

最优化方法

凸集与凸函数

Definition 1 凸集:

设集合 $D \subset \mathbb{R}^n$, 若 $\forall x, y \in D$,

$$\lambda x + (1 - \lambda)y \in D, \forall 0 \leq \lambda \leq 1$$

则称集合 D 为凸集。

凸集的性质: 设 D_1, D_2 是凸集, 则 $D_1 \cap D_2, D_1 + D_2, D_1 - D_2, \alpha D_1$ 都是凸集

Examples:

1. 超平面: $H = \{x | p^T x = \alpha\}$ 是凸集, 其中 $p \in \mathbb{R}^n$ 是非零向量, 称为超平面的法向量, $\alpha \in \mathbb{R}$ 。
2. 闭半空间: $H^- = \{x | p^T x \leq \alpha\}$ 和 $H^+ = \{x | p^T x \geq \alpha\}$ 是凸集。
3. 开半空间: $H_0^- = \{x | p^T x < \alpha\}$ 和 $H_0^+ = \{x | p^T x > \alpha\}$ 是凸集。
4. 多面集: 由有限个闭半空间的交组合成的集合 $D = \{x | p_i^T x \leq \beta_i, i = 1, \dots, m\}$ 。其中 p_i 是非零向量, β_i 是数。多面集是一个凸闭集。

Statement 1 $D \subset \mathbb{R}^n$ 是凸集的充分必要条件是 D 中任意 m 个点 $x^{(i)} (i = 1, 2, \dots, m)$ 的凸组合仍然属于 D , 即:

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i x^{(i)} \in D, \alpha_i \geq 0 (i = 1, 2, \dots, m), \sum_{i=1}^m \alpha_i = 1$$

Definition 2 分离, 严格分离

设 $D_1, D_2 \subset \mathbb{R}^n$ 为两非空凸集

若存在非零向量 $\alpha \in \mathbb{R}^n$ 和 $\beta \in \mathbb{R}$, 使

$$D_1 \subset H^+ = \{x \in \mathbb{R}^n | \alpha^T x \geq \beta\} D_2 \subset H^- = \{x \in \mathbb{R}^n | \alpha^T x \leq \beta\}$$

则称超平面

$$H = \{x \in \mathbb{R}^n | \alpha^T x = \beta\}$$

分离集合 D_1, D_2 。

若存在非零向量 $\alpha \in \mathbb{R}^n$ 和 $\beta \in \mathbb{R}$, 使

$$D_1 \subset H_0^+ = \{x \in \mathbb{R}^n | \alpha^T x > \beta\} D_2 \subset H_0^- = \{x \in \mathbb{R}^n | \alpha^T x < \beta\}$$

则称超平面 $H = \{x \in \mathbb{R}^n | \alpha^T x = \beta\}$ 严格分离 D_1, D_2 , 其中 H_0^+, H_0^- 分别表示集合 H^+, H^- 的内部。

Statement 2 投影定理

设 $D \subset \mathbb{R}^n$ 是非空闭凸集, $y \in \mathbb{R}^n$ 但 $y \notin D$, 则

(1)存在唯一的点 $\bar{x} \in D$, 使得集合 D 到点 y 的距离最小 , 即

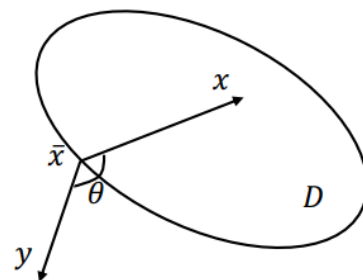
$$\|\bar{x} - y\| = \inf_{x \in D} \|x - y\|$$

(2) $\bar{x} \in D$ 是点 y 到集合 D 的最短距离点的充分必要条件为

$$(x - \bar{x})^T(\bar{x} - y) \geq 0, \forall x \in D$$

或写成

$$\langle x - \bar{x}, y - \bar{x} \rangle \leq 0, \forall x \in D$$



Statement 3 存在超平面严格分离点与凸集

定理5.3 设 $D \subset \mathbf{R}^n$ 为非空闭凸集 , $y \in \mathbf{R}^n$, $y \notin D$, 则存在非零向量 $\alpha \in \mathbf{R}^n$ 和实数 β , 使得

$$\alpha^T x \leq \beta < \alpha^T y, \forall x \in D$$

成立 , 即存在超平面 $H = \{x \in \mathbf{R}^n | \alpha^T x = \beta\}$ 严格分离点 y 与凸集 D 。

Definition 3凸函数

定义5.3 设函数 $f(x)$ 在凸集 D 上有定义 , 如果对任意 $x, y \in D$ 和任意 $\lambda \in [0,1]$, 有

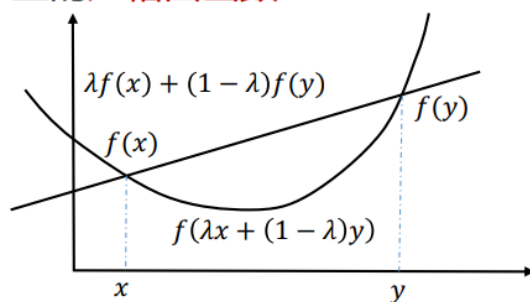
$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$$

