凸优化问题
Convex Problems

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

bolei.zhang@njupt.edu.cn

凸集

- 凸集
  - 一个集合C是凸集，则集合中任意两点所组成的线段仍然在该集合中

$$\forall x_1, x_2 \in \mathrm{C}, 0 \le \theta \le 1. \Rightarrow \ \theta x_1 + (1-\theta) x_2 \in \mathrm{C}$$

- 重要的凸集
  - 超平面、半空间、多面体
  - 对称半正定矩阵集合
  - 球、椭球
- 凸集的证明
  - 定义
  - 保凸的运算：凸集的交集、凸集的仿射变换

凸函数

- 定义

1. 对于一个函数f: $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$，如果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，则f为（下）凸函数

2. 一阶条件：对于可微函数f，如果dom$f$为凸集，则f为凸函数当且仅当

$$f(y) \geq f(x)+\nabla f(x)^T(y-x) \quad \text{for all } x, y \in \mathrm{dom}\, f$$

3. 对于二阶可微函数f，如果定义域为凸集，f为凸函数当且仅当

$$\nabla^2 f(x) \succeq 0 \quad \text{for all } x \in \mathrm{dom}\, f$$

凸函数

- 常见的凸函数
  - 负熵： $x\log x$ on R_{++}
  - 范数函数： $||x||_p = (\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p)^{\frac{1}{p}}$ for $p \geq 1$;
  - $f(x) = \max\{\mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x}_\mathrm{n}\}, \mathrm{x} \in R^m$
- 保凸的运算
  - 非负加权和、仿射组合、最大化
  - 函数组合
- 函数的共轭
  - $f^*(y) = \sup\limits_{x \in \mathrm{dom}\, f}(y^T x - f(x))$

目录

- 优化问题的标准形式
- 凸优化问题
- 典型优化问题
  - 线性优化
  - 最小二乘问题
  - 复合优化问题
  - 正定规划
  - …

一般优化问题

- 优化问题

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

- 其中
  - $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$： 优化变量(optimization variable)
  - f_0: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$： 目标/损失/效用函数(Objective/loss/utility function)
  - f_i: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, i = 1, \dots, m$： 不等式约束(Inequality constraint)
  - h_i: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, i = 1, \dots, p$： 等式约束(Equality constraint)
  - m=p=0： 无约束问题

优化问题的最优解

- 优化问题的域 (domain)

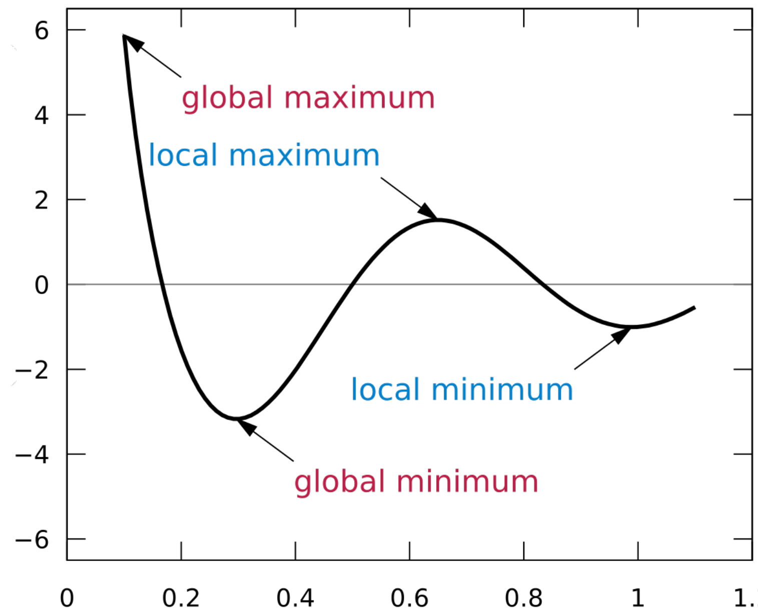
$$D = \bigcap_{i=0}^{m} dom f_i \cap \bigcap_{i=1}^{p} dom h_i$$

- 可行解集（feasible set）：$X = \{x \in D$且所有约束条件可以满足$\}$
- 问题的最优值（optimal value）：$p^* = \inf\{f_0(x) | x \in X_f\}$
- 最优解（optimal point/solution）：若x^*可行，且$f_0(x^*) = p^*$
- 最优解集（optimal set）：$X_{opt} = \{x | x \in \mathrm{X}_f, f_0(x^*) = p^*\}$
- ε-次优解集（ε – suboptimal set）：$X_\varepsilon = \{x | x \in \mathrm{X}_f, f_0(x^*) \le p^* + \varepsilon\}$

