

Методы оптимизации. Повторение лекций.

Корнилов Никита Максимович

Московский физико-технический институт

Декабрь 2025г

Скорости сходимости

- Сублинейная: $\|x^k - x^*\|_2 \leq \frac{C}{k^\alpha}$, $C > 0$, $\alpha > 0$.
- Линейная: $\|x^k - x^*\|_2 \leq Cq^k$, $C > 0$, $0 < q < 1$. Или
 $\|x^{k+1} - x^*\| \leq q\|x^k - x^*\|$.
- Сверхлинейная: $\|x^k - x^*\|_2 \leq Cq^{kp}$, $C > 0$, $0 < q < 1$, $p > 1$.
- Квадратичная: $\|x^k - x^*\|_2 \leq Cq^{2^k}$, $C > 0$, $0 < q < 1$. Или
 $\|x^{k+1} - x^*\| \leq q\|x^k - x^*\|^2$.

Свойства L -гладких и μ -сильно выпуклых функций

Пусть f — μ -сильно выпуклая, тогда

$$\langle \nabla f(x) - \nabla f(y), x - y \rangle \geq \mu \|x - y\|_2^2.$$

$$\frac{\mu}{2} \|x - y\|_2^2 \leq f(y) - f(x) - \langle \nabla f(x), y - x \rangle.$$

Пусть f — L -гладкая, тогда

$$|f(y) - f(x) - \langle \nabla f(x), y - x \rangle| \leq \frac{L}{2} \|x - y\|_2^2.$$

Пусть f — L -гладкая и μ -сильно выпуклая, тогда

$$LI \succeq \nabla^2 f(x) \succeq \mu I.$$

$$\langle \nabla f(x) - \nabla f(y), x - y \rangle \geq \frac{\mu L}{\mu + L} \|x - y\|_2^2 + \frac{1}{\mu + L} \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|_2^2.$$

Оптимальность

Theorem (Необходимые условия локального минимума)

Пусть дана непрерывно дифференцируемая функция $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$. Если точка x^* является локальным минимумом, то $\nabla f(x^*) = 0$.

Theorem (Достаточные условия глобального минимума)

Пусть дана выпуклая непрерывно дифференцируемая на \mathbb{R}^d функция $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$. Если для некоторой точки $x^* \in \mathbb{R}^d$ верно, что $\nabla f(x^*) = 0$, то x^* – глобальный минимум f на всем \mathbb{R}^d .

Theorem (Достаточные условия условного минимума)

Пусть дана выпуклая непрерывно дифференцируемая на \mathbb{R}^d функция $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ и выпуклое множество \mathcal{X} . Тогда $x^* \in \mathcal{X}$ – глобальный минимум f на \mathcal{X} тогда и только тогда, когда для всех $x \in \mathcal{X}$ выполнено

$$\langle \nabla f(x^*), x - x^* \rangle \geq 0.$$

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x)$$

Задача: для выпуклых функций ищем глобальный минимум, а для невыпуклых – стационарную точку. Метод:

$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k \nabla f(x^k).$$

Интуиция: идти в сторону убывания функции или решение системы $\frac{dx_t}{dt} = -\nabla f(x_t)dt$ или минимизация ограничивающей параболы:

$$x^{k+1} = \arg \min_x \left\{ f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), x - x^k \rangle + \frac{1}{2\gamma_k} \|x - x^k\|_2^2 \right\}, \gamma_k \leq \frac{1}{L}.$$

Шаг: при большом γ_k может не сойтись, нужно $\gamma_k \leq \frac{1}{L}$, оптимальное значение $\gamma_k = \frac{1}{L}$, для сильно выпуклых функций можно $\gamma_k = \frac{2}{(L+\mu)}$.

Сходимость GD с оптимальным шагом

- Сублинейная сходимость для L -гладких выпуклых функций $\gamma_k = \gamma$:

$$f(x^K) - f(x^*) \leq \frac{2\|x^0 - x^*\|_2^2}{\gamma K}.$$

- Для невыпуклых функций сохраняется скорость сходимости по квадрату нормы градиента (оценка оптимальна):

$$\|\nabla f(\hat{x}^K)\|_2^2 \leq \frac{2(f(x^0) - f^*)}{\gamma K}.$$

- Линейная сходимость для L -гладких и μ -сильно выпуклых функций:

$$\|x^K - x^*\|_2^2 \leq (1 - \gamma\mu)^K \|x^0 - x^*\|_2^2.$$

- Для функций, удовлетворяющих условию Поляка-Лоясевича, эта скорость сходимости сохраняется (Верно для всех оценок дальше):

$$\frac{1}{2}\|\nabla f(x)\|_2^2 \geq \mu(f(x) - f^*), \forall x \in \mathbb{R}^d.$$

Выбор шага

Для шага $x^{k+1} = x^k + \gamma_k h_k$ с направлением h_k , в GD $h_k = -\nabla f(x^k)$.

- Константный и степенной шаг

$$\gamma_k := \frac{\gamma}{\delta + k^p}, \quad \gamma > 0, \quad \delta > 0, \quad p \geq 0.$$

Наиболее часто применяются $\gamma_k = \gamma$, $\gamma_k = \frac{\gamma}{k+1}$ и $\gamma_k = \frac{\gamma}{\sqrt{k+1}}$.

- Наискорейший спуск

$$\gamma_k^* = \arg \min_{\gamma_k > 0} f(x^k + \gamma_k h_k).$$

Ищем аналитически или методами одномерной минимизации.

Градиент в итоговой точке перпендикулярен направлению.

- Адаптивный подбор: на каждой итерации подбираем шаг

$$\gamma_{k+1} = \frac{1}{L_{k+1}}, \quad \text{увеличивая } L_{k+1} \text{ в } \rho \text{ раз, пока не выполнено условие } f(x^{k+1}) \leq f(x^k) + \frac{1}{L_{k+1}} \langle \nabla f(x^k), h \rangle + \frac{1}{2L_{k+1}} \|h\|_2^2.$$

Выбор шага

- Правила Армихо, Вольфа, Голдстейна и прочие.
- Шаг Поляка–Шора для GD с параметром $\alpha > 0$:

$$\gamma_k^* := \frac{f(x^k) - f^*}{\alpha \|\nabla f(x^k)\|_2^2}.$$

Получен из минимизации

$$\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \leq \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma_k(f(x^k) - f^*) + \gamma_k^2 \|\nabla f(x^k)\|_2^2.$$

Вместо f^* часто используют некоторую нижнюю оценку.

Метод тяжелого шарика

$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k \nabla f(x^k) + \tau_k (x^k - x^{k-1}).$$

- Интуиция: использовать инерцию траектории $\tau_k \in [0.75, 0.95]$.

- Оптимальный для **квадратичных** сильно выпуклых задач: с

$\gamma_k = \frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}$, $\tau_k = \left(\frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}} \right)$ справедлива оценка:

$$\|x^K - x^*\|_2 \leq \sqrt{2} \cdot \left(\frac{\sqrt{L}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}} \right)^K \|x^0 - x^*\|_2.$$

- Сходимость в общем случае: не лучше градиентного спуска в теории, но на практике может быть заметно лучше, особенно вблизи решения. Наблюдается волнообразная сходимость, так как идёт не по направлению убывания.
- Особенности: нужно хранить доп. вектор x^{k-1} и подбирать два параметра τ_k и γ_k (для γ_k см. выбор шага).

Ускоренный метод Нестерова

$$y^{k+1} = x^k + \tau_k(x^k - x^{k-1}), \quad x^{k+1} = y^{k+1} - \gamma_k \nabla f(y^{k+1}).$$

Интуиция: смотрим по инерции в будущее и оттуда делаем градиентный шаг с $\tau_k \in [0.75, 0.95]$.

