



M05M11084 最优化理论、算法与应用

2 理论基础



M05M11084

2 理论基础

参考：

1. 矩阵分析与应用，张贤达，第3章
2. 最优化导论，Edwin K.P., Chong著，孙志强等译，第4~5章
3. Convex Optimization, Stephen Boyd, Chapter 2&3

1. 导数定义及运算法则
2. 梯度信息
3. 泰勒展开与函数逼近
4. 极值点与平稳点
5. 凸集、凸函数与凸优化
6. 优化问题的最优性条件
7. 下降方向的判定

1. 导数定义及运算法则
2. 梯度信息
3. 泰勒展开与函数逼近
4. 极值点与平稳点
5. 凸集、凸函数与凸优化
6. 无约束问题的最优性条件
7. 下降方向

- 1.1 函数与变量定义的多种形式
- 1.2 实函数（列向量为变量）
- 1.3 向量函数（列向量为变量）
- 1.4 导数运算法则
 - 常用函数导数公式
- 1.5 二阶导数矩阵
- 1.6 微分与导数的关系

参考：

2. 矩阵分析与应用，张贤达，第3章

1.1 函数与变量定义的多重形式

	实函数 $\rightarrow \mathcal{R}$	向量函数 $\rightarrow \mathcal{R}^p$	矩阵函数 $\rightarrow \mathcal{R}^{p \times q}$
实数变量 \mathcal{R}	$f(x)$	$f(x)$	$F(x)$
列向量变量 \mathcal{R}^n	$f(x)$	$f(x)$ 主要涉及	$F(x)$ 少量涉及
矩阵变量 $\mathcal{R}^{m \times n}$	$f(X)$	$f(X)$	$F(X)$

$f(x) = a^T x$
 $f(x) = Ax$

当上下文无歧义时
也简单写成

$f(x) = a^T x$
 $f(x) = Ax$

注：无论是函数还是变量，对于向量和矩阵“转置”还有其它形式，本课程不讨论

1.2 实函数（列向量为变量）

设可微函数 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}, x \in \mathcal{R}^n$ ，即， n 元实函数 $f(x)$ ，自变量 $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$

一阶导数向量

$Df(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix}$

行向量

梯度向量

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

列向量

例 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{x}$, $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$, 给定 $\mathbf{a} \in \mathcal{R}^n$ $\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$ $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$

$$\begin{aligned} Df(\mathbf{x}) &= \left[\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \quad \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2} \quad \cdots \quad \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right] & \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^n a_j x_j \right) = a_i \\ &= [a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_n] \\ &= \mathbf{a}^T \end{aligned}$$

1.3 向量函数（列向量为变量）

$f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m$, $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$ $f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ f_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_m(\mathbf{x}) \end{bmatrix}$

一阶导数矩阵 雅克比矩阵
Jacobi

$$Df(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} Df_1(\mathbf{x}) \\ Df_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ Df_m(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}_{m \times n}$$

$$Df_i(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial x_1} \quad \frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial x_2} \quad \cdots \quad \frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right]$$

例 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$, $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

$$Dx_i = [0 \quad \cdots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \cdots \quad 0]$$

$\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{i-1}$
 $\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\text{第 } i \text{ 个}}$
 $\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{n-i}$

$$D = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} & \frac{\partial}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

$$Df(\mathbf{x}) = D\mathbf{x} = D \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} = I_n$$

例 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m$, 函数 $f(\mathbf{x}) = A\mathbf{x}$, 变量 $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$, 给定 $A \in \mathcal{R}^{m \times n}$

$$f(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \mathbf{x} \\ \mathbf{a}_2^T \mathbf{x} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \mathbf{x} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{a}_i^T = [a_{i1} \quad a_{i2} \quad \cdots \quad a_{in}], \quad i = 1, 2, \cdots, m$$

$$D(\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}) = \mathbf{a}_i^T$$

$$Df(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} D(\mathbf{a}_1^T \mathbf{x}) \\ D(\mathbf{a}_2^T \mathbf{x}) \\ \vdots \\ D(\mathbf{a}_m^T \mathbf{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \mathbf{a}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_m^T \end{bmatrix} = A$$

一阶导数矩阵的几何解释

$f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m$, 点 $\mathbf{x}_0 = [x_1^0, \dots, x_{j-1}^0, x_j^0, x_{j+1}^0, \dots, x_n^0]^T$ 的导数矩阵为 $Df(\mathbf{x}_0)$, $J = \{1, \dots, n\}$

$Df(\mathbf{x}_0)$ 的列为向量偏导数 $\frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{x}_0)$

设仅第 j 个元素为变量的向量为

$$\mathbf{x}_j^0 = [x_1^0, \dots, x_{j-1}^0, x_j^0, x_{j+1}^0, \dots, x_n^0]^T, j \in J$$

第 j 个元素 x_j 是变量

其余元素 x_i^0 为常数, $\forall i \neq j, i \in J$

$$\mathbf{x}_1^0 = [x, b]^T, \text{ 或, } \mathbf{x}_2^0 = [a, y]^T$$

$f(\mathbf{x}_j^0)$ 只有第 j 个元素 x_j 为变量的单变量函数, 为曲线

$$f(x, b), \text{ 或, } f(a, y)$$

曲线 $f(\mathbf{x}_j^0)$ 在点 \mathbf{x}_0 的切向量就是 $\frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{x}_0)$

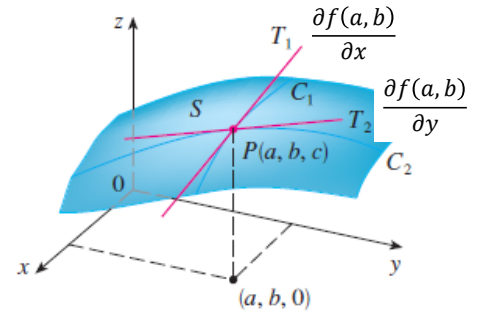


FIGURE 1

The partial derivatives of f at (a, b) are the slopes of the tangents to C_1 and C_2 .

1.4 导数运算法则

设函数 f, g 可微, α, β 为常数

① $Dc = \mathbf{0}$

② $D(\alpha f + \beta g) = \alpha Df + \beta Dg$

③ $D(f^T) = (Df)^T$

④ 复合函数的链式法则

⑤ 乘积法则

} 详见后

④链式法则

链式法则1 复合函数 $h: \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}$, $h = f \circ g$, $h(t) = f(g(t))$ 其中, $g: \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}^n$, $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$ 记 $x = g(t)$

$$h'(t) = Df(x)Dg(t) = \nabla f(x)^T \begin{bmatrix} g'_1(t) \\ \vdots \\ g'_n(t) \end{bmatrix}$$

链式法则2 复合函数 $h: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$, $h = f \circ g$, $h(u) = f(g(u))$ 其中, $g: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m$, $f: \mathcal{R}^m \rightarrow \mathcal{R}$ 记 $x = g(u)$

$$Dh(u) = Df(x)Dg(u)$$

$$D_u h(u) = D_x f(x) D_u g(u)$$

链式法则3 复合函数 $h: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m$, $h = f \circ g$, $h(u) = f(g(u))$ 其中 $g: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^p$, $f: \mathcal{R}^p \rightarrow \mathcal{R}^m$ 记 $x = g(u)$

$$Dh(u) = Df(x)Dg(u)$$

$$D_u h(u) = D_x f(x) D_u g(u)$$

④链式法则

例 考虑函数 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$, $f \in C^2$ $x^*, d \in \mathcal{R}^n$,

$$x(\alpha) = x^* + \alpha d, \quad \alpha \in \mathcal{R}$$

$$\phi(\alpha) \triangleq f(x(\alpha)), \quad \phi: \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}$$

求 $\phi(0), \phi'(0)$

$$x(0) = x^*$$

$$\phi(0) = f(x^*)$$

$$Dx(\alpha) = d$$

$$\phi'(\alpha) = Df(x(\alpha))Dx(\alpha) = \nabla f(x(\alpha))^T d = d^T \nabla f(x(\alpha))$$

$$\phi'(0) = d^T \nabla f(x^*)$$

④链式法则

Exercise 5.5

Consider $f(\mathbf{x}) = x_1 x_2 / 2$, $\mathbf{g}(s, t) = [4s + 3t \quad 2s + t]^T$.

Evaluate $\frac{\partial}{\partial s} f(\mathbf{g}(s, t))$ and $\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{g}(s, t))$ using the chain rule.

$$f(\mathbf{x}) = x_1 x_2 / 2$$

$$\mathbf{g}(s, t) \triangleq \begin{bmatrix} x_1(s, t) \\ x_2(s, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4s + 3t \\ 2s + t \end{bmatrix}$$

$$h(s, t) \triangleq f(\mathbf{g}(s, t))$$

$$D_{s,t} h(s, t) = D_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) D_{s,t} \mathbf{g}(s, t)$$

$$\begin{aligned} D_{s,t} h(s, t) &= D_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) D_{s,t} \mathbf{g}(s, t) \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} & \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial s} & \frac{\partial x_1}{\partial t} \\ \frac{\partial x_2}{\partial s} & \frac{\partial x_2}{\partial t} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{x_2}{2} & \frac{x_1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} x_1 + 2x_2 & \frac{x_1 + 3x_2}{2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

⑤乘积法则

$$\mathbf{f}: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m, \quad \mathbf{g}: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m$$

$$h: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R} \quad h(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}(\mathbf{x})$$

$$Dh(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^T D\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{g}(\mathbf{x})^T D\mathbf{f}(\mathbf{x})$$

⑤ 乘法法则

$$h(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}(\mathbf{x})$$

$$Dh(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^T D\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{g}(\mathbf{x})^T D\mathbf{f}(\mathbf{x})$$

例 1. $h(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x}$, $A \in \mathcal{R}^{n \times n}$, $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}, \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) = A\mathbf{x}$$

$$D(\mathbf{x}^T A \mathbf{x}) = D((\mathbf{x})^T (A\mathbf{x})) = \mathbf{x}^T D(A\mathbf{x}) + (A\mathbf{x})^T D(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T (A + A^T)$$

$$\text{若 } A^T = A, \text{ 则 } D(\mathbf{x}^T A \mathbf{x}) = 2\mathbf{x}^T A$$

例 2. $h(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{x}$, $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}, \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$$

$$D(\mathbf{x}^T \mathbf{x}) = \mathbf{x}^T D(\mathbf{x}) + (\mathbf{x})^T D(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}^T$$

