

Μέθοδοι βελτιστοποίησης

Βελτιστοποίηση υπο περιορισμούς - *Gradient Schemes*

A. N. Γιαννακόπουλος

Ο.Π.Α

Εαρινό Εξάμηνο 2026

- 1 Βασικές έννοιες
- 2 *Primal Gradient Descent*
 - Εφαρμογή 1: Γραμμική παλινδρόμηση με περιορισμούς
 - Εφαρμογή 2: Επιλογή χαρτοφυλακίου
 - Εφαρμογή 3: Παλινδρομηση με περιορισμούς στο μέγεθος των συντελεστών του μοντέλου
- 3 Πολλαπλασιαστές *Lagrange* και συνθήκες *Kuhn – Tucker*
 - Εφαρμογή 1: Τετραγωνικός προγραμματισμος με περιορισμούς σε μορφή ισοτήτων
- 4 Δυικές μέθοδοι (*Duality methods*)
 - Εφαρμογή 1: *SVM* και τα δυικά του προβλήματα
- 5 *Sequential Quadratic Programming*
- 6 Μέθοδοι ποινικοποίησης (*Penalty methods*)

Βελτιστοποίηση υπο περιορισμούς

Έστω $f : D \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ μια συνάρτηση d -μεταβλητών.

Έστω $D_0 \subset D$ ένα υποσύνολο του $\mathbb{R}^d$.

Ορισμός

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης

$$\min_{x \in D_0} f(x)$$

ονομάζεται πρόβλημα βελτιστοποίησης της f υπο τον περιορισμό $x \in D_0$.

Παράδειγμα

Δίνεται η συνάρτηση $f(x) = (\sum_{i=1}^d (x_i - x_{i,0})^2)^{1/2}$ που εκφράζει την απόσταση του σημείου $x = (x_1, \dots, x_d)$ από το σημείο $x_0 = (x_{1,0}, \dots, x_{d,0})$ και έστω

$$D_0 = \{(x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d : x_1^2 + \dots + x_d^2 \leq 1\} =: B_1,$$

η μοναδιαία μπάλλα στον $\mathbb{R}^d$.

Έστω $x_0 \notin B_1$.

Το πρόβλημα

$$\min_{x \in B_1} f(x) = \min_{x \in B_1} \|x - x_0\|$$

είναι το πρόβλημα της προβολής του σημείου x_0 στην μοναδιαία μπάλλα.

Primal Gradient Descent

Μια γενική κατηγορία προβλημάτων βελτιστοποίησης κάτω από περιορισμούς είναι προβλήματα της μορφής

$$\min_{x \in C} f(x), \quad C \subset \mathbb{R}^d, \quad \text{κυρτό}$$

Παραδείγματα περιορισμών που μπορεί να εκφραστούν στην μορφή αυτή:

- Affine περιορισμοί:

$$Ax \leq b, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times d}, \quad b \in \mathbb{R}^{m \times 1}, \\ C := \{x \in \mathbb{R}^d : Ax = b\}$$

Περιορισμοί με την μορφή γραμμικών ισοτήτων μπορεί να εκφραστούν ως affine περιορισμοί π.χ.

$$Ax = b \iff Ax \leq b \text{ και } -Ax \leq -b$$

- Κυρτοί περιορισμοί με την μορφή ανισοτήτων

$$f_1(x) \leq 0, \dots, f_m(x) \leq 0, \quad f_i : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}, \quad \text{κυρτές}, \quad i = 1, \dots, m, \\ C := \{x \in \mathbb{R}^d : f_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m\}$$

Ο τελεστής προβολής σε κλειστά κυρτά $C \subset \mathbb{R}^d$

Στην θεωρία και την υπολοποίηση της βελτιστοποίησης κάτω απο περιορισμούς παίζει πολυ σημαντικό ρόλο η έννοια της προβολής.

Έστω $C \subset \mathbb{R}^d$ κλειστό και κυρτό υποσύνολο του $\mathbb{R}^d$ και $x \notin C$.

Μπορούμε να βρούμε το σημείο $x^* \in C$ που να απέχει την ελάχιστη απόσταση απο το $x \notin C$;

Το πρόβλημα αυτό μπορεί να γραφεί σαν το πρόβλημα βελτιστοποίησης

$$\min_{z \in C} \|z - x\|^2 \text{ ή ισοδύναμα } x^* \in \arg \min_{z \in C} \|z - x\|^2.$$

Η λύση του προβλήματος αυτού x^* ονομάζεται η προβολή του x στο C .

Θεώρημα

Αν $C \subset \mathbb{R}^d$ κλειστό και κυρτό τότε για κάθε $x \in \mathbb{R}^d$, $x \notin C$ το πρόβλημα $\min_{z \in C} \|z - x\|^2$ έχει μοναδική λύση x^* η οποία συμβολίζεται $x^* = P_C(x)$ και χαρακτηρίζεται απο την μεταβολική ανισότητα

$$\langle x - x^*, z - x^* \rangle \leq 0, \quad \forall z \in C.$$

Το παραπάνω πρόβλημα ορίζει μια μονοσημαντη απεικόνιση $P_C : \mathbb{R}^d \rightarrow C$ μέσω της σχέσης

$$P_C(x) = x^* = \arg \min_{z \in C} \|z - x\|^2,$$

που ονομάζεται **τελεστής προβολής στο C** .

Ο τελεστής προβολής έχει την ιδιότητα να είναι ψευδο-συστολή δηλαδή

$$\|P_C(x_1) - P_C(x_2)\| \leq \|x_1 - x_2\|, \quad \forall x_1, x_2 \in \mathbb{R}^d.$$

Η τελευταία ιδιότητα τον κάνει και πολύ χρήσιμο σαν εργαλείο για την αριθμητική επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης κάτω από περιορισμούς.

Στην περίπτωση που ο C είναι ένας κλειστός υπόχωρος E τότε η συνθήκη ορισμού για την προβολή απλοποιείται στην συνηθισμένη συνθήκη καθετότητας

$$\langle x - x^*, z - x^* \rangle = 0, \quad \forall z \in E.$$

Ο κάθετος κώνος του C

Με τον τελεστή προβολής συνδέεται και ο κάθετος κωνος (normal cone) του C

$$N_C(x) = \begin{cases} \emptyset & x \notin C \\ \{ w \in \mathbb{R}^d : \langle w, z - x \rangle \leq 0, \forall z \in C \} & x \in C \end{cases}$$

Η σύνδεση είναι προφανής απο το

$$x^* = P_C(x) \iff x - x^* \in N_C(x^*)$$

Αν $C = E$ γραμμικός υπόχωρος τότε $N_C(x) = E^\perp$.

Παράδειγμα: Τελεστής προβολής σε ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο

Η περίπτωση αυτή είναι ιδιαίτερα χρήσιμη για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης με περιορισμούς της μορφής

$$L_i \leq x_i \leq U_i, \quad i = 1, \dots, d \text{ box constraints.}$$

Το πρόβλημα αυτό αντιστοιχεί με ελαχιστοποίηση στο κυρτό σύνολο

$$C = [L_1, U_1] \times \dots \times [L_d, U_d] \subset \mathbb{R}^d$$

Έχουμε ότι

$$x = (x_1, \dots, x_d) \mapsto x^* = P_C(x) = (x_1^*, \dots, x_d^*)$$

$$x_i^* = (P_C(x))_i = \begin{cases} L_i & \text{αν } x_i < L_i, \\ x_i & \text{αν } L_i \leq x_i \leq U_i, \\ U_i & \text{αν } x_i > U_i, \end{cases}$$

Αν $C = \mathbb{R}_+^d$ τότε $P_C(x) = x^+ = \max(0, x)$.

Παράδειγμα: Τελεστής προβολής σε affine υποσυνολο

Η περίπτωση αυτή είναι πολύ χρήσιμη για την μελέτη προβλημάτων βελτιστοποίησης με affine περιορισμούς δηλ. περιορισμούς της μορφής $Ax = b$ που ισοδυναμούν με βελτιστοποίηση στο κυρτό συνολο

$$C = \{x \in \mathbb{R}^d : Ax = b\}$$

Στην περίπτωση αυτή ο τελεστής προβολής έχει την μορφη

$$P_C(x) = x - A^T(AA^T)^{-1}(Ax - b)$$

Παράδειγμα: Τελεστής προβολής στην μοναδιαία μπάλα του ℓ^2

Η περίπτωση αυτή είναι πολύ χρήσιμη για την μελέτη προβλημάτων βελτιστοποίησης με τετραγωνικούς περιορισμούς δηλ. περιορισμούς της μορφής $\|x\|_2 \leq 1$ που ισοδυναμούν με βελτιστοποίηση στο κυρτό συνολο

$$C = \{x \in \mathbb{R}^d : \|x\|_2^2 = x_1^2 + \dots + x_d^2 \leq 1\}$$

Στην περίπτωση αυτή ο τελεστής προβολής έχει την μορφή

$$P_C(x) = \frac{1}{\max\{1, \|x\|_2\}} x$$

Για την προβολή στην μπάλα ακτίνας a , δηλ στο

$$C = \{x \in \mathbb{R}^d : \|x\|_2^2 = x_1^2 + \dots + x_d^2 \leq a^2\}$$

ο τελεστής προβολής έχει την μορφή

$$P_C(x) = \frac{a}{\max\{a, \|x\|_2\}} x$$

Προβολή, κάθετος κώνος και βελτιστοποίηση υπο περιορισμούς

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης

$$x^* \in \arg \min_{x \in C} f(x), \quad C \subset \mathbb{R}^d \text{ κυρτό και κλειστό, } f \text{ κυρτή,}$$

μπορεί να επιλυθεί χρησιμοποιώντας τη συνθήκη πρώτης τάξης

$$\langle Df(x^*), x - x^* \rangle \geq 0, \quad \forall x \in C$$

Η συνθήκη αυτή είναι ισοδύναμη με την σχέση

$$-Df(x^*) \in N_C(x^*),$$

η οποία με τη σειρά της είναι ισοδύναμη με την

$$x^* = P_C(x^* - \alpha Df(x^*)), \quad \alpha > 0$$

Κατά συνέπεια

$$x^* \in \arg \min_{x \in C} f(x) \iff -Df(x^*) \in N_C(x^*) \iff x^* = P_C(x^* - \alpha Df(x^*)), \quad \alpha > 0$$

Η τελευταία σχέση μας οδηγεί σε ένα αριθμητικό σχήμα για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης υπο περιορισμούς

Projected gradient method

Η μεθοδος βαθμίδας με προβολή μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την αριθμητική επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης

$$\min_{x \in C} f(x), \quad C \text{ κλειστό και κυρτό, } f \in C^1$$

Αποτελεί τροποποίηση της μεθόδου της βαθμίδας στο σχήμα

$$x_{k+1} = P_C(x_k - a_k Df(x_k)), \quad a_k > 0,$$

Η χρήση του τελεστή προβολής P_C σε κάθε βήμα μας εξασφαλίζει ότι $x_k \in C$ για κάθε $k \in \mathbb{N}$.

