

Essence of the lecture (19/21/22/23/24)

凸问题：

- 非凸、非拟凸问题的松弛（零范数的松弛）
- 广义凸问题及相关定义
- 问题的等价变换
- 狭义凸问题
- 凸问题的性质：局部最优 = 全局最优，目标函数可微情况下的最优解

零范数的松弛：

在一维条件下，零范数是拟凸函数（非凸），在 $n \geq 2$ 情况下，零范数非拟凸，此时主要有两种松弛方法。

- 松弛为 l_1 范数，该函数为凸函数
- 松弛为 $\log(ax^2 + 1)$ ，该函数非凸，但是是拟凸函数

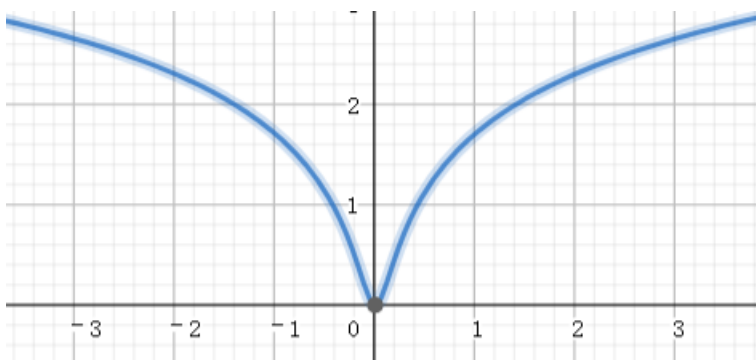


图 1: $f(x) = \log(ax^2 + 1)$, $a \rightarrow +\infty$ 时整体趋近零范数，拟凸函数

广义凸问题：凸目标，凸集约束

一般优化问题的描述：

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

x 称为优化变量 (optimization variable), f_0 称为目标函数、损失函数、效用函数, $f_i(x) \leq 0$ 称为不等式约束 (inequality constraint), $h_i(x) = 0$ 称为等式约束 (equality constraint), $m = p = 0$ 时为无约束 (unconstrained) 问题

概念定义 (注意 \inf 可以对应 \min):

优化问题的域 (domain): $D = \bigcap_{i=0}^m \text{dom } f_i \cap \bigcap_{i=1}^p \text{dom } h_i$

可行解集 (feasible set): $X_f = \{x \mid x \in D, f_i(x) \leq 0, i = 1, \dots, m, h_i(x) = 0, i = 1, \dots, p\}$

最优值 (optimization value): $p^* = \inf \{f_0(x) \mid x \in X_f\}$, 若 $X_f = \emptyset$, $p^* = +\infty$

最优解 (optimization point/solution): 若 x^* 可行, 且 $f_0(x^*) = p^*$, 称 x^* 为最优解

ε 次优解集 (ε -suboptimal set): $X_\varepsilon = \{x \mid x \in X_f, f_0(x) \leq p^* + \varepsilon\}$

局部最优解 (locally optimal): $f_0(x) = \inf \left\{ f_0(z) \mid \begin{array}{l} f_i(z) \leq 0, i = 1, \dots, m \\ h_i(z) = 0, i = 1, \dots, p \\ \|z - x\| \leq R \end{array} \right\}$, 解集为 X_{loc}

不等式约束采用 \leq 而非 $<$ 的原因

若 $x \in X_f$, $f_i(x) = 0$, 则 $f_i(x) \leq 0$ 为活动 (active) 约束

若 $x \in X_f$, $f_i(x) < 0$, 则 $f_i(x) \leq 0$ 为非活动 (inactive) 约束

而所有的 $<$ 约束都可以转化为 \leq 约束

例如 $\text{money} < 100 \Rightarrow -|\log(100 - \text{money})| \leq 0$

问题的等价变换

例: Box Constraint

$$l_i \leq x \leq u_i \Rightarrow \begin{cases} l_i - x_i \leq 0 \\ x_i - u_i \leq 0 \end{cases}$$

例: 将问题的量纲做标准化

$$\begin{aligned} \min \quad & \alpha_0 f_0(x) \\ \text{s.t.} \quad & \alpha_i f_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & \beta_i h_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, p \end{aligned}$$

