凸优化基础

一：一般优化问题

1.1 无约束优化问题

自变量为矢量的函数$f:\mathbf{R}^n\to\mathbf{R}$:

$$min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x}\in\mathbf{R}^n$$

求解方法有两种：（均求得局部最优解，不一定是全局最优解，因为不知道函数的形状）

- 直接法求解。令$\nabla f(\mathbf{x})=0$,求得驻点，如果有必要，则再根据Hessian矩阵的正定性判断驻点的性质（局部极大、局部极小、鞍点）
- 迭代法求解
  - 梯度下降法（$d_k=-g_k$),每次下降的方向为负梯度方向。
  - 牛顿法（$d_k=-H_k^{-1}g_k$),考虑泰勒级数中的二阶项。
  - 拟牛顿法（避免求Hessian矩阵的逆，使用另一个矩阵S_k近似）
    - DFP
    - BFGS
    - 两者的区别在于S_k的不同。

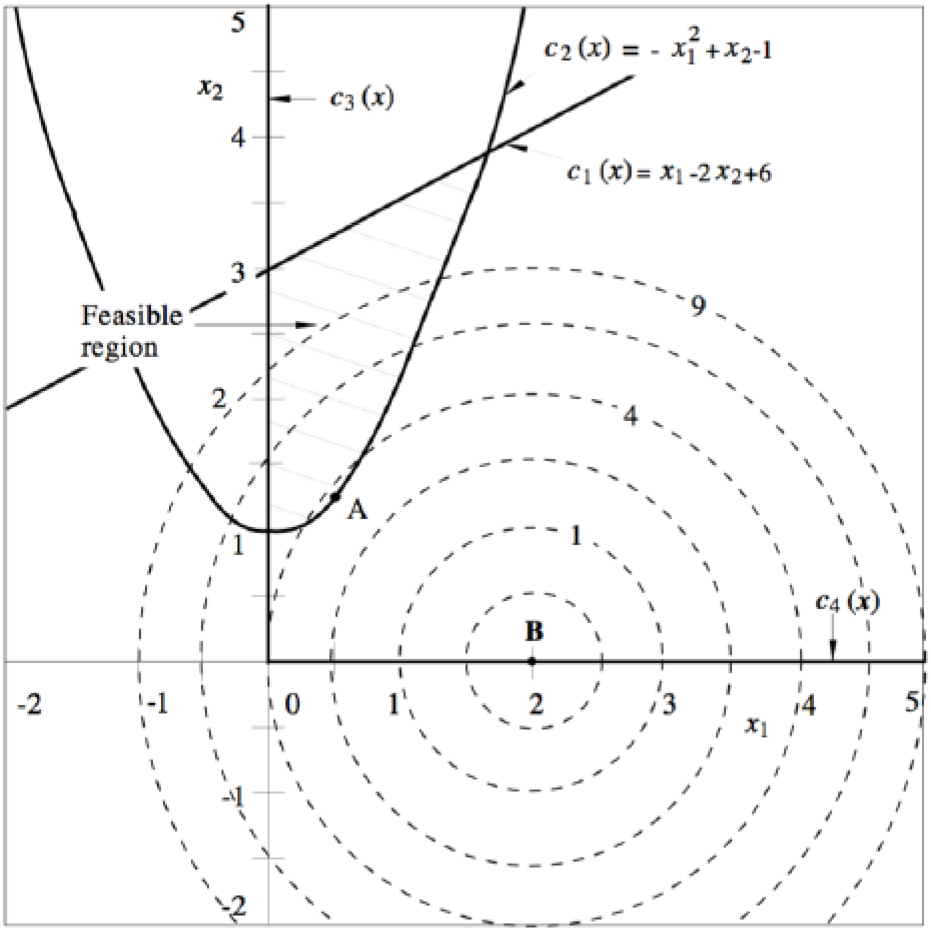
1.2 有约束优化问题

- 约束优化问题的一般形式：

$$\begin{aligned} minmize \quad & f_0(\mathbf{x}) \\ subject\ to\ f_i(\mathbf{x})\le 0 \quad & for\ i=1,2,\dots m \\ h_i(\mathbf{x})=0 \quad & for\ i=1,2,\dots p \end{aligned}$$

