Белорусский государственный университет
Факультет прикладной математики и информатики

ИЗБРАННЫЕ РАЗДЕЛЫ МЕТОДОВ ОПТИМИЗАЦИИ

канд. физ.-мат. наук Войделевич А.С.

КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ

Минск
2019

СОДЕРЖАНИЕ

§1 ВЫПУКЛЫЕ МНОЖЕСТВА

Пусть $\mathbb{A}^n$ — n-мерное аффинное пространство над полем $\mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}$. Зафиксируем некоторую точку $O \in \mathbb{A}^n$ в качестве начала координат. Далее будет отождествлять произвольную точку $P \in \mathbb{A}^n$ с её радиусом вектором $\overrightarrow{OP}$, а само пространство $\mathbb{A}^n$ — с вещественным n-мерным векторным пространством $\mathbb{R}^n$. Для обозначения векторов и точек будем использовать строчные буквы, а для обозначения множеств — заглавные.

Опр. 1.1. *Точка* $\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \ldots + \alpha_m p_m \in \mathbb{R}^n$, *где* $p_i \in \mathbb{R}^n$, $\alpha_i \geqslant 0$ *и* $\sum\limits_{i=1}^{m} \alpha_i = 1$, *называется выпуклой комбинацией точек* p_1, p_2, $\ldots$, p_m.

Опр. 1.2. *Для произвольных точек* x, $y \in \mathbb{R}^n$ *множество*

$$[x, y] \overset{\text{def}}{=} \{\alpha x + (1-\alpha) y \colon \alpha \in [0,1]\},$$

состоящее из всех возможных выпуклых комбинаций точек x *и* y, *называется отрезком* (*с концами* x, y).

Опр. 1.3. *Множество* $X \subset \mathbb{R}^n$ *называется выпуклым, если для произвольных двух точек* x, $y \in X$ *оно содержит весь отрезок* $[x, y]$.

Отметим, что согласно определению 1.3 пустое множество $\varnothing$ и произвольное одноточечное множество $\{p\}$, $p \in \mathbb{R}^n$, являются выпуклыми.

Лемма 1.1. *Множество* X *является выпуклым, если и только если* X *содержит любую выпуклую комбинацию своих точек.*

$\triangleright$ Если множество X содержит любую выпуклую комбинацию своих точек, то, в частности, для любых двух точек x, $y \in X$ имеем $[x, y] \subset X$, а значит, X — выпуклое множество.

Обратное утверждение доказывается индукцией по количеству m точек p_1, p_2, $\ldots$, $p_m \in X$, входящих в выпуклую комбинацию $\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \ldots + \alpha_m p_m$. База индукции $m = 2$ следует из определения 1.3. Предположим теперь, что множество X содержит всевозможные выпуклые комбинации своих точек размера $m \geq 2$. Докажем, что X также содержит любую выпуклую комбинацию размера $m+1$. Действительно, пусть p_1, p_2, $\ldots$, $p_{m+1} \in X$ и числа α_1, α_2, $\ldots$, $\alpha_{m+1} \geq 0$, такие что $\sum\limits_{i=1}^{m+1} \alpha_i = 1$. Без нарушения общности будем считать, что $\alpha_1 < 1$ (иначе это выпуклая комбинация, состоящая из одной точки). Тогда

$$p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \ldots + \alpha_{m+1} p_{m+1} = \alpha_1 p_1 + (1-\alpha_1) q,$$

где $q = \dfrac{\alpha_2}{1-\alpha_1} p_2 + \dfrac{\alpha_3}{1-\alpha_1} p_3 + \ldots + \dfrac{\alpha_{m+1}}{1-\alpha_1} p_{m+1}$. Так как $\sum\limits_{i=2}^{m+1} \dfrac{\alpha_i}{1-\alpha_1} = 1$, то согласно предположению индукции $q \in X$, а значит, $p \in X$. $\triangleleft$

Рассмотрим операции над выпуклыми множествами, которые сохраняют выпуклость.

Лемма 1.2. *Пусть I — некоторое множество индексов произвольной мощности, а $\{X_i \subset \mathbb{R}^n : i \in I\}$ — семейство выпуклых множеств. Тогда множество $X = \bigcap_{i \in I} X_i$ является выпуклым.*

$\triangleright$ Действительно, пусть x, $y \in X$. Тогда x, $y \in X_i$ для всех $i \in I$, а значит, $[x, y] \subset X_i$. Таким образом, $[x, y] \subset X$, т.е. множество X является выпуклым. $\triangleleft$

Выпуклой оболочкой $\operatorname{Conv} X$ произвольного множества $X \subset \mathbb{R}^n$ называется наименьшее (по вложению) выпуклое множество, содержащее X. Из леммы 1.2 следует, в частности, что $\operatorname{Conv} X$ — это пересечение всех выпуклых множеств, содержащих X.

Лемма 1.3. *Пусть $F\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ — аффинное преобразование, т.е. преобразование, действующее по правилу $F\colon x \mapsto Ax + b$, где $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$. Тогда для произвольных выпуклых множеств $X \subset \mathbb{R}^n$ и $Y \subset \mathbb{R}^m$ множества $F(X) \stackrel{\text{def}}{=} \{Fx\colon x \in X\} \subset \mathbb{R}^m$ и $F^{-1}(Y) \stackrel{\text{def}}{=} \{x\colon Fx \in Y\} \subset \mathbb{R}^n$ также являются выпуклыми.*

$\triangleright$ Пусть $y_1 = Fx_1$, $y_2 = Fx_2$ и $\alpha \in [0, 1]$. Тогда утверждение леммы следует из равенства $\alpha y_1 + (1-\alpha)y_2 = \alpha F x_1 + (1-\alpha)Fx_2 = F(\alpha x_1 + (1-\alpha)x_2)$, которое выполнено для любого аффинного преобразования F. $\triangleleft$

Лемма 1.4. *Пусть $\{X_i \subset \mathbb{R}^{n_i} : 1 \le i \le m\}$ — семейство выпуклых множеств. Тогда прямое произведение*

$$X_1 \times X_2 \times \ldots \times X_m \stackrel{\text{def}}{=} \{(x_1, x_2, \ldots, x_m)\colon x_i \in X_i, 1 \le i \le m\}$$

является выпуклым множеством в пространстве $\mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_2} \times \ldots \times \mathbb{R}^{n_m}$.

$\triangleright$ Пусть x_i, $\widetilde{x}_i \in X_i$, $1 \le i \le m$, и $\alpha \in [0, 1]$. Тогда

$$\begin{multline}\alpha(x_1, x_2, \ldots, x_m) + (1-\alpha)(\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2, \ldots \widetilde{x}_m) = \\ = (\alpha x_1 + (1-\alpha)\widetilde{x}_1, \ldots, \alpha x_m + (1-\alpha)\widetilde{x}_m) \in X_1 \times X_2 \times \ldots X_m, \quad (1.1)\end{multline}$$

так как $\alpha x_i + (1-\alpha)\widetilde{x}_i \in X_i$, $1 \le i \le m$. $\triangleleft$

Композиция операций, сохраняющих выпуклость, также, очевидно, сохраняет выпуклость. Следовательно, для произвольных выпуклых множеств X_1, X_2, ..., $X_m \in \mathbb{R}^n$ и вещественных чисел α_1, α_2, ..., $\alpha_m \in \mathbb{R}$ множество

$$\alpha_1 X_1 + \alpha_2 X_2 + \ldots + \alpha_m X_m \stackrel{\text{def}}{=} \{\sum_{i=1}^{m} \alpha_i x_i \colon x_i \in X_i, 1 \le i \le m\}$$

является выпуклым. Действительно, эту линейную комбинацию множеств можно представить как композицию прямого произведения и аффинного преобразования. Отметим, что линейную композицию вида $A + B$ называют суммой Минковского множеств A, $B \subset \mathbb{R}^n$.

