Методы оптимизации
Лекция 2: Сопряжённые конусы. Отделимость. Автоматическое дифференцирование

Александр Катруца

Физтех-школа прикладной математики и информатики
Московский физико-технический институт

12 сентября 2022 г.

На прошлой лекции

- О чём этот курс и почему он нужен
- Примеры постановок задач оптимизации
- Выпуклые множества и их свойства

Напоминание: конусы

Определение

Множество $\mathcal{K}$ называется конусом, если для любого $\mathbf{x} \in \mathcal{K}$ и произвольного числа $\theta \geq 0$ выполнено $\theta \mathbf{x} \in \mathcal{K}$.

Напоминание: конусы

Определение

Множество $\mathcal{K}$ *называется конусом, если для любого* $\mathbf{x} \in \mathcal{K}$ *и произвольного числа* $\theta \geq 0$ *выполнено* $\theta \mathbf{x} \in \mathcal{K}$*.*

Определение

Множество $\mathcal{K}$ *называется* **выпуклым** *конусом, если для любых точек* $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathcal{K}$ *и любых чисел* $\theta_1 \geq 0,\ \theta_2 \geq 0$ *выполнено* $\theta_1 \mathbf{x}_1 + \theta_2 \mathbf{x}_2 \in \mathcal{K}$*.*

Напоминание: конусы

Определение

Множество $\mathcal{K}$ называется конусом, если для любого $\mathbf{x} \in \mathcal{K}$ и произвольного числа $\theta \geq 0$ выполнено $\theta \mathbf{x} \in \mathcal{K}$.

Определение

Множество $\mathcal{K}$ называется **выпуклым** *конусом, если для любых точек $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathcal{K}$ и любых чисел $\theta_1 \geq 0, \; \theta_2 \geq 0$ выполнено $\theta_1 \mathbf{x}_1 + \theta_2 \mathbf{x}_2 \in \mathcal{K}$.*

Важные конусы

- Неотрицательный октант
  $\mathbb{R}^n_+ = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid x_i \geq 0, \; i = 1, \ldots, n\} \to$ LP
- Конус второго порядка $\{(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+ \mid \|\mathbf{x}\|_2 \leq t\} \to$ SOCP
- Конус симметричных положительно полуопределённых матриц $\mathbf{S}^n_+ \to$ SDP

Сопряжённый конус (dual cone)

Определение

Пусть $\mathcal{K}$ — конус. Тогда множество

$$\mathcal{K}^* = \{\mathbf{y} \mid \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle \geq 0, \; \mathbf{x} \in \mathcal{K}\}$$

называется сопряжённым конусом.

Сопряжённый конус (dual cone)

Определение

Пусть $\mathcal{K}$ — конус. Тогда множество

$$\mathcal{K}^* = \{\mathbf{y} \mid \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle \geq 0, \ \mathbf{x} \in \mathcal{K}\}$$

называется сопряжённым конусом.

Свойства

- $\mathcal{K}^*$ — конус
- $\mathcal{K}^*$ — выпуклый конус для *любого* конуса $\mathcal{K}$
- Если $\mathcal{K}_1 \subseteq \mathcal{K}_2$, то $\mathcal{K}_2^* \subseteq \mathcal{K}_1^*$

Сопряжённый конус (dual cone)

Определение

Пусть $\mathcal{K}$ — конус. Тогда множество

$$\mathcal{K}^* = \{\mathbf{y} \mid \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle \geq 0,\ \mathbf{x} \in \mathcal{K}\}$$

называется сопряжённым конусом.

Свойства

- $\mathcal{K}^*$ — конус
- $\mathcal{K}^*$ — выпуклый конус для *любого* конуса $\mathcal{K}$
- Если $\mathcal{K}_1 \subseteq \mathcal{K}_2$, то $\mathcal{K}_2^* \subseteq \mathcal{K}_1^*$

Определение

Если $\mathcal{K} = \mathcal{K}^*$, то конус называется самосопряжённым (self-dual)

Самосопряжённые конусы

Самосопряжённые конусы

Определение

Сопряжённой нормой относительно $\|\cdot\|$ *называется*

$$\|\mathbf{z}\|_* = \sup_{\|\mathbf{x}\|\le 1} \mathbf{z}^\top \mathbf{x}.$$

Самосопряжённые конусы

Определение

Сопряжённой нормой относительно $\|\cdot\|$ *называется*

$$\|\mathbf{z}\|_* = \sup_{\|\mathbf{x}\| \le 1} \mathbf{z}^\top \mathbf{x}.$$

Примеры

- $\|\cdot\|_1 \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_\infty$
- $\|\cdot\|_2 \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_2$
- $\|\cdot\|_\infty \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_1$

