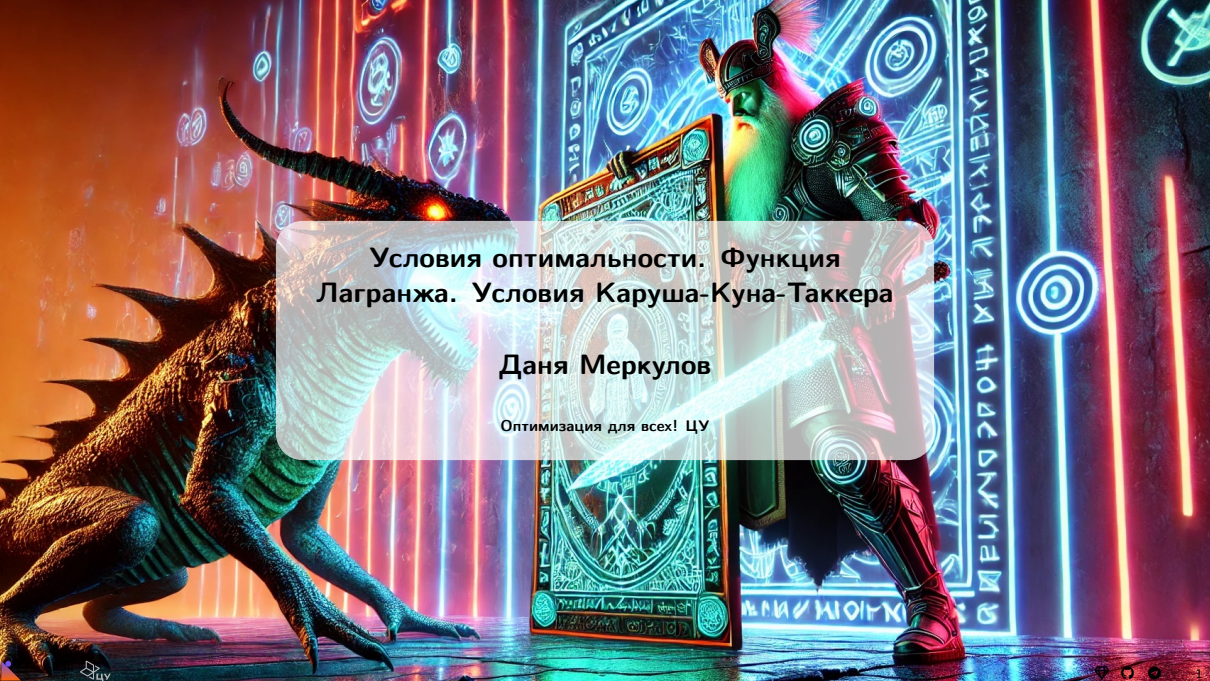


Условия оптимальности. Функция Лагранжа. Условия Каруша-Куна-Таккера

Даня Меркулов

Оптимизация для всех! ЦУ

В этой работе совершенно отсутствуют какие бы то ни было чертежи. Излагаемые мною методы не требуют ни построений, ни геометрических или механических рассуждений; они требуют только алгебраических операций, подчиненных планомерному и однообразному алгоритму.

—Предисловие к "Аналитической механике"

Рис. 1: Жозеф Луи Лагранж

Условия оптимальности

Теория

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

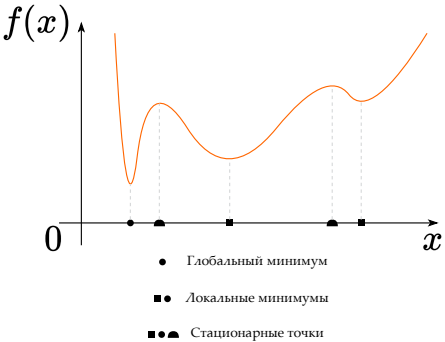


Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

Теория

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

Множество S обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

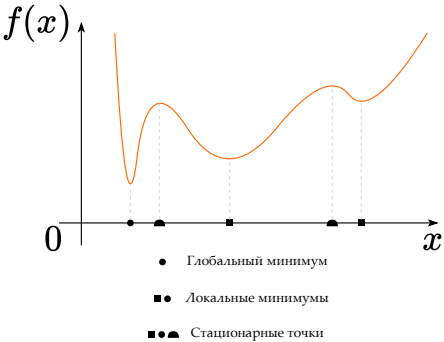


Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

Теория

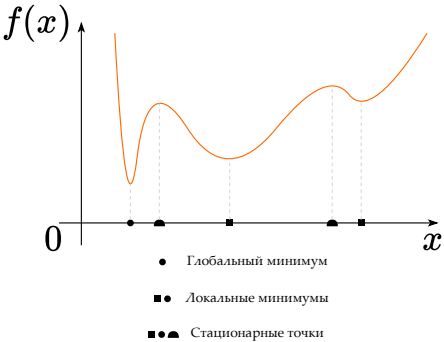


Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

Множество S обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

Мы говорим, что задача имеет решение, если бюджетное множество, в котором достигается минимум или инфимум данной функции, **не пусто**: $x^* \in S$.

Теория

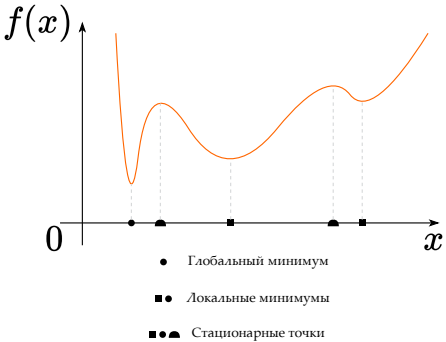


Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

Множество S обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

Мы говорим, что задача имеет решение, если бюджетное множество, в котором достигается минимум или инфимум данной функции, **не пусто**: $x^* \in S$.

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

Теория

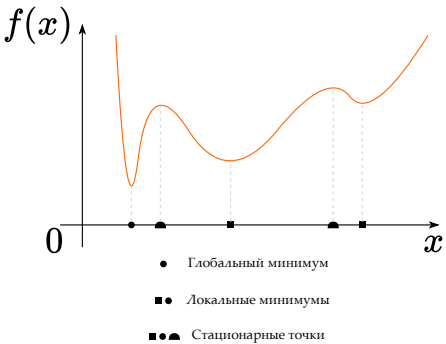


Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

Множество S обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

Мы говорим, что задача имеет решение, если бюджетное множество, в котором достигается минимум или инфимум данной функции, **не пусто**: $x^* \in S$.

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

Теория

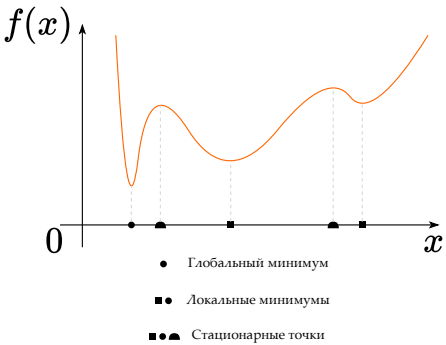


Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

Множество S обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

Мы говорим, что задача имеет решение, если бюджетное множество, в котором достигается минимум или инфимум данной функции, **не пусто**: $x^* \in S$.

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

Теория

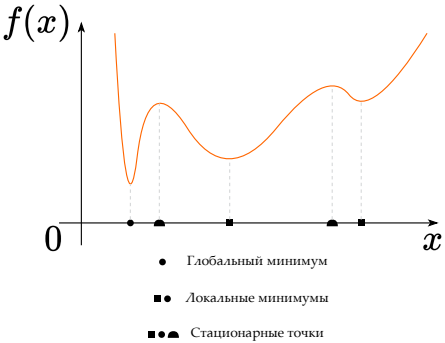


Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

Множество S обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

Мы говорим, что задача имеет решение, если бюджетное множество, в котором достигается минимум или инфимум данной функции, **не пусто**: $x^* \in S$.

