凸优化

Dai HBG (1800010660@pku.edu.cn)

2020 年 12 月 5 日

目录

1 凸集和凸函数

1.1 基本定义

1.1.1 凸集

首先给出几种常见集合的定义：

定义 1.1.1 集合 D 称为**仿射集** (affine set) 当且仅当过 D 中任意两个不同点的直线都在 D 中, 即 $\forall x_1, x_2 \in D, x_1 \neq x_2$, 都有 $\theta x_1 + (1-\theta)x_2 \in D, \forall \theta \in \mathbb{R}$. 线性方程的解集 $\{x|\boldsymbol{A}x = b\}$ 是仿射集.

定义 1.1.2 集合 D 称为**凸集** (convex set) 当且仅当过 D 中任意两个不同点的线段都在 D 中, 即 $\forall x_1, x_2 \in D, x_1 \neq x_2$, 都有 $\theta x_1 + (1-\theta)x_2 \in D, \forall \theta \in [0,1]$. 点 $x_1, \cdots, x_k$ 的一个**凸组合** (convex combination) 指的是一切形如

$$x = \sum_{i=1}^{k} \theta_i x_i, \quad \sum_{i=1}^{k} \theta_i = 1, \quad \theta_i \geq 0,$$

的点. 可以认为凸集和仿射集的区别就在于这个 θ 的取值范围. 集合 S 中所有点的所有凸组合构成的集合 D 称为集合 S 的**凸包** (convex hull).

定义 1.1.3 点 x_1, x_2 的一个**锥 (非负) 组合** (conic (nonnegative) combination) 指的是形如

$$x = \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2, \quad \theta_i \geq 0$$

的点. 集合 D 称为**凸锥** (convex cone) 当且仅当 D 包含其中任意点的锥组合. n 阶半正定矩阵的集合我们记为 $\mathbb{S}_+^n$, 这是一个凸锥, 称为**半正定锥** (positive semidefinite cone). 同理以 $\mathbb{S}_{++}^n$ 记 n 阶正定矩阵的集合, 这也是一个凸锥. 一个**范数锥** (norm cone) 是集合 $C = \{(x,t)||x|| \leq t\}$, 其中 $||\cdot||$ 是一个范数.

定义 1.1.4 定义一个凸锥 K 为**真锥** (proper cone), 如果 K 是凸锥, 且有非空内部, 并且不包含内部. 由真锥 K 定义一个广义不等号 $\succ_K$, 使得 $x \succ_K y$ 当且仅当 $x - y \in K$.

定义一个锥 K 的**对偶锥** (dual cone)K^* 为

$$K^* = \{y|y^T x \geq 0, \forall x \in K\}.$$

命题 1.1.4 *若 $K = \mathbb{R}_+^n$, 则 $K^* = \mathbb{R}_+^n$. 若 $K = \mathbb{S}_+^n$, 则 $K^* = \mathbb{S}_+^n$, 这里定义的矩阵内积为 $\langle X, Y \rangle = \mathrm{tr}(XY^T)$.*

证明 第一部分的证明是显然的. 对于第二部分的充分性证明, 考虑任意 X 的特征值分解, 有 $X = \sum_{i=1}^n \lambda_i q_i q_i^T$, 然后利用矩阵的迹的性质, 可知

$$\mathrm{tr}(XY^T) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \mathrm{tr}(q_i^T Y^T q_i),$$

从而当且仅当 $Y \in \mathbb{S}_+^n$, 能保证上式对任意 $\{q_i\}$ 非负, 从而结论成立. □

对偶锥是自身的锥叫做**自对偶锥** (self dual cone).

定义 1.1.5 形如 $D = \{x|a^T x = b\}(a \neq 0)$ 的集合称为**超平面** (hyperplane), 形如 $D = \{x|a^T x \leq b\}(a \neq 0)$ 的集合称为**半平面** (halfplane). 超平面是凸集, 也是仿射集, 半平面是凸集.

定义 1.1.6 由有限多个半平面的超平面的交组成的集合称为**多面体** (polyhedra).

定义 1.1.7 一个**椭球** (ellipsoid) 可以表示为

$$\{x|(x-x_c)^T P^{-1}(x-x_c)\},$$

其中 P 是正定矩阵.

定义 1.1.8 一个**范数锥** (norm cone) 可以表示为

$$\{(x,t)|||x|| \leq t\},$$

其中 $||\cdot||$ 是一个范数. 当范数取为 2 范数时的锥称为**二次锥**.

定义 1.1.9 函数 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 称为凸函数如果 f **的定义域是凸的** [1], 并且不等式

$$f(\theta x+(1-\theta)y)\le\theta f(x)+(1-\theta)f(y)$$

对于一切 $x,y\in\mathrm{dom}f, 0\le\theta\le 1$ 成立. 如果上述不等式对于 $0<\theta<1$ 严格成立, 则称 f 是**严格凸的** (strictly convex).

