第三章 典型优化问题

修贤超

https://xianchaoxiu.github.io

目录

凸优化问题

- 标准形式的凸优化问题

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & f_0(x) \\
\text{s.t.} \quad & f_i(x) \le 0, \quad i = 1,\cdots,m \\
& a_i^\top x = b_i, \quad i = 1,\cdots,p
\end{aligned}
$$

  - $f_0, f_1, \ldots, f_m$ 为凸函数
  - $a_i^\top x = b_i$ 为线性等式约束

- 经常写成

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & f_0(x) \\
\text{s.t.} \quad & f_i(x) \le 0, \quad i = 1,\cdots,m \\
& Ax = b
\end{aligned}
$$

应用举例

- 考虑

$$\begin{aligned}\min_{x_1,x_2}\quad & f_0(x) = x_1^2 + x_2^2 \\ \text{s.t.}\quad & f_1(x) = x_1/(1+x_2^2) \le 0 \\ & h_1(x) = (x_1+x_2)^2 = 0\end{aligned}$$

  - f_0 为凸函数, 可行集 $\{(x_1,x_2) \mid x_1 = -x_2 \le 0\}$ 为凸集
  - f_1 非凸, h_1 不是线性函数

- 不是凸问题，但可转化为凸优化问题

$$\begin{aligned}\min_{x_1,x_2}\quad & x_1^2 + x_2^2 \\ \text{s.t.}\quad & x_1 \le 0 \\ & x_1 + x_2 = 0\end{aligned}$$

局部和全局极小

- **凸优化问题的任意局部极小点都是全局最优**

  证明 设 x 是局部极小解，y 是全局最优解且 $f_0(y) < f_0(x)$. 存在 $R > 0$ 使

  $$z\text{可行},\quad \|z - x\|_2 \le R \quad \Rightarrow \quad f_0(z) \ge f_0(x)$$

  考虑 $z = \theta y + (1 - \theta)x$ 且 $\theta = R/(2\|y - x\|_2)$

  - $\|y - x\|_2 > R$, 则 $0 < \theta < 1/2$
  - z 是两个可行点的凸组合，则也可行
  - $\|z - x\|_2 = R/2$，并且

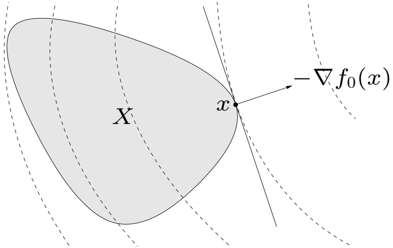
  $$f_0(z) \le \theta f_0(x) + (1 - \theta) f_0(y) < f_0(x)$$

  这与 x 是局部极小的假设矛盾

可微凸优化问题的最优性条件

- 设 x 是凸优化问题 $\min_{x \in X} f_0(x)$ 的最优解当且仅当 x 可行且满足

$$\nabla f_0(x)^\top (y - x) \geq 0, \quad \forall y \in X$$



- 如果 $\nabla f_0(x)$ 非零，它定义了可行集 X 在 x 处的支撑超平面

具体含义

- **无约束优化**　x 是最优解当且仅当

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

- **等式约束优化问题**

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

x 是最优解当且仅当存在 v 使得

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

- **非负约束优化问题**

$$\min \quad f_0(x) \qquad \text{s.t.} \quad x \succeq 0$$

x 是最优解当且仅当

$$x \in \mathrm{dom}\ f_0, \quad x \succeq 0, \quad \begin{cases} \nabla f_0(x)_i \geq 0, & x_i = 0 \\ \nabla f_0(x)_i = 0, & x_i > 0 \end{cases}$$

线性规划基本形式

- 线性规划问题的一般形式

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & c^\top x \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b \\ & Gx \leq e \end{aligned}$$

- 线性规划问题的标准形式

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & c^\top x \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{aligned}$$

- 线性规划问题的不等式形式

$$\begin{aligned} \max_{y\in\mathbb{R}^n} \quad & b^\top y \\ \text{s.t.} \quad & A^\top y \leq c \end{aligned}$$

应用举例：基追踪问题

- 基追踪问题是压缩感知中的一个基本问题，可以写为

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & \|x\|_1 \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b \end{aligned}$$

- 对每个 $|x_i|$ 引入一个新的变量 z_i，可以转化为

$$\begin{aligned} \min_{z\in\mathbb{R}^n} \quad & \sum_{i=1}^{n} z_i \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b \\ & -z_i \le x_i \le z_i, \quad i = 1, \cdots, n \end{aligned}$$

应用举例: 数据拟合

- 最小 ℓ_∞ 范数模型

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|Ax-b\|_\infty$$

- 令 $t=\|Ax-b\|_\infty$，得到等价问题

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^n,\, t\in\mathbb{R}} \quad & t \\ \text{s.t.} \quad & \|Ax-b\|_\infty \le t\end{aligned}$$

