

Методы внутренней точки

Рассмотрим выпуклую задачу условной оптимизации:

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{x}) &\rightarrow \min_{\mathbf{x}}, \\ f_i(\mathbf{x}) &\leq 0, \quad i = \overline{1, m}; \\ A\mathbf{x} &= \mathbf{b}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{p \times n}$, $p < n$, матрица A имеет ранг p , все функции $f_i(\mathbf{x})$, $i = \overline{0, m}$ являются выпуклыми и непрерывно-дифференцируемыми. Обозначим через $\mathcal{D} = \text{dom} f_0 \cap \bigcap_{i=1}^m \text{dom} f_i$ – доменное множество, через $\mathcal{F} = \{\mathbf{x} \in \mathcal{D} \mid f_i(\mathbf{x}) \leq 0, A\mathbf{x} = \mathbf{b}\}$ – множество допустимых решений, а через \mathbf{x}_{opt} – решение задачи (1). Заметим, что в выпуклых задачах условной оптимизации ограничения вида равенства могут быть только линейными, иначе допустимое множество \mathcal{F} не будет выпуклым.

Рассмотрим функцию Лагранжа

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\mu}^T (A\mathbf{x} - \mathbf{b}).$$

Если точка $\hat{\mathbf{x}} \in \mathcal{D}$ является (глобальным) решением задачи (1), то найдутся $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$, $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^p$ такие, что $(\hat{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ удовлетворяют системе Куна-Таккера:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} L(\hat{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) &= \nabla f_0(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla f_i(\hat{\mathbf{x}}) + A^T \boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}, && \text{– условие стационарности} \\ \lambda_i &\geq 0, \quad \lambda_i f_i(\hat{\mathbf{x}}) = 0, \quad i = \overline{1, m}; && \text{– условие дополняющей нежесткости} \\ f_i(\hat{\mathbf{x}}) &\leq 0, \quad A\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{b}. && \text{– условие допустимости} \end{aligned} \quad (2)$$

Рассмотрим двойственную функцию Лагранжа $g(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \inf_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ и двойственную задачу оптимизации:

$$\begin{aligned} g(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) &\rightarrow \max_{\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}}, \\ \lambda_i &\geq 0, \quad i = \overline{1, m}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь и далее будем предполагать, что выполнены условия Слейтера, т.е. $\exists \tilde{\mathbf{x}} : f_i(\tilde{\mathbf{x}}) < 0 \forall i$ ¹. В этом случае условия (2) являются достаточными условиями оптимальности для задачи (1). Кроме того, выполняется свойство сильной двойственности, т.е. решение прямой задачи $f_{opt} = f_0(\mathbf{x}_{opt})$ совпадает с решением двойственной $g_{opt} = g(\boldsymbol{\lambda}_{opt}, \boldsymbol{\mu}_{opt})$. Этот факт позволяет получить неэвристический критерий останова для метода решения задачи (1), который итерационно вычисляет как прямую точку \mathbf{x} , так и двойственную точку $(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ такую, что $\lambda_i \geq 0$, $g(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) > -\infty$ ². Тогда величина $f_0(\mathbf{x}) - g(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ будет верхней оценкой на $f_0(\mathbf{x}) - f_{opt}$, и итерационный процесс оптимизации можно завершать, если $f_0(\mathbf{x}) - g(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) < \varepsilon$.

Задача квадратичного программирования с ограничениями вида равенства

Рассмотрим следующую задачу оптимизации:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \mathbf{x}^T Q \mathbf{x} - \mathbf{c}^T \mathbf{x} &\rightarrow \min_{\mathbf{x}}, \\ A\mathbf{x} &= \mathbf{b}, \end{aligned}$$

где $Q \succ 0$, т.е. минимизируемая функция является строго выпуклой. Здесь рассматриваются только ограничения вида равенства. Поэтому выполняется свойство сильной двойственности, а условия Куна-Таккера являются необходимыми и достаточными условиями оптимальности:

$$\begin{aligned} Q\mathbf{x} - \mathbf{c} + A^T \boldsymbol{\mu} &= \mathbf{0}, \\ A\mathbf{x} &= \mathbf{b}. \end{aligned}$$

¹На самом деле достаточно требовать выполнение условия $f_i(\tilde{\mathbf{x}}) < 0$ только для нелинейных функций f_i .

²Такие точки называются допустимыми для двойственной задачи оптимизации

Эту систему линейных уравнений можно эквивалентно записать как

$$\begin{bmatrix} Q & A^T \\ A & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \boldsymbol{\mu} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{c} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix}.$$

Матрица данной СЛАУ является невырожденной. Поэтому решение $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu})$ всегда существует и единственно. В случае нестрогой выпуклости минимизируемой функции ($Q \succeq 0$) матрица СЛАУ будет невырожденной тогда и только тогда, когда:

$$\mathbf{x}^T Q \mathbf{x} > 0 \quad \forall \mathbf{x} : A \mathbf{x} = 0.$$

Метод Ньютона для систем с ограничениями вида равенства

Рассмотрим задачу оптимизации

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{x}) &\rightarrow \min_{\mathbf{x}}, \\ A \mathbf{x} &= \mathbf{b}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $f_0(\mathbf{x})$ – выпуклая, дважды непрерывно-дифференцируемая функция. Здесь по-прежнему присутствуют только ограничения вида равенства, поэтому выполняется свойство сильной двойственности, а условия Куна-Таккера являются необходимыми и достаточными условиями оптимальности. Рассмотрим несколько способов решения задачи (4).