Лемма 1.5. *Замыкание $\overline{X}$ выпуклого множества $X \subset \mathbb{R}^n$ выпукло.*

$\triangleright$ Выберем произвольные точки a, $b \in \overline{X}$ и число $\alpha \in [0,1]$. Необходимо доказать, что $c \stackrel{\text{def}}{=} \alpha a + (1-\alpha)b \in \overline{X}$. Существуют такие две последовательности точек $(a_k)_{k\in\mathbb{N}}$ и $(b_k)_{k\in\mathbb{N}} \subset X$, что $a_k \to a$ и $b_k \to b$. Тогда последовательность точек $(c_k)_{k\in\mathbb{N}} \subset X$, где $c_k = \alpha a_k + (1-\alpha)b_k$, сходится к c, а значит, $c \in \overline{X}$. $\triangleleft$

Опр. 1.4. *Множества X, $Y \subset \mathbb{R}^n$ называются отделимыми, если существуют ненулевой вектор c и число d, такие что $c^\mathsf{T} x \geq d \geq c^\mathsf{T} y$ для любых $x \in X$ и $y \in Y$. Если известно, что неравенства строгие $c^\mathsf{T} x > d > c^\mathsf{T} y$, то говорят, что множества X и Y строго отделимы. Гиперплоскость, заданная уравнением $c^\mathsf{T} x = d$, называется разделяющей гиперплоскостью.*

Отметим, что согласно определению, вектор c из уравнения гиперплоскости $c^\mathsf{T} x = d$ ненулевой.

Теорема 1.1. *Если непересекающиеся множества X и $Y \subset \mathbb{R}^n$ выпуклы, замкнуты и одно из них ограничено, то они строго отделимы.*

$\triangleright$ Пусть X — ограниченное множество и $d_X \stackrel{\text{def}}{=} \sup\limits_{x_1,x_2\in X} \|x_1 - x_2\|$ — его диаметр. Докажем, что найдутся точки $x_0 \in X$ и $y_0 \in Y$, для которых $\|x_0 - y_0\| = \inf\limits_{x\in X, y\in Y} \|x - y\|$. Действительно, выберем произвольные две точки $x_1 \in X$ и $y_1 \in Y$. Пусть $\widetilde{Y} = Y \cap B_r(x_1)$, где $B_r(x_1)$ — шар радиуса $r = d_X + \|x_1 - y_1\|$ с центром в x_1. Множества X и $\widetilde{Y}$ являются компактными, а функция f, действующая по правилу $f\colon (x,y) \in X \times \widetilde{Y} \mapsto \|x-y\|$, — непрерывной. Так как декартово произведение компактных множеств компактно, то функция f достигает свое минимальное значение в некоторых точках $x_0 \in X$ и $y_0 \in \widetilde{Y}$. Если $y \in Y \setminus \widetilde{Y}$ и $x \in X$, то $\|x-y\| \geq \|x_1 - y\| - \|x_1 - x\| \geq d_X + \|x_1 - y_1\| - d_X = \|x_1 - y_1\|$, а значит, точки x_0, y_0 искомые.

Пусть $\Pi \stackrel{\text{def}}{=} \{x \in \mathbb{R}^n \colon c^\mathsf{T} x = d\}$ — гиперплоскость, проходящая через середину отрезка $[x_0, y_0]$, перпендикулярно ему. Выберем $c = x_0 - y_0$ и $d = (\|x_0\|^2 - \|y_0\|^2)/2$. Докажем, что множества X и Y не пересекаются с указанной гиперплоскостью, а значит, лежат в разных открытых полупространствах относительно её. Предположим противное, а именно, что некоторая точка $y \in Y$ принадлежит плоскости Π. Треугольник с вершинами x_0, y и y_0 является равнобедренным с основанием $[x_0, y_0]$ и острым углом при вершине y, так как $\|x_0 - y_0\| \leq \|y - x_0\|$. По условию Y — выпуклое множество, а значит, $[y, y_0] \subset Y$. Пусть $\widetilde{y}$ — основание перпендикуляра, опущенного из вершины x_0 на сторону $[y, y_0]$. Тогда $\widetilde{y} \in [y, y_0]$ и $\|x_0 - \widetilde{y}\| < \|x_0 - y_0\|$. Последнее неравенство противоречит выбору точек $x_0 \in X$ и $y_0 \in Y$. Таким образом, $c^\mathsf{T} x > d > c^\mathsf{T} y$. $\triangleleft$

Опр. 1.5. *Гиперплоскость $\Pi \stackrel{\text{def}}{=} \{x \in \mathbb{R}^n \colon c^\mathsf{T} x = d\}$ называется опорной к множеству X в точке x_0, если $x_0 \in \Pi \cap \overline{X}$ и для всех $x \in X$ одновременно выполняется одно из неравенств: $c^\mathsf{T} x \geq d$ или $c^\mathsf{T} x \leq d$.*

Напомним, что точка x называется граничной для множества X, если любая её окрестность содержит как точки, принадлежащие данному множеству, так и не принадлежащие ему.

Лемма 1.6. *Выпуклое множество $X \subset \mathbb{R}^n$ в каждой граничной точке имеет опорную гиперплоскость.*

$\rhd$ Пусть x_0 — граничная точка множества X. Так как X — выпуклое множество, то x_0 — граничная точка замыкания $\overline{X}$. Следовательно, найдётся такая последовательность точек $(y_k)_{k\in\mathbb{N}} \subset \mathbb{R}^n \setminus \overline{X}$, что $y_k \to x_0$. Согласно, теореме 1.1 для множеств $\{y_k\}$ и $\overline{X}$ (выпуклость $\overline{X}$ следует из леммы 1.5) найдётся такая гиперплоскость, заданная уравнением $c_k^\mathsf{T} x = d_k$, что $c_k^\mathsf{T} x > d_k > c_k^\mathsf{T} y_k$, $x \in \overline{X}$. Без нарушения общности будем считать, что $\|c_k\| = 1$. Тогда, в силу построения, последовательность $(d_k)_{k\in\mathbb{N}}$ является ограниченной. Наконец, без нарушения общности будем считать, что $c_k \to c$ и $d_k \to d$. Тогда $c^\mathsf{T} x \geq d$, $x \in X$, и $c^\mathsf{T} x_0 = d$. $\lhd$

Теорема 1.2. *Произвольное выпуклое множество $X \subset \mathbb{R}^n$ можно отделить от точки y, ему не принадлежащей.*

$\rhd$ Действительно, если $y \notin \overline{X}$, то доказательство следует из теоремы 1.1, иначе — из леммы 1.6. $\lhd$

Теорема 1.3. *Множества X и $Y \subset \mathbb{R}^n$ отделимы тогда и только тогда, когда множество $X - Y$ и точка $\{\mathbf{0}\}$ отделимы.*

$\rhd$ Пусть множества X и Y отделимы. Тогда существуют такие $c \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ и $d \in \mathbb{R}$, что $c^\mathsf{T} y \leq d \leq c^\mathsf{T} x$ для всех $x \in X$, $y \in Y$. Следовательно, $c^\mathsf{T}(x - y) \geq 0$, а значит, гиперплоскость $\Pi = \{x\colon c^\mathsf{T} x = 0\}$ отделяет множество $X - Y$ от нуля.

