гладкий случай

Theorem

Существует L -гладкая и выпуклая функция f , такая, что любой метод (1) для всех k , $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$f(x_k) - f^* \geq \frac{3L\|x_0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- Какой бы метод из семейства методов первого порядка вы ни использовали, найдётся функция f , на которой скорость сходимости не лучше $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.
- Ключом к доказательству является явное построение специальной функции f .
- Обратите внимание, что эта граница $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ не соответствует скорости градиентного спуска $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$. Два возможных варианта:
 - Нижняя оценка не является точной.
 - Метод градиентного спуска не является оптимальным для этой задачи.**

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть,
что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть,
что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

Пример, когда $n = 3$:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Пример, когда $n = 3$:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Нижняя оценка:

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1 x_2 - 2x_2 x_3 \\ &= x_1^2 + x_1^2 - 2x_1 x_2 + x_2^2 + x_2^2 - 2x_2 x_3 + x_3^2 + x_3^2 \\ &= x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2 \geq 0 \end{aligned}$$

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Пример, когда $n = 3$:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Нижняя оценка:

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1 x_2 - 2x_2 x_3 \\ &= x_1^2 + x_1^2 - 2x_1 x_2 + x_2^2 + x_2^2 - 2x_2 x_3 + x_3^2 + x_3^2 \\ &= x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2 \geq 0 \end{aligned}$$

Верхняя оценка

$$x^T A x = 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1 x_2 - 2x_2 x_3$$

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Пример, когда $n = 3$:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Нижняя оценка:

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1x_2 - 2x_2x_3 \\ &= x_1^2 + x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2 + x_2^2 - 2x_2x_3 + x_3^2 + x_3^2 \\ &= x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2 \geq 0 \end{aligned}$$

Верхняя оценка

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1x_2 - 2x_2x_3 \\ &\leq 4(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \end{aligned}$$

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Пример, когда $n = 3$:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Нижняя оценка:

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1x_2 - 2x_2x_3 \\ &= x_1^2 + x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2 + x_2^2 - 2x_2x_3 + x_3^2 + x_3^2 \\ &= x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2 \geq 0 \end{aligned}$$

Верхняя оценка

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1x_2 - 2x_2x_3 \\ &\leq 4(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \\ 0 &\leq 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 + 2x_1x_2 + 2x_2x_3 \end{aligned}$$

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Пример, когда $n = 3$:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Нижняя оценка:

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1x_2 - 2x_2x_3 \\ &= x_1^2 + x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2 + x_2^2 - 2x_2x_3 + x_3^2 + x_3^2 \\ &= x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2 \geq 0 \end{aligned}$$

Верхняя оценка

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1x_2 - 2x_2x_3 \\ &\leq 4(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \\ 0 &\leq 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 + 2x_1x_2 + 2x_2x_3 \\ 0 &\leq x_1^2 + x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2 + x_2^2 + 2x_2x_3 + x_3^2 + x_3^2 \end{aligned}$$

Наихудшая функция Нестерова

- Пусть $n = 2k + 1$ и $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}$$

- Обратите внимание, что

$$x^T A x = x_1^2 + x_n^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2,$$

Следовательно, $x^T A x \geq 0$. Также легко увидеть, что $0 \preceq A \preceq 4I$.

Пример, когда $n = 3$:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Нижняя оценка:

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1 x_2 - 2x_2 x_3 \\ &= x_1^2 + x_1^2 - 2x_1 x_2 + x_2^2 + x_2^2 - 2x_2 x_3 + x_3^2 + x_3^2 \\ &= x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2 \geq 0 \end{aligned}$$

Верхняя оценка

$$\begin{aligned} x^T A x &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 2x_1 x_2 - 2x_2 x_3 \\ &\leq 4(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \\ 0 &\leq 2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 + 2x_1 x_2 + 2x_2 x_3 \\ 0 &\leq x_1^2 + x_1^2 + 2x_1 x_2 + x_2^2 + x_2^2 + 2x_2 x_3 + x_3^2 + x_3^2 \\ 0 &\leq x_1^2 + (x_1 + x_2)^2 + (x_2 + x_3)^2 + x_3^2 \end{aligned}$$

Наихудшая функция Нестерова

- Определим следующую L -гладкую выпуклую функцию: $f(x) = \frac{L}{4} \left(\frac{1}{2}x^T Ax - e_1^T x \right) = \frac{L}{8}x^T Ax - \frac{L}{4}e_1^T x.$

Наихудшая функция Нестерова

- Определим следующую L -гладкую выпуклую функцию: $f(x) = \frac{L}{4} \left(\frac{1}{2}x^T Ax - e_1^T x \right) = \frac{L}{8}x^T Ax - \frac{L}{4}e_1^T x$.
- Оптимальное решение x^* удовлетворяет $Ax^* = e_1$, и решение этой системы уравнений дает:

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{cases} 2x_1^* - x_2^* = 1 \\ -x_{i-1}^* + 2x_i^* - x_{i+1}^* = 0, \quad i = 2, \dots, n-1 \\ -x_{n-1}^* + 2x_n^* = 0 \end{cases}$$

Наихудшая функция Нестерова

- Определим следующую L -гладкую выпуклую функцию: $f(x) = \frac{L}{4} \left(\frac{1}{2}x^T Ax - e_1^T x \right) = \frac{L}{8}x^T Ax - \frac{L}{4}e_1^T x$.
- Оптимальное решение x^* удовлетворяет $Ax^* = e_1$, и решение этой системы уравнений дает:

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{cases} 2x_1^* - x_2^* = 1 \\ -x_{i-1}^* + 2x_i^* - x_{i+1}^* = 0, \quad i = 2, \dots, n-1 \\ -x_{n-1}^* + 2x_n^* = 0 \end{cases}$$

- Гипотеза: $x_i^* = a + bi$ (вдохновлённая физикой). Проверьте, что выполнено второе уравнение, в то время как a и b вычисляются из первого и последнего уравнений.

Наихудшая функция Нестерова

- Определим следующую L -гладкую выпуклую функцию: $f(x) = \frac{L}{4} \left(\frac{1}{2}x^T Ax - e_1^T x \right) = \frac{L}{8}x^T Ax - \frac{L}{4}e_1^T x$.
- Оптимальное решение x^* удовлетворяет $Ax^* = e_1$, и решение этой системы уравнений дает:

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{cases} 2x_1^* - x_2^* = 1 \\ -x_{i-1}^* + 2x_i^* - x_{i+1}^* = 0, \quad i = 2, \dots, n-1 \\ -x_{n-1}^* + 2x_n^* = 0 \end{cases}$$

- Гипотеза: $x_i^* = a + bi$ (вдохновлённая физикой). Проверьте, что выполнено второе уравнение, в то время как a и b вычисляются из первого и последнего уравнений.
- Решение:

$$x_i^* = 1 - \frac{i}{n+1},$$

Наихудшая функция Нестерова

- Определим следующую L -гладкую выпуклую функцию: $f(x) = \frac{L}{4} \left(\frac{1}{2}x^T Ax - e_1^T x \right) = \frac{L}{8}x^T Ax - \frac{L}{4}e_1^T x$.
- Оптимальное решение x^* удовлетворяет $Ax^* = e_1$, и решение этой системы уравнений дает:

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{cases} 2x_1^* - x_2^* = 1 \\ -x_{i-1}^* + 2x_i^* - x_{i+1}^* = 0, \quad i = 2, \dots, n-1 \\ -x_{n-1}^* + 2x_n^* = 0 \end{cases}$$

- Гипотеза: $x_i^* = a + bi$ (вдохновлённая физикой). Проверьте, что выполнено второе уравнение, в то время как a и b вычисляются из первого и последнего уравнений.
- Решение:

$$x_i^* = 1 - \frac{i}{n+1},$$

- И значение функции равно

$$f(x^*) = \frac{L}{8}x^{*T}Ax^* - \frac{L}{4}\langle x^*, e_1 \rangle = -\frac{L}{8}\langle x^*, e_1 \rangle = -\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{n+1} \right).$$

Гладкий случай (доказательство)

- Предположим, что мы начинаем с $x_0 = 0$.

Запросив у оракула градиент, мы получаем

$g_0 = -\frac{L}{4}e_1$. Тогда, x_1 должен лежать на линии, генерируемой e_1 . В этой точке все компоненты x_1 равны нулю, кроме первой, поэтому

$$x_1 = \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Гладкий случай (доказательство)

- Предположим, что мы начинаем с $x_0 = 0$.

Запросив у оракула градиент, мы получаем

$g_0 = -\frac{L}{4}e_1$. Тогда, x_1 должен лежать на линии, генерируемой e_1 . В этой точке все компоненты x_1 равны нулю, кроме первой, поэтому

$$x_1 = \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- На второй итерации оракул возвращает градиент $g_1 = \frac{L}{4}(Ax_1 - e_1)$. Тогда, x_2 должен лежать на линии, генерируемой e_1 и $Ax_1 - e_1$. Все компоненты x_2 равны нулю, кроме первых двух, поэтому

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow x_2 = \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Гладкий случай (доказательство)

- Предположим, что мы начинаем с $x_0 = 0$.

Запросив у оракула градиент, мы получаем $g_0 = -\frac{L}{4}e_1$. Тогда, x_1 должен лежать на линии, генерируемой e_1 . В этой точке все компоненты x_1 равны нулю, кроме первой, поэтому

$$x_1 = \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- На второй итерации оракул возвращает градиент $g_1 = \frac{L}{4}(Ax_1 - e_1)$. Тогда, x_2 должен лежать на линии, генерируемой e_1 и $Ax_1 - e_1$. Все компоненты x_2 равны нулю, кроме первых двух, поэтому

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow x_2 = \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- Из-за структуры матрицы A можно показать, что после k итераций все последние $n - k$ компоненты x_k равны нулю.

$$x_k = \begin{bmatrix} \bullet \\ \bullet \\ \vdots \\ \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ k \\ k+1 \\ \vdots \\ n \end{matrix}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Предположим, что мы начинаем с $x_0 = 0$.

Запросив у оракула градиент, мы получаем $g_0 = -\frac{L}{4}e_1$. Тогда, x_1 должен лежать на линии, генерируемой e_1 . В этой точке все компоненты x_1 равны нулю, кроме первой, поэтому

$$x_1 = \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- На второй итерации оракул возвращает градиент $g_1 = \frac{L}{4}(Ax_1 - e_1)$. Тогда, x_2 должен лежать на линии, генерируемой e_1 и $Ax_1 - e_1$. Все компоненты x_2 равны нулю, кроме первых двух, поэтому

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow x_2 = \begin{bmatrix} \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- Из-за структуры матрицы A можно показать, что после k итераций все последние $n - k$ компоненты x_k равны нулю.

$$x_k = \begin{bmatrix} \bullet \\ \bullet \\ \vdots \\ \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ k \\ k+1 \\ \vdots \\ n \end{matrix}$$

- Однако, поскольку каждая итерация x_k , произведенная нашим методом, лежит в $S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ (т.е. имеет нули в координатах $k+1, \dots, n$), она не может “достичь” полного оптимального вектора x^* . Другими словами, даже если бы мы выбрали лучший возможный вектор из S_k , обозначаемый

$$\tilde{x}_k = \arg \min_{x \in S_k} f(x),$$

значение функции в нём $f(\tilde{x}_k)$ будет выше, чем $f(x^*)$.

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x_k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ и \tilde{x}_k является лучшим возможным приближением к x^* в S_k , мы имеем

$$f(x_k) \geq f(\tilde{x}_k).$$

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x_k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ и \tilde{x}_k является лучшим возможным приближением к x^* в S_k , мы имеем

$$f(x_k) \geq f(\tilde{x}_k).$$

- Следовательно,

$$f(x_k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}_k) - f(x^*).$$

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x_k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ и \tilde{x}_k является лучшим возможным приближением к x^* в S_k , мы имеем

$$f(x_k) \geq f(\tilde{x}_k).$$

- Следовательно,

$$f(x_k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}_k) - f(x^*).$$

- Аналогично, для оптимума исходной функции, мы имеем $\tilde{x}_{k(i)} = 1 - \frac{i}{k+1}$ и $f(\tilde{x}_k) = -\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$.

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x_k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ и \tilde{x}_k является лучшим возможным приближением к x^* в S_k , мы имеем

$$f(x_k) \geq f(\tilde{x}_k).$$

- Следовательно,

$$f(x_k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}_k) - f(x^*).$$

- Аналогично, для оптимума исходной функции, мы имеем $\tilde{x}_{k_{(i)}} = 1 - \frac{i}{k+1}$ и $f(\tilde{x}_k) = -\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$.

- Теперь мы имеем:

$$f(x_k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}_k) - f(x^*)$$

(2)

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x_k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ и \tilde{x}_k является лучшим возможным приближением к x^* в S_k , мы имеем

$$f(x_k) \geq f(\tilde{x}_k).$$

- Следовательно,

$$f(x_k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}_k) - f(x^*).$$

- Аналогично, для оптимума исходной функции, мы имеем $\tilde{x}_{k_{(i)}} = 1 - \frac{i}{k+1}$ и $f(\tilde{x}_k) = -\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$.

- Теперь мы имеем:

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(x^*) &\geq f(\tilde{x}_k) - f(x^*) \\ &= -\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{k+1}\right) - \left(-\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{n+1}\right)\right) \end{aligned} \tag{2}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x_k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ и \tilde{x}_k является лучшим возможным приближением к x^* в S_k , мы имеем

$$f(x_k) \geq f(\tilde{x}_k).$$

- Следовательно,

$$f(x_k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}_k) - f(x^*).$$

- Аналогично, для оптимума исходной функции, мы имеем $\tilde{x}_{k_{(i)}} = 1 - \frac{i}{k+1}$ и $f(\tilde{x}_k) = -\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$.

- Теперь мы имеем:

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(x^*) &\geq f(\tilde{x}_k) - f(x^*) \\ &= -\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{k+1}\right) - \left(-\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{n+1}\right)\right) \\ &= \frac{L}{8} \left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{n+1}\right) = \frac{L}{8} \left(\frac{n-k}{(k+1)(n+1)}\right) \end{aligned} \tag{2}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Поскольку $x_k \in S_k = \text{Lin}\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ и \tilde{x}_k является лучшим возможным приближением к x^* в S_k , мы имеем

$$f(x_k) \geq f(\tilde{x}_k).$$

- Следовательно,

$$f(x_k) - f(x^*) \geq f(\tilde{x}_k) - f(x^*).$$

- Аналогично, для оптимума исходной функции, мы имеем $\tilde{x}_{k_{(i)}} = 1 - \frac{i}{k+1}$ и $f(\tilde{x}_k) = -\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$.
- Теперь мы имеем:

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(x^*) &\geq f(\tilde{x}_k) - f(x^*) \\ &= -\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{k+1}\right) - \left(-\frac{L}{8} \left(1 - \frac{1}{n+1}\right)\right) \\ &= \frac{L}{8} \left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{n+1}\right) = \frac{L}{8} \left(\frac{n-k}{(k+1)(n+1)}\right) \\ &\stackrel{n=2k+1}{=} \frac{L}{16(k+1)} \end{aligned} \tag{2}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x_0 - x^*\|_2$:

$$\|x_0 - x^*\|_2^2 = \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x_0 - x^*\|_2$:

$$\begin{aligned}\|x_0 - x^*\|_2^2 &= \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 \\ &= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^n i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^n i^2\end{aligned}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x_0 - x^*\|_2$:

$$\begin{aligned}\|x_0 - x^*\|_2^2 &= \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 \\ &= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^n i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^n i^2 \\ &\leq n - \frac{2}{n+1} \cdot \frac{n(n+1)}{2} + \frac{1}{(n+1)^2} \cdot \frac{(n+1)^3}{3}\end{aligned}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x_0 - x^*\|_2$:

$$\begin{aligned}\|x_0 - x^*\|_2^2 &= \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 \\ &= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^n i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^n i^2 \\ &\leq n - \frac{2}{n+1} \cdot \frac{n(n+1)}{2} + \frac{1}{(n+1)^2} \cdot \frac{(n+1)^3}{3} \\ &= \frac{n+1}{3} \stackrel{n=2k+1}{=} \frac{2(k+1)}{3}.\end{aligned}$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x_0 - x^*\|_2$:

$$\begin{aligned}\|x_0 - x^*\|_2^2 &= \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 \\ &= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^n i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^n i^2 \\ &\leq n - \frac{2}{n+1} \cdot \frac{n(n+1)}{2} + \frac{1}{(n+1)^2} \cdot \frac{(n+1)^3}{3} \\ &= \frac{n+1}{3} \stackrel{n=2k+1}{=} \frac{2(k+1)}{3}.\end{aligned}$$

- Следовательно,

$$k+1 \geq \frac{3}{2} \|x_0 - x^*\|_2^2 = \frac{3}{2} R^2 \quad (3)$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x_0 - x^*\|_2$:

$$\begin{aligned}\|x_0 - x^*\|_2^2 &= \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 \\ &= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^n i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^n i^2 \\ &\leq n - \frac{2}{n+1} \cdot \frac{n(n+1)}{2} + \frac{1}{(n+1)^2} \cdot \frac{(n+1)^3}{3} \\ &= \frac{n+1}{3} \stackrel{n=2k+1}{=} \frac{2(k+1)}{3}.\end{aligned}$$

- Следовательно,

$$k+1 \geq \frac{3}{2} \|x_0 - x^*\|_2^2 = \frac{3}{2} R^2 \quad (3)$$

Гладкий случай (доказательство)

- Теперь мы ограничиваем $R = \|x_0 - x^*\|_2$:

$$\begin{aligned}\|x_0 - x^*\|_2^2 &= \|0 - x^*\|_2^2 = \|x^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 \\ &= n - \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^n i + \frac{1}{(n+1)^2} \sum_{i=1}^n i^2 \\ &\leq n - \frac{2}{n+1} \cdot \frac{n(n+1)}{2} + \frac{1}{(n+1)^2} \cdot \frac{(n+1)^3}{3} \\ &= \frac{n+1}{3} \stackrel{n=2k+1}{=} \frac{2(k+1)}{3}.\end{aligned}$$

- Следовательно,

$$k+1 \geq \frac{3}{2} \|x_0 - x^*\|_2^2 = \frac{3}{2} R^2 \quad (3)$$

Заметим, что

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n i &= \frac{n(n+1)}{2} \\ \sum_{i=1}^n i^2 &= \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} \\ &\leq \frac{(n+1)^3}{3}\end{aligned}$$

Гладкий случай (доказательство)

Наконец, используя (2) и (3), мы получаем:

$$f(x_k) - f(x^*) \geq \frac{L}{16(k+1)} = \frac{L(k+1)}{16(k+1)^2}$$

Гладкий случай (доказательство)

Наконец, используя (2) и (3), мы получаем:

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(x^*) &\geq \frac{L}{16(k+1)} = \frac{L(k+1)}{16(k+1)^2} \\ &\geq \frac{L}{16(k+1)^2} \frac{3}{2} R^2 \end{aligned}$$

Гладкий случай (доказательство)

Наконец, используя (2) и (3), мы получаем:

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(x^*) &\geq \frac{L}{16(k+1)} = \frac{L(k+1)}{16(k+1)^2} \\ &\geq \frac{L}{16(k+1)^2} \frac{3}{2} R^2 \\ &= \frac{3LR^2}{32(k+1)^2} \end{aligned}$$

Гладкий случай (доказательство)

Наконец, используя (2) и (3), мы получаем:

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(x^*) &\geq \frac{L}{16(k+1)} = \frac{L(k+1)}{16(k+1)^2} \\ &\geq \frac{L}{16(k+1)^2} \frac{3}{2} R^2 \\ &= \frac{3LR^2}{32(k+1)^2} \end{aligned}$$

Это завершает доказательство с желаемой скоростью $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$.