- **Исключение неизвестных.** Общее решение СЛАУ $A \mathbf{x} = \mathbf{b}$ можно представить как $\hat{\mathbf{x}} + G \mathbf{z}$, где $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n$ – частное решение СЛАУ, $G \in \mathbb{R}^{n \times (n-p)}$ – матрица, в столбцах которой стоят базисные вектора для $\ker A$, $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{n-p}$ – произвольный вектор. В результате задачу (4) можно эквивалентно переписать как задачу выпуклой безусловной оптимизации

$$f_0(\hat{\mathbf{x}} + G \mathbf{z}) \rightarrow \min_{\mathbf{z}}.$$

Для этой задачи может быть задействован обширный арсенал методов решения задач безусловной оптимизации. Однако, такой подход может исказить структура исходной задачи. Если, например, матрица A является сильно разреженной, то матрица G получится произвольной, и свойство разреженности не удастся использовать для более эффективного решения задачи (4).

- **Решение двойственной задачи.** Рассмотрим двойственную функцию для задачи (4):

$$\begin{aligned} g(\boldsymbol{\mu}) &= \inf_{\mathbf{x}} (f_0(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\mu}^T (A \mathbf{x} - \mathbf{b})) = -\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{b} + \inf_{\mathbf{x}} (f_0(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\mu}^T A \mathbf{x}) = \\ &= -\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{b} - \sup_{\mathbf{x}} (\mathbf{x}^T (-A^T \boldsymbol{\mu}) - f_0(\mathbf{x})) = -\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{b} - f_0^*(-A^T \boldsymbol{\mu}) \rightarrow \max_{\boldsymbol{\mu}}. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь через f_0^* обозначена сопряженная по Фенхелю функция для f_0 . Сопряженная функция вычисляется аналитически для многих элементарных функций. Для решения двойственной задачи (5) могут быть использованы методы безусловной оптимизации. По решению двойственной задачи $\boldsymbol{\mu}_{opt}$ решение прямой задачи (4) вычисляется как

$$\mathbf{x}_{opt} = \arg \sup_{\mathbf{x}} (\mathbf{x}^T (-A^T \boldsymbol{\mu}_{opt}) - f_0(\mathbf{x})).$$

Аналогично предыдущему случаю при переходе к двойственной задаче структура исходной задачи (4), например, свойство разреженности матрицы A , может теряться.

- **Прямое решение методом Ньютона.** Пусть имеется некоторая точка $\mathbf{x}_k \in \mathcal{F}$. В методе Ньютона для поиска очередного направления оптимизации \mathbf{d}_k минимизируемая функция f_0 локально приближается квадратичной:

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k) &\simeq f_0(\mathbf{x}_k) + \nabla f_0(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k + \frac{1}{2} \mathbf{d}_k^T \nabla^2 f_0(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k \rightarrow \min_{\mathbf{d}_k}, \\ A(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k) &= \mathbf{b} \Leftrightarrow A \mathbf{d}_k = \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Таким образом, получаем задачу минимизации выпуклой квадратичной функции при линейных ограничениях. Решение такой задачи может быть найдено путем решения СЛАУ:

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f_0(\mathbf{x}) & A^T \\ A & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{d}_k \\ \boldsymbol{\mu}_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla f_0(\mathbf{x}) \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}. \quad (6)$$

Предположение строгой выпуклости f_0 означает, что $\nabla^2 f_0 \succ 0$. Следовательно, матрица СЛАУ является невырожденной, и пара $(\mathbf{d}_k, \boldsymbol{\mu}_k)$ определена однозначно. По аналогии с методом Ньютона для задачи

безусловной оптимизации, в данном случае рекомендуется дополнительно оценивать длину шага вдоль направления \mathbf{d}_k путем решения одномерной задачи

$$f_0(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k) \rightarrow \min_{\alpha \geq 0}.$$

Здесь можно воспользоваться как точными методами одномерной оптимизации, например, методом Брента, так и приближенными, например, схемой backtracking. Заметим, что точка $\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k$ принадлежит допустимому множеству \mathcal{F} для любого α . Если двойственная функция (5) вычисляется аналитически, то текущее решение $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k$ может быть проверено на ε -оптимальность путем сравнения $f_0(\mathbf{x}_{k+1}) - g(\boldsymbol{\mu}_k) < \varepsilon$.

В отличие от предыдущих двух подходов исключения неизвестных и решения двойственной задачи, итерационное решение системы (6) не меняет структуры задачи. В частности, свойство разреженности матрицы A может быть учтено путем решения (6) методом сопряженных градиентов с соответствующей реализацией алгоритма умножения матрицы СЛАУ на вектор.

В заключение заметим, что система (6) эквивалентна линеаризации системы Куна-Таккера:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla f_0(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k) + A^T \boldsymbol{\mu}_k = \mathbf{0}, \\ A(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k) = \mathbf{b}, \end{array} \right. \xrightarrow{\text{Линеаризация}} \left\{ \begin{array}{l} \nabla f_0(\mathbf{x}_k) + \nabla^2 f_0(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k + A^T \boldsymbol{\mu}_k = \mathbf{0}, \\ A \mathbf{d}_k = \mathbf{0}. \end{array} \right.$$

Метод Ньютона с недопустимой начальной точкой

Будем по-прежнему рассматривать задачу оптимизации (4) с выпуклой дважды непрерывно-дифференцируемой функцией f_0 . Для запуска метода Ньютона из предыдущего раздела необходимо задать начальную точку $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{F}$. Предположим теперь, что поиск такой допустимой начальной точки связан с определенными трудностями. Как правило, это актуально в случае $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$. Пусть, например, доменное множество \mathcal{D} представляет собой положительный октант. Тогда поиск решения СЛАУ $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ при ограничениях $x_i \geq 0$ может быть сформулирован как задача квадратичного программирования.

