

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

Даня Меркулов

Методы оптимизации. МФТИ

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

Теория

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

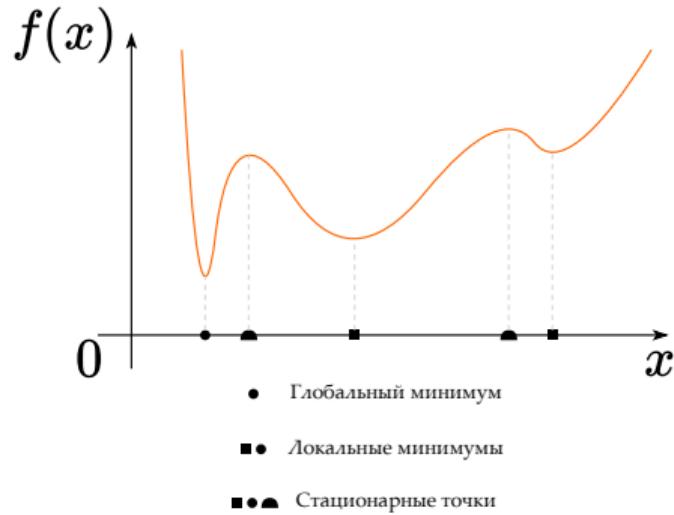


Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

Теория

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

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

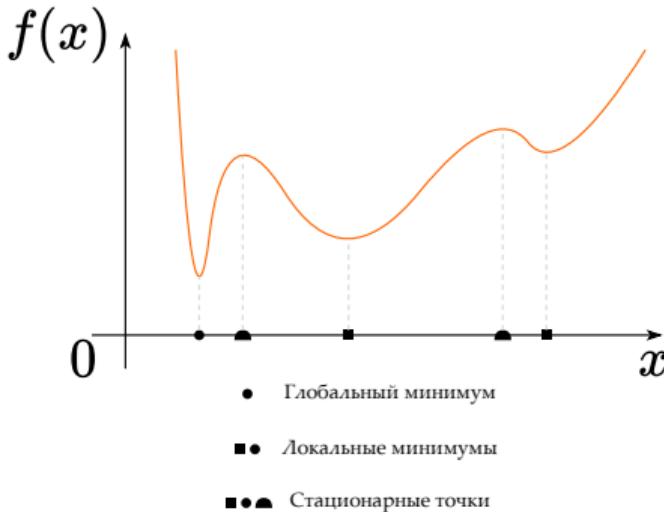
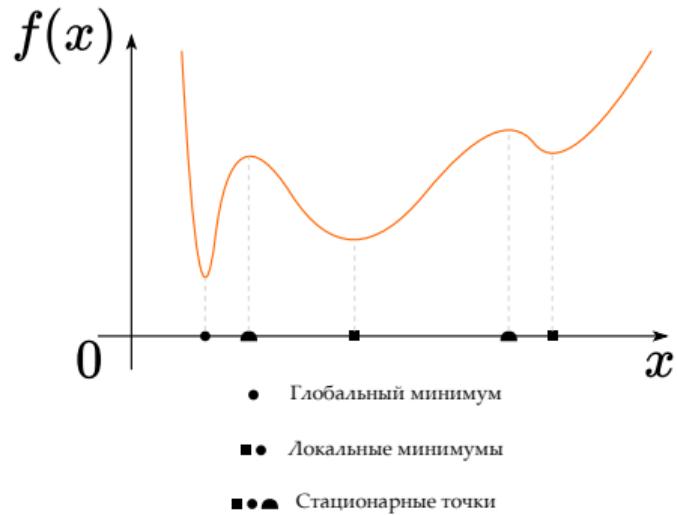


Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

Теория

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



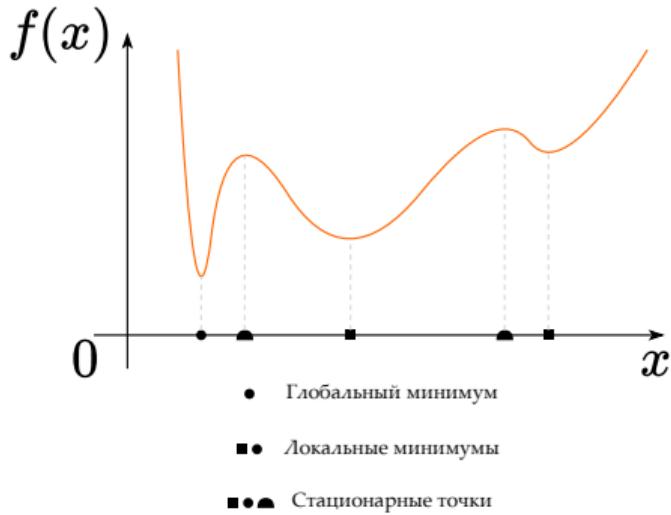
Множество S обычно называется **допустимым множеством** (или **бюджетным множеством**).

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

Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

Теория

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



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

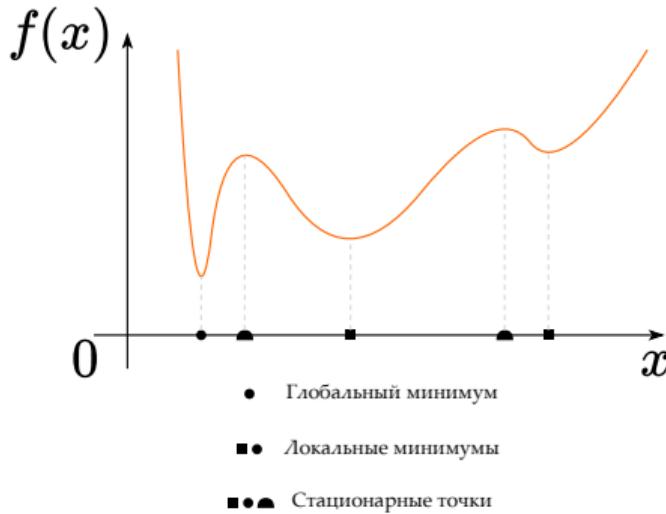
Мы говорим, что задача имеет решение, если бюджетное множество, в котором достигается минимум или инфимум данной функции, **не пусто**: $x^* \in S$.

