§7 МЕТОД СПУСКА

Пусть $f\colon X \to \mathbb{R}$ — дифференцируемая выпуклая функция, а значит, для всех $x, y \in X$ выполнено неравенство $f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^\mathsf{T}(y - x)$. Для численного определения минимального значения функции f используют так называемый метод спуска, который заключается в построении последовательностей векторов $(x^k)_{k\in\mathbb{N}_0}$, $(\Delta x^k)_{k\in\mathbb{N}_0}$ и действительных чисел $(t_k)_{k\in\mathbb{N}_0}$, таких что $x^{k+1} = x^k + t^k \Delta x^k \in X$ и $f(x^{k+1}) \leq f(x^k)$, где $x^0 \in X$ — заданный начальный вектор.

Алгоритм 7.1. Общий метод спуска

Input: начальное приближение $x \in X$
Output: приближённое решение
while *не выполнен критерий останова* **do**
  определить направление спуска Δx
  выбрать размер шага t
  $x \leftarrow x + t\Delta x$
return x

На практике, элементы последовательности $(x^k)_{k\in\mathbb{N}_0}$ вычисляются до тех пор пока не будет выполнен критерий останова. Например, для заданного $\varepsilon > 0$, таким условием является выполнение одно из неравенств: $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \varepsilon$, $|f(x^{k+1}) - f(x^k)| < \varepsilon$, $\|\nabla f(x^k)\| \leq \varepsilon$.

Так как f — выпуклая функция, то из неравенства $\nabla f(x^k)^\mathsf{T}(y - x^k) > 0$ следует, что $f(y) > f(x^k)$. Таким образом, в методе спуска необходимо выполнение неравенства $\nabla f(x^k)^\mathsf{T} \Delta x^k \leq 0$. Будем говорить, что вектор Δx является направлением спуска в точке x, если $\nabla f(x)^\mathsf{T} \Delta x \leq 0$. Последовательность $(t^k)_{k\in\mathbb{N}_0}$ называется последовательностью размеров шагов. Метод спуска имеет множество вариаций, которые различаются способом вычисления направлений спуска $(\Delta x^k)_{k\in\mathbb{N}_0}$ и размеров шагов $(t_k)_{k\in\mathbb{N}_0}$.

Далее будем предполагать, что $X = \mathbb{R}^n$. Пусть Δx — направление спуска в точке x. Рассмотрим два способа определения размера шага t. Первый способ заключается в решении следующей задачи

$$t^* = \arg\min_{t\geq 0} f(x + t\Delta x)$$

и называется методом наискорейшего спуска (Exact Line Search, ELS). Второй

Алгоритм 7.2. Backtracking Line Search

Input: направление спуска Δx, $\alpha \in (0, 1/2)$, $\beta \in (0, 1)$
Output: размер шага t
$t \leftarrow 1$
while $f(x + t\Delta x) > f(x) + \alpha t \nabla f(x)^\mathsf{T} \Delta x$ **do**
  $t \leftarrow \beta t$
return t

способ называется Backtracking Line Search (BLS) и зависит от двух параметров $\alpha \in \left(0, \frac{1}{2}\right)$, $\beta \in (0,1)$. Начиная с $t = 1$, будем уменьшать t, умножением на β, до тех пор пока не будет выполнено неравенство $f(x + t\Delta x) \le f(x) + \alpha t \nabla f(x)^{\mathsf{T}} \Delta x$. Нетрудно показать, что если выполнено неравенство $\nabla f(x)^{\mathsf{T}} \Delta x < 0$, то искомое t будет найдено за конечное число итераций. Действительно,

$$f(x + t\Delta x) = f(x) + t\nabla f(x)^{\mathsf{T}} \Delta x + o(t) = f(x) + \alpha t \nabla f(x)^{\mathsf{T}} \Delta x + t h(t),$$

где $h(t) = \left(\frac{o(t)}{t} + (1-\alpha)\nabla f(x)^{\mathsf{T}} \Delta x\right)$. При достаточно малом $t > 0$ функция $h(t)$ принимает отрицательные значения.

