

# Теория к зачёту по методам оптимизации

Иванов Вячеслав, группа 699

20 декабря 2018 г.

# Оглавление

1	Безусловные методы первого порядка . . . . .	3
1.1	Градиентный спуск . . . . .	3
1.2	Метод тяжёлого шарика . . . . .	3
1.3	Метод Нестерова . . . . .	4
1.4	Метод сопряжённых градиентов . . . . .	4
1.5	Метод Флетчера-Ривза . . . . .	5
2	Проксимальные методы . . . . .	6
2.1	PGM и его частные случаи . . . . .	6
3	Условные методы первого порядка . . . . .	7
3.1	Метод Франка-Вольфе (условного градиента) . . . . .	7
4	Стохастические методы . . . . .	8
5	Методы второго порядка . . . . .	8
5.1	Метод Ньютона . . . . .	8
5.2	Квазиньютоновские методы . . . . .	8
5.3	Barzilai-Borwein . . . . .	9
5.4	DFP . . . . .	10
5.5	(L-)BFGS . . . . .	10
6	Линейное программирование (LP) . . . . .	11
6.1	Двухфазный симплекс-метод . . . . .	13
6.2	М-метод . . . . .	13
7	Полуопределённое программирование (SDP) . . . . .	13
7.1	Двойственность в SDP-задачах . . . . .	14
7.2	Минимизация спектрального радиуса . . . . .	15
7.3	Поиск описанного эллипсоида минимального объёма . . . . .	15
7.4	Приближённое решение невыпуклых задач . . . . .	16
7.5	Реласкация задачи MAXCUT . . . . .	16
8	Методы внутренней точки . . . . .	16

# 1 Безусловные методы первого порядка

## 1.1 Градиентный спуск

Основная формула<sup>1</sup>:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

**Теорема 1.1** (*Выпуклая функция, оценка сверху*).

Пусть целевая функция  $f$  выпуклая с липшицевым градиентом, а  $\alpha = \frac{1}{L}$ . Тогда:

$$f(x_{k+1}) - f^* \leq \frac{2L\|x - x_0\|_2^2}{k+4} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$$

Т.е. сходимость сублинейная в смысле  $\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Ck^\alpha$ ,  $\alpha < 0$ .

Т.е. для достижения точности  $\varepsilon$  нужно  $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$  итераций.

**Теорема 1.2** (*Сильно выпуклая функция, оценка сверху*).

Пусть  $f$  сильно выпукла с липшицевым градиентом, а  $\alpha = \frac{2}{L+\mu}$ . Тогда:

$$f(x_k) - f^* \leq \frac{L}{2} \left( \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1} \right)^{2k} \|x_0 - x^*\|_2^2, \quad \kappa = \frac{L}{\mu}$$

Т.е. сходимость линейная в смысле определения  $\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Cq^k$  с  $q = \frac{\kappa-1}{\kappa+1}$ .

Т.е. для достижения точности  $\varepsilon$  нужно  $\mathcal{O}\left(\kappa \ln \frac{1}{\varepsilon}\right)$  итераций.

**Теорема 1.3** (*Выпуклая функция, оценка снизу*).

$$f(x_{k+1}) - f^* \geq \frac{3\|x_0 - x^*\|_2^2}{32L(k+1)^2}$$

т.е. показатель сублинейной сходимости  $\alpha \in (-1, -0.5)$ .

Более того, оценка верна для всех методов первого порядка.

**Теорема 1.4** (*Сильно выпуклая функция, оценка снизу*).

$$f(x_{k+1}) - f^* \geq \frac{\mu}{2} \left( \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^{2k} \|x_0 - x^*\|_2^2$$

т.е. знаменатель прогрессии в линейной сходимости  $q \in \left( \frac{\kappa-1}{\kappa+1}; \frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1} \right)$ .

## 1.2 Метод тяжёлого шарика

Основная формула<sup>2</sup>:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) + \beta_k (x_k - x_{k-1})$$

**Теорема 1.5** (*Сильно выпуклая функция, оценка сверху*).

Пусть  $f$  — сильно выпуклая функция с липшицевым градиентом. Тогда:

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2}, \quad \beta_k = \max\{|1 - \sqrt{\alpha_k L}|, |1 - \sqrt{\alpha_k \mu}|\}^2 \implies \\ &\implies \left\| \begin{bmatrix} x_{k+1} - x^* \\ x_k - x^* \end{bmatrix} \right\|_2 \leq \left( \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \left\| \begin{bmatrix} x_1 - x^* \\ x_0 - x^* \end{bmatrix} \right\|_2 \end{aligned}$$

Т.е. сходимость линейная в смысле определения  $\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Cq^k$  с  $q = \frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}$ .

Т.е. для достижения точности  $\varepsilon$  нужно  $\mathcal{O}\left(\sqrt{\kappa} \ln \frac{1}{\varepsilon}\right)$  итераций.

---

<sup>1</sup>Дискретизация ОДУ  $\dot{x}(t) = -\nabla f(x)$

<sup>2</sup>Дискретизация ОДУ второго порядка — затухающих колебаний в вязкой среде

### 1.3 Метод Нестерова

Основные формулы:

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= y_k - \alpha_k \nabla f(y_k) \\ y_{k+1} &= x_{k+1} + \frac{k}{k+3}(x_{k+1} - x_k)\end{aligned}$$

**Теорема 1.6** (*Оценка сверху*).

$$f(x_{k+1}) - f^* \leq \frac{2L\|x_0 - x^*\|_2^2}{(k+2)^2}$$

Т.е. сходимость сублинейная в смысле  $\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leq Ck^\alpha$ ,  $\alpha < 0$ .

