Harbin Institute of Technology Spring, 2023
School of Computing Assignment 2
Student Name: 刘建
student ID: 22B903037

CS64001: Convex Optimization

all code can be found here

T0

function	Minimum value	Minimum point
Ackley	4.440892098500626e-16	[0,0]
Booth	0.0	[1. 3.]
Branin	0.3978873577300295	[-3.1415928 12.27499991]
Flower	0.0	[0,0]
Michalewicz	-1.6026068201970993	[2.20290554 2.20290552]
Rosenbrock Banana	0.0	[1. 1.]
Wheeler	-0.9999999999568931	[0.99999408 1.5000058]

表 1: 尝试各个方法在 8 个测试函数上的性能表现（只尝试了七个），只需要在代码中体现即可）

T1

用共轭梯度法求解下列问题：

method	Minimum value	Minimum point	iterations
共轭梯度法	-1.25	[-1. 1.5]	2

T2

分别使用黄金分割，斐波那契算法，二分法和 Dichotomous 解下列问题：

Problem a:

method	Minimum point
Golden Section Search	0.25735421375199785
Fibonacci Searchh	0.2647058823529412
Bisection Search	0.2647058823529412
Dichotomous Search	0.25394531249999996
Shubert-Piyavskii (L = 5)	-0.0277632

Problem b:

method	Minimum point
Golden Section Search	3.608630593568614
Fibonacci Searchh	3.6140583554376664
Bisection Search	3.5888671875
Dichotomous Search	3.5909374999999994
Shubert-Piyavskii (L = 150)	0

T3

使用不精确的一维搜索算法 Goldstein，Wolfe-Powell 方法解下列问题 $\min f(x+\lambda d)$：

$$f(x)=100(x_2-x_1^2)^2+(1-x_1)^2, x_1=(-1,1)^T, d=(1,1)^T$$

method	lambda
Goldstein	0.9999995231628418
Goldstein-Price	0.00390625
Wolfe-Powell	0.00390625

T4

计算凸函数的次微分 (1) $f(x_1,x_2,x_3)=max(|x_1|,|x_2|,|x_3|)$, 在点 $(0,0,0)$ 处. 由次梯度定义 $\partial f = g|g^t(y-x)\le f(y)-f(x)\forall y\in \mathbf{dom}f$,

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &\ge f(\mathbf{0})+\mathbf{g^t x}\\ \max\{|\mathbf{x}|\} &\ge 0+\mathbf{g^t x}\\ \max\{|\mathbf{x}|\} &\ge \mathbf{g^t x}\end{aligned}$$

故有：$||g||_1\le \mathbf{1}$

注：无穷范数的对偶范数是 1-范数.

(2) $f(x)=e^{|x|}$, 在 $x=0$ 处...

$$f(x)\ge f(0)+gx \leftarrow \begin{cases} x>0 \qquad g<\frac{e^x-1}{x} \quad s.t. g<\lim_{x\to 0^+}\frac{e^x-1}{x}=1\\ x<0 \qquad g>\frac{e^{-x}-1}{x} \quad s.t. g>\lim_{x\to 0^-}\frac{e^{-x}-1}{x}=-1\end{cases}$$

所以次梯度 g $=[-1,1]$

(3) $f(x_1,x_2)=max(x_1+x_2-1,x_1-x_2+1)$, 在点 $(1,1)$ 处, 由 subgradient basic calculus rules and

pointwise maximum property 可得：

$$\partial f = conv \cup_{i\in I(x)} \partial f_i(x)$$
$$\partial f_1(x) = A_1, \quad A_1 = (1,1)^T$$
$$\partial f_2(x) = A_2, \quad A_2 = (1,-1)^T$$

T5

DFP 方法求解问题：$\min 10 * x_1^2 + x_2^2$, $H^{(0)=I}, x^{(0)} = (0.1,0)^T$. 精确一维搜索.

method	Minimum point	Minimum value	iterations
DFP	[-1.38777878e-17 0.00000000e+00]	1.925929944387236e-33	2

T6

使用 BFGS 求解问题: $\min x_1^2 + 4x_2^2 - 4x_1 - 8x_2$, $H^{(0)=I}, x^{(0)} = (0,0)^T$. 精确一维搜索.

method	Minimum point	Minimum value	iterations
DFP	[-1.38777878e-17 0.00000000e+00]	1.925929944387236e-33	2

Q7

分别使用 DFP，BFGS，FR conjugate 解优化问题，并比较算法的优缺点.