Самосопряжённые конусы

Определение

Сопряжённой нормой относительно $\|\cdot\|$ *называется*

$$\|\mathbf{z}\|_* = \sup_{\|\mathbf{x}\|\leq 1} \mathbf{z}^\top \mathbf{x}.$$

Примеры

- $\|\cdot\|_1 \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_\infty$
- $\|\cdot\|_2 \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_2$
- $\|\cdot\|_\infty \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_1$

Самосопряжённые конусы

- $\mathbb{R}^n_+$

Самосопряжённые конусы

Определение

Сопряжённой нормой относительно $\|\cdot\|$ *называется*

$$\|\mathbf{z}\|_* = \sup_{\|\mathbf{x}\|\leq 1} \mathbf{z}^\top \mathbf{x}.$$

Примеры

- $\|\cdot\|_1 \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_\infty$
- $\|\cdot\|_2 \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_2$
- $\|\cdot\|_\infty \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_1$

Самосопряжённые конусы

- $\mathbb{R}^n_+$
- Конус второго порядка $\{(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+ \mid \|\mathbf{x}\|_2 \leq t\}$

Самосопряжённые конусы

Определение

Сопряжённой нормой относительно $\|\cdot\|$ *называется*

$$\|\mathbf{z}\|_* = \sup_{\|\mathbf{x}\| \leq 1} \mathbf{z}^\top \mathbf{x}.$$

Примеры

- $\|\cdot\|_1 \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_\infty$
- $\|\cdot\|_2 \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_2$
- $\|\cdot\|_\infty \to \|\cdot\|_* = \|\cdot\|_1$

Самосопряжённые конусы

- $\mathbb{R}^n_+$
- Конус второго порядка $\{(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+ \mid \|\mathbf{x}\|_2 \leq t\}$
- $\mathbf{S}^n_+$

Правильный конус (proper cone)

Определение

Конус $\mathcal{K}$ называется правильным (proper), если

- $\mathcal{K}$ выпуклый
- $\mathcal{K}$ замкнутый
- $\mathcal{K}$ не содежит прямых
- внутренность $\mathcal{K}$ непуста

Правильный конус (proper cone)

Определение

Конус $\mathcal{K}$ называется правильным (proper), если

- $\mathcal{K}$ выпуклый
- $\mathcal{K}$ замкнутый
- $\mathcal{K}$ не содежит прямых
- внутренность $\mathcal{K}$ непуста

Упражнение

Покажите, что самосопряжённые конусы, перечисленные выше, являются правильными.

Зачем нужны конусы?

Зачем нужны конусы?

Обобщённое отношение частичного порядка

Пусть $\mathcal{K}$ — правильный конус. Тогда $\mathbf{x} \leq_{\mathcal{K}} \mathbf{y} \Leftrightarrow \mathbf{y} - \mathbf{x} \in \mathcal{K}$.

Зачем нужны конусы?

Обобщённое отношение частичного порядка

Пусть $\mathcal{K}$ — правильный конус. Тогда $\mathbf{x} \leq_{\mathcal{K}} \mathbf{y} \Leftrightarrow \mathbf{y} - \mathbf{x} \in \mathcal{K}$.

Пример: конус $\mathbf{S}_+^n$

Пусть $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in \mathbf{S}^n$. Тогда $\mathbf{X} \leq_{\mathcal{K}} \mathbf{Y}$ означает, что $\mathbf{Y} - \mathbf{X} \in \mathbf{S}_+^n$

Зачем нужны конусы?

Обобщённое отношение частичного порядка

Пусть $\mathcal{K}$ — правильный конус. Тогда $\mathbf{x} \leq_{\mathcal{K}} \mathbf{y} \Leftrightarrow \mathbf{y} - \mathbf{x} \in \mathcal{K}$.

