优化算法

张伯雷
南京邮电大学 计算机学院
https://bolei-zhang.github.io/

回顾

目录

- 无约束优化算法
  - 线搜索算法
  - 信赖域优化
- 约束优化算法
  - 罚函数法

预备知识

- 泰勒展开

$$f(a)+\frac{f'(a)}{1!}(x-a)+\frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2+\frac{f'''(a)}{3!}(x-a)^3+\cdots,$$

- KKT条件

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

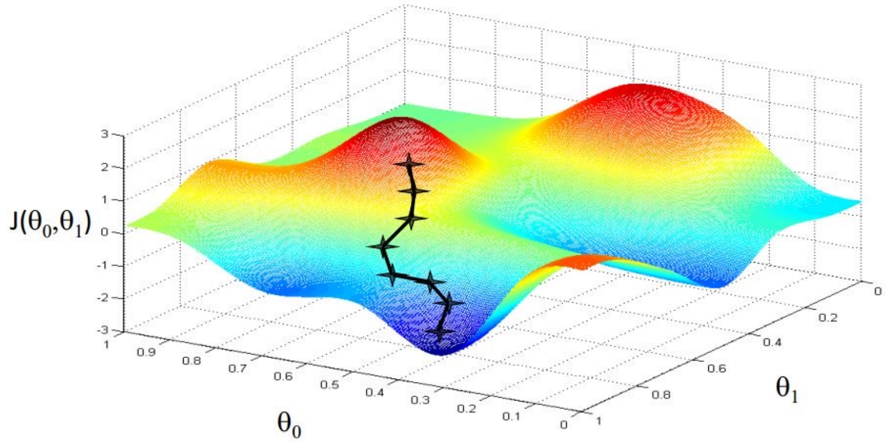
优化算法

- 所有的算法的本质都在求解KKT条件
- 大多数优化算法都是迭代算法
- 假设：$f_0(x)$是光滑的，容易求梯度、Hessian矩阵
- **线搜索算法：**
  - 一旦确定了搜索的方向，下一步即沿着该方向寻找下一个迭代点

线搜索算法

- 线搜索算法
  - 梯度下降法
  - 牛顿法

- 迭代算法（下山法）



$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$$

  - 步长： $\alpha^k \in R$
  - 方向： $d^k \in R^n$

$$\varphi(\alpha) = f_0(x^k + \alpha d^k)$$

$$\alpha^k = \arg\min_{\alpha} \varphi(\alpha) = \arg\min_{\alpha} f_0(x^k + \alpha d^k)$$

一维、关于α的凸函数

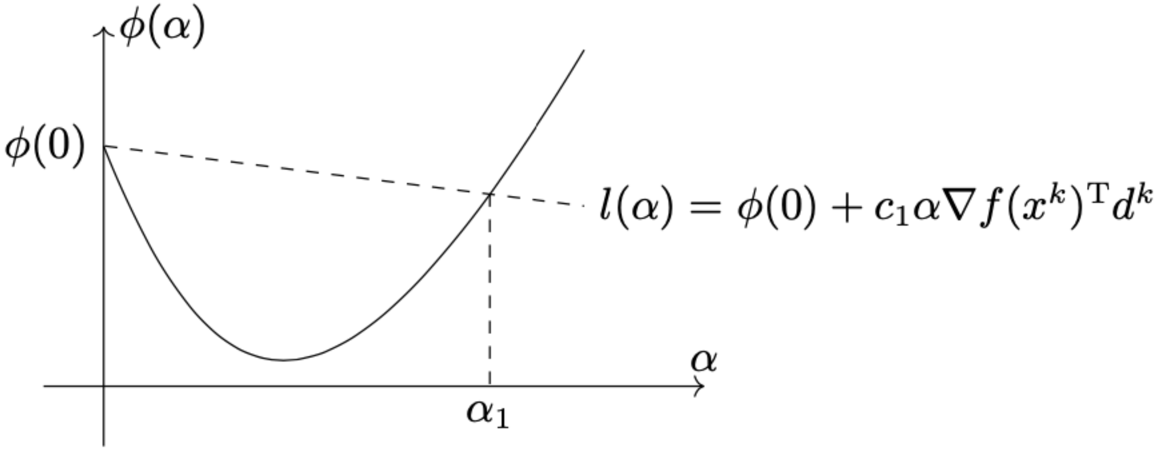
线搜索算法-Armijo准则

定义 6.1 (Armijo 准则) 设 d^k 是点 x^k 处的下降方向，若

$$f(x^k+\alpha d^k) \leqslant f(x^k)+c_1\alpha\nabla f(x^k)^{\mathrm{T}}d^k,$$

则称步长 α 满足 **Armijo 准则**，其中 $c_1\in(0,1)$ 是一个常数.

