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

- 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　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
- 鲁棒优化、组合优化、随机优化、零阶优化、流形优化、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

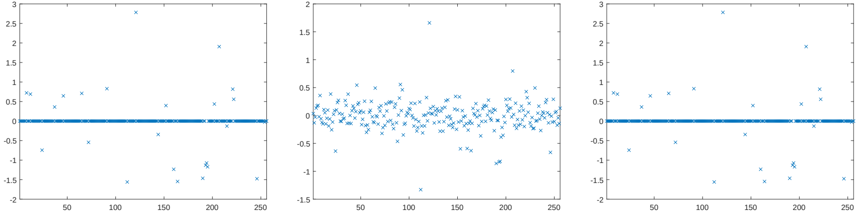
- 压缩感知（compressive sensing），即通过部分信息恢复全部信息的解决方案

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

- 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**



稀疏优化代表作

Compressed sensing

DL Donoho - IEEE Transactions on information theory, 2006 - ieeexplore.ieee.org

Suppose x is an unknown vector in Ropf m (a digital image or signal); we p
measure n general linear functionals of x and then reconstruct. If x is know
compressible by …

☆ 被引用次数：34750 相关文章 ≫

Robust uncertainty principles: Exact signal reconstruction from highly incomplete frequency information

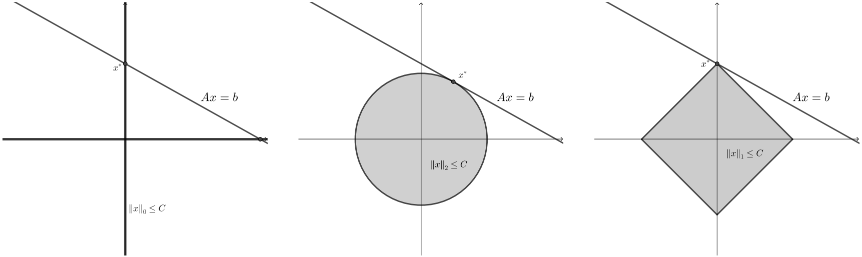
EJ Candès, J Romberg, T Tao - IEEE Transactions on …, 2006 - ieeexplor

… to Uncertainty Principles From a certain point of view, our results are co
the so-called uncertainty principles [4]… will be a novel uncertainty principl
for generic sets , . …

☆ 99 引用 被引用次数：19715 相关文章 所有 27 个版本 ≪

稀疏优化

- 原点到仿射集 $Ax = b$ 的投影



- 绝对值函数在零点处不可微，即非光滑
- 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

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \mu\|x\|_1 \quad \text{s.t.} \quad Ax = b \tag{2}$$

$$\Downarrow$$

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \mu\|x\|_1 + \frac{1}{2}\|Ax - b\|_2^2 \tag{3}$$

  - $\mu > 0$ 是给定的正则化参数
  - 称为 LASSO（least absolute shrinkage and selection operator）
- 本课程大部分算法都将针对(2)和(3)给出

LASSO 代表作

Regression shrinkage and selection via the lasso

R Tibshirani - Journal of the Royal Statistical Society Series B …, 1996 - academic.oup.com

… methods for estimation ofprediction error and the lasso shrinkage par
Bayes model for the lasso is briefly mentioned in Section 5. We describe
algorithm in Section 6. …

被引用次数：60458 相关文章

The adaptive lasso and its oracle properties

H Zou - Journal of the American statistical association, 2006 - Taylor & Francis

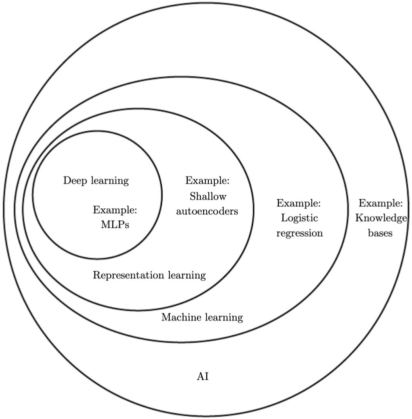
… for the lasso variable selection to … lasso, called the adaptive lasso,
adaptive weights are used for penalizing different coefficients in the l1 p
show that the adaptive lasso …

