Методы оптимизации
Введение в численные методы оптимизации. Градиентный спуск

Александр Катруца

Московский физико-технический институт

24 марта 2021 г.

На прошлой лекции

- Условия ККТ
- Коническая двойственность
- Условие Слейтера
- Сильная и слабая двойственность

Постановка задачи

$$
\begin{aligned}
&\min_{x \in S} f_0(x) \\
\text{s.t. } &f_j(x) = 0,\ j = 1, \ldots, m \\
&g_k(x) \leq 0,\ k = 1, \ldots, p
\end{aligned}
$$

где $S \subseteq \mathbb{R}^n,\ f_j : S \to \mathbb{R},\ j = 0, \ldots, m,\ g_k : S \to \mathbb{R},\ k = 1, \ldots, p$

- Все функции как минимум непрерывны
- Задачи **нелинейной** оптимизации в общем случае являются **численно неразрешимыми**!

Некоторые аналитические результаты

Некоторые аналитические результаты

Необходимое условие первого порядка

Если x^* точка локального минимума дифференцируемой функции $f(x)$, тогда

$$f'(x^*) = 0$$

Некоторые аналитические результаты

Необходимое условие первого порядка

Если x^* точка локального минимума дифференцируемой функции $f(x)$, тогда

$$f'(x^*) = 0$$

Необходимое условие второго порядка

Если x^* точка локального минимума дважды дифференцируемой функции $f(x)$, тогда

$$f'(x^*) = 0 \quad \text{и} \quad f''(x^*) \succeq 0$$

Некоторые аналитические результаты

Необходимое условие первого порядка

Если x^* точка локального минимума дифференцируемой функции $f(x)$, тогда

$$f'(x^*) = 0$$

Необходимое условие второго порядка

Если x^* точка локального минимума дважды дифференцируемой функции $f(x)$, тогда

$$f'(x^*) = 0 \quad \text{и} \quad f''(x^*) \succeq 0$$

Достаточное условие

Пусть $f(x)$ дважды дифференцируемая функция, и пусть точка x^* удовлетворяет условиям

$$f'(x^*) = 0 \quad f''(x^*) \succ 0,$$

тогда x^* является точкой строгого локального минимума функции $f(x)$

Зачем нужны численные методы?

- Для задач большой размерности аналитическое выражение может быть трудно вычислить

Зачем нужны численные методы?

- Для задач большой размерности аналитическое выражение может быть трудно вычислить
- Чаще всего аналитического выражения для решения нет

Особенности численного решения

- Точно решить задачу принципиально невозможно из-за погрешности машинной арифметики

Особенности численного решения

- Точно решить задачу принципиально невозможно из-за погрешности машинной арифметики
- Необходимо задать критерий обнаружения решения

Особенности численного решения

- Точно решить задачу принципиально невозможно из-за погрешности машинной арифметики
- Необходимо задать критерий обнаружения решения
- Необходимо определить, какую информацию о задаче использовать

Как создаются численные методы?

- Способы численного решения уравнений из условий оптимальности

Как создаются численные методы?

- Способы численного решения уравнений из условий оптимальности
- Замена целевой функции её **простой** аппроксимацией

Как создаются численные методы?

- Способы численного решения уравнений из условий оптимальности
- Замена целевой функции её **простой** аппроксимацией
- Сведение условных задач к безусловным с сохранением множества решений

Общая схема

- Начальная точка x_0
- Желаемая точность ε

```python
def GeneralScheme(x, epsilon):
    while StopCriterion(x) > epsilon:
        OracleResponse = RequestOracle(x)
        UpdateInformation(I, x, OracleResponse)
        x = NextPoint(I, x)
    return x
```

Вопросы

1. Какие критерии остановки могут быть?

Вопросы

1. Какие критерии остановки могут быть?
2. Что такое оракул и зачем он нужен?

Вопросы

1. Какие критерии остановки могут быть?
2. Что такое оракул и зачем он нужен?
3. Что такое информационная модель?