- c_1用来衡量下降的显著程度
- 点$(\alpha,\varphi(\alpha))$必须在直线$l(\alpha)=\varphi(0)+c_1\alpha\nabla f\left(x^k\right)^T d^k$的下方



- d_k 为下降方向，说明 $l(\alpha)$ 的斜率为负，选取符合条件的α确实会使得函数值下降

梯度下降法

- 负梯度定义

$$d^k = -\nabla f(x^k)$$

- 重复

$$\alpha^k = \arg\min_{\alpha} f_0(x^k + \alpha^k d^k)$$
$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$$

直到收敛

二次函数的梯度法

设二次函数$f(x,y)=x^2+10y^2$, 初始点(x^0,y^0) 取为$(10,1)$, 取固定步长$\alpha_k=0.085$. 我们使用梯度法$x^{k+1}=x^k-\alpha_k\nabla f(x^k)$ 进行15 次迭代.

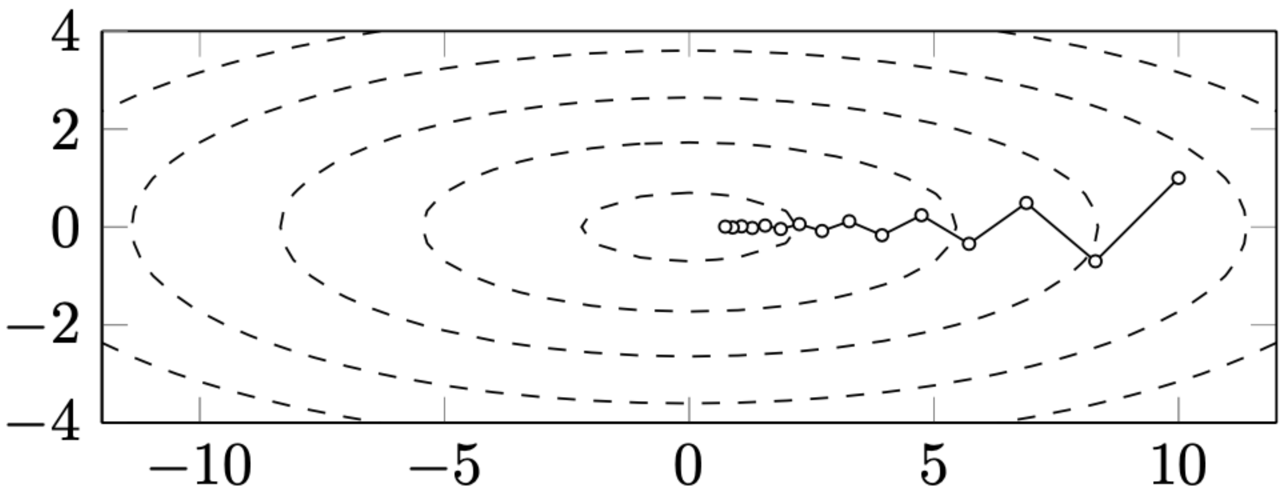


Figure: 梯度法的前15 次迭代

梯度法在凸函数上的收敛性

- 收敛性的证明思路

$$\frac{||x^{k+1} - x^*||}{||x^k - x^*||} < 1$$

- 线性收敛

$$\frac{||x^{k+1} - x^*||}{||x^0 - x^*||} < c^k$$

牛顿法

- 考虑$f(x)$在x^k的二阶泰勒展开

$$f(x^k+d^k)=f(x^k)+\nabla f(x^k)^{\mathrm{T}}d^k+\frac{1}{2}(d^k)^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x^k)d^k+o(\|d^k\|^2).$$