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

Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

Теория

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



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 $x \in N \cap S$.

Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

Теория

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

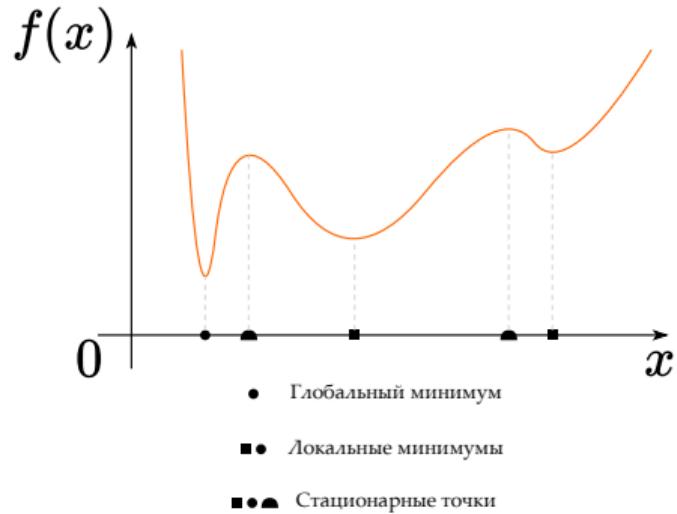


Рис. 2: Иллюстрация различных стационарных (критических) точек

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

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

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

i 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

i 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.

GOOD NEWS EVERYONE!



Рис. 3: Многие практические задачи теоретически разрешимы

Теорема Вейерштрасса об экстремальных значениях

i 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.

GOOD NEWS EVERYONE!



i Теорема Тейлора

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

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

Рис. 3: Многие практические задачи теоретически разрешимы

Теорема Вейерштрасса об экстремальных значениях

i 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.

GOOD NEWS EVERYONE!



Рис. 3: Многие практические задачи теоретически разрешимы

i Теорема Тейлора

Пусть $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ - 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 $t \in (0, 1)$.

Необходимые условия

■ Необходимое условие оптимальности первого порядка

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

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

Необходимые условия

■ Необходимое условие оптимальности первого порядка

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

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

Доказательство

Предположим от противного, что $\nabla f(x^*) \neq 0$. Определим вектор $p = -\nabla f(x^*)$ и заметим, что

$$p^T \nabla f(x^*) = -\|\nabla f(x^*)\|^2 < 0$$

Необходимые условия

■ Необходимое условие оптимальности первого порядка

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

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

Доказательство

Предположим от противного, что $\nabla f(x^*) \neq 0$. Определим вектор $p = -\nabla f(x^*)$ и заметим, что

$$p^T \nabla f(x^*) = -\|\nabla f(x^*)\|^2 < 0$$

Поскольку ∇f непрерывна в окрестности x^* , существует скаляр $T > 0$ такой, что

$$p^T \nabla f(x^* + tp) < 0, \text{ для всех } t \in [0, T]$$

Необходимые условия

■ Необходимое условие оптимальности первого порядка

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

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

Доказательство

Предположим от противного, что $\nabla f(x^*) \neq 0$. Определим вектор $p = -\nabla f(x^*)$ и заметим, что

$$p^T \nabla f(x^*) = -\|\nabla f(x^*)\|^2 < 0$$

Поскольку ∇f непрерывна в окрестности x^* , существует скаляр $T > 0$ такой, что

$$p^T \nabla f(x^* + tp) < 0, \text{ для всех } t \in [0, T]$$

Для любого $\bar{t} \in (0, T]$, мы имеем по теореме Тейлора, что

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

Необходимые условия

Необходимое условие оптимальности первого порядка

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

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

Доказательство

Предположим от противного, что $\nabla f(x^*) \neq 0$. Определим вектор $p = -\nabla f(x^*)$ и заметим, что

$$p^T \nabla f(x^*) = -\|\nabla f(x^*)\|^2 < 0$$

Поскольку ∇f непрерывна в окрестности x^* , существует скаляр $T > 0$ такой, что

$$p^T \nabla f(x^* + tp) < 0, \text{ для всех } t \in [0, T]$$

Для любого $\bar{t} \in (0, T]$, мы имеем по теореме Тейлора, что

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

Следовательно, $f(x^* + \bar{t}p) < f(x^*)$ для всех $\bar{t} \in (0, T]$. Мы нашли направление из x^* вдоль которого f убывает, поэтому x^* не является локальным минимумом, что приводит к противоречию.

Достаточные условия

1 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 .

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 .

Доказательство

Поскольку гессиан непрерывен и положительно определен в x^* , мы можем выбрать радиус $r > 0$ такой, что $\nabla^2 f(x)$ остается положительно определенным для всех x в открытом шаре $B = \{z \mid \|z - x^*\| < r\}$. Возьмем любой ненулевой вектор p с $\|p\| < r$, тогда $x^* + p \in B$ и для некоторого $t \in (0, 1)$ выполняется

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 .

Доказательство

Поскольку гессиан непрерывен и положительно определен в x^* , мы можем выбрать радиус $r > 0$ такой, что $\nabla^2 f(x)$ остается положительно определенным для всех x в открытом шаре $B = \{z \mid \|z - x^*\| < r\}$. Возьмем любой ненулевой вектор p с $\|p\| < r$, тогда $x^* + p \in B$ и для некоторого $t \in (0, 1)$ выполняется

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

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 .

Доказательство

Поскольку гессиан непрерывен и положительно определен в x^* , мы можем выбрать радиус $r > 0$ такой, что $\nabla^2 f(x)$ остается положительно определенным для всех x в открытом шаре $B = \{z \mid \|z - x^*\| < r\}$. Возьмем любой ненулевой вектор p с $\|p\| < r$, тогда $x^* + p \in B$ и для некоторого $t \in (0, 1)$ выполняется

$$\begin{aligned} f(x^* + p) &= f(x^*) + p^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x^* + tp)p, \\ &= f(x^*) + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x^* + tp)p. \end{aligned}$$

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 .

