Задача с ограничениями

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x)$$
$$\text{s.t. } h_i(x) = 0 \quad i = 1..m$$

Перепишем:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x) + \rho \cdot \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} h_i^2(x) \qquad \rho > 0$$
$$\text{s.t. } h_i(x) = 0 \quad i = 1 \dots m$$

решения эквивалентны $h_i(x) = 0$

Упростим:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \underbrace{f(x) + \rho \cdot \frac{1}{2} \sum h_i^2(x)}_{f_\rho(x)}$$

штрафная функция

нет ограничений

⊕ задача с ограничениями стала без ограничений

⊖ решения другие

⊖ можем выйти за пределы ограничений

Минимизируя f_ρ, получим решение исходной задачи

$$\lim_{\rho \to +\infty} f_\rho(x) = \begin{cases} f(x), & x \text{ удовл. огран} \\ +\infty, & \text{иначе} \end{cases}$$

Более общая задача

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x)$$
$$\text{s.t. } h_i(x) = 0 \quad i = 1..m$$
$$g_j(x) \leq 0 \quad j = 1..n$$

$$f_\rho(x) = f(x) + \rho \cdot \frac{1}{2} \sum h_i^2(x) + \rho \cdot \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \left((g_j(x))^+ \right)^2$$

$$g^+ = \max\{g; 0\}$$

Свойства штрафной функции и задачи

1) x^* – решение исходной задачи, x^*_ρ – решение штрафной, тогда

$$f(x^*) \geq f(x^*_\rho)$$

Док-во:

$$f(x^*) = f_\rho(x^*) \geq \min_{x \in \mathbb{R}^d} f_\rho(x) = f_\rho(x^*_\rho) \geq f(x^*_\rho) \quad \blacksquare$$

2) С увеличением ρ решение штрафной задачи не ухудшает степень нарушения ограничений.

Т.е. для $\rho_1 > \rho_2 \hookrightarrow$

$$\sum_{i=1}^{m} h_i^2(x^*_{\rho_2}) \geq \sum_{i=1}^{m} h_i^2(x^*_{\rho_1})$$

Док-во:

$x^*_{\rho_1}$ – решение

$$f(x^*_{\rho_1}) + \rho_1 \cdot \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} h_i^2(x^*_{\rho_1}) \leq f(x^*_{\rho_2}) + \rho_1 \cdot \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} h_i^2(x^*_{\rho_2})$$

$+\Big($

$x^*_{\rho_2}$ – решение

$$f(x^*_{\rho_2}) + \rho_2 \cdot \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} h_i^2(x^*_{\rho_2}) \leq f(x^*_{\rho_1}) + \rho_2 \cdot \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} h_i^2(x^*_{\rho_1})$$

$$\rho_1 \cdot \frac{1}{2} \sum h_i^2(x^*_{\rho_1}) + \rho_2 \cdot \frac{1}{2} \sum h_i^2(x^*_{\rho_2}) \leq$$

$$\rho_1 \cdot \frac{1}{2} \sum h_i^2(x^*_{\rho_2}) + \rho_2 \cdot \frac{1}{2} \sum h_i^2(x^*_{\rho_1})$$

$$\underbrace{\cancel{(\rho_1 - \rho_2)}}_{>0} \cdot \frac{1}{2} \sum h_i^2(x^*_{\rho_1}) \leq \underbrace{\cancel{(\rho_1 - \rho_2)}}_{>0} \cdot \frac{1}{2} \sum h_i^2(x^*_{\rho_2}) \quad \blacksquare$$

3) f, h_i – непрерывны.

