Семинары по линейным классификаторам

Евгений Соколов

6 ноября 2015 г.

2 Оптимизационные задачи и теорема Куна-Таккера

Рассмотрим задачу минимизации

$$\begin{cases}
f_0(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^d} \\
f_i(x) \leqslant 0, \quad i = 1, \dots, m, \\
h_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, p.
\end{cases}$$
(2.1)

Если ограничения в этой задаче отсутствуют, то имеет место $neo6xodumoe\ ycnoeue\ экстремума$: если в точке x функция f_0 достигает своего минимума, то ее градиент в этой точке равен нулю. Значит, для решения задачи безусловной оптимизации

$$f_0(x) \to \min$$

достаточно найти все решения уравнения

$$\nabla f_0(x) = 0,$$

и выбрать то, в котором достигается наименьшее значение. Для решения условных задач оптимизации требуется более сложный подход, который мы сейчас и рассмотрим.

§2.1 Лагранжиан

Задача условной оптимизации (2.1) эквивалентна следующей безусловной задаче:

$$f_0(x) + \sum_{i=1}^m I_-(f_i(x)) + \sum_{i=1}^p I_0(h_i(x)) \to \min_x,$$

где $I_{-}(x)$ — индикаторная функция для неположительных чисел:

$$I_{-}(x) = \begin{cases} 0, & x \leqslant 0\\ \infty, & x > 0, \end{cases}$$

а $I_0(x)$ — индикаторная функция для нуля:

$$I_0(x) = \begin{cases} 0, & x = 0 \\ \infty, & x \neq 0, \end{cases}$$

Такая переформулировка, однако, не упрощает задачу — индикаторные функции являются кусочно-постоянными и могут быть оптимизированы лишь путем полного перебора решений.

Заменим теперь индикаторные функции на их линейные аппроксимации:

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^{p} \nu_i h_i(x),$$

где $\lambda_i \geqslant 0$. Полученная функция называется *лагранжианом* задачи (2.1). Числа λ_i и ν_i называются *множителями* Лагранжа или двойственными переменными.

Конечно, линейные аппроксимации являются крайне грубыми, однако их оказывается достаточно, чтобы получить необходимые условия на решение исходной задачи.

§2.2 Двойственная функция

 \mathcal{A} войственной функцией для задачи (2.1) называется функция, получающаяся при взятии минимума лагранжиана по x:

$$g(\lambda, \nu) = \inf_{x} L(x, \lambda, \nu).$$

Можно показать, что данная функция всегда является вогнутой.

Зачем нужна двойственная функция? Оказывается, она дает нижнюю оценку на минимум в исходной оптимизационной задаче. Обозначим решение задачи (2.1) через x_* . Пусть $x' - \partial$ опустимая точка, т.е. $f_i(x') \leq 0$, $h_i(x') = 0$. Пусть также $\lambda_i > 0$. Тогда

$$L(x', \lambda, \nu) = f_0(x') + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(x') + \sum_{i=1}^{p} \nu_i h_i(x') \leqslant f_0(x').$$

Если взять в левой части минимум по всем допустимым x, то неравенство останется верным; оно останется верным и в случае, если мы возьмем минимум по всем возможным x:

$$\inf_{x} L(x, \lambda, \nu) \leqslant \inf_{x \text{--gonyct.}} L(x, \lambda, \nu) \leqslant L(x', \lambda, \nu).$$

Итак, получаем

$$\inf_{x} L(x, \lambda, \nu) \leqslant f_0(x').$$

Поскольку решение задачи x_* также является допустимой точкой, получаем, что при $\lambda \geqslant 0$ двойственная функция дает нижнюю оценку на минимум:

$$g(\lambda, \nu) \leqslant f_0(x_*).$$

§2.3 Двойственная задача

Итак, двойственная функция для любой пары (λ, ν) с $\lambda > 0$ дает нижнюю оценку на минимум в оптимизационной задаче. Попробуем теперь найти наилучшую нижнюю оценку:

$$\begin{cases}
g(\lambda, \nu) \to \max_{\lambda, \nu} \\
\lambda_i \geqslant 0, \quad i = 1, \dots, m.
\end{cases}$$
(2.2)

Данная задача называется $\partial soutcmeehhou$ к задаче (2.1). Заметим, что функционал в двойственной задаче всегда является вогнутым.

Задача 2.1. Постройте двойственную к оптимизационной задаче:

$$\begin{cases} ||x||^2 \to \min_x \\ Ax = b. \end{cases}$$

Отметим, что это задача поиска решения системы линейных уравнений с наименьшей нормой.

