Градиентный спуск

Мальковский Н. В.

Санкт-Петербургский академический университет

Общая идея градиентного спуска

$$\text{минимизировать} \quad f(x), \; x \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n. \tag{1}$$

Условия стационарности: если $x^* \in \operatorname{Int} \mathcal{D}$ – точка минимума f на $\mathcal{D}$, f дифференцируема в x^*, то

$$\nabla f(x^*) = 0_n.$$

Общая идея градиентного спуска

$$\text{минимизировать} \quad f(x),\ x \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n. \tag{1}$$

Условия стационарности: если $x^* \in \operatorname{Int}\mathcal{D}$ – точка минимума f на $\mathcal{D}$, f дифференцируема в x^*, то

$$\nabla f(x^*) = 0_n.$$

Пусть $x_0 \in \operatorname{Int}\mathcal{D}$. Можно ли понять, где находится точка минимума по $\nabla f(x_0)$?

Общая идея градиентного спуска

$$\text{минимизировать} \quad f(x),\ x \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n. \tag{1}$$

Условия стационарности: если $x^* \in \operatorname{Int}\mathcal{D}$ – точка минимума f на $\mathcal{D}$, f дифференцируема в x^*, то

$$\nabla f(x^*) = 0_n.$$

Пусть $x_0 \in \operatorname{Int}\mathcal{D}$. Можно ли понять, где находится точка минимума по $\nabla f(x_0)$?

Если немного сдвинуться из x_0 в направлении h, то получаем

$$f(x_0 + th) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T h + o(t).$$

Таким образом, локально выгоднее всего двигаться в направлении $h = -\nabla f(x_0)$.

Общая идея градиентного спуска

Оказывается, при некоторых предположениях на f и $0 < \alpha_k \in \mathbb{R}$ последовательность

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \tag{2}$$

сходится к точке минимума f.

Общая идея градиентного спуска

Оказывается, при некоторых предположениях на f и $0 < \alpha_k \in \mathbb{R}$ последовательность

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \tag{2}$$

сходится к точке минимума f.

Генерирование последовательности x_k по правилу (2) принято называть *градиентным спуском*. Величину α_k принято называть *размером шага* на k-ой итерации.

Общая идея градиентного спуска

Оказывается, при некоторых предположениях на f и $0 < \alpha_k \in \mathbb{R}$ последовательность

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \tag{2}$$

сходится к точке минимума f.
Генерирование последовательности x_k по правилу (2) принято называть *градиентным спуском*. Величину α_k принято называть *размером шага* на k-ой итерации.

В многих случаях легче измерить ∇f в нескольких точках, чтобы получить приближенное значение точки минимума нежели решать систему уравнений $\nabla f(x) = 0_n$.

Основные способы выбора шага

Наиболее распространенными способами выбора последовательности α_k в градиентном спуске являются следующие три:

- Постоянный шаг, $\alpha = \alpha_0 = \alpha_1 = \ldots = \alpha_k = \ldots$. При аккуратном выборе дает экспоненциальную скорость сходимости для сильно выпуклых функций.
- Последовательность, удовлетворяющая

$$\sum_{i=1} \alpha_k = \infty \tag{3a}$$

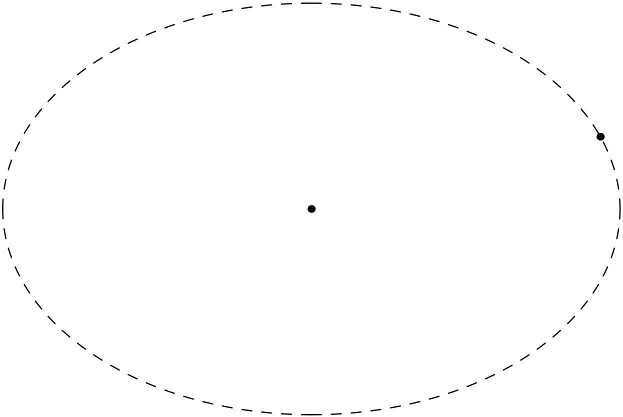
$$\sum_{i=1} \alpha_k^2 < \infty. \tag{3b}$$

  Такая последовательность всегда гарантирует сходимость к точке минимума для выпуклых функций. Проще всего брать $\alpha_k = \frac{c}{k}$.
- Минимум по направлению: α_k выбирается как

$$\alpha_k = \operatorname{argmin}_\alpha f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)).$$

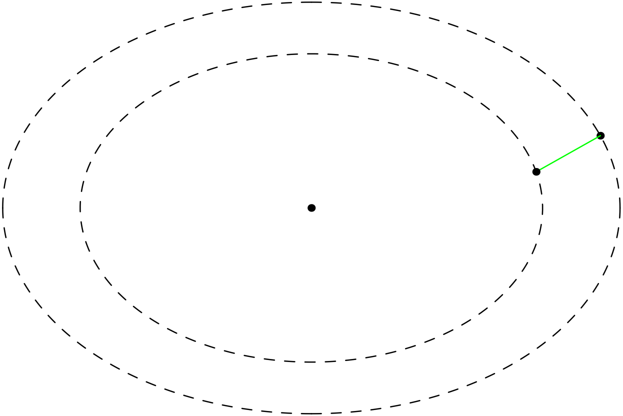
  Обычно используется, если соответствующий минимум можно найти аналитически.

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



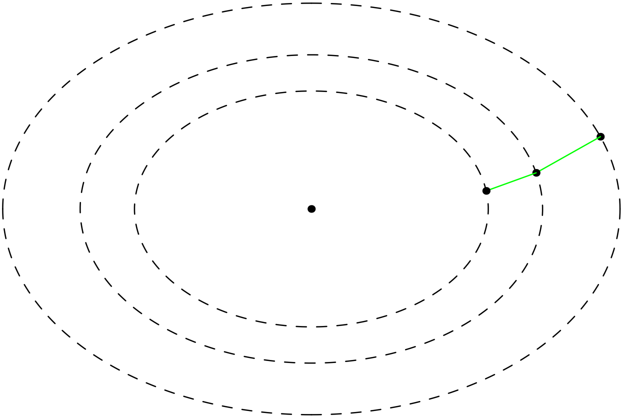
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_0 = 4.000000$$
$$y_0 = 1.000000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.888889,$$
$$0.500000)$$
$$\alpha_0 = 1$$
$$\sqrt{x_0^2 + y_0^2} = 4.123106$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



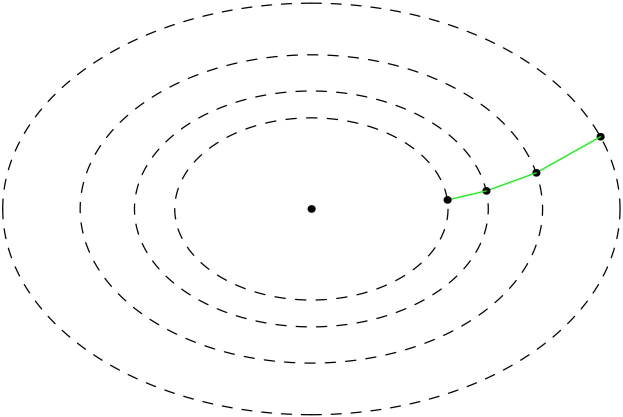
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_1 = 3.111111$$
$$y_1 = 0.500000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.691358,$$
$$0.250000)$$
$$\alpha_1 = 1$$
$$\sqrt{x_1^2 + y_1^2} = 3.151034$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