被引用次数：8879 相关文章

目录

深度学习

- 深度学习（deep learning）是机器学习的一个子领域
- 起源可以追溯至 20 世纪 40 年代，雏形出现在控制论



- 常见的激活函数类型
  - Sigmoid 函数

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

  - Heaviside 函数

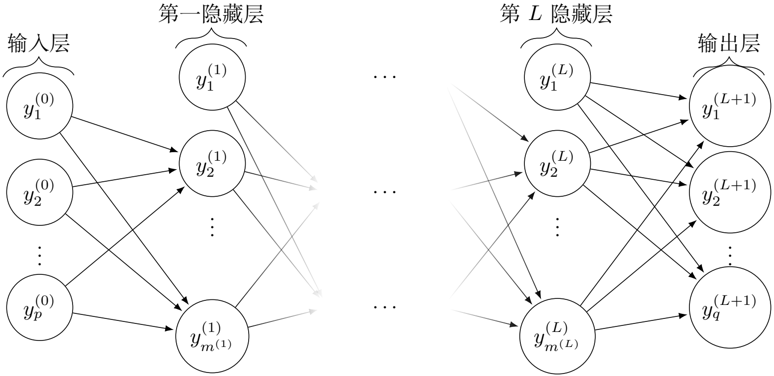
$$t(z) = \begin{cases} 1, & z \geq 0 \\ 0, & z < 0 \end{cases}$$

  - ReLU 函数

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

多层感知机

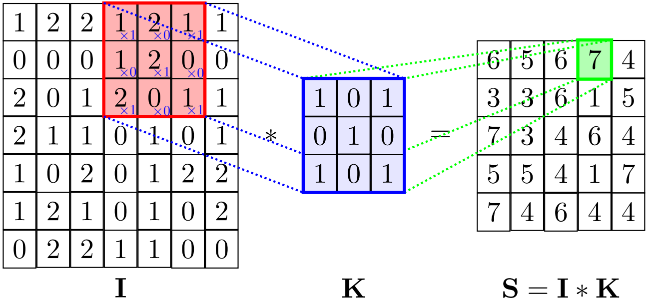
- 多层感知机（multi-layer perceptron, MLP）也叫前馈神经网络
- 通过已有的信息或者知识来对未知事物进行预测



卷积神经网络

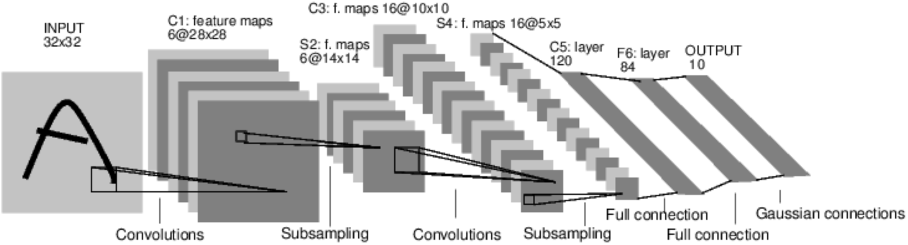
- 卷积神经网络（convolutional neural network, CNN）
- 给定二维图像 $I \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和卷积核 $K \in \mathbb{R}^{k\times k}$，定义卷积操作 $S = I * K$，即

