

Выпуклость множеств и функций

МЕТОДЫ ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

НЕДЕЛЯ 4

Даня Меркулов
Пётр Остроухов

Выпуклость. Сильная выпуклость.

Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ

Напоминание с лекции

Выпуклые множества

Отрезок



Пусть x_1, x_2 два вектора в \mathbb{R}^n . Тогда отрезок, проходящий через них, определяется следующим образом:

$$x = \theta x_1 + (1 - \theta)x_2, \theta \in [0, 1]$$



Рисунок 1. Иллюстрация отрезка между точками x_1, x_2

Выпуклое множество



Множество S называется **выпуклым**, если для любых x_1, x_2 из S отрезок между ними также лежит в S , т.е.

$$\forall \theta \in [0, 1], \forall x_1, x_2 \in S : \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in S$$

i Example

Любое аффинное множество, луч, отрезок - все они являются выпуклыми множествами.



Рисунок 2. Верх: примеры выпуклых множеств. Низ: примеры невыпуклых множеств.

Задача 1



Question

Докажите, что шар в \mathbb{R}^n (т.е. множество $\{\mathbf{x} \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_c\| \leq r\}$) - является выпуклым.

Задача 2



i Question

Является ли полоса $\{x \in \mathbb{R}^n \mid \alpha \leq a^\top x \leq \beta\}$ выпуклой?

Задача 3



i Question

Пусть S такое, что $\forall x, y \in S \rightarrow \frac{1}{2}(x + y) \in S$. Является ли это множество выпуклым?

Задача 4



Question

Является ли множество $S = \{x \mid x + S_2 \subseteq S_1\}$, где $S_1, S_2 \subseteq \mathbb{R}^n$ с выпуклым S_1 , выпуклым?

Функции

Выпуклая функция



Функция $f(x)$, определенная на выпуклом множестве $S \subseteq \mathbb{R}^n$, называется **выпуклой** на S , если:

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2)$$

для любых $x_1, x_2 \in S$ и $0 \leq \lambda \leq 1$.

Если вышеуказанное неравенство выполняется как строгое неравенство $x_1 \neq x_2$ и $0 < \lambda < 1$, то функция называется **строго выпуклой** на S .



Рисунок 3. Разница между выпуклой и невыпуклой функцией

Сильная выпуклость



$f(x)$, определенная на выпуклом множестве $S \subseteq \mathbb{R}^n$, называется μ -сильно выпуклой (сильно выпуклой) на S , если:

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2) - \frac{\mu}{2}\lambda(1 - \lambda)\|x_1 - x_2\|^2$$

для любых $x_1, x_2 \in S$ и $0 \leq \lambda \leq 1$ для некоторого $\mu > 0$.



Рисунок 4. Сильно выпуклая функция больше или равна квадратичной аппроксимации Тейлора в любой точке

Критерии выпуклости

Дифференциальный критерий выпуклости первого порядка



Дифференцируемая функция $f(x)$ определенная на выпуклом множестве $S \subseteq \mathbb{R}^n$ является выпуклой тогда и только тогда, когда $\forall x, y \in S$:

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f^T(x)(y - x)$$

Пусть $y = x + \Delta x$, тогда критерий станет более удобным:

$$f(x + \Delta x) \geq f(x) + \nabla f^T(x)\Delta x$$



Рисунок 5. Выпуклая функция больше или равна линейной аппроксимации Тейлора в любой точке

Дифференциальный критерий выпуклости второго порядка



Дважды дифференцируемая функция $f(x)$ определенная на выпуклом множестве $S \subseteq \mathbb{R}^n$ является μ -сильно выпуклой тогда и только тогда, когда $\forall x \in \text{int}(S) \neq \emptyset$:


$$\nabla^2 f(x) \succeq \mu I$$

Другими словами:

$$\langle y, \nabla^2 f(x)y \rangle \geq \mu \|y\|^2$$

Эксперимент с JAX



Почему выпуклость и сильная выпуклость важны? Проверьте простой  код.

Задача 5



i Question

Докажите, что $f(x) = \|x\|$ является выпуклой на \mathbb{R}^n .

i Question

Докажите, что $f(x) = x^\top Ax$, где $A \succeq 0$ - является выпуклой на \mathbb{R}^n .

Задача 6



Question

Докажите, что если $f(x)$ является выпуклой на \mathbb{R}^n , то $\exp(f(x))$ является выпуклой на \mathbb{R}^n .