Нижние оценки для гладкого случая

Гладкий выпуклый случай

Существует L -гладкая выпуклая функция f , такая, что любой метод в форме 1 для всех k , $1 \leq k \leq \frac{n-1}{2}$, удовлетворяет:

$$f(x_k) - f^* \geq \frac{3L\|x_0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

Гладкий сильно выпуклый случай

Для любого x_0 и любого $\mu > 0$, $\varkappa = \frac{L}{\mu} > 1$, существует L -гладкая и μ -сильно выпуклая функция f , такая, что для любого метода в форме 1 выполняются неравенства:

$$\|x_k - x^*\|_2 \geq \left(\frac{\sqrt{\varkappa} - 1}{\sqrt{\varkappa} + 1} \right)^k \|x_0 - x^*\|_2$$

$$f(x_k) - f^* \geq \frac{\mu}{2} \left(\frac{\sqrt{\varkappa} - 1}{\sqrt{\varkappa} + 1} \right)^{2k} \|x_0 - x^*\|_2^2$$

Ускорение для квадратичных функций

Результат сходимости для квадратичных функций

Предположим, что мы решаем задачу минимизации сильно выпуклой квадратичной функции, с помощью метода градиентного спуска:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x \quad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Результат сходимости для квадратичных функций

Предположим, что мы решаем задачу минимизации сильно выпуклой квадратичной функции, с помощью метода градиентного спуска:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x \quad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Theorem

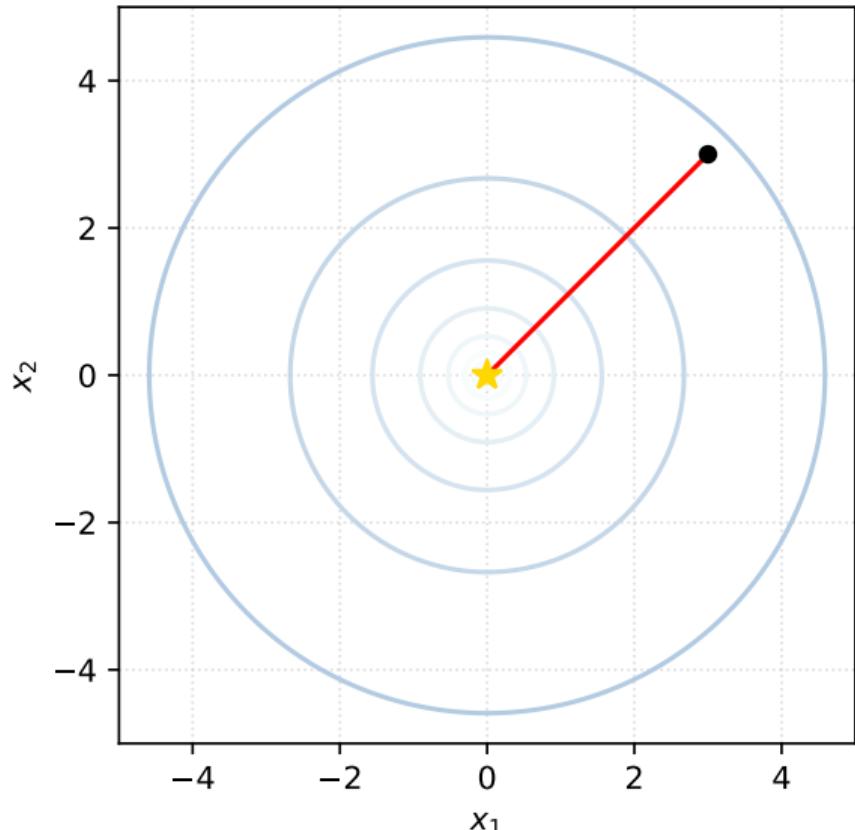
Градиентный спуск с шагом $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$ сходится к оптимальному решению x^* со следующей гарантией:

$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq \left(\frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1}\right)^k \|x_0 - x^*\|_2 \quad f(x_{k+1}) - f(x^*) \leq \left(\frac{\varkappa - 1}{\varkappa + 1}\right)^{2k} (f(x_0) - f(x^*))$$

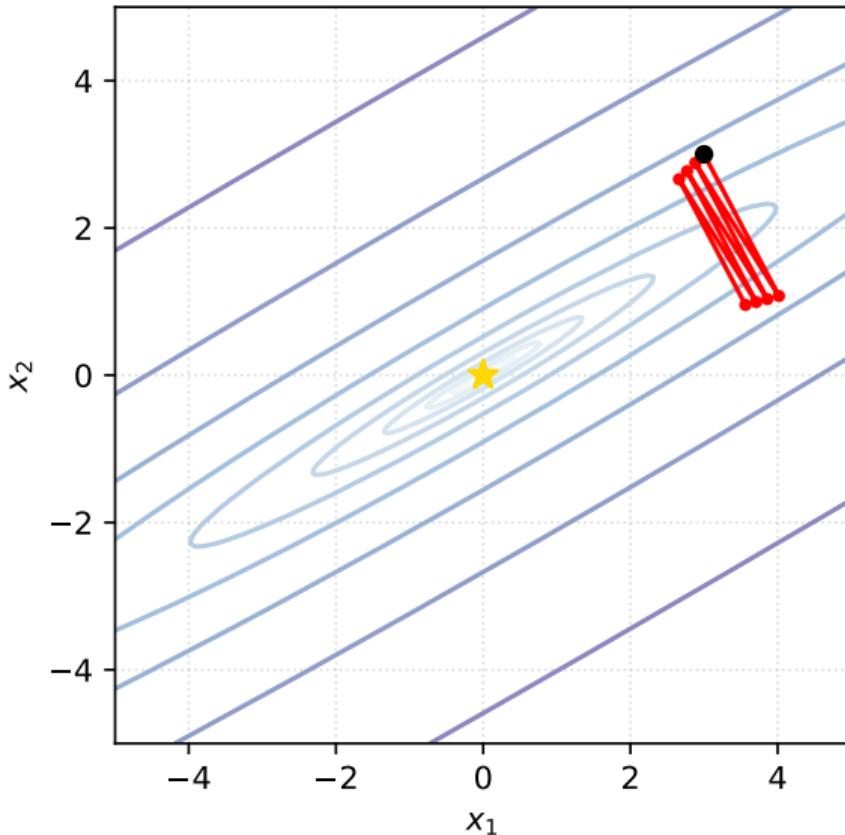
где $\varkappa = \frac{L}{\mu}$ является числом обусловленности A .

Число обусловленности κ

$$\kappa = 1.0$$



$$\kappa = 100.0$$



Ускорение из первых принципов

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x \quad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Пусть x^* будет единственным решением системы линейных уравнений $Ax = b$ и пусть $e_k = x_k - x^*$, где $x_{k+1} = x_k - \alpha_k(Ax_k - b)$ определяется рекурсивно, начиная с некоторого x_0 , а α_k — шаг, который мы определим позже.

$$e_{k+1} = (I - \alpha_k A)e_k.$$

Ускорение из первых принципов

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x \quad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Пусть x^* будет единственным решением системы линейных уравнений $Ax = b$ и пусть $e_k = x_k - x^*$, где $x_{k+1} = x_k - \alpha_k(Ax_k - b)$ определяется рекурсивно, начиная с некоторого x_0 , а α_k — шаг, который мы определим позже.

$$e_{k+1} = (I - \alpha_k A)e_k.$$

Полиномы

Вышеуказанный расчет дает нам $e_k = p_k(A)e_0$,
где p_k является полиномом

$$p_k(a) = \prod_{i=1}^k (1 - \alpha_i a).$$

Ускорение из первых принципов

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x \quad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Пусть x^* будет единственным решением системы линейных уравнений $Ax = b$ и пусть $e_k = x_k - x^*$, где $x_{k+1} = x_k - \alpha_k(Ax_k - b)$ определяется рекурсивно, начиная с некоторого x_0 , а α_k — шаг, который мы определим позже.

$$e_{k+1} = (I - \alpha_k A)e_k.$$

Полиномы

Вышеуказанный расчет дает нам $e_k = p_k(A)e_0$,
где p_k является полиномом

$$p_k(a) = \prod_{i=1}^k (1 - \alpha_i a).$$

Мы можем ограничить норму ошибки как

$$\|e_k\| \leq \|p_k(A)\| \cdot \|e_0\|.$$

Ускорение из первых принципов

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x \quad x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Пусть x^* будет единственным решением системы линейных уравнений $Ax = b$ и пусть $e_k = x_k - x^*$, где $x_{k+1} = x_k - \alpha_k(Ax_k - b)$ определяется рекурсивно, начиная с некоторого x_0 , а α_k — шаг, который мы определим позже.

$$e_{k+1} = (I - \alpha_k A)e_k.$$

Полиномы

Вышеуказанный расчет дает нам $e_k = p_k(A)e_0$,
где p_k является полиномом

$$p_k(a) = \prod_{i=1}^k (1 - \alpha_i a).$$

Мы можем ограничить норму ошибки как

$$\|e_k\| \leq \|p_k(A)\| \cdot \|e_0\|.$$

Поскольку A является симметричной матрицей с собственными значениями в $[\mu, L]$:

$$\|p_k(A)\| \leq \max_{\mu \leq a \leq L} |p_k(a)|.$$

Это приводит к интересной постановке задачи: среди всех полиномов, удовлетворяющих $p_k(0) = 1$, мы ищем полином, значение которого как можно меньше отклоняется от нуля на интервале $[\mu, L]$.

Наивное полиномиальное решение

Наивное решение состоит в том, чтобы выбрать равномерный шаг $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$. Благодаря этому $|p_k(\mu)| = |p_k(L)|$.

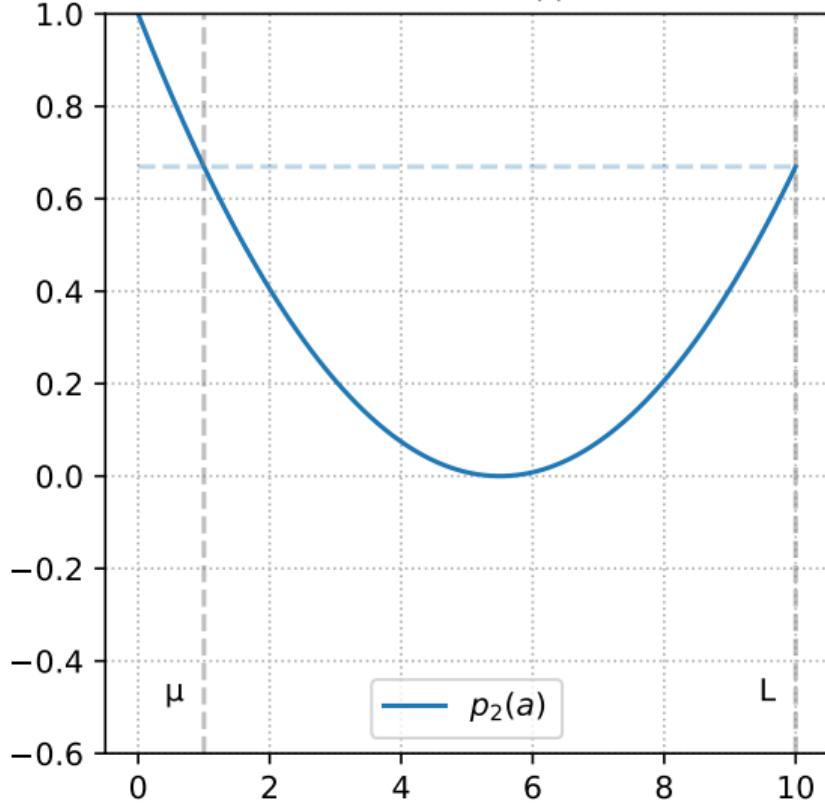
$$\|e_k\| \leq \left(\frac{\mu - 1}{\mu + 1} \right)^k \|e_0\|$$

Это точно та же скорость, которую мы доказали в предыдущей лекции для любой гладкой и сильно выпуклой функции.

Давайте посмотрим на этот полином поближе. На правом рисунке мы выбираем $\mu = 1$ и $L = 10$ так, что $\varkappa = 10$. Следовательно, соответствующий интервал равен $[1, 10]$.

Можем ли мы сделать лучше? Ответ — да.

Наивные полиномы до 2 степени



Наивное полиномиальное решение

Наивное решение состоит в том, чтобы выбрать равномерный шаг $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$. Благодаря этому $|p_k(\mu)| = |p_k(L)|$.

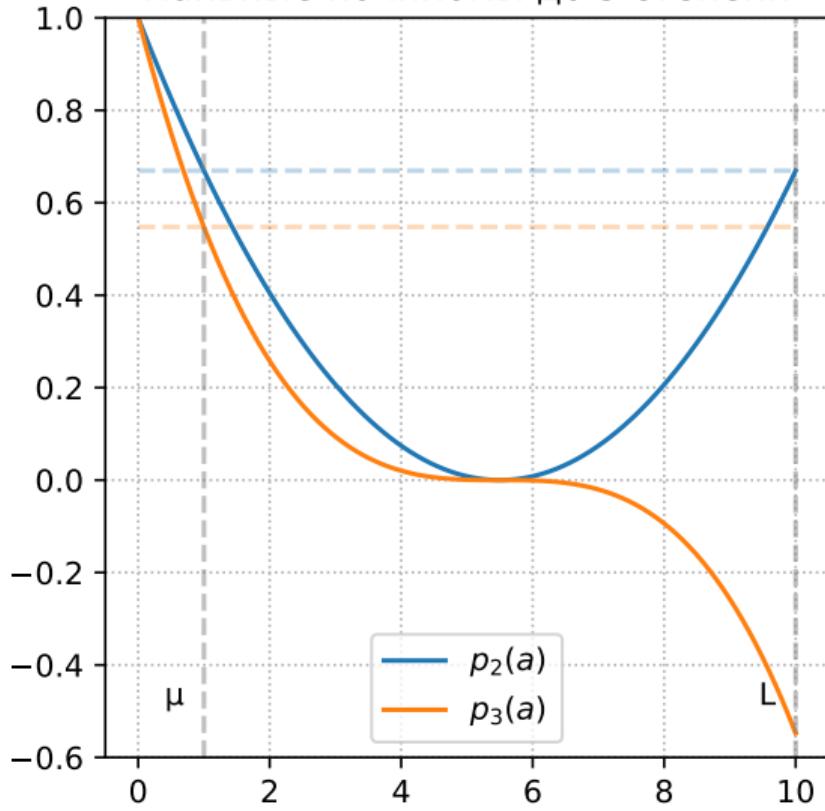
$$\|e_k\| \leq \left(\frac{\mu - 1}{\mu + 1} \right)^k \|e_0\|$$

Это точно та же скорость, которую мы доказали в предыдущей лекции для любой гладкой и сильно выпуклой функции.

Давайте посмотрим на этот полином поближе. На правом рисунке мы выбираем $\mu = 1$ и $L = 10$ так, что $\varkappa = 10$. Следовательно, соответствующий интервал равен $[1, 10]$.

Можем ли мы сделать лучше? Ответ — да.

Наивные полиномы до 3 степени



Наивное полиномиальное решение

Наивное решение состоит в том, чтобы выбрать равномерный шаг $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$. Благодаря этому $|p_k(\mu)| = |p_k(L)|$.

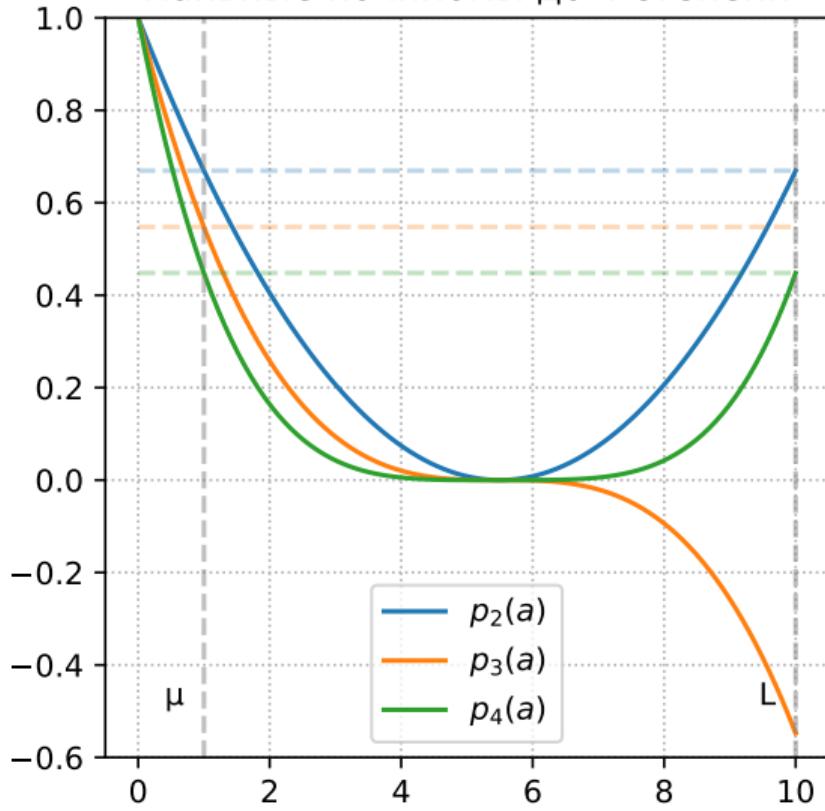
$$\|e_k\| \leq \left(\frac{\mu - 1}{\mu + 1} \right)^k \|e_0\|$$

Это точно та же скорость, которую мы доказали в предыдущей лекции для любой гладкой и сильно выпуклой функции.

Давайте посмотрим на этот полином поближе. На правом рисунке мы выбираем $\mu = 1$ и $L = 10$ так, что $\varkappa = 10$. Следовательно, соответствующий интервал равен $[1, 10]$.

Можем ли мы сделать лучше? Ответ — да.

Наивные полиномы до 4 степени



Наивное полиномиальное решение

Наивное решение состоит в том, чтобы выбрать равномерный шаг $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$. Благодаря этому $|p_k(\mu)| = |p_k(L)|$.

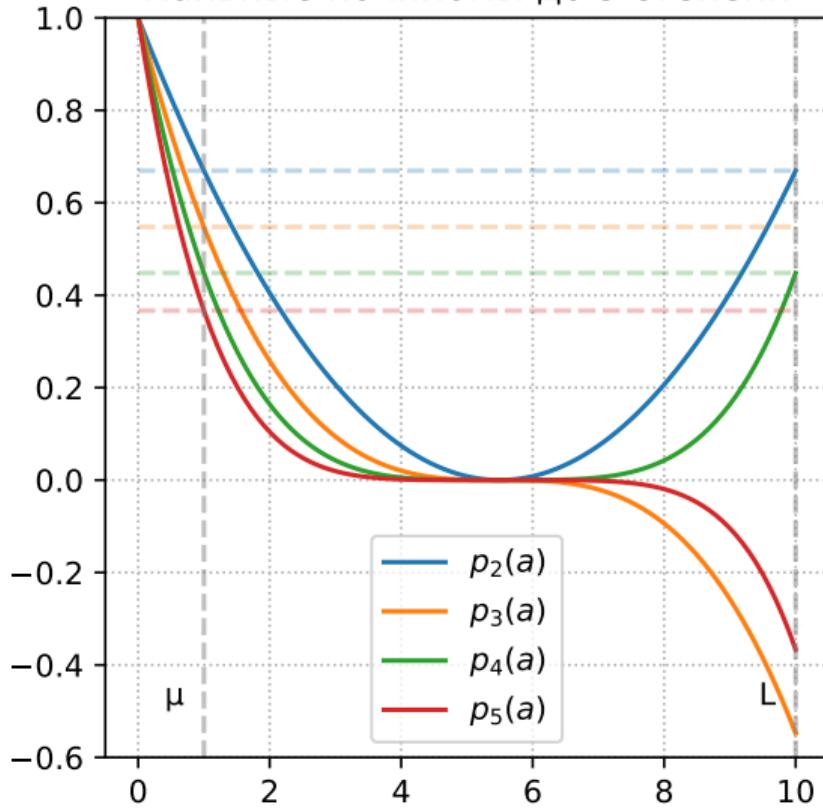
$$\|e_k\| \leq \left(\frac{\mu - 1}{\mu + 1} \right)^k \|e_0\|$$

Это точно та же скорость, которую мы доказали в предыдущей лекции для любой гладкой и сильно выпуклой функции.

Давайте посмотрим на этот полином поближе. На правом рисунке мы выбираем $\mu = 1$ и $L = 10$ так, что $\varkappa = 10$. Следовательно, соответствующий интервал равен $[1, 10]$.

Можем ли мы сделать лучше? Ответ — да.

Наивные полиномы до 5 степени



Наивное полиномиальное решение

Наивное решение состоит в том, чтобы выбрать равномерный шаг $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$. Благодаря этому $|p_k(\mu)| = |p_k(L)|$.

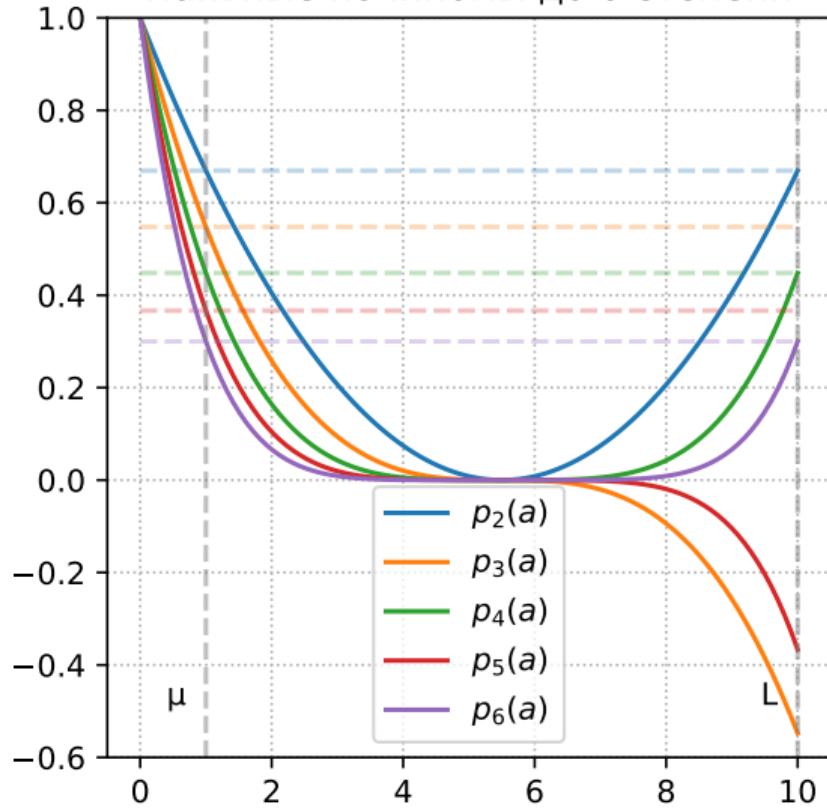
$$\|e_k\| \leq \left(\frac{\mu - 1}{\mu + 1} \right)^k \|e_0\|$$

Это точно та же скорость, которую мы доказали в предыдущей лекции для любой гладкой и сильно выпуклой функции.

Давайте посмотрим на этот полином поближе. На правом рисунке мы выбираем $\mu = 1$ и $L = 10$ так, что $\varkappa = 10$. Следовательно, соответствующий интервал равен $[1, 10]$.

Можем ли мы сделать лучше? Ответ — да.

Наивные полиномы до 6 степени



Полиномы Чебышева

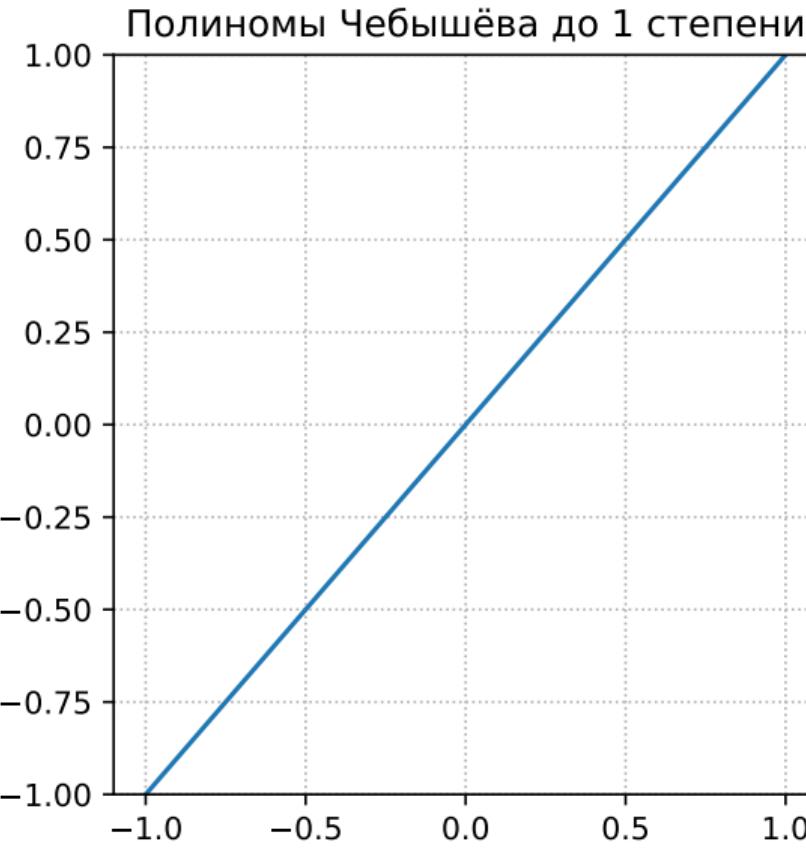
Полиномы Чебышёва дают оптимальный ответ на поставленный вопрос. При соответствующем шкалировании они минимизируют абсолютное значение на заданном интервале $[\mu, L]$, одновременно удовлетворяя нормировочному условию $p(0) = 1$.

