ФПМИ-ИВТф МФТИ. Численные методы оптимизации 2026 г.

Лекторы: Гасников А.В., Хильдебранд Р.

Программа лекций.

Лекция 1. Повтор некоторых материалов осеннего семестра. Выпуклые задачи. Теоремы отделимости. Принцип множителей Лагранжа, условия ККТ, условие Слейтера. Двойственная задача. Задача ЛП в стандартной форме. Структура полиэдра. Двойственная задача в ЛП. Сильная двойственность в ЛП.

Лекция 2. Понятие о численных методах оптимизации. Классы задач оптимизации. Сильно выпуклые задачи, выпуклые (вырожденные) задачи, невыпуклые задачи. Гладкие, негладкие задачи. Сложность алгоритмов на классах задач. Субградиентный метод (с доказательством). Способ выбора шага. Сопротивляющийся оракул. Ускоренный метод (без доказательства) и его оптимальность (с точностью до числового множителя) на классе гладких выпуклых задач.
Простые ограничения (неотрицательный ортант). Другие примеры оракулов (безградиентный, второго порядка, упоминание метода Ньютона).
Маломерная оптимизация: метод дихотомии, метод центров тяжести (схематично).
Метод рестартов (сведение сильно выпуклых к просто выпуклым) и техника регуляризации Тихонова — обе техники с доказательством. Сравнительный оракул для одномерной задачи (поиск наивкуснейшей шоколадки, RLHF).

Лекция 3. Сходимость градиентного метода к экстремуму для невыпуклой гладкой задачи (с доказательством). Условие Поляка—Лоясиевича. Пример — решение системы нелинейных уравнений. Сходимость градиентного спуска в условия Поляка-Лоясиевича. Сходимость градиентного спуска в выпуклом случае (с доказательством).

Лекция 4. Методы с проекцией. Метод проекции (суб-)градиента. Формула Демьянова-Данскина. Зеркальный спуск. Оптимизация квадратичной функции на симплексе методом проекции градиента и зеркальным спуском.

Лекция 5. Прямо-двойственные методы. Решения задач выпуклой сепарабельной оптимизации с аффинными ограничениями. Пример задачи энтропийно-линейного программирования. Как сильная выпулкость порождает гладкость, а гладкость сильную выпуклость при переходе к двойственной. Двойственное сглаживание по Нестерову.

Лекция 6. Квадратичная оптимизация. Метод сопряжённых градиентов. Задача достижения консенсуса, в т.ч. с меняющимся графом. Связь ускоренных методов с Чебышевскими полиномами. Вычисление максимального собственного числа матрицы. Метод Ланцоша.

Потоковая контрольная 25 марта (среда) с 12:20 до 13:55 в 110КПМ и 115КПМ.

Лекция 7. Метод условного градиента. Примеры множеств, на которых легко минимизировать линейный функционал. Скорость сходимости по функционалу. Разреженность представления генерируемых точек.

Лекция 8. Стохастическая оптимизация. Минибатчинг и распараллеливание. Рандомизированные методы. Покоординатный и блочно-координатный методы. Рандомизация суммы и редукция дисперсии.

Лекция 9. Стохастическая оптимизация. Минимизация квадратичной формы на симплексе. Адаптивные методы Adagrad, DoG, AdaDelta. Метод Sign-SGD.

Лекция 10. Метод Ньютона. Аффинная инвариантность. Ньютоновский декремент. Квадратичная скорость сходимости. Метод Ньютона с кубической регуляризацией.

Самосогласованные функции. Барьеры, штрафные функции.
Квазиньютоновские методы. Muon.

Лекция 11. Методы нулевого порядка. Схема рандомизированного сглаживания. Одноточечный и двухточечный оракул. Метод Нелдера-Мида, эволюционные алгоритмы (обзорно).

Лекция 12. Онлайн оптимизация. Многорукие бандиты. Сэмплирование Томпсона, онлайн градиентный спуск, UCB-алгоритмы.

Задание №1.

Вступительные задачи.

