5.2 제한조건이 있는 최적화 문제

제한조건 = 연립방정식 or 연립부등식.

연립방정식 ← 라그랑주 승수법

연립부등식 ← KKT 조건 만족

① 등식 제한조건이 있는 최적화 문제.

연립방정식 제한조건, 등식 (equity) 제한조건

$$x^* = \arg\min_x f(x)$$

$$x \in \mathbb{R}^N$$

$$g_j(x) = 0 \quad (j = 1, \dots, M)$$

→ M개의 연립방정식

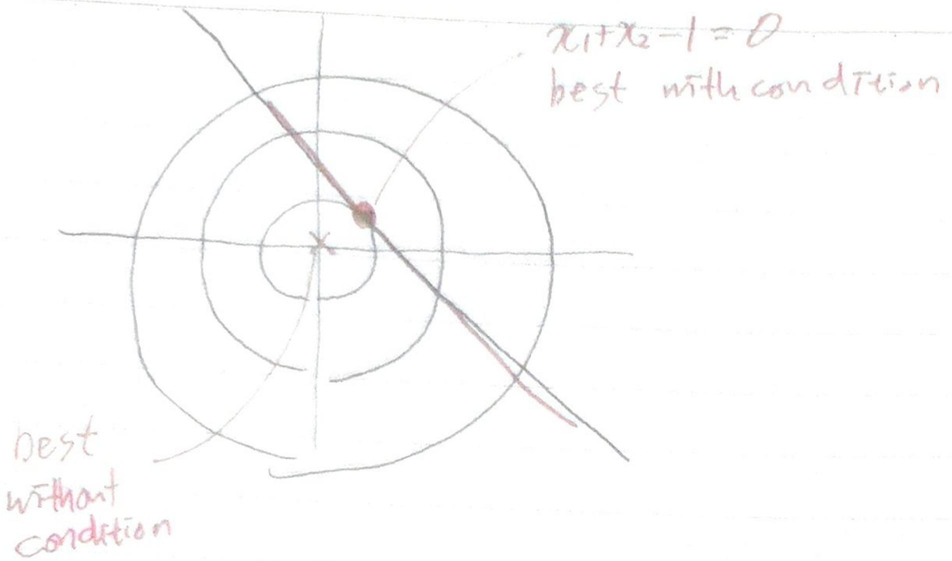
$\underline{g_1 x = 0,\ g_2 x = 0, \cdots\ g_M x = 0}$ 만족해야 함. + $\underline{f(x)\text{ 최소}}$.

예제 목적함수 f와 등식 제한조건 g이 다음과 같은 경우.

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$$

$$g(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - 1 = 0$$

$g(x_1, x_2) = 0$으로 정의되는 직선 상에서 가장 $f(x_1, x_2)$가 작아지는 점 (x_1^*, x_2^*)를 찾는 문제가 된다.



라그랑주 승수법

◦ 등식 제한조건이 있는 최적화문제는 라그랑주승수법(Lagrange multiplier)을 사용하여 최적화할 수 있다.

라그랑주 승수 방법에서는 목적함수를 원래의 목적함수 $f(x)$를 사용하지 않는다.
대신 제한조건 등식에 λ라는 새로운 변수를 곱해서 더한 함수

$$\boxed{\begin{aligned} h(x,\lambda) &= h(\underbrace{x_1, x_2, \cdots x_N, \lambda_1, \cdots, \lambda_M}_{\text{변수 } N+M\text{개.}}) \\ &= f(x) + \sum_{j=1}^{M} \lambda_j g_j(x) \end{aligned}}$$

를 목적함수로 최적화한다. 이때 제한조건 등식 하나마다 새로운 λ_i를 추가해주어야 한다.
따라서 만약 제한조건이 M개이면 $\lambda_1, \cdots \lambda_M$ 개의 변수가 새로 생긴 것과 같다.
이렇게 확장된 목적함수 h는 입력변수가 더 늘어났기 때문에 그레디언트 벡터를 영벡터로 만드는 최적화 필요 조건이 다음처럼 $N+M$개가 된다.