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

Теорема Вейерштрасса об экстремальных значениях

Theorem

Пусть $S \subset \mathbb{R}^n$ - компактное множество и $f(x)$ - непрерывная функция на S. Тогда точка глобального минимума функции $f(x)$ на S существует.

Теорема Вейерштрасса об экстремальных значениях

Theorem

Пусть $S \subset \mathbb{R}^n$ - компактное множество и $f(x)$ - непрерывная функция на S. Тогда точка глобального минимума функции $f(x)$ на S существует.

Рис. 3: Многие практические задачи теоретически разрешимы

Теорема Вейерштрасса об экстремальных значениях

Theorem

Пусть $S \subset \mathbb{R}^n$ - компактное множество и $f(x)$ - непрерывная функция на S. Тогда точка глобального минимума функции $f(x)$ на S существует.

Рис. 3: Многие практические задачи теоретически разрешимы

Теорема Тейлора

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ - непрерывно дифференцируемая функция и $p \in \mathbb{R}^n$. Тогда мы имеем:

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x+tp)^T p \quad \text{для некоторого } t \in (0,1)$$

Теорема Вейерштрасса об экстремальных значениях

Theorem

Пусть $S \subset \mathbb{R}^n$ - компактное множество и $f(x)$ - непрерывная функция на S. Тогда точка глобального минимума функции $f(x)$ на S существует.

Рис. 3: Многие практические задачи теоретически разрешимы

Теорема Тейлора

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ - непрерывно дифференцируемая функция и $p \in \mathbb{R}^n$. Тогда мы имеем:

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x+tp)^T p \quad \text{для некоторого } t \in (0,1)$$

Кроме того, если f дважды непрерывно дифференцируема, то мы имеем:

$$\nabla f(x+p) = \nabla f(x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x+tp)p\,dt$$

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x+tp)p$$

для некоторого $t \in (0,1)$.

Безусловная оптимизация

Необходимые условия

Необходимое условие оптимальности первого порядка

Если x^* - локальный минимум и f непрерывно дифференцируема в открытой окрестности, то

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

Достаточные условия

Достаточные условия оптимальности второго порядка

Пусть $\nabla^2 f$ непрерывна в открытой окрестности x^*, и выполнено

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

Тогда x^* является строгим локальным минимумом функции f.

Контрпример Пеано

Заметим, что если $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$ (гессиан положительно полуопределён), то мы не можем быть уверены, что x^* является локальным минимумом.

Контрпример Пеано

Заметим, что если $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$ (гессиан положительно полуопределён), то мы не можем быть уверены, что x^* является локальным минимумом.

$$f(x, y) = (2x^2 - y)(x^2 - y)$$

Контрпример Пеано

Заметим, что если $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$ (гессиан положительно полуопределён), то мы не можем быть уверены, что x^* является локальным минимумом.

$$f(x, y) = (2x^2 - y)(x^2 - y)$$

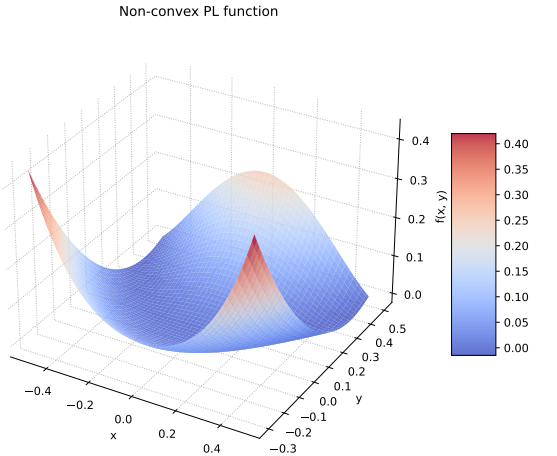
Хотя поверхность не имеет локального минимума в начале координат, ее пересечение с любой вертикальной плоскостью, проходящей через начало координат (плоскость с уравнением $y = mx$ или $x = 0$) является кривой, которая имеет локальный минимум в начале координат. Другими словами, если точка начинает движение в начале координат $(0, 0)$ вдоль любой прямой линии, то значение $(2x^2 - y)(x^2 - y)$ будет увеличиваться в начале движения. Тем не менее, $(0, 0)$ не является локальным минимумом функции, потому что движение вдоль параболы, такой как $y = \sqrt{2}x^2$, приведет к уменьшению значения функции.

Контрпример Пеано

Заметим, что если $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$ (гессиан положительно полуопределён), то мы не можем быть уверены, что x^* является локальным минимумом.

$$f(x, y) = (2x^2 - y)(x^2 - y)$$

Хотя поверхность не имеет локального минимума в начале координат, ее пересечение с любой вертикальной плоскостью, проходящей через начало координат (плоскость с уравнением $y = mx$ или $x = 0$) является кривой, которая имеет локальный минимум в начале координат. Другими словами, если точка начинает движение в начале координат $(0, 0)$ вдоль любой прямой линии, то значение $(2x^2 - y)(x^2 - y)$ будет увеличиваться в начале движения. Тем не менее, $(0, 0)$ не является локальным минимумом функции, потому что движение вдоль параболы, такой как $y = \sqrt{2}x^2$, приведет к уменьшению значения функции.



Условная оптимизация

Общее условие локальной оптимальности первого порядка

Вектор $d \in \mathbb{R}^n$ является допустимым направлением в точке $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$, если малые шаги вдоль d не выводят нас за пределы S.

Общее условие локальной оптимальности первого порядка

Вектор $d \in \mathbb{R}^n$ является допустимым направлением в точке $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$, если малые шаги вдоль d не выводят нас за пределы S.

Пусть $S \subseteq \mathbb{R}^n$ и функция $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Предположим, что $x^* \in S$ является точкой локального минимума для f над S, и предположим далее, что f непрерывно дифференцируема в окрестности x^*.

Общее условие локальной оптимальности первого порядка

Вектор $d \in \mathbb{R}^n$ является допустимым направлением в точке $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$, если малые шаги вдоль d не выводят нас за пределы S.

Пусть $S \subseteq \mathbb{R}^n$ и функция $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Предположим, что $x^* \in S$ является точкой локального минимума для f над S, и предположим далее, что f непрерывно дифференцируема в окрестности x^*.

1. Тогда для любого допустимого направления $d \in \mathbb{R}^n$ в x^* выполняется $\nabla f(x^*)^\top d \geq 0$.

Общее условие локальной оптимальности первого порядка

Вектор $d \in \mathbb{R}^n$ является допустимым направлением в точке $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$, если малые шаги вдоль d не выводят нас за пределы S.

Пусть $S \subseteq \mathbb{R}^n$ и функция $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Предположим, что $x^* \in S$ является точкой локального минимума для f над S, и предположим далее, что f непрерывно дифференцируема в окрестности x^*.

1. Тогда для любого допустимого направления $d \in \mathbb{R}^n$ в x^* выполняется $\nabla f(x^*)^\top d \geq 0$.
2. Если, кроме того, S выпукло, то

$$\nabla f(x^*)^\top (x - x^*) \geq 0, \forall x \in S.$$

Общее условие локальной оптимальности первого порядка

Вектор $d \in \mathbb{R}^n$ является допустимым направлением в точке $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$, если малые шаги вдоль d не выводят нас за пределы S.

Пусть $S \subseteq \mathbb{R}^n$ и функция $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Предположим, что $x^* \in S$ является точкой локального минимума для f над S, и предположим далее, что f непрерывно дифференцируема в окрестности x^*.