Задача 1. Рассмотрим функцию

$$f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax + b^\top x + c, \tag{1a}$$

$$\text{где } A \in \mathbb{S}^n,\ A \succ 0 \text{ - симметричная положительно определенная матрица, } b \in \mathbb{R}^n. \tag{1b}$$

1) Пользуясь правилами матрично-векторного дифференцирования, найдите $\nabla f(x),\ \nabla^2 f(x)$. Покажите, что f – выпуклая функция.

2) Покажите, что точная оценка на константу Липшица L есть $\lambda_{\max}(A)$.

3) Покажите, что точная оценка на константу сильной выпуклости μ есть $\lambda_{\min}(A)$.

Задача 2. Рассмотрим градиентный спуск на функции $f(x)$, определенной в (1). Размер шага равен $\gamma > 0$, минимум функции $f(x)$ достигается в точке $x^* = 0$. Обозначим $\mu = \lambda_{\min}(A),\ L = \lambda_{\max}(A)$.

1) Покажите, что $\|x^{k+1} - x^*\|_2 \leq \|I - \gamma A\| \cdot \|x^k - x^*\|_2$.

2) Покажите, что $\|I - \gamma A\| = \max(|1 - \gamma\mu|, |\gamma L - 1|)$. Минимизируя это выражение по γ, получите оптимальный размер шага $\gamma^* = \frac{2}{\mu + L}$.

3) Оцените количество итераций N, которое потребуется градиентному методу с шагом γ^* для получения точки x^N, такой что $\|x^N - x^*\|_2^2 \leq \varepsilon$.

Задача 3. Пусть градиент выпуклой функции f имеет константу Липшица L. Докажите лемму о спуске:

1) $f(x - \gamma\nabla f(x)) \leq f(x) + \left(\frac{L\gamma^2}{2} - \gamma\right)\|\nabla f(x)\|_2^2$.

Пусть дополнительно f является μ-сильно выпуклой ($\mu > 0$). Докажите, что

2) $\langle \nabla f(x) - \nabla f(y), x - y\rangle \geq \mu\|x - y\|_2^2$.

Покажите, что сильно выпуклая гладкая функция зажата между двумя параболами, т.е.

3) $\frac{\mu}{2}\|x - x^*\|_2^2 \leq f(x) - f(x^*) \leq \frac{L}{2}\|x - x^*\|_2^2$.

Задача 4. Пусть $f(x):\ \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ – выпуклая функция, достигающая своего минимума в x^*. Обозначим $R = |x^*|$. Рассмотрим регуляризованную функцию $f_\mu(x) = f(x) + \frac{\mu}{2}\|x\|_2^2$ и ее точку минимума x^*_μ.

1) Насколько может сдвинуться точка минимума при добавлении регуляризации? Оцените сверху $|x^*_\mu - x^*|$.

2) Покажите, что можно подобрать такую выпуклую функцию f, что $|x^*_\mu - x^*| = \Omega(R)$.

3) Пусть $f(x)$ – μ-сильно выпуклая функция (коэффициент μ такой же, как в регуляризаторе $\frac{\mu}{2}\|x\|_2^2$). Изменится ли ответ в пунктах 1 и 2?

Задача 5. Рассмотрим функцию $f(x)$, определенную в (1), но с вырожденной матрицей A ($\lambda_{\min}(A) = 0$).

1) Покажите, что функция $f(x)$ удовлетворяет условию Поляка-Лоясиевича с константой $\mu = \lambda_{\min^+}(A)$.

2) Как выбрать шаг градиентного метода γ, чтобы гарантировать линейную сходимость (укажите хотя бы одно значение)? Сколько итераций необходимо градиентному методу для достижения точности $f(x^N) - f(x^*) \leq \varepsilon$?

3*) Будет ли иметь место сходимость по аргументу? Если да, к какой точке будет сходиться градиентный метод при старте из точки x^0?

Задача 6. Зададим $f(x,y) = \frac{1}{2}x^2y^2 + \frac{\lambda}{2}x^2 + \frac{\lambda}{2}y^2$, $\lambda > 0$.

