最优化问题解题步骤

1. 建模最优化问题

我们首先需要根据题目的描述对于问题 $(\mathcal{P})$ 进行数学建模。包括问题中提供的任何信息。确定

(1) 我们想要最大化或最小化目标函数，并将其统一转换成最小化问题；

(2) 为目标方程中的变量依照题意添加约束，统一标准化为小于等于约束；

(3) 如果可以，结合图形更加直观。

2. 确定目标函数的定义域 Ω

目标函数的定义域 Ω 的封闭性、有无界性、是否非空 和 凹凸性：必须是一个封闭(closed) 的、有界的(bounded) 非空 (non-empty) 凸区间 (convex interval) （即两端都有端点并包含这些端点的区间，且区间中任意两点的连线上的所有点都属于这个区间）

3. 判断目标函数在定义域 Ω 上的极值情况

- 存在性 (existence)：一阶偏导 (梯度) ∇ 检验，评估目标函数在定义域 Ω 中的一阶偏导，简单判断目标函数的极值情况。例如：

  $$f(x_1,x_2,x_3) \;\Rightarrow\; f(z,z,z) \xrightarrow{z\to\infty} f\to\infty \text{ 无全局最大值,}$$
  $$f(x_1,x_2,x_3) \;\Rightarrow\; f(z,z,z) \xrightarrow{z\to-\infty} f\to-\infty \text{ 无全局最小值}$$

- 唯一性 (unicité)：二阶偏导 (梯度) ∇^2 检验，要求：定义域 Ω 中必须只有一个极值。测试：求目标函数的二阶偏导 ，并在临界数处对其进行评估。如果该值为 <0，则临界数表示严格极大值 (strict maximum)。如果该值为>0，则临界数表示严格极小值 (strict minimum)。

4. 构造拉格朗日乘数法或$\mathcal{KKT}$

下略。

范数

是数学中的一种基本概念。 在泛函分析中，它定义在赋范线性空间中，并满足一定的条件，即 ①非负性；②齐次性；③三角不等式。 它常常被用来度量某个向量空间（或矩阵）中的每个向量的长度或大小。

- l_1范数：

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

- l_2范数：

$$\|x\|_2 = \sqrt{x^T x} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$$

- l_∞范数：

$$\|x\|_\infty = max\{|x_i| : i \in 1, 2, \dots, n\}$$

- l_p范数：

$$\|x\|_p = (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{\frac{1}{p}}, p \in [1, \infty)$$

凸集

凸集 (Convex set)

给定非空集合 $F \subseteq \mathbb{R}^n$，如果 $\forall x, y \in F, \alpha \in [0,1]$ 都有 $\alpha x + (1-\alpha)y \in F$，那么我们就称这个 F 为 $\mathbb{R}^n$ 中的一个凸集，即集合中的任意两点的连线仍然属于该集合。

凸组合 (Convex combination)

$x^1, x^2, \dots, x^k$ 的凸组合：

$$\lambda_1 x^1 + \lambda_2 x^2 + \dots + \lambda_k x^k$$

其中，$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k \geq 0, \sum_{i=1}^{k} \lambda_i = 1$

黑塞矩阵 (Hessain)

在之前的学习中我们已经知道，一阶导数，也就是目标函数的梯度，反映了函数值随着自变量 x 变化的速率情况。所谓二阶导数，就是在一阶导数的基础上再求导数，反映了一阶导数的变化情况。

例如对于二次型函数 $f(x) = x^2$，它的一阶导数就是 $\frac{df(x)}{dx} = 2x$，二阶导数为 $\frac{d^2f(x)}{dx^2} = 2$

将其推广，对于一般的多元函数 $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$，对其求一阶偏导数 (partial)，一阶偏导为向量称作梯度 (gradient):