常用函数导数公式

1. 若给定 $A \in \mathcal{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathcal{R}^m$; 变量 $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$,

$$D(\mathbf{b}^T A \mathbf{x}) = \mathbf{b}^T A,$$

$$D(\mathbf{x}^T A \mathbf{x}) = \mathbf{x}^T (A + A^T) \text{ if } m = n$$

$$D(A\mathbf{x}) = A$$

$$D(\mathbf{x}) = I$$

2. 若给定 $\mathbf{b} \in \mathcal{R}^n$, $D(\mathbf{b}^T \mathbf{x}) = D(\mathbf{x}^T \mathbf{b}) = \mathbf{b}^T$

3. 若给定 $Q \in \mathcal{R}^{n \times n}$, $Q = Q^T$, 那么 $D(\mathbf{x}^T Q \mathbf{x}) = 2\mathbf{x}^T Q$

$$D(\mathbf{x}^T \mathbf{x}) = 2\mathbf{x}^T$$

$$\|\mathbf{x}\|^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{x}$$

1.5 二阶导数矩阵

$f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}, \mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$, 二阶可微

$$\begin{aligned} \text{二阶导数矩阵 } D^2 f(\mathbf{x}) &\triangleq D(Df(\mathbf{x})^T) \\ &\triangleq D(\nabla f(\mathbf{x})) \end{aligned} \quad Df(\mathbf{x})^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

$$D^2 f(\mathbf{x}) = D \left(\begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \right) & \cdots & \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right) & \cdots & \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_1} \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

向量函数的二阶导数涉及矩阵函数求导，暂时不讲；
若后面需要，再具体讲

例 考虑函数 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}, f \in C^2$ $\mathbf{x}^*, \mathbf{d} \in \mathcal{R}^n$,

$$\mathbf{x}(\alpha) = \mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}, \quad \alpha \in \mathcal{R}$$

$$\phi(\alpha) \triangleq f(\mathbf{x}(\alpha)), \quad \phi: \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}$$

求 $\phi(0), \phi'(0)$ 和 $\phi''(0)$

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}^*$$

$$\phi(0) = f(\mathbf{x}^*)$$

$$D\mathbf{x}(\alpha) = \mathbf{d}$$

$$\phi'(\alpha) = \mathbf{d}^T \nabla f(\mathbf{x}(\alpha))$$

$$\begin{aligned} \phi''(\alpha) &= D[\mathbf{d}^T \nabla f(\mathbf{x}(\alpha))] = \mathbf{d}^T D[\nabla f(\mathbf{x}(\alpha))] \\ &= \mathbf{d}^T D_{\mathbf{x}}[\nabla f(\mathbf{x}(\alpha))][D_{\alpha} \mathbf{x}(\alpha)] \\ &= \mathbf{d}^T [D^2 f(\mathbf{x}(\alpha))] \mathbf{d} \end{aligned}$$

$$f \in C^2 \Rightarrow (D^2 f(\mathbf{x}(\alpha)))^T = D^2 f(\mathbf{x}(\alpha))$$

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}(\alpha)) = D^2 f(\mathbf{x}(\alpha))$$

$$\phi'(0) = \mathbf{d}^T \nabla f(\mathbf{x}^*)$$

$$\phi''(0) = \mathbf{d}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^*) \mathbf{d}$$

例 $h(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x}$, $A \in \mathcal{R}^{n \times n}$, $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$

$$\begin{aligned} D(\mathbf{x}^T A \mathbf{x}) &= D((\mathbf{x}^T)(A\mathbf{x})) \\ &= \mathbf{x}^T (A + A^T) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D^2 h(\mathbf{x}) &= D(Dh(\mathbf{x})^T) \\ &= D\left((\mathbf{x}^T (A + A^T))^T\right) \\ &= D((A + A^T)^T \mathbf{x}) \\ &= (A + A^T)^T \\ &= A + A^T \quad A^T = A \\ &= 2A \end{aligned}$$

1.6 微分与导数的关系

可微的实值函数 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \rightarrow d\mathbf{x} = \begin{bmatrix} dx_1 \\ dx_2 \\ \vdots \\ dx_n \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} df(\mathbf{x}) &= \frac{\partial f(\mathbf{x})^T}{\partial \mathbf{x}} d\mathbf{x} \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} dx_i \\ &= Df(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= (\nabla f(\mathbf{x}))^T d\mathbf{x} \end{aligned}$$

如果表达式 $df(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ 成立，那么，导数 $Df(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x})$

常用于求导

1.6 微分与导数的关系

可微向量函数 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m$

$$df_j(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f_j(\mathbf{x})}{\partial x_i} dx_i$$

$$\begin{aligned} d\mathbf{f}(\mathbf{x}) &= \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x})^T}{\partial \mathbf{x}} d\mathbf{x} \\ &= D\mathbf{f}(\mathbf{x})d\mathbf{x} \\ &= (\nabla \mathbf{f}(\mathbf{x}))^T d\mathbf{x} \end{aligned}$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \rightarrow d\mathbf{x} = \begin{bmatrix} dx_1 \\ dx_2 \\ \vdots \\ dx_n \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_m \end{bmatrix} \rightarrow d\mathbf{f} = \begin{bmatrix} df_1 \\ df_2 \\ \vdots \\ df_m \end{bmatrix}$$

1. 导数定义及运算法则

2. 梯度信息

3. 泰勒展开与函数逼近

4. 极值点与平稳点

5. 凸集、凸函数与凸优化

6. 无约束问题的最优性条件

7. 下降方向的判定

2.1 梯度向量

常用函数梯度公式

2.2 Hesse 矩阵

2.3 矩阵的正定/半正定性质与判定方法

2.1 梯度向量

用于构造搜索方向

可微函数 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$ $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$

$f(\mathbf{x})$ 在 \mathbf{x} 处的梯度向量

$$\nabla f(\mathbf{x}) \triangleq (Df(\mathbf{x}))^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

$n = 1$ 时, $\nabla f(x) = f'(x)$

常用函数梯度公式

1. 若给定 $A \in \mathcal{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathcal{R}^m$; 变量 $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$

$$\nabla(\mathbf{b}^T A \mathbf{x}) = A^T \mathbf{b},$$

$$\nabla(A \mathbf{x}) = A^T$$

$$\nabla(\mathbf{x}^T A \mathbf{x}) = (A + A^T) \mathbf{x} \text{ if } m = n$$

2. 若给定 $\mathbf{b} \in \mathcal{R}^n$, $\nabla(\mathbf{b}^T \mathbf{x}) = \nabla(\mathbf{x}^T \mathbf{b}) = \mathbf{b}$

3. 若给定 $Q \in \mathcal{R}^{n \times n}$, $Q = Q^T$, 那么 $\nabla(\mathbf{x}^T Q \mathbf{x}) = 2Q \mathbf{x}$

$$\nabla(\mathbf{x}^T \mathbf{x}) = 2\mathbf{x}$$

4. $\nabla(\|\mathbf{x}\|^2) = \nabla(\mathbf{x}^T \mathbf{x}) = 2\mathbf{x}$

2.2 Hesse 矩阵

二阶可微函数 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$ $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) \triangleq (D^2 f(\mathbf{x}))^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \quad f(\mathbf{x}) \text{ 在 } \mathbf{x} \text{ 处的 Hesse 矩阵}$$

记为 H , 或 F

$n = 1$ 时, $\nabla^2 f(\mathbf{x}) = f''(\mathbf{x})$

$$D^2 f(\mathbf{x}) \triangleq D(\nabla f(\mathbf{x}))$$

2.2 Hesse 矩阵

克莱罗定理或施瓦茨定理 *Clairaut's theorem or Schwarz's theorem*

如果 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$ 在点 \mathbf{x} 处是二次连续可微的, 那么, 点 \mathbf{x} 处的 Hesse 矩阵是对称的

如果 f 的二次偏导数不是连续的, 那么, Hesse 矩阵不一定对称

Example Consider the function $f(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{x_1 x_2 (x_1^2 - x_2^2)}{x_1^2 + x_2^2} & \text{if } \mathbf{x} \neq \mathbf{0}, \\ 0 & \text{if } \mathbf{x} = \mathbf{0} \end{cases}$,

compute its Hessian at the point $\mathbf{0} = [0, 0]^T$.

2.2 Hesse 矩阵

$$f(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{x_1 x_2 (x_1^2 - x_2^2)}{x_1^2 + x_2^2} & \text{if } \mathbf{x} \neq \mathbf{0}, \\ 0 & \text{if } \mathbf{x} = \mathbf{0} \end{cases}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{x_2(x_1^4 - x_2^4 + 4x_1^2 x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \text{if } \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \\ 0 & \text{if } \mathbf{x} = \mathbf{0} \end{cases}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{x_1(x_1^4 - x_2^4 + 4x_1^2 x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} & \text{if } \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \\ 0 & \text{if } \mathbf{x} = \mathbf{0} \end{cases}$$

Therefore, the Hessian evaluated at the point $\mathbf{0}$ is

$$F(\mathbf{0}) = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

which is *not symmetric*

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_2 (\partial x_1)} = \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \right)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}([x_1, 0]^T) = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}([0, x_2]^T) = -x_2$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(\mathbf{0}) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(\mathbf{0}) = -1$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} = \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 (\partial x_2)} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2}([0, x_2]^T) = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2}([x_1, 0]^T) = x_1$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(\mathbf{0}) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(\mathbf{0}) = 1$$

2.2 Hesse 矩阵

例 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T Q \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} \quad Q^T = Q$

求: 1. $\nabla f(\mathbf{x})$

2. $\nabla^2 f(\mathbf{x})$

$$\begin{aligned} Df(\mathbf{x}) &= D \left(\frac{1}{2} \mathbf{x}^T Q \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} \right) \\ &= D \left(\frac{1}{2} \mathbf{x}^T Q \mathbf{x} \right) - D(\mathbf{b}^T \mathbf{x}) \\ &= \mathbf{x}^T Q - \mathbf{b}^T \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{x}) &= (Df(\mathbf{x}))^T \\ &= (\mathbf{x}^T Q - \mathbf{b}^T)^T \\ &= Q\mathbf{x} - \mathbf{b} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D^2 f(\mathbf{x}) &\triangleq D(\nabla f(\mathbf{x})) \\ &= D(Q\mathbf{x} - \mathbf{b}) \\ &= Q \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 f(\mathbf{x}) &\triangleq (D^2 f(\mathbf{x}))^T \\ &= (Q)^T \\ &= Q \end{aligned}$$

常用记号

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x})$$

$$\mathbf{g}_k = \nabla f(\mathbf{x}_k) \longleftrightarrow \mathbf{g}^{(k)} = \nabla f(\mathbf{x}^{(k)}) \quad g^k = \nabla f(x^k)$$

$$H(\mathbf{x}) = \nabla^2 f(\mathbf{x})$$

$$H_k = \nabla^2 f(\mathbf{x}_k) \longleftrightarrow H^{(k)} = \nabla^2 f(\mathbf{x}^{(k)}) \quad H^k = \nabla^2 f(x^k)$$

练习

Consider the function $f(\mathbf{x}) = x_1^3 + x_2^2 + x_3^4 + 2x_1x_2$

a. Find $\nabla f(\mathbf{x})$.

b. Find the Hessian $F(\mathbf{x})$.