Пример: конус $\mathbf{S}^n_+$

Пусть $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in \mathbf{S}^n$. Тогда $\mathbf{X} \leq_{\mathcal{K}} \mathbf{Y}$ означает, что $\mathbf{Y} - \mathbf{X} \in \mathbf{S}^n_+$

Задача линейного программирования

$$
\begin{aligned}
& \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{c}^\top \mathbf{x} \\
\text{s.t. } & \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \\
& x_i \geq 0
\end{aligned}
\qquad\qquad
\begin{aligned}
& \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{c}^\top \mathbf{x} \\
\text{s.t. } & \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \\
& \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n_+
\end{aligned}
$$

Зачем нужны конусы?

Обобщённое отношение частичного порядка

Пусть $\mathcal{K}$ — правильный конус. Тогда $\mathbf{x} \preceq_{\mathcal{K}} \mathbf{y} \Leftrightarrow \mathbf{y} - \mathbf{x} \in \mathcal{K}$.

Пример: конус $\mathbf{S}^n_+$

Пусть $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in \mathbf{S}^n$. Тогда $\mathbf{X} \preceq_{\mathcal{K}} \mathbf{Y}$ означает, что $\mathbf{Y} - \mathbf{X} \in \mathbf{S}^n_+$

Задача линейного программирования

$$
\begin{aligned}
&\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{c}^\top \mathbf{x} \\
\text{s.t. } & \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \\
& x_i \geq 0
\end{aligned}
\qquad\qquad
\begin{aligned}
&\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{c}^\top \mathbf{x} \\
\text{s.t. } & \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \\
& \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n_+
\end{aligned}
$$

Введение нелинейности

Использование декартового произведение трёх самосопряжённых конусов позволяет записать многие практически важные выпуклые задачи

Отделимость выпуклых множеств

Определение

Множества $\mathcal{A}, \mathcal{B}$ *называются отделимыми, если существует вектор* $\mathbf{a} \neq 0$ *и число* b *такие что*

- $\mathbf{a}^\top \mathbf{x} + b \geq 0$ *для всех* $\mathbf{x} \in \mathcal{A}$
- $\mathbf{a}^\top \mathbf{y} + b \leq 0$ *для всех* $\mathbf{y} \in \mathcal{B}$.

Отделимость выпуклых множеств

Определение

Множества $\mathcal{A}, \mathcal{B}$ *называются отделимыми, если существует вектор* $\mathbf{a} \neq 0$ *и число* b *такие что*

- $\mathbf{a}^\top \mathbf{x} + b \geq 0$ *для всех* $\mathbf{x} \in \mathcal{A}$
- $\mathbf{a}^\top \mathbf{y} + b \leq 0$ *для всех* $\mathbf{y} \in \mathcal{B}$.

Теорема

Пусть $\mathcal{A}$ *и* $\mathcal{B}$ *— выпуклые и непересекающиеся множества. Тогда существует разделяющая их гиперплоскость.*

Отделимость выпуклых множеств

Определение

Множества $\mathcal{A}, \mathcal{B}$ называются отделимыми, если существует вектор $\mathbf{a} \neq 0$ и число b такие что

- $\mathbf{a}^\top \mathbf{x} + b \geq 0$ *для всех* $\mathbf{x} \in \mathcal{A}$
- $\mathbf{a}^\top \mathbf{y} + b \leq 0$ *для всех* $\mathbf{y} \in \mathcal{B}$.

Теорема

Пусть $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ — выпуклые и непересекающиеся множества. Тогда существует разделяющая их гиперплоскость.

Теорема

Два выпуклых множества, одно из которых открыто, не пересекаются тогда и только когда, когда они отделимы.

Лемма Фаркаша (Farkas' lemma)

Лемма Фаркаша

Выполнено одно и только одно из следующих условий

- множество $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},\ \mathbf{x} \geq 0\}$ непусто
- существует вектор $\mathbf{p}$ такой что $\mathbf{p}^\top \mathbf{A} \geq 0$ и $\mathbf{p}^\top \mathbf{b} < 0$

Лемма Фаркаша (Farkas' lemma)

Лемма Фаркаша

Выполнено одно и только одно из следующих условий

- множество $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},\ \mathbf{x} \geq 0\}$ непусто
- существует вектор $\mathbf{p}$ такой что $\mathbf{p}^\top \mathbf{A} \geq 0$ и $\mathbf{p}^\top \mathbf{b} < 0$

Доказательство

Лемма Фаркаша (Farkas' lemma)

Лемма Фаркаша

Выполнено одно и только одно из следующих условий

- множество $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},\ \mathbf{x} \geq 0\}$ непусто
- существует вектор $\mathbf{p}$ такой что $\mathbf{p}^\top \mathbf{A} \geq 0$ и $\mathbf{p}^\top \mathbf{b} < 0$