局部最优解（Locally optimal）

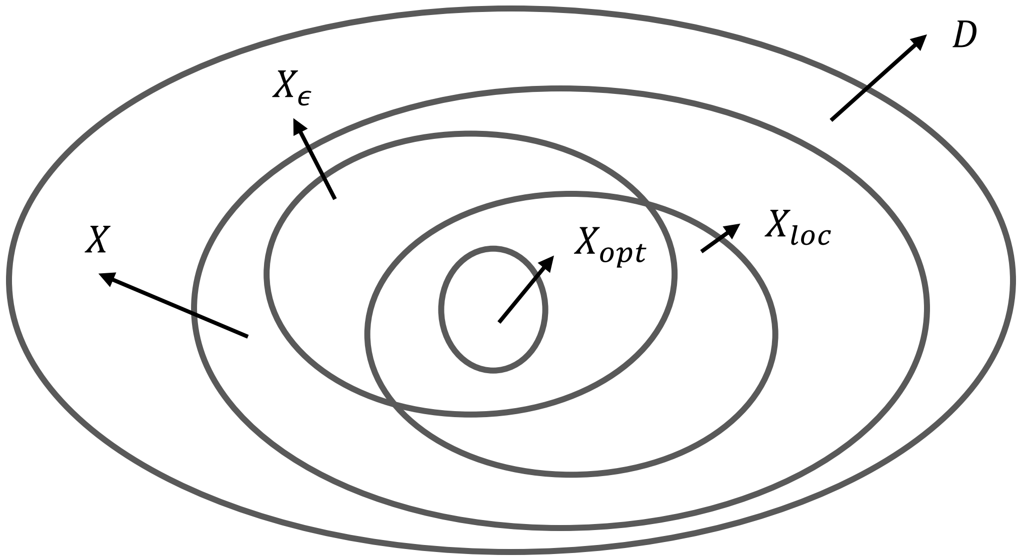
- x为局部最优解，如果$\exists R>0$使得x为以下问题的最优解：

$$
\begin{array}{ll}
\min(\text{over} z) & f_0(z) \\
\text{s.t.} & f_i(z) \le 0, \quad i=1,\dots,m \\
 & h_i(z) = 0, \quad i=1,\dots,p \\
 & \|z-x\|_2 \le R
\end{array}
$$



- 所有局部最优解构成的解集为X_{loc}

不同解集的关系



凸优化问题

- （狭义）凸优化问题的标准形式

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

- 其中
  - f_i: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, i = 0, \dots, m$：凸函数
  - h_i: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, i = 1, \dots, p$：等式约束为仿射函数
- 性质：凸优化问题的可行解集为凸集

例

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) = x_1^2 + x_2^2 \\ \textsf{s.t.} \quad & f_1(x) = x_1/(1+x_2^2) \leq 0 \\ & h_1(x) = (x_1+x_2)^2 = 0 \end{aligned}$$

- 是否为标准形式的凸优化问题?
- 等价变换

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1^2 + x_2^2 \\ \textsf{s.t.} \quad & x_1 \leq 0 \\ & x_1 + x_2 = 0 \end{aligned}$$

例

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

- 其中f_0：凹函数
- 是否为凸优化问题

重要性质：局部最优=全部最优

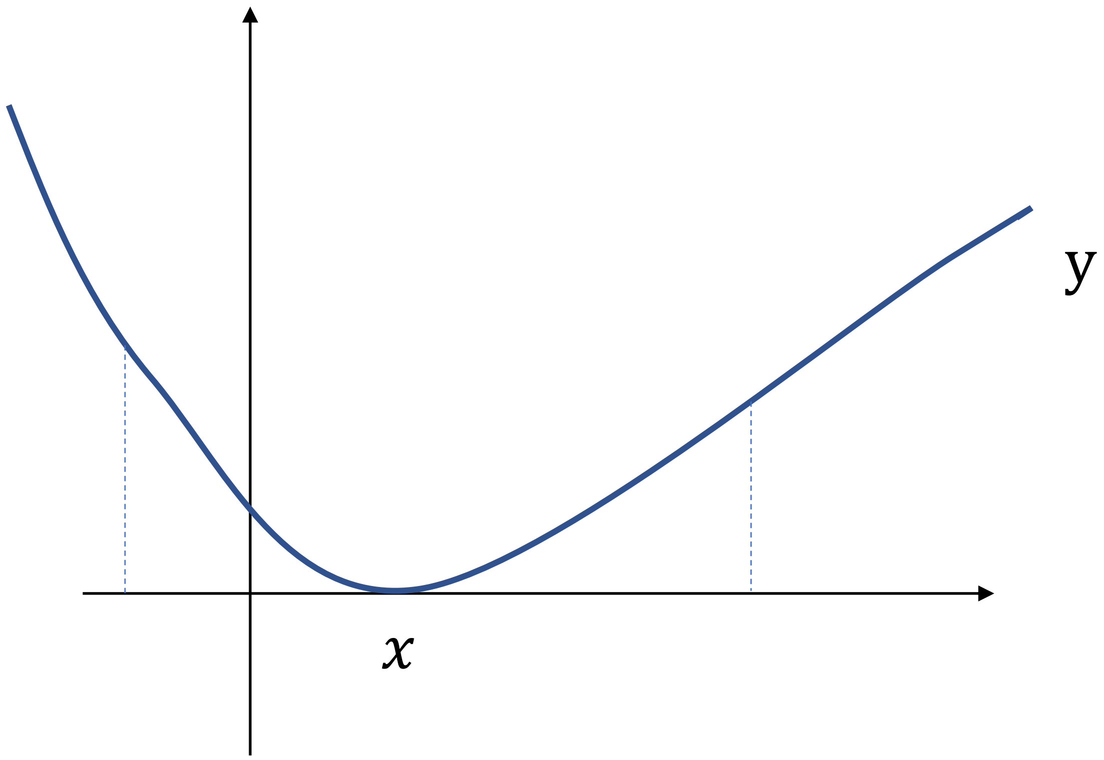
- 局部最优=全部最优
  - 局部最优：存在$R > 0$使得x为以下问题的最优解：

