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

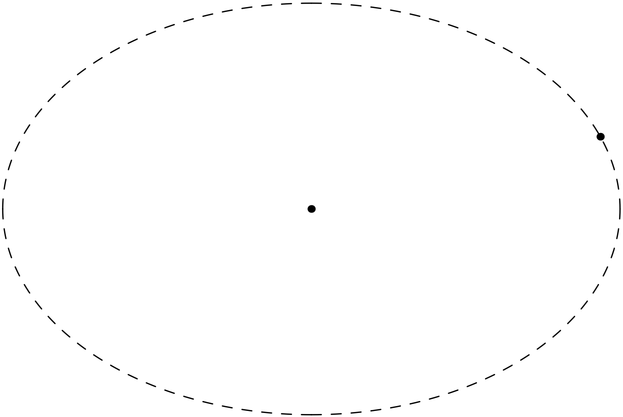
Наиболее распространенными способами выбора последовательности α_k в градиентном спуске являются следующие три:

- Заранее выбранная последовательность, например $\alpha_k \equiv \alpha > 0$ или $\alpha_k = \frac{\alpha}{n^c}$.
- Точный минимум по направлению:
$$\alpha_k = \operatorname{argmin}_\alpha f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)).$$
- Аппроксимированный минимум по направлению, α_k вычисляется следующим образом: пусть $\gamma \in (0, 1/2)$, $\beta \in (0, 1)$ – некоторые константы

Function Backtracking line search(f, x_k, γ, β)

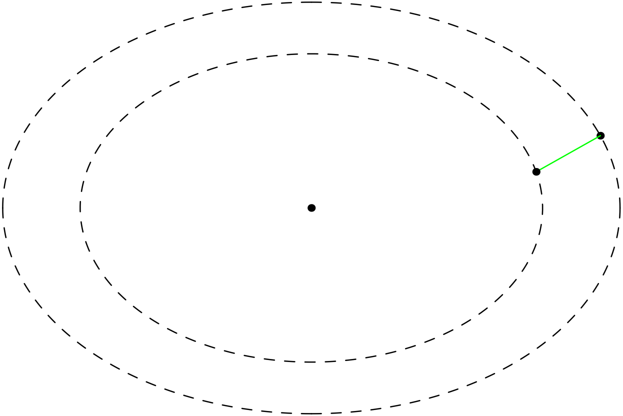
$\alpha_k \leftarrow 1$;
while $f(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)) > f(x_k) - \gamma \alpha_k ||\nabla f(x_k)||^2$ **do**
  $\alpha_k \leftarrow \beta \alpha_k$;
return α_k;

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



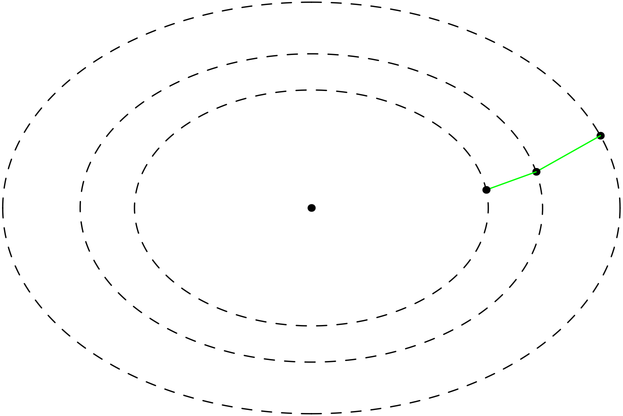
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_0 = 4.000000$$
$$y_0 = 1.000000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.888889, \\ 0.500000)$$
$$\alpha_0 = 1$$
$$\sqrt{x_0^2 + y_0^2} = 4.123106$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



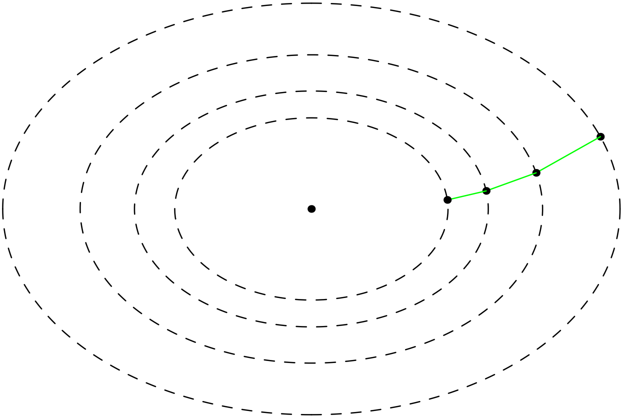
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_1 = 3.111111$$
$$y_1 = 0.500000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.691358,$$
$$0.250000)$$
$$\alpha_1 = 1$$
$$\sqrt{x_1^2 + y_1^2} = 3.151034$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



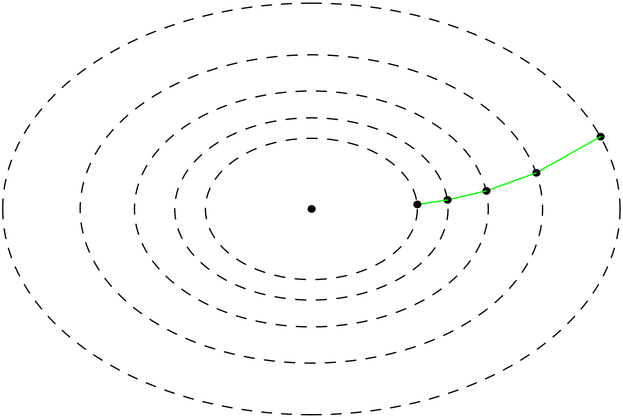
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_2 = 2.419753$$
$$y_2 = 0.250000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.537723, 0.125000)$$
$$\alpha_2 = 1$$
$$\sqrt{x_2^2 + y_2^2} = 2.432633$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