Сходимость для L -гладких и μ -сильно выпуклых функций с $\gamma_k = \frac{1}{L}$,
 $\tau_k = \frac{\sqrt{L} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{L} + \sqrt{\mu}}$.

$$f(x^K) - f(x^*) \leq \left(1 - \sqrt{\frac{\mu}{L}}\right)^K \cdot L \|x^0 - x^*\|_2^2.$$

Сходимость для L -гладких и выпуклых функций с $\gamma_k = \frac{1}{L}$, $\tau_k = \frac{k}{k+3}$:

$$f(x^K) - f(x^*) \leq \frac{4L \|x^0 - x^*\|_2^2}{(K+2)^2}.$$

Особенность: нужно хранить доп вектор, подбирать два параметра τ_k и γ_k (для γ_k см. выбор шага), оценки совпадают с нижними оценками.

Нижние оценки

Будем рассматривать следующий класс алгоритмов:

$$x^{k+1} \in x^0 + \text{span}\{\nabla f(x^0), \dots, \nabla f(x^k)\}.$$

Пусть задача безусловной оптимизации с L -гладкой, μ -сильно выпуклой функцией f решается методом первого порядка. Тогда для достижения точности ε по аргументу ($\|x^K - x^*\|_2 \leq \varepsilon$) потребуется

$$\Omega\left(\sqrt{\frac{L}{\mu}} \log \frac{\|x^0 - x^*\|_2}{\varepsilon}\right) \text{ оракульных вызовов.}$$

Идея: построить такую функцию, что любой метод на ней будет сходиться не лучше оценки.

Пример плохой функции

Зафиксируем K — кол-во итераций метода и построим

$$f(x) = \frac{L - \mu}{8} \langle x, Ax \rangle - \frac{L - \mu}{4} \langle e_1, x \rangle + \frac{\mu}{2} \|x\|_2^2,$$

где матрица размерности $d = 2K$ задана следующим образом:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2 \end{pmatrix}.$$

Оптимум равен $x_i^* = -\frac{q^{2d+2}}{1-q^{2d+2}} \frac{1}{q^i} + \frac{1}{1-q^{2d+2}} q^i$ с $q = \frac{\sqrt{L}-\sqrt{\mu}}{\sqrt{L}+\sqrt{\mu}}$.

Если начальная точка $x^0 = (0, 0, \dots, 0)^\top$, то за один шаг любого метода сможем заполнить только одну следующую координату для x^k .

Метод сопряженных градиентов

Используется для решения СЛАУ: $Ax = b, A \succ 0$.

Идея: разложить решение $Ax^* = b$ в базис из сопряженных относительно A направлений ($p_i^T A p_j = 0, i \neq j$), т.е., $x^* = \sum_{k=0}^{d-1} \alpha_k p_k$, восстанавливая на k -ой итерации p_k и α_k .

1) По индукции доказываем, что следующее направление p_k сопряжено со всеми предыдущими

$$r_k = Ax^k - b = \nabla f(x^k), \quad p_k = -r_k + \beta_k p_{k-1}, \quad p_{-1} = 0.$$

Сопряженность p_{k-1} и p_k :

$$\beta_k = \frac{p_{k-1}^T A r_k}{p_{k-1}^T A p_{k-1}}.$$

2) По сопряженности считаем коэффициент α_k из представления x^* :

$$\alpha_k = \frac{p_k^T b}{p_k^T A p_k}, \quad x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k.$$

Метод сопряженных градиентов: особенности

- С квадратной положительно определенной матрицей размера d находит точное решение за не более чем d итераций (за число уникальных собственных значений).
- Сходимость по норме

$$\|x^k - x^*\|_A \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa(A)} - 1}{\sqrt{\kappa(A)} + 1} \right)^k \|x^0 - x^*\|_A.$$

Здесь $\|x\|_A^2 = x^T A x$ и $\kappa(A) = \lambda_{\max}(A)/\lambda_{\min}(A)$.

- Обобщения для произвольных функций: $r_k = \nabla f(x^k)$,
 $\beta_{k+1} = \frac{\langle \nabla f(x^{k+1}), \nabla f(x^{k+1}) \rangle}{\langle \nabla f(x^k), \nabla f(x^k) \rangle}$ (Флетчер - Ривс) или
 $\beta_{k+1} = \frac{\langle \nabla f(x^{k+1}), \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k) \rangle}{\langle \nabla f(x^k), \nabla f(x^k) \rangle}$ (Поляк - Рибьер), α_k - правило подбора шага. Полезно использовать рестарты.

Метод Ньютона

$$x^{k+1} = x^k - \left(\nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \nabla f(x^k).$$

- Интуиция: минимизация приближения Тейлора второго порядка

$$x^{k+1} = \arg \min_{y \in \mathbb{R}^d} \left[f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), y - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x^k)(y - x^k), y - x^k \rangle \right]$$

- Сходимость для μ -сильно выпуклых функций с M -Липшицевым гессианом: Квадратичная, но локальная скорость

$$\|x^{k+1} - x^*\|_2 \leq \frac{M}{2\mu} \|x^k - x^*\|_2^2.$$

- Особенности: дорогая итерация из подсчета и обращения гессиана за $O(d^3)$, вне области квадратичной сходимости может расходиться.

Модификации метода Ньютона

- Демпированный метод Ньютона: добавить подбор шага $\gamma_k < 1$, сходится сублинейно вне области квадратичной сходимости

$$x^{k+1} = x^k - \underbrace{\gamma_k \left(\nabla^2 f(x^k) \right)^{-1} \nabla f(x^k)}_{=p_k}.$$

- Усечённый метод Ньютона: считать p_k , решая несколько итераций метода CG для $(\nabla^2 f(x^k)) \cdot p_k = \nabla f(x^k)$.

Кубический Ньютон

Идея: минимизировать разложение до 3 порядка с параметром M_k

$$x^{k+1} = \arg \min_{y \in \mathbb{R}^d} [\langle \nabla f(x^k), y - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle \nabla^2 f(x^k)(y - x^k), y - x^k \rangle + \frac{M_k}{6} \|x^k - y\|_2^3]$$

эквивалентна выпуклой одномерной задаче

$$\min_{r \in D} \left[\frac{1}{2} \langle (\nabla^2 f(x^k) + \frac{M_k r}{2} I_d)^{-1} \nabla f(x^k), \nabla f(x^k) \rangle + \frac{M_k}{12} r^3 \right],$$

где $D = \{r \in \mathbb{R}_+ | \nabla^2 f(x^k) + \frac{M_k r}{2} I_d \succ 0\}$.

Локальная квадратичная сходимость даже для невыпуклых функций, плюс сублинейная сходимость вне области квадратичной.

Квазиньютоновские методы

Идея: приближительный, быстрый пересчёт обратного гессиана H_k за $O(d^2)$:

$$x^{k+1} = x^k - H_k \nabla f(x^k).$$

1) Квазиньютоновское урав: $s^k = x^{k+1} - x^k$ и $y^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$:

$$s^k = H_{k+1} y^k.$$

Обычно $H_0 = I_d$.

2) Нужно доп условие:

SR-1:

$$H_{k+1} = H_k + \mu_k q^k (q^k)^\top,$$

где $\mu_k \in \mathbb{R}$ и $q^k \in \mathbb{R}^d$ нужно подобрать.

Итоговая формула (пересчет за $O(d^2)$ - прибавить одноранговую матрицу):

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(s^k - H_k y^k)(s^k - H_k y^k)^\top}{(s^k - H_k y^k)^\top y^k}.$$

Квазиньютоновские методы

Broyden

Запишем квазиньютоновское уравнение для матрицы B : $y^k = B_{k+1}s^k$.