Т.е. для достижения точности  $\varepsilon$  нужно  $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right)$  итераций.

### 1.4 Метод сопряжённых градиентов

$$\min \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x, \quad A \in S_{++}^n$$

Идея: каждым шагом устранять отличие  $x_k$  от  $x^*$  в одной координате (как минимум).

Факт: для этого не обязательно знать  $x^*$ . По сути, обобщается идея предобуславливания.

**Определение** (*A-ортогональность*).

$$x, y : x^\top Ay = 0, \quad A \in S_{++}^n$$

Эквивалентно ортогональности относительно скалярного произведения с матрицей Грама  $A$ .

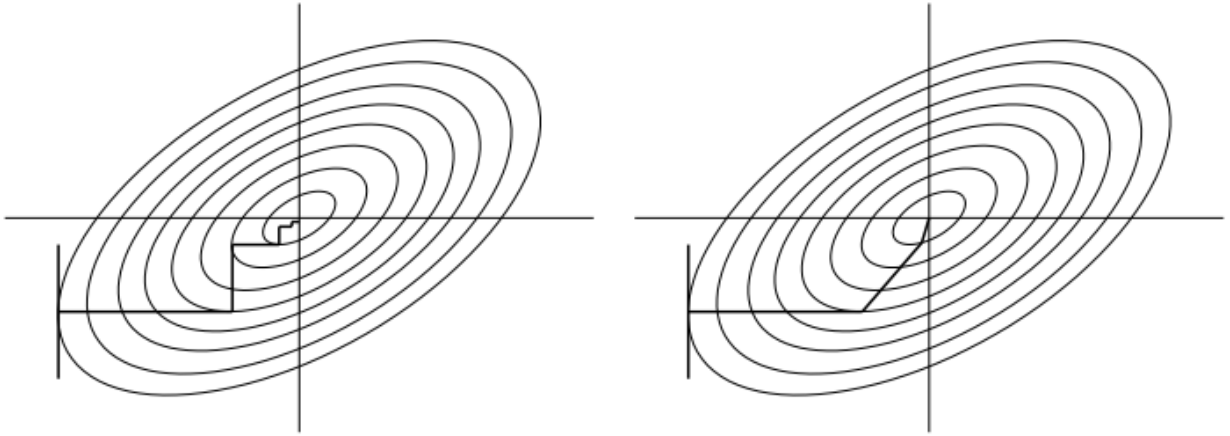


Figure 6.14: Steepest descent vs. conjugate gradient.

В алгоритме выстраивается последовательность  $A$ -ортогональных векторов  $p_j$ , через которые пересчитываются направления  $x_k$ . Формулы пересчёта имеют вид:

$$\begin{aligned}p_0 &= -r_0 = Ax - b \\ x_{k+1} &= x_k + \alpha_k p_k \\ r_{k+1} &= r_k + \alpha_k A p_k \\ p_{k+1} &= -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k \\ \alpha_{k+1} &= -\frac{r_k^\top p_k}{p_k^\top A p_k}, \quad \beta_{k+1} = \frac{p_k^\top A r_{k+1}}{p_k^\top A p_k}\end{aligned}$$

Где формула для  $\beta_{k+1}$  выводится из условия  $A$ -ортогональности векторов  $p_{k+1}$  и  $p_k$ , а для  $\alpha_{k+1}$  — из условия  $r_k \perp p_i$ ,  $i = 1, \dots, k-1$ . Тогда  $x_k = \arg \min_{x \in P} f(x)$ ,  $P = x_0 + \text{span}(p_0, \dots, p_{k-1})$

Формулы пересчёта коэффициентов упрощаются:

$$\begin{aligned}
\alpha_k &= -\frac{r_k^\top p_k}{p_k^\top A p_k} = \\
&= -\frac{r_k^\top (-r_k + \beta_k p_{k-1})}{p_k^\top A p_k} = \\
&= \frac{\|r_k\|_2^2}{p_k^\top A p_k} + \frac{r_k^\top p_{k-1}}{p_k^\top A p_k} = [r_k \perp p_{k-1}] = \\
&= \frac{\|r_k\|_2^2}{p_k^\top A p_k} \\
\beta_{k+1} &= \frac{r_{k+1}^\top A p_k}{p_k^\top A p_k} = [\alpha_k A p_k = r_{k+1} - r_k] = \\
&= \frac{r_{k+1}^\top (r_{k+1} - r_k)}{(-r_k + \beta_k p_{k-1})^\top (r_{k+1} - r_k)} = \\
&= \frac{\|r_{k+1}\|_2^2}{\|r_k\|_2^2}
\end{aligned}$$

**Теорема 1.7.**

- ◇  $r_k \perp r_i$ ,  $i < k$
- ◇  $\text{span}(r_0, \dots, r_k) = \text{span}(p_0, \dots, p_k) = \text{span}(r_0, A r_0, \dots, A^k r_0)$
- ◇  $p_k^\top A p_k = 0$ ,  $i < k$
- ◇ Метод сопряжённых градиентов оптимален для квадратичной целевой функции. Он сходится за  $|\text{spec}(A)| \leq n$  итераций, где  $\text{spec}(A)$  — спектр оператора  $A$ .
- ◇ Справедлива оценка:

$$f_k - f^* \leq C \left( \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k$$

## 1.5 Метод Флетчера-Ривза

Обобщение метода сопряжённых градиентов на неквадратичную целевую функцию.