Η μέθοδος αυτή είναι πολύ διαδεδομένη για προβλήματα με περιορισμούς τέτοιους ώστε ο τελεστής προβολής να είναι εύκολα υπολογίσιμος.

Η επιλογή του βήματος a_k μπορεί να γίνει είτε αυθαίρετα είτε με κάποιο μονοδιάστατο αλγόριθμο βελτιστοποίησης (backstepping).

Αλγόριθμος (Projected gradient method)

- ❶ Επιλέγουμε αρχικό σημείο x_0 και ακρίβεια $\epsilon > 0$
- ❷ Σε κάθε βήμα k μέχρι να ικανοποιηθεί κάποιο κριτήριο σύγκλισης:
- ❸ Επιλέγουμε την διεύθυνση $d_k = -Df(x_k)$ και ένα βήμα a_k .
- ❹ Θέτουμε

$$x_{k+1} = P_C(x_k - a_k Df(x_k))$$

Το βήμα a_k μπορεί να επιλεγεί

- Σταθερό και επαρκώς μικρό
- Μεταβαλλόμενο χρησιμοποιώντας κάποιο κριτήριο επαρκούς μείωσης της τιμής της συνάρτησης π.χ. το κριτήριο του Armijo
- Με βέλτιστο τρόπο χρησιμοποιώντας κάποιο σχήμα μονοδιάστασης βελτιστοποίησης.

Παραλλαγές

Μία δημοφιλής παραλλαγή είναι η μέθοδος projected gradient descent με χαλάρωση

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k + \gamma_k(z_k - x_k), \quad \gamma_k \in (0, 1] \\z_k &= P_C(x_k - a_k D(x_k)), \quad a_k > 0,\end{aligned}$$

Εφόσον $z_k \in C$ έχουμε ότι $x_{k+1} = (1 - \gamma_k)x_k + \gamma_k z_k \in C$ λόγω κυρτότητας οπότε το βήμα στην διεύθυνση $z_k - x_k$ είναι ένα εφικτό βήμα (feasible step).

Ένα σταθερό σημείο του σχήματος αυτού είναι και ελάχιστο της f στο C .

Προκαθορισμένα βήματα

Π1 Σταθερά βήματα:

$$\gamma_k = 1, \quad a_k = a > 0$$

Π2 Φθίνοντα βήματα:

$$\gamma_k = 1, \quad a_k \rightarrow 0, \quad \sum_{k=0}^{\infty} a_k = \infty.$$

Επιλογή βήματος με το κριτήριο του Armijo

A1 $\gamma_k = 1$:

Ένα πιθανό κριτήριο επιλογής του a_k μπορεί να είναι με διαδοχική μείωση του βάσει του κανόνα

$$a_k = \beta^{m_k} \bar{a}, \quad \bar{a} > 0, \quad \beta \in (0, 1)$$

με

$$m_k = \min\{m \in \mathbb{N} : f(x_k) - f(x_k(\beta^m \bar{a})) \geq \sigma \langle Df(x_k), x_k - x_k(\beta^m \bar{a}) \rangle, \\ x_k(\beta^m \bar{a}) = P_C(x_k - \beta^m \bar{a} Df(x_k))\}$$

A2 $a_k = a$:

Ένα πιθανό κριτήριο επιλογής του γ_k είναι με διαδοχική μείωση του βάσει του κανόνα

$$\gamma_k = \beta^{m_k}, \quad \beta \in (0, 1)$$

με

$$m_k = \min\{m \in \mathbb{N} : f(x_k) - f(x_k + \beta^m (z_k - x_k)) \geq -\sigma \beta^m \langle Df(x_k), z_k - x_k \rangle, \\ z_k = P_C(x_k - a Df(x_k))\}$$

Επιλογή βήματος με βελτιστοποίηση

B1 $\gamma_k = 1$:

Θέτουμε $x(\lambda) = P_C(x - \lambda Df(x_k))$ και επιλέγουμε το $a_k > 0$ έτσι ώστε

$$a_k = \arg \min_{\lambda > 0} f(P_C(x - \lambda Df(x_k)))$$

B2 $a_k = a$:

Επιλέγουμε γ_k έτσι ώστε

$$\begin{aligned} \gamma_k &= \arg \min_{\lambda > 0} f(x_k + \gamma(z_k - x_k)) \\ z_k &= P_C(x - a Df(x_k)) \end{aligned}$$

Σύγκλιση του projected gradient descent

Θεώρημα

Η ακολουθία $\{x_k\}$ που παράγεται απο την μέθοδο *projected gradient descent* έχει την ιδιότητα ότι κάθε σημείο συσσώρευσης της αντιστοιχεί σε κάποιο ελάχιστο αν τα βήματα επιλέγονται με κάποια απο τις παρακάτω μεθόδους

- ① Με τον κανόνα Armijo A2
- ② Με τον κανόνα B2
- ③ Με τον κανόνα Π1 αν η Df είναι συνεχής κατά Lipschitz με σταθερά Lipschitz L και $\alpha < 2/L$.
- ④ Με τον κανόνα Armijo A1

Εφαρμογή 1: Γραμμική παλινδρόμηση με περιορισμούς

Πολλές φορές χρειαζόμαστε να εκτιμήσουμε ένα γραμμικό μοντέλο κάτω απο περιορισμούς σχετικά με τις παραμέτρους του οι οποίοι προκύπτουν απο την φύση των μεταβλητών του και την ορθή ερμηνεία τους.

Π.χ. αν η μεταβλητή Y αντιστοιχεί στην τιμή ενός ακινήτου, και το χαρακτηριστικό X_1 αντιστοιχεί π.χ. στην απόσταση του απο τον πλησιέστερο σταθμό του μετρό, δεν περιμένουμε το χαρακτηριστικό αυτό να οδηγήσει σε μείωση της τιμής του ακινήτου συνεπώς ο συντελεστής w_1 που αντιστοιχεί στο χαρακτηριστικό αυτό θα πρέπει να ικανοποιεί $w_1 \geq 0$.

Αν το πρόβλημα

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d} \frac{1}{2n} \|\mathbf{D}w - y\|^2$$

οδηγεί σε μια λύση τέτοια ώστε $w_1 < 0$ τότε το μοντέλο που θα αντιστοιχεί στην λύση αυτή δεν θα είναι εφαρμόσιμο και μπορεί να μας οδηγήσει σε λανθασμένα συμπεράσματα.

Αναγκαζόμαστε λοιπόν να αντικαταστήσουμε το παραπάνω πρόβλημα με το πρόβλημα ελαχιστοποίησης υπο περιορισμούς

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d, w_1 \geq 0} \frac{1}{2n} \|\mathbf{D}w - y\|^2$$

Το πρόβλημα αυτό μπορεί να αντιμετωπιστεί σχετικά απλά με ένα projected gradient scheme



Η βαθμίδα της συνάρτησης $f(w) = \frac{1}{2n} \|\mathbf{D}w - y\|^2$ έχει υπολογιστεί σε προηγούμενα ως

$$Df(w) = \frac{1}{n} \mathbf{D}^T (\mathbf{D}w - y)$$

Η μέθοδος projected gradient για το συγκεκριμένο πρόβλημα γίνεται

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_{k+1} &= P_C(\mathbf{w}_k - \alpha Df(w_k)) \implies \\ \mathbf{w}_{k+1} &= P_C\left(\mathbf{w}_k - \alpha \frac{1}{n} \mathbf{D}^T (\mathbf{D}w - y)\right) \end{aligned}$$

όπου

$$\begin{aligned} C &= \{(w_1, \dots, w_d) \in \mathbb{R}^d, : w_1 \geq 0, \\ P_C(z) &= (z_1^+, z_2, \dots, z_d), \quad z = (z_1, z_2, \dots, z_d). \end{aligned}$$

Εφαρμογή 2: Επιλογή χαρτοφυλακίου

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε μια αγορά με N χρηματοοικονομικούς τίτλους (πχ. μετοχές ή ομόλογα) με αποδόσεις που περιγράφονται από τις τυχαίες μεταβλητές $X_1, \dots, X_N$.

Οι αποδόσεις των τίτλων ενδεχομένως να παρουσιάζουν συσχετισεις μεταξύ τους που περιγράφονται από τον πίνακα συνδιακύμανσης

$$S = (s_{ij} = \text{cov}(X_i, X_j)), \quad i, j, = 1, \dots, N$$

Οι μεσες αποδόσεις του καθε τίτλου συγκεντρώνονται στο διάνυσμα

$$M = (\mu_1, \dots, \mu_N) = (\mathbb{E}[X_1], \dots, \mathbb{E}[X_N])$$

Ένα χαρτοφυλάκιο είναι ένας συνδυασμός των τίτλων της αγοράς και εμφανίζει αποδόσεις της μορφής

$$X = w_1 X_1 + \dots + w_N X_N$$

Το πρόβλημα της εύρεσης του χαρτοφυλακίου που για δεδομένη απόδοση ελαχιστοποιεί τον κίνδυνο γραφεται σαν το πρόβλημα

$$\begin{aligned} \min_w \quad & \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s_{ij} w_i w_j, \\ & \sum_{i=1}^N \mu_i w_i = \mu, \\ & \sum_{n=1}^N w_i = 1 \end{aligned}$$

Το πρόβλημα αυτό είναι ισοδύναμο με το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης της τετραγωνικής συνάρτησης

$$f(w) := \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s_{ij} w_i w_j = \langle w, Sw \rangle$$

κάτω απο τους affine περιορισμούς

$$Aw = b,$$

$$A = \begin{pmatrix} \mu_1 & \dots & \mu_N \\ 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad w = \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_N \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} \mu \\ 1 \end{pmatrix}$$

Ορίζουμε το κυρτό σύνολο

$$C = \{w \in \mathbb{R}^d : Aw = b\} \subset \mathbb{R}^d$$

και θυμόμαστε ότι ο τελεστής προβολής για το C παίρνει την μορφή

$$P_C(w) = w - A^T(AA^T)^{-1}(Ax - b)$$

Μπορούμε ευκολα να υπολογίσουμε την βαθμίδα της f ως

$$Df(w) = Sw$$

οπότε το projected gradient scheme για το πρόβλημα του Markowitz θα είναι

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_{k+1} &= P_C(\mathbf{w}_k - \alpha Df(\mathbf{w}_k)) \implies \\ \mathbf{w}_{k+1} &= P_C C(\mathbf{w}_k - \alpha S\mathbf{w}_k) \end{aligned}$$

Θέτουμε

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{w}_k - \alpha S\mathbf{w}_k$$

και καταλήγουμε στο επαναληπτικό σχήμα

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_k &= \mathbf{w}_k - \alpha S\mathbf{w}_k, \\ \mathbf{w}_{k+1} &= \mathbf{z}_k - A^T(AA^T)^{-1}(A\mathbf{z}_k - b) \end{aligned}$$

Εφαρμογή 3: Παλινδρομηση με περιορισμούς στο μέγεθος των συντελεστών του μοντέλου

Πολλές φορές χρειαζόμαστε να εκτιμήσουμε ένα γραμμικό μοντέλο κάτω απο περιορισμούς σχετικά με το συνολικό μέγεθος των παραμέτρων του μοντέλου όπως αυτό π.χ. μπορεί να μετρηθεί απο την ευκλειδεια νόρμα των συντελεστών.