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \quad k \geq 2.$$

Давайте построим стандартные полиномы Чебышёва (без масштабирования):



Полиномы Чебышева

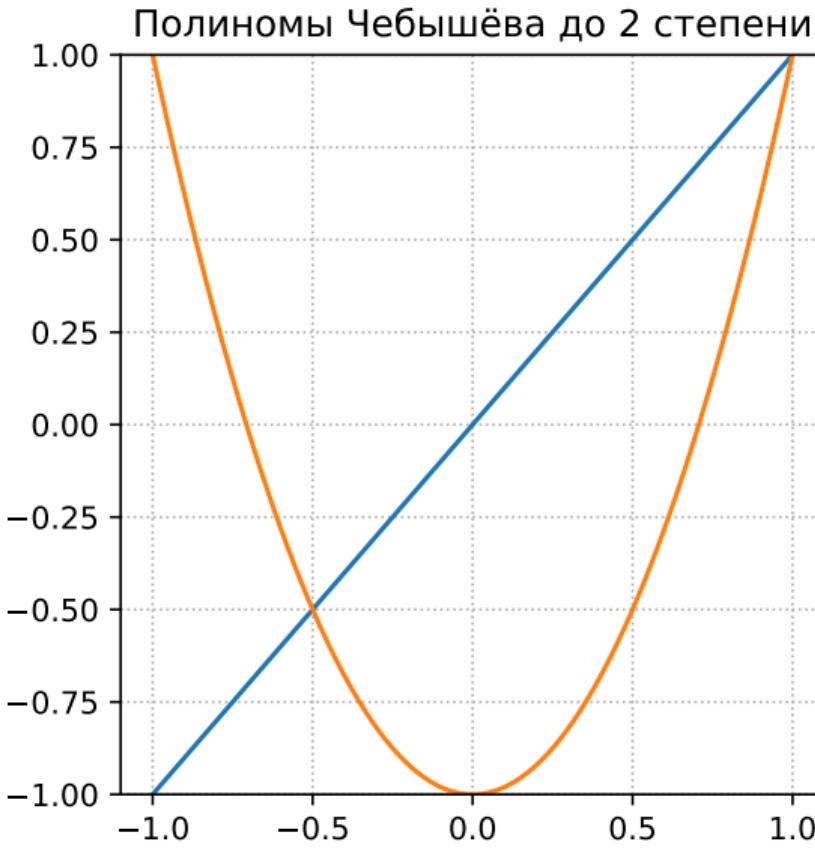
Полиномы Чебышёва дают оптимальный ответ на поставленный вопрос. При соответствующем шкалировании они минимизируют абсолютное значение на заданном интервале $[\mu, L]$, одновременно удовлетворяя нормировочному условию $p(0) = 1$.

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \quad k \geq 2.$$

Давайте построим стандартные полиномы Чебышёва (без масштабирования):



Полиномы Чебышева

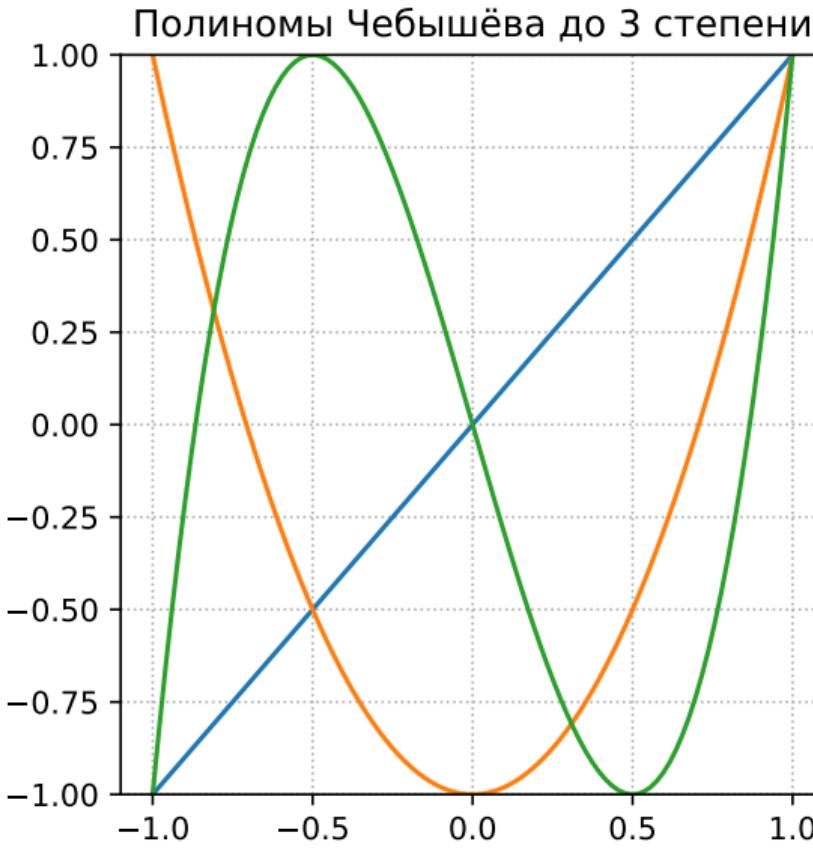
Полиномы Чебышёва дают оптимальный ответ на поставленный вопрос. При соответствующем шкалировании они минимизируют абсолютное значение на заданном интервале $[\mu, L]$, одновременно удовлетворяя нормировочному условию $p(0) = 1$.

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \quad k \geq 2.$$

Давайте построим стандартные полиномы Чебышёва (без масштабирования):



Полиномы Чебышева

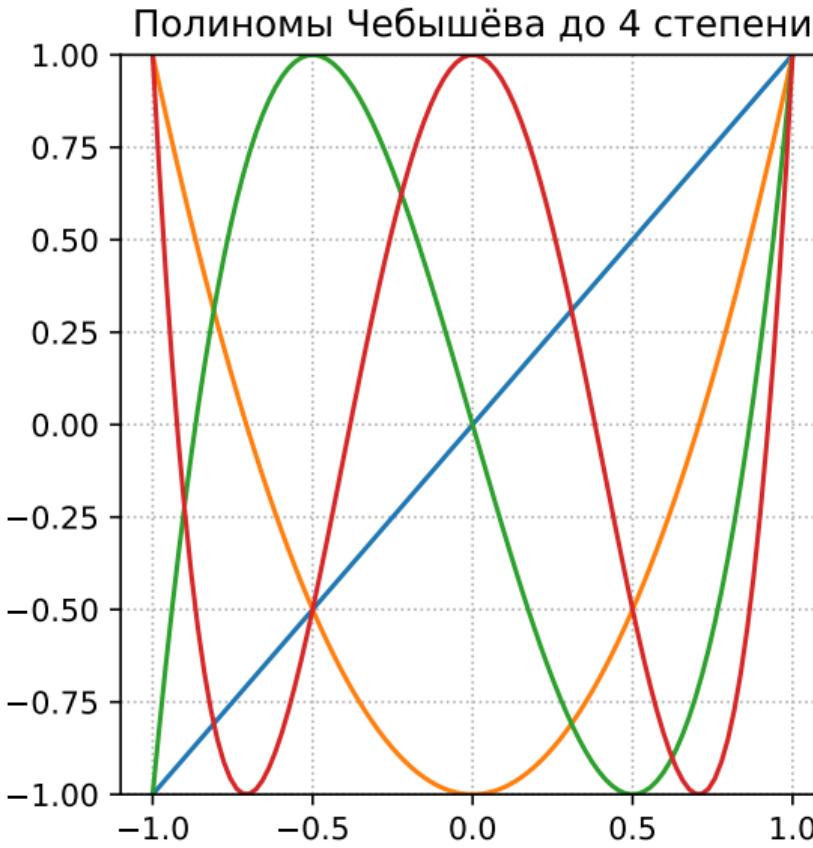
Полиномы Чебышёва дают оптимальный ответ на поставленный вопрос. При соответствующем шкалировании они минимизируют абсолютное значение на заданном интервале $[\mu, L]$, одновременно удовлетворяя нормировочному условию $p(0) = 1$.

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \quad k \geq 2.$$

Давайте построим стандартные полиномы Чебышёва (без масштабирования):



Полиномы Чебышева

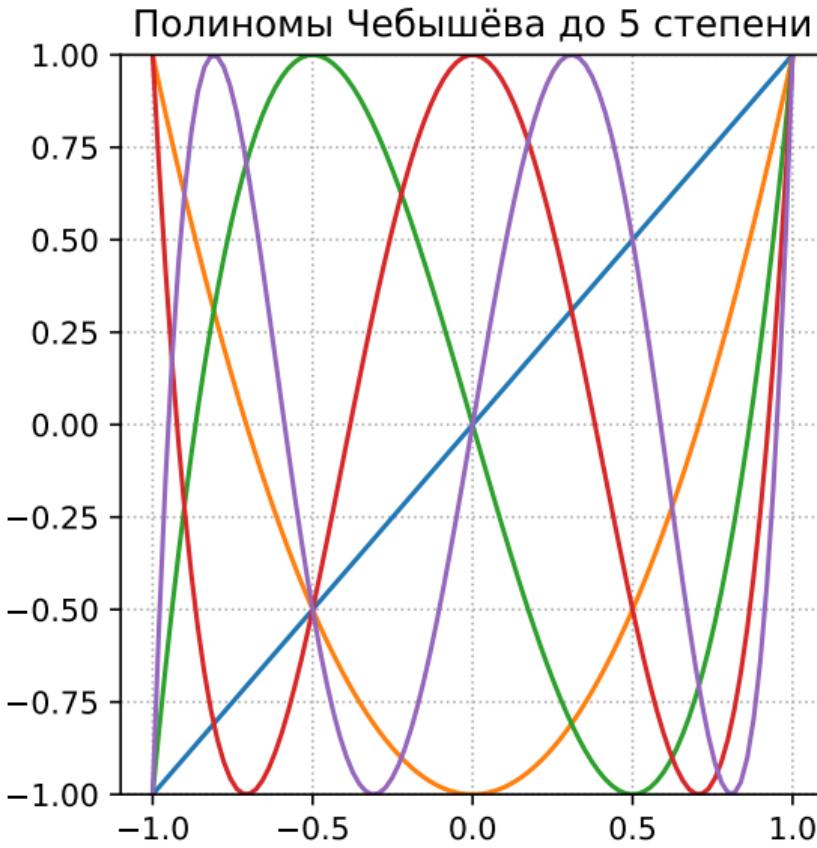
Полиномы Чебышёва дают оптимальный ответ на поставленный вопрос. При соответствующем шкалировании они минимизируют абсолютное значение на заданном интервале $[\mu, L]$, одновременно удовлетворяя нормировочному условию $p(0) = 1$.

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \quad k \geq 2.$$

Давайте построим стандартные полиномы Чебышёва (без масштабирования):



Отшкалированные полиномы Чебышёва

Оригинальные полиномы Чебышёва определены на интервале $[-1, 1]$. Чтобы использовать их для наших целей, мы должны отшкалировать их на интервал $[\mu, L]$.

Отшкалированные полиномы Чебышёва

Оригинальные полиномы Чебышёва определены на интервале $[-1, 1]$. Чтобы использовать их для наших целей, мы должны отшкалировать их на интервал $[\mu, L]$.

Мы будем использовать следующее аффинное преобразование:

$$x = \frac{L + \mu - 2a}{L - \mu}, \quad a \in [\mu, L], \quad x \in [-1, 1].$$

Обратите внимание, что $x = 1$ соответствует $a = \mu$, $x = -1$ соответствует $a = L$ и $x = 0$ соответствует $a = \frac{\mu+L}{2}$. Это преобразование гарантирует, что поведение полинома Чебышёва на интервале $[-1, 1]$ транслируется на интервал $[\mu, L]$.

Отшкалированные полиномы Чебышёва

Оригинальные полиномы Чебышёва определены на интервале $[-1, 1]$. Чтобы использовать их для наших целей, мы должны отшкалировать их на интервал $[\mu, L]$.

Мы будем использовать следующее аффинное преобразование:

$$x = \frac{L + \mu - 2a}{L - \mu}, \quad a \in [\mu, L], \quad x \in [-1, 1].$$

Обратите внимание, что $x = 1$ соответствует $a = \mu$, $x = -1$ соответствует $a = L$ и $x = 0$ соответствует $a = \frac{\mu+L}{2}$. Это преобразование гарантирует, что поведение полинома Чебышёва на интервале $[-1, 1]$ транслируется на интервал $[\mu, L]$.

В нашем анализе ошибок мы требуем, чтобы полином был равен 1 в 0 (т.е. $p_k(0) = 1$). После применения преобразования значение T_k в точке, соответствующей $a = 0$, может не быть 1. Следовательно, мы умножаем на обратную величину T_k в точке

$$\frac{L + \mu}{L - \mu}, \quad \text{что обеспечивает} \quad P_k(0) = T_k \left(\frac{L + \mu - 0}{L - \mu} \right) \cdot T_k \left(\frac{L + \mu}{L - \mu} \right)^{-1} = 1.$$

Отшкалированные полиномы Чебышёва

Оригинальные полиномы Чебышёва определены на интервале $[-1, 1]$. Чтобы использовать их для наших целей, мы должны отшкалировать их на интервал $[\mu, L]$.

Мы будем использовать следующее аффинное преобразование:

$$x = \frac{L + \mu - 2a}{L - \mu}, \quad a \in [\mu, L], \quad x \in [-1, 1].$$

Обратите внимание, что $x = 1$ соответствует $a = \mu$, $x = -1$ соответствует $a = L$ и $x = 0$ соответствует $a = \frac{\mu+L}{2}$. Это преобразование гарантирует, что поведение полинома Чебышёва на интервале $[-1, 1]$ транслируется на интервал $[\mu, L]$.

В нашем анализе ошибок мы требуем, чтобы полином был равен 1 в 0 (т.е. $p_k(0) = 1$). После применения преобразования значение T_k в точке, соответствующей $a = 0$, может не быть 1. Следовательно, мы умножаем на обратную величину T_k в точке

$$\frac{L + \mu}{L - \mu}, \quad \text{что обеспечивает} \quad P_k(0) = T_k\left(\frac{L + \mu - 0}{L - \mu}\right) \cdot T_k\left(\frac{L + \mu}{L - \mu}\right)^{-1} = 1.$$

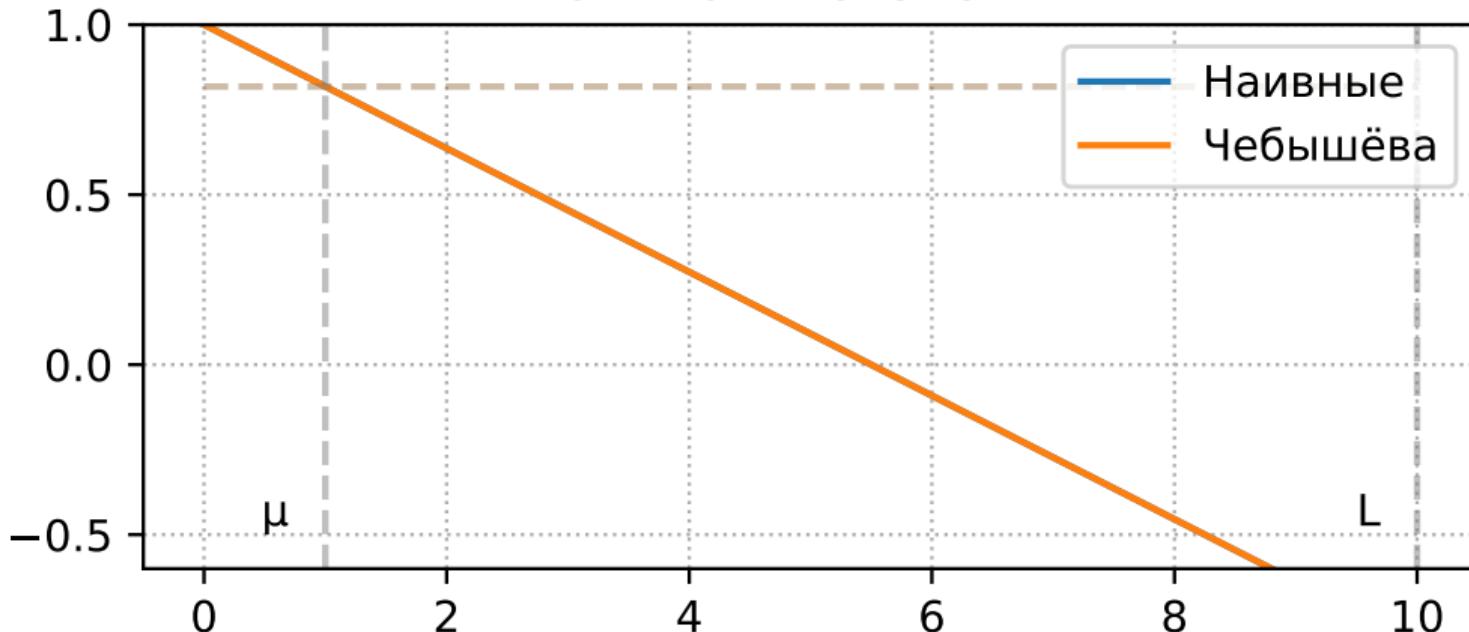
Построим отшкалированные полиномы Чебышёва

$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L + \mu - 2a}{L - \mu}\right) \cdot T_k\left(\frac{L + \mu}{L - \mu}\right)^{-1}$$

и увидим, что они больше подходят для нашей задачи, чем наивные полиномы на интервале $[\mu, L]$.