Доп условие минимальности

$$\begin{aligned} B_{k+1} &= \arg \min_{B \in \mathbb{R}^{d \times d}} \|B - B_k\|_F^2 \\ \text{s.t. } & B s^k = y^k. \end{aligned}$$

Итоговое одноранговое несимметричное решение:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y^k - B_k s^k)(s^k)^\top}{(s^k)^\top s^k}.$$

Аналитический подсчет обратной матрицы (пересчет за $O(d^2)$):

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(s^k - H_k y^k)(s^k)^\top H_k}{(s^k)^\top H_k y^k}.$$

Квазиньютоновские методы

DPF:

$$\begin{aligned} B_{k+1} &= \arg \min_{B \in \mathbb{R}^{d \times d}} \|B - B_k\|_W^2 \\ \text{s.t. } &Bs^k = y^k \\ &B^T = B, \end{aligned}$$

где $\|A\|_W = \|W^{1/2}AW^{1/2}\|_F$ и $W = \int_0^1 \nabla^2 f(x^k - \tau \gamma_k H_k \nabla f(x^k)) d\tau$.
Итоговая формула:

$$B_{k+1} = \left(I_d - \frac{y^k(s^k)^\top}{(y^k)^\top s^k}\right) B_k \left(I_d - \frac{s^k(y^k)^\top}{(y^k)^\top s^k}\right) + \frac{y^k(y^k)^\top}{(y^k)^\top s^k}.$$

Обращая ее по формуле Шермана-Моррисона-Вудбери, получаем:

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k y^k (y^k)^\top H_k}{(y^k)^\top H_k y^k} + \frac{s^k (s^k)^\top}{(s^k)^\top y^k}.$$

Квазиньютоновские методы

BFGS:

$$\begin{aligned} H_{k+1} &= \arg \min_{H \in \mathbb{R}^{d \times d}} \|H - H_k\|_W^2 \\ \text{s.t. } s^k &= Hy^k \\ H^T &= H \end{aligned}$$

Итоговая формула (пересчет за $O(d^2)$):

$$H_{k+1} = \left(I_d - \frac{s^k(y^k)^\top}{(y^k)^\top s^k}\right) H_k \left(I_d - \frac{y^k(s^k)^\top}{(y^k)^\top s^k}\right) + \frac{s^k(s^k)^\top}{(y^k)^\top s^k}.$$

Локальная сверхлинейная сходимость: с близостью

$\lambda_f(x) = \sqrt{\langle \nabla f(x), (\nabla^2 f(x))^{-1} \nabla f(x) \rangle}$ и начальным условием

$\lambda_f(x^0) \leq \frac{\log \frac{3}{2}}{4} \frac{\mu^{5/2}}{LM}$ справедлива следующая оценка сходимости:

$$\lambda_f(x^K) \leq \left(\frac{11dL}{\mu K}\right)^{K/2} \lambda_f(x^0).$$

Квазиньютоновские методы

L-BFGS:

Можно использовать только последние $m \approx 20$ шагов для вычисления матрицы H_{k+1} . Нужно хранить лишь m пар векторов, а не матрицу. Умножение H_{k+1} на вектор справа тоже можно реализовать за $O(dm)$.

$$\begin{aligned} H_{k+1} = & ((V_{k-1})^\top \dots (V_{k-m})^\top) H_k^0 (V_{k-m} \dots V_{k-1}) \\ & + \rho^{k-m} ((V_{k-1})^\top \dots (V_{k-m+1})^\top) s^{k-m} (s^{k-m})^\top (V_{k-m+1} \dots V_{k-1}) \\ & + \dots \\ & + \rho^{k-1} s^{k-1} (s^{k-1})^\top, \end{aligned}$$

где $V_k = I_d - \frac{y^k (s^k)^\top}{(y^k)^\top s^k}$, $\rho^k = \frac{1}{(y^k)^\top s^k}$, $H_k^0 = \frac{(s^{k-1})^\top y^{k-1}}{(y^{k-1})^\top y^{k-1}} I_d$.

Оптимизация на множествах. GD с проекцией

Выпуклая задача на выпуклом замкнутом множестве X :

$$\min_{x \in X} f(x).$$

Проекция (вып. и замк. \Rightarrow существование и единственность):

$$\Pi_X(x) := \arg \min_{y \in X} \frac{1}{2} \|x - y\|_2^2, \quad \|\Pi_X(x_1) - \Pi_X(x_2)\|_2 \leq \|x_1 - x_2\|_2.$$

GD с проекцией: возвращает точку в X после град. шага:

$$x^{k+1} = \Pi_X \left[x^k - \gamma_k \nabla f(x^k) \right].$$

Для решения выполнено: $x^* = \Pi_X(x^* - \gamma \nabla f(x^*))$, т.е. ищем стационарную точку оператора.

Итерационная сходимость и выбор шага как у GD (все док-ва по 2 свойству аналогичны). Примеры проекций:

- $X = \ell_2$ -шар радиуса R с центром в 0: $\Pi_X(x) = \min \left\{ 1, \frac{R}{\|x\|_2} \right\} x$.
- $X = \{y \in \mathbb{R}^d \mid Ay = b\}$: $\Pi_X(x) = x - A^T(AA^T)^{-1}(Ax - b)$.



Метод Франка Вульфа

Идея: на выпуклом компакте X искать точку максимально сонаправленную с антиградиентом + выпуклая комба с ней:

$$s^k = \arg \min_{s \in X} \langle s, \nabla f(x^k) \rangle,$$

$$\gamma_k = \frac{2}{k+2}, \quad x^{k+1} = (1 - \gamma_k)x^k + \gamma_k s^k.$$

Сходимость итерационная:

$$f(x^K) - f(x^*) \leq \frac{2 \max\{L \operatorname{diam}(X)^2, f(x^0) - f(x^*)\}}{K+2},$$

где $\operatorname{diam}(X) := \max_{x,y \in X} \|x - y\|_2$ – диаметр множества X .

Примеры подзадачи с готовыми решениями:

- $X = \ell_1$ -шар радиуса R с центром в 0:
 $s^* = -R \cdot \operatorname{sign}(x_i) \mathbf{e}_i, i = \arg \max_j |x_j|.$
- $X = \left\{ s \in \mathbb{R}^d \mid s_i \geq 0, \sum_{i=1}^d s_i = R \right\}$: $s^* = R \mathbf{e}_i$, где $i = \arg \min_j x_j$.

Часто ведет к разряженным решениям из-за линейной задачи.

Зеркальный спуск

Выпуклая задача на выпуклом и замкнутом множестве X :

$$\min_{x \in X} f(x).$$

Идея: использовать другие расстояния кроме Евклидового, чтобы подстроиться под геометрию и множества в задаче. Можно эффективно подстраиваться под меняющуюся геометрию (онлайн и распределенная оптимизация).

Обобщение сильной выпуклости и гладкости относительно нормы $\|\cdot\|$:

$$\frac{\mu}{2} \|x - y\|_2^2 \leq f(y) - f(x) - \langle \nabla f(x), y - x \rangle,$$

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|_* \leq L \|x - y\|.$$

Дивергенцией Брэгмана (аналог метрики)

Пусть дана дифференцируемая 1-сильно выпуклая относительно нормы $\|\cdot\|$ на множестве X функция d (аналог нормы). Дивергенция Брэгмана $V(x, y) : X \times X \rightarrow \mathbb{R}_+$ это

$$V(x, y) = d(x) - d(y) - \langle \nabla d(y), x - y \rangle.$$

Примеры:

Шар с $\|\cdot\|_2$: $d(x) = \frac{1}{2}\|x\|_2^2 \implies V(x, y) = \frac{1}{2}\|x - y\|_2^2.$

Энтропия с $\|\cdot\|_1$: $d(x) = \sum_{i=1}^d x_i \log x_i \implies V(x, y) = \sum_{i=1}^d x_i \log \frac{x_i}{y_i}.$

Выполняется теорема Пифагора, как и для Евклидового расстояния (доказательства аналогичны GD). Также любая дивергенция ограничена снизу $V(x, y) \geq \frac{1}{2}\|x - y\|_2^2$.

Зеркальный спуск 2

Минимизация ограничивающей параболы, как в GD:

$$x^{k+1} = \arg \min_{x \in X} \{ \langle \gamma_k \nabla f(x^k), x \rangle + V(x, x^k) \}$$

Эквивалентная запись

$$x^{k+1} = \Pi_X^{V(\cdot, \cdot)} \left[(\nabla d)^{-1} (\nabla d(x^k) - \gamma_k \nabla f(x^k)) \right], \quad (\nabla d)^{-1} = \nabla d^*.$$

Сходимость: на выпуклом множестве X с L -гладкой относительно нормы $\|\cdot\|$, выпуклой целевой функцией f и шагом $\gamma_k = \gamma \leq \frac{1}{L}$

$$f \left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K x^k \right) - f(x^*) \leq \frac{V(x^*, x^0)}{\gamma K}.$$

Константа гладкости отн. $\|\cdot\|$ может быть гораздо меньше, чем для $\|\cdot\|_2$ в GD с проекцией. При этом $V(x^*, x^0)$ возрастает не так сильно.