Предположим теперь, что множества $X - Y$ и $\{\mathbf{0}\}$ отделимы. Тогда существуют такие $c \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ и $d \in \mathbb{R}$, что $0 \leq d \leq c^\mathsf{T} z$ для всех $z \in X - Y$. Следовательно, $c^\mathsf{T} y \leq c^\mathsf{T} x$ для всех $x \in X$, $y \in Y$, а значит, $\sup\limits_{y\in Y} c^\mathsf{T} y \leq \inf\limits_{x\in X} c^\mathsf{T} x$. Выберем такое число $\widetilde{d} \in \mathbb{R}$, что $\sup\limits_{y\in Y} c^\mathsf{T} y \leq \widetilde{d} \leq \inf\limits_{x\in X} c^\mathsf{T} x$. Тогда гиперплоскость $\Pi = \{x\colon c^\mathsf{T} x = \widetilde{d}\}$ отделяет множества X и Y. $\lhd$

Следствие 1.1. *Пусть X, Y — непустые выпуклые непересекающиеся множества. Тогда X и Y отделимы.*

Через $\operatorname{Int} X$ обозначим внутренность множества $X \subset \mathbb{R}^n$, т.е. множество всех внутренних точек X. Не сложно видеть, что, если X — выпуклое множество, то $\operatorname{Int} X$ также выпукло.

Следствие 1.2. *Пусть X, Y — выпуклые множества с непустой внутренностью, при этом $\operatorname{Int} X \cap \operatorname{Int} Y = \varnothing$. Тогда X и Y отделимы.*

Упражнения

1. Пусть $X \subset \mathbb{R}^n$ — непустое множество. Докажите, что любую точку p, принадлежащую выпуклой оболочке множества X, можно представить в виде выпуклой линейной комбинации не более чем $n + 1$ точек множества X.
2. Пусть в $\mathbb{R}^n$ заданы точки $p_1, p_2, \ldots, p_s$, где $s \geq n + 2$. Докажите, что точки можно разбить на два непересекающихся множества так, что выпуклые оболочки этих двух множеств будут иметь непустое пересечение.

3. (Теорема Хелли) Пусть I — произвольное семейство индексов и $\{X_i\}_{i\in I}$ — семейство замкнутых выпуклых множеств в $\mathbb{R}^n$, из которых хотя бы одно компактно. Докажите, что если любое подсемейство из $n+1$ множеств имеет непустое пересечение, то и всё семейство имеет непустое пересечение.

§2 ВЫПУКЛЫЕ ФУНКЦИИ

Опр. 2.1. *Функция $f\colon X\to\mathbb{R}$, заданная на выпуклом множестве $X\subset\mathbb{R}^n$, называется выпуклой, если для любых x, $y\in X$ и любого $\alpha\in[0,1]$ выполнено неравенство $f\big(\alpha x+(1-\alpha)y\big)\le\alpha f(x)+(1-\alpha)f(y)$. Если последнее неравенство строгое при $\alpha\in(0,1)$, то функция f называется строго выпуклой.*

Лемма 2.1. *Для того, чтобы функция $f\colon X\to\mathbb{R}$, определённая на выпуклом множестве X, была выпуклой, необходимо и достаточно, чтобы было выпуклым множество* $\operatorname{epi} f\overset{\text{def}}{=}\{(x,y)\colon x\in X, y\ge f(x)\}\subset X\times\mathbb{R}$. (*Множество* $\operatorname{epi} f$ *называется надграфиком функции f.*)

$\triangleright$ Пусть $f\colon X\to\mathbb{R}$ — выпуклая функция. Выбрав произвольные две точки $z_1=(x_1,y_1)$, $z_2=(x_2,y_2)\in\operatorname{epi} f$ и число $\alpha\in[0,1]$, докажем, что $\alpha z_1+(1-\alpha)z_2\in$ $\in\operatorname{epi} f$, т.е. что $f\big(\alpha x_1+(1-\alpha)x_2\big)\le\alpha y_1+(1-\alpha)y_2$. Так как $f(x_1)\le y_1$ и $f(x_2)\le y_2$, то необходимое неравенство следует из выпуклости функции f.

Предположим теперь, что $\operatorname{epi} f$ — выпуклое множество. Очевидно, что для произвольных двух точек x_1, $x_2\in X$ пары $z_1=\big(x_1,f(x_1)\big)$, $z_2=\big(x_2,f(x_2)\big)$ принадлежат надграфику функции f. Следовательно, для произвольного числа $\alpha\in[0,1]$ имеем $\alpha z_1+(1-\alpha)z_2\in\operatorname{epi} f$, а значит, $f\big(\alpha x_1+(1-\alpha)x_2\big)\le\alpha f(x_1)+$ $+(1-\alpha)f(x_2)$. Другими словами, функция f выпукла. $\triangleleft$

Лемма 2.2 (Неравенство Йенсена). *Пусть $f\colon X\to\mathbb{R}$ — выпуклая функция. Тогда для произвольных точек x_1, x_2, $\ldots$, $x_m\in X$ и чисел α_1, α_2, $\ldots$, $\alpha_m\ge 0$, таких что $\sum\limits_{i=1}^{m}\alpha_i=1$, справедливо неравенство*

$$f(\alpha_1x_1+\alpha_2x_2+\ldots+\alpha_mx_m)\le\alpha_1f(x_1)+\alpha_2f(x_2)+\ldots+\alpha_mf(x_m). \tag{2.1}$$

$\triangleright$ Докажем неравенство (2.1) индукцией по количеству точек m. База индукции $m=2$ следует из определения выпуклой функции. Предположим, что неравенство (2.1) верно при $m\ge 2$. Пусть x_1, x_2, $\ldots$, $x_{m+1}\in X$ и числа α_1, α_2, $\ldots$, $\alpha_{m+1}\ge 0$, такие что $\sum\limits_{i=1}^{m+1}\alpha_i=1$. Без нарушения общности будем считать, что $\alpha_1<1$. Так как $\sum\limits_{i=2}^{m+1}\dfrac{\alpha_i}{1-\alpha_1}=1$, то верна цепочка неравенств

$$f\left(\sum_{i=1}^{m+1}\alpha_ix_i\right)\le\alpha_1f(x_1)+(1-\alpha_1)f\left(\sum_{i=2}^{m+1}\frac{\alpha_i}{1-\alpha_1}x_i\right)\le\sum_{i=1}^{m+1}\alpha_if(x_i).\quad\triangleleft$$

Напомним, что точка x называется внутренней для множества X, если найдётся такое $r>0$, что $B_r(x)\subset X$.