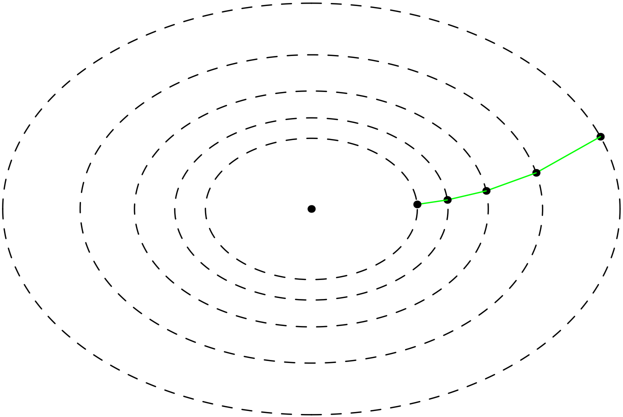
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_2 = 2.419753$$
$$y_2 = 0.250000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.537723,$$
$$0.125000)$$
$$\alpha_2 = 1$$
$$\sqrt{x_2^2 + y_2^2} = 2.432633$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



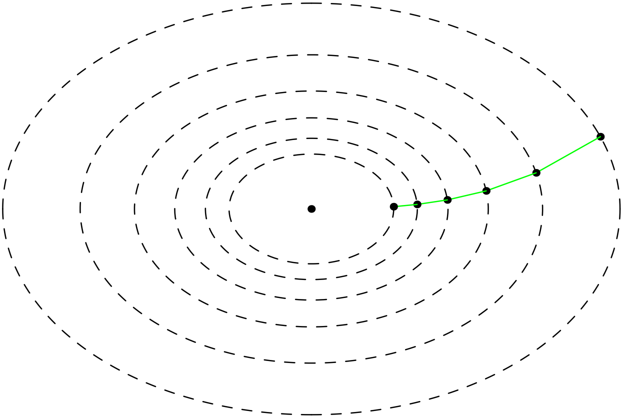
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_3 = 1.882030$$
$$y_3 = 0.125000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.418229,$$
$$0.062500)$$
$$\alpha_3 = 1$$
$$\sqrt{x_3^2 + y_3^2} = 1.886177$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



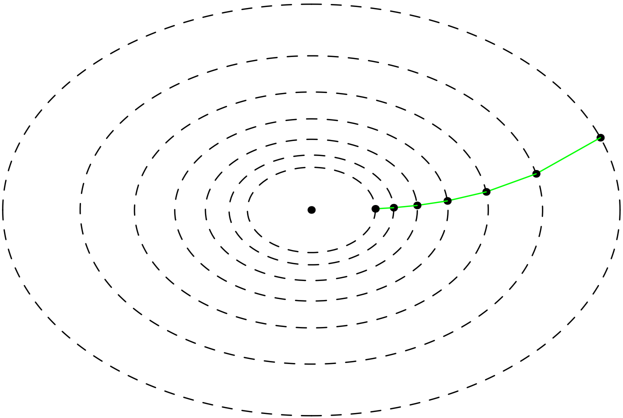
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_4 = 1.463801$$
$$y_4 = 0.062500$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.325289,\ 0.031250)$$
$$\alpha_4 = 1$$
$$\sqrt{x_4^2 + y_4^2} = 1.465135$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



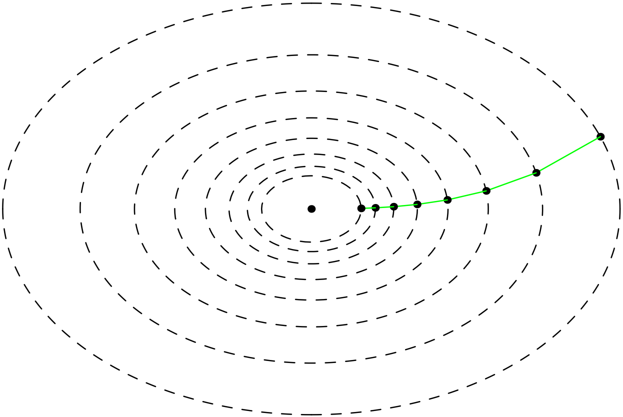
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_5 = 1.138512$$
$$y_5 = 0.031250$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.253003,$$
$$0.015625)$$
$$\alpha_5 = 1$$
$$\sqrt{x_5^2 + y_5^2} = 1.138941$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



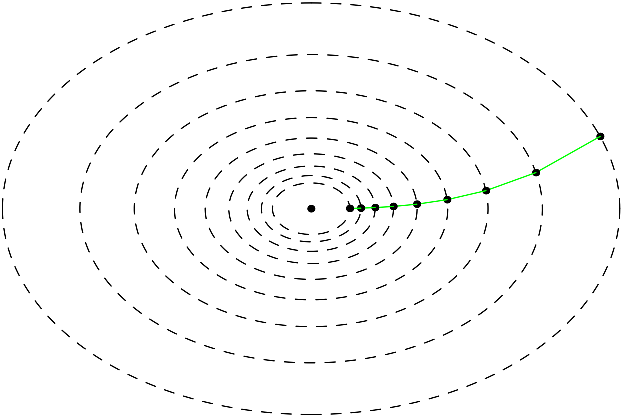
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_6 = 0.885509$$
$$y_6 = 0.015625$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.196780,$$
$$0.007813)$$
$$\alpha_6 = 1$$
$$\sqrt{x_6^2 + y_6^2} = 0.885647$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



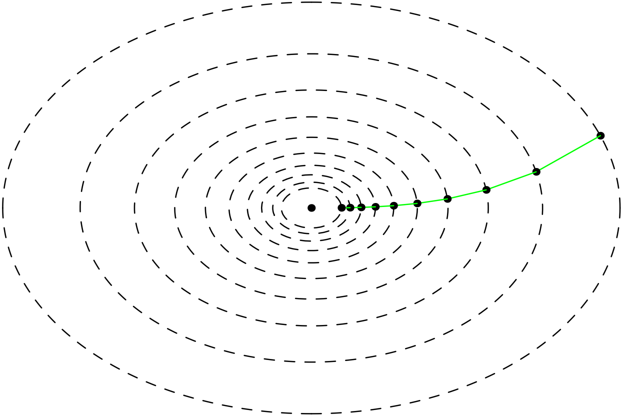
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_7 = 0.688730$$
$$y_7 = 0.007813$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.153051,$$
$$0.003906)$$
$$\alpha_7 = 1$$
$$\sqrt{x_7^2 + y_7^2} = 0.688774$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



