Задача оптимизации

$$\min_{\substack{g_i(x)\&0,\\ i=1,\ldots,m,\\ x\in Q}} f(x) \qquad (1)$$

- $Q \subseteq \mathbb{R}^d$ — подмножество d-мерного пространства
- $f : Q \to \mathbb{R}$ — некоторая функция, заданная на множестве Q
- В качестве & берётся $\leq, \geq$ либо $=$
- $g_i(x) : Q \to \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$ — функции, задающие ограничения

Матрица Гессе [править | править код]

Матрица этой квадратичной формы образована вторыми частными производными функции. Если все производные существуют, то

$$H(f) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1\,\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1\,\partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2\,\partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2\,\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n\,\partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n\,\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

Определитель этой матрицы называется **определителем Гессе**, или просто **гессианом**[*источник не указан 3595 дней*].

Матрицы Гессе используются в задачах оптимизации методом Ньютона. Полное вычисление матрицы Гессе может быть затруднительно, поэтому были разработаны квазиньютоновские алгоритмы, основанные на приближённых выражениях для матрицы Гессе. Наиболее известный из них — алгоритм Бройдена — Флетчера — Гольдфарба — Шанно.

Примеры задач оптимизации. Логистическая регрессия.

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left\{ f(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log\left(1 + \exp\left(-y_i \cdot (\mathbf{A}x)_i\right)\right) \right\}, \tag{2}$$

- $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times d}$ — матрица признаков, n — количество объектов
- $x \in \mathbb{R}^d$ — вектор параметров, d — количество параметров
- $y \in \{-1, 1\}^n$ — вектор ответов
- $(\mathbf{A}x)_i, y_i$ — i-е компоненты векторов $\mathbf{A}x$ и y соответственно

Данная задача возникает как один из подходов к решению задачи бинарной классификации.

Задачи оптимизации. Первые наблюдения.

1. В общем случае задачи оптимизации могут не иметь решения. Например, задача $\min_{x \in \mathbb{R}} x$ не имеет решения.
2. Задачи оптимизации часто нельзя решить аналитически.
3. Их сложность зависит от вида целевой функции f, множества Q и может зависеть от размерности x.

Если же задача оптимизации имеет решение, то на практике её обычно решают, вообще говоря, приближённо. Для этого применяются специальные алгоритмы, которые и называют методами оптимизации.

Методы оптимизации I

- Нет смысла искать лучший метод для решения конкретной задачи. Например, лучший метод для решений задачи $\min_{x \in \mathbb{R}^d} \|x\|^2$ сходится за 1 итерацию: этот метод просто всегда выдаёт ответ $x^* = \mathbf{0}$. Очевидно, что для других задач такой метод не пригоден.
- Эффективность метода определяется для класса задач, т.к. обычно численные методы разрабатываются для *приближённого* решения множества однотипных задач.
- Метод разрабатывается для класса задач $\Longrightarrow$ метод не может иметь с самого начала полной информации о задаче. Вместо этого метод использует модель задачи, например, формулировку задачи, описание функциональных компонент, множества, на котором происходит оптимизация и т.д.

Методы оптимизации II

- Предполагается, что численный метод может накапливать специфическую информацию о задаче при помощи некоторого *оракула*. Под оракулом можно понимать некоторое устройство, которое отвечает на последовательные вопросы численного метода.

Примеры оракулов

- **Оракул нулевого порядка** в запрашиваемой точке x возвращает значение целевой функции $f(x)$.
- **Оракул первого порядка** в запрашиваемой точке возвращает значение функции $f(x)$ и её градиент в данной точке $\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n}\right)$.

Общая итеративная схема метода оптимизации $\mathcal{M}$

Входные данные: начальная точка x^0 (0 – верхний индекс), требуемая точность решения задачи $\varepsilon > 0$.
Настройка. Задать $k = 0$ (счётчик итераций) и $I_{-1} = \varnothing$ (накапливаемая информационная модель решаемой задачи).
Основной цикл

1. Задать вопрос к оракулу $\mathcal{O}$ в точке x^k.
2. Пересчитать информационную модель: $I_k = I_{k-1} \cup (x_k, \mathcal{O}(x^k))$.
3. Применить правило метода $\mathcal{M}$ для получения новой точки x^{k+1} по модели I_k.
4. Проверить критерий остановки $\mathcal{T}_\varepsilon$. Если критерий выполнен, то выдать ответ $\bar{x}$, иначе положить $k := k + 1$ и вернуться на шаг 1.

Сложность методов оптимизации

- **Аналитическая сложность** — число обращений к оракулу, необходимое для решения задачи с точностью ε.
- **Арифметическая сложность** — общее число вычислений (включая работу оракула), необходимых для решения задачи с точностью ε.

Примеры итерационных методов. Градиентный спуск

Рассмотрим задачу оптимизации

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \tag{5}$$

где функция $f(x)$ дифференцируема. Предположим, что в любой точке мы можем посчитать её градиент.

