第一章：优化迭代方法统一论

——优化论五部曲

Jason 博士

网易微专业 x 稀牛学院

人工智能数学基础微专业

线性回归建模

无约束优化梯度分析法

无约束优化迭代法

线性回归求解

线性回归 (1/2)

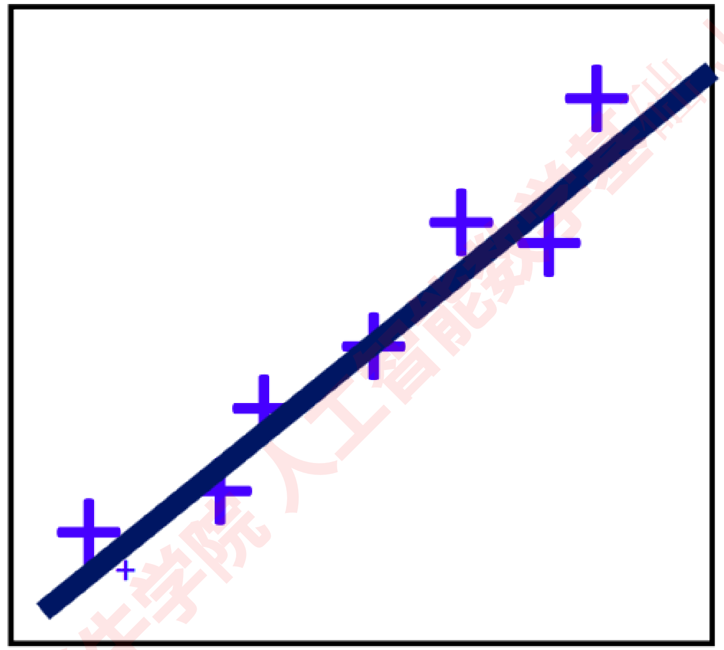
- 训练，预测

	1 name	2 sex	3 age	4 wgt	5 smoke	6 sys	7 dia	8 trial1	9 trial
1 YPL-320	'SMITH'	'm'	38	176	1	124	93	18	
2 GLI-532	'JOHNSON'	'm'	43	163	0	109	77	11	
3 PNI-258	'WILLIAMS'	'f'	38	131	0	125	83	-99	
4 MIJ-579	'JONES'	'f'	40	133	0	117	75	6	
5 XLK-030	'BROWN'	'f'	49	119	0	122	80	14	
6 TFP-518	'DAVIS'	'f'	46	142	0	121	70	19	
7 LPD-746	'MILLER'	'f'	33	142	1	130	88	0	
8 ATA-945	'WILSON'	'm'	40	180	0	115	82	-99	
9 VNL-702	'MOORE'	'm'	28	183	0	115	78	2	
10 LQW-768	'TAYLOR'	'f'	31	132	0	118	86	11	
11 QFY-472	'ANDERS...	'f'	45	128	0	114	77	8	
12 UJG-627	'THOMAS'	'f'	42	137	0	115	68	4	
13 XUE-826	'JACKSON'	'm'	25	174	0	127	74	-99	
14 TRW-072	'WHITE'	'm'	39	202	1	130	95	8	

- $\left\{\left(x^{(i)}, y^{(i)}\right)\right\}$ 一个训练样本，$\left\{\left(x^{(i)}, y^{(i)}\right); i=1,\cdots,N\right\}$ 训练样本集

- $\left\{\left(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, y^{(i)}\right)\right\} \longrightarrow \left\{\left(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)}\right)\right\}, \mathbf{x}^{(i)} = \begin{bmatrix} x_1^{(i)} \\ x_2^{(i)} \end{bmatrix}$

线性回归 (2/2)



- 试图学习：$f(x) = wx + b$ 使得 $f\left(x^{(i)}\right) \approx y^{(i)}$
- 试图学习：$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b$ 使得 $f\left(\mathbf{x}^{(i)}\right) \approx y^{(i)}$
- 核心在于怎么学?