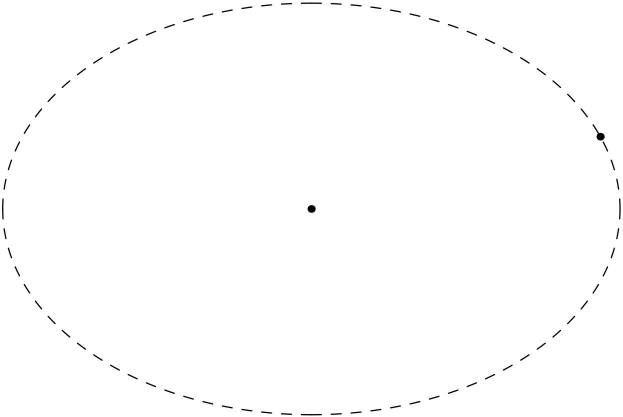
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_8 = 0.535679$$
$$y_8 = 0.003906$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.119040, 0.001953)$$
$$\alpha_8 = 1$$
$$\sqrt{x_8^2 + y_8^2} = 0.535693$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



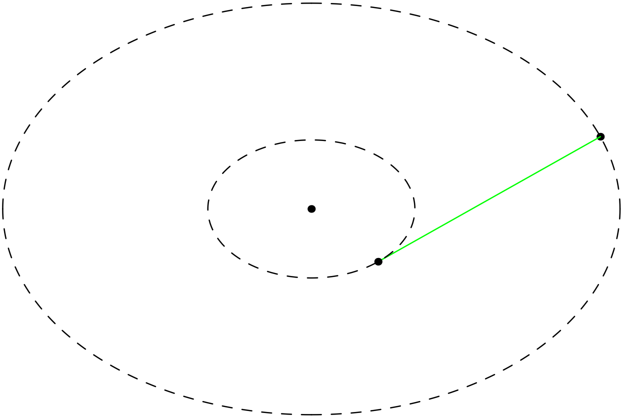
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_9 = 0.416639$$
$$y_9 = 0.001953$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.092586, 0.000977)$$
$$\alpha_9 = 1$$
$$\sqrt{x_9^2 + y_9^2} = 0.416643$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



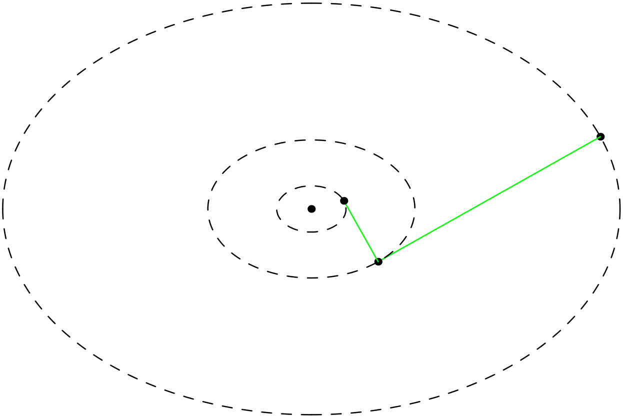
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_0 = 4.000000$$
$$y_0 = 1.000000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.888889, 0.500000)$$
$$\alpha_0 = 3.460354$$
$$\sqrt{x_0^2 + y_0^2} = 4.123106$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



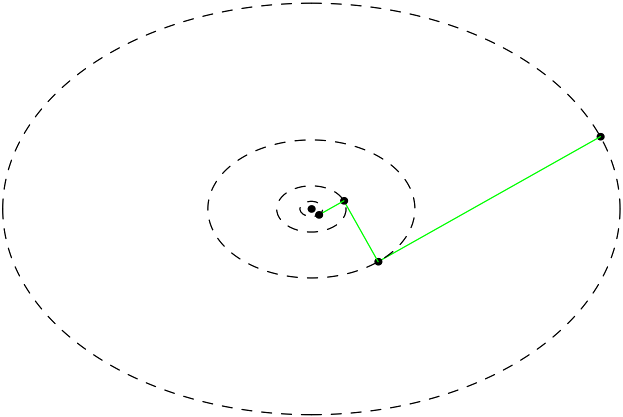
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_1 = 0.924130$$
$$y_1 = -0.730177$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.205362, -0.365088)$$
$$\alpha_1 = 2.308219$$
$$\sqrt{x_1^2 + y_1^2} = 1.177784$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



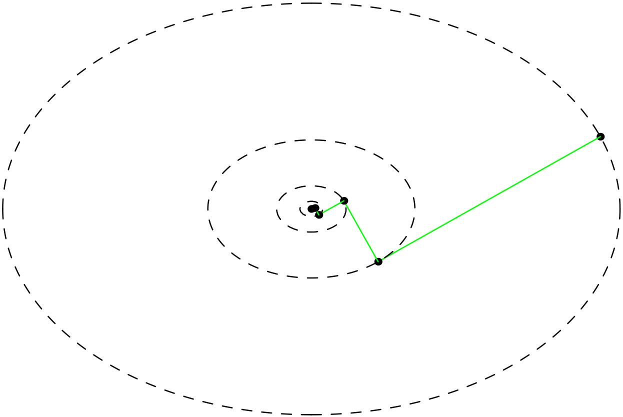
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_2 = 0.450109$$
$$y_2 = 0.112527$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.100024,$$
$$0.056264)$$
$$\alpha_2 = 3.460354$$
$$\sqrt{x_2^2 + y_2^2} = 0.463962$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_3 = 0.103990$$
$$y_3 = -0.082165$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.023109,$$
$$-0.041082)$$
$$\alpha_3 = 2.308219$$
$$\sqrt{x_3^2 + y_3^2} = 0.132533$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$

$$x_4 = 0.050650$$

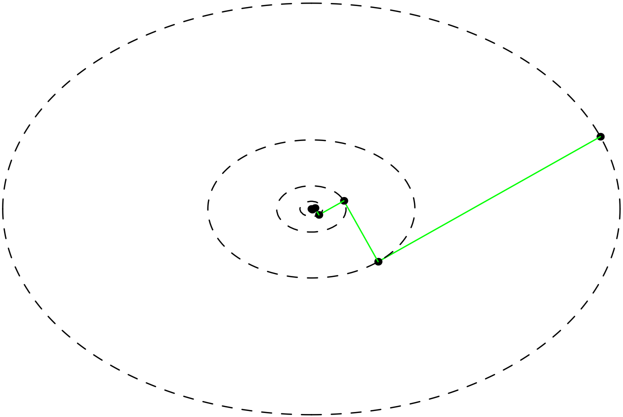
$$y_4 = 0.012662$$

$$\nabla f(\cdot) = (0.011255, \\ 0.006331)$$

$$\alpha_4 = 3.460354$$

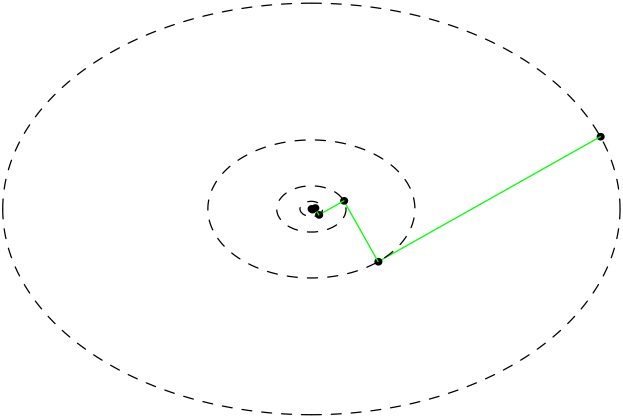
$$\sqrt{x_4^2 + y_4^2} = 0.052208$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



