Методы оптимизации. ДЗ на ноябрь.

Прохоров Юрий, 776

---

1 Karush-Kuhn-Tucker conditions

1.1 Условия ККТ

Рассматривается задача оптимизации (*задача математического программирования*):

$$\begin{cases} f(x) \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} \\ g_i(x) \le 0, \qquad i = \overline{1, m} \\ h_j(x) = 0, \qquad j = \overline{1, p} \end{cases} \qquad \Longleftrightarrow \qquad f(x) \longrightarrow \min_{x \in S}, \tag{$*$}$$

где множество S задается ограничениями.

Замечания:

- можно убрать ограничения типа $h_j(x) = 0$, заменив их на $h_j(x) \le 0$ и $-h_j(x) \le 0$;
- под записью $f(x) \longrightarrow \min$ понимается нахождение нижней грани (инфимума);
- далее все функции f, g_i и h_j считаем достаточно гладкими.

Опр. *Функцией Лагранжа* для задачи $(*)$ называется

$$L(x, \lambda, \mu) = \lambda_0 f(x) + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j h_j(x) + \sum_{i=1}^{m} \mu_i g_i(x)$$

Теорема Каруша-Куна-Таккера.

Пусть x^* — решение задачи $(*)$.
Тогда $\exists\ (\lambda^*, \mu^*) = (\lambda_0^*, \ldots, \lambda_p^*, \mu_1^*, \ldots, \mu_m^*) \neq \mathbf{0}$ такой, что выполнены *условия Каруша-Куна-Таккера*:

1. $x^* \in S$ (x^* — *допустимая* точка, т.е. выполнены ограничения);
2. $\lambda_0^* \ge 0,\ \mu_i^* \ge 0,\ i = \overline{1, m}$ (*неотрицательность*);
3. $\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = 0$ (*минимальность*);
4. $\mu_i^* \cdot g_i(x^*) = 0,\ i = \overline{1, m}$ (*дополняющая нежесткость*).

Опр. Задача $(*)$ называется *выпуклой*, если функции f, g_i выпуклы, а ограничения-равенства либо отсутствуют, либо являются аффинными (имеют вид $Ax = b$).

Опр. Задача $(*)$ называется *регулярной*, если для нее условия ККТ выполнены при $\lambda_0^* > 0$.

Если задача $(*)$ регулярна, то в лагранжиане можно положить $\lambda_0 = 1$:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j h_j(x) + \sum_{i=1}^{m} \mu_i g_i(x),$$

то есть регулярность в некотором смысле означает невырожденность задачи.

Условие регулярности Слейтера. Пусть в задаче $(*)$

- функции g_i выпуклы, а h_j либо отсутствуют, либо аффинны;
- $\exists \widetilde{x} \in S: \quad g_i(\widetilde{x}) < 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathrm{relint}(S) \neq \varnothing.$

Тогда задача $(*)$ является регулярной.

Условие регулярности через двойственность. Если в задаче $(*)$ присутствует сильная двойственность, то задача $(*)$ регулярна.

Если задача $(*)$ выпукла и регулярна, то условия Каруша-Куна-Таккера являются *необходимыми и достаточными условиями глобального минимума.*

1.2 Псевдообратная матрица

Опр. Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. *Псевдообратной матрицей* (Moore-Penrose inverse) к матрице A называется

$$A^\dagger = \lim_{\alpha \to 0} (A^T A + \alpha I)^{-1} A^T = \lim_{\alpha \to 0} A^T (A A^T + \alpha I)^{-1}$$

Оба предела всегда существуют и равны.

Если матрица A имеет полный ранг ($\operatorname{rg} A = \min\{m, n\}$), то для $A^\dagger$ есть алгебраическое выражение:

Случай	Алгебраическое выражение	Задача, решением которой является $A^\dagger b$
$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$	$A^\dagger = A^{-1}$	$Ax = b$
$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ $m \geq n$	$A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$	$\|Ax - b\|_2^2 \to \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}$
$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ $m \leq n$	$A^\dagger = A^T (A A^T)^{-1}$	$\begin{cases} \|x\|_2^2 \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} \\ Ax = b \end{cases}$

Если линейная система $Ax = b$ имеет решения, то все они задаются формулой

$$x = A^\dagger b + \big[I - A^\dagger A\big] w, \qquad \forall w \in \mathbb{R}^n$$

Свойства:

- $A A^\dagger A = A$
- $A^\dagger A A^\dagger = A^\dagger$
- $(A^\dagger)^\dagger = A$
- $(A^T)^\dagger = (A^\dagger)^T$
- $(\alpha A)^\dagger = \alpha^{-1} A^\dagger$
- $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$, если A или B полного ранга

1.3 Сингулярное разложение

Теорема о сингулярном разложении (SVD)

Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ — произвольная вещественная матрица ранга r. Тогда при $m \geq n$:

$$A = U \Sigma V^T,$$

- $U = (m \times m), \quad V = (n \times n)$ — ортогональные матрицы,
- $\Sigma = (m \times n)$ — матрица с r ненулевыми элементами на диагонали:

  $$\sigma_j = \sqrt{\lambda_j} \ \text{ — сингулярные числа матрицы } A^T A \text{ в порядке убывания}$$

- Столбцы U — собственные векторы $A A^T$, столбцы V — собственные векторы $A^T A$.

Аналогично теорема формулируется для случая, когда $m \leq n$.

Если $A = U \Sigma V^T$, то псевдообратная матрица находится по формуле:

$$A^\dagger = V \Sigma^\dagger U^T, \qquad \Sigma^\dagger = \operatorname{diag}\left(\frac{1}{\sigma_1}, \dots, \frac{1}{\sigma_r}, 0, \dots, 0\right)$$

Задача 1

Найти решение задачи линейного программирования (LP) ($c \in \mathbb{R}^n,\ A \in \mathbb{R}^{m \times n},\ b \in \mathbb{R}^m$)

$$\begin{cases} c^T x \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}, \\ Ax = b. \end{cases}$$

Решение:

Это выпуклая задача, и для нее выполнено условие регулярности Слейтера. Значит, условия ККТ являются необходимыми и достаточными условиями глобального минимума.

Лагранжиан при $\lambda \in \mathbb{R}^m$:

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

Условия ККТ:

$$\begin{cases} c + A^T \lambda = 0 \\ Ax = b \end{cases} \qquad (*)$$

Задача имеет конечное оптимальное значение тогда и только тогда, когда система $(*)$ совместна. Итак, оптимальное значение:

$$p^* = \begin{cases} c^T A^\dagger b & \text{, система } (*) \text{ совместна} \\ -\infty & \text{, иначе} \end{cases}$$

Здесь $A^\dagger$ — псевдообратная матрица к A.

Условие $Ax = b$, если совместно, задает подпространство $\mathbb{R}^n$. Линейная функция $c^T x$ не может достигать инфинума на неограниченном множестве, если только она не является константой. Условие $c + A^T \lambda = 0$ как раз и отражает тот факт, что значение целевой функции константно на этом подпространстве.

