对偶理论（Duality）

张伯雷

南京邮电大学 计算机学院、通达学院

https://bolei-zhang.github.io/course/opt.html

回顾

- 凸集
  - 集合中任意两点所组成的线段仍然在该集合中
- 凸函数
  - 定义一：如果$\mathrm{dom} f$为凸集，且$f(\theta x+(1-\theta)y) \leq \theta f(x)+(1-\theta)f(y)$对所有的$x, y \in \mathrm{dom} f$，$0 \leq \theta \leq 1$成立
  - 定义二：对于可微函数f，如果$\mathrm{dom} f$为凸集，则f为凸函数当且仅当$f(y) \geq f(x)+\nabla f(x)^T(y-x)$，对所有的$x, y \in \mathrm{dom} f$成立
  - 定义三：对于二阶可微函数f，如果$\mathrm{dom} f$为凸集，则f为凸函数当且仅当$\nabla^2 f(x) \succcurlyeq 0$，对所有$x \in \mathrm{dom} f$成立
- 凸优化问题
  - 标准形式
  - 局部最优=全局最优
  - 最优条件：$x \in X$最优$\Leftrightarrow \nabla f_0^T(x)(y-x) \geq 0$ for all $y \in X$

目录

- 拉格朗日与共轭函数
- 对偶间隙
- 最优性条件：Slater条件
- 最优条件的两个解释
  - 几何解释
  - 鞍点解释
- 互补松弛与KKT条件

一般优化问题

- 优化问题

$$\min f_0(x).$$

$$\text{s.t.}\quad f_i(x) \le 0, \qquad i = 1, \dots, m$$

$$h_i(x) = 0, \qquad i = 1, \dots, p$$

- $x \in R^n$
- $D = \bigcap_{i=0}^{m} dom f_i \cap \bigcap_{i=1}^{p} dom h_i$
- $X = \{x \in D$ 且所有约束条件可以满足$\}$
- p^* 为最优值

不一定是凸优化问题!

拉格朗日函数

- 优化问题

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f_0(x). \\
\text{s.t.} \quad & f_i(x) \le 0, \qquad i = 1, \dots, m \\
& h_i(x) = 0, \qquad i = 1, \dots, p
\end{aligned}
$$

- 拉格朗日函数（Lagrangian function）
  - 给该问题中的每一个约束指定一个拉格朗日乘子λ, ν，以乘子为加权系数将约束增加到目标函数中
  - L: $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{\mathrm{m}} \times \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$，其中定义域为$D \times \mathbb{R}^{\mathrm{m}} \times \mathbb{R}^p$，

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

拉格朗日对偶函数

- 拉格朗日对偶函数(Lagrange Function/Dual Function)

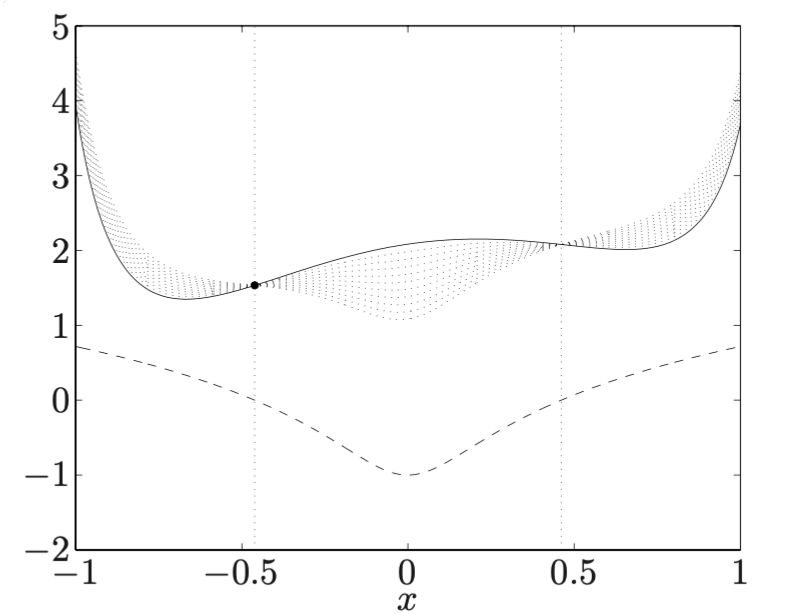
$$g(\lambda, \upsilon) = \inf_{x \in D} L(x, \lambda, \upsilon)$$