Αν το πρόβλημα

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d} \frac{1}{2n} \|\mathbf{D}w - y\|^2$$

οδηγήσει σε μια λύση τέτοια ώστε $\|w\|_2 > a$ για κάποιο επιλεγμένο $a > 0$ τότε το μοντέλο που θα αντιστοιχεί στην λύση αυτή δεν θα είναι εφαρμόσιμο και μπορεί να μας οδηγήσει σε λανθασμένα συμπεράσματα.

Αναγκαζόμαστε λοιπόν να αντικαταστήσουμε το παραπάνω πρόβλημα με το πρόβλημα ελαχιστοποίησης υπο περιορισμούς

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d, \|w\|_2 \leq a} \frac{1}{2n} \|\mathbf{D}w - y\|^2$$

Το πρόβλημα αυτό μπορεί να αντιμετωπιστεί σχετικά απλά με ένα projected gradient scheme

Όπως θα δούμε και αργότερα το πρόβλημα αυτό είναι συνδεδεμένο (μέσω δυσμού) με το ridge regression.

Η βαθμίδα της συνάρτησης $f(w) = \frac{1}{2n} \|\mathbf{D}w - y\|^2$ έχει υπολογιστεί σε προηγούμενα ως

$$Df(w) = \frac{1}{n} \mathbf{D}^T (\mathbf{D}w - y)$$

Η μέθοδος projected gradient για το συγκεκριμένο πρόβλημα γίνεται

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_{k+1} &= P_C(\mathbf{w}_k - \alpha Df(w_k)) \implies \\ \mathbf{w}_{k+1} &= P_C\left(\mathbf{w}_k - \alpha \frac{1}{n} \mathbf{D}^T (\mathbf{D}w - y)\right) \end{aligned}$$

όπου

$$\begin{aligned} C &= \{(w_1, \dots, w_d) \in \mathbb{R}^d, : \|w\|_2 \leq a, \\ P_C(z) &= \frac{a}{\max(a, \|z\|_2)} z, \quad z = (z_1, z_2, \dots, z_d). \end{aligned}$$

Παίρνουμε λοιπόν το επαναληπτικό σχήμα

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{w}_k - \alpha Df(w_k)$$
$$w_{k+1} = \frac{a}{\max(a, \|\mathbf{z}_k\|_2)} \mathbf{z}_k$$

Alternating Projection Method

Η alternating projection method είναι χρήσιμη αν θέλουμε να λύσουμε προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς της μορφής

$$\min_{x \in C_1 \cap C_2} \|x - x_0\|^2$$

όπου C_1, C_2 κυρτά σύνολα.

Η λύση του προβλήματος αυτού μας δίνει την προβολή στο σύνολο $C_1 \cap C_2$ δηλ. $x = P_{C_1 \cap C_2}(x_0)$.

Για να προσεγγίσουμε την λύση μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον επαναληπτικό αλγόριθμο

$$\begin{aligned} y_k &= P_{C_2}(x_k), \\ x_{k+1} &= P_{C_1}(y_k) \end{aligned}$$

- Αν $C_1 \cap C_2 \neq \emptyset$ τότε τόσο η ακολουθία $\{x_k\}$ όσο και η ακολουθία $\{y_k\}$ συγκλίνουν σε ένα σημείο $x^* \in C_1 \cap C_2$, υπο την έννοια ότι
 - $x_k \in C_1$ και $\text{dist}(x_k, C_2) \rightarrow 0$
 - $y_k \in C_2$ και $\text{dist}(y_k, C_1) \rightarrow 0$
- Αν $C_1 \cap C_2 = \emptyset$ και κάτω απο την υπόθεση ότι υπάρχουν σημεία στα C_1, C_2 για τα οποία η απόσταση $\text{dist}(C_1, C_2)$ επιτυγχάνεται τότε
 - $x_k \rightarrow x^* \in C_1$,
 - $y_k \rightarrow y^* \in C_2$,
 - και ισχύει $\|x^* - y^*\|^2 = \text{dist}(C_1, C_2)$

Παράδειγμα: Επίλυση γραμμικών ανισοτήτων

Ας υποθέσουμε ότι χρειαζομαστε να βρούμε ένα σημείο στον $\mathbb{R}^d$ που ικανοποιεί τις γραμμικές ανισότητες

$$\langle a_1, x \rangle \leq b_1,$$

...

$$\langle a_m, x \rangle \leq b_m$$

Γεωμετρικά αυτό αντιστοιχεί στο να βρούμε ένα σημείο $x \in \mathbb{R}^d$ που ανήκει στο κυρτό πολύεδρο $\mathcal{H}$ που ορίζουν οι παραπάνω ανισότητες.

Το πρόβλημα αυτό μπορεί να λυθεί με την χρήση της μεθόδου των alternating projections

Ορίζουμε τα κυρτά συνολα

$$\mathcal{H}_i = \{x \in \mathbb{R}^d : \langle a_i, x \rangle \leq b_i\}, \quad i = 1, \dots, m$$

και παρατηρούμε ότι

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \times \dots \times \mathcal{H}_m$$

Ο τελεστής προβολής στο $\mathcal{H}_i$ είναι ο

$$P_{\mathcal{H}_i}(x) = \begin{cases} x & \text{αν } \langle a_i, x \rangle \leq b_i \\ x - (\langle a_i, x \rangle - b_i)a_i & \text{αν } \langle a_i, x \rangle > b_i \end{cases}$$

Η εύρεση ενός σημείου $x \in \mathcal{H}$ γίνεται ξεκινώντας απο ένα σημείο x_0 και μετά παίρνοντας διαδοχικές προβολές κυκλικά $P_{\mathcal{H}_i}$ για $i = 1, \dots, m$ και επαναλαμβάνοντας αυτούς τους κύκλους μέχρι να συγκλίνει.

Πολλαπλασιαστές Lagrange και συνθήκες Kuhn-Tucker

Η μέθοδος των πολλαπλασιαστών Lagrange πρωτοδιατυπώθηκε στα τέλη του 18ου αιώνα (περ. 1788) απο τον κορυφαίο μαθηματικό Joseph-Louis Lagrange για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης της μορφής

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \\ h_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Αργότερα, το 1951, η μέθοδος αυτή γενικεύθηκε απο τους Kuhn και Tucker και για την περίπτωση ανισοτικών περιορισμών (αν και είχε πρωτοδιατυπωθεί, εν αγνοία των προηγούμενων, απο τον William Karush το 1939 για την διατριβή του Master του),

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \\ h_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m_1, \\ \phi_j(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m_2 \end{aligned}$$

Προβλήματα της μορφής

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \\ h_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m_1, \\ \phi_j(x) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m_2 \end{aligned}$$

συνδέονται με μια συνάρτηση $L : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{m_1} \times \mathbb{R}_+^{m_2} \rightarrow \mathbb{R}$,

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^{m_1} \lambda_i h_i(x) + \sum_{j=1}^{m_2} \mu_j \phi_j(x),$$

η οποία ονομάζεται συνάρτηση του Lagrange

Θα ξεκινήσουμε πρώτα με το πρόβλημα λαμβάνοντας υπόψιν μόνο τους ανισοτικούς περιορισμούς:

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \\ \phi_j(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

Οι ανισοτικοί περιορισμοί για τους οποίους στο ελάχιστο x_0 ισχύει

$$\phi_j(x_0) < 0,$$

ονομάζονται **μη ενεργοί (inactive)** ενώ οι ανισοτικοί περιορισμοί για τους οποίους στο ελάχιστο ισχύει

$$\phi_j(x_0) = 0,$$

ονομάζονται **ενεργοί (active)**

Το συνολό των ενεργών περιορισμών στο σημείο x_0 θα συμβολίζεται με

$$A(x_0) = \{j \in \{1, \dots, m\} : \phi_j(x_0) = 0\}$$

Θεώρημα (ΚΚΤ1)

Ας υποθέσουμε ότι οι συναρτήσεις $f, \phi_1, \dots, \phi_m$ είναι παραγωγίσιμες και ας ορίσουμε το σύνολο

$$D_0 = \{(x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d : \phi_i(x) \leq 0, 1 \leq i \leq m\} \subset \mathbb{R}^d.$$

- 1 Αν η f έχει τοπικό ελάχιστο στο $x_0 \in D_0$ τότε υπάρχουν $\lambda_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, m$ τέτοια ώστε

$$Df(x_0) + \sum_{i=1}^m \lambda_i D\phi_i(x_0) = 0,$$

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i \phi_i(x_0) = 0, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (\text{ΚΚΤ1})$$

ή ισοδύναμα

$$Df(x_0) + \sum_{i=1}^m \lambda_i D\phi_i(x_0) = 0,$$

$$\lambda_i \phi_i(x_0) = 0, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (\text{ΚΚΤ2})$$

- 2 Έστω $f : D \rightarrow \mathbb{R}$, με D ανοιχτό και κυρτό, ϕ_i κυρτές και $f|_{D_0}$ κυρτή. Αν οι συνθήκες

(ΚΚΤ1) ή (ΚΚΤ2) ικανοποιούνται σε κάποιο σημείο $x_0 \in D_0$ τότε το x_0 είναι ολικό ελάχιστο της f στο D_0 .

Σχολια

- ❶ Οι συνθήκες KKT1 και KKT2 είναι ισοδύναμες.
- ❷ Αν ο περιορισμός $\phi_i(x_0) \leq 0$ ισχύει με αυστηρή ανισότητα

$$\phi_i(x_0) < 0 \text{ ανενεργός} \implies \lambda_i = 0$$

- ❸ Αν για τον πολλαπλασιαστή $\lambda_i \geq 0$ ισχύει

$$\lambda_i > 0 \implies \phi_i(x_0) = 0 \text{ ενεργός}$$

- ❹ Αν το πρόβλημα δεν είναι κυρτό τότε η συνθήκη KKT είναι αναγκαία συνθήκη για να είναι το x_0 ελαχιστο.
- ❺ Αν το πρόβλημα είναι κυρτό τότε η συνθήκη KKT είναι και επαρκής και το x_0 είναι ολικό ελάχιστο (όχι απλά τοπικό ελάχιστο!).
- ❻ Αν οι περιορισμοί είναι με την μορφή ισότητας τότε οι πολλαπλασιαστές Lagrange λ_i δεν χρειάζεται να είναι θετικοί.