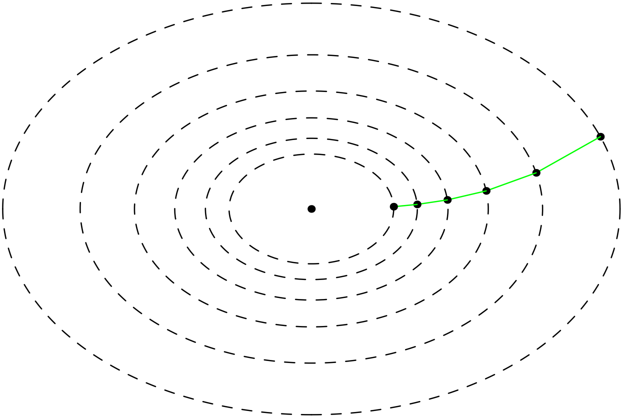
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_3 = 1.882030$$
$$y_3 = 0.125000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.418229,$$
$$0.062500)$$
$$\alpha_3 = 1$$
$$\sqrt{x_3^2 + y_3^2} = 1.886177$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



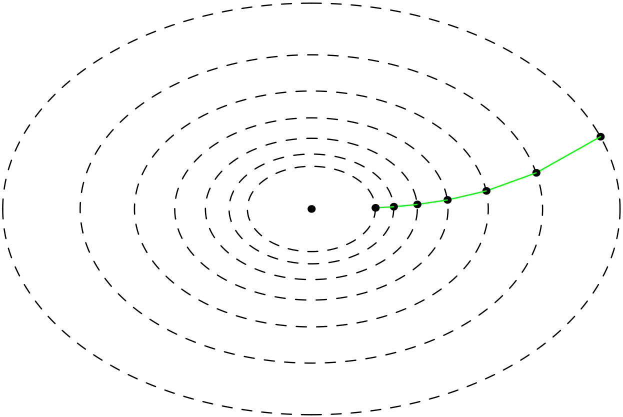
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_4 = 1.463801$$
$$y_4 = 0.062500$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.325289,$$
$$0.031250)$$
$$\alpha_4 = 1$$
$$\sqrt{x_4^2 + y_4^2} = 1.465135$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



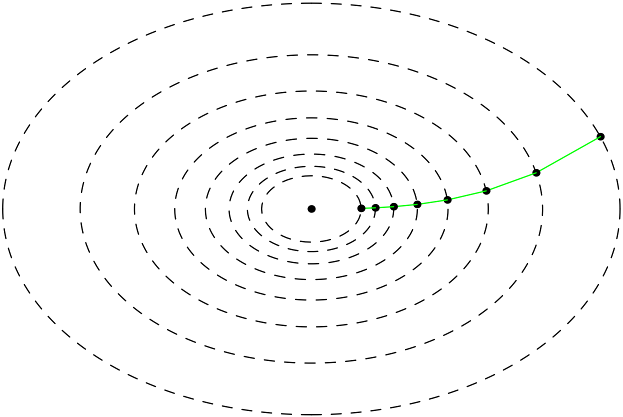
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_5 = 1.138512$$
$$y_5 = 0.031250$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.253003, 0.015625)$$
$$\alpha_5 = 1$$
$$\sqrt{x_5^2 + y_5^2} = 1.138941$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



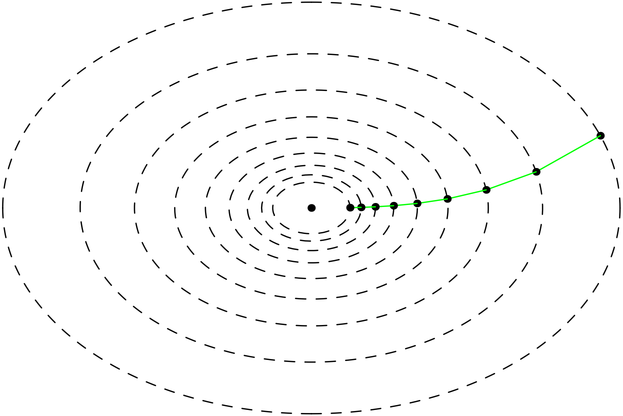
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_6 = 0.885509$$
$$y_6 = 0.015625$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.196780, 0.007813)$$
$$\alpha_6 = 1$$
$$\sqrt{x_6^2 + y_6^2} = 0.885647$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



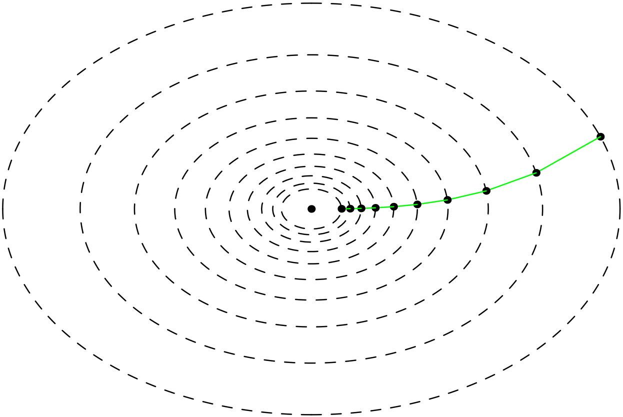
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_7 = 0.688730$$
$$y_7 = 0.007813$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.153051,$$
$$0.003906)$$
$$\alpha_7 = 1$$
$$\sqrt{x_7^2 + y_7^2} = 0.688774$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



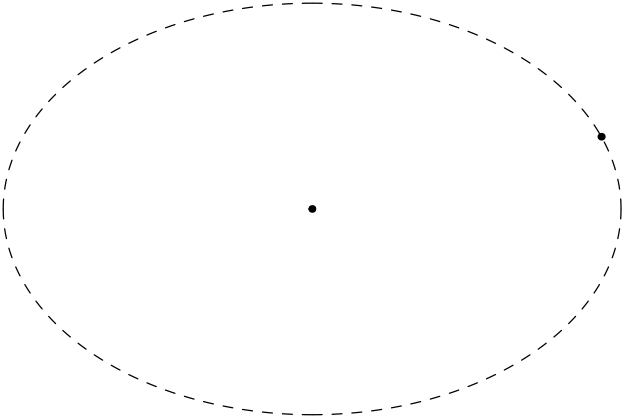
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_8 = 0.535679$$
$$y_8 = 0.003906$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.119040, \\ 0.001953)$$
$$\alpha_8 = 1$$
$$\sqrt{x_8^2 + y_8^2} = 0.535693$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