$$\frac{\partial h}{\partial x_1} = \frac{\partial f}{\partial x_1} + \sum_{j=1}^{M} \lambda_j \frac{\partial g_j}{\partial x_1} = 0$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial h}{\partial x_N} = \frac{\partial f}{\partial x_N} + \sum_{j=1}^{M} \lambda_j \frac{\partial g_j}{\partial x_N} = 0$$

$$\frac{\partial h}{\partial \lambda_1} = g_1 = 0$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial h}{\partial \lambda_M} = g_M = 0$$

이 $N+M$개의 방정식을 풀면 $N+M$개의 미지수

$$x_1, x_2, \cdots, x_N, \lambda_1, \cdots \lambda_M$$

을 구할수 있다. 구한 결과에서 $x_1, x_2, \cdots, x_N$ 이 우리가 찾는 최소값 x다.
(라그랑주 승수값은 필요X)

$\boxed{\text{예제}}$

위에서 제시한 예제를 라그랑주 승수법으로 풀어보자. 새 목적함수는 다음과 같다.

$$h(x_1, x_2, \lambda) = f(x_1, x_2) + \lambda g(x_1, x_2)$$

$$= x_1^2 + x_2^2 + \lambda(x_1 + x_2 - 1)$$

라그랑주 승수법을 이용하여 그레디언트 벡터가 영벡터인 위치를 구한다.

$$\frac{\partial h}{\partial x_1} = 2x_1 + \lambda = 0$$

$$\frac{\partial h}{\partial x_2} = 2x_2 + \lambda = 0$$

$$\frac{\partial h}{\partial \lambda} = x_1 + x_2 - 1 = 0$$

위 방정식을 풀면,

$$x_1 = x_2 = \frac{1}{2}, \quad \lambda = -1.$$

연습문제 5.2.1

제한조건이 $x_1+x_2=1$ 일 때 목적함수

$$f(x) = -\log x_1 - \log x_2$$

$$x_1, x_2 > 0$$

을 최소화하는 x_1, x_2 값을 라그랑주 승수법으로 계산하라.

$$f(x) = -\log x_1 - \log x_2$$
$$g(x) = x_1 + x_2 - 1 = 0$$

$$h(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$$
$$= -\log x_1 - \log x_2 + \lambda(x_1 + x_2 - 1)$$

$$\frac{\partial h}{\partial x_1} = -\frac{1}{x_1} + \lambda$$

$$\frac{\partial h}{\partial x_2} = -\frac{1}{x_2} + \lambda$$

$$\frac{\partial h}{\partial \lambda} = x_1 + x_2 - 1 = 0.$$

$x_1 = x_2$,

$x_1 = \frac{1}{2}$, $x_2 = \frac{1}{2}$,

$\lambda = 2.$

연습문제 5.2.2

제한조건이 $x_1^2 + x_2^2 = 1$ 일 때 목적함수 $f(x) = x_1 + x_2$ 를 최소화하는 x_1, x_2 값을 라그랑주 승수법으로 계산하라.

$$f(x) = x_1 + x_2$$
$$g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0$$

$$h(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$$
$$= x_1 + x_2 + \lambda(x_1^2 + x_2^2 - 1)$$

$$\frac{\partial h}{\partial x_1} = 1 + 2\lambda x_1 = 0$$
$$\frac{\partial h}{\partial x_2} = 1 + 2\lambda x_2 = 0$$
$$\frac{\partial h}{\partial \lambda} = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0$$

$x_1 = x_2$

$x_1 = x_2 = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$

minimum?

$x_1 = x_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$

scipy. fmin_slsqp()

- 제한조건이 있는 최적화문제 풀기.
- fmin_slsqp (func_obj, x0, eqcons = (func_constraint1, func_constraint2))

라그랑주 승수의 의미

최적화 문제에서 등식제한조건 g_i가 있는가 없는가에 따라 해의 값이 달라진다면, 이 등식 제한조건에 대응하는 라그랑주 승수 λ_i는 0이 아닌 값이어야 한다.

$$\lambda_i \neq 0$$

$\lambda_i = 0$일 때만 원래의 문제와 제한조건이 있는 문제의 최적화 조건이 같아지므로 최적화 해의 위치도 같게 나오기 때문이다.

예제

목적함수가 $f(x) = x_1^2 + x_2^2$ 인 최소화 문제의 답은 $x_1 = x_2 = 0$ 이다.