$$
\begin{array}{ll}
\min(\text{over} z) & f_0(z) \\
\text{s.t.} & f_i(z) \le 0, \quad i = 1, \ldots, m \\
& h_i(z) = 0, \quad i = 1, \ldots, p \\
& \|z - x\|_2 \le R
\end{array}
$$

  - 全局最优：$p^* = \inf\{f_0(x) | x \in D_f\}$，$f_0(x^*) = p^*$

重要性质：局部最优=全部最优

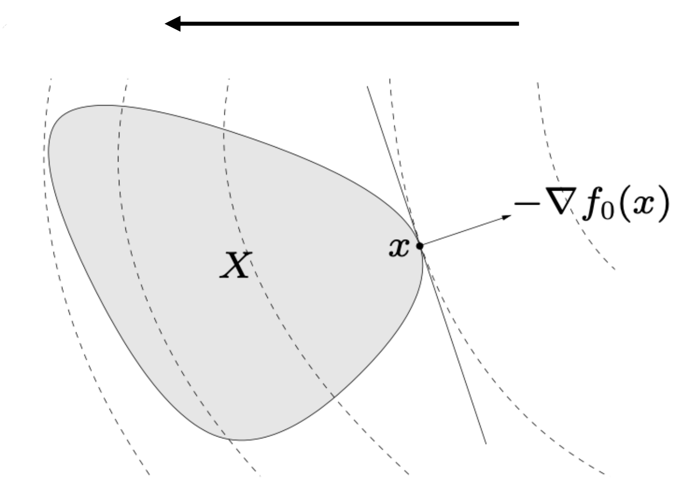
- 证明:



最优条件

- 可微目标函数下的最优条件
  - 凸函数的一阶条件
    - f_0可微，则f_0为凸函数 $\Longrightarrow$ $dom f$为凸集
    - $f_0(y) \geq f_0(x) + \nabla f_0^T(x)(y-x), \forall x, y \in \mathrm{dom}\, f$
  - 最优条件
    - $x \in X$最优 $\Longleftrightarrow$

$$\nabla f_0(x)^T(y-x) \geq 0 \text{ for all } y \in X.$$



梯度表示某一函数在该点处的方向导数沿着该方向取得最大值

最优条件（特殊情况）

- 无约束问题：
  - x为最优解的充分必要条件

$$x \in \operatorname{dom} f_0, \quad \nabla f_0(x) = 0$$

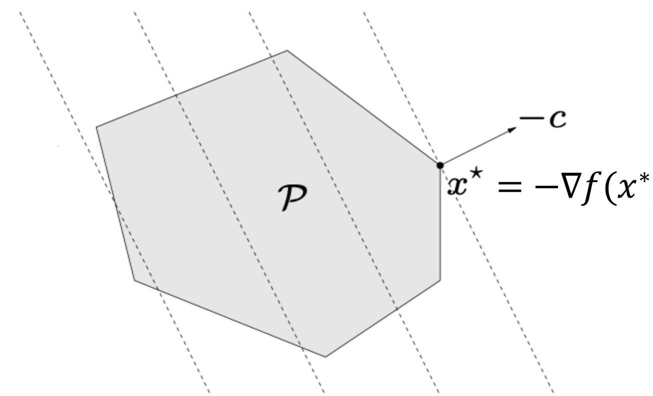
线性规划（Linear Programming）

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

$c \in \mathbb{R}^n, d \in \mathbb{R}$

$G \in \mathbb{R}^{m \times n}, h \in \mathbb{R}^m$

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



- 凸优化问题，目标函数和约束都是仿射函数
- 可行解集是多面体，虚线为等高线
- 在P中任意找一点与x*梯度的内积一定小于0
- 单纯形法（simplex methods）
  - 任意一个线性规划问题，其最优解一定在边界上