Задача 7



Question

Докажите, что если $f(x)$ является выпуклой неотрицательной функцией и $p \geq 1$, то $g(x) = f(x)^p$ является выпуклой.

Задача 8



i Question

Докажите, что если $f(x)$ является вогнутой положительной функцией над выпуклым S , то $g(x) = \frac{1}{f(x)}$ является выпуклой.

i Question

Докажите, что следующая функция является выпуклой на множестве всех положительных знаменателей

$$f(x) = \frac{1}{x_1 - \frac{1}{x_2 - \frac{1}{x_3 - \frac{1}{\dots}}}}, x \in \mathbb{R}^n$$

Задача 9



Question

Пусть $S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x \succ 0, \|x\|_\infty \leq M\}$. Докажите, что $f(x) = \sum_{i=1}^n x_i \log x_i$ является $\frac{1}{M}$ -сильно выпуклой.

Условие Поляка - Лоясиевича

Условие Поляка - Лоясиевича

Условие Поляка - Лоясиевича выполняется, если выполняется следующее условие для некоторого $\mu > 0$,

$$\|\nabla f(x)\|^2 \geq \mu(f(x) - f^*) \forall x$$

Пример функции, которая удовлетворяет условию Поляка - Лоясиевича, но не является выпуклой.

$$f(x, y) = \frac{(y - \sin x)^2}{2}$$

Пример невыпуклой функции, удовлетворяющей условию Поляка - Лоясиевича  Open in Colab.

Практические примеры

Логистическая регрессия



i Дано

$$X \in \mathbb{R}^{m \times n}, y \in \{0, 1\}^n.$$

Логистическая регрессия



i Дано

$$X \in \mathbb{R}^{m \times n}, y \in \{0, 1\}^n.$$

! Найти

Найти функцию, которая переводит объект x в вероятность $p(y = 1|x)$:

$$p : \mathbb{R}^m \rightarrow (0, 1), p(x) \equiv \sigma(x^T w) = \frac{1}{1 + \exp(-x^T w)}$$

Логистическая регрессия



i Дано

$$X \in \mathbb{R}^{m \times n}, y \in \{0, 1\}^n.$$

! Найти

Найти функцию, которая переводит объект x в вероятность $p(y = 1|x)$:

$$p : \mathbb{R}^m \rightarrow (0, 1), p(x) \equiv \sigma(x^T w) = \frac{1}{1 + \exp(-x^T w)}$$

💡 Критерий

Двоичная кросс-энтропия (лог-потери): $L(p, X, y) =$
$$-\sum_{i=1}^n y_i \log p(X_i) + (1 - y_i) \log (1 - p(X_i)),$$
 которая
минимизируется относительно w .

Логистическая регрессия



i Дано

$$X \in \mathbb{R}^{m \times n}, y \in \{0, 1\}^n.$$

! Найти

Найти функцию, которая переводит объект x в вероятность $p(y = 1|x)$:
 $p: \mathbb{R}^m \rightarrow (0, 1), p(x) \equiv \sigma(x^T w) = \frac{1}{1 + \exp(-x^T w)}$

💡 Критерий

Двоичная кросс-энтропия (лог-потери): $L(p, X, y) = -\sum_{i=1}^n y_i \log p(X_i) + (1 - y_i) \log (1 - p(X_i))$, которая минимизируется относительно w .

Рассмотрите  эксперименты по логистической регрессии.



Мы можем сделать эту задачу μ -сильно выпуклой, если рассмотрим регуляризованную логистическую потерю как критерий:
 $L(p, X, y) + \frac{\mu}{2} \|w\|_2^2.$

Метод опорных векторов (SVM)



i Дано

$$X \in \mathbb{R}^{m \times n}, y \in \{-1, 1\}^n.$$

Метод опорных векторов (SVM)



i Дано

$$X \in \mathbb{R}^{m \times n}, y \in \{-1, 1\}^n.$$

! Найти

Найти гиперплоскость, которая максимизирует маржу между двумя классами:

$$f : \mathbb{R}^m \rightarrow \{-1, 1\}, f(x) = \text{sign}(w^T x + b).$$

Метод опорных векторов (SVM)



i Дано

$$X \in \mathbb{R}^{m \times n}, y \in \{-1, 1\}^n.$$

! Найти

Найти гиперплоскость, которая максимизирует маржу между двумя классами:

$$f : \mathbb{R}^m \rightarrow \{-1, 1\}, f(x) = \text{sign}(w^T x + b).$$

💡 Критерий

Шарнирная функция потерь:

$$L(w, X, y) = \frac{1}{2} \|w\|_2^2 + C \sum_{i=1}^n \max(0, 1 - y_i (X_i^T w + b)), \text{ которая минимизируется относительно } w \text{ и } b.$$

Эта задача является сильно выпуклой из-за квадратичной евклидовой нормы.
Рассмотрите 🧠 эксперименты по SVM в том же ноутбуке.