1.2 集合保凸运算

命题 1.2.1 *透视函数 (perspective function)$P:\mathbb{R}^{n+1}\to\mathbb{R}^n$:*

$$P(x,t)=\frac{x}{t},\quad \mathrm{dom}P=\{(x,t),t>0\}$$

将凸集映为凸集, 且凸集的原像也为凸集.

证明 对任意 $(x_1,t_1),(x_2,t_2),\theta$, 我们希望找到一个 $k\in[0,1]$ 满足

$$\theta\frac{x_1}{t_1}+(1-\theta)\frac{x_2}{t_2}=\frac{kx_1+(1-k)x_2}{kt_1+(1-k)t_2},$$

可以解得

$$\theta=\frac{kt_1}{kt_1+(1-k)t_2}\in[0,1],$$

易知可以反解得到 k, 从而命题得证.

命题 1.2.2 *线性分式函数 (linear-fractional function)$f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^m$:*

$$f(x)=\frac{\boldsymbol{A}x+b}{c^Tx+d},\quad \mathrm{dom}P=\{x|c^Tx+d>0\}$$

将凸集映为凸集, 且凸集的原像也为凸集.

证明 可知 f 是仿射函数

$$x\to[\boldsymbol{A}x+b,c^Tx+d]$$

和透视函数的复合, 从而由命题 1.2.1 可知得证. □

命题 1.2.3 *凸集在仿射变换下的像以及原像都是凸集.*

双曲锥 (hyperbolic cone)$\{x|x^TPx\le(c^Tx)^2,c^Tx\ge 0\}$ 是凸集, 其中 $P\in\mathbb{S}^n_+$. 这是因为可以将 P 表示为 $P=Z^2$,Z 的特征值非负, 从而双曲锥可以表示为 $\{x|Z^Tx\le c^Tx\}$, 由命题 1.2.3 可知成立.

分离超平面的存在性证明, 一种方法是若两个凸集是不交的, 则取距离最小的两个点, 前提是闭集.

1.3 凸函数判定

定义 1.3.1 函数 f 称为**下半连续**, 如果满足

$$\liminf_{y\to x}f(y)\ge f(x).$$

定义 1.3.2 称函数 f 为**闭函数**, 当且仅当 $\mathrm{epi}f=\{(x,t)|f(x)\le t\}$ 是闭集.

命题 1.3.3 *函数 f 是凸函数当且仅当 $\mathrm{epi}f$ 是凸集.*

定义 1.3.4 映射 $F:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ 是**单调的** (monotone), 如果

$$\langle F(x)-F(y),x-y\rangle\ge 0,\quad x,y\in\mathbb{R}^n.$$

命题 1.3.5 *若函数 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 是可微的, 则其是凸函数当且仅当 $\nabla f(x)$ 是单调的.*

[1] 如果需要证明某函数是凸函数, 必须首先证明定义域是凸集. 在证明凸函数的一阶条件的时候, 也需要用到定义域是凸集的条件, 否则 x 和 y 之间的点不一定在定义域中

证明 必要性考虑

$$f(x) \geq f(y) + \langle \nabla f(y), x-y \rangle$$
$$f(y) \geq f(x) + \langle \nabla f(x), y-x \rangle$$

两式相加即可.

对于充分性, 则有

$$f(y) - f(x) = \langle \nabla f(x+t(y-x)), y-x \rangle = \langle \nabla f(x+t(y-x)) - f(x) + f(x), y-x \rangle \geq \langle \nabla f(x), y-x \rangle.$$

□

命题 1.3.6 一族 x 关于参变量 y 的凸函数的上确界是关于 x 的凸函数 [2]. 例如

$$f(X) = \max_{||y||=1} y^T X y$$

关于 X 是凸函数, 从而可知 X 的最大特征值函数是凸函数.

命题 1.3.7 如果函数 f 关于自变量 (x, y) 是联合凸的, 且 C 是凸集, 则

$$g(x) = \inf_{y \in C} f(x, y)$$

关于自变量 x 是凸函数.

证明 首先验证 g 的定义域是凸集, 于是对任意 $\varepsilon > 0$, 存在 $y_1, y_2 \in C$ 满足 $f(x_1, y_i) \leq g(x_i) + \varepsilon, i = 1, 2$, 则

$$\begin{aligned} g(\theta x_1 + (1-\theta)x_2) &= \inf_{y \in C} f(\theta x_1 + (1-\theta)x_2, y) \\ &\leq f(\theta x_1 + (1-\theta)x_2, \theta y_1 + (1-\theta)y_2) \\ &\leq \theta g(x_1) + (1-\theta)g(x_2) + \varepsilon, \end{aligned}$$

由 ε 的任意性可知 g 是凸函数 □

定义 1.3.8 (共轭函数) 称

$$f^*(y) = \sup_{x \in \mathrm{dom} f} (y^T x - f(x))$$

为函数 f 的共轭函数, 由命题 1.3.7 可知这是关于 y 的凸函数.

1.3.1 Fenchel Inequality

称

$$f(x) + f^*(y) \geq y^T x$$

为 Fenchel Inequality.