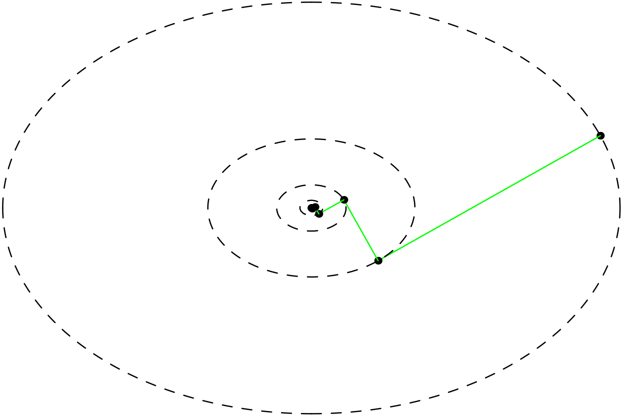
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_5 = 0.011702$$
$$y_5 = -0.009246$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.002600, -0.004623)$$
$$\alpha_5 = 2.308219$$
$$\sqrt{x_5^2 + y_5^2} = 0.014914$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



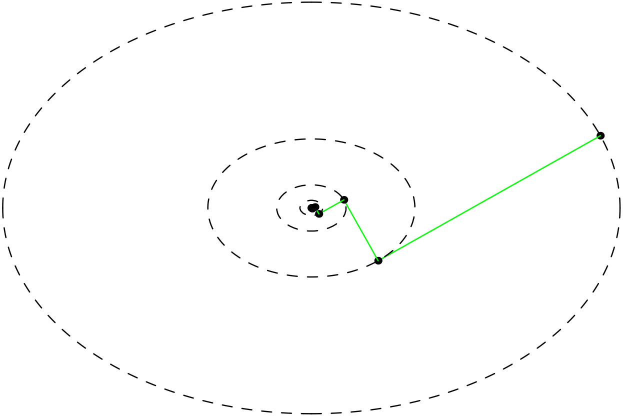
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_6 = 0.005699$$
$$y_6 = 0.001425$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.001267,$$
$$0.000712)$$
$$\alpha_6 = 3.460354$$
$$\sqrt{x_6^2 + y_6^2} = 0.005875$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_7 = 0.001317$$
$$y_7 = -0.001040$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.000293,$$
$$-0.000520)$$
$$\alpha_7 = 2.308219$$
$$\sqrt{x_7^2 + y_7^2} = 0.001678$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$

$$x_8 = 0.000641$$

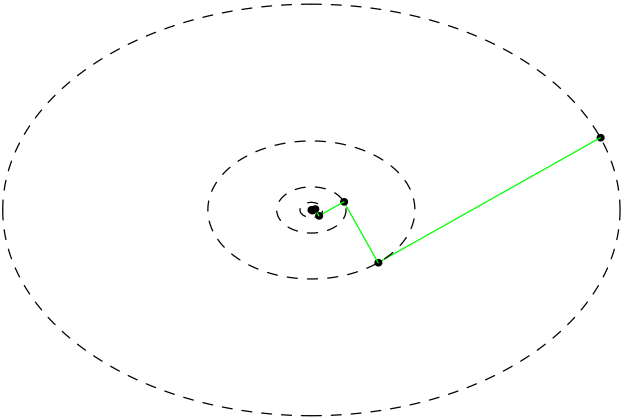
$$y_8 = 0.000160$$

$$\nabla f(\cdot) = (0.000143, \\ 0.000080)$$

$$\alpha_8 = 3.460354$$

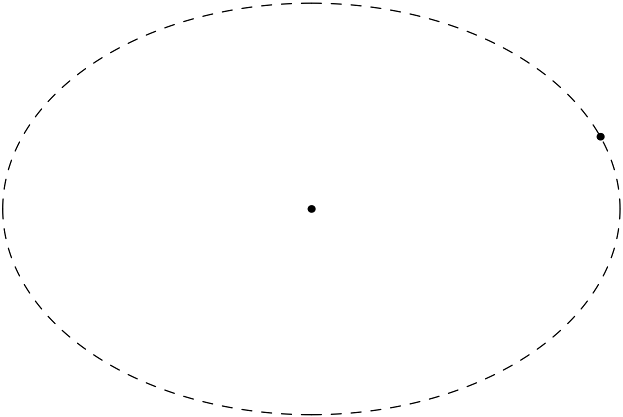
$$\sqrt{x_8^2 + y_8^2} = 0.000661$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



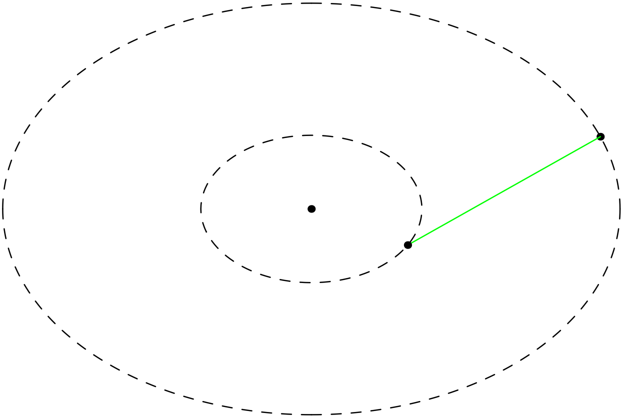
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_9 = 0.000148$$
$$y_9 = -0.000117$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.000033,$$
$$-0.000059)$$
$$\alpha_9 = 2.308219$$
$$\sqrt{x_9^2 + y_9^2} = 0.000189$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



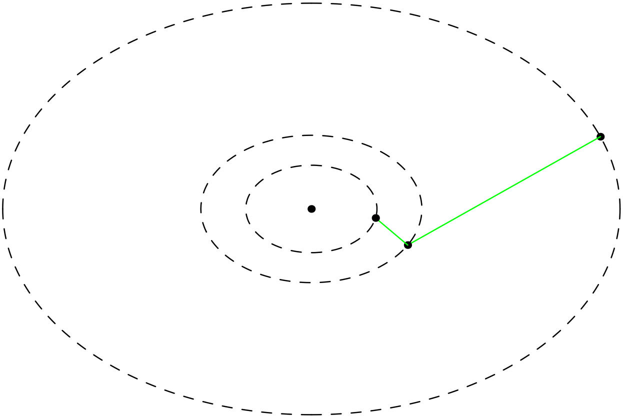
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_0 = 4.000000$$
$$y_0 = 1.000000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.888889, 0.500000)$$
$$\alpha_0 = 3/1$$
$$\sqrt{x_0^2 + y_0^2} = 4.123106$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



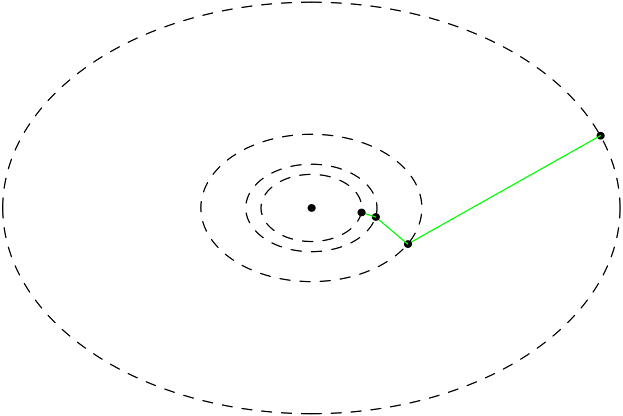
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_1 = 1.333333$$
$$y_1 = -0.500000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.296296,$$
$$-0.250000)$$
$$\alpha_1 = 3/2$$
$$\sqrt{x_1^2 + y_1^2} = 1.424001$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