1. Тогда для любого допустимого направления $d \in \mathbb{R}^n$ в x^* выполняется $\nabla f(x^*)^\top d \geq 0$.
2. Если, кроме того, S выпукло, то

$$\nabla f(x^*)^\top (x - x^*) \geq 0, \forall x \in S.$$

Общее условие локальной оптимальности первого порядка

Вектор $d \in \mathbb{R}^n$ является допустимым направлением в точке $x^* \in S \subseteq \mathbb{R}^n$, если малые шаги вдоль d не выводят нас за пределы S.

Пусть $S \subseteq \mathbb{R}^n$ и функция $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Предположим, что $x^* \in S$ является точкой локального минимума для f над S, и предположим далее, что f непрерывно дифференцируема в окрестности x^*.

1. Тогда для любого допустимого направления $d \in \mathbb{R}^n$ в x^* выполняется $\nabla f(x^*)^\top d \geq 0$.
2. Если, кроме того, S выпукло, то

$$\nabla f(x^*)^\top (x - x^*) \geq 0, \forall x \in S.$$

$$f(x) = x_1 + x_2 \to \min_{x_1, x_2 \in \mathbb{R}^2}$$

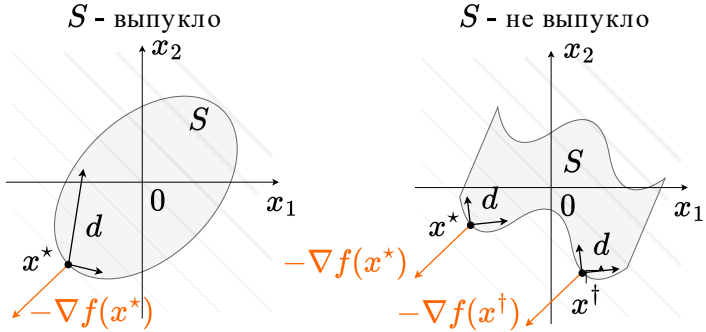


Рис. 4: Общее условие локальной оптимальности первого порядка

Выпуклый случай

Следует отметить, что в **выпуклом** случае (то есть при выпуклых f и S) необходимое условие становится достаточным.

Выпуклый случай

Следует отметить, что в **выпуклом** случае (то есть при выпуклых f и S) необходимое условие становится достаточным.

Еще один важный результат для выпуклого случая звучит следующим образом: если $f(x) : S \to \mathbb{R}$ — выпуклая функция, определённая на выпуклом множестве S, то:

Выпуклый случай

Следует отметить, что в **выпуклом** случае (то есть при выпуклых f и S) необходимое условие становится достаточным.

Еще один важный результат для выпуклого случая звучит следующим образом: если $f(x) : S \to \mathbb{R}$ — выпуклая функция, определённая на выпуклом множестве S, то:

- Любой локальный минимум является глобальным.

Выпуклый случай

Следует отметить, что в **выпуклом** случае (то есть при выпуклых f и S) необходимое условие становится достаточным.

Еще один важный результат для выпуклого случая звучит следующим образом: если $f(x) : S \to \mathbb{R}$ — выпуклая функция, определённая на выпуклом множестве S, то:

- Любой локальный минимум является глобальным.
- Множество локальных минимумов S^* выпукло.

Выпуклый случай

Следует отметить, что в **выпуклом** случае (то есть при выпуклых f и S) необходимое условие становится достаточным.

Еще один важный результат для выпуклого случая звучит следующим образом: если $f(x) : S \to \mathbb{R}$ — выпуклая функция, определённая на выпуклом множестве S, то:

- Любой локальный минимум является глобальным.
- Множество локальных минимумов S^* выпукло.
- Если $f(x)$ — строго или сильно выпуклая функция, то S^* содержит только одну точку: $S^* = \{x^*\}$.

Задачи с ограничениями-равенствами

В задачах без ограничений всё довольно интуитивно. В этом разделе мы добавим одно ограничение-равенство, то есть:

Задачи с ограничениями-равенствами

В задачах без ограничений всё довольно интуитивно. В этом разделе мы добавим одно ограничение-равенство, то есть:

$$\begin{aligned} f(x) &\to \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } h(x) &= 0 \end{aligned}$$

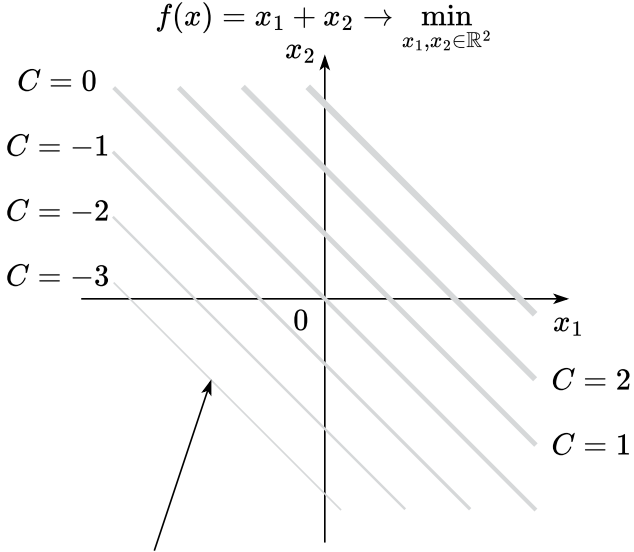
Задачи с ограничениями-равенствами

В задачах без ограничений всё довольно интуитивно. В этом разделе мы добавим одно ограничение-равенство, то есть:

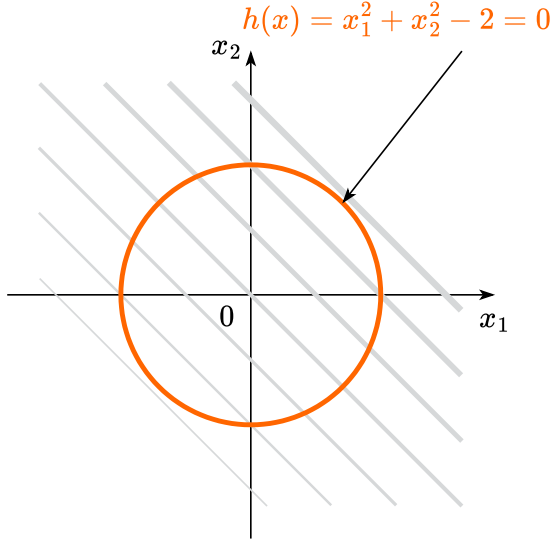
$$\begin{aligned} f(x) &\to \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } h(x) &= 0 \end{aligned}$$

Мы попробуем проиллюстрировать подход к решению этой задачи через простой пример с $f(x) = x_1 + x_2$ и $h(x) = x_1^2 + x_2^2 - 2$.