1) Покажите, $f(x,y)$ не выпукла ни для какого $\lambda > 0$.

2) Покажите, что $f(x,y)$ удовлетворяет условию Поляка-Лоясиевича для всякого $\lambda > 0$. Укажите константу μ для этого условия (хотя бы одно значение).

Задача 7 (**Необязательная**). Рассмотрим функцию $f(x) = \sum_{i=1}^n x_i \ln x_i$, определенную на $\{x \in \mathbb{R}^n : \ x_i \geq 0, \ i = 1, \ldots, n\}$. (Слагаемое $x_i \ln x_i$ непрерывно доопределяется в нуле нулем – это можно показать по правилу Лопиталя). Обозначим $\Delta^{n-1} = \{x \in \mathbb{R}^n : \ x_i \geq 0, \ i = 1, \ldots, n; \ x_1 + \ldots + x_n = 1\}$ – единичный симплекс в $\mathbb{R}^n$.

Постройте задачи, двойственные к данным.

1) $\min\limits_{x_1,\ldots,x_n \geq 0} f(x)$.

2) $\min\limits_{x \in \Delta^{n-1}} f(x)$. Введите множители Лагранжа только на ограничения $x_i \geq 0$.

3) $\min\limits_{x \in \Delta^{n-1}} f(x)$. Введите множители Лагранжа на ограничения $x_i \geq 0$ и $x_1 + \ldots + x_n = 1$.

Задача 8. Пусть x^{k+1} и x^k – последовательные итерации в методе сопряженных градиентов. Метод запускается на квадратичной функции $f(x)$ вида (1).

1. Докажите, что градиенты на соседних итерациях ортогональны: $\left\langle \nabla f(x^{k+1}), \nabla f(x^k) \right\rangle = 0$.

2. Пусть q^k – направление спуска на k-ой итерации, т.е. $x^{k+1} = x^k - \gamma_k q^k$. Докажите, что направления спуска на соседних итерациях являются сопряженными: $\left\langle q^k, Aq^k \right\rangle = 0$.

Задача 9. Выведите вид дивергенции Брэгмана $V_d(x,y)$ для данной прокс-функции $d(x)$.

1. Квадратичная функция $d(x) = \frac{1}{2}\|x\|_2^2$.

2. Энтропия $d(x) = \sum\limits_{i=1}^n x_i(\ln x_i - 1)$.

3. Выпишите шаг зеркального спуска для задачи $\min\limits_{x \in \Delta^n} f(x)$.

Основные задачи.

Задача 10 (система нелинейных уравнений, замечание 1.1 [1]). Рассмотрим систему нелинейных уравнений $g(x) = 0$, где $g(x) = (g_1(x), \ldots, g_m(x))^\top : \ \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ – дифференцируемая функция. Будем считать, что система имеет решение, т.е. для некоторого x^* выполняется $g(x^*) = 0$. Пусть также матрица Якоби $J(x) = \frac{\partial g(x)}{\partial x}$ удовлетворяет условию $\lambda_{\min}(J(x)(J(x))^\top) \geq \mu > 0$ для всякого $x \in \mathbb{R}^n$. Докажите, что функция $f(x) = \|g(x)\|_2^2$ удовлетворяет условию Поляка-Лоясиевича с константой μ.

Задача 11 (нащупывание цен по Вальрасу, упражнение 4.7 [1]).

Пусть руководство города владеет пекарнями. Затраты i-й пекарни на выпечку x_i тонн хлеба в день равны $f_i(x_i)$; это сильно выпуклые возрастающие функции. Задача руководства — производить не меньше C тонн хлеба в день (C — объём спроса на хлеб в день со стороны населения города) так, чтобы суммарные затраты всех пекарен были минимальны. Формально задача может быть поставлена следующим образом:

$$\sum_{i=1}^n f_i(x_i) \to \min_{x_i \geq 0, \ i=1,\ldots,n} \quad : \quad \sum_{i=1}^n x_i \geq C. \tag{2}$$

Обозначим решение этой задачи $x^* = \{x_i^*\}_{i=1}^n$.