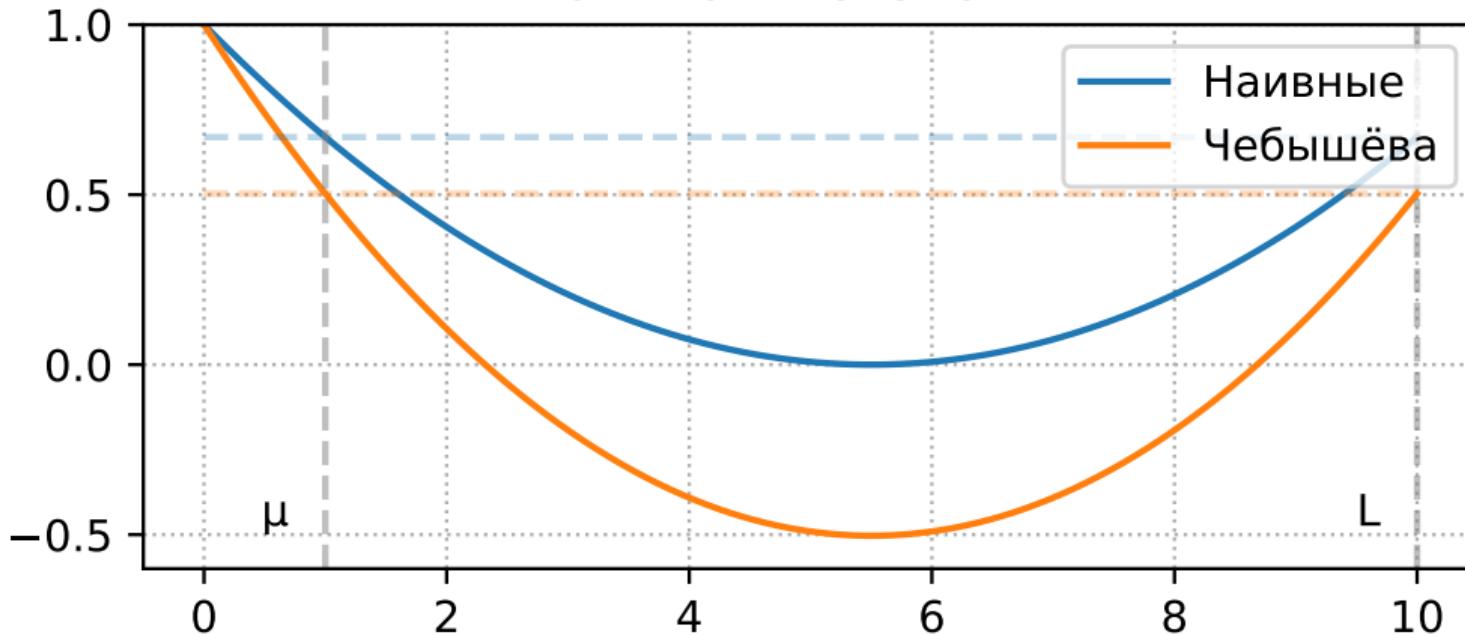
Отшкалированные полиномы Чебышёва

Полиномы степени 1



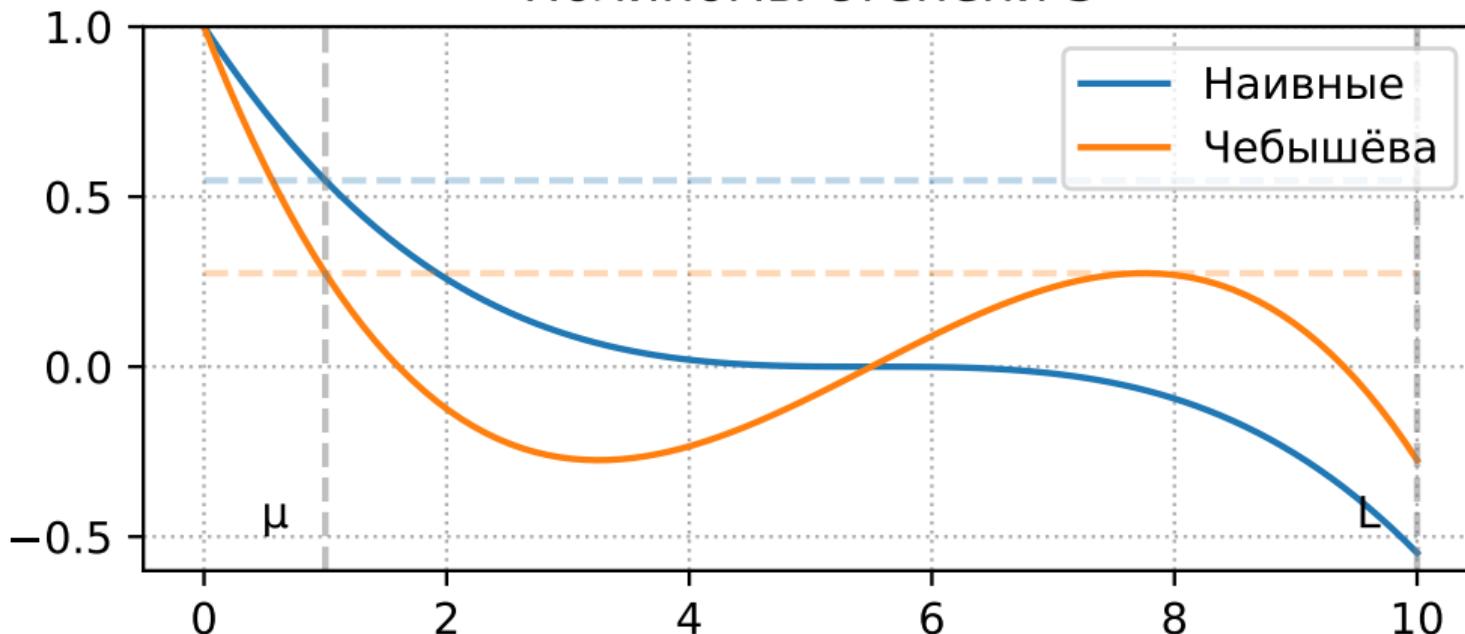
Отшкалированные полиномы Чебышёва

Полиномы степени 2



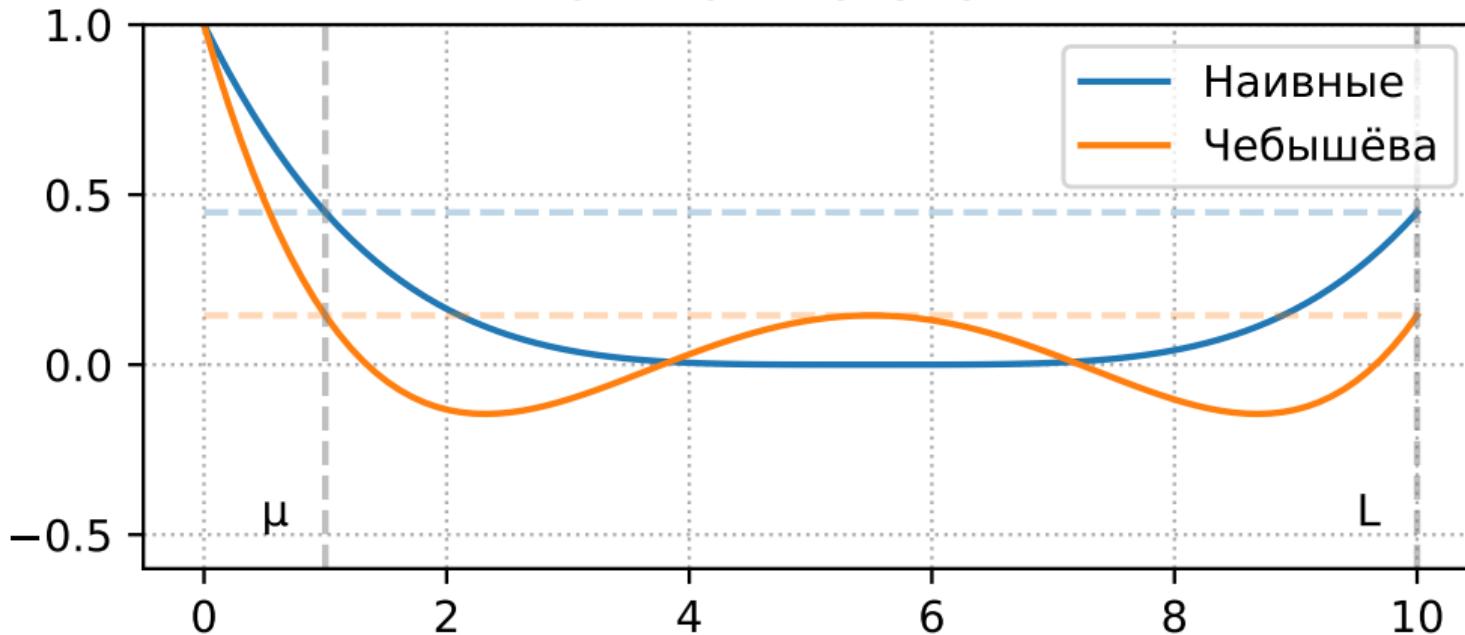
Отшкалированные полиномы Чебышёва

Полиномы степени 3



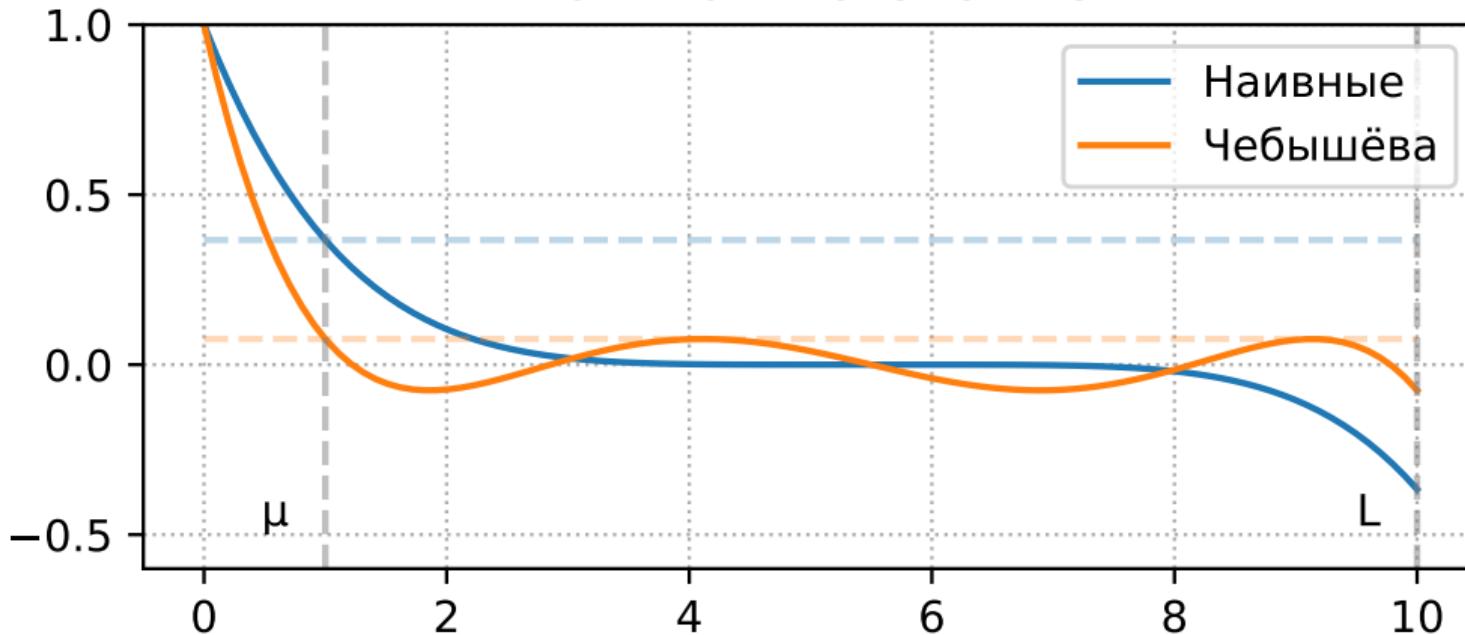
Отшкалированные полиномы Чебышёва

Полиномы степени 4



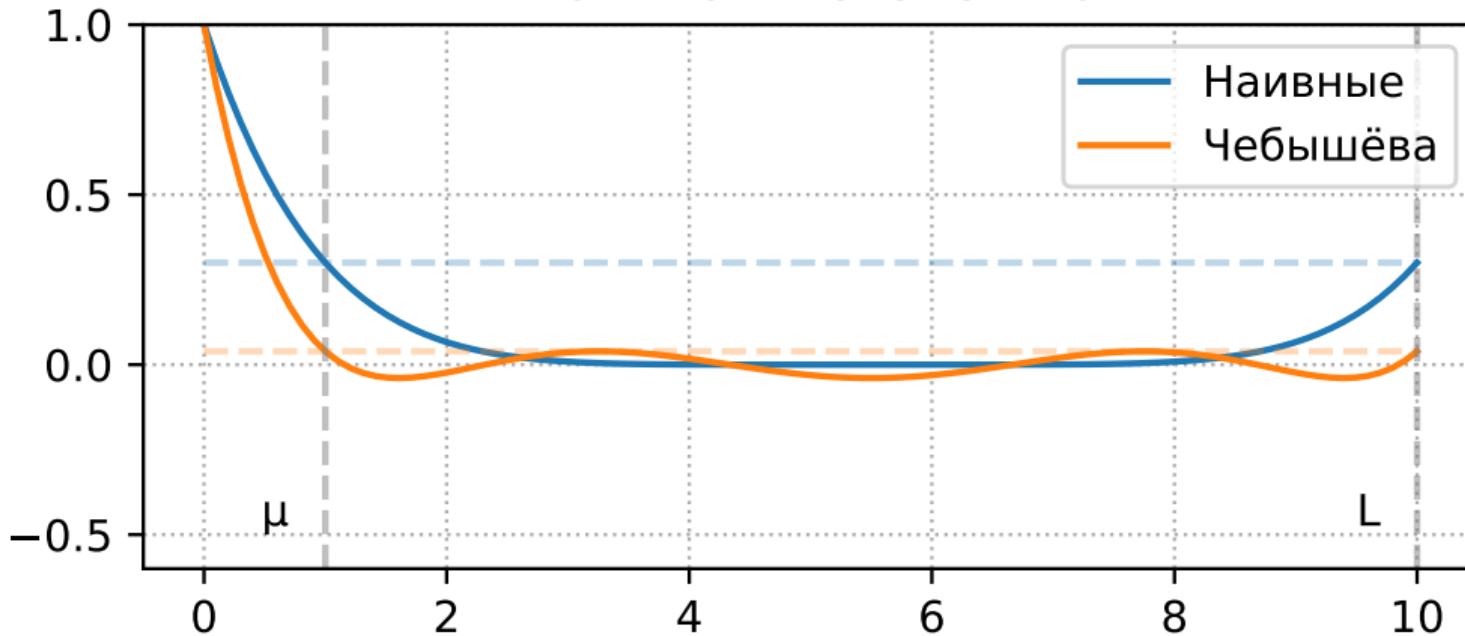
Отшкалированные полиномы Чебышёва

Полиномы степени 5



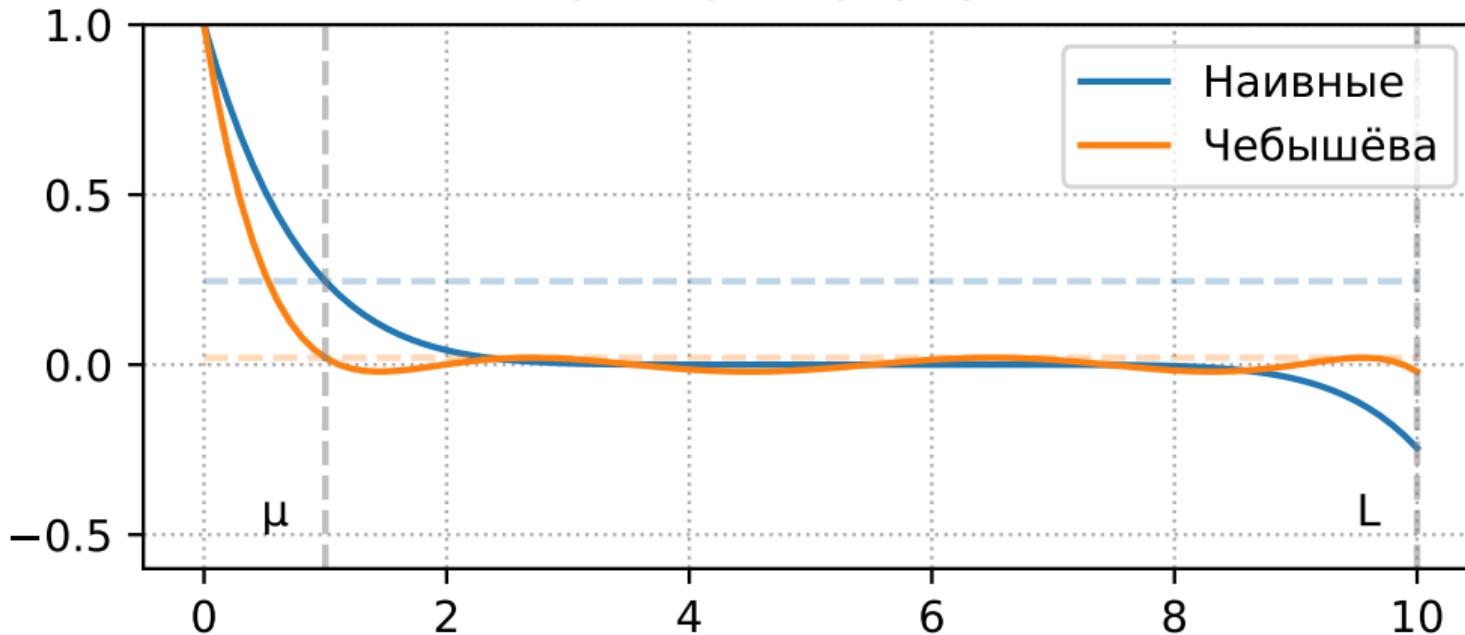
Отшкалированные полиномы Чебышёва

Полиномы степени 6



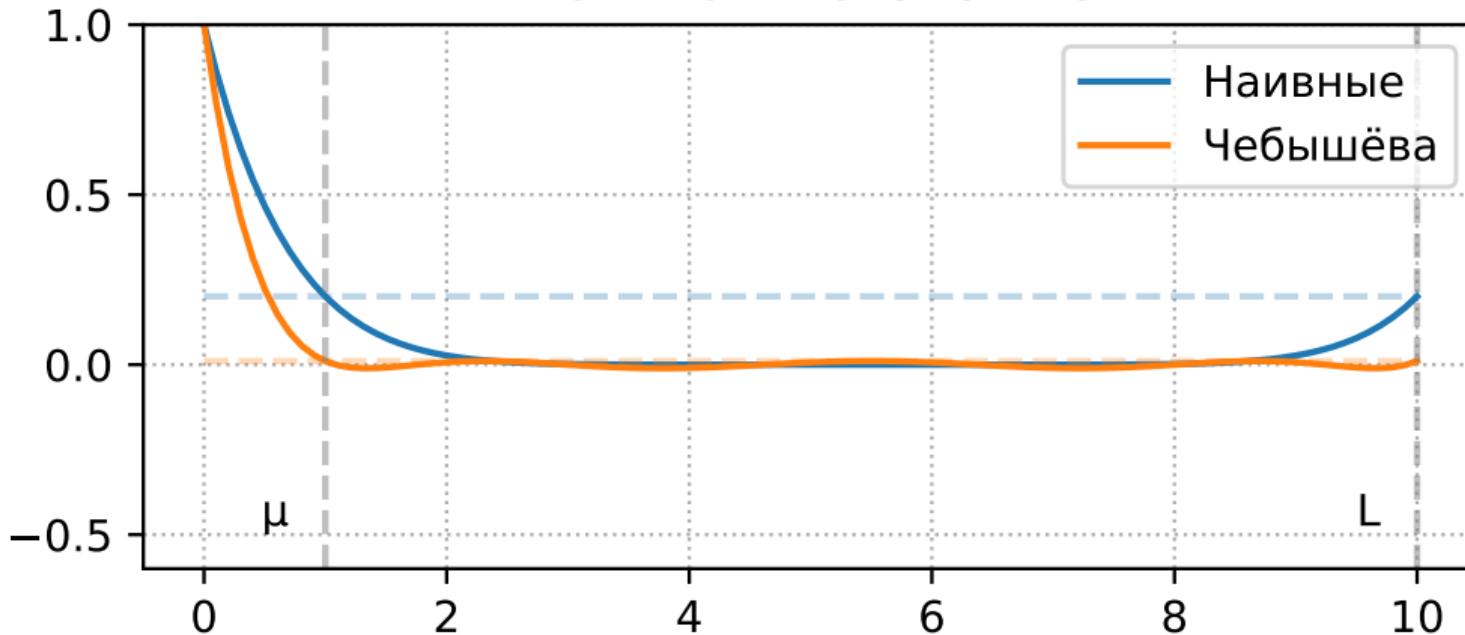
Отшкалированные полиномы Чебышёва

Полиномы степени 7



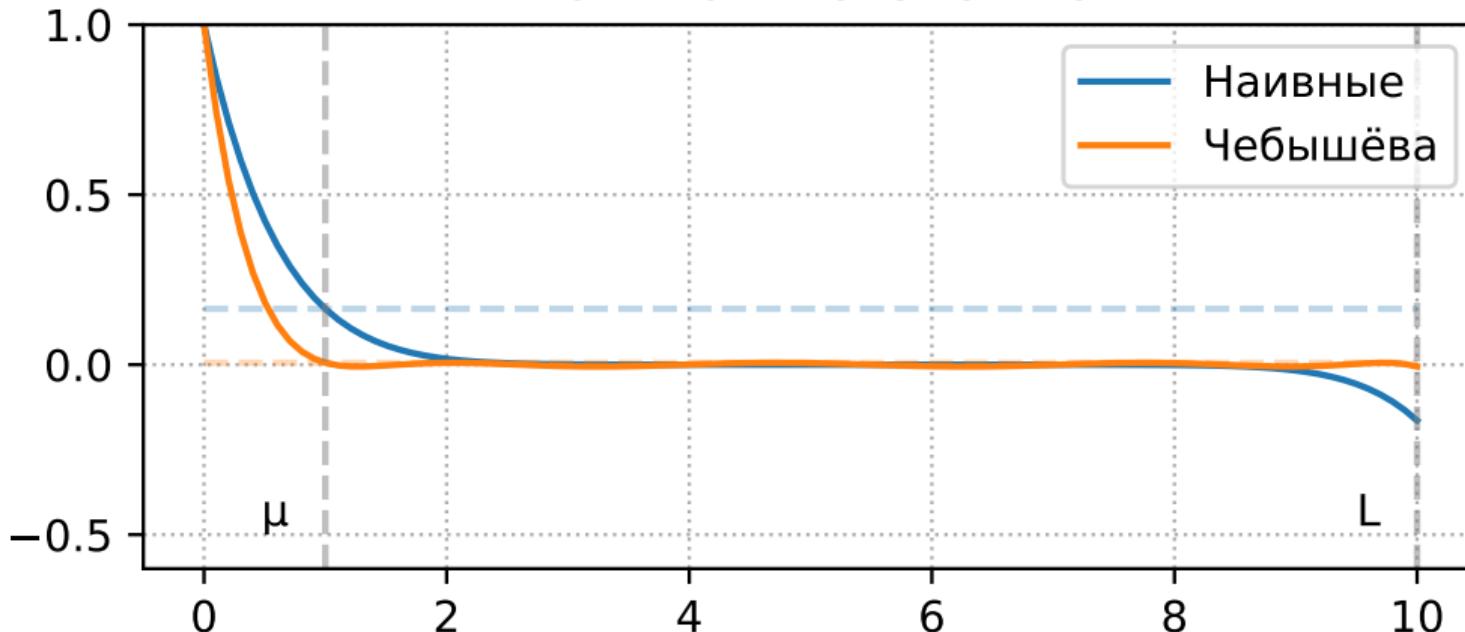
Отшкалированные полиномы Чебышёва

Полиномы степени 8



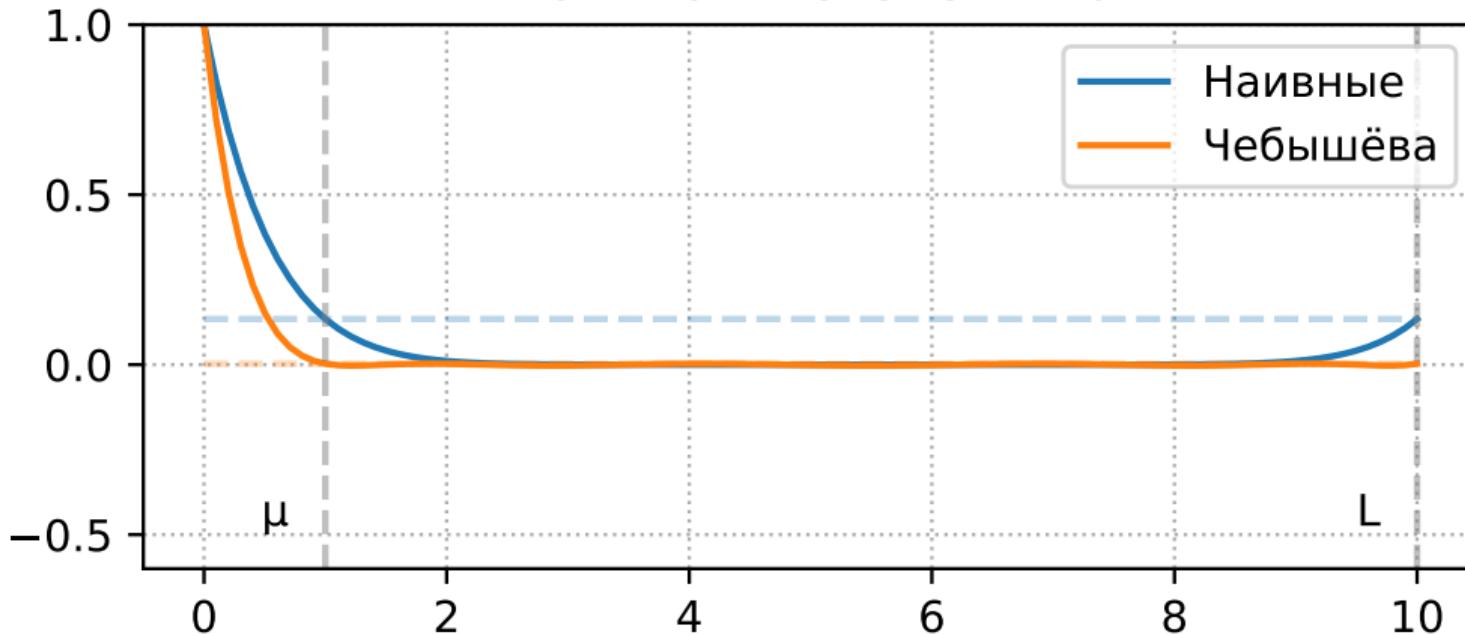
Отшкалированные полиномы Чебышёва

Полиномы степени 9



Отшкалированные полиномы Чебышёва

Полиномы степени 10



Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Мы можем видеть, что максимальное значение полинома Чебышёва на интервале $[\mu, L]$ достигается на концах отрезка в точках $a = \mu$ и $a = L$. Следовательно, мы можем использовать следующую верхнюю оценку:

$$\|P_k(A)\|_2 \leq P_k(\mu) = T_k \left(\frac{L + \mu - 2\mu}{L - \mu} \right) \cdot T_k \left(\frac{L + \mu}{L - \mu} \right)^{-1} = T_k(1) \cdot T_k \left(\frac{L + \mu}{L - \mu} \right)^{-1} = T_k \left(\frac{L + \mu}{L - \mu} \right)^{-1}$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Мы можем видеть, что максимальное значение полинома Чебышёва на интервале $[\mu, L]$ достигается на концах отрезка в точках $a = \mu$ и $a = L$. Следовательно, мы можем использовать следующую верхнюю оценку:

$$\|P_k(A)\|_2 \leq P_k(\mu) = T_k\left(\frac{L+\mu-2\mu}{L-\mu}\right) \cdot T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1} = T_k(1) \cdot T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1} = T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

Используя определение числа обусловленности $\kappa = \frac{L}{\mu}$, мы получаем:

$$\|P_k(A)\|_2 \leq T_k\left(\frac{\kappa+1}{\kappa-1}\right)^{-1} = T_k\left(1 + \frac{2}{\kappa-1}\right)^{-1} = T_k(1+\epsilon)^{-1}, \quad \epsilon = \frac{2}{\kappa-1}.$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Мы можем видеть, что максимальное значение полинома Чебышёва на интервале $[\mu, L]$ достигается на концах отрезка в точках $a = \mu$ и $a = L$. Следовательно, мы можем использовать следующую верхнюю оценку:

$$\|P_k(A)\|_2 \leq P_k(\mu) = T_k\left(\frac{L+\mu-2\mu}{L-\mu}\right) \cdot T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1} = T_k(1) \cdot T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1} = T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

Используя определение числа обусловленности $\varkappa = \frac{L}{\mu}$, мы получаем:

$$\|P_k(A)\|_2 \leq T_k\left(\frac{\varkappa+1}{\varkappa-1}\right)^{-1} = T_k\left(1 + \frac{2}{\varkappa-1}\right)^{-1} = T_k(1+\epsilon)^{-1}, \quad \epsilon = \frac{2}{\varkappa-1}.$$

Именно в этот момент явно возникнет ускорение. Мы ограничим значение $\|P_k(A)\|_2$ сверху величиной $\left(\frac{1}{1+\sqrt{\epsilon}}\right)^k$. Для этого детально изучим величину $|T_k(1+\epsilon)|$.