- 利用 ℓ_∞ 范数的定义，可以进一步写为

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^n,\, t\in\mathbb{R}} \quad & t \\ \text{s.t.} \quad & -t\mathbf{1} \le Ax-b \le t\mathbf{1}\end{aligned}$$

目录

最小二乘问题

- 最小二乘问题的一般形式如下

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \sum_{i=1}^{m} r_i^2(x)$$

- 如果所有的 $r_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 都是线性函数，则称线性最小二乘问题，否则称为非线性最小二乘问题
- 如果噪声服从高斯分布，最小二乘问题的解对应于原问题的最大似然解
- 1801 年，24 岁的高斯计算出小行星的运动轨道

应用举例: 线性最小二乘问题

- 线性最小二乘问题是回归分析中的一个基本模型，它可以表示为

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \sum_{i=1}^{m}(a_i^\top x - b_i)^2$$

- 记 $A = [a_1, a_2, \cdots, a_m]^\top$，上式可以等价地写成

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|_2^2$$

- $x \in \mathbb{R}^n$ 为其全局极小解当且仅当 x 满足

$$\nabla f(x) = A^\top(Ax - b) = 0$$

应用举例: 数据插值

- 给定数据集 $\{a_i \in \mathbb{R}^p, b_i \in \mathbb{R}^q, i = 1, 2, \cdots, m\}$，插值是求一个映射 f，使得

$$b_i = f(a_i), \quad i = 1, 2, \cdots, m$$

- 利用线性函数 $f(a) = Xa + y$ 逼近，可以建立如下最小二乘问题

$$\min_{X \in \mathbb{R}^{q \times p}} \quad \sum_{i=1}^{m} \|Xa_i + y - b_i\|^2$$

- 设 $\{\phi_i(a)\}_{i=1}^{n} (n \leq m)$ 为插值空间的一组基，数据插值可以写成

$$b_j = f(a_j) = \sum_{i=1}^{n} x_i \phi_i(a_j), \quad j = 1, 2, \cdots, m$$

应用举例: 数据插值

- 设非线性向量函数 $\phi_i(\theta):\mathbb{R}^q\to\mathbb{R}^q$，并构造如下复合函数

$$f(\theta)=\phi_n(X_n\phi_{n-1}(X_{n-1}\cdots\phi_1(X_1\theta+y_1)\cdots+y_{n-1})+y_n)$$

- 常用的有 ReLU，即

$$\phi_i(\theta)=(\mathrm{ReLU}(\theta_1),\mathrm{ReLU}(\theta_2),\cdots,\mathrm{ReLU}(\theta_q))^\top,\quad i=1,2,\cdots,n$$

$$\mathrm{ReLU}(t)=\begin{cases}t, & t\geq 0\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

- 更多未知的非线性，可能在更大的函数空间中得到一个更好的逼近

应用举例：带微分方程约束优化问题

- 当约束中含微分方程时，称为**带微分方程约束的优化问题**
- 考虑瓦斯油催化裂解生成气体和其他副产物的反应过程

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = -(\theta_1 + \theta_3) y_1^2 \\ \dot{y}_2 = \theta_1 y_1^2 - \theta_2 y_2 \end{cases}$$

- 转化为最小二乘问题

$$\begin{aligned} \min_{\theta \in \mathbb{R}^3} \quad & \sum_{j=1}^{n} \| y(\tau_j; \theta) - z_j \|^2 \\ \text{s.t.} \quad & y(\tau; \theta) \text{满足上述方程组} \end{aligned}$$

其中 z_j 是在时刻 τ_j 的 y 的测量值，n 为测量的时刻数量

目录

复合优化问题

- 复合优化问题一般可以表示为

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = f(x) + h(x)$$

  - $f(x)$ 是光滑函数, 如数据拟合项
  - $h(x)$ 可能是非光滑的, 如 ℓ_1 范数正则项, 约束集合的示性函数

- 常用的优化算法有
  - 次梯度法
  - 近似点梯度法
  - Nesterov 加速法
  - 交替方向乘子法

应用举例: 信号处理

- ℓ_1 范数正则化回归分析问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2+\mu\|x\|_1$$

- 矩阵分离问题

$$\begin{aligned}\min_{X,S\in\mathbb{R}^{m\times n}} \quad & \|X\|_* + \mu\|S\|_1 \\ \text{s.t.} \quad & X+S=M\end{aligned}$$

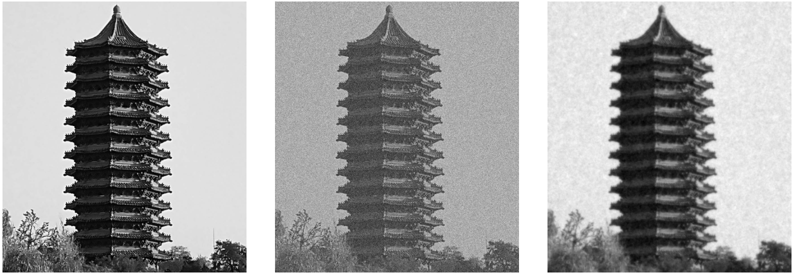
- 字典学习问题

$$\begin{aligned}\min_{X,D\in\mathbb{R}^{m\times n}} \quad & \frac{1}{2n}\|DX-A\|_F^2+\lambda\|X\|_1 \\ \text{s.t.} \quad & \|D\|_F\leqslant 1\end{aligned}$$