$$S_{i,j} = \langle I(i:i+k-1, j:j+k-1), K\rangle$$



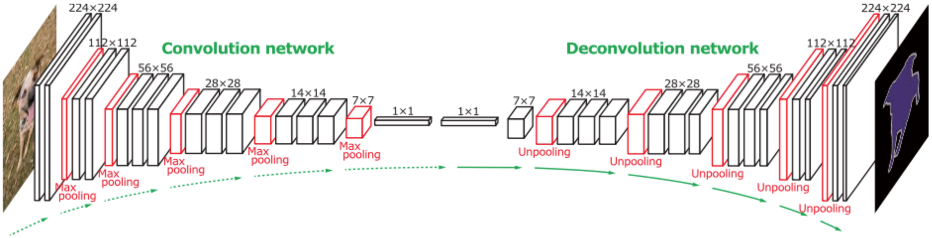
卷积神经网络

- LeCun 等人开创性的建立了数字分类的神经网络 LeNet-5，几家银行使用它来识别支票上的手写数字



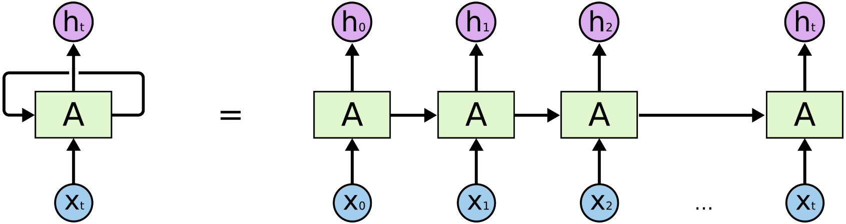
反卷积网络

- 生成网络是一种特殊的卷积网络，它使用转置卷积，也称为反卷积层



递归神经网络

- 递归神经网络（recurrent neural networks, RNN）建立在与前馈神经网络相同的计算单元上。RNN 不必分层组织，并且允许定向循环。这样一来，他们就可以拥有内部存储器，从而可以处理顺序数据



神经网络代表作

Imagenet classification with deep convolutional neural networks

A Krizhevsky, I Sutskever… - Advances in neural …, 2012 - proceedings.

We trained a large, deep convolutional neural network to classify the 1.3
resolution images in the LSVRC-2010 ImageNet training set into the 100
classes. On the …

☆ 99 引用 被引用次数：132672 相关文章 所有 98 个版本 HTML

Deep residual learning for image recognition

K He, X Zhang, S Ren, J Sun - Proceedings of the IEEE …, 2016 - openaccess.thecvf.com

… Deeper neural networks are more difficult to train. We present a res
framework to ease the training of networks that are substantially deepe
used previously. …

☆ 99 引用 被引用次数：232781 相关文章 所有 65 个版本 HTM

深度学习中的优化算法

- **典型的数学模型**

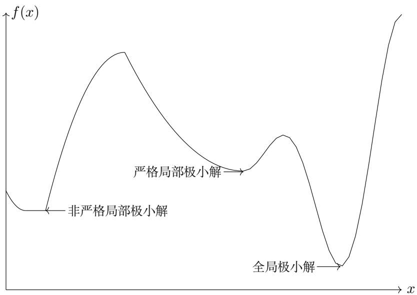
$$\min_{x \in \mathcal{W}} \quad \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \ell(f(a_i, x), b_i) + \mu\varphi(x)$$

- **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 $f(\bar{x}) \leq f(x), \forall x \in \mathcal{X}$，则称 $\bar{x}$ 为**全局极小解**
- 如果存在 $N_\varepsilon(\bar{x})$ 使得 $f(\bar{x}) \leq f(x), \forall x \in N_\varepsilon(\bar{x}) \cap \mathcal{X}$, 则称 $\bar{x}$ 为**局部极小解**
- 进一步，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，则称该算法依点列收敛到局部（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

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

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

渐进收敛速度

- **Q-线性收敛** 若对充分大的 k 有

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

- **Q-次线性收敛** 若

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

- **Q-超线性收敛** 若

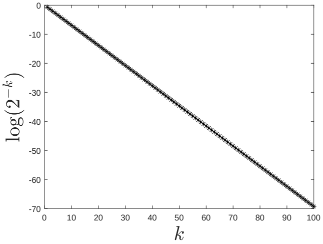
$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|} = 0$$

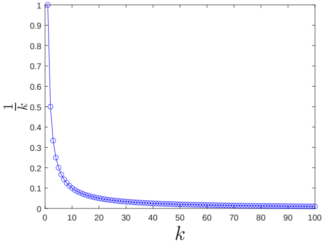
渐进收敛速度

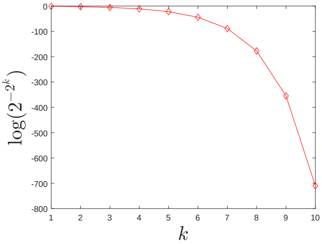
- Q-二次收敛 若对充分大的 k 有

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

- 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







Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