应用举例1-运输问题

- 假设有I个港口$P_1, P_2, \cdots, P_I$，提供某种商品。有J个市场$M_1, M_2, \cdots, M_J$需要这种商品.假设港口P_i有s_i单位的这种商品$(i = 1, \cdots, I)$，市场M_j需要r_j单位的这种商品，且总供应与总需求相等，即$\sum_{i=1}^{I} s_i = \sum_{i=1}^{I} r_j$。令$b_{ij}$为从港口$P_i$运输单位数量商品到市场$M_j$的成本。运输问题是在满足市场需求下使得运输成本最低.

$$
\begin{aligned}
\min_{x} \quad & \sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J} x_{ij} b_{ij}, \\
\text{s.t.} \quad & \sum_{j=1}^{J} x_{ij} = s_i, \quad i = 1, 2, \cdots, I, \\
& \sum_{i=1}^{I} x_{ij} = r_j, \quad j = 1, 2, \cdots, J, \\
& x_{ij} \geq 0, \quad i = 1, 2, \cdots, I, \quad j = 1, 2, \cdots, J.
\end{aligned}
$$

应用举例1-运输问题

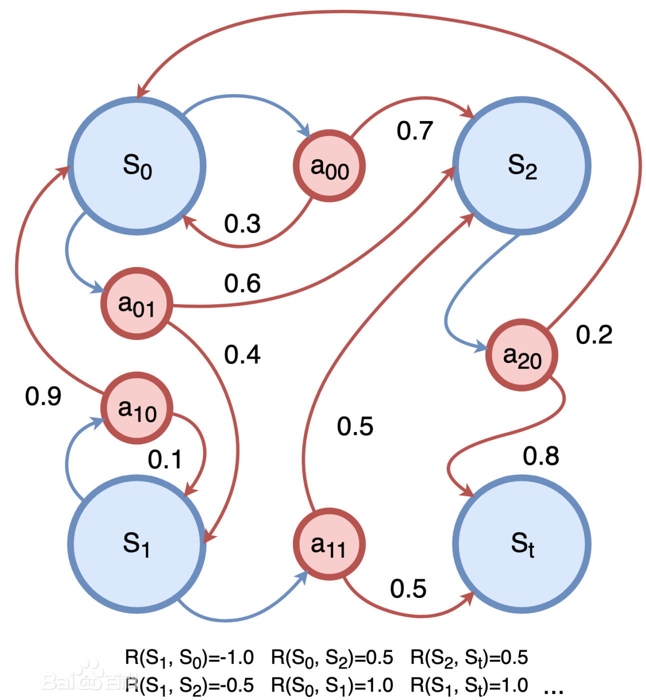
- 运输问题还有更一般的情形，即最优运输问题。它关心两个(离 散、连续)测度的对应关系。具体地，若测度是离散的，我们想要确定的是离散点之间的对应关系。
- 应用领域包括：计算流体力学，多幅图像之间的颜色转移或图像处理背景下的变形，计算机图形学中的插值方案，以及经济学、通过匹配和均衡问题等、单细胞RNA发育过程中指导分化。
- Domain Adaption： 从源数据分布中学习一个训练良好的模型，并将该模型转换为采用目标数据分布。
- Deep Generative Model： 其目标是将一个固定的分布，例如标准高斯或均匀分布，映射到真实样本的潜在总体分布

应用举例2-马尔科夫决策过程(Markov Decision Process)

- 智能体对环境进行感知，在每个状态i，按照策略π实施动作a，然后进入下一个状态j；获得奖励为$r(i,a)$。其中从状态i到状态j的概率为$\mathrm{P}_a(i,j)$
  - $V(i)$ 是向量 V 的第 i 个分量，表示从状态 i 出发得到的累积奖励
  - γ为折扣因子，一般取0.9-1之间

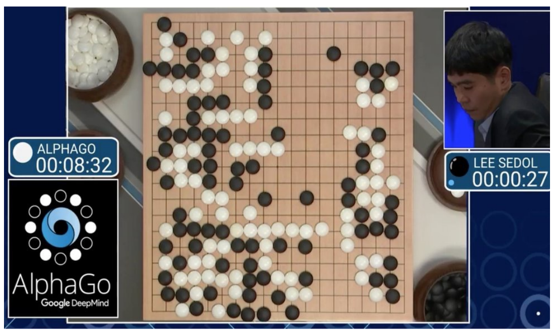
$$\max_{V\in\mathbb{R}^{|\mathcal{S}|}} \quad \sum_i V(i)$$

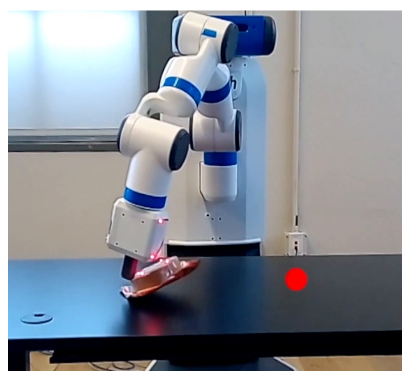
$$\text{s.t.} \quad V(i) \geq \sum_j P_a(i,j)\left(r(i,a)+\gamma V(j)\right), \forall i \in \mathcal{S},\ \forall a \in \mathcal{A},$$