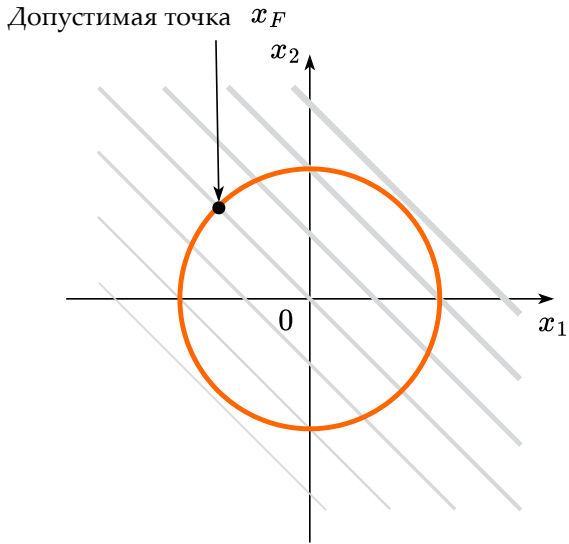
Задачи с ограничениями-равенствами



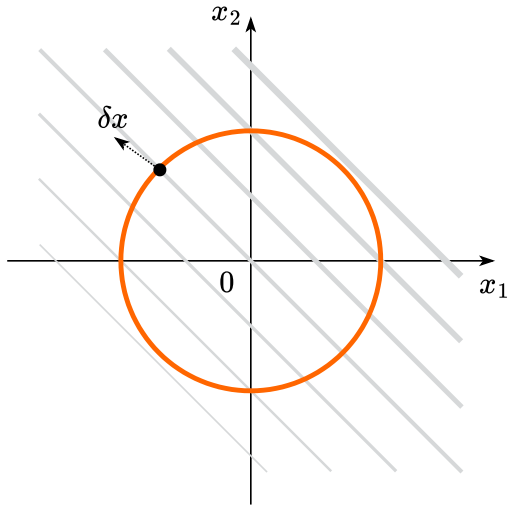
Задачи с ограничениями-равенствами



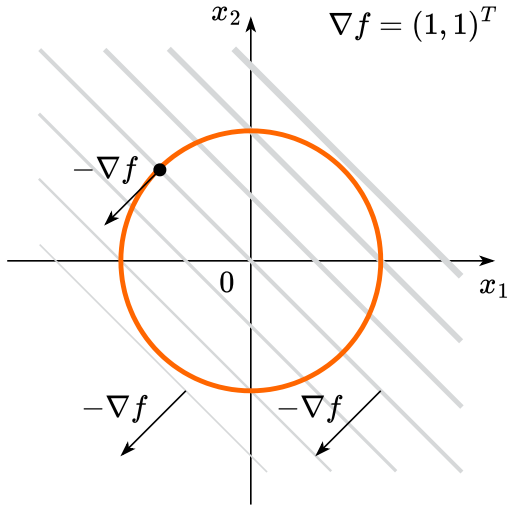
Задачи с ограничениями-равенствами



Задачи с ограничениями-равенствами

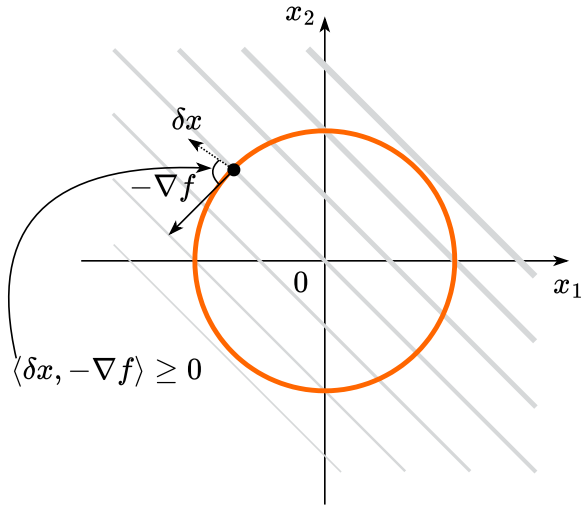


Задачи с ограничениями-равенствами

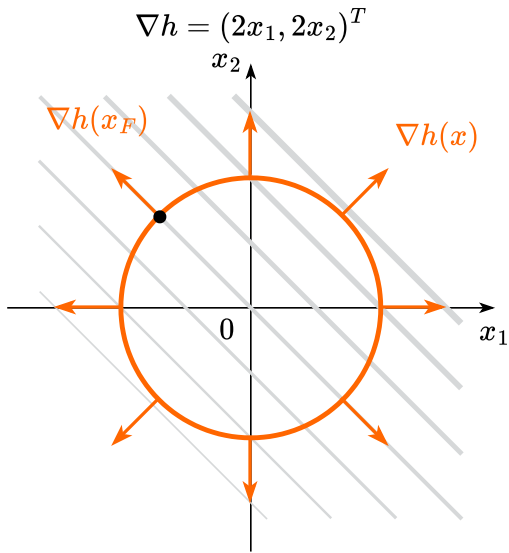


Задачи с ограничениями-равенствами

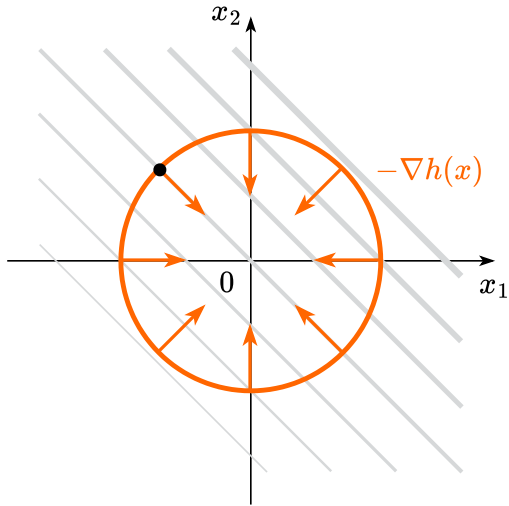
Мы хотим: $f(x_F + \delta x) \leq f(x_F)$



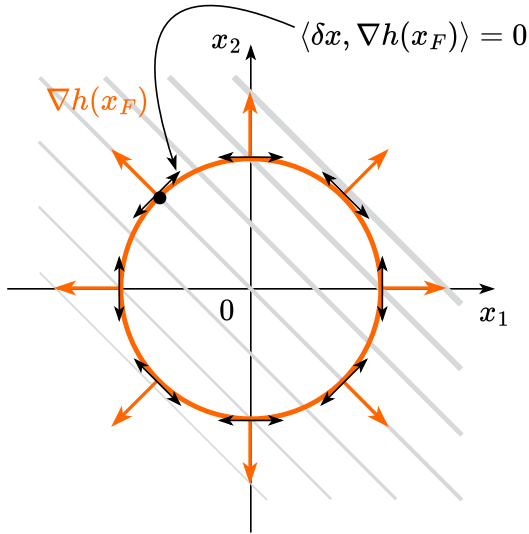
Задачи с ограничениями-равенствами



Задачи с ограничениями-равенствами



Задачи с ограничениями-равенствами



Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от x_F вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от x_F вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от x_F вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x_F) \rangle > 0$$

Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от x_F вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x_F) \rangle > 0$$

Предположим, что в процессе такого движения мы пришли в точку, где

Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от x_F вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x_F) \rangle > 0$$

Предположим, что в процессе такого движения мы пришли в точку, где

$$-\nabla f(x) = \nu \nabla h(x)$$

Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от x_F вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x_F) \rangle > 0$$

Предположим, что в процессе такого движения мы пришли в точку, где

$$-\nabla f(x) = \nu \nabla h(x)$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x) \rangle = \langle \delta x, \nu \nabla h(x) \rangle = 0$$

Задачи с ограничениями-равенствами

В общем случае, чтобы двигаться от x_F вдоль допустимого множества и уменьшать значение функции, необходимо обеспечить два условия:

$$\langle \delta x, \nabla h(x_F) \rangle = 0$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x_F) \rangle > 0$$

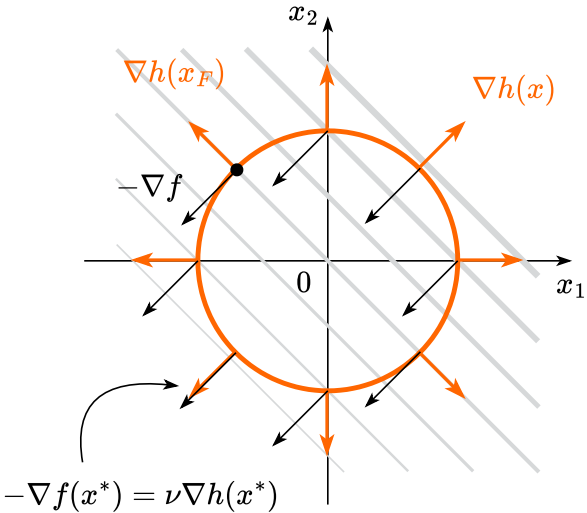
Предположим, что в процессе такого движения мы пришли в точку, где

$$-\nabla f(x) = \nu \nabla h(x)$$

$$\langle \delta x, -\nabla f(x) \rangle = \langle \delta x, \nu \nabla h(x) \rangle = 0$$

Тогда мы достигли такой точки допустимого множества, из которой нельзя уменьшить значение функции при допустимых малых сдвигах. Это и есть условие локального минимума в задаче с ограничением.

