

Лабораторная работа 3:

Метод барьеров.

Срок сдачи: 31 мая 2024 (пятница), 23:59

1 Метод барьеров

Метод барьеров (также называемый методом внутренней точки или методом внутренних штрафов) является методом решения условных задач оптимизации с ограничениями вида неравенств:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \{f(x) : g_i(x) \leq 0 \text{ для всех } 1 \leq i \leq m\} \quad (1)$$

где $f, g_1, \dots, g_m : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ - дважды непрерывно дифференцируемые функции, $x \in \mathbb{R}^n$ - целевая переменная.

1.1 Общая идея

Основная идея метода барьеров заключается в сведении исходной условной задачи (1) к последовательности специальным образом построенных безусловных задач, решения которых сходятся к решению исходной условной задачи. Это делается с помощью барьерной функции.

Пусть Q - множество, задаваемое функциональными ограничениями g_1, \dots, g_m :

$$Q := \{x \in \mathbb{R}^n : g_i(x) \leq 0 \text{ для всех } 1 \leq i \leq m\}.$$

Барьерной функцией (или функцией внутренних штрафов) для множества Q называется любая функция $F : \text{int } Q \rightarrow \mathbb{R}$, определенная на внутренности множества Q и являющаяся достаточно гладкой, которая обладает барьерным свойством: $F(x) \rightarrow +\infty$ при приближении x к границе множества Q изнутри.

Имея в распоряжении барьерную функцию, определим для каждого $t \geq 0$ вспомогательную функцию $f_t : \text{int } Q \rightarrow \mathbb{R}$ по формуле

$$f_t(x) := tf(x) + F(x)$$

Оказывается, что при $t \rightarrow +\infty$ точка $x^*(t)$ сходится к множеству решений исходной условной задачи (1). Обозначим $x^*(t) := \operatorname{argmin}_{x \in \text{int } Q} f_t(x)$. Множество точек $\{x^*(t) : t \geq 0\}$ называется центральным путем. Таким образом, для решения исходной условной задачи (1), можно использовать следующую схему отслеживания пути (она же и есть метод барьеров).

Общая схема метода барьеров

- (a) Выбрать начальное приближение $x_0 \in \text{int } Q$ и начальный параметр $t_0 > 0$.
- (b) На каждой итерации $k \geq 0$:
 1. Вычислить точку

$$x_{k+1} := \operatorname{argmin}_{y \in \text{int } Q} f_{t_k}(y), \quad (2)$$

используя некоторый метод безусловной оптимизации с начальной точкой x_k .

2. Увеличить параметр t : выбрать $t_{k+1} > t_k$ (чтобы в итоге $t_k \rightarrow +\infty$).

1.2 Решение вспомогательной задачи

Заметим, что задача оптимизации, возникающая на каждой итерации метода барьеров в реальности является “безусловной”, несмотря на присутствие в этой задаче условия $x \in \text{int } Q$. Действительно, за счет барьерного свойства целевая функция f_t стремится к $+\infty$ при приближении к границе множества Q , поэтому никакой “разумный” метод оптимизации достаточно близко к границе множества Q никогда не подойдет, и, с точки зрения самого метода, целевая функция как бы задана всюду. Тем не менее, здесь необходима определенная аккуратность.

Например, пусть для решения вспомогательной задачи (2) используется метод спуска: сначала $y_0 := x_k$, далее на каждой итерации $\ell \geq 0$

строится направление спуска $d_\ell \in \mathbb{R}^n$ для функции f_{t_k} в точке y_ℓ , и выполняется шаг

$$y_{\ell+1} := y_\ell + \alpha_\ell d_\ell,$$

где $\alpha_\ell \geq 0$ — длина шага. Поскольку метод барьеров по построению всегда работает с внутренними точками множества Q (отсюда и альтернативное название - метод внутренней точки), то для всех достаточно маленьких длин шагов α_ℓ новая точка $y_{\ell+1}$ будет принадлежать множеству Q , а значение функции f_{t_k} в этой точке уменьшится по сравнению с текущей точкой y_ℓ . Однако, если длина шага α_ℓ выбрана слишком большой, то точка $y_{\ell+1}$ может вообще оказаться за пределами множества Q — такое вполне может произойти при подборе шага в стандартном алгоритме линейного поиска. Чтобы избежать этой проблемы, стандартную процедуру линейного поиска необходимо модифицировать запретить ей вычислять функцию в точках за пределами множества Q .

