

Programacion Cuadratica: Conjuntos activos

Oscar S. Dalmau Cedeño
dalmau@cimat.mx

18 de octubre de 2018

1 Programación cuadrática

Programación cuadrática: Conjuntos activos

Metodo de Conjuntos activos para Programación cuadrática convexa

Un problema de programación cuadrática se puede formular como sigue:

$$\min q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{G} \mathbf{x} - \mathbf{c}^T \mathbf{x} \quad (1)$$

$$s.a. : \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i, i \in \mathcal{E} \quad (2)$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \geq b_i, i \in \mathcal{I} \quad (3)$$

donde $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es una matriz simetrica semi positiva definida (caso convexo) y $\mathbf{c}, \mathbf{x}, \{\mathbf{a}_i, i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}\} \in \mathbb{R}^n, \{b_i, i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}\} \in \mathbb{R}$.

El *conjuntos activo* consiste en los índices donde se activan las restricciones:

$$\mathcal{A}(\mathbf{x}^*) = \{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I} \mid \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* = b_i\} \quad (4)$$

Las condiciones de KKT para $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ son

$$\nabla \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \mathbf{G}\mathbf{x}^* - \mathbf{c} - \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* \mathbf{a}_i = 0 \quad (5)$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* = b_i, \quad i \in \mathcal{E} \quad (6)$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* \geq b_i, \quad i \in \mathcal{I} \quad (7)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \quad (8)$$

$$\lambda_i^* (\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* - b_i) = 0, \quad i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I} \quad (9)$$

Si se cumple la condicion LICQ (chechar esto) y se conoce el conjunto de indices donde se activan las restricciones $\mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$ entonces podemos reescribir las KKT como sigue

$$\nabla \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \mathbf{G}\mathbf{x}^* - \mathbf{c} - \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* \mathbf{a}_i = 0 \quad (10)$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* = b_i, \quad i \in \mathcal{E} \quad (11)$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* = b_i, \quad i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \quad (12)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \quad (13)$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* > b_i, \quad i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \quad (14)$$

$$\lambda_i^* = 0, \quad i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \quad (15)$$

En caso de conocer el conjunto activo $\mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$, el problema anterior es equivalente a eliminar las restricciones que no se activan es decir,

$$\nabla \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \mathbf{G}\mathbf{x}^* - \mathbf{c} - \sum_{i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)} \lambda_i^* \mathbf{a}_i = 0 \quad (16)$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* = b_i, \quad i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \quad (17)$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* \geq b_i, \quad i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \quad (18)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \quad (19)$$

o simplemente

$$\mathbf{G}\mathbf{x}^* - \sum_{i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)} \lambda_i^* \mathbf{a}_i = \mathbf{c} \quad (20)$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* = b_i, \quad i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \quad (21)$$

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* \geq b_i, \quad i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \quad (22)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) \quad (23)$$

donde $\lambda_i^* \in \mathbb{R}$, $i \in \mathcal{E}$, por lo que no es una restricción y simplemente se puede eliminar del problema.

Teorema

Si x^* satisface las condiciones anteriores para algunos λ_i^* , $i \in \mathcal{A}(x^*)$ y además G es semidefinida positiva, entonces x^* es un optimo global del problema original

Teorema

Sea x un punto factible y x^* satisfaciendo las condiciones del teorema

- Para $i \in \mathcal{E}$

$$\begin{aligned}a_i^T x &= a_i^T x^* = b \\ a_i^T (x - x^*) &= 0\end{aligned}$$

- Para $i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)$

$$\begin{aligned}a_i^T x^* &= b \\ a_i^T x &\geq b = a_i^T x^* \\ a_i^T (x - x^*) &\geq 0\end{aligned}$$

Teorema

- Como para toda $i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$ se cumple $\lambda_i^* \geq 0$ entonces:

$$\lambda_i^* \mathbf{a}_i^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \geq 0$$

- Por otro lado, premultiplicando la primera KKT por $(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T$

$$(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T (\mathbf{G}\mathbf{x}^* - \mathbf{c}) = \sum_{i \in \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)} \lambda_i^* \mathbf{a}_i^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \geq 0$$

- Reescribiendo la funcion objetivo

$$\begin{aligned} q(\mathbf{x}) &= q(\mathbf{x}^*) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T (\mathbf{G}\mathbf{x}^* - \mathbf{c}) \\ &\geq q(\mathbf{x}^*) \end{aligned}$$

Luego \mathbf{x}^* es una solucion global

Consideremos el caso convexo del problema cuadrático. Si el conjunto activo $\mathcal{A}(x^*)$ se conociera de antemano, entonces se podría resolver el sistema (20)-(23) el cual es equivalente al problema original, o se podría resolver de forma equivalente, el siguiente problema cuadrático:

$$\min q(x) = \frac{1}{2}x^T Gx - c^T x \quad (24)$$

$$s.a. : a_i^T x = b_i, i \in \mathcal{A}(x^*) \quad (25)$$

Nota: verificando las condiciones (22)-(23) para que sea equivalente a las KKTs originales.