Решение. Запишем лагранжиан:

$$L(x, \nu) = ||x||^2 + \nu^T (Ax - b).$$

Найдем градиент:

$$\nabla_x L(x, \nu) = 2x + \nu^T A = 2x + A^T \nu.$$

Приравняв градиент нулю, найдем минимум лагранжиана при данном ν :

$$x = -\frac{1}{2}A^T\nu.$$

Значит, двойственная функция равна

$$g(\nu) = L\left(-\frac{1}{2}A^{T}\nu, \nu\right) = -\frac{1}{4}\nu^{T}AA^{T}\nu - b^{T}\nu.$$

Поскольку ограничений-неравенств в исходной задаче нет, в двойственной задаче не будет ограничений. Получаем двойственную задачу

$$-\frac{1}{4}\nu^T A A^T \nu - b^T \nu \to \max_{\nu}.$$

Задача 2.2. Постройте двойственную к задаче линейного программирования в стандартном виде:

$$\begin{cases} \langle c, x \rangle \to \min_{x} \\ Ax = b, \\ x \ge 0. \end{cases}$$

Решение. Запишем лагранжиан:

$$L(x, \lambda, \nu) = \langle c, x \rangle - \lambda^T x + \nu^T (Ax - b).$$

Отметим, что ограничения-неравенства вошли с минусом, мы привели их к стандартному виду $-x \le 0$. Немного преобразуем лагранжиан:

$$L(x, \lambda, \nu) = -b^T \nu + (c + A^T \nu - \lambda)^T x.$$

Двойственная функция имеет вид

$$g(\lambda, \nu) = -b^T \nu + \inf_x (c + A^T \nu - \lambda)^T x.$$

Заметим, что выражение $(c+A^T\nu-\lambda)^Tx$ линейно по x и не ограничено, если $c+A^T\nu-\lambda\neq 0$. Таким образом, условие $c+A^T\nu-\lambda=0$ является ограничением в двойственная задаче.

Получаем, что двойственная задача имеет вид

$$\begin{cases}
-b^T \nu \to \max_{\nu} \\
c + A^T \nu - \lambda = 0, \\
\lambda \geqslant 0.
\end{cases}$$

Ограничения можно объединить, избавившись от λ :

$$\begin{cases} -b^T \nu \to \max_{\nu} \\ c + A^T \nu \geqslant 0. \end{cases}$$

§2.4 Сильная и слабая двойственность

Пусть (λ^*, ν^*) — решение двойственной задачи. Значение двойственной функции всегда не превосходит условный минимум исходной задачи:

$$g(\lambda^*, \nu^*) \leqslant f_0(x_*).$$

Это свойство называется слабой двойственностью. Разность $f_0(x_*) - g(\lambda^*, \nu^*)$ называется зазором между решениями прямой и двойственной задач.

Если имеет место равенство

$$g(\lambda^*, \nu^*) = f_0(x_*),$$

то говорят о *сильной двойственности*. Существует много достаточных условий сильной двойственности. Одним из таких условий для выпуклых задач является условие Слейтера. Выпуклой задачей оптимизации называется задача

$$\begin{cases} f_0(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^d} \\ f_i(x) \leqslant 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ Ax = b. \end{cases}$$

где функции f_0, f_1, \ldots, f_m являются выпуклыми. Условие Слейтера требует, чтобы существовала такая допустимая точка x', в которой ограничения-неравенства выполнены строго:

$$\begin{cases} f_i(x) < 0, & i = 1, \dots, m, \\ Ax = b. \end{cases}$$

Условие Слейтера можно ослабить: достаточно, чтобы ограничения-неравенства были строгими только в том случае, если они не являются линейными (т.е. не имеют вид Ax - b).

Вспомним, например, двойственную задачу линейного программирования:

$$\begin{cases} -b^T \nu \to \max_{\nu} \\ c + A^T \nu \geqslant 0. \end{cases}$$

Здесь максимизируемая функция и ограничения являются линейными, и по ослабленным условиям Слейтера для сильной двойственности достаточно потребовать, чтобы существовала допустимая точка.

§2.5 Условия Куна-Таккера

Пусть x_* и (λ^*, ν^*) — решения прямой и двойственной задач. Будем считать, что имеет место сильная двойственность. Тогда:

$$f_0(x_*) = g(\lambda^*, \nu^*)$$

$$= \inf_x \left(f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(x) + \sum_{i=1}^p \nu_i^* h_i(x) \right)$$

$$\leqslant f_0(x_*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(x_*) + \sum_{i=1}^p \nu_i^* h_i(x_*)$$

$$\leqslant f_0(x_*)$$

Получаем, что все неравенства в этой цепочке выполнены как равенства. Отсюда можно сделать несколько выводов.