Алгоритм 1 Градиентный спуск с постоянным размером шага

Вход: размер шага $\gamma > 0$, стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, количество итераций N

for $k = 0, 1, \ldots, N-1$ **do**

    Вычислить $\nabla f(x^k)$

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

end for

Выход: x^N

Примеры итерационных методов. Метод Ньютона

Рассмотрим задачу оптимизации

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \tag{6}$$

где функция $f(x)$ дважды непрерывно дифференцируема. Предположим, что в любой точке мы можем посчитать её градиент и матрицу вторых производных $\nabla^2 f(x)$.

Алгоритм 2 Метод Ньютона

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, количество итераций N

for $k = 0, 1, \ldots, N-1$ **do**

    Вычислить $\nabla f(x^k)$ и $\nabla^2 f(x^k)$

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

end for

Выход: x^N

Сложность задач оптимизации. Класс задач минимизации липшицевых функций

$$\min_{x \in B_d} f(x) \tag{7}$$

- $B_d = \{x \in \mathbb{R}^d \mid 0 \le x_i \le 1, \quad i = 1, \dots, d\}$
- Функция $f(x)$ является M-липшицевой на B_d относительно ℓ_∞-нормы:

$$\forall x, y \ |f(x) - f(y)| \le M\|x - y\|_\infty = M \max_{i=1,\dots,d} |x_i - y_i|. \tag{8}$$

Определение [правитьь | править код]

Отображение f метрического пространства $(X,\ \rho_X)$ в метрическое пространство $(Y,\ \rho_Y)$ называется липшицевым, если найдётся такая константа L (*константа Липшица* этого отображения), что $\rho_Y(f(x),\ f(y)) \leqslant L \cdot \rho_X(x,\ y)$ при любых $x,\ y \in X$. Это условие называют ***условием Липшица***. Отображение с $L = 1$ (1-липшицево отображение) называют также коротким отображением.

Липшицево отображение $f\colon X \to Y$ называется ***билипшицевым***, если у него существует обратное $f^{-1}\colon Y \to X$, которое также является липшицевым.

Отображение $f\colon X \to Y$ называется ***колипшицевым***, если существует константа L такая, что для любых $x \in X$ и $y \in Y$ найдётся $x' \in f^{-1}(y)$ такое, что $\rho_Y(f(x),\ y) \leqslant L \cdot \rho_X(x,\ x')$.

Сложность задач оптимизации. Класс задач минимизации липшицевых функций

Наблюдение

Множество B_d является ограниченным и замкнутым, т.е. компактом, а из липшицевости функции f следует и её непрерывность, поэтому задача (7) имеет решение, ибо непрерывная на компакте функция достигает своих минимального и максимального значений. Пусть $f_* = \min_{x \in B_d} f(x)$.

- **Класс методов.** Для данной задачи рассмотрим методы нулевого порядка.
- **Цель:** найти $\bar{x} \in B_d$: $f(\bar{x}) - f_* \leq \varepsilon$.

Сложность задач оптимизации. Класс задач минимизации липшицевых функций

Рассмотрим один из самых простых способов решения этой задачи — метод равномерного перебора.

Алгоритм 3 Метод равномерного перебора

Вход: целочисленный параметр перебора $p \geq 1$

1: Сформировать $(p+1)^d$ точек вида $x_{(i_1,\ldots,i_d)} = \left(\frac{i_1}{p}, \frac{i_2}{p}, \ldots, \frac{i_d}{p}\right)^\top$, где $(i_1, \ldots, i_d) \in \{0, 1, \ldots, p\}^n$

2: Среди точек $x_{(i_1,\ldots,i_d)}$ найти точку $\bar{x}$ с наименьшим значением целевой функции f.

Выход: $\bar{x}, f(\bar{x})$

Сложность задач оптимизации. Класс задач минимизации липшицевых функций

Теорема 1 (Теорема 1.1.1 из книги Нестерова 2010 года)

Алгоритм 3 с параметром p возвращает такую точку $\bar{x}$, что

$$f(\bar{x}) - f_* \leq \frac{M}{2p}, \tag{9}$$

откуда следует, что методу равномерного перебора нужно в худшем случае

$$\left(\left\lfloor \frac{M}{2\varepsilon} \right\rfloor + 2\right)^d \tag{10}$$

обращений к оракулу, чтобы гарантировать $f(\bar{x}) - f_* \leq \varepsilon$.

Сложность задач оптимизации. Класс задач минимизации липшицевых функций

- Предположим $M = 2$, $d = 13$ И $\varepsilon = 0.01$, то есть размерность задачи сравнительно небольшая и точность решения задачи не слишком высокая.
- Необходимое число обращений к оракулу: $\left(\left\lfloor \frac{M}{2\varepsilon} \right\rfloor + 2\right)^d = 102^{13} > 10^{26}$.
- Сложность оракула при этом составляет не меньше $d = 13$ арифметических операций.
- Производительность компьютера: 10^{11} арифметических операций в секунду.
- Общее время: хотя бы 10^{16} секунд, что больше 300 миллионов лет.