应用举例：图像去噪

- 图像去噪是指从一个带噪声的图像中恢复出不带噪声的原图
- 由全变差模型，去噪问题可表示为

$$\min_{x \in \mathbb{R}^{n \times n}} \quad \frac{1}{2}\|x - y\|_F^2 + \lambda \|x\|_{TV}$$



应用举例: 盲反卷积

- 反卷积是从一个模糊的图像恢复出原来清晰的图像, 也称为去模糊
- 反卷积问题的模型

$$y = a * x + \varepsilon$$

- 设噪声为高斯噪声，可转化为

$$\min_{a,x} \quad \frac{1}{2}\|y - a * x\|_2^2$$

- 设原始图像信号在小波变换下是稀疏的，进一步得到

$$\min_{a,x} \quad \frac{1}{2}\|y - a * x\|_2^2 + \|\lambda \odot (Wx)\|_1$$

其中 W 是小波框架，$\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m)^\top$ 用来控制稀疏度

目录

随机优化问题

- 随机优化问题可以表示为

$$\min_{x\in\mathcal{X}} \quad \mathbb{E}_\xi[F(x,\xi)] + h(x)$$

  - $F(x,\xi)$ 表示样本 ξ 上的损失或奖励
  - $h(x)$ 用来保证解的某种性质

- 设有 N 个样本 $\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N$，令 $f_i(x)=F(x,\xi_i)$，得到经验风险极小化问题

$$\min_{x\in\mathcal{X}} \quad f(x)=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f_i(x) + h(x)$$

- 样本数 N 比较多，可行域所在空间维数 n 比较大，导致计算困难

应用举例: 随机主成分分析

- 如果样本点 ξ 服从某个零均值分布 $\mathcal{D}$，则随机主成分分析可以写成

$$\max_{X\in\mathbb{R}^{p\times d}} \quad \mathrm{Tr}(X^\top AA^\top X) \qquad \text{s.t.} \quad X^\top X = I$$

$$\Downarrow$$

$$\max_{X\in\mathbb{R}^{p\times d}} \quad \mathrm{Tr}(X^\top \mathbb{E}_{\xi\sim\mathcal{D}}[\xi\xi^\top]X) \qquad \text{s.t.} \quad X^\top X = I$$

$$\Downarrow$$

$$\max_{X\in\mathbb{R}^{p\times d}} \quad \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathrm{Tr}(X^\top A_iA_i^\top X) \qquad \text{s.t.} \quad X^\top X = I$$

应用举例: 分布式鲁棒优化

- 为了提高深度学习预测器的泛化能力，考虑

$$\min_{h} \quad \mathbb{E}_z[F(h,z)]$$

$$\Downarrow$$

$$\min_{h} \quad \max_{\hat{z}\in\Gamma} \mathbb{E}_{\hat{z}}[F(h,\hat{z})]$$

- 集合 Γ 中随机变量的分布与真实数据的分布在一定意义下非常接近
- Wasserstein 距离可以改变原来经验分布的支撑集

应用举例：分布式鲁棒优化

Generative Adversarial Nets

Ian J. Goodfellow,[*] Jean Pouget-Abadie,[†] Mehdi Mirza, Bing Xu, David Warde-Farley, Sherjil Ozair,[‡] Aaron Courville, Yoshua Bengio[§]

The adversarial modeling framework is most straightforward to apply when the models are both multilayer perceptrons. To learn the generator's distribution p_g over data $\boldsymbol{x}$, we define a prior on input noise variables $p_{\boldsymbol{z}}(\boldsymbol{z})$, then represent a mapping to data space as $G(\boldsymbol{z};\theta_g)$, where G is a differentiable function represented by a multilayer perceptron with parameters θ_g. We also define a second multilayer perceptron $D(\boldsymbol{x};\theta_d)$ that outputs a single scalar. $D(\boldsymbol{x})$ represents the probability that $\boldsymbol{x}$ came from the data rather than p_g. We train D to maximize the probability of assigning the correct label to both training examples and samples from G. We simultaneously train G to minimize $\log(1 - D(G(\boldsymbol{z})))$. In other words, D and G play the following two-player minimax game with value function $V(G, D)$:

$$\min_G \max_D V(D,G) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim p_{\text{data}}(\boldsymbol{x})}[\log D(\boldsymbol{x})] + \mathbb{E}_{\boldsymbol{z}\sim p_{\boldsymbol{z}}(\boldsymbol{z})}[\log(1 - D(G(\boldsymbol{z})))]. \tag{1}$$

Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