  - 忽略其中的高阶项，求关于d^k的函数的稳定点

$$\nabla^2 f\left(x^k\right)d^k=-\nabla f(x^k)$$

  - 牛顿法更新公式

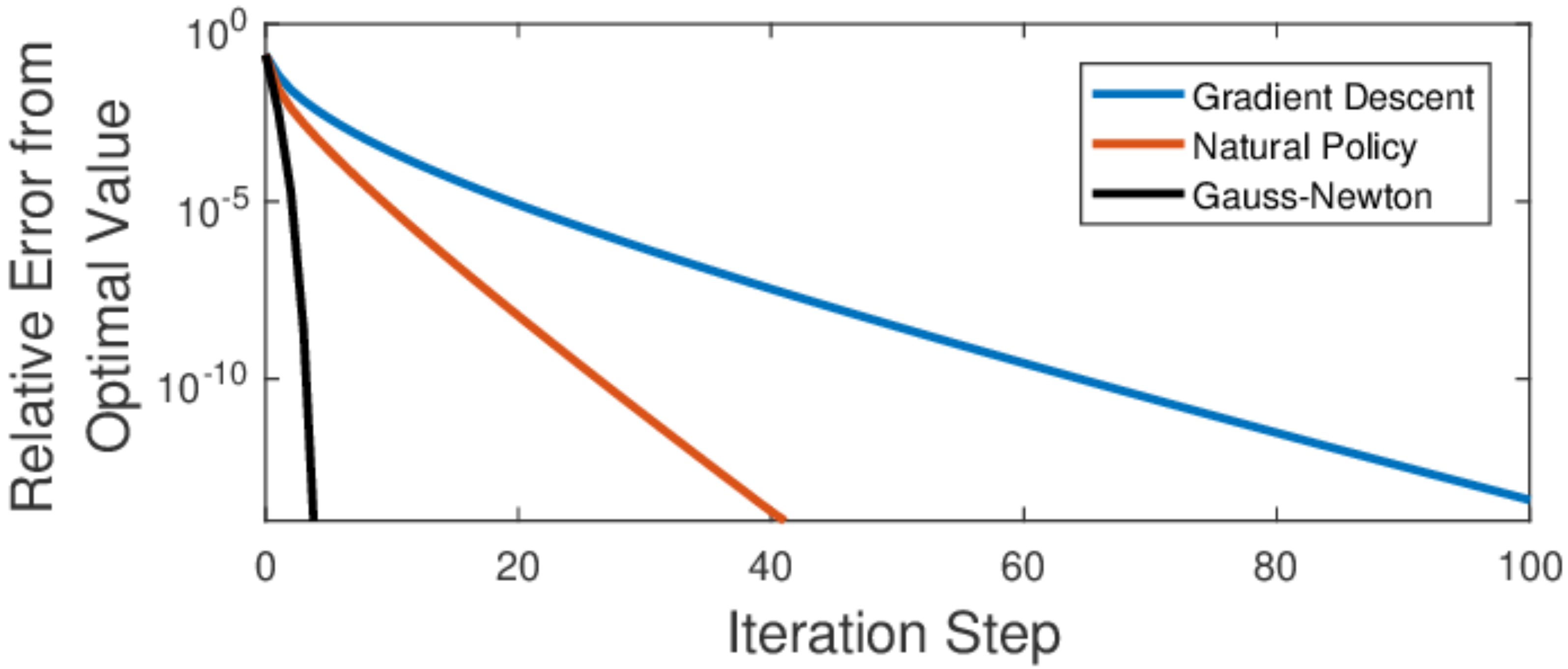
$$x^{k+1}=x^k-\nabla^2 f(x^k)^{-1}\nabla f(x^k).$$