Зафиксируем точку x и определим направление ℓ^*, $\|\ell^*\| = 1$, наибольшего убывания, т.е. $\ell^* = \arg\min\limits_{\ell \in \mathbb{S}^{n-1}} \frac{\partial f(x)}{\partial \ell}$, где $\mathbb{S}^{n-1} \overset{\mathrm{def}}{=} \{x \colon \|x\| = 1\}$ — сфера единичного радиуса с центром в начале координат. Так как $\frac{\partial f(x)}{\partial \ell} = \nabla f(x)^{\mathsf{T}} \ell \ge -\|\nabla f(x)\|$, то направление наибольшего убывания ℓ^* сонаправлено с $-\nabla f(x)$. Метод спуска, в котором $\Delta x = -\nabla f(x)$, называется методом градиентного спуска. Перед тем, как провести анализ сходимости метода градиентного спуска, докажем ряд вспомогательных утверждений [1].

Пусть A, $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ — квадратные матрицы порядка n с вещественными элементами. Если матрица $C = A - B$ является неотрицательно определённой, т.е. для любого $x \in \mathbb{R}^n$ выполнено неравенство $x^{\mathsf{T}} C x \ge 0$, то будем писать $A \succeq B$. Для векторов будем использовать евклидову норму, а для матриц — спектральную.

Лемма 7.1. *Пусть $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ и нашлось такое положительное число m, что $\nabla^2 f(x) \succeq mI$, $x \in \mathbb{R}^n$. Тогда для всех x, y справедливы неравенства*

$$f(y) \ge f(x) + \nabla f(x)^{\mathsf{T}}(y - x) + \frac{m}{2}\|y - x\|^2; \tag{7.1}$$

$$\min_{y \in \mathbb{R}^n} f(y) \ge f(x) - \frac{1}{2m}\|\nabla f(x)\|^2; \tag{7.2}$$

$$\|x - x^*\| \le \frac{2}{m}\|\nabla f(x)\|, \quad \textit{где} \quad x^* = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x). \tag{7.3}$$

$\triangleright$ Согласно формуле Тейлора существует такая точка z, принадлежащая отрезку $[x, y]$, что $f(y) = f(x) + \nabla f(x)^{\mathsf{T}}(y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(z)(y - x)$.

Так как $\nabla^2 f(z) - mI$ — неотрицательно определённая матрица, то

$$(y - x)^{\mathsf{T}} \big(\nabla^2 f(z) - mI\big)(y - x) \ge 0,$$

т.е. $(y - x)^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(z)(y - x) \ge m\|y - x\|^2$, а значит, имеет место неравенство (7.1).

При фиксированном x функция $g(y) = f(x) + \nabla f(x)^{\mathsf{T}}(y-x) + \dfrac{m}{2}\|y-x\|^2$ является строго выпуклой. Нетрудно видеть, что $\widetilde{y} = x - \dfrac{1}{m}\nabla f(x)$ — стационарная точка функции g, а значит, в этой точке функция g принимает минимальное значение. Другими словами, $g(y) \geq g(\widetilde{y}) = f(x) - \dfrac{1}{2m}\|\nabla^2 f(x)\|$, $y \in X$. То, что $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$ существует и достигается в единственной точке $x^* \in \mathbb{R}^n$ следует из неравенства (7.1) и строгой выпуклости функции f. Так как $f(y) \geq g(y)$, то выполнено неравенство (7.2).