分析：

DFP 法和 BFGS 法都是拟牛顿法，主要是为了解决牛顿法中 Hesse 逆矩阵不可解的问题。可以验证的，DFP 法和 BFGS 法提出的矫正矩阵能够得到满足拟牛顿条件的矩阵。

拟牛顿条件：

$$p^k = x^{k+1} - x^k$$
$$q^k = g^{k+1} - g^k$$
$$p^k = H_{k+1} q^k$$

DFP 提出的矫正矩阵为：

$$H_{k+1} = H_k + \frac{p(k) p^{(k)T}}{p(k) q^{(k)T}} - \frac{H_k q^{(k)} q^{(k)T H_k}}{q^{(k)T} H_k q^{(k)}}$$

可以验证的 DFP 法构造的 H_k 矩阵都是对称正定矩阵，故每次搜索方向均是函数下降方向。在目标函数是二次函数 $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x + c$ 时，可以证明 DFP 法构造的搜索方向是关于 A 的一组共轭方向，有限步迭代收敛至极值点。

和 DFP 法直接估计 Hesse 的逆矩阵不同，BFGS 法的想法是先估计 Hesse 矩阵本身，然后经过变换，可以得到 BFGS 法的矫正公式:

$$H_{k+1}^{BFGS} = H_k + (1 + \frac{q^{(k)T} H_k q^{(k)}}{p^{(k)T} q^{(k)}}) \frac{p^{(k)} p^{(k)T}}{p^{(k)T} q^{(k)}} - \frac{p^{(k)} q^{(k)T} H_k + H_k q^{(k)} p^{(k)T}}{p^{(k)T} q^{(k)}}$$

实际计算经验表明 BFGS 法的数值稳定性更好。拟牛顿算法是**无约束优化问题**中最有效的一类算法，在实际计算中规避了二次导数的计算（用一阶导数近似），当构造的 H_k 正定时，搜索方向都是下降方向，且具有二次终结性，对于更一般的情况，具有超线性的收敛速度。但是，拟牛顿法需要较大的存储空间，在求解大型问题可能会遇到困难。

FR-conjugate 法是一类共轭梯度法，实际是改造了最速下降法，对于目标函数是二次函数的情况，在计算 $x^{(k+1)}$ 出梯度方向后，并不直接将搜索方向 d_{k+1} 定为负梯度 $-g_{k+1}$ 方向，而是利用了上次搜索方向 d_k，使得 d_{k+1}, d_k 是关于 A 的一组共轭方向。这样做的好处在于，可以利用共轭方向的性质，算法具有二次终结性, 有限次迭代可收敛。

和拟牛顿法相比，共轭方向法的优点在于存储量较小, 在求解大型优化问题时占优势。

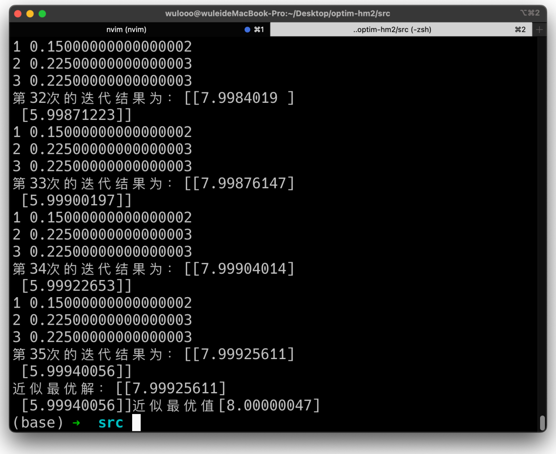

图 1: 7-DFP

Q8

无约束优化问题求解基本思想:

无约束优化问题的求解主要有两大类算法:

- 一类是利用导数信息的算法，包括最速下降法，牛顿法，共轭梯度法，拟牛顿法。这类方法是利用梯度信息，来选取合适的搜索方向，搜索方向要要满足使得函数值下降的要求。
- 另一类算法是不利用导数信息的直接优化方法，包括模式搜索，Rosenbrock 法，单纯形搜索，Powell 方法等，实际上是根据规则在空间中挑选线性无关的搜索方向，自然地，这类方法对于求解变量不多的优化问题比较有效。