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1 + \epsilon)|$ снизу.

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1 + \epsilon)|$ снизу.

1. Для любого $x \geq 1$, полиномы Чебышёва первого рода могут быть записаны как

$$T_k(x) = \cosh(k \operatorname{arccosh}(x))$$

$$T_k(1 + \epsilon) = \cosh(k \operatorname{arccosh}(1 + \epsilon)).$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1 + \epsilon)|$ снизу.

1. Для любого $x \geq 1$, полиномы Чебышёва первого рода могут быть записаны как

$$T_k(x) = \cosh(k \operatorname{arccosh}(x))$$
$$T_k(1 + \epsilon) = \cosh(k \operatorname{arccosh}(1 + \epsilon)).$$

2. Помните, что:

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \operatorname{arccosh}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}).$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1 + \epsilon)|$ снизу.

1. Для любого $x \geq 1$, полиномы Чебышёва первого рода могут быть записаны как

$$T_k(x) = \cosh(k \operatorname{arccosh}(x))$$
$$T_k(1 + \epsilon) = \cosh(k \operatorname{arccosh}(1 + \epsilon)).$$

2. Помните, что:

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \operatorname{arccosh}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}).$$

3. Теперь, пусть $\phi = \operatorname{arccosh}(1 + \epsilon)$,

$$e^\phi = 1 + \epsilon + \sqrt{2\epsilon + \epsilon^2} \geq 1 + \sqrt{\epsilon}.$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1 + \epsilon)|$ снизу.

1. Для любого $x \geq 1$, полиномы Чебышёва первого рода могут быть записаны как
4. Следовательно,

$$T_k(x) = \cosh(k \operatorname{arccosh}(x))$$

$$T_k(1 + \epsilon) = \cosh(k \operatorname{arccosh}(1 + \epsilon)).$$

2. Помните, что:

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \operatorname{arccosh}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}).$$

3. Теперь, пусть $\phi = \operatorname{arccosh}(1 + \epsilon)$,

$$e^\phi = 1 + \epsilon + \sqrt{2\epsilon + \epsilon^2} \geq 1 + \sqrt{\epsilon}.$$

$$\begin{aligned} T_k(1 + \epsilon) &= \cosh(k \operatorname{arccosh}(1 + \epsilon)) \\ &= \cosh(k\phi) \\ &= \frac{e^{k\phi} + e^{-k\phi}}{2} \geq \frac{e^{k\phi}}{2} \\ &= \frac{(1 + \sqrt{\epsilon})^k}{2}. \end{aligned}$$

Верхняя оценка для полиномов Чебышёва

Чтобы ограничить $|P_k|$ сверху, мы должны ограничить $|T_k(1 + \epsilon)|$ снизу.

1. Для любого $x \geq 1$, полиномы Чебышёва первого рода могут быть записаны как

$$T_k(x) = \cosh(k \operatorname{arccosh}(x))$$

$$T_k(1 + \epsilon) = \cosh(k \operatorname{arccosh}(1 + \epsilon)).$$

2. Помните, что:

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \operatorname{arccosh}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}).$$

3. Теперь, пусть $\phi = \operatorname{arccosh}(1 + \epsilon)$,

$$e^\phi = 1 + \epsilon + \sqrt{2\epsilon + \epsilon^2} \geq 1 + \sqrt{\epsilon}.$$

4. Следовательно,

$$\begin{aligned} T_k(1 + \epsilon) &= \cosh(k \operatorname{arccosh}(1 + \epsilon)) \\ &= \cosh(k\phi) \\ &= \frac{e^{k\phi} + e^{-k\phi}}{2} \geq \frac{e^{k\phi}}{2} \\ &= \frac{(1 + \sqrt{\epsilon})^k}{2}. \end{aligned}$$

5. Наконец, мы получаем:

$$\begin{aligned} \|e_k\| &\leq \|P_k(A)\| \|e_0\| \leq \frac{2}{(1 + \sqrt{\epsilon})^k} \|e_0\| \\ &\leq 2 \left(1 + \sqrt{\frac{2}{\nu - 1}}\right)^{-k} \|e_0\| \\ &\leq 2 \exp\left(-\sqrt{\frac{2}{\nu - 1}} k\right) \|e_0\| \end{aligned}$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускоренного алгоритма. Переформулируя рекурсию в терминах наших отшкалированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускоренного алгоритма. Переформулируя рекурсию в терминах наших отшкалированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$P_k(a) = T_k \left(\frac{L + \mu - 2a}{L - \mu} \right) T_k \left(\frac{L + \mu}{L - \mu} \right)^{-1}$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускоренного алгоритма. Переформулируя рекурсию в терминах наших отшкалированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

$$T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_k(a)T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускоренного алгоритма. Переформулируя рекурсию в терминах наших отшкалированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

$$T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_k(a)T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k-1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k-1}(a)T_{k-1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k+1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k+1}(a)T_{k+1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускоренного алгоритма. Переформулируя рекурсию в терминах наших отшкалированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

$$T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_k(a)T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k-1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k-1}(a)T_{k-1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k+1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k+1}(a)T_{k+1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$P_{k+1}(a)t_{k+1} = 2\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}P_k(a)t_k - P_{k-1}(a)t_{k-1}, \text{ где } t_k = T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускоренного алгоритма. Переформулируя рекурсию в терминах наших отшкалированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

$$T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_k(a)T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k-1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k-1}(a)T_{k-1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k+1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k+1}(a)T_{k+1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$P_{k+1}(a)t_{k+1} = 2\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}P_k(a)t_k - P_{k-1}(a)t_{k-1}, \text{ где } t_k = T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}P_k(a)\frac{t_k}{t_{k+1}} - P_{k-1}(a)\frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}$$

Ускоренный метод [1/2]

Из-за рекурсивного определения полиномов Чебышёва мы непосредственно получаем итерационную схему ускоренного алгоритма. Переформулируя рекурсию в терминах наших отшкалированных полиномов Чебышёва, мы получаем:

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$$

Принимая во внимание, что $x = \frac{L+\mu-2a}{L-\mu}$, и:

$$P_k(a) = T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)^{-1}$$

$$T_k\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_k(a)T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k-1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k-1}(a)T_{k-1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$T_{k+1}\left(\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}\right) = P_{k+1}(a)T_{k+1}\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$P_{k+1}(a)t_{k+1} = 2\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}P_k(a)t_k - P_{k-1}(a)t_{k-1}, \text{ где } t_k = T_k\left(\frac{L+\mu}{L-\mu}\right)$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu-2a}{L-\mu}P_k(a)\frac{t_k}{t_{k+1}} - P_{k-1}(a)\frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}$$

Поскольку мы имеем $P_{k+1}(0) = P_k(0) = P_{k-1}(0) = 1$, получаем рекуррентную формулу вида:

$$P_{k+1}(a) = (1 - \alpha_k a)P_k(a) + \beta_k (P_k(a) - P_{k-1}(a)).$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1 + \beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1 + \beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu} \frac{t_k}{t_{k+1}} P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu} \frac{t_k}{t_{k+1}} P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}} P_{k-1}(a)$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1 + \beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

$$\begin{cases} \beta_k = \frac{t_{k-1}}{\frac{4}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}}, \\ \alpha_k = \frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}, \\ 1 + \beta_k = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}} \end{cases}$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1 + \beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

$$\begin{cases} \beta_k = \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}, \\ \alpha_k = \frac{4}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}, \\ 1 + \beta_k = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}} \end{cases}$$

Мы почти закончили :) Помним, что $e_{k+1} = P_{k+1}(A)e_0$. Также обратим внимание, что мы работаем с квадратичной задачей, поэтому мы можем предположить $x^* = 0$ без ограничения общности. В этом случае $e_0 = x_0$ и $e_{k+1} = x_{k+1}$.

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1 + \beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

$$\begin{cases} \beta_k = \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}, \\ \alpha_k = \frac{4}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}, \\ 1 + \beta_k = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}} \end{cases}$$

Мы почти закончили :) Помним, что $e_{k+1} = P_{k+1}(A)e_0$. Также обратим внимание, что мы работаем с квадратичной задачей, поэтому мы можем предположить $x^* = 0$ без ограничения общности. В этом случае $e_0 = x_0$ и $e_{k+1} = x_{k+1}$.

$$x_{k+1} = P_{k+1}(A)x_0$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1 + \beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

$$\begin{cases} \beta_k = \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}, \\ \alpha_k = \frac{4}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}, \\ 1 + \beta_k = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}} \end{cases}$$

Мы почти закончили :) Помним, что $e_{k+1} = P_{k+1}(A)e_0$. Также обратим внимание, что мы работаем с квадратичной задачей, поэтому мы можем предположить $x^* = 0$ без ограничения общности. В этом случае $e_0 = x_0$ и $e_{k+1} = x_{k+1}$.

$$x_{k+1} = P_{k+1}(A)x_0 = (I - \alpha_k A)P_k(A)x_0 + \beta_k (P_k(A) - P_{k-1}(A))x_0$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1 + \beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

$$\begin{cases} \beta_k = \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}, \\ \alpha_k = \frac{4}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}, \\ 1 + \beta_k = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}} \end{cases}$$

Мы почти закончили :) Помним, что $e_{k+1} = P_{k+1}(A)e_0$. Также обратим внимание, что мы работаем с квадратичной задачей, поэтому мы можем предположить $x^* = 0$ без ограничения общности. В этом случае $e_0 = x_0$ и $e_{k+1} = x_{k+1}$.

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= P_{k+1}(A)x_0 = (I - \alpha_k A)P_k(A)x_0 + \beta_k (P_k(A) - P_{k-1}(A))x_0 \\ &= (I - \alpha_k A)x_k + \beta_k (x_k - x_{k-1}) \end{aligned}$$

Ускоренный метод [2/2]

Перегруппируя члены, мы получаем:

$$P_{k+1}(a) = (1 + \beta_k)P_k(a) - \alpha_k a P_k(a) - \beta_k P_{k-1}(a),$$

$$P_{k+1}(a) = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{4a}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}P_k(a) - \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}P_{k-1}(a)$$

$$\begin{cases} \beta_k = \frac{t_{k-1}}{t_{k+1}}, \\ \alpha_k = \frac{4}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}}, \\ 1 + \beta_k = 2\frac{L+\mu}{L-\mu}\frac{t_k}{t_{k+1}} \end{cases}$$

Мы почти закончили :) Помним, что $e_{k+1} = P_{k+1}(A)e_0$. Также обратим внимание, что мы работаем с квадратичной задачей, поэтому мы можем предположить $x^* = 0$ без ограничения общности. В этом случае $e_0 = x_0$ и $e_{k+1} = x_{k+1}$.

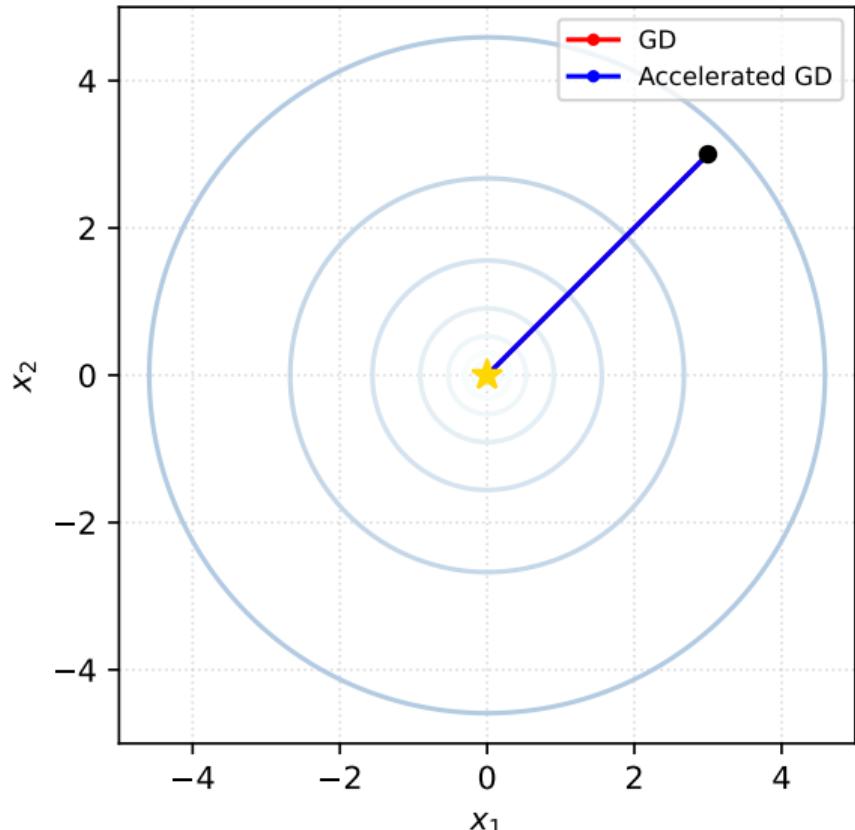
$$\begin{aligned} x_{k+1} &= P_{k+1}(A)x_0 = (I - \alpha_k A)P_k(A)x_0 + \beta_k (P_k(A) - P_{k-1}(A))x_0 \\ &= (I - \alpha_k A)x_k + \beta_k (x_k - x_{k-1}) \end{aligned}$$

Для квадратичной задачи мы имеем $\nabla f(x_k) = Ax_k$, поэтому мы можем переписать обновление как:

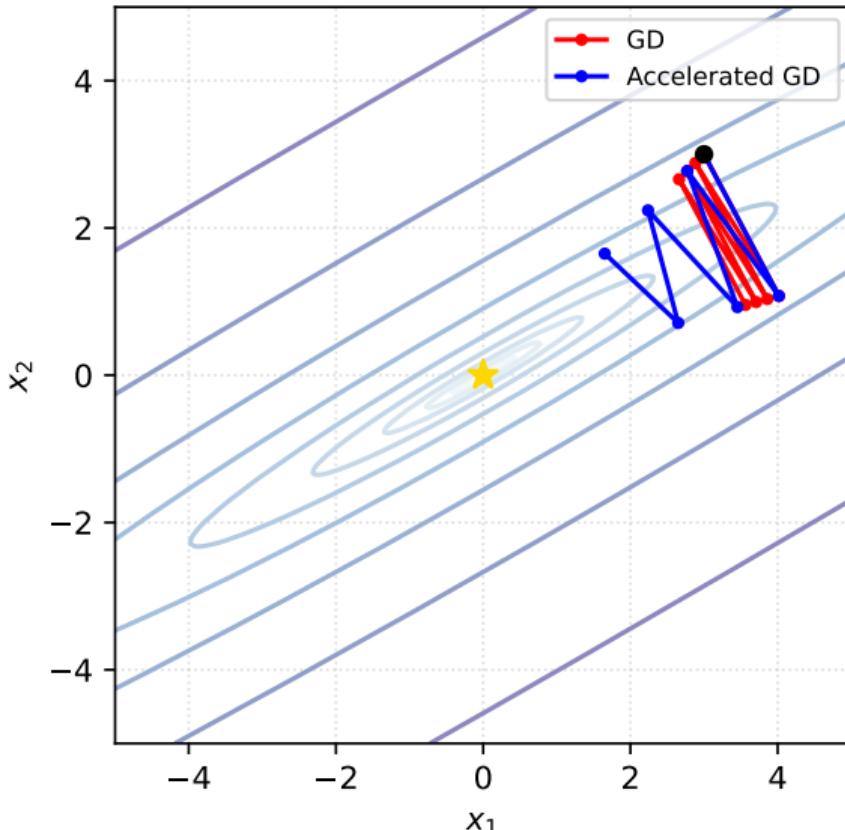
$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) + \beta_k (x_k - x_{k-1})$$

Ускорение из первых принципов

$$\alpha = 1.0$$



$$\alpha = 100.0$$

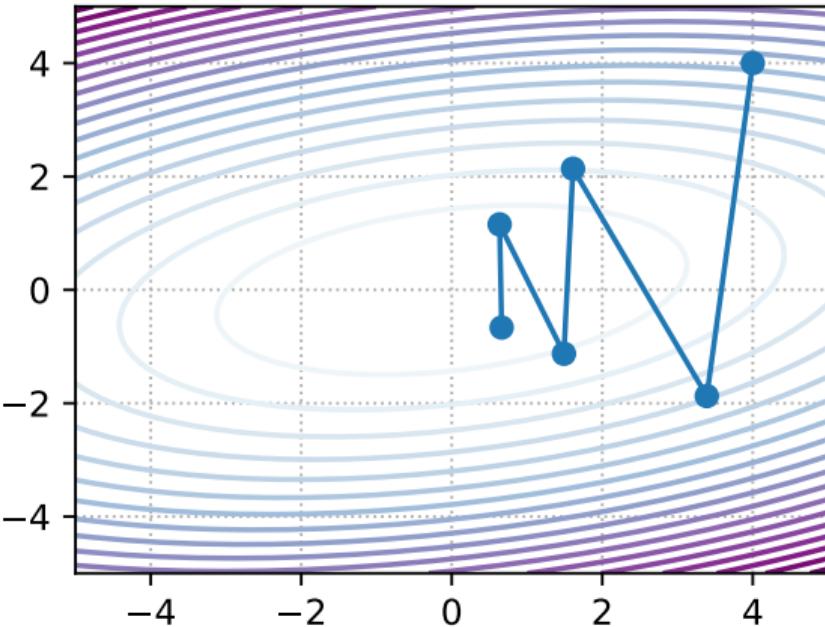


Метод тяжёлого шарика

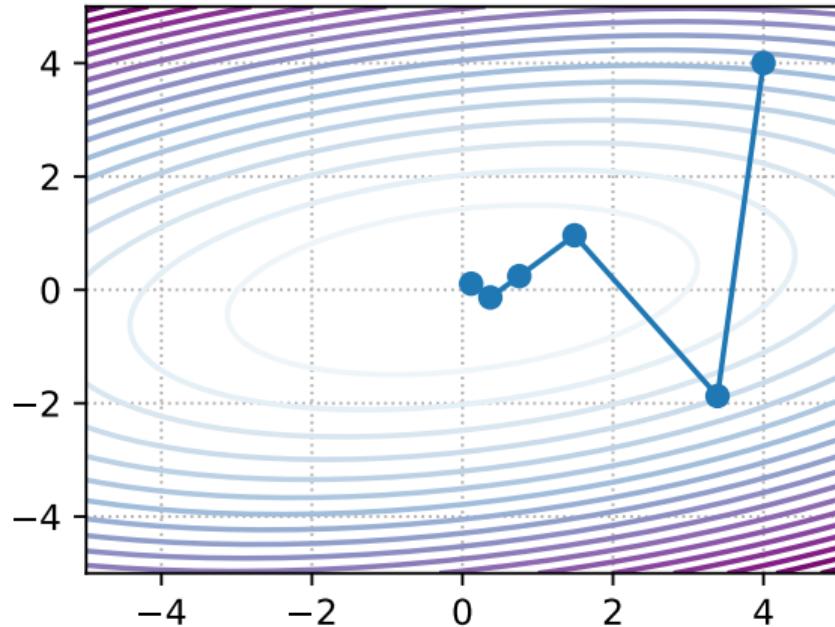
Колебания и ускорение

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

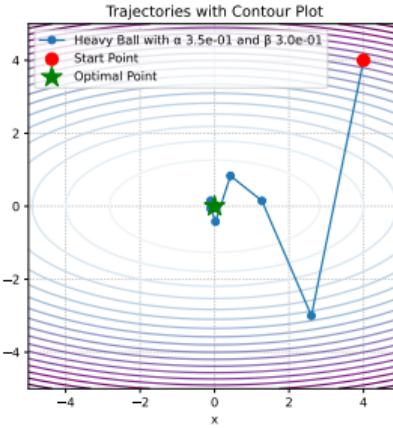
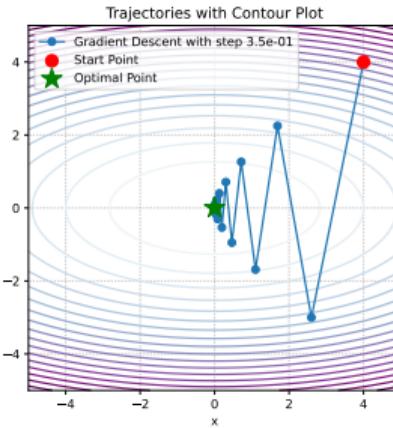
Gradient Descent



