最优化简介

Hailiang ZHAO @ ZJU-CS
http://hliangzhao.me

2021 年 6 月 30 日

标准形式

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_1: \qquad & \min \quad f(x) \\ & s.t. \quad x \in \mathcal{X} \end{aligned}$$

1. $x \in \mathbb{R}^n$：决策变量
2. $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$：目标函数
3. $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$：可行域

$$\begin{aligned} \mathcal{X} \triangleq \{x \in \mathcal{R}^n | c_i(x) \leq 0, i = 1, ..., m, \\ c_i(x) = 0, i = m+1, ..., m+l.\} \end{aligned}$$

- $\min f(x) \Rightarrow \inf f(x)$ （最大下界）
- $\max f(x) \Rightarrow \sup f(x)$ （最小上界）

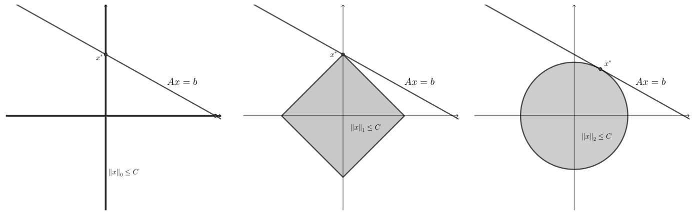
实例

- **稀疏优化**（信号还原）

$$(\text{NP-hard}) \qquad \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|x\|_0, \quad s.t. \quad Ax = b$$

变换为 l_1-norm 优化问题求解（l_0-*norm* 和 l_1-*norm* 优化一样，均具备稀疏性）：

$$(\text{solvable}) \qquad \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|x\|_1, \quad s.t. \quad Ax = b$$



(a) ℓ_0 范数　(b) ℓ_1 范数　(c) ℓ_2 范数

实例

- **低秩矩阵恢复**

$$\begin{aligned} \min_{X\in\mathbb{R}^{m\times n}} \ & \operatorname{rank}(X), \\ s.t. \quad & X_{ij} = M_{ij}, (i,j) \in \Omega \end{aligned}$$

根据稀疏优化思想，非零奇异值的个数 $\Rightarrow$ 非零奇异值的和：

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

二次罚函数形式（去掉约束项）：

$$\min_{X\in\mathbb{R}^{m\times n}} \mu\|X\|_* + \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in\Omega} \left(X_{ij} - M_{ij}\right)^2$$

步骤与分类

- 步骤：构造模型 ⇒ 确定问题类型 ⇒ 设计算法 ⇒ 实现
- 分类：

  1. 连续：可以根据临域信息来估计某点是否最优
  2. 离散：通常松弛成连续问题来求解

  1. 无约束：欧几里得空间中寻找函数的最小点
  2. 有约束：将约束罚到目标函数上转换为无约束问题

  1. 确定：不含未知参数
  2. 随机：目标函数是关于未知参数的期望

  1. 线性：单纯型法、内点法
  2. 非线性：目标或约束至少有一个非线性

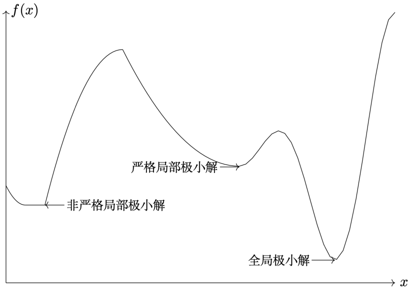
  1. 凸：任何局部最优解都是全局最优解
  2. 非凸：转化为一系列凸子问题并逼近

最优解

定义

$\mathcal{P}_1$ 的**最优解** 对于 $\bar{x} \in \mathcal{X}$:

1. $\forall x \in \mathcal{X}, f(\bar{x}) \leq f(x) \Rightarrow \bar{x}$ 为全局极小解/最优解/最小值点;
2. 存在 $\bar{x}$ 的 ε-临域 $\mathcal{N}_\varepsilon(\bar{x})$ 使得 $\forall x \in \mathcal{N}_\varepsilon(\bar{x}) \cap \mathcal{X}, f(\bar{x}) \leq f(x) \Rightarrow \bar{x}$ 为局部极小解/局部最优解;
3. $\forall x \in \mathcal{N}_\varepsilon(\bar{x}) \cap \mathcal{X}$且$x \neq \bar{x}, f(\bar{x}) < f(x) \Rightarrow \bar{x}$ 为严格局部极小解。



解的形式

- 解析解（分析函数性质得到）
- 数值解（迭代算法）

  (无约束优化）收敛准则（需要某种方法对 x^* 进行估计）：

$$\frac{f(x^k)-f^*}{\max\{|f^*,1|\}} \le \varepsilon_1, \quad \|\nabla f(x^k)\| \le \varepsilon_2$$

  判定约束优化问题是否收敛还需考虑约束条件的违反度。

  停机准则：

$$\frac{\|x^{k+1}-x^k\|}{\max\{\|x^k\|,1\}} \le \varepsilon_3, \quad \frac{\|f(x^{k+1})-f(x^k)\|}{\max\{\|f(x^k)\|,1\}} \le \varepsilon_4$$

  依点列收敛到局部（全局）最优解：

$$\lim_{k\to\infty}\|x^k-x^*\|=0$$

渐进收敛速度

Q-收敛速度：对于充分大的 k，若有

1. $\frac{\|x^{k+1}-x^*\|}{\|x^k-x^*\|} \le a, a \in (0,1) \Longrightarrow Q$-线性收敛
2. $\frac{\|x^{k+1}-x^*\|}{\|x^k-x^*\|} = 0 \Longrightarrow Q$-超线性收敛（快）
3. $\frac{\|x^{k+1}-x^*\|}{\|x^k-x^*\|} \le 1 \Longrightarrow Q$-次线性收敛
4. $\frac{\|x^{k+1}-x^*\|}{\|x^k-x^*\|^2} \le a, a \in (0,1) \Longrightarrow Q$-二次收敛（快）

差距越小，速度越快，注意 $\|x^{k+1}-x^*\|$ 和 a 都应是远小于 1 的量。

R-线性收敛 (同理可定义 R-超/次/二次收敛):

$$\|x^k - x^*\| \le t_k \Longrightarrow \text{记为}\mathcal{O}(t_k)$$

其中 $\{t_k\}$ 是非负的 Q-线性收敛序列。

复杂度

可结合渐进收敛速度得到。

示例：若已知

$$f(x^k) - f(x^*) \le \frac{c}{\sqrt{k}}, \forall k > 0,$$

则满足精度 $f(x^k) - f(x^*) \le \varepsilon$ 的迭代次数 k 满足

$$k \ge \frac{c^2}{\varepsilon^2}.$$

因此，算法对应的复杂度为 $\mathcal{O}(\frac{1}{\varepsilon^2})$。

优化算法设计技巧 *

1. **泰勒展开**（多项式的可拟合任意曲线）
   在局部用多项式函数逼近并迭代更新。
2. **对偶**
   对偶问题通常比原始问题容易求解，Primal-Dual Update，ADMM，etc。
3. **拆分**

$$\min_{x} f(x) + g(x) \Longrightarrow \min_{x,y} f(x) + g(y), \quad s.t. \quad x = y$$

4. **块坐标下降**
   通过逐步求解分量转化为多个低维空间的优化问题。