- 可行域：满足$f(\mathbf{x})$定义域和约束条件的$\mathbf{x}$的集合。
- 举例：下图中虚线为等高线

$$
\begin{aligned}
\text{minimize} \quad & f(\mathrm{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 4x_1 + 4 = (x_1 - 2)^2 + x_2^2 \\
\text{subject to} \quad & c_1(\mathrm{x}) = x_1 - 2x_2 + 6 \geq 0 \\
& c_2(\mathrm{x}) = -x_1^2 + x_2 - 1 \geq 0, \\
& c_3(\mathrm{x}) = x_1 \geq 0, \\
& c_4(\mathrm{x}) = x_2 \geq 0
\end{aligned}
$$



1.3 补充知识 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$

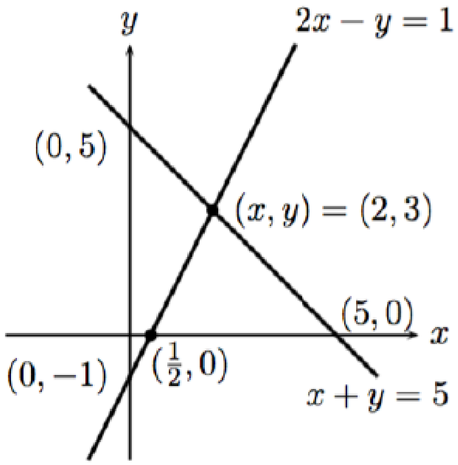
矩阵乘法

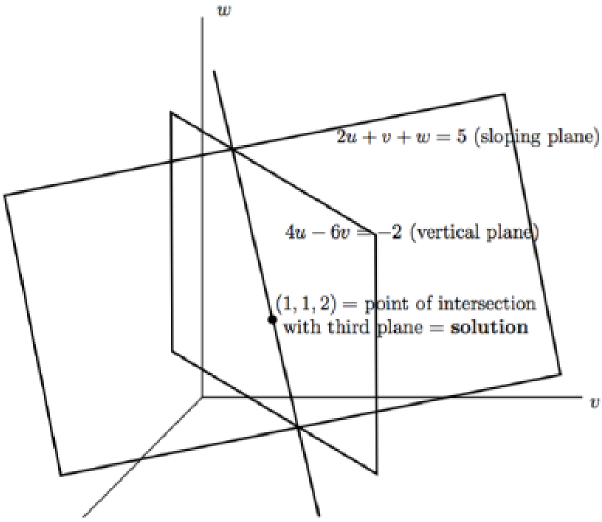
$$
\underbrace{\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2\times 2}} \underbrace{\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}}_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{2}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 5 \end{bmatrix}}_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{2}}
$$

$$
\underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & -6 & 0 \\ -2 & 7 & 2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3\times 3}} \underbrace{\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}}_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 5 \\ -2 \\ 9 \end{bmatrix}}_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{3}}
$$

- 行视图- 超平面

$$
\begin{aligned}
2x - y &= 1 \\
x + y &= 5
\end{aligned}
$$





对于$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$，从行视图的角度，可以理解为多个超平面的交集。所谓超平面，在二维空间中指直线，在三维空间中指平面。在更高维空间中，不可以可视化，但可以类比理解为$y=\mathbf{w}^{\mathbf{T}}\mathbf{x}+b$的平面。

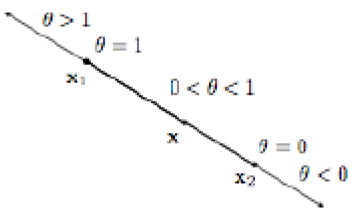
二：凸集和凸函数

2.1 凸集

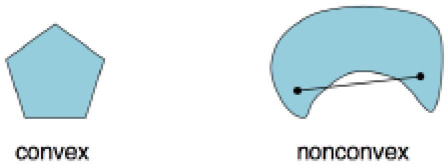
2.1.1 凸集和仿射集

- 仿射集：集合中任意两点间的**直线**也在集合中，那么该集合称为仿射集。例如 $\mathbf{x}=\theta\mathbf{x_1}+(1-\theta)\mathbf{x_2}\in C,\quad(C\in\mathbf{R}^n,\theta\in R)$.
- $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$的解的集合为仿射集。
  $\mathbf{Ax}=\mathbf{A}(\theta\mathbf{x_1}+(1-\theta)\mathbf{x_2})=\theta\mathbf{Ax_1}+(1-\theta)\mathbf{Ax_2}=\theta b+(1-\theta)b=b.$

