FACULTY OF IT-HCMUS

Mathematical Method in Visual Data Analysis

Lecturer: Assoc Prof. Lý Quốc Ngọc HCMc, 10-2022



KHOA CÔNG NGHỆ THÔNG TIN TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

Mathematical Method in Visual Data Analysis

Lecture 6: Optimization Method

Lecturer: Assoc Prof. Lý Quốc Ngọc





Content

- 6.1. Unconstrained Optimization
- 6.2. Constrained Optimization



6.1. Unconstrained Optimization

Problem Statement

Given a function $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ and a set $S \subset \mathbb{R}^n$, we seek $x \in S$ Such that f attains a minimum on S at x, i.e, $f(x) \le f(y) \quad \forall y \in S$.

The objective function, f, may be linear or nonlinear.

The constrained set S is usually defined by a system of equations or inequalities, or both, that may be linear or nonlinear.



6.1. Unconstrained Optimization

Problem Statement

If $S = R^n$ then the problem is unsconstrained.

General continuous optimization problems have the form

$$\min_{x} f(x)$$
 subject to $g(x) = 0, h(x) \le 0$

$$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m, h: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k$$





Tối ưu cục bộ, tối ưu toàn cục

Hàm f có cực tiểu toàn cục tại x^* nếu

$$f(x^*) \le f(x), \forall x \in S$$

Hàm f có cực tiểu cục bộ tại x^* nếu

$$f(x^*) \le f(x), ||x - x^*|| < \varepsilon$$



Tối ưu không ràng buộc

Điều kiện cần để x^* là điểm cực trị của $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ là

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

Điều kiện đủ để x^* là điểm cực tiểu, cực đại, yên ngựa là Nếu $H_f(x)$ xác định dương $(x^T H_f x > 0)$ thì x^* là điểm cực tiểu.

Nếu $H_f(x)$ xác định âm $(x^T H_f x < 0)$ thì x^* là điểm cực đại.

Nếu $H_f(x)$ không xác định thì x^* là điểm yên ngựa.

$$\{H_f(x)\}_{ij} = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j}$$



Tối ưu không ràng buộc

Vd:
$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + O(h^3),$$

 $f: R \to R$

$$\begin{cases} f'(x) = 0 \\ f''(x) > 0 \end{cases} \Rightarrow f(x+h) = f(x) + \frac{f''(x)}{2}h^2 > f(x)$$



Tối ưu không ràng buộc

$$\mathbf{Vd:} f(x+h) = f(x) + J(x)h + \frac{1}{2}h^{T}H(x)h + O(\|h\|^{3}),$$

$$f: R^{n} \to R$$

$$\begin{cases} J(x) = 0 \\ h^{T}H(x)h > 0 \end{cases} \Rightarrow f(x+h) = f(x) + \frac{1}{2}h^{T}H(x)h > f(x)$$



Tối ưu không ràng buộc

Vd:
$$J(x) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1} \frac{\partial f}{\partial x_2} \dots \frac{\partial f}{\partial x_n} \right],$$

$$H(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$



Tối ưu có ràng buộc

Cực tiểu hàm mục tiêu phi tuyến với ràng buộc đẳng thức phi tuyến

$$\min_{x} f(x), \quad g(x) = 0$$

$$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \ g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m, \ m \le n$$

Để x là lời giải của bài toán, cần thỏa

$$-\nabla f(x) = J_g^T(x)\lambda,$$

 $J_{g}(x)$ là ma trận Jacobi của g

 λ là vecto nhân tử Lagrange m chiều



Tối ưu có ràng buộc

Xét hàm Lagrange $L: \mathbb{R}^{n+m} \to \mathbb{R}$,

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

$$\nabla L(x,\lambda) = \begin{bmatrix} \nabla_x L(x,\lambda) \\ \nabla_{\lambda} L(x,\lambda) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla f(x) + J_g^T(x)\lambda \\ g(x) \end{bmatrix}$$

$$H_L(x,\lambda) = \begin{bmatrix} B(x,\lambda) & J_g^T(x) \\ J_g(x) & O \end{bmatrix}$$

$$B(x,\lambda) = \nabla_{xx} L(x,\lambda) = H_f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i H_{g_i}(x)$$



