Análisis Matemático para Inteligencia Artificial

Martín Errázquin (merrazquin@fi.uba.ar)

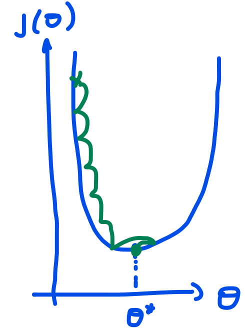
Especialización en Inteligencia Artificial

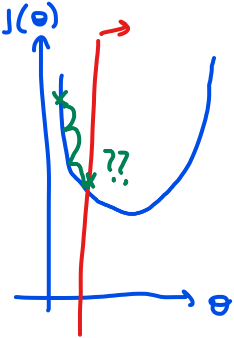
Optimización con restricciones

El objetivo es tratar de optimizar pero no cualquier valor de la entrada es valido

Motivación

¿Qué pasa cuando el mínimo "clásico" no es un valor válido?





$\exists J(\theta) \ \forall \theta$ $\longrightarrow$ ya no se cumple

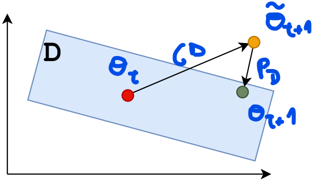
- mejorar $J(\theta)$
- no caer fuera de la región válida

Un "parche": Projected Gradient Descent

¿Cuál es el peligro de usar GD *as-is*? Caer afuera de la región válida D.

¿Cómo lo podemos corregir *"fácil"*? Buscamos el valor válido θ_{t+1} más cercano al update propuesto $\tilde{\theta}_{t+1} \rightarrow$ ¡GD + proyección ortogonal!

$$\theta_{t+1} = \Pi_D(\tilde{\theta}_{t+1}) = P_D \cdot (\theta_t - \gamma \cdot g_t)$$



Esto solo tiene sentido si proyectar es *barato*, pero a veces lo es.
Ejemplo: proyectar a valores no negativos es aplicar $\theta_{t+1} = max(\tilde{\theta}_{t+1}, 0)$.

Optimización con restricciones de igualdad

Definimos un problema de optimización con restricciones de igualdad en *formato estándar*:

$\|\vec{x}\| = 1 \Leftrightarrow \|\vec{x}\|^2 - 1^2 = 1 \Leftrightarrow x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2 = 1$

$\underbrace{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2 - 1}_{g_1(x_1, \dots, x_n)} = 0$

n vars

subject to

$$\min \ f(\overbrace{x_1, ..., x_n}^{n \text{ vars}})$$

$$\left.\begin{aligned} s.t. \ g_1(x_1, ..., x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ g_m(x_1, ..., x_n) &= 0 \end{aligned}\right\} m \text{ restr.}$$

restriccion de igualdad

donde $f, g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ con $i = 1, \dots m$ están definidas sobre $R \subset \mathbb{R}^n$.

Se define la región válida $D = \{\vec{x} \in R : g_i(\vec{x}) = 0 \ \forall\, i = 1, \dots, m\}$.

Se define el Lagrangiano del problema $\mathscr{L} : \mathbb{R}^{n+m} \to \mathbb{R}$:

$$\mathscr{L}(\vec{\lambda}, \vec{x}) = f(\vec{x}) + \lambda_1 g_1(\vec{x}) + ... + \lambda_m g_m(\vec{x}) = f(\vec{x}) + \vec{\lambda} \cdot \vec{g}(\vec{x})$$

multip. de Lagrange

Optimización con restricciones de desigualdad

Si agregamos condiciones de desigualdad queda:

$$\begin{array}{c} \min\ \ f(\overbrace{x_1, ..., x_n}^{n\ \text{vars.}}) \\ \left.\begin{array}{r} s.t.\ g_i(x_1, ..., x_n) = 0 \left.\vphantom{g_i}\right\} l \\ h_j(x_1, ..., x_n) \leq 0 \left.\vphantom{h_j}\right\} k \end{array}\right] m\ \text{restr.} \end{array}$$

con $i = 1, \dots, l$ y $j = 1, \dots, k$ suponiendo $\underline{l + k = m}$.

Ahora tenemos que la región válida es

$$D = \{\vec{x} \in R : \underbrace{g_i(\vec{x}) = 0}\ \forall\, i = 1, \dots, l\ \wedge \underbrace{h_j(\vec{x}) \leq 0}\ \forall\, j = 1, \dots, k\}$$

Y el Lagrangiano es:

$$\mathscr{L}(\underbrace{\vec{\lambda}}_{l}, \underbrace{\vec{x}}_{n}, \underbrace{\vec{\mu}}_{k}) = f(\vec{x}) + \sum_{i=1}^{l} \lambda_i g_i(\vec{x}) + \sum_{j=1}^{k} \mu_j h_j(\vec{x}) = f(\vec{x}) + \vec{\lambda} \cdot \vec{\mathrm{g}}(\vec{x}) + \vec{\mu} \cdot \vec{\mathrm{h}}(\vec{x})$$

$= n+m$

Condiciones necesarias de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)

Derivada continua entorno al punto

Sea un punto $\vec{x}^* \in D$ tal que $f, g_i, h_j \in \mathcal{C}^1(\mathcal{E}(\vec{x}^*))$. Bajo ciertas condiciones de regularidad, **si** $\vec{x}^*$ es un mínimo local **entonces** existen $\vec{\lambda}^* \in \mathbb{R}^l, \vec{\mu}^* \in \mathbb{R}^k$ tales que:

1. (Estacionariedad) $\nabla_{\vec{x}} \mathscr{L}(\vec{\lambda}^*, \vec{x}^*, \vec{\mu}^*) = \vec{0}$ ópt. local
2. (Factibilidad primal) validez
   1. $g_i(\vec{x}^*) = 0 \quad \forall i$
   2. $h_j(\vec{x}^*) \leq 0 \quad \forall j$
3. (Factibilidad dual) $\mu_j^* \geq 0 \quad \forall j$ holgura
4. (Holgura complementaria) $\mu_j^* \cdot h_j(\vec{x}^*) = 0 \quad \forall j$

$\forall j \ \mu_j^* \geq 0 \wedge h_j(\vec{x}^*) \leq 0$

pero alguno de los debe ser 0

Ejemplo analítico

$$\min_{x,y} \quad x^2 + y^2 \quad f(x,y)$$

$$\text{s.t.} \quad x + y = 1 \quad g_1$$

$$x \geq 0 \quad h_1 \Rightarrow h_1(x,y) = -x \leq 0$$

El Lagrangiano es: $\mathscr{L}(x, y, \lambda, \mu) = x^2 + y^2 + \lambda(x + y - 1) + \mu(-x)$

Condiciones KKT:

$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}$ $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y}$

Estacionariedad:	$2x + \lambda - \mu = 0,$	$2y + \lambda = 0$
Factibilidad primal:	$x + y = 1,$	$x \geq 0$
Factibilidad dual:	$\mu \geq 0$	
Holgura complementaria:	$\mu x = 0$	

Solución:

$$x^* = 0.5, \ y^* = 0.5, \ \underbrace{\lambda^* = -1, \ \mu^* = 0}_{} \ \Rightarrow f^* = 0.5$$