

Условия оптимальности. Ограничения равенства и неравенства. Условия ККТ.

Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ



Условия оптимальности



$$f(x) \to \min_{x \in S}$$

Множество S обычно называется допустимым (бюджетным) множеством.

• Точка x^* является глобальным минимумом, если $f(x^*) \leq f(x)$ для всех x.

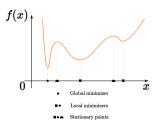


Рисунок 1. Illustration of different stationary (critical) points



$$f(x) \to \min_{x \in S}$$

Множество S обычно называется допустимым (бюджетным) множеством.

- Точка x^* является глобальным минимумом, если $f(x^*) \leq f(x)$ для всех x.
- Точка x^* является локальным минимумом, если существует окрестность N точки x^* , такая что $f(x^*) \leq f(x)$ для всех $x \in N$.

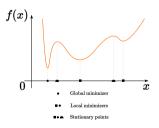


Рисунок 1. Illustration of different stationary (critical) points



$$f(x) \to \min_{x \in S}$$

Множество S обычно называется допустимым (бюджетным) множеством.

- Точка x^* является глобальным минимумом, если $f(x^*) \leq f(x)$ для всех x.
- Точка x^* является локальным минимумом, если существует окрестность N точки x^* , такая что $f(x^*) \leq f(x)$ для всех $x \in N$.
- Точка x^* является строгим локальным минимумом (также называется сильным локальным минимумом), если существует окрестность N точки x^* , такая что $f(x^*) < f(x)$ для всех $x \in N$ с $x \neq x^*$.

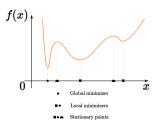


Рисунок 1. Illustration of different stationary (critical) points



$$f(x) \to \min_{x \in S}$$

Множество S обычно называется допустимым (бюджетным) множеством.

- Точка x^* является глобальным минимумом, если $f(x^*) \leq f(x)$ для всех x.
- Точка x^* является локальным минимумом, если существует окрестность N точки x^* , такая что $f(x^*) \leq f(x)$ для всех $x \in N$.
- Точка x^* является строгим локальным минимумом (также называется сильным локальным минимумом), если существует окрестность N точки x^* , такая что $f(x^*) < f(x)$ для всех $x \in N$ с $x \neq x^*$.
- Мы называем точку x^* стационарной (или критической), если $\nabla f(x^*) = 0$. Любой локальный минимум должен быть стационарной точкой.

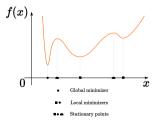


Рисунок 1. Illustration of different stationary (critical) points

Безусловная оптимизация



Необходимое условие оптимальности первого порядка

Если x^* является локальным минимумом и f непрерывно дифференцируема в окрестности, то

$$\nabla f(x^*) = 0 \tag{1}$$

🥊 Достаточные условия оптимальности второго порядка

Предположим, что $\nabla^2 f$ непрерывна в окрестности точки x^* и что

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad \nabla^2 f(x^*) \succ 0. \tag{2}$$

Тогда x^{st} является строгим локальным минимумом функции f.



Оптимизация с ограничениями-равенствами

Оптимизация с ограничениями-равенствами



Рассмотрим простой, но практический случай ограничений-равенств:

$$\begin{split} f(x) &\to \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t.} \ h_i(x) &= 0, i = 1, \dots, p \end{split}$$

Метод Лагранжа



Основная идея метода Лагранжа состоит в переходе от условной оптимизации к безусловной через увеличение размерности задачи:

$$L(x,\nu) = f(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x) = f(x) + \nu^T h(x) \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n, \nu \in \mathbb{R}^p}$$

Метод Лагранжа



Основная идея метода Лагранжа состоит в переходе от условной оптимизации к безусловной через увеличение размерности задачи:

$$L(x,\nu) = f(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x) = f(x) + \nu^T h(x) \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n, \nu \in \mathbb{R}^p}$$