- ◇  $\alpha_k$  подбирается адаптивно (замкнутой формы нет)
- ◇  $\beta_k$  ищется с помощью градиентов  $\nabla f'(x_{k-1}), \nabla f'(x_{k-2})$
- ◇  $r_k$  в формулах заменяется на  $\nabla f'(x_k)$  и пересчитывается в лоб

При этом:

- ◇ С ростом числа итераций направления  $p_k$  становятся всё более коллинеарными.
- ◇ Не при любом способе выбора  $\alpha_k$  получается направление убывания.

Первая проблема решается рестартами, вторая разобрана не была.

## 2 Проксимальные методы

### 2.1 PGM и его частные случаи

**Определение** (*Проксимальный оператор*).

$$\text{prox}_{\alpha f}(x) = \arg \min_u \left( f(u) + \frac{1}{2\alpha} \|x - u\|_2^2 \right)$$

Если  $f$  выпукла, то проксимальный оператор — сильно выпуклая функция.

**Теорема 2.1.** Минимум функции будет неподвижной точкой проксимального оператора.

**Утверждение 2.1.** Для проксимального оператора выполнено некоторое подобие линейности:

$$f(x) = \sum_{i=1}^n f_i(x_i) \implies \underset{f}{\text{prox}}(v)_i = \underset{f_i}{\text{prox}}(v_i)$$

**Определение** (*Проксимальный градиентный метод*).

Пусть выпуклая функция  $f$  представима в виде  $f = g + h$ , где  $g$  выпукла и может принимать бесконечные значения, а  $h$  дифференцируемая и выпуклая. Тогда положим:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= \underset{\alpha_k g}{\text{prox}}(x_k - \alpha_k \nabla h(x_k)) = \\ &= \arg \min_x \left( g(x) + \frac{1}{2\alpha_k} \|x - (x_k - \alpha_k \nabla h(x_k))\|_2^2 \right) = \\ &= \arg \min_x \left( g(x) + h(x_k) + \langle \nabla h(x_k), x - x_k \rangle + \frac{1}{2\alpha_k} \|x - x_k\|_2^2 \right) \end{aligned}$$

Такой метод сходится как  $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$  для  $\alpha_k \equiv \text{const} \in (0, \frac{1}{L}]$ , где  $L$  — константа Липшица для  $\nabla h$ . Видно, что:

1. Если  $g(x) := \begin{cases} x, & x \in G \\ +\infty, & \text{otherwise} \end{cases}$  — индикатор выпуклого множества  $G$ , — то:

$$\begin{aligned} &\arg \min_x \left( g(x) + h(x_k) + \langle \nabla h(x_k), x - x_k \rangle + \frac{1}{2\alpha_k} \|x - x_k\|_2^2 \right) = \\ &= \arg \min_{x \in G} \left( h(x_k) + \langle \nabla h(x_k), x - x_k \rangle + \frac{1}{2\alpha_k} \|x - x_k\|_2^2 \right) \end{aligned}$$

— т.н. *метод проекции градиента*.

2. Если  $h(x) \equiv 0$ , то получаем *проксимальный метод*.

3. Если  $g(x) \equiv 0$ , то получаем градиентный спуск (при  $\alpha_k = \frac{1}{L}$ ).

Сходимость каждого метода аналогична одной у градиентного спуска (с поправкой на то, что в методе проекции градиента нужно учесть сложность вычисления проекции точки на множество).

**Теорема 2.2** (*Метод проекции градиента, оценка сверху*).

Если  $f$  выпуклая с липшицевым градиентом на замкнутом выпуклом мн-ве  $P$ , то при  $\alpha \in (0, \frac{2}{L}]$ :

- ◇  $x_k \rightarrow x^*$  сублинейно, а в случае сильной выпуклости — линейно со знаменателем  $q$
- ◇ Если при этом  $\exists l > 0 \forall x \in P : \nabla^2 f(x) \succeq l\mathbf{I}$ , то  $q = \max\{|1 - \alpha l|, |1 - \alpha L|\}$

**Определение** ( $FISTA^3$ ). Аналог метода Нестерова для проксимального градиентного метода:

$$\begin{aligned} y_1 &:= x_0, \quad t_1 := 1, \quad k = 1 \\ x_k &:= \underset{\alpha_k g}{\text{prox}}(y_k - \alpha_k \nabla h(y_k)) \\ xt_{k+1} &:= \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2} \\ y_{k+1} &:= x_k + \frac{t_k - 1}{t_{k+1}}(x_k - x_{k-1}) \end{aligned}$$

**Теорема 2.3** (*О сходимости FISTA*).

	шаг	скорость сходимости	число итераций
$h$ выпуклая с липшицевым градиентом	$\alpha_k \equiv \frac{1}{k}$	$\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$	$\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right)$
$h$ сильно выпуклая с липшицевым градиентом	$\alpha_k \equiv \frac{1}{k}$	$\mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{1}{\sqrt{\kappa}}\right)^k\right)$	$\mathcal{O}(\sqrt{\kappa} \log \frac{1}{\varepsilon})$

