



北京交通大学

2021-2022学年第一学期全校研究生公共课

最优化方法 I

Optimization Methods I

主讲教师：孔令臣 lchkong@bjtu.edu.cn

助教：邢相茹 21118025@bjtu.edu.cn



主要内容与成绩评定

主要内容:

最优化模型**理论**、**方法**和应用

无约束优化 -----> 约束优化

成绩评定:

总成绩=作业(30%)+小论文(20%)+期末成绩(50%)



中文参考书

- [1] 袁亚湘, 孙文瑜. 最优化理论与方法[M]. 科学出版社, 1997.
- [2] 陈宝林. 最优化理论与算法[M]. 清华大学出版社, 2005.
- [3] 李航. 统计学习方法[M]. 清华大学出版社, 2012.
- [4] 周志华. 机器学习[M]. 清华大学出版社, 2016.
- [5] 王宜举, 修乃华. 非线性最优化理论与方法（第三版）[M]. 科学出版社, 2019.



英文参考书

- Dimitri P. Bertsekas, Angelia Nedic, and Asuman E. Ozdaglar, **Convex Analysis and Optimization**, Athena Scientific, Belmont; Massachusetts, 2003
- Dimitri P. Bertsekas, **Convex Optimization Theory**, MIT, 2009
- Jorge Nocedal, Stephen Wright, **Numerical Optimization**, Springer, 2006
- Stephen Boyd, Lieven Vandenberghe, **Convex Optimization**, Cambridge University Press, 2004
- R. T. Rockafellar and R. J-B. Wets, **Variational Analysis**, Springer, 1997
- R. T. Rockafellar, **Convex Analysis**, Princeton University Press, 1970



第一讲

- 最优化方法简史
- 无约束最优化理论



□ 最优化方法简史



发展简介

□ 运筹学在国外

英国称为 *Operational Research*

美国称为 *Operations Research*

- ✓ 起源于二战期间的军事问题，如雷达的设置、运输船队的护航舰队的规模、反潜作战中深水炸弹的深度、飞机出击队型、军事物资的存储等。
- ✓ 二战后运筹学应用于经济管理领域（LP、计算机）

1948年英国首先成立运筹学会；1952年美国成立。

1952年，Morse 和 Kimball出版《运筹学方法》

1959年成立国际运筹学联合会



□ 运筹学在国内

- ✓ 1956年成立运筹学小组
- ✓ 1958年提出运输问题的图上作业法
- ✓ 1962年提出中国邮路问题
- ✓ 1964年华罗庚推广统筹方法
- ✓ 我国于1982年加入国际运筹学联合会，并于1999年8月组织了第15届大会



最优化问题



Q： 什么是最优化？

A： 根据国际数学优化学会定义, 最优化是指在一定约束条件下极大化或极小化某一目标函数的问题, 其变量可能是连续或离散或随机的.

A： 通俗解释, 在所有可能中挑选最好的.



最优化问题无处不在！

- 早在**18**世纪，著名数学家欧拉就曾说：宇宙万物无不与最小化或最大化的原理有关系.
- 可以说，最优化的原理渗入到社会发展的各个方面，甚至在我们的日常生活里也有各种各样的最优化问题.



最优化问题无处不在！

- ◆ 经济金融： 最大利润、最小风险
- ◆ 交通运输： 列车运行图、物流
- ◆ 信息科学： 数据挖掘、图像处理
- ◆ 生命科学： DNA 序列、蛋白质折叠
- ◆ 工程力学： 最大载重、结构最优
- ◆ 军事国防： 摆兵布阵、后勤保障



最优化的起源

□ 中国古代优化思想——田忌赛马 (公元前340年)



	齐威王	田忌	齐威王	田忌
上	$A > B$		$A > F$	
中	$C > D$		$C < B$	
下	$E > F$		$E < D$	
	3 : 0		1 : 2	

反败为胜!





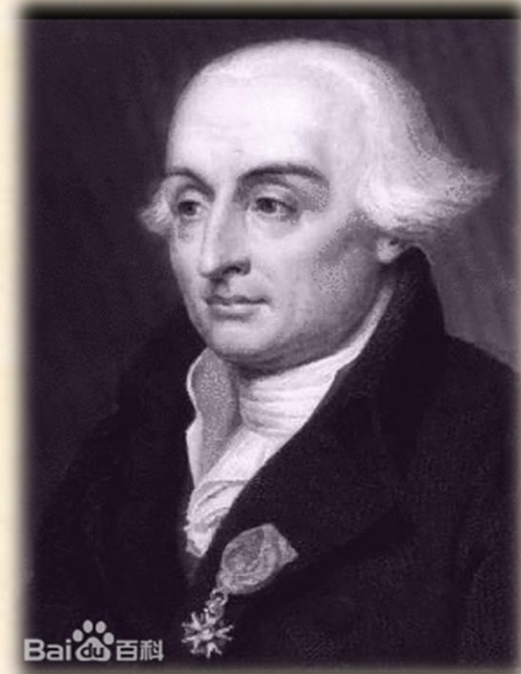
最优化的起源

- 追溯到18世纪L. Euler, J. L. Lagrange等对与力学相关的极值问题或者变分问题统一处理方法的研究。



莱昂哈德·欧拉 (Leonhard Euler)

