Методы оптимизации
Лекция 6: Подходы к построению солверов для решения задач оптимизации

Александр Катруца

Факультет инноваций и высоких технологий
Физтех-школа прикладной математики и информатики

7 октября 2018 г.

На прошлой лекции

- Построение двойственных функций

На прошлой лекции

- Построение двойственных функций
- Связь сопряжённых и двойственных функций

На прошлой лекции

- Построение двойственных функций
- Связь сопряжённых и двойственных функций
- Двойственная задача и её свойства

На прошлой лекции

- Построение двойственных функций
- Связь сопряжённых и двойственных функций
- Двойственная задача и её свойства
- Сильная и слабая двойственность

На прошлой лекции

- Построение двойственных функций
- Связь сопряжённых и двойственных функций
- Двойственная задача и её свойства
- Сильная и слабая двойственность
- ККТ и условие Слейтера

Задача оптимизации

$$\begin{aligned} &\min_{x \in \mathbb{R}^n} f_0(x) \\ \text{s.t. } & f_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m \\ & h_j(x) = 0,\ j = 1, \ldots, p \end{aligned}$$

- Возможность эффективного решения сильно зависит от свойств f_0, f_i, h_j

Задача оптимизации

$$\begin{aligned} &\min_{x \in \mathbb{R}^n} f_0(x) \\ \text{s.t. } & f_i(x) \le 0,\ i = 1, \dots, m \\ & h_j(x) = 0,\ j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

- Возможность эффективного решения сильно зависит от свойств f_0, f_i, h_j
- Если f_0, f_i, h_j аффинны, то это задача линейного программирования (LP), которая может быть решена крайне быстро

Задача оптимизации

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} & \ f_0(x) \\ \text{s.t. } & f_i(x) \le 0, \ i = 1, \dots, m \\ & h_j(x) = 0, \ j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

- Возможность эффективного решения сильно зависит от свойств f_0, f_i, h_j
- Если f_0, f_i, h_j аффинны, то это задача линейного программирования (LP), которая может быть решена крайне быстро
- Простые задачи с нелинейными f_i, h_j могут быть очень сложными для решения

Задача выпуклой оптимизации

$$
\begin{aligned}
&\min_{x \in \mathbb{R}^n} f_0(x) \\
\text{s.t. } & f_i(x) \le 0, \ i = 1, \dots, m \\
& Ax = b
\end{aligned}
$$

- f_0, f_i выпуклые функции: для всех x, y и $\alpha \in [0, 1]$

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \le \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$$

- Ограничения типа равенств аффинны

Свойства задач выпуклой оптимизации

- Подмножество задач оптимизации: LP – частный случай
- Могут выглядеть очень сложно, однако решаются также эффективно как и задача LP
- Встречаются гораздо чаще, чем можно было бы подумать
- Очень много приложений

Общие подходы к использованию выпуклости

- Надеяться/предполагать/делать вид, что f_i выпуклы
  - Просто для пользователя
  - Теряется часть преимуществ выпуклых задач
- Проверка выпуклости задачи перед решением
  - в общем случае может быть затруднительна
- Построение выпуклой задачи из элементарных блоков
  - пользователь следует фисированному набору правил при определении f_i
  - выпуклость проверяется автоматически

Как проверить выпуклость?

- Определение, критерии первого или второго порядка, например $\nabla^2 f(x) \succeq 0$
- Исчисление выпуклых функций: построение f, используя
    - набор простых функций, выпуклость которых известна
    - сочетания или преобразования, не меняющие выпуклость

Примеры простых выпуклых функций

- При $x > 0$: x^p для $p < 0,\ p \geq 1$ и x^{-p} для $p \in [0, 1]$
- $e^x,\ -\log x,\ x \log x$
- $\langle a, x \rangle + b$
- $\|x\|$ – любая норма
- $\max\{x_1, \ldots, x_n\}$ и $\log(e^{x_1} + \ldots + e^{x_n})$
- $\log \det X^{-1}$ для $X \in \mathbb{S}^n_+$