  如果$\mathbf{x_1}$和$\mathbf{x_2}$都为方程组的解，那么$\mathbf{x_1}$和$\mathbf{x_2}$连接组成的直线是的任意一点$\mathbf{x}$也是方程组的解。所以解的集合就是$\mathbf{x}$,是一个仿射集。



- 凸集：集合中任意两点间的**线段**也在集合中，那么该集合称为凸集。例如:对于$\mathbf{x_1},\mathbf{x_2}\in C$,有$\mathbf{x}=\theta\mathbf{x_1}+(1-\theta)\mathbf{x_2}\in C,\quad(C\in\mathbf{R}^n,\theta\in[0,1])$.



- 一个集合是仿射集，但不一定是凸集；一个集合如果是凸集，那么一定是仿射集。

2.1.2 常见的凸集

part1

- 所有的$\mathbf{R}^n$，既是凸集又是仿射集。
- 所有的$\mathbf{R}_+^n$,只是凸集，因为是半空间。
- 超平面：$C=\{\mathbf{x}|\mathbf{a}^\mathbf{T}\mathbf{x}=b\}$,既是仿射集又是凸集。
- 半空间：$C=\{\mathbf{x}|\mathbf{a}^\mathbf{T}\mathbf{x}\geq b\}$或者$C=\{\mathbf{x}|\mathbf{a}^\mathbf{T}\mathbf{x}\leq b\}$。

part2

首先补充向量范数的知识：

- 2-norm:

$$\|\mathbf{x}\|_2=\sqrt{\sum_{i=1}^n|x_i|^2}=\left(\mathbf{x}^T\mathbf{x}\right)^{1/2}$$

- 1-norm:（绝对值相加）

$$\|\mathbf{x}\|_1=\sum_{i=1}^n|x_i|$$

- ∞-norm:（绝对值最大的那个数的值）

$$\|\mathbf{x}\|_\infty=\max_{i=1,\ldots,n}|x_i|$$

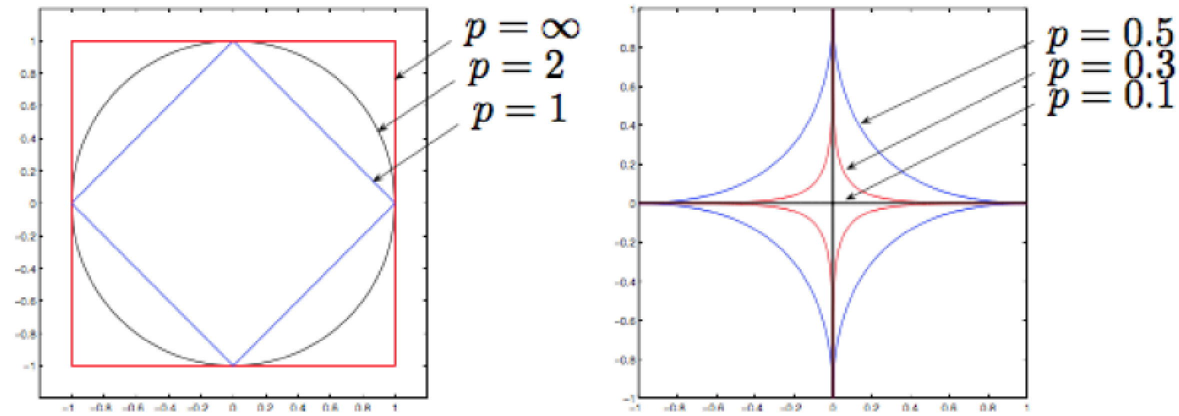
- p-norm($p\geq 1$):

$$\|\mathbf{x}\|_p=\left(\sum_{i=1}^n|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$