Θα δούμε τώρα το πλήρες πρόβλημα συμπεριλαμβανομένων και των περιορισμών σε μορφή ισοτήτων

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \\ h_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m_1, \\ \phi_j(x) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m_2 \end{aligned}$$

Σε αυτό θα χρειαστούμε 2 σετ απο πολλαπλασιαστές Lagrange τους

- $\lambda_i \in \mathbb{R}$ για τους περιορισμούς σε μορφή ισοτήτων και τους
- $\lambda_j = \mu_j \in \mathbb{R}_+$ για τους περιορισμούς σε μορφή ανισοτήτων

Θεώρημα (ΚΚΤ2)

Ας υποθέσουμε ότι οι συναρτήσεις $f, \phi_1, \dots, \phi_m$ είναι συνεχώς παραγωγίσιμες και ας υποθέσουμε ότι το x_0 είναι ένα τοπικό ελάχιστο του παραπάνω προβλήματος και ότι

$$Df_i(x_0), D\phi_j(x_0), \quad i = 1, \dots, m_1, \quad j = 1, \dots, m_2 \text{ γραμμικά ανεξάρτητα} \\ x_0 \text{ ομαλό σημείο (regular point) .}$$

Τότε,

- 1 (Αναγκαία συνθήκη) Υπάρχουν μοναδικοί πολλαπλασιαστές Lagrange $\lambda_0 = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_{m_1}^*) \in \mathbb{R}^{m_1}$ και $\mu_0 = (\mu_1^*, \dots, \mu_{m_2}^*) \in \mathbb{R}_+^{m_2}$ τέτοιοι ώστε

$$D_x L(x_0, \lambda_0, \mu_0) = 0 \iff Df(x_0) + \sum_{i=1}^{m_1} \lambda_i^* Dh_i(x_0) + \sum_{j=1}^{m_2} \mu_j^* D\phi_j(x_0) = 0$$

με

$$\mu_j^* \geq 0, \quad \mu_j^* = 0, \quad \text{για } j \notin A(x_0).$$

- 2 (Επαρκής συνθήκη) Αν οι f, f_i, ϕ_j είναι δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμες τότε αν το σημείο x_0 ικανοποιεί τις συνθήκες

$$D_x L(x_0, \lambda_0, \mu_0) = 0, \quad h_i(x_0) = 0, \quad \phi_j(x_0) \leq 0, \\ \mu_j > 0, \quad \forall j \in A(x_0), \quad \mu_j = 0 \quad \forall j \notin A(x_0), \\ \langle y, D_{xx} L(x_0, \lambda_0, \mu_0) y \rangle > 0, \quad \forall y \neq 0 \text{ τέτοια ώστε} \\ \langle Dh_i(x_0), y \rangle = 0, \quad i = 1, \dots, m_1, \quad \langle D\phi_j(x_0), y \rangle = 0, \quad j \in A(x_0),$$

το x_0 είναι τοπικό ελάχιστο του προβλήματος

ΚΚΤ

Συγκεντρώνουμε εδώ τις συνθήκες ΚΚΤ σε συμπαγή μορφή γράφοντας το πρόβλημα βελτιστοποίησης στην μορφή

$$\begin{cases} \min f(x), \\ g_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E}, \\ g_i(x) \leq 0 \quad i \in \mathcal{I} \end{cases} \quad L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i g_i(x)$$

όπου

- Χρησιμοποιούμε τον ίδιο συμβολισμό g_i για όλους τους περιορισμούς και λ_i για όλους τους πολλαπλασιαστές
- $\mathcal{E}$ είναι το σύνολο δεικτών που αντιστοιχεί στους ισοτικούς περιορισμούς
- $\mathcal{I}$ το σύνολο δεικτών που αντιστοιχεί σε ανισοτικούς περιορισμούς.

Αναγκαίες ΚΚΤ συνθήκες (εφόσον ικανοποιούνται τα constraint qualifications)

$$\begin{aligned} D_x L(x_0, \lambda_0) &= 0, \quad \lambda_0 = (\lambda_i, \quad i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}) \\ g_i(x_0) &= 0, \quad i \in \mathcal{E}, \quad g_i(x_0) \leq 0 \quad i \in \mathcal{I} \\ \lambda_i g_i(x_0) &= 0, \quad i \in \mathcal{E} \cap \mathcal{I}, \\ \lambda_i &\geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \end{aligned}$$

Η πρώτη συνθήκη είναι η ελαχιστοποίηση της $x \mapsto L(\cdot, \lambda_0)$ για x 

Σχόλια: Constraint qualifications

Το αν οι συνθήκες ΚΚΤ

$$D_x L(x_0, \lambda_0, \mu_0) = 0, \\ \mu_0 \geq 0, \mu_0 \phi(x_0) = 0 \iff \mu_j^* \geq 0, \mu_j^* = 0, \text{ για } j \notin A(x_0)$$

αποτελούν αναγκαιες συνθήκες σε κάποιο τοπικό ελάχιστο (ή όχι) εξαρτάται απο την μορφή των περιορισμών.

Συνθήκες για τους περιορισμούς κάτω απο τις οποίες οι συνθήκες ΚΚΤ αποτελούν αναγκαιές συνθήκες σε κάποιο τοπικό ελάχιστο ονομάζονται **constraint qualifications**

Παράδειγμα

Το πρόβλημα

$$\min_{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2} x_2 \\ (x_1 - 1)^2 + x_2^2 \leq 1, \\ (x_1 + 1)^2 + x_2^2 \leq 1$$

έχει μοναδικό εφικτό σημείο το $x_0 = (0, 0)$, άρα και ελάχιστο, αλλά στο σημείο αυτο δεν ικανοποιούνται οι συνθήκες ΚΚΤ.

Η εύρεση constraint qualifications είναι πολύ σημαντικό πρόβλημα για την μη γραμμική βελτιστοποίηση και έχουν διατυπωθεί αρκετές εναλλακτικές συνθήκες σχετικά με τα constraint qualifications.

- ① x_0 ομαλό σημείο δηλ.

$$Dh_i(x_0), D\phi_j(x_0), \quad i = 1, \dots, m_1, \quad j = 1, \dots, m_2$$

γραμμικά ανεξάρτητα

- ② Η συνθήκη του Slater : ϕ κυρτή, h_i γραμμικές και $h_i(x_0) = 0$ με $g(x_0) < 0$.
- ③ Η συνθήκη των Mangasarian-Fromovitz Οι $Dh_i(x_0)$ είναι γραμμικά ανεξάρτητες και υπάρχει $w \in \mathbb{R}^d$ τέτοιο ώστε

$$\langle Dh_i, w \rangle = 0, \quad \text{και} \quad \langle D\phi_j, w \rangle < 0, \quad \forall j \in A(x_0).$$

Παράδειγμα 1: Affine περιορισμοί

Ας δούμε το πρόβλημα

$$\begin{aligned} & \min f(x), \\ & Ax \leq b, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times d}, \quad b \in \mathbb{R}^{m \times 1}, \end{aligned}$$

όπου θεωρούμε τις παραπάνω ανισότητες να ισχύουν κατά συνιστώσα και ας γράψουμε τον πίνακα A ως

$$A = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix}, \quad a_i \in \mathbb{R}^{1 \times d}$$

Οι συνθήκες KKT στην περίπτωση αυτή γράφονται στην μορφή

$$Df(x_0) + A^T \lambda = 0, \quad \lambda \in \mathbb{R}^{m \times 1}$$

$$\lambda_i \geq 0, \quad \text{και αν } a_i x_0 < b_i, \quad \text{τότε } \lambda_i = 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad \square$$

Παράδειγμα 2: Affine περιορισμοί και $x \geq 0$

Μία άλλη χρήσιμη κατηγορία προβλημάτων είναι η

$$\min f(x)$$

$$Ax = b$$

$$x \geq 0$$

Το πρόβλημα αυτό μπορεί να γραφεί σε συμπαγή μορφή ως

$$\min f(x)$$

$$A_0 x \leq b_0$$

με

$$A_0 = \begin{bmatrix} A \\ -A \\ I_d \end{bmatrix}, \quad b_0 = \begin{bmatrix} b \\ -b \\ 0_d \end{bmatrix}$$

Για να χειριστούμε αυτό το πρόβλημα χρειαζομαστε 3 κατηγορίες πολλαπλασιαστών Lagrange

$$\begin{aligned}\lambda^+ &= (\lambda_1^+, \dots, \lambda_m^+) \rightarrow Ax \leq b \\ \lambda^- &= (\lambda_1^-, \dots, \lambda_m^-) \rightarrow -Ax \leq -b \\ \lambda^p &= (\lambda_1^p, \dots, \lambda_d^p) \rightarrow -x \leq 0\end{aligned}$$

Οι συνθήκες KKT παίρνουν την μορφή

$$\begin{aligned}Df(x_0) + [A^T \quad -A^T \quad -I_d] \begin{bmatrix} \lambda_0^+ \\ \lambda_0^- \\ \lambda_0^p \end{bmatrix} &= 0_d \iff Df(x_0) + A^T(\lambda_0^+ - \lambda_0^-) = \lambda_0^p \\ \lambda_{0,i}^+(Ax - b)_i &= 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ \lambda_{0,i}^-(-Ax + b)_i &= 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ \lambda_{0,j}^p(-x_j) &= 0, \quad j = 1, \dots, d\end{aligned}$$

Ως προς τα $\lambda_i := \lambda_i^+ - \lambda_i^- \in \mathbb{R}$ οι συνθήκες KKT γίνονται

$$\begin{aligned}Df(x_0) + A^T \lambda &= \lambda^p, \quad \lambda^p \in \mathbb{R}_+^d, \\ \lambda_i(Ax - b)_i &= 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ \lambda_{0,j}^p(-x_j) &= 0, \quad j = 1, \dots, d\end{aligned}$$

Παράδειγμα 3: Περιορισμοί στην μορφή affine ισοτήτων

Ας πάρουμε το πρόβλημα

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b \end{aligned}$$

Με βάση τα παραπάνω αν $x_0 \in \mathbb{R}^d$ η λύση του προβλήματος, θα πρέπει να υπάρχει και $\lambda_0 \in \mathbb{R}^m$ έτσι ώστε το ζεύγος (x_0, λ_0) να ικανοποιεί τις συνθήκες

$$\begin{aligned} Df(x_0) + A^T \lambda_0 &= 0, \quad (KKT) \\ Ax_0 &= b \end{aligned}$$

Το παραπάνω μπορούμε να το θεωρήσουμε σαν ένα σύστημα $m + n$ εξισώσεων με $n + m$ αγνώστους (x_0, λ_0) .