Solution

$$\mathbf{a.} \quad \nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 3x_1^2 + 2x_2 \\ 2x_1 + 2x_2 \\ 4x_3^3 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{b.} \quad F(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 6x_1 & 2 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 12x_3^2 \end{bmatrix}$$

练习

Consider the function $f(x) = ax^3 + b\sin x$

a. Find $\nabla f(x)$.

b. Find the Hessian $F(x)$.

Solution

$$f'(x) = 3ax^2 + b\cos x,$$

$$f''(x) = 6ax - b\sin x$$

练习

EXERCISES 5.3 Consider the function $f(x) = (a^T x)(b^T x)$,

where a , b , and x are n -dimensional vectors.

a. Find $\nabla f(x)$.

b. Find the Hessian $F(x)$.

$$\begin{aligned} f(x) &= (a^T x)(b^T x) \\ &= (x^T a)(b^T x) \\ &= x^T (ab^T) x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nabla f(x) &= (ab^T + (ab^T)^T) x \\ &= (ab^T + ba^T) x \end{aligned}$$

$$F(x) = ab^T + ba^T$$

练习

Consider

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2 + 4x_4^2 + 5x_1x_2 + 6x_1x_3 + 7x_1x_4 + 8x_2x_3 + 9x_2x_4 + 10x_3x_4 + 11x_1 + 12x_2 + 13x_3 + 14x_4 + 15$$

✓ How to change the General Form of a Quadratic Function into its Standard Form

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c \quad \mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}$$

✓ The Derivative of a Quadratic Function

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{Q} \mathbf{x} - \mathbf{b}$$

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \mathbf{Q}$$

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2 + 4x_4^2 + 5x_1x_2 + 6x_1x_3 + 7x_1x_4 + 8x_2x_3 + 9x_2x_4 + 10x_3x_4 + 11x_1 + 12x_2 + 13x_3 + 14x_4 + 15$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \quad \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 6 & 7 \\ 5 & 4 & 8 & 9 \\ 6 & 8 & 6 & 10 \\ 7 & 9 & 10 & 8 \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} -11 \\ -12 \\ -13 \\ -14 \end{bmatrix}$$

symmetric

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} + 15$$

2.3 矩阵的正定、半正定、负定、半负定、不定性质与判定

设矩阵 $A \in \mathcal{R}^{n \times n}$, $A = A^T$, 则

	$\forall \mathbf{d} \in \mathcal{R}^n$	总有	则称 A 为	记
①	$\mathbf{d} \neq \mathbf{0}$	$\mathbf{d}^T A \mathbf{d} > 0$	正定矩阵	$A > 0$
②		$\mathbf{d}^T A \mathbf{d} \geq 0$	半正定矩阵	$A \geq 0$
③	$\mathbf{d} \neq \mathbf{0}$	$\mathbf{d}^T A \mathbf{d} < 0$	负定矩阵	$A < 0$
④		$\mathbf{d}^T A \mathbf{d} \leq 0$	半负定矩阵	$A \leq 0$
⑤	其它		不定矩阵	

Hesse矩阵的正定、半正定、负定、半负定、不定性质与判定

$f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$, $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$, $f \in C^2$, $H(\mathbf{x}) = \nabla^2 f(\mathbf{x})$

	$\forall \mathbf{d} \in \mathcal{R}^n$	总有	则称 $H(\mathbf{x})$ 为	记
①	$\mathbf{d} \neq \mathbf{0}$	$\mathbf{d}^T H(\mathbf{x}) \mathbf{d} > 0$	正定矩阵	$H(\mathbf{x}) > 0$
②		$\mathbf{d}^T H(\mathbf{x}) \mathbf{d} \geq 0$	半正定矩阵	$H(\mathbf{x}) \geq 0$
③	$\mathbf{d} \neq \mathbf{0}$	$\mathbf{d}^T H(\mathbf{x}) \mathbf{d} < 0$	负定矩阵	$H(\mathbf{x}) < 0$
④		$\mathbf{d}^T H(\mathbf{x}) \mathbf{d} \leq 0$	半负定矩阵	$H(\mathbf{x}) \leq 0$
⑤	其它		不定矩阵	

$f: \mathcal{D} \subset \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$, 若存在常数 $c > 0$, $\forall \mathbf{d} \in \mathcal{R}^n, \mathbf{x} \in \mathcal{D}$, 有 $\mathbf{d}^T H(\mathbf{x}) \mathbf{d} \geq c \|\mathbf{d}\|^2$, 称 $H(\mathbf{x})$ 在 \mathcal{D} 上是一致正定的

如何判定 n 阶对称矩阵 A 为正（负）定矩阵？

方法一：特征值

设 $\lambda_i, i = 1, 2, \dots, n$ 是矩阵 A 的特征值

- ① $\lambda_i > 0, i = 1, 2, \dots, n$, 则矩阵 A 是正定的, $A > 0$
- ② $\lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, n$, 则矩阵 A 是半正定的, $A \geq 0$
- ③ $\lambda_i < 0, i = 1, 2, \dots, n$, 则矩阵 A 是负定的, $A < 0$
- ④ $\lambda_i \leq 0, i = 1, 2, \dots, n$, 则矩阵 A 是半负定的, $A \leq 0$
- ⑤ 否则, 矩阵 A 是不定的

如何判定 n 阶对称矩阵 A 为正（负）定矩阵？

方法二：主子式 $A^T = A$

- ① A 各阶顺序主子式都大于0, 则 $A > 0$
- ② A 所有的主子式都是非负的, 则 $A \geq 0$
- ③ A 各阶顺序主子式负正相间, 则 $A < 0$
- ④ A 的所有奇数阶主子式都非正、偶数阶主子式都非负, 则 $A \leq 0$
- ⑤ 否则, 矩阵 A 是不定的

例 判定 $f(x) = -x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_1x_2 + 2x_1 - 2x_2 + 1$ 的Hesse矩阵是否为正定矩阵?

$$H = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

顺序主子式: $\Delta_1 = -2 < 0$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = -5 < 0$$

$$\Delta_3 = \begin{vmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{vmatrix} = -10 < 0$$

H 不定矩阵

例 判定 $f(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_1x_2 + 2x_1x_3 + 2x_1 - 2x_2 + 1$ 的Hesse矩阵是否为正定矩阵?

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

一阶主子式: $\Delta_{11} = 2 > 0, \Delta_{22} = 2 > 0, \Delta_{33} = 2 > 0$

二阶主子式: $\begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} = 4 > 0, \begin{vmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{vmatrix} = 0, \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 3 > 0$

三阶主子式: $\Delta_3 = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \end{vmatrix} = -2 < 0$

H 不定矩阵



M05M11084 最优化理论、算法与应用

2 理论基础

1. 导数定义及运算法则
2. 梯度信息
3. 泰勒展开与函数逼近
4. 极值点与平稳点
5. 凸集、凸函数与凸优化
6. 优化问题的最优性条件
7. 下降方向的判定

一元实函数的Taylor展开式

设 $f: \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}$, $x \in \mathcal{R}$, f 在点 x 的某邻域内具有 K 阶连续导数（整数 $K \geq 1$ ），
则 $f(x + \delta)$ 在点 x 处的 K 阶 Taylor 展开式

$$f(x + \delta) = f(x) + f'(x)\delta + \frac{f''(x)}{2!}\delta^2 + \cdots + \frac{f^{(K)}(x)}{K!}\delta^K + o(\delta^K)$$

式中， $o(\delta^K)$ 是关于 δ^K 的高阶无穷小

多元实函数的一阶与二阶Taylor展开式

设 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$, $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$, f 在点 \mathbf{x} 的某邻域内一阶连续可导，则 $f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\delta})$ 在点 \mathbf{x} 处
的一阶 Taylor 展开式

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\delta}) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\delta} + o(\|\boldsymbol{\delta}\|)$$

式中， $o(\|\boldsymbol{\delta}\|)$ 是关于 $\|\boldsymbol{\delta}\|$ 的高阶无穷小

f 在点 \mathbf{x} 的某邻域内二阶连续可导，则 $f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\delta})$ 在点 \mathbf{x} 处的二阶 Taylor 展开式

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\delta}) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\delta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\delta}^T H(\mathbf{x}) \boldsymbol{\delta} + o(\|\boldsymbol{\delta}\|^2)$$

式中， $o(\|\boldsymbol{\delta}\|^2)$ 是关于 $\|\boldsymbol{\delta}\|^2$ 的高阶无穷小

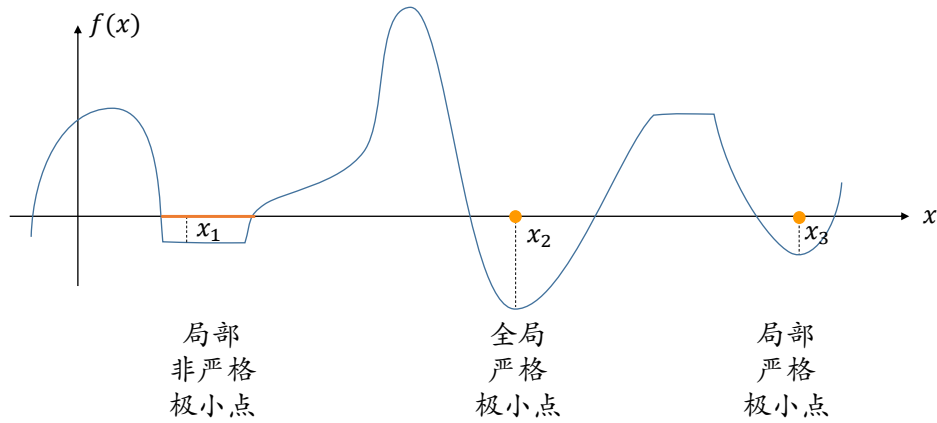
$$\text{2-范数 } \|\mathbf{x}\| = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