1. Предположим теперь, что у n пекарен есть собственники, которые продают хлеб руководству города (распределяющему этот хлеб среди населения) по цене p^k в k-й день. Таким образом, собственники решают задачи

$$x_i(p^k) = \arg\max_{x_i \geq 0} \left\{ p^k x_i - f_i(x_i) \right\}, \qquad i = 1, \ldots, n.$$

Руководство города действует по следующему правилу: каждый день k у него есть представление о том, в каком отрезке лежит равновесная цена $[p^k_{\min}, p^k_{\max}]$. Выставив цену

$$p^k = \frac{1}{2}(p^k_{\min} + p^k_{\max}),$$

руководство собирает следующую информацию с пекарен: $\sum_{i=1}^n x_i(p^k)$. Далее,

$$[p^{k+1}_{\min}, p^{k+1}_{\max}] = \begin{cases} \left[p^k_{\min},\ \frac{1}{2}(p^k_{\min} + p^k_{\max})\right], & \text{если } \sum_{i=1}^n x_i(p^k) > C, \\ \left[\frac{1}{2}(p^k_{\min} + p^k_{\max}),\ p^k_{\max}\right], & \text{если } \sum_{i=1}^n x_i(p^k) \leq C. \end{cases}$$

1) Выпишите двойственную задачу к (2). Покажите, что если на двойственной запустить метод деления отрезка пополам, то получится описанный процесс подбора цен.

2) Докажите, что $x_i(p^k) \longrightarrow x_i^*$ и оцените скорость сходимости.

3) Предложите способ оценки начального приближения $[p^0_{\min}, p^0_{\max}]$.

Задача 12 (восстановление матрицы корреспонденций).

Рассмотрим транспортную сеть, представленную в виде направленного графа $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$. Также рассмотрим поездки, совершаемые в данной сети, или корреспонденции (i, j), где i – источник, j – сток. Каждой корреспонденции (i, j) припишем ее размер $d_{(i,j)} \geq 0$, т.е. объем потока транспортных средств, движущихся из i в j.

Пусть известно количество транспортных средств, выезжающих из i-го района ℓ_i и количество транспортных средств, въезжающих в j-ый район w_j, причем $\sum_{i \in \mathcal{V}} \ell_i = \sum_{j \in \mathcal{V}} w_j = 1$. Также известно время путешествия между районами $T_{ij} \geq 0$. Размеры корреспонденций d_{ij} неизвестны, но могут быть найдены в результате решения задачи оптимизации

$$\sum_{i,j \in \mathcal{V}} d_{ij} \ln d_{ij} + \beta \sum_{i,j \in \mathcal{V}} T_{ij} d_{ij} \to \min_{d_{ij} \geq 0} : \quad \sum_{j \in \mathcal{V}} d_{ij} = \ell_i, \ \sum_{i \in \mathcal{V}} d_{ij} = w_j, \tag{3}$$

где $\beta > 0$ – некоторый коэффициент.

1. Постройте задачу, двойственную к (3). Выпишите формулу восстановления прямых переменных по двойственным.

2. Добавьте тавтологическое ограничение $\sum\limits_{i,j \in \mathcal{V}} d_{ij} = 1$. Постройте двойственную к (3) задачу и выпишите формулу восстановления прямых переменных по двойственным.

Задача 13 (оптимизация с аффинными ограничениями, пример 4.1 [1]).

Рассмотрим задачу оптимизации с аффинными ограничениями

$$\min_{x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}^d} \sum_{i=1}^n f_i(x_i) : \quad WX = 0, \tag{4}$$

где $X = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^\top \in \mathbb{R}^{n \times d}$ – матрица переменных, $W \in \mathbb{R}^{n \times n}$ – симметричная неотрицательно определенная матрица.

1. Будем считать, что доступно вычисление сопряженной функции $f_i^*(x_i)$ и ее градиента. Выпишите двойственную задачу к (4). Покажите, что двойственная функция $\varphi(Y)$ распадается на сумму $f_i^*([WY]_i)$.

