

# Методы оптимизации. Семинар 1. Введение.

Александр Катруца

Московский физико-технический институт,  
Факультет Управления и Прикладной Математики

2 сентября 2018 г.

# Вопросы к студентам

- Имя
- Кафедра
- Знание  $\text{T}_\text{E}\text{X}/\text{L}_\text{A}\text{T}_\text{E}\text{X}$
- Ожидания от курса

# Зачем этот курс?

- Формализация задачи выбора элемента из множества

# Зачем этот курс?

- Формализация задачи выбора элемента из множества
- Обоснование правильности принятия решения

# Зачем этот курс?

- Формализация задачи выбора элемента из множества
- Обоснование правильности принятия решения
- Разнообразные приложения:

# Зачем этот курс?

- Формализация задачи выбора элемента из множества
- Обоснование правильности принятия решения
- Разнообразные приложения:
  - машинное обучение: классификация, кластеризация, регрессия

# Зачем этот курс?

- Формализация задачи выбора элемента из множества
- Обоснование правильности принятия решения
- Разнообразные приложения:
  - машинное обучение: классификация, кластеризация, регрессия
  - молекулярное моделирование

# Зачем этот курс?

- Формализация задачи выбора элемента из множества
- Обоснование правильности принятия решения
- Разнообразные приложения:
  - машинное обучение: классификация, кластеризация, регрессия
  - молекулярное моделирование
  - анализ рисков



# Зачем этот курс?

- Формализация задачи выбора элемента из множества
- Обоснование правильности принятия решения
- Разнообразные приложения:
  - машинное обучение: классификация, кластеризация, регрессия
  - молекулярное моделирование
  - анализ рисков
  - выбор активов (portfolio optimization)

# Зачем этот курс?

- Формализация задачи выбора элемента из множества
- Обоснование правильности принятия решения
- Разнообразные приложения:
  - машинное обучение: классификация, кластеризация, регрессия
  - молекулярное моделирование
  - анализ рисков
  - выбор активов (portfolio optimization)
  - оптимальное управление

# Зачем этот курс?

- Формализация задачи выбора элемента из множества
- Обоснование правильности принятия решения
- Разнообразные приложения:
  - машинное обучение: классификация, кластеризация, регрессия
  - молекулярное моделирование
  - анализ рисков
  - выбор активов (portfolio optimization)
  - оптимальное управление
  - обработка сигналов

# Зачем этот курс?

- Формализация задачи выбора элемента из множества
- Обоснование правильности принятия решения
- Разнообразные приложения:
  - машинное обучение: классификация, кластеризация, регрессия
  - молекулярное моделирование
  - анализ рисков
  - выбор активов (portfolio optimization)
  - оптимальное управление
  - обработка сигналов
  - оценка параметров в статистике

# Зачем этот курс?

- Формализация задачи выбора элемента из множества
- Обоснование правильности принятия решения
- Разнообразные приложения:
  - машинное обучение: классификация, кластеризация, регрессия
  - молекулярное моделирование
  - анализ рисков
  - выбор активов (portfolio optimization)
  - оптимальное управление
  - обработка сигналов
  - оценка параметров в статистике
  - и другие

# О чём этот курс?

Первый семестр (теоретический):

- Основы выпуклого анализа
- Условия оптимальности
- Теория двойственности

# О чём этот курс?

Первый семестр (теоретический):

- Основы выпуклого анализа
- Условия оптимальности
- Теория двойственности

Второй семестр (практический):

- Методы безусловной минимизации первого и второго порядка
- Методы условной оптимизации
- Линейное программирование: симплекс-метод и пр.
- Оптимальные методы
- ...

# План на семестр

- Семинар и лекция раз в неделю



# План на семестр

- Семинар и лекция раз в неделю
- Миниконтрольные в начале каждого семинара

# План на семестр

- Семинар и лекция раз в неделю
- Миниконтрольные в начале каждого семинара
- Домашнее задание после каждого семинара

# План на семестр

- Семинар и лекция раз в неделю
- Миниконтрольные в начале каждого семинара
- Домашнее задание после каждого семинара
- Итоговая контрольная в конце семестра  
(и промежуточная в середине семестра)

# План на семестр

- Семинар и лекция раз в неделю
- Миниконтрольные в начале каждого семинара
- Домашнее задание после каждого семинара
- Итоговая контрольная в конце семестра  
(и промежуточная в середине семестра)
- Экзамен в конце семестра. Среднее арифметическое:

# План на семестр

- Семинар и лекция раз в неделю
- Миниконтрольные в начале каждого семинара
- Домашнее задание после каждого семинара
- Итоговая контрольная в конце семестра  
(и промежуточная в середине семестра)
- Экзамен в конце семестра. Среднее арифметическое:
  - оценки за работу в семестре

# План на семестр

- Семинар и лекция раз в неделю
- Миниконтрольные в начале каждого семинара
- Домашнее задание после каждого семинара
- Итоговая контрольная в конце семестра  
(и промежуточная в середине семестра)
- Экзамен в конце семестра. Среднее арифметическое:
  - оценки за работу в семестре
  - ответа на экзамене