1.3.2 严格凸的二次函数

考虑

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x,$$

对函数

$$y^T x - \frac{1}{2} x^T Q x$$

求导得到

$$y - Qx.$$

从而

$$f^*(y) = \frac{1}{2} y^T Q^{-1} y.$$

由 Fenchel Inequality 得到

$$y^T x \leq \frac{1}{2} y^T Q^{-1} y + \frac{1}{2} x^T Q x$$

[2]证明可以直接用定义, 也可以利用凸函数等价于上方图是凸集这个性质, 然后取上确界相当于上方图的交集.

1.3.3 Legendre 变换

可微函数 f 的共轭函数称为函数 f 的 Legendre 变换.

1.4 相对熵

定义两个分量为正的向量 u, v 的相对熵为

$$\sum_{k=1}^{n} u_i \ln \frac{u_i}{v_i}$$

1.5 Kullback-Leibler 散度

两个分量为正的向量 u, v 的 KL 散度定义为

$$D_{kl}(u,v) = \sum_{k=1}^{n} \left(u_i \ln \frac{u_i}{v_i} - u_i + v_i \right)$$

这可以用来度量两个概率分布的偏差, 此时 KL 散度等价于相对熵.

2 凸优化问题

考虑优化问题

$$\begin{aligned} \min_{x} \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & x \in C, \end{aligned}$$

如果 f 是凸函数,C 是凸集, 这就是一个**凸优化问题**. 凸优化问题的标准形式写为

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s.t.} \quad & f_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \cdots, m \\ & h_i(x) = 0, \quad i = 1, \cdots, p, \end{aligned} \tag{2.0.1}$$

$f_0(x)$ 称为**目标函数** (objective function), 最小化目标函数的值 x^* 称为**最优点** (optimal point), 对应的函数值称为**最优值** (optimum).

2.1 可微凸优化问题最优性判定

命题 2.1.1 对于凸可微函数 $f_0(x)$, 则 x 是最优点当且仅当 x 是可行的, 并且对于任意可行点 y, 有

$$\nabla f_0(x)^T (y - x) \geq 0.$$

证明 必要性由 $f(y) \geq f(x) + \nabla f_0(x)^T (y - x)$ 可得. 对于充分性, 使用反证法, 考虑函数 $g(t) = f(ty + (1-t)x)$, 则有 $g'(0) = \nabla f_0(x)^T (y - x)$, 于是易得矛盾. □

命题 2.1.2 对于等式约束优化问题

$$\min \quad f_0(x) \quad \text{s.t.} \quad Ax = b,$$

x 是最优点当且仅当存在 v 满足

$$x \in \mathrm{dom} f_0, \quad Ax = b, \quad \nabla f_0(x) + A^T v = 0.$$

证明 必要性考虑

$$\nabla f_0(x)^T (y - x) = -v^T A (y - x) = 0,$$

从而由命题 2.1.1 可知成立. 对于充分性, 可知对于任意 A 的零空间中的向量 $\eta = y - x$ 都有 $\nabla f_0(x)^T \eta \geq 0$, 从而 $\nabla f_0(x)^T \eta = 0$, 于是 $\nabla f_0(x)^T$ 必须能表示为 A 的行向量的线性组合, 从而结论成立. □

2.2 拟凸优化问题

考虑优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s.t.} \quad & f_i(x) \le 0, \quad i = 1, \cdots, m \\ & Ax = b \end{aligned} \tag{2.2.2}$$

其中 $f_0 : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 是拟凸函数, $f_i, i = 1, \cdots, m$ 是凸函数, 则优化问题 (2.2.2) 是**拟凸优化问题**, 记其最优值为 p^*.

由于 f_0 是拟凸函数, 从而存在函数族 $\{\phi_t\}$, 满足对于给定的 t, $\phi_t(x)$ 关于 x 是凸函数, 且

$$f_0 \le t \iff \phi_t(x) \le 0.$$

于是我们可以解凸优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & 0 \\ \text{s.t.} \quad & \phi_t(x) \le 0, \quad f_i(x) \le 0, \quad i = 1, \cdots, m \\ & Ax = b \end{aligned}$$

若其可行, 则 $t \ge p^*$. 于是可据此设计二分法解决拟凸优化问题.

2.3 线性规划

线性规划问题的标准形式是

$$\begin{aligned} \min \quad & c^T x + d \\ \text{s.t.} \quad & Gx \le h \\ & Ax = b \end{aligned}$$

问题的可行域是一个多面体 (polyhedron). 许多问题可以化为线性规划的形式.