例: 利用函数进行等价变换

ψ_0	$R \rightarrow R$	单增
ψ_1, \dots, ψ_m	$R \rightarrow R$	$\psi_i(u) \leq 0 \Leftrightarrow u \leq 0$
$\varrho_1, \dots, \varrho_p$	$R \rightarrow R$	$\varrho_i(u) = 0 \Leftrightarrow u = 0$

$$\begin{aligned}
 & \min \psi_0(f_0(x)) \\
 & s.t. \quad \psi_i(f_i(x)) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m \\
 & \quad \varrho_i(h_i(x)) = 0 \quad i = 1, \dots, p
 \end{aligned}$$

$$\text{如 } \min \|Ax - b\|_2 \Leftrightarrow \|Ax - b\|_2^2$$

例：消除等式约束

$\{h_i(x) = 0, i = 1, \dots, p\}$ 看作一组方程, $X = \varrho(Z)$, $Z \in R^k$, $\varrho: R^k \rightarrow R^n$

$$\begin{aligned}
 & \min f_0(\varrho(x)) \Rightarrow X^* = \varrho(Z^*) \\
 & s.t. \quad f_i(\varrho(x)) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m
 \end{aligned}$$

例：消除线性等式约束

在线性等式约束的情况下, $h_i(x) = 0 \Rightarrow Ax - b = 0$

此时若方程无解, 则问题无解, 若 A 可逆, 则 $X = A^{-1}b$

否则可将等式约束化为 $X = FZ + X_0$, FZ 在 A 的零空间, 即将求解 n 维的 X 化为求解 n-r 维的 Z (因为初等变换 F 不改变 Z 的秩)

只有在有必要的情况下这样做, 有时候会带来麻烦 (具体麻烦未提及)

狭义凸问题:

$$\begin{aligned}
 & \min f_0(x) && f_0(x) \text{ 为凸} \\
 & s.t. \quad f_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m && f_i(x) \text{ 均为凸} \\
 & \quad a_i^T x = b_i \quad i = 1, \dots, p && \text{等式约束为仿射函数}
 \end{aligned}$$

例：引入松弛变量 (slack variable) s_i

虽然是一个升维的情况，但是有时可以将问题化为非常特殊的形式更易求解

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s.t.} \quad & s_i \leq 0 \\ & f_i(x) - s_i = 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & a_i^T x = b_i \quad i = 1, \dots, p \end{aligned}$$

类似有相关问题 ($\max \text{ concave} \Leftrightarrow \min \text{ convex}$)

Quasi-convex optimization f_0 为拟凸函数, f_i, h_i 为凸函数

None-convex optimization f_0 为凹函数, f_i, h_i 为凸函数

求证：凸问题的局部最优即为全局最优

设 x 不是全局最优, $\exists y \in X_f, \text{ s.t. } f_0(y) < f_0(x)$

$\because x$ 为局部最优, $\Rightarrow \|y - x\|_2 > R$

令 $z = \theta y + (1 - \theta)x$, 取 $\theta = \frac{R}{2\|y - x\|_2} \in [0, 1]$

$\therefore z$ 为凸组合, $z \in X_f$ 且 $f_0(z) \leq \theta f_0(y) + (1 - \theta)f_0(x)$

$\|z - x\|_2 = \theta\|y - x\|_2 = \frac{R}{2} < R$, 由 x 局部最优有 $f_0(x) \leq f_0(z)$

由此应该有 $f_0(y) < f_0(x) \leq f_0(z)$ (两条蓝色结论矛盾, 因此原假设成立)

分析：目标函数可微情况下的最优解

考虑凸函数的一阶条件: $f(y) \geq f(x) + \nabla f^T(x)(y - x)$

对于全局最优 x^* , 此时一定有 $\nabla f_0^T(x^*)(y - x^*) \geq 0$

例：约束仅为等式约束的情况, $\min f_0(x) \text{ s.t. } x \geq 0$

此时问题仅有 $Ax = b$ 这一约束条件, 由 $Ax^* = b, Ay = b \Rightarrow y = x^* + v, v \in \text{Null}(A)$