1707.4.15~1783.9.18



Baidu 百科

1736.1.25~1813.4.10



最优化的起源

□ 线性规划与单纯形法—George Dantzig 1947

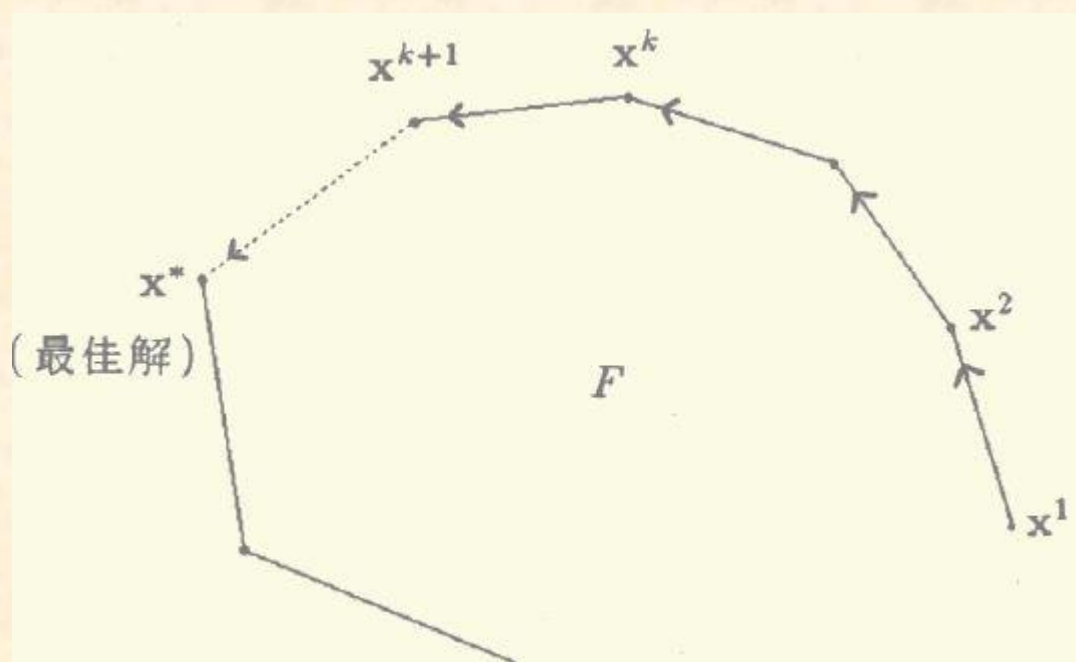


- 线性规划之父
- 师从著名统计学家J. Neyman
- 一个人的潜能是难以预料的，成功的障碍往往来自于心理上的畏难情绪；一定要相信自己，保持积极的态度。

1914.11.8~2005.5.13



□ 线性规划与单纯形法—George Dantzig 1947





最优化的发展

- ❑ Dantzig, Fulkerson和Johnson在1950年研究旅行商问题时提出了线性整数规划问题。
- ❑ 随后, Gomory提出的割平面方法则奠定了现代整数规划算法的基础。
- ❑ 1951年Kuhn和Tucker提出了约束最优化问题必要条件, 后称为Karush-Kuhn-Tucker (KKT)条件, 标志着现代非线性规划理论研究的开端。