分段线性最小化 (piecewise-linear minimization)

$$\min \max_{i=1,\cdots,m} (a_i^x + b_i)$$

等价于线性规划问题

$$\begin{aligned} \min \quad & t \\ \text{s.t.} \quad & a_i^T + b_i \le t, \quad i = 1, \cdots, m. \end{aligned}$$

多面体的切比雪夫中心

多面体

$$\mathcal{P} = \{x | a_i^T x \le b, i = 1, \cdots, m\}$$

的切比雪夫中心是其最大的内切球 (inscribed ball)

$$\mathcal{B} = \{x_c + u | ||u||_2 \le r\}$$

的球心. 求解 x_c, r 等价于求解线性规划问题

$$\begin{aligned} \max \quad & r \\ \text{s.t.} \quad & a_i^T x_c + r||a_i||_2 \le b_i, \quad i = 1, \cdots, m. \end{aligned}$$

线性分式规划化为线性规划

对于线性分式规划问题

$$\begin{aligned} \min_x \quad & \frac{c^T x + d}{e^T + f} \\ \text{s.t.} \quad & Gx \le h, \quad Ax = b \end{aligned}$$

其等价于线性规划

$$\begin{aligned} \min_y \quad & c^T y + dz \\ \text{s.t.} \quad & Gy \le hz, \quad Ay = bz, \quad e^T y + fz = 1, \quad z \ge 0 \end{aligned}$$

原问题推出线性规划问题是显然的, 需要处理的是线性规划问题最优解对应的 $z^* = 0$ 的情况此时必有 $c^T y^*$ 小于原问题的最优值, 于是考虑 $x^* + ky^*, k > 0$, 则显然 $x^* + ky^*$ 也在原问题的可行域内, 从而令 $k \to +\infty$ 可得一个更小的值, 也就是原问题的最优值应该等于线性规划问题的最优值, 只不过此时原问题没有最优解.

2.4 二次优化问题

二次规划问题 (Quadratic program, QP) 可以表述为

$$\begin{aligned} \min_x \quad & \frac{1}{2} x^T P x + q^T x + r \\ \text{s.t.} \quad & Gx \preceq h \\ & Ax = b \end{aligned} \tag{2.4.3}$$

的形式, 其中 $P \in \mathbb{S}_+^n$.

如果不等式约束也是凸二次型, 则成为所谓的**二次约束二次规划** (Quadratically constrained quadratic program, QCQP), 可以写为

$$\begin{aligned} \min_x \quad & \frac{1}{2} x^T P_0 x + q_0^T x + r_0 \\ \text{s.t.} \quad & \frac{1}{2} x^T P_i x + q_i^T x + r_i \le 0, \quad i = 1, \cdots, m \\ & Ax = b \end{aligned}$$

其中 $P_i \in \mathbb{S}_+^n, i = 0, \cdots, m$.

二次锥规划 (Second-order cone programming, SOCP)

二次锥规划是优化问题

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f^T x \\ \text{s.t.} \quad & ||A_i x + b_i||_2 \le c_i^T + d_i, \quad i = 1, \cdots, m \\ & Fx = g \end{aligned}$$

其中的不等式约束称为**二次锥约束**.

实际上广义的锥规划可以写为

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f^T x \\ \text{s.t.} \quad & Fx + g \preceq_K 0 \\ & Ax = b \end{aligned}$$

二次锥规划不过是使得 $(A_i x + b_i, c_i^T x + d_i)$ 属于 $\mathbb{R}^{n_i+1}$ 中的锥. 广义的锥规划是带有广义不等式约束的凸优化问题的特例. 带有广义不等式约束的凸优化问题可以写为

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f_0(x) \\ \text{s.t.} \quad & f_i(x) \preceq_{K_i} 0 \\ & Ax = b \end{aligned}$$

二次规划化为二次锥规划

对于二次规划问题 (2.4.3), 其等价于二次锥规划问题

$$\begin{aligned}\min\quad & u_0\\ \text{s.t.}\quad & \bar{u}=Q^{1/2}x+\frac{1}{2}P^{-1/2}p\\ & Gx\preceq h\\ & Ax=b\\ & ||\bar{u}||_2\leq u_0\end{aligned}$$

二次约束化为二次锥

注意到 $q(x)=x^TB^TBx+a^Tx+\beta\leq 0$ 等价于

$$||Bx||_2^2+\left(\frac{a^Tx+\beta+1}{2}\right)^2\leq\left(\frac{1-a^Tx-\beta}{2}\right)^2,$$

从而可以表示为一个二次锥约束.

旋转二次锥 (rotated cone)

旋转二次锥具有形式 $||\bar{x}||_2^2\leq uv$, 这里 $u,v\geq 0$. 一个例子是最小化调和平均

$$\min\quad\sum_{i=1}^n\frac{1}{a_i^T+b_i}\qquad a_i^T+b_i>0,$$

其等价于旋转二次锥规划

$$\begin{aligned}\min\quad & \sum_{i=1}^n u_i\\ \text{s.t.}\quad & v_i=a_i^T+b_i,\quad 1\leq u_iv_i,\quad u_i\geq 0\end{aligned}$$

实际上可以将二次旋转锥化为二次锥, 这是因为 $w^Tw\leq uv$ 等价于 $4w^Tw+(u-v)^2\leq(u+v)^2$, 这就是一个二次锥.

