第一章　最优化简介

1.1 考虑稀疏优化问题，我们已经直观地讨论了在 ℓ_0，ℓ_1，ℓ_2 三种范数下问题的解的可能形式．针对一般的 ℓ_p “范数”：

$$\|x\|_p \overset{\text{def}}{=\!=} (\sum_{i=1}^{n} |x|^p)^{1/p}, \quad 0 < p < 2,$$

我们考虑优化问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & \|x\|_p, \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b. \end{aligned}$$

试着用几何直观的方式（类似于图 1.2）来说明当 $p \in (0,2)$ 取何值时，该优化问题的解可能具有稀疏性．

解（丁思哲）．$Ax = b$ 表示空间中的直线，$\|x\|_p(0 < p < 2)$ 引导的 $\{x \| \|x\|_p \leqslant C\}$ 表示空间中的 ℓ_p 范数球．优化问题实际是找到最小的 C，使得范数球与 $Ax = b$ 相交．在 $\mathbb{R}^2$ 空间中，不同 p 的范数球情形如图 1.1 所示．

- 当 $p \in (0,1)$ 时，ℓ_p 范数球是内凸的，因此最小的 C 对应的范数球与直线的交点一般都是坐标轴上的顶点，因此 ℓ_p 范数的解具有稀疏性；
- 当 $p = 1$ 时，ℓ_p 范数球呈现“正方形”，且正方形的顶点恰在坐标轴上，因此在一定条件下（例如直线不与正方形的某边平行）最小的 C 对应的范数球与直线的交点一般也是坐标轴上的顶点，因此 ℓ_1 范数的解也具有稀疏性；
- 当 $p \in (1,2)$ 时，ℓ_p 范数球是外凸的，此时最小的 C 对应的范数球与直线的交点不一定在坐标轴上，那么 ℓ_p 范数的解一般不具有稀疏性．

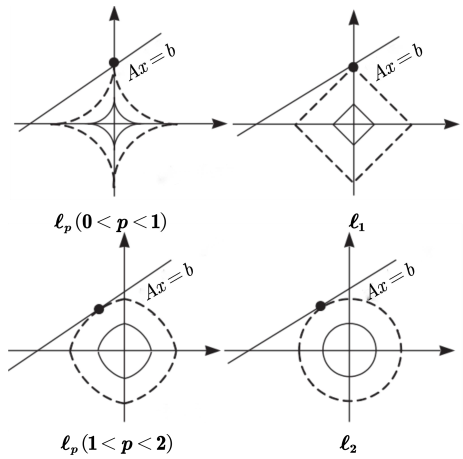

图 1.1 ℓ_p 范数优化问题的求解

$\square$

1.2 给定一个函数 $f(x):\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 及其一个局部最优点 x^*，则该点沿任何方向 $d \in \mathbb{R}^n$ 也是局部最优的，即 0 为函数 $\phi(\alpha) \overset{\text{def}}{=\!=} f(x^* + \alpha d)$ 的一个局部最优解. 反之，如果 x^* 沿任何方向 $d \in \mathbb{R}^n$ 都是局部最优解，则 x^* 是否为 $f(x)$ 的一个局部最优解? 若是，请给出证明；若不是，请给出反例.

解 (俞建江). x^* 不一定是 $f(x)$ 的局部最优解. 反例：如用极坐标表示 f

$$f(r,\theta) = \begin{cases} r\sin(\dfrac{r}{\theta}), & \theta \in (0, 2\pi), \\ 0, & \theta = 0. \end{cases}$$

在任一方向上，$r = 0$ 都是局部最优解，但 $x = 0$ 的任一邻域内都存在 x' 使得 $f(x') < 0$. 造成这一现象的原因之一是，某些函数在局部具有一定的振荡特性. $\square$

1.3 试给出如下点列的 Q-收敛速度：

(a) $x^k = \dfrac{1}{k!}, k = 1, 2, \cdots;$

(b)
$$x^k = \begin{cases} \left(\dfrac{1}{4}\right)^{2^k}, & k \text{ 为偶数}, \\ \dfrac{x^{k-1}}{k}, & k \text{ 为奇数}. \end{cases}, \quad k = 1, 2, \cdots$$

解 (俞建江，丁思哲).

(a) 该点列是 Q-超线性收敛的. 因为
$$\lim_{k\to\infty} \frac{\left\|x^{k+1} - x^*\right\|}{\|x^k - x^*\|} = \lim_{k\to\infty} \frac{1}{|k+1|} = 0.$$

(b) 该点列是 Q-超线性收敛的. 因为 $x^* = 0$，而若 k 是奇数，则成立
$$\lim_{k\to\infty} \frac{\left\|x^{k+1} - x^*\right\|}{\|x^k - x^*\|} = \lim_{k\to\infty} k \frac{\left|x^{k+1}\right|}{\left|x^{k-1}\right|} = \lim_{k\to\infty} \frac{k}{64^{2^{k-1}}} = 0,$$
若 k 是偶数，则成立
$$\lim_{k\to\infty} \frac{\left\|x^{k+1} - x^*\right\|}{\|x^k - x^*\|} = \lim_{k\to\infty} \frac{1}{k+1} \frac{\left|x^k\right|}{\left|x^k\right|} = 0. \qquad \square$$

1.4 考虑函数 $f(x) = x_1^2 + x_2^2$，$x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$，以及迭代点列 $x^k = (1 + \frac{1}{2^k})(\cos k, \sin k)^{\mathrm{T}}, k = 1, 2, \cdots$，请说明

(a) $\{f(x^{k+1})\}$ 是否收敛？若收敛，给出 Q-收敛速度；

(b) $\{x^{k+1}\}$ 是否收敛？若收敛，给出 Q-收敛速度.

解 (俞建江).

(a) 该点列收敛，且 $f(x^{k+1}) = (1 + \frac{1}{2^k})^2$，$k \to \infty$ 时 $f \to 1$.
因为
$$\lim_{k\to\infty} \frac{\left\|x^{k+1} - x^*\right\|}{\|x^k - x^*\|} = \lim_{k\to\infty} \frac{(1 + \frac{1}{2^{k+1}})^2 - 1}{(1 + \frac{1}{2^k})^2 - 1} = \frac{1}{2},$$
所以该点列还是 Q-线性收敛的.

(b) 该点列不收敛. 因为显然 $\cos k$ 和 $\sin k$ 都不收敛，但 $1 + \frac{1}{2^k}$ 收敛到 1. $\square$

第二章　基础知识

2.1 说明矩阵 F 范数不是算子范数（即它不可能被任何一种向量范数所诱导）．提示：算子范数需要满足某些必要条件，只需找到一个 F 范数不满足的必要条件即可．

解 (俞建江)．对任一算子范数 $\|\cdot\|$ 及 I_n（n 阶单位矩阵），

$$\|I_n\| = \max_{\|x\|=1} \|I_n x\| = 1,$$

又有 $\|I_n\|_F = \sqrt{n}$，因此 Frobenius 范数不是算子范数． □

2.2 证明：矩阵 A 的 2 范数等于其最大奇异值，即

$$\sigma_1(A) = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2.$$

解 (俞建江，丁思哲)．由矩阵 2 范数和向量 2 范数的定义，

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \left[(Ax)^{\mathrm{T}} Ax\right]^{\frac{1}{2}} = \max_{\|x\|_2=1} \left[x^{\mathrm{T}}(A^{\mathrm{T}}A)x\right]^{\frac{1}{2}}.$$

注意到 $A^{\mathrm{T}}A$ 是实对称且半正定的，不妨设其 n 个非负实特征值为

$$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \geqslant 0.$$

实对称矩阵 n 不同特征值对应的特征向量必正交，因此不妨设它们对应的正交规范特征向量为 $v_1, v_2, \cdots, v_n$，则对任一满足 $\|x\|_2 = 1$ 的向量 $x \in \mathbb{R}^n$ 成立线性组合结构

$$x = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i v_i, \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^2 = 1,$$

其中 $\alpha_i \in \mathbb{R}$ 是系数.

将上式代入定义，得

$$x^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A x = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \alpha_i^2 \leqslant \lambda_1,$$

也即 $\|A\|_2 \leqslant \lambda_1$.

另一方面，若取 $x = v_1$，则有

$$x^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A x = v_1^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A v_1 = \lambda_1,$$

故 $\|A\|_2 \geqslant \lambda_1$.

综上，

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{\lambda_{max}(A^{\mathrm{T}} A)} = \sigma_1(A). \qquad \square$$

2.3 证明如下有关矩阵范数的不等式：

(a) $\|AB\|_F \leqslant \|A\|_2 \|B\|_F$,

(b) $|\langle A, B\rangle| \leqslant \|A\|_2 \|B\|_*$.

解 (俞建江).

(a) 利用 F 范数的定义，

$$\begin{aligned} \|AB\|_F^2 &= \langle AB, AB\rangle \\ &= \mathrm{Tr}(B^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A B) \\ &= \mathrm{Tr}(B B^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A). \end{aligned}$$

$A^{\mathrm{T}} A$ 是对称半正定阵，它可以被正交对角化. 因此存在正交矩阵 T，使得

$$T^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A T = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n).$$

其中 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \geqslant 0$. 利用 T，对 F 范数的定义可作

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}(B B^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A) &= \mathrm{Tr}(T^{\mathrm{T}} B B^{\mathrm{T}} T T^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A T) \\ &\leqslant \lambda_1 \mathrm{Tr}(T^{\mathrm{T}} B B^{\mathrm{T}} T) \\ &= \lambda_1 \mathrm{Tr}(B B^{\mathrm{T}}) \\ &= \|A\|_2^2 \|B\|_F^2, \end{aligned}$$

因此 $\|AB\|_F \leqslant \|A\|_2 \|B\|_F$ 成立.

(b) 设 $A, B \in \mathbb{R}^{m\times n}$，不妨设 $m \geqslant n$. B 存在 SVD 分解

$$B = U_B \Sigma_B V_B^{\mathrm{T}}, \quad U_B \in \mathbb{R}^{m\times m}, V_B \in \mathbb{R}^{n\times n},$$

其中 U_B, V_B 都是正交矩阵，Σ_B 是对角矩阵.
利用矩阵内积的定义，

$$\begin{aligned}|\langle A, B\rangle| &= \mathrm{Tr}(B^{\mathrm{T}}A)\\ &= \mathrm{Tr}(V_B\Sigma_B U_B^{\mathrm{T}}A)\\ &= \mathrm{Tr}(\Sigma_B U_B^{\mathrm{T}} A V_B),\end{aligned}$$

其中记 $\Sigma_B = \mathrm{diag}(\tilde{b}_1, \tilde{b}_2, \cdots, \tilde{b}_n)$.
规定 $\tilde{A} = U_B^{\mathrm{T}} A V_B = (\tilde{a_{ij}})_{m\times n}$，对 $\tilde{A}$ 的每个对角元 $\tilde{a}_{ii}$，成立

$$\begin{aligned}|\tilde{a}_{ii}| &\leqslant \sqrt{\tilde{a}_{1i}^2 + \tilde{a}_{2i}^2 + \cdots + \tilde{a}_{mi}^2}\\ &= \frac{\|\tilde{A}e_i\|_2}{\|e_i\|_2}\\ &= \|\tilde{A}e_i\|_2\\ &\leqslant \|A\|_2,\end{aligned}$$

因此有

$$\begin{aligned}\langle A, B\rangle &= \mathrm{Tr}(\Sigma_B \tilde{A})\\ &= \sum_{i=1}^{n} \tilde{b}_i \tilde{a}_{ii}\\ &\leqslant \|A\|_2 \sum_{i=1}^{n} \tilde{b}_i\\ &= \|A\|_2 \|B\|_*.\end{aligned}$$

□

2.4 设矩阵 A 为

$$A = \begin{bmatrix} I & B\\ B^{\mathrm{T}} & I\end{bmatrix},$$

其中 $\|B\|_2 < 1$，I 为单位矩阵，证明：A 可逆且

$$\|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{1+\|B\|_2}{1-\|B\|_2}.$$

解 (俞建江).

(a) 当 $\|B\|_2 = 0$ 时，$B = 0$，结论显然成立.

(b) 当 $0 < \|B\|_2 < 1$ 时，考虑特征值方程 $\det(\lambda I - A) = 0(\lambda \neq 1)$，注意到

$$\begin{aligned}
&\det(\lambda I - A) = 0 \\
\Leftrightarrow &\det\begin{pmatrix} (\lambda-1)I & -B \\ -B^{\mathrm{T}} & (\lambda-1)I \end{pmatrix} = 0 \\
\Leftrightarrow &\det\begin{pmatrix} (\lambda-1)I & -B \\ 0 & (\lambda-1)I - \dfrac{1}{\lambda-1}B^{\mathrm{T}}B \end{pmatrix} = 0 \\
\Leftrightarrow &\det((\lambda-1)^2 I - B^{\mathrm{T}}B) = 0.
\end{aligned}$$

因此 $\lambda_{\max} = 1 + \sigma_1(B) = 1 + \|B\|_2$，$\lambda_{\min} = 1 - \|B\|_2$. 故

$$\|A\|_2\|A^{-1}\|_2 = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} = \frac{1+\|B\|_2}{1-\|B\|_2}. \qquad \square$$

2.5 假设 A 和 B 均为半正定矩阵，求证：$\langle A, B\rangle \geqslant 0$. 提示：利用对称矩阵的特征值分解.

解 (俞建江). 由 A 是半正定矩阵，对 A 进行谱分解

$$A = T^{\mathrm{T}}\Sigma_A T,$$

其中 T 是正交矩阵，Σ_A 是对角线元素全非负的对角矩阵. 则

$$\begin{aligned}
\langle A, B\rangle &= \mathrm{Tr}(T^{\mathrm{T}}\Sigma_A T B) \\
&= \mathrm{Tr}(\Sigma_A T B T^{\mathrm{T}}).
\end{aligned}$$

显然 TBT^{T} 也是半正定矩阵，其对角线元素都非负，因此

$$\langle A, B\rangle = \mathrm{Tr}(\Sigma_A T B T^{\mathrm{T}}) \geqslant 0. \qquad \square$$

2.6 计算下列矩阵变量函数的导数.

(a) $f(X) = a^{\mathrm{T}}Xb$，这里 $X \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$a \in \mathbb{R}^m, b \in \mathbb{R}^n$ 为给定的向量；

(b) $f(X) = \mathrm{Tr}(X^{\mathrm{T}}AX)$，其中 $X \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 是长方形矩阵，A 是方阵（但不一定对称）；

(c) $f(X) = \ln\det(X)$，其中 $X \in \mathbb{R}^{n\times n}$，定义域为 $\{X \mid \det(X) > 0\}$（注意这个习题和例 2.1 的 (3) 的区别）.

解 (俞建江，丁思哲).

(a) 对任意方向的 $V \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 和 $t \in \mathbb{R}$，有

$$\begin{aligned}&\lim_{t\to 0}\frac{f(X+tV)-f(X)}{t}\\ =&a^{\mathrm{T}}Vb = \mathrm{Tr}(a^{\mathrm{T}}Vb) = \mathrm{Tr}(ba^{\mathrm{T}}V) = \left\langle ab^{\mathrm{T}}, V\right\rangle,\end{aligned}$$

因此 $\nabla f(X) = ab^{\mathrm{T}}$.

(b) 对任意方向的 $V \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 和 $t \in \mathbb{R}$，有

$$\begin{aligned}f(X+tV)-f(X) &= t\mathrm{Tr}(V^{\mathrm{T}}AX + X^{\mathrm{T}}AV) + \mathcal{O}(t^2)\\ &= t\left(\langle AX, V\rangle + \left\langle A^{\mathrm{T}}X, V\right\rangle\right) + \mathcal{O}(t^2),\end{aligned}$$

因此 $\nabla f(X) = (A + A^{\mathrm{T}})X$.

(c) 对任意方向的 $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和 $t \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned}f(X+tV)-f(X) &= \ln(\det(X+tV)) - \ln(\det(X))\\ &= \ln(\det(I + tVX^{-1})).\end{aligned}$$

设 VX^{-1} 的所有特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$(可能有复数). 则 $I + tVX^{-1}$ 的所有特征值为 $1+t\lambda_1, 1+t\lambda_2, \cdots, 1+t\lambda_n$. 利用

$$\det(I + tVX^{-1}) = \prod_{i=1}^{n}(1+t\lambda_i)$$

的结论，成立

$$\begin{aligned}f(X+tV)-f(X) &= \ln\prod_{i=1}^{n}(1+t\lambda_n)\\ &= t\sum_{i=1}^{n}\lambda_i + \mathcal{O}(t^2)\\ &= t\mathrm{Tr}(VX^{-1}) + \mathcal{O}(t^2)\\ &= t\left\langle X^{-\mathrm{T}}, V\right\rangle + \mathcal{O}(t^2),\end{aligned}$$

即最终成立 $\nabla f(X) = X^{-\mathrm{T}}$. □

2.7 考虑二次不等式

$$x^{\mathrm{T}}Ax + b^{\mathrm{T}}x + c \leqslant 0,$$

其中 A 为 n 阶对称矩阵，设 C 为上述不等式的解集.

(a) 证明：当 A 正定时，C 为凸集；

(b) 设 C' 是 C 和超平面 $g^{\mathrm{T}}x + h = 0$ 的交集 ($g \neq 0$)，若存在 $\lambda \in \mathbb{R}$，使得 $A + \lambda gg^{\mathrm{T}}$ 半正定，证明：C' 为凸集.

解 (俞建江).

(a) 记 $f(x) = x^{\mathrm{T}}Ax + b^{\mathrm{T}}x + c$，则 $\nabla^2 f(x) = 2A \succ 0$，知 $f(x)$ 是严格凸函数. 对 $\forall x_1, x_2 \in C$ 以及 $t \in (0,1)$，

$$f(tx_1 + (1-t)x_2) \leqslant tf(x_1) + (1-t)f(x_2) \leqslant 0,$$

因此 $tx_1 + (1-t)x_2 \in C$，知 C 是凸集.

(b) 对 $\forall x_1, x_2 \in C'$ 以及 $t \in (0,1)$，记 $x_3 = tx_1 + (1-t)x_2$. 显然 x_3 在超平面 $g^{\mathrm{T}}x + h = 0$ 上，只需再证明 $x_3 \in C$. 容易验证:

$$\begin{aligned} f(x_3) =& tf(x_1) + (1-t)f(x_2) - t(1-t)(x_2 - x_1)^{\mathrm{T}}A(x_2 - x_1) \\ =& tf(x_1) + (1-t)f(x_2) + \lambda t(1-t)(x_2 - x_1)^{\mathrm{T}}gg^{\mathrm{T}}(x_2 - x_1) \\ & - t(1-t)(x_2 - x_1)^{\mathrm{T}}(A + \lambda gg^{\mathrm{T}})(x_2 - x_1), \end{aligned}$$

由于 $(x_2 - x_1)^{\mathrm{T}}g = 0$，因此 $(x_2 - x_1)^{\mathrm{T}}gg^{\mathrm{T}}(x_2 - x_1) = 0$. 那么，再由 $A + \lambda gg^{\mathrm{T}}$ 半正定，得 $f(x_3) \leqslant 0$. 故 $x_3 \in C$，命题得证. □

2.8 (鞍点问题) 设函数 $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ 满足如下性质：当固定 $z \in \mathbb{R}^m$ 时，$f(x,z)$ 关于 x 为凸函数；当固定 $x \in \mathbb{R}^n$ 时，$f(x,z)$ 关于 z 是凹函数，则称 f 为**凸 − 凹函数**.

(a) 设 f 二阶可导，试利用海瑟矩阵 $\nabla^2 f$ 给出 f 为凸 − 凹函数的一个二阶条件；

(b) 设 f 为凸 − 凹函数且可微，且在点 $(\bar{x}, \bar{z})$ 处满足 $\nabla f(\bar{x}, \bar{z}) = 0$，求证：对任意 x 和 z，如下鞍点性质成立：

$$f(\bar{x}, z) \leqslant f(\bar{x}, \bar{z}) \leqslant f(x, \bar{z}).$$

进一步证明 f 满足极小－极大性质：

$$\sup_z \inf_x f(x,z) = \inf_x \sup_z f(x,z).$$

(c) 设 f 可微但不一定是凸－凹函数，且在点 $(\bar{x},\bar{z})$ 处满足鞍点性质

$$f(\bar{x},z) \leqslant f(\bar{x},\bar{z}) \leqslant f(x,\bar{z}), \quad \forall\ x,z$$

求证：$\nabla f(\bar{x},\bar{z}) = 0$.

注：这个题目的结论和之后我们要学习的拉格朗日函数有密切联系.

解 (俞建江，丁思哲).

(a) 设 f 的海瑟矩阵是

$$\nabla^2 f = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix},$$

其中

$$A_{11} \in \mathbb{R}^{n\times n}, A_{12} \in \mathbb{R}^{n\times m}, A_{21} \in \mathbb{R}^{m\times n}, A_{22} \in \mathbb{R}^{m\times m}.$$

则 $\nabla_x^2 f = A_{11}$，$\nabla_z^2 f = A_{22}$. 若固定 z 时 f 关于 x 凸，则 A_{11} 半正定；若固定 x 时 f 关于 z 凹，则 A_{22} 半负定. 这就是由海瑟矩阵给出的二阶条件.

(b) 先证明第一个不等式. 由于 $f(x,z)$ 关于 x 是凸函数，利用凸函数的性质有

$$f(x,\bar{z}) \geqslant f(\bar{x},\bar{z}) + \nabla_x f(\bar{x},\bar{z})(x-\bar{x}) = f(\bar{x},\bar{z}),$$

同理可得左半边的不等式.

再证明 $\sup\limits_z \inf\limits_x f(x,z) = f(\bar{x},\bar{z})$. 首先

$$\inf_x f(x,z) \leqslant f(\bar{x},z) \leqslant f(\bar{x},\bar{z}),$$

故

$$\sup_z \inf_x f(x,z) \leqslant f(\bar{x},\bar{z}),$$

又

$$\sup_z \inf_x f(x,z) \geqslant \inf_x f(x,\bar{z}) \geqslant f(\bar{x},\bar{z}),$$

因此 $\sup\limits_z \inf\limits_x f(x,z) = f(\bar{x},\bar{z})$. 同理得 $\inf\limits_x \sup\limits_z f(x,z) = f(\bar{x},\bar{z})$，因此等式得证.

(c) 只需分别证明 $\nabla_x f(\bar{x},\bar{z})=0$ 和 $\nabla_z f(\bar{x},\bar{z})=0$. 用反证法证明. 先假设 $\nabla_x f(\bar{x},\bar{z})\neq 0$,取向量 $v=(\nabla_x f(\bar{x},\bar{z})^{\mathrm{T}},0)^{\mathrm{T}}$,对 $f(\bar{x}+tv,\bar{z})$(其中 $t\neq 0$)在 $(\bar{x},\bar{z})$ 处展开一阶，得

$$f(\bar{x}+tv,\bar{z})=f(\bar{x},\bar{z})+t\|\nabla_x f(\bar{x},\bar{z})\|^2+\mathcal{O}(t^2).$$

若取 $t<0$ 且绝对值足够小，就有 $f(\bar{x}+tv,\bar{z})<f(\bar{x},\bar{z})$，与题设矛盾. 因此假设不成立，$\nabla_x f(\bar{x},\bar{z})=0$. 同理可得 $\nabla_z f(\bar{x},\bar{z})=0$. 综上，命题成立. □

2.9 利用凸函数二阶条件证明如下结论：

(a) ln-sum-exp 函数：$f(x)=\ln\sum_{k=1}^{n}\exp x_k$ 是凸函数；

(b) 几何平均：$f(x)=(\prod_{k=1}^{n}x_k)^{1/n}$ $(x\in\mathbb{R}_{++}^n)$ 是凹函数；

(c) 设 $f(x)=\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^p\right)^{1/p}$，其中 $p\in(0,1)$，定义域为 $x>0$，则 $f(x)$ 是凹函数.

解 (俞建江).