应用举例2-马尔科夫决策过程(Markov Decision Process)

- 马尔科夫决策过程是强化学习的最基本模型。在实际问题中，转移概率矩阵$P_a(i,j)$往往是未知，需要通过探索-利用来求解最优的累积奖励

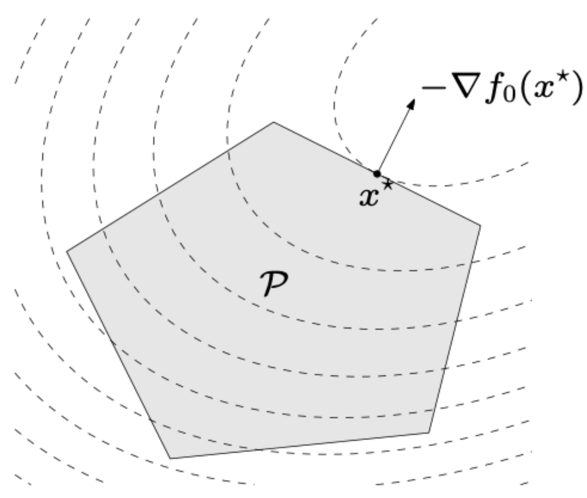




应用举例3-二次规划（Quadratic Programming）

$$
\begin{array}{ll}
\min & (1/2)x^T P x + q^T x + r \\
\textbf{s.t.} & Gx \leq h \\
& Ax = b
\end{array}
$$

- $P \in S_+^n$，凸优化问题
- 可行解集是多面体，虚线为等高线



二次约束二次规划（QCQP）

$$
\begin{array}{ll}
\min & (1/2)x^T P_0 x + q_0^T x + r_0 \\
\text{s.t.} & (1/2)x^T P_i x + q_i^T x + r_i \leq 0, \quad i = 1, \ldots, m \\
& Ax = b
\end{array}
$$