Доказательство

- Первое условие означает, что $\mathbf{b}$ лежит в конусе $\mathcal{K}$, образованном столбцами матрицы $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_m]$

Лемма Фаркаша (Farkas' lemma)

Лемма Фаркаша

Выполнено одно и только одно из следующих условий

- множество $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},\ \mathbf{x} \geq 0\}$ непусто
- существует вектор $\mathbf{p}$ такой что $\mathbf{p}^\top \mathbf{A} \geq 0$ и $\mathbf{p}^\top \mathbf{b} < 0$

Доказательство

- Первое условие означает, что $\mathbf{b}$ лежит в конусе $\mathcal{K}$, образованном столбцами матрицы $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_m]$
- Если это не так, то существует гиперплоскость, которая *строго* отделяет конус от точки $\mathbf{b}$:
$$\mathbf{c}^\top \mathbf{y} < d,\ \mathbf{y} \in \mathcal{K} \quad \mathbf{c}^\top \mathbf{b} > d.$$

Лемма Фаркаша (Farkas' lemma)

Лемма Фаркаша

Выполнено одно и только одно из следующих условий

- множество $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},\ \mathbf{x} \geq 0\}$ непусто
- существует вектор $\mathbf{p}$ такой что $\mathbf{p}^\top \mathbf{A} \geq 0$ и $\mathbf{p}^\top \mathbf{b} < 0$

Доказательство

- Первое условие означает, что $\mathbf{b}$ лежит в конусе $\mathcal{K}$, образованном столбцами матрицы $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_m]$
- Если это не так, то существует гиперплоскость, которая *строго* отделяет конус от точки $\mathbf{b}$:

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{y} < d,\ \mathbf{y} \in \mathcal{K} \quad \mathbf{c}^\top \mathbf{b} > d.$$

- Поскольку $0 \in \mathcal{K}$, то $d > 0$. Также $\mathbf{a}_i \in \mathcal{K} \Rightarrow \alpha \mathbf{a}_i \in \mathcal{K}\ \alpha > 0$

Лемма Фаркаша (Farkas' lemma)

Лемма Фаркаша

Выполнено одно и только одно из следующих условий

- множество $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},\ \mathbf{x} \geq 0\}$ непусто
- существует вектор $\mathbf{p}$ такой что $\mathbf{p}^\top \mathbf{A} \geq 0$ и $\mathbf{p}^\top \mathbf{b} < 0$

Доказательство

- Первое условие означает, что $\mathbf{b}$ лежит в конусе $\mathcal{K}$, образованном столбцами матрицы $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_m]$
- Если это не так, то существует гиперплоскость, которая *строго* отделяет конус от точки $\mathbf{b}$:

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{y} < d,\ \mathbf{y} \in \mathcal{K} \quad \mathbf{c}^\top \mathbf{b} > d.$$

- Поскольку $0 \in \mathcal{K}$, то $d > 0$. Также $\mathbf{a}_i \in \mathcal{K} \Rightarrow \alpha \mathbf{a}_i \in \mathcal{K}\ \alpha > 0$
- Значит $\mathbf{c}^\top \alpha \mathbf{a}_i < d \Rightarrow \mathbf{c}^\top \mathbf{a}_i < d/\alpha$. При $\alpha \to \infty$, $\mathbf{c}^\top \mathbf{a}_i \leq 0$

Лемма Фаркаша (Farkas' lemma)

Лемма Фаркаша

Выполнено одно и только одно из следующих условий

- множество $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},\ \mathbf{x} \geq 0\}$ непусто
- существует вектор $\mathbf{p}$ такой что $\mathbf{p}^\top \mathbf{A} \geq 0$ и $\mathbf{p}^\top \mathbf{b} < 0$

Доказательство

- Первое условие означает, что $\mathbf{b}$ лежит в конусе $\mathcal{K}$, образованном столбцами матрицы $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_m]$
- Если это не так, то существует гиперплоскость, которая *строго* отделяет конус от точки $\mathbf{b}$:
$$\mathbf{c}^\top \mathbf{y} < d,\ \mathbf{y} \in \mathcal{K} \quad \mathbf{c}^\top \mathbf{b} > d.$$
- Поскольку $0 \in \mathcal{K}$, то $d > 0$. Также $\mathbf{a}_i \in \mathcal{K} \Rightarrow \alpha \mathbf{a}_i \in \mathcal{K}\ \alpha > 0$
- Значит $\mathbf{c}^\top \alpha \mathbf{a}_i < d \Rightarrow \mathbf{c}^\top \mathbf{a}_i < d/\alpha$. При $\alpha \to \infty$, $\mathbf{c}^\top \mathbf{a}_i \leq 0$
- Таким образом, $\mathbf{p} = -\mathbf{c}$ и выполнено второе условие