注意p一定要大于等于1

- 范数球：例如$||\mathbf{x}||_2\leq 1$.给定任意的$\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbf{R}^n$,且$||\mathbf{x}||_2\leq 1,||\mathbf{y}||_2\leq 1$,则有$|||\theta\mathbf{x}+(1-\theta)\mathbf{y}||_2\leq\theta||\mathbf{x}||_2+(1-\theta)||\mathbf{y}||_2\leq 1$.所以二范数围成的集合是凸集。
- 在二维情形下，
  - $||\mathbf{x}||_1\leq 1\rightarrow|x|+|y|\leq 1;$
  - $||\mathbf{x}||_2\leq 1\rightarrow x^2+y^2\leq 1;$

- $||\mathbf{x}||_\infty \le 1 \to |x| \le 1 \ and \ |y| \le 1$



(a) Region of $\|x\|_p = 1$, $p \ge 1$.　　**(b) Region of $\|x\|_p = 1$, $p \le 1$.**

- 当$p \ge 1$时，范数球组成的集合是凸集。

part3

- 凸集的性质：**凸集的交集是凸集**，例如：$S = \{||\mathbf{x}||_2 \le 1, x \ge 0\}$,$||\mathbf{x}||_2 \le 1$是范数球，凸集；$x \ge 0$是半空间，凸集；凸集的交集还是凸集。所以$S$是凸集。

  证明：假定$S_1, \cdots, S_k$是凸集，给定$\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \bigcap_{i=1}^k S_i$（即x和y都是交集中的点），则有：

  $\theta \mathrm{x} + (1-\theta)\mathrm{y} \in S_i, \quad i = 1, \cdots, k$，因为每一个集合都是凸集，所以连接任意两点的线段都在每一个集合内，因此也就在所有集合的交集内。即：$\theta \mathbf{x} + (1-\theta)\mathbf{y} \in \cap_{i=1}^k S_i$，因此凸集的交集还是凸集。

- 凸集的并集**不一定**是凸集。
- 多面体：有限个半空间和半平面的交集

$$\mathcal{P} = \{\mathrm{x} | \mathrm{Ax} \le \mathrm{b}, \mathrm{Cx} = \mathrm{d}\}$$

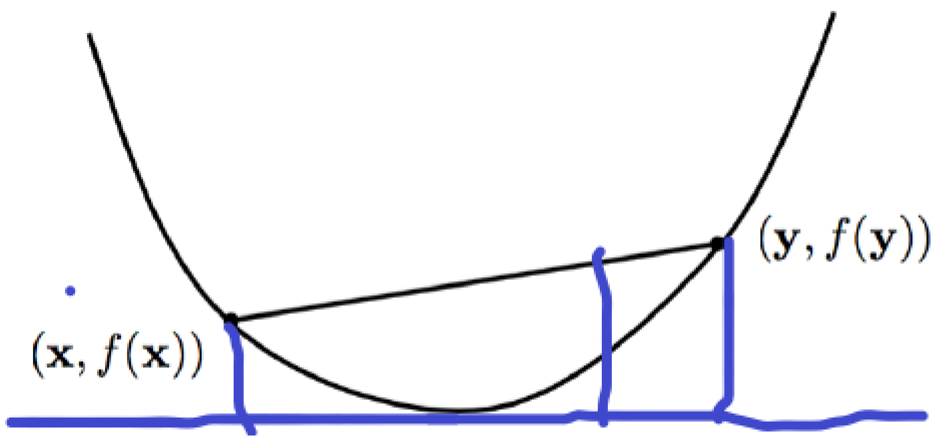
原因分析：对于$\mathrm{Ax} \le \mathrm{b}$,每一行都是一个半空间（凸集），而$\mathrm{Ax} \le \mathrm{b}$为多个半空间的交集，也是凸集；对于$\mathrm{Cx} = \mathrm{d}$每一行都是一个超平面（凸集），多个超平面的交集还是凸集。