- $P_i \in S_+^n$，目标函数与不等式约束都是二次凸函数
- 可行解集为m个椭球和一个仿射集的交集

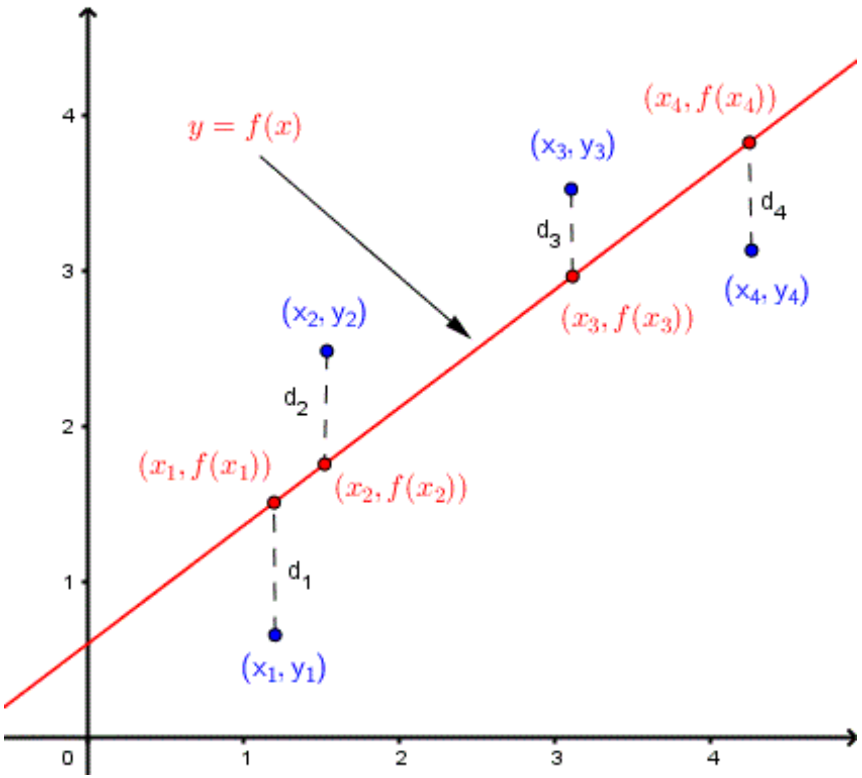
例-最小二乘问题（Least Squares Problem）

$$\min||Xw-y||_2^2$$

$$\min \quad w^TX^TXw-2y^TXw+y^Ty$$

- 无约束QP问题
- 解析解：$(X^TX)^{-1}X^Ty$

- 假设有约束$u_i \le w_i \le l_i$，则是一个具有等式约束的QP问题



例-投资组合问题（portfolio problem）

$$\max \sum_{i=1}^{n} x_i p_i .$$

$$s.t. \sum_{i=1}^{n} x_i \le B, x_i \ge 0$$

其中x_i为第i种产品的投资额，B为总资金，p_i为收益率

- 在实际情况中，p_i一般为概率分布
  - $\bar{p} = [1.05, 1.05, 1]$
  - $\Sigma = [1.2, 2, 0]$

$$\min \quad \sum_{i=1}^{n} X^T \Sigma X$$

$$s.t. \quad \bar{p}^T X \ge r_{min}, I^T X = B, X \ge 0$$

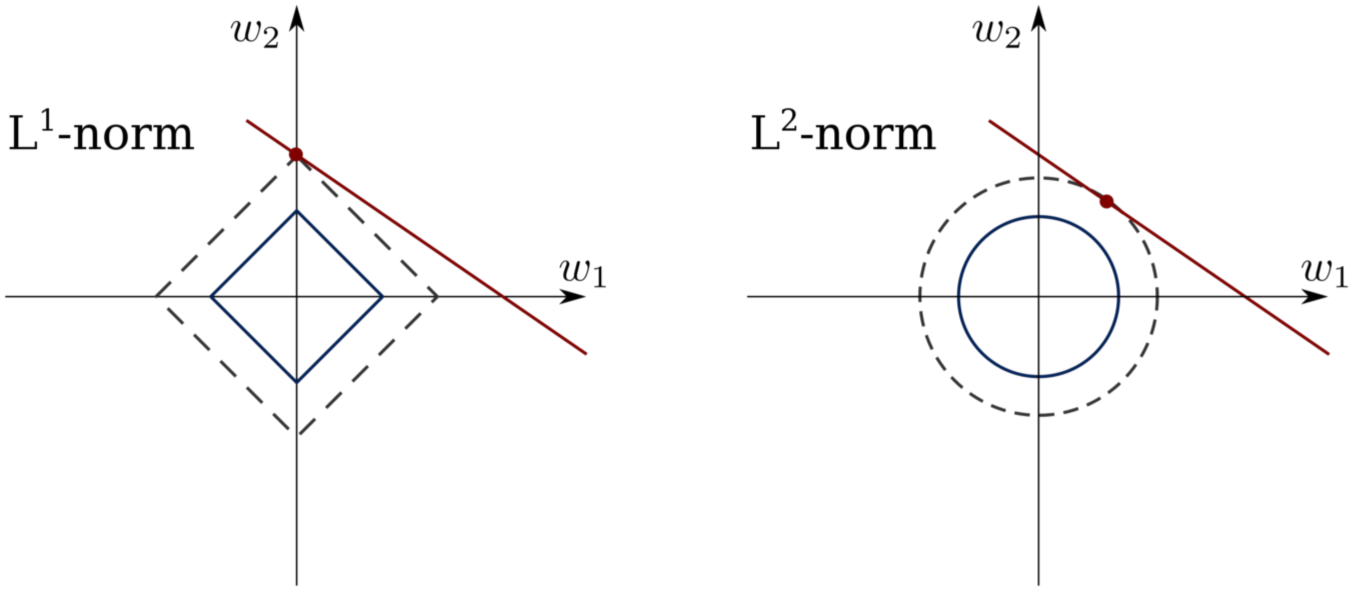
应用举例4-复合优化问题

$$\min \psi(x) = f(x) + h(x)$$

其中，$f(x)$一般是凸的、光滑的，$h(x)$一般是凸的，但不一定光滑

- 应用场景:
  - 岭回归：$f(x)$为最小二乘，$h(x) = ||x||_2$
  - Lasso：$f(x)$为最小二乘，$h(x) = ||x||_1$
  - l1 范数正则化逻辑回归：$f(x) = \sum_{i=1}^{m} \ln(1 + \exp(-b_i \cdot a_i^T x)), h(x) = ||x||_1$
  - l1 范数正则化支持向量机：$f(x) = \mathrm{C} \sum_{i=1}^{m} \max\{1 - b_i(a_i^T x + y), 0\}, h(x) = ||x||_1$

l1正则化与l2正则化



应用举例5-低秩矩阵恢复

- 某视频网站提供了约48万用户对1万7千多部电影的上亿条评级数据，希望对用户的电影评级进行预测，从而改进用户电影推荐系统，为每个用户更有针对性地推荐影片
- 用矩阵M代表用户评分，每一行表示不同用户，每一列表示不同电影

$$\begin{array}{c} \\ \text{用户 1} \\ \text{用户 2} \\ \text{用户 3} \\ \text{用户 4} \\ \vdots \\ \text{用户m} \end{array}
\begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} \text{电影 1} & \text{电影 2} & \text{电影 3} & \text{电影 4} & \cdots & \text{电影n} \end{array} \\
\begin{bmatrix} 4 & ? & ? & 3 & \cdots & ? \\ ? & 2 & 4 & ? & \cdots & ? \\ 3 & ? & ? & ? & \cdots & ? \\ 2 & ? & 5 & ? & \cdots & ? \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ ? & 3 & ? & 4 & \cdots & ? \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\min_{X \in \mathbb{R}^{m \times n}} \quad \|X\|_*,$$
$$\text{s.t.} \quad X_{ij} = M_{ij},\ (i,j) \in \Omega.$$