Лемма 2.3. *Выпуклая функция $f\colon X \to \mathbb{R}$ непрерывна во всех внутренних точках множества $X \subset \mathbb{R}^n$.*

$\triangleright$ Пусть x_0 — внутренняя точка множества X, а значит, $B_r(x_0) \subset X$ для некоторого $r > 0$. Пусть $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ — стандартный базис пространства $\mathbb{R}^n$. Тогда для любого $\alpha \in [0, 1)$ справедливо неравенство

$$f(x_0 \pm \alpha r e_i) \le (1-\alpha) f(x_0) + \alpha f(x_0 \pm r e_i).$$

Следовательно, $\varlimsup\limits_{t\to+0} f(x_0 \pm t e_i) \le f(x_0)$, поэтому, $\varlimsup\limits_{x\to x_0} f(x) \le f(x_0)$. Так как $f(x_0) \le \frac{1}{2} f(x_0+h) + \frac{1}{2} f(x_0-h)$ для любого $h \in B_r(\mathbf{0})$, то

$$f(x_0) \le \frac{1}{2}\varliminf_{x\to x_0} f(x) + \frac{1}{2}\varlimsup_{x\to x_0} f(x).$$

Следовательно, $f(x_0) = \varliminf\limits_{x\to x_0} f(x) = \varlimsup\limits_{x\to x_0} f(x)$, т.е. функция f непрерывна в x_0. $\triangleleft$

Опр. 2.2. *Вектор $c \in \mathbb{R}^n$ называется субградиентом функции $f\colon X \to \mathbb{R}$ в точке $x_0 \in X \subset \mathbb{R}^n$, если $f(x) \ge f(x_0) + c^{\mathsf{T}}(x - x_0)$ для всех $x \in X$. Множество всевозможных субградиентов функции f в точке x_0 называется субдифференциалом функции f в точке x_0 и обозначается $\partial f(x_0)$.*

Лемма 2.4. *Пусть $f\colon X \to \mathbb{R}$ — выпуклая функция, а x_0 — внутренняя точка множества X. Тогда множество $\partial f(x_0)$ непусто.*

$\triangleright$ Пусть $c^{\mathsf{T}}x + by = d$ — уравнение опорной гиперплоскости к множеству $\operatorname{epi} f$ в точке $\bigl(x_0, f(x_0)\bigr)$. Тогда $c^{\mathsf{T}}x + by \ge d$ при $(x, y) \in \operatorname{epi} f$ и $c^{\mathsf{T}}x_0 + bf(x_0) = d$. Докажем, что $b > 0$. Так как $\bigl(x_0, f(x_0)+1\bigr) \in \operatorname{epi} f$, то $c^{\mathsf{T}}x_0 + bf(x_0) + b \ge d$, т.е. $b \ge 0$. Если $b = 0$, то $c^{\mathsf{T}}x \ge d$, $x \in X$, а значит, $c^{\mathsf{T}}(x - x_0) \ge 0$. Так как x_0 — внутренняя точка, то $x_0 - tc \in X$ для некоторого положительного числа $t > 0$. Следовательно, $-t\|c\|^2 \ge 0$, т.е. $c = 0$. Получено противоречие. Таким образом, $b > 0$, а значит,

$$f(x) \ge -\frac{c^{\mathsf{T}}x}{b} + \frac{d}{b} \quad \text{и} \quad f(x_0) = -\frac{c^{\mathsf{T}}x_0}{b} + \frac{d}{b}.$$

Наконец, отнимая последнее равенство от неравенства, получаем, что

$$f(x) - f(x_0) \ge (\widetilde{c}, x - x_0), \quad \text{где} \quad \widetilde{c} = -\frac{c}{b}. \quad \triangleleft$$

Имеет место следующее обобщение неравенства Йенсена.

Лемма 2.5. *Пусть $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — выпуклая функция, а $\xi\colon \Omega \to \mathbb{R}^n$ — случайный вектор. Тогда справедливо неравенство $f(E\xi) \le Ef(\xi)$, при условии, что соответствующие математические ожидания существуют.*

$\triangleright$ Так как $f(x) - f(y) \geq c_y^{\mathsf{T}}(x - y)$, где $c_y \in \partial f(y)$, то $f(x) = \max\limits_{y \in \mathbb{R}^n}(c_y^{\mathsf{T}} x + d_y)$. Следовательно,

$$f(E\xi) = \max_{y \in \mathbb{R}^n}(c_y^{\mathsf{T}} E\xi + d_y) = \max_{y \in \mathbb{R}^n} E(c_y^{\mathsf{T}}\xi + d_y) \leq E \max_{y \in \mathbb{R}^n}(c_y^{\mathsf{T}}\xi + d_y) = Ef(\xi). \quad \triangleleft$$

Лемма 2.6. *Если в точке $x_0 \in X$ выпуклая функция $f\colon X \to \mathbb{R}$ — дифференцируема, то $\nabla f(x_0) \in \partial f(x_0)$.*

$\triangleright$ Пусть $x \in X$ и $t \in (0, 1]$. Тогда $f\big(x_0 + t(x - x_0)\big) \leq (1 - t) f(x_0) + t f(x)$, а значит, $\dfrac{f\big(x_0 + t(x - x_0)\big) - f(x_0)}{t} \leq f(x) - f(x_0)$. Устремляя t к 0, получаем, что

$$f(x) \geq f(x_0) + \nabla f(x_0)^{\mathsf{T}}(x - x_0). \quad \triangleleft$$

Лемма 2.7. *Если $f \in C^2(X)$, где X — открытое выпуклое множество, то для выпуклости функции f необходимо и достаточно, чтобы матрица $\nabla^2 f(x)$ была неотрицательно определённой ($\nabla^2 f(x) \succeq 0$). Если матрица $\nabla^2 f(x)$ положительно определена ($\nabla^2 f(x) \succ 0$), то f — строго выпуклая функция.*

$\triangleright$ Выберем произвольные точку $x_0 \in X$ и направление $\ell \neq \mathbf{0}$. Рассмотрим функцию $g(t) = f(x_0 + t\ell)$, заданную на интервале $T \overset{\text{def}}{=} \{t\colon x_0 + t\ell \in X\}$. Очевидно, что функция f (строго) выпукла тогда и только тогда, когда (строго) выпуклы скалярные функции g при всевозможных $x_0 \in X$ и $\ell \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$. Имеем $g'(t) = \ell^{\mathsf{T}} \nabla f(x_0 + t\ell)$ и $g''(t) = \ell^{\mathsf{T}} \nabla^2 f(x_0 + t\ell)\ell$. Функция g выпукла тогда и только тогда, когда $g''(t) \geq 0$, что равносильно неотрицательной определённости матрицы $\nabla^2 f(x)$. Если $\nabla^2 f(x) \succ 0$, то $g''(t) > 0$, а значит, g — строго выпуклая функция. $\triangleleft$

В заключении рассмотрим операции над функциями, сохраняющие выпуклость. Будем писать, что $x \leq y$ для векторов x, $y \in \mathbb{R}^n$, если выполнены неравенства $x_i \leq y_i$, $1 \leq i \leq n$.

Лемма 2.8. *Пусть f, f_1, f_2, …, f_m — выпуклые функции. Тогда следующие функции также являются выпуклыми:*

a) $g(x) = \sum\limits_{i=1}^{m} c_i f_i(x)$, *где* $c_i \geq 0$, $1 \leq i \leq m$;

b) $g(x) = f(Fx)$, *где* $Fx = Ax + b$ *— аффинное преобразование;*

c) $g(x) = \max\limits_{1 \leq i \leq m} f_i(x)$;

d) $g(x) = h\big(f_1(x), f_2(x), \ldots, f_m(x)\big)$, *где* h *— выпуклая монотонно неубывающая функция, т.е.* $h(y) \leq h(\widetilde{y})$ *для всех* y *и* $\widetilde{y}$, *таких что* $y \leq \widetilde{y}$.