- 1.导数定义及运算法则
- 2. 梯度信息
- 3. 泰勒展开与函数逼近
- 4. 极值点与平稳点
- 5. 凸集、凸函数与凸优化
- 6.优化问题的最优性条件
- 7. 下降方向的判定

极值点

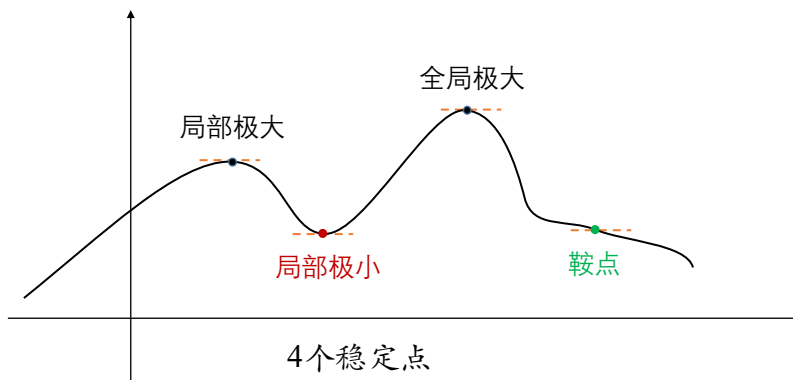
设 $f:\mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$, $X \subseteq \mathcal{R}^n$ 有

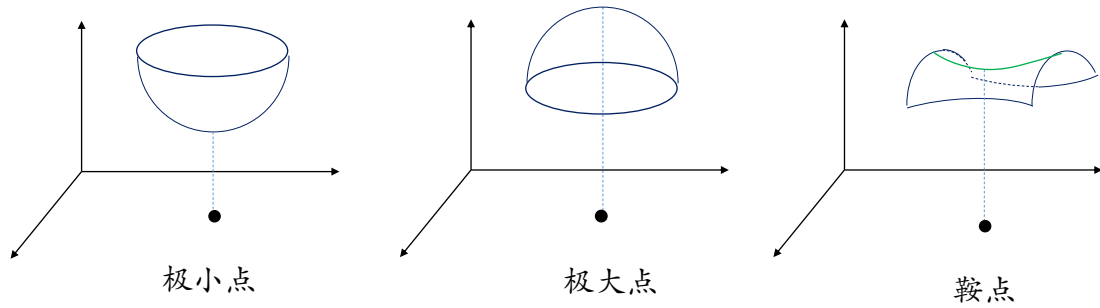
情况	条件		称	
	$\forall \mathbf{x} \in X$	$\exists \mathbf{x}^* \in X$	\mathbf{x}^* 极小点	$f(\mathbf{x}^*)$ 极小值
①		$f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$	全局	全局
②	$\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$	$f(\mathbf{x}^*) < f(\mathbf{x})$	严格全局	严格全局
③	$\ \mathbf{x} - \mathbf{x}^*\ < \varepsilon$	$f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$	局部	局部
④	$\varepsilon > 0$	$\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$ $f(\mathbf{x}^*) < f(\mathbf{x})$	严格局部	严格局部



稳定点

设 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$, $X \subseteq \mathcal{R}^n$, $\tilde{\mathbf{x}} \in X$, 在点 $\tilde{\mathbf{x}}$ 处梯度 $\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{x}})$ 存在, 若 $\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{x}}) = \mathbf{0}$, 则称 $\tilde{\mathbf{x}}$ 是函数 f 的稳定点或驻点





1. 导数定义及运算法则

2. 梯度信息

3. 泰勒展开与函数逼近

4. 极值点与平稳点

5. 凸集、凸函数与凸优化

6. 优化问题的最优性条件

7. 下降方向的判定

5.1 凸集

5.2 凸函数

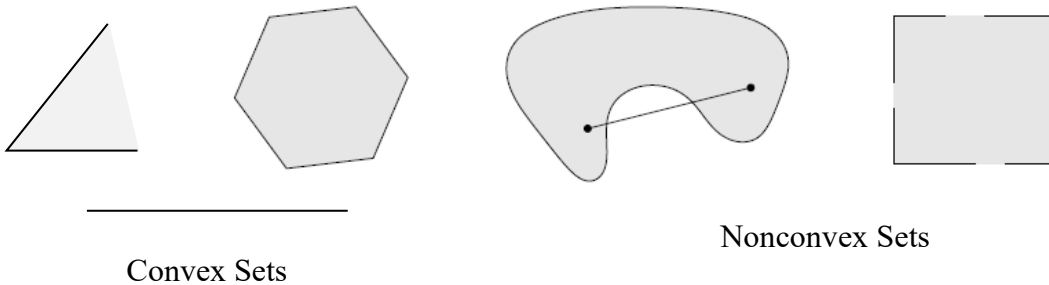
5.3 凸函数的判别定理

5.4 凸优化问题

5.1 凸集

设集合 $X \subset \mathcal{R}^n$. 若对任意的 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in X$ 及任意的实数 $\lambda \in [0, 1]$, 都有 $\lambda \mathbf{x} + (1 - \lambda) \mathbf{y} \in X$, 则集合 X 为凸集.

凸集的几何意义: 对非空集合 $X \subset \mathcal{R}^n$, 若连接其中任意两点的线段仍属于该集合, 则称该集合 X 为凸集.



凸集的基本性质

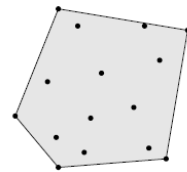
设 D, D_1, D_2 是凸集, α 是一实数, 那么

- (1) $\alpha D = \{\mathbf{y} | \mathbf{y} = \alpha \mathbf{x}, \mathbf{x} \in D\}$ 是凸集.
- (2) 交集 $D_1 \cap D_2$ 是凸集.
- (3) 和集 $D_1 + D_2 = \{\mathbf{z} | \mathbf{z} = \mathbf{x} + \mathbf{y}, \mathbf{x} \in D_1, \mathbf{y} \in D_2\}$ 也是凸集.
- (4) 差集 $D_1 - D_2 = \{\mathbf{z} | \mathbf{z} = \mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{x} \in D_1, \mathbf{y} \in D_2\}$ 也是凸集.

例 n 维欧氏空间中的 m 个点的凸组合是一个凸集. 即集合

$$\left\{ \mathbf{x} = \sum_{i=1}^m \alpha_i \mathbf{x}_i \mid \mathbf{x}_i \in \mathcal{R}^n, \alpha_i \geq 0, \sum_{i=1}^m \alpha_i = 1 \right\}$$

是凸集.



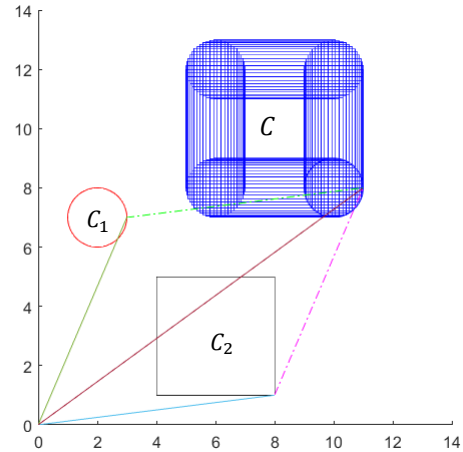
例：集合的和与差

$$C = C_1 + C_2 = \{z \in \mathbb{R}^2 | z = x + y, x \in C_1, y \in C_2\}$$

$$C_1 = \{x \in \mathbb{R}^2 | (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 7)^2 = 1\}$$

$$C_2 = \{x \in \mathbb{R}^2 | 4 \leq x_1 \leq 8, 1 \leq x_2 \leq 5\}$$

$$C_2 = C - C_1$$



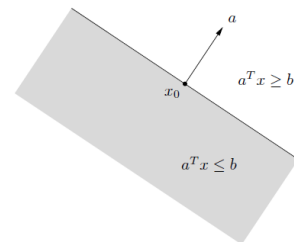
例 n 维欧氏空间中的超平面 $H \triangleq \{x | a^T x = b\}$ 是一个凸集, 其中 $b \in \mathbb{R}, a \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ 是超平面的法向量. 此外, 下面的四个半空间都是凸集.

(1) 正的闭半空间 $H^+ \triangleq \{x | a^T x \geq b\}$

(2) 负的闭半空间 $H^- \triangleq \{x | a^T x \leq b\}$

(3) 正的开半空间 $\dot{H}^+ \triangleq \{x | a^T x > b\}$

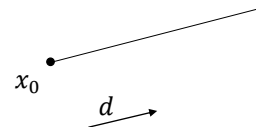
(4) 负的开半空间 $\dot{H}^- \triangleq \{x | a^T x < b\}$



例 以 $x_0 \in \mathbb{R}^n$ 为起点, $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ 为方向的射线

$$r(x_0; d) \triangleq \{x \in \mathbb{R}^n | x = x_0 + \alpha d, \alpha \geq 0\}$$

是凸集

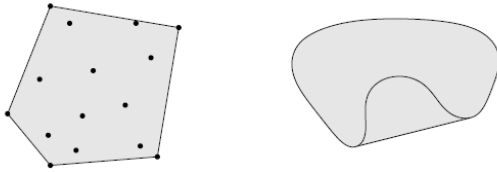


凸包

集合 $\mathcal{D} \subset \mathcal{R}^n$ 的凸包(convex hull) 是指所有包含 \mathcal{D} 的凸集的交集, 记为

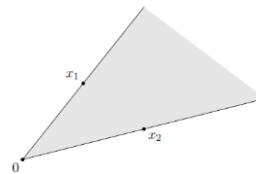
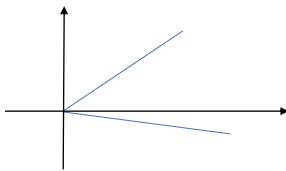
$$\text{conv}(\mathcal{D}) \triangleq \bigcap_{\mathcal{G} \supseteq \mathcal{D}} \mathcal{G}$$