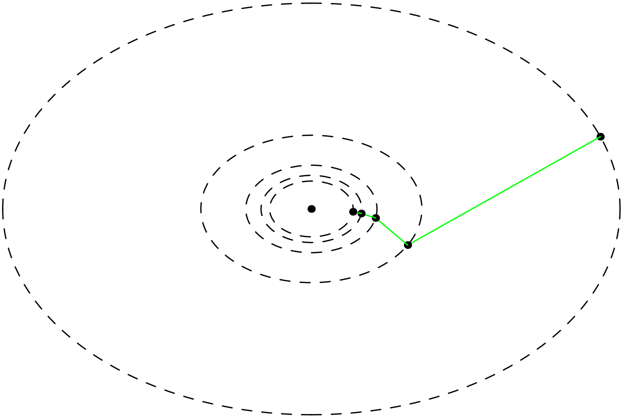
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_2 = 0.888889$$
$$y_2 = -0.125000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.197531,$$
$$-0.062500)$$
$$\alpha_2 = 3/3$$
$$\sqrt{x_2^2 + y_2^2} = 0.897635$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



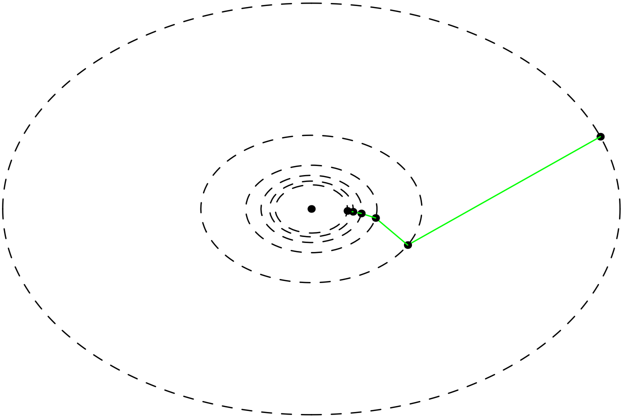
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_3 = 0.691358$$
$$y_3 = -0.062500$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.153635, -0.031250)$$
$$\alpha_3 = 3/4$$
$$\sqrt{x_3^2 + y_3^2} = 0.694177$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



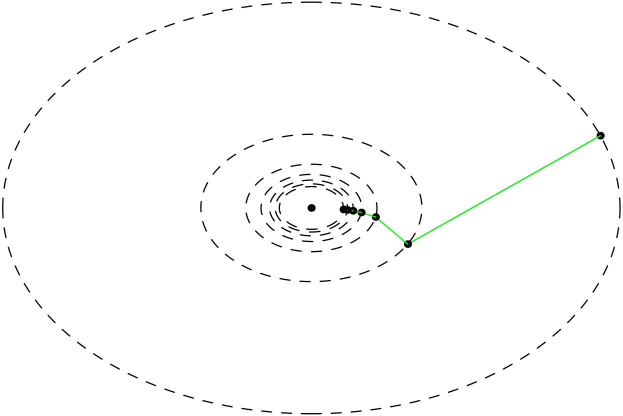
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_4 = 0.576132$$
$$y_4 = -0.039063$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.128029,$$
$$-0.019531)$$
$$\alpha_4 = 3/5$$
$$\sqrt{x_4^2 + y_4^2} = 0.577454$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



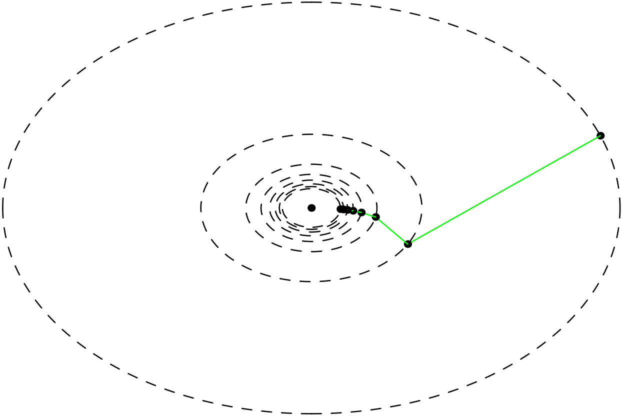
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_5 = 0.499314$$
$$y_5 = -0.027344$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.110959,$$
$$-0.013672)$$
$$\alpha_5 = 3/6$$
$$\sqrt{x_5^2 + y_5^2} = 0.500062$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



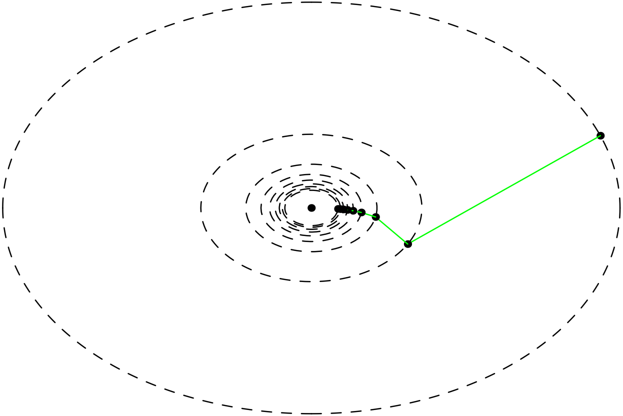
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_6 = 0.443835$$
$$y_6 = -0.020508$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.098630, -0.010254)$$
$$\alpha_6 = 3/7$$
$$\sqrt{x_6^2 + y_6^2} = 0.444308$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



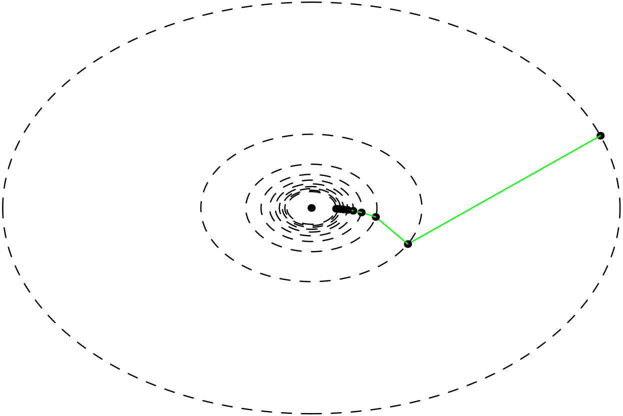
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_7 = 0.401565$$
$$y_7 = -0.016113$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.089237, -0.008057)$$
$$\alpha_7 = 3/8$$
$$\sqrt{x_7^2 + y_7^2} = 0.401888$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_8 = 0.368101$$
$$y_8 = -0.013092$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.081800, -0.006546)$$
$$\alpha_8 = 3/9$$
$$\sqrt{x_8^2 + y_8^2} = 0.368334$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_9 = 0.340834$$
$$y_9 = -0.010910$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.075741,$$
$$-0.005455)$$
$$\alpha_9 = 3/10$$
$$\sqrt{x_9^2 + y_9^2} = 0.341009$$