Доказательство

Поскольку гессиан непрерывен и положительно определен в x^* , мы можем выбрать радиус $r > 0$ такой, что $\nabla^2 f(x)$ остается положительно определенным для всех x в открытом шаре $B = \{z \mid \|z - x^*\| < r\}$. Возьмем любой ненулевой вектор p с $\|p\| < r$, тогда $x^* + p \in B$ и для некоторого $t \in (0, 1)$ выполняется

$$\begin{aligned} f(x^* + p) &= f(x^*) + p^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x^* + tp)p, \\ &= f(x^*) + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x^* + tp)p. \end{aligned}$$

Поскольку $x^* + tp \in B$, то $p^T \nabla^2 f(x^* + tp)p > 0$, и поэтому $f(x^* + p) > f(x^*)$, что доказывает утверждение.

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 $y = tx$ 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 полуопределен), 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.

Non-convex PL function



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 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

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 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

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 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

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 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

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 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

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

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



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 $f(x) : S \rightarrow \mathbb{R}$ — 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 $f(x) : S \rightarrow \mathbb{R}$ — 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 $f(x) : S \rightarrow \mathbb{R}$ — выпуклая функция, определённая на выпуклом множестве S , то:

- Любой локальный минимум является глобальным.
- Множество локальных (= глобальных) 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 $f(x) : S \rightarrow \mathbb{R}$ — выпуклая функция, определённая на выпуклом множестве S , то:

- Любой локальный минимум является глобальным.
- Множество локальных (= глобальных) 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:

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

Задачи с ограничениями-равенствами

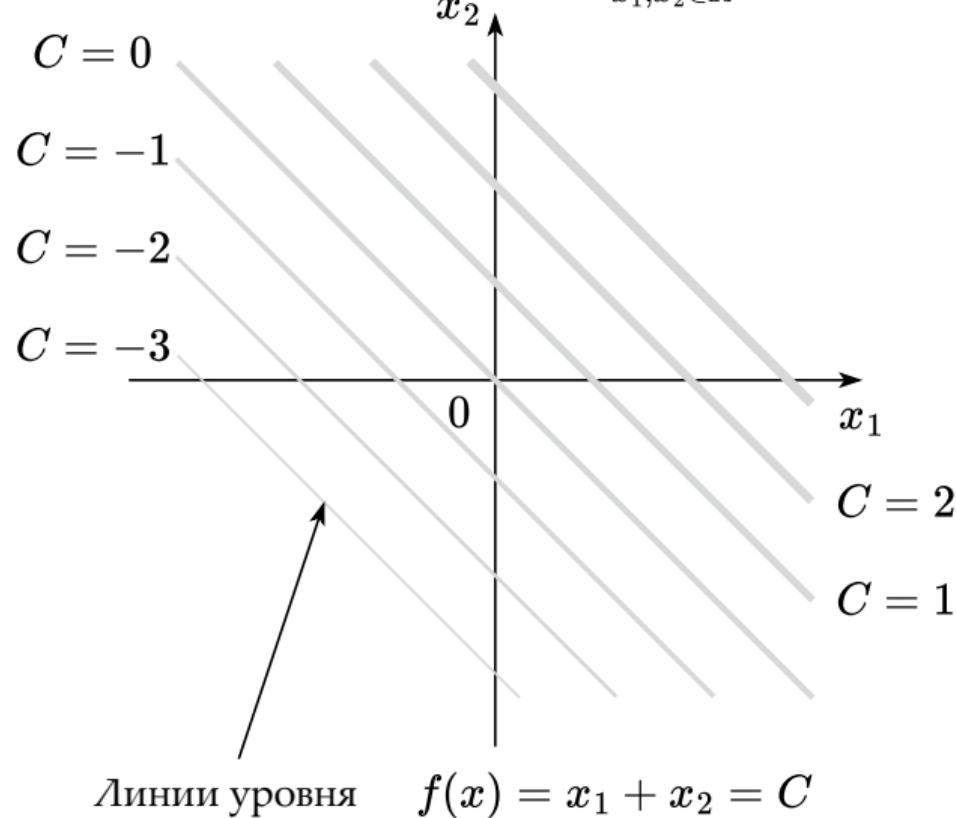
В задачах без ограничений всё довольно интуитивно. В этом разделе мы добавим одно ограничение-равенство, то есть:

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

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

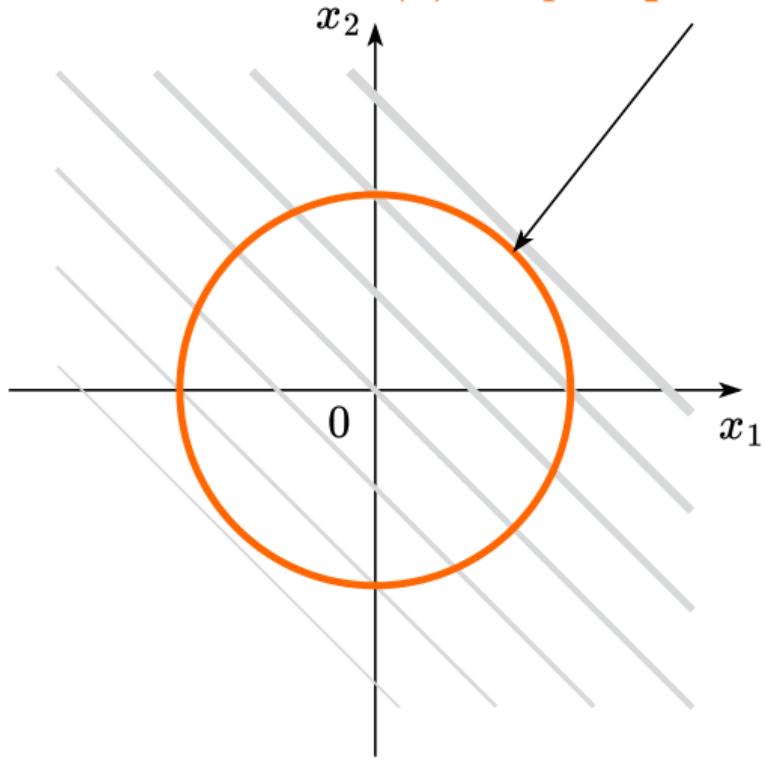
Задачи с ограничениями-равенствами

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



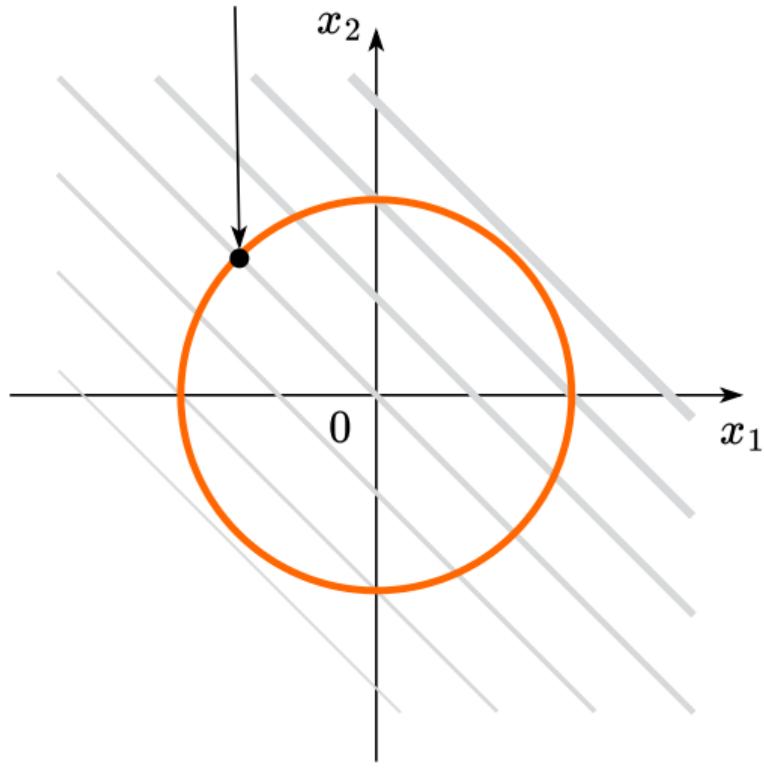
Задачи с ограничениями-равенствами

$$h(x) = x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0$$

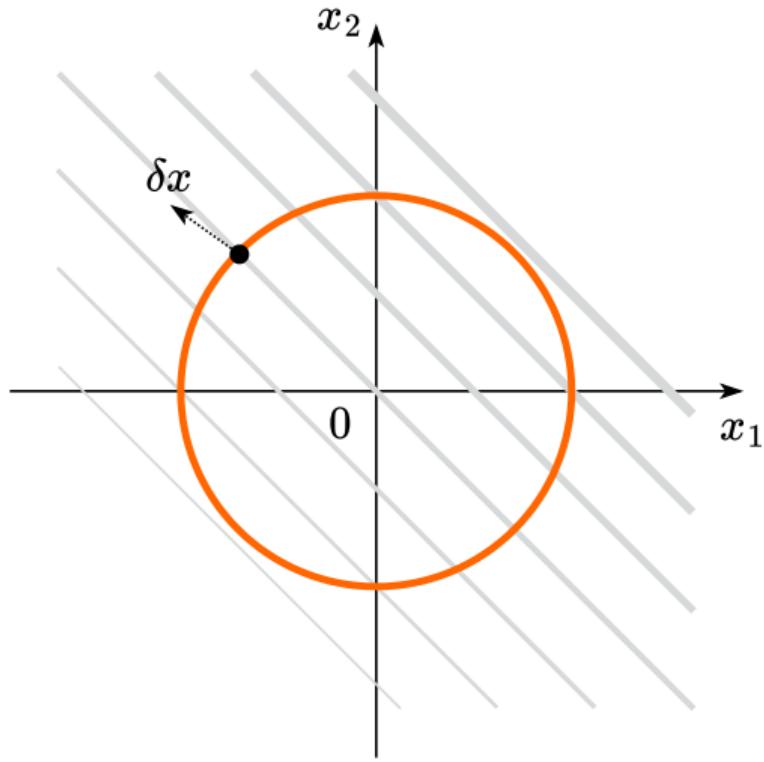


Задачи с ограничениями-равенствами

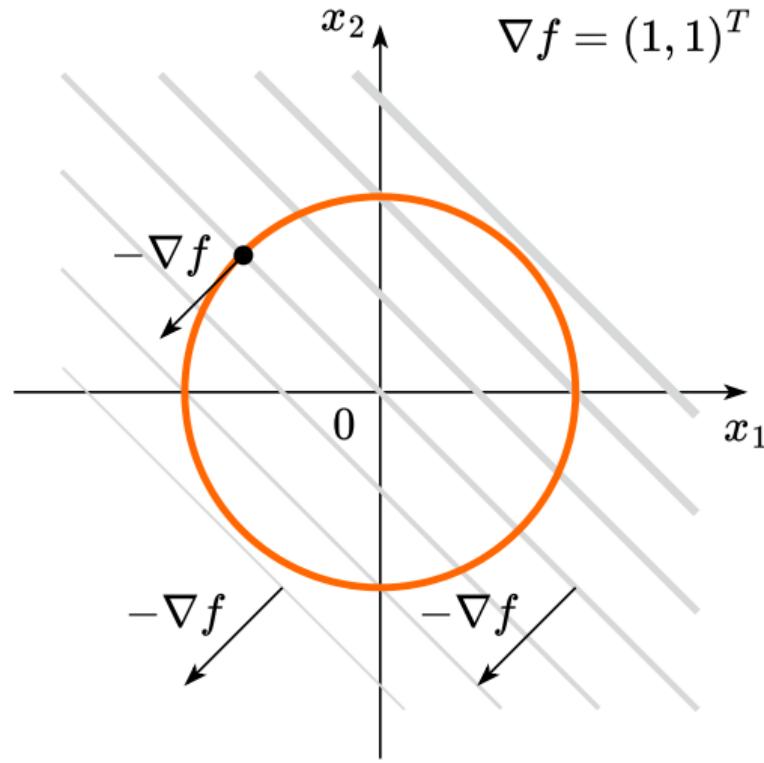
Допустимая точка x_F



Задачи с ограничениями-равенствами