(a) 求海瑟矩阵，为了方便记 $S=\sum_{k=1}^{n}\exp x_k$。则

$$\nabla^2 f=\frac{1}{S^2}\cdot\begin{bmatrix} e^{x_1}(S-e^{x_1}) & -e^{x_1}e^{x_2} & \cdots & -e^{x_1}e^{x_n}\\ -e^{x_2}e^{x_1} & e^{x_2}(S-e^{x_2}) & \cdots & -e^{x_1}e^{x_n}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ -e^{x_n}e^{x_1} & -e^{x_n}e^{x_2} & \cdots & e^{x_n}(S-e^{x_n})\end{bmatrix}.$$

现在只需证明 $\nabla^2 f$ 半正定.
对 $\forall y=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^n(y\neq 0)$，成立

$$y^{\mathrm{T}}\nabla^2 fy=\frac{1}{S^2}\left[\sum_{k=1}^{n}y_k^2e^{x_k}\sum_{k=1}^{n}e^{x_k}-\left(\sum_{k=1}^{n}y_ke^{x_k}\right)^2\right],$$

利用柯西不等式可知 $y^{\mathrm{T}}\nabla^2 fy\geqslant 0$. 因此 $\nabla^2 f\succeq 0$.

(b) 求海瑟矩阵，得

$$
\begin{aligned}
\nabla f(x) = & \quad \frac{f}{n}\left(\frac{1}{x_1},\frac{1}{x_2},\cdots,\frac{1}{x_n}\right)^{\mathrm{T}}, \\
\nabla^2 f(x) = & \quad -\frac{f}{n^2}\begin{bmatrix} \dfrac{n-1}{x_1^2} & -\dfrac{1}{x_1x_2} & \cdots & -\dfrac{1}{x_1x_n} \\ -\dfrac{1}{x_2x_1} & \dfrac{n-1}{x_2^2} & \cdots & -\dfrac{1}{x_2x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\dfrac{1}{x_nx_1} & -\dfrac{1}{x_nx_2} & \cdots & \dfrac{n-1}{x_n^2} \end{bmatrix}.
\end{aligned}
$$

设 $J(x) = \mathrm{Diag}\left(\dfrac{1}{x_1},\cdots,\dfrac{1}{x_n}\right)$，注意到 $\nabla^2 f(x) =$

$$
-\frac{f}{n^2}J(x)\begin{bmatrix} n-1 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & n-1 & \cdots & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & \cdots & n-1 \end{bmatrix}J(x).
$$

容易验证上式中间的矩阵是个实对称矩阵且其特征值为 n（该特征值是 $n-1$ 重的）和 0，是半正定矩阵，因此 $\nabla^2 f(x)$ 是半负定矩阵.

(c) 求海瑟矩阵，设 $J(x) = \mathrm{Diag}\left(\dfrac{1}{x_1},\cdots,\dfrac{1}{x_n}\right)$，得

$$
\begin{aligned}
\nabla f(x) &= \left(\left(\frac{f}{x_1}\right)^{1-p},\left(\frac{f}{x_2}\right)^{1-p},\cdots,\left(\frac{f}{x_n}\right)^{1-p}\right)^{\mathrm{T}}, \\
\nabla^2 f(x) &= -\frac{1-p}{f}J(x)A(x)J(x),
\end{aligned}
$$

其中

$$
A(x) = \begin{bmatrix} (f^p - x_1^p)x_1^p & -x_1^px_2^p & \cdots & -x_1^px_n^p \\ -x_2^px_1^p & (f^p - x_2^p)x_2^p & \cdots & -x_2^px_n^p \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -x_n^px_1^p & -x_n^px_2^p & \cdots & (f^p - x_n^p)x_n^p \end{bmatrix}.
$$

只需证明 $A(x)$ 半正定. 对 $\forall y \in \mathbb{R}^n$ 且 $y \neq 0$,

$$\begin{aligned} y^{\mathrm{T}} A(x) y =& (\sum_{k=1}^n y_k^2 x_k^p) f^p - (\sum_{k=1}^n y_k x_k^p)^2 \\ =& (\sum_{k=1}^n y_k^2 x_k^p)(\sum_{k=1}^n x_k^p) - (\sum_{k=1}^n y_k x_k^p)^2, \end{aligned}$$

并由柯西不等式得 $y^{\mathrm{T}} A(x) y \geqslant 0$. 因此 $A(x) \succeq 0$, $\nabla^2 f(x) \preceq 0$. □

2.10 证明定理 2.12.

解 (俞建江). 先证充分性. 对 $\forall x_1, x_2 \in \mathbf{dom}\, f, \forall t \in (0,1)$, 记 $x_3 = tx_1 + (1-t)x_2$. 显然 $(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)) \in \mathbf{epi}\, f$, 由题设 $\mathbf{epi}\, f$ 是凸集, 得

$$(x_3, tf(x_1) + (1-t)f(x_2)) \in \mathbf{epi}\, f,$$

即

$$f(x_3) \leqslant tf(x_1) + (1-t)f(x_2),$$

因此 $f(x)$ 是凸函数.
再证明必要性. 对 $\forall (x_1, t_1), (x_2, t_2) \in \mathbf{epi}\, f, \forall t \in (0,1)$, 记 $(x_3, t_3) = t(x_1, t_1) + (1-t)(x_2, t_2)$. 由 $f(x)$ 凸函数性质:

$$f(x_3) \leqslant tf(x_1) + (1-t)f(x_2) \leqslant tt_1 + (1-t)t_2 = t_3$$

得到 $(x_3, t_3) \in \mathbf{epi}\, f$. 故 $\mathbf{epi}\, f$ 是凸集. □

2.11 考虑如下带有半正定约束的优化问题:

$$\begin{aligned} \min \quad & \mathrm{Tr}(X), \\ \mathrm{s.t.} \quad & \begin{bmatrix} A & B \\ B^{\mathrm{T}} & X \end{bmatrix} \succeq 0, \\ & X \in \mathcal{S}^n, \end{aligned}$$

其中 A 是正定矩阵.

(a) 利用附录 B.1.9 中的 Schur 补的结论证明此优化问题的解为 $X = B^{\mathrm{T}} A^{-1} B$;

(b) 利用定理 2.13 的 (8) 证明：函数 $f(A,B)=\mathrm{Tr}(B^{\mathrm{T}}A^{-1}B)$ 关于 (A,B) 是凸函数，其中 $f(A,B)$ 的定义域 $\mathbf{dom}\, f=\mathcal{S}_{++}^{m}\times\mathbb{R}^{m\times n}$.

解 (俞建江).

(a) 记：

$$M=\begin{bmatrix} A & B \\ B^{\mathrm{T}} & X \end{bmatrix},$$

A 在 M 中的 Schur 补 $D=X-B^{\mathrm{T}}A^{-1}B$，$M$ 半正定当且仅当 D 半正定，

$$\mathrm{Tr}(X)=\mathrm{Tr}(B^{\mathrm{T}}A^{-1}B)+\mathrm{Tr}(D)\geqslant\mathrm{Tr}(B^{\mathrm{T}}A^{-1}B)$$

当且仅当 $D=0$ 时上式取到等号．因此优化问题的解为 $X=B^{\mathrm{T}}A^{-1}B$.

(b) 取函数 $g(A,B,X)=\mathrm{Tr}(X)$，定义域为

$$\mathbf{dom}\, g=\left\{(A,B,X)\mid A\succ 0,\begin{bmatrix} A & B \\ B^{\mathrm{T}} & X \end{bmatrix}\succeq 0\right\},$$

显然 $\mathbf{dom}\, g$ 是凸集．又由第一小问知:

$$f(A,B)=\inf_{X} g(A,B,X),$$

再利用定理 2.13(8) 即可. □

2.12 求下列函数的共轭函数：

(a) 负熵：$\displaystyle\sum_{i=1}^{n} x_i \ln x_i$；

(b) 矩阵对数：$f(x)=-\ln\det(X)$；

(c) 最大值函数：$f(x)=\max\limits_{i} x_i$；

(d) 二次锥上的对数函数：$f(x,t)=-\ln(t^2-x^{\mathrm{T}}x)$，注意这里 f 的自变量是 (x,t).

解 (丁思哲).

(a) 若补充定义 $\lim\limits_{x\to 0} x\ln x = 0$，$\mathbf{dom}\, f = \{x \mid x \geqslant 0\}$.
由共轭函数的定义，取 $y \in \mathbb{R}^n$，且

$$
\begin{aligned}
f^*(y) &= \sup_{x\in\mathbf{dom}\, f} \{y^{\mathrm{T}}x - f(x)\} \\
&= \sup_{x\in\mathbf{dom}\, f} \{\sum_{i=1}^{n} y_i x_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \ln x_i\} \\
&= \sum_{i=1}^{n} e^{y_i - 1}.
\end{aligned}
$$

(b) 显然 $\mathbf{dom}\, f = \{X \in \mathbb{R}^{n\times n} \mid \det(X) > 0\}$. 我们先形式化地引入 $Y \in \mathbb{R}^{n\times n}$，假设下述运算都是有意义的.
共轭函数

$$
\begin{aligned}
f^*(Y) &= \sup_{X\in\mathbf{dom}\, f} \{\mathrm{Tr}(Y^{\mathrm{T}}X) - f(X)\} \\
&= \sup_{X\in\mathbf{dom}\, f} \{\mathrm{Tr}(Y^{\mathrm{T}}X) + \ln\det(X)\},
\end{aligned}
$$

因为

$$
\begin{aligned}
\mathrm{d}(\mathrm{Tr}(Y^{\mathrm{T}}X)) &= \mathrm{Tr}(\mathrm{d}(Y^{\mathrm{T}}X)) = \mathrm{Tr}(Y^{\mathrm{T}}\mathrm{d}X), \\
\mathrm{d}(\ln\det(X)) &= \det(X)^{-1}\mathrm{d}(\det(X)) = \mathrm{Tr}(X^{-1}\mathrm{d}X),
\end{aligned}
$$

因此

$$
\frac{\mathrm{d}(\mathrm{Tr}(Y^{\mathrm{T}}X) + \ln\det(X))}{\mathrm{d}X} = Y + (X^{\mathrm{T}})^{-1}.
$$

故取 $X = -(Y^{\mathrm{T}})^{-1}$ 时，满足

$$
f^*(Y) = -n - \ln\det(-Y),
$$

其中 Y 的定义域是 $\{Y \in \mathbb{R}^{n\times n} \mid \det(-Y) > 0\}$.

(c) 分情况讨论. 若 $\|y\|_1 \leqslant 1$ 且 $y \geqslant 0$，则 y 与 x 内积时不会改变 x 分量的符号，且一定成立

$$
y^{\mathrm{T}}x \leqslant \max_i x_i,
$$

故此时 $f^*(y) = 0$.
若不然，则或有 $\|y\|_1 > 1$. 不妨设 $j = \arg\max\limits_i x_i$ 且 $y_j = 1 + \delta$

（$\delta > 0$ 且其他坐标取 0），那么

$$
\begin{aligned}
f^*(y) &= \sup_{x\in\mathbb{R}^n}\{y^{\mathrm{T}}x - x_j\} \\
&= \sup_{x_j\in\mathbb{R}}\{\delta x_j\} \\
&\to \infty.
\end{aligned}
$$

又或存在 i 使得 $y_i < 0$，类似可证 $f^*(y)$ 不存在.

综上，$f^*(y) = 0$，定义域是 $\{y \in \mathbb{R}^n \mid y \geqslant 0, \|y\|_1 \leqslant 1\}$.

(d) 考虑取 $y \in \mathbb{R}^n$，$q \in \mathbb{R}$，且

$$
f^*(y,q) = \sup_{x,t}\{y^{\mathrm{T}}x + qt + \ln(t^2 - x^{\mathrm{T}}x)\},
$$

分别对

$$
g(x,y,t,q) = y^{\mathrm{T}}x + qt + \ln(t^2 - x^{\mathrm{T}}x)
$$

中的变量 x,t 求其稳定点，得等式组

$$
x = \frac{1}{2}\left(t^2 - x^{\mathrm{T}}x\right)y, \tag{2.1}
$$

$$
t = -\frac{1}{2}\left(t^2 - x^{\mathrm{T}}x\right)q. \tag{2.2}
$$

利用 (2.1) 和 (2.2) 即可注意到 $x = -\dfrac{t}{q}y$. 此式代入 g 可以消去 x，代入等式 (2.2) 可以用 y 和 q 表示 t. 此时

$$
g(y,t,q) = -\frac{t}{q}y^{\mathrm{T}}y + qt + \ln\left(t^2 - \frac{t^2}{q^2}y^{\mathrm{T}}y\right),
$$

并且 $t = \dfrac{-2q}{q^2 - y^{\mathrm{T}}y}$. 将 t 的表达式代入 g 消去 t，得到

$$
f^*(y,q) = -2 + \ln(\frac{4}{q^2 - y^{\mathrm{T}}y}),
$$

定义域为 $\{(y,q) \mid q^2 - y^{\mathrm{T}}y > 0\}$. □

2.13 求下列函数的一个次梯度：

(a) $f(x) = \|Ax - b\|_2 + \|x\|_2$；

(b) $f(x) = \inf_{y}\|Ay - x\|_\infty$，这里可以假设能够取到 $\hat{y}$，使得 $\|A\hat{y} - x\|_\infty = f(x)$.

解 (俞建江).

(a) 一个次梯度为:

$$g(x) = \begin{cases} \dfrac{A^{\mathrm{T}}(Ax-b)}{\|Ax-b\|_2} + \dfrac{x}{\|x\|_2}, & Ax-b \neq 0,\ x \neq 0, \\ \dfrac{A^{\mathrm{T}}(Ax-b)}{\|Ax-b\|_2}, & Ax-b \neq 0,\ x = 0, \\ \dfrac{x}{\|x\|_2}, & Ax-b = 0,\ x \neq 0, \\ 0, & Ax-b = 0,\ x = 0. \end{cases}$$

(b) 记 $h(x,y) = \|Ax-y\|_\infty$，显然 $h(x,y)$ 关于 $\{x,y\}$ 整体是凸函数. 因此必有 $0 \in \dfrac{\partial h(x,y)}{\partial y}\Big|_{y=\hat{y}}$. 不妨设 $Ay-x$ 的第 i 个分量满足

$$f(x) = |(A\hat{y}-x)_i|,$$

由定理 2.25，$f(x)$ 的一个次梯度为

$$-\mathrm{sign}\left((A\hat{y}-x)_i\right) e_i = \mathrm{sign}\left((x-A\hat{y})_i\right) e_i.$$

□

2.14 利用定理 2.24 来求出最大特征值函数 $f(x) = \lambda_1(A(x))$ 的次微分 $\partial f(x)$，其中 $A(x)$ 是关于 x 的线性函数

$$A(x) = A_0 + \sum_{i=1}^{n} x_i A_i, \quad A_i \in \mathcal{S}^m, i = 0, \cdots, n.$$

说明 $f(x)$ 何时是可微函数.

解 (俞建江). 易知

$$f(x) = \sup_{\|u\|_2=1} u^{\mathrm{T}} A u = \sup_{\|u\|_2=1} u^{\mathrm{T}} A_0 u + \sum_{i=1}^{n} x_i u^{\mathrm{T}} A_i u.$$

设 $A(x)$ 最大特征值的特征子空间为 V，集合 $C = V \cap \{u \| \|u\|_2 = 1\}$. 有

$$\partial f(x) = \mathbf{conv}\left\{(u^{\mathrm{T}} A_1 u, u^{\mathrm{T}} A_2 u, \cdots, u^{\mathrm{T}} A_n u) \mid u \in C\right\},$$

当 $A(x)$ 最大特征值的几何重数为 1 时，$f(x)$ 是可微函数. □

2.15 设 $f(x)$ 为 m-强凸函数，求证：对于任意的 $x \in \textbf{int dom}\, f$，

$$f(x) - \inf_{y \in \textbf{dom}\, f} f(y) \leqslant \frac{1}{2m} \mathrm{dist}^2(0, \partial f(x)),$$

其中 $\mathrm{dist}(z, S)$ 表示点 z 到集合 S 的欧几里得距离.

解 (俞建江). 对 $\forall x, y \in \textbf{int dom}\, f$，由引理 2.2，对 $\forall g \in \partial f(x)$，

$$f(y) - f(x) \geqslant g^{\mathrm{T}}(y - x) + \frac{m}{2}\|y - x\|_2^2 \geqslant -\frac{1}{2m}\|g\|_2^2,$$

后一个不等式在 $y - x = -\dfrac{g}{m}$ 时取等. 变号后有：

$$f(x) - f(y) \leqslant \frac{1}{2m}\|g\|_2^2,$$

由于 y, g 均是任取的，不等式左边取极大，右边取极小，成立

$$f(x) - \inf_{y \in \textbf{dom}\, f} f(y) \leqslant \frac{1}{2m} \mathrm{dist}^2(0, \partial f(x)).$$

□

第三章　优化建模

3.1 证明：方程组 (3.6.1) 的解不是唯一的.

解 (李天佑). 若 (3.6.1) 存在解 x_0，则

$$b_k^2 = |\langle a_k, x_0\rangle|^2 = |\langle a_k, -x_0\rangle|^2.$$

可知 $-x_0$ 也是 (3.6.1) 的一组解. □

3.2 设有一片 9×9 的空地，每一小块空地可以改成池塘或者稻田. 由于稻田需要经常灌溉，因此设计的时候每一块稻田至少要与一块池塘相邻（前、后、左、右四个方向视为相邻）. 我们的最终目标是让稻田的数量达到最大. 试将这个实际问题转化为优化问题，该优化问题中的目标函数和约束是如何设计的?

解 (李天佑). 设 x_{ij} 代表空地第 i 排第 j 列的用地类型，$x_{ij}=1$ 代表稻田，$x_{ij}=0$ 代表池塘. 优化问题可写为

$$\begin{aligned}
\max_{x}\quad & \sum_{1\leqslant i,j\leqslant 9} x_{ij}\\
\text{s.t.}\quad & |x_{ij}-x_{(i-1)j}|+|x_{ij}-x_{(i+1)j}|+\\
&\quad |x_{ij}-x_{i(j-1)}|+|x_{ij}-x_{i(j+1)}|\geqslant 1,\quad i,j=1,2,\cdots,9\\
& x_{0,k}=x_{k,0}=x_{10,k}=x_{k,10}=1,\quad k=1,2,\cdots,9\\
& x_{ij}\in\{0,1\},\quad i,j=1,2,\cdots,9.
\end{aligned}$$

□

3.3 给定正交矩阵 $U=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \dfrac{1}{2} & -\dfrac{\sqrt{3}}{2}\\ 0 & \dfrac{\sqrt{3}}{2} & \dfrac{1}{2}\end{bmatrix}$ 及矩阵 $A=U\mathrm{Diag}(10^{-6},2,3)U^{\mathrm{T}}$,

分别计算 $b=(0,0,0)^{\mathrm{T}}$ 和 $b=(10^{-4},0,0)^{\mathrm{T}}$ 的情形下模型 (3.2.4) 和 (3.2.6) 的解，其中参数 μ 待定，并分析得到的结果.

解 (李天佑). 对模型 (3.2.4) 中 $f(x)=\dfrac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2$ 进行求导，令导数 $\nabla_x f(x)=A^{\mathrm{T}}(Ax-b)=0$，得到解 $x=A^{-1}b$.
$b=(0,0,0)^{\mathrm{T}}$ 时模型 (3.2.4) 的解为

$$x_1=A^{-1}b=(0,0,0)^{\mathrm{T}},$$

$b=(10^{-4},0,0)^{\mathrm{T}}$ 时模型 (3.2.4) 的解为

$$x_2=A^{-1}b=(10^2,0,0)^{\mathrm{T}}.$$

对模型 (3.2.6) 中 $f(x)=\dfrac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2+\mu\|x\|_2^2$ 求导，令导数 $\nabla_x f(x)=A^{\mathrm{T}}(Ax-b)+2\mu x=0$，得到解 $x=(A^{\mathrm{T}}A+2\mu I)^{-1}A^{\mathrm{T}}b$.
$b=(0,0,0)^{\mathrm{T}}$ 时模型 (3.2.6) 的解为

$$x_1=(A^{\mathrm{T}}A+2\mu I)^{-1}A^{\mathrm{T}}b=(0,0,0)^{\mathrm{T}},$$

$b=(10^{-4},0,0)^{\mathrm{T}}$ 时模型 (3.2.6) 的解为

$$x_2=(A^{\mathrm{T}}A+2\mu I)^{-1}A^{\mathrm{T}}b=(\frac{10^2}{1+2\times10^{12}\mu},0,0)^{\mathrm{T}}.$$

模型 (3.2.4) 中矩阵 A 是病态的，故当 b 有轻微扰动时，解 x 有较大的影响；模型 (3.2.6) 中增加了一个 L2 正则项，解 x_1 与解 x_2 极为接近，正则项的存在使得优化模型的解更加稳定. □

3.4 在主成分分析中，我们需要计算高维空间中的数据点到低维空间中的投影. 试给出 $a\in\mathbb{R}^n$ 在由一般矩阵 $X\in\mathbb{R}^{n\times p}(p<n)$ 的列向量张成的空间中的投影，这里 X 可能不是列正交矩阵，也可能秩小于 p.

解 (李天佑). 求解 a 在矩阵 $X\in\mathbb{R}^{n\times p}(p<n)$ 的列向量张成的空间中的投影，写为优化问题

$$\min_{b\in\mathbb{R}^p}\quad \|Xb-a\|_2^2,$$

对其求导并令导数为 0，得到

$$X^{\mathrm{T}}Xb=X^{\mathrm{T}}a.$$

不妨设矩阵有分块 $X=(X_1,X_2)$，X_1 列满秩，X_2 可用 X_1 线性表示 $X_2=X_1P$. 对 $b=(b_1,b_2)^{\mathrm{T}}$ 做相同分块，方程可写为

$$\begin{pmatrix} X_1^{\mathrm{T}}X_1 & X_1^{\mathrm{T}}X_2 \\ X_2^{\mathrm{T}}X_1 & X_2^{\mathrm{T}}X_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} X_1^{\mathrm{T}}a \\ X_2^{\mathrm{T}}a \end{pmatrix}.$$

令 $X_2b_2=0$，由于 $p<n$，非零解是存在的.
代入 $X_2=X_1P$，得

$$\begin{pmatrix} X_1^{\mathrm{T}}X_1 & X_1^{\mathrm{T}}X_2 \\ X_2^{\mathrm{T}}X_1 & X_2^{\mathrm{T}}X_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} X_1^{\mathrm{T}}X_1b_1 \\ P^{\mathrm{T}}X_1^{\mathrm{T}}X_1b_1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} X_1^{\mathrm{T}}a \\ P^{\mathrm{T}}X_1^{\mathrm{T}}a \end{pmatrix}.$$

由于 X_1 列满秩，$X_1^{\mathrm{T}}X_1$ 可逆，可解得 $b_1=(X_1^{\mathrm{T}}X_1)^{-1}X_1^{\mathrm{T}}a$. 投影表示为

$$\mathrm{Proj}(a)=\begin{pmatrix} X_1 & X_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}=X_1(X_1^{\mathrm{T}}X_1)^{-1}X_1^{\mathrm{T}}a. \qquad \square$$

3.5 假设 $A=I$，请分别计算优化问题 (3.2.6) 和 (3.2.7) 的解. 进一步地，当 λ 和 σ 满足何种关系时，两个问题的解是一样的？

解 (李天佑). 优化问题 (3.2.6) 的解为 $x_1=\dfrac{1}{1+\mu}b$.
当 $\|b\|_2\leqslant\sigma$ 时，优化问题 (3.2.7) 的解为 $x_2=b$；当 $\|b\|_2\leqslant\sigma$ 时，

$$\begin{aligned}\|x-b\|_2^2&=\|x\|_2^2-2x^{\mathrm{T}}b+\|b\|_2^2\\&\geqslant\|x\|_2^2-2\|x\|_2\|b\|_2+\|b\|_2^2\\&=(\|x\|_2-\|b\|_2)^2\\&\geqslant(\sigma-\|b\|_2)^2,\end{aligned}$$

当且仅当 $x_2=\dfrac{\sigma}{\|b\|_2}b$ 时取得等号.
当 $\dfrac{1}{1+\mu}=\dfrac{\sigma}{\|b\|_2}$，即 $\|b\|_2=\sigma(1+\mu)$ 时，两个问题的解相同. $\square$

3.6 给定向量 $a,b\in\mathbb{R}^n$，分别考虑取 $\ell_1,\ell_2,\ell_\infty$ 范数时，优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}}\quad \|xa-b\|$$

的解.

