

Оптимизация — это о чём? Ну, о том, что мы ищем минимум (или максимум) какой-то функции на каком-то множестве. Причём минимум ищется обычно локальный, потому что глобальный искать очень сложно.

Рассмотрим непрерывную оптимизацию: наша функция непрерывна. В таких методах применяется принцип чёрного ящика: мы не анализируем то, что делает функция, нас интересуют только её значения. Иногда нас также интересует градиент функции или гессиан. В зависимости от того, производная какого порядка нам нужно в нашем методе, говорят о том, что наш метод — это метод соответствующего порядка. Методы второго порядка — это, например, методы Ньютона. Также есть методы квазиньютона, которые пытаются как-то аппроксимировать гессиан, но сейчас не о них.

Зачем нам вообще градиент и гессиан? Потому что они позволяют разложить функцию в ряд Тейлора, и выглядеть он будет так:

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x^T \nabla f(x) + \frac{1}{2} \Delta x^T H_f(x) \Delta x + o(\|\Delta x\|^2)$$

Более высокие порядки не используются обычно, потому что там возникают такие операции как взятие обратной матрицы, которые вводят численную нестабильность.

**Пример.** Тернарный поиск. Все мы его знаем. Это метод нулевого порядка. Берём функцию, которая сначала убывает, потом возрастает и итеративно делим отрезок на три части, на каждом этапе отбрасывая одну третью.

Можно немного упростить жизнь себе, использовав метод золотого сечения. А именно отрезок  $[a; b]$  мы делим на три части точками  $x_1 = b - \frac{b-a}{\Phi}$ ,  $x_2 = a + \frac{b-a}{\Phi}$ , где  $\Phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ . Остальное как в обычном тернарном поиске. При таком разделении значение в одной из двух точек будет переиспользовано, ведь  $x_1$  делит  $[a; x_2]$  в соотношении золотого сечения и  $x_2$  делит  $[x_1; b]$  в соотношении золотого сечения.

Нулевого порядка в целом больше ничего не придумать.

Для методов первого порядка обычно итеративно выбирают последовательность точек, значения в которых должны уменьшаться. Как выбирать — рассмотрим позже. А сейчас подумаем, когда останавливаться.

**Определение 1.** Пусть  $\{x_k\}$  — последовательность точек, которые выбирает метод, а  $x^*$  — локальный минимум, к которому метод стремится. Тогда если выполнено

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^\mu} < r$$

то  $r$  называют **скоростью сходимости**, а  $\mu$  — **степенью сходимости**.

**Определение 2.** Контурными линиями называются множества

$$L_f(a) = \{x \mid f(x) = a\}$$

**Утверждение.** Контурные линии ортогональны градиенту функции.

**Условия оптимальности.** Хочется найти какие-нибудь критерии оптимальности точки в какой-то окрестности. У нас могут быть достаточные условия, могут быть необходимые, и все они следуют из квадратичной аппроксимации функции.

Ну, точка оптимальна, если при добавлении произвольного  $\Delta x$  функция возрастёт. Заметим, что  $\nabla f(x)$  и  $H_f(x)$  никак не зависят от  $x$ . Для методов первого порядка есть только необходимое условие:

**Теорема 1.** Если точка оптимальна, то  $\nabla f(x) = 0$ .

**Доказательство.** Ну, если он не ноль, то можно найти достаточно маленькое  $\Delta x$ , противонаправленное  $\nabla f(x)$ , и функция уменьшится. А значит точка не оптимальна была.  $\square$

Самое интересное, что для хороших функций можно решить уравнение  $\nabla f(x) = 0$  и получить аналитическое решение. Например, так отлично решается линейная регрессия.

А вот если у нас есть гессиан, то мы и достаточное условие можем сформулировать. Это условие доказывается через спектральное разложение гессиана.

**Теорема 2.** Если все собственные числа гессиана в точке положительные, то эта точка — минимум.

Если точка — минимум, то все собственные числа гессиана неотрицательны.

Доказательство.

$$\begin{aligned} f(x + \Delta x) &\approx f(x) + \frac{1}{2} \Delta x^T H_f(x) \Delta x = \\ &= f(x) + \frac{1}{2} \Delta x^T Q \wedge Q^T \Delta x = \\ &= f(x) + \frac{1}{2} (Q^T \Delta x)^T \wedge Q^T \Delta x = \\ &= f(x) + \frac{1}{2} \sum_i \lambda_i \| (Q^T \Delta x)_i \| \end{aligned}$$

□

**Линейные ограничения.** Давайте добавим какие-нибудь ограничения, например, линейные ограничения: минимизировать функцию  $f$  при условии  $Ax = b$ . Тогда  $A\Delta x = 0$ . Соответственно, проверяя условия необходимости и/или достаточности, нам надо проверять только те направления, для которых верно  $A\Delta x = 0$ . Как с этим работать? Ну, довольно легко: надо рассмотреть базис  $\ker A$  (назовём  $N$  матрицу проекции на  $\ker A$ ). И все  $\Delta x$  надо заменить на  $N\Delta x$ . Тогда наш  $\Delta x$  всегда будет правильным. Что будет с нашим рядом Тейлора?

$$f(x + N\Delta x) = f(x) + \Delta x^T N^T \nabla f(x) + \frac{1}{2} \Delta x^T N^T H_f(x) N \Delta x + o(\|\Delta x\|^2)$$

В итоге можно только домножать градиент и гессиан на  $N$ .