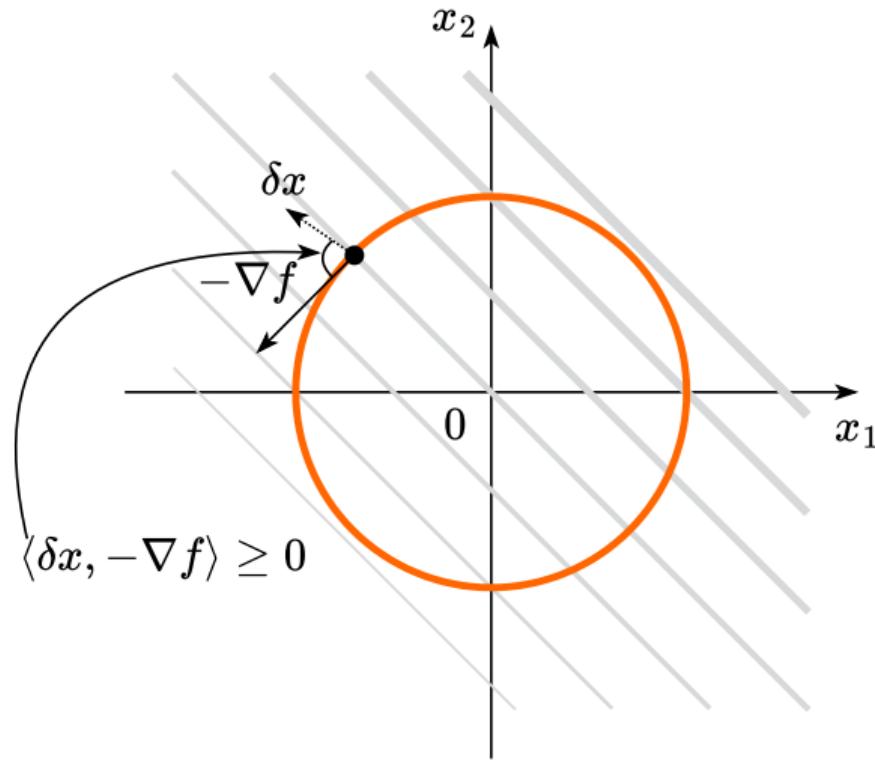


Задачи с ограничениями-равенствами



Задачи с ограничениями-равенствами

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

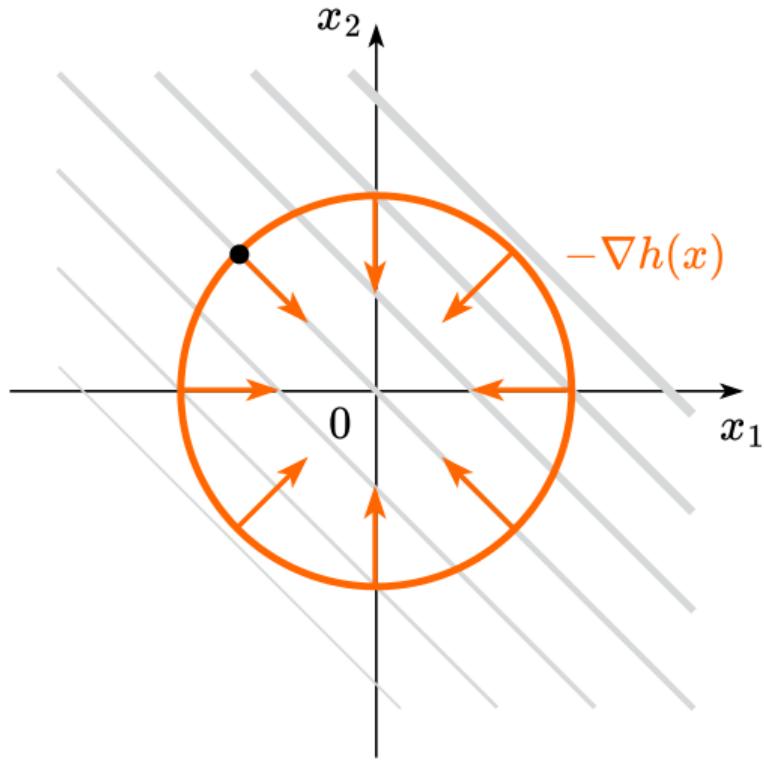


Задачи с ограничениями-равенствами

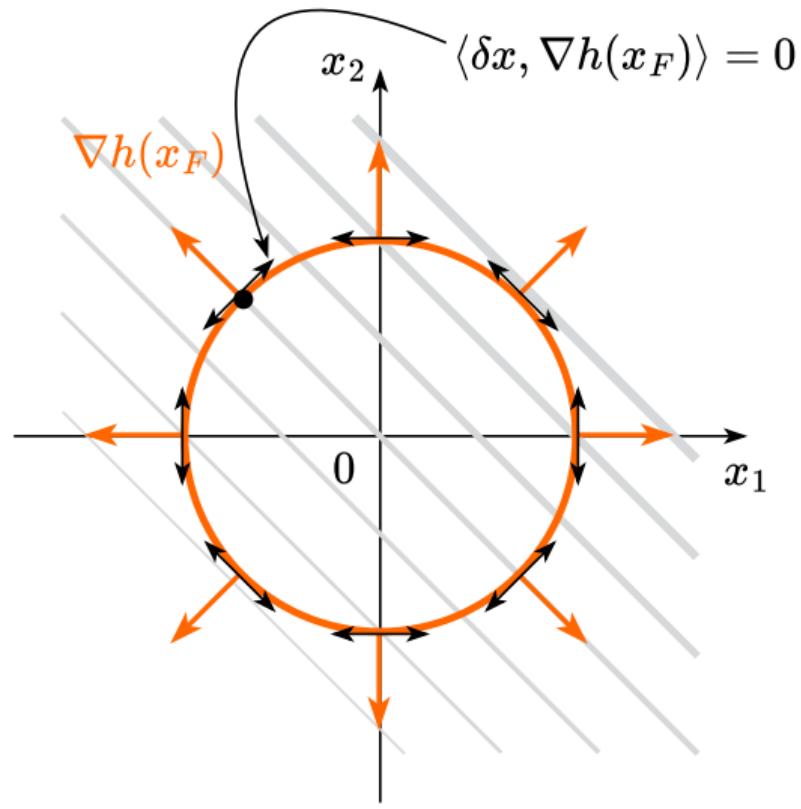
$$\nabla h = (2x_1, 2x_2)^T$$



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

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

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

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):