解 (李天佑). 记 $a=(a_1,a_2,\ldots,a_n)^{\mathrm{T}},b=(b_1,b_2,\ldots,b_n)^{\mathrm{T}}$.

- ℓ_1 范数．$\|xa-b\|_{\ell_1}=\sum\limits_{i=1}^{n}|xa_i-b_i|$．不妨设 $a_i\neq 0$，否则无视该项，又不妨令 $\dfrac{b_1}{a_1}\leqslant\dfrac{b_2}{a_2}\leqslant\cdots\leqslant\dfrac{b_n}{a_n}$，否则重新排序．那么

$$f(x)=\sum_{i=1}^{n}|a_i||x-\frac{b_i}{a_i}|=l_ix+m_i,\quad x\in[\frac{b_i}{a_i},\frac{b_{i+1}}{a_{i+1}}),$$

  因此 $f(x)$ 可写为分段线性函数．既然如此，存在某个 k 使得

$$l_{k-1}=\sum_{i=1}^{k-1}|a_i|-\sum_{j=k}^{n}|a_j|\leqslant 0,$$
$$l_k=\sum_{i=1}^{k}|a_i|-\sum_{j=k+1}^{n}|a_j|\geqslant 0,$$

  故 $x=\dfrac{b_k}{a_k}$ 时，函数有最小值 $\sum\limits_{i=1}^{n}|\dfrac{b_k}{a_k}a_i-b_i|$.

- ℓ_2 范数．$\|xa-b\|_2^2=\|a\|_2^2x^2-2(a^{\mathrm{T}}b)x+\|b\|_2^2$，当 $x=\dfrac{a^{\mathrm{T}}b}{\|a\|_2^2}$ 时，函数有最小值 $\|b\|_2^2-\dfrac{(a^{\mathrm{T}}b)^2}{\|a\|_2^2}$.

- ℓ_∞ 范数．$\|xa-b\|_{\ell_\infty}=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}|xa_i-b_i|=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}|a_i||x-\dfrac{b_i}{a_i}|$ 为分段线性函数，并且是凸函数．因此一定存在 $i<j$ 使得最小点在二者边界处取到，不妨设 $\dfrac{b_i}{a_i}<\dfrac{b_j}{a_j}$，$x\in(\dfrac{b_i}{a_i},\dfrac{b_j}{a_j})$，

$$|a_i|(x-\frac{b_i}{a_i})=|a_j|(\frac{b_j}{a_j}-x),$$

  解得 $x=\dfrac{\operatorname{sign}(a_i)bi+\operatorname{sign}(a_j)b_j}{|a_i|+|a_j|}$. □

3.7 考虑线性观测模型

$$b_i=a_i^{\mathrm{T}}x+\varepsilon_i,\quad i=1,2,\cdots,m,$$

其中 a_i,b_i 为观测数据，ε_i 为独立同分布的噪声，x 是要估计的参数．在下面的假设下，请利用最大似然估计方法构造相应的优化问题来估计参数 x.

(a) 噪声 $\varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0,\sigma^2)$，其密度函数为 $p(z)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp(-\dfrac{z^2}{2\sigma^2})$；

(b) 噪声 ε_i 服从拉普拉斯（Laplace）分布，其密度函数为 $p(z)=\dfrac{1}{2a}\exp(-\dfrac{|z|}{a})$，$a>0$；

(c) 噪声 ε_i 为 $[-a,a](a>0)$ 上的均匀分布，其密度函数为 $p(z)=\dfrac{1}{2a}$，$z\in[-a,a]$.

解 (李天佑).

(a) 对数似然函数为

$$\begin{aligned} l(x) &= \sum_{i=1}^{m}\ln p(b_i-a_i^{\mathrm{T}}x) \\ &= -\sum_{i=1}^{m}(\ln\sqrt{2\pi}\sigma+\frac{(b_i-a_i^{\mathrm{T}}x)^2}{2\sigma^2}), \end{aligned}$$

故优化问题可写为：

$$\max_x \quad l(x) \Leftrightarrow \min_x \quad \sum_{i=1}^{m}(b_i-a_i^{\mathrm{T}}x)^2.$$

(b) 对数似然函数为

$$\begin{aligned} l(x) &= \sum_{i=1}^{m}\ln p(b_i-a_i^{\mathrm{T}}x) \\ &= -\sum_{i=1}^{m}(\ln 2a+\frac{|(b_i-a_i^{\mathrm{T}}x|}{a}), \end{aligned}$$

故优化问题可写为：

$$\max_x \quad l(x) \Leftrightarrow \min_x \quad \sum_{i=1}^{m}|b_i-a_i^{\mathrm{T}}x|.$$

(c) 似然函数为

$$\begin{aligned} L(x) &= \prod_{i=1}^{m}p(b_i-a_i^{\mathrm{T}}x) \\ &= \begin{cases} (\dfrac{1}{2a})^m & , \quad \max\limits_{1\leqslant i\leqslant m}|b_i-a_i^{\mathrm{T}}x|\leqslant a, \\ 0 & , \quad \text{else}, \end{cases} \end{aligned}$$

故优化问题可构造为 $\min\limits_x \max\limits_{1\leqslant i\leqslant m}|b_i-a_i^{\mathrm{T}}x|$. □

3.8 在逻辑回归中，如果把 Sigmoid 函数 (3.3.1) 换成

$$\theta(z) = \frac{1}{2} + \frac{z}{2(1+|z|)},$$

试利用最大似然估计建立分类模型. 该模型得到的优化问题是否是凸的?

解 (李天佑). 注意到

$$p(b|a;x) = \theta(b \cdot a^{\mathrm{T}} x) = \frac{1}{2} + \frac{b \cdot a^{\mathrm{T}} x}{2(1+|a^{\mathrm{T}} x|)},$$

对数似然函数为

$$l(x) = \sum_{i=1}^{m} \ln\left(\frac{1}{2} + \frac{b_i \cdot a_i^{\mathrm{T}} x}{2(1+|a_i^{\mathrm{T}} x|)}\right).$$

因此优化问题可写作

$$\min_x \sum_{i=1}^{m} \ln\left(\frac{1+|a_i^{\mathrm{T}} x|}{1+|a_i^{\mathrm{T}} x| + b_i \cdot a_i^{\mathrm{T}} x}\right).$$

很容易验证该优化模型不是凸的. □

3.9 给定以下带标签的数据:

标签	**数据点**
-1	$(1,5,1),(9,5,1)$
1	$(8,13,13),(5,1,9)$

请建立原始的支持向量机模型并计算分割超平面.

解 (李天佑). 原始的支持向量机模型为

$$\max_{x,y,\gamma} \quad \gamma \quad \text{s.t.} \quad \frac{b_i(a_i^{\mathrm{T}} x + y)}{\|x\|_2} \geqslant \gamma, \quad i = 1,2,3,4.$$

分割超平面可以是 a_1, a_2 与 a_3, a_4 对应中点的所在的平面，即

$$\frac{a_1+a_3}{2} = (\frac{9}{2}, 9, 7)^{\mathrm{T}}, \quad \frac{a_1+a_4}{2} = (3,3,5)^{\mathrm{T}},$$
$$\frac{a_2+a_3}{2} = (\frac{17}{2}, 9, 7)^{\mathrm{T}}, \quad \frac{a_1+a_3}{2} = (7,3,5)^{\mathrm{T}}.$$

可解得所在平面为 $x^{\mathrm{T}} w + y = 0$，其中 $x = (0,-1,3)^{\mathrm{T}}$ 且 $y = 12$. □

3.10 用超平面（如 $a^{\mathrm{T}}x + b = 0$）来分类的模型称为线性分类模型. 证明逻辑回归是线性分类模型. 与支持向量机相比，逻辑回归的优缺点是什么?

解 (李天佑). 在逻辑回归中，预测样本属于类别 1 的概率是

$$p(1|a;x) = \mathcal{P}(t = 1|a) = \theta(a^{\mathrm{T}}x),$$

属于类别-1 的概率是

$$p(-1|a;x) = 1 - p(1|a;x) = \theta(-a^{\mathrm{T}}x),$$

因此逻辑回归用超平面分类，是线性分类模型.
优点：逻辑回归相比 SVM，考虑到了全局的样本点；逻辑回归不需要归一化；逻辑回归更适合处理大规模分类问题.
缺点：逻辑回归对部分异常值敏感；逻辑回归是线性分类模型，SVM 通过引入核函数可以变成非线性分类模型，应用更广泛. □

3.11 请分析如何将支持向量机方法应用到多分类问题中.

解 (李天佑).

(a) **成对分类方法**
若存在 n 类数据点，可以分别求得每对之间的决策平面，综合 C_n^2 个决策平面进行分类.

(b) **一类对余类**
若存在 n 类数据点，可以逐个选择某类数据，视为 +1 类，其余 $n-1$ 个类视为 -1 类，共得到 n 个决策平面进行分类. □

3.12 考虑三个随机变量 X, Y, Z，取值集合均为 $\{1, 2, \cdots, n\}$.

(a) 在没有独立性假设的条件下，为了表示随机向量 (X, Y, Z) 的联合概率质量函数 $p(x, y, z)$，我们至少需要多少个参数?

(b) 如果在给定 X 的情况下，Y 和 Z 独立，为了表示 $p(x, y, z)$，至少需要多少个参数?

解 (李天佑).

(a) 至少需要 n^3-1 个参数.

(b) 由于给定 X 的情况下，Y 和 Z 独立，

$$\begin{aligned}
&P(X=x,Y=y,Z=z)\\
&=P(X=x)P(Y=y|X=x)P(Z=z|X=x,Y=y)\\
&=P(X=x)P(Y=y|X=x)P(Z=z|X=x),
\end{aligned}$$

因此需要 $n-1+n(n-1)+n(n-1)=(2n+1)(n-1)$ 个参数. □

3.13 给定 n 维高斯随机变量的一组实际取值：$y^1,y^2,\cdots,y^m$. 试利用最大似然方法给出其精度矩阵的估计.

解 (李天佑). 对数似然函数为

$$l(X)=\ln\det(X)-tr(XS),$$

其中 $S=\dfrac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y^i-\bar{y})(y^i-\bar{y})^{\mathrm{T}}$. 令 $\nabla_X l(X)=(X^{-1})^{\mathrm{T}}-S^{\mathrm{T}}=0$，得到精度矩阵的估计 $X=S^{-1}$. □

3.14 试证明如下和 K-均值聚类相关的结论.

(a) 设 S_i 非空，证明：

$$2n_i\sum_{a\in S_i}\|a-c_i\|^2=\sum_{a,a'\in S_i}\|a-a'\|^2,$$

其中 n_i 为 S_i 中元素个数，c_i 为 S_i 所有数据点的中心点.

(b) 证明：问题 (3.10.4) 和问题 (3.10.5) 等价.

解 (李天佑).

(a) 由于 $c_i = \dfrac{1}{n_i}\sum_{a\in S_i} a$,

$$
\begin{aligned}
\|a-c_i\|^2 &= \|a - \frac{1}{n_i}\sum_{a'\in S_i} a'\|^2 \\
&= \frac{1}{n_i^2}\|\sum_{a'\in S_i}(a-a')\|^2 \\
&= \frac{1}{n_i^2}\sum_{a''\in S_i}\sum_{a'\in S_i}\langle a-a', a-a''\rangle \\
&= \frac{1}{n_i^2}\sum_{a''\in S_i}\sum_{a'\in S_i}\frac{\|(a-a')\|^2+\|(a-a'')\|^2-\|(a''-a')\|^2}{2} \\
&= \frac{1}{n_i}\sum_{a'\in S_i}\|(a-a')\|^2 - \frac{1}{2n_i^2}\sum_{a''\in S_i}\sum_{a'\in S_i}\|(a''-a')\|^2.
\end{aligned}
$$

进一步有

$$
\begin{aligned}
\sum_{a\in S_i}\|a-c_i\|^2 &= \frac{1}{n_i}\sum_{a,a'\in S_i}\|(a-a')\|^2 - \frac{1}{2n_i}\sum_{a,a'\in S_i}\|(a-a')\|^2 \\
&= \frac{1}{2n_i}\sum_{a,a'\in S_i}\|(a-a')\|^2.
\end{aligned}
$$

(b) (3.10.4)⇒(3.10.5):
若 X 是 (3.10.4) 的解, 对半定矩阵 X 进行分解 $X = YY^{\mathrm{T}}$, 可取 $Y = [\frac{1}{\sqrt{n_1}}\mathbf{1}_{S_1}, \frac{1}{\sqrt{n_2}}\mathbf{1}_{S_2}, \ldots, \frac{1}{\sqrt{n_k}}\mathbf{1}_{S_k}]$, 得到

$$
\begin{aligned}
YY^{\mathrm{T}}\mathbf{1} &= \sum_{t=1}^{k}\frac{1}{n_t}\mathbf{1}_{S_t}n_t = \mathbf{1}, \\
(Y^{\mathrm{T}}Y)_{ij} &= \frac{1}{\sqrt{n_i}}\frac{1}{\sqrt{n_j}}\mathbf{1}_{S_i}^{\mathrm{T}}\mathbf{1}_{S_j} = \delta_{ij}, \\
\mathrm{Tr}(DX) &= \mathrm{Tr}(DYY^{\mathrm{T}}) = \mathrm{Tr}(DY^{\mathrm{T}}Y),
\end{aligned}
$$

故 Y 是 (3.10.5) 的解.
(3.10.5)⇒(3.10.4):
若 Y 是 (3.10.5) 的解, 由于 $Y^{\mathrm{T}}Y = I_k, Y \geqslant 0$, 由列正交可知 Y 每行最多一个非零元. 设 $Y = [y_1, y_2, \ldots, y_k]$, 则由 $\mathbf{1} = YY^{\mathrm{T}}\mathbf{1} = \sum_{t=1}^{k} y_t(y_t^{\mathrm{T}}\mathbf{1})$ 可知, Y 每行有且仅有一个非零元.

设 y_t 有 n_t 个非零元，位置为 S_t，可知 y_t 非零元为 $\dfrac{1}{y_t^{\mathrm{T}}\mathbf{1}}$，进一步推出 $y_t^{\mathrm{T}}y_t = n_t(\dfrac{1}{y_t^{\mathrm{T}}\mathbf{1}})^2 = 1$，得到 $y_t^{\mathrm{T}}\mathbf{1} = \sqrt{n_t}$，$y_t = \dfrac{1}{\sqrt{n_t}}\mathbf{1}_{S_t}$.

令 $X = YY^{\mathrm{T}} = \displaystyle\sum_{t=1}^{k}\frac{1}{n_t}\mathbf{1}_{S_t}\mathbf{1}_{S_t}^{\mathrm{T}}$，其中 $S_1 \cup S_2 \cup \cdots \cup S_k$ 为一个 n 元集划分，则 X 是 (3.10.4) 的解. □

3.15 在 $\mathbb{R}^2$ 空间中，定义小波框架

$$
\begin{aligned}
w_1 &= \sqrt{\frac{2}{3}}(0,1)^{\mathrm{T}},\\
w_2 &= \sqrt{\frac{2}{3}}(-\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{1}{2})^{\mathrm{T}},\\
w_3 &= \sqrt{\frac{2}{3}}(\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{1}{2})^{\mathrm{T}}.
\end{aligned}
$$

对于向量 $x = (1,3)^{\mathrm{T}}$，试给出其在小波框架下的稀疏表示.

解 (李天佑). 求 $(w_1, w_2, w_3)\alpha = x$ 的稀疏解，其解集为

$$
\{\alpha = t\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\dfrac{\sqrt{2}+3\sqrt{6}}{2}\\0\\\sqrt{2}\end{pmatrix}, t \in \mathbb{R}\}.
$$

因此稀疏解为

$$
\alpha_1 = \begin{pmatrix}0\\-\dfrac{\sqrt{2}+3\sqrt{6}}{2}\\\dfrac{3\sqrt{6}-\sqrt{2}}{2}\end{pmatrix},\ \alpha_2 = \begin{pmatrix}\dfrac{\sqrt{2}+3\sqrt{6}}{2}\\0\\\sqrt{2}\end{pmatrix},\ \alpha_3 = \begin{pmatrix}\dfrac{3\sqrt{6}-\sqrt{2}}{2}\\-\sqrt{2}\\0\end{pmatrix}.
$$

□

第四章　典型优化问题

4.1 将下面的问题转化为线性规划：给定 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$b \in \mathbb{R}^n$，

(a) $\displaystyle\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|Ax-b\|_1, \quad \text{s.t.} \quad \|x\|_\infty \leqslant 1;$

(b) $\displaystyle\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|x\|_1, \quad \text{s.t.} \quad \|Ax-b\|_\infty \leqslant 1;$

(c) $\displaystyle\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|Ax-b\|_1 + \|x\|_\infty;$

(d) $\displaystyle\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \sum_{i=1}^m \max\{0, a_i^{\mathrm{T}}x + b_i\}.$

解 (丁思哲). 分别就本题存在的非线性项作如下转化：

- 目标函数中存在 ℓ_1 范数的情形，例如 $\|x\|_1$，可以转化为

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|x\|_1 &= \min_{x_i\in\mathbb{R}} \quad \sum_{i=1}^n |x_i| \\ &\Rightarrow \min_{z_i\in\mathbb{R}_+} \quad \sum_{i=1}^n z_i \quad \text{s.t.} \quad -z_i \leqslant x_i \leqslant z_i.\end{aligned}$$

- 目标函数中存在 max 函数的情形，例如 $\max\{0, x_i\}$ 的和. 注意到

$$\max\{0, x_i\} = \frac{|x_i| + x_i}{2},$$

就可以转化为目标函数中存在 ℓ_1 范数的情形. 或者也可以引入 $z_i \geqslant 0$ 并转化为

$$\min_{z_i\in\mathbb{R}_+} \quad \sum_{i=1}^n z_i \quad \text{s.t.} \quad z_i \geqslant x_i.$$

- 目标函数中存在 ℓ_∞ 范数的情形，例如 $\|x\|_\infty$．注意到

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|x\|_\infty &= \min_{x_i\in\mathbb{R}} \quad \max\{|x_i|\}\\ &\Rightarrow \min_{t\in\mathbb{R}_+} \quad t \quad \text{s.t.} \quad -t\mathbf{1}\leqslant x\leqslant t\mathbf{1}.\end{aligned}$$

- 条件中存在 ℓ_∞ 范数的情形．参考上一项，例如对 $\|x\|_\infty\leqslant\alpha$ 变换为

$$-\alpha\mathbf{1}\leqslant x\leqslant\alpha\mathbf{1}.$$

根据以上变换的形式，各小问转化成的线性规划问题分别是：

(a)

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^n,z\in\mathbb{R}^m_+} \quad & \sum_{i=1}^n z_i\\ \text{s.t.} \quad & -z\leqslant Ax-b\leqslant z,\\ & -\mathbf{1}\leqslant x\leqslant\mathbf{1}.\end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^n,z\in\mathbb{R}^m_+} \quad & \sum_{i=1}^m z_i\\ \text{s.t.} \quad & -z\leqslant x\leqslant z,\\ & -\mathbf{1}\leqslant Ax-b\leqslant\mathbf{1}.\end{aligned}$$

(c)

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^n,z\in\mathbb{R}^m_+,t\in\mathbb{R}_+} \quad & \sum_{i=1}^m z_i+t\\ \text{s.t.} \quad & -z\leqslant Ax-b\leqslant z,\\ & -t\mathbf{1}\leqslant x\leqslant t\mathbf{1}.\end{aligned}$$

(d)

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^n,z\in\mathbb{R}^m_+} \quad & \sum_{i=1}^m z_i\\ \text{s.t.} \quad & z\geqslant Ax+b.\end{aligned}$$

□

4.2 求解下面的线性规划问题：给定向量 $c\in\mathbb{R}^n$，

(a) $\displaystyle\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad c^{\mathrm{T}}x, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{0}\leqslant x\leqslant\mathbf{1};$

(b) $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} \quad c^{\mathrm{T}}x, \quad \text{s.t.} \quad -\mathbf{1} \leqslant x \leqslant \mathbf{1};$

(c) $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} \quad c^{\mathrm{T}}x, \quad \text{s.t.} \quad -1 \leqslant \mathbf{1}^{\mathrm{T}}x \leqslant 1;$

(d) $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} \quad c^{\mathrm{T}}x, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{1}^{\mathrm{T}}x = 1, \quad x \geqslant 0;$

解 (邓展望).

(a) 问题可写为

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & \sum_{i=1}^{n} c_i x_i \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{0} \leqslant x \leqslant \mathbf{1}, \end{aligned}$$

所以当 $c_i > 0$ 时 $x_i = 0$；当 $c_i < 0$ 时 $x_i = 1$，即 x 可写为

$$x = (x_1, ..., x_n)^{\mathrm{T}}, \quad x_i = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\operatorname{sign}(c_i).$$

(b) 根据 (a) 的分析，同理可知

$$x = (x_1, ..., x_n)^{\mathrm{T}}, \quad x_i = -\operatorname{sign}(c_i).$$

(c) 由于问题可写为

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & \sum_{i=1}^{n} c_i x_i \\ \text{s.t.} \quad & -1 \leqslant \mathbf{1}^{\mathrm{T}}x \leqslant 1, \end{aligned}$$

所以若 $c_i \neq c_j$，不妨设 $c_i > c_j$，则取 $x_i = -z, x_j = z$，其余分量为 0，目标函数的值为 $-z(c_i - c_j) \to -\infty (z \to +\infty)$，所以原问题无界.

该问题有解当且仅当 $c = m\mathbf{1}$，其中 m 为常数.

(d) 问题可写为

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & \sum_{i=1}^{n} c_i x_i \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{1}^{\mathrm{T}}x = 1, \end{aligned}$$

设 c_j 为 $c_i (i = 1...n)$ 中最小的项，则有

$$\sum_{i=1}^{n} c_i x_i \geqslant \sum_{i=1}^{n} c_j x_i = c_j$$

即解为 $x = (0, ...1, ...0)$，其中第 j 个分量取 1. □

4.3 在数据插值中，考虑一个简单的复合模型（取 ϕ 为恒等映射，两层复合模型）：

$$\min_{X_1\in\mathbb{R}^{q\times p},X_2\in\mathbb{R}^{q\times q}} \quad \sum_{i=1}^{m}\|X_2X_1a_i-b_i\|_2^2,$$

其中 $a_i\in\mathbb{R}^p, b_i\in\mathbb{R}^q, i=1,2,\cdots,m.$

(a) 试计算目标函数关于 X_1, X_2 的导数；

(b) 试给出该问题的最优解.