Правила исчисления выпуклых функций

- Умножение на неотрицательную константу: f выпукла и $\alpha > 0$, тогда αf выпукла
- Сложение: f, g выпуклы, тогда $f + g$ выпукла
- Композиция с аффинной функцией: f выпукла, тогда $f(Ax + b)$ также выпукла
- Взятие максимума: $f_1, \ldots, f_m$ выпуклы, тогда $\max\limits_{i=1,\ldots,m} \{f_i(x)\}$ выпукла
- Композиция: если h выпукла и возрастает, f выпукла, тогда $g(x) = h(f(x))$ выпукла
- И многие другие...

Примеры

- $f(x) = \max\limits_i (\langle a_i, x\rangle + b_i)$
- ℓ_1 регуляризация задачи наименьших квадратов

$$f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|_2^2 + \lambda\|x\|_1, \quad \lambda > 0$$

- Логарифмический барьер

$$-\sum_{i=1}^{m} \log(-f_i(x))$$

  при $\{x | f_i(x) < 0\}$ и выпуклых $f_i(x)$
- Максимальное собственное значение $A \in \mathbb{S}^n$:

$$\lambda_{\max}(A) = \sup_{\|x\|_2 = 1} (x^\top A x)$$

Как решать задачу выпуклой оптимизации?

- Использовать «стандартный» солвер (для LP, QP, SDP...)
  - лёгкий путь
  - задача ***должна быть*** в стандартной форме
  - сложность разработки компенсируется количеством пользователей
- Придумать и/или реализовать метод самостоятельно
  - Трудоёмко
  - Может быть эффективнее для конкретной задаче
- Преобразовать задачу к стандартному виду и использовать стандартный солвер
  - Расширяет множество задач, подходящих для решения стандартными солверами
  - Преобразование может быть громоздким для выполнения

Общие методы решения задач выпуклой оптимизации

Субградиентный метод, метод эллипсоидов, проксимальный метод и их вариации

- В основном разработаны в СССР в 1960-1970-ых годах, подробнее см. заметки Б.Т. Поляка
- Универсальные методы решения задач выпуклой оптимизации, даже для недифференцируемых f_i
- Метод эллипсоидов эффективен в теории (полиномиален)
- На практике такие методы могут быть медленными

Методы внутренней точки (IPM) для выпуклых задач

- Interior-Point Polynomial Algorithms in Convex Programming, Y. Nesterov, A. Nemirovskii, 1994
- Обзор про IPM см. тут
- Применим для **гладких** f_i и задач в конической форме (SOCP, SDP)
- Чрезвычайно эффективный метод: необходимо сделать несколько десятков итераций, независимо от размерности задачи
- На каждой итерации надо решить линейную систему такого же размера как исходная задача

А если IPM нельзя применить к задаче?

- Пример: ℓ_1 регуляризация задачи наименьших квадратов

$$f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|_2^2 + \lambda\|x\|_1, \quad \lambda > 0$$

- Задача выпукла, но f негладкая!
- **Основная идея**: изменить задачу так, чтобы IPM можно было применять
- Даже если в новой задаче будет больше переменных и ограничений, она может быть эффективна решена с помощью IPM

Пример

- Исходная задача: n переменных, нет ограничений

$$\min_x \frac{1}{2}\|Ax - b\|_2^2 + \lambda\|x\|_1, \quad \lambda > 0$$

- Введём новую переменную $t \in \mathbb{R}^n$ и новые ограничения $|x_i| \leq t_i$:

$$\begin{aligned} &\min_{(x,t)} \frac{1}{2}\|Ax - b\|_2^2 + \lambda \mathbf{1}^\top t \\ \text{s.t. } & -t \leq x \leq t \end{aligned}$$

- В новой задаче $2n$ переменных и $2n$ ограничений, но она **гладкая**!
- **Важно**: задачи эквивалентны! Решив одну, получим решение другой и наоборот