Задачи с ограничениями-равенствами



Лагранжиан

Давайте определим лагранжиан (для удобства):

$$L(x, \nu) = f(x) + \nu h(x)$$

Лагранжиан

Давайте определим лагранжиан (для удобства):

$$L(x, \nu) = f(x) + \nu h(x)$$

Если задача *регулярная* (мы определим это понятие позже) и точка x^* является локальным минимумом для описанной выше задачи, то существует ν^*:

Лагранжиан

Давайте определим лагранжиан (для удобства):

$$L(x, \nu) = f(x) + \nu h(x)$$

Если задача *регулярная* (мы определим это понятие позже) и точка x^* является локальным минимумом для описанной выше задачи, то существует ν^*:

Необходимые условия

Важно отметить, что $L(x^*, \nu^*) = f(x^*)$.

Лагранжиан

Давайте определим лагранжиан (для удобства):

$$L(x, \nu) = f(x) + \nu h(x)$$

Если задача *регулярная* (мы определим это понятие позже) и точка x^* является локальным минимумом для описанной выше задачи, то существует ν^*:

Необходимые условия

$\nabla_x L(x^*, \nu^*) = 0$ это мы уже написали выше

Важно отметить, что $L(x^*, \nu^*) = f(x^*)$.

Лагранжиан

Давайте определим лагранжиан (для удобства):

$$L(x, \nu) = f(x) + \nu h(x)$$

Если задача *регулярная* (мы определим это понятие позже) и точка x^* является локальным минимумом для описанной выше задачи, то существует ν^*:

Необходимые условия

$\nabla_x L(x^*, \nu^*) = 0$ это мы уже написали выше

$\nabla_\nu L(x^*, \nu^*) = 0$ бюджетное ограничение

Важно отметить, что $L(x^*, \nu^*) = f(x^*)$.

Задачи с ограничениями-равенствами

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

$$L(x, \nu) = f(x) + \sum_{i=1}^{p} \nu_i h_i(x) = f(x) + \nu^\top h(x)$$

Пусть $f(x)$ и $h_i(x)$ дважды дифференцируемы в точке x^* и непрерывно дифференцируемы в некоторой окрестности x^*. Условия локального минимума для $x \in \mathbb{R}^n, \nu \in \mathbb{R}^p$ записываются как

Необходимые условия

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

Задача наименьших квадратов

Example

Поставим задачу оптимизации и решим ее для линейной системы $Ax = b, A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ для трех случаев (предполагая, что матрица имеет полный ранг):

- $m < n$

Задача наименьших квадратов

Example

Поставим задачу оптимизации и решим ее для линейной системы $Ax = b, A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ для трех случаев (предполагая, что матрица имеет полный ранг):

- $m < n$
- $m = n$

Задача наименьших квадратов

Example

Поставим задачу оптимизации и решим ее для линейной системы $Ax = b, A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ для трех случаев (предполагая, что матрица имеет полный ранг):

- $m < n$
- $m = n$
- $m > n$

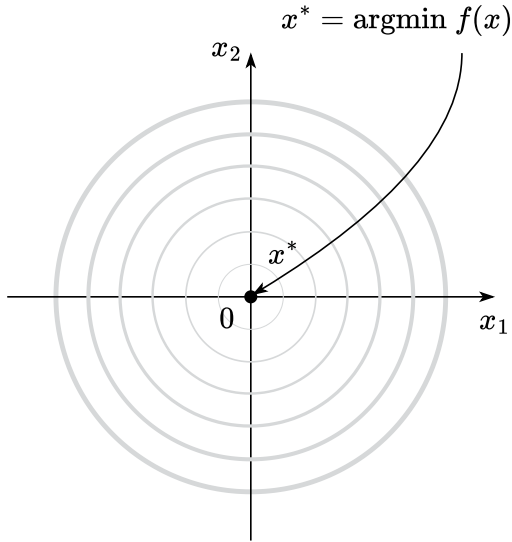
Задачи с ограничениями-неравенствами

Пример задачи с ограничениями-неравенствами

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2 \quad g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1$$

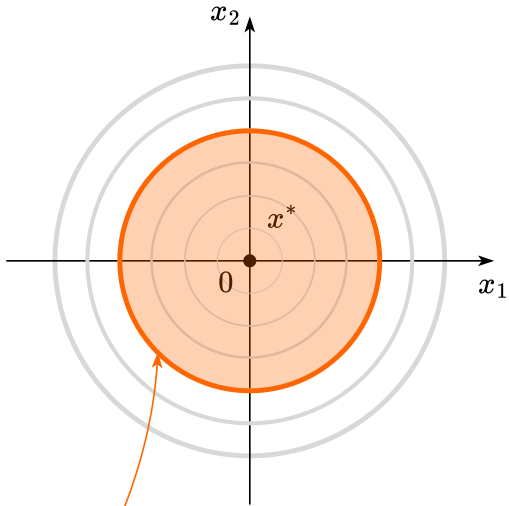
$$f(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$
$$\text{s.t. } g(x) \leq 0$$

Задачи с ограничениями-неравенствами



Линии уровня $f(x) = x_1^2 + x_2^2 = C$

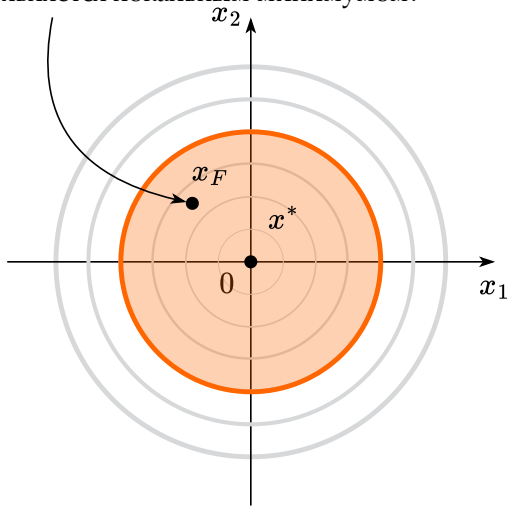
Задачи с ограничениями-неравенствами



Бюджетное множество $g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1 \leq 0$

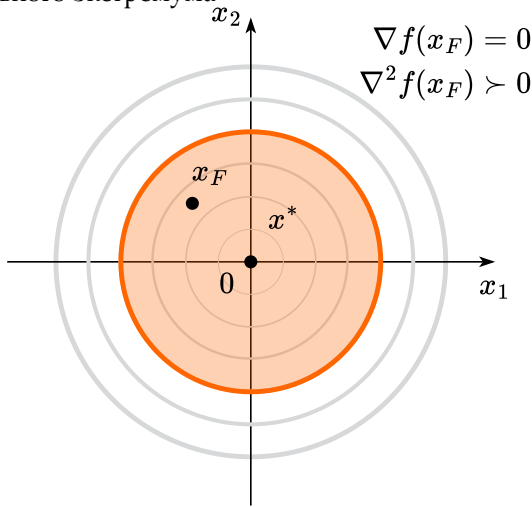
Задачи с ограничениями-неравенствами

Как понять, что некоторая допустимая точка является локальным минимумом?