解 (俞建江). 将 a_i, b_i 整合成矩阵 A, B：

$$A=(a_1,a_2,\cdots,a_m)\in\mathbb{R}^{p\times m},\ B=(b_1,b_2,\cdots,b_m)\in\mathbb{R}^{q\times m},$$

则目标函数等价于

$$\begin{aligned} f(X_1,X_2)=&\sum_{i=1}^{m}\|X_2X_1a_i-b_i\|_2^2\\ =&\|X_2X_1A-B\|_F^2\\ =&\mathrm{Tr}((X_2X_1A-B)^{\mathrm{T}}(X_2X_1A-B)). \end{aligned}$$

(a) 任取 $V\in\mathbb{R}^{q\times p}$ 以及 $t>0$，

$$\begin{aligned} f(X_1+tV,X_2)-f(X_1,X_2) &= 2t\mathrm{Tr}((X_2VA)^{\mathrm{T}}(X_2X_1A-B))+\mathcal{O}(t^2)\\ &= 2t\left\langle V, X_2^{\mathrm{T}}(X_2X_1-B)A^{\mathrm{T}}\right\rangle+\mathcal{O}(t^2), \end{aligned}$$

故 $\dfrac{\partial f}{\partial X_1}=2X_2^{\mathrm{T}}(X_2X_1A-B)A^{\mathrm{T}}.$

类似地可得到 $\dfrac{\partial f}{\partial X_2}=2(X_2X_1A-B)A^{\mathrm{T}}X_1^{\mathrm{T}}.$

(b) 令 $X=X_2X_1$，$g(X)=\|XA-B\|_F^2$，容易验证问题

$$\min_{X\in\mathbb{R}^{q\times p}}\|XA-B\|_F^2$$

与原问题等价. 令 $\dfrac{\partial g}{\partial X}=(XA-B)A^{\mathrm{T}}=0$，即

$$A(A^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}-B^{\mathrm{T}})=0,$$

显然这个方程有解，且由于 $g(X)=AA^{\mathrm{T}}$ 为半正定矩阵，方程的解即为原问题的解. 设等价问题的解集为 C，即原问题的最优解集是 $C_0=\{(X_1,X_2)\mid X_2X_1\in C\}$.

□

4.4 给定数据点 $a_i \in \mathbb{R}^n, b_i \in \mathbb{R}^n, i = 1, 2, \cdots, m$，我们用二次函数拟合，即求 $X \in \mathcal{S}^n, y \in \mathbb{R}^n, z \in \mathbb{R}$ 使得

$$b_i \approx f(a_i) = a_i^{\mathrm{T}} X a_i + y^{\mathrm{T}} a_i + z, \quad i = 1, 2, \cdots, m.$$

这里假设数据点 $a_i \in \mathcal{B} = \{a \in \mathbb{R}^n \mid l \leqslant a \leqslant u\}$. 相应的最小二乘模型为

$$\sum_{i=1}^{m} (f(a_i) - b_i)^2.$$

此外，对函数 f 有三个额外要求：(1) f 是凹函数；(2) f 在集合 $\mathcal{B}$ 上是非负的，即 $f(a) \geqslant 0, \forall a \in \mathcal{B}$；(3) f 在 $\mathcal{B}$ 上是单调非减的，即对任意的 $a, \hat{a} \in \mathcal{B}$ 且满足 $a \leqslant \hat{a}$，有 $f(a) \leqslant f(\hat{a})$.

请将上述问题表示成一个凸优化问题，并尽可能地简化.

解 (邓展望).

- 首先由于 f 为凹函数，所以 X 为负半定矩阵，即 $-X$ 为半正定矩阵.
- 由于 f 在 $\mathcal{B}$ 上是单调非减的，根据凹函数的理论可知，凹函数在约束情况下的最小值只可能在边界取到所以约束为：

$$\text{设} l = (l_1, l_2, ..., l_m), u = (u_1, u_2, ...u_m),$$

$$x^{\mathrm{T}} X x^{\mathrm{T}} + y^{\mathrm{T}} x + z \geqslant 0, x_i = l_i \text{或者} u_i.$$

- 再根据单调非减性，由于

$$\begin{aligned} f(a+\varepsilon) - f(a) &= (a+\varepsilon)^{\mathrm{T}} X + (a+\varepsilon) + y^{\mathrm{T}}(a+\varepsilon) + z - a^{\mathrm{T}} X a \\ &\quad - y^{\mathrm{T}} a - z \\ &= 2\varepsilon X a + y^{\mathrm{T}} \varepsilon \geqslant 0, \end{aligned}$$

  其中 $\varepsilon \geqslant 0$，因 ε 的任意性，所以该不等式对任意 $a \in \mathcal{B}$ 均成立.

综上，凸优化问题可写为

$$\begin{aligned} \min_{X\in\mathcal{S},y\in\mathbb{R}^n,z\in R} \quad & \sum_{i=1}^{m}(a_i^{\mathrm{T}}Xa_i - y^{\mathrm{T}}a_i - z + b_i)^2. \\ \text{s.t.} \quad & X \geqslant 0, \\ & x^{\mathrm{T}}Xx^{\mathrm{T}} + y^{\mathrm{T}}x + z \geqslant 0, \quad x_i \in \{l_i, u_i\}, \\ & 2\varepsilon Xa + y^{\mathrm{T}}\varepsilon \geqslant 0, \quad \varepsilon \geqslant 0, \\ & a \in \mathcal{B}. \end{aligned}$$

□

4.5 考虑下面的复合优化问题：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|x\|_1 + \|Dx - a\|_2^2,$$

其中 $a \in \mathbb{R}^n, D = \mathrm{Diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n)$ 均已知．试给出最优解 x^* 的表达式．

解 (邓展望)．**注：可参考课本 8.4.12**
由于对每个分量考虑，原问题可化为

$$|x_i| + (d_i x_i - a_i)^2 = |x_i| + d_i^2 x_i^2 - 2a_i x_i d_i + a_i^2,$$

求解该问题则可给出 x^* 每个分量的表达式．

(a) 若 $-2d_i a_i + 1 \leqslant 0$，$x_i^* = \dfrac{2d_i a_i - 1}{2d_i^2}$.

(b) 若 $-2d_i a_i - 1 \geqslant 0$，$x_i^* = \dfrac{1 + 2d_i a_i}{2d_i^2}$.

(c) 否则 $x_i^* = 0$. □

4.6 考虑下面的复合优化问题：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|x\|_0 + \|Dx - a\|_2^2,$$

其中 $a \in \mathbb{R}^n, D = \mathrm{Diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n)$ 均已知．试给出最优解 x^* 的表达式．

解 (邓展望)．按 **4.5** 题的方法，先给出 x_i 的表达式为

$$g(x_i) = \delta(x_i) + (d_i x_i - a_i)^2,$$

其中 $\delta(x_i) = 1$ 当且仅当 $x_i \neq 0$，否则取 0．则最优解分量 x_i^* 的表达式为：

(a) 若 $d_i = 0$，则 $x_i^* = 0$.

(b) 若 $d_i \neq 0$，

i. 若 $|a_i| \leqslant 1$，取 $x_i^* = 0$ 较小，此时满足

$$g(0) \leqslant g(x_i). \quad (x_i \neq 0)$$

ii. 若 $|a_i| > 1$，取使得 $(d_i x_i - a_i)^2$ 最小的非零的 x_i 即可，那么 $x_i^* = \dfrac{a_i}{d_i}$. □

4.7 将不等式形式的半定规划问题 (4.5.1) 转化成标准形式 (4.5.2).

解 (俞建江). 将原问题先化为:

$$\begin{aligned} \min_{y \in \mathbb{R}^m} \quad & -b^{\mathrm{T}} y, \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{m} y_i A_i \preceq C. \end{aligned} \tag{4.1}$$

我们可以求其对偶问题. 对不等式约束引入乘子 $X \in \mathcal{S}^n$ 并且 $X \succeq 0$，拉格朗日函数为

$$\begin{aligned} L(y, X) &= -b^{\mathrm{T}} y + \left\langle X, \left(\sum_{i=1}^{m} y_i A_i \right) - C \right\rangle, \\ &= \sum_{i=1}^{m} y_i(-b_i + \langle A_i, X \rangle) - \langle C, X \rangle. \end{aligned}$$

因为上式对 y 是仿射的，故对偶函数可以描述为

$$g(X) = \inf_{y} L(y, X) = \begin{cases} -\langle C, X \rangle, & \langle A_i, X \rangle = b_i,\ i = 1, 2, \cdots, m, \\ -\infty, & \text{其它}. \end{cases}$$

因此对偶问题可以写成

$$\begin{aligned} \min_{X \in \mathcal{S}^n} \quad & \langle C, X \rangle, \\ \text{s.t.} \quad & \langle A_i, X \rangle = b_i,\ i = 1, 2, \cdots, m, \\ & X \succeq 0. \end{aligned} \tag{4.2}$$

□

4.8 证明如下结论.

(a) 设 $x \in \mathbb{R}^n$，$X \in \mathcal{S}^n$，定义 $\overline{X} = \begin{bmatrix} X & x \\ x^{\mathrm{T}} & 1 \end{bmatrix}$，证明 $X \succeq xx^{\mathrm{T}}$ 等价于 $\overline{X} \succeq 0$.

(b) 设 $z \in \mathbb{R}^m$，矩阵值映射 $M(z) : \mathbb{R}^m \to \mathcal{S}^n$ 定义为

$$M(z) = A_0 + \sum_{i=1}^{m} z_i A_i, \quad A_i \in \mathcal{S}^n,$$

证明：$\eta \geqslant \lambda_{\max}(M(z))$ 等价于 $\eta I \succeq M(z)$.

解 (俞建江).

(a) 1 在 $\overline{M}$ 中的 Schur 补为 $X - xx^{\mathrm{T}}$，由定理 **B.3**，$\overline{M} \succeq 0$ 当且仅当 $M - xx^{\mathrm{T}} \succeq 0$.

(b) 由 $M(z) \in \mathcal{S}^n$，对 $M(z)$ 进行谱分解

$$M(z) = Q^{\mathrm{T}} D_z Q,$$

其中 $D_z = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$ $(\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \lambda_n)$. 那么

$$\begin{aligned} & \eta I \succeq M(z) \\ \Leftrightarrow \quad & \eta I \succeq D_z \\ \Leftrightarrow \quad & \eta \geqslant \lambda_1 = \lambda_{\max}(M(z)). \end{aligned}$$

□

4.9 给定矩阵 $A_i \in \mathcal{S}^m$，$i = 0, 1, \cdots, n$，定义线性映射 $A(x) = A_0 + x_1 A_1 + \cdots + x_n A_n$，令 $\lambda_1(x) \geqslant \lambda_2(x) \geqslant \cdots \lambda_m(x)$ 为矩阵 $A(x)$ 的特征值. 将下面的优化问题转化为半定规划问题：

(a) $\displaystyle\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad \lambda_1(x) - \lambda_m(x).$

(b) $\displaystyle\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad \sum_{i=1}^{m} |\lambda_i(x)|.$

解 (俞建江). 类似 **4.8** 题的分析方法，可知：

(a) 原问题可转化为

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & \alpha - \beta \\ \text{s.t.} \quad & \alpha I \succeq A(x), \\ & \beta I \preceq A(x). \end{aligned}$$

(b) 原问题可转化为

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \mathrm{Tr}(A^+) + \mathrm{Tr}(A^-) \\
\text{s.t.} \quad & A = A^+ - A^-, \\
& A^+ \succeq 0, \quad A^- \succeq 0.
\end{aligned}
$$

□

4.10 将下面的优化问题转化为半定规划问题：

(a) 给定 $(n+1)$ 个矩阵 $A_i \in \mathbb{R}^{p\times q}$，$i = 0, 1, \cdots, n$，考虑优化问题

$$
\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|A(x)\|_2,
$$

其中 $A(x) = A_0 + x_1A_1 + \cdots + x_nA_n$ 且 $\|\cdot\|_2$ 为矩阵的谱范数（即最大奇异值）；

(b) 给定 $c \in \mathbb{R}^n$，$A \in \mathbb{R}^{m\times n}, b \in \mathbb{R}^m$, $B \in \mathbb{R}^{p\times n}$ 以及 $d \in \mathbb{R}^p$，考虑优化问题

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & c^{\mathrm{T}}x, \\
\text{s.t.} \quad & \|Ax + b\|_2 \leqslant \mathbf{1}^{\mathrm{T}}x, \\
& Bx = d;
\end{aligned}
$$

(c) 给定 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}, b \in \mathbb{R}^m, F_i \in \mathcal{S}^m, i = 0, 1, \cdots, n$，考虑优化问题

$$
\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad (Ax+b)^{\mathrm{T}}F(x)^{-1}(Ax+b), \quad \text{s.t.} \quad F(x) \succ 0,
$$

其中 $F(x) = F_0 + x_1F_1 + x_2F_2 + \cdots + x_nF_n$.

解 (邓展望). 根据下式可得等价约束情形

$$
\begin{aligned}
\|A\|_2 \leqslant t \Leftrightarrow A^\top A \preceq t^2 I, \quad t \geqslant 0 \\
\Leftrightarrow \begin{pmatrix} tI & A(x) \\ A(x)^\top & tI \end{pmatrix} \succeq 0.
\end{aligned}
$$

因此转化的形式如下：

(a)

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbb{R}^n, t\in\mathbb{R}} \quad & t \\
\text{s.t.} \quad & \begin{bmatrix} tI_p & A(x) \\ A(x)^{\mathrm{T}} & tI_q \end{bmatrix} \succeq 0, \\
& A(x) = A_0 + x_1A_1 + \cdots + x_nA_n.
\end{aligned}
$$

(b)

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & c^{\mathrm{T}}x, \\
\text{s.t.} \quad & \begin{bmatrix} \mathbf{1}^{\mathrm{T}}xI_m & Ax+b \\ (Ax+b)^{\mathrm{T}} & \mathbf{1}^{\mathrm{T}}xI_n \end{bmatrix} \succeq 0, \\
& Bx = d.
\end{aligned}
$$

(c)

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbb{R}^n, t\in\mathbb{R}} \quad & t \\
\text{s.t.} \quad & \begin{bmatrix} F(x) & Ax+b \\ (Ax+b)^{\mathrm{T}} & t \end{bmatrix} \succeq 0, \\
& F(x) = F_0 + x_1F_1 + x_2F_2 + \cdots + x_nF_n.
\end{aligned}
$$

□

4.11 对于对称矩阵 $C \in \mathcal{S}^n$，记其特征值分解为 $C = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i u_i u_i^{\mathrm{T}}$，假设

$$
\lambda_1 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_m > 0 > \lambda_{m+1} \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n,
$$

考虑如下半定规划问题:

$$
\begin{aligned}
\min_{X\in\mathcal{S}^n} \quad & \langle C, X\rangle, \\
\text{s.t.} \quad & u_i^{\mathrm{T}} X u_i = 0, i = m+1, m+2, \cdots, n, \\
& X \succeq 0.
\end{aligned}
$$

试给出该问题最优解的表达式.

解 (俞建江). 最优解为 $X = 0$，证明如下.
考虑

$$
\begin{aligned}
\langle C, X\rangle =& \mathrm{Tr}(C^{\mathrm{T}}X) \\
=& \mathrm{Tr}(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i u_i u_i^{\mathrm{T}} X) \\
=& \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \mathrm{Tr}(u_i^{\mathrm{T}} X u_i),
\end{aligned}
$$

由约束条件 $u_i^{\mathrm{T}} X u_i = 0 (i = m+1, m+2, \cdots, n)$ 得 $\langle C, X\rangle \geqslant 0$ 当且仅

当 $u_i^{\mathrm{T}} X u_i = 0 (i = 1, 2, \cdots, m)$ 时取到等号．记 $T = (u_1, u_2, \cdots, u_n)$，

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}(u_i^{\mathrm{T}} X u_i) = 0 \quad (1 \leqslant i \leqslant n),\\
\Rightarrow &\mathrm{Tr}(u_i u_i^{\mathrm{T}} X) = 0 \quad (1 \leqslant i \leqslant n),\\
\Rightarrow &\mathrm{Tr}(T T^{\mathrm{T}} X) = 0\\
\Rightarrow &\mathrm{Tr}(X) = 0,
\end{aligned}$$

又 $X \succeq 0$，因此 $\mathrm{Tr}(X) = 0$ 说明 $X = 0$. □

4.12 如果在最大割问题 (4.5.6) 中，约束 $x_j \in \{-1, 1\}$ 改为 $x_j \in \{0, 1\}$，即对应优化问题

$$\begin{aligned}
\max \quad & \frac{1}{2} \sum_{i<j} w_{ij} (1 - x_i x_j),\\
\text{s.t.} \quad & x_j \in \{0, 1\},\ j = 1, 2, \cdots, n.
\end{aligned}$$

试给出其一个半定规划松弛.

解 (俞建江). 记 $W = (w_{ij})_{n \times n}$，作变量替换 $y = 2x - \mathbf{1}$，消去常数后原问题等价于

$$\begin{aligned}
\min \quad & y^{\mathrm{T}} W y + 2 b^{\mathrm{T}} y + c\\
\text{s.t.} \quad & y_i \in \{-1, 1\},\ i = 1, 2, \cdots, n,
\end{aligned}$$

其中 $b = \dfrac{1}{2}(W + W^{\mathrm{T}})\mathbf{1}$，$c = -3\mathbf{1}^{\mathrm{T}} W \mathbf{1}$. 这等价于

$$\begin{aligned}
\min \quad & \left\langle \begin{pmatrix} W & b \\ b^{\mathrm{T}} & c \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} Y & y \\ y^{\mathrm{T}} & 1 \end{pmatrix} \right\rangle\\
\text{s.t.} \quad & Y = y y^{\mathrm{T}}, Y_{ii} = 1,\ i = 1, 2, \cdots, n.
\end{aligned}$$

将 $Y = y y^{\mathrm{T}}$ 松弛为 $Y \succeq y y^{\mathrm{T}}$，又等价于 $\begin{pmatrix} Y & y \\ y^{\mathrm{T}} & 1 \end{pmatrix} \succeq 0$. 因此得到松弛形式

$$\begin{aligned}
\min \quad & \langle \overline{W}, \overline{Y} \rangle\\
\text{s.t.} \quad & \overline{Y} \succeq 0,\ \overline{Y}_{ii} = 1, i = 1, 2, \cdots, n + 1.
\end{aligned}$$

□

4.13 对于非负矩阵分解问题

$$\min_{X \in \mathbb{R}^{d \times p}, Y \in \mathbb{R}^{p \times n}} \quad \|A - XY\|_F^2, \quad \text{s.t.} \quad X \geqslant 0, Y \geqslant 0,$$

其中矩阵 $A \in \mathbb{R}^{d\times n}$ 是已知的. 证明：在上面优化问题中添加约束 $YY^{\mathrm{T}} = I$，其可以写成 K-均值聚类问题.

解 (邓展望). 由课本（3.10.3）可知 K-均值聚类问题可写为：

$$\begin{aligned} \min_{\Phi,H} \quad & \|A - \Phi H\|_F^2, \\ \text{s.t.} \quad & \Phi \in \mathbb{R}^{n\times k}, \text{每一行只有一个元素为 } 1\text{，其余为 } 0, \\ & H \in \mathbb{R}^{k\times p}. \end{aligned} \tag{4.3}$$

由于 $Y \geqslant 0$，再根据正交性，可知 Y 每一行只有一个元素为 1，其余为 0，所以问题可转化为：

$$\begin{aligned} \min_{X,Y} \quad & \|A^{\mathrm{T}} - YX\|_F^2, \\ \text{s.t.} \quad & Y \in \mathbb{R}^{n\times p}, \text{每一行只有一个元素为 } 1\text{，其余为 } 0, \\ & X \in \mathbb{R}^{p\times d}, X \geqslant 0. \end{aligned} \tag{4.4}$$

这是特殊情况下的均值聚类问题. □

第五章　最优性理论

5.1 考虑优化问题
$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad x^{\mathrm{T}}Ax+2b^{\mathrm{T}}x,$$
其中 $A\in\mathcal{S}^n$，$b\in\mathbb{R}^n$．为了保证该问题最优解存在，A,b 需要满足什么性质?

解 (邓展望). A,b 需要满足 A 为半正定矩阵并且 $b\in\mathcal{R}(A)$（即 b 位于 A 的像空间中）．实际上这也为充要条件．定义
$$m(x)=\frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax+x^{\mathrm{T}}b \tag{5.1}$$
则我们有：
$\Leftarrow$: 由于 $g\in\mathcal{R}\left(B\right)$, 所以存在 p^* 满足 $Ap^*=-b$, 所以对任意 $\omega\in\mathbb{R}^n$, 我们都有
$$\begin{aligned} m\left(p^*+\omega\right) &= b^{\mathrm{T}}\left(p^*+\omega\right)+\frac{1}{2}\left(p^*+\omega\right)^{\mathrm{T}}A\left(p^*+\omega\right)\\ &=\left(b^{\mathrm{T}}p^*+\frac{1}{2}p^{*\top}Ap^*\right)+b^{\mathrm{T}}\omega+\left(Ap^*\right)^{\mathrm{T}}\omega+\frac{1}{2}\omega^{\mathrm{T}}A\omega\\ &=m\left(p^*\right)+\frac{1}{2}\omega^{\mathrm{T}}A\omega\geqslant m\left(p^*\right), \end{aligned}$$
由此可知 p^* 是 $m(p)$ 的最小值.
$\Rightarrow$: 若 p^* 是 $m(p)$ 的最小值, 所以 $\nabla m\left(p^*\right)=Ap^*+b=0$，$b\in\mathcal{R}\left(A\right)$. 再由于 $\nabla^2 m\left(p^*\right)=A$ 为半正定矩阵，结果得证.

□

5.2 试举例说明对无约束光滑优化问题，二阶必要条件不是充分的，二阶充分条件也不是必要的（见定理 5.4).

解 (陈铖). 考虑 $f(x)=x^3$, 在零点处满足二阶必要条件 $f'(x)=3x^2=0$, $f''(x)=6x=0$. 而 $f(x)$ 是没有局部极小点的, 0 点不是 $f(x)$ 的局部极小点, 这说明二阶必要条件不充分.
再考虑 $f(x)=x^4$, 由于 $f(x)$ 是对称的, 显然在 0 点处有极小点, 而 $f'(x)=0$, $f''(x)=0$, 不满足二阶充分条件 ($\nabla^2 f(x)$ 正定). 这说明二阶充分条件不必要. $\square$

5.3 证明下列锥是自对偶锥:

(a) 半正定锥 $\{X \mid X \succeq 0\}$ (全空间为 $\mathcal{S}^n$);

(b) 二次锥 $\{(x,t)\in\mathbb{R}^{n+1} \mid t \geqslant \|x\|_2\}$ (全空间为 $\mathbb{R}^{n+1}$).

解 (陈铖).

(a) 半正定锥 $\{X \mid X \succeq 0\}$ (全空间为 $\mathcal{S}^n$) 是自对偶锥.
该命题等价于证明, Y 对于任意半正定矩阵 X 有 $\langle X,Y\rangle \geqslant 0$ 成立 $\Leftrightarrow$ Y 是半正定矩阵.
$\Rightarrow$: 若 $Y\in\mathcal{S}^n$ 满足对于任意半正定矩阵 X, 有 $\langle X,Y\rangle\geqslant 0 \leftrightarrow Y\succeq 0$. 考虑 $X=qq^{\mathrm{T}}$, $q\in\mathbb{R}^n$, 得

$$\langle X,Y\rangle = tr(XY) = tr(qq^{\mathrm{T}}Y) = tr(q^{\mathrm{T}}Yq) = q^{\mathrm{T}}Yq.$$

由 $\langle X,Y\rangle\geqslant 0$ 可得, $q^{\mathrm{T}}Yq\geqslant 0$ 对于任意 $q\in\mathbb{R}^n$, 这说明 Y 是半正定矩阵.
$\Leftarrow$: 令 X,Y 都是半正定矩阵, 则 X 有分解形式 $X=QQ^{\mathrm{T}}$, $Q=(q_1,q_2,\cdots,q_n)$. 则

$$\begin{aligned}\langle X,Y\rangle &= tr(XY)\\ &= tr(QQ^{\mathrm{T}}Y)\\ &= tr(Q^{\mathrm{T}}YQ)\\ &= \sum_{i=1}^{n} q_i^{\mathrm{T}}Yq_i.\end{aligned}$$

由于 Y 是半正定的, 因此 $\langle X,Y\rangle\geqslant 0$.