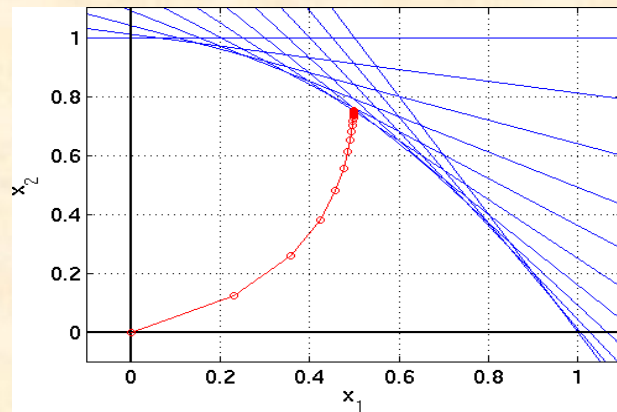
最优化的发展

■ 1970年, Victor Klee & George Minty给出实例证明了单纯形方法不是多项式时间的, 而是指数级 $O(2^n)$

◆ 椭球法——L.G.Khachian 1979 $O(n^6 L^2)$

◆ 内点法——Karmarkar 1984 $O(n^{3.5} L^2)$

◆ Nesterov和Nemirovski等推广到凸优化问题(90年代)。





最优化发展与现状

- 向量优化
- 互补与均衡问题
- 组合优化
- 随机优化
- 半定规划
- 鲁棒优化
- 稀疏优化
- 统计优化
- 张量与多项式优化
- 非光滑优化



最优化问题分类

- **CONSTRAINED AND UNCONSTRAINED OPTIMIZATION**
- **GLOBAL AND LOCAL OPTIMIZATION**
- **STOCHASTIC AND DETERMINISTIC OPTIMIZATION**
- **CONTINUOUS VERSUS DISCRETE OPTIMIZATION**
- **.....**



模型与分类

一般模型:

目标函数

$$\min f(x)$$

决策变量

$$s.t. x \in \Omega$$

可行域or决策集

约束函数

无约束优化

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

约束优化

$$\min f(x)$$

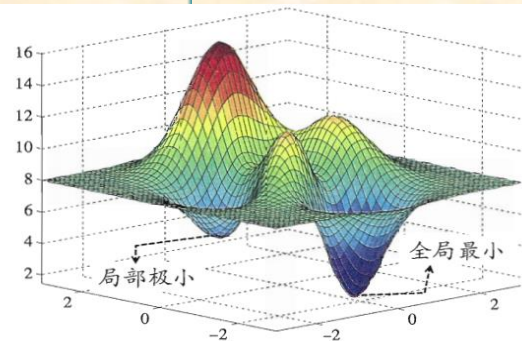
$$s.t. \begin{cases} c_i(x) \geq 0, & i \in I \\ c_j(x) = 0, & j \in \varepsilon \end{cases} \quad (1)$$



最优解概念

定义 1：设 $f(x)$ 为目标函数， Ω 为可行域， $x^0 \in \Omega$ ，若对 $\forall x \in \Omega$ ，有 $f(x) \geq f(x^0)$ ，则 x^0 称为极小化问题 $\min \{f(x), x \in \Omega\}$ 的（全局）最优解。

定义 2：设 $f(x)$ 为目标函数， Ω 为可行域，若存在 x^0 的 ε 邻域 $N_\varepsilon(x^0) = \{x \mid \|x - x^0\| < \varepsilon, \varepsilon > 0\}$ ，使得对 $\forall x \in \Omega \cap N_\varepsilon(x^0)$ ，有 $f(x) \geq f(x^0)$ ，则 x^0 称为极小化问题 $\min \{f(x), x \in \Omega\}$ 的局部最优解。若此时不等式严格成立，则称 x 为严格局部最优解。





最优化主要研究内容

□ 理论:

- 一阶/二阶最优性条件
- 对偶理论
- 鞍点问题
- 灵敏度分析
- 复杂性分析

□ 算法:

- 最速下降方法
- 共轭梯度方法
- 牛顿方法
- 拟牛顿方法
- 投影方法
- 罚函数方法
- new

□ 应用:

- 建立模型
- 理论分析
- 编程计算
- 解决实际问题



What will you learn?

- **Models --- the art:** How we choose to represent real problems 【线性规划、非线性规划】
- **Theory --- the science:** What we know about different classes of models; e.g. necessary and sufficient conditions for optimality 【无约束优化、约束优化最优性条件】
- **Algorithms --- the tools:** How we apply the theory to robustly and efficiently solve powerful models 【单纯形法、无约束优化方法（最速下降法、牛顿法、拟牛顿法、共轭梯度法）约束优化方法（罚函数法、ALM、ADMM等）】



北京交通大学

最优化的简单实例



工厂生产问题

已知:

	木门	木窗	总工时
木工	4小时	3小时	120小时/日
油漆工	2小时	1小时	50小时/日
利润	56	30	

问: 每日安排生产多少扇木门多少木窗, 才能使得总利润最大?