Предположим, что имеется точка $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{D}$, но $\mathbf{x}_0 \notin \mathcal{F}$. Рассмотрим для решения задачи (4) прямо-двойственный вариант метода Ньютона. В прямо-двойственных методах оптимизации в итерациях вычисляются как прямые переменные, так и двойственные. Для задачи (4) это означает вычисление $(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\mu}_k)$. Рассмотрим поиск очередного направления оптимизации $(\mathbf{d}_k^x, \mathbf{d}_k^\mu)$ путем решения линеаризованной системы Куна-Таккера:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla f_0(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k^x) + A^T(\boldsymbol{\mu}_k + \mathbf{d}_k^\mu) = \mathbf{0}, \\ A(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k^x) = \mathbf{b}, \end{array} \right. \xrightarrow{\text{Линеаризация}} \left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 f_0(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k^x + A^T \mathbf{d}_k^\mu = -\nabla f_0(\mathbf{x}_k) - A^T \boldsymbol{\mu}_k, \\ A \mathbf{d}_k^x = \mathbf{b} - A \mathbf{x}_k. \end{array} \right.$$

Последнюю систему можно записать в следующем виде:

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f_0(\mathbf{x}_k) & A^T \\ A & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{d}_k^x \\ \mathbf{d}_k^\mu \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f_0(\mathbf{x}_k) + A^T \boldsymbol{\mu}_k \\ A \mathbf{x}_k - \mathbf{b} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{dual}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\mu}_k) \\ \mathbf{r}_{primal}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\mu}_k) \end{bmatrix} = -\mathbf{r}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\mu}_k). \quad (7)$$

Заметим, что найденное таким образом направление оптимизации прямой точки \mathbf{d}_k^x может не быть направлением уменьшения функции f_0 . Действительно,

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial \alpha} f_0(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k^x) \right|_{\alpha=0} &= \nabla f_0(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k^x = (\mathbf{d}_k^x)^T (-A^T \boldsymbol{\mu}_k - \nabla^2 f_0(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k^x - A^T \mathbf{d}_k^\mu) = \\ &= -(\mathbf{d}_k^x)^T \nabla^2 f_0(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k^x - (\boldsymbol{\mu}_k + \mathbf{d}_k^\mu)^T (\mathbf{b} - A \mathbf{x}_k). \end{aligned}$$

Если точка $\mathbf{x}_k \in \mathcal{F}$, т.е. $A \mathbf{x}_k = \mathbf{b}$, то производная f_0 по направлению \mathbf{d}_k^x будет отрицательной для строго-выпуклой функции f_0 . Для недопустимой точки \mathbf{x}_k эта производная может оказаться положительной. С другой стороны, требование уменьшения значения f_0 для недопустимой прямой точки может не отражать прогресс прямо-двойственного метода оптимизации. Разумной характеристикой такого прогресса является величина $\|\mathbf{r}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\mu}_k)\|$, которая соответствует величине невязки системы Куна-Таккера для задачи (4). Ситуация $\|\mathbf{r}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\mu}_k)\| = 0$ означает, что \mathbf{x}_k является решением прямой задачи (4), а $\boldsymbol{\mu}_k$ – решением двойственной. В результате поиск длины шага α вдоль направления оптимизации $(\mathbf{d}_k^x, \mathbf{d}_k^\mu)$ можно осуществлять с помощью стратегии backtracking для функции $\|\mathbf{r}(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k^x, \boldsymbol{\mu}_k + \alpha \mathbf{d}_k^\mu)\|$. В качестве упрощенного критерия здесь можно использовать следующий:

$$\|\mathbf{r}(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k^x, \boldsymbol{\mu}_k + \alpha \mathbf{d}_k^\mu)\| < (1 - \rho \alpha) \|\mathbf{r}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\mu}_k)\|, \quad (8)$$

где $\rho \in (0, 0.5)$ – параметр метода, выбираемый пользователем. По сравнению со стандартным критерием, используемым в backtracking, критерий (8) не требует вычисления производной функции $\|\mathbf{r}\|$ по направлению $(\mathbf{d}_k^x, \mathbf{d}_k^\mu)$. Прямо-двойственный метод Ньютона заканчивает работу, когда $\|\mathbf{r}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\mu}_k)\| < \varepsilon$.

Если на текущей итерации оказалось, что $\alpha = 1$, то все последующие прямые точки \mathbf{x}_k будут допустимыми. Поэтому здесь можно переключиться на метод Ньютона, описанный в предыдущем разделе.

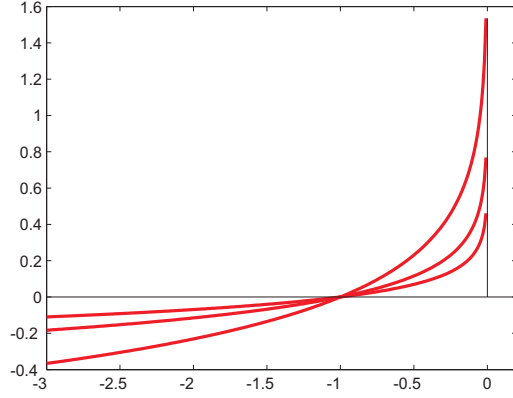


Рис. 1: Индикаторная функция $I_-(u)$ и ее приближение с помощью логарифмического барьера $-\frac{1}{\tau} \log(-u)$ для различных значений τ .