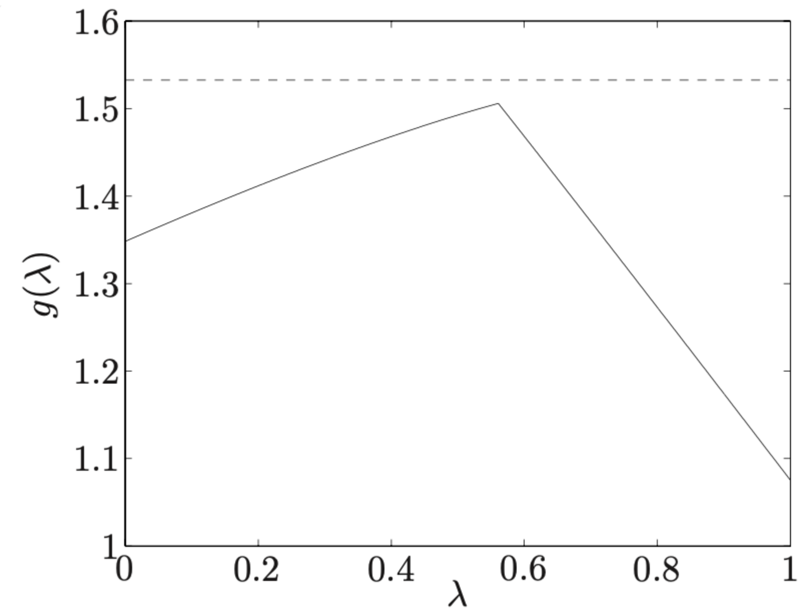
$$= \inf_{x \in D} \left(f_0(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^{p} \upsilon_i h_i(x) \right)$$

- $\lambda \in \mathbb{R}^m, \upsilon \in \mathbb{R}^p$

对偶函数性质一

- 弱对偶理论：如果$\lambda \geq 0$，则$g(\lambda, \upsilon) \leq p^*$





实线：目标函数f_0

虚线：$f_1 \leq 0$

点虚线：拉格朗日$f_0 + \lambda f_1$:$\lambda = 0.1, 0.2, \ldots, 1.0$

可行解集：[-0.46, 0.46]

对偶函数性质二

- 性质： 对偶函数为凹函数

$$g(\lambda,\nu)=\inf_{x\in\mathcal{D}} L(x,\lambda,\nu)=\inf_{x\in\mathcal{D}}\left(f_0(x)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i f_i(x)+\sum_{i=1}^{p}\nu_i h_i(x)\right)$$

- 命题：若$f_1,\ldots,f_m$为凸函数，则$f(x)=\max\{f_1(x),\ldots,f_m(x)\}$为凸函数
- 命题：若$f(x,y)$对所有$y\in A$为关于x的凸函数，则$f(x)=\sup_{y\in A} f(x,y)$ 为凸函数

例1

$$\min \quad x^T x$$

$$\text{s.t.} \quad \mathrm{Ax} = b$$

$$x \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}^p, A \in \mathbb{R}^{p \times n}$$

例2

$$\min \quad C^T x$$

$$\text{s.t.} \quad Ax = b\,, x \geq 0$$

例3

$$\begin{aligned} \min \quad & x^T W x \\ \text{s.t.} \quad & x_i = \pm 1, i = 1, \ldots, m \end{aligned}$$

函数的共轭

- 函数共轭：

$$f^*\text{是}f\text{的共轭，若}f^*(y)=\sup_{x\in dom\, f}(y^Tx-f(x))$$

- 拉格朗日对偶函数(Lagrange Function/Dual Function)

$$g(\lambda,v)=\inf_{x\in D}L(x,\lambda,v)$$

$$=\inf_{x\in D}(f_0(x)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i f_i(x)+\sum_{i=1}^{p}v_i h_i(x))$$

例

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \mathrm{s.t.} \quad & x = 0 \end{aligned}$$

- 解

例

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ s.t. \quad & Ax \le b, Cx = d \end{aligned}$$

- 解

对偶理论（Duality）

张伯雷

南京邮电大学 计算机学院、通达学院

https://bolei-zhang.github.io/course/opt.html

目录

- 拉格朗日函数

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

- 对偶函数

$$\begin{aligned} g(\lambda,v) &= \inf_{x\in D} L(x,\lambda,v) \\ &= \inf_{x\in D}\left(f_0(x)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i f_i(x)+\sum_{i=1}^{p}v_i h_i(x)\right) \end{aligned}$$