Задача 2

Найти решение задачи линейного программирования (LP) ($c \in \mathbb{R}^n$)

$$\begin{cases} c^T x \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}, \\ 1^T x = 1, \\ x \geq 0. \end{cases}$$

Решение:

Сразу отметим, что интуитивно понятно, что оптимальное значение $p^* = \min\limits_j c_j$ и достигается на $x^* = e_{j_0}$, где $j_0 = \arg\min\limits_j c_j$.

Задача выпукла, и выполнено условие регулярности Слейтера, поэтому условия ККТ — критерий глобального минимума.

$$L(x, \lambda, \mu) = c^T x + \lambda(1^T x - 1) - \mu^T x, \qquad \lambda \in \mathbb{R},\ \mu \in \mathbb{R}^n$$

Условия ККТ:

$$\begin{cases} c_j + \lambda - \mu_j = 0, \qquad j = \overline{1, n} \\ \mu \geq 0 \\ \mu_j x_j = 0, \qquad j = \overline{1, n} \\ 1^T x = 1 \\ x \geq 0 \end{cases}$$

Достаточно подставить угаданное решение и убедиться, что система выполнена, чтобы найти решение задачи. Так сделаем в следующей задаче. Но сейчас можно провести полноценный вывод.

Так как $1^T x = 1$, то существует $x_i > 0$. Из условия дополняющей нежесткости (третьего условия) следует, что $\mu_i = 0$. Тогда из первого условия найдем $\lambda = -c_i$.

Тогда $\forall j = \overline{1,n}$ из первого условия: $\mu_j = c_j + \lambda = c_j - c_i$. Из второго условия следует, что

$$\mu_j = c_j - c_i \geq 0 \qquad \Longrightarrow \qquad c_i = \min_j c_j$$

Теперь легко видеть, что решением системы будет

$$x_j = \begin{cases} 1, \ j = i \\ 0, \ j \neq i \end{cases} \qquad \mu_j = c_j - c_i, \qquad \lambda = -c_i$$

Отсюда решение задачи:

$$x^* = e_i, \qquad i = \arg\min_j c_j, \qquad p^* = c_i$$

Задача 3

(a) Найти решение задачи линейного программирования (LP) ($c \in \mathbb{R}^n, \ \alpha \in \mathbb{Z}, \ 0 \leq \alpha \leq n$)

$$\begin{cases} c^T x \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}, \\ 1^T x = \alpha, \\ 0 \leq x \leq 1. \end{cases}$$

(b) Как изменится решение, если $\alpha \notin \mathbb{Z}$, но $0 \leq \alpha \leq n$?

(c) Как изменится решение, если равенство заменить неравенством $1^T x \leq \alpha$?

Решение:

(a) Задача выпукла, и выполнено условие регулярности Слейтера, поэтому условия ККТ — критерий глобального минимума.

$$L(x, \lambda, \mu, \eta) = c^T x + \lambda(1^T x - \alpha) - \mu^T x + \eta^T (x - 1), \qquad \lambda \in \mathbb{R}, \ \mu, \eta \in \mathbb{R}^n$$

Условия ККТ:

$$\begin{cases} c_j + \lambda - \mu_j + \eta_j = 0, & j = \overline{1,n} \\ \mu \geq 0, \quad \eta \geq 0 \\ \mu_j x_j = 0, \quad \eta_j (x_j - 1) = 0 & j = \overline{1,n} \\ 1^T x = \alpha \\ 0 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

Интуитивно понятно, что оптимальное значение — это сумма α наименьших компонент вектора c. Так как условия ККТ — достаточные условия, угадаем решение этой системы, используя эту догадку.

Без ограничения общности будем считать, что $c_1 \leq c_2 \leq \ldots \leq c_n$ (всегда можно перенумеровать).

Если $\alpha = 0$, то допустимое множество состоит только из $x = 0$, поэтому $p^* = 0$.

Если $\alpha \neq 0$, то найдем решение системы в виде

$$x_1 = \ldots = x_\alpha = 1, \qquad x_{\alpha+1} = \ldots = x_n = 0$$

Из третьего условия: $\mu_1 = \ldots = \mu_\alpha = 0, \quad \eta_{\alpha+1} = \ldots = \eta_n = 0$. Из первого условия:

$$\left.\begin{array}{ll} \eta_j = -c_j - \lambda \geq 0, & j = \overline{1, \alpha} \\ \mu_j = c_j + \lambda \geq 0, & j = \overline{\alpha+1, n} \end{array}\right\} \quad \Longrightarrow \qquad -c_\alpha \geq \lambda \geq -c_{\alpha+1}$$

Если взять $\lambda = -c_\alpha$, то все условия ККТ будут выполнены. Отсюда оптимальное значение:

$$p^* = c_1 + \ldots + c_\alpha$$

(b) Если $\alpha \neq \mathbb{Z}$, то пусть $k = \lceil \alpha \rceil$. Решение будем искать в виде

$$x_1 = \ldots = x_{k-1} = 1, \qquad x_k = \alpha - k + 1, \qquad x_{k+1} = \ldots = x_n = 0$$

Значения μ, η и λ не поменяются. Поэтому оптимальное значение:

$$p^* = c_1 + \ldots + c_{k-1} + \big(\alpha - \lfloor \alpha \rfloor\big) c_{\lceil \alpha \rceil}$$

(c) Считаем, что $\alpha \in \mathbb{Z}$. Поменяется лагранжиан:

$$L(x, \mu_0, \mu, \eta) = c^T x + \mu_0(1^T x - \alpha) - \mu^T x + \eta^T (x - 1)$$

Условия ККТ:

$$\begin{cases} c_j + \mu_0 - \mu_j + \eta_j = 0, & j = \overline{1, n} \\ \mu_0 \geq 0, \quad \mu \geq 0, \quad \eta \geq 0 \\ \mu_0(1^T x - \alpha) = 0, \quad \mu_j x_j = 0, \quad \eta_j(x_j - 1) = 0 & j = \overline{1, n} \\ 1^T x \leq \alpha \\ 0 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

Попробуем взять такое же решение, как в пункте (a). Если выполнено условие $\mu_0 = -c_\alpha \geq 0$, то решение системы будет таким же, и оптимальное значение $p^* = c_1 + \ldots + c_\alpha$.