  - 步长恒为1（经典牛顿法）

经典牛顿法的收敛性

- 二次收敛

$$\frac{||x^{k+1} - x^*||}{\left||x^k - x^*|\right|^2} < 1$$



例： 逻辑回归

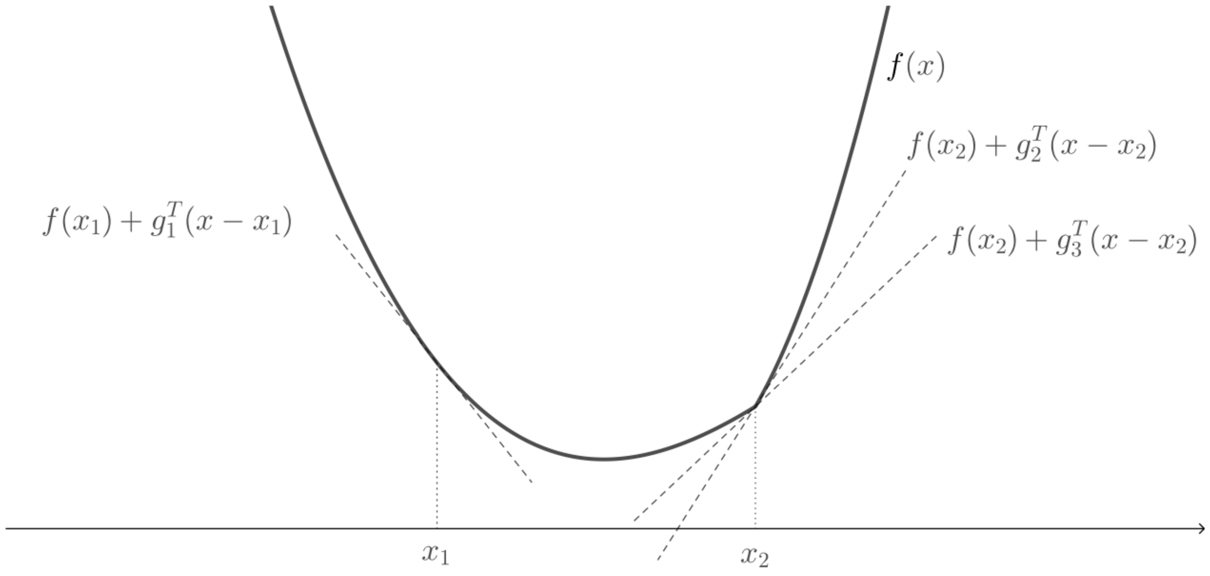
- 逻辑回归二分类模型

$$\min_{x} \quad \ell(x) \stackrel{\text{def}}{=\!=} \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \ln(1+\exp(-b_i a_i^{\mathrm{T}} x)) + \lambda\|x\|_2^2.$$

次梯度法

- $f_0(x)$为凸函数，但不可微
- 次梯度

$$f(y) \geqslant f(x) + g^T(y - x),$$



- 次梯度算法

$$x^{k+1} = x^k - \alpha^k g^k$$

目 录

- 无约束优化算法
  - 线搜索算法
  - 信赖域优化
- 约束优化算法
  - 等式约束的罚函数法

约束优化问题

$$
\begin{aligned}
\min_{x} \quad & f(x) \\
\text{s.t.} \quad & x \in \mathcal{X}
\end{aligned}
$$

- 相比于无约束优化问题
  - 约束优化问题中x不能随便取值，梯度下降法所得点不一定在可行域内
  - 最优解处目标函数的梯度不一定为零向量

1. 等式约束的凸优化问题

- 优化问题

$$\min f_0(x)$$
$$\mathrm{s.t.}\, Ax = b$$

- KKT条件

$$Ax^* = b$$
$$\nabla f^*(x) + A^T v^* = 0$$

- 如果是二次规划问题

1. 等式约束的牛顿法

- 假设x^k为可行解，需要找到下一个可行解

$$\min f_0\left(x^k+d\right)$$
$$\text{s.t.}\ \ A\left(x^k+d\right)=0$$

- 对x^k+d进行二阶泰勒展开

$$\min f_0\left(x^k\right)+\nabla f^T\left(x^k\right)d+\frac{1}{2}d^T\nabla^2 f^T\left(x^k\right)d$$
$$\text{s.t.}\ \ Ad=0$$

- 算法

$$\alpha^k=\arg\min_{\alpha\geq 0} f\left(x^k+\alpha^k d^k\right)$$
$$x^{k+1}=x^k+\alpha^k d^k$$