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

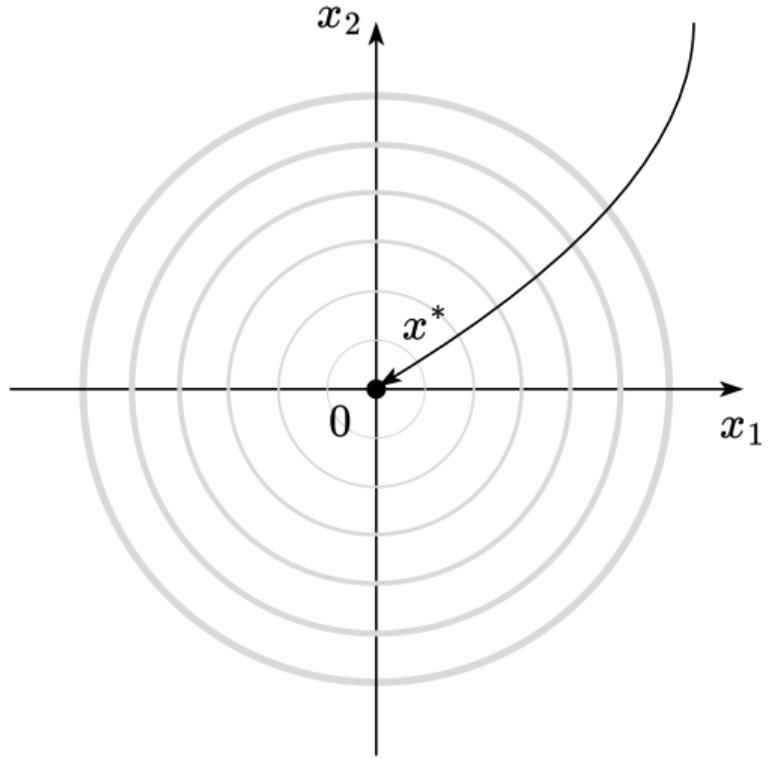
Пример задачи с ограничениями-неравенствами

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

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

Задачи с ограничениями-неравенствами

$$x^* = \operatorname{argmin} f(x)$$



$$\text{Линии уровня } f(x) = x_1^2 + x_2^2 = C$$

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.

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

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

Задачи с ограничениями-неравенствами

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

x_2

Линии уровня $f(x)$

0

x_1

x_f

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

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

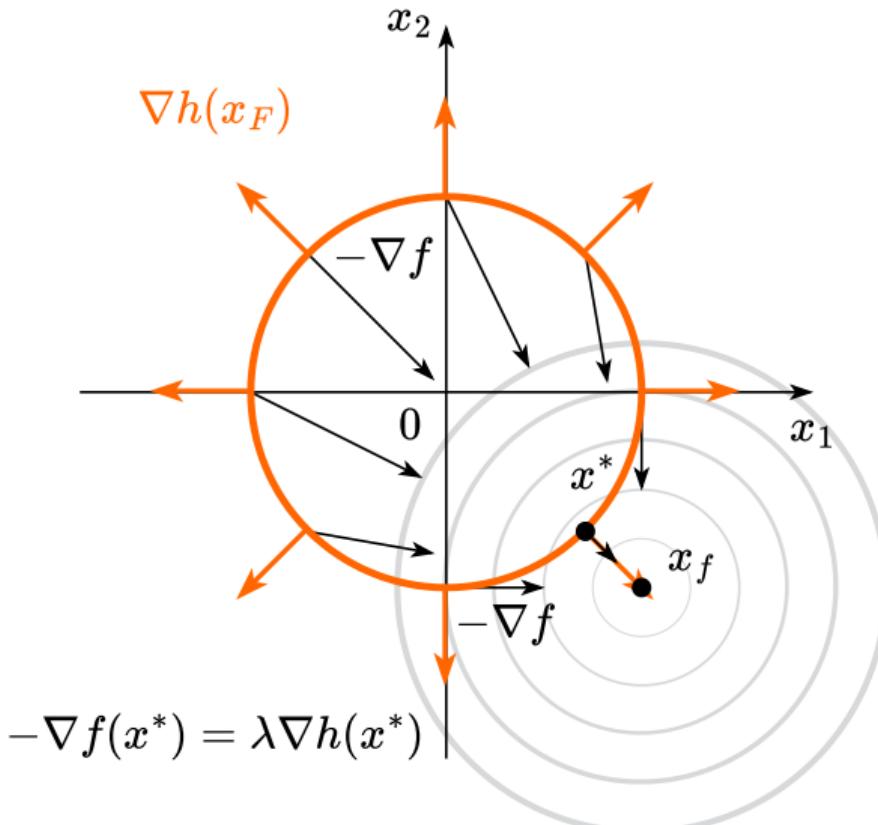
Фактически имеем задачу
с ограничением-равенством