一般而言，无约束优化问题的求解涉及两个关键的问题，一个是确定当前点的搜索方向，二是确定搜索步长。

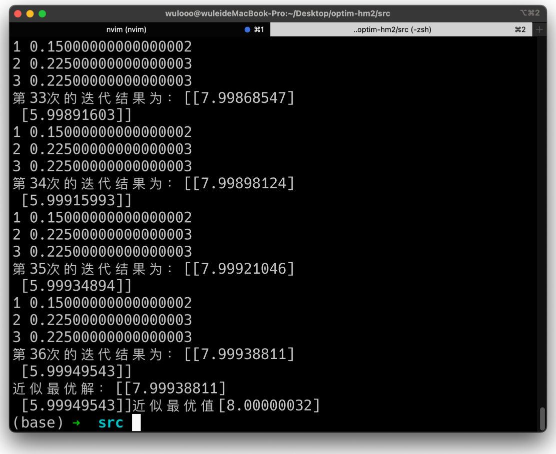

图 2: 7-BFGS

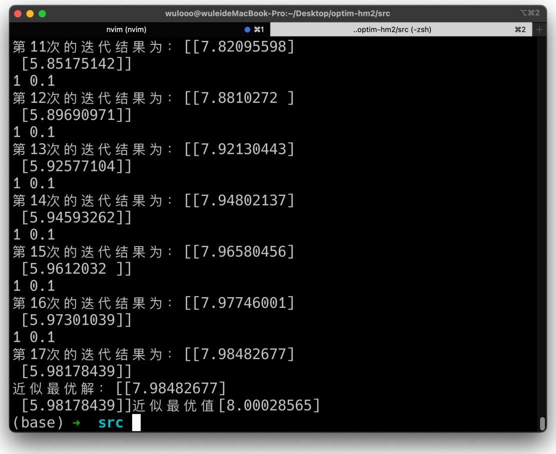

图 3: 7-FR

如何将非凸优化问题转化成凸优化问题：

首先需要说明相比于非凸问题，凸问题的优势。对于凸问题，局部最优解就是全局最优解（更准确的说法是严格凸函数），同时，非凸问题的困难在于在高维空间中，存在许多鞍点（梯度为零，但是 Hesse 矩阵不定）。

回顾凸问题的定义，需要满足两个条件（1）问题的可行域是一个凸集（2）目标函数是可行域上的一个凸函数。

在非凸问题转化成凸问题的过程中可以从这两个方向入手：

- 修改目标函数，使其成为一个凸函数，这样就可以满足条件（1）。
- 抛弃一些约束条件，或者对约束条件做松弛处理，使得新的可行域是凸集，同时包含原可行域的所有点。

如何将有约束问题转化成无约束优化问题：

可以将对于可行域的约束条件作为惩罚项加入到原目标函数中，比如常见的罚函数方法（内点法，外点法）；同时为了解决罚函数方法中的缺陷，提出了增广拉格朗日方法。

无约束优化求解的基本思想：

无约束优化问题是寻找一个解，使得目标函数值最小（或最大）。在无约束优化中，基本思想可以归纳为以下几点：

梯度信息：在求解无约束优化问题时，通常会利用目标函数的一阶导数（梯度）或二阶导数（Hessian 矩阵）来确定搜索方向。梯度信息提供了目标函数在当前位置下降最快的方向。