例： 等式约束的QP问题

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

2. 拉格朗日法

- 算法

$$x^{k+1} = x^k - \alpha^k\left(\nabla f\left(x^k\right) + A^T v^k\right)$$

$$v^{k+1} = v^k + \alpha^k\left(Ax^k - b\right)$$

- 鞍点解释
  - $(x^*, v^*) = \arg\min_x \max_v L(x, v)$
  - $(v^*, x^*) = \arg\max_v \min_x L(x, v)$
  - $x^* = \arg\min_x L(x, v^*)$：假设$v^*$已知（用$v^k$ 代替），求解无约束优化问题
  - $v^* = \arg\max_x L(x^*, v)$：假设$x^*$已知（用$x^k$ 代替），求解无约束优化问题

谢谢！！

优化算法

张伯雷

南京邮电大学 计算机学院

https://bolei-zhang.github.io/

随机优化算法

- 监督学习模型
  - 假定 (X, y) 服从概率分布 P，其中X为输入，y为标签.
  - 决定一个最优的 函数φ 使得期望风险 $E[L(\varphi(x), y)]$ 最小，其中 $L(\cdot,\cdot)$ 表示损失函数，用 来衡量预测的准确度，函数 φ 为某个函数空间中的预测函数.
  - 在实际问 题中我们并不知道真实的概率分布 P，而是随机采样得到的一个数据集 $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_N, y_N)\}$.然后我们用经验风险来近似期望风险，并将预测函数 $\varphi(\cdot)$ 参数化为 $\varphi(\cdot;\theta)$ 以缩小要找的预测函数的范围，即要求解下面的极小化问题:

$$\min_x \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L(\varphi(x_i, \theta), y_i)$$

  - 由于数据规模巨大，计算目标函数的梯度变得非常困难

随机梯度下降（Stochastic Gradient Descent）

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad f(x) \stackrel{\text{def}}{=\!=} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f_i(x),$$

- 假设每一个 $f_i(x)$ 是凸的、可微的

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f(x^k), \qquad \nabla f(x^k) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\nabla f_i(x^k).$$

- 随机梯度下降法

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f_{s_k}(x^k),$$

其中 s_k 是从 $\{1, 2, \cdots, \mathrm{N}\}$ 中随机等可能地抽取的一个样本。常用的形式是小批量(mini-batch)随机梯度法，即随机选择一个元素个数很少的集合 $I_k \subset \{1,2,\cdots,N\}$，然后执行迭代格式

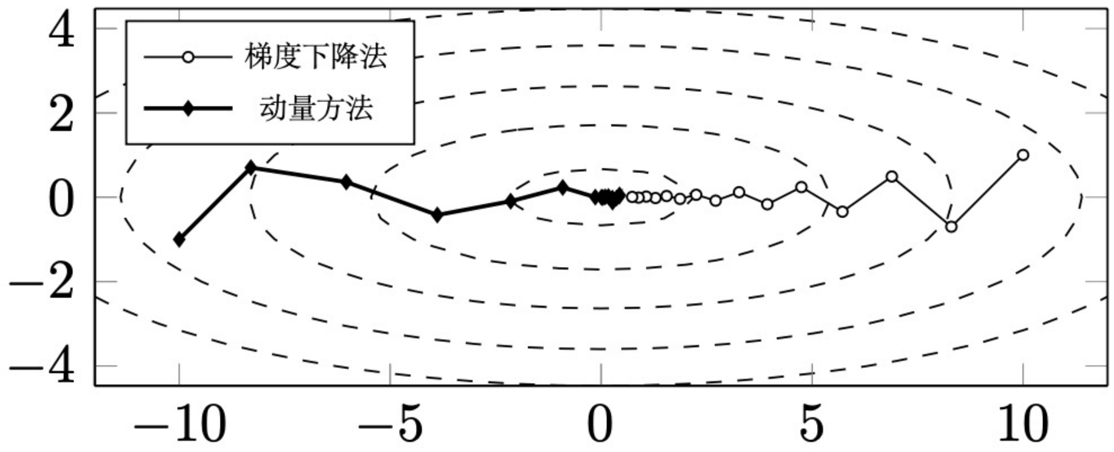
$$x^{k+1} = x^k - \frac{\alpha_k}{|\mathcal{I}_k|}\sum_{s\in\mathcal{I}_k}\nabla f_s(x^k),$$

动量方法(momentum)

- 在算法迭代时一定程度上保留之前更新的方向，同时利用当前计算的梯度调整最终的更新方向.

