第一章 最优化简介

修贤超

https://xianchaoxiu.github.io

目录

最优化问题的一般形式

- 最优化问题一般可以描述为

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & x \in \mathcal{X} \end{aligned} \tag{1}$$

  - $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^\top \in \mathbb{R}^n$ 是决策变量
  - $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 是目标函数
  - $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ 是约束集合或可行域，可行域包含的点称为可行解或可行点
  - 当 $\mathcal{X} = \mathbb{R}^n$ 时，问题 (1) 称为无约束优化问题
  - 集合 $\mathcal{X}$ 通常可以由约束函数 $c_i(x): \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, i = 1, 2, \cdots, m + l$ 表达为

$$\begin{aligned} \mathcal{X} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid\ & c_i(x) \le 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m, \\ & c_i(x) = 0, \quad i = m+1, m+2 \cdots, m+l\} \end{aligned}$$

最优化问题的一般形式

- 在所有满足约束条件的决策变量中，使目标函数取最小值的变量 x^* 称为优化问题 (1) 的**最优解**，即对任意 $x \in \mathcal{X}$ 都有

$$f(x) \geq f(x^*)$$

  - 如果求解目标函数 f 的最大值，则 “min” 应替换为 “max”
  - 函数 f 的最小（最大）值不一定存在，但其下（上）确界总是存在的
  - x 可以是矩阵、多维数组或张量等

最优化问题的类型

- 最优化问题可以按照目标函数、约束函数以及解的性质将其分类
  - 线性规划: 目标函数和约束函数均为线性函数的问题
  - 整数规划: 变量只能取整数的问题
  - 非线性规划: 目标函数和约束函数中至少有一个为非线性函数的问题
  - 二次规划: 目标函数是二次函数而约束函数是线性函数的问题
  - 半定规划: 在线性约束下极小化关于半正定矩阵的线性函数的问题
  - 稀疏优化: 最优解只有少量非零元素的问题
  - 非光滑优化: 包含非光滑函数的问题
  - 低秩矩阵优化: 最优解是低秩矩阵的问题
- 还有张量优化、鲁棒优化、全局优化、组合优化、随机优化、智能优化、零阶优化、流形约束优化、分布式优化等

目录

稀疏优化

- 给定 $b \in \mathbb{R}^m$，矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，且向量 b 的维数远小于向量 x 的维数，即 $m \ll n$. 考虑线性方程组求解问题

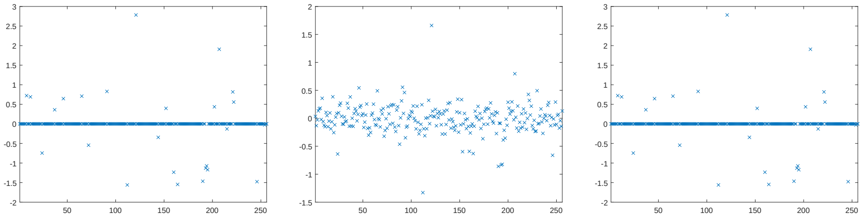
$$Ax = b$$

  - 方程组欠定，存在无穷多个解
  - 原始信号中有较多的零元素，即稀疏解
  - ℓ_0 是不连续的，是 NP 难的

$$(\ell_0)\begin{cases}\displaystyle\min_{x\in\mathbb{R}^n} & \|x\|_0\\ \text{s.t.} & Ax=b\end{cases} \quad \Rightarrow \quad (\ell_2)\begin{cases}\displaystyle\min_{x\in\mathbb{R}^n} & \|x\|_2\\ \text{s.t.} & Ax=b\end{cases} \qquad (\ell_1)\begin{cases}\displaystyle\min_{x\in\mathbb{R}^n} & \|x\|_1\\ \text{s.t.} & Ax=b\end{cases}$$

  - 广泛应用于压缩感知（compressive sensing），即通过部分信息恢复全部信息的解决方案

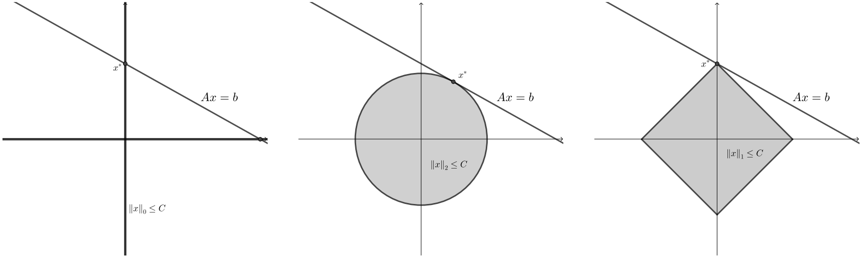
- MATLAB 仿真
  - $m = 128; n = 256;$
  - $A = randn(m,n); u = sprandn(n,1,0.1);$
  - $b = A * u;$