幂次锥 (power cone)

对于 $m<n$ 且 $\sum_{i=1}^m\alpha_i=1$, 对应的幂次锥具有形式

$$P_n^{\alpha_1,\cdots,\alpha_m}=\left\{x\in\mathbb{R}^n|\prod_{i=1}^m x_i^{\alpha_i}\geq\sqrt{\sum_{i=m+1}^n x_i^2},\quad x_1,\cdots,x_m\geq 0\right\}.$$

对于 $p>1$, 则 $t\geq|x|^p$ 等价于 $(t,1,x)\in P_3^{1/p,1-1/p}$.

对于 $0<p<1$, 则 $t\leq|x|^p$ 等价于 $(x,1,t)\in P_3^{p,1-p}$.

对于 $p<0$, 则 $t\geq|x|^p$ 等价于 $(t,x,1)\in P_3^{1/(1-p),-p/(1-p)}$.

指数锥 (exponential cone)

指数锥具有形式

$$K=\left\{(x_1,x_2,x_3)|x_1\geq e^{x_3/x_2},x_2>0\right\}\cup\{(x_1,0,x_3)|x_1\geq 0,x_3\leq 0\}.$$

2.5 半定规划

定义

$$\mathcal{A}(X)=(\langle A_1,X\rangle,\cdots,\langle A_m,X\rangle)^T,\quad X\in\mathcal{S}^n,$$

则半定规划 (semidefinite program, SDP) 的标准形式是

$$\begin{aligned}\min\quad & \langle C,X\rangle\\ \text{s.t.}\quad & \mathcal{A}(X)=b,\quad X\succeq 0.\end{aligned}$$

二次锥规划化为半定规划

对于二次锥规划问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f^T x \\ \text{s.t.} \quad & ||A_i x + b_i||_2 \le c^T x + d_i, \quad i = 1, \cdots, m \end{aligned}$$

其等价于半定规划问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f^T x \\ \text{s.t.} \quad & \begin{pmatrix} (c^T x + d_i) I & A_i x + b_i \\ (A_i x + b_i)^T & c^T x + d_i \end{pmatrix} \succeq 0 \quad i = 1, \cdots, m \end{aligned}$$

从 SOCP 到 SDP 是显然的, 若问题的解满足 SDP, 则必然有 $c^T x + d_i \ge 0$, 若 $c^T x + d_i = 0$, 则可知 $A_i x + b_i = 0$, 否则由A.3可知

$$(c^T x + d_i) I - (A_i x + b_i)^T (c^T x + d_i)^{-1} (A_i x + b_i) \succeq 0,$$

这正是 $||A_i x + b_i||_2 \le c^T x + d_i$.

二次约束二次规划化为半定规划

对于 QCQP 问题, 使用一个技巧

$$x^T A x + 2b^T x + c = \left\langle \begin{pmatrix} A & b \\ b^T & c \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} xx^T & x \\ x^T & 1 \end{pmatrix} \right\rangle$$

可将 QCQP 问题松弛为一个 SDP.

3 对偶

3.1 拉格朗日对偶函数与对偶问题

考虑标准形式的优化问题 (2.0.1), 变量 $x \in \mathbb{R}^n$, 定义域为 $\mathcal{D}$, 最优值为 p^*, 则其拉格朗日函数 (Lagrangian)$L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$ 为

$$L(x, \lambda, \nu) = f_0(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^{p} \nu_i h_i(x).$$

定义 3.1.1 定义优化问题 (2.0.1) 的**拉格朗日对偶函数** (Lagrange dual function)$g : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$ 为

$$g(\lambda, \nu) = \inf_{x \in D} L(x, \lambda, \nu),$$

由于 g 是一族关于自变量的仿射函数 (凹函数) 的逐点下确界, 因此是凹函数. 优化问题 (2.0.1) 的**拉格朗日对偶问题**为

$$\begin{aligned} \max_{\lambda, \nu} \quad & g(\lambda, \nu) \\ \text{s.t.} \quad & \lambda \succeq 0, \end{aligned}$$

这个优化问题的解实际上构成了原问题最优值的一个下界.

球面约束极小化二次函数

对于对称矩阵 A, 考虑优化问题

$$\begin{aligned} \min_x \quad & x^T A x + 2b^T x \\ \text{s.t.} \quad & x^T x \le 1, \end{aligned}$$

其拉格朗日对偶函数为

$$g(\lambda) = \inf_x (x^T(A+\lambda I)x + 2b^T x - \lambda),$$

可知只有当 $A+\lambda I \succeq 0$ 且 $b \in \mathcal{R}(A+\lambda I)$ 时 g 才是有界的, 从而可得对偶问题

$$\begin{aligned} \max_{\lambda} \quad & -b^T(A+\lambda I)^{\dagger} b - \lambda \\ \text{s.t.} \quad & A+\lambda I \succeq 0, \quad b \in \mathcal{R}(A+\lambda I) \end{aligned}$$

自然也可以写成半定规划的形式

$$\begin{aligned} \max_{\lambda} \quad & t - \lambda \\ \text{s.t.} \quad & \begin{pmatrix} A+\lambda I & b \\ b^T & t \end{pmatrix} \succeq 0 \end{aligned}$$

.