其中 \mathcal{G} 为凸集



锥与凸锥

设非空集合 $\mathcal{G} \subset \mathcal{R}^n$. 若对任意的 $x \in \mathcal{G}$ 和任意的实数 $\lambda \geq 0$, 有 $\lambda x \in \mathcal{G}$, 则称 \mathcal{G} 为一个锥(cone, nonnegative homogeneous). $\mathbf{0} \in \mathcal{G}$



若锥 \mathcal{G} 是凸集, 称 \mathcal{G} 为凸锥(convex cone)



例 多面体 $\{\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n | \mathbf{Ax} \geq 0\}$ 是凸锥, 通常称之为多面锥(polyhedral cone)

例 集合

$$\mathcal{R}_+^n \triangleq \{\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n | x_i \geq 0, i = 1, \dots, n\}$$

是凸锥, 通常称之为非负锥(nonnegative cone).

n 维正实数集是凸集

$$\mathcal{R}_{++}^n \triangleq \{\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n | x_i > 0, i = 1, \dots, n\}$$

5.2 凸函数

设函数 $f: \mathcal{D} \subset \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$, \mathcal{D} 为凸集

(1) f 是 \mathcal{D} 上的凸函数, $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{D}$ 及 $\forall \lambda \in [0, 1]$, 有

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

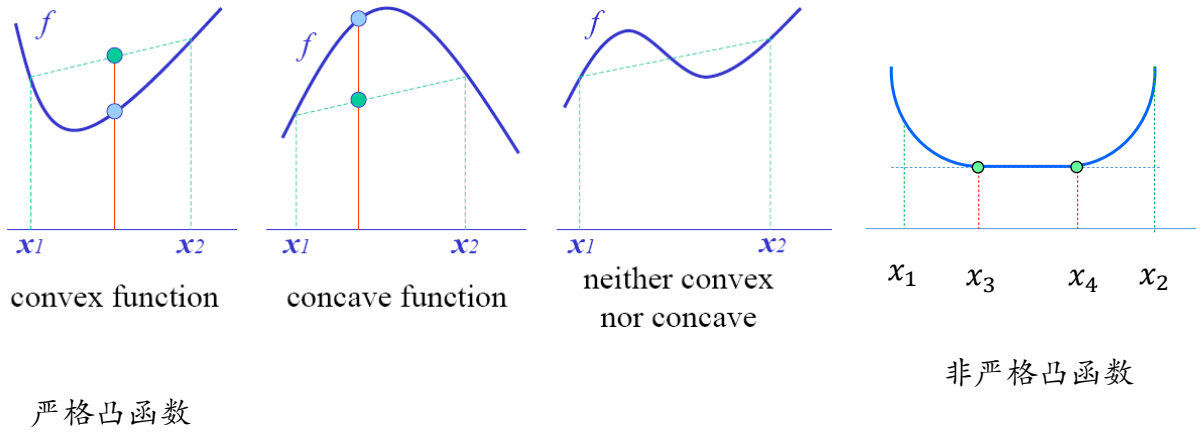


(2) f 是 \mathcal{D} 上的严格凸函数, $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{D}$, $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ 及 $\forall \lambda \in [0, 1]$, 有

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

(3) f 是 \mathcal{D} 上的一致凸函数, \exists 常数 $\gamma > 0$, 使 $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{D}$ 及 $\forall \lambda \in [0, 1]$, 有

$$f(\lambda \mathbf{x} + (1 - \lambda)\mathbf{y}) + \frac{1}{2}\lambda(1 - \lambda)\gamma\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 \leq \lambda f(\mathbf{x}) + (1 - \lambda)f(\mathbf{y})$$



凸函数的基本性质

设 $f_i, i = 1, 2, \dots, n$ 都是凸集 \mathcal{D} 上的凸函数, $c_i \in \mathcal{R}^+, i = 1, 2, \dots, n, \alpha \in \mathcal{R}$, 则有 $\sum_{i=1}^n c_i f_i(x)$ 是 \mathcal{D} 上的凸函数

设 f 都是凸集 \mathcal{D} 上的凸函数, $\alpha \in \mathcal{R}$

(下) 水平集

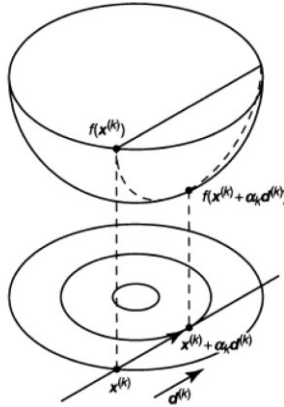
$$\mathcal{L}(f, \alpha) \triangleq \{x | x \in \mathcal{D}, f(x) \leq \alpha\}$$

是凸集

函数是凸的 \Leftrightarrow 函数在与其定义域相交的任何直线上都是凸的

✓ 考虑函数 $f(x)$, $g(t) = f(x + td)$, $g(t)$ 是凸函数 $\Leftrightarrow f(x)$ 是凸函数

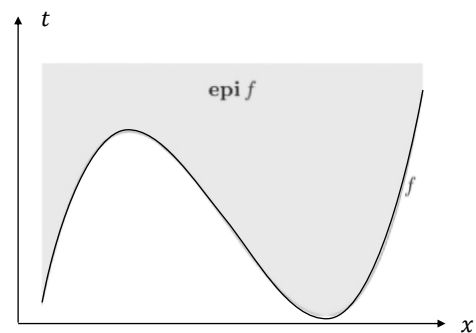
例: $\min_{x \in \mathcal{R}^n} f(x) \xrightarrow{\text{给定点 } x^k \text{ 和方向 } d^k} \min_{\alpha > 0} \phi(\alpha) = f(x^k + \alpha d^k)$



函数的上境图 epigraph

$$\text{epi } f = \{(x, t) | x \in \text{dom } f, f(x) \leq t\} \subset \mathcal{R}^{n+1}$$

f 是凸函数 $\Leftrightarrow \text{epi } f$ 是凸集



5.3 凸函数的判别定理

一阶判定条件

设 f 在凸集 $\mathcal{D} \subset \mathcal{R}^n$ 上一阶连续可微, 则

(1) f 在 \mathcal{D} 上为凸函数的充要条件是

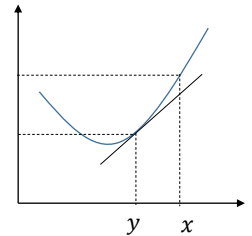
$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{y}) + \nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{D}$$

(2) f 在 \mathcal{D} 上严格凸的充要条件是

$$f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{y}) + \nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{D}, \mathbf{x} \neq \mathbf{y}$$

(3) f 在 \mathcal{D} 上一致凸的充要条件是, 存在常数 $m > 0$

$$f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{y}) + \nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}) + m\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{D}$$



证明: (1) 必要性

f 在 \mathcal{D} 上为凸函数, 从定义出发, $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{D}, \alpha \in (0, 1)$

$$f(\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}) = f(\mathbf{y} + \alpha(\mathbf{x} - \mathbf{y})) \leq \alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{y})$$

在 \mathbf{y} 处作一阶Taylor展开

$$f(\mathbf{y} + \alpha(\mathbf{x} - \mathbf{y})) = f(\mathbf{y}) + \alpha \nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}) + o(\alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|)$$

当 α 充分小时,

$$f(\mathbf{y} + \alpha(\mathbf{x} - \mathbf{y})) \approx f(\mathbf{y}) + \alpha \nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \leq \alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{y})$$

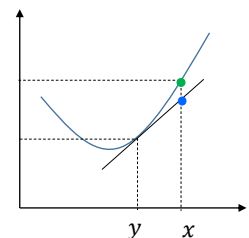
$$\alpha \nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \leq \alpha f(\mathbf{x}) - \alpha f(\mathbf{y})$$

$$\nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \leq f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})$$

$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{y}) + \nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y})$$

充分性 (略)

点 $(\mathbf{y}, f(\mathbf{y}))$ 处的切线在 \mathbf{x} 处的值
在 $(\mathbf{x}, f(\mathbf{x}))$ 的下方



×

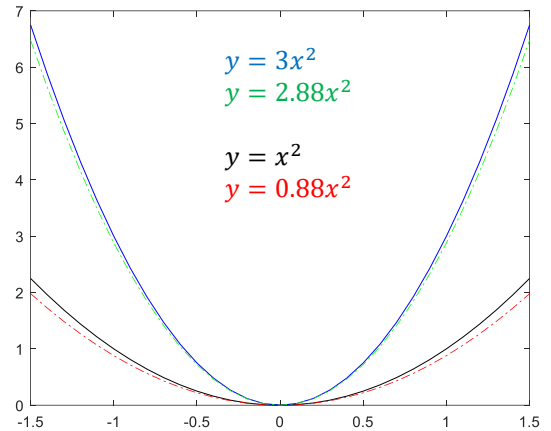
一致凸的解释

f 在 \mathcal{D} 上一致凸的充要条件是, 存在常数 $m > 0$, 使 $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{D}$, 成立

$$f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{y}) + \nabla f(\mathbf{y})^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + m\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2$$

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) - \frac{m}{2}I > 0$$

m 越大, 曲线在极小点附近越陡、
下降的越快
且在红色线之上



一致凸的解释

f 在 \mathcal{D} 上一致凹的充要条件是, 存在常数 $M > 0$, 使 $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{D}$, 成立

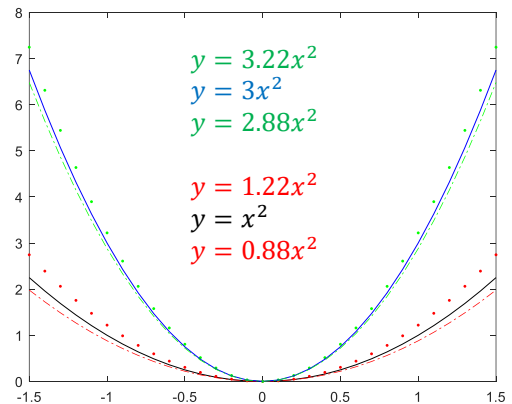
$$f(\mathbf{x}) < f(\mathbf{y}) + \nabla f(\mathbf{y})^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + M\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2$$