(b) 二次锥 $\{(x,t)\in\mathbb{R}^{n+1} \mid t\geqslant\|x\|_2\}$ (全空间为 $\mathbb{R}^{n+1}$).
令 $\mathcal{I}=\{(x,t)\in\mathbb{R}^{n+1} \mid t\geqslant\|x\|_2\}$. 我们要证明

$$(x',t')\in\mathcal{I} \quad\Leftrightarrow\quad \langle x',x\rangle + t't\geqslant 0, \forall (x,t)\in\mathcal{I}.$$

$\Rightarrow$：若 $(x', t') \in \mathcal{I}$，即 $t' \geqslant \|x'\|_2$，对于任意 $(x, t) \in \mathcal{I}$，我们有

$$tt' \geqslant \|x'\|_2 \|x\|_2 \geqslant |\langle x', x \rangle|,$$

由此得到 $tt' + \langle x', x \rangle \geqslant 0$.

$\Leftarrow$：若对于任意 $(x, t) \in \mathcal{I}$，(x', t') 满足 $tt' + \langle x', x \rangle \geqslant 0$. 注意到 $(-x', \|x'\|_2) \in \mathcal{I}$，因此 $\|x'\|_2 t' + \langle x', -x' \rangle \geqslant 0$，得到 $t' \geqslant \|x'\|_2$，即 $(x', t') \in \mathcal{I}$. □

5.4 考虑优化问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad x^{\mathrm{T}} A x + 2 b^{\mathrm{T}} x, \quad \text{s.t.} \quad \|x\|_2 \leqslant \Delta,$$

其中 $A \in \mathcal{S}_{++}^n$, $b \in \mathbb{R}^n$, $\Delta > 0$. 求出该问题的最优解.

解 (陈铖). 原问题满足 Slater 条件. 注意到原问题的约束等价于 $x^{\mathrm{T}} x \leqslant \Delta^2$. 由此我们得到原问题的 KKT 条件：

$$\begin{aligned} Ax + b + \mu x &= 0, \\ \mu(x^{\mathrm{T}} x - \Delta^2) &= 0, \\ \mu &\geqslant 0. \end{aligned}$$

KKT 条件给出了原问题最优解的两种可能，即 $\mu = 0$ 的情况下满足 $Ax + b = 0$，或者 $x^{\mathrm{T}} x - \Delta^2 = 0$ 成立.

由于 $\|A^{-1} b\|$ 是原目标函数在约束情况下的最优解，因此若 $\|A^{-1} b\| \leqslant \Delta$，则 $x = A^{-1} b$ 是最优解.

若 $\|A^{-1} b\| > \Delta$，则原问题的最优解即等式约束下的最优解是

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad x^{\mathrm{T}} A x + 2 b^{\mathrm{T}} x, \quad \text{s.t.} \quad \|x\|_2 = \Delta.$$ □

5.5 考虑函数 $f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 x_2 + 2x_1^3 + x_1^4$，求出其所有一阶稳定点，并判断它们是否为局部最优点 (极小或极大)、鞍点或全局最优点?

解 (陈铖). 首先计算 $f(x)$ 关于 x_1, x_2 的梯度.

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d} f(x)}{\mathrm{d} x_1} &= 4x_1 - 2x_2 + 6x_1^2 + 4x_1^3, \\ \frac{\mathrm{d} f(x)}{\mathrm{d} x_2} &= 2x_2 - 2x_1. \end{aligned}$$

对于一阶稳定点，令上述两式为 0，我们得到

$$x_1 = x_2,$$
$$x_1(1 + 3x_1 + 2x_1^2) = 0.$$

由此得到三个一阶稳定点 $(x_1, x_2) = (0, 0)$，$(-1, -1)$ 或 $(-0.5, -0.5)$. 再考虑海瑟矩阵

$$\nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} 4 + 12x_1 + 12x_1^2 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix},$$

有

$$\nabla^2 f(0,0) = \nabla^2 f(-1,-1) = \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix},$$
$$\nabla^2 f(-0.5,-0.5) = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}.$$

注意到 $(0, 0)$ 和 $(-1, -1)$ 处海瑟矩阵都是正定矩阵. 因此都是局部最优点.

又根据 $f(0, 0) = f(-1, -1) = 0$ 知这两个点也为全局最优点. 另一方面，$(-0.5, -0.5)$ 处的海瑟矩阵为不定矩阵，因此是一个鞍点. □

5.6 给出下列优化问题的显式解：

(a) $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} \quad c^\mathrm{T}x, \quad \text{s.t.} \quad Ax = b$，其中 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$b \in \mathbb{R}^m$；

(b) $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|x\|_2, \quad \text{s.t.} \quad Ax = b;$

(c) $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} \quad c^\mathrm{T}x, \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{1}^\mathrm{T}x = 1,\ x \geqslant 0;$

(d) $\min\limits_{X\in\mathbb{R}^{m\times n}} \quad \|X\|_* + \dfrac{1}{2}\|X - Y\|_F^2$，其中 $Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 是已知的.

解 (陈铖，邓展望).

(a) 注意到 $Ax = b$ 的解的集合可以表示为 $\{x \mid x = \eta + \xi, A\xi = 0\}$，其中 η 是 $Ax = b$ 的一个特解.
由此可知，若存在 ξ 满足 $A\xi = 0$，$c^\mathrm{T}\xi \neq 0$，则没有最优解. 反之，只有当 c 在 $Ax = 0$ 的解空间对应的正交子空间中时，才有最小值. 且此时 x 是任意满足 $Ax = b$ 的解.

(b) 对于这一问题，不妨设 A 是行满秩的，且目标函数等价于 $\frac{1}{2}\|x\|_2^2$. 我们引入拉格朗日乘子 λ，构造拉格朗日函数

$$L(x,\lambda)=\frac{1}{2}\|x\|_2^2+\lambda^{\mathrm{T}}(Ax-b).$$

由于问题只有仿射约束，Slater 条件满足. 对于全局最优解 x^* ，当且仅当存在 λ^* 满足

$$\begin{cases} x^*+A^{\mathrm{T}}\lambda=0, \\ Ax^*=b. \end{cases}$$

对于第一行公式同时左乘 A，得到

$$Ax^*+AA^{\mathrm{T}}\lambda=0,$$

由于 A 是行满秩的，所以 AA^{T} 是满秩矩阵，有 $\lambda=-(AA^{\mathrm{T}})^{-1}b$. 则得到

$$x^*=A^{\mathrm{T}}(AA^{\mathrm{T}})^{-1}b.$$

(c) 设 i 为 c 的最小分量的下标，则 $x=e_i$，即 x 为第 i 个分量为 1 的单位向量.

(d) 令 Y 有奇异值分解 $Y=U\tilde{\Sigma}V^{\mathrm{T}}$. 令 $X=UZV^{\mathrm{T}}$，X 与 Z 有相同的奇异值. 由于正交变换不改变 F 范数，则有

$$\|X\|_*+\frac{1}{2}\|X-Y\|_F^2=\|Z\|_*+\frac{1}{2}\|Z-\tilde{\Sigma}\|_F^2.$$

可以证明，当 Z 的奇异值 Σ 确定时，只有在 $Z=\Sigma$ 时，$\|Z-\tilde{\Sigma}\|_F^2$ 最小. 因此原问题转化为

$$\min_{\sigma_i\geqslant 0}\quad \sum_{i=1}^{r}\sigma_i+\sum_{i=1}^{r}\frac{1}{2}(\sigma_i-\tilde{\sigma})^2,$$

其中 $\tilde{\sigma}$ 是 Y 的特征值. 我们可以得到 $\sigma_i=\max\{0,\tilde{\sigma}_i-1\}$. 由此得到最优解 $X=U\Sigma V^{\mathrm{T}}$，Σ 为对角矩阵且第 i 个对角元为 $\sigma_i=\max(0,\tilde{\sigma}_i-1)$. □

5.7 计算下列优化问题的对偶问题.

(a) $\displaystyle\min_{x\in\mathbb{R}^n}\quad \|x\|_1,\quad \text{s.t.}\quad Ax=b;$

(b) $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|Ax-b\|_1$;

(c) $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|Ax-b\|_\infty$;

(d) $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} \quad x^{\mathrm{T}}Ax+2b^{\mathrm{T}}x, \quad \text{s.t.} \quad \|x\|_2^2 \leqslant 1$, 其中 A 为正定矩阵.

解 (陈铖).

(a) 引入拉格朗日乘子 λ，构造拉格朗日函数

$$L(x,\lambda)=\|x\|_1+\lambda^{\mathrm{T}}(Ax-b),$$

由于是等式约束，可得 $\lambda\in\mathbb{R}^m$. 对于确定的 λ，令 $c=A^{\mathrm{T}}\lambda$，则有

$$L(x,\lambda)=\sum_{i=1}^n(|x_i|+c_ix_i)-\lambda^{\mathrm{T}}b$$

由于 x 是任取的，因此为了使得 $\min\limits_x L(x,\lambda)$ 存在，需要满足 $|c_i|\leqslant 1$，即 $\|A^{\mathrm{T}}\lambda\|_\infty\leqslant 1$. 在这一条件下，$x_i$ 取零即为最小值. 由此得到对偶问题

$$\begin{aligned} \max \quad & -b^{\mathrm{T}}\lambda, \\ \text{s.t.} \quad & \|A^{\mathrm{T}}\lambda\|_\infty\leqslant 1. \end{aligned}$$

(b) 令 $y=Ax-b$，原优化问题等价于

$$\begin{aligned} \max \quad & \|y\|_1, \\ \text{s.t.} \quad & Ax-y=b. \end{aligned}$$

引入拉格朗日乘子 λ，构造拉格朗日函数

$$L(x,y,\lambda)=\|y\|_1+\lambda^{\mathrm{T}}(Ax-y-b),$$

只有在 $A^{\mathrm{T}}\lambda=0$ 且 $|\lambda_i|\leqslant 1$ 时 $\min\limits_{x,y} L(x,y,\lambda)$ 存在. 此时

$$\min_{x,y} L(x,y,\lambda)=-b^{\mathrm{T}}\lambda$$

由此得到对偶问题

$$\begin{aligned} \max \quad & -b^{\mathrm{T}}\lambda, \\ \text{s.t.} \quad & \|\lambda\|_\infty\leqslant 1, \\ & A^{\mathrm{T}}\lambda=0. \end{aligned}$$

(c) 上述问题等价于

$$\begin{aligned} \min \quad & y, \\ \text{s.t.} \quad & Ax - b \leqslant y\mathbf{1}. \\ & Ax - b \leqslant -y\mathbf{1} \end{aligned}$$

引入拉格朗日乘子 λ_1, λ_2，构造拉格朗日函数

$$L(x, y, \lambda_1, \lambda_2) = y + \lambda_1^{\mathrm{T}}(Ax - b - y\mathbf{1}) + \lambda_2^{\mathrm{T}}(Ax - b + y\mathbf{1}),$$

且不等式的拉格朗日乘子非负，即 $\lambda_1 \geqslant 0$，$\lambda_2 \geqslant 0$. 为使得最小值有限，需要使得 x, y 的系数都为零，即得到

$$A^{\mathrm{T}}(\lambda_1 + \lambda_2) = 0, \quad \lambda_1^{\mathrm{T}}\mathbf{1} + \lambda_2^{\mathrm{T}}\mathbf{1} + 1 = 0.$$

由此得到对偶问题

$$\begin{aligned} \max \quad & -b^{\mathrm{T}}(\lambda_1 + \lambda_2), \\ \text{s.t.} \quad & A^{\mathrm{T}}(\lambda_1 + \lambda_2) = 0, \\ & -\lambda_1^{\mathrm{T}}\mathbf{1} + \lambda_2^{\mathrm{T}}\mathbf{1} + 1 = 0. \end{aligned}$$

(d) 引入拉格朗日乘子 λ，构造拉格朗日函数

$$L(x, \lambda) = x^{\mathrm{T}}Ax + 2b^{\mathrm{T}}x + \lambda(x^{\mathrm{T}}x - 1) = x^{\mathrm{T}}(A + \lambda I)x + 2b^{\mathrm{T}}x - \lambda.$$

当 $A + \lambda I$ 正定时，$\min\limits_x L(x, \lambda)$ 存在，而 A 是正定的，因此有 $\lambda \geqslant 0$.

在这一条件下，$x = -(A + \lambda I)^{-1}b$ 得到最小值. 此时有

$$\min_x L(x, \lambda) = -b^{\mathrm{T}}(A + \lambda I)^{-1}b - \lambda.$$

由此得到对偶问题

$$\begin{aligned} \max \quad & -b^{\mathrm{T}}(A + \lambda I)^{-1}b - \lambda, \\ \text{s.t.} \quad & \lambda \geqslant 0. \end{aligned}$$

□

5.8 如下论断正确吗？为什么？

对等式约束优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x), \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E}. \end{aligned}$$

考虑与之等价的约束优化问题：

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(x), \\
\text{s.t.} \quad & c_i^2(x) = 0,\ i \in \mathcal{E}.
\end{aligned} \tag{5.2}
$$

设 $x^\sharp$ 是上述问题的一个 KKT 点，根据 (5.5.8) 式，$x^\sharp$ 满足

$$
\begin{aligned}
&0 = \nabla f(x^\sharp) + 2\sum_{i\in\mathcal{E}} \lambda_i^\sharp c_i(x^\sharp)\nabla c_i(x^\sharp), \\
&0 = c_i(x^\sharp), \quad i \in \mathcal{E},
\end{aligned}
$$

其中 $\lambda_i^\sharp$ 是相应的拉格朗日乘子. 整理上式得 $\nabla f(x^\sharp) = 0$. 这说明对等式约束优化问题，我们依然能给出类似无约束优化问题的最优性条件.

解 (邓展望). 此处用到了 (5.5.8) 式，也即一般约束优化问题的最优性条件. 但是该定理需要满足

$$
T_{\mathcal{X}}(x^\sharp) = \mathcal{F}(x^\sharp).
$$

容易验证 $\mathcal{F}(x^\sharp) = \mathbb{R}^d$($d$ 为 x 的维数). 由于 $c_i(x^\sharp) = 0$，其可行域一般是 $\mathbb{R}^d$ 的真子空间，那么 $T_{\mathcal{X}}(x^\sharp)$ 也应为 $\mathbb{R}^d$ 中的子空间（平面），故一般 $T_{\mathcal{X}}(x^*) \neq \mathbb{R}^d$.

综上所述，若不满足 KKT 条件所需的约束品性，就不能用 KKT 条件去推导原问题的最优性条件. 因此这种说法是错误的. □

5.9 证明：若在点 x 处线性约束品性（见定义 5.11）满足，则有 $T_{\mathcal{X}}(x) = \mathcal{F}(x)$.

解 (陈铖). 我们知道 $T_{\mathcal{X}}(x) \subseteq \mathcal{F}(x)$，只需证明在线性约束品性下，若 $d \in \mathcal{F}(x)$，则有 $d \in T_{\mathcal{X}}(x)$.

由于约束都是线性约束，可以写成如下形式

$$
\begin{cases}
A_1 x = b_1, \\
A_2 x \leqslant b_2.
\end{cases}
$$

令 $d \in \mathcal{F}(x)$ 为任一线性化可行方向，令 $\mathcal{A}(x)$ 为积极集，此时不等式约束中取等号的约束对应的矩阵 A_2 的部分记为 A_2'，则我们知道 d 满足

$$
A_1 d = 0, \quad A_2' d \leqslant 0.
$$

取 $z^k = x + t^k d$，$\{t^k\}$ 为一组正标量且 $\lim\limits_{k\to\infty} t^k = 0$. 注意到 z^k 一定满足等式约束，且有

$$A_2' z^k = A_2' x + t^k A_2' d = t^k A_2' d \leqslant 0,$$

当 t^k 取到较小的值时，x 处未取到等号的不等式约束在 z^k 上也满足. 因此可以得到 $z^k \in \mathcal{X}$. 而我们显然有

$$\lim_{k\to\infty} \frac{z^k - x}{t^k} = d.$$

因此得到 $d \in T_{\mathcal{X}}(x)$. $\square$

5.10 考虑优化问题

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^2} \quad & x_1, \\ \text{s.t.} \quad & 16 - (x_1 - 4)^2 - x_2^2 \geqslant 0, \\ & x_1^2 + (x_2 - 2)^2 - 4 = 0. \end{aligned}$$

求出该优化问题的 KKT 点，并判断它们是否是局部极小点、鞍点以及全局极小点?

解 (陈铖). 构造拉格朗日函数

$$L(x, \lambda, \nu) = x_1 + \nu(x_1^2 + (x_2 - 2)^2 - 4) - \lambda(16 - (x_1 - 4)^2 - x_2^2),$$

对 x_1，x_2 分别求导，得到稳定性条件

$$\begin{aligned} & 1 + 2\nu x_1 + 2\lambda(x_1 - 4) = 0, \\ & 2\nu(x_2 - 2) + 2\lambda x_2 = 0. \end{aligned}$$

分别考虑互补松弛条件的两种情况, 即 $\lambda = 0$ 或 $16 - (x_1 - 4)^2 - x_2^2 = 0$. 若互补松弛条件要求 $\lambda = 0$，则稳定性条件变为

$$\begin{aligned} & 1 + 2\nu x_1 = 0, \\ & 2\nu(x_2 - 2) = 0. \end{aligned}$$

由第一行公式知 $\nu \neq 0$，因此得到 $x_2 = 2$. 此时需要再考虑等式约束的可行性条件

$$x_1^2 + (x_2 - 2)^2 - 4 = 0,$$

得到 $x_1 = \pm 2$. 此时得到 KKT 点 $(x_1, x_2, \lambda, \nu) = (\pm 2, 2, 0, \mp\frac{1}{4})$. 而 $x_1 = -2$ 且 $x_2 = 2$ 不满足条件，因此取得 KKT 点 $(x_1, x_2, \lambda, \nu) = (2, 2, 0, -\frac{1}{4})$.

若互补松弛条件要求 $16-(x_1-4)^2-x_2^2 = 0$, 又有 $x_1^2+(x_2-2)^2-4 = 0$, 综合两式得到 (x_1, x_2) 的两个解 $(0,0)$，$(\frac{8}{5}, \frac{16}{5})$. 根据这两个解可得 KKT 点 $(x_1, x_2, \lambda, \nu) = (0, 0, \frac{1}{8}, 0)$，$(\frac{8}{5}, \frac{16}{5}, \frac{3}{40}, -\frac{1}{5})$.

注意 $L(x, \lambda, \nu)$ 关于 x 的海瑟矩阵为对角元均等于 $2(\lambda+\nu)$ 的对角矩阵，因此 $(0, 0, \frac{1}{8}, 0)$ 为局部极小点.

另一方面，对于 KKT 点 $(2, 2, 0, -\frac{1}{4})$，其切锥等于线性化可行锥，因此

$$
\begin{aligned}
\mathcal{C}(2, 2, 0, -\frac{1}{4}) &= \mathcal{F}(2,2) \\
&= \left\{ d | d^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} -4 \\ 4 \end{bmatrix} = 0,\ d^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \end{bmatrix} \leqslant 0 \right\} \\
&= \{ d | d_1 = d_2,\ d_1 \leqslant 0 \}.
\end{aligned}
$$

不妨取 $d = [-1, -1]^{\mathrm{T}}$ 属于切锥，使得 $d^{\mathrm{T}} \nabla_x^2 L(x, \lambda, \nu)\, d = -1 < 0$，故可以由二阶必要性条件得 $(2, 2, 0, -\frac{1}{4})$ 不是局部极小值点.

同理，对于 KKT 点 $(\frac{8}{5}, \frac{16}{5}, \frac{3}{40}, -\frac{1}{5})$，其切锥等于

$$
\begin{aligned}
\mathcal{C}(\frac{8}{5}, \frac{16}{5}, \frac{3}{40}, -\frac{1}{5}) &= \left\{ d \in \mathcal{F}\left(\frac{8}{5}, \frac{16}{5}\right) | \frac{1}{5} d^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 8 \\ 6 \end{bmatrix} = 0 \right\} \\
&= \left\{ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right\},
\end{aligned}
$$

因此恒有

$$
d^{\mathrm{T}} \nabla_x^2 L(x, \lambda, \nu)\, d = 0.
$$

这说明 KKT 点 $(\frac{8}{5}, \frac{16}{5}, \frac{3}{40}, -\frac{1}{5})$ 是局部极小值点.

综上所述，KKT 点 $(0, 0, \frac{1}{8}, 0)$ 和 $(\frac{8}{5}, \frac{16}{5}, \frac{3}{40}, -\frac{1}{5})$ 是局部极小值点，不存在鞍点. 经验证，全局极小值点是 $(x_1, x_2) = (0, 0)$. □

5.11 考虑对称矩阵的特征值问题

$$
\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad x^{\mathrm{T}} A x, \quad \text{s.t.} \quad \|x\|_2 = 1,
$$

其中 $A \in \mathcal{S}^n$. 试分析其所有的局部极小点、鞍点以及全局极小点.

解 (陈铖). 考虑 A 的特征值分解 $A = Q\Lambda Q^{\mathrm{T}}$，令 $y = Q^{\mathrm{T}}x$，原问题等价于

$$\min_{y\in\mathbb{R}^n} \quad y^{\mathrm{T}}\Lambda y, \quad \text{s.t.} \quad \|y\|_2 = 1,$$

引入拉格朗日乘子 λ，构造拉格朗日函数

$$L(y,\lambda) = y^{\mathrm{T}}\Lambda y + \lambda(y^{\mathrm{T}}y - 1).$$

通过 KKT 条件，KKT 点满足

$$\begin{cases} (\Lambda + \lambda I)y = 0, \\ y^{\mathrm{T}}y = 1. \end{cases}$$

由此我们得到了 n 个 KKT 点，即 $(e_i, -\lambda_i), i = 1, 2, \cdots, n$，$e_i$ 为第 i 个分量为 1 的单位向量，λ_i 是 A 的第 i 个特征值.
拉格朗日函数的海瑟矩阵恰好为 $A + \lambda I$，因此除了最小特征值对应的 KKT 点以外，海瑟矩阵都有负特征值，因此这些 KKT 点都是鞍点，而最小特征值对应的 KKT 点为全局极小点. □

5.12 类似于线性规划问题，试分析半定规划 (5.4.20) 与其对偶问题 (5.4.21) 的最优值的关系（强对偶性什么时候成立，什么时候失效）.

解 (陈铖). 在对 (5.4.20) 的分析中我们知道，其与其对偶问题互为对偶，假设原问题最优值为 p^*，对偶问题最优值为 d^*.

(a) p^* 存在，即 $-\infty < p^* < \infty$，则原问题有可行解，且有最优解，此时强对偶原理成立，$p^* = d^*$，对偶问题有可行解且有最优解.

(b) $p^* = -\infty$，那么原始问题可行，但目标函数值无下界. 由弱对偶原理知 $d^* \leqslant p^*$，即 $d^* = -\infty$，因为对偶问题是对目标函数极大化，所以此时对偶问题不可行.

(c) $p^* = \infty$，那么原始问题无可行解，此时我们无法断定对偶问题是无上界还是无可行解，但不可能出现对偶问题有最优解的情况，即存在 $-\infty < d^* < \infty$，否则由强对偶原理，$p^* = d^*$，这与 $p^* = \infty$ 矛盾. □

5.13 在介绍半定规划问题的最优性条件时，我们提到互补松弛条件可以是 $\langle X, S\rangle = 0$ 或 $XS = 0$，证明这两个条件是等价的，即对 $X \succeq 0$ 与 $S \succeq 0$ 有

$$\langle X, S\rangle = 0 \leftrightarrow XS = 0.$$

提示：证明 X 和 S 可以同时正交对角化且对应的特征值满足互补松弛条件.