Метод опорных векторов (SVM)



i Дано

$$X \in \mathbb{R}^{m \times n}, y \in \{-1, 1\}^n.$$

! Найти

Найти гиперплоскость, которая максимизирует маржу между двумя классами:

$$f: \mathbb{R}^m \rightarrow \{-1, 1\}, f(x) = \text{sign}(w^T x + b).$$

💡 Критерий

Шарнирная функция потерь:

$$L(w, X, y) = \frac{1}{2} \|w\|_2^2 + C \sum_{i=1}^n \max(0, 1 - y_i(X_i^T w + b)), \text{ которая минимизируется относительно } w \text{ и } b.$$

Эта задача является сильно выпуклой из-за квадратичной евклидовой нормы. Рассмотрите 🧪 эксперименты по SVM в том же ноутбуке.



Рисунок 6. Метод опорных векторов

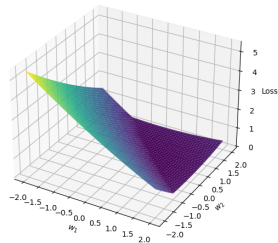


Рисунок 7. L_2 -регуляризованная шарнирная потеря в пространстве параметров для $x = (1, 1), y = 1$

Некоторые любопытные примеры



- Приближение низкоранговой матрицы

$$\min_X \|A - X\|_F^2 \text{ s.t. } \text{rank}(X) \leq k.$$

Некоторые любопытные примеры



- Приближение низкоранговой матрицы

$$\min_X \|A - X\|_F^2 \text{ s.t. } \text{rank}(X) \leq k.$$

Некоторые любопытные примеры



- Приближение низкоранговой матрицы

$$\min_X \|A - X\|_F^2 \text{ s.t. } \text{rank}(X) \leq k.$$

i Question

Является ли это выпуклым?

Некоторые любопытные примеры



- Приближение низкоранговой матрицы

$$\min_X \|A - X\|_F^2 \text{ s.t. } \text{rank}(X) \leq k.$$

Question

Является ли это выпуклым?

По теореме Эккарта-Янга это можно решить с помощью SVD: $X^* = U_k \Sigma_k V_k^T$, где $A = U \Sigma V^T$.

Некоторые любопытные примеры

- Приближение низкоранговой матрицы

$$\min_X \|A - X\|_F^2 \text{ s.t. } \text{rank}(X) \leq k.$$

Question

Является ли это выпуклым?

По теореме Эккарта-Янга это можно решить с помощью SVD: $X^* = U_k \Sigma_k V_k^T$, где $A = U \Sigma V^T$.

- Выпуклая релаксация через ядерную норму

$$\min_X \text{rank}(X), \text{ s.t. } X_{ij} = M_{ij}, (i, j) \in I.$$

Некоторые любопытные примеры

- Приближение низкоранговой матрицы

$$\min_X \|A - X\|_F^2 \text{ s.t. } \text{rank}(X) \leq k.$$

Question

Является ли это выпуклым?

По теореме Эккарта-Янга это можно решить с помощью SVD: $X^* = U_k \Sigma_k V_k^T$, где $A = U \Sigma V^T$.

- Выпуклая релаксация через ядерную норму

$$\min_X \text{rank}(X), \text{ s.t. } X_{ij} = M_{ij}, (i, j) \in I.$$

Некоторые любопытные примеры



- Приближение низкоранговой матрицы

$$\min_X \|A - X\|_F^2 \text{ s.t. } \text{rank}(X) \leq k.$$

i Question

Является ли это выпуклым?

По теореме Эккарта-Янга это можно решить с помощью SVD: $X^* = U_k \Sigma_k V_k^T$, где $A = U \Sigma V^T$.

- Выпуклая релаксация через ядерную норму

$$\min_X \text{rank}(X), \text{ s.t. } X_{ij} = M_{ij}, (i, j) \in I.$$

NP-сложная задача, но $\|A\|_* = \text{trace}(\sqrt{A^T A}) = \sum_{i=1}^{\text{rank}(A)} \sigma_i(A)$ является выпуклой оболочкой ранга матрицы.