**Pro:**

- ◇ Часто проекцию можно вычислить аналитически
- ◇ При этом сходимость аналогична градиентному спуску в безусловной оптимизации
- ◇ Обобщается на негладкий случай

**Contra:**

- ◇ Проекция не всегда вычисляется за  $\mathcal{O}(1)$  (пример — проекция на политоп)
- ◇ При обновлении градиента может меняться структура задачи (из-за свойств множества)

## 3 Условные методы первого порядка

### 3.1 Метод Франка-Вольфе (условного градиента)

Идея: в методе градиентного спуска подбирать направление и длину шага так, чтобы не выходить за пределы множества. Это возможно, если ограничения задают выпуклое замкнутое множество.

$$f(x_k + s_k) \approx f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), s_k \rangle \rightarrow \min_{s_k \in P}$$

Направление  $s_k - x_k$  называется *условным градиентом* функции  $f$  в точке  $x_k$  на мн-ве  $P$ . В силу выпуклости,  $f(s) \geq f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), s - x_k \rangle$ , откуда получаем аналог зазора двойственности:

$$f(x) - f(x^*) \leq -\min_{s \in P} \langle \nabla f(x_k), x - s \rangle = \max_{s \in P} \langle \nabla f(x_k), x - s \rangle = g(x)$$

**Теорема 3.1** (*Метод условного градиента, оценка сверху*).

Пусть  $f$  выпуклая с липшицевым градиентом на выпуклом компакте  $X$ . Тогда при  $\alpha_k = \frac{2}{k+1}$ :

$$f(x_k) - f(x^*) \leq \frac{2d^2 L}{k+2}, \quad k \geq 1, \quad d = \text{diam}(X)$$

Полученная сублинейная скорость сходимости не зависит от размерности. Тем не менее, она неумлучшаема даже для сильно выпуклых функций, а метод не обобщается на негладкий случай.

<sup>3</sup>Fast Iterative Shrinkage-Thresholding Algorithm

## 4 Стохастические методы

## 5 Методы второго порядка

### 5.1 Метод Ньютона

Основная формула:

$$x_{k+1} = x_k - (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)$$

Выводится из квадратичной аппроксимации при  $\nabla^2 f(x) \succ 0$ :

$$\begin{aligned} f(x+h) &\approx f(x) + \nabla f(x)^\top h + \frac{1}{2} h^\top \nabla^2 f(x) h \quad \left| \frac{\partial}{\partial h} \right. \\ 0 &= \nabla f(x) + \nabla^2 f(x) h \\ h &= -(\nabla^2 f(x))^{-1} \nabla f(x) \end{aligned}$$

Аналогичный метод применяется для решения систем нелинейных уравнений:

$$\begin{aligned} G(x) &= 0, \quad G: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \\ G(x_k + \Delta x) &\approx G(x_k) + \nabla G(x_k) \Delta x = 0 \\ \Delta x &= -(\nabla G(x_k))^{-1} G(x_k) \\ x_{k+1} &= x_k - (\nabla G(x_k))^{-1} G(x_k) \end{aligned}$$

Можно заметить, что необходимость решать такие системы возникает из условий оптимальности:

$$f'(x^*) = G(x) = 0$$

**Определение** (*Демпфированный метод Ньютона*).

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)$$

Адаптивный выбор размера шага расширяет область сходимости.

**Теорема 5.1** (*Характер сходимости в методе Ньютона*).

Пусть

1.  $f(x)$  локально сильно выпукла с константой  $\mu$ :  $\exists x^* : \nabla^2 f(x^*) \succeq \mu I$
2. Её гессиан липшицев с константой  $M$ :  $\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq M\|x - y\|$
3. Начальная точка достаточно близка к оптимальной:  $\|x_0 - x^*\| \leq \frac{2\mu}{3M}$

Тогда метод Ньютона сходится квадратично:

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \frac{M\|x_k - x^*\|^2}{2(\mu - M\|x_k - x^*\|)}$$

Т.е. для достижения точности  $\varepsilon$  нужно  $\mathcal{O}(\log \log \frac{1}{\varepsilon})$  итераций.

### 5.2 Квазиньютоновские методы

Мотивированы тем, что в методе Ньютона нужно явно хранить гессиан ( $\mathcal{O}(n^2)$  памяти) и обрабатывать его ( $\mathcal{O}(n^3)$  операций) на каждой итерации. Кроме того, на очередной итерации он может оказаться вырожденным. Этих недостатков можно избежать, если заменить гессиан на его приближение и придумать разумные формулы пересчёта. Посмотрим на две крайности:



◇ **Градиентный спуск:**

$$f(x+h) \leq f(x) + \langle \nabla f(x), h \rangle + \frac{1}{2\alpha} h^\top I h, \quad \alpha \in (0, L^{-1}]$$

$$\min_h f_g(h) \implies h^* = -\alpha \nabla f(x)$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

◇ **Метод Ньютона:**

$$f(x+h) \approx f(x) + \langle \nabla f(x), h \rangle + \frac{1}{2\alpha} h^\top \nabla^2 f(x) h, \quad \nabla^2 f(x) \succ 0$$

$$\min_h f_N(h) \implies h^* = -(\nabla^2 f(x))^{-1} \nabla f(x)$$

$$x_{k+1} = x_k - (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)$$

Все квазиньютоновские методы находятся "между ними":

$$f_q(h) := f(x+h) \approx f(x) + \langle \nabla f(x), h \rangle + \frac{1}{2\alpha} h^\top B_k h, \quad B_k \succ 0$$

$$\min_h f_q(h) \implies h^* = -B_k^{-1} \nabla f(x)$$

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - B_k^{-1} \nabla f(x_k) = \\ &= x_k - H_k \nabla f(x_k) \end{aligned}$$