Предположения о минимизируемой функции

В дальнейшем анализе предполагать, что $f : \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ выпукла и дифференцируема на $\mathcal{D}$. Обозначим

$$S_f(x) = \{y \in \mathcal{D} \mid f(y) \leq f(x)\}.$$

Также будут использоваться некоторые из следующих предположений:

Предположения о минимизируемой функции

В дальнейшем анализе предполагать, что $f : \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ выпукла и дифференцируема на $\mathcal{D}$. Обозначим

$$S_f(x) = \{y \in \mathcal{D} \mid f(y) \leq f(x)\}.$$

Также будут использоваться некоторые из следующих предположений:

- Градиент f липшицев с константой M, т.е.

$$||\nabla f(x) - \nabla f(y)|| \leq M||x - y|| \; \forall x, y \in S_f(x_0).$$

Предположения о минимизируемой функции

В дальнейшем анализе предполагать, что $f : \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ выпукла и дифференцируема на $\mathcal{D}$. Обозначим

$$S_f(x) = \{y \in \mathcal{D} \mid f(y) \le f(x)\}.$$

Также будут использоваться некоторые из следующих предположений:

- Градиент f липшицев с константой M, т.е.

$$||\nabla f(x) - \nabla f(y)|| \le M||x - y|| \ \forall x, y \in S_f(x_0).$$

- f – сильно выпуклая функция с параметром m на $S_f(x_0)$, т.е. $\forall x, y \in S_f(x_0)$

$$(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T(y - x) \ge m||y - x||^2$$

  или

$$f(y) \ge f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{m}{2}||y - x||^2.$$

Предположения о минимизируемой функции

В дальнейшем анализе предполагать, что $f : \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ выпукла и дифференцируема на $\mathcal{D}$. Обозначим

$$S_f(x) = \{y \in \mathcal{D} \mid f(y) \leq f(x)\}.$$

Также будут использоваться некоторые из следующих предположений:

- Градиент f липшицев с константой M, т.е.

$$||\nabla f(x) - \nabla f(y)|| \leq M||x - y|| \ \forall x, y \in S_f(x_0).$$

- f – сильно выпуклая функция с параметром m на $S_f(x_0)$, т.е. $\forall x, y \in S_f(x_0)$

$$(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T(y - x) \geq m||y - x||^2$$

  или

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

Предположения о минимизируемой функции

В дальнейшем анализе предполагать, что $f : \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ выпукла и дифференцируема на $\mathcal{D}$. Обозначим

$$S_f(x) = \{y \in \mathcal{D} \mid f(y) \leq f(x)\}.$$

Также будут использоваться некоторые из следующих предположений:

- Градиент f липшицев с константой M, т.е.

$$||\nabla f(x) - \nabla f(y)|| \leq M||x - y|| \; \forall x, y \in S_f(x_0).$$

- f – сильно выпуклая функция с параметром m на $S_f(x_0)$, т.е. $\forall x, y \in S_f(x_0)$

$$(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T (y - x) \geq m||y - x||^2$$

  или

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

Замечание. $S_f(x)$ – выпуклое множество, если f выпукла, более того $S_f(x)$ всегда ограничено, если f сильно выпукла.

Сходимость градиентного спуска

Теорема

Пусть f *дифференцируема и выпукла на* $\mathcal{D}$, $\alpha_k \equiv \alpha \in (0, 1/M]$, *градиент* f *липшицев с константой* $M > 0$ *на* $S_f(x_0)$, f *ограничена снизу и существует хотя бы одна точка минимума* x^*, *тогда для последовательности* x_k, *генерируемой по правилу* (2) $f(x_k)$ *убывает и, более того*

$$f(x_k) - f(x^*) \leq \frac{1}{2\alpha k}||x_0 - x^*||^2.$$

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Док-во. Из формулы Ньютона-Лейбница имеем

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) = \int_0^1 \nabla f(x_k + t(x_{k+1} - x_k))^T (x_{k+1} - x_k) dt =$$

$$\nabla f(x_k)^T (x_{k+1} - x_k) + \int_0^1 (\nabla f(x_k + t(x_{k+1} - x_k)) - \nabla f(x_k))^T (x_{k+1} - x_k) dt \leq$$

$$\nabla f(x_k)^T (x_{k+1} - x_k) + \int_0^1 M ||x_{k+1} - x_k||^2 t dt = -\alpha \left(1 - \frac{\alpha M}{2}\right) ||\nabla f(x_k)||^2.$$

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Док-во. Из формулы Ньютона-Лейбница имеем

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) = \int_0^1 \nabla f(x_k + t(x_{k+1} - x_k))^T (x_{k+1} - x_k) dt =$$

$$\nabla f(x_k)^T (x_{k+1} - x_k) + \int_0^1 (\nabla f(x_k + t(x_{k+1} - x_k)) - \nabla f(x_k))^T (x_{k+1} - x_k) dt \leq$$

$$\nabla f(x_k)^T (x_{k+1} - x_k) + \int_0^1 M ||x_{k+1} - x_k||^2 t dt = -\alpha \left(1 - \frac{\alpha M}{2}\right) ||\nabla f(x_k)||^2.$$

Таким образом $f(x_k)$ убывает в силу $0 < \alpha < 2/M$.

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Док-во. Из формулы Ньютона-Лейбница имеем

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) = \int_0^1 \nabla f(x_k + t(x_{k+1} - x_k))^T (x_{k+1} - x_k) dt =$$

$$\nabla f(x_k)^T (x_{k+1} - x_k) + \int_0^1 (\nabla f(x_k + t(x_{k+1} - x_k)) - \nabla f(x_k))^T (x_{k+1} - x_k) dt \leq$$

$$\nabla f(x_k)^T (x_{k+1} - x_k) + \int_0^1 M||x_{k+1} - x_k||^2 t dt = -\alpha \left(1 - \frac{\alpha M}{2}\right) ||\nabla f(x_k)||^2.$$

Таким образом $f(x_k)$ убывает в силу $0 < \alpha < 2/M$. С другой стороны

$$f(x_k) - f(x^*) \geq f(x_k) - f(x_{k+1}) \geq \alpha \left(1 - \frac{\alpha M}{2}\right) ||\nabla f(x_k)||^2.$$

Так как это неравенство выполняется при любом $\alpha \in (0, 2/M)$ и любом x_k, то минимизируя по α (минимум при $\alpha = 1/M$) получаем

$$f(x) - f(x^*) \geq \frac{1}{2M} ||\nabla f(x)||^2 \tag{4}$$

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Вернемся на шаг назад, при условии $\alpha \le 1/M$

$$
\begin{aligned}
f(x_{i+1}) &\le f(x_i) - \alpha \left(1 - \frac{\alpha M}{2}\right) ||\nabla f(x_i)||^2 \\
&\le f(x_i) - \frac{\alpha}{2} ||\nabla f(x_i)||^2 \\
&\le f(x^*) + \nabla f(x_i)^T (x_i - x^*) - \frac{\alpha}{2} ||\nabla f(x)||^2 \\
&= f(x^*) + \frac{1}{2\alpha} \left(||x_i - x^*||^2 - ||x_i - x^* - \alpha \nabla f(x_i)||^2\right) \\
&= f(x^*) + \frac{1}{2\alpha} \left(||x_i - x^*||^2 - ||x_{i+1} - x^*||^2\right).
\end{aligned}
$$