解: 设该车间每日安排 生产木门 x_1 扇, 木窗 x_2

$$\max \quad z = 56x_1 + 30x_2$$

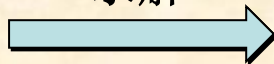
$$\text{s.t.} \quad 4x_1 + 3x_2 \leq 120$$

$$2x_1 + x_2 \leq 50$$

$$x_1, x_2 \geq 0$$

最优化问题 一线性规划

求解



最优解: (15,20)—最优决策



运输问题

把某种货物从 m 个工厂运到 n 个商店去，其中每个工厂的库存量为 a_1, a_2, \dots, a_m ，各商店的需求量为 b_1, b_2, \dots, b_n ，从工厂 i 到商店 j 的运费（每单位货物）为 c_{ij} ，确定从工厂 i 到商店 j 的运输量 $x_{ij}(i=1, \dots, m, j=1, \dots, n)$ ，使在满足供求的条件下，总的运费最小。

$$\left\{ \begin{array}{l} \min \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n c_{ij} x_{ij} \\ s.t. \quad \sum_{i=1}^m x_{ij} = b_j \quad j = 1, 2, \dots, n \\ \sum_{j=1}^n x_{ij} \leq a_i \quad i = 1, 2, \dots, m \\ x_{ij} \geq 0 \quad i = 1, 2, \dots, m \quad j = 1, 2, \dots, n \end{array} \right.$$



□ 无约束最优化理论



二阶连续可微函数

(Twice continuously differentiable function)

□ **定义：** 设 $f(x)$ 是 \mathbb{R}^n 上的一个连续可微函数，如果对每一点 $x \in \mathbb{R}^n$ ，对所有 $i, j = 1, 2, \dots, n$ ，二阶偏导数 $\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j}$ 存在且连续，则称 f 在 \mathbb{R}^n 上二阶连续可微，记作 $f \in C^2$.

例题3： $\forall x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$, 判断如下二元函数是否二阶连续可微

(1) $f(x) = x_1^2 + x_2^2$



(2) $f(x) = (\max\{x_1, 0\})^2 + (\max\{x_2, 0\})^2$





连续可微 \Rightarrow 函数的梯度 (Gradient)

□ 连续可微函数 f 在点 $x \in \mathbb{R}^n$ 处的梯度为 n 维列向量:

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right)^T$$

例题4: $\forall x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$, 计算如下二元函数的梯度.

(1) $f(x) = x_1^2 + x_2^2$

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} \right)^T = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix}$$

(2) $f(x) = (\max\{x_1, 0\})^2 + (\max\{x_2, 0\})^2$

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} \right)^T = \begin{pmatrix} 2\max\{x_1, 0\} \\ 2\max\{x_2, 0\} \end{pmatrix}$$



二阶连续可微 \Rightarrow 函数的Hesse矩阵

□ 二阶连续可微函数 f 在点 $x \in \mathbb{R}^n$ 处的Hesse 矩阵为 $n \times n$ 矩阵 $\nabla^2 f(x)$, 其表达式为

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

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_j \partial x_i}$$



$\nabla^2 f(x)$ 是对称矩阵

例题5: $\forall x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$, 计算如下二元函数 $f(x) = x_1^2 + x_2^2$

的Hesse矩阵

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} = 2I$$

单位矩阵



注意到:

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right)^T$$

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

Diagram illustrating the Hessian matrix $\nabla^2 f(x)$ as a matrix of second-order partial derivatives. Red boxes highlight the rows of the matrix, which are mapped by red arrows to a vertical stack of row vectors on the right:

- Row 1: $(\nabla(\nabla f(x)))_1^T$
- Row 2: $(\nabla(\nabla f(x)))_2^T$
- ...
- Row n: $(\nabla(\nabla f(x)))_n^T$



由向量值函数 $\nabla f(x): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ 的一阶导数信息产生的矩阵



泰勒展开式 (Taylor Expansion)

□ 一阶泰勒展开式：给定 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 且 $f \in C^1$ ，以及一点 $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ ，则 f 在点 \bar{x} 的一阶泰勒展开式为

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) + o(\|x - \bar{x}\|),$$

其中 $o(\|x - \bar{x}\|)$ 表示当 $\|x - \bar{x}\| \rightarrow 0$ 时，它是 $\|x - \bar{x}\|$ 的高阶无穷小量(例如： $\frac{1}{2}(x - \bar{x})^T \nabla^2 f(\bar{x})(x - \bar{x})$ 就是 $\|x - \bar{x}\|$ 的高阶无穷小量).