Heavy Ball



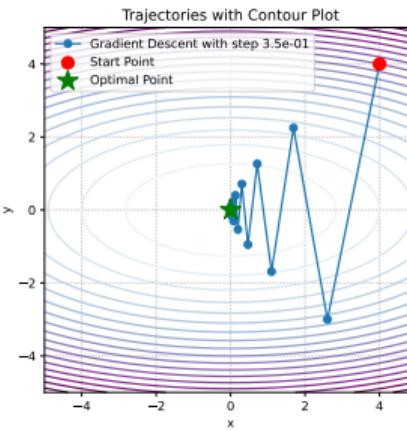
Метод тяжёлого шарика Поляка



Давайте представим идею момента (импульса, тяжёлого шарика), предложенную Б.Т. Поляком в 1964 году. Обновление метода тяжёлого шарика имеет вид

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

Метод тяжёлого шарика Поляка

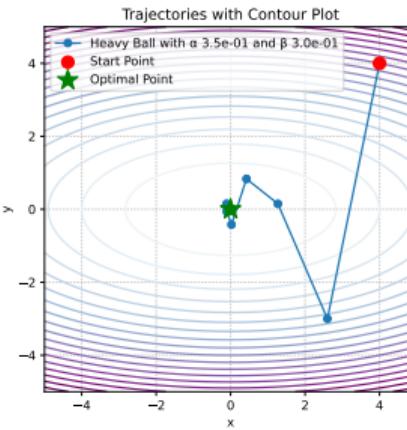


Давайте представим идею момента (импульса, тяжёлого шарика), предложенную Б.Т. Поляком в 1964 году. Обновление метода тяжёлого шарика имеет вид

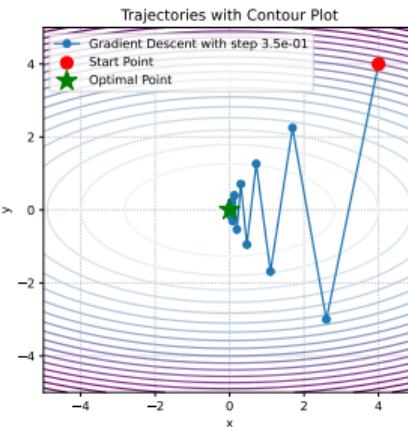
$$x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k) + \beta(x_k - x_{k-1}).$$

В нашем (квадратичном) случае это

$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k - \alpha \Lambda \hat{x}_k + \beta(\hat{x}_k - \hat{x}_{k-1}) = (I - \alpha \Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}$$



Метод тяжёлого шарика Поляка



Давайте представим идею момента (импульса, тяжёлого шарика), предложенную Б.Т. Поляком в 1964 году. Обновление метода тяжёлого шарика имеет вид

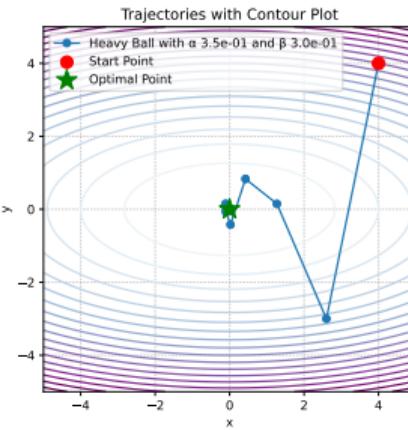
$$x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k) + \beta(x_k - x_{k-1}).$$

В нашем (квадратичном) случае это

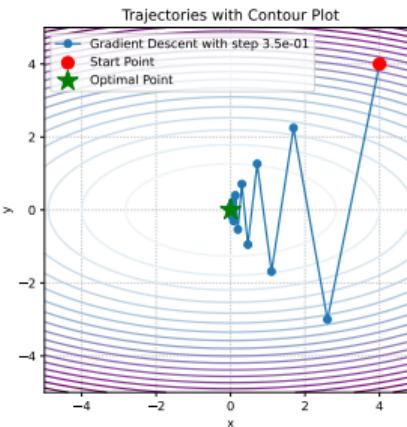
$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k - \alpha \Lambda \hat{x}_k + \beta(\hat{x}_k - \hat{x}_{k-1}) = (I - \alpha \Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}$$

Это можно переписать как

$$\begin{aligned}\hat{x}_{k+1} &= (I - \alpha \Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}, \\ \hat{x}_k &= \hat{x}_k.\end{aligned}$$



Метод тяжёлого шарика Поляка



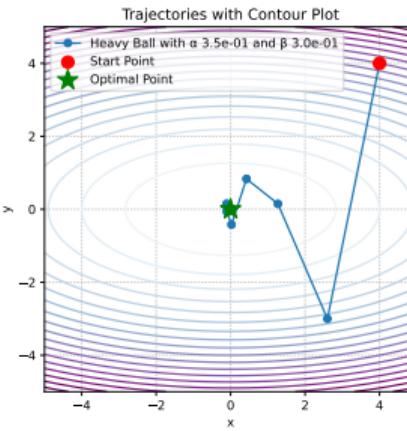
Давайте представим идею момента (импульса, тяжёлого шарика), предложенную Б.Т. Поляком в 1964 году. Обновление метода тяжёлого шарика имеет вид

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

В нашем (квадратичном) случае это

$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k - \alpha \Lambda \hat{x}_k + \beta(\hat{x}_k - \hat{x}_{k-1}) = (I - \alpha \Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}$$

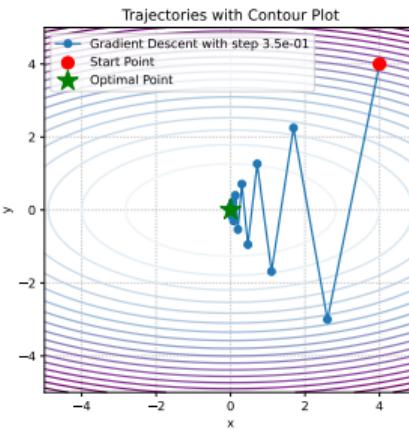
Это можно переписать как



$$\begin{aligned}\hat{x}_{k+1} &= (I - \alpha \Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}, \\ \hat{x}_k &= \hat{x}_k.\end{aligned}$$

Давайте введем следующее обозначение: $\hat{z}_k = \begin{bmatrix} \hat{x}_{k+1} \\ \hat{x}_k \end{bmatrix}$. Следовательно, $\hat{z}_{k+1} = M\hat{z}_k$, где матрица итерации M имеет вид:

Метод тяжёлого шарика Поляка



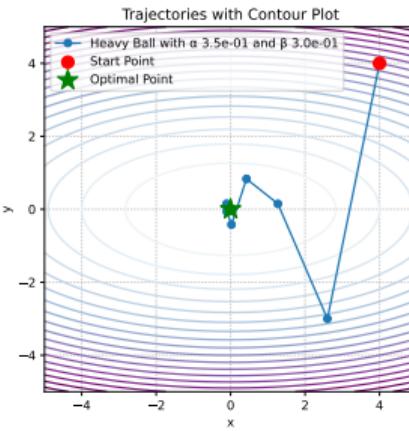
Давайте представим идею момента (импульса, тяжёлого шарика), предложенную Б.Т. Поляком в 1964 году. Обновление метода тяжёлого шарика имеет вид

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

В нашем (квадратичном) случае это

$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k - \alpha \Lambda \hat{x}_k + \beta(\hat{x}_k - \hat{x}_{k-1}) = (I - \alpha \Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}$$

Это можно переписать как



$$\begin{aligned}\hat{x}_{k+1} &= (I - \alpha \Lambda + \beta I)\hat{x}_k - \beta \hat{x}_{k-1}, \\ \hat{x}_k &= \hat{x}_k.\end{aligned}$$

Давайте введем следующее обозначение: $\hat{z}_k = \begin{bmatrix} \hat{x}_{k+1} \\ \hat{x}_k \end{bmatrix}$. Следовательно, $\hat{z}_{k+1} = M\hat{z}_k$, где матрица итерации M имеет вид:

$$M = \begin{bmatrix} I - \alpha \Lambda + \beta I & -\beta I \\ I & 0_d \end{bmatrix}.$$

Сведение к скалярному случаю

Обратим внимание, что M является матрицей $2d \times 2d$ с четырьмя блочно-диагональными матрицами размера $d \times d$ внутри. Это означает, что мы можем изменить порядок координат, чтобы сделать M блочно-диагональной. Обратите внимание, что в уравнении ниже матрица M обозначает то же самое, что и в обозначении выше, за исключением описанной перестановки строк и столбцов. Мы используем эту небольшую перегрузку обозначений для простоты.

Сведение к скалярному случаю

Обратим внимание, что M является матрицей $2d \times 2d$ с четырьмя блочно-диагональными матрицами размера $d \times d$ внутри. Это означает, что мы можем изменить порядок координат, чтобы сделать M блочно-диагональной. Обратите внимание, что в уравнении ниже матрица M обозначает то же самое, что и в обозначении выше, за исключением описанной перестановки строк и столбцов. Мы используем эту небольшую перегрузку обозначений для простоты.

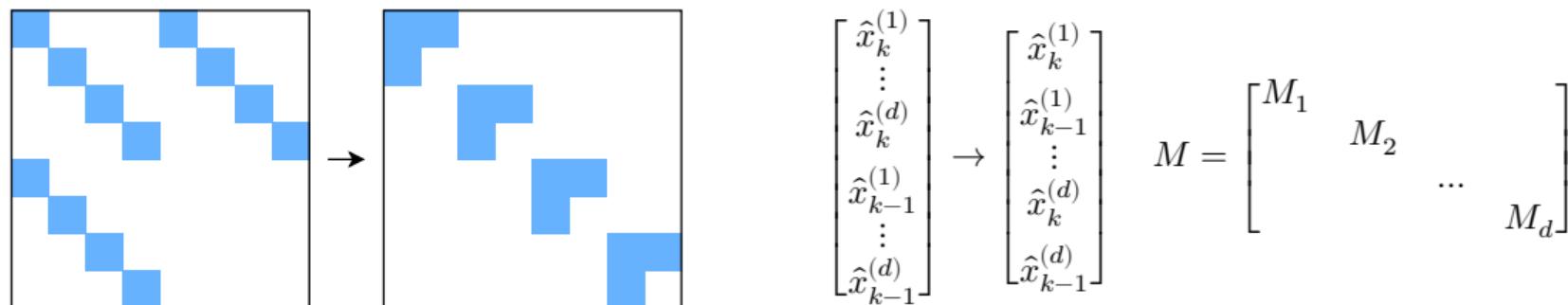


Рис. 1: Иллюстрация перестановки матрицы M

где $\hat{x}_k^{(i)}$ является i -й координатой вектора $\hat{x}_k \in \mathbb{R}^d$ и M_i обозначает 2×2 матрицу. Переупорядочение позволяет нам исследовать динамику метода независимо от размерности. Асимптотическая скорость сходимости $2d$ -мерной последовательности векторов \hat{x}_k определяется наихудшей скоростью сходимости среди его блока координат. Следовательно, достаточно исследовать оптимизацию в одномерном случае.

Сведение к скалярному случаю

Для i -й координаты, где λ_i — i -е собственное значение матрицы A , имеем:

$$M_i = \begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Сведение к скалярному случаю

Для i -й координаты, где λ_i — i -е собственное значение матрицы A , имеем:

$$M_i = \begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Метод будет сходиться, если $\rho(M) < 1$, и оптимальные параметры могут быть вычислены путем оптимизации спектрального радиуса

$$\alpha^*, \beta^* = \arg \min_{\alpha, \beta} \max_i \rho(M_i), \quad \alpha^* = \frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad \beta^* = \left(\frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}} \right)^2.$$

Сведение к скалярному случаю

Для i -й координаты, где λ_i — i -е собственное значение матрицы A , имеем:

$$M_i = \begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Метод будет сходиться, если $\rho(M) < 1$, и оптимальные параметры могут быть вычислены путем оптимизации спектрального радиуса

$$\alpha^*, \beta^* = \arg \min_{\alpha, \beta} \max_i \rho(M_i), \quad \alpha^* = \frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad \beta^* = \left(\frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}} \right)^2.$$

Можно показать, что для таких параметров матрица M имеет комплексные собственные значения, которые образуют комплексно-сопряжённую пару, поэтому расстояние до оптимума (в этом случае $\|z_k\|$) обычно не убывает монотонно.

Вывод оптимальных гиперпараметров [1/3]

Характеристический полином матрицы M_i имеет вид:

$$\det(M_i - \lambda I) = \lambda^2 - (1 - \alpha\lambda_i + \beta)\lambda + \beta = 0.$$

Вывод оптимальных гиперпараметров [1/3]

Характеристический полином матрицы M_i имеет вид:

$$\det(M_i - \lambda I) = \lambda^2 - (1 - \alpha\lambda_i + \beta)\lambda + \beta = 0.$$

Собственные значения матрицы M_i :

$$\lambda_{1,2}^M = \frac{(1 + \beta - \alpha\lambda_i) \pm \sqrt{(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta}}{2}.$$

Вывод оптимальных гиперпараметров [1/3]

Характеристический полином матрицы M_i имеет вид:

$$\det(M_i - \lambda I) = \lambda^2 - (1 - \alpha\lambda_i + \beta)\lambda + \beta = 0.$$

Собственные значения матрицы M_i :

$$\lambda_{1,2}^M = \frac{(1 + \beta - \alpha\lambda_i) \pm \sqrt{(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta}}{2}.$$

Спектральный радиус $\rho(M_i)$ зависит от знака дискриминанта $\Delta_i = (1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta$:

Случай 1: $\Delta_i \geq 0$ (**вещественные с.з.**)

Собственные значения вещественны и спектральный радиус равен

$$\rho(M_i) = \max(|\lambda_1^M|, |\lambda_2^M|).$$

Заметим, что $\lambda_1^M \cdot \lambda_2^M = \beta$ (свободный член характеристического полинома), поэтому оба с.з. неотрицательны при $\beta > 0$ и $\rho(M_i) \geq \sqrt{\beta}$.

Вывод оптимальных гиперпараметров [1/3]

Характеристический полином матрицы M_i имеет вид:

$$\det(M_i - \lambda I) = \lambda^2 - (1 - \alpha\lambda_i + \beta)\lambda + \beta = 0.$$

Собственные значения матрицы M_i :

$$\lambda_{1,2}^M = \frac{(1 + \beta - \alpha\lambda_i) \pm \sqrt{(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta}}{2}.$$

Спектральный радиус $\rho(M_i)$ зависит от знака дискриминанта $\Delta_i = (1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta$:

Случай 1: $\Delta_i \geq 0$ (**вещественные с.з.**)

Собственные значения вещественны и спектральный радиус равен

$$\rho(M_i) = \max(|\lambda_1^M|, |\lambda_2^M|).$$

Заметим, что $\lambda_1^M \cdot \lambda_2^M = \beta$ (свободный член хар. полинома), поэтому оба с.з. неотрицательны при $\beta > 0$ и $\rho(M_i) \geq \sqrt{\beta}$.

Случай 2: $\Delta_i < 0$ (**комплексные с.з.**)

Собственные значения комплексно-сопряжённые:

$\lambda_1^M = \overline{\lambda_2^M}$. По теореме Виета, произведение корней хар. полинома $\lambda^2 - (1 + \beta - \alpha\lambda_i)\lambda + \beta = 0$ равно свободному члену:

$$\lambda_1^M \cdot \lambda_2^M = |\lambda_1^M|^2 = \beta \quad \Rightarrow \quad \rho(M_i) = \sqrt{\beta}.$$

Вывод оптимальных гиперпараметров [1/3]

Характеристический полином матрицы M_i имеет вид:

$$\det(M_i - \lambda I) = \lambda^2 - (1 - \alpha\lambda_i + \beta)\lambda + \beta = 0.$$

Собственные значения матрицы M_i :

$$\lambda_{1,2}^M = \frac{(1 + \beta - \alpha\lambda_i) \pm \sqrt{(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta}}{2}.$$

Спектральный радиус $\rho(M_i)$ зависит от знака дискриминанта $\Delta_i = (1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta$:

Случай 1: $\Delta_i \geq 0$ (**вещественные с.з.**)

Собственные значения вещественны и спектральный радиус равен

$$\rho(M_i) = \max(|\lambda_1^M|, |\lambda_2^M|).$$

Заметим, что $\lambda_1^M \cdot \lambda_2^M = \beta$ (свободный член хар. полинома), поэтому оба с.з. неотрицательны при $\beta > 0$ и $\rho(M_i) \geq \sqrt{\beta}$.

Случай 2: $\Delta_i < 0$ (**комплексные с.з.**)

Собственные значения комплексно-сопряжённые:

$\lambda_1^M = \overline{\lambda_2^M}$. По теореме Виета, произведение корней хар. полинома $\lambda^2 - (1 + \beta - \alpha\lambda_i)\lambda + \beta = 0$ равно свободному члену:

$$\lambda_1^M \cdot \lambda_2^M = |\lambda_1^M|^2 = \beta \Rightarrow \rho(M_i) = \sqrt{\beta}.$$

Ключевое наблюдение: в комплексном режиме $\rho(M_i) = \sqrt{\beta}$ **не зависит от** λ_i . Значит, если мы подберём α, β так, чтобы все M_i были в комплексном режиме, то $\rho(M) = \sqrt{\beta}$ для всех i одновременно.

Вывод оптимальных гиперпараметров [2/3]

Условие $\rho(M_i) = \sqrt{\beta}$ (комплексные с.з. или кратный вещественный корень) для всех $\lambda_i \in [\mu, L]$:

$$(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 \leq 4\beta \Leftrightarrow (1 - \sqrt{\beta})^2 \leq \alpha\lambda_i \leq (1 + \sqrt{\beta})^2.$$

Вывод оптимальных гиперпараметров [2/3]

Условие $\rho(M_i) = \sqrt{\beta}$ (комплексные с.з. или кратный вещественный корень) для всех $\lambda_i \in [\mu, L]$:

$$(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 \leq 4\beta \Leftrightarrow (1 - \sqrt{\beta})^2 \leq \alpha\lambda_i \leq (1 + \sqrt{\beta})^2.$$

Заметим, что при $\Delta_i = 0$ собственное значение кратное и равно $\frac{1+\beta-\alpha\lambda_i}{2}$, а его квадрат равен β (т. Виета), так что $\rho(M_i) = \sqrt{\beta}$ и в граничном случае. Для выполнения при **всех** $\lambda_i \in [\mu, L]$ необходимо и достаточно:

$$(1 - \sqrt{\beta})^2 \leq \alpha\mu \quad \text{и} \quad \alpha L \leq (1 + \sqrt{\beta})^2.$$

Вывод оптимальных гиперпараметров [2/3]

Условие $\rho(M_i) = \sqrt{\beta}$ (комплексные с.з. или кратный вещественный корень) для всех $\lambda_i \in [\mu, L]$:

$$(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 \leq 4\beta \Leftrightarrow (1 - \sqrt{\beta})^2 \leq \alpha\lambda_i \leq (1 + \sqrt{\beta})^2.$$

Заметим, что при $\Delta_i = 0$ собственное значение кратное и равно $\frac{1+\beta-\alpha\lambda_i}{2}$, а его квадрат равен β (т. Виета), так что $\rho(M_i) = \sqrt{\beta}$ и в граничном случае. Для выполнения при **всех** $\lambda_i \in [\mu, L]$ необходимо и достаточно:

$$(1 - \sqrt{\beta})^2 \leq \alpha\mu \quad \text{и} \quad \alpha L \leq (1 + \sqrt{\beta})^2.$$

Минимизируем $\rho(M) = \sqrt{\beta}$, т.е. минимизируем β при условии существования α . Из двух неравенств выше получаем необходимое условие на α :

$$\frac{(1 - \sqrt{\beta})^2}{\mu} \leq \alpha \leq \frac{(1 + \sqrt{\beta})^2}{L}.$$

Вывод оптимальных гиперпараметров [2/3]

Условие $\rho(M_i) = \sqrt{\beta}$ (комплексные с.з. или кратный вещественный корень) для всех $\lambda_i \in [\mu, L]$:

$$(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 \leq 4\beta \Leftrightarrow (1 - \sqrt{\beta})^2 \leq \alpha\lambda_i \leq (1 + \sqrt{\beta})^2.$$

Заметим, что при $\Delta_i = 0$ собственное значение кратное и равно $\frac{1+\beta-\alpha\lambda_i}{2}$, а его квадрат равен β (т. Виета), так что $\rho(M_i) = \sqrt{\beta}$ и в граничном случае. Для выполнения при **всех** $\lambda_i \in [\mu, L]$ необходимо и достаточно:

$$(1 - \sqrt{\beta})^2 \leq \alpha\mu \quad \text{и} \quad \alpha L \leq (1 + \sqrt{\beta})^2.$$

Минимизируем $\rho(M) = \sqrt{\beta}$, т.е. минимизируем β при условии существования α . Из двух неравенств выше получаем необходимое условие на α :

$$\frac{(1 - \sqrt{\beta})^2}{\mu} \leq \alpha \leq \frac{(1 + \sqrt{\beta})^2}{L}.$$

Такое α существует тогда и только тогда, когда $\frac{(1 - \sqrt{\beta})^2}{\mu} \leq \frac{(1 + \sqrt{\beta})^2}{L}$, т.е. $\nu \leq \frac{(1 + \sqrt{\beta})^2}{(1 - \sqrt{\beta})^2}$. Правая часть монотонно возрастает по β , поэтому минимальное β достигается, когда неравенство обращается в равенство:

$$\alpha\mu = (1 - \sqrt{\beta})^2, \quad \alpha L = (1 + \sqrt{\beta})^2.$$

Вывод оптимальных гиперпараметров [2/3]

Условие $\rho(M_i) = \sqrt{\beta}$ (комплексные с.з. или кратный вещественный корень) для всех $\lambda_i \in [\mu, L]$:

$$(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 \leq 4\beta \Leftrightarrow (1 - \sqrt{\beta})^2 \leq \alpha\lambda_i \leq (1 + \sqrt{\beta})^2.$$

Заметим, что при $\Delta_i = 0$ собственное значение кратное и равно $\frac{1+\beta-\alpha\lambda_i}{2}$, а его квадрат равен β (т. Виета), так что $\rho(M_i) = \sqrt{\beta}$ и в граничном случае. Для выполнения при **всех** $\lambda_i \in [\mu, L]$ необходимо и достаточно:

$$(1 - \sqrt{\beta})^2 \leq \alpha\mu \quad \text{и} \quad \alpha L \leq (1 + \sqrt{\beta})^2.$$

Минимизируем $\rho(M) = \sqrt{\beta}$, т.е. минимизируем β при условии существования α . Из двух неравенств выше получаем необходимое условие на α :

$$\frac{(1 - \sqrt{\beta})^2}{\mu} \leq \alpha \leq \frac{(1 + \sqrt{\beta})^2}{L}.$$

Такое α существует тогда и только тогда, когда $\frac{(1 - \sqrt{\beta})^2}{\mu} \leq \frac{(1 + \sqrt{\beta})^2}{L}$, т.е. $\mu \leq \frac{(1 + \sqrt{\beta})^2}{(1 - \sqrt{\beta})^2}$. Правая часть монотонно возрастает по β , поэтому минимальное β достигается, когда неравенство обращается в равенство:

$$\alpha\mu = (1 - \sqrt{\beta})^2, \quad \alpha L = (1 + \sqrt{\beta})^2.$$

Разделим второе на первое:

$$f \rightarrow \min_{x,y,z} \quad \frac{L}{\mu} \quad \Rightarrow \quad \sqrt{\mu} = \frac{1 + \sqrt{\beta}}{1 - \sqrt{\beta}} \quad \Rightarrow \quad \beta^* = \left(\frac{\sqrt{\mu} - 1}{\sqrt{\mu} + 1} \right)^2 \equiv \left(\frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}} \right)^2$$

Вывод оптимальных гиперпараметров [3/3]

Подставим β^* в $\alpha L = (1 + \sqrt{\beta^*})^2$:

$$\alpha^* = \frac{(1 + \sqrt{\beta^*})^2}{L} = \frac{\left(1 + \frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}}\right)^2}{L} = \frac{\left(\frac{2\sqrt{L}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}}\right)^2}{L} = \boxed{\frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}}$$

Вывод оптимальных гиперпараметров [3/3]

Подставим β^* в $\alpha L = (1 + \sqrt{\beta^*})^2$:

$$\alpha^* = \frac{(1 + \sqrt{\beta^*})^2}{L} = \frac{\left(1 + \frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}}\right)^2}{L} = \frac{\left(\frac{2\sqrt{L}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}}\right)^2}{L} = \boxed{\frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}}$$

Итого, оптимальная скорость сходимости метода тяжёлого шарика для квадратичной задачи:

$$\rho(M) = \sqrt{\beta^*} = \frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}} = \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1}$$

Сходимость метода тяжёлого шарика для квадратичной функции

Мы можем явно вычислить собственные значения M_i :

$$\lambda_1^M, \lambda_2^M = \lambda \left(\begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) = \frac{1 + \beta - \alpha\lambda_i \pm \sqrt{(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta}}{2}.$$

Сходимость метода тяжёлого шарика для квадратичной функции

Мы можем явно вычислить собственные значения M_i :

$$\lambda_1^M, \lambda_2^M = \lambda \left(\begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) = \frac{1 + \beta - \alpha\lambda_i \pm \sqrt{(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta}}{2}.$$

Когда α и β оптимальны (α^*, β^*) , собственные значения являются комплексно-сопряженной парой $(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta \leq 0$, т.е. $\beta \geq (1 - \sqrt{\alpha\lambda_i})^2$.