则称 $f(x)$ 是凸集 D 上的**凸函数**

如果对任意 $x, y \in D, x \neq y$ 和任意有 $\lambda \in (0,1)$ 有

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) < \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$$

则称 $f(x)$ 是凸集 D 上的**严格凸函数**



凸函数的性质 (类似于凸集)

(1) 如果 f 是定义在凸集 D 上的凸函数, 实数 $\alpha \geq 0$, 则 αf 也是凸集 D 上的凸函数

(2) 如果 f_1, f_2 是定义在凸集 D 上的凸函数, 则 $f_1 + f_2$ 也是凸集 D 上的凸函数

(3) 如果 $f_i(x) (i = 1, \dots, m)$ 是非空凸集 D 上的凸函数, 则 $f(x) = \max_{1 \leq i \leq m} |f_i(x)|$ 也是凸集 D 上的凸函数

(4) 如果 $f_i(x) (i = 1, \dots, m)$ 是非空凸集 D 上的凸函数, 则 $f(x) = \sum_{i=1}^m \alpha_i f_i(x)$ 也是凸集 D 上的凸函数, 其中 $\alpha_i \geq 0 (i = 1, \dots, m)$

Statement 4 设 x^* 是凸规划问题的一个局部最优解, 那么 x^* 也是全局最优解。进一步, 如果目标函数严格凸, 那么 x^* 是唯一全局最优解。

Statement 5 设 $f(x)$ 是定义在非空开凸集 D 的可微函数, 则

$f(x)$ 是 D 上的凸函数 $\iff f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(y - x), \forall x, y \in D$

$f(x)$ 是 D 上的严格凸函数 $\iff f(y) > f(x) + \nabla f(x)^T(y - x), \forall x, y \in D, x \neq y$

Statement 6 设 $f(x)$ 是定义在非空开凸集 D 的二阶可微函数, 则

$f(x)$ 是 D 上的凸函数 $\iff Hesse_f = \nabla^2 f(x)$ 在 D 上半正定, 即

$$\text{对每一个 } x \in D, y^T \nabla^2 f(x) y \geq 0, \forall y \in \mathbb{R}^n$$

如果 $Hesse_f$ 在 D 上正定, 则 $f(x)$ 是 D 上的严格凸函数, 反之不亦然。

最优化问题

一般形式

$$P : \min f(x), x \in \mathbb{R}^n (\text{目标函数})$$

$$s. t. h_i(x) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, m (\text{等式约束})$$

$$h_i(x) \geq 0 (\text{不等式约束})$$

tips: 实际应用中, 将所有目标函数统一成求**最小值的形式**。

Definition 4 可行解

满足等式约束和不等式约束的 x 成为可行解 (也称可行点或容许点)。

Definition 5 可行域

全体可行解构成的集合为可行域 (或称容许集), 记为 D , 即:

$$D = \{x | h_i(x) = 0, i = 1, \dots, m, h_i(x) \geq 0, i = m + 1, \dots, p, x \in \mathbb{R}^n\}$$

若 h_i 为连续函数, 则 D 为闭集。

Definition 6 整体最优解 (严格整体最优解)

若 $x^* \in D, \forall x \in D, f(x^*) \leq f(x)$ 则称 x^* 为最优化问题(P)的整体最优解。

若 $x^* \in D, \forall x \in D \setminus \{x^*\}, f(x^*) < f(x)$ 则称 x^* 为最优化问题(P)的严格整体最优解。

Definition 7 局部最优解 (严格局部最优解)

若 $x^* \in D, \exists N_\epsilon(x^*), \forall x \in D \cap N_\epsilon(x^*), f(x^*) \leq f(x)$ 则称 x^* 为最优化问题(P)的整体最优解。

若 $x^* \in D, \exists N_\epsilon(x^*), \forall x \in D \cap N_\epsilon(x^*) \setminus \{x^*\}, f(x^*) < f(x)$ 则称 x^* 为最优化问题(P)的严格整体最优解。

局部最优解不一定是整体最优解; 求解最优化问题, 就是再求可行域上的整体最优解。一般说来, 整体最优解是很难求出的, 往往只能求出局部最优解。

Definition 8 局部极小点, 全局极小点, 严格局部极小点, 严格全局极小点 (略, 见

PPT5.Page17)