Необходимые условия:

$$\nabla_x L(x^*,\nu^*) = 0$$

$$\nabla_{\nu}L(x^*,\nu^*)=0$$

Достаточные условия:

$$\langle y, \nabla^2_{xx} L(x^*, \nu^*) y \rangle > 0,$$

$$\forall y \neq 0 \in \mathbb{R}^n : \nabla h_i(x^*)^T y = 0$$



Оптимизация с ограничениями-неравенствами

Оптимизация с ограничениями-неравенствами



Рассмотрим простой, но практический случай ограничений-неравенств:

$$f(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}}$$
 s.t. $g(x) \le 0$

Оптимизация с ограничениями-неравенствами



Рассмотрим простой, но практический случай ограничений-неравенств:

$$f(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$
 s.t. $g(x) \le 0$

$$g(x) \leq 0$$
 неактивно. $g(x^*) < 0$:
$$g(x^*) < 0$$

$$\nabla f(x^*) = 0$$

$$\nabla^2 f(x^*) > 0$$

$$g(x)\leq 0$$
 активно. $g(x^*)=0$:
$$g(x^*)=0$$

$$-\nabla f(x^*)=\lambda \nabla g(x^*), \lambda>0$$

$$\langle y, \nabla^2_{xx} L(x^*,\lambda^*)y\rangle>0,$$

$$\forall y\neq 0\in \mathbb{R}^n: \nabla g(x^*)^\top y=0$$



Условия Каруша-Куна-Таккера

Общая формулировка



Общая задача математического программирования:

$$\begin{split} f_0(x) &\to \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t.} \ f_i(x) &\le 0, \ i=1,\dots,m \\ h_i(x) &= 0, \ i=1,\dots,p \end{split}$$

Общая формулировка



Общая задача математического программирования:

$$\begin{split} f_0(x) &\to \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t.} \ f_i(x) &\le 0, \ i=1,\dots,m \\ h_i(x) &= 0, \ i=1,\dots,p \end{split}$$

Решение включает в себя построение функции Лагранжа:

$$L(x,\lambda,\nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x)$$

Необходимые условия ККТ



Пусть x^* , (λ^*, ν^*) является решением математической задачи программирования с нулевым двойственным разрывом (оптимальное значение для приоритетной задачи p^* равно оптимальному значению для двойственной задачи d^*). Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

Необходимые условия ККТ



Пусть x^* , (λ^*, ν^*) является решением математической задачи программирования с нулевым двойственным разрывом (оптимальное значение для приоритетной задачи p^* равно оптимальному значению для двойственной задачи d^*). Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

$$\begin{split} &(1)\nabla_x L(x^*,\lambda^*,\nu^*) = 0 \\ &(2)\nabla_\nu L(x^*,\lambda^*,\nu^*) = 0 \\ &(3)\lambda_i^* \geq 0, i = 1,\dots,m \\ &(4)\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, i = 1,\dots,m \\ &(5)f_i(x^*) \leq 0, i = 1,\dots,m \end{split}$$

Некоторые условия регулярности



Эти условия необходимы для того, чтобы условия ККТ стали необходимыми. Некоторые из них даже превращают необходимые условия в достаточные. Например, условие Слейтера:

Некоторые условия регулярности



Эти условия необходимы для того, чтобы условия ККТ стали необходимыми. Некоторые из них даже превращают необходимые условия в достаточные. Например, условие Слейтера:

Если для выпуклой задачи (т.е., предполагая минимизацию, f_0, f_i выпуклы и h_i аффинны), существует точка x такая что h(x)=0 и $f_i(x)<0$ (существование строго допустимой точки), то условия ККТ становятся необходимыми и достаточными.

Достаточные условия ККТ



Для гладких, нелинейных задач оптимизации, второе достаточное условие задается следующим образом. Решение x^*, λ^*, ν^* , которое удовлетворяет условиям ККТ (выше), является локальным минимумом при ограничениях, если для функции Лагранжа

$$L(x,\lambda,\nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i h_i(x)$$

выполняются следующие условия:

$$\begin{split} &\langle y, \nabla^2_{xx} L(x^*, \lambda^*, \nu^*) y \rangle > 0 \\ &\forall y \neq 0 \in \mathbb{R}^n : \nabla h_i(x^*)^\top y = 0, \nabla f_0(x^*)^\top y \leq 0, \nabla f_j(x^*)^\top y = 0 \\ &i = 1, \dots, p \quad \forall j : f_j(x^*) = 0 \end{split}$$



Задачи



i Question

Функция $f:E o\mathbb{R}$ определена как

$$f(x) = \ln \left(-Q(x) \right)$$

где
$$E=\{x\in\mathbb{R}^n:Q(x)<0\}$$
 и

$$Q(x) = \frac{1}{2}x^{\top}Ax + b^{\top}x + c$$

$$\mathsf{c}\,A\in\mathbb{S}^n_{++},\,b\in\mathbb{R}^n,\,c\in\mathbb{R}.$$

Найдите точку максимума x^{st} функции f.