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) - \frac{M}{2}I < 0$$

M 越大, 曲线在极小点附近越陡、
下降的越快
且在红色线之下

一般地, 称为大 M 、小 m 条件

对函数分别提供了一个上界和一个下界



二阶判定条件

设函数 f 在凸集 $\mathcal{D} \subset \mathcal{R}^n$ 上二阶连续可微, 则

- (1) f 在 \mathcal{D} 上是凸的 充要条件 是 $\nabla^2 f(\mathbf{x}) \succeq 0, \forall \mathbf{x} \in \mathcal{D}$
- (2) f 在 \mathcal{D} 上是严格凸的 充分条件 是 $\nabla^2 f(\mathbf{x}) \succ 0, \forall \mathbf{x} \in \mathcal{D}$
- (3) f 在 \mathcal{D} 上是一致凸的 充要条件 是 $\nabla^2 f(\mathbf{x})$ 一致正定, $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{D}$

注意, $\nabla^2 f(\mathbf{x}) \succ 0$ 是 f 严格凸的充分条件而非必要条件

例 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T Q \mathbf{x}$ 是凸函数 $\Leftrightarrow \nabla^2 f(\mathbf{x}) = Q \succeq 0$

例 $f(X) = \ln \det X, X \succ 0$ 是凹函数 $\Leftrightarrow \nabla^2 f(X) = -X^{-2} \prec 0$

说明 (1) f 在 \mathcal{D} 上是凸的 $\Leftrightarrow \nabla^2 f(\mathbf{x}) \succeq 0$

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{D}, \mathbf{x} = \mathbf{y} + \alpha \mathbf{d}, \mathbf{d} = \mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{d} \neq \mathbf{0}, \alpha \in (0, 1)$$

充分性 $\Leftarrow \nabla^2 f(\mathbf{x}) \succeq 0$

$f(\mathbf{x})$ 在 \mathbf{y} 处的二阶Taylor展开

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{y}) + \nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \frac{1}{2} \alpha^2 \mathbf{d}^T \nabla^2 f(\mathbf{y}) \mathbf{d} + o(\|\alpha \mathbf{d}\|^2)$$

当 α 充分小时, $f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{y}) + \nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \frac{1}{2} \alpha^2 \mathbf{d}^T \nabla^2 f(\mathbf{y}) \mathbf{d}$

$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{y}) + \nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y})$$

必要性 f 是凸的 $\Rightarrow f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{y}) + \nabla f(\mathbf{y})^T (\mathbf{x} - \mathbf{y})$

$$\mathbf{d}^T \nabla^2 f(\mathbf{y}) \mathbf{d} \geq 0$$

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) \succeq 0$$

例 判定 $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - x_1x_2 - 4x_1 + 1$ 在 \mathcal{R}^3 是否为严格凸函数?

$$H = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

特征值: $\lambda_1 = 2 > 0$, $\lambda_2 = 3 - \sqrt{2} > 0$, $\lambda_3 = 3 + \sqrt{2} > 0$

H 是正定矩阵, $f(x)$ 是严格凸函数

例 判定 $f(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + 4x_1x_2 + 4x_1x_3 + 1$ 在 \mathcal{R}^3 上的凹凸性。

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 \\ 4 & 2 & 0 \\ 4 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

特征值: $\lambda_1 = 2 > 0$, $\lambda_2 = 2 - 4\sqrt{2} < 0$, $\lambda_3 = 2 + 4\sqrt{2} > 0$

H 是不定矩阵, $f(x)$ 既不是凸函数、也不是凹函数

例 判定 $f(x) = a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + b$ 在 \mathcal{R}^3 上的凹凸性。

其中，非零实数 $a_i \in \mathcal{R}, i = 1, 2, 3$ ，非零实数 $b \in \mathcal{R}$

$$H = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

特征值： $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0$

H 既是半正定的也是半负定矩阵， $f(x)$ 既是凸函数、也是凹函数

直线、平面既是凹集也是凸集

强凸与强光滑性

Strong Convexity

若函数 $f(x) - \frac{m}{2}\|x\|^2$ 是一个凸函数，那么 $f(x)$ 就是一个凸性量度为 m 的强凸函数

$$\begin{aligned} \nabla^2 f(x) - mI &\succeq 0 \\ MI - \nabla^2 f(x) &\succeq 0 \end{aligned} \quad M \geq \lambda(\nabla^2 f(x)) \geq m \quad \begin{array}{l} m \text{ 小于 Hesse 阵的最小特征值} \\ M \text{ 大于 Hesse 阵的最大特征值} \end{array}$$

Smoothness

如果 $\nabla f(x)$ 满足 $\forall x, y, \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\|, L > 0$ ，那么称它具有 L 的光滑性量度

其实质就是Lipschitz连续

强凸性的以下性质等价

1. f 强凸, 且凸性量度为 m
2. $(\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}))^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \geq m \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y}$
3. $\nabla^2 f(\mathbf{x}) \succeq mI, \forall \mathbf{x}$
4. $f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{m}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2$

强光滑性的以下性质等价

1. $\nabla f(\mathbf{x})$ 是 Lipschitz 连续的, 且常数为 L 。
2. $\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\| \leq L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|, L > 0, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y}$
3. $\nabla^2 f(\mathbf{x}) \preceq LI, \forall \mathbf{x}$
4. $f(\mathbf{y}) \leq f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{L}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2$

参考 Amir Beck (2017), *First-order Methods in Optimization*, Chapter 5

5.4 凸优化问题

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } c_i(\mathbf{x}) = 0, i \in \mathcal{E} \quad \mathcal{I} = \{1, 2, \dots, m_1\} \\ c_i(\mathbf{x}) \geq 0, i \in \mathcal{I} \quad \mathcal{E} = \{m_1 + 1, m_1 + 2, \dots, m_1 + m_2\} \end{aligned}$$

$$\text{可行域 } X = \left\{ \mathbf{x} \in \mathcal{R}^n \mid \begin{array}{l} c_i(\mathbf{x}) = 0, i \in \mathcal{E} \\ c_i(\mathbf{x}) \geq 0, i \in \mathcal{I} \end{array} \right\}$$

凸优化问题的定义

- 优化问题的可行域 X 是凸集
- 目标函数 $f(\mathbf{x})$ 是 X 上的凸函数

凸优化问题的判定准则

$$\begin{aligned} \text{优化问题} \quad \min f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } c_i(\mathbf{x}) = 0, i \in \mathcal{E} \\ c_i(\mathbf{x}) \geq 0, i \in \mathcal{I} \end{aligned}$$

同时满足:

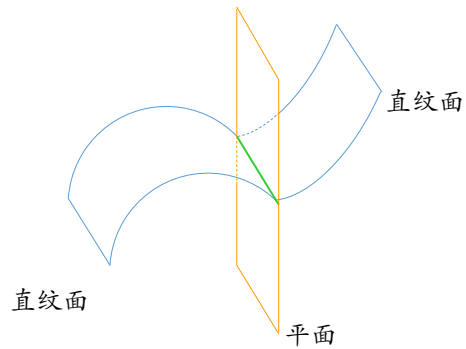
- ① 目标函数 $f(\mathbf{x})$ 为凸函数
- ② 等式约束函数 $c_i(\mathbf{x}), i \in \mathcal{E}$ 都是线性函数
- ③ 不等式约束函数 $-c_i(\mathbf{x}), i \in \mathcal{I}$ 都是凸函数

那么, 此优化问题为凸优化问题

充分条件, 不是必要条件



例 由线性等式约束和非线性等式约束的交集构成的可行域是凸集



例 判断下面的优化问题是否为凸优化问题

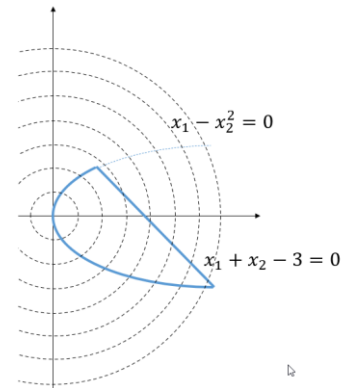
$$\min f(x) = x_1^2 + x_2^2 + 8$$

解： $H = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$ 为正定矩阵， $f(x)$ 为凸函数，可行域 $X = \mathcal{R}^2$ 为凸集

所以，该问题为凸优化问题

例 判断下面的优化问题是否为凸优化问题，并画出可行域

$$\begin{aligned} \min f(x) &= x_1^2 + x_2^2 + 8 \\ \text{s.t. } x_1 - x_2^2 &\geq 0 \\ x_1 + x_2 - 3 &\leq 0 \end{aligned}$$



解： $f(x)$ 为严格凸函数

约束函数

$$\begin{aligned} c_1(x) &= x_1 - x_2^2 \rightarrow -c_1(x) = x_2^2 - x_1 && \text{凸函数} \leftarrow H_{-c_1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ 半正定} \\ c_2(x) &= -x_1 - x_2 + 3 \rightarrow -c_2(x) = x_1 + x_2 - 3 && \text{凸函数} \leftarrow H_{-c_2} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ 半正定} \end{aligned}$$

所以，该问题为凸优化问题

说明

关于凸集、保凸运算、广义不等式、集合分离定理，以及凸函数、保凸变换等将按照Convex Optimization的第2章和第3章的内容，专门做视频详细讲解
我会发链接到群里，供大家参考

1. 导数定义及运算法则
2. 梯度信息
3. 泰勒展开与函数逼近
4. 极值点与平稳点
5. 凸集、凸函数与凸优化
6. 优化问题的最优性条件
 - 6.1 一阶条件
 - 6.2 二阶条件
7. 下降方向的判定

6.1 一阶条件

$$\begin{array}{ll} \min & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} & \mathbf{x} \in X \end{array}$$

设 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$, $\mathbf{x}^* \in X$, $f(\mathbf{x})$ 在 \mathbf{x}^* 处一阶可导. 若 \mathbf{x}^* 为 f 的局部极小点, 则对 \mathbf{x}^* 处任意可行方向 $\mathbf{d} \in \mathcal{R}^n$, 总有 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} \geq 0$

证明: 对 \mathbf{x}^* 处任意可行方向 \mathbf{d} , $\exists \gamma > 0$, 使 $\alpha \in (0, \gamma)$ 满足 $\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d} \in X$