В силу (7.2) имеем

$$0 \geq f(x^*) - f(x) \geq \nabla f(x)^{\mathsf{T}}(x^*-x) + \frac{m}{2}\|x^*-x\|^2 \geq$$
$$\geq -\|\nabla f(x)\|\|x^*-x\| + \frac{m}{2}\|x^*-x\|^2.$$

Из последнего, в частности, следует неравенство (7.3). $\triangleleft$

Лемма 7.2. *Пусть $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ и нашлось такое положительное число M, что $\nabla^2 f(x) \preceq MI$. Тогда для всех x, $y \in \mathbb{R}^n$ справедливы неравенства:*

$$f(y) \leq f(x) + \nabla f(x)^{\mathsf{T}}(y-x) + \frac{M}{2}\|y-x\|^2, \tag{7.4}$$
$$\inf_{y\in X} f(y) \leq f(x) - \frac{1}{2M}\|\nabla f(x)\|^2.$$

$\triangleright$ Доказательство аналогично доказательству леммы 7.1. $\triangleleft$

Наконец, перейдём к анализу сходимости метода градиентного спуска.

Теорема 7.1. *Пусть $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ и существуют такие положительные числа m, $M > 0$, что $mI \preceq \nabla^2 f(x) \preceq MI$, $x \in \mathbb{R}^n$. Обозначим $x^* = \arg\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$, а через $(x^k)_{k\in\mathbb{N}_0}$ — последовательность, построенную методом градиентного спуска. Тогда $f(x^k) - f(x^*) \leq c^k\big(f(x^0) - f(x^*)\big)$, где $c = 1 - m/M$, если последовательность $(t^k)_{k\in\mathbb{N}_0}$ строится согласно процедуре ELS, и $c = 1 - 2\alpha m\min(1, \beta/M)$, если последовательность $(t^k)_{k\in\mathbb{N}_0}$ строится согласно процедуре BLS.*

$\triangleright$ Зафиксируем точку x и пусть $g(t) = f\big(x - t\nabla f(x)\big)$. Из неравенства (7.4) следует, что $g(t) \leq f(x) + \left(\dfrac{Mt^2}{2} - t\right)\|\nabla f(x)\|^2$. Пусть t_E — размер шага, полученный согласно ELS. Тогда

$$g(t_E) \leq g\left(\frac{1}{M}\right) \leq f(x) - \frac{1}{2M}\|\nabla f(x)\|^2$$

(мы сравниваем со значением функции g в точке M^{-1}, так как функция $Mt^2/2 - t$ принимает там минимальное значение). Из (7.2) следует, что

$$\|\nabla f(x)\|^2 \geq 2m\big(f(x) - f(x^*)\big).$$

Таким образом, $f\big(x - t_E\nabla f(x)\big) - f(x^*) \le (1 - m/M)\big(f(x) - f(x^*)\big)$.

Пусть t_B — размер шага, который полученный согласно процедуре BLS. Покажем, что $t_B = 1$ или $t_B \ge \beta/M$. Действительно, при $0 \le t \le M^{-1}$ справедлива цепочка неравенств

$$g(t) \le f(x) - t\|\nabla f(x)\|^2 + \frac{Mt^2}{2}\|\nabla f(x)\|^2 \le f(x) - \frac{t}{2}\|\nabla f(x)\|^2 \le f(x) - \alpha t\|\nabla f(x)\|^2.$$

Если $t_B = 1$, то $f\big(x - t_B\nabla f(x)\big) \le f(x) - \alpha\|\nabla f(x)\|^2$, а если $t_B \ge \beta/M$, то верно $f\big(x - t_B\nabla f(x)\big) \le f(x) - \dfrac{\alpha\beta}{M}\|\nabla f(x)\|^2$. Таким образом,

$$f\big(x - t_B\nabla f(x)\big) - f(x^*) \le f(x) - f(x^*) - \alpha\min\left(1, \frac{\beta}{M}\right)\|\nabla f(x)\|^2.$$

А значит, в силу неравенства (7.2) имеем

$$f\big(x - t_B\nabla f(x)\big) \le \big(1 - 2\alpha m\min(1, \beta/M)\big)\big(f(x) - f(x^*)\big). \quad \triangleleft$$

Предположение о том, что $\nabla^2 f(x) \succeq mI$, $x \in \mathbb{R}^n$, является достаточно сильным. Оказывается, что сходимость имеет место и без этого предположения. Мы не будем приводить формулировку и доказательство этого результата, так как он будет следовать из анализа, проведённого в §**??** при обсуждении метода проекций градиента.