- Un problema del enfoque anterior es que no conocemos $\mathcal{A}(x^*)$ de antemano.
- Sin embargo, se puede usar una estrategia basada en *suponer conocido el conjunto activo, y resolver el problema cuadrático anterior, para dicho conjunto activo.*

- El metodo consiste en resolver una secuencia de subproblemas cuadraticos con restricciones de igualdad o restricciones activas \mathcal{W}_k , *conocido como conjunto trabajo*, de modo que

$$\mathcal{W}_0 \rightarrow \mathcal{W}_1 \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{W}_n = \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$$
$$\mathbf{x}^0 \rightarrow \mathbf{x}^1 \rightarrow \dots \rightarrow \mathbf{x}^n = \mathbf{x}^*$$

Garantizando en cada caso que \mathbf{x}^k es factible, ie

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^k \geq b_i, i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{W}_k$$

- El reto es encontrar un mecanismo que nos permita pasar de \mathcal{W}_k a \mathcal{W}_{k+1} y que al final encontremos el conjunto activo $\mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$.

- El algoritmo consiste en resolver la secuencia de subproblemas

$$\mathbf{x}_{k+1} = \arg \min q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{G} \mathbf{x} - \mathbf{c}^T \mathbf{x} \quad (26)$$

$$s.a. : \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i, i \in \mathcal{W}_k \quad (27)$$

dados \mathcal{W}_k y \mathbf{x}_k factible, ie, $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_k \geq b_i, i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{W}_k$

- El punto \mathbf{x}_k se usa como punto inicial para un algoritmo iterativo y \mathcal{W}_k es el *conjunto de trabajo* actual.

- Inicialmente se comprueba si x_k minimiza el problema anterior definido sobre el espacio de trabajo \mathcal{W}_k .
- En caso de que no sea el minimo, podemos reescribir el problema anterior, considerando que x_k es una buena aproximacion del optimo.
- Para ello se define

$$x = x_k + p \quad (28)$$

y el problema (26)-(27) puede ser reescrito en terminos del del paso p .

- Sustituyendo x en (26)-(27) se obtiene

$$p_k = \arg \min_p q(p) = \frac{1}{2} p^T G p - g_k^T p \quad (29)$$

$$s.a. : a_i^T p = 0, i \in \mathcal{W}_k \quad (30)$$

donde $g_k \stackrel{def}{=} Gx_k - c$

- Si $p_k = 0$ y basado en las KKTs, las λ_i se calculan solo en el conjunto de trabajo, ie

$$Gx - c - \sum_{i \in \mathcal{W}_k} \lambda_i a_i = 0 \quad (31)$$

con $x = x_k + p_k$ y en el optimo se debe verificar que

$\lambda_i \geq 0, i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{W}_k$, pues ya se cumple $a_i^T x_k \geq b_i$,

$i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{W}_k$, asumiendo $\lambda_i = 0$ se cumplen las condiciones de complementareidad para $i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{W}_k$.

Consideremos el caso $p_k \neq 0$

- Como p_k es ortogonal a a_i entonces el valor de $a_i^T x$ es constante para toda x en la linea que pasa por x_k en la direccion p_k , es decir, si $x = x_k + \alpha p_k$ entonces

$$a_i^T x = a_i^T (x_k + \alpha p_k) = a_i^T x_k = b_i \quad (32)$$

lo anterior garantiza que se satisfagan las restricciones de igualdad del problema original para la linea recta $x_k + \alpha p_k$ con $\alpha \in \mathbb{R}$.

- Basado en el comentario anterior, si p_k es el optimo del problema (29)-(30), podemos seleccionar x_{k+1} a lo largo de la recta, es decir,

$$x_{k+1} = x_k + \alpha p_k \quad (33)$$

donde $\alpha_k > 0$ es el tamaño de paso.

- Para la seleccion de α_k se toma el valor mas grande tal que $\alpha_k \in [0, 1]$ y se satisfagan las restricciones del problema original.