Сходимость метода тяжёлого шарика для квадратичной функции

Мы можем явно вычислить собственные значения M_i :

$$\lambda_1^M, \lambda_2^M = \lambda \left(\begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) = \frac{1 + \beta - \alpha\lambda_i \pm \sqrt{(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta}}{2}.$$

Когда α и β оптимальны (α^*, β^*) , собственные значения являются комплексно-сопряженной парой $(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta \leq 0$, т.е. $\beta \geq (1 - \sqrt{\alpha\lambda_i})^2$.

$$\operatorname{Re}(\lambda^M) = \frac{L + \mu - 2\lambda_i}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad \operatorname{Im}(\lambda^M) = \frac{\pm 2\sqrt{(L - \lambda_i)(\lambda_i - \mu)}}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad |\lambda^M| = \frac{L - \mu}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}.$$

Сходимость метода тяжёлого шарика для квадратичной функции

Мы можем явно вычислить собственные значения M_i :

$$\lambda_1^M, \lambda_2^M = \lambda \left(\begin{bmatrix} 1 - \alpha\lambda_i + \beta & -\beta \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) = \frac{1 + \beta - \alpha\lambda_i \pm \sqrt{(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta}}{2}.$$

Когда α и β оптимальны (α^*, β^*) , собственные значения являются комплексно-сопряженной парой $(1 + \beta - \alpha\lambda_i)^2 - 4\beta \leq 0$, т.е. $\beta \geq (1 - \sqrt{\alpha\lambda_i})^2$.

$$\operatorname{Re}(\lambda^M) = \frac{L + \mu - 2\lambda_i}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad \operatorname{Im}(\lambda^M) = \frac{\pm 2\sqrt{(L - \lambda_i)(\lambda_i - \mu)}}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad |\lambda^M| = \frac{L - \mu}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}.$$

И скорость сходимости не зависит от шага и равна $\sqrt{\beta^*}$.

Сходимость метода тяжёлого шарика для квадратичной функции

i Theorem

Предположим, что f является μ -сильно выпуклой и L -гладкой квадратичной функцией. Тогда метод тяжёлого шарика с параметрами

$$\alpha = \frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \beta = \left(\frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}} \right)^2$$

сходится линейно:

$$\|x_k - x^*\|_2 \leq \left(\frac{\sqrt{\mu} - 1}{\sqrt{\mu} + 1} \right)^k \|x_0 - x^*\|$$

Глобальная сходимость метода тяжёлого шарика³

i Theorem

Предположим, что f является гладкой и выпуклой и что

$$\beta \in [0, 1), \quad \alpha \in \left(0, \frac{2(1-\beta)}{L}\right).$$

Тогда последовательность $\{x_k\}$, генерируемая итерациями тяжёлого шарика, удовлетворяет

$$f(\bar{x}_T) - f^* \leq \begin{cases} \frac{\|x_0 - x^*\|^2}{2(T+1)} \left(\frac{L\beta}{1-\beta} + \frac{1-\beta}{\alpha} \right), & \text{if } \alpha \in (0, \frac{1-\beta}{L}], \\ \frac{\|x_0 - x^*\|^2}{2(T+1)(2(1-\beta)-\alpha L)} \left(L\beta + \frac{(1-\beta)^2}{\alpha} \right), & \text{if } \alpha \in [\frac{1-\beta}{L}, \frac{2(1-\beta)}{L}), \end{cases}$$

где \bar{x}_T среднее Чезаро последовательности итераций, т.е.

$$\bar{x}_T = \frac{1}{T+1} \sum_{k=0}^T x_k.$$

³Глобальная сходимость метода тяжёлого шарика для выпуклой оптимизации, Euhanna Ghadimi et al.

Глобальная сходимость метода тяжёлого шарика⁴

Theorem

Предположим, что f является гладкой и сильно выпуклой и что

$$\alpha \in \left(0, \frac{2}{L}\right), \quad 0 \leq \beta < \frac{1}{2} \left(\frac{\mu\alpha}{2} + \sqrt{\frac{\mu^2\alpha^2}{4} + 4(1 - \frac{\alpha L}{2})} \right).$$

Тогда последовательность $\{x_k\}$, генерируемая итерациями метода тяжёлого шарика, сходится линейно к единственному оптимальному решению x^* . В частности,

$$f(x_k) - f^* \leq q^k (f(x_0) - f^*),$$

где $q \in [0, 1)$.

⁴Глобальная сходимость метода тяжёлого шарика для выпуклой оптимизации, Euhanna Ghadimi et al.

Итоги по методу тяжёлого шарика

- Обеспечивает ускоренную сходимость для сильно выпуклых квадратичных задач.

Итоги по методу тяжёлого шарика

- Обеспечивает ускоренную сходимость для сильно выпуклых квадратичных задач.
- Локально ускоренная сходимость была доказана в оригинальной статье.

Итоги по методу тяжёлого шарика

- Обеспечивает ускоренную сходимость для сильно выпуклых квадратичных задач.
- Локально ускоренная сходимость была доказана в оригинальной статье.
- Недавно ⁵ было доказано, что глобального ускорения сходимости для метода не существует.

⁵Provable non-accelerations of the heavy-ball method

Итоги по методу тяжёлого шарика

- Обеспечивает ускоренную сходимость для сильно выпуклых квадратичных задач.
- Локально ускоренная сходимость была доказана в оригинальной статье.
- Недавно ⁵ было доказано, что глобального ускорения сходимости для метода не существует.
- Метод не был чрезвычайно популярен до ML-бума.

⁵Provable non-accelerations of the heavy-ball method

Итоги по методу тяжёлого шарика

- Обеспечивает ускоренную сходимость для сильно выпуклых квадратичных задач.
- Локально ускоренная сходимость была доказана в оригинальной статье.
- Недавно ⁵ было доказано, что глобального ускорения сходимости для метода не существует.
- Метод не был чрезвычайно популярен до ML-бума.
- Сейчас он фактически является стандартом для практического ускорения методов градиентного спуска, в том числе для невыпуклых задач (обучение нейронных сетей).

⁵Provable non-accelerations of the heavy-ball method

Ускоренный градиентный метод Нестерова

Концепция ускоренного градиентного метода Нестерова

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

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

$$\begin{cases} y_{k+1} = x_k + \beta(x_k - x_{k-1}) \\ x_{k+1} = y_{k+1} - \alpha \nabla f(y_{k+1}) \end{cases}$$

Концепция ускоренного градиентного метода Нестерова

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

Давайте определим следующие обозначения

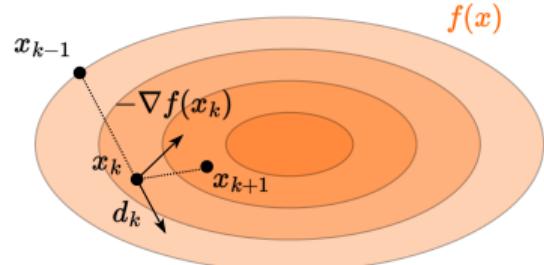
$$\begin{aligned} x^+ &= x - \alpha \nabla f(x) && \text{Градиентный шаг} \\ d_k &= \beta_k(x_k - x_{k-1}) && \text{Импульс} \end{aligned}$$

Тогда мы можем записать:

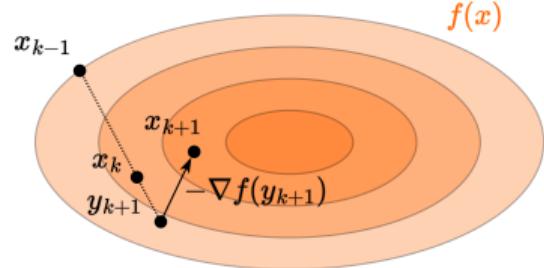
$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k^+ && \text{Градиентный спуск} \\ x_{k+1} &= x_k^+ + d_k && \text{Метод тяжёлого шарика} \\ x_{k+1} &= (x_k + d_k)^+ && \text{Ускоренный градиентный метод Нестерова} \end{aligned}$$

$$\begin{cases} y_{k+1} = x_k + \beta(x_k - x_{k-1}) \\ x_{k+1} = y_{k+1} - \alpha \nabla f(y_{k+1}) \end{cases}$$

Polyak momentum



Nesterov momentum



Сходимость для выпуклых функций

Theorem

Предположим, что $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ является выпуклой и L -гладкой. Ускоренный градиентный метод Нестерова (NAG) предназначен для решения задачи минимизации, начиная с начальной точки $x_0 = y_0 \in \mathbb{R}^n$ и $\lambda_0 = 0$. Алгоритм выполняет следующие шаги:

Обновление градиента: $x_{k+1} = y_k - \frac{1}{L} \nabla f(y_k)$

Вес экстраполяции: $\lambda_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4\lambda_k^2}}{2}$

$$\gamma_k = \frac{\lambda_k - 1}{\lambda_{k+1}}$$

Экстраполяция: $y_{k+1} = x_{k+1} + \gamma_k (x_{k+1} - x_k)$

Последовательность $\{f(x_k)\}_{k \in \mathbb{N}}$, генерируемая алгоритмом, сходится к оптимальному значению f^* со скоростью $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$, в частности:

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

Ускоренная сходимость для сильно выпуклых функций

Theorem

Предположим, что $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ является μ -сильно выпуклой и L -гладкой. Ускоренный градиентный метод Нестерова (NAG) предназначен для решения задачи минимизации, начиная с начальной точки $x_0 = y_0 \in \mathbb{R}^n$ и $\lambda_0 = 0$. Алгоритм выполняет следующие шаги:

Обновление градиента: $x_{k+1} = y_k - \frac{1}{L} \nabla f(y_k)$

Экстраполяция: $y_{k+1} = x_{k+1} - \gamma (x_{k+1} - x_k)$

Вес экстраполяции: $\gamma = \frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}}$

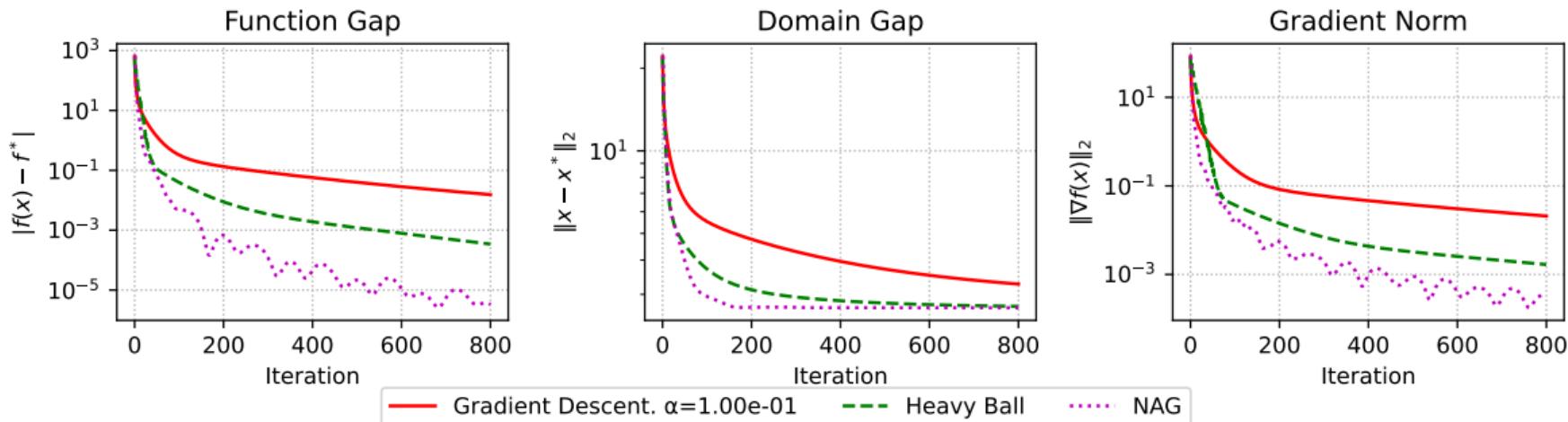
Последовательность $\{f(x_k)\}_{k \in \mathbb{N}}$, генерируемая алгоритмом, сходится к оптимальному значению f^* линейно:

$$f(x_k) - f^* \leq \frac{\mu + L}{2} \|x_0 - x^*\|_2^2 \exp\left(-\frac{k}{\sqrt{\mu}}\right)$$

Численные эксперименты

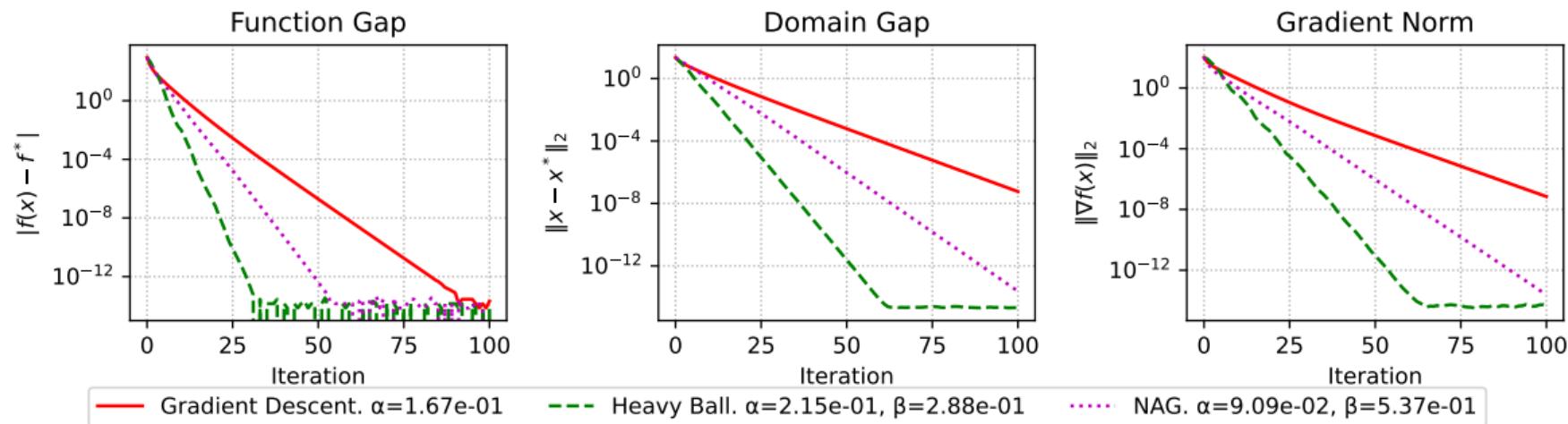
Выпуклая квадратичная задача (линейная регрессия)

Convex quadratics: $n=60$, random matrix, $\mu=0$, $L=10$



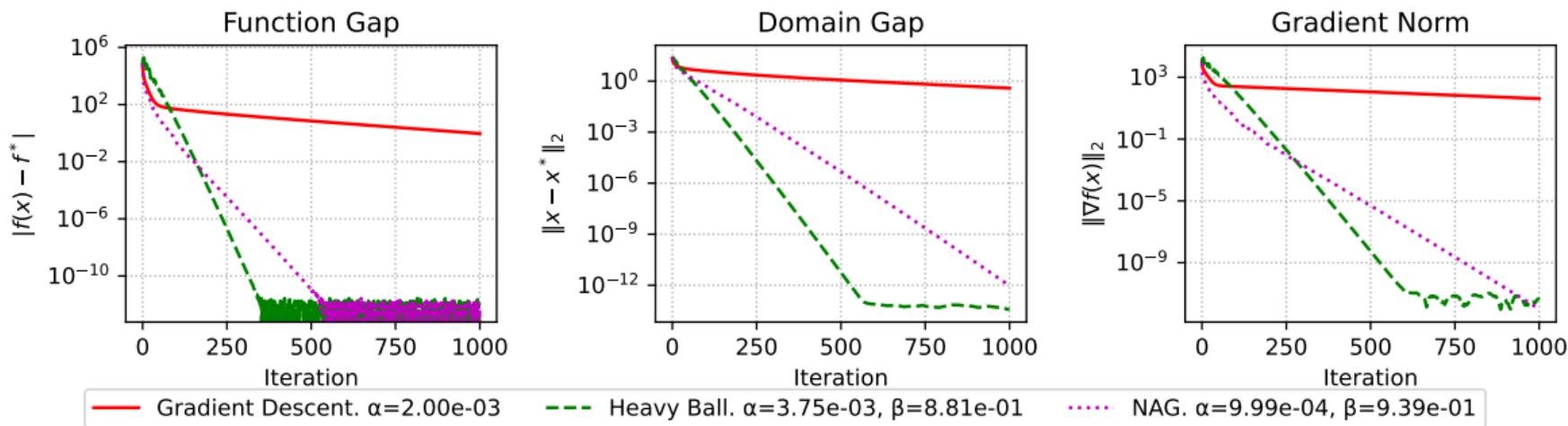
Сильно выпуклая квадратичная задача (регуляризованная линейная регрессия)

Strongly convex quadratics: $n=60$, random matrix, $\mu=1$, $L=10$



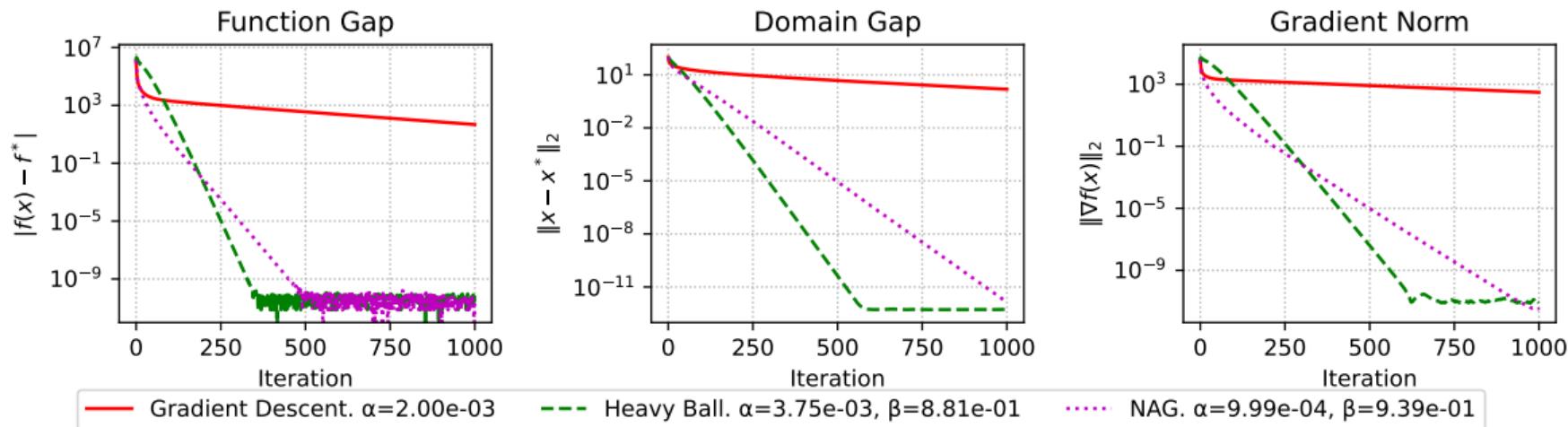
Сильно выпуклая квадратичная задача (регуляризованная линейная регрессия)

Strongly convex quadratics: $n=60$, random matrix, $\mu=1$, $L=1000$



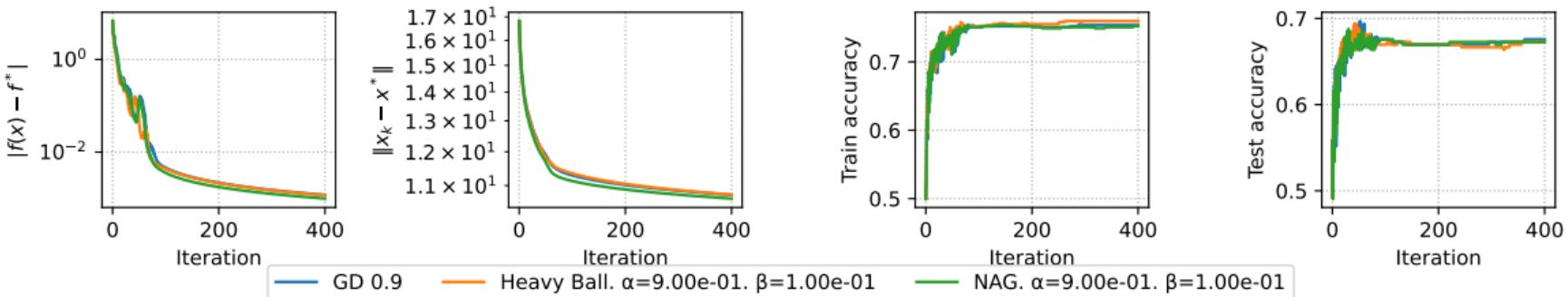
Сильно выпуклая квадратичная задача (регуляризованная линейная регрессия)

Strongly convex quadratics: $n=1000$, random matrix, $\mu=1$, $L=1000$



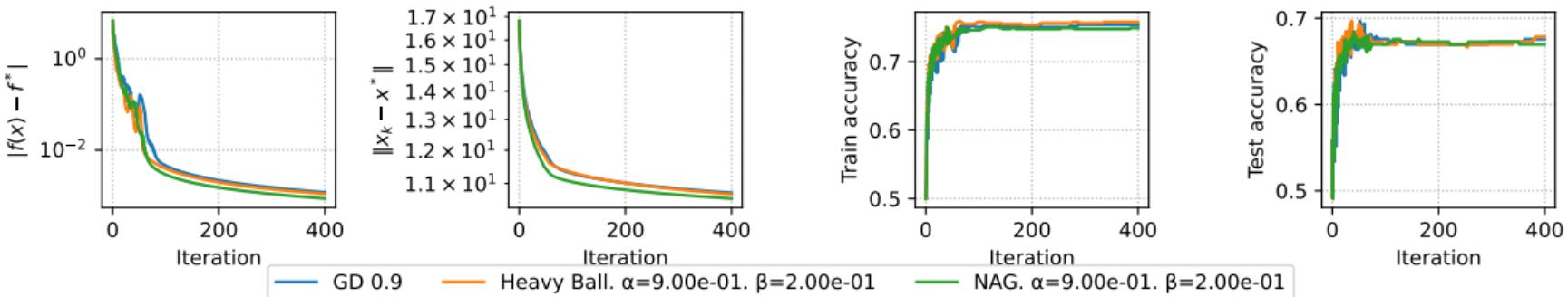
Выпуклая бинарная логистическая регрессия

Convex binary logistic regression. mu=0.