$\triangleright$ Доказательства утверждений тривиальным образом следуют из определения выпуклости. Для примера докажем выпуклость функции g из пункта d). Пусть x, $y \in X$ и $\alpha \in [0, 1]$. Так как функции f_i, $1 \leq i \leq m$, выпуклы по условию, то $f_i\big(\alpha x + (1 - \alpha)y\big) \leq \alpha f_i(x) + (1 - \alpha) f_i(y)$. Положим $u = \big(f_1(x), \ldots, f_m(x)\big)$ и $v = \big(f_1(y), \ldots, f_m(y)\big)$, тогда в силу монотонности функции h верно неравенство

$$h\Big(f_1\big(\alpha x + (1 - \alpha)y\big), \ldots, f_m\big(\alpha x + (1 - \alpha)y\big)\Big) \leq h\big(\alpha u + (1 - \alpha)v\big).$$

Так как функция h выпукла, то $h\big(\alpha u + (1-\alpha)v\big) \le \alpha h(u) + (1-\alpha)h(v)$. Наконец, в силу определения функции g имеем

$$g\big(\alpha x + (1-\alpha)y\big) = h\Big(f_1\big(\alpha x + (1-\alpha)y\big), \ldots, f_m\big(\alpha x + (1-\alpha)y\big)\Big),$$

$g(x) = h(u)$ и $g(y) = h(v)$, а значит, $g\big(\alpha x + (1-\alpha)y\big) \le \alpha g(x) + (1-\alpha)g(y)$. Следовательно, g — выпуклая функция. $\lhd$

Упражнения

4. Докажите, что непрерывная выпуклая функция $f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ удовлетворяет неравенству
$$f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) \le \int\limits_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \le \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a).$$
5. Докажите, что субдифференциал $\partial f(x_0)$ произвольной выпуклой функции f в точке x_0 является замкнутым выпуклым множеством.
6. Пусть $f(x) \stackrel{\text{def}}{=} \max\limits_{1\le i\le m} f_i(x)$, где $f_i(x)$ — выпуклые функции, и пусть c_i — субградиент функции f_i в точке x_0. Докажите, что вектор $c \stackrel{\text{def}}{=} \sum\limits_{i=1}^m \alpha_i c_i$, $\sum\limits_{i=1}^m \alpha_i = 1$, где $\alpha_i \ge 0$ и $\alpha_i = 0$, если $f_i(x_0) < f(x_0)$, является субградиентом функции $f(x)$.
7. (Неравенство Караматы) Пусть даны два упорядоченных по невозрастанию набора из n действительных чисел $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$ и $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_n)$. Говорят, что набор $\mathbf{a}$ *мажорирует* набор $\mathbf{b}$, и пишут $\mathbf{a} \succ \mathbf{b}$, если $a_1 \geqslant b_1$, $a_1 + a_2 \geqslant b_1 + b_2$, $\ldots$, $a_1 + a_2 + \ldots + a_{n-1} \geqslant b_1 + b_2 + \ldots + b_{n-1}$, $a_1 + a_2 + \ldots + a_n = b_1 + b_2 + \ldots + b_n$. Докажите, что для любой выпуклой функции $y = f(x)$, определённой на некотором промежутке I, и любых двух наборов $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$, $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_n)$ из этого промежутка, удовлетворяющих условию $\mathbf{a} \succ \mathbf{b}$, справедливо неравенство
$$f(a_1) + f(a_2) + \ldots + f(a_n) \geqslant f(b_1) + f(b_2) + \ldots + f(b_n).$$
8. Пусть $f(x)$ и $g(x)$ — выпуклая и вогнутая функции соответственно, определённые на выпуклом множестве X, причём для любого $x \in X$ выполняется неравенство $f(x) \ge g(x)$. Докажите, что существует линейная функция $h(x)$, такая что
$$f(x) \ge h(x) \ge g(x) \quad \text{для каждого} \quad x \in X.$$

§3 ЗАДАЧА ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Рассмотрим следующую задачу условной оптимизации

$$\begin{cases} f_0(x) \to \min; \\ f_i(x) \le 0, \quad 1 \le i \le m; \\ x \in X; \end{cases} \tag{3.1}$$

где $f_j\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — выпуклые функции, $0 \le j \le m$, а $X \subset \mathbb{R}^n$ — произвольное выпуклое множество. Задача (3.1) называется задачей выпуклой оптимизации (выпуклого программирования), а функция $f_0(x)$ — целевой функцией задачи (3.1).

Множество $Y \overset{\text{def}}{=} X \cap \{x\colon f_i(x) \le 0, 1 \le i \le m\} \subset \mathbb{R}^n$ будем называть множеством допустимых векторов (точек). Очевидно, что Y — выпуклое множество. Допустимую точку $x \in Y$, для которой выполнены неравенства $f_i(x) < 0$, $1 \le i \le m$, будем называться строго допустимой. Ограничение $f_j(x) \le 0$ называется активным в допустимой точке $x \in Y$, если $f_j(x) = 0$. Множество индексов активных ограничений обозначим через $I(x) \overset{\text{def}}{=} \{j\colon f_j(x) = 0, 1 \le j \le m\}$.

Опр. 3.1. *Допустимый вектор $x^* \in Y$ называется решением задачи* (3.1), *если $f_0(x^*) \le f_0(x)$ при $x \in Y$.*

В общем случае, когда функции f_j не обязательно выпуклы, приводят определения локального и глобального экстремумов. Однако, очевидно, что для выпуклых задач эти понятия совпадают. Более того, если дополнительно известно, что f_0 — строго выпуклая функция, то задача (3.1) имеет не более одного решения.

Иногда к ограничением задачи (3.1) добавляют следующее $Ax = b$, где $A \in \mathbb{R}^{k\times n}$, $b \in \mathbb{R}^k$ (отметим, что поверхность уровня $\{x\colon f(x) = c\}$ произвольной выпуклой функции $f(x)$, вообще говоря, не является выпуклым множеством). Пусть $\widetilde{x}$ — какое-либо решение линейного уравнения $Ax = b$ и $K \in \mathbb{R}^{n\times d}$ — матрица, столбцы которой образуют базис $\ker A$, $\dim\ker A = d$. Тогда, $\{\widetilde{x} + Ky\colon y \in \mathbb{R}^d\}$ — множество всех решений системы $Ax = b$. Таким образом, исходная задача равносильна задаче (3.1) для функций $\widetilde{f}_i(y) \overset{\text{def}}{=} f_i(\widetilde{x} + Ky)$, $0 \le i \le m$, и множества $\widetilde{X} = K^{-1}(X - \widetilde{x})$.

Лемма 3.1. *Пусть функция f_0 из задачи* (3.1) *является дифференцируемой, тогда точка $x^* \in Y$ — решение задачи* (3.1)*, если и только если для любой точки $x \in Y$ справедливо неравенство*

$$\nabla f_0(x^*)^{\mathsf{T}}(x - x^*) \ge 0. \tag{3.2}$$

$\triangleright$ Пусть x^* — решение задачи (3.1), докажем, что верно неравенство (3.2). Предположим противное, т.е., что нашлась такая допустимая точка $\widetilde{x} \in Y$, что $\nabla f(x^*)^{\mathsf{T}}(\widetilde{x} - x^*) < 0$. Так как f_0 — дифференцируемая функция, то имеет место равенство $f_0\big(x^* + t(\widetilde{x} - x^*)\big) = f_0(x^*) + t\nabla f_0(x^*)^{\mathsf{T}}(\widetilde{x} - x^*) + o(t)$, $t \in [0,1]$. При достаточно малом $t > 0$ слагаемое $t\big(\nabla f_0(x^*)^{\mathsf{T}}(\widetilde{x} - x^*) + o(t)/t\big)$ отрицательное, а значит, $f_0\big(x^* + t(\widetilde{x} - x^*)\big) < f_0(x^*)$, что противоречит выбору x^*.