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

我们再对一阶导数 $\frac{\partial f(x)}{\partial x}$ 对于 x_i 求偏导，我们可以得到

$$\nabla(\frac{\partial f}{\partial x_i}) = \nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1}\frac{\partial f}{\partial x_1} & \frac{\partial}{\partial x_2}\frac{\partial f}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial}{\partial x_n}\frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_1}\frac{\partial f}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_2}\frac{\partial f}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial}{\partial x_n}\frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_1}\frac{\partial f}{\partial x_n} & \frac{\partial}{\partial x_2}\frac{\partial f}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial}{\partial x_n}\frac{\partial f}{\partial x_n} \end{bmatrix} \leftarrow Hessian\ Matrix$$

黑塞矩阵是对梯度再求一次偏导，所以它是 $n \times n$ 的方阵，满足对称性 $\mathcal{H}_{ij} = \mathcal{H}_{ji}$

> 例：对于 $f(x, y) = 5x + 8y + xy - x^2 - 2y^2$

$$\nabla f(x,y)=\begin{bmatrix}\frac{\partial f}{\partial x}\\ \frac{\partial f}{\partial y}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5-2x+y\\ 8+x-4y\end{bmatrix}$$
$$\mathcal{H}(x)=\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & -4\end{bmatrix}$$

对于二次函数，黑塞矩阵为常数矩阵。

黑塞矩阵的意义

如果一个函数的黑塞矩阵是正定 (positive definite) 的，即特征值大于 0，也即目标函数在所有可行方向 d 上的二阶导数都大于 0。我们就可以得出 $f(x)$ 是<u>一个严格的凸函数</u>，其<u>极值就是极小值</u>，而且也是<u>全局的最小值</u>。

矩阵的正定

正定矩阵首先是一个对称阵。以下我们介绍一种判断矩阵是否正定的方法，Sylvester's Criterion：

Sylvester's Criterion

各阶行列式（顺序主子式）都大于0 $\Rightarrow$ 矩阵正定 $\succ 0$

$$\begin{bmatrix}2 & -1 & 0\\ -1 & 2 & -1\\ 0 & -1 & 2\end{bmatrix}\quad\Rightarrow\quad |2|>0\quad \begin{vmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{vmatrix}>0\quad \begin{vmatrix}2 & -1 & 0\\ -1 & 2 & -1\\ 0 & -1 & 2\end{vmatrix}>0$$

无约束优化问题的最优性条件

无约束优化问题： $\min f(x)$

最优解的定义：

- 局部最优解：对于一个解 $\bar{x}$，在 $\bar{x}$ 的临域空间 $N_s(\bar{x})$ 内 $f(\bar{x})$ 的值是最大或最小的。

$$\forall x\in N_s(\bar{x}), f(x)\geq f(\bar{x}) \text{ 或 } f(x)\leq f(\bar{x})$$

- 全局最优解：对于一个解 $\bar{x}$，在任意n维空间 $\mathbb{R}^n$ 内 $f(\bar{x})$ 的值是最大或最小的。

$$\forall x\in \mathbb{R}^n, f(x)\geq f(\bar{x}) \text{ 或 } f(x)\leq f(\bar{x})$$

- 严格局部最优解：对于一个解 $\bar{x}$，在 $\bar{x}$ 的临域空间 $N_s(\bar{x})$ 内 $f(\bar{x})$ 的值是严格最大或最小的（不包含等于情况）。

$$\forall x\in N_s(\bar{x}), f(x)> f(\bar{x}) \text{ 或 } f(x)< f(\bar{x})$$

- 严格全局最优解：对于一个解 $\bar{x}$，在任意n维空间 $\mathbb{R}^n$ 内 $f(\bar{x})$ 的值是严格最大或最小的（不包含等于情况）。

$$\forall x\in \mathbb{R}^n, f(x)> f(\bar{x}) \text{ 或 } f(x)< f(\bar{x})$$

最优性条件

考虑无约束优化问题： $\min f(x)$

- 必要条件：若 x^* 是最优解，则 x^* 有如下性质：

$$
\begin{aligned}
&(1) \quad \nabla f(x^*) = 0 \qquad\qquad\qquad \text{目标函数在 } x^* \text{的位置时梯度为零} \\
&(2) \quad \nabla^2 f(x^*) \succeq 0 \qquad \text{目标函数在 } x^* \text{的位置时黑塞矩阵是半正定的}
\end{aligned}
$$