X^* – мн-во решений исходной задачи

доп. обозначения: для $x^* \in X^*$

$$U(x^*) = \{x \in \mathbb{R}^d \mid f(x) \le f(x^*)\}$$

Если $U(x^*)$ ограничено для $\forall x^* \in X^*$, тогда

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \rho(\varepsilon) > 0 : \quad \forall \rho \ge \rho(\varepsilon) \hookrightarrow$$

X^*_ρ (мн-во решений штрафной задачи) содержится в ε-окрестности X^*:

$$X^*_\varepsilon = \{x \in \mathbb{R}^d \mid \exists x^* \in X^* : \|x - x^*\|_2 < \varepsilon\}$$

<u>Док-во:</u> от противного

$\exists \varepsilon > 0 \quad \{\rho_i\} \to \infty$, что $X^*_{\rho_i}$ не лежит в X^*_ε

$(\exists x_i^* \in X^*_{\rho_i}$ и $x_i^* \notin X^*_\varepsilon)$

знаем: $f(x^*) \ge f(x^*_\rho)$ (см. свойства выше)

в силу предположения на U, то x_i^* лежат в огран. мн-ве

Теорема Больцано-Вейерштрасса

$\{x_i^*\}$ – ограничен последов., из нее можно выделить сход. подпослед.: $\tilde{x}_i^* \to \tilde{x}^*$ ← что это?

знаем: $f(x^*) \ge f(\tilde{x}_i^*)$

перейдем к пределу (f – непрерывна)

$$\lim_{i\to\infty} f(x^*) \ge \lim_{i\to\infty} f(\tilde{x}_i^*)$$

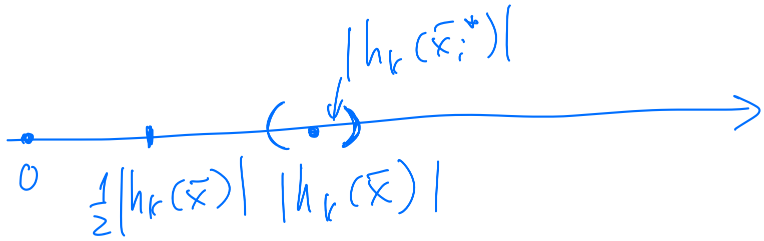
$$f(x^*) \ge f(\tilde{x}^*)$$

докажем $\tilde{x}^*$ удовл. всем ограничениям:

от противного $\exists k : h_k(\tilde{x}^*) \neq 0$

в силу непрерывности h_k $\exists i \in \mathbb{N}$:

$$|h_k(\tilde{x}_i^*)| \geq \frac{1}{2}|h_k(\tilde{x}^*)| > 0$$



$$f_{\tilde{\rho}_i}(\tilde{x}_i^*) = f(\tilde{x}_i^*) + \tilde{\rho}_i \cdot \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} h_i^2(\tilde{x}_i^*)$$

$\tilde{\rho}_i \to +\infty$, тогда $f_{\tilde{\rho}_i}(\tilde{x}_i^*) \longrightarrow +\infty$

но по свойству выше

$$\underset{+\infty}{f_{\tilde{\rho}_i}(\tilde{x}_i^*)} \leq f(x^*) \to \text{противоречие}$$

1) $\tilde{x}^*$ удовл. огранич.
2) $f(x^*) \geq f(\tilde{x}^*)$

$\Rightarrow \tilde{x}^* \in X^*$

$\Downarrow$

начиная с некоторого i

$\tilde{x}_i^*$ лежат в X_ε^*

$\Downarrow$

противоречие исходного предположения

$\tilde{x}_i^* \notin X_\varepsilon^*$ ■

⊖ ρ - параметр, который подбирать (с помощью решения задачи)

⊖ большие ρ - ухудшение свойств задачи

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x)$$
$$\text{s.t. } Ax = b$$

Лагранжиан:

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T (Ax - b)$$

Двойств. функция: $g(\lambda) = \min_{x \in \mathbb{R}^d} L(x, \lambda)$

Двойственный подъем:

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \alpha \nabla g(\lambda^k)$$
$$= \lambda^k + \alpha \nabla \left(\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left(f(x) + \lambda_k^T (Ax - b) \right) \right)$$

$g(\lambda)$ сложно найти аналитически

Модифицируем метод:

$$x^{k+1} = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left[f(x) + \lambda_k^T (Ax - b) \right]$$

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \alpha \nabla \left(f(x^{k+1}) + \lambda_k^T (Ax^{k+1} - b) \right)$$
$$= \lambda^k + \alpha (Ax^{k+1} - b)$$