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Вернемся на шаг назад, при условии $\alpha \le 1/M$

$$
\begin{aligned}
f(x_{i+1}) &\le f(x_i) - \alpha\left(1 - \frac{\alpha M}{2}\right)||\nabla f(x_i)||^2 \\
&\le f(x_i) - \frac{\alpha}{2}||\nabla f(x_i)||^2 \\
&\le f(x^*) + \nabla f(x_i)^T(x_i - x^*) - \frac{\alpha}{2}||\nabla f(x)||^2 \\
&= f(x^*) + \frac{1}{2\alpha}\left(||x_i - x^*||^2 - ||x_i - x^* - \alpha\nabla f(x_i)||^2\right) \\
&= f(x^*) + \frac{1}{2\alpha}\left(||x_i - x^*||^2 - ||x_{i+1} - x^*||^2\right).
\end{aligned}
$$

Суммируя по $i = 0 \dots k-1$ получаем

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{k}(f(x_i) - f(x^*)) &\le \frac{1}{2\alpha}\sum_{i=1}^{k}\left(||x_{i-1} - x^*||^2 - ||x_i - x^*||^2\right) \\
&= \frac{1}{2\alpha}\left(||x_0 - x^*||^2 - ||x_k - x^*||^2\right) \le \frac{1}{2\alpha}||x_0 - x^*||^2.
\end{aligned}
$$

Сходимость градиентного спуска

Так как $f(x_k)$ убывает, то

$$f(x_k) - f(x^*) \leq \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}(f(x_i) - f(x^*)) \leq \frac{1}{2\alpha k}||x_0 - x^*||^2.$$

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Теорема (Сходимость градиентного спуска с постоянным шагом)

Пусть f дифференцируема и выпукла на $\mathcal{D}$, $\alpha_k \equiv \alpha \in (0, 2/M)$, f сильно выпукла с константой $m > 0$ на $S_f(x_0)$, градиент f липшицев с константой $M \geq m$ на $S_f(x_0)$, тогда для последовательности x_k, генерируемой по правилу (2) выполняется:

- *x_k сходится к единственной точке минимума f на $\mathcal{D}$, более того для $q = 1 - 2m\alpha + mM\alpha^2$*

$$||x_k - x^*||^2 \leq \frac{m^2}{8M} q^k (f(x_0) - f(x^*)).$$

- *$f(x_k)$ убывает и сходится к $f(x^*)$, более того*

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

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Док-во. Из сильной выпуклости

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

Минимизирую правую часть по y (минимум при $y = x - (1/m)\nabla f(x)$) получаем

$$f(y) \geq f(x) - \frac{1}{2m}||\nabla f(x)||^2.$$

В частности

$$f(x) - f(x^*) \leq \frac{1}{2m}||\nabla f(x)||^2 \tag{5}$$

Наконец, вновь воспользовавшись сильной выпуклостью

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

$$-||\nabla f(x)|| \cdot ||x^* - x|| + \frac{m}{2}||x - x^*||^2,$$

а значит

$$||x - x^*|| \leq \frac{2}{m}||\nabla f(x)||. \tag{6}$$

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Далее, так как $f(x_k)$ убывает, а f ограничена снизу, то $f(x_k)$ сходится, более того

$$f(x_0) - f(x^*) \geq \sum_{k=0}^{\infty} f(x_k) - f(x_{k+1}) \geq \alpha \left(1 - \frac{\alpha M}{2}\right) \sum_{k=0}^{\infty} ||\nabla f(x_k)||^2.$$

Таким образом ряд $\sum_{k=0}^{\infty} ||\nabla f(x_k)||^2$ сходится $\Rightarrow ||\nabla f(x_k)|| \to 0$, в силу (6) $x_k \to x^*$ и, следовательно $f(x_k) \to f(x^*)$. Далее, оценим скорость сходимости: вернемся к неравенству

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \alpha \left(1 - \frac{\alpha M}{2}\right) ||\nabla f(x_k)||^2.$$

Вычитая из обоих частей $f(x^*)$ и используя (5) получаем

$$f(x_{k+1}) - f(x^*) \leq f(x_k) - f(x^*) - \alpha \left(1 - \frac{\alpha M}{2}\right) 2m(f(x_k) - f(x^*))$$

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Таким образом

$$f(x_k) - f(x^*) \leq q(f(x_{k-1}) - f(x^*)0 \leq q^k(f(x_0) - f(x^*)).$$

Используя (4) и (6) получаем

$$||x_k - x^*||^2 \leq \frac{m^2}{8M} q^k(f(x_0) - f(x^*)).$$

Сходимость (замечания)

Замечание 1. Значение q достигает минимума при $\alpha = 1/M$ и равно $1 - \frac{m}{M}$.

Сходимость (замечания)

Замечание 1. Значение q достигает минимума при $\alpha = 1/M$ и равно $1 - \frac{m}{M}$.
Замечание 2. Очевидным образом, полученные оценки верны в случае, если α_k выбирается как минимум по направлению. К сожалению, улучшения при этом получить не удается.

Сходимость (замечания)

Замечание 1. Значение q достигает минимума при $\alpha = 1/M$ и равно $1 - \frac{m}{M}$.
Замечание 2. Очевидным образом, полученные оценки верны в случае, если α_k выбирается как минимум по направлению. К сожалению, улучшения при этом получить не удается.
Замечание 3. Если f дважды дифференцируема, то q можно уменьшить с $\frac{M-m}{M}$ до $\left(\frac{M-m}{M+m}\right)^2$: из условий теоремы $mI \preceq \nabla^2 f(\cdot) \preceq MI$, по формуле Ньютона-Лейбница

$$\nabla f(x_k) = \nabla f(x^*) + \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + t(x_k - x^*))(x_k - x^*)dt = A_k(x_k - x^*).$$

Так как $mI \preceq \nabla^2 f(\cdot) \preceq MI$, то $mI \preceq A_k \preceq MI$. Отсюда выводим

$$||x_k - x^*|| \leq ||x_{k-1} - x^* - \alpha \nabla f(x_{k-1})|| \leq ||I - \alpha A_{k-1}|| \cdot ||x_{k-1} - x^*||.$$

Так как A_k – симметричная матрица, у которой все собственные числа лежат на отрезке $[m, M]$, то $||I - \alpha A_k|| = \max\{|1 - \alpha m|, |1 - \alpha M|\}$, которое достигает минимума при $\alpha = \frac{2}{M+m}$ и равно $\frac{M-m}{M+m}$.