核范数（nuclear norm）：

$$\|X\|_* = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i$$

其中σ_i为矩阵X的所有非零奇异值

应用举例6-整数规划（非凸）

$$
\begin{aligned}
\min \quad & c^\top x \\
\text{s.t.} \quad & Ax \leqslant b, \\
& x_i \geqslant 0,\ i = 1, 2, \cdots, n, \\
& x_i \in \mathbb{Z},\ i = 1, 2, \cdots, n,
\end{aligned}
$$

- 其中Z为所有的整数集合

例-仓库位置选取问题

- 一个管理者需要在 m 个可能的位置上修建 一些仓库去满足 n 个消费者的需求
- 根据消费者 的需求以及仓库到消费者之间的运输成本，来确定所要修建的仓库的位置， 以及如何以最低成本将物资从仓库运输到消费者

$$y_i = \begin{cases} 1, & \text{如果仓库 } i \text{ 被修建}, \\ 0, & \text{如果仓库 } i \text{ 未被修建}, \end{cases}$$

$f_i =$ 仓库 i 的固定运营成本, 比如租赁费,

$c_{ij} =$ 从仓库 i 运输物资到消费者 j 的运输成本.

x_{ij} 为从仓库 i 运输到消费者 j 的物资数量

d_j 为消费者需求

u_i 仓库的容量

$$\begin{aligned} \min_{x,y} \quad & \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} c_{ij}x_{ij} + \sum_{i=1}^{m} f_i y_i, \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{m} x_{ij} = d_j,\ j = 1,2,\cdots,n, \\ & \sum_{j=1}^{n} x_{ij} - y_i u_i \leqslant 0,\ i = 1,2,\cdots,m, \\ & x_{ij} \geqslant 0,\ i = 1,\cdots,m;\ j = 1,2,\cdots,n, \\ & y_i = 0 \text{ 或者 } 1,\ i = 1,\cdots,m, \end{aligned}$$

作业

- 考虑以下的优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x_1, x_2). \\ \mathrm{s.t.} \quad & 2x_1 + x_2 \geq 1 \\ & x_1 + 3x_2 \geq 1 \\ & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{aligned}$$

计算以上优化问题的可行解集，并针对以下的目标函数，计算最优解集与最优值

(a) $f_0(x_1, x_2) = x_1 + x_2$

(b) $f_0(x_1, x_2) = -x_1 - x_2$

(c) $f_0(x_1, x_2) = x_1$

(d) $f_0(x_1, x_2) = \max\{x_1, x_2\}$

(e) $f_0(x_1, x_2) = x_1^2 + 9x_2^2$

实验一

- Python, numpy, CVXOPT (https://cvxopt.org/)
  - https://cvxopt.org/userguide/coneprog.html#linear-programming
  - https://cvxopt.org/userguide/coneprog.html#quadratic-programming
- Python基本语法
  - 变量和数据类型
  - 运算符和表达式
  - 字符串
  - 流程控制
- Python组合数据类型
- Python函数
- 数值计算库NumPy

题目

- 1. 食谱问题
  - 从n种食品中分别选择每种食品的食用量$x_1, \ldots, x_n$
    - 第j种食品的卡路里为c_j,包含的第i种营养的量为a_{ij}
    - 为了保持健康，第i种营养的需求至少为b_i
  - 目标：最小化卡路里的食谱
- 2. 最小二乘问题

谢谢！！

鞍点问题

2.8 (鞍点问题) 设函数 f : $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ 满足如下性质：当固定 $z \in \mathbb{R}^m$ 时，$f(x,z)$ 关于 x 为凸函数；当固定 $x \in \mathbb{R}^n$ 时，$f(x,z)$ 关于 z 是凹函数，则称 f 为**凸 − 凹函数**.

(a) 设 f 二阶可导，试利用海瑟矩阵 $\nabla^2 f$ 给出 f 为凸 − 凹函数的一个二阶条件；

(b) 设 f 为凸 − 凹函数且可微，且在点 $(\bar{x},\bar{z})$ 处满足 $\nabla f(\bar{x},\bar{z}) = 0$，求证：对任意 x 和 z，如下鞍点性质成立：