线性回归建模

无约束优化梯度分析法

无约束优化迭代法

线性回归求解

无约束优化问题

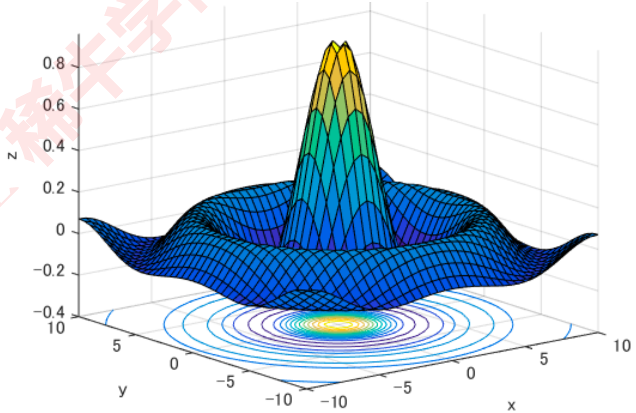
- 自变量为标量的函数 $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$$\min\ f(x) \qquad x \in \mathbb{R}$$

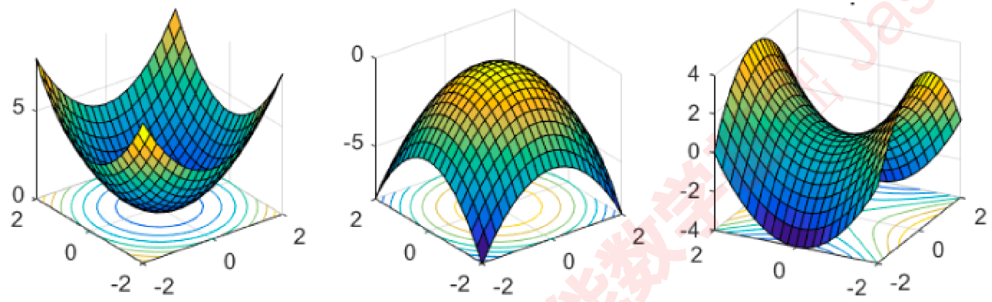
- 自变量为向量的函数 $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

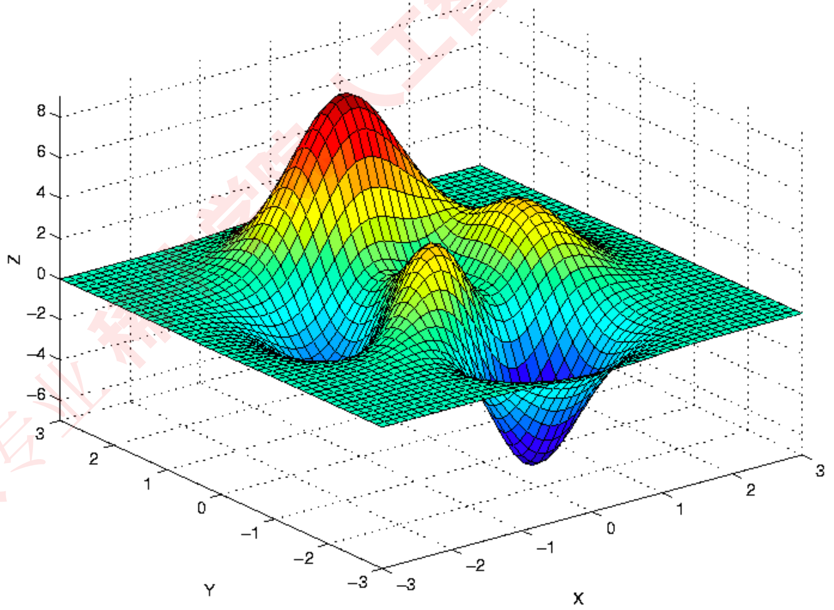
$$\min\ f(\mathbf{x}) \qquad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

- 熟悉 Contour



优化问题可能的极值点情况





梯度和 Hessian 矩阵

- 一阶导数和梯度 (gradient vector)

$$f(x);\qquad \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

- 二阶导数和 Hessian 矩阵

$$f''(x);\qquad \mathbf{H}(\mathbf{x}) = \nabla^2 f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \cdots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2^2} & & \\ & & \ddots & \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_2} & & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} = \nabla\left(\nabla f(\mathbf{x})\right)^T$$