- 若 A, b 满足一定的条件，向量 u 也是 ℓ_1 范数优化问题的**唯一最优解**

稀疏优化

- 原点到仿射集 $Ax = b$ 的投影



- 思考 1：绝对值函数在零点处不可微，即非光滑
- 思考 2：A 通常是稠密矩阵，甚至元素未知或者不能直接存储

LASSO 问题

- 考虑带 ℓ_1 范数正则项的优化问题

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

  - $\mu > 0$ 是给定的正则化参数
  - 称为 LASSO（least absolute shrinkage and selection operator）
  - R Tibshirani [JRSSB, 1996], Google Citation: 60087
  - DL Donoho [IEEE TIT, 2006], Google Citation: 34645
  - H Zou [JASA, 2006], Google Citation: 8846

- 思考 3: 与对应约束优化问题的关系

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad \mu \|x\|_1 \quad \text{s.t. } Ax = b \tag{3}$$

- 本课程大部分算法都将针对(2)和(3)给出

目录

深度学习

- 深度学习（deep learning）是机器学习的一个子领域
- 深度学习的起源可以追溯至 20 世纪 40 年代，其雏形出现在控制论中
- 常见的激活函数类型
  - Sigmoid 函数

$$t(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}$$

  - Heaviside 函数

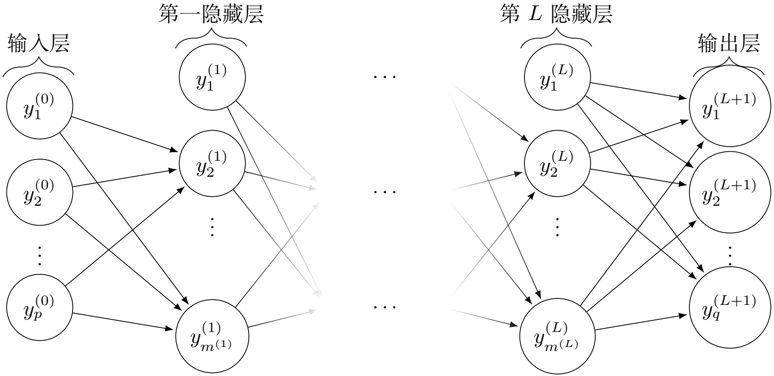
$$t(z) = \begin{cases} 1, & z \geq 0 \\ 0, & z < 0 \end{cases}$$

  - ReLU 函数

$$t(z) = \max\{0, z\}$$

多层感知机

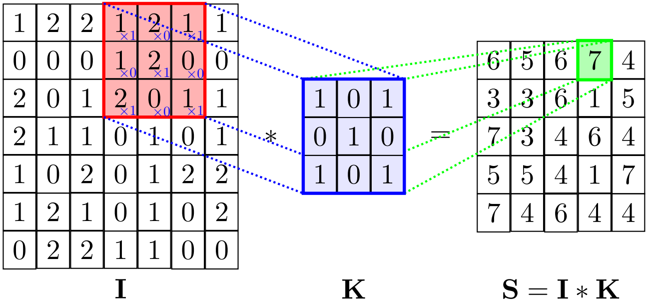
- 多层感知机（multi-layer perceptron, MLP）也叫前馈神经网络
- 通过已有的信息或者知识来对未知事物进行预测



卷积神经网络

- 卷积神经网络（convolutional neural network, CNN）
- 给定二维图像 $\mathbf{I} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和卷积核 $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{k\times k}$，定义卷积操作 $\mathbf{S} = \mathbf{I} * \mathbf{K}$，即

$$\mathbf{S}_{i,j} = \mathbf{I}(i : i+k-1, j : j+k-1)\mathbf{K}$$



深度学习中的优化算法

典型的数学模型

$$\min_{x \in \mathcal{W}} \quad \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \ell(f(a_i, x), b_i) + \mu\varphi(x)$$