Вопросы

1. Какие критерии остановки могут быть?
2. Что такое оракул и зачем он нужен?
3. Что такое информационная модель?
4. Как вычисляется новая точка?

Критерии остановки

1. Сходимость по аргументу:

$$\|x_k - x^*\|_2 < \varepsilon$$

Критерии остановки

1. Сходимость по аргументу:

$$\|x_k - x^*\|_2 < \varepsilon$$

2. Сходимость по функции:

$$\|f_k - f^*\|_2 < \varepsilon$$

Критерии остановки

1. Сходимость по аргументу:

$$\|x_k - x^*\|_2 < \varepsilon$$

2. Сходимость по функции:

$$\|f_k - f^*\|_2 < \varepsilon$$

3. Выполнение необходимого условия

$$\|f'(x_k)\|_2 < \varepsilon$$

Критерии остановки

1. Сходимость по аргументу:

$$\|x_k - x^*\|_2 < \varepsilon$$

2. Сходимость по функции:

$$\|f_k - f^*\|_2 < \varepsilon$$

3. Выполнение необходимого условия

$$\|f'(x_k)\|_2 < \varepsilon$$

4. Зазор двойственности

$$f_k - g(\lambda_k, \mu_k) \leq \varepsilon$$

Что такое оракул?

Что такое оракул?

Почти определение

Оракулом называют некоторое абстрактное устройство, которое отвечает на последовательные вопросы метода

Что такое оракул?

Почти определение

Оракулом называют некоторое абстрактное устройство, которое отвечает на последовательные вопросы метода

Аналогия из ООП

- оракул – это виртуальный метод базового класса
- каждая задача – производный класс
- оракул определяется для каждой задачи отдельно согласно общему определению в базовом классе

Что такое оракул?

Почти определение

Оракулом называют некоторое абстрактное устройство, которое отвечает на последовательные вопросы метода

Аналогия из ООП

- оракул – это виртуальный метод базового класса
- каждая задача – производный класс
- оракул определяется для каждой задачи отдельно согласно общему определению в базовом классе

Концепция чёрного ящика

1. Единственной информацией, получаемой в ходе работы итерационного метода, являются ответы оракула
2. Ответы оракула являются **локальными**

Информация о задаче

1. Каждый ответ оракула даёт **локальную** информацию о поведении функции в точке
2. Агрегируя все полученные ответы оракула, обновляем информацию о **глобальном** виде целевой функции:
    - кривизна
    - направление убывания
    - etc

Вычисление следующей точки

Вычисление следующей точки

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k$$

Вычисление следующей точки

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k$$

Линейный поиск

1. Сначала выбирается направление h_k
2. Далее определяется «оптимальное» значение α_k

Вычисление следующей точки

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k$$

Линейный поиск

1. Сначала выбирается направление h_k
2. Далее определяется «оптимальное» значение α_k

Метод доверительных областей

1. Выбирается α-окрестность x_k
2. В этой окрестности строится упрощённая **модель** целевой функции
3. Далее определяется направления h_k, минимизирующее модель целевой функции и не выводящее точку $x_k + h_k$ за пределы области

Как сравнивать методы оптимизации?

Для заданного класса задач сравнивают следующие величины:

1. Сложность
   - аналитическая: число обращений к оракулу для решения задачи с точностью ε
   - арифметическая: общее число всех вычислений, необходимых для решения задачи с точностью ε
2. Скорость сходимости
3. Эксперименты

Скорости сходимости

1. Сублинейная

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

где $\alpha < 0$ и $0 < C < \infty$

Скорости сходимости

1. Сублинейная
$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Ck^{\alpha},$$
где $\alpha < 0$ и $0 < C < \infty$
2. Линейная (геометрическая прогрессия)
$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Cq^{k},$$
где $q \in (0, 1)$ и $0 < C < \infty$