Во-первых, если подставить в лагранжиан решение двойственной задачи (λ^*, ν^*) , то его минимум будет достигаться на решении прямой задачи x_* . Иными словами, решение исходной задачи (2.1) эквивалентно минимизации лагранжиана $L(x, \lambda^*, \nu^*)$ с подставленным решением двойственной задачи.

Во-вторых, из последнего неравенства получаем, что

$$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* f_i(x_*) = 0.$$

Каждый член неположителен, поэтому

$$\lambda_i^* f_i(x_*) = 0, \quad i = 1, \dots, m.$$

Эти условия называются условиями дополняющей нежесткости. Они говорят, что множитель Лагранжа при i-м ограничении может быть не равен нулю лишь в том

случае, если ограничение выполнено с равенством (в этом случае говорят, что оно является активным).

Итак, мы можем записать следующие условия, которые выполнены для решений прямой и двойственной задач x_* и (λ^*, ν^*) :

$$\begin{cases} \nabla f_0(x_*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla f_i(x_*) + \sum_{i=1}^p \nu_i^* \nabla h_i(x_*) = 0 \\ f_i(x_*) \leq 0, & i = 1, \dots m \\ h_i(x_*) = 0, & i = 1, \dots p \\ \lambda_i^* \geq 0, & i = 1, \dots m \\ \lambda_i^* f_i(x_*) = 0, & i = 1, \dots m \end{cases}$$
(KKT)

Данные условия называются условиями Куна-Таккера (в зарубежной литературе их принято называть условиями Каруша-Куна-Таккера) и являются необходимыми условиями экстремума. Их можно сформулировать несколько иначе:

Теорема 2.1. Пусть x_* — решение задачи (2.1). Тогда найдутся такие векторы λ^* и ν^* , что выполнены условия (KKT).

Если задача (2.1) является выпуклой и удовлетворяет условию Слейтера, то условия Куна-Таккера становятся *необходимыми* и *достаточными*.

Задача 2.3. Решите следующую задачу условной оптимизации:

$$\begin{cases} (x-4)^2 + (y-4)^2 \to \min_{x,y} \\ x+y \leqslant 4, \\ x+3y \leqslant 9. \end{cases}$$

Решение. Выпишем лагранжиан:

$$L(x, y, \lambda_1, \lambda_2) = (x - 4)^2 + (y - 4)^2 + \lambda_1(x + y - 4) + \lambda_2(x + 3y - 9).$$

Условия Куна-Таккера запишутся в виде:

$$\begin{cases} 2(x-4) + \lambda_1 + \lambda_2 = 0, \\ 2(y-4) + \lambda_1 + 3\lambda_2 = 0, \\ x+y \leqslant 4, \ \lambda_1 \geqslant 0, \ \lambda_1(x+y-4) = 0, \\ x+3y \leqslant 9, \ \lambda_2 \geqslant 0, \ \lambda_2(x+3y-9) = 0. \end{cases}$$

Решая их, рассмотрим 4 случая:

• $x+y=4, \ x+3y=9, \ \lambda_1>0, \ \lambda_2>0.$ Два эти уравнения дают $(x=\frac{3}{2},y=\frac{5}{2}).$ После подстановки в первые два уравнения условий Куна–Таккера, получаем

$$\begin{cases} 2(\frac{3}{2} - 4) + \lambda_1 + \lambda_2 = 0; \\ 2(\frac{5}{2} - 4) + \lambda_1 + 3\lambda_2 = 0, \end{cases}$$

откуда $\lambda_2 = -1$, что противоречит принятым условиям.

- $x+y=4, \ x+3y<9, \ \lambda_1>0, \ \lambda_2=0.$ Подстановка $\lambda_2=0$ в первые два уравнения условий Куна–Таккера вместе с уравнением x+y=4 дают решение ($x=2,y=2,\lambda_1=4,\lambda_2=0$). Эти решения удовлетворяют всем условиям Куна–Таккера.
- Два оставшихся случая, как и первый, ведут к противоречиям.

Поскольку задача выпуклая и удовлетворяет ослабленным условиям Слейтера, найденная точка является решением.

Список литературы

[1] Boyd, S., Vandenberghe, L. Convex Optimization. // Cambridge University Press, 2004.