К  $B_k$ , кроме близости к гессиану по матричной норме, предъявляются следующие требования:

- ◇ Быстрый пересчёт  $B_k \rightarrow B_{k+1}$ , когда доступны только градиенты.
- ◇ Быстрый поиск направления  $h_k$ .
- ◇ Возможность компактного хранения  $B_k$ .
- ◇ Сверхлинейная сходимость.

Для обновления  $B_k$  есть следующие 2 правила:

1. **Правило двух градиентов:**

$$\begin{aligned} f'_q(-\alpha_k h_k) &= f'(x_k) \implies \nabla f(x_{k+1}) - \alpha_k B_{k+1} h_k = \nabla f(x_k) \\ f'_q(0) &= f'(x_{k+1}) \end{aligned}$$

2. **Secant equation:**

$$\begin{aligned} s_k &:= x_{k+1} - x_k \\ y_k &:= \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) \\ B_{k+1} s_k &= y_k \end{aligned}$$

### 5.3 Barzilai-Borwein

Аппроксимация гессиана диагональной матрицей:

$$\alpha_k \nabla f(x_k) = \alpha_k I \nabla f(x_k) = \left( \frac{1}{\alpha_k} I \right)^{-1} \nabla f(x_k) \approx (\nabla^2 f(x))^{-1} \nabla f(x)$$

Квазиньютоновское уравнение принимает вид:

$$\alpha_k^{-1} s_{k-1} \approx y_{k-1}$$

Отсюда естественным образом возникает задача наименьших квадратов:

$$\min_{\alpha_k} \frac{1}{2} \|s_{k-1} - \alpha_k y_{k-1}\|_2^2 \implies \alpha_k = \frac{s_{k-1}^\top y_{k-1}}{y_{k-1}^\top y_{k-1}}$$

Хотя её можно поставить иначе (скажем, в другой норме) и получить другие методы.

## 5.4 DFP

Поиск  $B_{k+1}$  сам по себе записывается в форме задачи оптимизации:

$$\begin{aligned} B_{k+1} = \arg \min_B & \|B_k - B\|_2^2 \\ & B^\top = B \\ \text{s.t. } & Bs_k = y_k \\ & B \succeq 0 \end{aligned}$$

Замкнутый вид решения, откуда  $H_{k+1}$  получается по формуле ШМВ:

$$\begin{aligned} B_{k+1} &= (I - \rho_k y_k s_k^\top) B_k (I - \rho_k s_k y_k^\top) + \rho_k y_k y_k^\top, \quad \rho_k = \frac{1}{y_k^\top s_k} \\ B_{k+1}^{-1} &= H_{k+1} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^\top H_k}{y_k^\top H_k y_k} + \frac{s_k s_k^\top}{y_k^\top s_k} \end{aligned}$$

## 5.5 (L-)BFGS

Аналогичная задача оптимизации ставится сразу для  $H_{k+1}$ :

$$\begin{aligned} H_{k+1} = \arg \min_H & \|H_k - H\|_2^2 \\ & H^\top = H \\ \text{s.t. } & Hy_k = s_k \\ & H \succeq 0 \end{aligned}$$

Замкнутый вид решения, откуда  $H_{k+1}$  получается по формуле ШМВ:

$$H_{k+1} = (I - \rho_k s_k y_k^\top) H_k (I - \rho_k y_k s_k^\top) + \rho_k s_k s_k^\top, \quad \rho_k = \frac{1}{y_k^\top s_k}$$

**Теорема 5.2.** Если  $f$  сильно выпуклая с липшицевым гессианом, то при некоторых дополнительных технических допущениях BFGS сходится сверхлинейно.

Если размерность велика, хранить эти матрицы целиком становится непрактично.

Т.е. нужна процедура эффективного умножения на вектор  $\nabla f(x)$ .

Также есть проблема, что значения  $s_k, y_k$  на первых итерациях могут портить оценку  $B_k, H_k$  на более поздних итерациях. Модификация L-BFGS позволяет рекурсивно вычислять  $H_{k+1} \nabla f(x_k)$  за счёт хранения только последних  $m \ll n$  значений  $(s_k, y_k)$  и обновления  $H_{m,0}$ .

- BFGS обновляет  $H$  рекурсивно

$$H_{k+1} = V_k^\top H_k V_k + \rho_k s_k s_k^\top, \quad V_k = I - \rho_k y_k s_k^\top$$

- Развернём  $m$  шагов рекурсии

$$\begin{aligned} H_{k+1} &= V_k^\top H_k V_k + \rho_k s_k s_k^\top \\ &= V_k^\top V_{k-1}^\top H_{k-1} V_{k-1} V_k + \rho_{k-1} V_k^\top V_{k-1}^\top s_{k-1} s_{k-1}^\top V_{k-1} V_k + \rho_k s_k s_k^\top \\ &= V_k^\top \dots V_{k-m+1}^\top H_{m,0} V_{k-m+1} \dots V_k \\ &\quad + \rho_{k-m+1} V_k^\top \dots V_{k-m+2}^\top s_{k-m+1} s_{k-m+1}^\top V_{k-m+2} \dots V_k \\ &\quad + \dots + \rho_k s_k s_k^\top \end{aligned}$$

Отсюда получаем  $\mathcal{O}(n^2)$  операций на одну итерацию и линейную сложность по памяти. Тем не менее, у метода есть недостатки:

- ◊ Он не рандомизируется.
- ◊ Нужно подбирать  $B_0$  или  $H_0$ .
- ◊ Для него нет разработанной теории сходимости и точных оценок.
- ◊ Не любой способ выбора шага гарантирует, что  $y_k^\top s_k > 0$ .