$$f(\bar{x},z) \leqslant f(\bar{x},\bar{z}) \leqslant f(x,\bar{z}).$$

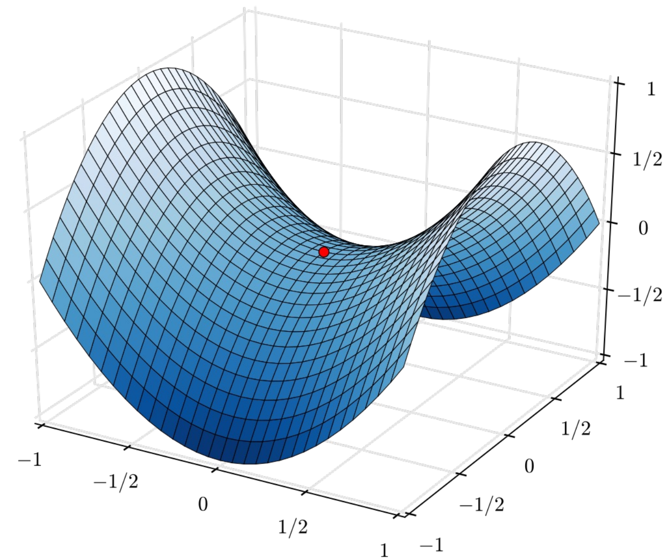
进一步证明 f 满足极小 − 极大性质：

$$\sup_z \inf_x f(x,z) = \inf_x \sup_z f(x,z).$$

(c) 设 f 可微但不一定是凸 − 凹函数，且在点 $(\bar{x},\bar{z})$ 处满足鞍点性质

$$f(\bar{x},z) \leqslant f(\bar{x},\bar{z}) \leqslant f(x,\bar{z}), \quad \forall\ x,z$$

求证：$\nabla f(\bar{x},\bar{z}) = 0$.



鞍点问题

(a) 设 f 的海瑟矩阵是

$$\nabla^2 f = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix},$$

其中

$$A_{11} \in \mathbb{R}^{n\times n}, A_{12} \in \mathbb{R}^{n\times m}, A_{21} \in \mathbb{R}^{m\times n}, A_{22} \in \mathbb{R}^{m\times m}.$$

则 $\nabla_x^2 f = A_{11}$，$\nabla_z^2 f = A_{22}$．若固定 z 时 f 关于 x 凸，则 A_{11} 半正定；若固定 x 时 f 关于 z 凹，则 A_{22} 半负定．这就是由海瑟矩阵给出的二阶条件.

(b) 先证明第一个不等式．由于 $f(x,z)$ 关于 x 是凸函数，利用凸函数的性质有

$$f(x,\bar{z}) \geqslant f(\bar{x},\bar{z}) + \nabla_x f(\bar{x},\bar{z})(x-\bar{x}) = f(\bar{x},\bar{z}),$$

同理可得左半边的不等式.

再证明 $\sup\limits_z \inf\limits_x f(x,z) = f(\bar{x},\bar{z})$．首先

$$\inf_x f(x,z) \leqslant f(\bar{x},z) \leqslant f(\bar{x},\bar{z}),$$

故

$$\sup_z \inf_x f(x,z) \leqslant f(\bar{x},\bar{z}),$$

又

$$\sup_z \inf_x f(x,z) \geqslant \inf_x f(x,\bar{z}) \geqslant f(\bar{x},\bar{z}),$$

因此 $\sup\limits_z \inf\limits_x f(x,z) = f(\bar{x},\bar{z})$．同理得 $\inf\limits_x \sup\limits_z f(x,z) = f(\bar{x},\bar{z})$，因此等式得证.

(c) 只需分别证明 $\nabla_x f(\bar{x},\bar{z}) = 0$ 和 $\nabla_z f(\bar{x},\bar{z}) = 0$．用反证法证明.
先假设 $\nabla_x f(\bar{x},\bar{z}) \neq 0$，取向量 $v = (\nabla_x f(\bar{x},\bar{z})^{\mathrm{T}}, 0)^{\mathrm{T}}$，对 $f(\bar{x}+tv,\bar{z})$（其中 $t \neq 0$）在 $(\bar{x},\bar{z})$ 处展开一阶，得

$$f(\bar{x}+tv,\bar{z}) = f(\bar{x},\bar{z}) + t\|\nabla_x f(\bar{x},\bar{z})\|^2 + \mathcal{O}(t^2).$$

若取 $t<0$ 且绝对值足够小，就有 $f(\bar{x}+tv,\bar{z}) < f(\bar{x},\bar{z})$，与题设矛盾．因此假设不成立，$\nabla_x f(\bar{x},\bar{z}) = 0$．同理可得 $\nabla_z f(\bar{x},\bar{z}) = 0$.
综上，命题成立. □

最优条件（特殊情况）

- 无约束问题：
  - x为最优解的充分必要条件

$$x \in \operatorname{dom} f_0, \quad \nabla f_0(x) = 0$$

- 等式约束问题：

$$\min \quad f_0(x) \qquad \text{s.t.} \quad Ax = b$$

  - x为最优解的充分必要条件，存在v使得

$$x \in \operatorname{dom} f_0, \quad Ax = b, \quad \nabla f_0(x) + A^T v = 0$$