■ 函数 f 在点 \bar{x} 处的最佳线性近似：

$$l(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) \quad \text{【最速下降法的基础】}$$



泰勒展开式 (Taylor Expansion)

□ 二阶泰勒展开式：给定 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 且 $f \in C^2$ ，以及一点 $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ ，则 f 在点 \bar{x} 的二阶泰勒展开式为

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

其中 $o(\|x - \bar{x}\|^2)$ 表示当 $\|x - \bar{x}\| \rightarrow 0$ 时，它是 $\|x - \bar{x}\|^2$ 的高阶无穷小量。

■ 函数 f 在点 \bar{x} 处的最佳二次近似：

$$m(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) + \frac{1}{2} (x - \bar{x})^T \nabla^2 f(\bar{x}) (x - \bar{x})$$

【牛顿法的基础】



无约束优化最优性条件

- 一阶必要条件
- 二阶必要条件
- 二阶充分条件
- 凸优化的一阶充要条件



无约束优化问题

数学模型:
$$\min_{x \in R^n} f(x) \quad (1)$$

这里我们假设目标函数是连续可微的.

函数的下降方向:

设 $\bar{x} \in R^n$ 是任一给定向量, $d \neq 0$, 若存在 $\delta > 0$, 对任意 $\lambda \in (0, \delta)$, 有 $f(\bar{x} + \lambda d) < f(\bar{x})$, 则称 d 为 $f(x)$ 在点 \bar{x} 处的下降方向。



局部最优解的几何条件

????



局部最优解的一阶必要条件

定理1:(一阶必要条件)若 x^* 是无约束优化问题(1)的局部最优解, 则 $\nabla f(x^*) = 0$.

证明: 反证法假设 $\nabla f(x^*) \neq 0$, 取 $d = -\nabla f(x^*) \neq 0$, 则对充分小的 $\alpha > 0$, 由Taylor展开式得

$$\begin{aligned} f(x^* + \alpha d) &= f(x^*) + \alpha \nabla f(x^*)^T d + o(\alpha) \\ &= f(x^*) - \alpha \|\nabla f(x^*)\|^2 + o(\alpha) \\ &< f(x^*). \end{aligned}$$

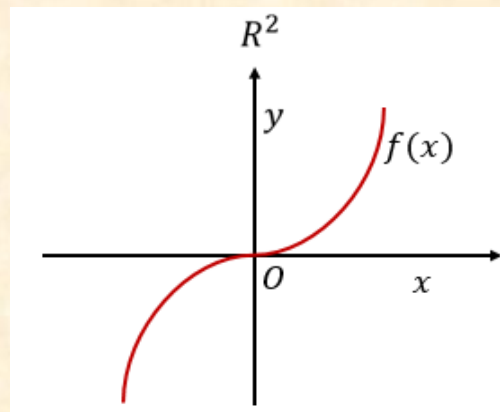
这与 x^* 是局部最优解矛盾. 定理得证.



一阶条件的非充分性

定义: 对无约束优化(1), 若 $\nabla f(x^*) = 0$, 则 x^* 称为 $f(x)$ 的一个 **稳定点** (stationary point). 既不是极小值点, 也不是极大值点的驻点称为 **鞍点** (saddle point).

例题8: 对于二次函数 $f(x) = x^3$, $x^* = 0$ 是它的稳定点, 但是该点既不是极小值点, 也不是极大值点, 所以 x^* 是 $f(x)$ 的鞍点.





局部最优解的二阶必要条件

定理3:(二阶必要条件) 若 \bar{x} 是无约束优化(1)的局部最优解, 则 $\nabla f(\bar{x}) = 0$, 且Hesse矩阵 $\nabla^2 f(\bar{x})$ 是半正定的。

证明: 由定理1, $\nabla f(\bar{x}) = 0$. 设 d 是任意一个 n 维非零向量,

$\because f(x)$ 在 \bar{x} 处二阶可微, 且 $\nabla f(\bar{x}) = 0$,

$$\therefore f(\bar{x} + \lambda d) = f(\bar{x}) + \lambda \nabla f(\bar{x})^T d + \frac{1}{2} \lambda^2 d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + o(\lambda^2 \|d\|^2)$$

$$\Rightarrow \frac{f(\bar{x} + \lambda d) - f(\bar{x})}{\lambda^2} = \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + o(\lambda^2 \|d\|^2) / \lambda^2$$

其中当 $\lambda \rightarrow 0$ 时, $o(\lambda^2 \|d\|^2) / \lambda^2 \rightarrow 0$

$\because \bar{x}$ 是局部极小点, 当 $|\lambda|$ 充分小时, 必有 $f(\bar{x} + \lambda d) \geq f(\bar{x})$

\therefore 当 $\lambda \rightarrow 0$ 时, 有 $d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d \geq 0$, 即 $\nabla^2 f(\bar{x})$ 为半正定的。