Задачи с ограничениями-неравенствами

Просто! Проверим достаточные условия локального экстремума



Задачи с ограничениями-неравенствами

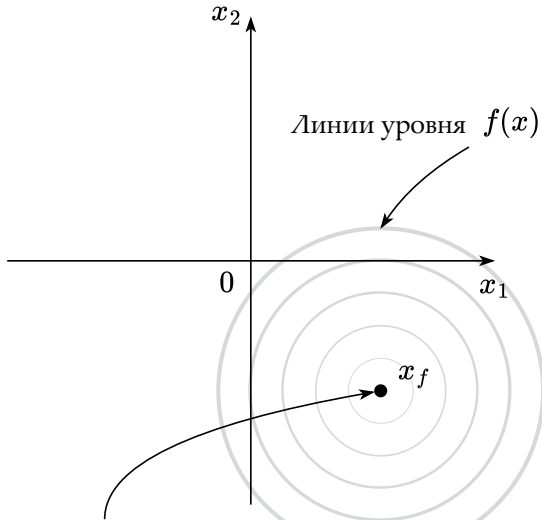
Таким образом, если ограничения типа неравенства неактивны в условной задаче, то мы можем решать задачу без ограничений. Однако так бывает не всегда. Рассмотрим второй простой пример.

$$f(x) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 + 1)^2 \quad g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1$$

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

Задачи с ограничениями-неравенствами

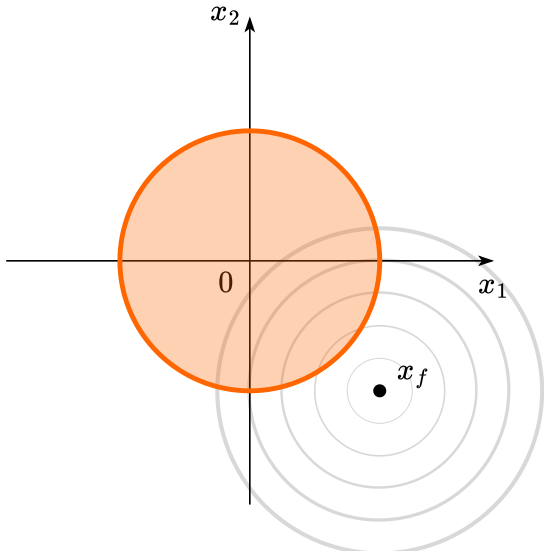
$$f(x) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 + 1)^2 = C$$



$$x_f = \operatorname{argmin} f(x)$$

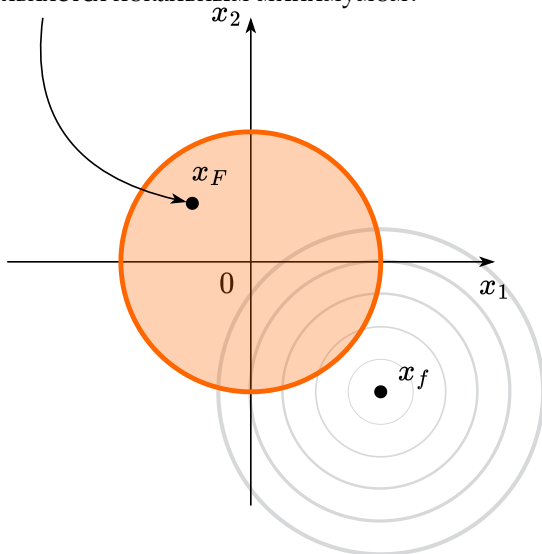
Задачи с ограничениями-неравенствами

Бюджетное множество $g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1 \leq 0$



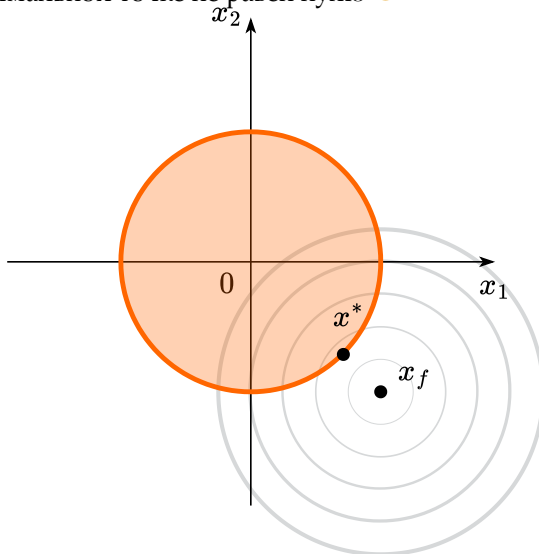
Задачи с ограничениями-неравенствами

Как понять, что некоторая допустимая точка является локальным минимумом?



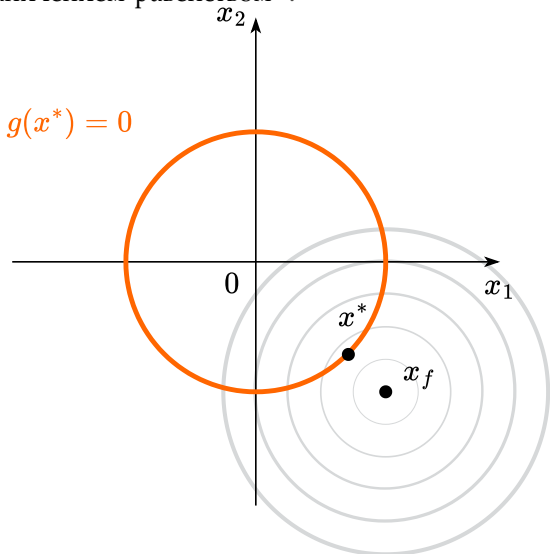
Задачи с ограничениями-неравенствами

Не так просто! Даже градиент
в оптимальной точке не равен нулю 😭

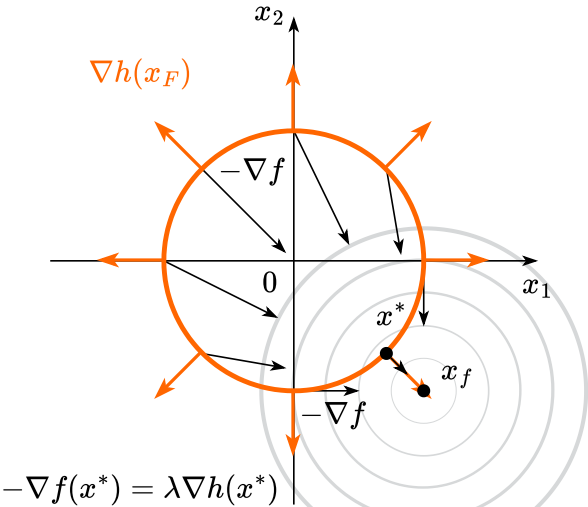


Задачи с ограничениями-неравенствами

Фактически имеем задачу
с ограничением-равенством 💡



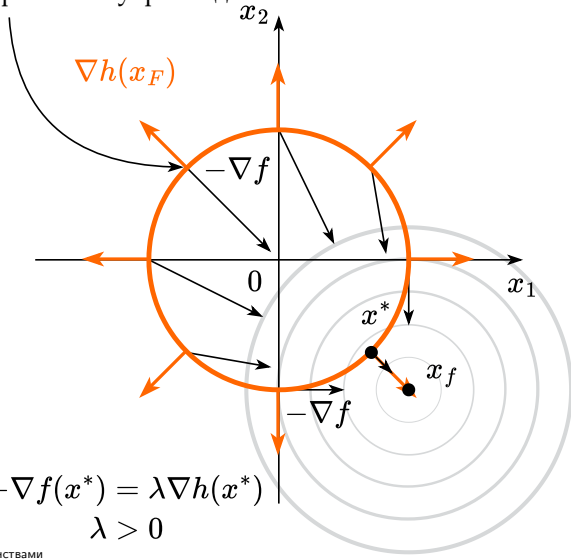
Задачи с ограничениями-неравенствами



$$-\nabla f(x^*) = \lambda \nabla h(x^*)$$

Задачи с ограничениями-неравенствами

Не является локальным минимумом, т.к. $-\nabla f(x)$ направлен внутрь бюджетного множества