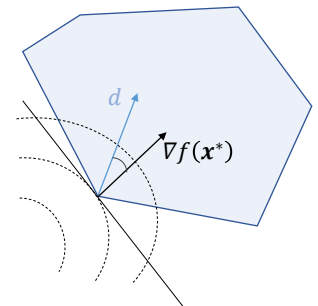
$f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d})$ 在 \mathbf{x}^* 处 Taylor 一阶展开

$$f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}^*) + \alpha \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} + o(\alpha \|\mathbf{d}\|)$$

当 α 充分小时, 有

$$f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}^*) \approx \alpha \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} \geq 0$$

\mathbf{x}^* 为 f 的局部极小点



设 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}, \mathbf{x}^* \in \text{int } X, f(\mathbf{x})$ 在 \mathbf{x}^* 处一阶可导. 若 \mathbf{x}^* 为 f 的局部极小点, 则 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$.
内点

证明: 反证法

设 $\nabla f(\mathbf{x}^*) \neq \mathbf{0}$, 取 $\mathbf{d} = -\nabla f(\mathbf{x}^*)$, 则

$$\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} = -\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \nabla f(\mathbf{x}^*) = -\|\nabla f(\mathbf{x}^*)\|^2 < 0$$

所以, $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$

对无约束优化问题, $f(\mathbf{x})$ 在 \mathbf{x}^* 处一阶可导. 若 \mathbf{x}^* 为 f 的局部极小点, 则 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$
 $X = \mathcal{R}^n$

设 $f(\mathbf{x})$ 在开集 $X \subset \mathcal{R}^n$ 上一阶连续可微. 若 $\mathbf{x}^* \in X$ 是一个局部极小点, 则 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$

对开集 X , $\text{int } X = X$

全局极小点的充要条件

设 $f(\mathbf{x})$ 在 \mathcal{R}^n 上是凸函数并且是一阶连续可微的. $\mathbf{x}^* \in \mathcal{R}^n$ 是 $\min f(\mathbf{x})$ 的全局极小点的充要条件是 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$

证 只需证明充分性, 必要性是显然的.

设 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$. 由凸函数的判别定理, 可得

$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*) + \nabla f(\mathbf{x}^*)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) = f(\mathbf{x}^*),$$

$$\forall \mathbf{x}^* \in \mathcal{R}^n$$

这表明 \mathbf{x}^* 是全局极小点.

6.2 二阶条件

设 $f(\mathbf{x})$ 在开集 $X \subset \mathcal{R}^n$ 上二阶连续可微. 若 $\mathbf{x}^* \in X$ 是优化问题的一个局部极小点, 则必有 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ 且 $H(\mathbf{x}^*) \geq 0$

证 设 \mathbf{x}^* 是一局部极小点, 那么, $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$

下面证明 $H(\mathbf{x}^*) \geq 0$

任取 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d} \in \mathcal{D}$, $\alpha > 0$, $\mathbf{d} \in \mathcal{R}^n$

由泰勒展开式, 得

$$\begin{aligned} 0 \leq f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^*) &= \frac{1}{2} \alpha^2 \mathbf{d}^T H(\mathbf{x}^*) \mathbf{d} + o(\alpha^2) \\ 0 \leq \mathbf{d}^T H(\mathbf{x}^*) \mathbf{d} + \frac{o(2\alpha^2)}{\alpha^2} \end{aligned}$$

对上式令 $\alpha \rightarrow 0$, 得 $\mathbf{d}^T H(\mathbf{x}^*) \mathbf{d} \geq 0$, $H(\mathbf{x}^*) \geq 0$

二阶充分条件

设 $f(\mathbf{x})$ 在开集 $X \subset \mathcal{R}^n$ 上二阶连续可微. 若 $\mathbf{x}^* \in X$ 满足 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ 及 $H(\mathbf{x}^*) > 0$, 则 \mathbf{x}^* 是优化问题的一个局部极小点

证 任取 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d} \in X$, $\alpha > 0$, $\mathbf{d} \in \mathcal{R}^n$

由泰勒公式得

$$f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}^*) + \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} + \frac{1}{2} \alpha^2 \mathbf{d}^T H(\mathbf{x}^* + \theta \alpha \mathbf{d}) \mathbf{d} \quad \theta \in (0,1)$$

注意, $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$

$H(\mathbf{x}^*) > 0$ 和 f 二阶连续可微, 故存在 $\delta > 0$

使 $H(\mathbf{x}^* + \theta \alpha \mathbf{d}) > 0$ 在 $\|\theta \alpha \mathbf{d}\| < \delta$ 范围内

因此

$$f(\mathbf{x}^* + \alpha \mathbf{d}) > f(\mathbf{x}^*)$$

1. 导数定义及运算法则
2. 梯度信息
3. 泰勒展开与函数逼近
4. 极值点与平稳点
5. 凸集、凸函数与凸优化
6. 优化问题的最优性条件
7. 下降方向的判定

设 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}, \mathbf{x}^{(k)} \in X$, 开集 $X \subseteq \mathcal{R}^n$, $f(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x}^{(k)}$ 处一阶可导, 则 $f(\mathbf{x})$ 在点 $\mathbf{x}^{(k)}$ 的搜索方向 $\mathbf{d}^{(k)} \in \mathcal{R}^n$ 是下降方向的充分条件是 $\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d}^{(k)} < 0$

证明: $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha \mathbf{d}^{(k)} \in X, \alpha > 0$

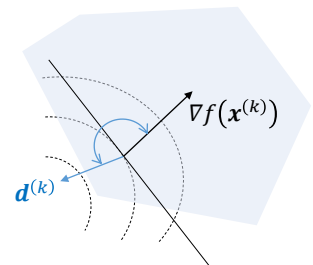
$f(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha \mathbf{d}^{(k)})$ 在 $\mathbf{x}^{(k)}$ 处 Taylor 一阶展开

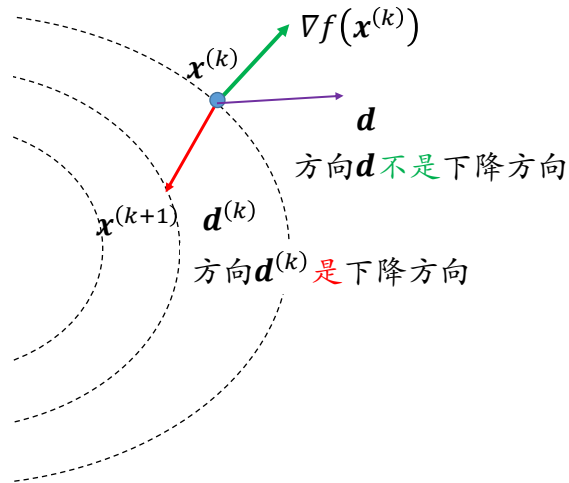
$$f(\mathbf{x}^{(k+1)}) = f(\mathbf{x}^{(k)}) + \alpha \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d}^{(k)} + o(\alpha \|\mathbf{d}^{(k)}\|)$$

当 α 充分小时, $\alpha > 0$, 有

$$f(\mathbf{x}^{(k+1)}) - f(\mathbf{x}^{(k)}) \approx \alpha \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d}^{(k)} < 0 \rightarrow \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{d}^{(k)} < 0$$

所以, $\mathbf{d}^{(k)}$ 是下降方向





习题1

2. 判断下列函数为凸(凹) 函数或严格凸(凹) 函数:

(4) $f(\mathbf{x}) = 2x_1^2 + x_2^2 + 2x_3^2 + x_1x_2 - 3x_1x_3 + x_1 - x_3, \mathbf{x} \in \mathcal{R}^3$

3. 证明: $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T Q \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$ 为严格凸函数当且仅当 Hessian 矩阵 Q 正定.

11. 设 $A \in \mathcal{R}^{m \times n}, \mathbf{b} \in \mathcal{R}^m, f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2$. 试给出无约束优化问题

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n} f(\mathbf{x})$$

的一阶最优性条件, 并验证该条件是否是充分的, 它的最优解是否唯一.

12. 设 $A \in \mathcal{R}^{n \times n}, \mathbf{b} \in \mathcal{R}^n, f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T A \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$. 试给出无约束优化问题

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n} f(\mathbf{x})$$

的最优性条件.

下载安装matlab
CVX

习题课

$$3. f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T Q \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = Q\mathbf{x} - \mathbf{b}$$

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = Q$$

定理9 设 $f(\mathbf{x})$ 在 \mathcal{R}^n 上是凸函数并且是一阶连续可微的. 则 $\mathbf{x}^* \in \mathcal{R}^n$ 是(1.14) 的全局极小点的充要条件是 $\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$.

$$11. f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2 = (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})$$

$$\text{设 } \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} - \mathbf{b}, D\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}$$

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{h}(\mathbf{x})^T \mathbf{h}(\mathbf{x})$$

$$Df(\mathbf{x}) = \mathbf{h}(\mathbf{x})^T D\mathbf{h}(\mathbf{x}) + \mathbf{h}(\mathbf{x})^T D\mathbf{h}(\mathbf{x})$$

$$= 2(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T \mathbf{A}$$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = Df(\mathbf{x})^T$$

$$= 2\mathbf{A}^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})$$

$$= 2(\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{A}^T \mathbf{b})$$

$$\begin{aligned} h(\mathbf{x}) &= \mathbf{f}(\mathbf{x})^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) \\ Dh(\mathbf{x}) &= \mathbf{f}(\mathbf{x})^T D\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{g}(\mathbf{x})^T D\mathbf{f}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

$$\text{令 } \nabla f(\mathbf{x}) = 2(\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{A}^T \mathbf{b}) = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{A}^T \mathbf{b} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$$

$$\mathbf{x}^* = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b}$$



An alternative method of arriving at the least-squares solution is to proceed as follows.

$$f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2 = (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T (2\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \mathbf{x} - \mathbf{x}^T (2\mathbf{A}^T \mathbf{b}) + \mathbf{b}^T \mathbf{b}$$

Therefore, f is a quadratic function. The quadratic term is positive definite because $\text{rank } \mathbf{A} = n$.

Thus, the unique minimizer of f is obtained by solving the FONC

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{x}) &= (2\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \mathbf{x} - (2\mathbf{A}^T \mathbf{b}) = 0 \\ \mathbf{x}^* &= (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b} \end{aligned}$$

11.