  - 弱对偶理论：如果$\lambda\geq 0$，则$g(\lambda,v)\leq p^*$
  - 性质：对偶函数为凹函数

对偶问题（dual problem）

- 原问题（Primal problem）

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x). \\ \text{s.t.} \quad & f_i(x) \le 0, \qquad i = 1, \dots, m \\ & h_i(x) = 0, \qquad i = 1, \dots, p \end{aligned}$$

- 对偶问题（Dual problem）

$$\begin{aligned} \max \quad & g(\lambda, \upsilon) \\ \text{s.t.} \quad & \lambda \ge 0 \end{aligned}$$

  - 通过最大化$g(\lambda, \upsilon)$，可以不断逼近于p^*的下界

$$\max_{\lambda \ge 0, \upsilon} g(\lambda, \upsilon) = \max_{\lambda \ge 0, \upsilon} \inf_{x \in D} L(x, \lambda, \upsilon) \le p^*$$

  - 该问题为一个凸优化问题，最优值为d^*，最优解为(λ^*, υ^*)

对偶间隙（duality gap）

- 对偶问题为凸优化问题
- $p^* - d^*$：对偶间隙（duality gap）
- 弱对偶（weak duality）： $d^* \le p^*$
  - 对凸优化问题与非凸优化问题都成立
  - 用于找到一个原问题的下界
- 强对偶（strong duality）： $d^* = p^*$

相对内点集（relative interior）

定义 5.13 (相对内点集) 给定集合 $\mathcal{D}$，记其仿射包为 $\textbf{affine}\,\mathcal{D}$（见定义2.14）. 集合 $\mathcal{D}$ 的**相对内点集** 定义为

$$\textbf{relint}\,\mathcal{D} = \{x \in \mathcal{D} \mid \exists\, r > 0,\ \text{使得}\ B(x,r) \cap \textbf{affine}\,\mathcal{D} \subseteq \mathcal{D}\}.$$

- $B(x,r)$：以x为中心的球

Slater条件

- 强对偶成立的充分条件
  - 对于一个凸优化问题

$$\min f_0(x).$$

$$\text{s.t.}\quad f_i(x) \le 0, \qquad i = 1, \ldots, m$$

$$\mathrm{Ax} = \mathrm{b}$$

  - Slater条件：对以上的凸优化问题，存在$x \in \operatorname{relint} D$，满足

$$f_i(x) < 0,\ i = 1, \ldots, m,\quad \mathrm{Ax} = \mathrm{b}$$

    - 则称为Slater条件，此时$d^* = p^*$
    - **对大多数凸优化问题，slater条件都成立；对非凸问题，强对偶也可能存在**
  - 弱Slater条件：若不等式约束为仿射时，只要可行域非空，必有$d^* = p^*$

例1

- 线性约束的最小二乘问题

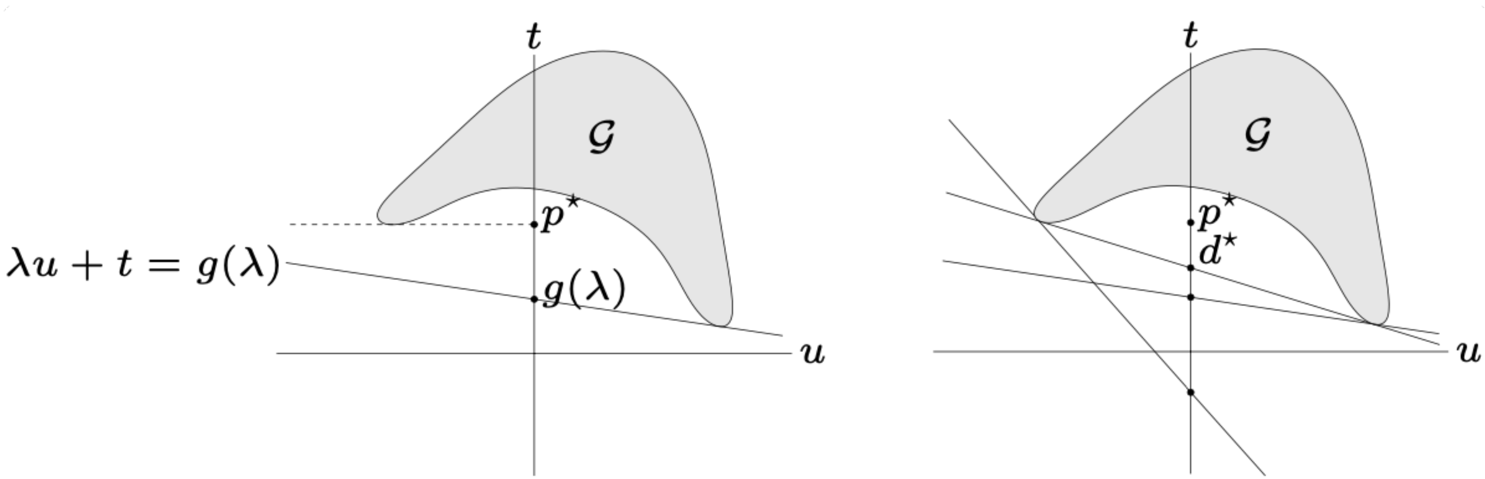
$$
\begin{aligned}
\min \quad & x^T x \\
\mathrm{s.t.} \quad & \mathrm{Ax} = b
\end{aligned}
$$