2.2 凸函数

2.2.1 凸函数的定义

- 一个函数$f:\mathbf{R}^n\rightarrow\mathbf{R}$被称为凸函数，如果
  - 定义域$dom(f)$为凸集
  - 对于任何$\mathbf{x},\mathbf{y}\in dom(f)$和$0\leq\theta\leq 1$,有

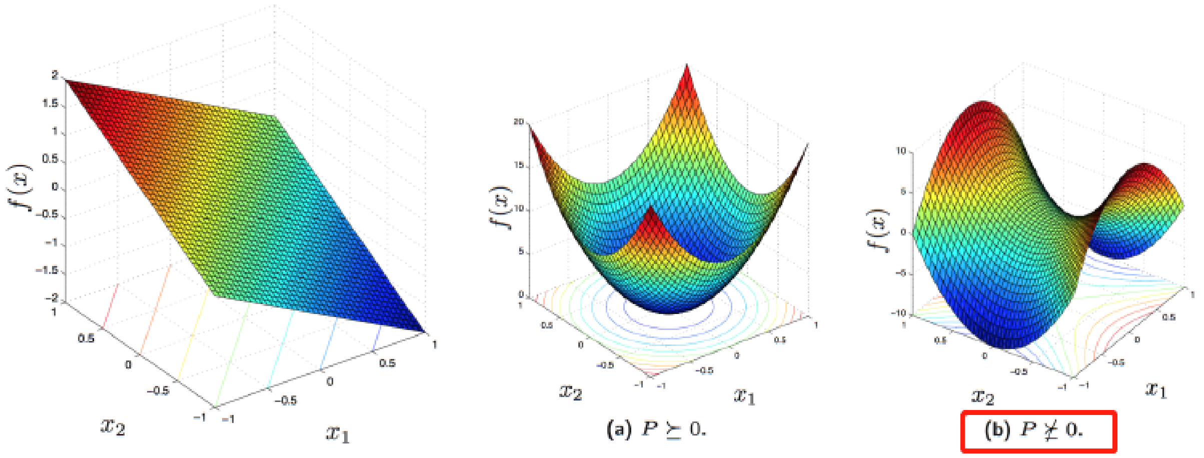
$$f(\theta\mathbf{x}+(1-\theta)\mathbf{y})\leq\theta f(\mathbf{x})+(1-\theta)f(\mathbf{y})$$



- 凸函数的一阶二阶充要条件
  - 一阶充要条件（不好用）：$f\left(\mathrm{x}_1\right)\geq f(\mathrm{x})+\nabla^T f(\mathrm{x})\left(\mathrm{x}_1-\mathrm{x}\right)$对于所有的$\mathbf{x_1},\mathbf{x}$均成立。
  - 二阶充要条件：如果函数二阶可导，则凸函数的充要条件：$\mathbf{H}(\mathbf{x})$半正定。

2.2.2 常见的凸函数

- 一元函数举例：
  - $ax+b$ 既凸且凹
  - x^2 凸函数（二阶导数大于0）
  - $e^{\alpha x}$ 凸函数（二阶导数：$\alpha^2 e^{\alpha x}$）
  - $-log\ x\ convex\ on\ x>0$,二阶导数$\frac{1}{x^2}$
  - $xlogx\ convex\ on\ x>0$,二阶导数 $\frac{1}{x}$
- 二元函数举例
  - $f(\mathbf{x})=\mathbf{a}^{\mathbf{T}}\mathbf{x}+\mathbf{b}$,既凸且凹。$\nabla f(\mathbf{x})=\mathbf{a}$, $\nabla^2 f(\mathbf{x})=\mathbf{0}$.
  - $f(\mathbf{x})=\mathbf{x}^{\mathbf{T}}\mathbf{P}\mathbf{x}+\mathbf{2q}^{\mathbf{T}}\mathbf{x}+\mathbf{r}$, 是凸函数的条件：$\nabla^2 f(\mathbf{x})=2\mathbf{P}\geq 0$,即$\mathbf{P}$为半正定矩阵。
    - $f(\mathbf{x})=||\mathbf{x}||_2^2=\mathbf{x}^{\mathbf{T}}\mathbf{x}$，是凸函数，因为$\mathbf{P}=\mathbf{I}$是单位阵。