Метод логарифмических барьеров (прямой метод внутренней точки)

Рассмотрим задачу оптимизации (1) с ограничениями вида равенств и неравенств. При этом будем предполагать, что все функции $f_i(\mathbf{x})$, $i = \overline{0, m}$ являются выпуклыми и дважды непрерывно-дифференцируемыми. Задачу (1) можно эквивалентно переписать как задачу оптимизации только с ограничениями вида равенств:

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m I_-(f_i(\mathbf{x})) &\rightarrow \min_{\mathbf{x}}, \\ A\mathbf{x} &= \mathbf{b}, \end{aligned} \quad (9)$$

где I_- – индикаторная функция вида

$$I_-(u) = \begin{cases} 0, & u \leq 0, \\ +\infty, & u > 0. \end{cases}$$

Минимизируемая функция в задаче (9) не является дифференцируемой, поэтому здесь нельзя применять методы Ньютона, описанные выше. Введем аппроксимацию индикаторной функции $I_-(u)$ в виде логарифмического барьера $-\frac{1}{\tau} \log(-u)$, где $\tau > 0$ – некоторый параметр. Данная аппроксимация для различных значений τ показана на рис. 1. Рассмотрим теперь следующую задачу оптимизации:

$$\begin{cases} f_0(\mathbf{x}) - \frac{1}{\tau} \sum_{i=1}^m \log(-f_i(\mathbf{x})) \rightarrow \min_{\mathbf{x}}, \\ A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \tau f_0(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^m \log(-f_i(\mathbf{x})) \rightarrow \min_{\mathbf{x}}, \\ A\mathbf{x} = \mathbf{b}. \end{cases} \quad (10)$$

Обозначим через $(\mathbf{x}_{opt}(\tau), \boldsymbol{\mu}_{opt}(\tau))$ оптимальную прямую и двойственную точку для задачи (10) при выбранном τ . Набор таких точек при различных значениях τ получил название [центрального пути](#). Рассмотрим величины

$$\begin{aligned} \lambda_i(\tau) &= -\frac{1}{\tau f_i(\mathbf{x}_{opt}(\tau))}, \quad i = \overline{1, m}; \\ \mu_j(\tau) &= \frac{\mu_{opt,j}(\tau)}{\tau}, \quad j = \overline{1, p}. \end{aligned}$$

Можно показать, что введенные таким образом точки $(\boldsymbol{\lambda}(\tau), \boldsymbol{\mu}(\tau))$ являются допустимыми для двойственной задачи к исходной задаче (1). При этом значение двойственной функции вычисляется аналитически:

$$g(\boldsymbol{\lambda}(\tau), \boldsymbol{\mu}(\tau)) = f_0(\mathbf{x}_{opt}(\tau)) - \frac{m}{\tau}.$$

В результате

$$f_0(\mathbf{x}_{opt}(\tau)) - f_{opt} \leq f_0(\mathbf{x}_{opt}(\tau)) - g(\boldsymbol{\lambda}(\tau), \boldsymbol{\mu}(\tau)) = \frac{m}{\tau} \xrightarrow{\tau \rightarrow +\infty} 0.$$

Таким образом, решение задачи (10) при увеличении значения τ действительно сходится к решению исходной задачи (1). Более того, точка $\mathbf{x}_{opt}(\tau)$ является m/τ -оптимальным решением. Поэтому ε -оптимальное решение задачи (1) можно получить путем решения задачи (10) с $\tau = m/\varepsilon$.

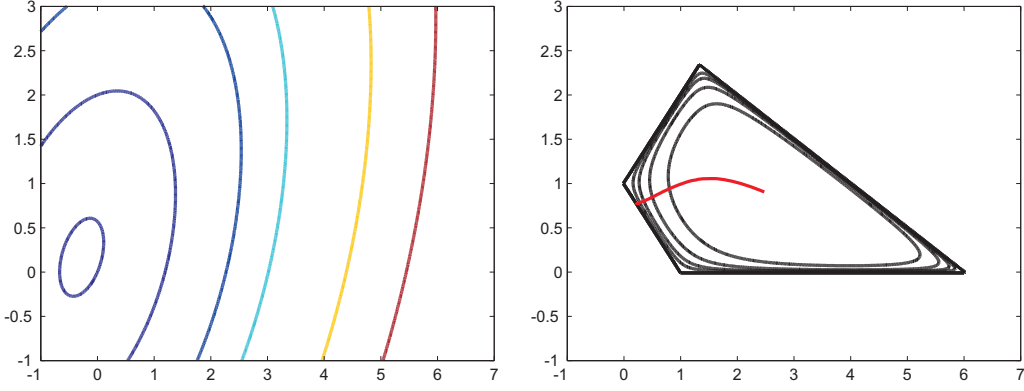


Рис. 2: Иллюстрация работы метода логарифмических барьеров для задачи (12). Слева показаны линии уровня минимизируемой функции, справа показаны линии уровня барьерной функции для ограничений (черные кривые), а также центральный путь для прямой переменной (красная кривая).

Можно показать, что величины $(\mathbf{x}_{opt}(\tau), \boldsymbol{\lambda}(\tau), \boldsymbol{\mu}(\tau))$ являются решением следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned} \nabla f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla f_i(\mathbf{x}) + A^T \boldsymbol{\mu} &= \mathbf{0}, \\ \lambda_i &\geq 0, \quad \lambda_i f_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\tau}, \quad i = \overline{1, m}; \\ f_i(\mathbf{x}) &\leq 0, \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b}. \end{aligned} \quad (11)$$

Эта система совпадает с системой Куна-Таккера (2) за исключением того, что условия дополняющей нежесткости выглядят как $\lambda_i f_i(\mathbf{x}) = -1/\tau$. При стремлении τ к плюс бесконечности система (11) переходит в систему (2). Это еще одно объяснение того факта, что решение задачи (10) стремится к решению задачи (1).