- Teniendo en cuenta el primer punto: las restricciones de igualdad $i \in \mathcal{W}_k$ en el conjunto de trabajo siempre se satisfacen a lo largo de la recta, es decir, para todo $\alpha \in \mathbb{R}$.
- Por lo tanto, para garantizar que se satisfagan las restricciones solo debemos analizar las restricciones $i \notin \mathcal{W}_k$ o lo que es lo mismo $i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{W}_k$. Luego se debe cumplir,

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_{k+1} &\geq b_i \quad i \notin \mathcal{W}_k \\ \mathbf{a}_i^T (\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{p}_k) &\geq b_i \\ \mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k \alpha &\geq b_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_k \end{aligned}$$

Ahora podemos considerar 2 casos:

- Si $\mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k \geq 0$: Dado que \mathbf{x}_k debe satisfacer todas las restricciones (en particular las de desigualdad) y $\alpha > 0$ entonces:

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_k &\geq b_i \quad i \in \mathcal{I} \\ \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k &\geq b_i \\ \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_{k+1} &\geq b_i\end{aligned}$$

Por lo que en este caso, el nuevo punto \mathbf{x}_{k+1} también satisface las restricciones de desigualdad

- Si $\mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k < 0$:

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k \alpha &\geq b_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_k \\ \alpha &\leq \frac{b_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_k}{\mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k}\end{aligned}$$

luego α_k es menor o igual que el minimo $\frac{b_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_k}{\mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k}$, ie

$$\alpha_k \leq \alpha_{min} \stackrel{def}{=} \min_{i \notin \mathcal{W}_k | \mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k < 0} \frac{b_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_k}{\mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k}$$

Como $0 < \alpha_k \leq 1$ entonces

$$\begin{aligned}\alpha_k &\stackrel{def}{=} \min(1, \alpha_{min}) \\ &= \min\left(1, \min_{i \notin \mathcal{W}_k | \mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k < 0} \frac{b_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_k}{\mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k}\right)\end{aligned}\quad (34)$$

Al conjunto de restricciones $i \notin \mathcal{W}_k | \mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k < 0$ que satisfacen $\alpha_k = \alpha_{min}$ se les llama *restricciones de bloqueo*, al cual denotaremos por \mathcal{B}_k , luego

$$\mathcal{B}_k = \{i \notin \mathcal{W}_k | \mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k < 0 \text{ y } \alpha_k = \alpha_{min}\} \quad (35)$$

- 1 Si $\alpha_{min} > 1$ entonces el *conjunto de restricciones de bloqueo* \mathcal{B}_k es **vacio** y $\alpha_k = 1$.
- 2 Si $\alpha_{min} = 1$ entonces el *conjunto de restricciones de bloqueo* \mathcal{B}_k es **no vacio** y $\alpha_k = 1$
- 3 Si $\alpha_{min} < 1$ entonces el *conjunto de restricciones de bloqueo* \mathcal{B}_k es **no vacio** y $\alpha_k = \alpha_{min}$.

Notar que se puede dar el caso en que una restriccion $j \in \{i \notin \mathcal{W}_k | \mathbf{a}_i^T \mathbf{p}_k < 0\}$ (no considerada en el conjunto de trabajo actual \mathcal{W}_k) sea activa, ie, $b_j - \mathbf{a}_j^T \mathbf{x}_k = 0$ y en este caso $\alpha_k = \alpha_{min} = 0$.

Una forma de actualizar el conjunto de trabajo en la proxima iteracion es añadir al conjunto de trabajo actual el conjunto de las restricciones de bloqueo:

$$\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k \cup \mathcal{B}_k \quad (36)$$

o tambien

$$\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k \cup \{j\}, j \in \mathcal{B}_k \quad (37)$$

- 1 El proceso de obtencion de nuevos conjuntos de trabajo puede seguir sucesivamente como se explico anteriormente, ie, añadiendo restricciones de bloqueo en cada iteracion.
- 2 Luego se determina una dirección de descenso p_k mediante la solucion del subproblema (29)-(30) para el nuevo conjunto de trabajo.

- La pregunta es, cuando termina el algoritmo?.
- Si $p_k = 0$ es el optimo del subproblema (29)-(30) con conjunto de trabajo \mathcal{W}_k , entonces x_k es optimo del problema equivalente (26)-(27).
- Sin embargo, como se ha mencionado anteriormente, para que se cumplan las condiciones de optimalidad del problema original se debe verificar que $\lambda_i \geq 0$, $i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{W}_k$.