回代, 有 $\nabla f^T(x)v \geq 0$

要求对 $\forall v \in \text{Null}(A)$ 均成立 $\Rightarrow \begin{cases} v = 0 \\ \nabla f(x) \text{ 与 } \text{Null}(A) \text{ 正交} \end{cases}$

第一种情况下, $x = y$, 说明有且仅有一解, $x = A^{-1}b$

例：约束仅为非负约束， $\min f_0(x) \text{ s.t. } x \geq 0$

即在给定 x 的情况下，对于 $\forall y \geq 0$, $\nabla f^T(x)(y - x) \geq 0 \Rightarrow \nabla f^T(x)y - \nabla f^T(x)x \geq 0$

$f^T(x)y = \sum a_i x_i$ ，为了保证对于任意 y 成立，故 $a_i \geq 0 \Leftrightarrow \nabla f(x) \geq 0$

结合 $x \geq 0$ ，有 $\nabla f^T(x)x \geq 0$ ，又取 $y=0$ 时，有 $\nabla f^T(x)x \leq 0$

$$\text{综上，有 } \nabla f^T(x) = 0 \Rightarrow \begin{cases} x \geq 0 \\ \nabla f(x) \geq 0 \\ (\nabla f(x))_i x_i = 0 \end{cases} \quad (\text{互补条件: Complementarity})$$

Essence of the lecture (25/26/27/28)

典型的凸问题：

- 线性规划
- 线性分数规划
- 二次规划（二次约束的二次规划）
- 半正定规划
- 多目标优化

线性规划：

线性规划要求目标和约束均为线性

linear program 线性问题（名词）

linear programing 线性问题求解（动词）

$$\begin{aligned} \min \quad & c^T x + d \\ \text{s.t.} \quad & Gx \leq h, Ax = b \end{aligned}$$

线性规划的等价变换

$$\begin{array}{ll} \min & c^T x + d \\ \text{s.t.} & Gx + s = h \\ & Ax = b \\ & s \geq 0 \end{array} \qquad \begin{array}{ll} \min & c^T x^+ - c^T x^- + d \\ \text{s.t.} & Gx^+ - Gx^- + s = h \\ & Ax^+ - Ax^- = b \\ & s \geq 0, x^+ \geq 0, x^- \geq 0 \end{array}$$

通过这种变换能够将问题化为线性约束以及非负约束，这方便使用函数 (linprog) 进行求解。

线性分数规划 (linear fractional programming)

BTW, 线性分数函数保凸, 是拟凸函数但不是凸函数, 例如 $1/x$

$$\begin{array}{ll}
 (P_0) & \min \quad \frac{c^T x + d}{e^T x + f} \\
 & s.t. \quad Gx \leq h \\
 & \quad Ax = b \\
 & \quad e^T x + f > 0
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{ll}
 (P_1) & \min \quad c^T y + dz \\
 & s.t. \quad Gy - hz \leq 0 \\
 & \quad Ax - bz = 0 \\
 & \quad e^T y + fz = 1 \\
 & \quad z \geq 0
 \end{array}$$

证明两问题等价的思路: P_1 的可行解在 P_2 可行, P_2 的可行解在 P_1 可行, 同时二者的值相同

证明: 1) 若 x 在 P_0 可行, 取 $y = \frac{x}{e^T x + f}$, $z = \frac{1}{e^T x + f}$

$$\begin{cases}
 Gy - hz = \frac{Gx - h}{e^T x + f} \leq 0 \\
 Ay - bz = \frac{Ax - b}{e^T x + f} = 0 \\
 e^T x + fz = \frac{e^T x + f}{e^T x + f} = 1 \\
 z > 0
 \end{cases}
 \Rightarrow x \text{ 同时在 } P_1 \text{ 可行, 同时目标函数值均为 } \frac{c^T x + d}{e^T x + f}$$