Λύνοντας το σύστημα αυτό ως προς τα (x_0, λ_0) μπορούμε να προσδιορίσουμε το υποψηφίο ελάχιστο.

Εφαρμογή 1: Τετραγωνικός προγραμματισμος με περιορισμούς σε μορφή ισοτήτων

Αν η f είναι μια τετραγωνική συνάρτηση της μορφής

$$f(x) = \frac{1}{2} \langle Qx, x \rangle + \langle q, x \rangle + c$$

τότε

$$Df(x) = Qx + q$$

και οι συνθήκες KKT για το πρόβλημα

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x) \\ Ax = b \end{aligned}$$

οδηγούν στο γραμμικό σύστημα της μορφης

$$\begin{aligned} Qx_0 + A^T \lambda_0 &= -q \\ Ax_0 &= b \end{aligned}$$

ή σε πιο συμπαγή μορφή

$$\begin{bmatrix} Q & A^T \\ A & 0_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ \lambda_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -q \\ b \end{bmatrix}$$

Ο πίνακας

$$K := \begin{bmatrix} Q & A^T \\ A & 0_m \end{bmatrix}$$

ονομάζεται πίνακας KKT.

Αν ο πίνακας K είναι αντιστρέψιμος ή το σύστημα

$$Kz = w, \quad w = [-q, -b]^T$$

είναι επιλύσιμο τότε οποιαδήποτε λύση του $[x^*, \lambda^*]$ δίνει ένα ελάχιστο x^* για το αρχικό πρόβλημα ελαχιστοποίησης.

Αν το σύστημα αυτό δεν είναι επιλύσιμο τότε το αρχικό πρόβλημα είναι μη φραγμένο από τα κάτω (οπότε μπορεί να πάρει την τιμή $-\infty$).

Αν ο πίνακας Q είναι θετικά ορισμένος τότε η λύση του παραπάνω συστήματος μπορεί να γίνει με αναγωγή

$$\begin{aligned}\lambda_0 &= (AQ^{-1}A^T)^{-1}(b - AQ^{-1}q), \\ x_0 &= -Q^{-1}(A^T\lambda_0 + q).\end{aligned}$$

Στην πράξη δεν αντιστρέφουμε τους παραπάνω πίνακες αλλά λύνουμε το γραμμικό σύστημα

$$\begin{aligned}Qz &= q, \\ QE &= A^T, \\ AE\lambda &= -(b + Az), \\ Qx &= -(A^T\lambda + q)\end{aligned}$$

Μια εφαρμογή του τετραγωνικού προγραμματισμού είναι στην επιλογή χαρτοφυλακίου όπου

$$Q = S = (\text{cov}(X_i, X_j)), \quad q = 0, \quad c = 0$$
$$A = \begin{pmatrix} \mathbb{E}[X_1] & \cdots & \mathbb{E}[X_N] \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} \mu \\ 1 \end{pmatrix}$$

Εφαρμογή 2: Feasible start Newton method

Η μεθοδος αυτή βασίζεται στον συνδυασμό των συνθηκών KKT και του τετραγωνικού προγραμματισμού για την επίλυση μη γραμμικών προβλημάτων βελτιστοποίησης με περιορισμούς στην μορφή ισοτήτων

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \\ Ax = b \end{aligned}$$

Υποθέτουμε ότι ξεκινάμε απο μία αρχική προσέγγιση x_0 η οποία είναι εφικτή

$$Ax_0 = b$$

Στο βήμα k ανανεώνουμε την (εφικτή) προσέγγιση x_k βάσει του κανόνα

$$x_{k+1} = x_k + a_k d_k$$

υπολογίζοντας μια διευθυνση d_k η οποία λύνει το τετραγωνικό πρόβλημα βελτιστοποίησης

$$\begin{aligned} \min_{z \in \mathbb{R}^d} \frac{1}{2} \langle D^2 f(x_k)(z - x_k), (z - x_k) \rangle + \langle Df(x_k), z - x_k \rangle \\ Az = 0 \end{aligned}$$

Η συνθήκη $Az = 0$ εξασφαλίζει ότι αν ξεκινήσουμε απο μια εφικτή προσέγγιση και οι επόμενες προσεγγίσεις μας θα παραμένουν εφικτές.

Η τετραγωνική προσέγγιση μπορεί να επιλυθεί με την βοήθεια των συνθηκών KKT και με τις παραπάνω μεθόδους τετραγωνικού προγραμματισμού.

Συγκεκριμένα το d_k θα ικανοποιεί το γραμμικό σύστημα

$$\begin{pmatrix} D^2f(x_k) & A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_k \\ w_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -Df(x_k) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Το βήμα a_k μπορεί να υπολογιστεί με την μέθοδο backline search

$$a_k = \arg \min_{a > 0} f(x_k + ad_k)$$

Ο υπολογισμός της πρώτης εφικτής προσέγγισης x_0 μπορεί να γίνει π.χ. με την alternating projection method

Δυικές μέθοδοι (Duality methods)

Το πρωτευον πρόβλημα (primal problem)

$$\min_{x \in X \subset \mathbb{R}^d} f(x)$$

$$\phi_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \text{ κυρτές}$$

και έστω

$$P_0 := \inf_{x \in X, \phi(x) \leq 0} f(x)$$

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε το ολικό ελάχιστο είναι x_0 και έχουμε βρεί πολλαπλασιαστές Lagrange $\mu_0 = (\mu_1^*, \dots, \mu_m^*) \geq 0$ που ικανοποιούν τις συνθήκες ΚΚΤ

$$\mu_j \phi_j(x_0) = 0.$$

Τότε για την συνάρτηση Lagrange

$$L(x, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^m \mu_i \phi_i(x),$$

ισχύει ότι

$$P_0 = f(x_0) = \inf_{x \in X, \phi(x) \leq 0} f(x) = \min_{x \in \mathbb{R}^d} L(x, \mu_0)$$

Με το πρόβλημα αυτό μπορούμε να συνδέσουμε και το λεγόμενο δυϊκό πρόβλημα (dual problem)

Ορίζουμε την δυϊκή συνάρτηση

$$D(\mu) = \inf_{x \in X} L(x, \mu)$$

και μέσω αυτής το **δυϊκό πρόβλημα**

$$\begin{aligned} \max_{\mu \in \mathbb{R}^m} D(\mu), \\ \mu \geq 0 \end{aligned}$$

Θέτουμε

$$D_0 = \max_{\mu \in \mathbb{R}^m, \mu \geq 0} D(\mu) = \max_{\mu \in \mathbb{R}^m, \mu \geq 0} \inf_{x \in X} L(x, \mu)$$

Δεν είναι απαραίτητο η συνάρτηση D να παίρνει πεπερασμένες τιμές, μπορεί κάλλιστα να πάρει την τιμή $-\infty$ οπότε και $D_0 = -\infty$.

Αν $\text{Dom}(D) = \{\mu \in \mathbb{R}^d : D(\mu) > -\infty\}$ τότε

- $\text{Dom}(D)$ κυρτό σύνολο
- D κοίλη συνάρτηση στο $\text{Dom}(D)$.

Το πρωτεύων (primal) και το δυικό (dual) πρόβλημα συνδέονται:

Θεώρημα

1. Εν γένει ισχύει ότι

$$D_0 \leq P_0, \text{ ασθενής δυικότητα}$$

Η διαφορά μεταξύ P_0 και D_0 ονομάζεται *duality gap*

2. Αν το *duality gap* μηδενίζεται τότε η λύση μ_0 του δυικού προβλήματος είναι οι πολλαπλασιαστές Lagrange του πρωτευοντος προβλήματος υπο την έννοια ότι ικανοποιεί το

$$P_0 = \inf_{x \in X} L(x, \mu_0), \quad \mu_0 \geq 0. \quad (1)$$

Αν το *duality gap* δεν μηδενίζεται τότε το σύνολο των πολλαπλασιαστών Lagrange (δηλ. το σύνολο των $\mu_0 \geq 0$ για τα οποία ισχύει η (1) είναι κενό.

3. Το ζευγος (x_0, μ_0) είναι ένα σαγματικό σημείο για την Lagrangian δηλ.

$$L(x_0, \mu) \leq L(x_0, \mu_0) \leq L(x, \mu_0), \quad \forall x \in X, \mu \geq 0$$

Υπάρχουν διάφορες συνθήκες που εξασφαλίζουν το ότι δεν υπάρχει *duality gap* όπως π.χ. η συνθήκη του Slater

$$\phi_i \text{ κυρτές και } \exists \bar{x} \in X \subset \mathbb{R}^d \text{ τέτοιο ώστε } \phi_i(\bar{x}) < 0, \quad i = 1, \dots, m$$

και αν $P_0 = D_0$ το *duality gap* μηδενίζεται.

Το παραπάνω αποκτά περισσότερη δομή αν παρατηρήσουμε ότι η συναρτηση Lagrange

$$L(x, \mu) = \begin{cases} f(x) + \sum_{i=1}^m \mu_i \phi_i(x), & \text{αν } \mu \geq 0 \\ -\infty & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

έχει την ιδιότητα

$$\sup_{\mu \geq 0} L(x, \mu) = \begin{cases} f(x) & \text{αν } \phi(x) \leq 0 \\ \infty & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

οπότε το πρωτεύων πρόβλημα P γράφεται ως

$$P := \min_{x : \phi(x) \leq 0} f(x) = \inf_{x \in \mathbb{R}^d} \sup_{\mu \geq 0} L(x, \mu)$$

Αν επιτρέπεται να αλλάξουμε την σειρά του $\inf$ με το $\sup$ χωρίς να αλλάξει το αποτέλεσμα (minimax) τότε

$$P := \inf_{x \in \mathbb{R}^d} \sup_{\mu \geq 0} L(x, \mu) \stackrel{?}{=} \sup_{\mu \geq 0} \inf_{x \in \mathbb{R}^d} L(x, \mu) = D!$$

Κατά συνέπεια το strong duality προκύπτει σαν επακόλουθο του θεωρήματος minimax

Αυτό που είναι πολύ ενδιαφέρον είναι ότι στην περίπτωση που ισχύει το strong duality μπορούμε να συνδέσουμε την λύση του δυικού προβλήματος με την λύση του πρωτεύοντος (που είναι και αυτό που μας ενδιαφέρει στην ουσία).