$d^* \leq p^*$

- 几何解释

$$\min f_0(x).$$
$$\text{s.t.}\quad f_1(x) \leq 0, \qquad i = 1, \dots, m$$

  - $G = \{(f_1(x), f_0(x)) | x \in D\}$
  - $p^* = \inf\{t | (u,t) \in G, u \leq 0\}$
  - $g(\lambda) = \inf\{\lambda u + t | (u,t) \in G\}$



$d^* = p^*$

- 几何解释

$$\min f_0(x).$$
$$\text{s.t.}\quad f_1(x) \le 0, \qquad i = 1, \dots, m$$

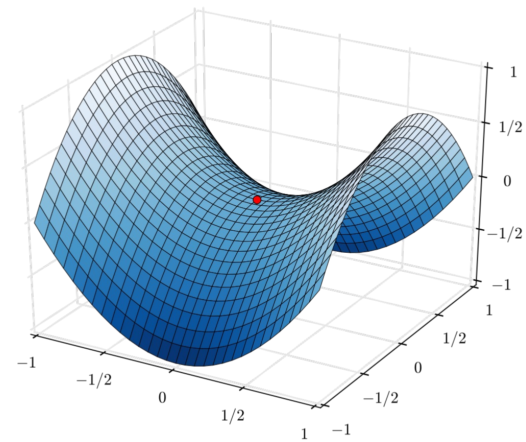
- $G = \{(f_1(x), f_0(x)) | x \in D\}$
- $p^* = \inf\{t | (u, t) \in G, u \le 0\}$
- $g(\lambda) = \inf\{\lambda u + t | (u, t) \in G\}$

$d^* = p^*$

- 鞍点解释
  - 极小极大不等式

$$\sup_{\lambda\geq 0}\inf_{x\in D} L(x,\lambda) \leq \inf_{x\in D}\sup_{\lambda\geq 0} L(x,\lambda)$$

$$d^* \leq p^*$$



  - 鞍点定理
    - 对一般的优化问题
    - 拉格朗日函数有鞍点⇔该点为原始/对偶问题的最优解，对偶间隙为0

根据对偶间隙求ϵ次优解

- 如果x是原始问题的可行解，λ, ν是对偶问题的可行解，则存在

$$f_0(x) - p^* \le f_0(x) - g(\lambda, \nu)$$

- ε-次优解集（ε – suboptimal set）

$$X_\varepsilon = \{x | x \in \mathrm{X}_f, f_0(x) \le p^* + \varepsilon\}$$

- $\varepsilon = f_0(x) - g(\lambda, \nu)$

- 原始问题可行解x与对偶问题可行解λ, υ对应的对偶间隙

$$p^* \in [g(\lambda, \nu), f_0(x)]$$

$$d^* \in [g(\lambda, \nu), f_0(x)]$$

算法

- 假设一个算法可以产生序列的可行解：
  - $x^{(k)}, (\lambda^{(k)}, \nu^{(k)})$，for $k = 1,2, \ldots$
- 预先设定一个期望的间隙值ε_{abs}
- 不断生成可行解，直至

$$f_0(x^{(k)}) - g(\lambda^{(k)}, \nu^{(k)}) \leq \epsilon_{\mathrm{abs}}$$

- 则$x^{(k)}$是ε_{abs}-次优解

互补松弛（complementary slackness）

- 假设强对偶成立，x^* 为原问题的最优解，λ^*, ν^* 为对偶问题的最优解

$$
\begin{aligned}
f_0(x^\star) &= g(\lambda^\star, \nu^\star) \\
&= \inf_x \left(f_0(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^\star f_i(x) + \sum_{i=1}^{p} \nu_i^\star h_i(x) \right) \\
&\leq f_0(x^\star) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^\star f_i(x^\star) + \sum_{i=1}^{p} \nu_i^\star h_i(x^\star) \\
&\leq f_0(x^\star).
\end{aligned}
$$