2. Выпишите, какой вид имеет шаг градиентого метода на двойственной функции. Сколько умножений на W требуется для совершения одного шага?

3. Считая, что каждая f_i является μ-сильно выпуклой, выпишите оценку на константу гладкости двойственной функции.

4*. Считая, что каждая f_i является L-гладкой функцией и считая $\lambda_{\min}(W) = 0$, покажите, что $\varphi(Y)$ является сильно выпуклой на $\operatorname{Im} W$ (т.е. условие сильной выпуклости выполняется для любых двух точек x, y, разность которых лежит в $\operatorname{Im} W$). Найдите константу сильной выпуклости $\varphi(Y)$.

Задача 14 (наискорейший спуск, замечание 1.4 [1]). Покажите, что метод наискорейшего спуска не быстрее обычного градиентного с постоянным шагом. Рассмотрим функцию $f(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^n \lambda_i x_i^2$, где $0 < \mu = \lambda_1 \leq \ldots \leq \lambda_n = L$, и стартовую точку $x^0 = \left(\frac{1}{\mu}, 0, \ldots, 0, \frac{1}{L}\right)^\top$.

1) Покажите, что $x^1 = \left(\frac{L-\mu}{L+\mu}\right)\left(\frac{1}{\mu}, 0, \ldots, 0, -\frac{1}{L}\right)^\top$.

2) Докажите, что $x^{2i} = \left(\frac{L-\mu}{L+\mu}\right)^{2i} x^0$ и $x^{2i+1} = \left(\frac{L-\mu}{L+\mu}\right)^{2i} x^0$.

3) Сравните скорость сходимости по аргументу с градиентным спуском с оптимально подобранным шагом, как в задаче 2.

Задача 15 (нижние оценки в сильно выпуклом гладком случае, упражнение 1.3 [1]). Зададим $L > \mu > 0$, $\kappa = \frac{L}{\mu}$. Рассмотрим функцию $f(x)$, определенную на пространстве последовательностей ℓ_2 и имеющую вид $f(x) = \frac{\mu(\kappa-1)}{8}\left[x_1^2 + \sum_{i=1}^\infty (x_i - x_{i+1})^2 - 2x_1\right] + \frac{\mu}{2}\|x\|_2^2$. Стартовая точка $x^0 = 0$.

1) Покажите, что функция $f(x)$ является μ-сильно выпуклой и L-гладкой, т.е. имеет число обусловленности κ.

2) Пусть $x^* = (x_1^*, x_2^*, \ldots)$ – точка минимума $f(x)$. Покажите, что $x_k^* = \left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^k$.

3) Метод оптимизации использует только градиенты целевой функции, поэтому на каждой итерации количество ненулевых компонент увеличивается не более, чем на одну. Покажите, что $\|x^k - x^*\|_2^2 \geq \left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^{2k} \|x^0 - x^*\|_2^2$.

4*) Сделайте окончательный вывод: для получения точности $\|x^N - x^*\|_2^2 \leq \varepsilon$ необходимо по крайней мере $N = \Omega\left(\sqrt{\kappa}\ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)\right)$ итераций.

Указание: распишите $\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 = \|x^k - x^* - \gamma_k \nabla f(x^k)\|_2^2$, раскройте квадрат и получите оценку сверху на $\min\limits_{k=1,\ldots,N} v(x^k)$. Затем воспользуйтесь результатом п. 3.

Задача 16 (модель стабильной динамики). Рассмотрим транспортную сеть, представленную в виде направленного графа $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$. Каждому ребру $e \in \mathcal{E}$ припишем время проезда по нему $t_e > 0$ и пропускную способность $b_e > 0$. Также рассмотрим поездки, совершаемые в данной сети, или корреспонденции $\omega = (i, j)$, где i – источник, j – сток. Множество всех корреспонденций обозначим $W \subseteq V \times V$.