Приложение: теорема об арбитраже

- Пусть есть n активов с ценами $p_1, \ldots, p_n$ до и $v_1, \ldots, v_n$ в конце периода инвестирования
- Пусть $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ размер инвестиций в каждый актив
- Значения для цен v_i неизвестны, но пусть возможно K наборов таких цен, которые известны
- Если $\langle \mathbf{p}, \mathbf{x} \rangle < 0$ и $\langle \mathbf{v}^{(k)}, \mathbf{x} \rangle \geq 0$ для всех $k = 1, \ldots, K$, то такая стратегия гарантировано принесёт прибыль!
- Ситуация на рынке, при которой существует гарантированно прибыльная стратегия называется *арбитражем*
- Такая ситуация в общем случае не обязана выполняться, то есть система $\mathbf{V}\mathbf{x} \geq 0,\ \langle \mathbf{p}, \mathbf{x} \rangle < 0$ несовместна
- По лемме Фаркаша это равносильно существованию $\mathbf{y} \geq 0$ такому, что $\mathbf{V}^\top \mathbf{y} = \mathbf{p}$

Полный рынок (complete market)

- Пусть известна вся матрица $\mathbf{V}$ и все p_i кроме p_n
- Тогда можно поставить задачу поиска интервала для p_n

$$\max_{p_n, \mathbf{y}} / \min_{p_n, \mathbf{y}} p_n$$
$$\text{s.t. } \mathbf{V}^\top \mathbf{y} = \mathbf{p}$$
$$\mathbf{y} \geq 0$$

- Если условие арбитража приводит к единственным ценам, то такой рынок называется *полным*.

Главное в первой части

- Сопряжённые конусы и геометрическая интерпретация

Главное в первой части

- Сопряжённые конусы и геометрическая интерпретация
- Самосопряжённые конусы

Главное в первой части

- Сопряжённые конусы и геометрическая интерпретация
- Самосопряжённые конусы
- Отделимость выпуклых множеств

Градиент и гессиан

Определение

Градиентом дифференцируемой функции f в точке $\mathbf{x} \in \operatorname{int}(\operatorname{dom}(f))$, называется вектор $\mathbf{g}$ такой что

$$\lim_{\mathbf{d} \to 0} \frac{f(\mathbf{x} + \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}) - \langle \mathbf{g}, \mathbf{d} \rangle}{\|\mathbf{d}\|} = 0.$$

Этот вектор единственный (проверьте!).

Утверждение

Для градиента f в $\mathbf{x}$ и производной по любому направлению $\mathbf{d}$ выполнено $f'(\mathbf{x}, \mathbf{d}) = \langle f'(\mathbf{x}), \mathbf{d} \rangle$, где $f'(\mathbf{x}, \mathbf{d})$ — производная по направлению $\mathbf{d}$.

Градиент и гессиан

Определение

Градиентом дифференцируемой функции f в точке $\mathbf{x} \in \operatorname{int}(\operatorname{dom}(f))$, называется вектор $\mathbf{g}$ такой что

$$\lim_{\mathbf{d} \to 0} \frac{f(\mathbf{x} + \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}) - \langle \mathbf{g}, \mathbf{d} \rangle}{\|\mathbf{d}\|} = 0.$$

Этот вектор единственный (проверьте!).

Утверждение

Для градиента f в $\mathbf{x}$ и производной по любому направлению $\mathbf{d}$ выполнено $f'(\mathbf{x}, \mathbf{d}) = \langle f'(\mathbf{x}), \mathbf{d} \rangle$, где $f'(\mathbf{x}, \mathbf{d})$ — производная по направлению $\mathbf{d}$.

Определение

Для дважды непрерывно диффренцируемой функции f матрица $\mathbf{H}$ с элементами

$$h_{ij} = \frac{\partial f}{\partial x_i \partial x_j}$$

называется гессиан.