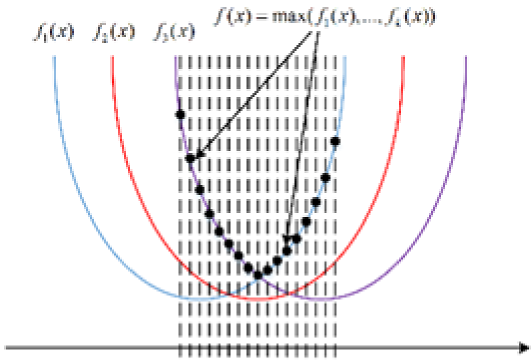


(a) $P \succeq 0$.

(b) $P \not\succeq 0$.

2.2.3 保凸运算

- $f(\mathbf{x})$凸，则$f(\mathbf{Ax}+\mathbf{b})$凸。
    - 解释：$\mathbf{Ax}+\mathbf{b}$为仿射变换，相当于对原始图像进行了'线性变换+平移'。并不改变函数的凸性。可以参考《通俗理解仿射变换》。
    - 举例：$f(x)=x^2$是凸函数，$f(2x+1)=(2x+1)^2$也是凸函数。
    - 这个性质，就可以解释线性回归的损失函数$||\mathbf{y}-\mathbf{Xw}||_2^2$是凸函数。
- g凸，h凸，扩展的h非递减，则$f(\mathbf{x})=h(g(\mathbf{x}))$凸。例如:$f(x)=\|y-Ax\|_2^2$凸，$g(\mathrm{x})=\|\mathrm{y}-\mathrm{Ax}\|_2$，$h(x)=x^2$在$x\geq 0$部分非递减。
- $f_1,\cdots,f_m$凸，$w_1,\cdots,w_m\geq 0$，则$\sum_{i=1}^m w_i f_i$凸，例如：$f(x)=\|y-Ax\|_2^2+\gamma\|x\|_2^2$凸，$\gamma\geq 0$.简单来讲：就是凸函数的非负线性组合还是凸函数。
- 逐点最大：$f_1,\cdots,f_m$凸，则$f(\mathrm{x})=\max\{f_1(\mathrm{x}),\cdots,f_m(\mathrm{x})\}$凸。$f(\mathrm{x},\mathrm{y})$对于每个$\mathrm{y}\in\mathcal{A}$凸，则$\sup_{\mathbf{y}\in\mathcal{A}} f(\mathbf{x},\mathbf{y})$凸。



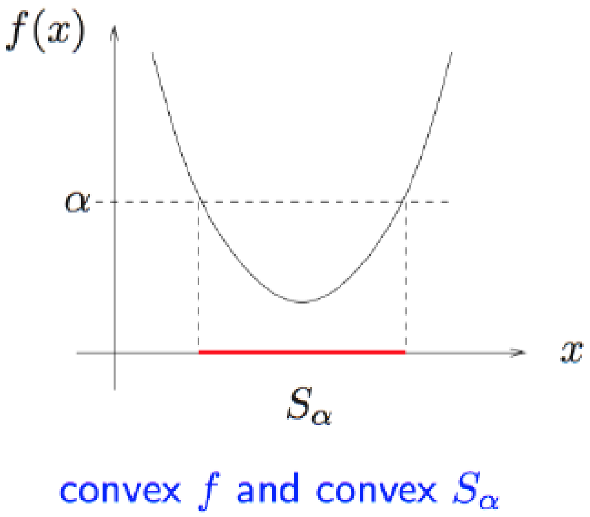
三条曲线为凸函数，那么三个凸函数在每个x处
取的最大值(黑色点)构成的函数为凸函数