- 结论1： x^* 最小化 $L(x, \lambda^*, \nu^*)$.
- 结论2： $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m.$ （互补松弛 complementary slackness）

互补松弛（complementary slackness）

$$\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, \qquad i = 1, \dots, m$$

- 如果$\lambda_i^* > 0$，则$f_i(x^*) = 0$
- 如果$f_i(x^*) < 0$，则$\lambda_i^* = 0$

KKT条件（一般可微优化问题）

- 假设$f_0, f_1, \dots, f_m, h_1, \dots, h_p$都是可微的，但不一定为凸函数
- 假设强对偶成立，x^*为原问题的最优解，λ^*, ν^*为对偶问题的最优解
- 由于x^*最小化$L(x, \lambda^*, \nu^*)$，因此该点的梯度为0

$$\nabla f_0(x^\star) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^\star \nabla f_i(x^\star) + \sum_{i=1}^{p} \nu_i^\star \nabla h_i(x^\star) = 0.$$

- KKT条件：

$$\begin{array}{rcll}
f_i(x^\star) & \le & 0, & i = 1, \dots, m \\
h_i(x^\star) & = & 0, & i = 1, \dots, p \\
\lambda_i^\star & \ge & 0, & i = 1, \dots, m \\
\lambda_i^\star f_i(x^\star) & = & 0, & i = 1, \dots, m \\
\nabla f_0(x^\star) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^\star \nabla f_i(x^\star) + \sum_{i=1}^{p} \nu_i^\star \nabla h_i(x^\star) & = & 0, &
\end{array}$$

KKT条件（可微凸优化问题）

- 假设$f_0, f_1, \dots, f_m, h_1, \dots, h_p$都是可微的，且该问题为**凸优化问题**
- KKT条件是强对偶的充分必要条件

- 证明：假设 $(\tilde{x}, \tilde{\lambda}, \tilde{v})$ 为满足KKT条件一个可行解

$$
\begin{aligned}
g(\tilde{\lambda}, \tilde{\nu}) &= L(\tilde{x}, \tilde{\lambda}, \tilde{\nu}) \\
&= f_0(\tilde{x}) + \sum_{i=1}^{m} \tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{x}) + \sum_{i=1}^{p} \tilde{\nu}_i h_i(\tilde{x}) \\
&= f_0(\tilde{x}),
\end{aligned}
$$

- 可以得到：$\tilde{x}, (\tilde{\lambda}, \tilde{v})$ 满足强对偶，**同时为原始与对偶问题的最优解**

KKT条件的意义

- 对一般可微的优化问题（不一定为凸）
  - 对偶间隙为0$\Rightarrow$KKT条件成立
- **对可微的凸优化问题**
  - 对偶间隙为0$\Leftrightarrow$ KKT条件成立
- 意义:
  - 如果一个凸优化问题，存在很多约束条件，则往往难以求解
  - 很多凸优化问题可以通过求解KKT条件来解决

对偶理论（Duality）

张伯雷

南京邮电大学 计算机学院、通达学院

https://bolei-zhang.github.io/course/opt.html

例：等式约束的QP问题

$$
\begin{array}{ll}
\text{minimize} & (1/2)x^T P x + q^T x + r \\
\text{subject to} & Ax = b,
\end{array}
$$