Предположим, что для некоторой точки $x^* \in Y$ выполнено неравенство (3.2). Так как $f_0(x) \ge f_0(x^*) + \nabla f_0(x^*)^{\mathsf{T}}(x - x^*)$, $x \in Y$, то $f_0(x) \ge f_0(x^*)$, а значит, x^* — решение задачи (3.1). $\triangleleft$

Опр. 3.2. *Говорят, что для задачи* (3.1) *выполнено условие Слейтера, если множество строго допустимых точек задачи* (3.1) *не пусто.*

Следуя [1, с. 52–58], перейдём к доказательству фундаментального результата, который является прямым аналогом метода множителей Лагранжа. Напомним, что функция $\mathcal{L}(x; \lambda_0, \lambda) \overset{\text{def}}{=} \sum\limits_{j=0}^{m} \lambda_j f_j(x)$, где $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m)$, называется функцией Лагранжа задачи (3.1), а числа λ_0, λ_1, …, λ_m — множителями Лагранжа.

Теорема 3.1 (Кун, Таккер). *Пусть $f_j\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $0 \le j \le m$, — выпуклые функции, а X — выпуклое множество. Если x^* является решением задачи* (3.1), *то найдутся такие множители Лагранжа λ_0^* и $\lambda^* = (\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_m^*)$, что*

a) (условие невырожденности) числа λ_0^*, λ_1^*, …, λ_m^* не равны 0 одновременно;

b) (условие неотрицательности) $\lambda_j^* \ge 0$, $0 \le j \le m$;

c) (условия дополняющей нежёсткости) $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0$, $1 \le i \le m$.

d) (принцип минимума) $\min\limits_{x\in X} \mathcal{L}(x; \lambda_0^*, \lambda^*) = \mathcal{L}(x^*; \lambda_0^*, \lambda^*)$;

Пусть для некоторых множителей λ_0^*, λ^* и допустимой точки $x^* \in Y$ выполнены условия a) – d), тогда

A) x^* — решение задачи (3.1), *если $\lambda_0^* \ne 0$;*

B) $\lambda_0^* \ne 0$, если для задачи (3.1) *справедливо условие Слейтера.*

$\triangleright$ Пусть x^* — решение задачи (3.1). Без нарушения общности будем считать, что $f_0(x^*) = 0$. Действительно, если это не так, то определим новую функцию $\widetilde{f}_0(x) = f_0(x) - f_0(x^*)$. Рассмотрим множество $C \subset \mathbb{R}^{m+1}$, состоящее из таких векторов $\mu = (\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_m)^{\mathsf{T}}$, для которых найдётся точка $x_\mu \in X$, такая что выполнены неравенства

$$f_0(x_\mu) < \mu_0, \quad f_1(x_\mu) \le \mu_1, \quad \dots, \quad f_m(x_\mu) \le \mu_m. \tag{3.3}$$

Установим ряд свойств множества C. Сперва докажем, что множество C непусто и выпукло. Действительно, любой вектор $\mu \in \mathbb{R}^{m+1}$ с положительными компонентами принадлежит C, так как в (3.3) для такого вектора достаточно положить $x = x^*$. Выпуклость множества C устанавливается аналогично доказательству выпуклости надграфика $\operatorname{epi} f$ произвольной выпуклой функции f.

Докажем, что нулевой вектор $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{m+1}$ не принадлежит C. Предположим противное. Тогда существует такая точка $\widetilde{x} \in X$, что $f_0(\widetilde{x}) < 0$ и $f_i(\widetilde{x}) \le 0$, $1 \le i \le m$, а значит, x^* не является решением задачи (3.1).

Поскольку C — выпуклое множество и $\mathbf{0} \notin C$, то из теоремы 1.2 отделимости следует, что найдутся такие числа λ_0^*, λ_1^*, …, λ_m^*, неравные одновременно нулю, что $\sum\limits_{j=0}^{m} \lambda_j^* \mu_j \ge 0$, $\mu \in C$. Докажем, что λ_0^*, λ^* — искомые множители Лагранжа.

Множители λ_j^*, $0 \le j \le m$, неотрицательны. Действительно, очевидно, что вектор $(\delta, \dots, \delta, 1, \delta, \dots \delta)^{\mathsf{T}}$, где $\delta > 0$ и 1 стоит на j_0-м месте, принадлежит C, а значит, $\lambda_{j_0}^* \ge -\delta \sum\limits_{j \ne j_0} \lambda_j^*$. Так как $\delta > 0$ выбрано произвольно, то $\lambda_{j_0}^* \ge 0$.

Множители λ_i^*, $1 \le i \le m$, удовлетворяют условиям дополняющей нежёсткости. Выберем индекс i_0. Если $f_{i_0}(x^*) = 0$, то $\lambda_{i_0}^* f_{i_0}(x^*) = 0$. Предположим, что $f_{i_0}(x^*) < 0$. Очевидно, что вектор $(\delta, 0, \dots, 0, f_{i_0}(x^*), 0, \dots, 0)^{\mathsf{T}}$, где $\delta > 0$ и число $f_{i_0}(x^*)$ стоит на i_0-м месте, принадлежит C. Следовательно, $\lambda_{i_0}^* f_{i_0}(x^*) \ge -\lambda_{i_0}^* \delta$. Таким образом, $\lambda_{i_0}^* f_{i_0}(x^*) \ge 0$, а значит, $\lambda_{i_0}^* = 0$, т.е. $\lambda_{i_0}^* f_{i_0}(x^*) = 0$.

В точке x^* выполнен принцип минимума. Действительно, пусть $x \in X$. Тогда вектор $\big(f_0(x) + \delta, f_1(x), \dots, f_m(x)\big)^{\mathsf{T}}$, где $\delta > 0$, принадлежит множеству C.

Следовательно, $\lambda_0^* f_0(x) + \sum\limits_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(x) \geq -\lambda_0^*\delta$, а значит, $\mathcal{L}(x, \lambda_0^*, \lambda^*) \geq 0$. С другой стороны, $f_0(x^*) = 0$ и выполнены условия дополняющей нежёсткости, поэтому $\mathcal{L}(x^*, \lambda_0^*, \lambda^*) = 0$. Таким образом, $\mathcal{L}(x, \lambda_0^*, \lambda^*) \geq \mathcal{L}(x^*, \lambda_0^*, \lambda^*)$ для любого $x \in X$.

Пусть теперь для некоторых множителей λ_0^*, λ^* и допустимой точки $x^* \in Y$ выполнены условия a) – d). Предположим, что $\lambda_0^* \neq 0$. Без нарушения общности будем считать, что $\lambda_0^* = 1$. Тогда для любой допустимой точки $x \in Y$ получаем

$$f_0(x) \geq f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(x) = \mathcal{L}(x; 1, \lambda^*) \geq \mathcal{L}(x^*; 1, \lambda^*).$$

Так как $\mathcal{L}(x^*; 1, \lambda^*) = f_0(x^*) + \sum\limits_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(x^*) = f_0(x^*)$, то x^* — решение задачи (3.1).