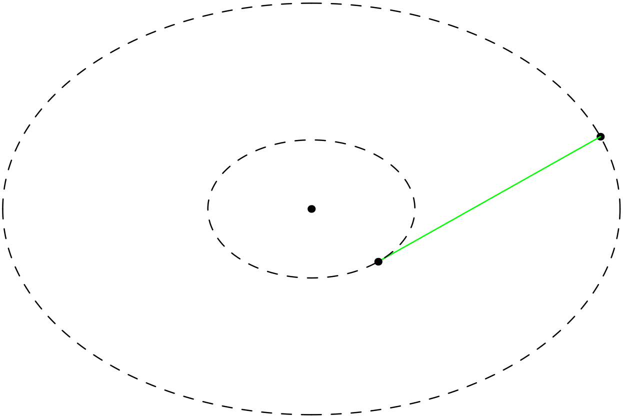
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_9 = 0.416639$$
$$y_9 = 0.001953$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.092586,$$
$$0.000977)$$
$$\alpha_9 = 1$$
$$\sqrt{x_9^2 + y_9^2} = 0.416643$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



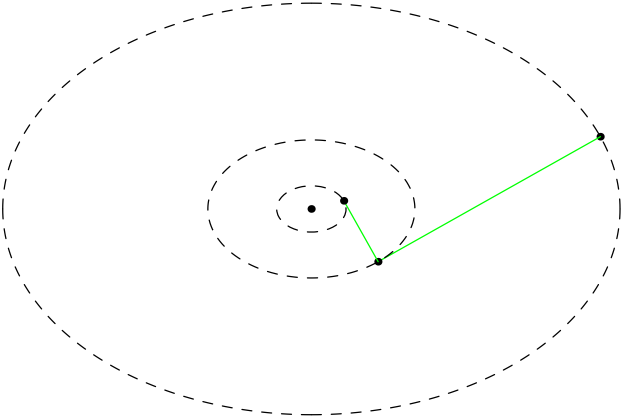
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_0 = 4.000000$$
$$y_0 = 1.000000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.888889,$$
$$0.500000)$$
$$\alpha_0 = 3.460354$$
$$\sqrt{x_0^2 + y_0^2} = 4.123106$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



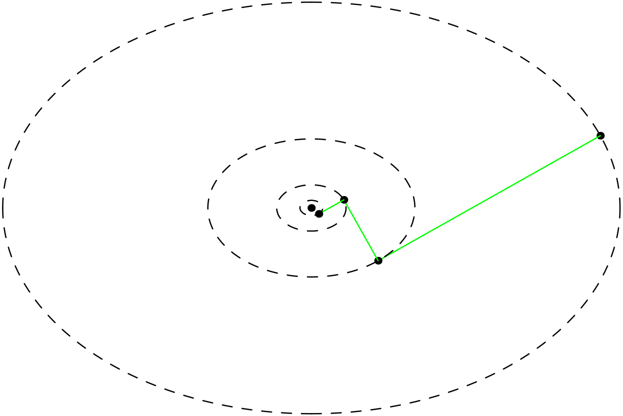
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_1 = 0.924130$$
$$y_1 = -0.730177$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.205362, -0.365088)$$
$$\alpha_1 = 2.308219$$
$$\sqrt{x_1^2 + y_1^2} = 1.177784$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



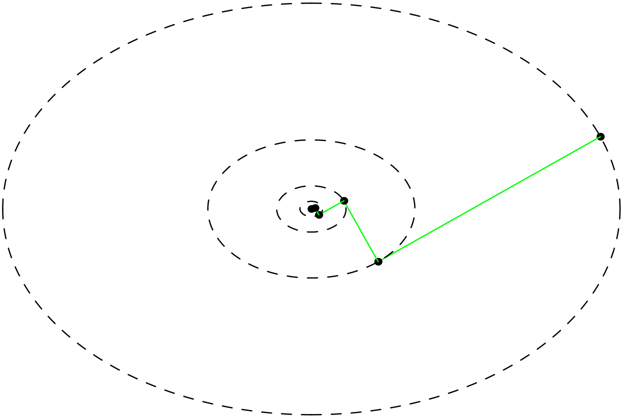
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_2 = 0.450109$$
$$y_2 = 0.112527$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.100024, \\ 0.056264)$$
$$\alpha_2 = 3.460354$$
$$\sqrt{x_2^2 + y_2^2} = 0.463962$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



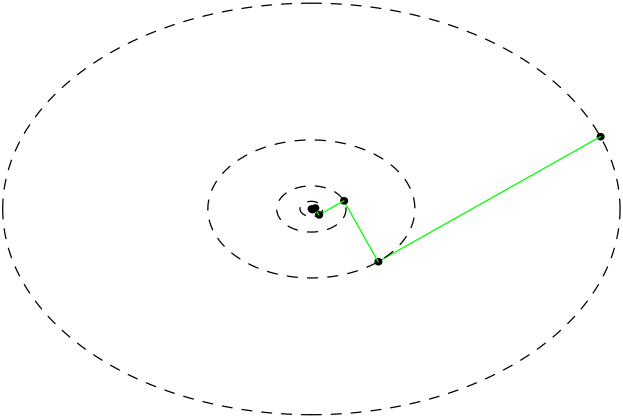
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_3 = 0.103990$$
$$y_3 = -0.082165$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.023109, -0.041082)$$
$$\alpha_3 = 2.308219$$
$$\sqrt{x_3^2 + y_3^2} = 0.132533$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