Εφόσον οι πρωτεύουσες και οι δυικές μεταβλητές (x και μ) αντίστοιχα συνδέονται με τρόπο ώστε στο

- (x_0, μ_0) είναι σαγματικό σημείο της συνάρτησης Lagrange L :

▷ x_0 το ελάχιστο που ψάχνουμε ικανοποιεί

$$x_0 = \arg \min_x L(x, \mu_0)$$

▷ μ_0 οι πολλαπλασιαστές Lagrange ικανοποιούν το

$$\mu_0 = \arg \max_{\mu \geq 0} L(x_0, \mu)$$

Τα (x_0, μ_0) συνδέονται μέσω των συνθηκών πρώτης τάξης

$$x_0 = D_x L(x_0, \mu_0),$$

$$\mu_0 = D_\mu L(x_0, \mu_0)$$

Η παραπάνω παρατήρηση μας δείχνει οτι μπορούμε να λύσουμε ταυτόχρονα για την L

- Ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης ως προς το x χρησιμοποιώντας ένα σχήμα **gradient descent**

$$x_{k+1} = x_k - a_k D_x L(x_k, \mu_k), \quad a_k \geq 0,$$

- Ένα πρόβλημα μεγιστοποίησης ως προς το μ χρησιμοποιώντας ένα σχήμα **gradient ascent**

$$\mu_{k+1} = \mu_k + a_k D_\mu L(x_k, \mu_k), \quad a_k \geq 0,$$

Το ascent κομματι υπόκειται στους περιορισμούς $\mu \geq 0$ (box constraints) το οποίο μπορεί να εξασφαλιστεί χρησιμοποιώντας το projected gradient ascent.

Ένα σταθερό σημείο του παραπάνω σχήματος θα μας δώσει ταυτόχρονα το ελάχιστο x_0 και του πολλαπλασιαστές Lagrange μ_0 χαρακτηρίζοντας έτσι την λύση.

Παράδειγμα: Ελαχιστοποίηση της εντροπίας

Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να λύσουμε το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης της εντροπίας

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} \quad & \sum_{i=1}^d x_i \ln x_i, \\ & Ax \leq b, \\ & \langle \mathbf{1}, x \rangle = 1, \\ & x > 0 \end{aligned}$$

Η συνάρτηση Lagrange είναι η

$$L(x, \lambda, \lambda_0) = \sum_{i=1}^d x_i \ln x_i + \sum_{j=1}^m \lambda_j (Ax - b)_j + \lambda_0 (\langle \mathbf{1}, x \rangle - 1)$$

Το δυϊκό πρόβλημα παίρνει τη μορφή

$$\begin{cases} \max_{(\lambda, \lambda_0) \in \mathbb{R}^{m+1}} -\langle b, \lambda \rangle - \lambda_0 - e^{-\lambda_0-1} \sum_{i=1}^d e^{-\langle a_i, \lambda \rangle}, \\ \lambda \geq 0 \end{cases} \implies \begin{cases} \min_{(\lambda, \lambda_0) \in \mathbb{R}^{m+1}} \langle b, \lambda \rangle + \lambda_0 + e^{-\lambda_0-1} \sum_{i=1}^d e^{-\langle a_i, \lambda \rangle}, \\ \lambda \geq 0 \end{cases}$$

όπου a_i τα διανύσματα που απαρτίζουν τις στήλες του A .

Αν ισχύει η ισχυρή δυικότητα και (λ^*, λ_0^*) είναι μια λύση του δυϊκού προβλήματος τότε

$$x^* = \arg \min_x L(x, \lambda^*, \lambda_0^*)$$

και χρησιμοποιώντας την μορφή της συνάρτησης Lagrange μπορούμε εύκολα να δούμε ότι οι συνθήκες πρώτης τάξης για το πρόβλημα αυτό μας εξασφαλίζουν ότι

$$x_i^* = \exp(-\langle a_i, \lambda^* \rangle - \lambda_0^* - 1).$$

Η ισχυρή δυικότητα ισχύει αν π.χ. ικανοποιείται η συνθήκη του Slater

$$\exists \bar{x} \geq 0, : A\bar{x} \leq 0, \quad \langle \mathbf{1}, \bar{x} \rangle = 1.$$

Το δυϊκό πρόβλημα μπορεί να λυθεί σχετικά απλά χρησιμοποιώντας π.χ. την projected gradient μεθοδο.

Το Lasso και το δυϊκό του πρόβλημα

Το πρωτεύον πρόβλημα είναι το

$$\min_{w \in \mathbb{R}^d} \frac{1}{2} \|\mathbf{D}w - y\|_2^2 + \alpha \|w\|_1$$

Εισάγουμε την μεταβλητή v και γράφουμε το πρόβλημα στην μορφή

$$\min_{(w,v) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \frac{1}{2} \|\mathbf{D}w - y\|_2^2 + \alpha \|v\|_1, \\ w = v$$

Η συνάρτηση Lagrange για το πρόβλημα αυτό είναι

$$L(w, v, \lambda) = \frac{1}{2} \|\mathbf{D}w - y\|_2^2 + \alpha \|v\|_1 + \langle \lambda, w - v \rangle,$$

όπου $\lambda \in \mathbb{R}^d$ είναι οι πολλαπλασιαστές Lagrange

Η θεωρία της δυικότητας μας δίνει ότι

$$P := \inf_{(w,v) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \sup_{\lambda \in \mathbb{R}^d} L(w, v, \lambda) \stackrel{?}{=} \sup_{\lambda \in \mathbb{R}^d} \inf_{(w,v) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} L(w, v, \lambda) = D$$

Κοιτάμε το δυικό πρόβλημα

$$D = \sup_{\lambda \in \mathbb{R}^d} \inf_{(w,v) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} L(w, v, \lambda) = \sup_{\lambda \in \mathbb{R}^d} \inf_{(w,v) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \frac{1}{2} \|\mathbf{D}w - y\|_2^2 + \alpha \|v\|_1 + \langle \lambda, w - v \rangle,$$

και ξεκινάμε την απλοποίηση του απο το εσωτερικό πρόβλημα ελαχιστοποίησης

$$\inf_{(w,v) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \frac{1}{2} \|\mathbf{D}w - y\|_2^2 + \alpha \|v\|_1 + \langle \lambda, w - v \rangle,$$

το οποίο ως προς την μεταβλητή w είναι τετραγωνικό (άρα λειο) και λύνεται πολύ απλά με την συνθήκη πρώτης τάξης

$$D_w L(w, v, \lambda) = 0 \implies \mathbf{D}^T (\mathbf{D}w - y) + \lambda = 0 \implies w = (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} (\mathbf{D}^T y - \lambda).$$

Έχουμε λοιπόν χαρακτηρίσει το w συναρτήσει των πολλαπλασιαστών Lagrange

Ως προς την μεταβλητή v τα πράγματα είναι λιγάκι πιο περιπλοκά, γιατί το πρόβλημα (διατηρώντας μόνο τους όρους που χρειάζονται για πιο απλά) είναι το

$$\begin{aligned} \inf_{v \in \mathbb{R}^d} (\alpha \|v\|_1 - \langle \lambda, v \rangle) &= - \sup_{v \in \mathbb{R}^d} (\langle \lambda, v \rangle - \alpha \|v\|_1) \\ &= - \sup_{v=(v_1, \dots, v_d) \in \mathbb{R}^d} \sum_{i=1}^d (\lambda_i v_i - \alpha |v_i|) = - \sum_{i=1}^d \sup_{v_i \in \mathbb{R}} (\lambda_i v_i - \alpha |v_i|) \end{aligned}$$

Παρατηρείστε ότι

$$\sup_{v_i \in \mathbb{R}} (\lambda_i v_i - \alpha |v_i|) = \begin{cases} 0 & \text{αν } |\lambda_i| \leq \alpha \\ +\infty & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

Συνεπώς

$$\inf_{v \in \mathbb{R}^d} \alpha \|v\|_1 - \langle \lambda, v \rangle = \begin{cases} 0 & \text{αν } \max_i |\lambda_i| = \|\lambda\|_\infty \leq \alpha \\ -\infty & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

Κάποιοι απο εσάς ίσως παρατηρήσανε ένα μετασχηματισμό Fenchel - Legendre που κρυβεται στους παραπάνω υπολογισμούς!

Αντικαθιστούμε τις λύσεις αυτές στο εσωτερικό πρόβλημα και παίρνουμε

$$D(\lambda) := \inf_{(w,v) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \frac{1}{2} \|\mathbf{D}w - y\|_2^2 + \alpha \|v\|_1 + \langle \lambda, w - v \rangle =$$

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \|\mathbf{D}[(\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1}(\mathbf{D}^T y - \lambda)] - y\|_2^2 + \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1}(\mathbf{D}^T y - \lambda) \rangle & \text{αν } \|\lambda\|_\infty \leq \alpha \\ -\infty & \text{αλλιώς} \end{cases} =$$

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \|(\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \lambda\|_2^2 - \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \lambda \rangle + \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \mathbf{D}^T y \rangle & \text{αν } \|\lambda\|_\infty \leq \alpha \\ -\infty & \text{αλλιώς} \end{cases} =$$

$$\begin{cases} -\frac{1}{2} \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \lambda \rangle + \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \mathbf{D}^T y \rangle & \text{αν } \|\lambda\|_\infty \leq \alpha \\ -\infty & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

Το πρόβλημα της μεγιστοποίησης της συνάρτησης $D(\lambda)$ ως προς λ (δυϊκό πρόβλημα) έχει νόημα μόνο αν $\|\lambda\|_\infty \leq \alpha$ συνεπώς

$$D = \max_{\lambda \in \mathbb{R}^d, \|\lambda\|_\infty \leq \alpha} D(\lambda) = \max_{\lambda \in \mathbb{R}^d, \|\lambda\|_\infty \leq \alpha} \left(-\frac{1}{2} \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \lambda \rangle + \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \mathbf{D}^T y \rangle \right)$$

$$= - \min_{\lambda \in \mathbb{R}^d, \|\lambda\|_\infty \leq \alpha} \left(\frac{1}{2} \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \lambda \rangle - \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \mathbf{D}^T y \rangle \right)$$

Το δυικό πρόβλημα λοιπόν είναι ισοδύναμο με ένα πρόβλημα τετραγωνικού προγραμματισμού

$$\min_{\lambda \in \mathbb{R}^d, \|\lambda\|_\infty \leq \alpha} \left(\frac{1}{2} \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \lambda \rangle - \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \mathbf{D}^T y \rangle \right)$$

ή ισοδύναμα

$$\begin{aligned} \min_{\lambda \in \mathbb{R}^d} \quad & \left(\frac{1}{2} \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \lambda \rangle - \langle \lambda, (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \mathbf{D}^T y \rangle \right) \\ & -\alpha \leq \lambda_i \leq \alpha, \quad i = 1, \dots, d \end{aligned}$$

Το πρόβλημα αυτό μπορεί να επιλυθεί ευκολα για να μας δώσει το λ^* χρησιμοποιώντας οποιονδήποτε αλγόριθμο τετραγωνικού προγραμματισμού με box constraints π.χ. projected gradient method και αφού βρούμε την λύση του επιστρέφουμε στον υπολογισμό της λύσης του πρωτευοντος προβλήματος μέσω της σχέσης

$$w^* = (\mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} (\mathbf{D}^T y - \lambda^*).$$

Εφαρμογή 1: SVM και τα δυϊκά του προβλήματα

Ας πάρουμε το πρόβλημα των SVM με το hinge loss

$$\min_w \mathcal{L}(w) = \min_w \frac{1}{\lambda} \sum_{k=1}^n \max\{0, 1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle\} + \frac{1}{2} \|w\|_2^2 \quad (2)$$

Το πρόβλημα αυτό το γράφουμε στην συναφή μορφή

$$\begin{aligned} \min_{w \in \mathbb{R}^n, \xi \geq 0} \quad & \frac{1}{2} \|w\|_2^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i, \\ \xi_i \geq \quad & 1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle, \quad i = 1, \dots, n \\ \xi_i \geq \quad & 0, \quad i = 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (3)$$

όπου οι $\xi_i \geq 0$ είναι slack variables που μας εξασφαλίζουν τα margin constraints χωρίς να χρειαστεί να εισάγουμε την (μη λεία) συνάρτηση $\{0, 1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle\}$.

