

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 формула¹:

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

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 ε 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 ε 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, откуда следует оптимальность ме

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 формула²:

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

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 $q = \frac{\kappa-1}{\kappa+1}$.

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

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

²Дискретизация 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 ε 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 .

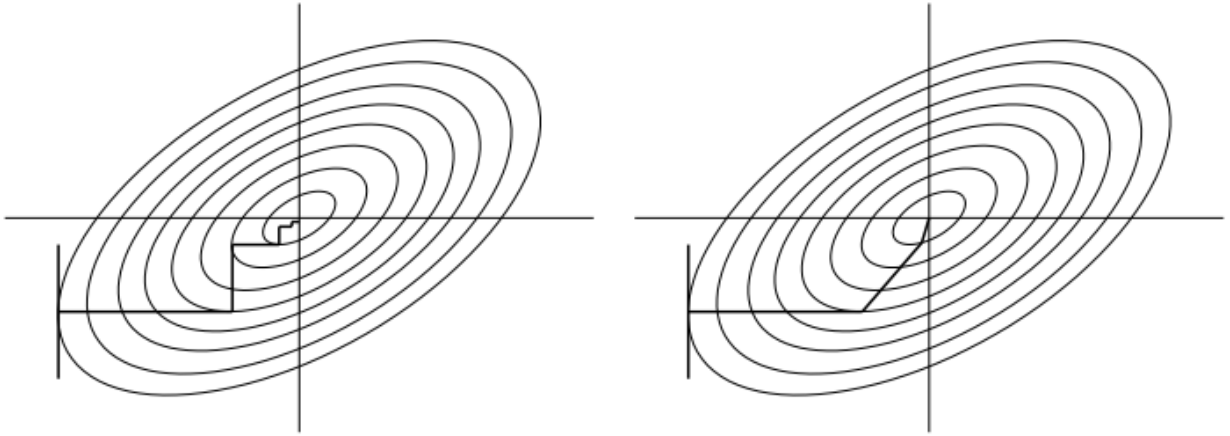


Figure 6.14: Steepest descent vs. conjugate gradient.

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 β_{k+1} выводится из условия A -ортогональности векторов p_{k+1} и p_k , а для α_{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.

- ◇ α_k подбирается адаптивно (замкнутой формы нет)
- ◇ β_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 α_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 ∇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:

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

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 $\alpha_k = \frac{2}{k+1}$:

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

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.

³Fast 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 $\nabla^2 f(x) \succ 0$:

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

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 μ : $\exists x^* : \nabla^2 f(x^*) \succeq \mu I$
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 ε 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:**

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

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

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

◇ **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":

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

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

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

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:

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

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} :

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

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 ℓ **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 $b \succeq 0$)⁴:

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

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.⁵

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:

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

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

⁵Подозрительно похоже на регуляризацию.

Тем не менее, SDP более выразительно, чем LP:

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

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:

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

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, τ_1, \dots, τ_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

8 Методы внутренней точки