解 (陈铖). 对 X 和 S 分别进行对角化 $X = Q\Lambda_1 Q^{\mathrm{T}}$，$S = R\Lambda_2 R^{\mathrm{T}}$. 则有

$$\langle X, S\rangle = \mathrm{Tr}(()XS) = \mathrm{Tr}(()Q\Lambda_1 Q^{\mathrm{T}} R\Lambda_2 R^{\mathrm{T}}) = \mathrm{Tr}(()\Lambda_1 Q^{\mathrm{T}} R\Lambda_2) = 0,$$

其中 Λ_1, Λ_2 是对角矩阵，且对角元素从大到小排列. 由此可以得到 $q_1^{\mathrm{T}} r_1 = 0$.
注意到对非零特征值对应的特征向量更换位置，如将 R 的第二列更换到第一列，同样可得到 $q_1^{\mathrm{T}} q_2 = 0$，因此我们可以得到 $q_i^{\mathrm{T}} r_j = 0$，q_i 为 X 的任意非零特征向量，r_j 为 S 的任意非零特征向量.
由此我们得到

$$\Lambda_1 Q^{\mathrm{T}} R\Lambda_2 = 0.$$

又有

$$XS = 0 \Leftrightarrow Q\Lambda_1 Q^{\mathrm{T}} R\Lambda_2 R^{\mathrm{T}} = 0 \Leftrightarrow \Lambda_1 Q^{\mathrm{T}} R\Lambda_2 = 0,$$

命题得证. □

5.14 考虑等式约束的最小二乘问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|Ax - b\|_2^2, \quad \text{s.t.} \quad Gx = h,$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 且 $\mathrm{rank}(A) = n$，$G \in \mathbb{R}^{p\times n}$ 且 $\mathrm{rank}(G) = p$.

(a) 写出该问题的对偶问题；

(b) 给出原始问题和对偶问题的最优解的显式表达式.

解 (陈铖). (a) 不妨将等式约束写作 $2Gx = 2h$. 引入拉格朗日乘子 λ，构造拉格朗日函数

$$\begin{aligned} L(x, \lambda) &= \|Ax - b\|_2^2 + 2\lambda^{\mathrm{T}}(Gx - h) \\ &= x^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} Ax - 2(b^{\mathrm{T}} A - \lambda^{\mathrm{T}} G)x + b^{\mathrm{T}} b - 2\lambda^{\mathrm{T}} h. \end{aligned}$$

固定 λ，$x=(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}(A^{\mathrm{T}}b-G^{\mathrm{T}}\lambda)$ 使拉格朗日函数取到最优解，此时

$$\min_x L(x,\lambda)=-(A^{\mathrm{T}}b-G^{\mathrm{T}}\lambda)^{\mathrm{T}}(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}(A^{\mathrm{T}}b-G^{\mathrm{T}}\lambda)+b^{\mathrm{T}}b-2\lambda^{\mathrm{T}}h.$$

由此得到对偶问题

$$\max_{\lambda\in\mathbb{R}^p}\quad -\lambda^{\mathrm{T}}G(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}G^{\mathrm{T}}\lambda+2b^{\mathrm{T}}A(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}G^{\mathrm{T}}\lambda-2h^{\mathrm{T}}\lambda.$$

(b) 考虑原始问题的 KKT 条件

$$\begin{cases}2A^{\mathrm{T}}Ax-2A^{\mathrm{T}}b+2G^{\mathrm{T}}\lambda=0,\\ Gx=h.\end{cases}$$

由于 $A^{\mathrm{T}}A$ 满秩，得到 $x=(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}(A^{\mathrm{T}}b-G^{\mathrm{T}}\lambda)$．带入第二个条件，得到

$$G(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}(A^{\mathrm{T}}b-G^{\mathrm{T}}\lambda)=h,$$

因此 $\lambda=(G(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}G^{\mathrm{T}})^{-1}(G(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}b-h)$．进一步得到 x 的显式解为

$$x=(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}(A^{\mathrm{T}}b-G^{\mathrm{T}}(G(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}G^{\mathrm{T}})^{-1}(G(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}b-h)).$$

对偶问题则为简单的无约束问题，最优解的显式表达式为

$$\lambda^*=(G(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}G^{\mathrm{T}})^{-1}(G(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}b-h).\quad\square$$

5.15 考虑优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\quad x^{\mathrm{T}}Ax+2b^{\mathrm{T}}x,\quad \text{s.t.}\quad \|x\|_2\leqslant 1,$$

其中 $A\in\mathcal{S}^n$，$b\in\mathbb{R}^n$．写出该问题的对偶问题，以及对偶问题的对偶问题.

解 (陈铖). 引入拉格朗日乘子 λ，约束等价于 $x^{\mathrm{T}}x\leqslant 1$，构造拉格朗日函数

$$L(x,\lambda)=x^{\mathrm{T}}Ax+2b^{\mathrm{T}}x+\lambda(x^{\mathrm{T}}x-1)=x^{\mathrm{T}}(A+\lambda I)x+2b^{\mathrm{T}}x-\lambda.$$

为使得 $\min_x L(x,\lambda)$ 存在，要求 $A+\lambda I$ 正定，即 $\lambda > -\lambda_{\min}(A)$. 此时 $x=-(A+\lambda I)^{-1}b$ 取到最小值，由此得到

$$\min_x L(x,\lambda) = -b^{\mathrm{T}}(A+\lambda I)^{-1}b - \lambda.$$

令 A 有特征值分解 $A=Q\Sigma Q^{\mathrm{T}}$，$c=Q^{\mathrm{T}}b$，则上式可写作

$$\begin{aligned}\min_x L(x,\lambda) &= -c^{\mathrm{T}}(\Sigma+\lambda I)^{-1}c - \lambda \\ &= -\sum_{i=1}^n \frac{c_i^2}{\lambda+\sigma_i} - \lambda,\end{aligned}$$

由此得到对偶问题

$$\begin{aligned}\max_{\lambda\in\mathbb{R}} \quad & -\sum_{i=1}^n \frac{c_i^2}{\lambda+\sigma_i} - \lambda \\ \text{s.t.} \quad & \lambda > -\sigma_i, i=1,2,\cdots,n.\end{aligned}$$

注意到 λ 趋近于 $-\sigma_i$ 时目标函数趋近于负无穷，因此可以将不等式约束改为 $\lambda \geqslant -\sigma_i$. 引入变量 $z_i=\lambda+\sigma_i$，原问题等价于

$$\begin{aligned}\max_{\lambda\in R, z\in\mathbb{R}^n} \quad & -\sum_{i=1}^n \frac{c_i^2}{z_i} - \lambda \\ \text{s.t.} \quad & z_i - \lambda = \sigma_i, \\ & z_i \geqslant 0, i=1,2,\cdots,n.\end{aligned}$$

考虑这一问题的对偶问题，引入对应于等式约束的拉格朗日乘子 ν，和对应于不等式约束的拉格朗日乘子 μ，则有

$$L(z,\lambda,\nu,\mu) = -\sum_{i=1}^n \frac{c_i^2}{z_i} - \lambda - \mu^{\mathrm{T}}z - \nu^{\mathrm{T}}(z-\lambda\mathbf{1}-\sigma).$$

为使得 $\max_{\lambda,z} L(z,\lambda,\nu,\mu)$ 存在，则需要满足

$$\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\nu = 1, \quad \nu+\mu > 0.$$

由此得到

$$\max_{\lambda,z} L(z,\lambda,\nu,\mu) = -2\sum_{i=1}^n |c_i|\sqrt{\mu_i+\nu_i} + \sigma^{\mathrm{T}}\nu,$$

因此对偶问题为

$$\begin{aligned}\min \quad & -2\sum_{i=1}^{n}|c_i|\sqrt{\mu_i+\nu_i}+\sigma^{\mathrm{T}}\nu \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{1}^{\mathrm{T}}\nu=1, \\ & \nu+\mu\geqslant 0, \\ & \nu\geqslant 0.\end{aligned}$$

注意到 μ 是任取的，则 $\nu+\mu$ 可以为 0，因此上述问题等价于

$$\begin{aligned}\min \quad & \sigma^{\mathrm{T}}\nu \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{1}^{\mathrm{T}}\nu=1, \\ & \nu\geqslant 0.\end{aligned}$$

□

5.16 考虑支持向量机问题

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^n,\xi} \quad & \frac{1}{2}\|x\|_2^2+\mu\sum_{i=1}^{m}\xi_i, \\ \text{s.t.} \quad & b_ia_i^{\mathrm{T}}x\geqslant 1-\xi_i,\ i=1,2,\cdots,m, \\ & \xi_i\geqslant 0,\ i=1,2,\cdots,m,\end{aligned}$$

其中 $\mu>0$ 为常数且 $b_i\in\mathbb{R}$，$a_i\in\mathbb{R}^n$，$i=1,2,\cdots,m$ 是已知的. 写出该问题的对偶问题.

解 (陈铖). 引入对应于第一条约束的拉格朗日乘子 λ, 和对应于 $\xi_i\geqslant 0$ 约束的拉格朗日乘子 ν，构造拉格朗日函数

$$\begin{aligned}L(x,\xi,\lambda,\nu)&=\frac{1}{2}\|x\|_2^2+\mu\sum_{i=1}^{m}\xi_i-\sum_{i=1}^{m}\lambda_i(b_ia_i^{\mathrm{T}}x-1+\xi_i)-\sum_{i=1}^{m}\nu_i\xi_i \\ &=\frac{1}{2}\|x\|_2^2-(\sum_{i=1}^{m}\lambda_ib_ia_i^{\mathrm{T}})x+\sum_{i=1}^{m}(\mu-\lambda_i-\nu_i)\xi_i+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i.\end{aligned}$$

为使得 $\min\limits_{x,\xi}L(x,\xi,\lambda,\nu)$ 存在，要求有 $\mu-\lambda_i-\nu_i=0)$. 此时取 $x=\sum\limits_{i=1}^{m}\lambda_ib_ia_i^{\mathrm{T}}$ 得到最小值

$$\min_{x,\xi}L(x,\xi,\lambda,\nu)=-\frac{1}{2}\|\sum_{i=1}^{m}\lambda_ib_ia_i\|_2^2+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i,$$

由此对偶问题为

$$\begin{aligned}\max \quad & -\frac{1}{2}\|\sum_{i=1}^m \lambda_i b_i a_i\|_2^2+\sum_{i=1}^m \lambda_i,\\ \text{s.t.} \quad & \lambda+\nu=\mu,\\ & \nu_i \geqslant 0, \quad \forall i=1,2,\cdots,m,\\ & \lambda_i \geqslant 0, \quad \forall i=1,2,\cdots,m.\end{aligned}$$

对 ν 进一步分析，上述问题等价于

$$\begin{aligned}\max \quad & -\frac{1}{2}\|\sum_{i=1}^m \lambda_i b_i a_i\|_2^2+\sum_{i=1}^m \lambda_i,\\ \text{s.t.} \quad & \lambda_i \leqslant \mu_i, \quad \forall i=1,2,\cdots,m,\\ & \lambda_i \geqslant 0, \quad \forall i=1,2,\cdots,m.\end{aligned}$$

□

5.17 考虑优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R},y>0} \quad e^{-x}, \quad \text{s.t.} \quad \frac{x^2}{y}\leqslant 0.$$

(a) 证明这是一个凸优化问题，求出最小值并判断 Slater 条件是否成立；

(b) 写出该问题的对偶问题，并求出对偶问题的最优解以及对偶间隙.

解 (丁思哲).

(a) 设 $f(x,y)=e^{-x}$，并有约束 $c(x,y)=\dfrac{x^2}{y}\leqslant 0$ 且 $y>0$. 容易证明 $f(x,y)$ 和 $c(x,y)$ 均是凸函数（用二阶条件），因此该问题是凸优化问题.

在约束 $y>0$ 的限制下，显然 $x=0$ 才能满足题意，因此该问题的解是 $f(0,y)=1$.

Slater 条件不成立. 因为取 x,y 为相对内点集中的值时，$c(x,y)<0$ 与 $y>0$ 无法同时满足.

(b) 先化简原问题. 由上一问的分析可知，原问题等价于

$$\min_{x\in\mathbb{R}} \quad e^{-x}, \quad \text{s.t.} \quad x=0,$$

因此引入乘子 v，拉格朗日函数为

$$L(x,v)=e^{-x}+vx,$$

那么

$$g(v)=\inf_{x\in\mathbb{R}}\left\{e^{-x}+vx\right\}=\begin{cases}v-v\ln v, & v>0,\\ -\infty, & v\leqslant 0.\end{cases}$$

因此对偶问题为

$$\max_{v\in\mathbb{R}}\quad v-v\ln v,\quad \text{s.t.}\quad v>0,$$

显然其最优解在 $v=1$ 时取得，此时 $v-v\ln v=1$，对偶间隙为 0. □

5.18 考虑优化问题

$$\min_{Z\in\mathbb{R}^{n\times q},V\in\mathbb{R}^{q\times p}}\quad \|X-ZV\|_F^2,\quad \text{s.t.}\quad V^{\mathrm{T}}V=I,\quad Z^{\mathrm{T}}\mathbf{1}=0,$$

其中 $X\in\mathbb{R}^{n\times p}$. 请给出该优化问题的解.

解 (邓展望). 首先写出该问题的拉格朗日函数:

$$L(Z,V,\mu,\lambda)=\|X-ZV\|_F^2-\mu^{\mathrm{T}}(V^{\mathrm{T}}V-I_p)\mu-\lambda^{\mathrm{T}}Z^{\mathrm{T}}\mathbf{1}=0,$$

其中 $\mu\in\mathbb{R}^p,\lambda\in\mathbb{R}^q$. 对 Z,V 求导可得:

$$-2XV^{\mathrm{T}}+2ZVV^{\mathrm{T}}-\mathbf{1}\lambda^{\mathrm{T}}=0, \tag{5.3a}$$

$$-2Z^{\mathrm{T}}X+2Z^{\mathrm{T}}ZV-2V(\mu\mu^{\mathrm{T}})=0, \tag{5.3b}$$

在 (5.3a) 右乘 V 再左乘 $\mathbf{1}$ 分别得:

$$-2X+2ZV-\mathbf{1}\lambda^{\mathrm{T}}V=0, \tag{5.4a}$$

$$-2\mathbf{1}^{\mathrm{T}}X-n\lambda^{\mathrm{T}}V=0, \tag{5.4b}$$

因此有

$$\lambda^{\mathrm{T}}V=-\frac{2}{n}\mathbf{1}^{\mathrm{T}}X,$$

带入到(5.4a)可得

$$ZV=X-\mathbf{1}\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\frac{X}{n}.$$ □

注 5.1 Z,V 的解不唯一. 因为若 $QQ^{\mathrm{T}}=I,Q\in R^{q\times q}$, 则 $ZQQ^{\mathrm{T}}V=ZV$. 令 $\hat{Z}=ZQ$, $\hat{Q}=Q^{\mathrm{T}}V$, 函数值不变.

另解. 记原问题为 P1，现构造新的优化问题：

$$\min_{W\in\mathbb{R}^{n\times p}} \quad \|X-W\|_F^2, \quad \text{s.t.} \quad W^{\mathrm{T}}\mathbf{1}=0,$$

并记该问题为 P2. 下证：P1 与 P2 可以相互构造最优解.
对于问题 P1，不妨设其最优解存在且为 (Z^*,V^*)，并记 P1 的最优目标函数值为 p^*. 同理，设 P2 的最优解存在且为 W^*，最优目标函数值为 q^*. 首先，令 $\hat{W}=Z^*V^*$，则由 P1 的约束条件得

$$(V^*)^{\mathrm{T}}V^*=I, \quad (Z^*)^{\mathrm{T}}\mathbf{1}=\mathbf{0},$$

因此 $\hat{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{1}=(Z^*V^*)^{\mathrm{T}}=\mathbf{0}$，故 $\hat{W}$ 是 P2 的可行解. 因此，

$$p^*=\|X-Z^*V^*\|_F^2=\left\|X-\hat{W}\right\|_F^2\geqslant q^*.$$

另一方面，令

$$\hat{Z}=\begin{bmatrix}W^* & 0\end{bmatrix}, \quad \hat{V}=\begin{bmatrix}I_{p\times p}\\ 0\end{bmatrix},$$

则容易验证 $\hat{Z}$ 与 $\hat{V}$ 均满足 P1 的约束条件，因而是 P1 的可行解. 同理，

$$q^*=\|X-W^*\|_F^2=\left\|X-\hat{Z}\hat{V}\right\|_F^2\geqslant p^*.$$

综合上述讨论，可知 P1 与 P2 可以相互构造最优解.
由此结论，我们可以通过求 P2 的最优解，从而表示出 P1 的最优解.
对于 P2，其拉格朗日函数为：

$$L(W,\lambda)=\|X-W\|_F^2+\lambda^{\mathrm{T}}W\mathbf{1},$$

因而由 KKT 条件可知

$$\begin{aligned} 2(W^*-X)+\lambda\mathbf{1}^{\mathrm{T}}&=0,\\ (W^*)^{\mathrm{T}}\mathbf{1}&=0, \end{aligned}$$

解得 $W^*=X-\dfrac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^{\mathrm{T}}X$. 这就是 P2 的最优解. 利用 P2 和 P1 最优解的关系，可以构造关于 P1 的一个最优解为：

$$Z^*=\begin{bmatrix}X-\dfrac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^{\mathrm{T}}X & 0\end{bmatrix}, \quad V^*=\begin{bmatrix}I_{p\times p}\\ 0\end{bmatrix}.$$

□

注 5.2 上述关于 *P1* 构造的最优解并不是唯一的，另解以另一种思路给出了其中一个最优解的具体结构.

第六章 无约束优化算法

6.1 设 $f(x)$ 是连续可微函数，d^k 是一个下降方向，且 $f(x)$ 在射线 $\{x^k + \alpha d^k \mid \alpha > 0\}$ 上有下界．求证：当 $0 < c_1 < c_2 < 1$ 时，总是存在满足 Wolfe 准则 (6.1.4a) (6.1.4b) 的点.并举一个反例说明当 $0 < c_2 < c_1 < 1$ 时，满足 Wolfe 准则的点可能不存在.

解 (谢中林)．记 $\phi(\alpha) = f(x^k + \alpha d^k)$，在 α 较小时，由 $f(x)$ 连续可微知

$$\phi(\alpha) = f(x^k) + \alpha \nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} d^k + o(|\alpha|).$$

因为 $\phi(\alpha)$ 在 $\alpha > 0$ 时由下界，且 $\nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} d^k < 0$，当 α 充分大时

$$\phi(\alpha) > f(x^k) + \alpha c_1 \nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} d^k.$$

故集合

$$A_1 = \{\alpha \mid \phi(\alpha) > f(x^k) + \alpha c_1 \nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} d^k, \, \alpha > 0\}$$

非空．而在 α 充分小时，利用 $0 < c_1 < 1$ 及 $\nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} d^k < 0$ 得

$$\phi(\alpha) < f(x^k) + \alpha c_1 \nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} d^k.$$

于是集合 A_1 有下界.

记 $\xi_1 = \inf A_1$，由 $f(x)$ 的连续性知 $\phi(\xi_1) = f(x^k) + \alpha c_1 \xi_1 f(x^k)^{\mathrm{T}} d^k$. 借助拉格朗日中值定理知，存在 $\zeta \in (0, \xi_1)$，使得

$$\begin{aligned} \phi'(\zeta) &= c_1 \nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} d^k \geqslant c_2 \nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} d^k, \\ \phi(\zeta) &\leqslant f(x^k) + \alpha c_1 \nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} d^k. \end{aligned}$$

□

6.2 f 为正定二次函数 $f(x)=\frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax+b^{\mathrm{T}}x$，$d^k$ 为下降方向，x^k 为当前迭代点．试求出精确线搜索步长

$$\alpha_k=\mathop{\arg\min}_{\alpha>0} f(x^k+\alpha d^k),$$

并由此推出最速下降法的步长满足 (6.2.2) 式（见定理 6.2）．

解 (谢中林)．此时 $f(x^k+\alpha d^k)$ 关于 α 强凸，由一阶条件知

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}f(x^k+\alpha_k d^k)=\alpha_k(d^k)^{\mathrm{T}}Ad^k+(x^k)^{\mathrm{T}}Ad^k+b^{\mathrm{T}}d^k=0.$$

于是精确线搜索步长为

$$\alpha_k=-\frac{(x^k)^{\mathrm{T}}Ad^k+b^{\mathrm{T}}d^k}{(d^k)^{\mathrm{T}}Ad^k}=-\frac{(Ax^k+b)^{\mathrm{T}}d^k}{(d^k)^{\mathrm{T}}Ad^k}.$$

在最速下降法中，$d^k=-\nabla f(x^k)=-(Ax^k+b)$，代入上式即得

$$\alpha_k=\frac{\left\|\nabla f\left(x^k\right)\right\|^2}{\nabla f\left(x^k\right)^{\mathrm{T}}A\nabla f\left(x^k\right)}.$$ □

6.3 利用定理 6.5 证明推论 6.2.

解 (谢中林)．已知

$$2\left(\sum_{i=0}^{k}\alpha_i\right)\left(\hat{f}^k-f^*\right)\leqslant\left\|x^0-x^*\right\|^2+\sum_{i=0}^{k}\alpha_i^2G^2.$$

(1) 取 $\alpha_i=t,\forall i$ 即得

$$\hat{f}^k-f^*\leqslant\frac{\left\|x^0-x^*\right\|^2}{2(k+1)t}+\frac{G^2t}{2}.$$

(2) 此时

$$\begin{aligned}\left\|x^{i+1}-x^*\right\|^2&=\left\|x^i-\alpha_ig^i-x^*\right\|^2\\&=\left\|x^i-x^*\right\|^2-2\alpha_i\left\langle g^i,x^i-x^*\right\rangle+\alpha_i^2\left\|g^i\right\|^2\\&\leqslant\left\|x^i-x^*\right\|^2-2\alpha_i\left(f\left(x^i\right)-f^*\right)+s^2.\end{aligned}$$

因此定理可改写为

$$2\left(\sum_{i=0}^{k}\alpha_i\right)\left(\hat{f}^k-f^*\right)\leqslant\left\|x^0-x^*\right\|^2+(k+1)s^2.$$

又 $\sum_{i=0}^{k}\alpha_i\|g_i\| = (k+1)s \leqslant \sum_{i=0}^{k}\alpha_i G$，因此 $(k+1)s/G \leqslant \sum_{i=0}^{k}\alpha_i$，则

$$\hat{f}^k - f^* \leqslant \frac{G\left\|x^0 - x^*\right\|^2}{2(k+1)s} + \frac{Gs}{2}.$$

(3) 同时除以 $2(\sum_{i=0}^{k}\alpha_i)$ 即得

$$\hat{f}^k - f^* \leqslant \frac{\left\|x^0 - x^*\right\|^2 + G^2\sum_{i=0}^{k}\alpha_i^2}{2\sum_{i=0}^{k}\alpha_i}.$$ □

6.4 考虑非光滑函数

$$f(x) = \max_{1\leqslant i\leqslant K} x_i + \frac{1}{2}\|x\|^2,$$

其中 $x\in\mathbb{R}^n$，$K\in[1,n]$ 为一个给定的正整数.

(a) 求出 $f(x)$ 的最小值点 x^* 和对应的函数值 f^*；

(b) 证明 $f(x)$ 在区域 $\{x \mid \|x\| \leqslant R \overset{\text{def}}{=\!=} 1/\sqrt{K}\}$ 上是 G-利普希茨连续的，其中 $G = 1 + \dfrac{1}{\sqrt{K}}$；

(c) 设初值 $x^0 = 0$，考虑使用次梯度算法 (6.3.1) 对 $\min f(x)$ 进行求解，其中 x 处的次梯度取为 $g = x + e_j$，j 为使得 $x_j = \max\limits_{1\leqslant i\leqslant K} x_i$ 成立的最小整数，步长 α_k 可任意选取，证明：在 k（$k < K$）次迭代后，

$$\hat{f}^k - f^* \geqslant \frac{GR}{2(1+\sqrt{K})},$$

其中 $\hat{f}^k$ 的定义和定理 6.5 相同. 并根据此例子推出次梯度算法的收敛速度 $\mathcal{O}\left(\dfrac{GR}{\sqrt{K}}\right)$ 是不能改进的.

解 (谢中林).