Η παραπάνω μορφή συνδέεται με την αρχική για τον ακόλουθο λόγο:
Γράφουμε τους περιορισμούς στην μορφή

$$y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle \geq 1 - \xi_i \iff \xi_i \geq 1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle$$

δηλ. το ξ_i συνδέεται με το margin.

- Αν $1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle \leq 0$ η μικρότερη τιμή που επιτρέπεται για το $\xi_i \geq 0$ συμβατή με τους περιορισμούς είναι η $\xi_i = 0$.
- Αν $1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle \geq 0$ η μικρότερη τιμή που επιτρέπεται για το $\xi_i \geq 0$ συμβατή με τους περιορισμούς είναι η $\xi_i = 1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle$.

Κατά συνέπεια η λύση του δευτερου προβλήματος είναι ως προς το $\xi \geq 0$ και για δεδομένο w

$$\xi_i = \begin{cases} 0 & \text{αν } 1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle \leq 0 \\ 1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle & \text{αν } 1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle \geq 0 \end{cases} = \max(0, 1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle)$$

άρα τα προβλήματα (2) και (3) συνδέονται.

Η συνάρτηση Lagrange για το συγκεκριμένο πρόβλημα είναι

$$L(w, \mu) = \frac{1}{2} \|w\|_2^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i + \sum_{i=1}^n \mu_i (1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle - \xi_i) + \sum_{i=1}^n \nu_i (-\xi_i),$$

όπου ν_i είναι οι πολλαπλασιαστές Lagrange που αντιστοιχούν στους περιορισμούς $\xi_i \geq 0$ ή ισοδύναμα $-\xi_i \leq 0$.

Η δυική συνάρτηση είναι η

$$\begin{aligned} D(\mu, \nu) &= \inf_{w \in \mathbb{R}^d, \xi \in \mathbb{R}^n} L(w, \mu, \nu) \\ &= \inf_{w \in \mathbb{R}^d, \xi \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2} \|w\|_2^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i + \sum_{i=1}^n \mu_i (1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle - \xi_i) \right\} - \sum_{i=1}^n \nu_i \xi_i \\ &= \inf_{w \in \mathbb{R}^d, \xi \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^d w_j^2 + \sum_{i=1}^n \mu_i \left(1 - y_i \sum_{j=1}^d w_j X_{ij} - \xi_i \right) + C \sum_{i=1}^n \xi_i - \sum_{i=1}^n \nu_i \xi_i \right\} \\ &= \inf_{w \in \mathbb{R}^d, \xi \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^d w_j^2 - \sum_{i=1}^n \mu_i y_i \sum_{j=1}^d w_j X_{ij} + \sum_{i=1}^n (C - \mu_i - \nu_i) \xi_i + \sum_{i=1}^n \mu_i \right\} \end{aligned}$$

Αυτό είναι ένα πρόβλημα τετραγωνικού προγραμματισμού ως προς το w το οποίο μπορεί να λυθεί αναλυτικά και γραμμικό ως προς το ξ .

Ως προς το ξ το πρόβλημα είναι γραμμικό και το $\inf$ θα είναι το $-\infty$ σε κάθε περίπτωση εκτός και αν

$$C - \mu_i - \nu_i = 0, \quad i = 1, \dots, n$$

Με βάση αυτό παίρνουμε ότι

$$\begin{aligned} D(\mu, \nu) &= \inf_{w \in \mathbb{R}^d, \xi \in \mathbb{R}^n} L(w, \mu, \nu) = D(\mu) \\ &= \inf_{w \in \mathbb{R}^d} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^d w_j^2 - \sum_{i=1}^n \mu_i y_i \sum_{j=1}^d w_j X_{ij} + \sum_{i=1}^n \mu_i \right\} \end{aligned}$$

Καταλήγουμε λοιπόν μόνο στο τετραγωνικό πρόβλημα ως προς το w .

Οι συνθήκες πρώτης τάξης ως προς το w παίρνουν την μορφή

$$0 = \frac{\partial}{\partial w_j} L(w, \mu, \nu) = w_j - \sum_{i=1}^n \mu_i y_i X_{ij} \implies$$

$$w_j = \sum_{i=1}^n \mu_i y_i X_{ij}, \quad j = 1, \dots, d$$

Η συνθήκη αυτή μας εξασφαλίζει ότι (αν γνωρίζαμε τους πολλαπλασιαστές Lagrange μ_i το διάνυσμα w που καθορίζει το επίπεδο που διαχωρίζει τα δεδομένα (δηλ. το SVM) μπορεί να εκφραστεί ως

$$w = \sum_{i=1}^n \mu_i y_i \mathbf{X}_i,$$

δηλ. σαν γραμμικός συνδυασμός των διανυσμάτων $\mathbf{X}_i$ από τα δεδομένα, εξ ου και η ορολογία support vector machine

Πρέπει με κάποιο τρόπο να καθορίσουμε τους πολ/στες Lagrange $\mu_i \rightarrow$ Δυϊκό πρόβλημα!

Αντικαθιστούμε τα w που μας δίνουν οι συνθήκες πρώτης τάξης και καταλήγουμε στο

$$\begin{aligned}
 D(\mu) &= \frac{1}{2} \left\| \sum_{i=1}^n \mu_i y_i \mathbf{x}_i \right\|^2 - \sum_{i=1}^n \mu_i y_i \sum_{j=1}^d \sum_{\ell=1}^n \mu_\ell y_\ell X_{\ell j} X_{ij} + \sum_{i=1}^n \mu_i \\
 &= \frac{1}{2} \left\| \sum_{i=1}^n \mu_i y_i \mathbf{x}_i \right\|^2 - \sum_{i=1}^n \sum_{\ell=1}^n \mu_i y_i \mu_\ell y_\ell \left(\sum_{j=1}^d X_{\ell j} X_{ij} \right) + \sum_{i=1}^n \mu_i \\
 &= \frac{1}{2} \left\| \sum_{i=1}^n \mu_i y_i \mathbf{x}_i \right\|^2 - \sum_{i=1}^n \sum_{\ell=1}^n \mu_i y_i \mu_\ell y_\ell \langle \mathbf{x}_\ell, \mathbf{x}_i \rangle + \sum_{i=1}^n \mu_i \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{\ell=1}^n y_i y_\ell \langle \mathbf{x}_\ell, \mathbf{x}_i \rangle \mu_i \mu_\ell + \sum_{i=1}^n \mu_i
 \end{aligned}$$

Το διυικό πρόβλημα λοιπόν γίνεται

$$\begin{aligned}
 \max_{\mu \geq 0} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{\ell=1}^n y_i y_\ell \langle \mathbf{x}_\ell, \mathbf{x}_i \rangle \mu_i \mu_\ell + \sum_{i=1}^n \mu_i \right\} &\iff \\
 \min_{\mu \geq 0} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{\ell=1}^n y_i y_\ell \langle \mathbf{x}_\ell, \mathbf{x}_i \rangle \mu_i \mu_\ell - \sum_{i=1}^n \mu_i \right\}
 \end{aligned}$$

Το πρόβλημα αυτό είναι ένα τετραγωνικό πρόβλημα με box constraints το οποίο είναι πολύ πιο εύκολο στην λύση απο το αρχικό πρόβλημα και που μπορεί να επιλυθεί αριθμητικά σχετικά απλά με την χρήση π.χ. του projected gradient σχηματος.

Ανακεφαλαιώνοντας:

Το πρόβλημα των SVM με το hinge loss

$$\min_w \mathcal{L}(w) = \min_w \frac{1}{\lambda} \sum_{k=1}^n \max\{0, 1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle\} + \frac{1}{2} \|w\|_2^2 \quad (4)$$

χρησιμοποιώντας slack variables παίρνει την μορφή

$$\begin{aligned} \min_{w \in \mathbb{R}^n, \xi \geq 0} \quad & \frac{1}{2} \|w\|_2^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i, \\ & \xi_i \geq 1 - y_i \langle w, \mathbf{X}_i \rangle, \quad i = 1, \dots, n \end{aligned} \quad (5)$$

το οποίο χρησιμοποιώντας τον **δυσμό (duality)** μπορούμε να δείξουμε ότι έχει λύση της μορφής

$$w = \sum_{i=1}^n \mu_i y_i \mathbf{X}_i, \quad \text{SVM} \quad (6)$$

με τους πολλαπλασιαστές Lagrange να αποτελούν λύση του δυικού (τετραγωνικού προβλήματος με box constraints) της μορφής

$$\min_{\mu \geq 0} D'(\mu) := \min_{\mu \geq 0} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{\ell=1}^n y_i y_\ell \langle \mathbf{X}_i, \mathbf{X}_\ell \rangle \mu_i \mu_\ell - \sum_{i=1}^n \mu_i \right\}$$

Η επίλυση του τελευταίου προβλήματος για τον καθορισμό των πολ/στων Lagrange μ και συνεπώς μέσω της (6) μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας κάποια παραλλαγή του αλγορίθμου gradient descent

Η βαθμίδα της συνάρτησης D' μπορεί να γραφεί στην μορφή

$$\frac{\partial D'}{\partial \mu_i}(\mu) = \sum_{\ell=1}^n y_{\ell} \langle \mathbf{X}_{\ell}, \mathbf{X}_i \rangle - 1, \quad i = 1, \dots, n$$

ή σε πιο συμπαγή μορφή ως

$$D_{\mu} D'(\mu) = G\mathbf{y} - \mathbf{1},$$

όπου

$$G = (g_{ij}), \quad i, j = 1, \dots, n, \quad g_{ij}, \\ \mathbf{1} = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^{n \times 1}$$

Η μέθοδος της βαθμίδας λοιπον για το διάνυσμα μ γίνεται

$$\mu_{k+1} = \mu_k - a_k(G\mathbf{y} - \mathbf{1}), \quad \mu_k \in \mathbb{R}^n$$

Sequential Quadratic Programming

Η μέθοδος SQP είναι μια πολυ διαδοδομένη μεθοδος αριθμητικής επίλυσης μη γραμμικών προβλημάτων βελτιστοποίησης με περιορισμούς η οποία βασίζεται

- Στο θεωρητικό πλαίσιο των πολλαπλασιαστών του Lagrange, των συνθηκών KKT και του δυισμού και
- Στην τοπική προσέγγιση της συναρτησης και των περιορισμών απο ένα τετραγωνικό πρόβλημα το οποίο επιλύεται με την ανωτέρω μεθοδολογία
- Σε ενα επαναληπτικό σχήμα κατα το οποίο σε κάθε βήμα επιλύεται το κατάλληλο τοπικό τετραγωνικό πρόβλημα η λύση του οποίου μας οδηγεί στο επόμενο.