- 充分条件：

$$
\text{若} \nabla f(x^*) = 0, \nabla^2 f(x^*) \succ 0 \quad \Rightarrow \quad \text{则} x^* \text{是严格最优的}
$$

无约束优化：线搜索 和 信赖域

考虑无约束优化问题： $\min f(x)$

迭代下降算法的描述：

给定一个初始点 x_0 ，我们可以判断 x_0 是否是我们需要找的点，如果不是，我们要产生点列 $\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ ，并且满足 $f(x_{k+1}) < f(x)$ “下一个点的函数值比当前点的函数值小”。我们有两种策略：线搜索 (Line search) 和 信赖域 (Trust region)

线搜索方法

算法描述

1. 给定初始点 x_0
2. 判断 x_0 是否满足【终止条件】；是，则终止
3. 当前点为 x_k，首先找到【下降方向 d_k】（从这个点出发，有一段步长的距离，目标函数值会减小的方向）
4. 确定【步长 $\alpha_k > 0$ 】，使得 $f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x)$
5. 我们就得到了下一个点 $x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k$；转第 2 步

- 终止条件：$\|\nabla f(x_k)\|_2 \leq \mathcal{E}$，其中 $\mathcal{E}$ 是一个很小的正整数，意味着当梯度趋近于 0
- 下降方向 d_k 的选择：最速下降、共轭梯度等
- 步长 α_k 的选择：我们令 $\phi(\alpha) := f(x_k + \alpha d_k)$，步长 $\alpha_k = \min \phi(\alpha), \alpha \geq 0$
- 算法结束后会给我们一个点列 $\{x_k\}$，我们需要关心点列的收敛性和收敛速度

信赖域方法

1. 当前点为 x_k，首先决定“活动范围 Δ” $\|d\|_2 \leq \Delta$
2. 再决定“活动方向”

无约束优化：最速下降

收敛速度

设当前点列 $\{x_k\}$ 收敛到 x^*，若存在极限

$$\lim_{k\to\infty}\frac{\|x_{k+1}-x^*\|_2}{\|x_k-x^*\|_2}=\beta$$

- 当 $0<\beta<1$ 时，则称点列 $\{x_k\}$ 为线性收敛
- 当 $\beta=0$ 时，则称点列 $\{x_k\}$ 为**超线性收敛**

若存在某个 $p\geq 1$，有

$$\lim_{k\to\infty}\frac{\|x_{k+1}-x^*\|_2}{\|x_k-x^*\|_2^p}=\beta<+\infty$$

则称点列 $\{x_k\}$ 为**p阶收敛**

- 当 $p>1$ 时，p阶收敛必为超线性收敛

最速下降法

也叫做梯度下降法。【基本思想】是选择 x_k 处的负梯度方向作为搜索方向，即 $d_k=-\nabla f(x_k)$

- 优点：简单直观；收敛；搜索方向只需计算 $-\nabla f(x_k)$
- 缺点：收敛速度慢（线性搜索）；Zigzag现象（路径是"之"字形）；不具备"在有限步内求得凸二次函数最优解"的特性

约束优化：$\mathcal{KKT}$ 条件

一阶必要条件：最优解 $\rightarrow$ $\mathcal{KKT}$点

假设 x^* 是问题 $\mathcal{P}$ 的局部最优解，且 x^* 某处的约束规范 (constraint qualification) 成立，则存在 λ，μ 使得

$$\min_{x\in\mathbb{R}^2} f(x)$$
$$s.t.\quad \forall i\in\{1,2,\dots,l\}:h_i(x)=0\quad 且\quad \forall j\in\{1,2,\dots,m\}:g_j(x)\leq 0$$
$$可行集S(\mathcal{E})=\{x|满足\ s.t.\}$$