Para ello, se calculan los multiplicadores de Lagrange, usando las primeras KKT de subproblema (26)-(27).

$$\begin{aligned} [\nabla q(\mathbf{x}) - \sum_{i \in \mathcal{W}_k} \lambda_i \nabla(\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i)]|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} &= 0 \\ \mathbf{G}\mathbf{x}_k - \mathbf{c} - \sum_{i \in \mathcal{W}_k} \lambda_i \mathbf{a}_i &= 0 \end{aligned}$$

o en forma matricial

$$\mathbf{A}_k \boldsymbol{\lambda}^k = \mathbf{g}_k \quad (38)$$

donde

$$\mathbf{A}_k = [\mathbf{a}_i]_{i \in \mathcal{W}_k} \quad (39)$$

$$\boldsymbol{\lambda}^k = [\lambda_i]_{i \in \mathcal{W}_k} \quad (40)$$

$$\mathbf{g}_k = \mathbf{G}\mathbf{x}_k - \mathbf{c} \quad (41)$$

como se ha supuesto que $\{\mathbf{a}_i\}$ son l.i. entonces

$$\boldsymbol{\lambda}^k = (\mathbf{A}_k^T \mathbf{A}_k)^{-1} \mathbf{A}_k^T \mathbf{g}_k \quad (42)$$

- Si $\lambda_i \geq 0$, $\forall i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{W}_k$ entonces $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_k$
- En caso contrario, definamos el conjunto

$$\mathcal{C}_k = \{i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{W}_k \mid \lambda_i < 0\} \quad (43)$$

que no cumplen las KKT's.

- Ahora podemos actualizar el conjunto de trabajo, eliminando una o varias restricciones que no cumplen las KKTs

- Es decir

$$\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k \setminus \mathcal{C}_k \quad (44)$$

o tambien eliminar una sola restricción

$$\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k \setminus \{j\}, j \in \mathcal{C}_k \quad (45)$$

- Por lo general se selecciona el indice que corresponde al menor λ_i , ie

$$\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k \setminus \{j^*\} \quad (46)$$

donde $j^* = \arg \min_{j \in \mathcal{I} \cap \mathcal{W}_k} \lambda_j$.

Algoritmo de Conjuntos Activos para QP convexa

Dado x_0 y \mathcal{W}_0 por ejemplo $\mathcal{W}_0 = \mathcal{E}$

for $k = 0, 1, 2, \dots$ **do**

Hallar p_k resolviendo el subproblema (29)-(30)

if $p_k = 0$ **then**

Calcular λ^k usando Ecs. (39)-(42) y Hallar \mathcal{C}_k , Ec. (43)

if $\mathcal{C}_k = \emptyset$ **then**

return $x^* = x_k$

else

$\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k \setminus \{j^*\}$, donde $j^* = \arg \min_{j \in \mathcal{I} \cap \mathcal{W}_k} \lambda_j$.

end if

$x_{k+1} = x_k$

else

Hallar α_k , Ec. (34)

Actualizar $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$

Hallar \mathcal{B}_k , Ec. (35)

if $\mathcal{B}_k = \emptyset$ **then**

$\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k$

else

$\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k \cup \{j\}$, $j \in \mathcal{B}_k$

end if

end if

end for

- Punto inicial x_0 : Usar algoritmo Fase I, similar al caso de Programacion Lineal

$$\begin{aligned} \min_{x,z} \mathbf{1}^T z \\ \text{s.a :} \quad & \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + \gamma_i z_i = b_i \quad i \in \mathcal{E} \\ & \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + \gamma_i z_i \geq b_i \quad i \in \mathcal{I} \\ & \mathbf{z} \succeq \mathbf{0} \end{aligned}$$

donde $\gamma_i = -\text{signo}(\mathbf{a}_i^T \tilde{\mathbf{x}} - b_i)$ para $i \in \mathcal{E}$, $\gamma_i = 1$ para $i \in \mathcal{I}$.
El punto inicial del problema anterior es:

$$\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}}, \quad z_i = |\mathbf{a}_i^T \tilde{\mathbf{x}} - b_i|, \quad i \in \mathcal{E}; \quad z_i = \max(b_i - \mathbf{a}_i^T \tilde{\mathbf{x}}, 0), \quad i \in \mathcal{I}$$

Se puede ver que si $\tilde{\mathbf{x}}$ es factible para el problema original
($\tilde{\mathbf{x}}, 0$) es optimo para el problema anterior

- Sobre Degenaracion: en principio en un problema actual, aunque hay varias estrategias (ver tesis doctoral en los documentos: una en Canada y la otra en Stanford).
- Una variante puede ser usar un metodo de perturbacion,

$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i + \epsilon^i$$

con $\epsilon > 0$ un valor pequeño. Ver variante en el Nocedal (seccion **degenerate steps and cycling**, pagina 381).

Tarea

- Implementar el Algoritmo del Conjuntos activos
- Realizar experimentos con el modelo SVM
 - Generar datos linealmente separables. Ejecutar el algoritmo para SVM y mostrar datos, vectores de soporte y el hiperplano separador (SVM)
 - Generar datos no linealmente separables. Ejecutar el algoritmo para SVM no linealmente separable y mostrar datos, vectores de soporte y el hiperplano separador (SVM)
 - Usar datos Mnist con dos clases para entrenar el SVM. Considerar datos de entrenamiento y datos de prueba. Reportar el accuracy