Как было показано выше, для получения ε -оптимального решения (1) достаточно решить задачу (10) с $\tau = m/\varepsilon$. Однако, на практике поиск такого решения из случайного начального приближения может быть связан с определенными трудностями. Поэтому здесь обычно решается последовательность задач (10) с увеличивающимся значением τ , при этом решение очередной задачи используется в качестве начального приближения для решения следующей задачи. В итоге схема метода логарифмических барьерных функций выглядит как

1. Выбирается строго допустимая точка \mathbf{x} (внутренняя точка), точность ε , начальное значение $\tau = \tau_0$ и мультипликатор $v > 1$;
2. Находится решение \mathbf{x} задачи (10) с текущим значением τ , где в качестве начального приближения используется решение с предыдущей итерации;
3. Если $m/\tau < \varepsilon$, то алгоритм заканчивает работу;
4. Устанавливается новое значение $\tau = \tau v$, переход в шаг 2.

Решение задачи (10) может быть получено с помощью метода Ньютона (прямого или прямо-двойственного). При использовании прямо-двойственной версии метода Ньютона в качестве начальной точки \mathbf{x} достаточно задавать точку, удовлетворяющую только ограничениям вида неравенства $f_i(\mathbf{x}) < 0$.

Значение мультипликатора v обеспечивает компромисс между количеством внешних и внутренних итераций³ в методе барьеров. Небольшое значение v соответствует малому числу внутренних итераций за счет использования хорошего начального приближения, но может приводить к большому числу внешних итераций, необходимых для выполнения условия $m/\tau < \varepsilon$. При этом решение очередной задачи (10) находится с большой численной устойчивостью. Увеличение v уменьшает количество внешних итераций, но может приводить к численным неустойчивостям и большому количеству внутренних итераций за счет использования далеких от оптимальных начальных приближений. На практике метод барьеров устойчиво работает для широкого диапазона значений v .

³Под внутренними итерациями понимаются итерации метода Ньютона для решения очередной задачи (10)

Рассмотрим в качестве иллюстративного примера следующую задачу условной минимизации:

$$\begin{aligned} \frac{9}{2}x_1^2 - 3x_1x_2 + \frac{7}{2}x_2^2 - 3x_1 + 2x_2 &\rightarrow \min_{x_1, x_2}, \\ x_2 &\geq 0, \\ x_1 + x_2 &\geq 1, \\ x_2 - x_1 &\leq 1, \\ 2x_2 + x_1 &\leq 6. \end{aligned} \tag{12}$$

Это задача квадратичного программирования. На рис. 2 показаны линии уровня минимизируемой функции, линии уровня логарифмических барьеров и центральный путь для прямых переменных (x_1, x_2) .

Методы первой фазы

Для запуска метода барьеров необходимо указать начальную внутреннюю точку, т.е. такую точку \mathbf{x} , для которой $f_i(\mathbf{x}) < 0 \forall i$. В общем случае поиск внутренней точки \mathbf{x} может оказаться нетривиальной задачей. Методы решения этой задачи получили название **методов первой фазы**. Рассмотрим два метода такого типа:

- **Метод барьеров**. Рассмотрим следующую задачу оптимизации:

$$\begin{aligned} s &\rightarrow \min_{s, \mathbf{x}}, \\ f_i(\mathbf{x}) &\leq s, \quad i = \overline{1, m}; \\ A\mathbf{x} &= \mathbf{b}. \end{aligned} \tag{13}$$

Для этой задачи легко указать внутреннюю точку: достаточно взять любой \mathbf{x} и выбрать в качестве значения s любое число, превышающее $\max_i f_i(\mathbf{x})$. Тогда задачу (13) можно решать с помощью метода барьеров. Если \mathbf{x} не удовлетворяет линейным ограничениям $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, то в методе барьеров на первой итерации необходимо использовать прямо-двойственный метод Ньютона. Итерации метода барьеров можно останавливать, если текущее $s \leq 0$. Если решением задачи (13) оказалось $s > 0$, то система ограничений является несовместной, и поиск решения исходной задачи (1) становится бессмысленным.

- **Прямо-двойственный метод Ньютона**. Рассмотрим следующую задачу оптимизации:

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{x}) &\rightarrow \min_{\mathbf{x}, s}, \\ f_i(\mathbf{x}) &\leq s, \quad i = \overline{1, m}; \\ A\mathbf{x} &= \mathbf{b}, \quad s = 0. \end{aligned}$$

Аналогично предыдущему случаю для этой задачи легко указать внутреннюю точку (\mathbf{x}, s) . Первая итерация метода барьеров для этой задачи эквивалентна решению задачи

$$\begin{aligned} \tau_0 f_0(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^m \log(s - f_i(\mathbf{x})) &\rightarrow \min_{\mathbf{x}, s}, \\ A\mathbf{x} &= \mathbf{b}, \quad s = 0. \end{aligned}$$

Эту задачу можно решить с помощью прямо-двойственного метода Ньютона. Ее решение будет внутренней точкой, и поэтому далее можно переключиться на обычные итерации метода барьеров решения задачи (1).

Сравнивая два представленных метода первой фазы между собой можно заметить, что второй метод не позволяет определить ситуацию несовместности ограничений, но при этом требует лишь одного дополнительного запуска метода Ньютона перед основными итерациями метода барьеров. Напротив, первый метод требует полного итерационного процесса метода барьеров для решения задачи (13), но при этом корректно работает в любой ситуации, включая случаи несовместности ограничений.

Прямо-двойственный метод внутренней точки

Прямо-двойственный метод Ньютона для задачи (4) оптимизирует одновременно прямые переменные \mathbf{x} и двойственные переменные $\boldsymbol{\mu}$ путем решения линеаризованной системы Куна-Таккера (7). Как было показано выше, метод барьеров для задачи (1) решает возмущенную систему Куна-Таккера (11) для набора увеличивающихся τ .