## 6 Линейное программирование (LP)

$$\begin{aligned} \min_x \quad & c^\top x \\ \text{s.t.} \quad & Ax \preceq 0, \\ & x \succeq 0 \end{aligned}$$

**Определение** (*Угловая точка*).

1. Точка из допустимого множества называется *вершиной многоугольника*, если она не лежит на отрезке между двумя другими точками многоугольника.
  2. Точка  $x$  называется *угловой точкой* многоугольника, если:
    - ◊ Она лежит в множестве.
    - ◊ Существует такое множество  $\mathcal{B} \subset \{1, \dots, n\}$ , что
      - $|\mathcal{B}| = m$
      - $i \notin \mathcal{B} \Rightarrow x_i = 0$
      - матрица  $B = [a_i]_{i \in \mathcal{B}}$  невырождена, где  $a_i$  -  $i$ -ый столбец матрицы  $A$ .
- Матрица  $B$  называется *матрицей базиса*.

**Теорема 6.1.** Все угловые точки являются вершинами многоугольника  $Ax \preceq b$ .

**Теорема 6.2** (Основная теорема линейного программирования).

- ◇ Если в задаче линейного программирования допустимое множество непусто, тогда оно имеет как минимум одну угловую точку.
- ◇ Если задача линейного программирования имеет решения, тогда хотя бы одно из них является угловой точкой.
- ◇ Если задача линейного программирования ограничена и допустимое множество непусто, тогда она имеет оптимальное решение.

Основной алгоритм решения задачи линейного программирования называется *симплекс-методом*:

1. Начальная точка — произвольная вершина.
2. Перебрать смежные вершины и пойти в ту, в которой значение целевой функции меньше.

**Шаги алгоритма:**

Дана угловая точка  $x$ , соответствующая ей матрица базиса  $B$  и множество индексов  $\mathcal{B}$ .

1. Вычислить *оценки замещения* (reduced costs)  $\bar{c}_j = c_j - c_B^\top B^{-1} a_j$  для всех  $j \notin \mathcal{B}$ .
  - (a) если  $\bar{c}_j \geq 0$  для всех  $j$ , то текущее значение является оптимальным и уменьшить целевую функцию нельзя
  - (b) иначе **выбрать** индекс  $j^*$ , для которого  $\bar{c}_{j^*} < 0$
2. Вычислить  $u = B^{-1} a_{j^*}$ 
  - (a) если все компоненты  $u$  неположительны, то задача неограничена, оптимальное значение равно  $-\infty$
  - (b) если есть положительные компоненты, то

$$\theta^* := \min_{\{i|u_i>0\}} \frac{x_{\mathcal{B}(i)}}{u_i}$$

**По смыслу** — выбрать столбец в симплекс-таблице на основе оценок замещения.

3. Пусть  $\ell$  **такой** индекс, что

$$\theta^* = \frac{x_{\mathcal{B}(\ell)}}{u_\ell}.$$

Сформировать новую матрицу базиса  $\hat{B}$  с помощью замены столбца  $a_{\mathcal{B}(\ell)}$  на столбец  $a_{j^*}$ . Новая угловая точка  $\hat{x}$ , соответствующая матрице базиса  $\hat{B}$ , определяется так:

$$\begin{aligned}\hat{x}_{j^*} &= \theta^* \\ \hat{x}_{\mathcal{B}(k)} &= x_{\mathcal{B}(k)} - \theta^* u_k, \text{ если } k \neq \ell\end{aligned}$$

**По смыслу** — выбрать строку в симплекс-таблице и провести итерацию метода Гаусса с ведущим элементом на пересечении выбранных строки и столбца.

Чтобы избежать закливания, которое может произойти, если угловая точка содержит больше  $(m - n)$  нулевых координат, на каждом шаге нужно выбирать лекс. минимальные индексы.

- ◇ Было показано, что в худшем случае время работы симплекс-метода **экспоненциально** зависит от размерности задачи!
- ◇ Однако на практике сложность чаще всего пропорциональна количеству ограничений и симплекс-метод сходится быстро.

◇ Почему это так, неясно до сих пор.

Занимательный факт: в невырожденных задачах линейного программирования всегда выполнена сильная двойственность. При этом в двойственной задаче число переменных совпадает с числом ограничений в прямой задаче, что может сильно понизить размерность. Но неясно, как по двойственным переменным восстановить ответ прямой задачи, в нашем курсе это не обсуждалось.

