Теория к зачёту по методам оптимизации

Иванов Вячеслав, группа 699

20 декабря 2018 г.

Оглавление

1 Безусловные методы первого порядка

1.1 Градиентный спуск

Основная формула[1]:

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

Теорема 1.1 (*Выпуклая функция, оценка сверху*).
Пусть целевая функция f выпуклая с липшицевым градиентом, а $\alpha = \frac{1}{L}$. Тогда:

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

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

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

Т.е. сходимость линейная в смысле определения $\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leqslant Cq^k$ 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*).

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

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*).

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

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[2]:

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

Теорема 1.5 (*Сильно выпуклая функция, оценка сверху*).
Пусть f — сильно выпуклая функция с липшицевым градиентом. Тогда:

$$\alpha_k = \frac{4}{(\sqrt{L} + \sqrt{\mu})^2},\ \beta_k = \max\{|1 - \sqrt{\alpha_k L}|,\ |1 - \sqrt{\alpha_k \mu}|\}^2 \implies$$

$$\implies \left\| \begin{bmatrix} x_{k+1} - x^* \\ x_k - x^* \end{bmatrix} \right\|_2 \leqslant \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1}\right)^k \left\| \begin{bmatrix} x_1 - x^* \\ x_0 - x^* \end{bmatrix} \right\|_2$$

Т.е. сходимость линейная в смысле определения $\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leqslant Cq^k$ 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.

[1] Дискретизация ОДУ $\dot{x}\,(t) = -\nabla f(x)$
[2] Дискретизация ОДУ второго порядка — затухающих колебаний в вязкой среде

1.3 Метод Нестерова

Основные формулы:

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

Теорема 1.6 (*Оценка сверху*)**.**

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

Т.е. сходимость сублинейная в смысле$\|x_{k+1} - x^*\|_2 \leqslant Ck^\alpha,\ \alpha < 0$.
Т.е. для достижения точности ε нужно $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right)$ итераций.

1.4 Метод сопряжённых градиентов

$$\min \frac{1}{2} x^\top A x - b^\top x,\ A \in S^n_{++}$$

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*)**.**

$$x, y:\ x^\top A y = 0,\ A \in S^n_{++}$$

Эквивалентно ортогональности относительно скалярного произведения с матрицей Грама A.

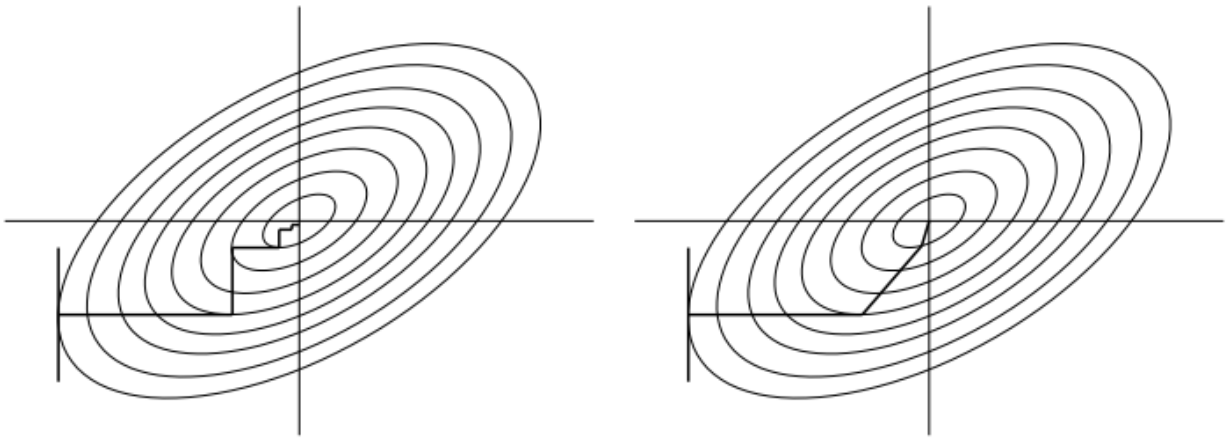

Figure 6.14: Steepest descent vs. conjugate gradient.

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

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

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 $r_k \perp p_i,\ i = 1, \ldots, k-1$. Тогда $x_k = \arg\min_{x \in P} f(x),\ P = x_0 + \text{span}(p_0, \ldots, p_{k-1})$

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.