一维搜索：在确定了搜索方向后，需要沿该方向进行一维搜索以确定步长。步长的选取可以是精确的，如通过求解最小化问题，也可以是近似的，如使用启发式规则。

迭代更新：根据搜索方向和步长，更新解的位置。不断迭代，直到满足收敛条件，如迭代次数、解的变化范围、梯度范数等。

收敛性能：选择合适的优化算法可以提高收敛速度和准确性。例如，二阶方法（如牛顿法、拟牛顿法）通常具有较快的收敛速度，但需要更多的计算资源。

将非凸优化问题转化为凸优化问题：

将非凸优化问题转化为凸优化问题并不总是可能的。然而，在某些情况下，可以采用以下方法：

凸松弛：将非凸约束或目标函数替换为它们的凸上界或凸下界，从而得到一个凸问题。求解凸问题后，可以得到原问题的近似解。

分段逼近：将非凸函数分段为凸子问题，然后在每个子区间内求解凸优化问题。通过合并子问题的解，可以得到原问题的近似解。

逐次凸规划：使用凸优化技术逐次求解非凸问题。在每次迭代中，用一个凸函数逼近非凸目标函数，然后求解凸问题。将得到的解作为下一次迭代的初始点，直至满足收敛条件。

将有约束问题转化为无约束问题：

有约束优化问题可以通过以下方法转化为无约束优化问题：

惩罚函数法：将约束条件转化为惩罚项，加到目标函数中。这样，违反约束条件时，目标函数值会变得很大。通过调整惩罚系数，可以使得有约束问题转化为无约束问题。

拉格朗日乘数法：引入拉格朗日乘子，将约束条件与目标函数结合成一个拉格朗日函数。通过优化拉格朗日函数，可以将有约束问题转化为无约束问题。然后，可以使用无约束优化方法求解拉格朗日函数。

投影梯度法：在每次迭代更新解的位置后，将解投影回可行域。这样，无约束优化过程始终保持在可行域内，最终得到有约束问题的解。

障碍函数法（内点法）：将约束条件转化为障碍函数，加到目标函数中。障碍函数的值在可行域内为 0，而在不可行域内为正无穷。通过调整障碍函数的参数，可以在可行域内求解无约束优化问题。

序列二次规划（SQP）：将有约束问题转化为一系列无约束二次规划子问题。在每次迭代中，使用当前解和梯度信息构建一个二次规划子问题，然后使用无约束优化方法求解子问题。将子问题的解作为下一次迭代的初始点，直至满足收敛条件。

通过这些方法，可以将有约束问题转化为无约束问题，从而利用无约束优化技术求解原问题。然而，需要注意的是，这些方法并不保证始终能找到全局最优解，特别是在非凸问题中。在实际应用中，需要根据问题的特点选择合适的方法。

Q9

总结最速下降法，牛顿法，修正牛顿法的统一公式描述：

$$x^{k+1} = x^k - \lambda_k d^k$$

其中，λ_k 是每次迭代的步长，$d^{(k)}$ 是每次迭代的搜索方向。对于上述方法：

- 最速下降法：搜索方向是 $-\nabla f(x^k)$, 可以通过方向导数来证明负梯度是在 x^k 点局部下降最快的方向（并非全局下降最快的方向），每次迭代步长可以通过一维搜索方法确定最优的 λ_k。
- 牛顿法：搜索方向是 $-\nabla^2 f(x^k)^{-1}\nabla f(x^k)$, 每次迭代步长为 1。牛顿法的基本思想是 x^k 点附近用二阶的泰勒展开，用二次函数的极值点近似目标函数的极值点，但是如果 x^k 不满足前提，搜索方向不能保证是下降方向。
- 修正牛顿法：牛顿法存在的问题是 Hesse 的逆矩阵不一定可解，且迭代步长为定值。修正牛顿法的思想是（1）修正 Hesse 矩阵为 $B_k = \nabla^2 f(x^k) + \epsilon I$，同时用一维搜索方法确定最优的 λ_k。

变尺度法的基本思想：

和修正牛顿法不同，变尺度法通过秩 2 近似，直接求解 Hesse 矩阵的逆矩阵的近似矩阵 H_k, 使得近似矩阵 H_k 满足拟牛顿条件然后用一维搜索算法确定搜索步长。