(не тот же самый метод, но достаточно близкий)

⊖ нестабильны на практике

Аугментация (эквив. задача)

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x) + \underline{\frac{\rho}{2} \|Ax - b\|_2^2}$$
$$\text{s.t. } Ax = b$$

$$L_\rho(x,\lambda) = f(x) + \lambda^T(Ax-b) + \frac{\rho}{2}\|Ax-b\|_2^2$$

Обыкновенный подход:

$$x^{k+1} = \operatorname*{argmin}_{x \in \mathbb{R}^d} L_\rho(x, \lambda^k)$$

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \rho\,(Ax^{k+1} - b)$$

не α (не нужно $\rho \to +\infty$
зав. от одного параметра)

Чуть более общая задача:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^{d_x},\, y \in \mathbb{R}^{d_y}} f(x) + g(y)$$

$$\text{s.t.} \quad Ax + By = c$$

Пример:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} L(Ax, b) + r(x) \to \|Ax-b\|_2^2$$

$$\to \text{logreg}$$

$$\Downarrow$$

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d,\, y \in \mathbb{R}^{d_s}} L(y, b) + r(x)$$

$$\text{s.t.} \quad Ax = y$$

Аугментация

$$\min_{x,y} f(x) + g(y) + \frac{\rho}{2}\|Ax + By - c\|_2^2$$

$$\text{s.t.} \quad Ax + By = c$$

Лагранжиан:

$$L_\rho(x,y,\lambda) = f(x) + g(y) + \lambda^T(Ax + By - c) + \frac{\rho}{2}\|Ax + By - c\|_2^2$$

ADMM (Alternating Directions Method of Multipliers)

$$\boxed{\begin{aligned} x^{k+1} &= \arg\min_x L_\rho(x, y^k, \lambda^k) && \text{AD} \\ y^{k+1} &= \arg\min_y L_\rho(x^{k+1}, y, \lambda^k) && \text{AD} \\ \lambda^{k+1} &= \lambda^k + \rho(Ax^{k+1} + By^{k+1} - c) && \text{M} \end{aligned}}$$

(обобщение двойственных подходов)

„Штраф", который не дает выйти за пределы мн-ва

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left[f_\rho(x) := f(x) + \frac{1}{\rho} \mathbb{I}_{H,G}(x) \right]$$

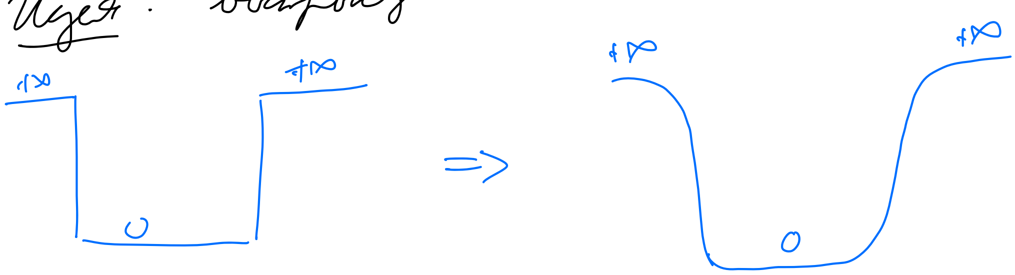
$\mathbb{I}_{H,G}(x)$ – индикатор ограничений

$$\mathbb{I}_{H,G}(x) = \begin{cases} 0 & x \text{ удовл. огран.} \\ +\infty & \text{иначе} \end{cases}$$

⊕ формально все хорошо

⊖ практически бесполезно

Идея: воспроизвести поведение индикатора



Барьер:

1) Кэррола: $F(x) = -\sum_{i=1}^{m} \frac{1}{g_i(x)}$

2) логарифм. $F(x) = -\sum_{i=1}^{n} \ln(-g_i(x))$

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left[F_\rho(x) = f(x) + \frac{1}{\rho} F(x) \right]$$

барьерная функция

барьер

метод барьеров

$\oplus$ не выходит за пределы мн-ва

$\ominus$ не подходит к границе