Способы вычисления

- Аналитически

$$[f'(\mathbf{x})]_i = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}$$

Способы вычисления

- Аналитически

$$[f'(\mathbf{x})]_i = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}$$

- Численное приближение

$$[f'(\mathbf{x})]_i \approx \frac{f(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_i) - f(\mathbf{x})}{h}, \quad h \to 0$$

Способы вычисления

- Аналитически

$$[f'(\mathbf{x})]_i = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}$$

- Численное приближение

$$[f'(\mathbf{x})]_i \approx \frac{f(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_i) - f(\mathbf{x})}{h}, \quad h \to 0$$

- Символьное https://docs.sympy.org/latest/tutorials/intro-tutorial/calculus.html

```
>>> sym.diff(sym.sin(x), x)
cos(x)
>>> sym.diff(sym.sin(2 * x), x)
2*cos(2*x)
>>> sym.diff(sym.tan(x), x)
   2
tan (x) + 1
```

Способы вычисления

- Аналитически

$$[f'(\mathbf{x})]_i = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}$$

- Численное приближение

$$[f'(\mathbf{x})]_i \approx \frac{f(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_i) - f(\mathbf{x})}{h}, \quad h \to 0$$

- Символьное https://docs.sympy.org/latest/tutorials/intro-tutorial/calculus.html

```
>>> sym.diff(sym.sin(x), x)
cos(x)
>>> sym.diff(sym.sin(2 * x), x)
2*cos(2*x)
>>> sym.diff(sym.tan(x), x)
   2
tan (x) + 1
```

- Автоматическое дифференцирование

Вычислительный граф

Основная идея

Вычисление большинства практически важных функций представимо в виде суперпозиции элементарных операций.

Вычислительный граф

Основная идея

Вычисление большинства практически важных функций представимо в виде суперпозиции элементарных операций.

Пример

1. $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 = f_3(f_2(f_1(\mathbf{x})))$
2. $f_1(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$
3. $f_2(\mathbf{u}) = \|\mathbf{u}\|_2$
4. $f_3(t) = t^2$

Вычислительный граф

Основная идея

Вычисление большинства практически важных функций представимо в виде суперпозиции элементарных операций.

Пример

1. $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 = f_3(f_2(f_1(\mathbf{x})))$
2. $f_1(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$
3. $f_2(\mathbf{u}) = \|\mathbf{u}\|_2$
4. $f_3(t) = t^2$

Визуализация суперпозиции функций

Подобные суперпозиции представляются в виде направленного ациклического графа (DAG).

Как вычислить градиент?

Скалярный случай: $u : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

- Пусть $f(\mathbf{x}) = g(u(\mathbf{x}))$, тогда $f'(\mathbf{x}) = \frac{\partial g}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}}$
- Важно смотреть на размерности и понимать как записывать $\frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}}$.

Векторный случай: $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$

- $f(\mathbf{x}) = g(h(\mathbf{x}))$, где $g : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$
- $\frac{\partial f}{\partial x_k} = \sum_j \frac{\partial g}{\partial h_j} \frac{\partial h_j}{\partial x_k} = \sum_j J_{jk} \frac{\partial g}{\partial h_j}$ — k-ый элемент градиента
- $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{J}^\top \frac{\partial g}{\partial h}$, где $\mathbf{J}$ — якобиан h

Chain rule и `autodiff`[1]

Мотивирующий пример

- $f = h(g(\mathbf{x}))$, где $h : \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^m$, $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k$
- $\mathbf{J}_f = \mathbf{J}_h(g(\mathbf{x}))\mathbf{J}_g(\mathbf{x})$ или $J_f^{(i,j)} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \sum_{l=1}^{k} \frac{\partial h_i}{\partial g_k} \frac{\partial g_k}{\partial x_j}$

[1] Griewank A., Walther A. Evaluating derivatives: principles and techniques of algorithmic differentiation. – Society for Industrial and Applied Mathematics, 2008.

Chain rule и `autodiff`[1]

Мотивирующий пример

- $f = h(g(\mathbf{x}))$, где $h : \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^m$, $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k$
- $\mathbf{J}_f = \mathbf{J}_h(g(\mathbf{x}))\mathbf{J}_g(\mathbf{x})$ или $J_f^{(i,j)} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \sum_{l=1}^{k} \frac{\partial h_i}{\partial g_k} \frac{\partial g_k}{\partial x_j}$

Обобщение

- $f = f_L \circ \ldots \circ f_1$ — представление в виде графа
- $\mathbf{J}_f = \mathbf{J}_L \cdot \ldots \cdot \mathbf{J}_1$

[1] Griewank A., Walther A. Evaluating derivatives: principles and techniques of algorithmic differentiation. – Society for Industrial and Applied Mathematics, 2008.