$$p^k = x^{k+1} - x^k$$
$$q^k = g^{k+1} - g^k$$
$$p^k = H_{k+1} q^k$$

Q10

随机梯度下降改良算法求解上述问题：

选取 Q6 中的优化问题，选择用带有动量的梯度下降优化，优化结果如下图所示，可以看到相比于 BFGS，在这个问题上，随机梯度下降改良算法的收敛速度更快。

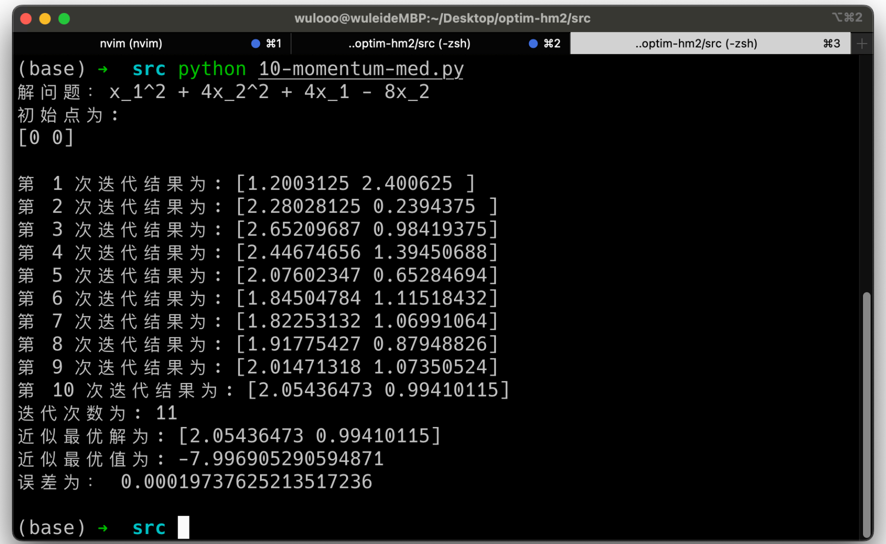

图 4: 10-MomentumGD

Q11

一阶优化算法的加速算法思想（参考林宙晨老师讲义）。

paper: `https://zhouchenlin.github.io/Publications/2020-PIEEE-Review.pdf`

book: `https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/978-981-15-2910-8.pdf`

主要可以从以下个方面考虑：

- 随机梯度：对于较大规模数据，可以通过随机选取一定量的样本数据计算梯度，达到减少计算量的目的。
- 动量加速：考虑最速下降法在由于相邻两次的搜索方向正交，导致在最优点附近出现 zig-zag 现象。考虑用利用上一步的梯度信息加速收敛。
- Nesterov 动量加速：考虑动量加速算法中，梯度变化滞后于函数变化，故需要预测下一时刻的梯度，来修正动量。

Q12

思考共轭函数和对偶性的关系。

参考：https://zhuanlan.zhihu.com/p/265522736

https://zhuanlan.zhihu.com/p/107483229

对偶函数：任意适当函数 f 的对偶函数定义为

$$f^*(y) = \sup_{x \in \mathbf{dom} f} \{y^T x - f(x)\}$$

根据凸函数的保凸运算，可以知道共轭函数 $f^*(y)$ 是凸函数。通过共轭函数的定义，容易得到 Fenchel 不等式即

$$f(x) \geq y^T x - f^*(y) = g(x, y)$$

在上式中，任意的 y 都能得到一个对 $f(x)$ 下界的刻画。面对 $f(x)$ 非凸的场景，可以通过将目标函数设置为 f^{**}, 即考虑原问题共轭的共轭，此时 f^{**} 是一个凸函数，求解该问题，可以得到原非凸问题最优解的一个下界。

注：'共轭'之名是指原函数和共轭函数之间的关系是相互的，对于凸问题 f，其共轭函数的共轭即 f^* 的共轭是 f。

共轭函数和拉格朗日对偶函数之间关系密切。考虑一个带约束的优化问题：

$$\min f_0(x) \quad f: R^n \leftarrow R \qquad \text{s.t.} \begin{cases} Ax \leq b, & g: R^m \leftarrow R^n \\ Cx = 0, & h: R^n \leftarrow R^l \end{cases}$$

首先可以写出原问题的拉格朗日对偶函数：

$$g(u, v) = \inf_{x \in \mathbf{dom} f} \{f_0(x) + u^T(Ax - b) + v^T Cx\}$$

可以将上式改写成下面的形式：

$$\begin{aligned} g(u, v) &= -b^T u + \inf_x \{f_0(x) + (A^T u + C^T v)x\} \\ &= -b^T u - \sup_x \{-(A^T u + C^T v)x - f_0(x)\} \\ &= -b^T u - f^*\{-(A^T u + C^T v)\} \end{aligned}$$