# План на семестр

- Семинар и лекция раз в неделю
- Миниконтрольные в начале каждого семинара
- Домашнее задание после каждого семинара
- Итоговая контрольная в конце семестра  
(и промежуточная в середине семестра)
- Экзамен в конце семестра. Среднее арифметическое:
  - оценки за работу в семестре
  - ответа на экзамене
- Piazza для Q&A

# Предварительные навыки

- Линейная алгебра
- Математический анализ
- Программирование: Python (NumPy, SciPy, CVXPY) или MATLAB
- Элементы вычислительной математики



Основные этапы использования методов оптимизации при решении реальных задач:

1. Определение целевой функции

Основные этапы использования методов оптимизации при решении реальных задач:

1. Определение целевой функции
2. Определение допустимого множества решений

Основные этапы использования методов оптимизации при решении реальных задач:

1. Определение целевой функции
2. Определение допустимого множества решений
3. Постановка и анализ оптимизационной задачи

Основные этапы использования методов оптимизации при решении реальных задач:

1. Определение целевой функции
2. Определение допустимого множества решений
3. Постановка и анализ оптимизационной задачи
4. Выбор наилучшего алгоритма для решения поставленной задачи

Основные этапы использования методов оптимизации при решении реальных задач:

1. Определение целевой функции
2. Определение допустимого множества решений
3. Постановка и анализ оптимизационной задачи
4. Выбор наилучшего алгоритма для решения поставленной задачи
5. Реализация алгоритма и проверка его корректности

# Постановка задачи

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{x} \in X} f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } & f_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, p \\ & f_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = p + 1, \dots, m, \end{aligned}$$

# Постановка задачи

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{x} \in X} f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } & f_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, p \\ & f_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = p + 1, \dots, m, \end{aligned}$$

- $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  — искомый вектор

# Постановка задачи

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{x} \in X} f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } & f_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, p \\ & f_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = p + 1, \dots, m, \end{aligned}$$

- $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  — искомый вектор
- $f_0(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  — целевая функция



# Постановка задачи

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{x} \in X} f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } & f_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, p \\ & f_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = p + 1, \dots, m, \end{aligned}$$

- $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  — искомый вектор
- $f_0(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  — целевая функция
- $f_k(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  — функции ограничений

# Постановка задачи

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{x} \in X} f_0(\mathbf{x}) \\ & \text{s.t. } f_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, p \\ & \quad f_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = p + 1, \dots, m, \end{aligned}$$

- $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  — искомый вектор
- $f_0(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  — целевая функция
- $f_k(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  — функции ограничений

Пример: выбор объектов для вложения денег и определение в какой объект сколько вкладывать

- $\mathbf{x}$  — размер инвестиций в каждый актив
- $f_0$  — суммарный риск или вариация прибыли
- $f_k$  — бюджетные ограничения, min/max вложения в актив, минимально допустимая прибыль

# Как решать?

В общем случае:

- NP-полные
- рандомизированные алгоритмы: время vs. стабильность

НО определённые классы задач могут быть решены быстро!

- Линейное программирование
- Метод наименьших квадратов
- Малоранговое приближение порядка  $k$
- Выпуклая оптимизация

# История развития

- 1940-ые — линейное программирование
- 1950-ые — квадратичное программирование
- 1960-ые — геометрическое программирование
- 1990-ые — полиномиальные методы внутренней точки для произвольной задачи выпуклой оптимизации

- Решение задач огромной размерности ( $\sim 10^8 - 10^{12}$ )

- Решение задач огромной размерности ( $\sim 10^8 - 10^{12}$ )
- Распределённая оптимизация

- Решение задач огромной размерности ( $\sim 10^8 - 10^{12}$ )
- Распределённая оптимизация
- Быстрые методы первого порядка

- Решение задач огромной размерности ( $\sim 10^8 - 10^{12}$ )
- Распределённая оптимизация
- Быстрые методы первого порядка
- Стохастические алгоритмы: масштабируемость vs. точности



- Решение задач огромной размерности ( $\sim 10^8 - 10^{12}$ )
- Распределённая оптимизация
- Быстрые методы первого порядка
- Стохастические алгоритмы: масштабируемость vs. точности
- Невыпуклые задачи определённой структуры

- Решение задач огромной размерности ( $\sim 10^8 - 10^{12}$ )
- Распределённая оптимизация
- Быстрые методы первого порядка
- Стохастические алгоритмы: масштабируемость vs. точности
- Невыпуклые задачи определённой структуры
- Приложения выпуклой оптимизации

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{c}^T \mathbf{x} \\ \text{s.t. } \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

- нет аналитического решения
- существуют эффективные алгоритмы
- разработанная технология
- симплекс-метод входит в Топ-10 алгоритмов XX века<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup><https://www.siam.org/pdf/news/637.pdf>

# Задача наименьших квадратов

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2,$$

где  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$  и  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ .

- имеет аналитическое решение:  $\mathbf{x}^* = (\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{b}$
- существуют эффективные алгоритмы
- разработанная технология
- имеет статистическую интерпретацию

# Малоранговое приближение ранга $k$

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}} \quad & \|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|_F \\ \text{s.t.} \quad & \text{rank}(\mathbf{X}) \leq k \end{aligned}$$

## Theorem (Eckart–Young, 1993)

Пусть  $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top$  — сингулярное разложение матрицы  $\mathbf{A}$ , где  $\mathbf{U} = [\mathbf{U}_k, \mathbf{U}_{r-k}] \in \mathbb{R}^{m \times r}$ ,  $\mathbf{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_k, \dots, \sigma_r)$ ,  $\mathbf{V} = [\mathbf{V}_k, \mathbf{V}_{r-k}] \in \mathbb{R}^{n \times r}$  и  $r = \text{rank}(\mathbf{A})$ . Тогда решение задачи можно записать в виде:

$$\mathbf{X} = \hat{\mathbf{U}}\hat{\mathbf{\Sigma}}\hat{\mathbf{V}}^\top,$$

где  $\hat{\mathbf{U}} \in \mathbb{R}^{m \times k}$ ,  $\hat{\mathbf{\Sigma}} = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_k)$ ,  $\hat{\mathbf{V}} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ .

Алгоритм вычисления сингулярного разложения и быстрый, и устойчивый.

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } f_i(\mathbf{x}) \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

- $f_0, f_i$  — выпуклые функции:

$$f(\alpha \mathbf{x}_1 + \beta \mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_1) + \beta f(\mathbf{x}_2),$$

где  $\alpha, \beta \geq 0$  и  $\alpha + \beta = 1$ .

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } f_i(\mathbf{x}) \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

- $f_0, f_i$  — выпуклые функции:

$$f(\alpha \mathbf{x}_1 + \beta \mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_1) + \beta f(\mathbf{x}_2),$$

где  $\alpha, \beta \geq 0$  и  $\alpha + \beta = 1$ .

- нет аналитического решения

# Выпуклая оптимизация

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } f_i(\mathbf{x}) \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

- $f_0, f_i$  — выпуклые функции:

$$f(\alpha \mathbf{x}_1 + \beta \mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_1) + \beta f(\mathbf{x}_2),$$

где  $\alpha, \beta \geq 0$  и  $\alpha + \beta = 1$ .

- нет аналитического решения
- существуют эффективные алгоритмы



# Выпуклая оптимизация

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } f_i(\mathbf{x}) \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

- $f_0, f_i$  — выпуклые функции:

$$f(\alpha \mathbf{x}_1 + \beta \mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_1) + \beta f(\mathbf{x}_2),$$

где  $\alpha, \beta \geq 0$  и  $\alpha + \beta = 1$ .

- нет аналитического решения
- существуют эффективные алгоритмы
- часто сложно «увидеть» задачу выпуклой оптимизации

# Выпуклая оптимизация

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } f_i(\mathbf{x}) \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

- $f_0, f_i$  — выпуклые функции:

$$f(\alpha \mathbf{x}_1 + \beta \mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_1) + \beta f(\mathbf{x}_2),$$

где  $\alpha, \beta \geq 0$  и  $\alpha + \beta = 1$ .

- нет аналитического решения
- существуют эффективные алгоритмы
- часто сложно «увидеть» задачу выпуклой оптимизации
- существуют приёмы для преобразования задачи к стандартному виду

# Почему выпуклость так важна?

R. Tyrrell Rockafellar (1935 —)

The great watershed in optimization is not between linearity and non-linearity, but convexity and non-convexity.

# Почему выпуклость так важна?

R. Tyrrell Rockafellar (1935 —)

The great watershed in optimization is not between linearity and non-linearity, but convexity and non-convexity.

- Локальный оптимум является глобальным

# Почему выпуклость так важна?

R. Tyrrell Rockafellar (1935 —)

The great watershed in optimization is not between linearity and non-linearity, but convexity and non-convexity.

- Локальный оптимум является глобальным
- Необходимое условие оптимальности является достаточным

# Почему выпуклость так важна?

R. Tyrrell Rockafellar (1935 —)

The great watershed in optimization is not between linearity and non-linearity, but convexity and non-convexity.

- Локальный оптимум является глобальным
- Необходимое условие оптимальности является достаточным

Вопросы:

# Почему выпуклость так важна?

R. Tyrrell Rockafellar (1935 —)

The great watershed in optimization is not between linearity and non-linearity, but convexity and non-convexity.

- Локальный оптимум является глобальным
- Необходимое условие оптимальности является достаточным

Вопросы:

- Любую ли задачу выпуклой оптимизации можно эффективно решить?

# Почему выпуклость так важна?

R. Tyrrell Rockafellar (1935 —)

The great watershed in optimization is not between linearity and non-linearity, but convexity and non-convexity.

- Локальный оптимум является глобальным
- Необходимое условие оптимальности является достаточным

Вопросы:

- Любую ли задачу выпуклой оптимизации можно эффективно решить?
- Можно ли эффективно решить невыпуклые задачи оптимизации?



- Организация работы
- Предмет курса по оптимизации
- Общая формулировка оптимизационной задачи
- Классические оптимизационные задачи