2) 若 y, z 在 P_1 中可行

当 $z > 0 \Rightarrow x = \frac{y}{z}$ 在 P_0 可行, 且目标函数值均为 $c^T y + dz$

当 $z = 0$, 此时有 $Gy \geq 0$, $Ay = 0$, $e^T y = 1$, 设 x_0 为 P_0 的可行解, 找到射线 $x = x_0 + ty$, $\forall t \geq 0$ 对 P_0 可行

$$\begin{cases}
 Gx = Gx_0 + Gty \leq h \\
 Ax = Ax_0 + tAy = b \\
 e^T x + f = e^T x_0 + f + te^T y > 0
 \end{cases}
 \Rightarrow
 \begin{array}{l}
 \text{目标: 在该射线上找到一点使得 } P_1, P_2 \text{ 同解} \\
 f_0(x) = f_0(x_0 + ty) = \frac{c^T x_0 + c^T ty + d}{e^T x_0 + e^T ty + f} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} c^T y
 \end{array}$$

综上, P_0, P_1 两问题等价

二次规划 (Quadratic Programing)

$$\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2}X^T P X + q^T x + r \\
s.t. \quad & Qx \leq h \quad P \in S_+^n \\
& Ax = b
\end{aligned}$$

线性规划问题的最优解只能在边界点取到，二次规划问题的最优解可能在内部取到

二次约束的二次规划 (Quadratically Constrained Quadratic Programing, QCQP)

$$\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2}X^T P X + q^T x + r \\
s.t. \quad & \frac{1}{2}X^T P_i X + q_i^T x + r \leq 0 \quad P \in S_{++}^n \\
& Ax = b \quad P_i \in S_+^n, i = 1, \dots, m
\end{aligned}$$

二次的约束条件其实是椭圆

例：稀疏约束下的最小二乘

之前提到可以使用 1 范数取代 0 范数

$$\begin{aligned}
\hat{x} &= \arg \min_x \|b - Ax\|_2^2 + \lambda_0 \|x\|_0 \\
&= \arg \min_x \|b - Ax\|_2^2 + \lambda_1 \|x\|_1 \quad (l_1 - regularized least squares)
\end{aligned}$$

此时由于目标函数内涉及绝对值，是不可导的，同时也不是二次规划问题

令 $x = x^+ - x^-$ ，回代，由于 $\lambda_1 \|x^+ - x^-\|_1 = \lambda_1 1^T x^+ + \lambda_1 1^T x^-$ ，从而消除绝对值，化为二次规划的问题

$$\begin{aligned}
\hat{x} &= \arg \min_x \|b - Ax^+ - Ax^-\|_2^2 + \lambda_1 1^T x^+ + \lambda_1 1^T x^- \\
s.t. \quad & x^+, x^- \geq 0
\end{aligned}$$

类似有 ($l_2 - regularized least squares$)，以下两种表述等价，但右边的表述是标准的 QCQP 形式

$$\begin{aligned}
\arg \min_x \|b - Ax\|_2^2 + \lambda_2 \|x\|_2 & \quad \arg \min_x \|b - Ax\|_2^2 \\
\Rightarrow X^T (A^T A + \lambda_2 I) X + \dots & \quad s.t. \quad \lambda_2 \|x\|_2 \leq \theta
\end{aligned}$$

半正定规划 (Semi-definite Program)

半正定规划有两种形式，一种是矩阵形式，一种是向量形式

半正定规划的矩阵形式，这实际上是矩阵空间的线性规划（因为 trace 的操作实际上是线性操作，可从特例对角矩阵理解）

$$\begin{aligned} \min \quad & \text{tr}(CX) \\ \text{s.t.} \quad & \text{tr}(A_i X) = b_i, \quad i = 1, \dots, p \\ & X \succeq 0, \quad X \in S_+^n, \quad C \in R^{n \times n}, \quad A_i \in R^{n \times n}, \quad b_i \in R \end{aligned}$$

半正定规划的向量形式

$$\begin{aligned} \min \quad & c^T x \\ \text{s.t.} \quad & x_1 A_1 + \dots + x_n A_n \preceq B \\ & x \in R^n, \quad B, A_1, \dots, A_n \in S^k, \quad C \in R^n \end{aligned}$$