Согласно определению множества Q , чтобы $y_\ell + \alpha d_\ell \in \text{int } Q$, длина шага $\alpha \geq 0$ должна удовлетворять следующей системе неравенств:

$$g_i(y_\ell + \alpha d_\ell) < 0, \quad 1 \leq i \leq m.$$

Наиболее просто эта система решается в том случае, когда множество Q является полиэдром, т. е. когда функции g_1, \dots, g_m являются аффинными: $g_i(x) = \langle q_i, x \rangle - s_i$. В этом случае соответствующая система неравенств выглядит следующим образом:

$$\langle q_i, y_\ell + \alpha d_\ell \rangle < s_i, \quad 1 \leq i \leq m.$$

Раскрывая скобки, получаем

$$\langle q_i, d_\ell \rangle \alpha < s_i - \langle q_i, y_\ell \rangle, \quad 1 \leq i \leq m \quad (3)$$

Поскольку по построению точка y_ℓ — внутренняя, то все правые части в этих неравенствах строго положительные. Значит, если для некоторого $1 \leq i \leq m$ коэффициент $\langle q_i, d_\ell \rangle \leq 0$, то соответствующее неравенство бессодержательно (поскольку $\alpha \geq 0$). Введем обозначение

$$I_\ell := \{1 \leq i \leq m : \langle q_i, d_\ell \rangle > 0\}.$$

Тогда система (3) эквивалентна следующей системе:

$$\langle q_i, d_\ell \rangle \alpha < s_i - \langle q_i, y_\ell \rangle, \quad i \in I_\ell.$$

Заметим, что теперь все коэффициенты при α строго положительные, поэтому законно разделить:

$$\alpha < \frac{s_i - \langle q_i, y_\ell \rangle}{\langle q_i, d_\ell \rangle}, \quad i \in I_\ell.$$

Наконец, последнюю систему можно переписать в виде одного скалярного неравенства:

$$\alpha < \alpha_\ell^{\max}, \quad \text{где } \alpha_\ell^{\max} := \min_{i \in I_\ell} \frac{s_i - \langle q_i, y_\ell \rangle}{\langle q_i, d_\ell \rangle}.$$

Итак, согласно проведенным выкладкам, все допустимые длины шагов α лежат в интервале $[0, \alpha_\ell^{\max})$, т. е. в процедуре линейного поиска никогда нельзя брать шаг $\alpha \geq \alpha_\ell^{\max}$. Например, если для подбора длины шага используется процедура бэктрекинга, то в этом случае единственная модификация, которую нужно сделать по сравнению со стандартным случаем, - это изменить начальную пробную длину шага: вместо прежде используемого значения α_ℓ^0 теперь нужно использовать значение

$$\tilde{\alpha}_\ell^0 := \min \{ \alpha_\ell^0, \theta \alpha_\ell^{\max} \},$$

где $0 < \theta < 1$ - некоторая константа (например, 0.99).

1.3 Полная спецификация метода

К настоящему моменту схема метода барьеров все еще довольно абстрактная, и имеется несколько вопросов, на которые нужно ответить:

- (а) Как именно выбирать барьерную функцию F ?
- (б) Какой метод безусловной оптимизации нужно использовать для решения внутренней задачи, и какова должна быть точность ее решения?
- (в) Какая конкретно должна быть стратегия увеличения параметра t_k в схеме отслеживания пути?