На единичном симплексе с энтропийным сетапом:

$$x_i^{k+1} = \frac{x_i^k \exp(-\gamma_k [\nabla f(x^k)]_i)}{\sum_{i=1}^d x_i^k \exp(-\gamma_k [\nabla f(x^k)]_i)}.$$

Негладкая задача

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x),$$

где f выпуклая и M -Липшицева (кусочно-линейные функции).

Критерий: M -Липшецевость функции $\longleftrightarrow \|g\|_2 \leq M, \forall g \in \partial f(\cdot)$.

Субградиентный метод (если градиент не существует)

$$g^k \in \partial f(x^k), \quad x^{k+1} = x^k - \gamma_k g^k.$$

Можно добавить проекцию, если минимизация на множестве.

Сходимость с $R = \|x^0 - x^*\|_2$ при $\gamma_k = \frac{R}{M\sqrt{K}}$:

$$f\left(\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^k\right) - f(x^*) \leq \frac{MR}{\sqrt{K}}.$$

Оптимальная оценка (медленнее чем для гладких функций из-за неточного субград), уменьшающейся по K шаг и средняя точка (подавляют неточность)

Условие на шаг в негладких задачах

Сходимость при произвольных γ_k :

$$f\left(\frac{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k x^k}{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k}\right) - f(x^*) \leq \frac{R^2}{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k} + \frac{M^2 \sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k^2}{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k}.$$

Необходимое условие сходимости: $\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k \rightarrow \infty$, $\frac{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k^2}{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k} \rightarrow 0$.

Уменьшающейся γ_k , чтобы неточный субград. не мешал, но не сильно, чтобы с любой начальной точки сойтись. Например: $\gamma_k = \frac{R}{M\sqrt{K}}$ или $\gamma_k = \frac{R}{M\sqrt{k+1}}$ (ведет к доп $\ln K$ фактору при суммировании квадратов).

Сильная выпуклость + негладкость

Липшецевость накладывает существенные ограничения на функции, например, сильно вып. и лип. на всем \mathbb{R}^d не существует. Поэтому обычно предполагают ограничение нормы субград. на ограниченной области с траекторией метода, но константа M может стать очень большой и зависит от нач. точки и функции.

Сходимость с шагом $\gamma_k = \frac{2}{\mu(k+1)}$:

$$f\left(\frac{\sum_{k=0}^{K-1} kx^k}{\sum_{k=0}^{K-1} k}\right) - f(x^*) \leq \frac{2M^2}{\mu K}.$$

Оптимальная сублинейная оценка. Все еще необходим уменьшающийся шаг, но можно уменьшаться с большими скоростями.

Адаптивные методы

Идея: сделать подбор оптимального шага $\gamma = \frac{\|x^0 - x^*\|_2}{M\sqrt{K}}$ адаптивным.

Algorithm AdaGradNorm

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $G^{-1} = 0$, параметры $\varepsilon \sim 10^{-8}$, $D > 0$, количество итераций K

- 1: **for** $k = 0, 1, \dots, K - 1$ **do**
- 2: Вычислить $g^k \in \partial f(x^k)$
- 3: $G^k = G^{k-1} + \|g^k\|_2^2$
- 4: $x^{k+1} = x^k - \frac{D}{\sqrt{G^k + \varepsilon}} g^k$

5: **end for**

Выход: $\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^k$

Идея: сделать подсчет расстояния от начальной точки до решения адаптивным.

Algorithm DoG (Distance over Gradients)

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $G^{-1} = 0$, $d_{-1} > 0$, параметр $\varepsilon \sim 10^{-8}$, количество итераций K

- 1: **for** $k = 0, 1, \dots, K - 1$ **do**
- 2: Вычислить $g^k \in \partial f(x^k)$
- 3: $G^k = G^{k-1} + \|g^k\|_2^2$
- 4: $d_k = \max(d_{k-1}, \|x^k - x^0\|_2)$
- 5: $x^{k+1} = x^k - \frac{d_k}{\sqrt{G^k + \varepsilon}} g^k$

- 6: **end for**

Выход: $\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^k$

AdaGrad

Следующий шаг — учесть неоднородность по координатам.

Algorithm AdaGrad

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $G_i^{-1} = 0$, параметры $\varepsilon \sim 10^{-8}$, $D_i > 0$, количество итераций K

1: **for** $k = 0, 1, \dots, K - 1$ **do**

2: Вычислить $g^k \in \partial f(x^k)$

3: $G_i^k = G_i^{k-1} + (g_i^k)^2$

4: $x_i^{k+1} = x_i^k - \frac{D_i}{\sqrt{G_i^k + \varepsilon}} g_i^k$

5: **end for**

Выход: $\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^k$

Для M -Липшецевой и выпуклой функции верна оценка:

$$f\left(\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^k\right) - f^* \leq \frac{3M\tilde{D}}{2\sqrt{K}},$$

где $\tilde{D} = \sum_{i=1}^d D_i$, $|x_i^k - x_i^*| \leq D_i, \forall i = \overline{1, d}, k = \overline{0, K - 1}$.

У AdaGrad знаменатель монотонно растёт, и шаг со временем может становиться слишком малым. Чтобы избежать затухания, используют экспоненциальное скользящее среднее квадратов градиентов.

Algorithm RMSProp

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $G_i^{-1} = 0$, параметры $\varepsilon \sim 10^{-8}$,

$D_i > 0$, $\beta \in [0, 1]$, количество итераций K

1: **for** $k = 0, 1, \dots, K - 1$ **do**

2: Вычислить $g^k \in \partial f(x^k)$

3: $G_i^k = \beta G_i^{k-1} + (1 - \beta)(g_i^k)^2$

4: $x_i^{k+1} = x_i^k - \frac{D_i}{\sqrt{G_i^k + \varepsilon}} g_i^k$

5: **end for**

Выход: $\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^k$

Алгоритм Adam объединяет идеи RMSProp и момента: два моментума $\beta_1, \beta_2 \in [0, 1]$, обычно выбираются 0.9 и 0.999 соответственно.

Algorithm Adam

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $G_i^{-1} = 0$, $v^{-1} = 0$, параметры $\beta_1, \beta_2 \in [0, 1]$, $\varepsilon \sim 10^{-8}$, $D_i > 0$, количество итераций K

- 1: **for** $k = 0, 1, \dots, K - 1$ **do**
- 2: Вычислить $g^k \in \partial f(x^k)$
- 3: $v^k = \beta_1 v^{k-1} + (1 - \beta_1)g^k$
- 4: $\hat{v}^k = v^k / (1 - \beta_1^{k+1})$
- 5: $G_i^k = \beta_2 G_i^{k-1} + (1 - \beta_2)(g_i^k)^2$
- 6: $\hat{G}^k = G^k / (1 - \beta_2^{k+1})$
- 7: $x_i^{k+1} = x_i^k - \frac{D_i}{\sqrt{\hat{G}_i^k + \varepsilon}} \hat{v}_i^k$

- 8: **end for**

Выход: $\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^k$

В классическом Adam если применяется ℓ_2 -регуляризация, то градиент масштабируется адаптивным шагом. AdamW отделяет регуляризацию.