Каждой корреспонденции $w = (i, j)$ припишем ее размер $d_\omega > 0$, т.е. объем потока транспортных средств, движущихся из i в j. Также обозначим P_ω множество всех простых путей их i в j и для каждого пути $p \in P_\omega$ обозначим поток по нему $x_p \geq 0$. Введем множество допустимых потоков $\mathcal{X}_D = \left\{x_p :\ x_p \geq 0,\ \forall \omega \in W :\ \sum_{p \in P_\omega} x_p = d_\omega\right\}$. Таким образом, допустимые потоки - это те, которые

в точности закрывают ограничения по корреспонденциям.

Рассмотрим модель стабильной динамики.

$$\sum_{\omega\in W}\sum_{p\in P_w} x_p \sum_{e\in p} t_e \to \min_{x\in\mathcal{X}_D}: \quad \forall e\in\mathcal{E}: \sum_{\omega\in W}\sum_{p\in P_w} x_p \le b_e. \tag{5}$$

В данной модели оптимизируется суммарное количество времени, которое участники движения проведут в дороге.

1. Покажите, что двойственная задача к (5) имеет вид

$$\varphi(y) \equiv -\sum_{e\in\mathcal{E}} y_e b_e + \sum_{\omega\in W} d_\omega \min_{p\in P_\omega}\left(\sum_{e\in p}(t_e+y_e)\right) \to \max_{y\ge 0}, \tag{6}$$

где y – двойственная переменная размерности $|\mathcal{E}|$.

2. Докажите, что $\varphi(y)$ вогнута и выпишите, какой вид имеет $\partial(-\varphi(y))$ (субдифференциал). Покажите, что для расчета субградиента нужно находить кратчайший путь относительно весов ребер (t_e+y_e). Какую сложность имеет расчет субдифференциала? Выразите эту сложность через $|W|$, $|\mathcal{V}|$ и $|\mathcal{E}|$.

3. Предложите прямо-двойственный метод решения пары задач (5)-(6). За основу возьмите метод проекции субградиента. Выпишите вид итерации на двойственных переменных y.

4. Явно выпишите формулу обновления прямых переменных – потоков по путям x_p.

Задача 17 (регуляризация Тихонова, упражнение 4.9 [1]). Рассмотрим задачу линейной регрессии

$$\|Ax-b\|_2^2 \to \min_x$$

и ее решение x^*. Предположим также, что $x^* = A^\top y^*$ для некоторого y^*. Пусть вектор b неизвестен, и вместо него мы имеем доступ к неточному $\tilde{b}$. такому что $\|\tilde{b}-b\|_2 \le \delta$. Рассмотрим регуляризованную версию задачи

$$\|Ax-\tilde{b}\|_2^2 + \frac{\mu}{2}\|x\|_2^2 \to \min_x$$

и обозначим ее решение $x^*_\mu(\tilde{b})$. Аналогично $x^*_\mu(b)$ – решение регуляризованной задачи с точной правой частью. Задача - подобрать оптимальное μ для того, чтобы x^*_μ приближало x^* наилучшим образом.

1) Пусть $\Theta(A,\mu) = (A^\top A+\mu I)^{-1}A^\top$. Пользуясь условиями оптимальности первого порядка, покажите, что $x^* - x^*_\mu(b) = \mu\Theta(A,\mu)y^*$ и $x^*_\mu(b) - x^*_\mu(\tilde{b}) = \Theta(A,\mu)(b-\tilde{b})$.

2) Докажите, что $\|\Theta(A,\mu)\| \le \frac{1}{2\sqrt{\mu}}$. *Указание*: используйте разложение A или $A^\top A$ по собственным векторам.

3) По неравенству треугольника получаем

$$\|x^* - x^*_\mu(\tilde{b})\| \le \|x^* - x^*_\mu(b)\|_2 + \|x^*_\mu(b) - x^*_\mu(\tilde{b})\|_2 = \|\Theta(A,\mu)\|\left(\mu\|y^*\|_2 + \|b-\tilde{b}\|_2\right).$$

Пользуясь полученной оценкой на $\|\Theta(A,\mu)\|$ и данной в условии оценкой $\|b-\tilde{b}\|_2 \le \delta$, получите оптимальное выражение для μ через δ и $R = \|y^*\|_2$.