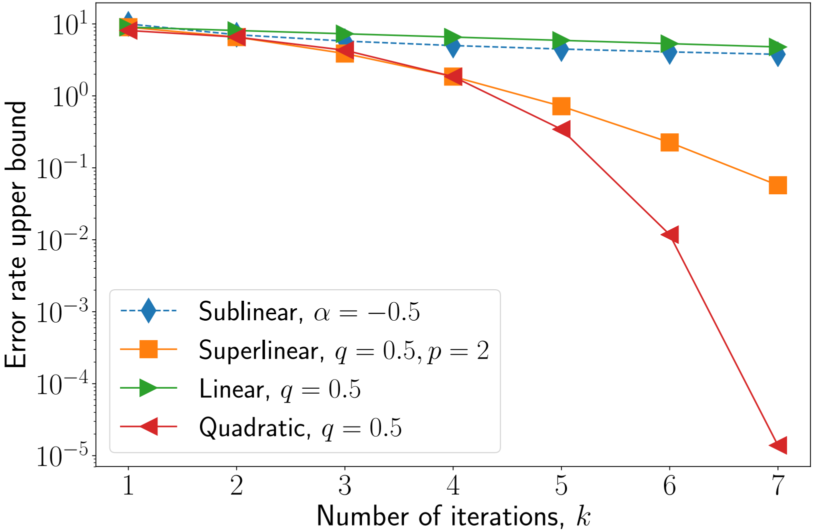
Скорости сходимости

1. Сублинейная
$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Ck^{\alpha},$$
где $\alpha < 0$ и $0 < C < \infty$
2. Линейная (геометрическая прогрессия)
$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Cq^k,$$
где $q \in (0, 1)$ и $0 < C < \infty$
3. Сверхлинейная
$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Cq^{k^p},$$
где $q \in (0, 1)$, $0 < C < \infty$ и $p > 1$

Скорости сходимости

1. Сублинейная
$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Ck^{\alpha},$$
где $\alpha < 0$ и $0 < C < \infty$
2. Линейная (геометрическая прогрессия)
$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Cq^k,$$
где $q \in (0, 1)$ и $0 < C < \infty$
3. Сверхлинейная
$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Cq^{k^p},$$
где $q \in (0, 1)$, $0 < C < \infty$ и $p > 1$
4. Квадратичная
$$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq C\|x_k - x^*\|_2^2, \qquad \text{или} \qquad \|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Cq^{2^k}$$
где $q \in (0, 1)$ и $0 < C < \infty$

Сравнение скоростей сходимости



Значение теорем сходимости

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что дают теоремы сходимости

- класс задач, для которых применим метод

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что дают теоремы сходимости

- класс задач, для которых применим метод
  - выпуклость

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что дают теоремы сходимости

- класс задач, для которых применим метод
  - выпуклость
  - гладкость

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что дают теоремы сходимости

- класс задач, для которых применим метод
  - выпуклость
  - гладкость
- качественное поведение метода

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что дают теоремы сходимости

- класс задач, для которых применим метод
  - выпуклость
  - гладкость
- качественное поведение метода
  - существенно ли начальное приближение

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что дают теоремы сходимости

- класс задач, для которых применим метод
  - выпуклость
  - гладкость
- качественное поведение метода
  - существенно ли начальное приближение
  - по какому функционалу есть сходимость

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что дают теоремы сходимости

- класс задач, для которых применим метод
  - выпуклость
  - гладкость
- качественное поведение метода
  - существенно ли начальное приближение
  - по какому функционалу есть сходимость
- оценку скорости сходимости

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что дают теоремы сходимости

- класс задач, для которых применим метод
  - выпуклость
  - гладкость
- качественное поведение метода
  - существенно ли начальное приближение
  - по какому функционалу есть сходимость
- оценку скорости сходимости
  - теоретическая оценка без проведения экспериментов

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что дают теоремы сходимости

- класс задач, для которых применим метод
    - выпуклость
    - гладкость
- качественное поведение метода
    - существенно ли начальное приближение
    - по какому функционалу есть сходимость
- оценку скорости сходимости
    - теоретическая оценка без проведения экспериментов
    - определение факторов, которые влияют на сходимость