二次型

- 给定矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，函数

$$\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i (\mathbf{A}\mathbf{x})_i = \sum_{i=1}^{n} x_i \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j\right) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} x_i x_j a_{ij} \tag{1}$$

被称为二次型．尝试将 $f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$ 写成二次型的形式

- 给定对称矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，如果对于所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$，有 $\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} \geq 0$，则为半正定矩阵 (positive semidefinite)，此时特征值 $\lambda(\mathbf{A}) \geq 0$．
- 如果对于所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$，有 $\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} > 0$，则为正定矩阵 (positive definite)．
- 负定矩阵, 不定矩阵 (indefinite)

具体计算

- 向量 $\mathbf{a}$ 和 $\mathbf{x}$ 无关，则 $\nabla\left(\mathbf{a}^T\mathbf{x}\right)=\mathbf{a}$, $\nabla^2\left(\mathbf{a}^T\mathbf{x}\right)=\mathbf{0}$
- 对称矩阵矩阵 $\mathbf{A}$ 与 $\mathbf{x}$ 无关，则 $\nabla\left(\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}\right)=\mathbf{2Ax}$，$\nabla^2\left(\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}\right)=2\mathbf{A}$
- 最小二乘

$$
\begin{aligned}
f(\mathbf{x}) &= ||\mathbf{Ax}-\mathbf{b}||_2^2 \\
&= \mathbf{x}^T\mathbf{A}^T\mathbf{Ax}-2\mathbf{b}^T\mathbf{Ax}+\mathbf{b}^T\mathbf{b}
\end{aligned}
$$

$$
\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{A}^T\mathbf{Ax}-2\mathbf{A}^T\mathbf{b}
$$

- $f(\mathbf{x})=\mathbf{x}^T\mathbf{Ax}+2\mathbf{b}^T\mathbf{x}+c$

泰勒级数

泰勒级数展开 (标量和向量)

- 输入为标量的泰勒级数展开

$$f(x_k+\delta) \approx f(x_k) + f'(x_k)\,\delta + \frac{1}{2}f''(x_k)\,\delta^2 + \cdots + \frac{1}{k!}f^k(x_k)\,\delta^k + \cdots \tag{2}$$

- 输入为向量的泰勒级数展开

$$f(\mathbf{x}_k+\boldsymbol{\delta}) \approx f(\mathbf{x}_k) + \mathbf{g}^T(\mathbf{x}_k)\,\boldsymbol{\delta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\delta}^T\mathbf{H}(\mathbf{x}_k)\,\boldsymbol{\delta} \tag{3}$$

泰勒级数和极值

标量情况

- 输入为标量的泰勒级数展开

$$f(x_k+\delta) \approx f(x_k) + f'(x_k)\,\delta + \frac{1}{2} f''(x_k)\,\delta^2$$

- 严格局部极小点指：$f(x_k+\delta) > f(x_k)$

- 称满足 $f'(x_k) = 0$ 的点为平稳点 (候选点).

- 函数在 x_k 有严格局部极小值条件为 $f'(x_k) = 0$ 且 $f''(x_k) > 0$

泰勒级数与极值

向量情况

- 输入为向量的泰勒级数展开

$$f(\mathbf{x}_k + \boldsymbol{\delta}) \approx f(\mathbf{x}_k) + \mathbf{g}^T(\mathbf{x}_k)\,\boldsymbol{\delta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\delta}^T\mathbf{H}(\mathbf{x}_k)\,\boldsymbol{\delta}$$

- 称满足 $\mathbf{g}(\mathbf{x}_k) = 0$ 的点为平稳点 (候选点)，此时如果有
  $\mathbf{H}(\mathbf{x}_k) \succ 0$，$x_k$ 为一严格局部极小点 (反之，严格局部最大点)
  如果 $\mathbf{H}(\mathbf{x}_k)$ 不定矩阵，是一个鞍点 (saddle point)