3.2 对偶性和 Slater 约束准则

考虑原问题的最优值 p^* 和对偶问题的最优值 d^*, 则 $d^* \le p^*$ 称为弱对偶性, $d^* = p^*$ 称为强对偶性.

4 算法

4.1 梯度法与线搜索

考虑无约束优化问题

$$\min_x \quad f(x),$$

线搜索 (line search) 方法是先选定方向 d_k, 然后选定正数 α_k, 得到下一步的迭代点

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k.$$

当 $f(x)$ 可微的时候, **梯度法** (gradient method) 选择的方向是

$$\alpha_k = \nabla f(x_k),$$

迭代更新为

$$x_{k+1} = x_k - t_k \nabla f(x_k).$$

Armijo 准则

在可微的情形, Armijo 准则要求选取的步长使得函数值有充分的下降, 也就是满足

$$f(x_k + \alpha_k dk) < f(x_k) + c\alpha_k dk \nabla f(x_k),$$

其中 $0 < c < 1$.

4.1.1 次梯度

对于凸函数 f, 若在点 x 处对任意 y 都有

$$f(y) \ge f(x) + g^T(y-x)$$

成立, 则称 g 是 f 在点 x 处的一个**次梯度** (subgradient). 则 x 处所有的次梯度的集合称为**次微分** (subdifferential), 记为 $\partial f(x)$. 显然这是一个凸集. 可以证明在可行域的内点, 次梯度存在有界.

次梯度的单调性

不妨设 $u \in \partial f(x), v \in \partial f(y)$, 则

$$f(x) \geq f(y) + v^T(x-y), \quad f(y) \geq f(x) + u^T(y-x),$$

两式相减得到 $(u-v)^T(x-y) \geq 0$. 特别地当 f 可微就得到**梯度的单调性**.

最大值函数的次梯度

考虑 $f(x) = \max\{f_1(x), f_2(x)\}$, 其中 $f_i(x), i=1,2$ 是凸的可微函数, 则

$$f_1(y) \geq f_1(x) + \nabla f_1(x)^T(y-x), \quad f_2(y) \geq f_2(x) + \nabla f_2(x)^T(y-x),$$

设 $f(x) = \theta f_1(x) + (1-\theta) f_2(x)$, 则

$$f(y) \geq \theta f_1(y) + (1-\theta) f_2(y) \geq f(x) + \left[\theta f_1(x) + (1-\theta) f_2(x)\right]^T (y-x),$$

于是 $\theta f_1(x) + (1-\theta) f_2(x)$ 是 f 的一个次梯度, 不同的情形对应于 $\theta = 0, \theta = 1$ 或者 $\theta \in [0,1]$.

现在考虑 $f(x) = \max\{f_1(x), \cdots, f_m(x)\}$, 定义

$$l(x) := \{i | f_i(x) = f(x)\},$$

则

$$\partial f(x) = \operatorname{conv} \bigcup_{i \in l(x)} \partial f_i(x),$$

这里 conv 指的是凸包. 也就是说逐点最大值函数的次梯度是在这一点取到最大的函数的次梯度的凸包.

l_1 范数的次梯度

由

$$f(x) = ||x||_1 = \max_{s \in \{-1,1\}^n} s^T x,$$

根据前面的结果可知

$$\partial f(x) = J_1 \times \cdots \times J_n, \quad J_k = \begin{cases} [-1,1], & x_k = 0 \\ \{1\}, & x_k > 0 \\ \{-1\}, & x_k < 0 \end{cases}$$

逐点上确界的次梯度

考虑一族凸函数 $\{f_\alpha(x)\}$ 的逐点上确界

$$f(x) = \sup_{\alpha \in \mathcal{A}} f_\alpha(x),$$

定义

$$I(x) := \{\alpha \in \mathcal{A} | f_\alpha(x) = f(x)\},$$

则

$$\partial f(x) \in \operatorname{conv} \bigcup_{\alpha \in I(x)} \partial f_\alpha(x).$$

共轭函数的梯度

对于闭的强凸函数 $f(x)$, 其共轭函数

$$f^*(y) = \sup_{x \in \mathrm{dom} f} \left(y^T x - f(x) \right)$$

的次梯度为

$$\partial f^*(y) \in \mathrm{conv} \bigcup_{x \in I(y)} \partial \left[y^T x - f(x) \right] = \arg\max_x \{ y^T - f(x) \},$$

这是因为 $y^T x - f(x)$ 对 y 的次微分就是 $\{x^T\}$. 最后能化为最大值是因为 f 是强凸的, 此时 f^* 是可微的.

4.2 梯度法收敛性质

定义 4.2.1 称函数 f 的梯度是李普希兹连续的, 如果存在常数 L 满足

$$||\nabla f(x) - \nabla f(y)||_2 \le L||x - y||_2 \quad \forall x, y \in \mathrm{dom} f.$$

命题 4.2.2 可微凸函数 f 是梯度 $L-$ 李普希兹连续的, 则

$$g(x) = \frac{L}{2} x^T x - f(x)$$

是凸函数.