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что дают теоремы сходимости

- класс задач, для которых применим метод
  - выпуклость
  - гладкость
- качественное поведение метода
  - существенно ли начальное приближение
  - по какому функционалу есть сходимость
- оценку скорости сходимости
  - теоретическая оценка без проведения экспериментов
  - определение факторов, которые влияют на сходимость
  - иногда заранее можно выбрать число итераций для достижения заданной точности

Значение теорем сходимости

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что НЕ дают теоремы сходимости

- сходимость метода *ничего не говорит* о целесообразности его применения

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что НЕ дают теоремы сходимости

- сходимость метода *ничего не говорит* о целесообразности его применения
- оценки сходимости зависят от неизвестных констант

Значение теорем сходимости

(Б.Т. Поляк Введение в оптимизацию, гл. 1, § 6)

Что НЕ дают теоремы сходимости

- сходимость метода *ничего не говорит* о целесообразности его применения
- оценки сходимости зависят от неизвестных констант
- учёт ошибок округления и точности решения вспомогательных задач

Классификация методов

Классификация методов

Порядок метода

- Методы нулевого порядка: оракул возвращает только значение функции $f(x)$

Классификация методов

Порядок метода

- Методы нулевого порядка: оракул возвращает только значение функции $f(x)$
- Методы первого порядка: оракул возвращает значение функции $f(x)$ и её градиент $f'(x)$

Классификация методов

Порядок метода

- Методы нулевого порядка: оракул возвращает только значение функции $f(x)$
- Методы первого порядка: оракул возвращает значение функции $f(x)$ и её градиент $f'(x)$
- Методы второго порядка: оракул возвращает значение функции $f(x)$, её градиент $f'(x)$ и гессиан $f''(x)$.

Классификация методов

Порядок метода

- Методы нулевого порядка: оракул возвращает только значение функции $f(x)$
- Методы первого порядка: оракул возвращает значение функции $f(x)$ и её градиент $f'(x)$
- Методы второго порядка: оракул возвращает значение функции $f(x)$, её градиент $f'(x)$ и гессиан $f''(x)$.

Q: существуют ли методы более высокого порядка?

Классификация методов

Порядок метода

- Методы нулевого порядка: оракул возвращает только значение функции $f(x)$
- Методы первого порядка: оракул возвращает значение функции $f(x)$ и её градиент $f'(x)$
- Методы второго порядка: оракул возвращает значение функции $f(x)$, её градиент $f'(x)$ и гессиан $f''(x)$.

Q: существуют ли методы более высокого порядка?

Использование истории

Классификация методов

Порядок метода

- Методы нулевого порядка: оракул возвращает только значение функции $f(x)$
- Методы первого порядка: оракул возвращает значение функции $f(x)$ и её градиент $f'(x)$
- Методы второго порядка: оракул возвращает значение функции $f(x)$, её градиент $f'(x)$ и гессиан $f''(x)$.

Q: существуют ли методы более высокого порядка?

Использование истории

1. Одношаговые методы

$$x_{k+1} = \Phi(x_k)$$

Классификация методов

Порядок метода

- Методы нулевого порядка: оракул возвращает только значение функции $f(x)$
- Методы первого порядка: оракул возвращает значение функции $f(x)$ и её градиент $f'(x)$
- Методы второго порядка: оракул возвращает значение функции $f(x)$, её градиент $f'(x)$ и гессиан $f''(x)$.

Q: существуют ли методы более высокого порядка?