$$
\begin{aligned}
v^{k+1} &= \mu_k v^k - \alpha_k \nabla f_{s_k}(x^k), \\
x^{k+1} &= x^k + v^{k+1}.
\end{aligned}
$$

- 在计算当前点的随机梯度 $\nabla f_{s_k}(x_k)$ 后，将其和上一步更新方向 v_k 做线性组合来得到新的更新方向 v_{k+1}
- 在普通的梯度法中，每一步迭代只用到了当前点的梯度估计，动量方法的更新方向还使用了之前的梯度信息。当许多连续的梯度指向相同的方向时，步长就会很大



Nesterov方法

- 先对点施加速度的作用，再求梯度，可以理解为对标准动量方法做了一个校正.

$$
\begin{aligned}
y^{k+1} &= x^k + \mu_k(x^k - x^{k-1}), \\
x^{k+1} &= y^{k+1} - \alpha_k \nabla f_{s_k}(y^{k+1}),
\end{aligned}
$$

AdaGrad算法(adaptive subgradient methods)

- 传统梯度算法只有一个统一的步长 α_k 来调节每一步迭代，它没有针对每一个分量考虑
- 当梯度的某个分量较大时，可以推断出在该方向上函数变化比较剧烈，此时应该用小步长
- 当梯度的某个分量较小时，在该方向上函数比较平缓，此时应该用大步长.
- $g_k = \nabla f_{s_k}(x_k)$
- 当 G_k 的某分量较大时，该分量变化比较剧烈，因此应采用小步长，反之亦然

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\alpha}{\sqrt{G^k + \varepsilon \mathbf{1}_n}} \odot g^k,$$
$$G^{k+1} = G^k + g^{k+1} \odot g^{k+1},$$

RMSProp（root mean square propagation）

- AdaGrad 会累加之前所有的梯度 分量平方，这就导致步长是单调递减的，因此在训练后期步长会非常小，同时这样做也加大了计算的开销.
- 所以 RMSProp 提出只需使用离当前迭代点比较近的项，同时引入衰减参数 ρ

$$M^{k+1} = \rho M^k + (1-\rho) g^{k+1} \odot g^{k+1},$$

$$R^k = \sqrt{M^k + \varepsilon \mathbf{1}_n},$$

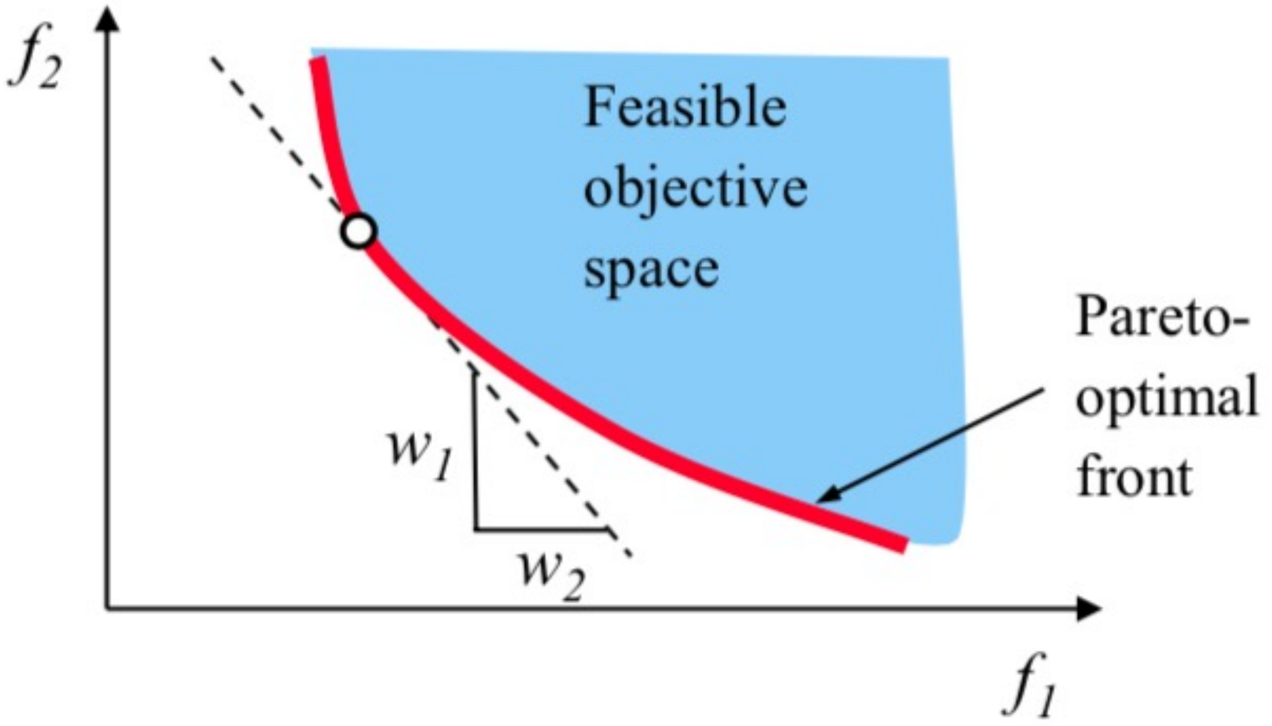
$$x^{k+1} = x^k - \frac{\alpha}{R^k} \odot g^k,$$