여기에 다음 제한조건이 있다고 하자:

$$g(x_1, x_2) = x_1 + x_2 = 0$$

라그랑주 승수법에서 새로운 목적함수는

$$h(x_1, x_2, \lambda) = f(x_1, x_2) + \lambda g(x_1, x_2)$$
$$= x_1^2 + x_2^2 + \lambda(x_1 + x_2)$$

이고, 최적화 조건은

$$\frac{\partial h}{\partial x_1} = 2x_1 + \lambda = 0$$

$$\frac{\partial h}{\partial x_2} = 2x_2 + \lambda = 0$$

$$\frac{\partial h}{\partial \lambda} = x_1 + x_2 = 0$$

$$\therefore x_1 = x_2 = \lambda = 0$$

→ 제한조건과 상관없이 해는 같고 라그랑주 승수가 0이다.

* $\lambda = 0$ ⟶ 제한조건 의미 없음

* $\lambda \neq 0$ ⟶ 제한조건이 결과에 영향을 미침.

부등식 제한조건이 있는 최적화 문제

부등식(inequality) 제한조건이 있는 최적화 문제를 생각해보자.

$$x^* = \arg\min_x f(x)$$

$$x \in R^N$$

$$g_j(x) \le 0 \quad (j=1, \cdots, M)$$

만약 부등식이

$$g_j(x) \ge 0$$

과 같다면, 양변에 -1을 곱하여 부등호의 방향을 바꾼다.
이렇게 부등식 제한조건이 있는 최적화 문제도 라그랑주 승수 방법과 목적함수를 다음처럼 바꾸어 푼다.

$$h(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^{M} \lambda_i g_j(x)$$

다만 이 경우, 최적화 해의 필요조건은 방정식 제한조건이 있는 최적화 문제와 다르게 KKT (Karush-Kuhn-Tucker) 조건이라고 하며, 다음처럼 3개의 조건으로 이루어진다.

(1) 모든 독립변수 $x_1, x_2, \cdots, x_N$에 대한 미분값이 0이다.

$$\frac{\partial h(x, \lambda)}{\partial x_i} = 0$$

(2) 모든 라그랑주 승수 $\lambda_1, \ldots \lambda_M$과 제한조건 부등식($\lambda$에 대한 미분값)의 곱이 0

$$\lambda_j \cdot \frac{\partial h(x, \lambda)}{\partial \lambda_i} = \lambda_i \cdot g_j = 0$$

(3) 라그랑주 승수는 음수가 아니어야 한다.

$$\lambda_i \ge 0$$

예제

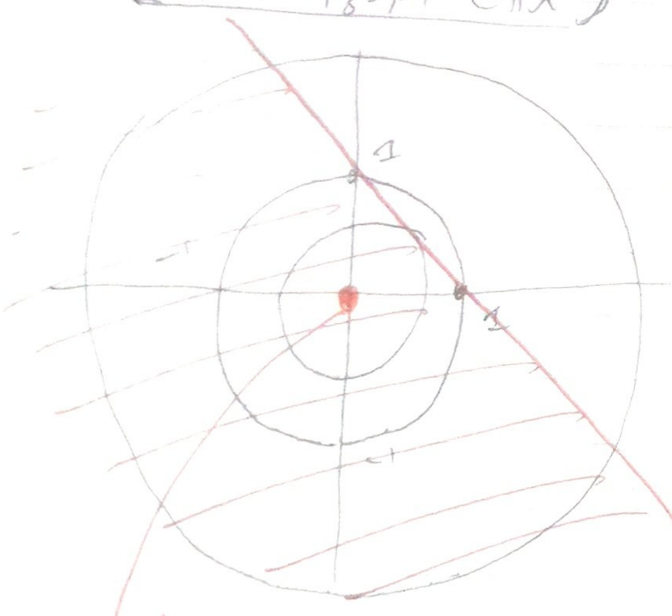
부등식 제한조건을 가지는 최적화의 예시

(목적함수 $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$)