证明 注意到可微函数是凸函数当且仅当

$$(\nabla f(x) - \nabla f(y))^T (x - y) \ge 0 \quad \forall x, y \in \mathrm{dom} f,$$

从而直接有

$$(\nabla g(x) - \nabla g(y))^T (x - y) \ge 0$$

等价于

$$[L(x - y) - (\nabla f(x) - \nabla f(y))]^T (x - y) \ge 0,$$

然后由柯西不等式可知命题成立. □

由命题 4.2.2, 利用凸函数的一阶条件

$$g(y) \ge g(x) + (y - x)^T \left[Lx - \nabla f(x) \right],$$

整理可得梯度李普希兹连续函数的**二次上界**

$$f(y) \le f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + \frac{L}{2} ||y - x||_2^2. \tag{4.2.1}$$

现在假设 f 有一个全局最小点 x^*, 则由不等式4.2.1可知

$$f(x) - f(x^*) \le \frac{L}{2} ||x - x^*||_2^2,$$

以及

$$f(x^*) \le f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + \frac{L}{2} ||y - x||_2^2, \tag{4.2.2}$$

对 y 最小化不等式 4.2.2 可知

$$f(x^*) \le f(x) - \frac{1}{2L} ||\nabla f(x)||_2^2,$$

合起来就是

$$\frac{1}{2L} ||\nabla f(x)||_2^2 \le f(x) - f(x^*) \le \frac{L}{2} ||x - x^*||_2^2.$$

梯度法收敛性

现在假设可微函数 f 是梯度 L-李普希兹连续的, 考虑

$$f(x-t\nabla f(x)) \le f(x) - t||\nabla f(x)||_2^2 + \frac{Lt^2}{2}||\nabla f(x)||_2^2,$$

从而

$$f(x-t\nabla f(x)) \le f(x) - t\left(1-\frac{tL}{2}\right)||\nabla f(x)||_2^2,$$

只需要取 $t \le 1/L$ 即可保证充分下降, 此时有

$$f(x-t\nabla f(x)) \le f(x) - \frac{t}{2}||\nabla f(x)||_2^2 \le f^* + \nabla f(x)^T(x-x^*) - \frac{t}{2}||\nabla f(x)||_2^2$$

令 $x^+ = x - t\nabla f(x)$, 然后配方可得

$$f(x^+) \le f^* + \frac{1}{2}\left(||x-x^*||_2^2 - ||x^+ - x^*||_2^2\right),$$

从而可知

$$\sum_{i=1}^k [f(x_i) - f^*] \le \frac{1}{2t}||x_0 - x^*||_2^2,$$

从而有

$$f(x_k) - f^* \le \frac{1}{2kt}||x_0 - x^*||_2^2.$$

从而梯度下降法有 $O(1/\varepsilon)$ 的收敛速度, 也就是说 k 步能达到 $1/k$ 的收敛精度.

总结梯度下降法的收敛性分析, 其证明思路就是由梯度李普希兹连续得到一个将原函数控制住的**二次函数**, 这是得到充分下降的重要条件. 从一维的情形具体来看, 梯度李普希兹条件的作用就是保证梯度方向的下降不会很快变为上升, 因为梯度不能很快变为反向.

次梯度法收敛性

对于次梯度方法, 我们假设函数本身是 G-李普希兹连续的, 于是可得函数的次梯度是有界的, 考虑步长 t, 由此梯度的性质可知

$$\begin{aligned}||x^+ - x^*||_2^2 &= ||x - tg - x^*||_2^2 \\ &= ||x^+ - x^*||_2^2 - 2tg^T(x-x^*) + t^2||g||_2^2 \\ &\le ||x^+ - x^*||_2^2 - 2t(f(x) - f^*) + t^2||g||_2^2\end{aligned}$$

从而可知

$$2\left(\sum_{i=1}^k t_i\right)(f_{\min} - f^*) \le ||x_0 - x^*||_2^2 + \sum_{i=1}^k t_i^2||g_{i-1}||_2^2, \quad f_{\min} = \min_i f(x_i),$$

于是

$$f_{\min} - f^* \le \frac{||x_0 - x^*||_2^2 + G^2\sum_{i=1}^k t_i^2}{2\left(\sum_{i=1}^k t_i\right)},$$

只需要

$$\sum_{i=1}^k t_i = \infty, \quad \sum_{i=1}^k t_i^2 < \infty$$

即可保证收敛性质. 固定迭代步数 k, 通过求最优的固定步长可得次梯度下降法的收敛速度是 $O(1/\varepsilon^2)$, 也就是说 k 步能达到 $1/\sqrt{k}$ 的收敛精度.