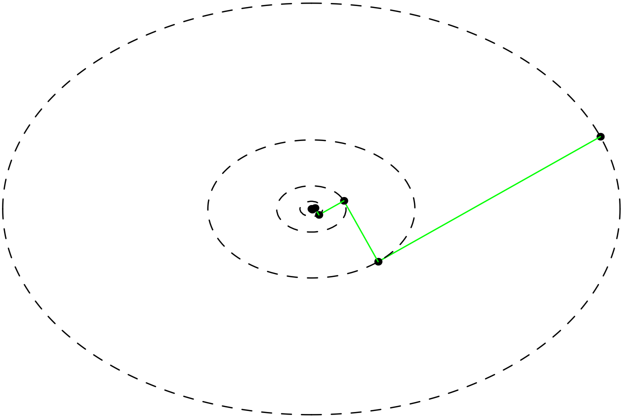
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_4 = 0.050650$$
$$y_4 = 0.012662$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.011255, \\ 0.006331)$$
$$\alpha_4 = 3.460354$$
$$\sqrt{x_4^2 + y_4^2} = 0.052208$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



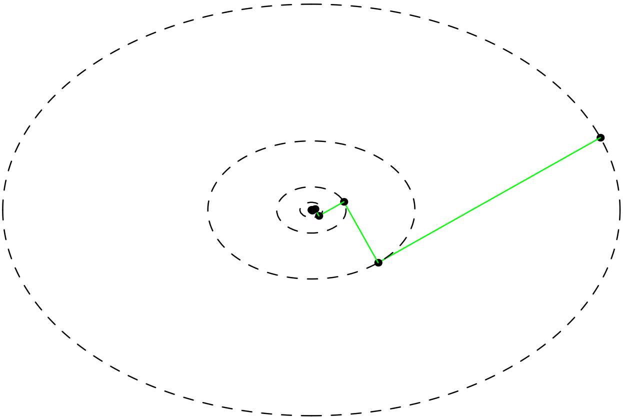
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_5 = 0.011702$$
$$y_5 = -0.009246$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.002600, -0.004623)$$
$$\alpha_5 = 2.308219$$
$$\sqrt{x_5^2 + y_5^2} = 0.014914$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



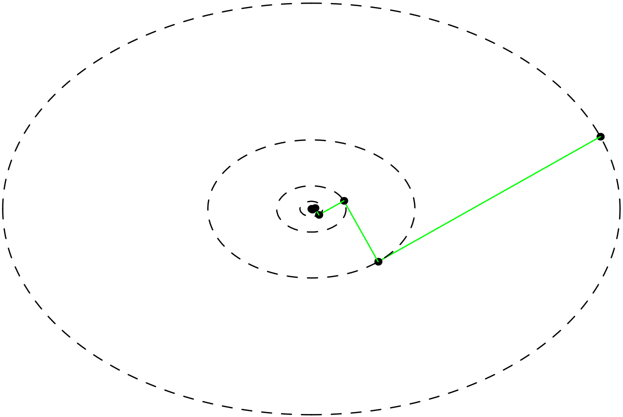
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_6 = 0.005699$$
$$y_6 = 0.001425$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.001267,$$
$$0.000712)$$
$$\alpha_6 = 3.460354$$
$$\sqrt{x_6^2 + y_6^2} = 0.005875$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



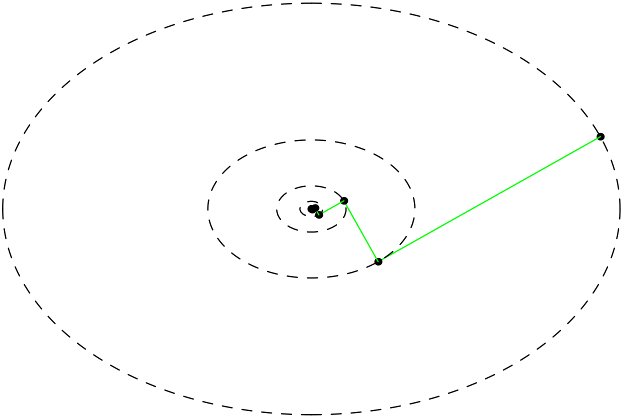
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_7 = 0.001317$$
$$y_7 = -0.001040$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.000293,$$
$$-0.000520)$$
$$\alpha_7 = 2.308219$$
$$\sqrt{x_7^2 + y_7^2} = 0.001678$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



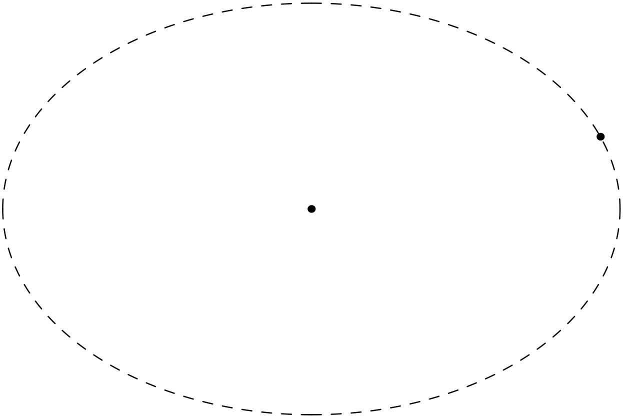
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_8 = 0.000641$$
$$y_8 = 0.000160$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.000143, 0.000080)$$
$$\alpha_8 = 3.460354$$
$$\sqrt{x_8^2 + y_8^2} = 0.000661$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



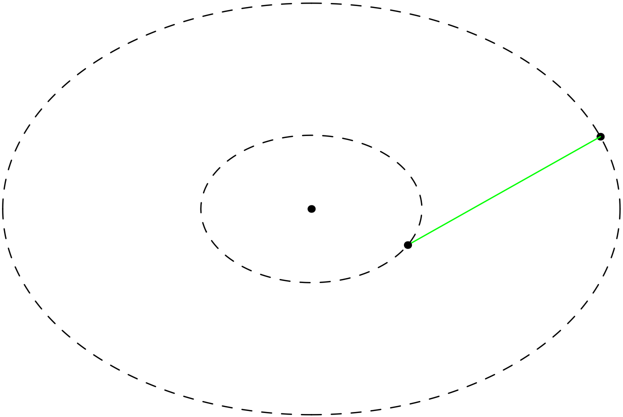
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_9 = 0.000148$$
$$y_9 = -0.000117$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.000033, -0.000059)$$
$$\alpha_9 = 2.308219$$
$$\sqrt{x_9^2 + y_9^2} = 0.000189$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