제한조건 1 : $g(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - 1 \leq 0$

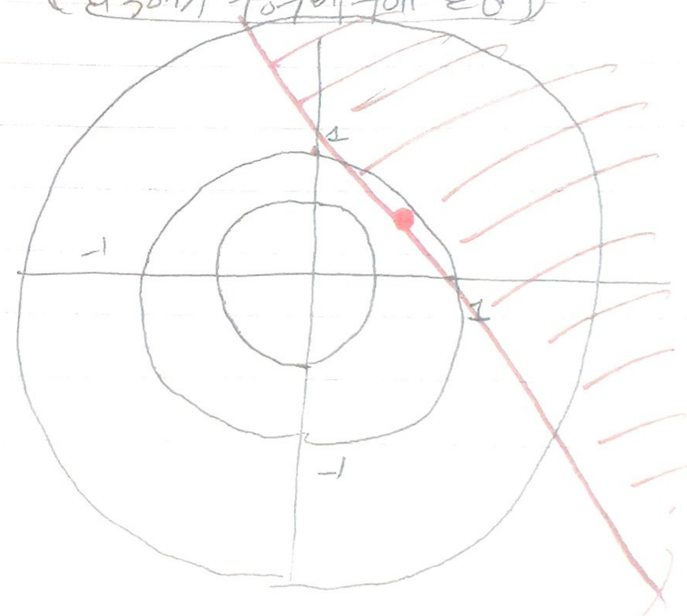
제한조건 2 : $g(x_1, x_2) = -x_1 - x_2 + 1 \leq 0$

(최적해가 부등식과 관계 X)



Original
global optimal

(최적해가 부등식에 의해 결정)



부등식이니까
일단 영역이 형성되지만,
최적해를 구하고자 하므로
"최적해를 영역이 아닌 선 위에서
탐색한다" when $\lambda \neq 0$

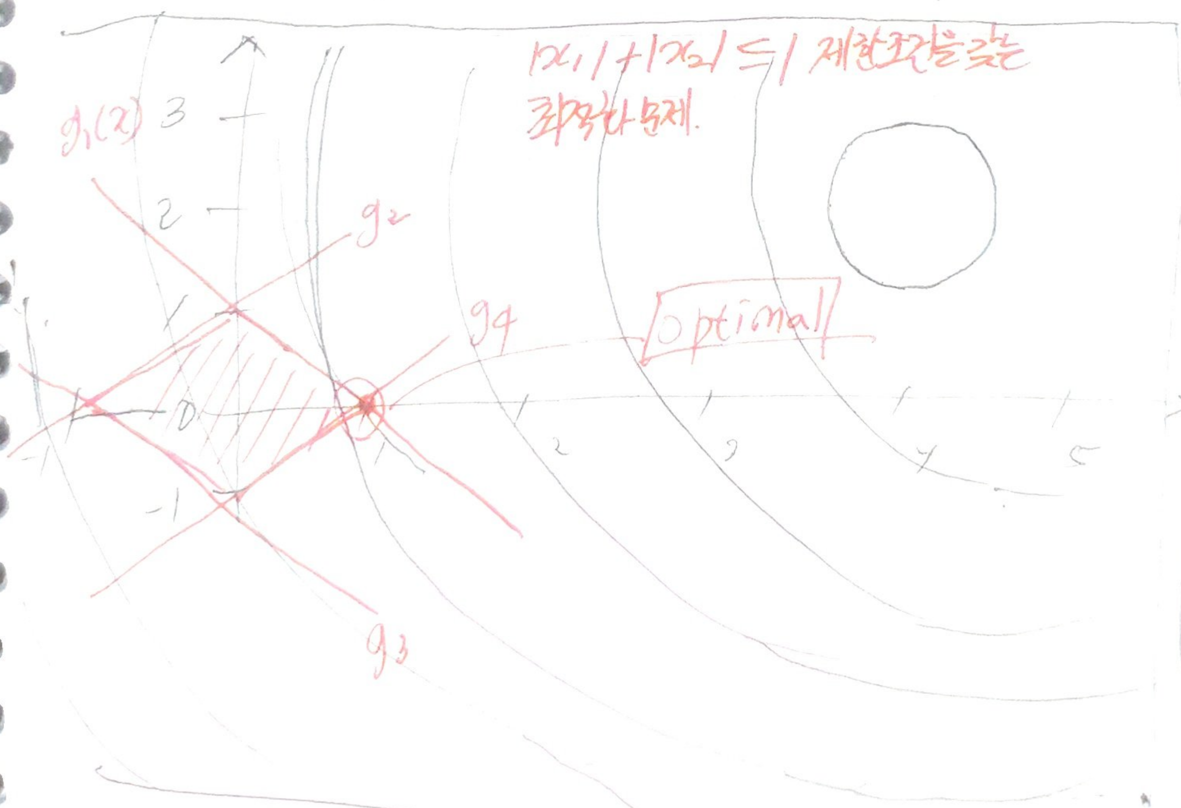
다음은 복수의 부등식 제한조건이 있는 또 다른 2차원 최적화 문제의 예다.