Το πρόβλημα που θέλουμε να λύσουμε παίρνει την γενική μορφή

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \\ h_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m_1, \\ \phi_j(x) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m_2 \end{aligned}$$

Η μέθοδος SQP δεν παίρνει την τετραγωνική προσέγγιση της f και την γραμμική προσέγγιση των περιορισμών (κάτι τέτοιο μπορεί να δημιουργήσει προβλήματα) αλλά την τετραγωνική προσέγγιση της συναρτησης Lagrange για το πρόβλημα αυτό,

$$\begin{aligned} L(x, \lambda, \mu) &= f(x) + \sum_{i=1}^{m_1} \lambda_i h_i(x) + \sum_{j=1}^{m_2} \mu_j \phi_j(x) \\ &= f(x) + \langle \lambda, h(x) \rangle + \langle \mu, \phi(x) \rangle \end{aligned}$$

Κάτω απο υποθέσεις που εξασφαλίζουν την ισχύ των συνθηκών ΚΚΤ γνωρίζουμε οτι το ελάχιστο x^* και οι πολλαπλασιαστές (λ^*, μ^*) έχουν την ιδιότητα

$$(x^*, (\lambda^*, \mu^*)) \text{ σαγματικό σημείο της } L(x; (\lambda, \mu)),$$

συνεπώς το x^* είναι τοπικό ελάχιστο του προβλήματος

$$\begin{aligned} \min_x L(x, \lambda^*, \mu^*), \\ h(x) = 0, \\ \phi(x) \leq 0 \end{aligned}$$

Για το πρόβλημα αυτό παίρνουμε την τοπική τετραγωνική προσέγγιση κοντά σε κάποιο σημείο x_k ,

$$\begin{aligned} L(x_k, \lambda_k, \mu_k) + \langle D_x L(x_k, \lambda_k, \mu_k), x - x_k \rangle \\ + \frac{1}{2} \langle x - x_k, D_x^2 L(x_k, \lambda_k, \mu_k)(x - x_k) \rangle, \end{aligned}$$

όπου επειδή εν γένει ενδεχομένως να μην γνωρίζουμε τις τιμές των πολλαπλασιαστών λ^*, μ^* , σε κάθε βήμα τις αντικαθιστούμε με μια προσέγγιση τους λ_k, μ_k .

Μάλιστα όπως κάνουμε και στις quasi Newton μεθόδους μπορούμε να αντικαταστήσουμε και τον πίνακα του Hess $D_x^2 L(x_k, \lambda_k, \mu_k)$ με κάποια κατάλληλη προσέγγιση του B_k .

Μέθοδοι ποινικοποίησης (Penalty methods)

Οι μέθοδοι ποινικοποίησης διαχειρίζονται του περιορισμούς συμπληρώνοντας την συνάρτηση που θέλουμε να βελτιστοποιήσουμε με συναρτήσεις ποινής P που παίρνουν πολύ μεγάλες τιμές αν η μεταβλητή x πάρει τιμές που δεν ικανοποιούν τους περιορισμούς.

Αντικαθιστούμε λοιπόν το αρχικό πρόβλημα υπο περιορισμούς

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \\ h_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m_1, \\ \phi_j(x) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m_2 \end{aligned}$$

με το πρόβλημα χωρίς περιορισμούς

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x) + cP(x), \quad c \geq 0,$$

για κατάλληλη επιλογή της παραμέτρου $c > 0$ και της συνάρτησης ποινής P .

Συνηθισμένες επιλογές για συναρτήσεις ποινής είναι

- Ανισοτικοί περιορισμοί:

- 1 $P(x) = -\sum_{j=1}^{m_2} \ln(-\phi_j(x))$

- 2 $P(x) = -\sum_{j=1}^{m_2} \frac{1}{\phi_j(x)}$

- 3 $P(x) = -\sum_{j=1}^{m_2} \frac{1}{q} [\max(0, \phi_j(x))]^q, q \geq 1.$

- Περιορισμο με την μορφή ισότητας:

- 1 $P(x) = \sum_{i=1}^{m_2} |h_i(x)|^q, q \geq 1.$

Η μεθοδος της τετραγωνικής συνάρτησης ποινής

Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να λύσουμε το πρόβλημα βελτιστοποίησης

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x), \\ g_i(x) = 0 \quad i \in \mathcal{E} \\ g_i(x) \leq 0 \quad i \in \mathcal{I} \end{aligned}$$

Χρησιμοποιούμε την ποινικοποιημενη συνάρτηση

$$Q(x; c) = f(x) + \frac{c}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} g_i(x)^2 + \frac{c}{2} \sum_{i \in \mathcal{I}} (\max(0, g_i(x)))^2$$

Η ιδέα της μεθόδου είναι να κατασκευάσουμε μια ακολουθία $\{x_k\}$ με το $k+1$ βημα να είναι λύση του προβλήματος ελαχιστοποίησης

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} Q(x_k, c_k),$$

για μια επιλογή των παραμετρων ποινής c_k , τέτοια ώστε $c_k \geq c_{k-1}$, π.χ.

$$c_k = \rho c_{k-1}, \quad \rho > 1$$

Το πρόβλημα ελαχιστοποίησης που έχουμε να επιλύσουμε σε κάθε βήμα k μπορεί να επιλυθεί με οποιαδήποτε μέθοδο βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς επιλέξουμε π.χ. την μέθοδο του Newton ή κάποια quasi Newton μέθοδο.

Οι όροι της ποινής για μεγάλες τιμές της παραμέτρου ποινής c_k μπορεί να οδηγήσουν σε ill conditioning για μεθόδους τυπου Newton και για τον λόγο αυτό μερικές φορές μπορεί να χρειαστεί η διαδικασία του preconditioning.

Για παράδειγμα η μεθοδος του Newton σε κάθε επανάληψη θα ανανεώνει το x_k χρησιμοποιώντας την μεταβολή p που λύνει το σύστημα

$$D_x^2 Q(x_k; \mu_k) p = -D_x Q(x; \mu_k)$$

το οποίο όμως μπορεί να είναι ill conditioned.

Για τον λόγο αυτό στην περίπτωση π.χ. των περιορισμών με την μορφή ισοτήτων ορίζουμε τον πίνακα $|\mathcal{E}| \times d$

$$C(x) = [D_x g_i(x)]_{i \in \mathcal{E}} = \left[\frac{\partial g_i(x)}{\partial x_j} \right], \quad i \in \mathcal{E}, \quad j = 1, \dots, d,$$

και το διάνυσμα

$$w = \mu_k C(x)p$$

και χρησιμοποιούμε το ισοδύναμο σύστημα

$$\begin{pmatrix} D_x^2 f(x) + \mu_k \sum_{i \in \mathcal{E}} g_i(x) D_x^2 g_i(x) & C(x)^T \\ C(x) & \frac{1}{c_k} I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -D_x Q(x; \mu_k) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Η μέθοδος της επαυξημένης Lagrangian (Augmented Lagrangian method)

Η μέθοδος αυτή είναι μια μέθοδος η οποία είναι συναφής με την μεθοδο ποινικοποίησης με τετραγωνικές συναρτήσεις ποινής.

Για ένα πρόβλημα με περιορισμούς στην μορφή ισότητας γράφουμε την επαυξημένη συνάρτηση Lagrange

$$L(x, \lambda; c) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i g_i(x) + \frac{c}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} (g_i(x))^2$$

Μετά προσπαθούμε για διαδοχικές (αυξανόμενες) επιλογές της παραμέτρου ποινής c_k να λύσουμε

- το πρόβλημα ελαχιστοποίησης της $L(x, \lambda; c_k)$ ως προς x το οποίο θα δώσει την επιλογή x_k
- το πρόβλημα μεγιστοποίησης της $L(x, \lambda; c_k)$ ως προς λ

Το δευτερο πρόβλημα γίνεται με ένα gradient ascent αλγόριθμο με βήματα της μορφής

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + \alpha g_i(x_k)$$

και επιλέγουμε συνήθως το μέγεθος του βήματος $\alpha = c_k$.

Αλγόριθμος

- ❶ Επιλέγουμε ένα αρχικό c_0, λ_0, x_0 .
- ❷ Στο k βήμα
 - Επιλέγουμε

$$x_{k+1} = \arg \min_x L(x, \lambda_k; c_k)$$

- Ανανεώνουμε τους πολλαπλασιαστές Lagrange

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + \alpha g_i(x_k)$$

- Ανανεώνουμε το c_k και πάμε στο βήμα $k + 1$

Οι περιορισμοί με την μορφή ανισοτήτων μπορεί να ληφθούν υπόψιν χρησιμοποιώντας slack variables $s_i \geq 0$, $i \in \mathcal{I}$, και την augmented Lagrangian

$$L(x, s, \lambda; c) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i (g_i(x) + s_i) + \frac{c}{2} \sum_{i \in \mathcal{I}} (g_i(x) + s_i)^2$$

και επιλύοντας επαναληπτικά τα προβλήματα,

$$\begin{aligned} \min_{x, s \geq 0} L(x, s, \lambda; c) \\ \max_{\lambda} L(x, s, \lambda; c) \end{aligned}$$

- Το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης της L ως προς s μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας projected coordinate descent ή ακόμα θέτωντας κατευθειαν

$$s_i = \max(0, -\frac{\lambda_i}{c_i} - g_i(x))$$

- Το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης ως προς x γίνεται για την $L(x, \lambda; c) = L(x, s, \lambda; c)$ αφού αντικαταστήσουμε τις παραπάνω τιμές για τα s_i .
- Μετά ανανεώνουμε τους πολλαπλασιαστές Lagrange με projected coordinate ascent

$$\lambda_{k+1,i} = \max(0, \lambda_{k,i} + c_k g_i(x_k))$$

με το τελευταίο βήμα για να εξασφαλίσουμε την θετικότητα των λ (συνθήκες KKT για το αρχικό πρόβλημα).