例：谱范数 (最大奇异值) 问题的转换

原问题： $\|A(x)\|_2$

由于 $\|A(x)\|_2 \leq \sqrt{S} \Leftrightarrow A(x)^T A(x) - SI \preceq 0$

问题化为

$$\min \quad \sqrt{S} \text{ (非凸)} \quad \Leftrightarrow \quad S \text{ (凸)} \quad (1)$$

$$s.t. \quad A(x)^T A(x) \preceq SI$$

$$\Rightarrow \min \quad t$$

$$s.t. \quad A(x)^T A(x) \preceq t^2 I, \quad t \geq 0 \quad (2)$$

$$\Rightarrow \min \quad t$$

$$s.t. \quad \begin{bmatrix} tI & A(x) \\ A^T(x) & tI \end{bmatrix} \succeq 0, \quad t \geq 0 \quad (3)$$

$$\Rightarrow \min \quad t$$

$$s.t. \quad Y = \begin{bmatrix} tI & A(x) \\ A^T(x) & tI \end{bmatrix}, \quad Y \succeq 0, \quad t \geq 0 \quad (4)$$

(1) 通过将目标函数转为 S，使称为凸问题，(2) 到 (3) 的转化是线性代数的内容，(3) 不够之处在于仍旧存在二次项约束，(4) 通过设置 Y，将矩阵正定条件拆出一个等式约束，而后 $Y \succeq 0 \quad t \geq 0$ 变为标准的半定规划形式

多目标优化

帕累托(帕累托曲面/曲线，帕累托最优点/最优值)

帕累托曲面/曲线 (pareto front)：若找到另一解，使其在某指标上更好，必然在某指标上更差。

若 $\{f_0(x)\}$ 在 R^k 中为凸， $f(x)$ 为凸， $h_i(x)$ 为仿射，则必可由如下方法求得 pareto front 中一点

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i=1}^q \lambda_i f_{0i}(x) \\ s.t. \quad & \lambda_i \geq 0 \\ & f_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & h_i(x) = 0 \quad i = 1, \dots, p \end{aligned}$$

从而通过遍历 $\{\lambda_i\}$ 可以找出所有解，然而现实中由于 $f(x)$ 的凸性无法满足，导致无法找出帕累托曲面上所有点

例: Ridge Regression

关键是展示目标函数和约束可以相互转换

原问题是一个多目标优化问题（左），右边是该问题的等价转换形式，要证明这两种形式等价

$$\begin{cases} \min & \|b - Ax\|^2 \\ \min & \|x\|^2 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \min & \|b - Ax\|^2 + \lambda \|x\|^2 \\ \min & \|b - Ax\|^2 \\ s.t. & \|x\|^2 \leq \epsilon \end{cases} \quad \begin{matrix} (1) \\ (2) \end{matrix}$$

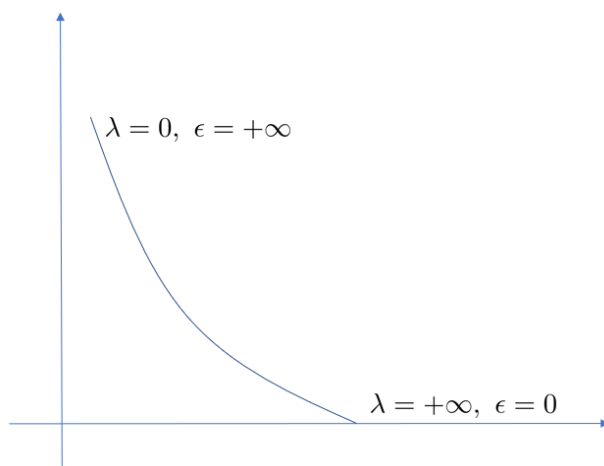


图 2: 这幅图是目标函数的帕累托曲面，横轴表示最小化误差这一目标，纵轴表示能量这一目标，两个端点分别表示两种表述中的不同取值，例如与横轴的交点，意味着能量为 0，即 $\epsilon = 0$ ，相应的在 (1) 中代表仅考虑能量， $\lambda = +\infty$ ，另一情况同理