Предположим, что для задачи (3.1) выполнено условие Слейтера. Следовательно, существует точка $\widetilde{x} \in Y$, такая что $f_i(\widetilde{x}) < 0$, $1 \leq i \leq m$. Докажем, что $\lambda_0^* \neq 0$. Предположим противное. Тогда $\mathcal{L}(\widetilde{x}; 0, \lambda^*) = \sum\limits_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(\widetilde{x}) < 0$, так как не все множители λ_i^*, $1 \leq i \leq m$, равны нулю. С другой стороны, $\mathcal{L}(x^*; 0, \lambda^*) = 0$, а значит, $\mathcal{L}(\widetilde{x}; 0, \lambda^*) < \mathcal{L}(x^*; 0, \lambda^*)$. Получено противоречие. $\lhd$

Функция $\mathcal{L}(x; \lambda) \overset{\text{def}}{=} f_0(x) + \sum\limits_{i=1}^m \lambda_i f_i(x)$, заданная на множестве $X \times \mathbb{R}_+^m$, где $\mathbb{R}_+^m \overset{\text{def}}{=} \{\lambda \in \mathbb{R}^m \colon \lambda_i \geq 0\}$, называется нормальной функцией Лагранжа.

Лемма 3.2. *Пусть $(x^*, \lambda^*) \in X \times \mathbb{R}_+^m$. Тогда точка x^* допустимая, т.е. $x^* \in Y$, и для пары (x^*, λ^*) выполнены условия a) – d) теоремы Куна – Таккера, если и только если (x^*, λ^*) — седловая точка нормальной функции Лагранжа, т.е.*

$$\min_{x \in X} \mathcal{L}(x, \lambda^*) = \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = \max_{\lambda \in \mathbb{R}_+^m} \mathcal{L}(x^*, \lambda). \tag{3.4}$$

$\rhd$ Действительно, пусть для пары $(x^*, \lambda^*) \in Y \times \mathbb{R}_+^m$ выполнены условия a) – d). Необходимо доказать только правое неравенство в (3.4). Для произвольных множителей $\lambda \in \mathbb{R}_+^m$ в силу условий b) и c) имеем

$$\mathcal{L}(x^*; \lambda^*) = f_0(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(x^*) = f_0(x^*) \geq f_0(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x^*) = \mathcal{L}(x^*; \lambda).$$

Пусть теперь пара $(x^*, \lambda^*) \in X \times \mathbb{R}_+^m$ — седловая точка функции $\mathcal{L}(x; \lambda)$. Докажем, только что $x^* \in Y$ и справедливо условие c), так как остальные условия, очевидно, выполнены. Если $f_{i_0}(x^*) > 0$ для некоторого $i_0 \geq 1$, то имеет место неравенство $\mathcal{L}(x^*; \lambda^*) < \mathcal{L}(x^*; \widetilde{\lambda})$, где $\widetilde{\lambda} \overset{\text{def}}{=} (\lambda_1^*, \ldots, \lambda_{i_0}^* + \delta, \ldots, \lambda_m^*)^\mathsf{T}$ и $\delta > 0$, которое противоречит (3.4). Следовательно, x^* — допустимая точка задачи (3.1). Так как $\mathcal{L}(x^*; \lambda^*) \geq \mathcal{L}(x^*; 0)$, то $\sum\limits_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(x^*) \geq 0$, а значит, $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0$, $1 \leq i \leq m$. $\lhd$

Пример 3.1 (Метод опорных векторов, SVM)**.** Сформулируем задачу обучения с учителем. Пусть $f\colon X \to Y$ — отображение из пространства объектов X в множество ответов Y. Отображение f, вообще говоря, не известно, однако, дана обучающая выборка $S = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$ размера N, где $x_i \in X$ и $y_i = f(x_i) \in Y$, $1 \le i \le N$. Требуется построить отображение $\widetilde{f}\colon X \to Y$, аппроксимирующее f на всём пространстве X.

Рассмотрим частный случай задачи обучения с учителем — задачу бинарной классификации, в которой $Y = \{-1, 1\}$ и объекты описываются n-мерным вещественным вектором, т.е. $X = \mathbb{R}^n$. Далее будем считать, что в обучающей выборе содержатся объекты двух классов, а искомое отображение $\widetilde{f}$ будем строить в форме линейного порогового классификатора $\widetilde{f}(x) = \operatorname{sign}(\omega^\mathsf{T} x - \omega_0)$, где $\omega \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ и $\omega_0 \in \mathbb{R}$ — параметры, которые необходимо определить.

Предположим, что выборка S строго линейно разделима, т.е. существуют такие значения параметров ω и ω_0, при которых справедливы неравенства $y_i(\omega^\mathsf{T} x_i - \omega_0) > 0$, $1 \le i \le N$. В этом случае разделяющая гиперплоскость, вообще говоря, не единственна. Идея метода опорных векторов (support vector machine) состоит в выборе такой разделяющей гиперплоскости, которая максимально далеко отстоит от ближайших к ней точек обоих классов.

Заметим, что параметры ω и ω_0 линейного порогового классификатора $\widetilde{f}$ определяются с точностью до умножения на одну и ту же ненулевую константу. Поэтому, без ограничения общности будем считать, что $\min\limits_{1 \le i \le N} y_i(\omega^\mathsf{T} x_i - \omega_0) = 1$. Ориентированное расстояние от точки x_i до гиперплоскости, заданной уравнением $\omega^\mathsf{T} x = \omega_0$, равно $(\omega^\mathsf{T} x_i - \omega_0)/\|\omega\|$. Следовательно, для определения параметров ω и ω_0 необходимо решить следующую задачу

$$\begin{cases} \|\omega\| \to \min; \\ \min\limits_{1 \le i \le N} y_i(\omega^\mathsf{T} x_i - \omega_0) = 1; \end{cases}$$

которая эквивалентна следующей

$$\begin{cases} \dfrac{1}{2}\|\omega\|^2 \to \min; \\ y_i(\omega^\mathsf{T} x_i - \omega_0) \ge 1, \quad 1 \le i \le N. \end{cases} \tag{3.5}$$

Не сложно видеть, что (3.5) — задача выпуклой оптимизации, для которой выполнено условие Слейтера. Согласно теореме Куна – Таккера и лемме 3.2 задача (3.5) эквивалентна двойственной задаче поиска седловой точки функции Лагранжа:

$$\begin{cases} \mathcal{L}(\omega, \omega_0; \lambda) = \dfrac{1}{2}\|\omega\|^2 - \sum\limits_{i=1}^N \lambda_i \big(y_i(\omega^\mathsf{T} x_i - \omega_0) - 1\big) \to \min\limits_{\omega, \omega_0} \max\limits_{\lambda}; \\ \lambda_i = 0, \quad \text{либо} \quad \omega^\mathsf{T} x_i - \omega_0 = y_i, \quad 1 \le i \le N; \\ \lambda \ge 0. \end{cases}$$

Седловая точка функции $\mathcal{L}$ является стационарной по аргументам ω и ω_0, а значит,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \omega} = \omega - \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i x_i = 0, \ \text{т.е.}\ \omega = \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i x_i; \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \omega_0} = \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0. \tag{3.6}$$

Из (3.6), в частности, следует, что вектор ω является линейной комбинацией тех векторов обучающей выборки, для которых $\lambda_i \ne 0$. Согласно условиям дополняющей нежёсткости для этих векторов справедливы равенства $\omega^{\mathsf T} x_i - \omega_0 = y_i$. Такие векторы называются опорными. Используя равенства (3.6), преобразуем двойственную задачу к задаче квадратичного программирования, содержащую только двойственные переменные:

$$\begin{cases} -\mathcal{L}(\lambda) = -\sum\limits_{i=1}^{N} \lambda_i + \dfrac{1}{2} \sum\limits_{i=1}^{N} \sum\limits_{j=1}^{N} \lambda_i \lambda_j y_i y_j x_i^{\mathsf T} x_j \to \min\limits_{\lambda}; \\ \sum\limits_{i=1}^{N} \lambda_i y_i = 0; \\ \lambda \geq 0. \end{cases} \tag{3.7}$$

Предположим, что λ — решение задачи (3.7). Тогда вектор ω вычисляется согласно (3.6). Для определения порога ω_0 достаточно взять произвольный опорный вектор x_i и положить $\omega_0 = \omega^{\mathsf T} x_i - y_i$.