次梯度下降之所以不能使用梯度下降的证明思路, 原因在于此时梯度的方向可能会突变. 次梯度下降法的收敛证明的直观在于, 函数李普希兹连续实际上就保证了函数大约就是一个线性函数, 从而当前点到最优点距离的平方的减小量大约正比于步长和函数值和最优值的乘积.

Algorithm 1 近似点梯度法

Require: 函数 $f(x), h(x)$, 初始点 $x_0, k = 0$

Ensure: 最优点 x^*

```
迭代次数 count = 0
while count < maxiter do
    选取步长 t_k
    更新 x_{k+1} = prob_{t_k h}(x_k − t_k ∇f(x_k))
    k = k + 1
end while
return x* = arg min_{x_k} f(x_k)
```

4.3 近似点梯度法

近似点梯度法描述如

我们有

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= \arg\min_u \left\{ h(u) + \frac{1}{2t_k}||u - x_k + t_k \nabla f(x_k)||^2 \right\} \\ &= \arg\min_u \left\{ h(u) + f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (u - x_k) + \frac{1}{2t_k}||u - x_k||^2 \right\} \end{aligned}$$

也就是将光滑部分线性展开再加上二次项, 并且保留非光滑部分, 然后求极小. 于是我们知道此时

$$x_{k+1} - x_k + t_k \nabla f(x_k) \in \partial t_k h(x_{k+1}),$$

也就是

$$x_{k+1} = x_k - t_k \nabla f(x_k) - t_k g_k, \quad g_k \in \partial h(x_{k+1}), \tag{4.3.3}$$

也就是**光滑部分做梯度下降**, 非光滑部分做**隐式的梯度下降**.

近似点梯度法收敛性

我们要证明近似点梯度法有 $O(1/\varepsilon)$ 的收敛速度. 注意到在梯度法收敛性4.2的证明中, 关键在于能够用二次上界控制住函数值的下降, 而次梯度法收敛性之所以做不到是因为如果采用当前点的次梯度信息则不知道下一个点的次梯度如何, 而近似点梯度法就是解决了这一问题, 注意到4.3.3中 h 的次梯度是下一个迭代点, 从而就可以据此控制函数值的下降.

考虑

$$G_t(x) = \frac{1}{t}\left(x - \text{prob}_{th}(x - t\nabla f(x))\right),$$

从而近似点梯度法的更新可以写成

$$x^+ = x - tG_t(x),$$

同样假设 f 是梯度 L-李普希兹连续的, 从而如同梯度法收敛性证明, 取步长 $t \le 1/L$, 我们希望有

$$\psi(x^+) - \psi^* \le G_t(x)^T (x - x^*) - \frac{t}{2}||G_t(x)||^2,$$

由于有

$$f(x^+) - f(x) \le -t\nabla f(x)^T G_t(x) + \frac{t}{2}||G_t(x)||^2$$

且

$$f(x) \le f(x^*) - \nabla f(x)^T (x^* - x),$$

从而得到

$$f(x^+) - f(x^*) \le G_t(x)^T (x - x^*) - \frac{t}{2}||G_t(x)||^2 - (G_t(x) - \nabla f(x))^T (x^* - x^+),$$

于是只需要说明

$$h(x^+) - h(x^*) \le -(G_t(x) - \nabla f(x))^T(x^* - x^+)$$

也就是说必须要

$$G_t(x) - \nabla f(x) \in \partial h(x^+),$$

这里的 $G_t(x)$ 可以认为是任意的更新方向, 这当然等价于

$$(x - t\nabla f(x)) - x^+ \in \partial th(x^+),$$

也就是

$$x^+ = \mathrm{prob}_{th}(x - t\nabla f(x)),$$

这就是近邻点梯度法的逻辑.

A 数值代数与矩阵相关

A.1 矩阵函数的导数

对于以矩阵 X 为自变量的函数 f, 若存在矩阵 G

$$\lim_{V\to 0}\frac{f(X+V) - f(X) - \langle G, V\rangle}{||V||} = 0,$$

则称为 **Frechet 可微**, 期中 $||\cdot||$ 是任意一个矩阵范数.

若存在 G, 满足对于任意的 V, 有

$$\lim_{t\to 0}\frac{f(X+tV) - f(X)}{t} = \langle G, V\rangle,$$

则称为 **Gateaux 可微**. 一般可取 $\langle G, V\rangle = GV^T$.

A.2 矩阵函数的泰勒展开

以矩阵为自变量的函数如果二阶可微, 仍然有泰勒展开式

$$f(x) = f(y) + \langle \nabla f(y), x - y\rangle + \frac{1}{2}(x-y)^T\nabla^2 f(y)(x-y) + o(||x-y||^2).$$

A.3 Schur complement

设矩阵 $A, C \in \mathcal{S}$ 且 $A \succ 0$, 于是

$$U = \begin{pmatrix} A & B \\ B^T & C \end{pmatrix} \succeq 0 \quad \Longleftrightarrow \quad C - B^TA^{-1}B \succeq 0,$$

称矩阵 $C - B^TA^{-1}B$ 为 A 在 U 中的 Schur complement.