$$M^{k+1} = \rho M^k + (1-\rho) g^{k+1} \odot g^{k+1}.$$

一般优化问题

多目标优化问题

$$
\begin{aligned}
\text{min} \quad & F(x) = \sum\nolimits_{m=1}^{M} w_m f_m(x), \\
\text{subject to} \quad & g_j(x) \geq 0, \quad j = 1, 2, \ldots, J \\
& h_k(x) = 0, \quad k = 1, 2, \ldots, K
\end{aligned}
$$



博弈优化问题

- 如果第一个玩家选择$w \in W$
- 第二个玩家选择$z \in Z$

$$\inf_{w \in W} \sup_{z \in Z} f(w, z)$$

$$\sup_{z \in Z} \inf_{w \in W} f(w, z)$$

- 极小极大不等式：第一个玩家更有优势
- 零和博弈
  - 鞍点
  - 纳什均衡

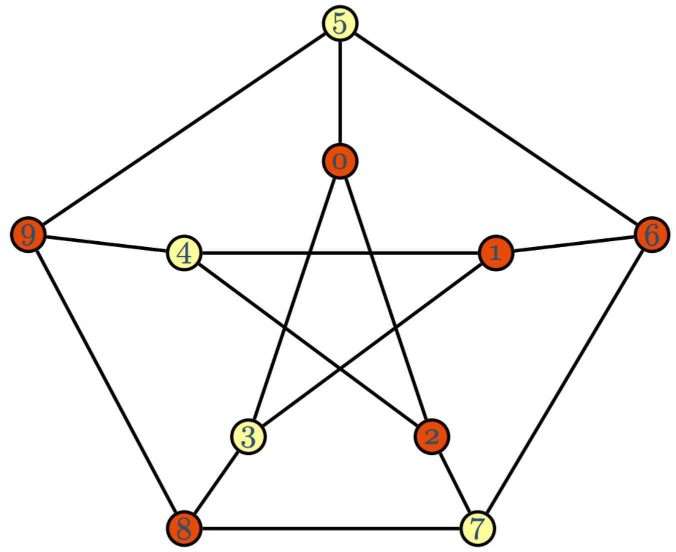
离散优化问题

- 所有的解可以遍历，但是解的复杂度可能是指数级的
- 判断离散优化问题的复杂度主要通过是否有多项式算法

Vertex Cover

- 找到最优的一个点集合的子集，使得所有的边都被至少一个节点所覆盖
- 原问题

$$\text{minimize} \quad \sum_{v \in V} x_v$$
$$\text{s.t.} \quad x_v + x_u \geq 1 \quad \forall (u,v) \in E$$
$$x_v \in \{0,1\} \quad \forall v \in V$$



- 松弛后的对偶问题

$$\text{maximize} \quad \sum_{e \in E} y_e$$
$$\text{s.t.} \quad \sum_{e \in \delta(v)} y_e \leq 1 \quad \forall v \in V$$
$$y_e \geq 0 \quad \forall e \in E$$

2-approximate 算法

谢谢！！