Сходимость градиентного спуска

Теорема (Сходимость градиентного спуска с переменным шагом)

Пусть f *непрерывно дифференцируема и выпукла на* $\mathcal{D}$, *градиент* f *липшицев с константой* $M \geq 0$, $\alpha_k \in (0, 2/M)$, $\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k = \infty$, $\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k^2 < \infty$, *последовательность* x_k *генерируется по правилу* (2), *тогда для* $\phi_k = \min_{i=0}^{k} f(x_k)$ *выполняется*

$$\phi_k - f(x^*) \to 0$$

Сходимость градиентного спуска (при условии (3))

Док-во.

$$
\begin{aligned}
0 \le ||x_{k+1} - x^*||^2 &= ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha_k \nabla f(x_k)^T (x_k - x^*) + \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2 \\
&\le ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha_k (f(x_k) - f(x^*) + \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2 \\
&\le ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha_k (\phi_k - f(x^*)) + \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2.
\end{aligned}
$$

Сходимость градиентного спуска (при условии (3))

Док-во.

$$0 \le ||x_{k+1} - x^*||^2 = ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha_k \nabla f(x_k)^T (x_k - x^*) + \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2$$
$$\le ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha_k (f(x_k) - f(x^*) + \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2$$
$$\le ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha_k (\phi_k - f(x^*)) + \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2.$$

Отсюда

$$2\alpha_k(\phi_k - f(x^*)) \le \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2.$$

Сходимость градиентного спуска (при условии (3))

Док-во.

$$0 \le ||x_{k+1} - x^*||^2 = ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha_k \nabla f(x_k)^T (x_k - x^*) + \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2$$
$$\le ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha_k (f(x_k) - f(x^*) + \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2$$
$$\le ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha_k (\phi_k - f(x^*)) + \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2.$$

Отсюда

$$2\alpha_k(\phi_k - f(x^*)) \le \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2.$$

Так как $\alpha_k \to 0$, то начиная с некоторого момента K последовательность $f(x_k)$ убывает, в силу непрерывности $\nabla f(\cdot)$ на $S_f(x_K)$ существует константа $C: \quad ||\nabla f(x_k)|| \le C$ при $k \ge K$. Таким образом

$$2 \sum_{k=K}^{\infty} \alpha_k(\phi_k - f(x^*)) \le \sum_{k=K}^{\infty} \alpha_k^2 C^2.$$

Таким образом ряд в левой части неравенства сходится. Так как ϕ_k убывает, $\phi_k \ge f(x^*)$, а $\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k$ расходится, то $\phi_k \to f(x^*)$ является необходимым условием сходимости ряда. ■

Сходимость градиентного спуска

Замечание 1. Вместо условия $\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k^2 < \infty$ можно использовать более слабое условие $\alpha_k \to 0$.

Сходимость градиентного спуска

Замечание 1. Вместо условия $\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k^2 < \infty$ можно использовать более слабое условие $\alpha_k \to 0$.

Замечание 2. При использовании нормированного шага $\gamma_k = \alpha_k / ||\nabla f(x_k)||$ имеет место сходимость $x_k \to x^*$, где x^* – некоторая точка минимума f (при условии существования хотя бы одной).

Сходимость градиентного спуска при $\alpha_k = \mathcal{O}(1/k)$

Замечание 3. Если f сильно выпукла, а $\alpha_k = \mathcal{O}(\frac{1}{k})$, то x_k сходится к x^* со скоростью $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$.

Замечание 3. Если f сильно выпукла, а $\alpha_k = \mathcal{O}(\frac{1}{k})$, то x_k сходится к x^* со скоростью $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$.

Лемма

Если при $\beta > 1$ для числовой последовательности α_k выполняется $\alpha_k \geq 0$ и

$$\alpha_{k+1} \leq \alpha_k \left(1 - \frac{\beta}{k+1}\right) + \frac{\gamma}{(k+1)^2},$$

то при $D = \max\left\{\frac{\gamma}{\beta - 1}, \alpha_0\right\}$ выполняется

$$\alpha_k \leq \frac{D}{k+1} \leq \frac{D}{k+1}.$$

Сходимость градиентного спуска

Док-во. Докажем по индукции: очевидным образом база верна. Предположим, что утверждение верно для k, выведем верность для $k+1$:

$$\alpha_{k+1} \le \alpha_k \left(1 - \frac{\beta}{k}\right) + \frac{\gamma}{(k+1)^2} \le \frac{D}{k+1}\left(1 - \frac{\beta}{k}\right) + \frac{\gamma}{(k+1)^2}$$
$$= \frac{D(k+1-\beta)(k+2) + \gamma(k+2)}{(k+1)^2(k+2)}$$
$$= \underbrace{\frac{-D + (k+2)(D(1-\beta)+\gamma)}{(k+1)^2(k+2)}}_{<0} + \frac{D}{k+2} \le \frac{D}{k+2}. \blacksquare$$

Сходимость градиентного спуска

Док-во. Докажем по индукции: очевидным образом база верна. Предположим, что утверждение верно для k, выведем верность для $k+1$:

$$\alpha_{k+1} \le \alpha_k \left(1 - \frac{\beta}{k}\right) + \frac{\gamma}{(k+1)^2} \le \frac{D}{k+1}\left(1 - \frac{\beta}{k}\right) + \frac{\gamma}{(k+1)^2}$$
$$= \frac{D(k+1-\beta)(k+2) + \gamma(k+2)}{(k+1)^2(k+2)}$$
$$= \underbrace{\frac{-D + (k+2)(D(1-\beta)+\gamma)}{(k+1)^2(k+2)}}_{<0} + \frac{D}{k+2} \le \frac{D}{k+2}. \blacksquare$$

Возвращаясь к градиентному спуску, если функция f сильно выпукла с константой m, а градиент липшицев с константой M, то

$$||x_{k+1} - x^*||^2 = ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha_k \nabla f(x_k)^T (x_k - x^*) + \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2$$
$$\le (1 - 2m\alpha_k)\, ||x_k - x^*||^2 + \alpha_k^2 M^2.$$

Сходимость градиентного спуска

Док-во. Докажем по индукции: очевидным образом база верна. Предположим, что утверждение верно для k, выведем верность для $k+1$:

$$\alpha_{k+1} \le \alpha_k \left(1 - \frac{\beta}{k}\right) + \frac{\gamma}{(k+1)^2} \le \frac{D}{k+1}\left(1 - \frac{\beta}{k}\right) + \frac{\gamma}{(k+1)^2}$$
$$= \frac{D(k+1-\beta)(k+2) + \gamma(k+2)}{(k+1)^2(k+2)}$$
$$= \underbrace{\frac{-D + (k+2)(D(1-\beta)+\gamma)}{(k+1)^2(k+2)}}_{<0} + \frac{D}{k+2} \le \frac{D}{k+2}. \blacksquare$$

Возвращаясь к градиентному спуску, если функция f сильно выпукла с константой m, а градиент липшицев с константой M, то

$$||x_{k+1} - x^*||^2 = ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha_k \nabla f(x_k)^T (x_k - x^*) + \alpha_k^2 ||\nabla f(x_k)||^2$$
$$\le (1 - 2m\alpha_k)\,||x_k - x^*||^2 + \alpha_k^2 M^2.$$

Из Доказанной леммы следует, что $||x_k - x^*|| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$ при $\alpha_k = \frac{\alpha}{k+1} > \frac{1}{2m(k+1)}$.