## 6.1 Двухфазный симплекс-метод

**Проблема:** выбор начальной точки неочевиден.

**Решение:** вспомогательная задача оптимизации (при условии  $b \succeq 0$ )<sup>4</sup>:

$$\begin{aligned} \min_{z,y} \quad & y_1 + \dots + y_m \\ \text{s.t.} \quad & Az + y = b \\ & z \geq 0, y \geq 0 \end{aligned}$$

Начальная точка для такой задачи очевидна —  $z = 0, y = b$ .

◇ Если оптимальное значение функции в этой задаче **не равно 0**, то допустимое множество исходной задачи пусто.

◇ Если оптимальное значение функции в этой задаче **равно 0**, то  $y^* = 0$  и  $x_0 = z^*$ .

## 6.2 М-метод

**Идея:** объединить двухфазный симплекс-метод в однофазный

$$\begin{aligned} \min_{z,y} \quad & c^\top z + M(y_1 + \dots + y_m) \\ \text{s.t.} \quad & Az + y = b \\ & z \geq 0, y \geq 0 \end{aligned}$$

$M$  - произвольное большое положительное число.<sup>5</sup>

## 7 Полуопределённое программирование (SDP)

Постановка задачи полуопределённого (semidefinite) программирования:

$$\begin{aligned} \min \quad & c^\top x \\ \text{s.t.} \quad & F_0 + \sum_{i=1}^m x_i F_i \succeq 0 \\ & F_i \in \mathbb{R}^{n \times n} \end{aligned}$$

К такой постановке сводятся задачи LP:

$$\begin{aligned} \min \quad & c^\top x \\ \text{s.t.} \quad & Ax + b \succeq 0 \end{aligned} \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} \min \quad & c^\top x \\ \text{s.t.} \quad & \text{diag}(b) + \sum_{i=1}^n x_i \text{diag}(A_{:,i}) \succeq 0 \end{aligned}$$

<sup>4</sup>А если это не так? Что тогда? Всегда ли есть сведение к такому виду?

<sup>5</sup>Подозрительно похоже на регуляризацию.

Тем не менее, SDP более выразительно, чем LP:

$$\begin{aligned} \min_x \frac{\langle c, x \rangle^2}{\langle d, x \rangle} \quad & \text{s.t. } Ax + b \succeq 0 \\ \longrightarrow \quad & \min_x t \\ & \text{s.t. } Ax + b \succeq 0, \\ & \frac{\langle c, x \rangle^2}{\langle d, x \rangle} \leq t, \\ & t \geq 0 \end{aligned} \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} \min_x t \quad & \text{s.t. } \begin{bmatrix} \text{diag}(Ax - b) & 0 & 0 \\ 0 & t & c^\top x \\ 0 & c^\top x & d^\top x \end{bmatrix} \succeq 0 \end{aligned}$$

Такую задачу в форме LP уже не записать.

Важным инструментом при сведении задачи к такой форме является дополнение по Шуру:

**Утверждение 7.1** (*Критерий положительной полуопределённости*).

Пусть дана блочно-диагональная матрица  $M$ :

$$M = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$$

Дополнением по Шуру блока  $D$  называется матрица  $A - BD^{-1}C$ .

Аналогично для блока  $A$ :  $D - CA^{-1}B$ .

Тогда верно, что: симметричная матрица  $M \succeq 0 \iff D \succeq 0, A - BD^{-1}B^\top \succeq 0$ .

## 7.1 Двойственность в SDP-задачах

**Утверждение 7.2** (*О виде двойственной задачи*).

$$\begin{aligned} \min c^\top x \quad & \text{s.t. } F_0 + \sum_{i=1}^m x_i F_i \succeq 0 \\ \longrightarrow \quad & \max -\text{tr}(F_0 Z) \\ & \text{s.t. } \text{tr}(F_i Z) = c_i \\ & Z \succeq 0 \end{aligned}$$

*Доказательство.* Вид Лагранжиана следует из условий ККТ:

$$\begin{aligned} L(x, Z) &= c^\top x - \text{tr} \left( Z^\top \left( F_0 + \sum_{i=1}^m x_i F_i \right) \right) = \\ &= c^\top x - \text{tr}(Z^\top F_0) - \sum_{i=1}^m x_i \cdot \text{tr}(Z^\top F_i) \\ \nabla_x L(x, Z) &= c - [\text{tr}(Z^\top F_1) \quad \dots \quad \text{tr}(Z^\top F_m)]^\top = 0 \\ &\iff \text{tr}(Z^\top F_i) = c_i \end{aligned}$$

Отсюда:

$$\begin{aligned} L(x^*, Z) &= \inf_x \left( c^\top x - \text{tr}(Z^\top F_0) - \sum_{i=1}^m x_i \cdot \text{tr}(Z^\top F_i) \right) = \\ &= -\text{tr}(Z^\top F_0) =: g(Z), \quad Z \succeq 0 \end{aligned}$$

Итоговый вид двойственной задачи:

$$\begin{aligned} \max -\text{tr}(F_0 W) \\ \text{s.t. } \text{tr}(F_i W) = c_i \\ W \succeq 0 \end{aligned}$$

где  $W := Z^\top$ .

□

Сильной двойственности может не быть (хуже, чем LP), но зазор двойственности всегда конечен.

**Теорема 7.1** (*О сильной двойственности в SDP*).

Для SDP-задачи выполнена сильная двойственность, если хотя бы одно из условий выполнено:

- ◊ Прямая задача строго допустима, т.е.  $\exists x : F(x) \succ 0$ .
- ◊ Двойственная задача строго допустима, т.е.  $\exists Z \in S_{++}^n \forall i = 1, \dots, m : \text{tr}(ZF_i) = c_i$ .