Algorithm AdamW

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $G_i^{-1} = 0$, $v^{-1} = 0$, параметры $\beta_1, \beta_2 \in [0, 1]$, $\lambda > 0$, $\varepsilon \sim 10^{-8}$, $D_i > 0$, кол-во итераций K

- 1: **for** $k = 0, 1, \dots, K - 1$ **do**
- 2: Вычислить $g^k \in \partial f(x^k)$
- 3: $v^k = \beta_1 v^{k-1} + (1 - \beta_1)g^k$
- 4: $\hat{v}^k = v^k / (1 - \beta_1^{k+1})$
- 5: $G_i^k = \beta_2 G_i^{k-1} + (1 - \beta_2)(g_i^k)^2$
- 6: $\hat{G}^k = G^k / (1 - \beta_2^{k+1})$
- 7: $x_i^{k+1} = x_i^k - \frac{D_i}{\sqrt{\hat{G}_i^k + \varepsilon}} \hat{v}_i^k - \lambda D_i x_i^k$

- 8: **end for**

Выход: $\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^k$

Проксимальный оператор (обобщение градиентного шага)

$$\text{prox}_r(x) = \arg \min_{\tilde{x} \in \mathbb{R}^d} \left(r(\tilde{x}) + \frac{1}{2} \|x - \tilde{x}\|^2 \right).$$

Примеры:

- $r(x) = \lambda \|x\|_1$, тогда $[\text{prox}_r(x)]_i = [|x_i| - \lambda]_+ \cdot \text{sign}(x_i)$,
- $r(x) = \frac{\lambda}{2} \|x\|_2^2$, тогда $\text{prox}_r(x) = \frac{x}{1+\lambda}$.

Свойства:

- $\text{prox}_r(x) = y \iff x - y \in \partial r(y)$.
- $\langle x - y, \text{prox}_r(x) - \text{prox}_r(y) \rangle \geq \|\text{prox}_r(x) - \text{prox}_r(y)\|_2^2$,
- $\|\text{prox}_r(x) - \text{prox}_r(y)\|_2 \leq \|x - y\|_2$.

Композитная задача и проксимальный метод

$\min_{x \in \mathbb{R}^d} [f(x) + r(x)]$ – композитная задача,

где f является L -гладкой выпуклой функцией, r выпуклой (необязательно гладкой, но проксимально дружественной функцией).

Проксимальный метод (сначала GD шаг по f , потом по r):

$$x^{k+1} = \text{prox}_{\gamma_k r}(x^k - \gamma_k \nabla f(x^k)).$$

Альтернативная запись:

$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k (\nabla f(x^k) + \partial r(x^{k+1})).$$

Сходимость: Композитная задача с L -гладкой, μ -сильно выпуклой целевой функцией f и выпуклой r при $\gamma_k = \frac{1}{L}$:

$$\|x^K - x^*\|_2^2 \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^K \|x^0 - x^*\|_2^2.$$

Точка x^* — неподвижная точка для $\text{prox}_{\gamma_k r}(\cdot - \gamma_k \nabla f(\cdot))$

Оптимизация с ограничениями. Штрафная функция

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} \quad & f(x), \\ \text{s.t.} \quad & f_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, n, \\ & h_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, m. \end{aligned} \tag{1}$$

Решение обычно располагается на границе допустимого множества.

Идея: добавить штраф за выход из множества, постепенно увеличивать силу штрафа, приближаясь к решению.

Штрафная функция f_ρ притягивает к решению извне множества:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left[f_\rho(x) = f(x) + \rho \cdot \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (f_i^+)^2(x) + \rho \cdot \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m h_j^2(x) \right].$$

Пусть все функции непрерывны и $\{x \in \mathbb{R}^d \mid f(x) \leq f(x^*)\}$ ограничено.

Тогда для любого $e > 0$ существует $\rho(e) > 0$ такое, что множество решений штрафной задачи X_ρ^* для любых $\rho \geq \rho(e)$ содержится в

$$X_e^* = \{x \in \mathbb{R}^d \mid \exists x^* \text{ решение задачи (1)} : \|x - x^*\|_2 \leq e\}.$$

Метод штрафных функций

Алгоритм:

- ① решить безусловную задачу $\min_{x \in \mathbb{R}^d} f_\rho(x)$ для текущего ρ , можно приближенно, используя один или несколько шагов стандартных методов;
- ② увеличить ρ (увеличить силу штрафов);
- ③ использовать предыдущее решение как начальную точку;

Особенности:

- Условная задача превращена в безусловную.
- Подходим извне допустимого множества к границе с решением. Увеличение ρ приближает к исходной задаче.
- Даже при большом ρ может наблюдаться нарушение ограничений, что подходит не для всех задач.
- Увеличение ρ влечет за собой увеличение обусловленности задачи (константа Липшица градиента будет сильно расти). А значит задачу будет сложнее решать.

Двойственный подъем

Рассмотрим задачу с ограничениями

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b. \end{aligned}$$

Градиентный подъем для максимизации двойственной функции g :

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \gamma_k \nabla_{\lambda_k} \left(\inf_{x \in \mathbb{R}^d} [f(x) + \lambda_k^\top (Ax - b)] \right).$$

Перепишем иначе (Теорема об огибающей):

$$x^{k+1} = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^d} [f(x) + \lambda_k^\top (Ax - b)] = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^d} L(x, \lambda^k),$$

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \gamma_k \nabla_{\lambda_k} (f(x^{k+1}) + \lambda_k^\top (Ax^{k+1} - b)) = \lambda^k + \gamma_k (Ax^{k+1} - b).$$

В цикле решаем задачу для x^{k+1} , можно использовать один или несколько шагов стандартных методов, потом один шаг для λ^{k+1} .

Augmented Lagrangian, Hestenes-Powell

Рассмотрим эквивалентную задачу с аугментацией

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} \quad & f(x) + \rho \|Ax - b\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b. \end{aligned}$$

Лагранжиан зависит от параметра ρ и сильно выпуклый по x :

$$L_\rho(x, \lambda) = f(x) + \lambda_k^\top (Ax - b) + \rho \|Ax - b\|_2^2.$$

Двойственный подъем

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \arg \min_{x \in \mathbb{R}^d} L_\rho(x, \lambda^k), \\ \lambda^{k+1} &= \lambda^k + \rho(Ax^{k+1} - b). \end{aligned}$$

Особенности: надо подбирать только параметр ρ , сходится более стабильно из-за сильной выпуклости от аугментации (по сути это спуск-подъем).

$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^{d_x}, y \in \mathbb{R}^{d_y}} f(x) + g(y), \\ & \text{s.t. } Ax + By = c, \end{aligned}$$

где $A \in \mathbb{R}^{n \times d_x}$, $B \in \mathbb{R}^{n \times d_y}$, $c \in \mathbb{R}^n$.

Регуляризация:

$$\begin{aligned} & \min_x f(x) + \alpha \|x\|_1 & \min_{x,y} f(x) + \alpha \|y\|_1, \\ & \text{s.t. } x = y. \end{aligned}$$

Легко считать проксимальный оператор для отдельной функции.

Распределенная оптимизация:

$$\begin{aligned} & \min_x \sum_{i=1}^n f_i(x) \quad \Leftrightarrow \quad \min_{x_i, y} \sum_{i=1}^n f_i(x_i), \\ & \text{s.t. } x_i = y, i \in \overline{1, n}. \end{aligned}$$

Каждую переменную x_i и функцию f_i можно оптимизировать отдельно.

Аугментация

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^{d_x}, y \in \mathbb{R}^{d_y}} \quad & f(x) + g(y) + \frac{\rho}{2} \|Ax + By - c\|_2^2, \\ \text{s.t.} \quad & Ax + By = c. \end{aligned}$$

Минимум задачи тот же самый и не зависит от ρ . Лагранжиан:

$$L_\rho(x, y, \lambda) = f(x) + g(y) + \lambda^\top(Ax + By - c) + \frac{\rho}{2} \|Ax + By - c\|_2^2.$$

Двойственный подъем:

$$\begin{aligned}x^{k+1} &= \arg \min_{x \in \mathbb{R}^{d_x}} L_\rho(x, y^k, \lambda^k), \\y^{k+1} &= \arg \min_{y \in \mathbb{R}^{d_y}} L_\rho(x^{k+1}, y, \lambda^k) \\ \lambda^{k+1} &= \lambda^k + \rho \left(Ax^{k+1} + By^{k+1} - c \right),\end{aligned}$$

Вернуть $\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K x^k, \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K y^k, \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \lambda^k$.

Особенности: Вместо шага подбираем только ρ . Причем ρ не надо устремлять к бесконечности как в других методах. Позволяет разделять вычисления (распределенная оптимизация) и добавлять проксимальные операторы (l_1 регуляризации).