В зависимости от максимального порядка смешанных производных целевой функции f, которые участвуют в методе оптимизации, различают прямые методы поиска (или метод нулевого порядка), методы первого порядка, методы второго порядка и т.д. В прямых методах поиска используется информация только о самой функции и не используется информация о её производных. Как правило, такие методы применяются, когда аналитическое представление функции f не известно. Методы первого порядка при поиске решения используют информацию как о самой функции, так и о её производных первого порядка. Рассмотренный метод градиентного спуска является методом первого порядка. Далее будет рассмотрен метод Ньютона, который является методом второго порядка, так как в этом методе используются информация о самой функции и о её производных первого и второго порядков.

Пусть $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ — выпуклая функция, гессиан $\nabla^2 f(x)$ которой обратим в каждой точке $x \in \mathbb{R}^n$. Из последнего, в частности, следует, что $\nabla^2 f(x)$ — положительно определённая матрица для любого $x \in \mathbb{R}^n$. Выпишем формулу Тейлора второго порядка для функции f в окрестности некоторой фиксированной точки x :

$$f(x+v) = f(x) + \nabla f(x)^{\mathsf{T}} v + \frac{1}{2}v^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)v + o(\|v\|^2).$$

Функция $h(v) = f(x) + \nabla f(x)^{\mathsf{T}} v + \dfrac{1}{2}v^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)v$ принимает минимальное значение в точке $v^* = -\nabla^2 f(x)^{-1}\nabla f(x)$. Направление $\Delta x = v^*$ называется шагом Ньютона.

Минимальное значение функции h равно

$$h(\Delta x) = f(x) - \frac{1}{2}\nabla f(x)^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)^{-1}\nabla f(x) = f(x) - \frac{1}{2}\lambda(x)^2 \approx f(x+\Delta x),$$

где $\lambda(x) \overset{\text{def}}{=} \left(\nabla f(x)^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)^{-1}\nabla f(x)\right)^{\frac{1}{2}}$. Непосредственно проверяется, что

$$\lambda(x)^2 = -\nabla f(x)^{\mathsf{T}}\Delta x = \Delta x^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)\Delta x.$$

Метод спуска, в котором направление спуска равно шагу Ньютона, называется

Алгоритм 7.3. Метод Ньютона

Input: начальное приближение $x \in \mathbb{R}^n$, $\varepsilon > 0$

Output: приближённое решение

```
repeat
    Δx ← −∇²f(x)⁻¹∇f(x)
    λ(x)² ← ∇f(x)ᵀ∇²f(x)⁻¹∇f(x)
    Определить размер шага t согласно BLS
    x ← x + tΔx
until λ(x)²/2 > ε
return x
```

методом Ньютона. Для определённости будем считать, что размер шага $t = t_B$ в этом методе выбирается согласно BLS.

Для анализа метода Ньютона докажем вспомогательные леммы.

Лемма 7.3. *Если для выпуклой функции $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ существуют такие числа m, $M > 0$, что $mI \preceq \nabla^2 f(x) \preceq MI$, то $f(x+t_B\Delta x) - f(x) \le -\dfrac{\alpha\beta m}{M^2}\|\nabla f(x)\|^2$.*

$\triangleright$ Согласно условию леммы справедливы неравенства

$$\lambda(x)^2 = \Delta x^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)\Delta x \ge m\|\Delta x\|^2,$$
$$\lambda(x)^2 = \nabla f(x)^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x)^{-1}\nabla f(x) \ge \frac{\|\nabla f(x)\|^2}{M}.$$