梯度为 0 求解的局限性

计算 $f(x) = x^4 + \sin(x^2) - \ln(x)e^x + 7$ 的导数

$$
\begin{aligned}
f'(x) &= 4x^{(4-1)} + \frac{d\left(x^2\right)}{dx}\cos(x^2) - \frac{d\left(\ln x\right)}{dx}e^x - \ln(x)\frac{d\left(e^x\right)}{dx} + 0 \\
&= 4x^3 + 2x\cos(x^2) - \frac{1}{x}e^x - \ln(x)e^x
\end{aligned}
$$

思考求 $f'(x) = 0$？

线性回归建模

无约束优化梯度分析法

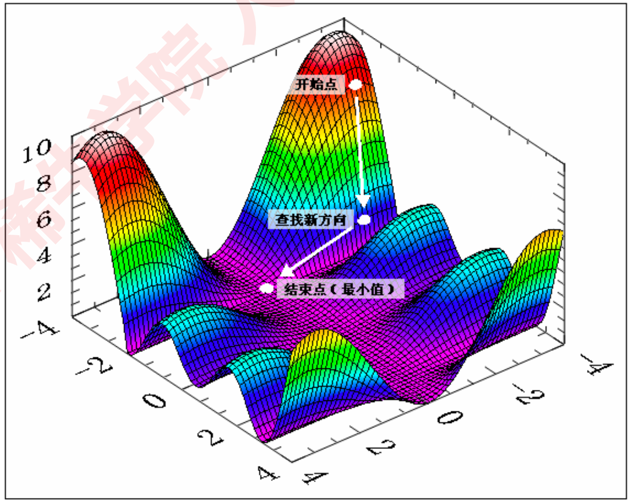
无约束优化迭代法

线性回归求解

无约束优化迭代法

迭代法的基本结构 (最小化 $f(\mathbf{x})$)

1. 选择一个初始点，设置一个 convergence tolerance ϵ，计数 $k=0$
2. 决定搜索方向 $\mathbf{d}_k$, 使得函数下降. (核心)
3. 决定步长 α_k 使得 $f(\mathbf{x}_k+\alpha_k\mathbf{d}_k)$ 对于 $\alpha_k \geq 0$ 最小化，构建 $\mathbf{x}_{k+1}=\mathbf{x}_k+\alpha_k\mathbf{d}_k$
4. 如果 $\|\mathbf{d}_k\| < \epsilon$，则停止输出解 $\mathbf{x}_{k+1}$；否则继续重复迭代.



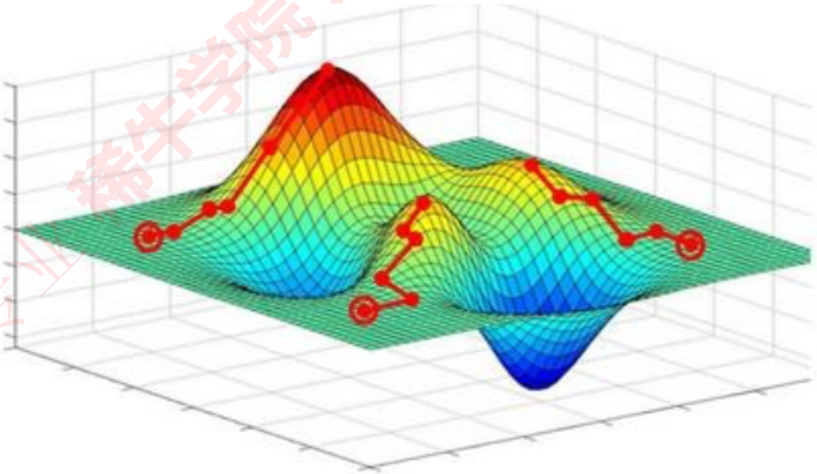
梯度下降法

梯度下降法

- $\mathbf{d}_k = -\mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$，思考为什么这么取?

$$f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k) \approx f(\mathbf{x}_k) + \mathbf{g}^T(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}_k$$

- 需要 $f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k)\downarrow$，则 $f(\mathbf{x}_k)$ 加个负数
- 回忆两个向量的内积，$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = \mathbf{a}^T\mathbf{b} = \|\mathbf{a}\|\,\|\mathbf{b}\|\cos\theta$



牛顿法

牛顿法

- 方向选取 $\mathbf{d}_k = -\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$

- 方向选取依据

$$f(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k) = f(\mathbf{x}_k) + \mathbf{g}^T(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}_k + \frac{1}{2}\mathbf{d}_k^T\mathbf{H}(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}_k$$

令 $\frac{\partial f(\mathbf{x}_k+\mathbf{d}_k)}{\partial \mathbf{d}_k} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{H}(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$

- 若 Hessian 矩阵正定，则有 $\mathbf{d}_k = -\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$

- 强制要求 Hessian 矩阵正定 (课上解释).