Chain rule и `autodiff`[1]

Мотивирующий пример

- $f = h(g(\mathbf{x}))$, где $h : \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^m$, $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k$
- $\mathbf{J}_f = \mathbf{J}_h(g(\mathbf{x}))\mathbf{J}_g(\mathbf{x})$ или $J_f^{(i,j)} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \sum_{l=1}^k \frac{\partial h_i}{\partial g_k} \frac{\partial g_k}{\partial x_j}$

Обобщение

- $f = f_L \circ \ldots \circ f_1$ — представление в виде графа
- $\mathbf{J}_f = \mathbf{J}_L \cdot \ldots \cdot \mathbf{J}_1$

Способы вычисления $\mathbf{J}_f$

- Справа налево — forward mode
- Слева направо — backward mode

[1] Griewank A., Walther A. Evaluating derivatives: principles and techniques of algorithmic differentiation. – Society for Industrial and Applied Mathematics, 2008.

Forward mode

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_i}{\partial x_k}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ый столбец матрицы $\mathbf{J}_f$

Forward mode

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_i}{\partial x_k}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ый столбец матрицы $\mathbf{J}_f$

Реализация

- Выбираем элемент x_j

Forward mode

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_i}{\partial x_k}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ый столбец матрицы $\mathbf{J}_f$

Реализация

- Выбираем элемент x_j
- Задаём вектор $\mathbf{u} = \mathbf{e}_j$ — j-ый орт

Forward mode

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_i}{\partial x_k}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ый столбец матрицы $\mathbf{J}_f$

Реализация

- Выбираем элемент x_j
- Задаём вектор $\mathbf{u} = \mathbf{e}_j$ — j-ый орт
- Умножаем рекурсивно $\mathbf{J}_L \ldots \mathbf{J}_2 \mathbf{J}_1 \mathbf{u}$ справа налево

Forward mode

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_i}{\partial x_k}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ый столбец матрицы $\mathbf{J}_f$

Реализация

- Выбираем элемент x_j
- Задаём вектор $\mathbf{u} = \mathbf{e}_j$ — j-ый орт
- Умножаем рекурсивно $\mathbf{J}_L \ldots \mathbf{J}_2 \mathbf{J}_1 \mathbf{u}$ справа налево
- Умножение происходит одновременно с вычислением $f_L \circ \ldots \circ f_1$

Forward mode

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_i}{\partial x_k}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ый столбец матрицы $\mathbf{J}_f$

Реализация

- Выбираем элемент x_j
- Задаём вектор $\mathbf{u} = \mathbf{e}_j$ — j-ый орт
- Умножаем рекурсивно $\mathbf{J}_L \ldots \mathbf{J}_2 \mathbf{J}_1 \mathbf{u}$ справа налево
- Умножение происходит одновременно с вычислением $f_L \circ \ldots \circ f_1$
- Для каждой f_i необходимо реализовать действие самой функции и умножение $\mathbf{J}_i$ на вектор

Backward mode или backpropagation

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_k}{\partial x_i}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ую строку матрицы $\mathbf{J}_f$

Backward mode или backpropagation

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_k}{\partial x_i}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ую строку матрицы $\mathbf{J}_f$

Реализация

- Выбираем компоненту f_k

Backward mode или backpropagation

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_k}{\partial x_i}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ую строку матрицы $\mathbf{J}_f$

Реализация

- Выбираем компоненту f_k
- Задаём вектор $\mathbf{u} = \mathbf{e}_k$ — k-ый орт

Backward mode или backpropagation

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_k}{\partial x_i}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ую строку матрицы $\mathbf{J}_f$

Реализация

- Выбираем компоненту f_k
- Задаём вектор $\mathbf{u} = \mathbf{e}_k$ — k-ый орт
- Умножаем рекурсивно $\mathbf{u}^\top \mathbf{J}_L \ldots \mathbf{J}_2 \mathbf{J}_1$ слева направо

Backward mode или backpropagation

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_k}{\partial x_i}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ую строку матрицы $\mathbf{J}_f$