$$\arg\min_{x} \; (x_1-4)^2 + (x_2-2)^2$$

$$g_1(x) = x_1 + x_2 - 1 \le 0$$
$$g_2(x) = -x_1 + x_2 - 1 \le 0$$
$$g_3(x) = -x_1 - x_2 - 1 \le 0$$
$$g_4(x) = x_1 - x_2 - 1 \le 0$$

이 4개의 제한조건은 다음과 같은 하나의 부등식으로 나타낼 수도 있다.

$$g(x) = |x_1| + |x_2| - 1 = \sum_{i=1}^{2} |x_i| - 1 \le 0$$



scipy.

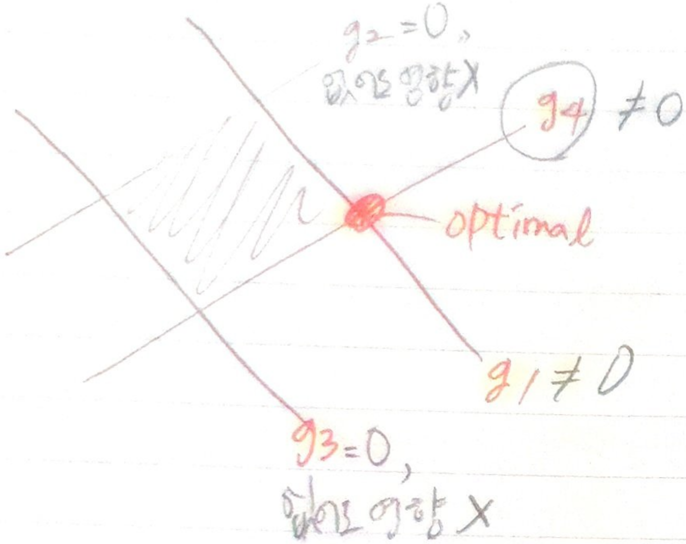
fmin_slsqp()

params

(func_obj,
x0,
ieqcons
= [func_constraint1,
func_constraint2]
)

연습문제 5.2.3

위 예제에서 최적해가 $x_1=1, x_2=0$ 이라는 사실을 이용하여 라그랑주 승수 λ_1, λ_2, λ_3, λ_4 중 어느 값이 0이 되는지 알아내라.



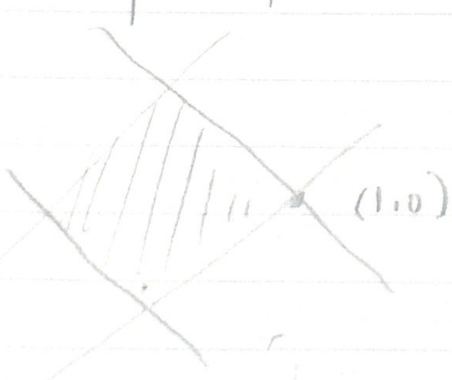
연습문제 5.2.4

위 문제에서 제한조건을 다음과 같이 바꾼다.