Если условие $c_\alpha \leq 0$ не выполнено, то пусть $k \leq \alpha$ — наибольшее, такое что $c_k \leq 0$. Тогда возьмем

$$x_1 = \ldots x_k = 1, \qquad x_{k+1} = \ldots = x_n = 0$$

Аналогично можно убедиться, что решением системы будет

$$\mu_0 = -c_k, \qquad \mu_j = \begin{cases} 0 & , \ j \leq k \\ c_j - c_k & , \ j > k \end{cases}, \qquad \eta_j = \begin{cases} c_k - c_j & , \ j \leq k \\ 0 & , \ j > k \end{cases}$$

Итак, оптимальное значение

$$p^* = c_1 + \ldots + c_k, \qquad k = \max \big\{ j \bigm| c_j \leq 0 \big\}$$

Задача 4

(a) Найти решение задачи квадратичного программирования (QP) ($c \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}, \ A \in \mathbb{S}^n_{++}$)

$$\begin{cases} c^T x \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}, \\ x^T A x \leq 1. \end{cases}$$

(b) Как изменится решение, если $A \notin \mathbb{S}^n_{++}$?

Решение:

(a) Задача выпукла, и выполнено условие регулярности Слейтера, поэтому условия ККТ — критерий глобального минимума.

$$L(x, \mu) = c^T x + \mu(x^T A x - 1), \qquad \mu \in \mathbb{R}$$

Условия ККТ:

$$\begin{cases} c + 2\mu A x = 0 \\ \mu \geq 0 \\ \mu(x^T A x - 1) = 0 \\ x^T A x \leq 1 \end{cases}$$

Так как $c \neq 0$, то и $\mu \neq 0$. Тогда из первого условия находим $x = -\dfrac{1}{2\mu} A^{-1} c$. Подставляем в третье условие, чтобы найти μ:

$$x^T A x = 1 \qquad \Longrightarrow \qquad \mu = \frac{1}{2}\sqrt{c^T A^{-1} c} > 0$$

Тогда оптимальные решение и значение:

$$x^* = -\frac{A^{-1} c}{\sqrt{c^T A^{-1} c}}, \qquad p^* = -\sqrt{c^T A^{-1} c}$$

(b) Если $A \notin \mathbb{S}^n_{++}$, то задача не является выпуклой.

Матрицу A будем все равно считать симметричной, так как всегда можно вместо A взять $\frac{1}{2}(A + A^T)$, и допустимое множество не поменяется.

Если $A \in \mathbb{S}^n$, то все собственные значения $\lambda \in \mathbb{R}$. В пункте (a) они все были положительны, и допустимое множество было эллипсоидом — ограниченным множеством. Покажем, что если хотя бы одно $\lambda \leq 0$, то допустимое множество неограничено.

Возьмем собственный вектор u, соответствующий $\lambda \leq 0$. Тогда

$$u^T A u = \lambda u^T u = \lambda \|u\|^2 \leq 0 < 1$$

Кроме того, для любого $t \in \mathbb{R}$, tu тоже лежит в допустимом множестве. Величину $tc^T u$ можно устремить в $-\infty$ при $t \to \pm\infty$ (в зависимости от знака $c^T u$). Поэтому в этом случае

$$p^* = -\infty$$

Задача 5

Найти решение задачи квадратичного программирования (QP) ($c \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\},\ A \in \mathbb{S}^n_{++},\ x_c \in \mathbb{R}^n$)

$$\begin{cases} c^T x \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}, \\ (x - x_c)^T A (x - x_c) \leq 1. \end{cases}$$

Решение:

Задача выпукла, и выполнено условие регулярности Слейтера, поэтому условия ККТ — критерий глобального минимума.

$$L(x, \mu) = c^T x + \mu\big((x - x_c)^T A (x - x_c) - 1\big), \qquad \mu \in \mathbb{R}$$

Условия ККТ:

$$\begin{cases} c + 2\mu A(x - x_c) = 0 \\ \mu \geq 0 \\ \mu\big((x - x_c)^T A (x - x_c) - 1\big) = 0 \\ (x - x_c)^T A (x - x_c) \leq 1 \end{cases}$$

Так как $c \neq 0$, то и $\mu \neq 0$. Тогда из первого условия находим $x = x_c - \dfrac{1}{2\mu} A^{-1} c$. Подставляем в третье условие, чтобы найти μ:

$$(x - x_c)^T A (x - x_c) = 1 \qquad \Longrightarrow \qquad \mu = \frac{1}{2}\sqrt{c^T A^{-1} c} > 0$$

Тогда оптимальные решение и значение:

$$x^* = x_c - \frac{A^{-1} c}{\sqrt{c^T A^{-1} c}}, \qquad p^* = c^T x_c - \sqrt{c^T A^{-1} c}$$

Задача 6

Найти решение задачи квадратичного программирования (QP) ($A \in \mathbb{S}^n_{++},\ B \in \mathbb{S}^n_{+}$)

$$\begin{cases} x^T B x \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}, \\ x^T A x \leq 1. \end{cases}$$

Решение:

Так как $B \succeq 0$, то $x^T B x \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$. Точка $x = 0$ лежит в допустимом множестве, поэтому решение и оптимальное значение:

$$x^* = 0, \qquad p^* = 0$$

Задача 7

Для задачи наименьших квадратов с ограничениями

$$\begin{cases} \left\|Ax-b\right\|_2^2 \longrightarrow \min\limits_{x\in\mathbb{R}^n}, \\ Cx = d. \end{cases} \qquad \begin{array}{l} A\in\mathbb{R}^{m\times n},\ m\geq n,\ \operatorname{rg} A = n \\ C\in\mathbb{R}^{k\times n},\ k\leq n,\ \operatorname{rg} C = k \end{array} \qquad b\in\mathbb{R}^m,\ d\in\mathbb{R}^k$$

Считаем матрицу C действительной, иначе оптимизировать только по действительным x странно...

(a) выписать условия Каруша-Куна-Таккера;

(b) найти решение x^* прямой задачи;

(c) найти решение λ^* двойственной задачи.

Решение:

(a) Задача выпукла, и выполнено условие регулярности Слейтера, поэтому условия ККТ — критерий глобального минимума.

$$L(x,\lambda) = \|Ax-b\|_2^2 + \lambda^T(Cx-d), \qquad \lambda\in\mathbb{R}^k$$

Условия ККТ:

$$\begin{cases} 2A^T(Ax-b) + C^T\lambda = 0 \\ C^Tx = d \end{cases}$$

(b) Из первого условия находим

$$x = \frac{1}{2}(A^TA)^{-1}\big(2A^Tb - C^T\lambda\big) \tag{1}$$

Чтобы найти λ, подставим во второе условие. После некоторых вычислений, получаем

$$\lambda^* = 2\big(C(A^TA)^{-1}C^T\big)^{-1}\big[C(A^TA)^{-1}A^Tb - d\big]$$

Замечание: докажем, что если $CC^T \succ 0$ и $M\succ 0$, то $CMC^T\succ 0$. Для матрицы M справедливо $M = QQ^T$, где $\det Q\neq 0$. Пусть $x^TCMC^Tx = 0$, тогда $\|Q^TC^Tx\|^2 = 0$. Q невырождена, поэтому $C^Tx = 0$. Матрица C^T имеет полный столбцовый ранг, поэтому $x = 0$.

В нашем случае $M = (A^TA)^{-1}$, поэтому от матрицы $C(A^TA)^{-1}A$ можно взять обратную.