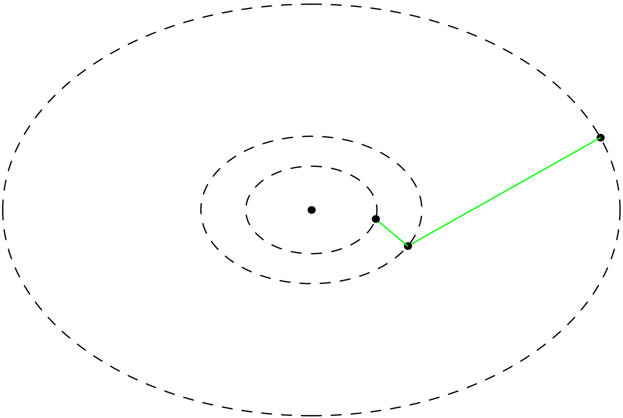
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_0 = 4.000000$$
$$y_0 = 1.000000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.888889,$$
$$0.500000)$$
$$\alpha_0 = 3/1$$
$$\sqrt{x_0^2 + y_0^2} = 4.123106$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



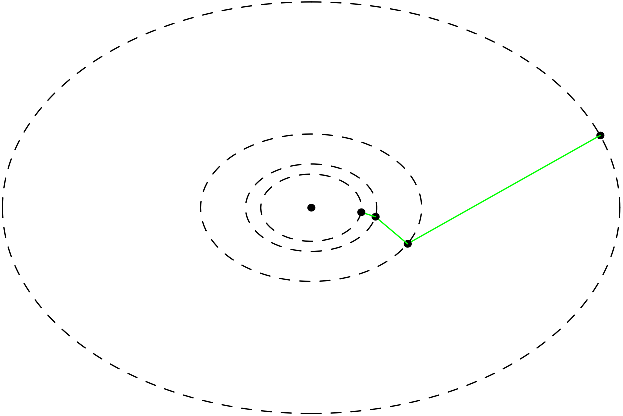
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_1 = 1.333333$$
$$y_1 = -0.500000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.296296, -0.250000)$$
$$\alpha_1 = 3/2$$
$$\sqrt{x_1^2 + y_1^2} = 1.424001$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



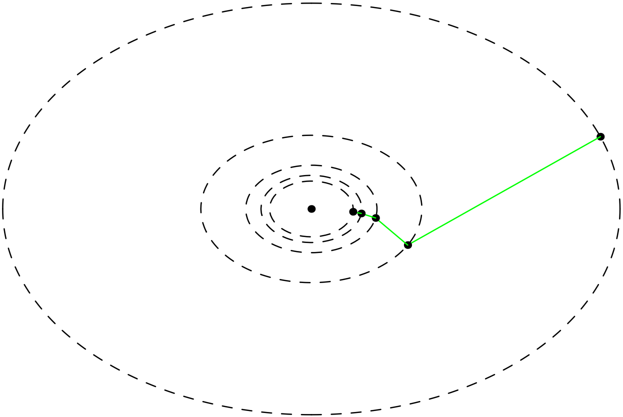
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_2 = 0.888889$$
$$y_2 = -0.125000$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.197531, -0.062500)$$
$$\alpha_2 = 3/3$$
$$\sqrt{x_2^2 + y_2^2} = 0.897635$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



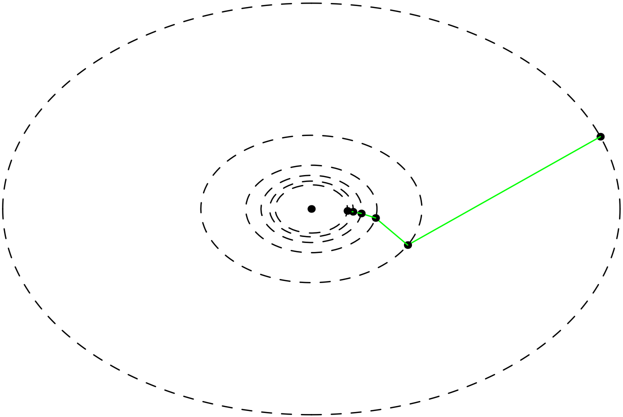
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_3 = 0.691358$$
$$y_3 = -0.062500$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.153635, -0.031250)$$
$$\alpha_3 = 3/4$$
$$\sqrt{x_3^2 + y_3^2} = 0.694177$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



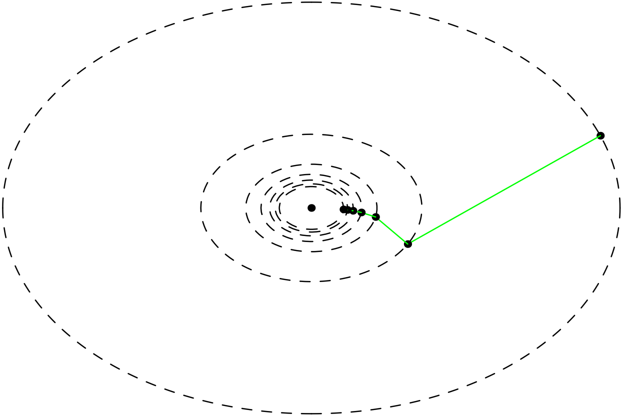
$$f(x, y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_4 = 0.576132$$
$$y_4 = -0.039063$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.128029,$$
$$-0.019531)$$
$$\alpha_4 = 3/5$$
$$\sqrt{x_4^2 + y_4^2} = 0.577454$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



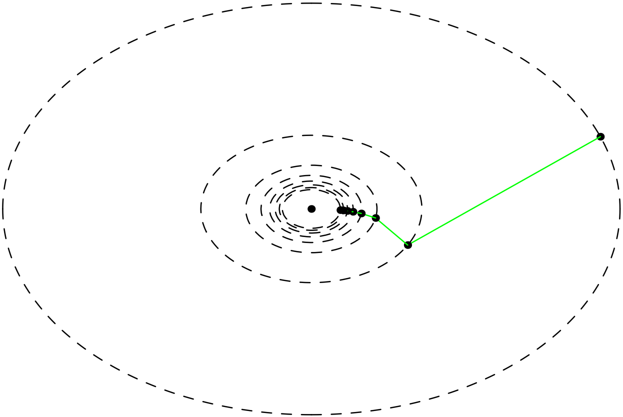
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_5 = 0.499314$$
$$y_5 = -0.027344$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.110959,$$
$$-0.013672)$$
$$\alpha_5 = 3/6$$
$$\sqrt{x_5^2 + y_5^2} = 0.500062$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