(a) 引入辅助变量 t，原问题等价于

$$\min_{x,t}\ t + \frac{1}{2}\|x\|^2, \quad \text{s.t. } x_i \leqslant t,\ i = 1,2,\ldots,K.$$

设 $\lambda_i \geqslant 0$ 为 $x_i \leqslant t$ 对应的乘子，其 KKT 条件为

$$\begin{aligned} x_i &= 0, \quad i = K+1, \dots, n, \\ x_i + \lambda_i = 0, \quad \lambda_i(t - x_i) &= 0, \quad i = 1, \dots, K, \\ t \geqslant x_i, \quad \lambda_i &\geqslant 0, \quad i = 1, \dots, K, \\ \sum_{i=0}^{K} \lambda_i &= 1. \end{aligned}$$

解得 $\sum_{i=1}^{K} x_i^2 = -t,\, t \geqslant -\frac{1}{K}$，分析取等条件知最小值点为

$$x_i^* = -\frac{1}{K},\, i = 1, \dots, K; \quad x_i^* = 0,\, i = K+1, \dots, n.$$

最小值 $f^* = -\frac{1}{2K}$.

(b) 由于

$$\max_{1 \leqslant i \leqslant K} x_i \leqslant \max_{1 \leqslant i \leqslant K} (x_i - y_i) + \max_{1 \leqslant i \leqslant K} y_i \leqslant \max_{1 \leqslant i \leqslant K} y_i + \|x - y\|_2,$$

因此当 $\|x\|$ 与 $\|y\|$ 小于等于 $1/\sqrt{K}$ 时，

$$f(x) - f(y) \leqslant \|x - y\|_2 + \frac{1}{2}(x+y)^{\mathrm{T}}(x - y) \leqslant (1 + \frac{1}{\sqrt{K}})\|x - y\|_2.$$

(c) 由于 $x^0 = 0$，根据次梯度的选取方式知 $g^0 = e_1$，因此 x^1 的第 1 个元素小于 0，其余元素仍为 0，故 $g^1 = e_2$．可以归纳地证明

$$x^k \in \mathrm{span}\{e_1, \dots, e_k\}.$$

由于 $k < K$，因此 x^k 的第 K 个元素为 0，于是

$$f^k - f^* \geqslant x_K^k + \frac{1}{2}\|x^k\|^2 + \frac{1}{2(1+k)} \geqslant \frac{1}{2(1+k)} \geqslant \frac{GR}{2(1+\sqrt{k})}. \quad \square$$

6.5 考虑非平方 ℓ_2 正则项优化问题

$$\min \quad f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|_2^2 + \mu\|x\|_2,$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$，注意这个问题并不是岭回归问题.

(a) 若 A 为列正交矩阵，即 $A^{\mathrm{T}}A = I$，利用不可微函数的一阶最优性条件求出该优化问题的显式解；

(b) 对一般的 A 我们可以使用迭代算法来求解这个问题．试设计出不引入次梯度的一种梯度类算法求解该优化问题．提示：$f(x)$ 仅在一点处不可导，若这个点不是最小值点，则次梯度算法和梯度法等价．

解 (谢中林).

(a) 在 $\|A^{\mathrm{T}}b\|_2 > \mu$ 时，若 $A^{\mathrm{T}}b \neq 0$，在 $x \neq 0$ 时，一阶最优性条件为

$$(1 + \frac{\mu}{\|x\|_2})x = A^{\mathrm{T}}b.$$

这说明 x 与 $A^{\mathrm{T}}b$ 共线．假设 $x = \alpha A^{\mathrm{T}}b$，代入得

$$\alpha = 1 - \frac{\mu}{\|A^{\mathrm{T}}b\|_2}, \quad x = \left(1 - \frac{\mu}{\|A^{\mathrm{T}}b\|_2}\right) A^{\mathrm{T}}b.$$

由凸性即知这是唯一的最小值点．
在 $\mu \geqslant \|A^{\mathrm{T}}b\|_2$ 时，利用柯西不等式得

$$f(x) = \frac{1}{2}\|b\|_2^2 + \frac{1}{2}\|Ax\|_2^2 + \mu\|x\|_2 - b^{\mathrm{T}}Ax \geqslant \frac{1}{2}\|b\|_2^2 = f(0).$$

且等号可以在 $x = 0$ 处取到，因此最小值点为 $x = 0$.

(b) 仅需考虑 $\mu < \|A^{\mathrm{T}}b\|_2$ 的情况．构造 $g_\lambda(x) = f(\lambda x)$，其中 $\lambda > 0$，此时

$$g_\lambda(0) = \frac{1}{2}\|b\|_2^2.$$

任取 y 使得 $\mu\|y\|_2 - b^{\mathrm{T}}Ay < 0$，则

$$g_\lambda(y) = \frac{1}{2}\|b\|_2^2 + \frac{\|Ay\|_2^2}{2}\lambda^2 + (\mu\|y\|_2 - b^{\mathrm{T}}Ay)\lambda.$$

利用二次函数的性质，此时总存在 $\lambda > 0$ 使得 $g_\lambda(y) < g_\lambda(0)$．于是 $x = 0$ 不是 $g_\lambda(x)$ 的最小值点.
由梯度法的下降性质，以 y 为初始点的梯度法不会经过不可导的零点，故利用梯度法求得 g_λ 的最小值点 y^* 后即得 f 的最小值点为 y^*/λ. $\square$

6.6 设函数 $f(x) = \|x\|^\beta$，其中 $\beta > 0$ 为给定的常数．考虑使用经典牛顿法 (6.4.2) 对 $f(x)$ 进行极小化，初值 $x^0 \neq 0$．证明：

(a) 若 $\beta > 1$ 且 $\beta \neq 2$，则 x^k 收敛到 0 的速度为 Q-线性的；

(b) 若 $0 < \beta < 1$，则牛顿法发散；

(c) 试解释定理 6.6 在 (a) 中不成立的原因.

解 (谢中林).

(a) 在 $x \neq 0$ 时，牛顿方程为

$$(\|x\|^2 I + (\beta - 2)xx^{\mathrm{T}})d = -\|x\|^2 x.$$

分别在等式两边左乘 x^{T} 与 d^{T} 并化简得

$$x^{\mathrm{T}}d = \frac{1}{1-\beta}\|x\|^2, \quad \|d^{\mathrm{T}}\|^2 = \frac{1}{(\beta-1)^2}\|x\|^2.$$

由于 $\beta > 1$ 且 $\beta \neq 2$，故

$$\frac{\|x+d\|^2}{\|x\|^2} = \frac{(\beta-2)^2}{(\beta-1)^2} < 1,$$

这说明此时牛顿法是 Q-线性收敛的.

(b) 在 $0 < \beta < 1$ 时

$$\frac{\|x+d\|^2}{\|x\|^2} = \frac{(\beta-2)^2}{(\beta-1)^2} > 1,$$

牛顿法发散.

(c) 函数 $f(x)$ 的海瑟矩阵为

$$\nabla^2 f(x) = \beta\|x\|^{\beta-2}I + \beta(\beta-2)\|x\|^{\beta-4}xx^{\mathrm{T}}.$$

在 $1 < \beta < 2$ 时，$\|x\|^{\beta-2}$ 在 $x = 0$ 附近不是利普希茨连续的，不符合定理条件；而在 $2 < \beta$ 时，$\|x\|^{\beta-4}xx^{\mathrm{T}}$ 与 $\|x\|^{\beta-2}I$ 在 $x = 0$ 处极限均为 0，即 $\nabla^2 f(x)$ 不正定，也不符合定理条件.

□

6.7 设矩阵 A 为 n 阶对称矩阵，d^k 为给定的非零向量．若对任意满足 $\|d\| = \|d^k\|$ 的 $d \in \mathbb{R}^n$，均有 $(d - d^k)^{\mathrm{T}}A(d - d^k) \geqslant 0$，证明：$A$ 是半正定矩阵.

解 (谢中林). 当 $x^{\mathrm{T}}d^k \neq 0$ 时，构造

$$d = d^k + \alpha x,$$

其中 $\alpha \neq 0$ 是待定系数. 令 $\|d\| = \|d^k\|$，解得 $\alpha = -x^{\mathrm{T}}d^k/\|x\|^2$. 于是

$$x^{\mathrm{T}}Ax = \frac{1}{\alpha^2}(d-d^k)^{\mathrm{T}}A(d-d^k) \geqslant 0.$$

在 $x^{\mathrm{T}}d^k = 0$ 时，构造 $x^n = x + \dfrac{1}{n}d^k$，则由连续性

$$x^{\mathrm{T}}Ax = \lim_{n\to\infty}(x^n)^{\mathrm{T}}Ax^n \geqslant 0.$$

综上，A 半正定. $\square$

6.8 设 $f(x)$ 为正定二次函数，且假定在迭代过程中 $(s^k - H^k y^k)^{\mathrm{T}}y^k > 0$ 对任意的 k 均满足，其中 H^k 由 SR1 公式 (6.5.10) 产生的拟牛顿矩阵. 证明:

$$H^k y^j = s^j, \quad j = 0, 1, \cdots, k-1,$$

其中 k 是任意给定的整数. 这个结论说明对于正定二次函数，SR1 公式产生的拟牛顿矩阵在当前点处满足割线方程，且历史迭代产生的 (s^j, y^j) 也满足割线方程.

解 (谢中林). 我们利用归纳法证明此结论. 设 $f(x) = \dfrac{1}{2}x^\top Qx + b^{\mathrm{T}}x$，其中 $Q \succ 0$，则在迭代过程中始终有 $Qs^j = y^j$. 假设结论对 k 成立，即

$$H^k y^j = s^j, \quad j = 0, 1, \cdots, k-1.$$

考虑 $k+1$ 时的情形，由于

$$H^{k+1} = H^k + \frac{\left(s^k - H^k y^k\right)\left(s^k - H^k y^k\right)^{\mathrm{T}}}{\left(s^k - H^k y^k\right)^{\mathrm{T}} y^k},$$

故

$$H^{k+1}y^k = H^k y^k + s^k - H^k y^k = s^k.$$

当 $j \leqslant k-1$ 时，利用归纳假设，有

$$\begin{aligned}
H^{k+1}y^j &= H^k y^j + \frac{\left(s^k - H^k y^k\right)\left((s^k)^{\mathrm{T}}y^j - (y^k)^{\mathrm{T}}H^k y^j\right)}{\left(s^k - H^k y^k\right)^{\mathrm{T}} y^k} \\
&= s^j + \frac{\left(s^k - H^k y^k\right)\left((s^k)^{\mathrm{T}}y^j - (y^k)^{\mathrm{T}}s^j\right)}{\left(s^k - H^k y^k\right)^{\mathrm{T}} y^k} \\
&= s^j + \frac{\left(s^k - H^k y^k\right)(s^k)^{\mathrm{T}}\left(Q - Q\right)s^j}{\left(s^k - H^k y^k\right)^{\mathrm{T}} y^k} \\
&= s^j.
\end{aligned}$$

□

6.9 仿照 BFGS 公式的推导过程, 利用待定系数法推导 DFP 公式 (6.5.15).

解 (谢中林). 假设

$$H^{k+1} = H^k + auu^{\mathrm{T}} + bvv^{\mathrm{T}}.$$

由割线方程得

$$H^{k+1}y^k = H^k y^k + (au^{\mathrm{T}}y^k)u + (bv^{\mathrm{T}}y^k)v = s^k,$$

令 $u = H^k y^k, v = s^k$，并令系数 $au^{\mathrm{T}}y^k = -1, bv^{\mathrm{T}}y^k = 1$ 即得

$$H^{k+1} = H^k - \frac{H^k y^k \left(H^k y^k\right)^{\mathrm{T}}}{\left(y^k\right)^{\mathrm{T}} H^k y^k} + \frac{s^k \left(s^k\right)^{\mathrm{T}}}{\left(y^k\right)^{\mathrm{T}} s^k}.$$

□

6.10 考虑共轭梯度法中的 Hestenes-Stiefel (HS) 格式

$$d^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \frac{\nabla f(x^{k+1})^{\mathrm{T}}y^k}{(y^k)^{\mathrm{T}}d^k}d^k,$$

其中 y^k 的定义如 (6.5.13) 式. 假设在迭代过程中 d^k 均为下降方向且精确搜索条件 $\nabla f(x^{k+1})^{\mathrm{T}}d^k = 0$ 满足，试说明 HS 格式可看成是某一种特殊的拟牛顿方法. 提示：将 *HS* 格式改写为拟牛顿迭代格式，并根据此格式构造另一个拟牛顿矩阵使其满足割线方程 (6.5.4)，注意拟牛顿矩阵需要满足对称性和正定性.

解 (谢中林). 由于

$$d^{k+1} = -\left(I - \frac{d^k(y^k)^{\mathrm{T}}}{(y^k)^{\mathrm{T}}d^k}\right)\nabla f(x^{k+1}),$$

上式中 d^k 在分子与分母中均是 1 次的，因此可以替换为 s^k，此时

$$d^{k+1} = -\left(I - \frac{s^k(y^k)^{\mathrm{T}}}{(y^k)^{\mathrm{T}}s^k}\right)\nabla f(x^{k+1}).$$

借助 $\nabla f(x^{k+1})^{\mathrm{T}}d^k = 0$，容易得到

$$d^{k+1} = -\left(I - \frac{s^k(y^k)^{\mathrm{T}} + y^k(s^k)^{\mathrm{T}}}{(y^k)^{\mathrm{T}}s^k}\right)\nabla f(x^{k+1}).$$

但此时

$$\left(I - \frac{s^k(y^k)^{\mathrm{T}} + y^k(s^k)^{\mathrm{T}}}{(y^k)^{\mathrm{T}}s^k}\right)y^k = -\frac{(y^k)^{\mathrm{T}}y^k}{(y^k)^{\mathrm{T}}s^k}s^k \neq s^k.$$

为此，考虑构造

$$H^{k+1} = I - \frac{s^k(y^k)^{\mathrm{T}} + y^k(s^k)^{\mathrm{T}}}{(y^k)^{\mathrm{T}}s^k} + \frac{(y^k)^{\mathrm{T}}y^k + (y^k)^{\mathrm{T}}s^k}{((y^k)^{\mathrm{T}}s^k)^2}s^k(s^k)^{\mathrm{T}},$$

此时 H^{k+1} 对称且 $H^{k+1}y^k = s^k$. 由 d^k 是下降方向及 $\nabla f(x^{k+1})^{\mathrm{T}}d^k = 0$ 知，$(y^k)^{\mathrm{T}}s^k = -\nabla f(x^k)s^k > 0$. 任取 $(s^k)^{\mathrm{T}}x \neq 0$，有

$$\begin{aligned}
&x^{\mathrm{T}}H^{k+1}x\\
=&(y^k)^{\mathrm{T}}s^k((s^k)^{\mathrm{T}}x)^2 + \|y^k\|^2((s^k)^{\mathrm{T}}x)^2 + ((y^k)^{\mathrm{T}}s^k)^2\|x\|^2\\
&-2((s^k)^{\mathrm{T}}x)((y^k)^{\mathrm{T}}x)((s^k)^{\mathrm{T}}y^k)\\
>&\|y^k\|^2((s^k)^{\mathrm{T}}x)^2 + ((y^k)^{\mathrm{T}}s^k)^2\|x\|^2 - 2((s^k)^{\mathrm{T}}x)((y^k)^{\mathrm{T}}x)((s^k)^{\mathrm{T}}y^k)\\
\geqslant&2|(s^k)^{\mathrm{T}}x||(y^k)^{\mathrm{T}}s^k|\|y^k\|\|x\| - 2((s^k)^{\mathrm{T}}x)((y^k)^{\mathrm{T}}x)((s^k)^{\mathrm{T}}y^k)\\
\geqslant&0.
\end{aligned}$$

当 $(s^k)^{\mathrm{T}}x = 0, x \neq 0$ 时，$x^{\mathrm{T}}H^{k+1}x = ((y^k)^{\mathrm{T}}s^k)^2\|x\|^2 > 0$，因此 H^{k+1} 是正定的.

综上，HS 格式可以看成在第 $k+1$ 步用

$$H^{k+1} = I - \frac{s^k(y^k)^{\mathrm{T}} + y^k(s^k)^{\mathrm{T}}}{(y^k)^{\mathrm{T}}s^k} + \frac{(y^k)^{\mathrm{T}}y^k + (y^k)^{\mathrm{T}}s^k}{((y^k)^{\mathrm{T}}s^k)^2}s^k(s^k)^{\mathrm{T}}$$

来近似海瑟矩阵之逆的特殊拟牛顿方法. $\square$

6.11 证明等式 (6.5.20).

解 (谢中林). 对于向量 u, v, x, y，利用分块矩阵乘法及迹的性质，有

$$
\begin{aligned}
\det(I + uv^{\mathrm{T}} + xy^{\mathrm{T}}) &= \det \begin{bmatrix} I + uv^{\mathrm{T}} + xy^{\mathrm{T}} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\
&= \det \begin{bmatrix} I & -u & -x \\ v^{\mathrm{T}} & 1 & 0 \\ y^{\mathrm{T}} & 0 & 1 \end{bmatrix} \\
&= \det \begin{bmatrix} I & -u & -x \\ 0 & 1 + u^{\mathrm{T}} v & x^{\mathrm{T}} v \\ 0 & u^{\mathrm{T}} y & 1 + x^{\mathrm{T}} y \end{bmatrix} \\
&= (1 + x^{\mathrm{T}} y)(1 + u^{\mathrm{T}} v) - (x^{\mathrm{T}} v)(u^{\mathrm{T}} y).
\end{aligned}
$$

因此

$$
\begin{aligned}
\det B^{k+1} &= \det \left(B^k + \frac{y^k (y^k)^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} y^k} - \frac{B^k s^k (B^k s^k)^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} B^k s^k} \right) \\
&= \det B^k \det(I + uv^{\mathrm{T}} + xy^{\mathrm{T}}).
\end{aligned}
$$

其中

$$
u = \frac{(B^k)^{-1} y^k}{(s^k)^{\mathrm{T}} y^k}, \quad v = y^k, \quad x = \frac{s^k}{(s^k)^{\mathrm{T}} B^k s^k}, \quad y = -B^k s^k.
$$

利用上述性质，

$$
\begin{aligned}
\det B^{k+1} &= \big((1 + x^{\mathrm{T}} y)(1 + u^{\mathrm{T}} v) - (x^{\mathrm{T}} v)(u^{\mathrm{T}} y)\big) \det B^k \\
&= \det B^k \frac{(y^k)^{\mathrm{T}} s^k}{(s^k)^{\mathrm{T}} B^k s^k}.
\end{aligned}
$$

□

6.12 设 $m(d)$ 为具有如下形式的二次函数：

$$
m(d) = g^{\mathrm{T}} d + \frac{1}{2} d^{\mathrm{T}} B d,
$$

其中 B 为对称矩阵，证明以下结论：

(a) $m(d)$ 存在全局极小值当且仅当 B 半正定且 g 在 B 的值空间中；若 B 半正定，则满足 $Bd = -g$ 的 d 均为 $m(d)$ 的全局极小值点；

(b) $m(d)$ 的全局极小值唯一当且仅当 B 严格正定.

解 (谢中林).

(a) 充分性：由于 g 属于 B 的值空间，存在 p 使得 $Bp=-g$，任取 w，有

$$\begin{aligned} m(p+w) &= g^T(p+w)+\frac{1}{2}(p+w)^TB(p+w) \\ &= \left(g^Tp+\frac{1}{2}p^TBp\right)+g^Tw+(Bp)^Tw+\frac{1}{2}w^TBw \\ &= m(p)+\frac{1}{2}w^TBw \\ &\geqslant m(p) \end{aligned}$$

由 B 半正定知 p 是全局极小值点.

必要性：假设 p 是全局极小值点，由 $\nabla m(p)=Bp+g=0$ 知 g 位于 B 的值空间，借助二阶必要条件知 $\nabla^2 m(p)=B$ 半正定.

(b) 充分性：只需注意到 (a) 中不等式，当 $w\neq 0$ 时 $w^{\mathrm{T}}Bw>0$，这说明了最小值点的唯一性.

必要性：若 B 不正定，p 是全局极小值点，此时存在 $w\neq 0$ 使得 $Bw=0$，于是

$$m(p+w)=m(p),$$

这说明最小值点不唯一. □

6.13 (小样本问题) 设 $J(x)\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 为最小二乘问题 (6.7.1) 中 $r(x)$ 在点 x 处的雅可比矩阵，其中 $m\ll n$. 设 $J(x)$ 行满秩，证明：

$$\hat{d}=-J(x)^{\mathrm{T}}(J(x)J(x)^{\mathrm{T}})^{-1}r(x)$$

给出了高斯 – 牛顿方程 (6.7.3) 的一个 ℓ_2 范数最小解.

解 (谢中林). 假设 d 也是高斯 – 牛顿方程的解，则

$$\|d\|^2=\|d-\hat{d}\|^2+2(d-\hat{d})^{\mathrm{T}}\hat{d}+\|\hat{d}\|^2.$$

由于 $J^{\mathrm{T}}Jd=-J^{\mathrm{T}}r$, 因此 $J^{\mathrm{T}}J(d-\hat{d})=0$, 由 J 行满秩得 $J(d-\hat{d})=0$, 故 $(d-\hat{d})^{\mathrm{T}}\hat{d}=0$，于是

$$\|d\|^2\geqslant\|d-\hat{d}\|^2+\|\hat{d}\|^2\geqslant\|\hat{d}\|^2.$$ □

第七章 约束优化算法

7.1 构造一个等式约束优化问题，使得它存在一个局部极小值，但对于任意的 $\sigma > 0$，它的二次罚函数是无界的.

解 (谢中林). 考虑

$$\min_{x,y} \quad -e^x, \quad \text{s.t. } x^2 + y^2 = 1.$$

其局部最小值点为 $(1,0)$，但对任意的 $\sigma > 0$，二次罚函数

$$P_E(x,y,\sigma) = -e^x + \frac{\sigma}{2}(x^2 + y^2 - 1)^2$$

无下界. □

7.2 考虑等式约束优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & -x_1x_2x_3, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 60. \end{aligned}$$

使用二次罚函数求解该问题，当固定罚因子 σ_k 时，写出二次罚函数的最优解 x^{k+1}. 当 $\sigma_k \to +\infty$ 时，写出该优化问题的解并求出约束的拉格朗日乘子. 此外，当罚因子 σ 满足什么条件时，二次罚函数的海瑟矩阵 $\nabla^2_{xx} P_E(x,\sigma)$ 是正定的?