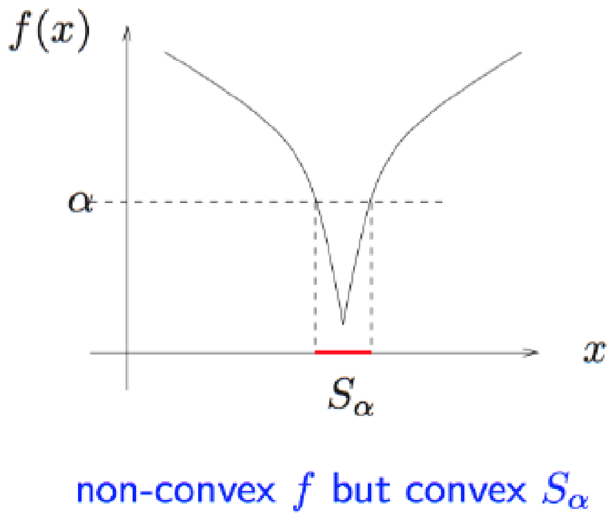
2.2.4 α水平集

- 一元函数f的α水平集为：

$$S_\alpha=\{x|f(x)\leq\alpha\}$$

则有f为凸函数 $\rightarrow S_\alpha$对于每个α是凸集，反之则不成立。





三：凸优化问题

3.1 凸优化问题说明

- 凸优化问题

$$\begin{aligned} minmize \quad & f_0(\mathbf{x}) \\ subject\ to\ f_i(\mathbf{x}) \leq 0 \quad & for\ i=1,2,\ldots m \\ h_i(\mathbf{x})=0 \quad & for\ i=1,2,\ldots p \end{aligned}$$

- 目标函数是凸函数，可行域是凸集
  - 目标函数是凸函数。
  - 不等式约束函数必须是凸的。（则0水平集是凸集）
  - 等式约束函数必须是仿射的。（类似$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$，解为凸集）
- 凸优化问题的本质：**在一个凸集上极小化一个凸函数**
- $f_0\left(\mathrm{x}^*\right)=p*$
- 凸优化问题的局部最优即为全局最优

3.2 典型的凸优化问题

- 线性规划（Liner Programming;LP)

$$\begin{aligned} minimize \quad & \mathbf{c}^T\mathbf{x}+d \\ subject\ to\ & \mathrm{Gx} \leq \mathrm{h} \\ & \mathrm{Ax}=\mathrm{b} \end{aligned}$$

- 说明：首先目标函数是仿射函数，既是凸函数也是凹函数（二阶导数为0）。$\mathrm{Gx} \leq \mathrm{h}$是一系列半空间的交集（凸集的交集还是凸集），是凸集；$\mathrm{Ax} = \mathrm{b}$是一系列超平面的交集（凸集的交集还是凸集），凸集。所以可行域为凸集。符合**在凸集上极小化一个凸函数。**

- 二次规划（Quadratic Programming；QP）**($\mathbf{P}$半正定)**

$$\begin{aligned} minimize & \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{P}\mathbf{x} + \mathbf{c}^T\mathbf{x} + d \\ subject\ to\ & \mathbf{G}\mathbf{x} \leq \mathbf{h} \\ & \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \end{aligned}$$

  - 说明：目标函数求二阶导可知$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \mathbf{P} \geq 0$，即半正定。所以目标函数是一个凸函数。又因为可行域是凸集，所以符合**在凸集上极小化一个凸函数。**

- QCQP($\mathbf{P}$和$\mathbf{Q_i}$均半正定):

$$\begin{aligned} minimize \quad & \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{P}\mathbf{x} + \mathbf{c}^T\mathbf{x} + d \\ subject\ to \quad & \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{Q_i}\mathbf{x} + \mathbf{r_i}^T\mathbf{x} + s_i \leq 0; i = 1, 2 \cdots m \\ & \mathrm{Ax} = \mathrm{b} \end{aligned}$$

  - 说明：目标函数为凸函数；可行域中，$\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{Q_i}\mathbf{x} + \mathbf{r_i}^T\mathbf{x} + s_i \leq 0; i = 1, 2 \cdots m$,可以理解为凸函数的0水平集，还是凸集。

四：普通问题转为凸优化问题（案例演示）

- 给定下列问题：将其转为标准的凸优化问题

$$\begin{aligned} minimize \quad & \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|_2^2 + C\sum_{i=1}^{m}\xi_i \\ subject\ to \quad & y_i\left(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b\right) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \cdots, m \\ & \xi_i \geq 0 \end{aligned}$$