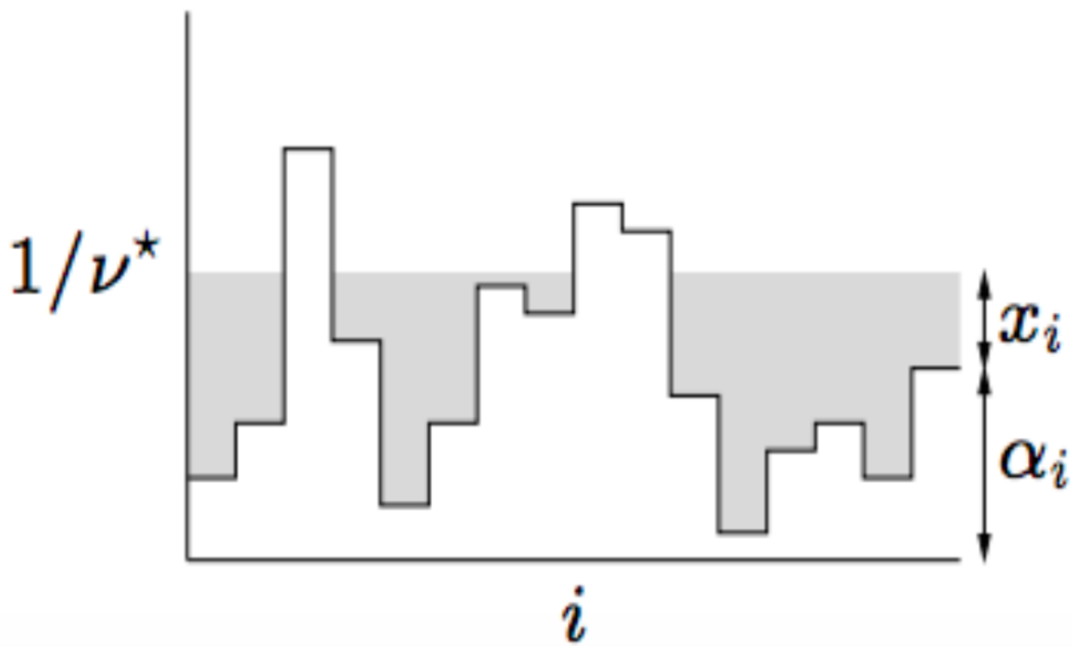
$P \in S_+^n$

例：最大熵问题

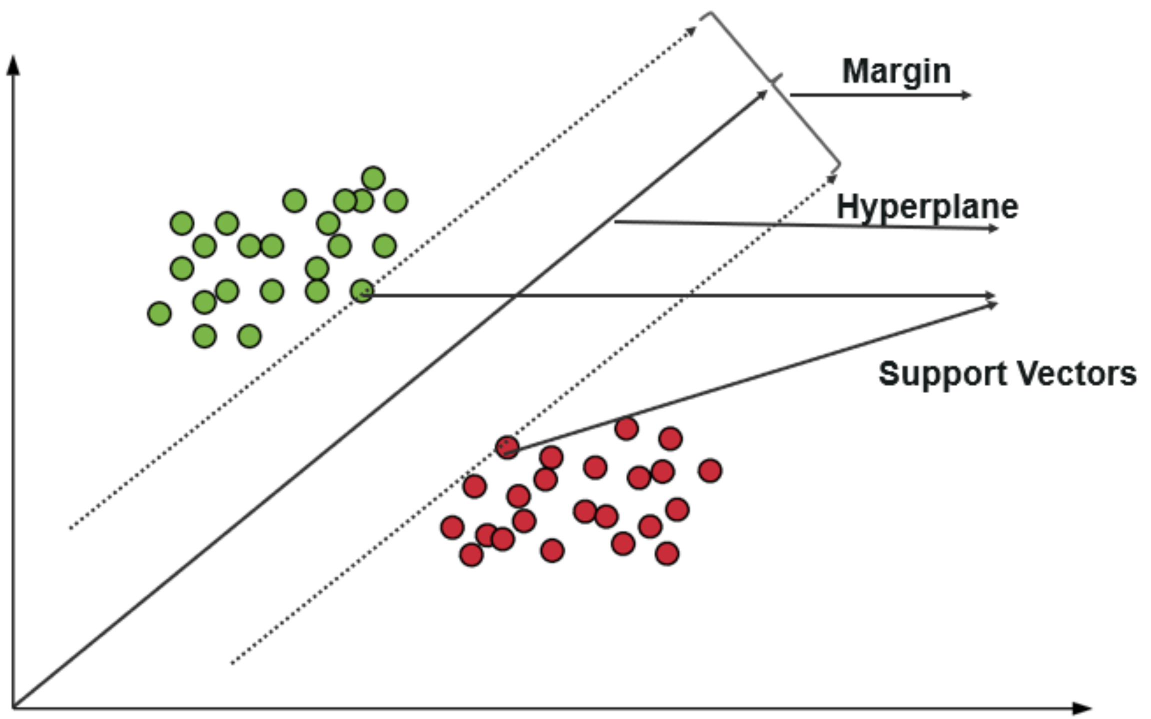
$$\min_x \ f_0(x) \doteq \sum_{i=1}^{n} x_i \log x_i \ : \ x \geq 0, \ \ \mathbf{1}^\top x = 1.$$

例：Water filling问题

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & -\sum_{i=1}^{n} \log(\alpha_i + x_i) \\ \text{subject to} & x \succeq 0, \quad \mathbf{1}^T x = 1, \end{array}$$