i Question

Найдите явное решение следующей задачи.

$$f(x,y) = x + y \to \min$$
 s.t. $x^2 + y^2 = 1$

где $x,y\in\mathbb{R}.$

Задача З



i Question

Найдите явное решение следующей задачи.

$$\langle c,x\rangle + \sum_{i=1}^n x_i \log x_i \to \min_{x\in \mathbb{R}^n}$$

$$\text{s.t. } \sum_{i=1}^n x_i = 1,$$

где
$$x \in \mathbb{R}^n_{++}, c \neq 0$$
.



1 Question

Пусть $A \in \mathbb{S}^n_{++}, b>0$ покажите, что:

$$\det(X) \to \max_{X \in \mathbb{S}^n_{++}} \text{s.t.} \langle A, X \rangle \leq b$$

имеет единственное решение и найдите его.



i Question

Даны $y \in \{-1,1\}$, и $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$, задача об опорных векторах:

$$\begin{split} \frac{1}{2}||w||_2^2 + C\sum_{i=1}^n \xi_i &\to \min_{w,w_0,\xi_i}\\ \text{s.t. } \xi_i &\geq 0, i=1,\dots,n\\ y_i(x_i^Tw+w_0) &\geq 1-\xi_i, i=1,\dots,n \end{split}$$

найдите условие стационарности ККТ.



i Question

Покажите, что следующая задача оптимизации с ограничениями имеет единственное решение и найдите его.

$$\langle C^{-1}, X \rangle - \log \det(X) \to \min_{X \in \mathbb{S}_{++}^n} \text{ s.t. } a^T X a \leq 1$$

$$C \in \mathbb{S}^n_{++}, a \neq 0$$

Вы должны избежать явного обратного матрицы ${\cal C}$ в ответе.

Задача 7 (БОНУС)



Для некоторых $\Sigma, \Sigma_0 \in \mathbb{S}^n_{++}$ определите расхождение Кульбака-Лейблера между двумя гауссовыми распределениями как:

$$D(\Sigma, \Sigma_0) = \frac{1}{2}(\langle \Sigma_0^{-1}, \Sigma \rangle - \log \det(\Sigma_0^{-1}\Sigma) - n)$$

Теперь пусть $H \in \mathbb{S}^n_{++}$ и $y,x \in \mathbb{R}^n: \langle y,s \rangle > 0$

Мы хотим решить следующую задачу минимизации с ограничениями.

$$\min_{X \in \mathbb{S}^n_{++}} \{D(X^{-1}, H^{-1}) | Xy = s\}$$

Докажите, что она имеет единственное решение и оно равно:

$$(I_n - \frac{sy^T}{y^Ts})H(I_n - \frac{ys^T}{y^Ts}) + \frac{ss^T}{y^Ts}$$

Задача 8 (БОНУС)



i Question

Пусть e_1,\dots,e_n будет стандартным базисом в $\mathbb{R}^n.$ Покажите, что:

$$\max_{X \in \mathbb{S}^n_{++}} \det(X) : ||Xe_i|| \leq 1 \forall i \in 1, \dots, n$$

имеет единственное решение $I_{n\prime}$ и выведите неравенство Гильберта:

$$\det(X) \leq \prod_{i=1}^n ||Xe_i|| \forall X \in \mathbb{S}^n_{++}$$



Приложения

Адверсариальные атаки



Определение: Адверсариальные атаки используются для обмана моделей DL путем добавления небольших возмущений к входным данным. Мы можем сформулировать это как задачу оптимизации с ограничениями, где целью является минимизация/максимизация функции потерь при сохранении возмущения в определенных пределах (ограничение нормы).

Метод FGSM (быстрого знака градиента) является самым простым таким методом, который генерирует adversarial examples путем применения небольшого возмущения в направлении градиента функции потерь. Формально:

$$x' = x + \varepsilon \cdot \mathrm{sgn}(\nabla_x L(x,y)), \text{s.t. } ||x - x'|| \leq \varepsilon$$

Таким образом, мы выполняем градиентный подъем на изображении (== максимизация потерь по отношению к этому изображению).



Рисунок 2. Иллюстрация

Вот код, попробуйте его сами!