Из неравенства (7.4) следует, что $f(x+t\Delta x) \le f(x) - t\lambda(x)^2 + \dfrac{M}{2m}t^2\lambda(x)^2$. Полагая в последнем неравенстве $t = m/M$, получаем, что

$$f(x+t\Delta x) \le f(x) - \frac{m}{2M}\lambda(x)^2 \le f(x) - \alpha t\lambda(x)^2.$$

Следовательно, $t_B \ge \beta m/M$. Таким образом,

$$f(x+t_B\Delta x) - f(x) \le -\alpha t_B\lambda(x)^2 \le -\alpha\beta\frac{m}{M}\lambda(x)^2 \le -\frac{\alpha\beta m}{M^2}\|\nabla f(x)\|^2. \quad \triangleleft$$

Лемма 7.4. *Пусть для функции* $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ *и чисел* m, M, $L > 0$ *верно, что*

$$mI \preceq \nabla^2 f(x) \preceq MI \quad \text{и} \quad \|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq L\|x-y\|, \quad x, y \in \mathbb{R}^n.$$

Тогда $\|\nabla f(x+\Delta x)\| \leq \dfrac{L}{2m^2}\|\nabla f(x)\|^2$ *и если* $\|\nabla f(x)\| \leq 3(1-2\alpha)\dfrac{m^2}{L}$, *то* $t_B = 1$.

▷ Докажем первую часть утверждения леммы.

$$\|\nabla f(x+\Delta x)\| = \|\nabla f(x+\Delta x) - \nabla f(x) - \nabla^2 f(x)\Delta x\| =$$
$$= \|\int_0^1 \big(\nabla^2 f(x+t\Delta x) - \nabla^2 f(x)\big)\Delta x \,\mathrm{d}t\| \leq \frac{L}{2}\|\Delta x\|^2 =$$
$$= \frac{L}{2}\|\nabla^2 f(x)^{-1}\nabla f(x)\|^2 \leq \frac{L}{2m^2}\|\nabla f(x)\|^2.$$

Пусть $g(t) \stackrel{\text{def}}{=} f(x+t\Delta x)$, тогда получаем $g''(t) = \Delta x^{\mathsf{T}}\nabla^2 f(x+t\Delta x)\Delta x$. В силу условия леммы справедливы неравенства:

$$|g''(t) - g''(0)| = |\Delta x^{\mathsf{T}}\big(\nabla^2 f(x+t\Delta x) - \nabla^2 f(x)\big)\Delta x| \leq tL\|\Delta x\|^3$$

и $g''(0) = \lambda(x)^2 \geq m\|\Delta x\|^2$. Тогда $g''(t) \leq g''(0) + tL\|\Delta x\|^3 \leq \lambda(x)^2 + \dfrac{tL}{m^{3/2}}\lambda(x)^3$. Проинтегрировав дважды последнюю цепочку неравенств, учитывая равенство $g'(0) = -\lambda(x)^2$, и положив $t = 1$, получаем $f(x+\Delta x) \leq f(x) - \dfrac{1}{2}\lambda(x)^2 + \dfrac{L}{6m^{3/2}}\lambda(x)^3$. Так как $\|\nabla f(x)\| \leq 3(1-2\alpha)\dfrac{m^2}{L}$, то $\lambda(x) \leq 3(1-2\alpha)\dfrac{m^{3/2}}{L}$. Следовательно,

$$f(x+\Delta x) \leq f(x) - \lambda(x)^2\left(\frac{1}{2} - \frac{L\lambda(x)}{6m^{3/2}}\right) \leq f(x) - \alpha\lambda(x)^2 = f(x) + \alpha\nabla f(x)^{\mathsf{T}}\Delta x.$$