Прямо-двойственный вариант метода барьеров (метод внутренней точки) оптимизирует прямые и двойственные переменные $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ путем решения линеаризованной возмущенной системы Куна-Таккера:

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \nabla^2 f_i(\mathbf{x}) & \nabla \mathbf{f}(\mathbf{x})^T & A^T \\ \text{diag}(\boldsymbol{\lambda}) \nabla \mathbf{f}(\mathbf{x}) & \text{diag}(\mathbf{f}(\mathbf{x})) & O \\ A & O & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{d}_x \\ \mathbf{d}_\lambda \\ \mathbf{d}_\mu \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f_0(\mathbf{x}) + \nabla \mathbf{f}(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\lambda} + A^T \boldsymbol{\mu} \\ \text{diag}(\boldsymbol{\lambda}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \frac{1}{\tau} \mathbf{e} \\ A\mathbf{x} - \mathbf{b} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{dual}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \\ \mathbf{r}_{center}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \\ \mathbf{r}_{primal}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \end{bmatrix} = -\mathbf{r}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}). \quad (14)$$

Здесь через $\text{diag}(\boldsymbol{\lambda})$ обозначена диагональная матрица, в которой на диагонали стоит вектор $\boldsymbol{\lambda}$, через $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ – вектор $[f_1(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})]^T$, через $\nabla \mathbf{f}(\mathbf{x})$ – матрица производных, в которой в позиции (ij) стоит $\frac{\partial}{\partial x_j} f_i(\mathbf{x})$, а через \mathbf{e} – вектор из единиц.

Как и в случае прямо-двойственного метода Ньютона, в данном случае величина $\|\mathbf{r}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})\|$ отражает прогресс итерационного процесса, и на каждой итерации вдоль найденного направления $(\mathbf{d}_x, \mathbf{d}_\lambda, \mathbf{d}_\mu)$ решается задача одномерной минимизации $\|\mathbf{r}\|$. При ее решении с помощью стратегии backtracking значение α уменьшается до выполнения условия

$$\|\mathbf{r}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}_x, \boldsymbol{\lambda} + \alpha \mathbf{d}_\lambda, \boldsymbol{\mu} + \alpha \mathbf{d}_\mu)\| < (1 - \alpha \rho) \|\mathbf{r}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})\|,$$

где ρ – параметр, задаваемый пользователем. Таким образом, получаем следующую общую схему прямо-двойственного метода внутренней точки:

1. Выбирается строго допустимая точка \mathbf{x} , положительный вектор $\boldsymbol{\lambda}$ и произвольный вектор $\boldsymbol{\mu}$. Также выбирается точность оптимизации ε , начальное значение $\tau = \tau_0$, мультипликатор $v > 1$ и параметры стратегии backtracking;
2. Находится решение $(\mathbf{d}_x, \mathbf{d}_\lambda, \mathbf{d}_\mu)$ СЛАУ (14) для текущего значения τ ;
3. Решается задача одномерной минимизации $\|\mathbf{r}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}_x, \boldsymbol{\lambda} + \alpha \mathbf{d}_\lambda, \boldsymbol{\mu} + \alpha \mathbf{d}_\mu)\| \rightarrow \min_{\alpha \geq 0}$ с помощью backtracking;
4. Если для нового набора $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ выполнено условие $\|\mathbf{r}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})\| < \varepsilon$, то алгоритм заканчивает работу;
5. Если $m/\tau > \varepsilon$, то значение τ увеличивается путем домножения на мультипликатор v , переход в шаг 2.

Заметим, что в отличие от метода барьеров, в прямо-двойственном варианте метода нет разделения на внешние и внутренние итерации, т.к. значение τ увеличивается после однократного решения СЛАУ (14). Также следует заметить, что при поиске α на этапе одномерной минимизации необходимо следить, чтобы новый $\boldsymbol{\lambda}$ был вектором с неотрицательными компонентами, а новый \mathbf{x} был внутренней точкой.

В стратегии backtracking значение α подбирается, начиная с некоторого максимального значения, например, $\alpha = 1$. Это значение может соответствовать выходу за внутренность ограничений. Поэтому его необходимо уменьшить так, чтобы $\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}_x$ был внутренней точкой, а $\boldsymbol{\lambda} + \alpha \mathbf{d}_\lambda$ был вектором с неотрицательными компонентами. При этом не следует устанавливать максимальное значение α так, чтобы $\mathbf{x} + \lambda \mathbf{d}_x$ в точности касался одной из границ допустимого множества, т.к. близость к границе соответствует большим значениям барьерной функции и может вести к неустойчивому решению СЛАУ (14) на следующей итерации. На практике максимальное значение α устанавливают как $\theta \alpha_{max}$, где α_{max} – максимально допустимое значение α , приводящее \mathbf{x} на одну из границ допустимого множества, а $\theta < 1$, например, $\theta = 0.9$.

Для прямо-двойственного метода внутренней точки доказана теоретическая сходимость за $O(\sqrt{n} \log(1/\varepsilon))$ итераций. Эта теоретическая оценка худшего числа итераций является наилучшей на сегодняшний день оценкой среди всех методов решения задач условной оптимизации (1). На практике метод внутренней точки сходится за константное число итераций, практически не зависящее от размерности задачи (обычно 30–40 итераций). Это обстоятельство делает метод особенно привлекательным для использования в случае данных большого объема.

Метод внутренней точки основан на итерациях Ньютона, обладающих квадратичной скоростью сходимости. Поэтому метод внутренней точки позволяет находить решение задачи (1), в том числе, для высокой точности ε . Этот момент является актуальным, например, для разреженных линейных моделей классификации/регрессии, в которых обнуление максимального количества компонент позволяет получать компактные и легко интерпретируемые решающие правила, предъявляющие минимальные требования к вычисляемому набору признаков, необходимому для принятия решений.