支持向量机（support vector machine）



SMO算法

- 输入：训练数据集$T=\{(x_1,y_1),(x_2,y_2),...,(x_N,y_N)\}$
  $x_i\in\mathcal{X}=R^n, y_i\in\mathcal{Y}=\{+1,-1\}, i=1,2,...,N$ ，精度ε
- 输出：近似解 α

(1)取初值$\alpha^{(0)}=0$ ，令 $k=0$

(2)选取优化变量α_1^k,α_2^k，解析求解两个变量的最优化问题，求得最优解$\alpha_1^{(k+1)},\alpha_2^{(k+1)}$，更新$\alpha$ 为$\alpha^{(k+1)}$;

(3)若在精度ε范围内满足停机条件

$$\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i=0$$

$$0\le\alpha_i\le C,\quad i=1,2,...,N$$

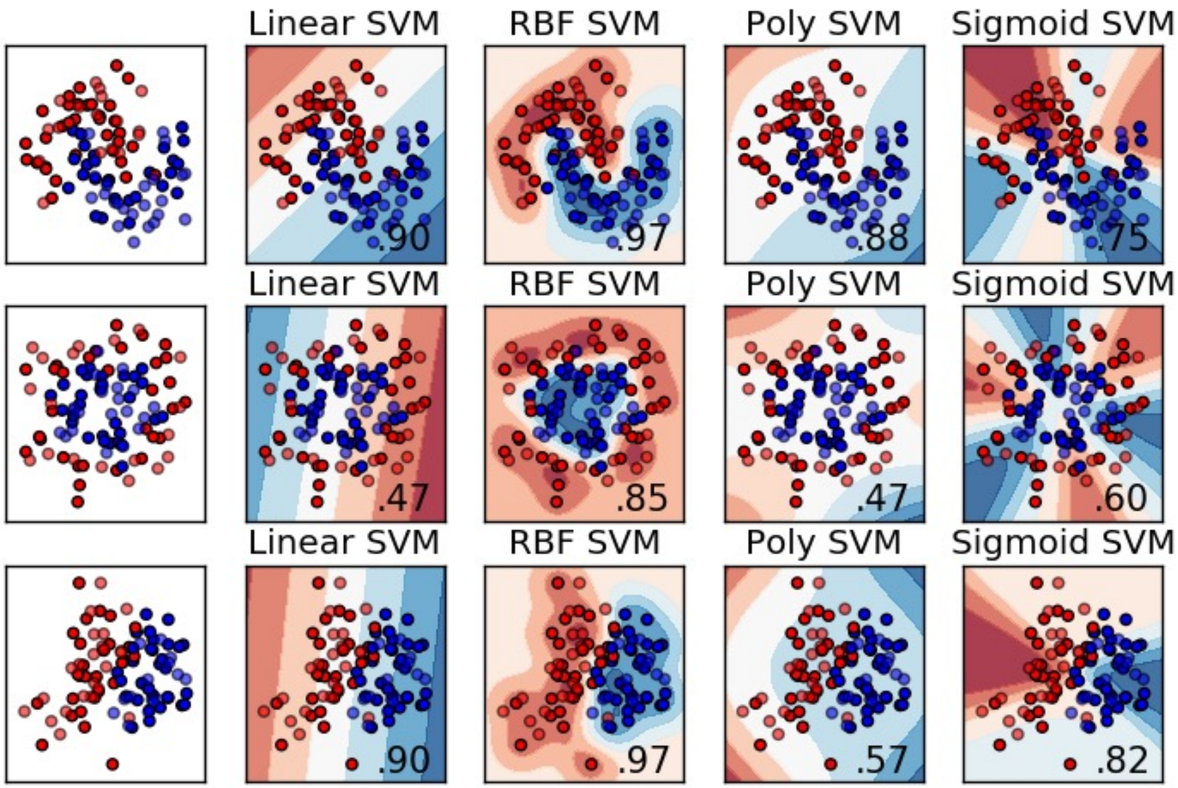
$$y_i\cdot g(x_i)=\begin{cases}\ge 1, & \{x_i|\alpha_i=0\}\\ =1, & \{x_i|0<\alpha_i<C\}\\ \le 1, & \{x_i|\alpha_i=C\}\end{cases}$$

$$g(x_i)=\sum_{j=1}^{N}\alpha_j y_j K(x_j,x_i)+b$$

则转(4);否则令k=k+1,转(2);

(4)取$\hat{\alpha}=\alpha^{(k+1)}$

SVM核方法



Linear SVM
RBF SVM
Poly SVM
Sigmoid SVM
.90
.97
.88
.75
Linear SVM
RBF SVM
Poly SVM
Sigmoid SVM
.47
.85
.47
.60
Linear SVM
RBF SVM
Poly SVM
Sigmoid SVM
.90
.97
.57
.82