Theorem 12.1 The unique vector \mathbf{x}^* that minimizes $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2$ is given by the solution to the equation $\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$; that is, $\mathbf{x}^* = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b}$.

Proof. Let $\mathbf{x}^* = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b}$.

$$\begin{aligned} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2 &= \|\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + (\mathbf{Ax}^* - \mathbf{b})\|^2 \\ &= [\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + (\mathbf{Ax}^* - \mathbf{b})]^T [\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + (\mathbf{Ax}^* - \mathbf{b})] \\ &= \|\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)\|^2 + \|\mathbf{Ax}^* - \mathbf{b}\|^2 + 2[\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)]^T (\mathbf{Ax}^* - \mathbf{b}) \\ &\quad \rightarrow [\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)]^T (\mathbf{Ax}^* - \mathbf{b}) \\ &= (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T \mathbf{A}^T [\mathbf{A}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T - \mathbf{I}_n] \mathbf{b} \\ &= (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T [(\mathbf{A}^T \mathbf{A})(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T - \mathbf{A}^T] \mathbf{b} \\ &= (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T [\mathbf{A}^T - \mathbf{A}^T] \mathbf{b} \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)\|^2 + \|\mathbf{Ax}^* - \mathbf{b}\|^2$$

If $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$, then $\|\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)\|^2 > 0$, because $\text{rank } \mathbf{A} = n$.

Thus, if $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$, we have

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2 > \|\mathbf{Ax}^* - \mathbf{b}\|^2$$

Thus, $\mathbf{x}^* = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b}$ is the unique minimizer of $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2$.

12. $f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T \boldsymbol{x}$

$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} = \mathbf{0}$

$\boldsymbol{A} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$

$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{A}^{-1} \boldsymbol{b}$

- 第一定义 (基本定义)
- 第二定义 (函数值法)
- 一阶条件 (梯度法)
- 二阶条件 (Hesse 矩阵法)

$\text{epi } f$

第一定义

凸函数：
设函数 $f(x)$ 在凸集 D 上有定义，如果对 $\forall x, y \in D \ \forall \lambda \in [0, 1]$
有 $f(\lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y)$ ，则称 $f(\cdot)$
严格凸函数：
设函数 $f(x)$ 在凸集 D 上有定义，如果对 $\forall x, y \in D$
有 $f(\lambda x + (1-\lambda)y) < \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y)$ ，则称 $f(\cdot)$

二阶条件

设 $f(x)$ 为定义在非空开凸集 D 上二阶可微函数， $D \subset \mathbb{R}^n$ ，则
(1) $f(x)$ 为 D 上凸函数 \Leftrightarrow Hesse 矩阵 $\nabla^2 f(x)$ 为半正定阵
(1) $f(x)$ 为 D 上严格凸函数 \Rightarrow Hesse 矩阵 $\nabla^2 f(x)$ 为半正定阵
 $f(x)$ 为 D 上严格凸函数 \Leftarrow Hesse 矩阵 $\nabla^2 f(x)$ 为正定阵

第二定义

函数 $f(x)$ 是 \mathbb{R}^n 上凸函数的充要条件为对 $\forall x, y \in \mathbb{R}^n$ ，单变量函数
 $\varphi(\alpha) = f(x + \alpha y)$ 是关于 α 的凸函数

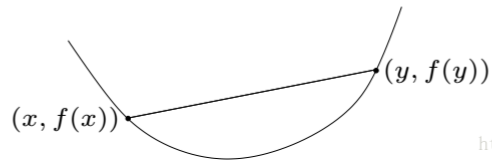
一阶条件

设 $f(x)$ 为定义在非空开凸集 D 上可微函数， $D \subset \mathbb{R}^n$ ，则
(1) $f(x)$ 为 D 上凸函数 $\Leftrightarrow f(y) \geq f(x) + \nabla f^T(x)(y-x), \forall x, y \in D$
(1) $f(x)$ 为 D 上严格凸函数 $\Leftrightarrow f(y) > f(x) + \nabla f^T(x)(y-x), \forall x, y \in D, x \neq y$

$f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ is convex if $\text{dom } f$ is a convex set and

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

for all $x, y \in \text{dom } f$, $0 \leq \theta \leq 1$



<https://blog.csdn.net/itnerd>

$f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ is convex if and only if the function $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$,

$$g(t) = f(x + tv), \quad \text{dom } g = \{t | x + tv \in \text{dom } f\}$$

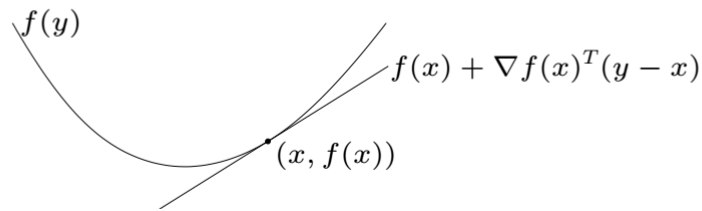
is convex (in t) for any $x \in \text{dom } f$, $v \in \mathbb{R}^n$

can check convexity of f by checking convexity of functions of one variable

<https://blog.csdn.net/itnerd>

1st-order condition: differentiable f with convex domain is convex iff

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) \quad \text{for all } x, y \in \text{dom } f$$



first-order approximation of f is global underestimator <https://blog.csdn.net/itnerd>

2nd-order conditions: for twice differentiable f with convex domain

- f is convex if and only if

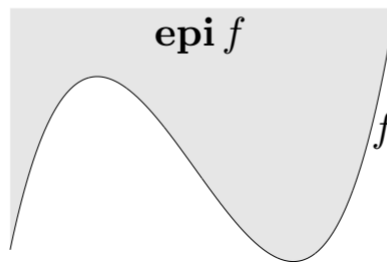
$$\nabla^2 f(x) \succeq 0 \quad \text{for all } x \in \text{dom } f$$

- if $\nabla^2 f(x) \succ 0$ for all $x \in \text{dom } f$, then f is strictly convex <https://blog.csdn.net/itnerd>

epigraph of $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\text{epi } f = \{(x, t) \in \mathbb{R}^{n+1} | x \in \text{dom } f, f(x) \leq t\}$$

f is convex if and only if $\text{epi } f$ is a convex set



<https://blog.csdn.net/itnerd>

梯度是单调的

- A mapping $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ is monotone if

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

- A mapping $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ is uniformly monotone if there exists a constant $c > 0$ such that

$$\langle F(x) - F(y), x - y \rangle \geq c \|x - y\|^2, \quad x, y \in \mathbb{R}^n.$$

- Suppose that $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ is differentiable, then $f(x)$ is convex if and only if $\nabla f(x)$ is monotone.

<https://blog.csdn.net/itnerd>

保凸运算

show that f is obtained from simple convex functions by operations that preserve convexity

- nonnegative weighted sum
- composition with affine function
- pointwise maximum and supremum
- composition
- minimization
- perspective

<https://blog.csdn.net/itnerd>

复合仿射映射

nonnegative multiple: αf is convex if f is convex, $\alpha \geq 0$

sum: $f_1 + f_2$ convex if f_1, f_2 convex (extends to infinite sums, integrals)

composition with affine function: $f(Ax + b)$ is convex if f is convex

examples

- log barrier for linear inequalities

$$f(x) = -\sum_{i=1}^m \log(b_i - a_i^T x), \quad \text{dom } f = \{x | a_i^T x < b_i, i = 1, \dots, m\}$$

- (any) norm of affine function: $f(x) = \|Ax + b\|$

<https://blog.csdn.net/itnerd>

逐点最大

if f_1, \dots, f_m are convex, then $f(x) = \max\{f_1(x), \dots, f_m(x)\}$ is convex

examples

- piecewise-linear function: $f(x) = \max_{i=1, \dots, m} (a_i^T x + b_i)$ is convex
- sum of r largest components of $x \in \mathbb{R}^n$:

$$f(x) = x_{[1]} + x_{[2]} + \dots + x_{[r]}$$

is convex ($x_{[i]}$ is i th largest component of x)

proof:

$$f(x) = \max\{x_{i_1} + x_{i_2} + \dots + x_{i_r} \mid 1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_r \leq n\}$$

逐点上确界

if $f(x, y)$ is convex in x for each $y \in \mathcal{A}$, then

$$g(x) = \sup_{y \in \mathcal{A}} f(x, y)$$

is convex

examples

- support function of a set C : $S_C(x) = \sup_{y \in C} y^T x$ is convex
- distance to farthest point in a set C :

$$f(x) = \sup_{y \in C} \|x - y\|$$

复合函数

composition of $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ and $h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$:

$$f(x) = h(g(x))$$

f is convex if $\begin{array}{l} g \text{ convex, } h \text{ convex, } \tilde{h} \text{ nondecreasing} \\ g \text{ concave, } h \text{ convex, } \tilde{h} \text{ nonincreasing} \end{array}$

- proof (for $n = 1$, differentiable g, h)

$$f''(x) = h''(g(x))g'(x)^2 + h'(g(x))g''(x)$$

- note: monotonicity must hold for extended-value extension \tilde{h}

composition of $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^k$ and $h : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$:

$$f(x) = h(g(x)) = h(g_1(x), g_2(x), \dots, g_k(x))$$

f is convex if $\begin{array}{l} g_i \text{ convex, } h \text{ convex, } \tilde{h} \text{ nondecreasing in each argument} \\ g_i \text{ concave, } h \text{ convex, } \tilde{h} \text{ nonincreasing in each argument} \end{array}$

proof (for $n = 1$, differentiable g, h)

$$f''(x) = g'(x)^T \nabla^2 h(g(x)) g'(x) + \nabla h(g(x))^T g''(x)$$

if $f(x, y)$ is convex in (x, y) and C is a convex set, then

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

is convex

<https://blog.csdn.net/itnerd>

the **perspective** of a function $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ is the function
 $g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$,

$$g(x, t) = tf(x/t), \quad \text{dom } g = \{(x, t) | x/t \in \text{dom } f, t > 0\}$$

g is convex if f is convex

<https://blog.csdn.net/itnerd>

保凸运算: 透视函数

给定函数 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$, 则它的透视函数 $g: \mathcal{R}^{n+1} \rightarrow \mathcal{R}$ 定义为

$$g(x, t) = tf\left(\frac{x}{t}\right)$$

透视函数是保凸(凹)运算

这里的 t 代表透视面在 y 上的坐标