Применение прямо-двойственного метода внутренней точки для задачи обучения метода опорных векторов

При применении метода двойственной точки для определенного класса задач оптимизации часто удается ускорить вычисление отдельных итераций метода за счет учета конкретного вида матрицы СЛАУ (14). Рассмотрим подобное ускорение в случае метода опорных векторов для стандартной задачи классификации на два класса.

Пусть имеется обучающая выборка из N объектов $(\mathbf{t}, X) = \{t_n, \mathbf{x}_n\}_{n=1}^N$, где $\mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^D$ – вектор признаков, а $t_n \in \{-1, +1\}$ – метка класса. Требуется на основе данной информации спрогнозировать метку класса t_{new} для нового объекта, представленного своим вектором признаков \mathbf{x}_{new} . В методе опорных векторов такой прогноз осуществляется по знаку линейного решающего правила:

$$\hat{t}(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\sum_{d=1}^D w_d x_d + b\right) = \text{sign}(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b),$$

где $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^D$ – некоторые веса и $b \in \mathbb{R}$ – коэффициент сдвига гиперплоскости. Параметры (\mathbf{w}, b) находятся путем решения следующей задачи квадратичного программирования:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + C \sum_{n=1}^N \xi_n &\rightarrow \min_{\mathbf{w}, b, \xi}, \\ t_n(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_n + b) &\geq 1 - \xi_n, \quad n = \overline{1, N}; \\ \xi_n &\geq 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь $C > 0$ – коэффициент регуляризации, задаваемый пользователем. Задача (15) является выпуклой с ограничениями только вида линейных. Поэтому выполняется свойство сильной двойственности, и наряду с (15) можно рассмотреть двойственную задачу:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{n=1}^N \lambda_n - \frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^N \lambda_n \lambda_m t_n t_m \mathbf{x}_n^T \mathbf{x}_m \rightarrow \max_{\lambda}, \\ \sum_{n=1}^N \lambda_n t_n = 0, \\ 0 \leq \lambda_n \leq C. \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} -\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{e} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\lambda}^T T X X^T T \boldsymbol{\lambda} \rightarrow \min_{\lambda}, \\ \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{t} = 0, \\ \mathbf{0} \leq \boldsymbol{\lambda} \leq C \mathbf{e}. \end{array} \right. \quad (16)$$

Здесь через T обозначена диагональная матрица с вектором \mathbf{t} на диагонали, а через \mathbf{e} – вектор из единиц длины N . По решению двойственной задачи (16) можно получить решение прямой задачи (15) следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &= \sum_{n=1}^N \lambda_n t_n \mathbf{x}_n, \\ b &= \frac{\sum_{n: 0 < \lambda_n < C} (t_n - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)}{\sum_{n: 0 < \lambda_n < C} 1}. \end{aligned}$$

Рассмотрим теперь применение прямо-двойственного метода внутренней точки для задачи (16). Для этого введем функцию Лагранжа

$$L(\boldsymbol{\lambda}, \mu, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = -\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{e} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\lambda}^T T X X^T T \boldsymbol{\lambda} + \mu \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{t} - \mathbf{v}_1^T \boldsymbol{\lambda} + \mathbf{v}_2^T (\boldsymbol{\lambda} - C \mathbf{e})$$

и запишем возмущенную систему Куна-Таккера:

$$\begin{aligned} \nabla_{\boldsymbol{\lambda}} L(\boldsymbol{\lambda}, \mu, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) &= -\mathbf{e} + T X X^T T \boldsymbol{\lambda} + \mu \mathbf{t} - \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 = \mathbf{0}, \\ \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{t} &= 0, \\ -v_{1n} \lambda_n &= -\frac{1}{\tau} \forall n \Leftrightarrow \text{diag}(\mathbf{v}_1) \boldsymbol{\lambda} = \frac{1}{\tau} \mathbf{e}, \\ v_{2n} (\lambda_n - C) &= -\frac{1}{\tau} \forall n \Leftrightarrow \text{diag}(\mathbf{v}_2) (\boldsymbol{\lambda} - C \mathbf{e}) = -\frac{1}{\tau} \mathbf{e}, \\ \mathbf{v}_1 \geq \mathbf{0}, \mathbf{v}_2 \geq \mathbf{0}, \mathbf{0} \leq \boldsymbol{\lambda} \leq C \mathbf{e}. \end{aligned}$$

Одна итерация прямо-двойственного метода внутренней точки соответствует решению линейаризованной версии возмущенной системы Куна-Таккера:

$$\begin{bmatrix} T X X^T T & \mathbf{t} & -I & I \\ \mathbf{t}^T & 0 & O & O \\ \text{diag}(\mathbf{v}_1) & \mathbf{0} & \text{diag}(\boldsymbol{\lambda}) & O \\ \text{diag}(\mathbf{v}_2) & \mathbf{0} & O & \text{diag}(\boldsymbol{\lambda} - C \mathbf{e}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{d}_{\lambda} \\ \mathbf{d}_{\mu} \\ \mathbf{d}_{v_1} \\ \mathbf{d}_{v_2} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} T X X^T T \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{e} + \mu \mathbf{t} - \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \\ \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{t} \\ -\frac{1}{\tau} \mathbf{e} + \text{diag}(\mathbf{v}_1) \boldsymbol{\lambda} \\ \frac{1}{\tau} \mathbf{e} + \text{diag}(\mathbf{v}_2) (\boldsymbol{\lambda} - C \mathbf{e}) \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{dual}(\boldsymbol{\lambda}, \mu, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \\ \mathbf{r}_{primal}(\boldsymbol{\lambda}, \mu, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \\ \mathbf{r}_{center,1}(\boldsymbol{\lambda}, \mu, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \\ \mathbf{r}_{center,2}(\boldsymbol{\lambda}, \mu, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \end{bmatrix}. \quad (17)$$