作业

1. 求以下问题的KKT条件和对应的最优解：

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbb{R}^2} \quad & x_1, \\
\text{s.t.} \quad & 16-(x_1-4)^2-x_2^2 \geqslant 0, \\
& x_1^2+(x_2-2)^2-4=0.
\end{aligned}
$$

2. （1）以下优化问题是否为凸优化问题，求出最优解；

（2）写出该问题的对偶问题，并求出对偶问题的最优解以及对偶间隙

$$
\min_{x\in\mathbb{R},y>0} \quad e^{-x}, \quad \text{s.t.} \quad \frac{x^2}{y} \leqslant 0.
$$

实验二

- 使用最小二乘对房屋价格（数据集:题目1数据.xlsx）进行拟合，需要对前350行作为拟合，并在351-414行上测试拟合结果，并对测试数据输出评价指标均方误差。
  1. 使用CVXOPT实现最小二乘;
  2. 对优化目标增加L2范数约束;
  3. 对以上情况，分别测试从0.01, 0.1, 1, 10, 100,1000不同的拉格朗日乘子λ的时候，优化的参数在训练数据和测试数据的均方误差，并以拉格朗日乘子λ为横坐标（log），均方误差为纵坐标，画出曲线图

作业

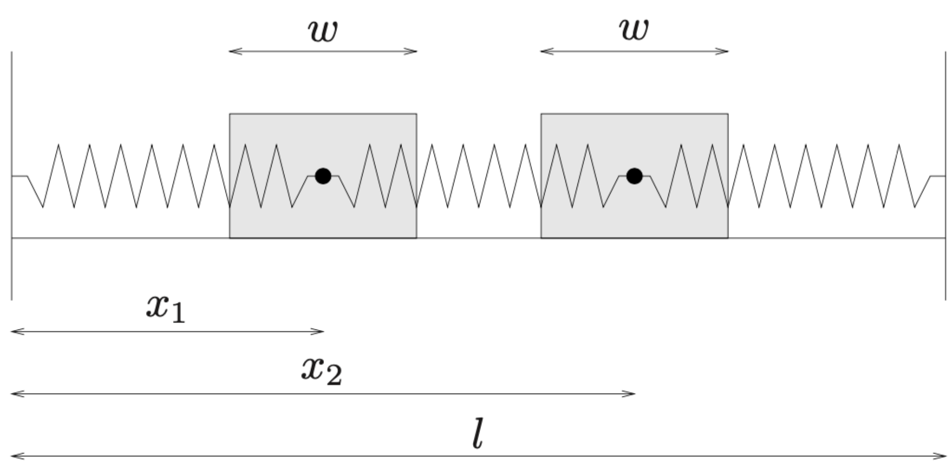
- 1：$f(x) = x^{-2}, \mathrm{x} \neq 0$，是否为凸函数，请说明理由

- 2：0范数：$||\mathrm{x}||_0 = \mathrm{x}$中非零元素的个数，是否为范数，是否为凸函数，写出证明过程

- 3. 求证：$f(x, y) = \mathrm{x}^2/y$对所有的$y > 0$都为凸函数

- 4*. 已知$\forall x, v \in dom\, f, g(t) = f(x + tv)$是凸函数，求证f是凸函数

KKT条件的机械学解释



系统的势能：

$$f_0(x_1,x_2)=\frac{1}{2}k_1x_1^2+\frac{1}{2}k_2(x_2-x_1)^2+\frac{1}{2}k_3(l-x_2)^2,$$

系统的均衡点为满足以下约束时的最小势能

$$w/2-x_1\le 0,\qquad w+x_1-x_2\le 0,\qquad w/2-l+x_2\le 0.$$

KKT条件的机械学解释

- 引入$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$为拉格朗日乘子，KKT条件为
  1. 约束条件
  2. 非负拉格朗日： $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \geq 0$
  3. 互补松弛

$$\lambda_1(w/2 - x_1) = 0, \qquad \lambda_2(w - x_2 + x_1) = 0, \qquad \lambda_3(w/2 - l + x_2) = 0,$$

  4. 梯度为0

$$\begin{bmatrix} k_1 x_1 - k_2(x_2 - x_1) \\ k_2(x_2 - x_1) - k_3(l - x_2) \end{bmatrix} + \lambda_1 \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} + \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} + \lambda_3 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0.$$