Theorem

Если функции f и g являются выпуклыми и дружественными с точки зрения вычислений $\arg \min$, то ADMM имеет следующую оценку сходимости для любого $x \in \mathbb{R}^{d_x}$, $y \in \mathbb{R}^{d_y}$, $\lambda \in \mathbb{R}^n$

$$L_0 \left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K x^k, \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K y^k, \lambda \right) - L_0 \left(x, y, \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \lambda^k \right) \leq \frac{1}{2K} \|z^0 - z\|_P^2,$$

где L_0 – Лагранжиан без аугментации, $P = \begin{pmatrix} \rho A^T A & 0 & -A^T \\ 0 & 0 & 0 \\ -A & 0 & \frac{1}{\rho} I \end{pmatrix}$,

$$z^0 = \begin{pmatrix} x^0 \\ y^0 \\ \lambda^0 \end{pmatrix}$$

Барьерная функция

$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \\ & \text{s.t. } f_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \tag{2}$$

и допустимое множество $G = \{x \in \mathbb{R}^d \mid f_i(x) \leq 0, \quad i = \overline{1, n}\}$.

Идея: добавить сдерживающий внутри G барьер и постепенно уменьшать его силу, приближаясь к решению.

Барьером будем называть функцию $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$:

- F непрерывно дифференцируема на $\text{int}G$;
- Для любой последовательности $\{x_i\} \in \text{int}G$ такой, что $x_i \rightarrow x \in \partial G$ (граница множества G), выполнено $F(x_i) \rightarrow +\infty$.

Примеры:

- Барьер Кэрролла: $F(x) = -\sum_{i=1}^n \frac{1}{f_i(x)}$;
- Логарифмический барьер: $F(x) = -\sum_{i=1}^n \ln(-f_i(x))$.

Барьерная задача: $\min_{x \in \text{int}G} \left[F_\rho(x) = f(x) + \frac{1}{\rho} F(x) \right]$.

Метод внутренней точки

Сходимость: Для любого $\epsilon > 0$ существует $\rho(\epsilon) > 0$ такое, что множество решений барьерной задачи X_ρ^* для любых $\rho \geq \rho(\epsilon)$ содержится в

$$X_\epsilon^* = \{x \in G \mid \exists x^* \text{ решение задачи (2)} : \|x - x^*\|_2 \leq \epsilon\}.$$

Алгоритм:

- ① Увеличить $\rho_k > \rho_{k-1}$ (уменьшить силу барьера)
- ② С помощью некоторого метода решить безусловную задачу $\min_{x \in \mathbb{R}^d} F_{\rho_k}(x)$ со стартовой точкой x_k . Можно приближенно, используя один или несколько шагов стандартных методов.
Гарантировать, что выход метода x_{k+1} будет близок к реальному решению $x^*(\rho_k)$.

Всегда находимся внутри допустимого множества и подходим к границе с решением!

Самосогласованный барьер

Ограничивает темпы изменения кривизны и роста функции при приближении к границе. Позволяет четко оценить необходимые точность решения подзадачи и увеличение ρ .

Definition

Функция $B : \text{int } G \rightarrow \mathbb{R}$ является ν -самосогласованным барьером ($\nu \geq 1$) на множестве $\text{int } G$, если:

- B — самосогласована на $\text{int } G$: для любых $x \in G$ и $h \in \mathbb{R}^d$:

$$\left| \frac{d^3}{dt^3} f(x + th) \right| \leq 2[\langle h, \nabla^2 f(x)h \rangle]^{\frac{3}{2}}.$$

- Для любой последовательности $\{x_i\} \subset \text{int } G$, сходящейся к $x \in \partial G$, выполнено $B(x_i) \rightarrow +\infty$.
- Для любых $x \in \text{int } G$ и $h \in \mathbb{R}^d$ выполнено условие:

$$|\langle h, \nabla B(x) \rangle| \leq \sqrt{\nu} \sqrt{\langle h, \nabla^2 B(x)h \rangle}.$$

Примеры самосогласованных барьеров

- Предложим n -самосогласованный барьер для множества выпуклых ограничений неравенств G с условием Слейтера: $B(x) = -\sum_{i=1}^n \log(-f_i(x))$.
- Для конуса $\{(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \mid t \geq \|x\|_2\}$ подойдет 2-самосогласованный барьер $B(t, x) = -\log(t^2 - \langle x, x \rangle)$.
- Для матриц из \mathbb{S}_+^d подойдет d -самосогласованный барьер $B(X) = -\log \det(X)$.

Свойства:

- Линейная комбинация ν -самосогласованных барьеров $B_i : \text{int } G_i \rightarrow \mathbb{R}$ с коэффициентами $\alpha_i \geq 1$ на $\cap \text{int } G_i$ является $\sum_{i=1}^n \alpha_i \nu_i$ -самосогласованным барьером.
- Композиция ν -самосогласованного барьера и аффинного преобразования является ν -самосогласованным барьером.

Метод внутренней точки + самосогласованный барьер

Общая задача:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x)$$

$$\text{s.t. } f_i(x) \leq 0.$$

$$\min_{t \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}^d} t$$

$$\text{s.t. } f_i(x) \leq 0,$$

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \langle c, x \rangle$$

$$f(x) - t \leq 0.$$

$$\text{s.t. } f_i(x) \leq 0.$$

Используем ν -самосогласованный барьер B и объекты:

$$\Phi_\rho(x) = \rho \langle c, x \rangle + B(x), \lambda(\Phi_\rho, x) = \sqrt{\langle (\nabla^2 \Phi_\rho(x))^{-1} \nabla \Phi_\rho(x), \nabla \Phi_\rho(x) \rangle}.$$

Будем применять метод внутренней точки и решать подзадачу с помощью одного шага демпфиированного метода Ньютона

Метод внутренней точки (демпфированный метод Ньютона)

Algorithm Метод внутренней точки (демпфированный метод Ньютона)

Вход: стартовая точка $x^0 \in G$ такая, что $\lambda(\Phi_{\rho_{-1}}, x^0) \leq e_1$, параметры $e_1, e_2 \in (0, 1)$, стартовое значение параметра $\rho_{-1} > 0$, K

1: **for** $k = 0, 1, \dots, K - 1$ **do**

2: $\rho_k = (1 + \frac{e_2}{\sqrt{\nu}})\rho_{k-1}$

3: $x^{k+1} = x^k - \frac{1}{1+\lambda(\Phi_{\rho_k}, x^k)}[\nabla^2\Phi_{\rho_k}(x^k)]^{-1}\nabla\Phi_{\rho_k}(x^k)$

4: **end for**

Выход: x^K

Возможно, понадобится больше одного шага метода Ньютона, но при правильном соотношении e_1 и e_2 достаточно ровно одного. Также начальное приближение должно быть достаточно близко.

Сходимость метода внутренней точки

С настройкой $e_1 = 0.05$, $e_2 = 0.08$ и ν -самосогласованным барьером метод с выпуклыми ограничениями неравенства достигает ε решения по функции ($f(x) - f^* \leq \varepsilon$) за

$$K = \tilde{O} \left(\sqrt{\nu} \log \frac{\nu}{\varepsilon \rho_0} \right) \text{ итераций.}$$

- Линейная скорость по ε и полиномиальная зависимость от количества переменных и ограничений.
- На практике можно куда быстрее изменять ρ , и число итераций метода Ньютона не превышает 30 – 50.

Седловая задача

- Функция $L(x, y) : X \times \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$. Контекст: x и λ это игроки, а $L(x, y)$ – цена, которую платит игрок x игроку λ . Все пытаются получить наилучшие условия.
- Седловая точка или равновесие (x^*, λ^*) – это такая точка, что для любых значений $x \in X, \lambda \in \Lambda$: $L(x, \lambda^*) \geq L(x^*, \lambda^*) \geq L(x^*, \lambda)$.
- Седловые точки существуют \Leftrightarrow они решают сразу две задачи

$$\max_{\lambda \in \Lambda} \min_{x \in X} L(x, \lambda) = \min_{x \in X} \max_{\lambda \in \Lambda} L(x, \lambda).$$

В общем случае, $\max_{\lambda \in \Lambda} \min_{x \in X} L(x, \lambda) \leq \min_{x \in X} \max_{\lambda \in \Lambda} L(x, \lambda)$. Для существования седловых точек достаточно, чтобы X, Λ были выпуклые и компактные + $L(x, \lambda)$ непрерывна и выпукла-вогнута: выпукла по x (фикс λ) и вогнута по λ (фикс x).