Подставляем обратно в x и получаем решение прямой задачи:

$$x^* = \frac{1}{2}(A^TA)^{-1}\big(2A^Tb - C^T\lambda^*\big)$$

(c) Решением двойственной задачи как раз и будет то λ^*, которое мы нашли по ходу в предыдущем пункте. Объясним это.

Если подставить $x(\lambda)$ из (1) в лагранжиан, то мы получим двойственную задачу:

$$g(\lambda) = L(x(\lambda),\lambda) \longrightarrow \max_{\lambda\in\mathbb{R}^k}$$

Ее решение находится дифференцированием:

$$\sum_{j=1}^n \frac{\partial L}{\partial x_i}\frac{dx_i}{d\lambda} + \frac{\partial L}{\partial\lambda} = 0 \tag{2}$$

Вспомним, что λ^* было решением системы уравнений из ККТ: $\dfrac{\partial L}{\partial x} = 0,\ \ \dfrac{\partial L}{\partial\lambda} = 0$. При подстановке λ^* в уравнение (2) все слагаемые обращаются в 0, поэтому λ^* — решение двойственной задачи.

Задача 8

Для задачи ($s, y \in \mathbb{R}^n,\ y^T s = 1$)

$$\begin{cases} \operatorname{tr} X - \log\det X \longrightarrow \min\limits_{X \in \mathbb{S}^n_{++}}, \\ Xs = y. \end{cases}$$

(a) выписать условия Каруша-Куна-Таккера;

(b) доказать, что решением является матрица

$$X^* = I + yy^T - \frac{1}{s^T s} ss^T.$$

Решение: (source: "Convex optimization", Boyd, ex. 5.30)

Как известно, функция $f(X) = \log\det X$ вогнута на $\mathbb{S}^n_{++}$ (см. "Convex optimization", Boyd, §3, пример 3.1.5), и градиент имеет вид $\dfrac{df}{dX} = X^{-T}$.

(a) Задача выпукла, и выполнено условие регулярности Слейтера, поэтому условия ККТ — критерий глобального минимума.

$$L(X, \lambda) = \operatorname{tr} X - \log\det X + \lambda^T (Xs - y), \qquad X \in \mathbb{S}^n_{++},\ \lambda \in \mathbb{R}^n$$

Заметим, что при $X \in \mathbb{S}^n_{++}$ лагранжиан записывается неоднозначно, так как, например:

$$\lambda^T X s = \sum_{i,j=1}^{n} \lambda_i x_{ij} s_j = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i x_{ii} s_i + \sum_{i<j} (\lambda_i s_j + \lambda_j s_i) x_{ij} = \dots$$

Поэтому градиент тоже неоднозначен (это целое линейное подпространство). В условии ККТ ниже:

$$X^{-1} - I = \nabla_X(\lambda^T X s) \qquad \Longrightarrow \qquad \nabla_X(\lambda^T X s) \text{ — симметричная матрица}$$

Запишем его в виде: $\nabla_X(\lambda^T X s) = \frac{1}{2}(\lambda s^T + s\lambda^T)$.

Условия ККТ:

$$\begin{cases} I - X^{-1} + \dfrac{1}{2}(\lambda s^T + s\lambda^T) = 0, \qquad X \in \mathbb{S}^n_{++} \\ Xs = y \end{cases}$$

(b) Первое уравнение умножим скалярно на y. Тогда, учитывая, что $s^T y = 1$ и $s = X^{-1} y$ из второго равенства:

$$s = y + \frac{1}{2}(\lambda + s\lambda^T y) \tag{1}$$

Еще раз умножим на y:

$$1 = y^T y + \lambda^T y \qquad \overset{(1)}{\Longrightarrow} \qquad \lambda = -2y + (1 + y^T y)s$$

Тогда

$$X^{-1} = I + (1 + y^T y) ss^T - ys^T - sy^T$$

Несложно убедиться, просто раскрыв скобки, что $X^{-1} X^* = I$, то есть решением является

$$X^* = I + yy^T - \frac{ss^T}{s^T s}$$

Осталось показать, что $X^* \in \mathbb{S}^n_{++}$. Симметричность тривиальна, а для положительной определенности достаточно рассмотреть разложение

$$X^* = QQ^T, \quad \text{где} \quad Q = I + \frac{ys^T}{\sqrt{s^T s}} - \frac{ss^T}{s^T s}$$

Задача 9

Пусть дана выпуклая задача оптимизации

$$\begin{cases} f_0(x) \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}, \\ f_i(x) \le 0, \qquad i = \overline{1,n}. \end{cases}$$

и векторы $x^* \in \mathbb{R}^n,\ \mu^* \in \mathbb{R}^m$ удовлетворяют условиям ККТ. Доказать, что

$$\nabla f_0(x^*)^T (x - x^*) \ge 0$$

для всех допустимых точек x.

Решение:

Выпишем условия ККТ:

$$\begin{cases} \nabla f_0(x^*) + \sum\limits_{j=1}^{n} \mu_j^* \nabla f_j(x^*) = 0 \\ \mu \ge 0 \\ \mu_j f_j(x^*) = 0, \qquad j = \overline{1,n} \\ f_j(x^*) \le 0, \qquad j = \overline{1,n} \end{cases}$$

Пусть x лежит в допустимом множестве. Тогда

$$\nabla f_0(x^*)^T (x - x^*) = \Big/ \begin{matrix} \text{первое} \\ \text{условие} \end{matrix} \Big/ = -\sum_{j=1}^{n} \mu_j^* \nabla f_j(x^*)^T (x - x^*) \ge \Big/ \begin{matrix} \mu_j^* f_j(x) \le 0 \\ \mu_j^* f_j(x^*) = 0 \end{matrix} \Big/ \ge$$

$$\ge \sum_{j=1}^{n} \mu_j^* f_j(x) - \sum_{j=1}^{n} \mu_j^* f_j(x^*) - \sum_{j=1}^{n} \mu_j^* \nabla f_j(x^*)^T (x - x^*) = \sum_{j=1}^{n} \mu_j^* \Big[f_j(x) - f_j(x^*) - \nabla f_j(x^*)^T (x - x^*) \Big] \ge$$

$$\ge \Big/ \begin{matrix} \text{критерий выпуклости} \\ \text{функции } f_j \end{matrix} \Big/ \ge 0$$

2 Duality

2.1 Построение двойственной задачи

Опр. Функция $f : \mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$ называется *собственной*, если f не принимает значения $-\infty$ и $f \not\equiv +\infty$.

Рассматривается задача оптимизации (*primal problem*) собственной функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$:

$$\begin{cases} f(x) \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} \\ g_i(x) \le 0, \qquad i = \overline{1, m} \\ h_j(x) = 0, \qquad j = \overline{1, p} \end{cases} \qquad \Longleftrightarrow \qquad f(x) \longrightarrow \min_{x \in S}, \tag{P}$$

где множество S задается ограничениями. Оптимальное значение этой задачи будем обозначать p^*.