Сперва ответим на первые два вопроса. Несмотря на то, что гипотетически в методе барьеров можно использовать любую комбинацию барьерной функции и метода безусловной минимизации, наиболее эффективной (как с точки зрения теории, так и практики) оказывается связка логарифмического барьера и метода Ньютона. Логарифмический барьер в общем виде имеет вид

$$F(x) := - \sum_{i=1}^m \ln(-g_i(x))$$

В качестве критерия останова в методе Ньютона в этом задании Вам нужно будет использовать стандартный критерий по норме градиента целевой функции (который использовался в предыдущих заданиях) :

$$\|\nabla f_{t_k}(y_\ell)\|^2 \leq \epsilon_{\text{inner}} \|\nabla f_{t_k}(x_k)\|^2$$

где $\epsilon_{\text{inner}} > 0$ - некоторый параметр, который обычно выбирается довольно маленьким (например, 10^{-7}), что соответствует практически точному решению внутренней задачи (в выпуклом случае). Заметим, что поскольку в качестве алгоритма минимизации используется метод Ньютона, а стартовая точка выбирается достаточно «хорошей», то маленькое значение ϵ_{inner} совсем не представляет никакой проблемы для метода (напомним, что метод Ньютона имеет локальную квадратичную сходимость).

Что касается последнего вопроса о стратегии увеличения параметров t_k , то здесь имеется несколько эффективных стратегий. Самая простая из них, которую Вам нужно будет использовать в этом задании, состоит в постоянном линейном увеличении:

$$t_{k+1} := \gamma t_k$$

где $\gamma > 1$ — постоянная константа (обычно порядка 10-100).

2 Модели

2.1 Модель LASSO

Модель LASSO является одной из стандартных моделей линейной регрессии. Имеется обучающая выборка $((a_i, b_i))_{i=1}^m$, где $a_i \in \mathbb{R}^n$ - вектор признаков i -го объекта, а $b_i \in \mathbb{R}$ - его регрессионное значение. Задача заключается в прогнозировании регрессионного значения b_{new} для нового объекта, представленного своим вектором признаков a_{new} .

В модели LASSO, как и в любой модели линейной регрессии, прогнозирование выполняется с помощью линейной комбинации компонент вектора a с некоторыми фиксированными коэффициентами $x \in \mathbb{R}^n$:

$$b(a) := \langle a, x \rangle$$

Коэффициенты x являются параметрами модели и настраиваются с помощью решения следующей оптимизационной задачи:

$$\phi(x) := \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (\langle a_i, x \rangle - b_i)^2 + \lambda \sum_{j=1}^n |x_j| =: \frac{1}{2} \|Ax - b\|^2 + \lambda \|x\|_1 \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad (4)$$

Здесь $\lambda > 0$ - коэффициент регуляризации (параметр модели). Особенностью LASSO является использование именно ℓ_1 -регуляризации (а не, например, ℓ^2 -регуляризации). Такая регуляризация позволяет получить разреженное решение. В разреженном решении x^* часть компонент равна нулю. (Можно показать, что при $\lambda \geq \|A^T b\|_\infty$ все компоненты будут нулевыми). Нулевые веса соответствуют исключению соответствующих признаков из модели (признание их неинформативными).

2.2 Двойственная задача и критерий остановки

Двойственной задачей Фенхеля к задаче (4) является

$$\max_{\mu \in \mathbb{R}^m} \left\{ -\frac{1}{2} \|\mu\|^2 - \langle b, \mu \rangle : \|A^T \mu\|_\infty \leq \lambda \right\} \quad (5)$$

Таким образом, имея в распоряжении допустимую двойственную точку $\mu \in \mathbb{R}^m$, т. е. такую что $\|A^T \mu\|_\infty \leq \lambda$, можно вычислить следующую оценку для невязки в задаче (4):

$$\phi(x) - \phi^* \leq \frac{1}{2} \|Ax - b\|^2 + \lambda \|x\|_1 + \frac{1}{2} \|\mu\|^2 + \langle b, \mu \rangle =: \eta(x, \mu). \quad (6)$$

Величина $\eta(x, \mu)$ называется зазором двойственности и обращается в ноль в оптимальных решениях x^* и μ^* задач (4) и (5). Заметим, что решения x^* и μ^* связаны между собой следующим соотношением: $Ax^* - b = \mu^*$. Поэтому для фиксированного $x \in \mathbb{R}^n$ естественным выбором соответствующего μ будет

$$\mu(x) := \min \left\{ 1, \frac{\lambda}{\|A^T(Ax - b)\|_\infty} \right\} (Ax - b)$$

Такой выбор обеспечивает стремление зазора двойственности $\eta(x, \mu(x))$ к нулю при $x \rightarrow x^*$, что позволяет использовать условие $\eta(x, \mu(x)) < \epsilon$ в качестве критерия остановки в любом итерационном методе решения задачи (1).