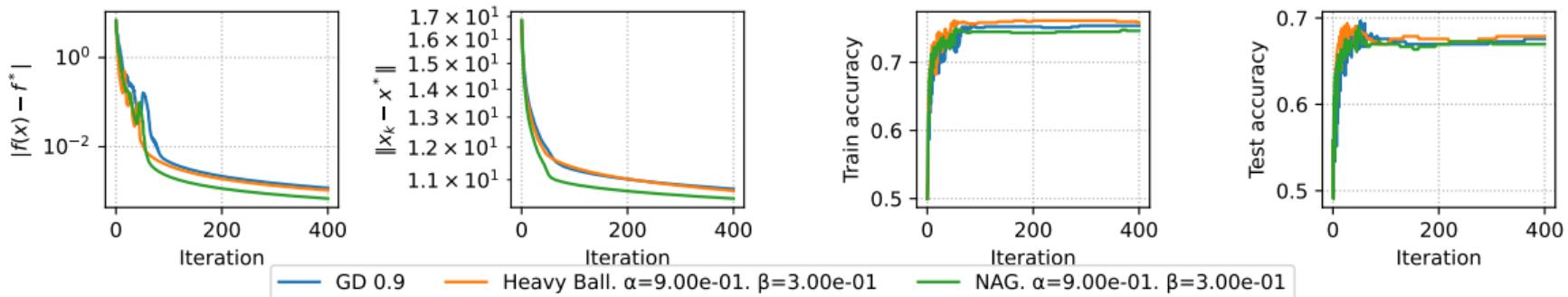
Выпуклая бинарная логистическая регрессия

Convex binary logistic regression. mu=0.



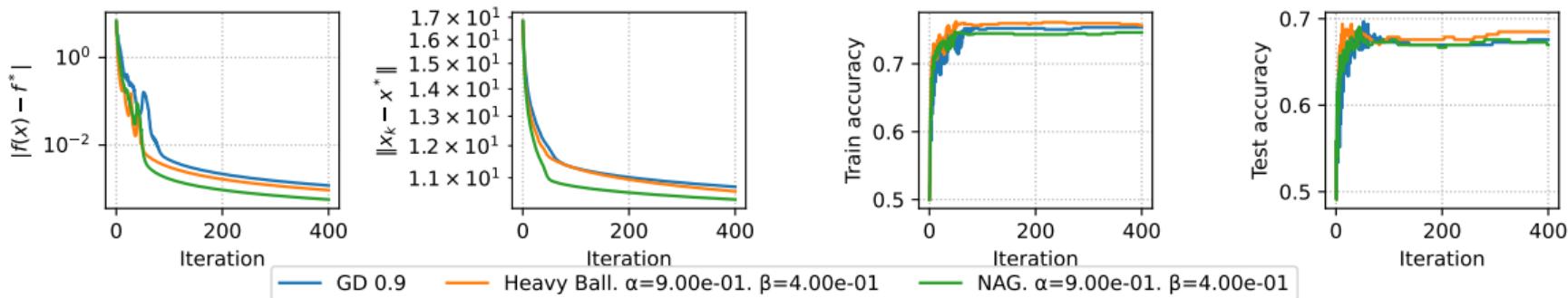
Выпуклая бинарная логистическая регрессия

Convex binary logistic regression. mu=0.



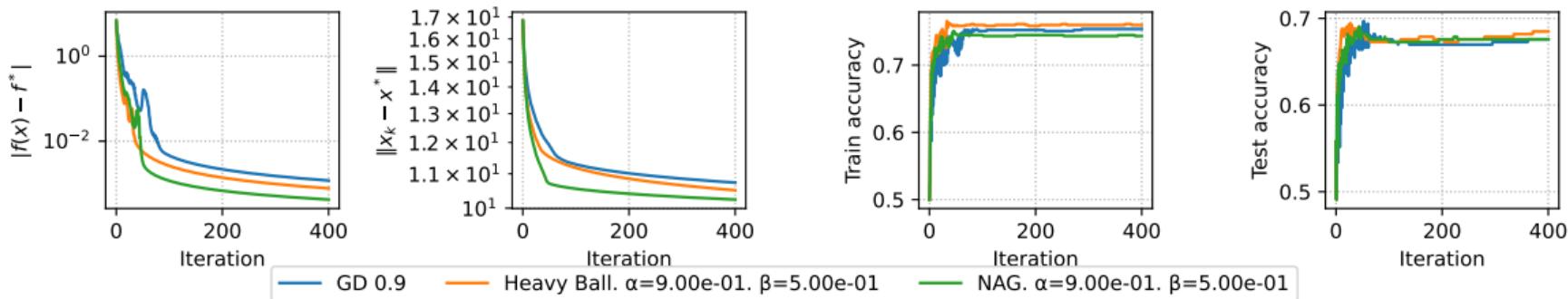
Выпуклая бинарная логистическая регрессия

Convex binary logistic regression. mu=0.



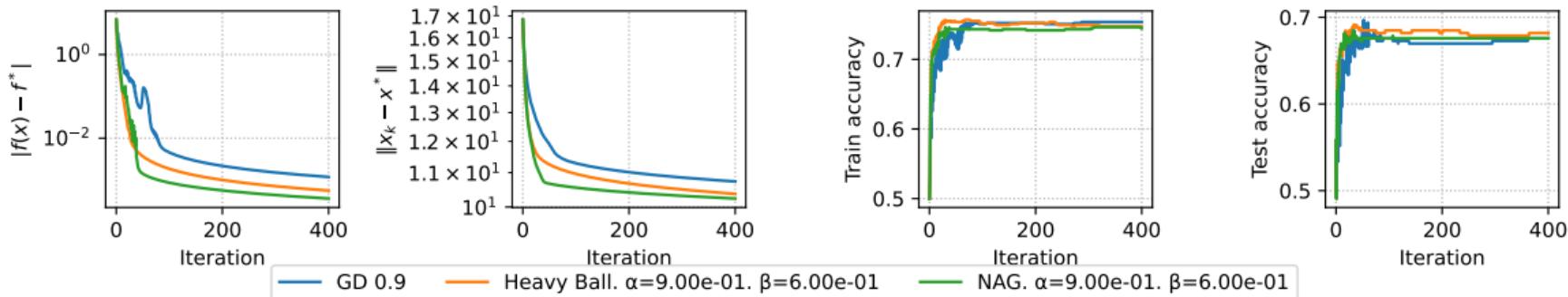
Выпуклая бинарная логистическая регрессия

Convex binary logistic regression. mu=0.



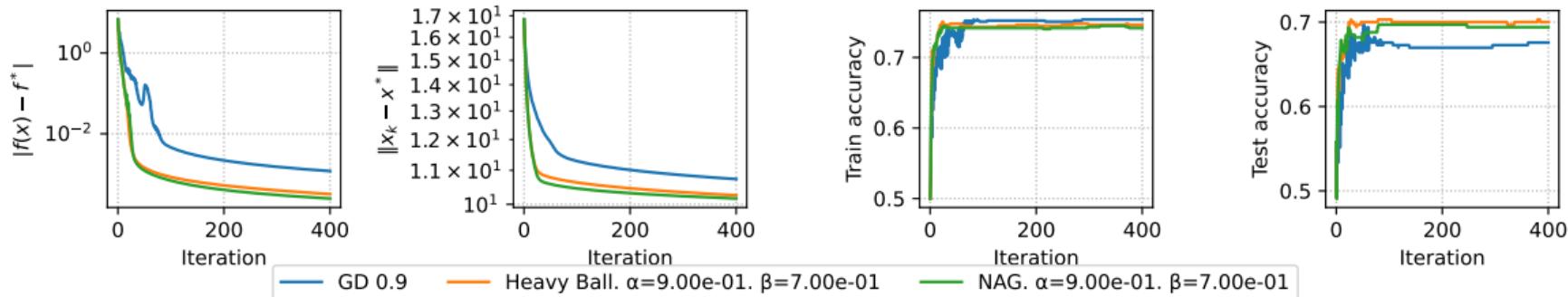
Выпуклая бинарная логистическая регрессия

Convex binary logistic regression. mu=0.



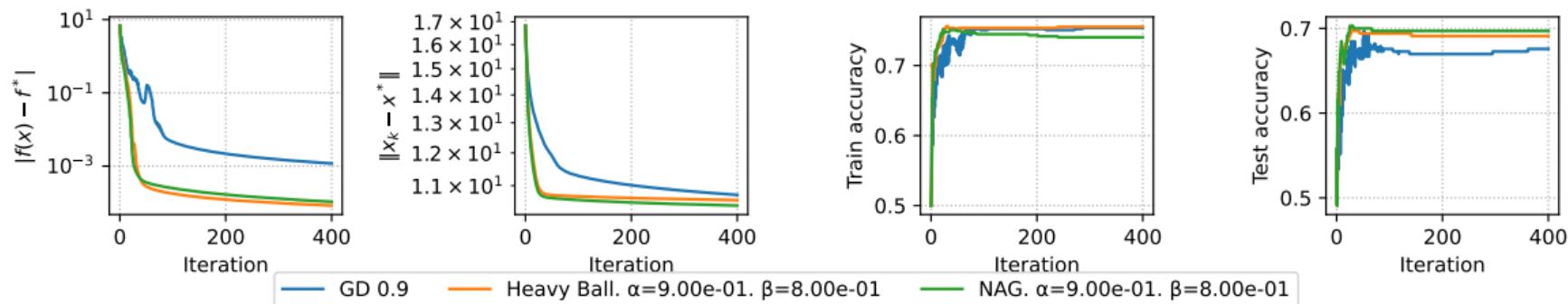
Выпуклая бинарная логистическая регрессия

Convex binary logistic regression. mu=0.



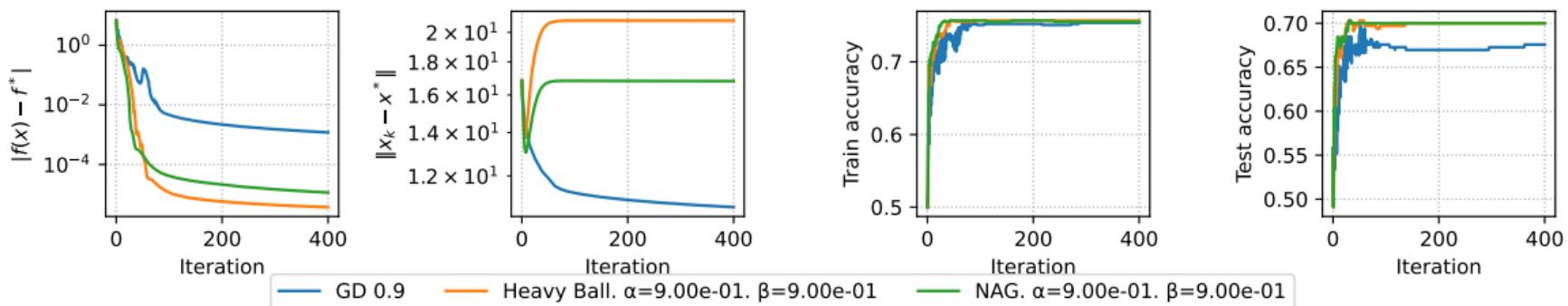
Выпуклая бинарная логистическая регрессия

Convex binary logistic regression. mu=0.



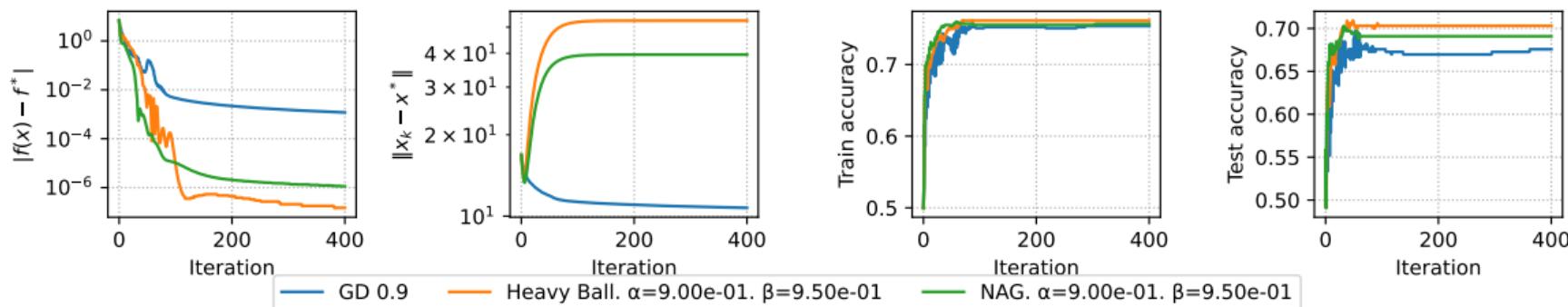
Выпуклая бинарная логистическая регрессия

Convex binary logistic regression. mu=0.



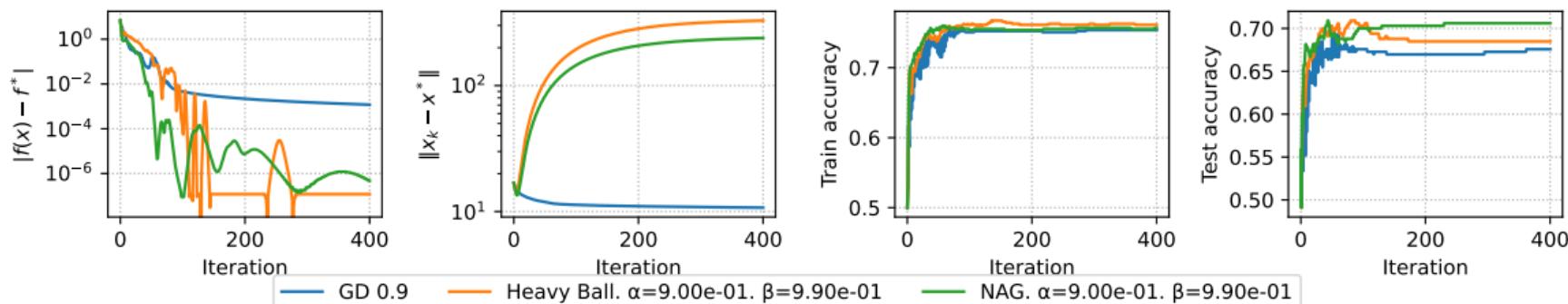
Выпуклая бинарная логистическая регрессия

Convex binary logistic regression. mu=0.



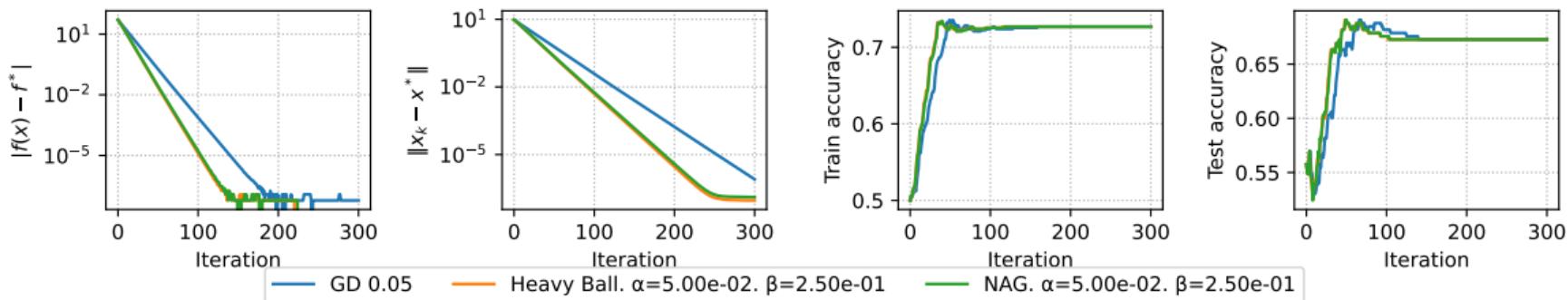
Выпуклая бинарная логистическая регрессия

Convex binary logistic regression. mu=0.



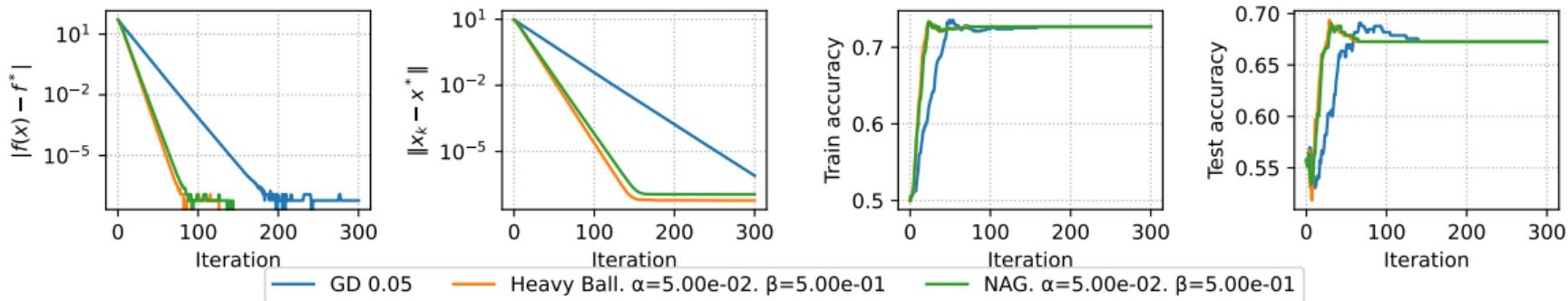
Сильно выпуклая бинарная логистическая регрессия

Strongly convex binary logistic regression. $\mu=1$.



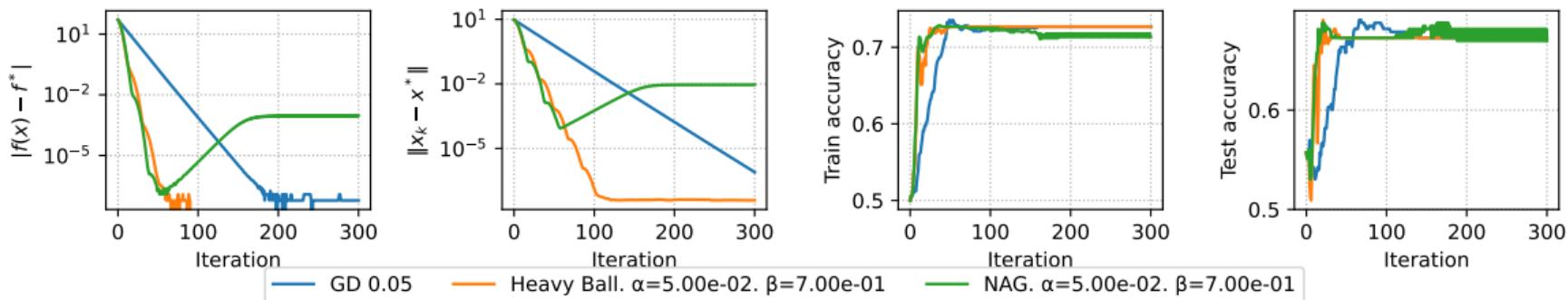
Сильно выпуклая бинарная логистическая регрессия

Strongly convex binary logistic regression. $\mu=1$.



Сильно выпуклая бинарная логистическая регрессия

Strongly convex binary logistic regression. $\mu=1$.



Сильно выпуклая бинарная логистическая регрессия

Strongly convex binary logistic regression. $\mu=1$.