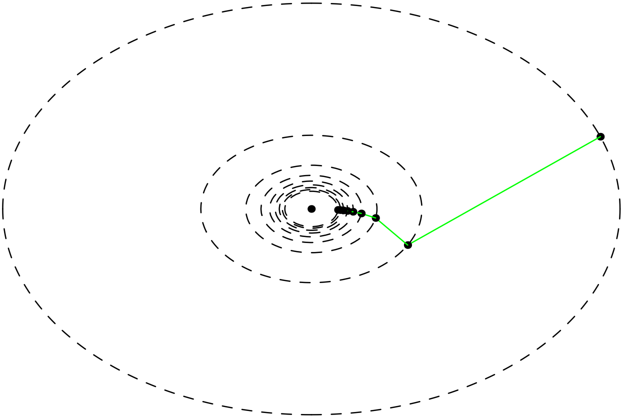
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_6 = 0.443835$$
$$y_6 = -0.020508$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.098630, -0.010254)$$
$$\alpha_6 = 3/7$$
$$\sqrt{x_6^2 + y_6^2} = 0.444308$$

Пример: градиентный спуск для квадратичной функции



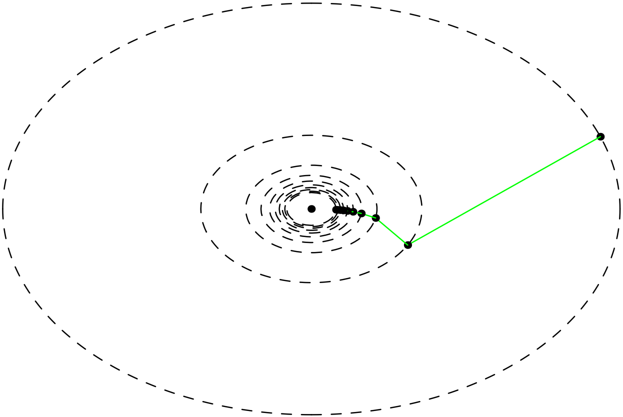
$$f(x,y) = \frac{x^2}{9} + \frac{y^2}{4}$$
$$x_7 = 0.401565$$
$$y_7 = -0.016113$$
$$\nabla f(\cdot) = (0.089237,$$
$$-0.008057)$$
$$\alpha_7 = 3/8$$
$$\sqrt{x_7^2 + y_7^2} = 0.401888$$

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 будем полагать, 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 будем полагать, 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 непрерывен по Липшицу 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 будем полагать, 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 непрерывен по Липшицу 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. $\forall x, y \in S_f(x_0)$

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

Предположения о минимизируемой функции

В дальнейшем анализе будем полагать, 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 непрерывен по Липшицу 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. $\forall x, y \in S_f(x_0)$

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

Предположения о минимизируемой функции

В дальнейшем анализе будем полагать, 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 непрерывен по Липшицу 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. $\forall x, y \in S_f(x_0)$

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

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

Сходимость градиентного спуска

Теорема (Постоянный шаг)

Пусть f выпукла и дифференцируема на $\mathcal{D}$, градиент f липшицев с константой $M > 0$ на $S_f(x_0)$, f ограничена снизу, существует хотя бы одна точка минимума x^*, $\alpha_k = \alpha \in [0, 1/M]$, 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. Используя непрерывность по Липшицу и $x_{k+1} - x_k = -\alpha \nabla f(x_k)$

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

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Док-во. Используя непрерывность по Липшицу и $x_{k+1} - x_k = -\alpha \nabla f(x_k)$

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

Таким образом $f(x_k)$ убывает в силу $0 < \alpha < 2/M$, что гарантирует $x_k \in S_f(x_0)$.

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Док-во. Используя непрерывность по Липшицу и $x_{k+1} - x_k = -\alpha \nabla f(x_k)$

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

Таким образом $f(x_k)$ убывает в силу $0 < \alpha < 2/M$, что гарантирует $x_k \in S_f(x_0)$. 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

$$f(x) - f(x^*) \geq \frac{1}{2M} ||\nabla f(x)||^2 \qquad (3)$$

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Вернемся на шаг назад, при условии $\alpha \le 1/M$ выполняется $-\alpha + M\alpha^2/2 \le -\alpha/2$, получаем

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

Сходимость градиентного спуска (постоянный шаг)

Вернемся на шаг назад, при условии $\alpha \leq 1/M$ выполняется $-\alpha + M\alpha^2/2 \leq -\alpha/2$, получаем

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

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

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

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

Так как $f(x_k)$ убывает, то

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

Замечание 1. Если использовать минимум по направлению, то величина $f(x_k) - f(x_{k+1})$ увеличиваются, а значит все оценки сохраняются.

Использование *backtracking line search*

Замечание 2. Если использовать аппроксимированный минимум по направлению с параметрами $\gamma \in (0, 1/2), \beta \in (0, 1)$, то учитывая $-\alpha + M\alpha^2/2 \leq -\alpha/2$ при $0 \leq \alpha \leq 1/M$

$$\begin{aligned} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)) &\leq f(x_k) - \alpha \left(1 - \frac{\alpha M}{2}\right) ||\nabla f(x_k)||^2 \\ &\leq f(x_k) - \frac{\alpha}{2} ||\nabla f(x_k)||^2 \end{aligned}$$