Использование истории

1. Одношаговые методы

$$x_{k+1} = \Phi(x_k)$$

2. Многошаговые методы

$$x_{k+1} = \Phi(x_k, x_{k-1}, ...)$$

Главное

- Введение в численные методы оптимизации
- Общая схема работы метода
- Способы сравнения методов оптимизации
- Зоопарк задач и методов

Методы спуска

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k$$

так что

$$f(x_{k+1}) < f(x_k)$$

Методы спуска

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k$$

так что

$$f(x_{k+1}) < f(x_k)$$

Определение

Направление h_k называется *направлением убывания*

Методы спуска

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k$$

так что

$$f(x_{k+1}) < f(x_k)$$

Определение

Направление h_k называется *направлением убывания*

Замечание

Существуют методы, которые не требуют монотонного убывания функции от итерации к итерации

Градиентный спуск

Глобальная оценка сверху на функцию f в точке x_k:

$$f(y) \leq f(x_k) + \langle f'(x_k), y - x_k \rangle + \frac{L}{2} \|y - x_k\|_2^2 \equiv g(y),$$

где $\lambda_{\max}(f''(x)) \leq L$ для всех допустимых x.

Градиентный спуск

Глобальная оценка сверху на функцию f в точке x_k:

$$f(y) \le f(x_k) + \langle f'(x_k), y - x_k \rangle + \frac{L}{2}\|y - x_k\|_2^2 \equiv g(y),$$

где $\lambda_{\max}(f''(x)) \le L$ для всех допустимых x.
Справа – квадратичная форма, точка минимума которой имеет аналитическое выражение:

$$\begin{aligned}
&g'(y^*) = 0 \\
&f'(x_k) + L(y^* - x_k) = 0 \\
&y^* = x_k - \frac{1}{L} f'(x_k) \equiv x_{k+1}
\end{aligned}$$

Этот способ позволяет оценить значение шага как $\frac{1}{L}$.

Выбор шага

- Постоянный $\alpha_k \equiv \text{const} < \frac{2}{L}$
- Убывающая последовательность, такая что $\sum\limits_{k=1}^{\infty} \alpha_k = \infty$, например $\frac{1}{k}$, $\frac{1}{\sqrt{k}}$, etc
- Адаптивный поиск: правила Армихо, Вольфа, Гольдштейна и другие
- Наискорейший спуск: поиск лучшего α_k

Важно

Лучший размер шага даёт не столь существенное теоретическое ускорение сходимости

Сходимость к стационарной точке

$$
\begin{aligned}
f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \langle f'(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle + \frac{L}{2}\|x_{k+1} - x_k\|_2^2 = \\
f(x_k) - \alpha_k \|f'(x_k)\|_2^2 + \frac{L\alpha_k^2}{2}\|f'(x_k)\|_2^2 = \\
f(x_k) - \left(\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2}\right)\|f'(x_k)\|_2^2
\end{aligned}
$$

Сходимость к стационарной точке

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \langle f'(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle + \frac{L}{2}\|x_{k+1} - x_k\|_2^2 =$$
$$f(x_k) - \alpha_k\|f'(x_k)\|_2^2 + \frac{L\alpha_k^2}{2}\|f'(x_k)\|_2^2 =$$
$$f(x_k) - \left(\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2}\right)\|f'(x_k)\|_2^2$$

- Условие убывания: $\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2} > 0 \Rightarrow \alpha_k < \frac{2}{L}$

Сходимость к стационарной точке

$$
\begin{aligned}
f(x_{k+1}) \le f(x_k) + \langle f'(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle + \frac{L}{2}\|x_{k+1} - x_k\|_2^2 = \\
f(x_k) - \alpha_k \|f'(x_k)\|_2^2 + \frac{L\alpha_k^2}{2}\|f'(x_k)\|_2^2 = \\
f(x_k) - \left(\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2}\right)\|f'(x_k)\|_2^2
\end{aligned}
$$

- Условие убывания: $\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2} > 0 \Rightarrow \alpha_k < \frac{2}{L}$
- $\alpha_k^* = \arg\max\limits_{\alpha_k} \left(\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2}\right) = \frac{1}{L}$

Сходимость к стационарной точке

$$
\begin{aligned}
f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \langle f'(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle + \frac{L}{2}\|x_{k+1} - x_k\|_2^2 = \\
f(x_k) - \alpha_k \|f'(x_k)\|_2^2 + \frac{L\alpha_k^2}{2}\|f'(x_k)\|_2^2 = \\
f(x_k) - \left(\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2}\right)\|f'(x_k)\|_2^2
\end{aligned}
$$