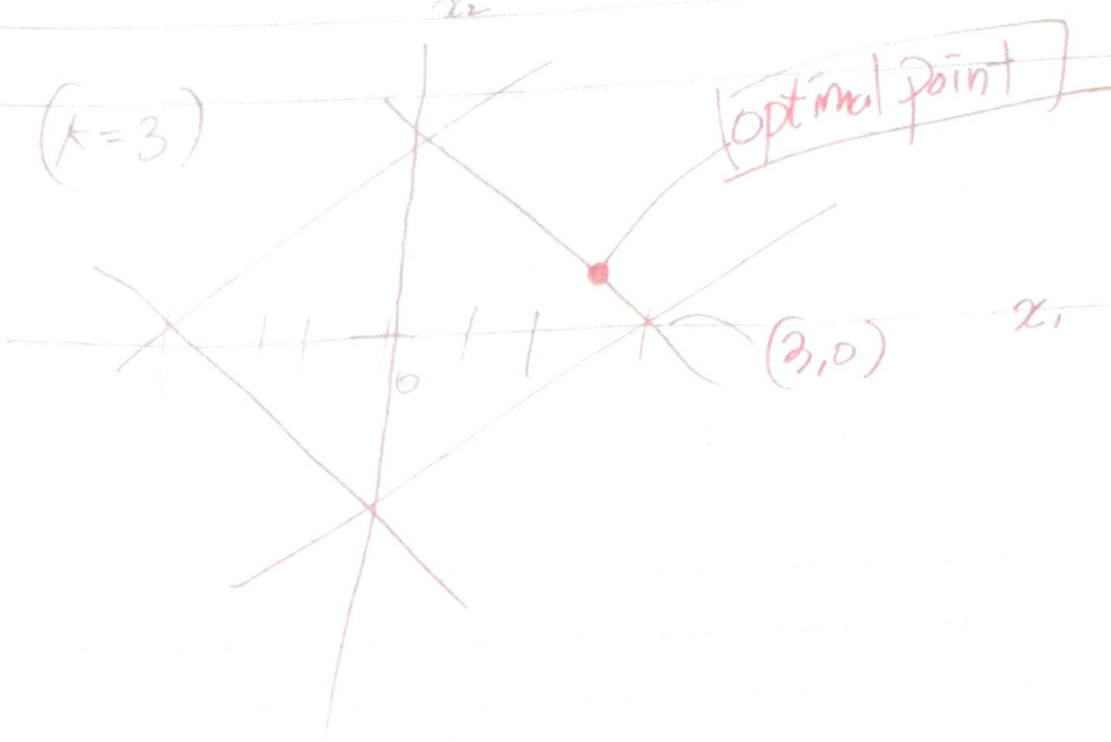
$$g(x) = |x_1| + |x_2| - k = \sum_{i=1}^{2} |x_i| - k \le 0$$

여기에서 k의 값을 0.1부터 10까지 다양하게 변화시키면서 최적화의 해가 어떻게 달라지는지 살펴보자.

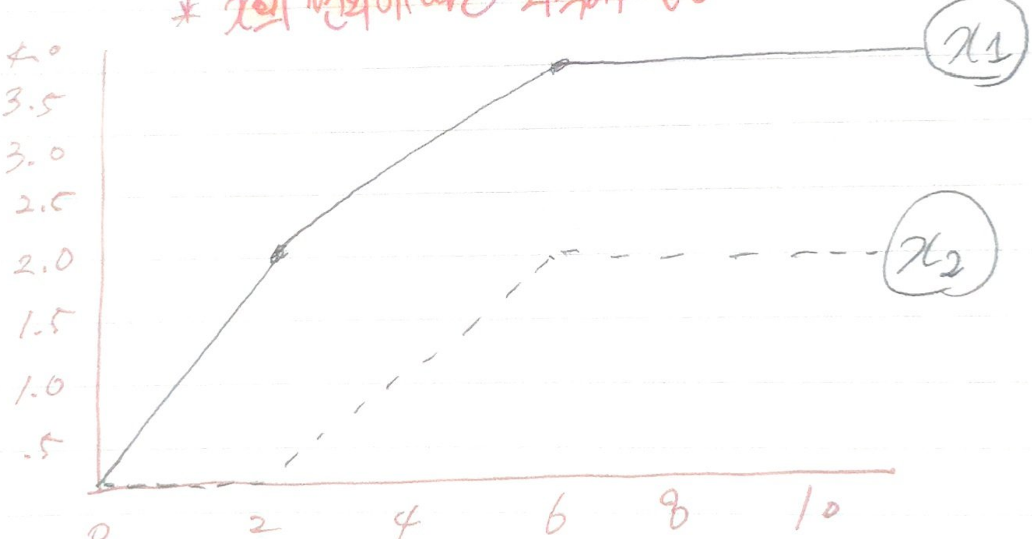
$(k=1)$



$(k=2)$



* x의 변화에 따른 최적해 변화.



← $x_1 = K$
$x_2 = 0$

x_2가 0을 벗어나면서 optimal이 기존 위로 이동한다.

→ 사각형이 너무 커져서 최적해를 항상 포함하게 됨