получаем, что условие выхода в *backtracking line search* выполняется для любого $\alpha \in [0, 1/M]$. Так как на каждом шаге α увеличивается в β раз, то *backtracking line search* выдаёт либо 1, либо виличину $\alpha_k \geq \beta/M$, что дает

$$\begin{aligned} f(x_{i+1}) &\leq f(x_i) - \frac{\alpha_k}{2} ||\nabla f(x_i)||^2 \\ &\leq f(x^*) + \nabla f(x_i)^T (x_i - x^*) - \frac{\alpha_k}{2} ||\nabla f(x_i)||^2 \\ &= f(x^*) + \frac{1}{2\alpha_k} \left(||x_i - x^*||^2 - ||x_i - x^* - \alpha_k \nabla f(x_i)||^2\right) \\ &\leq f(x^*) + \frac{1}{2 \min\{1, \beta/M\}} \left(||x_i - x^*||^2 - ||x_{i+1} - x^*||^2\right). \end{aligned}$$

Использование *backtracking line search*

Суммируя по итерациям выводим схожый результат, отличающийся на константу $\alpha \to \min\{1, \beta/M\}$:

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

Сходимость градиентного спуска $(f(x_k) \to f(x^*))$

Теорема (Постоянный шаг, сильная выпуклость)

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

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

Сходимость градиентного спуска $(f(x_k) \to f(x^*))$

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

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

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

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

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

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

Сходимость градиентного спуска $(f(x_k) \to f(x^*))$

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

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

Сходимость градиентного спуска ($f(x_k) \to f(x^*)$)

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 (5) $x_k \to x^*$ и, следовательно $f(x_k) \to f(x^*)$.

Сходимость градиентного спуска ($f(x_k) \to f(x^*)$)

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 (5) $x_k \to x^*$ 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 (4) 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 $(f(x_k) \to f(x^*))$

Таким образом

$$f(x_k) - f(x^*) \le q(f(x_{k-1}) - f(x^*)) \le q^k(f(x_0) - f(x^*)). \quad \blacksquare$$

Сходимость градиентного спуска $(f(x_k) \to f(x^*))$

Таким образом

$$f(x_k) - f(x^*) \le q(f(x_{k-1}) - f(x^*)) \le q^k(f(x_0) - f(x^*)). \quad \blacksquare$$

Замечание 1. Используя (3) и (5) можно получить

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

Сходимость градиентного спуска ($f(x_k) \to f(x^*)$)

Таким образом

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

Замечание 1. Используя (3) и (5) можно получить

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

Замечание 2. При использовании *backtracking line search* с параметрами γ, β все выкладки сохраняются при $q = 1 - \min\{2m\gamma, 2\beta\gamma m/M\}$.

Сходимость градиентного спуска ($x_k \to x^*$)

Лемма (О m-сильно выпуклой M-гладкой функции)

Пусть $f : \mathcal{D} \to \mathbb{R}$ – сильно выпуклая с параметром m функция, ∇f удовлетворяет условию Липшица с параметром M, т. е.

$$m||y-x||^2 \leq (\nabla f(y) - \nabla f(x))^T(y-x) \leq M||y-x||^2,$$

тогда для f выполняется

$$(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T(y-x) \geq \frac{mM}{m+M}||y-x||^2 + \frac{1}{m+M}||\nabla f(y) - \nabla f(x)||^2$$

Сходимость градиентного спуска ($x_k \to x^*$)

Лемма (О m-сильно выпуклой M-гладкой функции)

Пусть $f : \mathcal{D} \to \mathbb{R}$ – сильно выпуклая с параметром m функция, ∇f удовлетворяет условию Липшица с параметром M, т. е.

$$m||y - x||^2 \leq (\nabla f(y) - \nabla f(x))^T (y - x) \leq M||y - x||^2,$$

тогда для f выполняется

$$(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T (y - x) \geq \frac{mM}{m + M}||y - x||^2 + \frac{1}{m + M}||\nabla f(y) - \nabla f(x)||^2$$

Док-во. Рассмотрим функцию $g(x) = f(x) - \frac{m}{2}||x||^2$. Заметим, что $\nabla g(x) = \nabla f(x) - mx$ и

$$(\nabla g(y) - \nabla g(x))^T (y - x) = (\nabla f(y) - \nabla f(x))^T (y - x) - m||y - x||^2,$$

то есть g – выпуклая функция, ∇g удовлетворяет условию Липшица с константой $M - m$.

Сходимость градиентного спуска ($x_k \to x^*$)

Далее, пусть для некоторого x $\phi(y) = g(y) - \nabla g(x)^T y$. Заметим, что $\nabla\phi(y) = \nabla g(y) - \nabla g(x)$, таким образом ϕ тоже выпукла и $\nabla\phi$ удовлетворяет условию Липшица с константов $M - m$.

Сходимость градиентного спуска ($x_k \to x^*$)

Далее, пусть для некоторого x $\phi(y) = g(y) - \nabla g(x)^T y$. Заметим, что $\nabla\phi(y) = \nabla g(y) - \nabla g(x)$, таким образом ϕ тоже выпукла и $\nabla\phi$ удовлетворяет условию Липшица с константов $M - m$.

Точка x минимизирует ϕ в силу выпуклости ϕ и $\nabla\phi(x) = 0$, используя (3)

$$\phi(x) \leq \phi(y) - \frac{1}{2(M-m)}||\nabla\phi(y)||^2$$

что имеет следующий вид в терминах g

$$g(y) \geq g(x) + \nabla g(x)^T(y - x) + \frac{1}{2(M-m)}||\nabla g(y) - \nabla g(x)||^2$$

Сходимость градиентного спуска ($x_k \to x^*$)

Далее, пусть для некоторого x $\phi(y) = g(y) - \nabla g(x)^T y$. Заметим, что $\nabla\phi(y) = \nabla g(y) - \nabla g(x)$, таким образом ϕ тоже выпукла и $\nabla\phi$ удовлетворяет условию Липшица с константов $M - m$.