Задача 18. Известно, что шаг градиентного метода можно получить через минимизацию модели функции:

$$x^{k+1} = \arg\min_{x\in\mathbb{R}^d}\left[\left\langle \nabla f(x^k), x\right\rangle + \frac{1}{2\gamma}\|x-x^k\|_2^2\right] \quad\Longleftrightarrow\quad x^{k+1} = x^k - \gamma_k\nabla f(x^k).$$

1. Покажите, что в методе проекции градиента шаг можно разбить на градиентный шаг и проекцию.

$$x^{k+1} = \arg\min_{x \in Q} \left[\left\langle \nabla f(x^k), x \right\rangle + \frac{1}{2\gamma} \|x - x^k\|_2^2 \right] \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} x^{k+1/2} = x^k - \gamma_k \nabla f(x^k) \\ x^{k+1} = \pi_Q(x^{k+1/2}) \end{cases}$$

Указание: воспользуйтесь условиями оптимальности первого порядка и определением проекции на множество: $\pi_Q(x) = \arg\min_{y \in Q} \|x - y\|_2^2$.

2. Пусть $d(x)$ – сильно выпуклая прокс-функция и $V_d(x, y) = d(x) - d(y) - \langle \nabla d(y), x - y \rangle$ – дивергенция Брегмана. Покажите, что в методе зеркального спуска шаг можно разбить на шаг в двойственном пространстве и брегмановскую проекцию на исходное множество.

$$x^{k+1} = \arg\min_{x \in Q} \left[\left\langle \nabla f(x^k), x \right\rangle + \frac{1}{\gamma} V_d(x, x^k) \right] \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} \nabla d(x^{k+1/2}) = \nabla d(x^k) - \gamma \nabla f(x^k) \\ x^{k+1} = \arg\min_{x \in Q} \left[V_d(x, x^{k+1/2}) \right] \end{cases}$$

Дополнительные задачи.

Задача 19 (обучение с подкреплением). Рассмотрим задачу обучения агента в среде. Пусть $s \in \mathcal{S}$ – множество состояний, $a \in \mathcal{A}$ – множество действий агента. Множества $\mathcal{S}$ и $\mathcal{A}$ конечны. Когда агент предпринимает действие a в состоянии s, он получает награду $r(s, a)$ и переходит в состояние s' с вероятностью $P(s'|s, a)$. Агент следует стратегии $\pi \in \Delta^{|\mathcal{S}| \cdot |\mathcal{A}| - 1}$, которая приписывает набор вероятностей действиям $a \in \mathcal{A}$ в каждом состоянии $s \in \mathcal{S}$, где $\Delta^{n-1} = \{x \in \mathbb{R}^n : \ \sum_{i=1}^n x_i = 1, \ x_i \geq 0\}$ обозначает вероятностый симплекс в $\mathbb{R}^n$. Введем функцию $V_\gamma^\pi : \mathcal{S} \to \mathbb{R}$ (value function), обозначающую ожидаемую награду агента при старте из состояния s_0 при стратегии π.

$$V_0^\pi(s) = \lim_{H \to \infty} \mathbb{E}_\pi \left[\frac{1}{H} \sum_{t=0}^{H-1} r(s_t, a_t) \Big| s_0 = s \right]; \quad V_\gamma^\pi(s) = \mathbb{E}_\pi \left[\sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t r(s_t, a_t) \Big| s_0 = s \right], \ \gamma > 0,$$

где γ – коэффициент дисконтирования. Соответственно, задача поиска оптимальной стратегии имеет вид $\max_{\pi \in \Delta^{|\mathcal{S}| \cdot |\mathcal{A}| - 1}} V_0^\pi$ (усредненный случай) или $\max_{\pi \in \Delta^{|\mathcal{S}| \cdot |\mathcal{A}| - 1}} V_\gamma^\pi$ (дисконтированный случай).