Ей соответствует лагранжиан

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j h_j(x) + \sum_{i=1}^{m} \mu_i g_i(x)$$

Обозначим

$$F(x) = \max_{\substack{\lambda \in \mathbb{R}^p \\ \mu \in \mathbb{R}^m_+}} L(x, \lambda, \mu) = \begin{cases} f(x), & x \in S; \\ +\infty, & x \notin S. \end{cases}$$

Второе равенство легко доказывается.

Часто в качестве нотации вместо sup и inf используется max и min, но подразумеваются верхняя и нижняя грани соответственно.

Тогда исходную задачу можно записать в виде:

$$f(x) \longrightarrow \min_{x \in S} \qquad \Longleftrightarrow \qquad F(x) \longrightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$

Опр. *Двойственной функцией (dual function)* к задаче (P) называется функция $g : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^m_+ \to \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$

$$g(\lambda, \mu) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \lambda, \mu)$$

Не стоит путать понятия сопряженной функции и двойственной функции.

Несложно видеть, что

$$g(\lambda, \mu) \le L(x, \lambda, \mu) \le F(x) \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n,\ \lambda \in \mathbb{R}^p,\ \mu \in \mathbb{R}^m_+,$$

поэтому

$$\max_{\substack{\lambda \in \mathbb{R}^p \\ \mu \in \mathbb{R}^m_+}} g(\lambda, \mu) \le \min_{x \in \mathbb{R}^n} F(x) = \min_{x \in S} f(x) \tag{1}$$

Опр. *Двойственной задачей (dual problem)* к задаче (P) называется задача

$$\begin{cases} g(\lambda, \mu) \longrightarrow \max \\ \mu_i \ge 0, \qquad i = \overline{1, m} \end{cases} \tag{D}$$

Оптимальное значение задачи (D) будем обозначать d^*.

Опр. Говорят, что в задаче (P) присутствует *слабая двойственность (weak duality)*, если $d^* \le p^*$.

Из (1) следует, что слабая двойственность есть всегда.

Опр. Говорят, что в задаче (P) присутствует *сильная двойственность (strong duality)*, если $d^* = p^*$.

Сильная двойственность есть не всегда, однако есть некоторые достаточные условия, гарантирующие ее наличие.

Опр. Разница $p^* - d^*$ называется *разрывом двойственности (duality gap)*.

Условие Слейтера.

В задаче (P) есть сильная двойственность, если (P) — выпуклая задача и $\mathrm{relint}(S) \neq \varnothing$, т.е.

$$\exists \widetilde{x} \in \mathbb{R}^n : \quad g_i(\widetilde{x}) < 0$$

2.2 Связь двойственной задачи и условий ККТ

Рассмотрим выпуклую задачу, для которой выполнено условие Слейтера

$$\begin{cases} f(x) \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} \\ g_i(x) \le 0, \qquad i = \overline{1, m} \\ Ax = b. \end{cases}$$

Для нее условия Каруша-Куна-Таккера являются необходимыми и достаточными условиями глобального минимума, и наблюдается сильная двойственность.

При таких условиях точки x^*, λ^*, μ^* — решение системы из условий ККТ тогда и только тогда, когда

- x^* — точка оптимума прямой задачи;
- (λ^*, μ^*) — точка оптимума двойственной задачи.

2.3 Теорема Фенхеля-Рокафеллара

Рассмотрим задачу оптимизации

$$f(x) + g(Ax) \longrightarrow \min_{x \in E \cap A^{-1}(G)},$$

$$\begin{tikzcd} \mathbb{R}^n \arrow[rr, "A"] & & \mathbb{R}^m \\ \cup & & \cup \\ E \arrow[dr, "f"] & & G \arrow[dl, "g"'] \\ & \mathbb{R} & \end{tikzcd}$$

где $x \in \mathbb{R}^n$, а $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ — матрица линейного отображения из $\mathbb{R}^n$ в $\mathbb{R}^m$.

Эквивалентная задача:

$$\begin{cases} f(x) + g(y) \longrightarrow \min \\ Ax = y \end{cases} \qquad (*)$$

Можно считать, что f и g равны $+\infty$ вне множеств E и G соответственно, то есть $E = \operatorname{dom} f,\ G = \operatorname{dom} g$.

Лагранжиан:

$$L(x, y, \lambda) = f(x) + g(y) + \lambda^T(Ax - y)$$

Несложно видеть, что двойственная функция выражается через сопряженные:

$$g_d(\lambda) = -f^*(-A^T\lambda) - g^*(\lambda)$$

Тогда задача, двойственная к $(*)$ имеет вид

$$-f^*(-A^T\lambda) - g^*(\lambda) \longrightarrow \max_{\lambda \in \mathbb{R}^m}$$

Теорема Фенхеля-Рокафеллара.

1. Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}},\ g : \mathbb{R}^m \to \overline{\mathbb{R}}$ — собственные функции, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, а p^* и d^* — значения оптимумов прямой и двойственной задач:

$$p^* = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \big[f(x) + g(Ax)\big], \qquad d^* = \max_{\lambda \in \mathbb{R}^m} \big[-f^*(-A^T\lambda) - g^*(\lambda)\big]$$

   Тогда $p^* \ge d^*$. (Это мы доказали, построив двойственную задачу.)

2. Кроме того, пусть функции f и g выпуклы, и $A(\operatorname{relint} E) \cap \operatorname{relint} G \ne \varnothing$. Тогда $p^* = d^*$.
   При этом, если $p^* = d^* < +\infty$, то точки x^* и λ^* являются точками оптимума тогда и только тогда, когда

$$-A^T\lambda^* \in \partial f(x^*), \qquad \lambda^* \in \partial g(Ax^*)$$

2.4 Задачи линейного программирования

Форма задачи линейного программирования	Прямая задача (P)	Двойственная задача (D)
нормальная	$\begin{cases} c^T x \longrightarrow \min \\ Ax \geq b \\ x \geq 0 \end{cases}$	$\begin{cases} y^T b \to \max \\ y^T A \leq c^T \\ y^T \geq 0 \end{cases}$
общая	$\begin{cases} c^T x \longrightarrow \min \\ Ax \geq b \end{cases}$	$\begin{cases} y^T b \to \max \\ y^T A = c^T \\ y^T \geq 0 \end{cases}$
каноническая	$\begin{cases} c^T x \longrightarrow \min \\ Ax = b \\ x \geq 0 \end{cases}$	$\begin{cases} y^T b \to \max \\ y^T A \leq c^T \end{cases}$

Задачу линейного программирования (ЛП) в одной форме можно свести к другой, то есть все три формы эквивалентны.

Везде подразумевается, что заданы столбцы $c \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$ и матрица $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, а оптимум ищется по векторам $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$.

Теорема о двойственности.