- Условие убывания: $\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2} > 0 \Rightarrow \alpha_k < \frac{2}{L}$
- $\alpha_k^* = \arg\max\limits_{\alpha_k} \left(\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2}\right) = \frac{1}{L}$
- $f(x_k) - f(x_{k+1}) \geq \frac{1}{2L}\|f'(x_k)\|_2^2$

Сходимость к стационарной точке

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \langle f'(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle + \frac{L}{2}\|x_{k+1} - x_k\|_2^2 =$$

$$f(x_k) - \alpha_k \|f'(x_k)\|_2^2 + \frac{L\alpha_k^2}{2}\|f'(x_k)\|_2^2 =$$

$$f(x_k) - \left(\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2}\right)\|f'(x_k)\|_2^2$$

- Условие убывания: $\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2} > 0 \Rightarrow \alpha_k < \frac{2}{L}$
- $\alpha_k^* = \arg\max\limits_{\alpha_k} \left(\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2}\right) = \frac{1}{L}$
- $f(x_k) - f(x_{k+1}) \geq \frac{1}{2L}\|f'(x_k)\|_2^2$
- $\frac{1}{2L}\sum\limits_{k=0}^{T}\|f'(x_k)\|_2^2 \leq f(x_0) - f(x_{T+1}) \leq f(x_0) - f^*$

Сходимость к стационарной точке

$$
\begin{aligned}
f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \langle f'(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle + \frac{L}{2}\|x_{k+1} - x_k\|_2^2 = \\
f(x_k) - \alpha_k \|f'(x_k)\|_2^2 + \frac{L\alpha_k^2}{2}\|f'(x_k)\|_2^2 = \\
f(x_k) - \left(\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2}\right)\|f'(x_k)\|_2^2
\end{aligned}
$$

- Условие убывания: $\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2} > 0 \Rightarrow \alpha_k < \frac{2}{L}$
- $\alpha_k^* = \arg\max\limits_{\alpha_k} \left(\alpha_k - \frac{L\alpha_k^2}{2}\right) = \frac{1}{L}$
- $f(x_k) - f(x_{k+1}) \geq \frac{1}{2L}\|f'(x_k)\|_2^2$
- $\frac{1}{2L}\sum\limits_{k=0}^{T}\|f'(x_k)\|_2^2 \leq f(x_0) - f(x_{T+1}) \leq f(x_0) - f^*$
- f ограничена снизу, $\|f'(x_k)\|_2 \to 0,\ k \to \infty$

Сходимость для выпуклой функции

Теорема

Пусть f выпуклая функция с Липшицевым градиентом и $\alpha = \frac{1}{L}$, тогда градиентный спуск сходится как

$$f(x_{k+1}) - f^* \leq \frac{2L\|x - x_0\|_2^2}{k+4} = \mathcal{O}(1/k)$$

Сходимость для сильно выпуклой функции

- Следствие сильной выпуклости

$$f(z) \geq f(x_k) + \langle f'(x_k), z - x_k \rangle + \frac{\mu}{2}\|z - x_k\|_2^2$$

- Минимизируя обе части по z

$$f(x^*) \geq f(x_k) - \frac{1}{2\mu}\|f'(x_k)\|_2^2, \quad \|f'(x_k)\|_2^2 \geq 2\mu(f(x_k) - f^*)$$

- Вспомним, что для $\alpha_k \equiv \frac{1}{L}$

$$f^* \leq f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \frac{1}{2L}\|f'(x_k)\|_2^2$$

- И наконец получим линейную сходимость

$$f(x_{k+1}) - f^* \leq \left(1 - \frac{1}{\kappa}\right)(f(x_k) - f^*)$$

Теорема для сильно выпуклой функции

Теорема

Пусть f с Липшицевым градиентом и μ сильно выпукла, $\alpha_k = \frac{2}{\mu+L}$, тогда градиентный спуск сходится как

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

Что влияет на линейную скорость сходимости?

$$q^* = \frac{L - \mu}{L + \mu} = \frac{L/\mu - 1}{L/\mu + 1} = \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1},$$

где κ - оценка числа обусловленности $f''(x)$.