  其中$\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n, \boldsymbol{\xi} = [\xi_1, \cdots, \xi_m]^T \in \mathbb{R}^m, b \in \mathbb{R}$.定义 $k = m + n + 1$(未知变量的个数)。

  说明：未知变量为w, b, ξ。C, y, x已知。

转换过程

- 定义变量

$$\mathbf{x} \in \mathbf{R}^k = \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ \xi \\ b \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}\in\mathbb{R}^{m\times n}=\begin{bmatrix}\mathbf{x}_1^T\\ \vdots\\ \mathbf{x}_m^T\end{bmatrix},\mathbf{y}\in\mathbb{R}^{m}=\begin{bmatrix}y_1\\ \vdots\\ y_m\end{bmatrix}$$

- 回归QP问题：

$$\begin{aligned}&minimize\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{P}\mathbf{x}+\mathbf{c}^T\mathbf{x}+d\\&subject\ to\ \mathbf{G}\mathbf{x}\leq\mathbf{h}\\&\qquad\qquad\ \ \mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}\end{aligned}$$

- 定义

$$\mathbf{P}\in\mathbb{R}^{k\times k}=\begin{bmatrix}\mathbf{I}&0&0\\0&0&0\\0&0&0\end{bmatrix},\mathbf{c}\in\mathbb{R}^{k}=\begin{bmatrix}0\\C\cdot\mathbf{1}(\textbf{vector})\\0\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{G}\in\mathbb{R}^{2m\times k}=\begin{bmatrix}-\operatorname{diag}(\mathbf{y})\mathbf{X}&-\mathbf{I}&-\mathbf{y}\\0&-\mathbf{I}&0\end{bmatrix},\mathbf{h}\in\mathbb{R}^{2m}=\begin{bmatrix}\mathbf{-1}\textbf{ (vector)}\\\mathbf{0}\textbf{ (vector)}\end{bmatrix}$$

则

$$\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{P}\mathbf{x}=\frac{1}{2}\left[\mathbf{w}^T,\xi^T,b^T\right]\begin{bmatrix}\mathbf{I}&0&0\\0&0&0\\0&0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{w}\\\xi\\b\end{bmatrix}=\frac{1}{2}\left[\mathbf{w}^T,\xi^T,b^T\right]\begin{bmatrix}\mathbf{w}\\0\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|_2^2$$

$$\mathbf{c}^T\mathbf{x}=\left[0,C\mathbf{1}^T,0\right]\begin{bmatrix}\mathbf{w}\\\xi\\b\end{bmatrix}=C\sum_{i=1}^{m}\xi_i$$

$$\begin{aligned}\mathbf{G}\mathbf{x}&=\begin{bmatrix}-\operatorname{diag}(\mathbf{y})\mathbf{X}&-\mathbf{I}&-\mathbf{y}\\0&-\mathbf{I}&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{w}\\\xi\\b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\operatorname{diag}(\mathbf{y})\mathbf{X}\mathbf{w}-\xi-b\mathbf{y}\\-\xi\end{bmatrix}\\&\leq\begin{bmatrix}\mathbf{-1}\\\mathbf{0}\end{bmatrix}\rightarrow\begin{bmatrix}\operatorname{diag}(\mathbf{y})\mathbf{X}\mathbf{w}+b\mathbf{y}\geq\mathbf{1}-\xi\\\xi\geq0\end{bmatrix}\\&\rightarrow y_i\left(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i+b\right)\geq1-\xi_i,i=1,\cdots,m\\&\qquad\xi_i\geq0\end{aligned}$$

- 经过上述推导，可以发现原问题转换为了一个QP问题，是一个凸优化问题。而对于凸优化问题，目前已经有非常成熟的解决办法了。因此，能够将一个问题转换为凸优化问题是最为重要的一步。

五：参考资料

1. https://www.cnblogs.com/hgl0417/p/6670762.html
2. https://www.matongxue.com/madocs/244.html