x_2

$$g(x^*) = 0$$

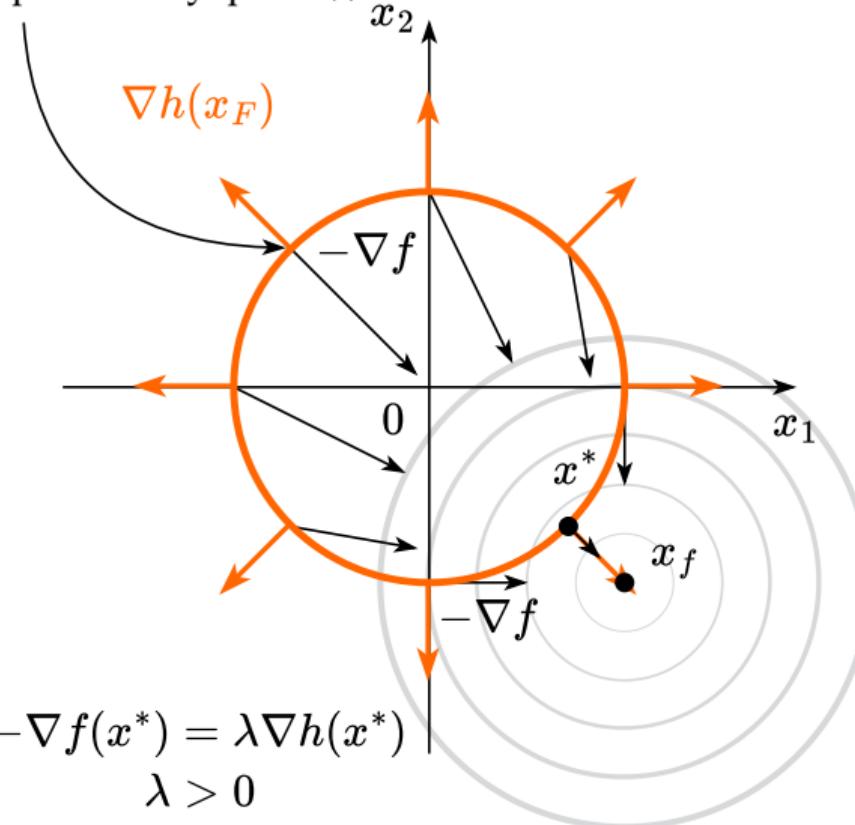


Задачи с ограничениями-неравенствами



Задачи с ограничениями-неравенствами

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



Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно: $g(x^*) < 0$

- $g(x^*) = 0$

Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

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:

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

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно: $g(x^*) < 0$

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

Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно: $g(x^*) < 0$

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

Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно: $g(x^*) < 0$

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

$g(x) \leq 0$ активно: $g(x^*) = 0$

- $g(x^*) = 0$

Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно: $g(x^*) < 0$

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

$g(x) \leq 0$ активно: $g(x^*) = 0$

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

Задачи с ограничениями-неравенствами

Итак, у нас есть задача:

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

Два возможных случая:

$g(x) \leq 0$ неактивно: $g(x^*) < 0$

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

$g(x) \leq 0$ активно: $g(x^*) = 0$

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

Лагранжиан для задач с ограничениями-неравенствами

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

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

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

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:

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

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

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

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

$$(2) \quad \lambda^* \geq 0$$

$$(3) \quad \lambda^* g(x^*) = 0$$

$$(4) \quad g(x^*) \leq 0$$

$$(5) \quad \forall y \in C(x^*) : \langle y, \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) y \rangle > 0$$

where $C(x^*) = \{y \in \mathbb{R}^n | \nabla f(x^*)^\top y \leq 0 \text{ and } \forall i \in I(x^*) : \nabla g_i(x^*)^\top y \leq 0\}$

$$I(x^*) = \{i | g_i(x^*) = 0\}$$

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.

KKT

Общая формулировка

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

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 $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$ является решением **регулярной** 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 $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$ является решением **регулярной** 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 $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$ является решением **регулярной** 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 $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$ является решением **регулярной** 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 $x^*, (\lambda^*, \nu^*)$ является решением **регулярной** 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 нужны для того, чтобы условия Каруша-Куна-Таккера стали необходимыми условиями. Некоторые из них даже превращают необходимые условия в достаточные (например, условие Слейтера). Кроме того, если у нас есть регулярность, мы можем записать необходимые условия второго порядка $\langle y, \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \nu^*)y \rangle \geq 0$ с полуопределенным гессианом лагранжиана.

- **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 нужны для того, чтобы условия Каруша-Куна-Таккера стали необходимыми условиями. Некоторые из них даже превращают необходимые условия в достаточные (например, условие Слейтера). Кроме того, если у нас есть регулярность, мы можем записать необходимые условия второго порядка $\langle y, \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \nu^*)y \rangle \geq 0$ с полуопределенным гессианом лагранжиана.

- **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 нужны для того, чтобы условия Каруша-Куна-Таккера стали необходимыми условиями. Некоторые из них даже превращают необходимые условия в достаточные (например, условие Слейтера). Кроме того, если у нас есть регулярность, мы можем записать необходимые условия второго порядка $\langle y, \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \nu^*)y \rangle \geq 0$ с полуопределенным гессианом лагранжиана.

- **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 нужны для того, чтобы условия Каруша-Куна-Таккера стали необходимыми условиями. Некоторые из них даже превращают необходимые условия в достаточные (например, условие Слейтера). Кроме того, если у нас есть регулярность, мы можем записать необходимые условия второго порядка $\langle y, \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*, \nu^*)y \rangle \geq 0$ с полуопределенным гессианом лагранжиана.

- **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.

Доказательство в простом случае

Субдифференциальная форма ККТ

Пусть X - линейное нормированное пространство, а $f_j : X \rightarrow \mathbb{R}$, $j = 0, 1, \dots, m$ - выпуклая и не принимающая значения $-\infty$ и ∞ . Рассмотрим задачу

$$\begin{aligned} f_0(x) &\rightarrow \min_{x \in X} \\ \text{s.t. } f_j(x) &\leq 0, \quad j = 1, \dots, m \end{aligned}$$

Пусть $x^* \in X$ - точка минимума, и функции f_j , $j = 0, 1, \dots, m$, непрерывны в x^* . Тогда существуют $\lambda_j \geq 0$, $j = 0, 1, \dots, m$ такие, что

$$\sum_{j=0}^m \lambda_j = 1,$$

$$\lambda_j f_j(x^*) = 0, \quad j = 1, \dots, m,$$

$$0 \in \sum_{j=0}^m \lambda_j \partial f_j(x^*).$$

Доказательство в простом случае

Доказательство

1. Рассмотрим функцию

$$f(x) = \max\{f_0(x) - f_0(x^*), f_1(x), \dots, f_m(x)\}.$$

Точка x^* - точка глобального минимума этой функции. Действительно, если в некоторой точке $x_e \in X$ выполнено неравенство $f(x_e) < 0$, то $f_0(x_e) < f_0(x^*)$ и $f_j(x_e) < 0$, $j = 1, \dots, m$, что противоречит тому, что точка x^* является точкой минимума.

