几类应用优化问题的新算法

付云姗

摘要

最优化计算方法作为应用数学、计算科学与运筹学等学科的交叉学科，有着十分广阔的应用背景。它在航空航天、生命科学、水利科学、地球科学、工程技术等自然科学领域和经济金融、管理科学等社会科学领域有着广泛而重要的应用。因此，对于最优化计算方法的研究有着很重要的实际价值。另一方面，在这些科学领域中，很多问题可归结为最优化问题，这些问题的出现不断的为科学工作者提出新的问题和挑战，因此，应用问题的解决也反过来推动着最优化计算方法的理论发展。本文主要对几个有广泛应用背景的优化问题进行了模型讨论，理论研究和算法设计。

论文的第一部分是对于数据挖掘和机器学习中的支持向量机算法的改进。支持向量机 (Support Vector Machine 简称(SVM)) 方法是借助于最优化方法解决数据挖掘问题的新工具。近年来，它在理论研究和算法实现方面取得了突破性的进展。它将分类以及回归问题归约为一个二次规划问题，由于一般的分类问题和回归问题都涉及到大量的数据，因此设计解决大规模这类问题的快速高效的算法成为了一件很有意义的科学工作。投影梯度方法是解决这类问题的快速高效的方法，在这个框架下，我们提出了解决这个问题的新算法。我们给出了在一阶稳定点处 Lagrange 乘子与投影子问题中 Lagrange 乘子之间的关系，同时提出了子问题的 Lagrange 乘子的初始化策略。这个新的初始化方法可以应用到所有解决这类问题的投影梯度算法中。数值实验结果表明新初始可将子程序的运算时间缩短 40% 左右，这是很可观的改进。

论文的第二部分是关于数据挖掘问题以及机器学习理论中度量学习问题和核学习问题中的算法研究。已有的解决这类问题的方法多是基于相继投影算法 (Successive Projection Algorithm) (或循环投影算法 (Cyclic Projection Algorithm))，约束条件的个数直接影响到算法的效率，更糟糕的是这类问题往往涉及大量的约束条件。我们通过引入 Bregman 偏离正则项，将任意凸二阶可微损失函数意义下的欧氏度量学习和核学习问题转化为一个无约束的非线性半定规划问题。为了避免这个问题，本文提出了两种方法求解这个非线性半定规划问题，第一种方法是重开始的部分牛顿法，它利用 Hessian 算子的部分信息计算一种特殊的部分牛顿步进行迭代。第二种方法是一个结合截断共轭梯度法的半定矩阵空间上的信赖域方法 (TRIN方法)。对于简单的优化问题，部分牛顿法的计算速度较快，而对于复杂的优化问题，信赖域算法的表现更为突出。用我们的算法测试了大量的数据库以及损失函数，数值结果表明，在欧氏度量问题中，我们的 TRIN 算法要比目前公认最好的 ITML 算法要更加高效。

论文的第三部分简述了与北京交通大学轨道交通控制与安全国家重点实验室合作解决轨道交通GPS 数据约简问题。我们提出了解决轨道交通 GPS 数据约简问题的数学模型（把该问题转化为一个赋权有向图上的最小路径问题），并且给出了求解这个问题的有效算法。以往的启发式算法只能得到一个近似的解，利用我们的模型以及算法可以得到一个精确全局的最优解。

关键词：支持向量机，机器学习，数据挖掘，度量学习，核学习，非线性半定规划，轨道交通GPS数据约简问题，最短路径问题。