## 7.2 Минимизация спектрального радиуса

Пусть  $A(x) = A_0 + \sum_{i=1}^m x_i A_i$ ,  $\forall j > 0 : A_j = A_j^\top$  и поставлена задача минимизации:

$$\min_x \lambda_{\max}(A(x))$$

может быть переписана в SDP-виде:

$$\begin{aligned} \min_{t,x} \quad & t \\ \text{s.t.} \quad & tI - A(x) \succeq 0 \end{aligned}$$

Если матрица несимметрична/неквадратна, то минимизируется макс. сингулярное значение:

$$\min_x \sigma_{\max}(A(x))$$

что в SDP-терминах записывается как:

$$\begin{aligned} \min_{t,x} \quad & t \\ \text{s.t.} \quad & \begin{bmatrix} tI & A(x) \\ A^\top(x) & tI \end{bmatrix} \succeq 0 \end{aligned}$$

## 7.3 Поиск описанного эллипсоида минимального объёма

Пусть дан набор точек в  $\mathbb{R}^d$  и нужно найти описанный вокруг них эллипс минимальной площади. Здесь нужно воспользоваться тем, что эллипс можно задать аффинным преобразованием:

$$\{x \mid \|x\|_2^2 \leq 1\} \rightarrow \{u \mid \|u\|_2^2 \leq 1, u = Ax + b\}$$

Площадь при этом увеличивается в  $\det(A^{-1})$  раз, откуда возникает задача минимизации:

$$\begin{aligned} \min_{A,b} \quad & -\log \det(A) \\ \text{s.t.} \quad & \|Ax_i + b\|_2^2 \leq 1, \\ & A \succ 0 \end{aligned}$$

А уже ограничение на норму переписывается в SDP-виде:

$$\|Ax_i + b\|_2^2 \leq 1 \iff \begin{bmatrix} I & Ax_i + b \\ (Ax_i + b)^\top & 1 \end{bmatrix} \succeq 0$$

## 7.4 Приближённое решение невыпуклых задач

В курсе рассматривалась только задача вида:

$$\begin{aligned} \min f_0(x) \\ \text{s.t. } f_i(x) \leq 0 \end{aligned}$$

где  $f_i(x) \leq x^\top A_i x + 2b_i^\top x + c_i$ , но матрицы  $A_i$  неопределены.

1. Перепишем ограничения в матричном виде:

$$f_i(x) = \begin{bmatrix} x & 1 \end{bmatrix}^\top \begin{bmatrix} A_i & b_i \\ b_i^\top & c_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ 1 \end{bmatrix} \leq 0$$

2. Пусть  $x$  допустимая точка в исходной задаче, а  $t, \tau_1, \dots, \tau_M$  допустимые точки для введённой задаче, тогда можно выписать SDP-задачу:

$$\begin{aligned} \max t \\ \text{s.t. } \tau_i \geq 0 \\ \begin{bmatrix} A_0 & b_0 \\ b_0^\top & c_0 - t \end{bmatrix} + \tau_1 \begin{bmatrix} A_1 & b_1 \\ b_1^\top & c_1 \end{bmatrix} + \dots + \tau_M \begin{bmatrix} A_M & b_M \\ b_M^\top & c_M \end{bmatrix} \succeq 0 \\ 0 \leq \begin{bmatrix} x \\ 1 \end{bmatrix}^\top \left( \begin{bmatrix} A_0 & b_0 \\ b_0^\top & c_0 - t \end{bmatrix} + \tau_1 \begin{bmatrix} A_1 & b_1 \\ b_1^\top & c_1 \end{bmatrix} + \dots + \tau_M \begin{bmatrix} A_M & b_M \\ b_M^\top & c_M \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} x \\ 1 \end{bmatrix} = \\ 0 \leq f_0(x) - t + \tau_1 f_1(x) + \dots + \tau_M f_M(x) \leq f_0(x) - t \end{aligned}$$

Отсюда  $f_0(x) \geq t$ , т.е.  $\max t = \min f_0(x)$ , задачи эквивалентны.

В частности, такой подход позволяет решать задачу о пересечении эллипсоидов в  $\mathbb{R}^n$ .

## 7.5 Реласкация задачи MAXCUT

**Задача:** найти макс.разрез в неориентированном графе  $G = (V, E)$  с весами рёбер  $w_{ij}$ .

$$\begin{aligned} \max \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^n (1 - x_i x_j) w_{ij} \\ \text{s.t. } x_i \in \{-1, 1\} \end{aligned}$$

У этой задачи есть SDP-реласкация:

$$X = xx^\top \rightarrow X \succeq xx^\top, \quad X_{ii} = 1$$

$$\begin{aligned} \max \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^n (1 - X_{ij}) w_{ij} \\ \text{s.t. } X_{ii} = 1 \\ X \succeq 0 \end{aligned}$$

Пусть  $X = V^\top V$ , а  $r$  — случайный вектор, равномерно распределённый на сфере.

Если  $S = \{i \mid r^\top v_i \geq 0\}$ , то

$$\mathbb{E}(\text{разрез}) \geq 0.876 \cdot \text{MAXCUT}$$

В целом, SDP часто применяется в комбинаторной оптимизации.

## 8 Методы внутренней точки