Матрица данной СЛАУ имеет размер $(3N + 1) \times (3N + 1)$. Для большого объема выборки N решение такой системы может занимать значительное время. Покажем, как систему (17) можно решить путем рассмотрения СЛАУ с матрицей размера $D \times D$. Для этого выразим неизвестные \mathbf{d}_{v_1} и \mathbf{d}_{v_2} из последних двух уравнений:

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{v_1} &= -\text{diag}(1/\boldsymbol{\lambda}) \text{diag}(\mathbf{v}_1) \mathbf{d}_{\lambda} + \text{diag}(1/\boldsymbol{\lambda}) \left(\frac{1}{\tau} \mathbf{e} - \text{diag}(\mathbf{v}_1) \boldsymbol{\lambda} \right), \\ \mathbf{d}_{v_2} &= -\text{diag} \left(\frac{\mathbf{v}_2}{\boldsymbol{\lambda} - C \mathbf{e}} \right) \mathbf{d}_{\lambda} - \text{diag} \left(\frac{1}{\boldsymbol{\lambda} - C \mathbf{e}} \right) \left(\frac{1}{\tau} \mathbf{e} + \text{diag}(\mathbf{v}_2) (\boldsymbol{\lambda} - C \mathbf{e}) \right). \end{aligned}$$

Здесь и далее в аргументе команды `diag` все арифметические операции подразумеваются покомпонентными. Подставляя последний результат в первое уравнение, получим:

$$\begin{bmatrix} TXX^TT + \text{diag}\left(\frac{v_1}{\lambda} - \frac{v_2}{\lambda - C_e}\right) & \mathbf{t} \\ \mathbf{t}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_\lambda \\ d_\mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{r}_{\text{primal}} - \text{diag}\left(\frac{1}{\lambda}\right) \mathbf{r}_{\text{center},1} + \text{diag}\left(\frac{1}{\lambda - C_e}\right) \mathbf{r}_{\text{center},2} \\ \mathbf{r}_{\text{primal}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_0 \end{bmatrix}. \quad (18)$$

Для дальнейших преобразований нам понадобятся следующие два результата из области матричных вычислений:

- **Тождество Вудбери.** Рассмотрим четыре матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $C \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $U \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Тогда справедливо следующее тождество:

$$(A + UCV)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(C^{-1} + VA^{-1}U)^{-1}VA^{-1}.$$

Предположим, что $n \gg m$ и матрица A^{-1} известна. Тогда данное утверждение позволяет свести вычисление обратной матрицы размера $n \times n$ к вычислению обратной матрицы размера $m \times m$.

- **Блочное обращение матрицы.** Справедливо следующее утверждение:

$$\begin{bmatrix} A & U \\ V & C \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A^{-1} + A^{-1}UBVA^{-1} & -A^{-1}UB \\ -BVA^{-1} & B \end{bmatrix},$$

где матрицы A, C, U, V имеют такой же размер, как и выше для тождества Вудбери, а $B = (C - UA^{-1}V)^{-1}$ – т.н. дополнение Шура.

Перейдем теперь в решению системы (18). Обозначим через A матрицу $\text{diag}\left(\frac{v_1}{\lambda} - \frac{v_2}{\lambda - C_e}\right)$, а через P – матрицу $TXX^TT + A$. Тогда, применяя формулу для блочного обращения матрицы, решение (18) можно записать как

$$\begin{bmatrix} d_\lambda \\ d_\mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P & \mathbf{t} \\ \mathbf{t}^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P^{-1} - P^{-1}\mathbf{t}(\mathbf{t}^T P^{-1}\mathbf{t})^{-1}\mathbf{t}^T P^{-1} & P^{-1}\mathbf{t}(\mathbf{t}^T P^{-1}\mathbf{t})^{-1} \\ (\mathbf{t}^T P^{-1}\mathbf{t})^{-1}\mathbf{t}^T P^{-1} & -(\mathbf{t}^T P^{-1}\mathbf{t})^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P^{-1}\mathbf{y} - P^{-1}\mathbf{t}\frac{\mathbf{t}^T P^{-1}\mathbf{y} - y_0}{\mathbf{t}^T P^{-1}\mathbf{t}} \\ \frac{\mathbf{t}^T P^{-1}\mathbf{y} - y_0}{\mathbf{t}^T P^{-1}\mathbf{t}} \end{bmatrix}.$$

В последнем выражении требуется вычислить $P^{-1}\mathbf{y}$ и $P^{-1}\mathbf{t}$, т.е. решить СЛАУ с матрицей P для двух правых частей \mathbf{y} и \mathbf{t} . Применим для решения данной СЛАУ тождество Вудбери:

$$\hat{\mathbf{y}} = P^{-1}\mathbf{y} = (TXX^TT + A)^{-1}\mathbf{y} = A^{-1}\mathbf{y} - A^{-1}TX(I + X^T T A^{-1} T X)^{-1} X^T T A^{-1} \mathbf{y}.$$

Теперь вектор $\hat{\mathbf{y}}$ может быть получен как

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_1 &= X^T T A^{-1} \mathbf{y}, \\ (I + X^T T A^{-1} T X) \mathbf{y}_2 &= \mathbf{y}_1, \\ \hat{\mathbf{y}} &= A^{-1}(\mathbf{y} - T X \mathbf{y}_2). \end{aligned}$$

Аналогично находится вектор $\hat{\mathbf{t}} = P^{-1}\mathbf{t}$. Заметим, что получение $\hat{\mathbf{y}}$ и $\hat{\mathbf{t}}$ требует решения СЛАУ с матрицей $I + X^T T A^{-1} T X$ размера $D \times D$. Матрица A является диагональной, поэтому получение A^{-1} не представляет труда.