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

Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно. $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) < 0$

Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно. $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) < 0$
- $\nabla f(x^*) = 0$

Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно. $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) < 0$
- $\nabla f(x^*) = 0$
- $\nabla^2 f(x^*) > 0$

Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно. $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) < 0$
- $\nabla f(x^*) = 0$
- $\nabla^2 f(x^*) > 0$

Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно. $g(x^*) < 0$
- $g(x^*) < 0$
- $\nabla f(x^*) = 0$
- $\nabla^2 f(x^*) > 0$

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

Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

$$f(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$

$$\text{s.t. } g(x) \leq 0$$

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно. $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) < 0$
- $\nabla f(x^*) = 0$
- $\nabla^2 f(x^*) > 0$

$g(x) \leq 0$ активно. $g(x^*) = 0$

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

Лагранжиан для задач с ограничениями-неравенствами

Объединяя два возможных случая, мы можем записать общие условия для задачи:

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

Определим функцию Лагранжа:

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$$

Классические условия Каруша-Куна-Таккера для локального минимума x^*, сформулированные при некоторых условиях регулярности, можно записать следующим образом.

Лагранжиан для задач с ограничениями-неравенствами

Объединяя два возможных случая, мы можем записать общие условия для задачи:

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

Определим функцию Лагранжа:

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$$

Классические условия Каруша-Куна-Таккера для локального минимума x^*, сформулированные при некоторых условиях регулярности, можно записать следующим образом.

Если x^* является локальным минимумом для описанной выше задачи, то существует единственный множитель Лагранжа λ^* такой, что:

$$(1)\ \nabla_x L(x^*, \lambda^*) = 0$$
$$(2)\ \lambda^* \geq 0$$
$$(3)\ \lambda^* g(x^*) = 0$$
$$(4)\ g(x^*) \leq 0$$

Общая формулировка

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

Данная формулировка является общей задачей математического программирования.

Решение включает в себя построение лагранжиана:

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

Необходимые условия

Пусть x^*, (λ^*, ν^*) является решением задачи математического программирования с нулевым зазором двойственности (оптимальное значение для исходной задачи p^* равно оптимальному значению для двойственной задачи d^*). Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

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

Необходимые условия

Пусть x^*, (λ^*, ν^*) является решением задачи математического программирования с нулевым зазором двойственности (оптимальное значение для исходной задачи p^* равно оптимальному значению для двойственной задачи d^*). Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

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

Необходимые условия

Пусть x^*, (λ^*, ν^*) является решением задачи математического программирования с нулевым зазором двойственности (оптимальное значение для исходной задачи p^* равно оптимальному значению для двойственной задачи d^*). Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

- $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\nabla_\nu L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\lambda_i^* \geq 0, i = 1, \dots, m$

Необходимые условия

Пусть x^*, (λ^*, ν^*) является решением задачи математического программирования с нулевым зазором двойственности (оптимальное значение для исходной задачи p^* равно оптимальному значению для двойственной задачи d^*). Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

- $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\nabla_\nu L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\lambda_i^* \geq 0, i = 1, \dots, m$
- $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m$

Необходимые условия

Пусть x^*, (λ^*, ν^*) является решением задачи математического программирования с нулевым зазором двойственности (оптимальное значение для исходной задачи p^* равно оптимальному значению для двойственной задачи d^*). Пусть также функции f_0, f_i, h_i дифференцируемы.

- $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\nabla_\nu L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$
- $\lambda_i^* \geq 0, i = 1, \dots, m$
- $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m$
- $f_i(x^*) \leq 0, i = 1, \dots, m$

Некоторые условия регулярности

Эти условия необходимы для того, чтобы условия Каруша-Куна-Таккера стали необходимыми условиями. Некоторые из них даже превращают необходимые условия в достаточные (например, условие Слейтера).

- **Условие Слейтера.** Если для выпуклой задачи (при минимизации, с выпуклыми f_0, f_i и аффинными h_i) существует точка x такая, что $h(x) = 0$ и $f_i(x) < 0$ (существует строго допустимая точка), то зазор двойственности равен нулю, и условия Каруша—Куна—Таккера становятся необходимыми и достаточными.

Некоторые условия регулярности

Эти условия необходимы для того, чтобы условия Каруша-Куна-Таккера стали необходимыми условиями. Некоторые из них даже превращают необходимые условия в достаточные (например, условие Слейтера).

- **Условие Слейтера.** Если для выпуклой задачи (при минимизации, с выпуклыми f_0, f_i и аффинными h_i) существует точка x такая, что $h(x) = 0$ и $f_i(x) < 0$ (существует строго допустимая точка), то зазор двойственности равен нулю, и условия Каруша—Куна—Таккера становятся необходимыми и достаточными.
- **Условие линейной квалификации ограничений.** Если f_i и h_i являются аффинными функциями, то никаких других условий не требуется.

Некоторые условия регулярности

Эти условия необходимы для того, чтобы условия Каруша-Куна-Таккера стали необходимыми условиями. Некоторые из них даже превращают необходимые условия в достаточные (например, условие Слейтера).

- **Условие Слейтера.** Если для выпуклой задачи (при минимизации, с выпуклыми f_0, f_i и аффинными h_i) существует точка x такая, что $h(x) = 0$ и $f_i(x) < 0$ (существует строго допустимая точка), то зазор двойственности равен нулю, и условия Каруша—Куна—Таккера становятся необходимыми и достаточными.
- **Условие линейной квалификации ограничений.** Если f_i и h_i являются аффинными функциями, то никаких других условий не требуется.
- **Условие линейной независимости ограничений.** Градиенты активных ограничений неравенства и градиенты ограничений равенства линейно независимы в точке x^*.

Некоторые условия регулярности

Эти условия необходимы для того, чтобы условия Каруша-Куна-Таккера стали необходимыми условиями. Некоторые из них даже превращают необходимые условия в достаточные (например, условие Слейтера).

- **Условие Слейтера.** Если для выпуклой задачи (при минимизации, с выпуклыми f_0, f_i и аффинными h_i) существует точка x такая, что $h(x) = 0$ и $f_i(x) < 0$ (существует строго допустимая точка), то зазор двойственности равен нулю, и условия Каруша—Куна—Таккера становятся необходимыми и достаточными.
- **Условие линейной квалификации ограничений.** Если f_i и h_i являются аффинными функциями, то никаких других условий не требуется.
- **Условие линейной независимости ограничений.** Градиенты активных ограничений неравенства и градиенты ограничений равенства линейно независимы в точке x^*.
- Для других примеров см. wiki.