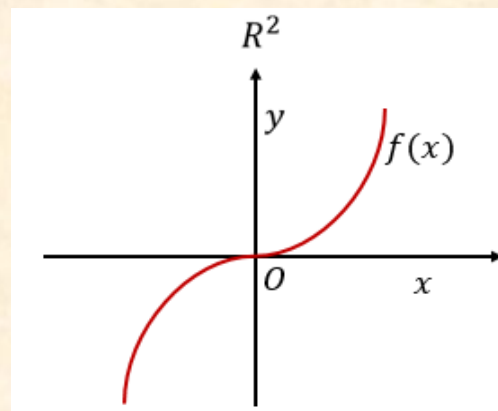


二阶必要条件的非充分性

例题：对于二次函数 $f(x) = x^3$ ，在 $x = 0$ 处，

$$\nabla f(x) = 0, \nabla^2 f(x) = 0,$$

从而二阶必要性条件满足，然而0不是局部最优解。





二阶充分条件

定理4: 设函数 $f(x)$ 在点 \bar{x} 处二阶连续可微, 若梯度 $\nabla f(\bar{x}) = 0$, 且Hesse矩阵 $\nabla^2 f(\bar{x})$ 正定, 则 \bar{x} 是(1)的严格局部最优解。

证明: 对任意的 $d \in \mathbb{R}^n, d \neq 0$, $\because f(x)$ 在 \bar{x} 处二阶可微且 $\nabla f(\bar{x}) = 0$,

$$\therefore f(\bar{x} + \lambda d) = f(\bar{x}) + \frac{1}{2} \lambda^2 d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + o(\lambda^2 \|d\|^2)$$

$$\text{其中 } \lim_{\lambda \rightarrow 0} o(\lambda^2 \|d\|^2) / \lambda^2 = 0.$$

$$\because d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d > 0, \therefore \text{存在 } \delta > 0, \text{使得当 } \lambda \in (0, \delta) \text{ 时, 有}$$
$$\frac{1}{2} \lambda^2 d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d + o(\lambda^2 \|d\|^2) > 0 \Rightarrow f(\bar{x} + \lambda d) > f(\bar{x})$$

由 d 的任意性, 知 \bar{x} 是严格局部最优解.

□



二阶充分条件

定理 3'： 设函数 $f(x)$ 在 \bar{x} 的邻域内二阶可微，若梯度 $\nabla f(\bar{x}) = 0$ ，且 **Hesse 矩阵** $\nabla^2 f(x)$ 在该邻域内半正定，则 \bar{x} 是局部最优解。特别地，对于邻域内的任意点 $x \neq \bar{x}$ ，若 $\nabla^2 f(x)$ 是正定矩阵，则 \bar{x} 是优化问题 (1) 的严格的局部最优解。



例题： $\min f(x) = \frac{1}{3}x_1^3 + \frac{1}{3}x_2^3 - x_2^2 - x_1$

解：由 $\frac{\partial f}{\partial x_1} = x_1^2 - 1$, $\frac{\partial f}{\partial x_2} = x_2^2 - 2x_2$, 令 $\nabla f(x) = 0$,

得 $\begin{cases} x_1^2 - 1 = 0 \\ x_2^2 - 2x_2 = 0 \end{cases}$, 从而稳定点有：

$$x^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, x^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, x^{(3)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, x^{(4)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

由于 $f(x)$ 的 *Hesse* 矩阵 $\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 0 \\ 0 & 2x_2 - 2 \end{pmatrix}$

显然，只有在 $x^{(2)}$ 处，相应的 $\nabla^2 f(x^{(2)})$ 正定，

其它三个点处均不是半正定矩阵，因此 $x^{(2)}$ 是一个局部极小值点.



无约束优化最优性条件

- 一阶必要条件
- 二阶必要条件
- 二阶充分条件
- 凸优化的一阶充要条件



Homework

1. 设函数 $f: R^n \rightarrow R$ 连续可微, $d \in R^n$ 为该函数在点 $x \in R^n$ 处的下降方向. 试建立函数 $\phi(\alpha) = f(x + \alpha d)$ 在 $\alpha \geq 0$ 上的最小值点的必要条件.

2. 设 $a_1, a_2, \dots, a_m \in R^n$. 求下面问题的最优解

$$\min_{x \in R^n} \sum_{i=1}^m \|a_i - x\|^2.$$

注意: 请大家将作业于下周二上课之前交给助教【提交方式: 电子文档标明姓名、学号、学院) 发送到助教邮箱, 也可纸纸板下次课前交, 或者...】



无约束优化最优性条件

➤ 凸优化的一阶充要条件

➤ 自由思考？

□ 给出自己的结论，说明理由？

(几何直观 \dashrightarrow 代数抽象)



凸集(convex set)

定义：设 x, y 为欧式空间 E^n 中相异的两个点，则点集

$$P = \{\lambda x + (1-\lambda)y \mid \lambda \in \mathbb{R}\}$$

称为通过 x 和 y 的直线.