Пусть $\nu_\pi \in \Delta^{|\mathcal{S}| - 1}$ – стационарное распределение на множестве состояний, которое соответствует стратегии π, т.е.

$$\nu_\pi(s') = \sum_{(s,a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}} P(s'|s, a) \pi(a|s) \nu_\pi(s), \quad s' \in \mathcal{S}.$$

Также обозначим $\mu_\pi(s, a) = \nu_\pi(s) \pi(a|s)$. Тогда можно показать, что $V_0^\pi = \sum_{(s,a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}} \mu_\pi(s, a) r(s, a)$.

1. Задача поиска оптимальной стратегии вида V_0^π имеет вид

$$\max_{\mu \in \Delta^{|\mathcal{S}| \cdot |\mathcal{A}|}} \sum_{(s,a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}} \mu(s, a) r(s, a) : \quad \forall s' \in \mathcal{S} \ \sum_{a \in \mathcal{A}} \mu(s, a) = \sum_{(s,a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}} P(s'|s, a) \mu(s, a) \tag{7}$$

Покажите, что двойственная задача к (7) имеет вид

$$\min_{\overline{V} \in \mathbb{R}, \ V \in \mathbb{R}^{|\mathcal{S}|}} \overline{V} : \quad V(s) \geq r(s, a) + \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s'|s, a) V(s') - \overline{V}. \tag{8}$$

2. Докажите, что решением двойственной (8) являются V^*, V такие, что

$$V(s) = \max_{a \in \mathcal{A}} \left(r(s,a) + \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s'|s,a) V(s') - V^* \right).$$

3. Задача поиска оптимальной стратегии вида V_γ^π имеет вид

$$\max_{\mu \in \Delta^{|\mathcal{S}| \cdot |\mathcal{A}| - 1}} \sum_{(s,a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}} \mu(s,a) r(s,a) : \quad s' \in \mathcal{S} \ \sum_{a \in \mathcal{A}} \mu(s,a) = \gamma \cdot \sum_{(s,a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}} P(s'|s,a) \mu(s,a) + q(s'), \tag{9}$$

где $q \in \Delta^{|\mathcal{S}|-1}$ – стартовое распределение вероятностей состояний. Докажите, что двойственная к (7) имеет вид

$$\min_{V \in \mathbb{R}^{|\mathcal{S}|}} \sum_{s \in \mathcal{S}} q(s) V(s) : \quad V(s) \geq r(s,a) + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s'|s,a) V(s').$$

Задача 20 (квазивыпуклые функции, упражнение 2.7 [1]). Функцию $f(x) : \ Q \to \mathbb{R}$, где $Q \subseteq \mathbb{R}^n$ – выпуклое множество, назовем квазивыпуклой, если $f(\alpha x + (1-\alpha) y) \leq \max\{f(x), f(y)\}$ для всякого $\alpha \in (0,1)$.

1) Множеством Лебега назовем $\mathcal{L}_f(c) = \{x \in Q : \ f(x) < c\}$, где $c \in \mathbb{R}$. Докажите, что все множества Лебега квазивыпуклой функции выпуклы.

2) Пусть функция f дифференцируема и имеет единственную точку минимума x^*. Для точки $x \neq x^*$ обозначим касательную ко множеству $\mathcal{L}_f(x)$ как $\mathcal{K}_x$. Докажите, что $\nabla f(x)$ является нормалью к $\mathcal{K}_x$.

3) Обозначим модуль непрерывности $\omega(t) = \max(f(x) - f(x^*) : \ \|x - x^*\|_2 \leq t)$ и введем $v(x) = \frac{\langle \nabla f(x), x - x^* \rangle}{\|\nabla f(x)\|_2}$. Докажите, что $f(x) - f(x^*) \leq \omega(v(x))$.

Указание. Пусть y – проекция x^* на $\mathcal{K}_x$. Заметьте, что $f(x) \leq f(y)$ и $v(x) = \|y - x^*\|_2$.

4*) Докажите сходимость градиентного метода $x^{k+1} = x^k - \gamma_k \nabla f(x^k)$, где $\gamma_k = \frac{R}{\|\nabla f(x^k)\| \sqrt{N}}$, а N – заранее заданное число шагов.

Список литературы

[1] А. В. Гасников. *Современные численные методы оптимизации.* 2021.