牛顿法关键点

- 实际工程中 Hessian 矩阵 $\mathbf{H}$ 很难求，$\mathbf{H}^{-1}$ 更加难求.
- 解决思路：
  - 修正牛顿法：当 Hessian 矩阵不是正定矩阵时，可对 Hessian 矩阵进行修正：$\mathbf{H}\left(\mathbf{x}_k\right)+\mathbf{E}$，典型的方法 $\mathbf{E}=\delta\mathbf{I}$，$\delta>0$ 很小．思考为什么这么取?
  - 拟牛顿法 (Quasi-Newton methods)

拟牛顿法 (1/3)

核心思想

- 统一深度下降法和牛顿法：

$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{S}_k\mathbf{g}_k \tag{4}$$

其中 $\mathbf{S}_k = \begin{cases} \mathbf{I} & \text{steepest} \\ \mathbf{H}_k^{-1} & \text{Newton} \end{cases}$

- 不直接求 $\mathbf{H}_k^{-1}$，尝试用一正定矩阵逼近 $\mathbf{H}_k^{-1}$(一阶的量慢慢近似二阶的量)
- 定义 $\boldsymbol{\delta}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$，$\gamma_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k$
- 需要 $\mathbf{S}_{k+1}\gamma_k = \boldsymbol{\delta}_k$，为什么?
- 但是，只有 $\boldsymbol{\delta}_k$ 和 γ_k，是不可能计算出 $\mathbf{S}_{k+1}$ 的，继续用迭代的方法.

拟牛顿法 (2/3)

DFP

- 给定初始 $\mathbf{S}_0 = \mathbf{I}$
- $\mathbf{S}_{k+1} = \mathbf{S}_k + \Delta\mathbf{S}_k,\ k = 0, 1, \cdots$
- $\Delta\mathbf{S}_k = \alpha\mathbf{u}\mathbf{u}^T + \beta\mathbf{v}\mathbf{v}^T$，因此

$$\mathbf{S}_{k+1} = \mathbf{S}_k + \alpha\mathbf{u}\mathbf{u}^T + \beta\mathbf{v}\mathbf{v}^T$$

- 两边乘以 γ_k，有 $\boldsymbol{\delta}_k = \mathbf{S}_k\gamma_k + \underbrace{\left(\alpha\mathbf{u}^T\gamma_k\right)}_{1}\mathbf{u} + \underbrace{\left(\beta\mathbf{v}^T\gamma_k\right)}_{-1}\mathbf{v} = \mathbf{S}_k\gamma_k + \mathbf{u} - \mathbf{v}$
- 解出 $\alpha = \frac{1}{\mathbf{u}^T\gamma_k}$, $\beta = -\frac{1}{\mathbf{v}^T\gamma_k}$, 且有 $\mathbf{u} - \mathbf{v} = \boldsymbol{\delta}_k - \mathbf{S}_k\gamma_k$，可得 $\mathbf{u}$ 和 $\mathbf{v}$，从而最终解得：
- Davidion-Feltcher-Powell (DFP) 更新公式

$$\mathbf{S}_{k+1} = \mathbf{S}_k + \frac{\boldsymbol{\delta}_k\boldsymbol{\delta}_k^T}{\boldsymbol{\delta}_k^T\gamma_k} - \frac{\mathbf{S}_k\gamma_k\gamma_k^T\mathbf{S}_k}{\gamma_k^T\mathbf{S}_k\gamma_k} \tag{5}$$

拟牛顿法 (3/3)