Выпуклые и гладкие функции

Хорошие новости:

- Богатая и интересная теория
- Существуют эффективные алгоритмы приближённого решения

Плохие новости:

- Класс выпуклых и гладких задач не очень широк
- На практике часто приходится сталкиваться с невыпуклыми задачами

Тем не менее, иногда методы выпуклой гладкой оптимизации хорошо себя проявляют на практике и на невыпуклых или негладких задачах, имеющих локальную выпуклость или гладкость, поэтому имеет смысл для начала разобраться, как они работают для выпуклых и гладких задач.

Выпуклые множества

Определение 1

Множество $Q \subseteq \mathbb{R}^d$ называется выпуклым, если для любых двух точек $x, y \in Q$ и для любого числа $\alpha \in [0, 1]$ точка $z = \alpha x + (1 - \alpha)y$ принадлежит множеству Q.

Это означает, что вместе с любыми двумя точками во множестве содержится и отрезок, их соединяющий.

Выпуклые функции

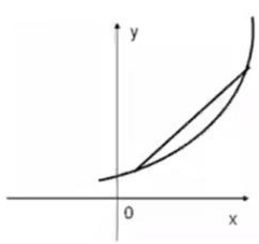
Определение 2

Функция $f(x)$ заданная на **выпуклом** множестве $Q \subseteq \mathbb{R}^d$ называется **выпуклой**, если для любых двух точек $x, y \in Q$ и для любого числа $\alpha \in [0, 1]$ выполняется следующее неравенство:

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y). \tag{12}$$

(если знак $<$ для всех $x \neq y$, $\alpha \in (0, 1)$, то **строго выпуклой**)

В одномерном
случае это означает, что между любыми двумя точками $x, y \in Q$ график функции f проходит не выше отрезка, соединяющего $f(x)$ и $f(y)$.



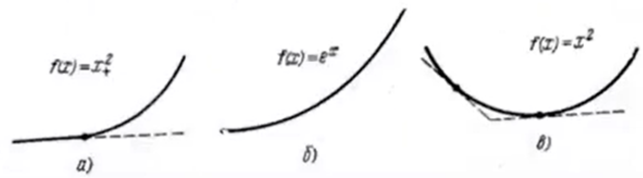
Сильно выпуклые функции

Определение 3

Функция $f(x)$ заданная на выпуклом множестве $Q \subseteq \mathbb{R}^d$ называется μ-сильно выпуклой, если для любых двух точек $x, y \in Q$ и для любого числа $\alpha \in [0,1]$ выполняется следующее неравенство:

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y) - \alpha(1-\alpha)\frac{\mu}{2}\|x-y\|_2^2. \quad (13)$$

График (строго) выпуклой функции лежит (строго) выше касательной гиперплоскости, а для сильно выпуклой функции график лежит выше некоторого параболоида.

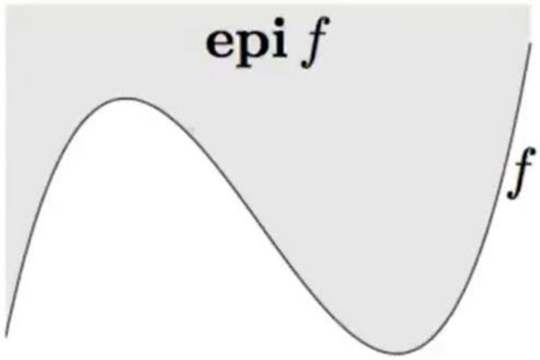


Свойства выпуклых функций I

1. Выпуклые функции непрерывны во всех внутренних точках области определения.
2. Сильно выпуклая функция, очевидно, строго выпукла. Обратное неверно.
3. Функция выпуклая, тогда и только тогда, когда её надграфик (эпиграф) выпуклое множество, где под надграфиком функции f, определённой на множестве $Q \subseteq \mathbb{R}^d$, понимается следующее множество:

$$\mathrm{epi} f = \{(x,t) \mid x \in Q,\ t \in \mathbb{R},\ t \geq f(x)\} \subseteq \mathbb{R}^{d+1}$$

Свойства выпуклых функций II



4. Если $f(x)$ выпуклая функция, то множество

$$\mathrm{C}_\gamma = \{x \in Q \subseteq \mathbb{R}^d \mid f(x) \leq \gamma,\ \gamma = const\}$$

является выпуклым.

Свойства выпуклых функций III

5. Для выпуклой функции $f(x)$ выполнено **неравенство Йенсена**

$$f\left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i x_i\right) \leq \sum_{i=1}^{n} \lambda_i f(x_i)$$

для любых $\lambda_i \geq 0$ и $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1$.

Неравенство Йенсена обобщается и на случай выпуклой комбинации бесконечного (счетного или несчетного) числа точек.