Таким образом, $t_B = 1$. ◁

Теорема 7.2. *Пусть для функции* $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ *и чисел* m, M, $L > 0$ *верно, что* $mI \preceq \nabla^2 f(x) \preceq MI$ *и* $\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq L\|x-y\|$, $x, y \in \mathbb{R}^n$. *Обозначим* $x^* = \arg\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$, *а через* $(x^k)_{k\in\mathbb{N}_0}$ *— последовательность, построенную методом Ньютона. Тогда для любого* $\varepsilon > 0$ *верно неравенство* $f(x^k) - f(x^*) < \varepsilon$ *при*

$$k \geq N_\varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} \frac{f(x^0) - f(x^*)}{\gamma} + \log_2\log_2\left(\frac{m^3}{L^2\varepsilon}\right), \quad \text{где} \quad \gamma = \gamma(m, M, L).$$

▷ Пусть $\eta \stackrel{\text{def}}{=} \min\big(1, 3(1-2\alpha)\big)\dfrac{m^2}{L}$. Если $\|\nabla f(x)\| \leq \eta$, то из леммы 7.4, в частности, следует, что $\|\nabla f(x+\Delta x)\| \leq \dfrac{\eta}{2}$. Действительно, так как $\dfrac{L}{m^2} \leq \eta^{-1}$, то

$\|\nabla f(x+\Delta x)\| \leq \dfrac{L}{2m^2}\|\nabla f(x)\|^2 \leq \dfrac{\eta}{2}$. Через s обозначим наименьшее натуральное число, такое что $\|\nabla f(x^s)\| \leq \eta$. Из леммы 7.3 следует, что $s \leq \dfrac{f(x^0)-f(x^*)}{\gamma}$, где $\gamma \overset{\text{def}}{=} \alpha\beta\eta^2\dfrac{m}{M^2}$. Тогда при $k > s$ справедливо неравенство $\|\nabla f(x^k)\| < \eta$, а значит,

$$\frac{L}{2m^2}\|\nabla f(x^k)\| \leq \left(\frac{L}{2m^2}\|\nabla f(x^{k-1})\|\right)^2 \leq \left(\frac{L}{2m^2}\|\nabla f(x^s)\|\right)^{2^{k-s}} \leq \left(\frac{1}{2}\right)^{2^{k-s}}.$$

Из неравенства (7.2) следует, что $f(x^k)-f(x^*) \leq \dfrac{1}{2m}\|\nabla f(x^k)\| \leq \dfrac{m^3}{L^2}2^{-2^{k-s}} < \varepsilon$. $\lhd$

Упражнения

19. (Метод сопряжённых направлений) Пусть A — положительно определённая матрица и $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x + c$. Векторы (направления) p и q назовём A-сопряжёнными, если $p^\top Aq = 0$. Для данного начального приближения x^0 и последовательности ненулевых сопряжённых направлений $(p^k)_{k=0}^{n-1}$ определим последовательность точек $(x^k)_{k=1}^{n}$ равенством $x^{k+1} = x^k + t^k p^k$, где $t^k = \arg\min\limits_{t\in\mathbb{R}} f(x^k + tp^k)$. Докажите, что
    (a) $t^k = -\big(p^k, \nabla f(x^k)\big)/\big(p^k, Ap^k\big)$;
    (b) вектор $\nabla f(x^{k+1})$ ортогонален направлениям p^0, p^1, ..., p^k;
    (c) $\nabla f(x^n) = 0$, а значит, x^n — минимум функции $f(x)$;
    (d) последовательность направлений $(p^k)_{k=0}^{n-1}$ может быть определена как

$$\begin{cases} p^0 = -\nabla f(x^0), \\ p^k = -\nabla f(x^k) + \dfrac{\|\nabla f(x^k)\|^2}{\|\nabla f(x^{k-1})\|^2}p^{k-1}, \quad 1 \leq k < n. \end{cases}$$

Указание: Пусть $L_k \overset{\text{def}}{=} \mathrm{Span}(p^0, Ap^0, \ldots, A^k p^0)$. Индукцией по k докажите, что p^k и $\nabla f(x^k) \in L^k$, при этом Ap^k и $\nabla f(x^k) \in L_{k-1}^{\perp}$.

Литература

1. Boyd S., Vandenberghe L. *Convex Optimization* – Cambridge University Press, 2004. – 730 с.