1. Для оптимальных значений прямой и двойственной задач линейного программирования возможны следующие 4 случая:

	1	2	3	4
значение (P)	c	$\varnothing$	$-\infty$	$\varnothing$
значение (D)	c	$+\infty$	$\varnothing$	$\varnothing$

   где $c \in \mathbb{R}$, а $\varnothing$ означает, что допустимое множество задачи пусто.

2. Пусть $\widehat{x}$ и $\widehat{y}^T$ — допустимые точки задач (P) и (D). Тогда

$$\left.\begin{array}{r} \widehat{x} \text{ — решение } (P) \\ \widehat{y}^T \text{ — решение } (D) \end{array}\right\} \qquad \Longleftrightarrow \qquad c^T \widehat{x} = \widehat{y}^T b$$

То есть если значение хотя бы одной из задач (P) или (D) конечно, то значения обоих задач конечны и совпадают, то есть присутствует сильная двойственность.

Теорема о двойственности верна для задач линейного программирования в любой форме.

Задача 1

Выразить двойственную задачу к задаче ($c \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$, f— произвольная функция)

$$\begin{cases} c^T x \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}, \\ f(x) \leq 0. \end{cases}$$

через сопряженную функцию f^* и доказать, что двойственная задача выпукла.

Решение:

$$L(x, \mu) = c^T x + \mu f(x), \qquad \mu \in \mathbb{R}$$

Двойственная функция при $\mu \neq 0$:

$$g(\mu) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \mu) = -\sup_{x \in \mathbb{R}^n} \big(-c^T x - \mu f(x) \big) = -\mu \sup_{x \in \mathbb{R}^n} \left[\left\langle -\frac{c}{\mu}, x \right\rangle - f(x) \right] = -\mu f^* \left(-\frac{c}{\mu} \right)$$

При $\mu = 0$: $g(0) = \inf\limits_{x \in \mathbb{R}^n} c^T x = -\infty$.

Тогда двойственная задача:

$$\begin{cases} -\mu \, f^* \left(-\dfrac{c}{\mu} \right) \longrightarrow \max\limits_{\mu \in \mathbb{R}} \\ \mu > 0 \end{cases}$$

Сопряженная функция всегда выпукла, поэтому при $\mu > 0$ целевая функция вогнута. Так как в ней ищется максимум, то задачу можно считать выпуклой.

Задача 2

Для задачи (minimum volume covering ellipsoid) ($a_1, \ldots, a_n \in \mathbb{R}^n$ — линейно независимы)

$$\begin{cases} \log\det X^{-1} \longrightarrow \min\limits_{X \in \mathbb{S}^n_{++}}, \\ a_i^T X a_i \leq 1, \qquad i = \overline{1, n}. \end{cases}$$

(1) построить лагранжиан;

(2) построить двойственную функцию;

(3) построить двойственную задачу;

(4) проверить сильную двойственность;

(5) найти решение двойственной задачи.

Решение:

(1) Лагранжиан:

$$L(X, \mu) = \log\det X^{-1} + \sum_{i=1}^{n} \mu_i \big(a_i^T X a_i - 1 \big), \qquad \mu \in \mathbb{R}^n$$

(2) Двойственной к целевой функции $f(X)$ является функция: ("Convex optimization", Boyd, p. 92, ex. 3.23)

$$f^*(Y) = \begin{cases} -\log\det(-Y) - n & , \ Y \in -\mathbb{S}^n_{++} \\ +\infty & , \ \text{иначе} \end{cases}$$

Находили ее в прошлом ДЗ.

Заметим, что условия-неравенства являются аффинными:

$$a_i^T X a_i \leq 1 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathrm{tr}\big((a_i a_i^T) X \big) = \langle a_i a_i^T, X \rangle \leq 1$$

Обозначим $A_i = a_i a_i^T$. Тогда двойственная функция:

$$g(\mu) = \inf_{X \in \mathbb{S}^n_{++}} \left(f(X) + \sum_{i=1}^n \mu_i \big(\langle A_i, X \rangle - 1 \big) \right) = -\sum_{i=1}^n \mu_i - \sup_{X \in \mathbb{S}^n_{++}} \left(\left\langle -\sum_{i=1}^n \mu_i A_i, X \right\rangle - f(X) \right) =$$

$$= -1^T \mu - f^* \left(-\sum_{i=1}^n \mu_i A_i \right)$$

Подставляем сопряженную функцию:

$$g(\mu) = \begin{cases} \log\det \left(\sum\limits_{i=1}^n \mu_i a_i a_i^T \right) + n - 1^T \mu &, \ \sum_{i=1}^n \mu_i a_i a_i^T \succ 0 \\ -\infty &, \ \text{иначе} \end{cases}$$

(3) Двойственная задача:

$$\begin{cases} \log\det \left(\sum\limits_{i=1}^n \mu_i a_i a_i^T \right) + n - 1^T \mu \longrightarrow \max\limits_{\mu \in \mathbb{R}^n} \\ \sum\limits_{i=1}^n \mu_i a_i a_i^T \succ 0 \\ \mu \geq 0 \end{cases}$$

(4) Задача является выпуклой, так как целевая функция $f(X) = -\log\det X$ выпукла на $\mathbb{S}^n_{++}$, а ограничения-неравенства аффинны. Покажем, что выполнено условие Слейтера. Найдем матрицу, которая строго удовлетворяет всем неравенствам:

$$X = \delta I \qquad \Longrightarrow \qquad \delta \cdot a_i^T a_i < 1 \quad \forall i = \overline{1, n}$$

Тогда подойдет

$$\delta = \frac{1}{2} \min_i \frac{1}{\|a_i\|_2^2}$$

Значит, в задаче есть сильная двойственность.

Задача 3

Рассматривается задача (f_0 — выпукла и дифференцируема, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \leq n$, $\operatorname{rg} A = m$)

$$\begin{cases} f_0(x) \longrightarrow \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n}, \\ Ax = b. \end{cases}$$

Для нахождения ее приближенного решения рассматривается функция

$$\varphi(x) = f_0(x) + \alpha \big\| Ax - b \big\|_2^2, \qquad \alpha > 0 \text{ — параметр}$$

Интуитивно понятно, что чем больше α, тем ближе точка минимума $\varphi(x)$ к решению исходной задачи.

Пусть $\widetilde{x}$ — точка минимума $\varphi(x)$.

(a) Зная $\widetilde{x}$, найти какую-нибудь допустимую точку $\widetilde{\lambda}$ двойственной (к исходной) задачи.

(b) Получить соответствующую $\widetilde{\lambda}$ верхнюю оценку на решение p^* исходной задачи.