- $r_k \perp r_i,\ i < k$
- $\text{span}(r_0, \ldots, r_k) = \text{span}(p_0, \ldots, p_k) = \text{span}(r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0)$
- $p_k^\top A p_k = 0,\ i < k$
- Метод сопряжённых градиентов оптимален для квадратичной целевой функции. Он сходится за $|\text{spec}(A)| \leqslant n$ итераций, где $\text{spec}(A)$ — спектр оператора A.
- Справедлива оценка:

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

1.5 Метод Флетчера-Ривза

Обобщение метода сопряжённый 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 1. Для проксимального оператора выполнено некоторое подобие линейности:

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

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 $\alpha_k \equiv \text{const} \in \left(0, \frac{1}{L}\right]$, 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 оной 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 $\alpha \in \left(0, \frac{2}{L}\right]$:

- $x_k \to x^*$ 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:

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

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 градиентому 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.

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

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

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

Теорема 3.1 (*Метод условного градиента, оценка сверху*).
Пусть f выпуклая с липшицевым градиентом на выпуклом компакте X. Тогда при $\alpha_k = \frac{2}{k+1}$:

$$f(x_k) - f(x^*) \leqslant \frac{2d^2 L}{k+2},\ k \geqslant 1,\ d = \operatorname{diam}(X)$$

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

[3] 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 $\nabla^2 f(x) \succ 0$:

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

Аналогичный метод применяется для решения систем нелинейных уравнений:

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

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: $\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leqslant M \|x - y\|$
3. Начальная точка достаточно близка к оптимальной: $\|x_0 - x^*\| \leqslant \frac{2\mu}{3M}$

Тогда метод Ньютона сходится квадратично:

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

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

5.2 Квазиньютоновские методы

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

◇ **Градиентный спуск:**

$$f(x+h) \leqslant f(x) + \langle \nabla f(x), h \rangle + \frac{1}{2\alpha} h^\top I h, \ \alpha \in (0, L^{-1}]$$
$$\min_h f_g(h) \implies h^* = -\alpha \nabla f(x)$$
$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

◇ **Метод Ньютона:**

$$f(x+h) \approx f(x) + \langle \nabla f(x), h \rangle + \frac{1}{2\alpha} h^\top \nabla^2 f(x) h, \ \nabla^2 f(x) \succ 0$$
$$\min_h f_N(h) \implies h^* = -(\nabla^2 f(x))^{-1} \nabla f(x)$$
$$x_{k+1} = x_k - (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)$$

Все квазиньютоновские методы находятся "между ними":

$$f_q(h) := f(x+h) \approx f(x) + \langle \nabla f(x), h \rangle + \frac{1}{2\alpha} h^\top B_k h, \ B_k \succ 0$$
$$\min_h f_q(h) \implies h^* = -B_k^{-1} \nabla f(x)$$
$$x_{k+1} = x_k - B_k^{-1} \nabla f(x_k) = \\ = x_k - H_k \nabla f(x_k)$$

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

◇ Быстрый пересчёт $B_k \to B_{k+1}$, 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:**

$$f_q'(-\alpha_k h_k) = f'(x_k) \implies \nabla f(x_{k+1}) - \alpha_k B_{k+1} h_k = \nabla f(x_k)$$
$$f_q'(0) = f'(x_{k+1})$$

2. **Secant equation:**

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

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:

$$B_{k+1} = \arg\min_{B} \|B_k - B\|_2^2$$
$$\text{s.t. } B^\top = B$$
$$Bs_k = y_k$$

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

$$B_{k+1} = (I - \rho_k y_k s_k^\top) B_k (I - \rho_k s_k y_k^\top) + \rho_k y_k y_k^\top, \ \rho_k = \frac{1}{y_k^\top s_k}$$

$$B_{k+1}^{-1} = H_{k+1} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^\top H_k}{y_k^\top H_k y_k} + \frac{s_k s_k^\top}{y_k^\top s_k}$$

5.5 (L-)BFGS

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

$$H_{k+1} = \arg\min_{H} \|H_k - H\|_2^2$$
$$\text{s.t. } H^\top = H$$
$$Hy_k = s_k$$

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

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

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

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

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

7 Полуопределённое программирование

8 Методы внутренней точки