定义：设 $S \subseteq E^n$ ，若对 $\forall x^{(1)}, x^{(2)} \in S$ 及 $\forall \lambda \in [0, 1]$ ，都有

$$\lambda x^{(1)} + (1-\lambda)x^{(2)} \in S$$

则称 S 为**凸集**.

设 $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(k)} \in S$ ，称

$$\lambda_1 x^{(1)} + \lambda_2 x^{(2)} + \dots + \lambda_k x^{(k)}$$

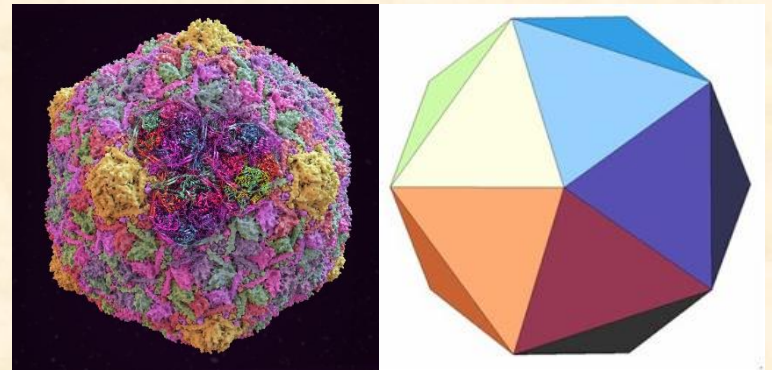
(其中 $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_k = 1$)为 $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(k)}$ 的**凸组合**.



凸集 (convex set)



石墨烯 32
面体



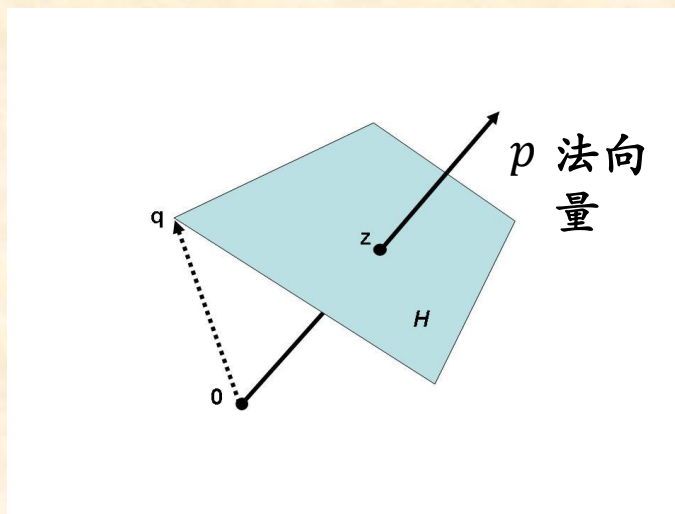
病毒衣壳 正20
面体



常见凸集-超平面

■ R^n 中超平面 $H = \{x \in R^n \mid p^T x = a\}$

对任意两点 $x^{(1)}, x^{(2)}$ 及每个实数 $\lambda \in [0, 1]$, 都有 $p^T [\lambda x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)}] = a$
因此 $\lambda x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)} \in H$, 由定义可知 H 为凸集。



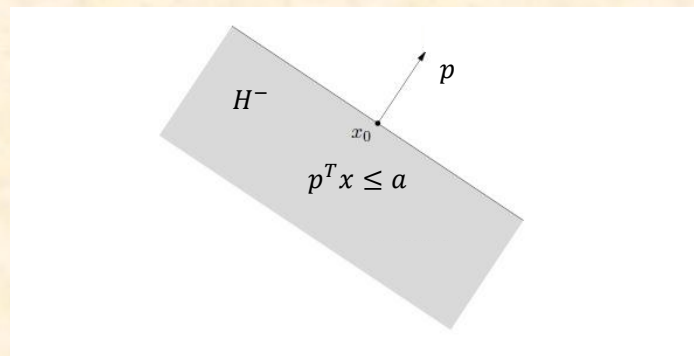


常见凸集-半空间

■ 半空间 $H^- = \{x \in R^n \mid p^T x \leq a\}$ ($H^+ = \{x \in R^n \mid p^T x \geq a\}$)

□ 对任意 $x^{(1)}, x^{(2)} \in H^-$ 及每个实数 $\lambda \in [0, 1]$, 都有
$$p^T [\lambda x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)}] = \lambda p^T x^{(1)} + (1 - \lambda)p^T x^{(2)} \leq a,$$

所以 $\lambda x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)} \in H^-$. 根据定义可知 H^- 为凸集.





