

Условия оптимальности. Ограничения равенства и неравенства. Условия ККТ.

Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ

Условия оптимальности

Важные понятия



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

Множество S обычно называется допустимым (бюджетным) множеством.

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

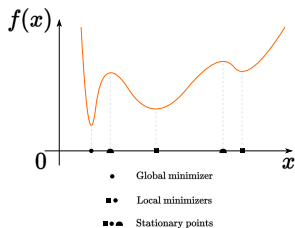


Рисунок 1. Illustration of different stationary (critical) points

Важные понятия



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

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 $x \in N$.

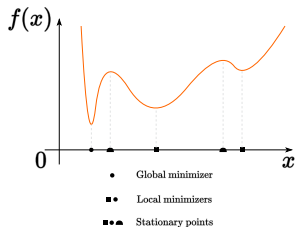


Рисунок 1. Illustration of different stationary (critical) points

Важные понятия



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

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 $x \neq x^*$.

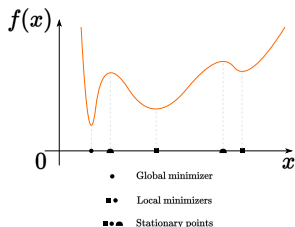


Рисунок 1. Illustration of different stationary (critical) points

Важные понятия



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

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.

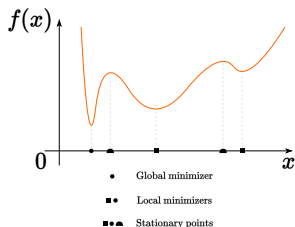


Рисунок 1. Illustration of different stationary (critical) points

Безусловная оптимизация



💡 Необходимое условие оптимальности первого порядка

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

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad (1)$$

💡 Достаточные условия оптимальности второго порядка

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

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

Тогда x^* является строгим локальным минимумом функции f .

Оптимизация с ограничениями-равенствами

Оптимизация с ограничениями-равенствами



Рассмотрим простой, но практический случай ограничений-равенств:

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

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:

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

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

Оптимизация с ограничениями-неравенствами

Оптимизация с ограничениями-неравенствами



Рассмотрим простой, но практический случай ограничений-неравенств:

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } g(x) &\leq 0 \end{aligned}$$

Оптимизация с ограничениями-неравенствами



Рассмотрим простой, но практический случай ограничений-неравенств:

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } g(x) &\leq 0 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} g(x^*) &< 0 \\ \nabla f(x^*) &= 0 \\ \nabla^2 f(x^*) &> 0 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} g(x^*) &= 0 \\ -\nabla f(x^*) &= \lambda \nabla g(x^*), \lambda > 0 \\ \langle y, \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) y \rangle &> 0, \\ \forall y \neq 0 \in \mathbb{R}^n : \nabla g(x^*)^\top y &= 0 \end{aligned}$$

Условия Каруша-Куна-Таккера

Общая формулировка



Общая задача математического программирования:

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

Общая формулировка



Общая задача математического программирования:

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

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 $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$ 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 $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$ 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.

$$(1) \nabla_x L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$$

$$(2) \nabla_\nu L(x^*, \lambda^*, \nu^*) = 0$$

$$(3) \lambda_i^* \geq 0, i = 1, \dots, m$$

$$(4) \lambda_i^* f_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m$$

$$(5) f_i(x^*) \leq 0, i = 1, \dots, m$$

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:

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

Задачи

Задача 1



i Question

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

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

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

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

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

Найдите точку максимума x^* функции f .

Задача 2



i Question

Найдите явное решение следующей задачи.

$$\begin{aligned} f(x, y) = x + y &\rightarrow \min \\ \text{s.t. } x^2 + y^2 &= 1 \end{aligned}$$

где $x, y \in \mathbb{R}$.

Задача 3



i Question

Найдите явное решение следующей задачи.

$$\begin{aligned} \langle c, x \rangle + \sum_{i=1}^n x_i \log x_i &\rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \\ \text{s.t. } \sum_{i=1}^n x_i &= 1, \end{aligned}$$

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

Задача 4



i Question

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

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

имеет единственное решение и найдите его.

Задача 5



i Question

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

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

найдите условие стационарности ККТ.

Задача 6



i Question

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

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

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

Вы должны избежать явного обратного матрицы 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:

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

Задача 8 (БОНУС)



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 , 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:

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

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

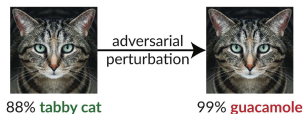


Рисунок 2. Иллюстрация

Вот код, попробуйте его сами! 