Точка x минимизирует ϕ в силу выпуклости ϕ и $\nabla\phi(x) = 0$, используя (3)

$$\phi(x) \leq \phi(y) - \frac{1}{2(M-m)}||\nabla\phi(y)||^2$$

что имеет следующий вид в терминах g

$$g(y) \geq g(x) + \nabla g(x)^T(y-x) + \frac{1}{2(M-m)}||\nabla g(y) - \nabla g(x)||^2$$

складывая это неравенство с самим собой с переставленными $x \leftrightarrow y$ получаем

$$(\nabla g(y) - \nabla g(x))^T(y-x) \geq \frac{1}{M-m}||\nabla g(y) - \nabla g(x)||^2$$

Сходимость градиентного спуска ($x_k \to x^*$)

Наконец, выражая g через f получаем

$$\begin{aligned}(\nabla g(y) - \nabla g(x))^T(y - x) &= (\nabla f(y) - \nabla f(x))^T(y - x) - m||y - x||^2 \\ ||\nabla g(y) - \nabla g(x)||^2 &= ||\nabla f(y) - \nabla f(x)||^2 - 2m(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T(y - x) \\ &\quad + m^2||y - x||^2,\end{aligned}$$

Сходимость градиентного спуска ($x_k \to x^*$)

Наконец, выражая g через f получаем

$$(\nabla g(y) - \nabla g(x))^T(y - x) = (\nabla f(y) - \nabla f(x))^T(y - x) - m||y - x||^2$$
$$||\nabla g(y) - \nabla g(x)||^2 = ||\nabla f(y) - \nabla f(x)||^2 - 2m(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T(y - x) + m^2||y - x||^2,$$

что дает

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

Сходимость градиентного спуска ($x_k \to x^*$)

Наконец, выражая g через f получаем

$$(\nabla g(y) - \nabla g(x))^T(y-x) = (\nabla f(y) - \nabla f(x))^T(y-x) - m||y-x||^2$$
$$||\nabla g(y) - \nabla g(x)||^2 = ||\nabla f(y) - \nabla f(x)||^2 - 2m(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T(y-x) + m^2||y-x||^2,$$

что дает

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

$$(\nabla f(y) - \nabla f(x))^T(y-x) \geq \frac{1}{m+M}(Mm||y-x||^2 + ||\nabla f(y) - \nabla f(x)||^2) \quad \blacksquare$$

Сходимость градиентного спуска ($x_k \to x^*$)

Теорема

Пусть f дифференцируема на $\mathcal{D}$, $\alpha_k \equiv \alpha \in (0, 2/(M+m))$, f сильно выпукла с константой $m > 0$ на $\bar{B}(x^*, ||x_0 - x^*||)$, градиент f липшицев с константой $M \geq m$ на $\bar{B}(x^*, ||x_0 - x^*||)$, тогда для последовательности x_k, генерируемой по правилу (2), x_k сходится к единственной точке минимума x^* f на $\mathcal{D}$, более того для

$$||x_k - x^*||^2 \leq \left(1 - \frac{2\alpha m M}{M+m}\right)^k ||x_0 - x^*||^2$$

Сходимость градиентного спуска ($x_k \to x^*$)

Теорема

Пусть f дифференцируема на $\mathcal{D}$, $\alpha_k \equiv \alpha \in (0, 2/(M+m))$, f сильно выпукла с константой $m > 0$ на $\bar{B}(x^*, ||x_0 - x^*||)$, градиент f липшицев с константой $M \geq m$ на $\bar{B}(x^*, ||x_0 - x^*||)$, тогда для последовательности x_k, генерируемой по правилу (2), x_k сходится к единственной точке минимума x^* f на $\mathcal{D}$, более того для

$$||x_k - x^*||^2 \leq \left(1 - \frac{2\alpha m M}{M+m}\right)^k ||x_0 - x^*||^2$$

Док-во. Используя доказанную лемму

$$\begin{aligned} ||x_{k+1} - x^*||^2 &= ||x_k - x^*||^2 - 2\alpha \nabla f(x_k)(x_k - x^*) + \alpha^2 ||\nabla f(x_k)||^2 \\ &\leq \left(1 - \frac{2\alpha m M}{M+m}\right) ||x_k - x^*||^2 + \alpha \left(\alpha - \frac{2}{m+M}\right) ||\nabla f(x_k)||^2 \\ &\leq \left(1 - \frac{2\alpha m M}{M+m}\right) ||x_k - x^*||^2 \end{aligned}$$

Оптимальность $\alpha = 2/(m+M)$

Замечание. При $\alpha = 2/(m+M)$ параметр сходимости становится

$$1 - \frac{2\alpha m M}{M+m} = 1 - \frac{4\alpha m M}{(M+m)^2} = \left(\frac{M-m}{M+m}\right)^2$$

Оптимальность $\alpha = 2/(m+M)$

Замечание. При $\alpha = 2/(m+M)$ параметр сходимости становится

$$1 - \frac{2\alpha mM}{M+m} = 1 - \frac{4\alpha mM}{(M+m)^2} = \left(\frac{M-m}{M+m}\right)^2$$

Такой выбор α оптимален при условии, что m, M – точные оценки: пусть $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$, $A = A^T$, тогда последовательность (2) принимает вид

$$x_{k+1} = (I - \alpha A)x_k + \alpha b.$$

Оптимальность $\alpha = 2/(m+M)$

Замечание. При $\alpha = 2/(m+M)$ параметр сходимости становится

$$1 - \frac{2\alpha m M}{M+m} = 1 - \frac{4\alpha m M}{(M+m)^2} = \left(\frac{M-m}{M+m}\right)^2$$

Такой выбор α оптимален при условии, что m, M – точные оценки: пусть $f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x$, $A = A^T$, тогда последовательность (2) принимает вид

$$x_{k+1} = (I - \alpha A)x_k + \alpha b.$$

Если $Ax^* = b$, $m, M > 0$ – минимальное и максимальное собственные числа A, то

$$||x_{k+1} - x^*|| = ||(I - \alpha_k A)(x_k - x^*)|| \leq \max\{|1 - \alpha M|, |1 - \alpha m|\}||x_k - x^*||,$$

при этом

$$\min_{\alpha} \max\{|1 - \alpha M|, |1 - \alpha m|\} = \frac{M-m}{M+m},$$

минимум достигается при $\alpha = 2/(m+M)$.

Ссылки на литературу

Нестеров Ю. Е. Методы выпуклой оптимизации // парагафы 1.2.3 и 2.1.5

Boyd S., Vandenberghe L. Convex optimization // парагаф 9.3

Поляк Б. Т. Введение в оптимизацию // парагаф 1.4

Vandenberghe L. Лекция по градиентному спуску