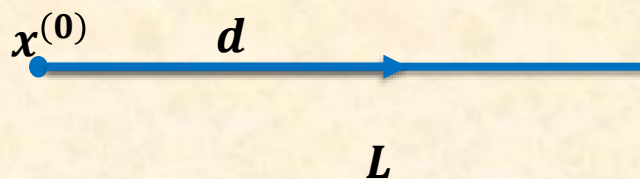
常见凸集-射线

■ 射线 $L = \{x \in R^n \mid x = x^{(0)} + \lambda d, \lambda \geq 0\}$, 其中 d 为给定非零向量, $x^{(0)}$ 为固定点

解 因为对任意两点 $x^{(1)}, x^{(2)} \in L$ 及每一个数 $\lambda \in [0, 1]$, 必有 $x^{(1)} = x^{(0)} + \lambda_1 d, x^{(2)} = x^{(0)} + \lambda_2 d$, λ_1 和 λ_2 是两个非负数, 以及

$$\begin{aligned}\lambda x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)} &= \lambda(x^{(0)} + \lambda_1 d) + (1 - \lambda)(x^{(0)} + \lambda_2 d) \\ &= x^{(0)} + [\lambda\lambda_1 + (1 - \lambda)\lambda_2]d.\end{aligned}$$

由于 $\lambda\lambda_1 + (1 - \lambda)\lambda_2 \geq 0$, 因此有 $\lambda x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)} \in L$, 根据定义 1.4.1 知 L 为凸集.





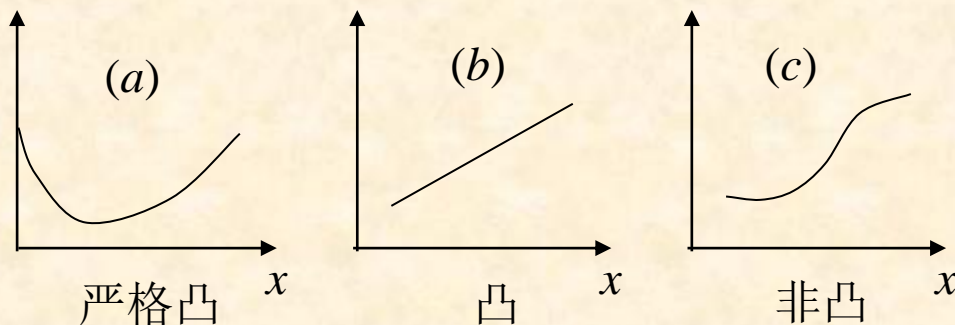
凸函数

凸函数：设 S 是 E^n 中的非空凸集， $f(x)$ 是定义在 S 上的实函数，如果对于每一对 $x_1, x_2 \in S$ 及每一个 $a, 0 \leq a \leq 1$, 都有

$$f(ax_1 + (1-a)x_2) \leq af(x_1) + (1-a)f(x_2)$$

则称函数 $f(x)$ 为 S 上的凸函数. 上式中, 若 \leq 变为 $<$, 则称为严格凸函数。

若 $-f(x)$ 为 S 的凸函数, 则称 $f(x)$ 为 S 上的**凹函数**.



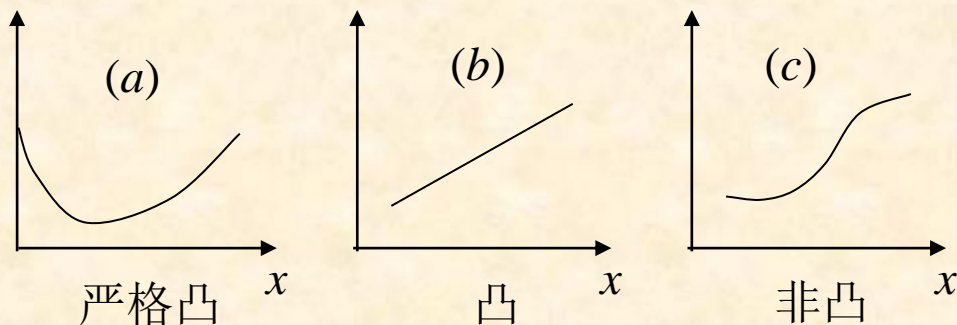


凸函数 与凸集

观察:

函数的图像:

函数的上图:



结论: 凸函数的上图为凸集.