В этом задании необходимо использовать критерий остановки по зазору двойственности $\eta(x, \mu(x))$.

2.3 Сведение к гладкой условной задаче оптимизации

Выполнив эквивалентное преобразование задачи через надграфик, задачу (4) можно переписать в виде гладкой условной задачи:

$$\min_{x, u \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2} \|Ax - b\|^2 + \lambda \langle 1_n, u \rangle : -u \preceq x \preceq u \right\} \quad (7)$$

где $1_n := (1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^n$ и неравенства $-u \preceq x \preceq u$ обозначают обычные поэлементные неравенства между соответствующими компонентами. Эта задача является задачей квадратичного программирования, и ее можно решать методом барьеров.

3 Формулировка задания

1. Даны прототипы функций, которые Вам нужно будет реализовать. Некоторые процедуры уже частично или полностью реализованы.

2. Реализуйте процедуру вычисления зазора двойственности (6) (функция `lasso_duality_gap` в модуле `oracles`).

3. Выпишите для задачи (7) вспомогательную функцию $f_t(x, u)$, минимизируемую в методе барьеров. Выпишите систему линейных уравнений, задающую ньютоновское направление $d_k = (d_k^x, d_k^u)$. Предложите свой способ решения этой системы и прокомментируйте его достоинства и недостатки. Для текущей точки (x, u) и направления d_k определите максимальную допустимую длину шага α . Какую начальную точку (x_0, u_0) можно выбрать для метода барьеров?

4. Реализуйте метод барьеров для задачи (7) (функция `barrier_method_lasso` в модуле `optimization`). Для подбора длины шага на внутренних итерациях используйте бэктрекинг. (Не забудьте выбрать начальное значение длины шага равным единице, если оно допустимо.)

5. Проведите эксперименты, описанные ниже. Напишите отчет.

3.1 Эксперимент

Поэкспериментируйте с реализованным методом барьеров для задачи LASSO:

(а) Исследуйте, насколько сильно метод чувствителен к выбору параметров γ (скорость увеличения t_k) и ϵ_{inner} (точность для метода Ньютона).

(б) Как меняется поведение метода для различных значений размерности пространства n , размера выборки m и коэффициента регуляризации λ ?

Данные (матрицу A и вектор b) для задачи LASSO можно сгенерировать случайно, либо взять реальные данные с сайта LIBSVM.

При исследовании метода полезно строить графики следующих двух типов: 1) гарантируемая точность по зазору двойственности (6) против числа итераций и 2) гарантированная точность по зазору двойственности

против реального времени работы. Для гарантированной точности по зазору двойственности используйте логарифмическую шкалу.

4 Оформление задания

Результатом выполнения задания являются

(а) Файлы `optimization.py` и `oracles.py` с реализованным методом барьеров и вспомогательными функциями.

(б) Полные исходные коды для проведения экспериментов и рисования всех графиков. Все результаты должны быть воспроизводимыми. Если вы используете случайность — зафиксируйте `seed`.

(с) Отчет в формате PDF о проведенных исследованиях.

Каждый проведенный эксперимент следует оформить как отдельный раздел в PDF документе (название раздела - название соответствующего эксперимента). Для каждого эксперимента необходимо сначала написать его описание: какие функции оптимизируются, каким образом генерируются данные, какие методы и с какими параметрами используются. Далее должны быть представлены результаты соответствующего эксперимента - графики, таблицы и т. д. Наконец, после результатов эксперимента должны быть написаны Ваши выводы - какая зависимость наблюдается и почему.

Важно: Отчет не должен содержать никакого кода. Каждый график должен быть прокомментирован - что на нем изображено, какие выводы можно сделать из этого эксперимента. Обязательно должны быть подписаны оси. Если на графике нарисовано несколько кривых, то должна быть легенда. Сами линии следует рисовать достаточно толстыми, чтобы они были хорошо видимыми.

Важно: Практическое задание выполняется самостоятельно. Если вы получили ценные советы (по реализации или проведению экспериментов) от другого студента, то об этом должно быть явно написано в отчёте. В противном случае «похожие» решения считаются плагиатом.