Пример. Проекция на гиперплоскость

$$\min \frac{1}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T\mathbf{x} = b.$$

Пример. Проекция на гиперплоскость

$$\min \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T\mathbf{x} = b.$$

Решение

Лагранжиан:

Пример. Проекция на гиперплоскость

$$\min \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T\mathbf{x} = b.$$

Решение

Лагранжиан:

$$L(\mathbf{x}, \nu) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \nu(\mathbf{a}^T\mathbf{x} - b)$$

Пример. Проекция на гиперплоскость

$$\min \frac{1}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T\mathbf{x} = b.$$

Решение

Лагранжиан:

$$L(\mathbf{x}, \nu) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|^2 + \nu(\mathbf{a}^T\mathbf{x} - b)$$

Производная L по $\mathbf{x}$:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{y} + \nu\mathbf{a} = 0, \qquad \mathbf{x} = \mathbf{y} - \nu\mathbf{a}$$

Пример. Проекция на гиперплоскость

$$\min \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T\mathbf{x} = b.$$

Решение

Лагранжиан:

$$L(\mathbf{x}, \nu) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \nu(\mathbf{a}^T\mathbf{x} - b)$$

Производная L по $\mathbf{x}$:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{y} + \nu\mathbf{a} = 0, \qquad \mathbf{x} = \mathbf{y} - \nu\mathbf{a}$$

$$\mathbf{a}^T\mathbf{x} = \mathbf{a}^T\mathbf{y} - \nu\mathbf{a}^T\mathbf{a} \qquad \nu = \frac{\mathbf{a}^T\mathbf{y} - b}{\|\mathbf{a}\|^2}$$

Пример. Проекция на гиперплоскость

$$\min \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T\mathbf{x} = b.$$

Решение

Лагранжиан:

$$L(\mathbf{x}, \nu) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \nu(\mathbf{a}^T\mathbf{x} - b)$$

Производная L по $\mathbf{x}$:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{y} + \nu\mathbf{a} = 0, \qquad \mathbf{x} = \mathbf{y} - \nu\mathbf{a}$$

$$\mathbf{a}^T\mathbf{x} = \mathbf{a}^T\mathbf{y} - \nu\mathbf{a}^T\mathbf{a} \qquad \nu = \frac{\mathbf{a}^T\mathbf{y} - b}{\|\mathbf{a}\|^2}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{y} - \frac{\mathbf{a}^T\mathbf{y} - b}{\|\mathbf{a}\|^2}\mathbf{a}$$

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min \frac{1}{2}\|x - y\|^2, \quad \text{s.t.} \quad x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0.$$

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min \frac{1}{2}\|x - y\|^2, \quad \text{s.t.} \quad x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0.$$

Условия KKT

Лагранжиан задается следующим образом:

$$L = \frac{1}{2}\|x - y\|^2 - \sum_i \lambda_i x_i + \nu(x^\top 1 - 1)$$

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min \frac{1}{2}\|x - y\|^2, \quad \text{s.t.} \quad x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0.$$

Условия KKT

Лагранжиан задается следующим образом:

$$L = \frac{1}{2}\|x - y\|^2 - \sum_i \lambda_i x_i + \nu(x^\top 1 - 1)$$

Взяв производную L по x_i и записав KKT, мы получаем:

- $\frac{\partial L}{\partial x_i} = x_i - y_i - \lambda_i + \nu = 0$

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min \frac{1}{2}\|x - y\|^2, \quad \text{s.t.} \quad x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0.$$

Условия KKT

Лагранжиан задается следующим образом:

$$L = \frac{1}{2}\|x - y\|^2 - \sum_i \lambda_i x_i + \nu(x^\top 1 - 1)$$

Взяв производную L по x_i и записав KKT, мы получаем:

- $\frac{\partial L}{\partial x_i} = x_i - y_i - \lambda_i + \nu = 0$
- $\lambda_i x_i = 0$

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min \frac{1}{2}\|x - y\|^2, \quad \text{s.t.} \quad x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0.$$

Условия KKT

Лагранжиан задается следующим образом:

$$L = \frac{1}{2}\|x - y\|^2 - \sum_i \lambda_i x_i + \nu(x^\top 1 - 1)$$

Взяв производную L по x_i и записав KKT, мы получаем:

- $\frac{\partial L}{\partial x_i} = x_i - y_i - \lambda_i + \nu = 0$
- $\lambda_i x_i = 0$
- $\lambda_i \geq 0$

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min \frac{1}{2}\|x - y\|^2, \quad \text{s.t.} \quad x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0.$$

Условия KKT

Лагранжиан задается следующим образом:

$$L = \frac{1}{2}\|x - y\|^2 - \sum_i \lambda_i x_i + \nu(x^\top 1 - 1)$$

Взяв производную L по x_i и записав KKT, мы получаем:

- $\frac{\partial L}{\partial x_i} = x_i - y_i - \lambda_i + \nu = 0$
- $\lambda_i x_i = 0$
- $\lambda_i \geq 0$
- $x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0$

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min \frac{1}{2}\|x - y\|^2, \quad \text{s.t.} \quad x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0.$$

Условия KKT

Лагранжиан задается следующим образом:

$$L = \frac{1}{2}\|x - y\|^2 - \sum_i \lambda_i x_i + \nu(x^\top 1 - 1)$$

Взяв производную L по x_i и записав KKT, мы получаем:

- $\frac{\partial L}{\partial x_i} = x_i - y_i - \lambda_i + \nu = 0$
- $\lambda_i x_i = 0$
- $\lambda_i \geq 0$
- $x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0$

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min \frac{1}{2}\|x - y\|^2, \quad \text{s.t.} \quad x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0.$$

Условия KKT

Лагранжиан задается следующим образом:

$$L = \frac{1}{2}\|x - y\|^2 - \sum_i \lambda_i x_i + \nu(x^\top 1 - 1)$$

Взяв производную L по x_i и записав KKT, мы получаем:

- $\frac{\partial L}{\partial x_i} = x_i - y_i - \lambda_i + \nu = 0$
- $\lambda_i x_i = 0$
- $\lambda_i \geq 0$
- $x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0$

> **Question**
>
> Решите систему выше за $O(n \log n)$.

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min \frac{1}{2}\|x - y\|^2, \quad \text{s.t.} \quad x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0.$$

Условия KKT

Лагранжиан задается следующим образом:

$$L = \frac{1}{2}\|x - y\|^2 - \sum_i \lambda_i x_i + \nu(x^\top 1 - 1)$$

Взяв производную L по x_i и записав KKT, мы получаем:

- $\frac{\partial L}{\partial x_i} = x_i - y_i - \lambda_i + \nu = 0$
- $\lambda_i x_i = 0$
- $\lambda_i \geq 0$
- $x^\top 1 = 1, \quad x \geq 0$

Question

Решите систему выше за $O(n \log n)$.

Question

Решите систему выше за $O(n)$.

Ссылки

- Лекция по условиям ККТ (очень интуитивное объяснение) в курсе “Элементы статистического обучения” @ КТН.

Ссылки

- Лекция по условиям ККТ (очень интуитивное объяснение) в курсе “Элементы статистического обучения” @ КТН.
- Однострочное доказательство ККТ

Ссылки

- Лекция по условиям ККТ (очень интуитивное объяснение) в курсе “Элементы статистического обучения” @ КТН.
- Однострочное доказательство ККТ
- О втором порядке оптимальности для задач оптимизации с ограничениями неравенства

Ссылки

- Лекция по условиям ККТ (очень интуитивное объяснение) в курсе “Элементы статистического обучения” @ КТН.
- Однострочное доказательство ККТ
- О втором порядке оптимальности для задач оптимизации с ограничениями неравенства
- О втором порядке оптимальности в нелинейной оптимизации

Ссылки

- Лекция по условиям KKT (очень интуитивное объяснение) в курсе “Элементы статистического обучения” @ КТН.
- Однострочное доказательство KKT
- О втором порядке оптимальности для задач оптимизации с ограничениями неравенства
- О втором порядке оптимальности в нелинейной оптимизации
- Численная оптимизация by Jorge Nocedal and Stephen J. Wright.