1. $$\nabla f(x^*)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i\nabla g_i(x^*)+\sum_{i=1}^{l}\mu_i\nabla h_i(x^*)=0$$
2. $\forall i\in\{1,2,\dots,m\}:\lambda_i\geq 0$
3. $\forall i\in\{1,2,\dots,m\}:g_i(x^*)\leq 0$
4. $\forall i\in\{1,2,\dots,m\}:h_i(x^*)=0$
5. $\forall i\in\{1,2,\dots,m\}:\lambda_i g_i(x^*)=0$

二阶充分条件：$\mathcal{KKT}$点 $\to$ 最优解

假设 x^* 满足上述的 $\mathcal{KKT}$ 条件，我们定义一个函数 $\mathcal{L}(x) = f(x) + \sum \mu_i h_i(x) + \sum \lambda_i g_i(x))$，可知：

1. $\nabla_x \mathcal{L}(x^*) = 0 \qquad \mathcal{KKT}$条件中的第 1 条
2. $\mathcal{L}(x^*) = f(x^*) + \sum \mu_i h_i(x^*) + \sum \lambda_i g_i(x^*)) = f(x^*) + 0 + 0 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L}(x^*) = f(x^*)$
3. $\forall x \in S(\mathcal{E}),\ \mathcal{L}(x) \le f(x)$

有以下结论：

- 由 2, 3 可知，若 x^* 是 $\mathcal{L}(x)$ 的最优解，则x^* 也是 $\mathcal{P}$ 的最优解：$f(x^*) = \mathcal{L}(x^*) \le \mathcal{L}(x) \le f(x)$
- 若 $\nabla_{xx}\mathcal{L}(x^*) \succeq 0,\ \forall x \in S(\mathcal{E})$，则 x^* 是 $\mathcal{P}$ 的<u>全局最优解</u>
- 若 $\nabla_{xx}\mathcal{L}(x^*) \succeq 0,\ \forall x \in \{S(\mathcal{E}) \cap_{\text{临域}} N_S(x*)\}$，则 x^* 是 $\mathcal{P}$ 的<u>局部最优解</u>
- 若 $\nabla_{xx}\mathcal{L}(x^*) \succ 0$，则 x^* 是 $\mathcal{P}$ 的<u>严格局部最优解</u>

约束优化：对偶理论

考虑如下一般形式的约束优化问题：

$$(\mathcal{P}):\ \min_{x\in\mathbb{R}^2} f(x)$$

$$s.t. \quad \begin{cases} h_i(x) = 0,\ \forall i \in \{1,2,\dots,l\} \\ g_j(x) \le 0,\ \forall j \in \{1,2,\dots,m\} \\ x \in X \end{cases}$$

$$\text{可行集} S(\mathcal{E}) = \{x \in X | \text{满足 } s.t.\}$$

其中 X 是"集合约束"，如果：

1. $X = \mathbb{R}^n$ 所研究的问题 $\mathcal{P}$ 就是在 **n 维实数域上的连续优化问题**，就可以运用以上知识
2. $X = \mathbb{Z}_+^n$ 所研究的问题 $\mathcal{P}$ 就是在 **n 维整数（或非负整数）域上的连续优化问题**，就可以运用以上知识
3. $X = \{0,1\}^n$ 所研究的问题 $\mathcal{P}$ 就是在 **n 维 0-1 集合上的离散整数优化问题**

对偶问题的意义

$$\text{原问题 } (\mathcal{P}) \quad \xrightarrow{\text{构建}} \quad \text{对偶问题 } (\mathcal{D})$$

1. 如果原问题 $(\mathcal{P})$ 是非凸问题，我们很难求解这一类 `NP-hard` 问题，我们就可以构造一个和原问题 $(\mathcal{P})$ 的关系紧密又简单的对偶问题 $(\mathcal{D})$ 来求解；
2. 在线性规划问题中的对偶问题；
3. 鲁棒优化，锥优化