Связь с оптимизацией

Рассмотрим задачу условной оптимизации:

$$\begin{aligned} \min_{x \in X} \quad & f_0(x) \\ \text{s.t.} \quad & f_i(x) \leq 0, \quad i = \overline{1, m} \\ & Ax = b. \end{aligned}$$

Лагранжиан для этой задачи строится следующим образом:

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \nu^\top (Ax - b).$$

- С условием Слейтера любой набор оптимальных переменных x^* и (λ^*, ν^*) является седловой точкой лагранжиана:

$$L(x, \lambda^*, \nu^*) \geq g(\lambda^*, \nu^*) = f_0(x^*) = L(x^*, \lambda^*, \nu^*) \geq L(x^*, \lambda, \nu).$$

Решаем седловую задачу, максимизируя двойственную функцию:

$$\max_{\lambda \geq 0, \nu \in \mathbb{R}^d} \min_{x \in X} L(x, \lambda, \nu).$$

Седловая задача и Спуск-Подъем

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \max_{\lambda \in \mathbb{R}^d} L(x, \lambda),$$

где L выпукла-вогнута и L -гладкая функция

$$\|\nabla_x L(x_1, \lambda_1) - \nabla_x L(x_2, \lambda_2)\|_2^2 \leq \frac{L^2}{2}(\|x_1 - x_2\|_2^2 + \|\lambda_1 - \lambda_2\|_2^2),$$
$$\|\nabla_\lambda L(x_1, \lambda_1) - \nabla_\lambda L(x_2, \lambda_2)\|_2^2 \leq \frac{L^2}{2}(\|x_1 - x_2\|_2^2 + \|\lambda_1 - \lambda_2\|_2^2).$$

Обобщения GD расходятся или сходятся неоптимально особенно с просто выпукло-вогнутыми функциями ($L(x, y) = xy$):

Градиентный спуск подъем (Gradient Descent Ascent, GDA)

$$x^{k+1} = x^k - \gamma \nabla_x L(x^k, \lambda^k), \quad \lambda^{k+1} = \lambda^k + \gamma \nabla_\lambda L(x^k, \lambda^k)$$

или поочередный (Alt-GDA)

$$x^{k+1} = x^k - \gamma \nabla_x L(x^k, \lambda^k), \quad \lambda^{k+1} = \lambda^k + \gamma \nabla_\lambda L(x^{k+1}, \lambda^k).$$

Экстраградиент

Идея: посмотреть в будущее, взять оттуда градиент и сходить по нему.

Экстраградиент

$$x^{k+1/2} = x^k - \gamma \nabla_x L(x^k, \lambda^k)$$

$$\lambda^{k+1/2} = \lambda^k + \gamma \nabla_\lambda L(x^k, \lambda^k)$$

$$x^{k+1} = x^k - \gamma \nabla_x L(x^{k+1/2}, \lambda^{k+1/2})$$

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \gamma \nabla_\lambda L(x^{k+1/2}, \lambda^{k+1/2})$$

Вернуть $\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^{k+1/2}, \frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} \lambda^{k+1/2}$

Экстраградиент: сходимость

Пусть дана выпукло-вогнутая и L -гладкая функция $L(x, \lambda)$. Для любого $u \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^n$ и для любого $\gamma \leq \frac{1}{L}$:

$$\left(L\left(\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^{k+1/2}, u_\lambda\right) - L\left(u_x, \frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} \lambda^{k+1/2}\right) \right) \leq \frac{\|z^0 - u\|_2^2}{2\gamma K}$$

Метрика для решения на компактах: $\max_\lambda L(x^k, \lambda) - \min_x L(x, \lambda^k)$. См. $L(x, \lambda) = (x - 1)(\lambda + 1)$ с $x^* = 1, \lambda = -1$.

- Можно добавить проекции и решать седловую задачу на множествах $X \neq \mathbb{R}^d$ и $\Lambda \neq \mathbb{R}^n$ (2 проекции + 2 оракула градиента).
- Можно получить линейную сходимость для сильно выпуклых–сильно вогнутых задач.
- Часто применяют для решения двойственной задачи.

Модификации

Новые обозначения: $z = (x, \lambda)^\top$, $F(z) = (\nabla_x L(x, \lambda), -\nabla_\lambda L(x, \lambda))^\top$.

- **Past Extra–Gradient:**

$$z^{k+1/2} = \Pi_Z[z^k - \gamma_k F(z^{k-1/2})], \quad z^{k+1} = \Pi_Z[z^k - \gamma_k F(z^{k+1/2})].$$

Всего 1 градиент + 2 проекции.

- **Reflected Gradient:** смотрим градиент из прошлого

$$z^{k+1/2} = z^k - (z^{k-1} - z^k), \quad z^{k+1} = \Pi_Z[z^k - \gamma_k F(z^{k+1/2})].$$

Всего 1 градиент + 1 проекция.

- **Forward–Backward–Forward:** Смотрим вперед и на 2ом шаге

$$z^{k+1/2} = \Pi_Z[z^k - \gamma_k F(z^k)], \quad z^{k+1} = z^{k+1/2} + \gamma_k F(z^k) - \gamma_k F(z^{k+1/2}).$$

Всего 2 градиента + 1 проекция.

Модификации

- **Optimistic Gradient:** смотрим градиент из прошлого

$$z^{k+\frac{1}{2}} = \Pi_Z[z^k - \gamma_k F(z^{k-\frac{1}{2}})], z^{k+1} = z^{k+\frac{1}{2}} + \gamma_k F(z^{k-\frac{1}{2}}) - \gamma_k F(z^{k+\frac{1}{2}}).$$

Всего 1 градиент + 1 проекция.

Все алгоритмы выше сходятся как $1/K$.

- **Экстраград с моментумом** $\tau_k > 0$: уменьшает вихрения

$$z^{k+1/2} = \Pi_Z[z^k - \gamma_k F(z^k)], z^{k+1} = \Pi_Z[z^k - \gamma_k F(z^{k+1/2}) + \tau_k(z^k - z^{k-1})]$$

- **Alt-GDA с моментумом** $\tau_k < 0$: хорош на практике

$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k \nabla_x L(x^k, \lambda^k) + \tau_k(x^k - x^{k-1}),$$

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \gamma_k \nabla_\lambda L(x^{k+1}, \lambda^k) + \tau_k(\lambda^k - \lambda^{k-1}).$$

Прямо-двойственный метод (Chambolle–Pock Algorithm)

- Рассмотрим задачу минимизации с выпуклой и гладкой f :

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b, \end{aligned}$$

с Лангранжианом $L(x, \lambda) = f(x) - \lambda^\top(Ax - b)$.

- Для следующей задачи можно использовать сопряженную функцию:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x) + h(Ax) \Leftrightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^d} \max_{\lambda} \{f(x) + \lambda^\top Ax - h^*(\lambda)\}.$$

- В общем случае Лагранжиан $L(x, \lambda) = f(x) - \lambda^\top Ax + g(\lambda)$ с выпуклой, замкнутой и гладкой регуляризацией g .

Algorithm Прямо-двойственный алгоритм

```
1: for  $k = 0, 1, \dots, K - 1$  do
2:    $x^{k+1} = x^k - \gamma_k(\nabla f(x^k) - A^\top \lambda^k)$ 
3:    $\lambda^{k+1} = \lambda^k - \gamma_k(\nabla g(\lambda^k) + A(2x^{k+1} - x^k))$ 
4: end for
```

Выход: $\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K x^k, \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \lambda^k$

Сходится одинаково как экстраградиент. В отличие от ADMM и двойственного подъема, переменные x^k и λ^k обновляются вместе эффективно, как у экстраградиента. Можно встроить проксимальный оператор для негладких f, g и добавить ускорение.

Стохастическая оптимизация

Онлайн-постановка:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} [f(x) := \mathbb{E}_{\xi \sim D}[f(x, \xi)]].$$

Бесконечная выборка для семплирования.