Реализация

- Выбираем компоненту f_k
- Задаём вектор $\mathbf{u} = \mathbf{e}_k$ — k-ый орт
- Умножаем рекурсивно $\mathbf{u}^\top \mathbf{J}_L \ldots \mathbf{J}_2 \mathbf{J}_1$ слева направо
- Сначала вычисляем f, сохраняем промежуточные результаты, потом произведение выше $\Rightarrow$ два обхода графа

Backward mode или backpropagation

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_k}{\partial x_i}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ую строку матрицы $\mathbf{J}_f$

Реализация

- Выбираем компоненту f_k
- Задаём вектор $\mathbf{u} = \mathbf{e}_k$ — k-ый орт
- Умножаем рекурсивно $\mathbf{u}^\top \mathbf{J}_L \ldots \mathbf{J}_2 \mathbf{J}_1$ слева направо
- Сначала вычисляем f, сохраняем промежуточные результаты, потом произведение выше $\Rightarrow$ два обхода графа
- Для каждой f_i необходимо реализовать действие самой функции и умножение $\mathbf{J}_i^\top$ на вектор

Backward mode или backpropagation

Основная идея

Вычислить $\frac{\partial f_k}{\partial x_i}$ для всех i и для заданного k, то есть вычислить j-ую строку матрицы $\mathbf{J}_f$

Реализация

- Выбираем компоненту f_k
- Задаём вектор $\mathbf{u} = \mathbf{e}_k$ — k-ый орт
- Умножаем рекурсивно $\mathbf{u}^\top \mathbf{J}_L \ldots \mathbf{J}_2 \mathbf{J}_1$ слева направо
- Сначала вычисляем f, сохраняем промежуточные результаты, потом произведение выше $\Rightarrow$ два обхода графа
- Для каждой f_i необходимо реализовать действие самой функции и умножение $\mathbf{J}_i^\top$ на вектор

Если $m = 1$, то $\mathbf{u} = 1$ и результат совпадает с градиентом!

Forward vs backward modes

Вычислительная сложность

- Forward mode: $C(f(\mathbf{x}), \mathbf{J}\mathbf{u}) \leq 2.5C(f(\mathbf{x}))$
- Backward mode: $C(f(\mathbf{x}), \mathbf{J}^\top \mathbf{u}) \leq 4C(f(\mathbf{x}))$

Forward vs backward modes

Вычислительная сложность

- Forward mode: $C(f(\mathbf{x}), \mathbf{J}\mathbf{u}) \leq 2.5C(f(\mathbf{x}))$
- Backward mode: $C(f(\mathbf{x}), \mathbf{J}^\top\mathbf{u}) \leq 4C(f(\mathbf{x}))$

Требуемая память

- Forward mode: не требует, все вычисления делаются в процессе вычисления f
- Backward mode: требует, промежуточные значения f_{i-1} надо сохранить для вычисления $\mathbf{J}_i^\top\mathbf{u}$

Forward vs backward modes

Вычислительная сложность

- Forward mode: $C(f(\mathbf{x}), \mathbf{J}\mathbf{u}) \leq 2.5C(f(\mathbf{x}))$
- Backward mode: $C(f(\mathbf{x}), \mathbf{J}^\top\mathbf{u}) \leq 4C(f(\mathbf{x}))$

Требуемая память

- Forward mode: не требует, все вычисления делаются в процессе вычисления f
- Backward mode: требует, промежуточные значения f_{i-1} надо сохранить для вычисления $\mathbf{J}_i^\top\mathbf{u}$

Вывод

- Если $m \ll n$, используйте backward mode
- Если $m \geq n$, используйте forward mode

Различные реализации могут оптимизировать промежуточные вычисления!

Где реализованы эти подходы?

- JAX — https://jax.readthedocs.io/en/latest/notebooks/autodiff_cookbook.html
- PyTorch — https://pytorch.org/tutorials/beginner/blitz/autograd_tutorial.html
- Autograd — https://github.com/HIPS/autograd

Главное во второй части

- Градиент и гессиан

Главное во второй части

- Градиент и гессиан
- Вычисление функции как проход по графу

Главное во второй части

- Градиент и гессиан
- Вычисление функции как проход по графу
- Вычисление градиента через проход вперёд

Главное во второй части

- Градиент и гессиан
- Вычисление функции как проход по графу
- Вычисление градиента через проход вперёд
- Вычисление градиента через проход назад