Преобразование задачи и эффективность решения

- Дана выпуклая задача P_0
- Выполняются последовательные эквивалентные преобразования

$$P_0 \to P_1 \to \ldots \to P_K,$$

  где P_K – задача, которую можно решать IPM
- Эффективное решение P_K
- Обратное преобразование решения P_K в решение P_0
- P_K может иметь больше ограничений и/или переменных, но наличие определённой структуры и высокая эффективность IPM компенсируют это

Примеры преобразований задач

- Правила преобразования выпуклых функций порождают преобразования задач
- $\max\{f_1(x), f_2(x)\}$
  - Вводим новую переменную $t = \max\{f_1(x), f_2(x)\}$
  - Добавляем ограничения $f_1(x) \le t,\ f_2(x) \le t$
- $h(f(x))$
  - Вводим новую переменную $t = f(x)$
  - Добавляем ограничение $f(x) \le t$

От доказательства выпуклости к применимости IPM

$$
\begin{aligned}
&\min_{x\in\mathbb{R}^n} f_0(x)\\
\text{s.t. } & f_i(x) \le 0,\ i = 1,\ldots,m\\
& Ax = b
\end{aligned}
$$

- Построение f_i из элементарных функций и правил преобразований даёт доказательство выпуклости
- Аналогичный разбор даёт преобразование задачи к форме, состоящей из элементарных функций и аффинных равенств
- Если элементарные функции подходят для IPM, преобразование автоматически даёт форму задачи, которая может быть решена IPM

Disciplined convex programming (DCP)

- Задаются искомые переменные и фиксированные параметры
- Целевая функция и ограничения строятся из элементарных функций с помощью правил композиций и сочетаний
- Задача выпукла по построению
- Автоматически разбирается на элементы
- Приводится к форме для запуска IPM
- Решается некоторым стандартным пакетом для IPM
- Восстанавливается решение исходной задачи

История

- Системы AMPL, GAMS – 1970-ые
- Пакеты для задач SDP/LMI: `sdpsol` (Wu, Boyd), `lmilab` (Gahinet, Nemirovsky), `lmitool` (El Ghaoui) – 1990-ые
- `yalmip` (Löfberg 2000–)
- automated convexity checking (Crusius PhD thesis 2002)
- disciplined convex programming (DCP) (Grant, Boyd, Ye 2004)
- `cvx` (Grant, Boyd, Ye 2005) для MATLAB
- `cvxopt` (Dahl, Vandenberghe 2005)
- `cvxpy` (Diamond, Boyd 2016) для Python

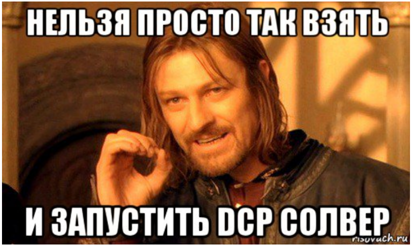
Главное по DCP

Pro:

- Проверка выпуклости и генерация преобразования задачи для IPM
- Построене задачи: элементарные выпуклые функции + правила композиций и преобразований
- Очень похоже на математическую нотацию

Contra:

- Не про «plug & play» или «try my code»



- Нельзя записать произвольную задачу и надеяться, что она будет выпукла

Солверы для решения общих задач оптимизации

- ipopt
- Pyomo
- Gurobi

Главное

- Правила построения выпуклых функций

Главное

- Правила построения выпуклых функций
- Сведение задач к стандартной форме

Главное

- Правила построения выпуклых функций
- Сведение задач к стандартной форме
- Disciplined convex programming

Главное

- Правила построения выпуклых функций
- Сведение задач к стандартной форме
- Disciplined convex programming
- Примеры

Главное

- Правила построения выпуклых функций
- Сведение задач к стандартной форме
- Disciplined convex programming
- Примеры
- Солверы для решения задач оптимизации