Доказательство в простом случае

Доказательство

1. Рассмотрим функцию

$$f(x) = \max\{f_0(x) - f_0(x^*), f_1(x), \dots, f_m(x)\}.$$

Точка x^* - точка глобального минимума этой функции. Действительно, если в некоторой точке $x_e \in X$ выполнено неравенство $f(x_e) < 0$, то $f_0(x_e) < f_0(x^*)$ и $f_j(x_e) < 0$, $j = 1, \dots, m$, что противоречит тому, что точка x^* является точкой минимума.

2. Из теоремы Ферма в субдифференциальной форме

$$0 \in \partial f(x^*).$$

Доказательство в простом случае

Доказательство

1. Рассмотрим функцию

$$f(x) = \max\{f_0(x) - f_0(x^*), f_1(x), \dots, f_m(x)\}.$$

Точка x^* - точка глобального минимума этой функции. Действительно, если в некоторой точке $x_e \in X$ выполнено неравенство $f(x_e) < 0$, то $f_0(x_e) < f_0(x^*)$ и $f_j(x_e) < 0$, $j = 1, \dots, m$, что противоречит тому, что точка x^* является точкой минимума.

2. Из теоремы Ферма в субдифференциальной форме

$$0 \in \partial f(x^*).$$

3. Из теоремы Дубовицкого-Милютина имеем

$$\partial f(x^*) = \text{conv} \left(\bigcup_{j \in I} \partial f_j(x^*) \right),$$

где $I = \{0\} \cup \{j : f_j(x^*) = 0, 1 \leq j \leq m\}$.

Доказательство в простом случае

Доказательство

1. Рассмотрим функцию

$$f(x) = \max\{f_0(x) - f_0(x^*), f_1(x), \dots, f_m(x)\}.$$

Точка x^* - точка глобального минимума этой функции. Действительно, если в некоторой точке $x_e \in X$ выполнено неравенство $f(x_e) < 0$, то $f_0(x_e) < f_0(x^*)$ и $f_j(x_e) < 0$, $j = 1, \dots, m$, что противоречит тому, что точка x^* является точкой минимума.

2. Из теоремы Ферма в субдифференциальной форме

$$0 \in \partial f(x^*).$$

3. Из теоремы Дубовицкого-Милютина имеем

$$\partial f(x^*) = \text{conv} \left(\bigcup_{j \in I} \partial f_j(x^*) \right),$$

где $I = \{0\} \cup \{j : f_j(x^*) = 0, 1 \leq j \leq m\}$.

4. Следовательно, существует $g_j \in \partial f_j(x^*)$, $j \in I$ такая, что

$$\sum_{j \in I} \lambda_j g_j = 0, \quad \sum_{j \in I} \lambda_j = 1, \quad \lambda_j \geq 0, \quad j \in I.$$

Осталось установить $\lambda_j = 0$ for $j \notin I$.

Пример. Проекция на гиперплоскость

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b.$$

Пример. Проекция на гиперплоскость

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b.$$

Решение

Лагранжиан:

Пример. Проекция на гиперплоскость

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b.$$

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

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b.$$

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} :

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

Пример. Проекция на гиперплоскость

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b.$$

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} :

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

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

Пример. Проекция на гиперплоскость

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b.$$

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} :

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

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

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

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{x}^\top \mathbf{1} = 1, \quad \mathbf{x} \geq 0.$$

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{x}^\top \mathbf{1} = 1, \quad \mathbf{x} \geq 0.$$

Условия ККТ

Лагранжиан задается следующим образом:

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

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{x}^\top \mathbf{1} = 1, \quad \mathbf{x} \geq 0.$$

Условия ККТ

Лагранжиан задается следующим образом:

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

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

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

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{x}^\top \mathbf{1} = 1, \quad \mathbf{x} \geq 0.$$

Условия ККТ

Лагранжиан задается следующим образом:

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

Взяв производную L по x_i и записав ККТ, 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

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{x}^\top \mathbf{1} = 1, \quad \mathbf{x} \geq 0.$$

Условия ККТ

Лагранжиан задается следующим образом:

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

Взяв производную L по x_i и записав ККТ, 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

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{x}^\top \mathbf{1} = 1, \quad \mathbf{x} \geq 0.$$

Условия ККТ

Лагранжиан задается следующим образом:

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

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

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

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{x}^\top \mathbf{1} = 1, \quad \mathbf{x} \geq 0.$$

Условия ККТ

Лагранжиан задается следующим образом:

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

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

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

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{x}^\top \mathbf{1} = 1, \quad \mathbf{x} \geq 0.$$

Условия ККТ

Лагранжиан задается следующим образом:

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

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

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

Question

Решите систему выше за $O(n \log n)$.

Пример. Проекция на единичный симплекс

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{x}^\top \mathbf{1} = 1, \quad \mathbf{x} \geq 0.$$

Условия ККТ

Лагранжиан задается следующим образом:

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

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

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

 Question

Решите систему выше за $O(n \log n)$.

 Question

Решите систему выше за $O(n)$.

Задачи

Задача 1

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

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

Question

Найдите явное решение следующей задачи.

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

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

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

Задача 4

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

Question

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

$$\frac{1}{2} \|w\|_2^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i \rightarrow \min_{w, w_0, \xi_i}$$

$$\text{s.t. } \xi_i \geq 0, i = 1, \dots, n$$

$$y_i(x_i^T w + w_0) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \dots, n$$

найдите условие стационарности ККТ.

Задача 6

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:

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

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).

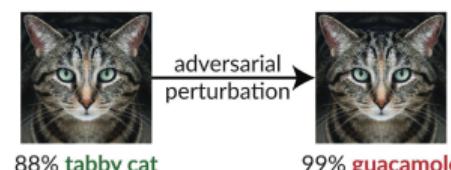


Рис. 26: Иллюстрация

Ссылки

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

Ссылки

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

Ссылки

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

Ссылки

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