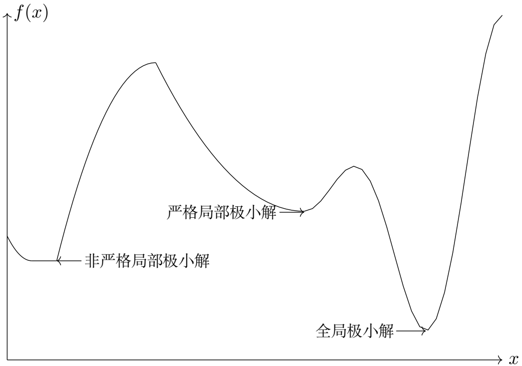
随机梯度类算法

- pytorch/caffe2: adadelta, adagrad, adam, nesterov, rmsprop, YellowFin
  https://github.com/pytorch/pytorch/tree/master/caffe2/sgd
- pytorch/torch: sgd, asgd, adagrad, rmsprop, adadelta, adam, adamax
  https://github.com/pytorch/pytorch/tree/master/torch/optim
- tensorflow: Adadelta, AdagradDA, Adagrad, ProximalAdagrad, Ftrl, Momentum, adam, Momentum, CenteredRMSProp
  https://github.com/tensorflow/tensorflow/blob/master/tensorflow/core/kernels/training_ops.cc

目录

全局和局部最优解

- 如果 $f(\bar{x}) \le f(x), \forall x \in \mathcal{X}$，则称 $\bar{x}$ 为**全局极小解**
- 如果存在 $N_\varepsilon(\bar{x})$ 使得 $f(\bar{x}) \le f(x), \forall x \in N_\varepsilon(\bar{x}) \cap \mathcal{X}$, 则称 $\bar{x}$ 为**局部极小解**. 进一步地，如果有 $f(\bar{x}) < f(x), \forall x \in N_\varepsilon(\bar{x}) \cap \mathcal{X}$, 且 $x \neq \bar{x}$ 成立，则称 $\bar{x}$ 为**严格局部极小解**



收敛性

- 给定初始点 x^0，记算法迭代产生的点列为 $\{x^k\}$. 如果 $\{x^k\}$ 在某种范数 $\|\cdot\|$ 的意义下满足 $\lim_{k\to\infty}\|x^k - x^*\| = 0$, 且收敛的点 x^* 为一个局部（全局）极小解，则称该点列收敛到局部（全局）极小解，相应的算法称为依点列收敛到局部（全局）极小解
- 如果从任意初始点 x^0 出发，算法都是依点列收敛到局部（全局）极小解的，则称该算法全局依点列收敛到局部（全局）极小解
- 记对应的函数值序列 $\{f(x^k)\}$，则称该算法（全局）依函数值收敛到局部（全局）极小值
- 除了点列和函数值的收敛外，还有每个迭代点的最优性条件（如无约束优化问题中的梯度范数，约束优化问题中的最优性条件违反度等等）的收敛

渐进收敛速度

- Q-线性收敛: 对充分大的 k 有

$$\frac{\|x^{k+1}-x^*\|}{\|x^k-x^*\|} \leq a, \quad a \in (0,1)$$

- Q-次线性收敛: 对充分大的 k 有

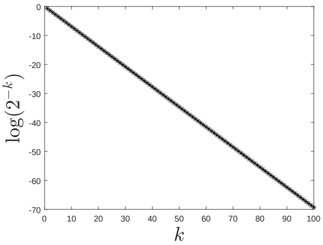
$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x^{k+1}-x^*\|}{\|x^k-x^*\|} = 1$$

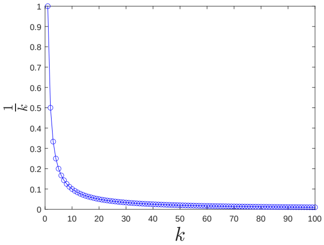
- Q-超线性收敛: 对充分大的 k 有

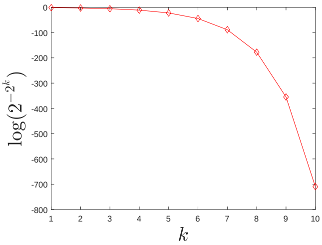
$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x^{k+1}-x^*\|}{\|x^k-x^*\|} = 0$$

- Q-二次收敛: 对充分大的 k 有

$$\frac{\|x^{k+1}-x^*\|}{\|x^k-x^*\|^2} \le a, \quad a>0$$







- 一般来说，选择 Q-超线性收敛速度和 Q-二次收敛速度的算法
- 思考 4: 时间复杂度和空间复杂度

收敛准则

- 对于无约束优化问题，常用的收敛准则有

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

如果最优解未知，通常使用相对误差

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

- 对于约束优化问题，还需要考虑约束违反度

$$c_i(x^k) \le \varepsilon_5, \ i = 1, 2, \cdots, m,$$
$$|c_i(x^k)| \le \varepsilon_6, \ i = m+1, m+2, \cdots, m+l$$

Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