Решение:

(a) Пусть $\widetilde{x}$ — точка минимума $\varphi(x)$. Так как $\varphi(x)$ дифференцируема, то тогда

$$\nabla \varphi(\widetilde{x}) = \nabla f_0(\widetilde{x}) + \alpha \cdot 2A^T (A\widetilde{x} - b) = 0 \qquad (*)$$

Лагранжиан исходной задачи

$$L(x, \lambda) = f_0(x) + \lambda^T (Ax - b), \qquad \lambda \in \mathbb{R}^m$$

Условие минимума из ККТ:

$$\nabla_x L(x, \lambda) = \nabla f_0(x) + A^T\lambda = 0 \tag{$**$}$$

Если нам известно $\widetilde{x}$, удовлетворяющее условию $(*)$, то решением этого уравнения будет

$$\widetilde{\lambda} = 2\alpha(A\widetilde{x} - b)$$

(b) Теперь поймем, как это поможет сделать нижнюю оценку решения исходной задачи. Запишем двойственную функцию:

$$g(\lambda) = \inf_{x\in\mathbb{R}^n} \left[f_0(x) + \lambda^T(Ax - b)\right]$$

Тогда мы можем вычислить

$$g(\widetilde{\lambda}) = \inf_{x\in\mathbb{R}^n} \left[f_0(x) + 2\alpha(A\widetilde{x} - b)^T(Ax - b)\right] = f_0(\widetilde{x}) + 2\alpha\|A\widetilde{x} - b\|_2^2$$

так если приравнять градиент к нулю, то как раз получится уравнение $(*)$.

Отсюда получаем нижнюю оценку:

$$\forall x : (Ax = b) \quad \to \quad f_0(x) \geq g(\widetilde{\lambda}) = f_0(\widetilde{x}) + 2\alpha\|A\widetilde{x} - b\|_2^2$$

В задаче 7 первой части нужно было показать, что $\widetilde{\lambda}$, удовлетворяющее условиям ККТ, является решением двойственной задачи, однако здесь это не так. Дело в том, что в условиях ККТ, кроме условия $(**)$, есть еще условие $Ax = b$. Но точка $\widetilde{x}$ не удовлетворяет ему в общем случае, поэтому $\widetilde{\lambda}$ — не решение всей системы условий ККТ.

Задача 4

Построить задачу, двойственную к задаче

$$-\sum_{i=1}^{m} \log(b_i - a_i^T x) \longrightarrow \min_{x\in\mathbb{R}^n}$$

при $Ax < b$, где a_i — столбцы матрицы $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$.

Решение этой задачи называется *аналитическим центром* системы неравенств $Ax \leq b$.

Решение:

Запишем эквивалентную задачу:

$$\begin{cases} -\sum\limits_{i=1}^{m} \log y_i \longrightarrow \min\limits_{\substack{y\in\mathbb{R}^m_{++}\\ x\in\mathbb{R}^n}} \\ y = b - Ax \end{cases}$$

Лагранжиан:

$$L(x, y, \lambda) = -\sum_{i=1}^{m} \log y_i + \lambda^T(y + Ax - b), \qquad \lambda \in \mathbb{R}^m$$

Двойственная функция — инфимум лагранжиана по x и y. Если $\lambda^T A \neq 0$, то можно выбирать такие x, что $L \to -\infty$. Аналогично, если существует $\lambda_j \leq 0$, то можно устремить $L \to -\infty$.

Если $A^T\lambda = 0$ и $\lambda > 0$, то найдем минимум, взяв градиент:

$$-\frac{1}{y_i} + \lambda_i = 0 \qquad \forall i = \overline{1, n} \qquad \Longrightarrow \qquad y_i = \frac{1}{\lambda_i}$$

Итак,

$$g(\lambda) = \begin{cases} \sum_{i=1}^{m} \log\lambda_i + m - \lambda^T b & , \ A^T\lambda = 0, \ \lambda > 0 \\ -\infty & , \ \text{иначе} \end{cases}$$

Отсюда двойственная задача:

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{m} \log\lambda_i + m - \lambda^T b \longrightarrow \max\limits_{\lambda\in\mathbb{R}^m_{++}} \\ A^T\lambda = 0 \end{cases}$$

3 Maximum likelihood estimation

3.1 Постановка задачи

Дано: выборка $x_1, \ldots, x_m$ — независимые измерения случайного вектора $X \in \mathbb{R}^n$.

Задача: найти распределение случайного вектора X.

Сначала делается общая гипотеза о том, распределение какого класса имеет случайный вектор X. То есть мы предполагаем, что X имеет плотность распределения $p(x \mid \theta)$, где $\theta \in \mathbb{R}^k$ — набор параметров.

Например, мы можем предположить, что X имеет нормальное распределение. Тогда $\theta = (\mu, \sigma)$ и

$$p(x \mid \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Найдем такие параметры θ^*, что вероятность исходной выборки при $\theta = \theta^*$ максимальна. В этом и заключается суть метода максимального правдоподобия.

Опр. *Функцией правдоподобия (likelihood function)* называется вероятность исходной выборки:

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^{m} p(x_i \mid \theta)$$

Почти всегда удобно перейти к логарифму этой функции, и иногда именно его называют функцией правдоподобия.

Опр. *Функцией правдоподобия (log-likelihood function)* называется

$$L(\theta) = \log \prod_{i=1}^{m} p(x_i \mid \theta) = \sum_{i=1}^{m} \log\, p(x_i \mid \theta)$$

Тогда оптимальные параметры:

$$\theta^* = \arg\max_{\theta} L(\theta) = \arg\max_{\theta} \sum_{i=1}^{m} \log\, p(x_i \mid \theta)$$

Находить их можно, например, приравняв градиент функции правдоподобия к нулю: $\nabla_\theta L(\theta^*) = 0$.

3.2 Линейная регрессия

Дано: точки $a_1, \ldots, a_m \in \mathbb{R}^n$ $(m > n)$ и измерения $b_1, \ldots, b_m \in \mathbb{R}$ в этих точках.

Задача: найти наилучшее линейное приближение $b \approx \theta^T A$, где матрица $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ имеет строки a_i, а $\theta \in \mathbb{R}^n$ — вектор параметров.

Если в модель хочется добавить смещение: $b \approx \theta^T A + \theta_0$, то можно добавить еще одну величину $a_{m+1} = 1$, всегда равную единице. Тогда задача сведется к описанному выше случаю.

Рассмотрим два способа решения этой задачи.

1. Метод наименьших квадратов

Предположим, что слово “наилучшее” означает, что сумма квадратов отклонений наименьшая. Тогда можно сформулировать задачу оптимизации:

$$\sum_{i=1}^{m} (\theta^T a_i - b_i)^2 = \left\|\theta^T A - b\right\|_2^2 \longrightarrow \min_{\theta}$$

В случае полноранговой матрицы A, приравнивая градиент по θ к нулю, получаем, что решение задается псевдобратной матрицей:

$$\theta^* = (A^T)^\dagger b^T = A(A^T A)^{-1} b^T$$

2. Метод максимального правдоподобия

Сделаем гипотезу, что измерения b_i не просто зависят линейно от a_i, но и имеют некоторый шум ξ_i:

$$b_i = \theta^T a_i + \xi_i$$

Предположим, что ξ_i — независимые значения одной и той же случайной величины $\xi \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, то есть что шум нормальный:

$$p(x \mid \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

Таким образом, функция правдоподобия:

$$L(\theta, \sigma) = \sum_{i=1}^{m} p(\xi_i \mid \sigma) = \sum_{i=1}^{m} p(b_i - \theta^T a_i \mid \sigma) = -\frac{m}{2}\ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{m}(b_i - \theta^T a_i)^2$$

Заметим, что в этом примере параметры θ является параметрами распределения, но все равно входят в функцию правдоподобия.