BFGS

Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS): $\mathbf{S}_0 = \mathbf{I}$

$$\mathbf{S}_{k+1} = \mathbf{S}_k + \left(1 + \frac{\boldsymbol{\gamma}_k^T \mathbf{S}_k \boldsymbol{\gamma}_k}{\boldsymbol{\delta}_k^T \boldsymbol{\gamma}_k}\right) \frac{\boldsymbol{\delta}_k \boldsymbol{\delta}_k^T}{\boldsymbol{\delta}_k^T \boldsymbol{\gamma}_k} - \frac{\boldsymbol{\delta}_k \boldsymbol{\gamma}_k^T \mathbf{S}_k + \mathbf{S}_k \boldsymbol{\gamma}_k \boldsymbol{\delta}_k^T}{\boldsymbol{\delta}_k^T \boldsymbol{\gamma}_k} \tag{6}$$

步长求取

1. 每次迭代固定步长，实际中最常用，例如 $\alpha_k = \alpha = 0.1$

2. 求导．例如：$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} + 2\mathbf{b}^T\mathbf{x} + c$，需要解 $\min_{\alpha \geq 0} f(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{d})$ 则 $h(\alpha) = f(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{d})$，则有 $\frac{\partial h(\alpha)}{\partial \alpha} = 0 \Rightarrow \alpha = -\frac{\mathbf{d}^T\nabla f(\mathbf{x})}{2\mathbf{d}^T\mathbf{A}\mathbf{d}}$

3. 不精确的线搜索和 Armijo 条件

$$f(\mathbf{x}_k + \alpha\mathbf{d}_k) < f(\mathbf{x}_k) + c_1\alpha\mathbf{g}^T(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{d}_k$$

   1. 设置 $c_1 = 10^{-4}$，具体参考[a]．先从 $\alpha = 1$ 搜，如果 Armijo 条件不满足，设置一回调因子 $\beta \in (0, 1)$，将步长下调至 $\alpha = \beta\alpha$．如果还不满足，继续回调 (backtracking line search)，从而保证步长不至于太小．

---

[a] Nocedal, Jorge; Wright, Stephen (1999). Numerical Optimization

线性回归建模

无约束优化梯度分析法

无约束优化迭代法

线性回归求解

解法 1：利用梯度等于 0

- 试图学习：$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b$ 使得 $f\left(\mathbf{x}^{(i)}\right) \approx y^{(i)}$
- 未知 $\overline{\mathbf{w}} = \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{bmatrix}$, 已知 $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(1)T} & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{x}^{(N)T} & 1 \end{bmatrix}_{N\times(d+1)}$，则有

$$\mathbf{y} \approx \mathbf{X}\overline{\mathbf{w}}$$

- 损失函数 $||\mathbf{y} - \mathbf{X}\overline{\mathbf{w}}||_2^2$，求解

$$\min ||\mathbf{y} - \mathbf{X}\overline{\mathbf{w}}||_2^2$$

- $g\left(\overline{\mathbf{w}}\right) = 0 \Rightarrow 2\mathbf{X}^T\left(\mathbf{X}\overline{\mathbf{w}} - \mathbf{y}\right) = 0 \Rightarrow \overline{\mathbf{w}}^* = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$
- 正则化

解法 2：梯度下降

- 梯度下降法

$$\mathbf{g}\left(\overline{\mathbf{w}}\right) = 2\mathbf{X}^T\left(\mathbf{X}\overline{\mathbf{w}} - \mathbf{y}\right)$$
$$= 2\sum_{i=1}^{N}\mathbf{x}^{(i)}\left(\mathbf{w}^T\mathbf{x}^{(i)} - y^{(i)}\right)$$

$$\overline{\mathbf{w}} \leftarrow \overline{\mathbf{w}} - \alpha\mathbf{g}\left(\overline{\mathbf{w}}\right)$$

- 随机梯度下降法（实际中很有用）

$$\left\{i = 1 : N,\ 2\mathbf{x}^{(i)}\left(\mathbf{w}^T\mathbf{x}^{(i)} - y^{(i)}\right)\right\}$$

案例演示

本章总结

本章参考资料

- Nocedal, Jorge; Wright, Stephen. Numerical Optimization
- Goodfellow, Ian, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. Deep learning. MIT press, 2016.