拉格朗日对偶问题

$$
\begin{aligned}
(\mathcal{P}):\ &\min_{x\in\mathbb{R}^2} f(x)\\
s.t.\quad &\begin{cases} h_i(x)=0,\ \forall i\in\{1,2,\dots,l\}\\ g_j(x)\le 0,\ \forall j\in\{1,2,\dots,m\}\\ x\in X\end{cases}
\end{aligned}
$$

$$
\text{可行集} S(\mathcal{E})=\{x\in X|\text{满足 } s.t.\}
$$

我们引入拉格朗日函数：

$$
\mathcal{L}(x,\lambda,\mu)=f(x)+\sum_{i=1}^{l}\mu_i h_i(x)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i g_i(x))
$$

此时我们对拉格朗日函数 $\mathcal{L}$ 求最小值，得到拉格朗日对偶函数 (dual function)：

$$
\begin{aligned}
d(\lambda,\mu)=\min_{x\in X}(\mathcal{L}(x,\lambda,\mu))&=\min_{x\in X}\{f(x)+\sum_{i=1}^{l}\mu_i h_i(x)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i g_i(x)\}\\
&\le \min_{x\in S(\mathcal{E})}\{f(x)+\sum_{i=1}^{l}\mu_i h_i(x)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i g_i(x)\}\\
&\le \min_{x\in S(\mathcal{E})}\{f(x)\}
\end{aligned}
$$

- 对于 $\forall(\lambda,\mu),\lambda\ge 0$ 必有 $d(\lambda,\mu)\le v(\mathcal{P})$，即 $d(\lambda,\mu)$ 是 $v(\mathcal{P})$ 的下界，所以我们要找出 $d(\lambda,\mu)$ 的【最大值】

此时我们就可以给出拉格朗日问题的对偶问题 $(\mathcal{D})$：

$$
\begin{aligned}
(\mathcal{D}):\ &\max d(\lambda,\mu)\\
s.t.\quad &\lambda_i\ge 0,\ \forall i\in\{1,2,\dots,m\}
\end{aligned}
$$

写成以下形式：

$$
(\mathcal{D}):\ \max_{\lambda\ge 0}\quad \min_{x\in X}(\mathcal{L}(x,\lambda,\mu))\quad \xrightarrow{\text{交换}}\quad \min_{x\in X}\quad \max_{\lambda\ge 0}(\mathcal{L}(x,\lambda,\mu))
$$

经过推导，问题 $(\mathcal{D})$ 可转化成原问题 $(\mathcal{P})$：

$$
\begin{aligned}
(\mathcal{P}):\ &\min_{x\in\mathbb{R}^2} f(x)\\
s.t.\quad &\begin{cases} h_i(x)=0,\ \forall i\in\{1,2,\dots,l\}\\ g_j(x)\le 0,\ \forall j\in\{1,2,\dots,m\}\\ x\in X\end{cases}
\end{aligned}
$$

弱对偶定理

在之前拉格朗日对偶问题中，“对于 $\forall(\lambda,\mu),\lambda\ge 0$ 必有 $d(\lambda,\mu)\le v(\mathcal{P})$，即 $d(\lambda,\mu)$ 是 $v(\mathcal{P})$ 的下界，所以我们要找出 $d(\lambda,\mu)$ 的最大值”。我们可以推导到一般：

- 设 $v(\mathcal{P})$ 是原问题 $(\mathcal{P})$ 的最优值，$v(\mathcal{D})$ 是对偶问题 $(\mathcal{D})$ 的最优值，则 $v(\mathcal{D})\le v(\mathcal{P})$

推论：假设 $\bar{x}\in S(\mathcal{E})$，$(\bar{\lambda},\bar{\mu}),\bar{\lambda}\ge 0$ 且 $d(\bar{\lambda},\bar{\mu})=f(\bar{x})$，则 $v(\mathcal{P})=v(\mathcal{D})$ 且 $\bar{x},(\bar{\lambda},\bar{\mu})$ 是 $v(\mathcal{P})$ 和 $v(\mathcal{D})$ 的最优解