Q: что такое число обусловленности матрицы?

Что влияет на линейную скорость сходимости?

$$q^* = \frac{L - \mu}{L + \mu} = \frac{L/\mu - 1}{L/\mu + 1} = \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1},$$

где κ - оценка числа обусловленности $f''(x)$.

Q: что такое число обусловленности матрицы?

- При $\kappa \gg 1$, $q^* \to 1 \Rightarrow$ ооооочень *медленная* сходимости. Например при $\kappa = 100$: $q^* \approx 0.98$

Что влияет на линейную скорость сходимости?

$$
q^* = \frac{L-\mu}{L+\mu} = \frac{L/\mu - 1}{L/\mu + 1} = \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1},
$$

где κ - оценка числа обусловленности $f''(x)$.

Q: что такое число обусловленности матрицы?

- При $\kappa \gg 1$, $q^* \to 1 \Rightarrow$ оооочень *медленная* сходимости. Например при $\kappa = 100$: $q^* \approx 0.98$
- При $\kappa \simeq 1$, $q^* \to 0 \Rightarrow$ *ускорение* сходимости. Например при $\kappa = 4$: $q^* = 0.6$

Что влияет на линейную скорость сходимости?

$$q^* = \frac{L - \mu}{L + \mu} = \frac{L/\mu - 1}{L/\mu + 1} = \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1},$$

где κ - оценка числа обусловленности $f''(x)$.
Q: что такое число обусловленности матрицы?

- При $\kappa \gg 1$, $q^* \to 1 \Rightarrow$ оооочень *медленная* сходимости. Например при $\kappa = 100$: $q^* \approx 0.98$
- При $\kappa \simeq 1$, $q^* \to 0 \Rightarrow$ *ускорение* сходимости. Например при $\kappa = 4$: $q^* = 0.6$

Q: какая геометрия у этого требования?

Can we do better?

Что нам известно

- Для выпуклых функций с Липшицевым градиентом градиентный спуск сходится как $\mathcal{O}(1/k)$
- Для сильно выпуклых функций с Липшицевым градиентом градиентный спуск сходится с линейной скоростью $q = \frac{\kappa-1}{\kappa+1}$

Q: есть ли методы, которые сходятся быстрее, и как это выяснить?

Нижние оценки сходимости

Для обоих классов функций существуют такие «плохие» функции, для которых выполнены следующие оценки **снизу**

Нижние оценки сходимости

Для обоих классов функций существуют такие «плохие» функции, для которых выполнены следующие оценки **снизу**

- для выпуклых функций с Липшицевым градиентом

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

Нижние оценки сходимости

Для обоих классов функций существуют такие «плохие» функции, для которых выполнены следующие оценки **снизу**

- для выпуклых функций с Липшицевым градиентом

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

- для сильно выпуклых функций с Липшицевым градиентом

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

Нижние оценки сходимости

Для обоих классов функций существуют такие «плохие» функции, для которых выполнены следующие оценки **снизу**

- для выпуклых функций с Липшицевым градиентом

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

- для сильно выпуклых функций с Липшицевым градиентом

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

Эти оценки справедливы для таких методов, что

$$x_{k+1} = x_0 + \mathtt{span}(f'(x_0), \ldots, f'(x_k))$$

Оптимальные методы

Про методы, которые в той или иной степени достигают нижних оценок, будет рассказано на следующей лекции:

- метод сопряжённых градиентов
- метод тяжёлого шарика
- градиентный метод Нестерова

Резюме

- Общая схема работы методов оптимизации
- Скорости сходимости
- Градиентный спуск
- Свойства и сходимость
- Нижние оценки