Оффлайн-постановка:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left[f(x) := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [f(x, \xi_i)] \right]$$

Конечная выборка, но полный градиент дорогой \Rightarrow считаем частично.

Предположения на оценку градиента (несмещенность и ограничение дисперсии):

$$\mathbb{E}_\xi[\nabla f(x, \xi)] = \nabla f(x), \quad \mathbb{E}_\xi[\|\nabla f(x, \xi) - \nabla f(x)\|_2^2] \leq \sigma^2.$$

SGD:

$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k \nabla f(x^k, \xi^k).$$

SGD Сходимость

Задача безусловной стохастической оптимизации с L -гладкой, μ -сильно выпуклой функцией f решается с помощью SGD с $\gamma_k \leq \frac{1}{L}$:

$$\mathbb{E} [\|x^{k+1} - x^*\|^2] \leq (1 - \gamma_k \mu) \mathbb{E} [\|x^k - x^*\|^2] + \gamma_k^2 \sigma^2.$$

Оценка разбилась на детерминированную часть и на стохастическую.
Постоянный шаг: линейная сходимость до плато и осцилляция
вокруг решения

$$\mathbb{E} [\|x^K - x^*\|^2] \leq (1 - \gamma\mu)^K \|x^0 - x^*\|^2 + \frac{\gamma\sigma^2}{\mu}.$$

Модификации SGD

- **Batching:** параллельно вычислять более точную среднюю оценку

$$\nabla f(x^k, \xi^k) \rightarrow \frac{1}{b} \sum_{j \in S^k} \nabla f(x, \xi_j^k).$$

Уменьшение дисперсии с σ до σ/\sqrt{b} в оценках выше.

- **Weighting:** в качестве ответа давать среднее $\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^k$ — уменьшает осцилляции. Можно брать произвольные веса ω_k и ответ $\frac{\sum_{k=0}^{K-1} \omega_k x^k}{\sum_{k=0}^{K-1} \omega_k}$ — например, сглаживание уже вблизи решения.
- **Momentum:** Аналогично усреднению уменьшает осцилляции + ускоряет детерминированную часть оценки сходимости алгоритма.
- **Clipping, normalization, sign:** полезно дополнительно обрезать оценки градиента, чтобы сделать алгоритм устойчивым к тяжелым шумам и добиться сходимости с высокой вероятностью.

Уменьшающийся шаг

- $\gamma_k = \frac{2}{\mu(k+1)}$:

$$\mathbb{E}[\|x^K - x^*\|_2^2] \leq \frac{\exp(8L^2/\mu^2)}{K^2} (\|x^0 - x^*\|_2^2 + \frac{\sigma^2}{L^2}) + \frac{8\sigma^2 \log K}{\mu^2 K}.$$

- $\gamma_k = \frac{2}{\mu\sqrt{k+1}}$:

$$\mathbb{E}[\|x^K - x^*\|_2^2] \leq 2K^{16L^2/\mu^2} \exp(-\frac{\sqrt{K}}{2}) (\|x^0 - x^*\|_2^2 + \frac{\sigma^2}{L^2}) + \frac{8\sigma^2}{\mu^2 \sqrt{K}}.$$

- Чтобы сохранить линейную сходимость от GD в начале, сначала шаг постоянный, потом начинает уменьшаться + появляется возрастающий weighting

Появилась сублинейная сходимость до точного решения. Можно делать батчинг.

Выпуклые гладкие функции

Сходимость при произвольных $\gamma_k \leq \frac{1}{2L}$ с $R = \|x^0 - x^*\|_2$:

$$\mathbb{E} \left[f \left(\frac{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k x^k}{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k} \right) \right] - f(x^*) \leq \frac{R^2}{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k} + \frac{\sigma^2 \sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k^2}{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k}.$$

Необходимое условие сходимости: $\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k \rightarrow \infty$, $\frac{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k^2}{\sum_{k=0}^{K-1} \gamma_k} \rightarrow 0$.

Уменьшающейся γ_k , чтобы шум из оценки не мешал, но не сильно, чтобы с любой начальной точки сойтись. Например: при $\gamma_k = \frac{R}{\sigma\sqrt{K}}$

$$\mathbb{E} \left[f \left(\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^k \right) \right] - f(x^*) \leq \frac{\sigma R}{\sqrt{K}}.$$

На практике берут $\gamma_k = \frac{R}{\sigma\sqrt{k+1}}$ (ведет к доп $\ln K$ фактору в оценке).

Нижние оценки

Нижняя оценка для стох. методов первого порядка и L -гладких μ -сильно выпуклых функций:

$$\mathbb{E}[f(x^K)] - f^* = \Omega\left(\left(1 - \sqrt{\frac{\mu}{L}}\right)^K LR^2 + \frac{\sigma^2}{\mu K}\right).$$

Даже с нормальным шумом дисперсия не падает быстрее $1/\sqrt{K}$.
Для просто гладких функций:

$$\mathbb{E}[f(x^K)] - f^* = \Omega\left(\frac{LR^2}{K^2} + \frac{\sigma R}{\sqrt{K}}\right).$$

- Оценки достигаются на ускоренных версиях SGD с уменьшающимся шагом, при этом в стох. слагаемых SGD оптimalен, что даже более важно в приложениях. К тому же в невыпуклом случае, GD оптimalен, так что и SGD оптimalен по обоим компонентам.

Негладкая стох оптимизация

В стох методах можно вместо зашумленной оценки градиента использовать оценку субградиента. При этом стох. шум и неточность из-за недифф. — это два раздельных шума вместе портящих сходимость. Например, оптимальная сходимость субградиентного спуска для выпуклых липш. функций с $\gamma_k = \frac{R}{(M+\sigma)\sqrt{K}}$

$$\mathbb{E} \left[f \left(\frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} x^k \right) \right] - f(x^*) \leq \frac{MR}{\sqrt{K}} + \frac{\sigma R}{\sqrt{K}}.$$

Для μ -сильно вып с $\gamma_k = \frac{2}{\mu(k+1)}$

$$\mathbb{E} \left[f \left(\frac{\sum_{k=0}^{K-1} kx^k}{\sum_{k=0}^{K-1} k} \right) \right] - f(x^*) \leq \frac{2M^2}{\mu K} + \frac{2\sigma^2}{\mu K}.$$

Так стох. слагаемые гладких и негладких оценок совпадают, а стох. шум и неточность субград. действуют одинаково, и константы M и σ просто складываются. Можно использовать адаптивные методы.

$$\min_x f(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i(x).$$

Идея: уменьшаем с каждой итерацией дисперсию оценки градиента g^k до нуля, чтобы $g^k \rightarrow \nabla f(x^*) = 0$ при $x^k \rightarrow x^*$.

Алгоритм SAGA:

Сгенерировать независимо i_k

$$g^k = \nabla f_{i_k}(x^k) - y_{i_k}^k + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n y_j^k$$

$$y_i^{k+1} = \begin{cases} \nabla f_i(x^k), & \text{если } i = i_k \\ y_i^k, & \text{иначе} \end{cases}$$

$$x^{k+1} = x^k - \gamma g^k$$

Несмешенная оценка: $\mathbb{E}_{i_k} [g^k | x^k] = \nabla f(x^k)$.

О сходимости SAGA

y_i^k запоминает с запаздыванием $\nabla f_i(x^k)$, а $\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n y_j^k$ запоминает $\nabla f(x^k)$. При $x^k \rightarrow x^*$ имеем, что $y_j^k \rightarrow \nabla f_j(x^*)$, и $\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n y_j^k \rightarrow \nabla f(x^*) = 0$, значит $g^k \rightarrow 0$.

Сходимость. Пусть задача безусловной стохастической оптимизации вида конечной суммы с L -гладкими, выпуклыми функциями f_i и μ -сильно выпуклой целевой функцией f решается с помощью SAGA с $\gamma \leq \frac{1}{6L}$. Тогда получается следующая **полностью линейная** итерационная сложность:

$$\mathcal{O}\left(\left[n + \frac{L}{\mu}\right] \log \frac{1}{\varepsilon}\right).$$