Рассмотрим общий случай, не делая предположений о линейной разделимости выборки. При любом выборе параметров ω и ω_0 линейный классификатор $\widetilde{f}$ может ошибаться на объектах выборки. Введём набор дополнительных переменных $\xi_i \geq 0$, характеризующих величину ошибки на объектах x_i, $1 \leq i \leq N$. На основе задачи (3.5) составим новую задачу:

$$\begin{cases} \dfrac{1}{2}\|\omega\|^2 + C \sum\limits_{i=1}^{N} \xi_i \to \min\limits_{\omega, \omega_0, \xi}; \\ y_i(\omega^{\mathsf T} x_i - \omega_0) \geq 1 - \xi_i, \quad 1 \leq i \leq N; \\ \xi \geq 0; \end{cases} \tag{3.8}$$

где C — некоторый заданный гиперпараметр, определяющий компромисс между максимизацией ширины разделяющей полосы и минимизацией суммарной ошибки. Очевидно, что для задачи (3.8) справедливо условие Слейтера. Рассмотрим функцию Лагранжа для задачи (3.8): $\mathcal{L}(\omega, \omega_0, \xi; \lambda, \eta) = \dfrac{1}{2}\|\omega\|^2 - \sum\limits_{i=1}^{N} \lambda_i \big(y_i(\omega^{\mathsf T} x_i - \omega_0) - 1\big) - \sum\limits_{i=1}^{N} \xi_i(\lambda_i + \eta_i - C)$, где $\eta = (\eta_1, \eta_2, \ldots, \eta_N)^{\mathsf T}$ — вектор переменных, двойственных к вектору переменных $\xi = (\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)^{\mathsf T}$. Согласно теореме Куна – Таккера и лемме 3.2 задача (3.8) сводится к поиску седловой точки функции $\mathcal{L}$:

$$\begin{cases} \mathcal{L}(\omega, \omega_0, \xi; \lambda, \eta) \to \min\limits_{\omega, \omega_0, \xi} \max\limits_{\lambda, \eta}; \\ \lambda_i = 0, \quad \text{либо} \quad y_i(\omega^{\mathsf T} x_i - \omega_0) = 1 - \xi_i, \quad 1 \leq i \leq N; \\ \eta_i = 0, \quad \text{либо} \quad \xi_i = 0, \quad 1 \leq i \leq N; \\ \xi \geq 0, \quad \lambda \geq 0, \quad \eta \geq 0. \end{cases} \tag{3.9}$$

Из условия стационарности седловой точки по аргументам ω и ω_0 получаем

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \omega} = \omega - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i x_i = 0, \quad \text{т.е.} \quad \omega = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i x_i; \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \omega_0} = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i = 0; \tag{3.10}$$

Пусть $(\omega, \omega_0, \xi; \lambda, \eta)$ — седловая точка функции Лагранжа $\mathcal{L}$. Отметим, что $\lambda_i + \eta_i \leq C$, действительно, иначе функция $\mathcal{L}$ была бы неограничена по переменной ξ_i снизу. Если $\xi^* > 0$, то из условия стационарности следует, что $\lambda_i + \eta_i = C$, если же $\xi_i = 0$, то, очевидно, без нарушения общности можно считать, что $\lambda_i + \eta_i = C$. Используя (3.10) сведём задачу (3.9) к задаче квадратичного программирования:

$$\begin{cases} -\mathcal{L}(\lambda) = -\sum\limits_{i=1}^{N} \lambda_i + \dfrac{1}{2} \sum\limits_{i=1}^{N} \sum\limits_{j=1}^{N} \lambda_i \lambda_j y_i y_j x_i^{\mathsf{T}} x_j \to \min\limits_{\lambda}; \\ \sum\limits_{i=1}^{N} \lambda_i y_i = 0; \\ 0 \le \lambda_i \le C, \quad 1 \le i \le N. \end{cases} \tag{3.11}$$

В заключении приведём критерий существования седловой точки.

Теорема 3.2. *Пусть $f(x, y)\colon X \times Y \to \mathbb{R}$ — непрерывная функция, заданная на произведении компактных множеств X и Y. Тогда*

$$\min_x \max_y f(x, y) \ge \max_y \min_x f(x, y). \tag{3.12}$$

При этом равенство в (3.12) *достигается тогда и только тогда, когда существует седловая точка* (x_0, y_0) *функции* f :

$$f(x_0, y) \le f(x_0, y_0) \le f(x, y_0), \quad x \in X,\ y \in Y.$$

$\triangleright$ Выберем произвольную точку $\widetilde{y} \in Y$. Так как $\max\limits_y f(x, y) \ge f(x, \widetilde{y})$, $x \in X$, то $\min\limits_x \max\limits_y f(x, y) \ge \min\limits_x f(x, \widetilde{y})$, а значит, в силу произвольного выбора $\widetilde{y}$ выполнено неравенство (3.12).

Предположим, что $\min\limits_x \max\limits_y f(x, y) = \max\limits_y \min\limits_x f(x, y)$. Выберем точки $x_0 \in X$ и $y_0 \in Y$ из условий $\max\limits_y f(x_0, y) = \min\limits_x \max\limits_y f(x, y)$ и $\min\limits_x f(x, y_0) = \max\limits_y \min\limits_x f(x, y)$. Тогда $f(x_0, y_0) \ge \min\limits_x f(x, y_0) = \max\limits_y \min\limits_x f(x, y) = \min\limits_x \max\limits_y f(x, y)$. Поэтому, справедливо неравенство $f(x_0, y_0) \ge \max\limits_y f(x_0, y)$. Аналогично, получаем

$$f(x_0, y_0) \le \max_y f(x_0, y) = \min_x \max_y f(x, y) = \max_y \min_x f(x, y) = \min_x f(x, y_0).$$

Таким образом, (x_0, y_0) — седловая точка.

Пусть теперь известно, что (x_0, y_0) — седловая точка. Тогда

$$\max_y \min_x f(x, y) \ge \min_x f(x, y_0) \ge f(x_0, y_0),$$
$$\min_x \max_y f(x, y) \le \max_y f(x_0, y) \le f(x_0, y_0).$$

Следовательно, $\max\limits_y \min\limits_x f(x, y) \ge \min\limits_x \max\limits_y f(x, y)$ и неравенство (3.12) обращается в равенство. $\triangleleft$

Упражнения

9. Докажите, что квадратичная функция $f(x) = x^{\mathsf{T}} A x + b^{\mathsf{T}} x$ либо достигает своей нижней грани на $\mathbb{R}^n$, либо не ограничена снизу.
10. Докажите, что для того, чтобы точка $x^* \in X$ была решением задачи выпуклого программирования (3.1), достаточно, чтобы для любого вектора v, удовлетворяющего системе неравенств $v^{\mathsf{T}} \nabla f_j(x^*) \le 0$, $j \in I(x^*)$, было верно $v^{\mathsf{T}} \nabla f_0(x^*) \ge 0$.

Литература

[1] Алексеев В.М., Тихомиров В.М., Фомин С.В. Оптимальное управление – М.: Наука, 1979. – 432 с.