Максимизация этой функции по θ равносильна минимизации $\|b - \theta^T A\|_2^2$, что как раз и есть метод наименьших квадратов.

Итак, мы показали, что следующие два подхода эквивалентны:

- искать такие параметры θ^*, что сумма квадратов отклонений минимальна;
- искать такие параметры θ^*, что невязки ξ_i как можно лучше описываются нормальным распределением.

Аналогичным образом, можно показать, что эквивалентны следующие подходы:

- искать такие параметры θ^*, что сумма модулей отклонений минимальна;
- искать такие параметры θ^*, что невязки ξ_i как можно лучше описываются распределением Лапласа.

3.3 Логистическая регрессия

Решается задача бинарной классификации.

Дано: точки (векторы признаков) $x_1, \ldots, x_m \in \mathbb{R}^n$ и значения $y_1, \ldots, y_m \in \{0, 1\}$ бинарной функции в этих точках.

Задача: построить функцию $\varphi : \mathbb{R}^n \to [0, 1]$, которая по набору признаков x будет давать вероятность $\varphi(x)$ того, что $y = 1$.

Предположим, что вероятность того, что $y = 1$ подчиняется *логистической функции* или *сигмоиде*:

$$\mathbb{P}\{y = 1 \mid x\} = \sigma(u) = \frac{1}{1 + e^{-u}},$$

где $u = u(x) \in \mathbb{R}$ — некоторая величина, характеризующая выборку. В логистической регрессии, как в линейной регрессии, используется линейная комбинация:

$$u = \theta_0 + \theta_1 x^{(1)} + \ldots + \theta_n x^{(n)} = \theta_0 + \theta^T x$$

Таким образом:

$$\mathbb{P}\{y = 1 \mid x\} = \sigma\big(\theta^T x\big), \qquad \mathbb{P}\{y = 0 \mid x\} = 1 - \sigma\big(\theta^T x\big)$$

Здесь и далее будем без ограничения общности опускать коэффициент θ_0.

Можно записать компактно:

$$\mathbb{P}\{y \mid x\} = \big[\sigma(\theta^T x)\big]^y \cdot \big[1 - \sigma(\theta^T x)\big]^{1-y}, \qquad y \in \{0, 1\}$$

Задача сводится к тому, что найти наилучшие коэффициенты θ. Найдем их *методом максимального правдоподобия*:

$$\prod_{i=1}^{m} \mathbb{P}\{y = y_i \mid x_i\} \longrightarrow \max_{\theta}$$

Функция правдоподобия:

$$L(\theta) = \sum_{i=1}^{m} \ln \mathbb{P}\{y = y_i \mid x_i\} = \sum_{i=1}^{m} \Big[y_i \ln \sigma(\theta^T x_i) + (1 - y_i) \ln \big(1 - \sigma(\theta^T x_i)\big) \Big] \longrightarrow \max_{\theta}$$

Можно упростить это выражение. Распишем $\sigma(u) = \dfrac{e^u}{1 + e^u}$, $1 - \sigma(u) = \dfrac{1}{1 + e^u}$, и тогда

$$L(\theta) = \sum_{i=1}^{m} \Big[y_i \big(u_i - \ln(1 + e^{u_i})\big) - (1 - y_i) \ln(1 + e^{u_i}) \Big] = \sum_{i=1}^{m} \Big[y_i \cdot \theta^T x_i - \ln \big(1 + \exp(\theta^T x_i)\big) \Big] \longrightarrow \max_{\theta}$$

Максимизация функции правдоподобия эквивалентна минимизации *логистической функции ошибки (log-loss function)*, это частный случай функции *кросс-энтропии* при числе классов $M = 2$:

$$\text{Log\_loss}(y, p) = -\sum_{i=1}^{m} \Big[y_i \ln p_i + (1 - y_i) \ln(1 - p_i) \Big] \longrightarrow \min_{\theta},$$

где $p_i = \sigma(\theta^T x_i)$ — предсказываемые моделью вероятности, y_i — реальные значения.

Ясно, что бинарная энтропия достигает минимума, когда все $p_i = y_i$, но в логистической регрессии мы ищем их в особом виде, зависящем от коэффициентов θ, поэтому оптимальные значения будут другими:

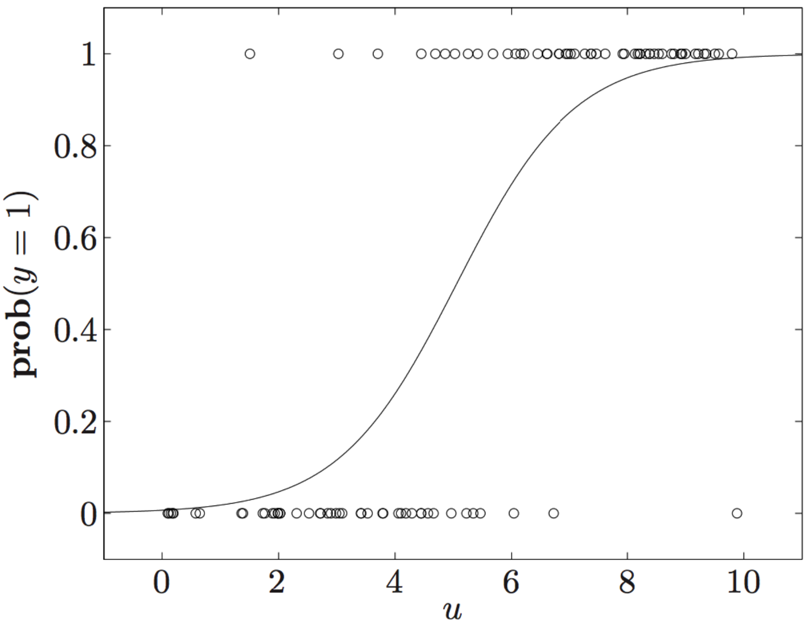

Иллюстрация из книги “Convex optimization”, Boyd, §7.1.1.

Кружочками отмечены реальные пары (u_i, y_i) из выборки, где $u = \theta^T x$, при этом параметры θ выбраны оптимальными. На графике также изображена сигмоида. Ее значение в каждой точке $\sigma(u_i) = p_i$ — предсказываемые моделью вероятности.

Итак, конечной моделью будет

$$\varphi(x) = \sigma(\theta^T x) = \frac{1}{1 + \exp(-\theta^T x)}.$$