Tối ưu có ràng buộc

Điểm cực trị của bài toán thỏa

$$\nabla L(x,\lambda) = \begin{bmatrix} \nabla_x L(x,\lambda) \\ \nabla_{\lambda} L(x,\lambda) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla f(x) + J_g^T(x)\lambda \\ g(x) \end{bmatrix} = 0$$

Điều kiện đủ để đạt cực tiểu tại x là $B(x,\lambda)$ xác định dương.



Tối ưu có ràng buộc

Vd: cực tiểu hàm dạng toàn phương

$$f(x) = 0.5x_1^2 + 2.5x_2^2$$

Với ràng buộc

$$g(x) = x_1 - x_2 - 1 = 0$$

Hàm Lagrange được xác định bởi

$$L(x,\lambda) = f(x) + \lambda^{T} g(x) = 0.5x_{1}^{2} + 2.5x_{2}^{2} + \lambda(x_{1} - x_{2} - 1)$$



Tối ưu có ràng buộc

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} x_1 \\ 5x_2 \end{bmatrix} \quad v\grave{a} \quad J_g(x) = \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\nabla_{x}L(x,\lambda) = \nabla f(x) + J_{g}^{T}(x)\lambda = \begin{bmatrix} x_{1} \\ 5x_{2} \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$



Tối ưu có ràng buộc

Điểm cực trị là nghiệm của hệ phương trình

$$x_1 + \lambda = 0,$$

 $5x_2 - \lambda = 0,$
 $x_1 - x_2 = 1,$

Dưới dạng ma trận, ta có

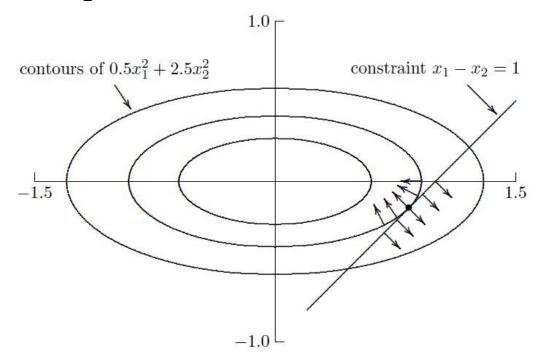
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 5 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$



Tối ưu có ràng buộc

Giải hệ phương trình trên, ta được nghiệm

$$x_1 = 0.833, \ x_2 = -0.167, \ \lambda = -0.833$$





Tối ưu có ràng buộc

Vd: cực tiểu hàm dạng toàn phương

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

Với ràng buộc

$$g(x, y) = x + y = 10$$

Hàm Lagrange được xác định bởi

$$L(x, y, \lambda) = x^2 + y^2 + \lambda(x + y - 10)$$



Tối ưu có ràng buộc

Vd: cực tiểu hàm dạng toàn phương

Điều kiện cần để đạt cực trị

$$\frac{\partial L}{\partial x} = 2x + \lambda = 0 \Leftrightarrow x = -\frac{\lambda}{2}$$

$$\frac{\partial L}{\partial y} = 2y + \lambda = 0 \Leftrightarrow y = -\frac{\lambda}{2}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = x + y - 10 = 0 \Rightarrow -\frac{\lambda}{2}.2 = 10 \Leftrightarrow \lambda = -10$$

Điểm dừng là (5;5;-10)



Tối ưu có ràng buộc

Điều kiện đủ để đạt cực tiểu

$$\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} = 2, \frac{\partial^2 L}{\partial y^2} = 2, \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial y} = 0$$

$$\begin{bmatrix} dx & dy \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 L}{\partial y^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} = 2(dx^2 + dy^2) > 0$$

$$f_{\text{min}} = f(5,5) = 5^2 + 5^2 = 25$$