Definition 9 下降方向

定义5.9 设 $f(x)$ 为定义在空间 \mathbf{R}^n 上的连续函数, 点 $\bar{x} \in \mathbf{R}^n$, 若对于方向 $s \in \mathbf{R}^n$ 存在 $\delta > 0$ 使成立

$$f(\bar{x} + \alpha s) < f(\bar{x}), \forall \alpha \in (0, \delta)$$

则称 s 为 $f(x)$ 在 \bar{x} 处的一个下降方向。在点 \bar{x} 处的所有下降方向的全体记为 $D(\bar{x})$ 。

Statement 7 设函数 $f(x)$ 在点 x_0 处连续可微, 如存在非零向量 $s \in \mathbf{R}^n$ 使成立

$$\nabla f(x_0)^T s < 0$$

, 则 s 是 $f(x)$ 在 x_0 处的一个下降方向。

Statement 8~12, 一阶必要条件 二阶必要条件 二阶充分条件 凸最优性定理

定理5.8 (一阶必要条件) 设 $f: D \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^1$ 在开集 D 上连续可微, 若 $x^* \in D$ 是 $\min_{x \in \mathbf{R}^n} f(x)$ 的局部极小点, 则

$$g(x^*) = \nabla f(x^*) = 0$$

定理5.9 (二阶必要条件) 设 $f: D \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^1$ 在开集 D 上二阶连续可微, 若 $x^* \in D$ 是 $\min_{x \in \mathbf{R}^n} f(x)$ 的局部极小点, 则

$$g(x^*) = 0, G(x^*) = \nabla^2 f(x^*) \geq 0$$

定理5.10 (二阶充分条件) 设 $f: D \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^1$ 在开集 D 上二阶连续可微, 则 $x^* \in D$ 是 f 的一个严格局部极小点的充分条件是

$$g(x^*) = 0 \text{ 和 } G(x^*) \text{ 是正定矩阵}$$

定理5.11 (凸最优性定理) 设 $f: D \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^1$ 是凸函数, 且 $f \in C^1$. 则 x^* 是总体极小点的充分必要条件是 $g(x^*) = 0$

迭代法基本格式:

1. 给定初始点 $x^{(0)}$, 令 $k = 0$
2. 如果 $x^{(k)}$ 满足对最优解估计的终止条件, 停止迭代。

3. 确定一个改善 $x^{(k)}$ 的修正量 $s^{(k)}$
4. 得到一个更优的估计 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + s^{(k)}$
5. $k++$, goto(2)

如果一个算法只有当初始点充分接近最优解时，产生的点列才收敛，则这种算法为局部收敛的算法。如果对任意初始点，都收敛，则是具有全局收敛的算法。由于一般情况最优解是未知的，所有只有具有全局收敛的算法才有实用意义。

Definition 9 收敛速度（与方程迭代法收敛速度相似）

定义5.9 设向量序列 $\{x^{(k)}\} \subset \mathbf{R}^n$ 收敛于 x^* ，定义误差序列

$$e_k = x^{(k)} - x^*$$

如果存在正的常数 C 和 r 使成立

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|e_{k+1}\|}{\|e_k\|^r} = C$$

则称序列 $\{x^{(k)}\}$ r 阶收敛于 x^* (以 C 为因子)

□ 当 $r = 1, 0 < C < 1$ 时称为**线性收敛**，这时的误差序列满足

$$\|e_{k+1}\| \leq C \|e_k\|$$

□ 当 $r = 1, C = 0$ 时，称序列 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 x^* ，超线性收敛是一种比线性收敛更快的收敛，在上述收敛率的定义中，所有 $r > 1$ 的收敛都属于**超线性收敛**

黄金分割法

1. 选取初始数据，确定搜索区间 $[a_0, b_0]$ ，和精度要求 $\delta > 0$ 。计算初始点
 $\lambda_0 = a_0 + (1 - 0.618)(b_0 - a_0)$ $\mu_0 = a_0 + 0.618(b_0 - a_0)$ 计算 $\phi(\lambda_0), \phi(\mu_0)$ ，令 $k=0$
2. 比较 $\phi(\lambda_k), \phi(\mu_k)$ ，若 $\phi(\lambda_0) > \phi(\mu_0)$ ，转3，否则转4
3. 若 $b_k - \lambda_k \leq \delta$ ，则停止计算，输出 μ_k ；否则，令

$$a_{k+1} := \lambda_k, b_{k+1} := b_k, \lambda_{k+1} := \mu_k, \phi(\lambda_{k+1}) = \phi(\mu_k), \mu_{k+1} := a_{k+1} + 0.618(b_{k+1} - a_{k+1})$$

计算 $\phi(\mu_{k+1}), k++$ ，转2。

4. 若 $\mu_k - a_k \leq \delta$ ，则停止计算，输出 λ_k ；否则，令

$$a_{k+1} := a_k, b_{k+1} := \mu_k, \mu_{k+1} := \lambda_k, \phi(\mu_{k+1}) = \phi(\lambda_k), \lambda_{k+1} := a_{k+1} + 0.382(b_{k+1} - a_{k+1})$$

计算 $\phi(\lambda_{k+1}), k++$ ，转2。

总结：即每一次取两个黄金分割点，取舍掉较大的一个，形成新的区间，进行新一轮搜索。

二分法

1. 设初始区间 $[a_1, b_1]$ ，第 k 步的搜索区间 $[a_k, b_k]$ ，满足 $\phi'(a_k) \leq 0, \phi'(b_k) \geq 0$
2. 取中点 c_k ，if $\phi'(c_k) < 0$, then $a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = c_k$; else, then $a_{k+1} = c_k, b_{k+1} = b_k$ 。
一直进行2，知道搜索区间长度小于预定的限度为止。

二分法收敛速度为**线性**，收敛比1/2。

$$(b_1 - a_1)(1/2)^n \leq \delta$$