解 (谢中林). 该问题的二次罚函数为

$$P_E(x,\sigma) = -x_1x_2x_3 + \frac{\sigma}{2}(x_1 + 2x_2 + 3x_3 - 60)^2.$$

由于可行解取 $x = (10,10,10)^{\mathrm{T}}$ 时 $P_E(x,\sigma) = -1000 < 0$，而当 x_i 中存在 0 时最小值必大于 0，因此最小值点坐标全部非 0. 又注意到对

$\forall z > 0$，构造 $x = (-z, -z, z+20)$ 均为可行解，故当 $z \to \infty$ 时原问题与罚问题均无界，因而优化问题是无解的．故用二次罚函数求解原问题时，我们可以只关注它局部极小解的存在性．

利用罚问题的一阶最优性条件可得

$$x_2x_3 = \frac{x_3x_1}{2} = \frac{x_1x_2}{3},$$

由于局部极小解的坐标全部非 0，上述条件可推出 $2x_2 = x_1, 3x_3 = x_1$，因此罚问题的最优性条件等价于

$$-x_1^2 + 18\sigma(x_1 - 20) = 0,$$

即仅在 $81\sigma^2 - 360\sigma > 0$ 时有极小值点，解得

$$\begin{aligned} x_1(\sigma) &= 9\sigma - \sqrt{81\sigma^2 - 360\sigma}, \\ x_2(\sigma) &= \frac{1}{2}x_1(\sigma), \quad x_3(\sigma) = \frac{1}{3}x_1(\sigma). \end{aligned}$$

于是在 $\sigma \to \infty$ 时，可以解得优化问题的一个局部极小解为：

$$x_1 = \lim_{\sigma\to\infty} \frac{360\sigma}{9\sigma + \sqrt{81\sigma^2 - 360\sigma}} = 20, \quad x_2 = 10, \quad x_3 = \frac{20}{3}.$$

利用 (7.1.5) 式，拉格朗日乘子为

$$\begin{aligned} \lambda &= -\lim_{\sigma\to\infty} \sigma(x_1(\sigma) + 2x_2(\sigma) + 3x_3(\sigma) - 60) \\ &= -60 \lim_{\sigma\to\infty} \sigma\left(\frac{6\sigma}{3\sigma + \sqrt{9\sigma^2 - 40\sigma}} - 1\right) \\ &= -60 \lim_{\sigma\to\infty} \frac{40\sigma^2}{(3\sigma + \sqrt{9\sigma^2 - 40\sigma})^2} \\ &= -\frac{200}{3}. \end{aligned}$$

由

$$\nabla_{xx}^2 P_E(x,\sigma) = \sigma \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & x_3 & x_2 \\ x_3 & 0 & x_1 \\ x_2 & x_1 & 0 \end{bmatrix},$$

应该考虑 $\nabla_{xx}^2 P_E(x(\sigma),\sigma)$ 的正定性以确定罚因子的值． □

7.3 考虑等式约束优化问题

$$\min \quad f(x), \quad \text{s.t.} \quad c_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E},$$

定义一般形式的罚函数

$$P_E(x,\sigma) = f(x) + \sigma \sum_{i\in\mathcal{E}} \varphi(c_i(x)),$$

其中 $\varphi(t)$ 是充分光滑的函数，且 $t=0$ 是其 s 阶零点（$s \geqslant 2$），即

$$\varphi(0) = \varphi'(0) = \cdots = \varphi^{(s-1)}(0) = 0, \quad \varphi^{(s)}(0) \neq 0.$$

设 x^k, σ_k 的选取方式和算法 7.1 的相同，且 $\{x^k\}$ 存在极限 x^*，在点 x^* 处 LICQ （见定义 5.9）成立.

(a) 证明：$\sigma_k(c_i(x^k))^{s-1}$, $\forall\, i \in \mathcal{E}$ 极限存在，其极限 λ_i^* 为约束 $c_i(x^*)=0$ 对应的拉格朗日乘子；

(b) 求 $P_E(x,\sigma)$ 关于 x 的海瑟矩阵 $\nabla_{xx}^2 P_E(x,\sigma)$；

(c) 设在 (a) 中 $\lambda_i^* \neq 0$, $\forall\, i \in \mathcal{E}$，证明：当 $\sigma_k \to +\infty$ 时，$\nabla_{xx}^2 P_E(x^k,\sigma_k)$ 有 m 个特征值的模长与 $\sigma_k^{1/(s-1)}$ 同阶，其中 $m = |\mathcal{E}|$.

解 (陈铖，丁思哲).

(a) 利用定理 7.2，首先求 $P_E(x,\sigma)$ 的一阶梯度，即

$$\nabla_x P_E(x,\sigma) = \nabla_x f(x) + \sigma \sum_{i\in\mathcal{E}} \varphi'(c_i(x)) \nabla_x c_i(x),$$

因此由 $\varphi'(0)=0$ 得

$$\|\nabla_x P_E(x^{k+1},\sigma_k)\| \to 0,$$

结合题设和定理 7.2 可知 x^* 是问题的 KKT 点，且

$$\lambda_i^* = \lim_{k\to\infty} \left(\sigma_k \varphi'(c_i(x^{k+1}))\right),$$

其中 λ_i^* 是约束 $c_i(x^*)=0$ 对应的拉格朗日乘子.

若迭代点收敛到最优解，则 $k\to\infty$ 时，$c_i(x^{k+1}) \to 0$，即逐渐满足等式约束. 由于 $c_i(x)$ 连续且 $\varphi(t)$ 充分光滑，可将 $\varphi'(c_i(x^{k+1}))$ 在 $c_i(x^*)=0$ 处泰勒展开，因此

$$\begin{aligned}\lim_{k\to\infty} \left(\sigma_k \varphi'(c_i(x^{k+1}))\right) &= \lim_{k\to\infty} \left(\frac{1}{s!}\sigma_k \varphi^{(s)}(c_i(x^{k+1}))(c_i(x^{k+1}))^{s-1}\right) \\ &= \frac{1}{s!}\varphi^{(s)}(0) \lim_{k\to\infty} \left(\sigma_k (c_i(x^{k+1}))^{s-1}\right) .\end{aligned}$$

(b) 直接对 $\nabla_x P_E(x,\sigma)$ 中的 x 微分，得海瑟矩阵为

$$\begin{aligned}\nabla^2_{xx}P_E(x,\sigma) = \quad & \nabla^2_{xx}f(x) + \sigma\sum_{i\in\mathcal{E}}\varphi'(c_i(x))\nabla^2_{xx}c_i(x)\\ & +\sigma\sum_{i\in\mathcal{E}}\varphi''(c_i(x))\nabla_x c_i(x)\nabla_x c_i(x)^{\mathrm{T}}.\end{aligned}$$

(c) 同 (7.1.11) 式，在 k 较大时（$x^{k+1}\approx x^*$），上述海瑟矩阵的前 2 项可以用拉格朗日函数近似. 此时对于 x^{k+1}，成立近似

$$\begin{aligned}\nabla^2_{xx}P_E(x^{k+1},\sigma_k) \approx & \nabla^2_{xx}L(x^{k+1},\lambda^*)\\ & + \sigma_k\sum_{i\in\mathcal{E}}\varphi''(c_i(x^{k+1}))\nabla_x c(x^{k+1})\nabla_x c(x^{k+1})^{\mathrm{T}},\end{aligned}$$

其中 $c(x) = [c_i(x)]_{i\in\mathcal{E}}$. 由于 $\nabla_x c(x^{k+1})\nabla_x c(x^{k+1})^{\mathrm{T}}$ 是半正定矩阵，它有 $(n-m)$ 个特征值都是 0，不妨设所有非 0 的特征值为 $\{\rho_j\}_{j=1}^m$，它们与 σ_k 无关.
$\nabla^2_{xx}L(x,\lambda^*)$ 是定值矩阵，而海瑟矩阵的另一项是一个最大特征值趋近于正无穷的矩阵. 因此当 $k\to\infty$ 时，可以在阶数意义上忽略定值矩阵的特征值.
综上，k 足够大时，海瑟矩阵的特征值趋近于 $\{\rho_j\sigma_k\varphi''(c_i(x^{k+1}))\}$.
再对 $\varphi''(c_i(x^{k+1}))$ 在 $c_i(x^*)=0$ 处做泰勒近似，展开到 s 阶，成立

$$\begin{aligned}\lim_{k\to\infty}\frac{\rho_i\sigma_k\varphi''(c_i(x^{k+1}))}{\sigma_k^{1/(s-1)}} &= \lim_{k\to\infty}\frac{\rho_i\sigma_k\varphi^{(s)}(c_i(x^{k+1}))(c_i(x^{k+1}))^{s-2}}{(s-2)!\sigma_k^{1/(s-1)}}\\ &= \lim_{k\to\infty}\frac{\varphi^{(s)}(c_i(x^{k+1}))(\sigma_k(c_i(x^{k+1}))^{s-1})^{\frac{s-2}{s-1}}}{(s-2)!}\\ &= \frac{\varphi^{(s)}(0)}{(s-2)!}\lim_{k\to\infty}(\sigma_k(c_i(x^{k+1}))^{s-1})^{\frac{s-2}{s-1}}.\end{aligned}$$

由 (a) 知 $\sigma_k(c_i(x^{k+1}))^{s-1}$ 存在，再由题设知其非 0，因此 $k\to\infty$ 时海瑟矩阵的特征值与 $\sigma_k^{1/(s-1)}$ 同阶. □

7.4 考虑不等式约束优化问题 (7.1.2)，其中 f 在可行域 $\mathcal{X}$ 上有下界，现使用对数罚函数法进行求解（算法 7.4）. 假设在算法 7.4 的每一步子问题能求出罚函数的全局极小值点 x^{k+1}，证明：算法 7.4 在有限次迭代后终止，或者

$$\lim_{k\to\infty}\sigma_k\sum_{i\in\mathcal{I}}\ln(-c_i(x^{k+1}))=0,$$

并且

$$\lim_{k\to\infty} f(x^k) = \inf_{x\in\mathbf{int}\mathcal{X}} f(x).$$

解 (谢中林). 若算法不能在有限步终止，任取 $\eta > 0$，存在 $x_\eta \in \mathbf{int}\mathcal{X}$，使得

$$f\left(x_\eta\right) < \inf_{x\in\mathbf{int}\mathcal{X}} f(x) + \frac{\eta}{2}.$$

由算法不能在有限步终止知 $\sigma_k \to 0$，故存在 $\bar{k}$，使得任取 $k > \bar{k}$，有

$$\frac{1}{\sigma_k} > \frac{2}{\eta}\sum_{i\in\mathcal{I}} \ln(-c_i(x_\eta)).$$

由 x_{k+1} 的定义，有

$$P_I(x_{k+1}, \sigma_k) \leqslant P_I(x_\eta, \sigma_k).$$

于是任取 $k > \bar{k}$ 且满足 $c_i(x_k) \neq 0$，成立：

$$\begin{aligned}
\sigma_k \sum_{i\in\mathcal{I}} \ln(-c_i(x_{k+1})) &\leqslant f\left(x_\eta\right) + \sigma_k \sum_{i\in\mathcal{I}} \ln(-c_i(x_\eta)) - f\left(x_{k+1}\right) \\
&\leqslant \inf_{x\in\mathbf{int}\mathcal{X}} f(x) + \frac{1}{2}\eta + \frac{1}{2}\eta - f\left(x_{k+1}\right) \\
&\leqslant \eta,
\end{aligned}$$

由 η 的任意性知

$$\lim_{k\to\infty} c_k \sum_{i\in\mathcal{I}} \ln(-c_i(x^{k+1})) = 0.$$

同理可得任取 $k > \bar{k}$，有

$$\begin{aligned}
f\left(x_{k+1}\right) &\leqslant f\left(x_\eta\right) + \sigma_k \sum_{i\in\mathcal{I}} \ln(-c_i(x_\eta)) \\
&\leqslant \inf_{x\in\mathbf{int}\mathcal{X}} f(x) + \eta.
\end{aligned}$$

由 η 的任意性知

$$\lim_{k\to\infty} f(x^k) = \inf_{x\in\mathbf{int}\mathcal{X}} f(x). \qquad \square$$

7.5 考虑一般约束优化问题 (7.1.15)，现在针对等式约束使用二次罚函数，对不等式约束使用对数罚函数：

$$P(x,\sigma) = f(x) + \frac{\sigma}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x) - \frac{1}{\sigma}\sum_{i\in\mathcal{I}} \ln(-c_i(x)),$$

其中 $\mathbf{dom}\, P=\{x \mid c_i(x)<0,\ i\in\mathcal{I}\}$．令罚因子 $\sigma_k\to+\infty$，定义

$$x^{k+1}=\arg\min_x P(x,\sigma_k).$$

假定涉及的所有函数都是连续的，$\{x \mid c_i(x)\leqslant 0,\ i\in\mathcal{I}\}$ 是有界闭集，x^* 为问题 (7.1.15) 的解．试证明如下结论：

(a) $\lim\limits_{k\to\infty} P(x^{k+1},\sigma_k)=f(x^*)$;

(b) $\lim\limits_{k\to\infty} \sigma_k\sum\limits_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x^{k+1})=0$;

(c) $\lim\limits_{k\to\infty} \dfrac{1}{\sigma_k}\sum\limits_{i\in\mathcal{I}} \ln(-c_i(x^{k+1}))=0$.

解 (陈铖、丁思哲)．(a) 我们首先考虑将二次罚函数系数固定为 μ ，并将添加了二次罚函数的函数视作一个新的函数

$$g_\mu(x)=f(x)+\frac{\mu}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x).$$

构造对于 $g_\mu(x)$ 的对数罚函数形式

$$\tilde{P}_\mu(x,\sigma)=g_\mu(x)-\frac{1}{\sigma}\sum_{i\in\mathcal{I}}\ln(-c_i(x)).$$

由前述证明知，$\sigma\to\infty$ 时，对数罚函数法收敛到函数的最优值，即

$$\lim_{k\to\infty}\tilde{P}_\mu(x_\mu^{k+1},\sigma_k)=g_\mu(x_\mu^*).$$

其中 x_μ^* 是满足不等式约束的极小值点．我们知道，任取 μ，当 $\sigma\leqslant\mu$ 时，有

$$g_\mu(x)\geqslant f(x)+\frac{\sigma}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x),$$

在添加对数罚函数之后，不等式仍然成立，即可得到

$$\tilde{P}_\mu(x,\sigma^k)\geqslant P(x,\sigma^k).$$

对左右两边取极小，即可得到

$$\tilde{P}_\mu(x_\mu^{k+1},\sigma^k)=\inf_x\tilde{P}_\mu(x,\sigma^k)\geqslant\inf_x P(x,\sigma^k)=P(x^{k+1},\sigma^k).$$

由此

$$\lim_{k\to\infty} P(x^{k+1},\sigma_k) \leqslant \lim_{k\to\infty} \tilde{P}_\mu(x_\mu^{k+1},\sigma_k) = g_\mu(x_\mu^*).$$

上式对于任意 μ 均成立，则有

$$\lim_{k\to\infty} P(x^{k+1},\sigma_k) \leqslant \lim_{\mu\to 0} g_\mu(x_\mu^*).$$

注意到 $g_\mu(x_\mu^*)$ 是在满足不等式约束的条件下 $g_\mu(x)$ 的极小值，如果将定义域设置为满足不等式约束的所有点，则 x_μ^* 是 $g_\mu(x)$ 在定义域上的极小值，而 $g_\mu(x)$ 是 $f(x)$ 的系数为 μ 的二次罚函数形式. 因此根据二次罚函数的收敛性，我们有 $\lim\limits_{\mu\to 0} g_\mu(x_\mu^*) = f(x^*)$，$x^*$ 是定义域上满足等式约束的最小值，即同时满足不等式约束以及等式约束的最小值.

同时，我们知道 $\lim\limits_{k\to\infty} P(x^{k+1},\sigma_k) \geqslant f(x^*)$.

综上可得

$$f(x^*) \leqslant \lim_{k\to\infty} P(x^{k+1},\sigma_k) \leqslant f(x^*),$$

即 $\lim\limits_{k\to\infty} P(x^{k+1},\sigma_k) = f(x^*)$.

(b) 根据 (a) 的说法，对数罚函数法使得

$$\tilde{P}_\mu(x_\mu^{k+1},\sigma^k) \to g_\mu(x_\mu^*),$$

在上式中使得 $\mu\to 0$，即有

$$f(x^{k+1}) - \frac{1}{\sigma_k}\sum_{i\in\mathcal{E}} \ln(-c_i(x^{k+1})) \to f(x^*),$$

再联立 (a) 中证明的结论，即有

$$\lim_{k\to\infty} \sigma_k \sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x^{k+1}) = 0.$$

(c) 固定对数罚函数的系数为 μ，即设

$$h_\mu(x) = f(x) - \frac{1}{\mu}\sum_{i\in\mathcal{I}} \ln(-c_i(x)),$$

并在 $\mathbf{dom}\,P$ 中讨论 $h_\mu(x)$. 构造对于 $h_\mu(x)$ 的二次罚函数形式，类似 (a)(b) 讨论，亦可得 $\lim\limits_{k\to\infty} \dfrac{1}{\sigma_k}\sum\limits_{i\in\mathcal{I}} \ln(-c_i(x^{k+1})) = 0$，不再赘述. $\square$

7.6 (Morrison 方法) 考虑等式约束优化问题 (7.1.1)，设其最优解为 x^*. 令 M 是最优函数值 $f(x^*)$ 的一个下界估计（即 $M \leqslant f(x^*)$），构造辅助函数

$$v(M,x) = [f(x) - M]^2 + \sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x),$$

Morrison 方法的迭代步骤如下：

$$\begin{aligned} x^k &= \arg\min_x \ v(M_k, x), \\ M_{k+1} &= M_k + \sqrt{v(M_k, x^k)}. \end{aligned}$$

试回答以下问题：

(a) 证明：$f(x^k) \leqslant f(x^*)$；

(b) 若 $M_k \leqslant f(x^*)$，证明：$M_{k+1} \leqslant f(x^*)$；

(c) 证明：$\lim\limits_{k\to\infty} M_k = f(x^*)$；

(d) 求 $v(M,x)$ 关于 x 的海瑟矩阵，并说明 Morrison 方法和算法 7.1 的联系.

解 (丁思哲).

(a) 用反证法. 若 $f(x^k) > f(x^*)$，则有

$$v(M, x^*) < v(M, x^k),$$

这与题设矛盾. 因此，$f(x^k) \leqslant f(x^*)$.

(b) 由于 $v(M_k, x^k) \leqslant v(M_k, x^*)$，故有

$$\begin{aligned} M_{k+1} = M_k + \sqrt{v(M_k, x^k)} &\leqslant M_k + \sqrt{v(M_k, x^*)} \\ &= M_k + |f(x^*) - M_k|, \end{aligned}$$

而 $f(x^*) \geqslant M_k$，则 $M_{k+1} \leqslant M_k + f(x^*) - M_k = f(x^*)$.

(c) 考虑 Morrison 方法中 $x^k \to x^*$ $(k \to \infty)$，则

$$\begin{aligned} M_{k+1} &= M_k + \sqrt{v(M_k, x^k)} \\ &= M_k + \sqrt{(f(x^k) - M_k)^2 + \sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\,(x^k)}. \end{aligned}$$

$\exists N \in \mathbb{N}_+$，当 $\forall n \geqslant N$ 时，成立

$$\begin{aligned} M_{n+1} &= M_n + \sqrt{(f(x^n) - M_n)^2 + \varepsilon_n} \\ &\leqslant M_n + |f(x^n) - M_n| + \varepsilon_n, \end{aligned}$$

其中 $\varepsilon_n > 0$ 且 $n \to \infty$ 时 $\varepsilon_n \to 0$.
同理，$M_{n+1} \geqslant M_n + |f(x^n) - M_n| - \varepsilon_n$.
令 $n \to \infty$，且注意 $f(x^n) \to f(x^*)$，则有

$$\lim_{k\to\infty} M_{k+1} = \lim_{k\to\infty} M_k = f\left(x^*\right).$$

(d) 经过简单的计算可知，海瑟矩阵的 (i, j) 元为

$$2\frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial f}{\partial x_j} + 2\left(f - M\right)\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} + 2\sum_{k\in\mathcal{E}}\frac{\partial c_k}{\partial x_i}\frac{\partial c_k}{\partial x_j} + 2\sum_{k\in\mathcal{E}} c_k \frac{\partial^2 c_k}{\partial x_i \partial x_j}.$$

它与算法 7.1 的联系是，Morrison 方法仍为惩罚方法，这与算法 7.1 所属的方法类别一致.
算法 7.1 通过调节惩罚项 $\sum\limits_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right)$ 的权系数 σ_k 的大小施加惩罚，而 Morrison 方法是一类惩罚项自适应的方法，通过构造问题

$$\min_{x} \quad v\left(M_k, x\right)$$

以使 $\sum\limits_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right)$ 不断减小，最终完成优化.
从分析的角度看，将 Morrison 方法进一步写成

$$\begin{aligned} x^{k+1} = \arg\min_{x}\{&f(x)[f(x) - 2M_k - 2\sqrt{v(M_k, x^k)}] + 2\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right)\} \\ &+ M_k^2 + (f(x^k) - M_k)^2 + 2M_k\sqrt{v(M_k, x^k)}. \end{aligned}$$

由 **(a)**，**(c)** 可得 $k \to \infty$ 时成立

$$\begin{aligned} \text{上式} &= f(x)(f(x) - 2f(x^*)) + 2\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right) + f^2(x^*) \\ &= (f(x) - f(x^*))^2 + 2\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right), \end{aligned}$$

因此 Morrison 方法在 k 足够大时，相当于对问题

$$\min_{x}\{\left|f(x) - f(x^*)\right|^2 + 2\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right)\}$$

求解.

所以，相比算法 7.1，Morrison 方法在运行后期的表现等同于将对 $f(x)$ 的优化换成对 $|f(x)-f(x^*)|^2$ 的优化，而直接取 $\sigma_k=4$. □

7.7 考虑不等式约束优化问题

$$\min \quad f(x), \quad \text{s.t.} \quad c_i(x)\leqslant 0,\ i\in\mathcal{I}.$$

(a) 定义函数 $F(x)=\sup\limits_{\lambda_i\geqslant 0}\left\{f(x)+\sum\limits_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i c_i(x)\right\}$，证明：原问题等价于无约束优化问题 $\min\limits_x F(x)$；

(b) 定义函数

$$\hat{F}(x,\lambda^k,\sigma_k)=\sup_{\lambda_i\geqslant 0}\left\{f(x)+\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i c_i(x)-\frac{\sigma_k}{2}\sum_{i\in\mathcal{I}}(\lambda_i-\lambda_i^k)^2\right\},$$

求 $\hat{F}(x,\lambda^k,\sigma_k)$ 的显式表达式；

(c) 考虑如下优化算法：

$$\begin{aligned}
x^k &= \arg\min_x \hat{F}(x,\lambda^k,\sigma_k),\\
\lambda^{k+1} &= \arg\max_{\lambda\geqslant 0}\left\{\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i c_i(x^k)-\frac{\sigma_k}{2}\sum_{i\in\mathcal{I}}(\lambda_i-\lambda_i^k)^2\right\},\\
\sigma_{k+1} &= \min\{\rho\sigma_k,\bar{\sigma}\},
\end{aligned}$$

试说明其与算法 7.5 的区别和联系.

解（丁思哲）. (a) 此证明实际上是**“广义拉格朗日函数的极小极大问题与原问题等价”**.

原问题的广义拉格朗日函数为

$$L(x,\lambda)=f(x)+\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i c_i(x),\quad \lambda_i\geqslant 0.$$

考虑关于 x 的函数

$$\begin{aligned}
F(x) &= \sup_{\lambda_i\geqslant 0} L(x,\lambda)\\
&= \sup_{\lambda_i\geqslant 0}\left\{f(x)+\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i c_i(x)\right\},
\end{aligned}$$

假设对某 x，若 x 违反约束，即 $\exists i \in \mathcal{I}$，使 $c_i(x) > 0$，则有

$$F(x) = \sup_{\lambda_i \geqslant 0} L(x, \lambda) \to \infty,$$

即 $F(x)$ 无定义．相反，若 x 不违反约束，则 $F(x) < \infty$，且取得 $\lambda_i = 0$.

因此，

$$\begin{aligned}\min_x \quad F(x) &= \min_x \sup_{\lambda_i \geqslant 0} \left\{ f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x) \right\} \\ &= \min_x \quad f(x) \quad \text{s.t.} \quad c_i(x) \leqslant 0 \ (i \in \mathcal{I}).\end{aligned}$$

这就说明问题彼此是等价的.

(b) 适当取 λ_i 的值，使得 $\hat{F}(x, \lambda^k, \sigma_k)$ 取极小值，由极小性原理，

$$\lambda_i = \frac{c_i(x)}{\sigma_k} + \lambda_i^k \quad (\sigma_k \neq 0). \tag{7.1}$$

对于(7.1)所定义的 λ_i，若 $\lambda_i \geqslant 0$，则 $\hat{F}(x, \lambda^k, \sigma_k)$ 的显式表达式为

$$\begin{aligned}\hat{F}(x, \lambda^k, \sigma_k) &= f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(\frac{c_i(x)}{\sigma_k} + \lambda_i^k \right) c_i(x) - \frac{\sigma_k}{2} \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(\frac{c_i(x)}{\sigma_k} \right)^2 \\ &= f(x) + \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(\frac{c_i^2(x)}{\sigma_k} + 2\lambda_i^k c_i(x) \right).\end{aligned}$$

否则，需将 λ_i 的表达式

$$\lambda_i = \begin{cases} \dfrac{c_i(x)}{\sigma_k} + \lambda_i^k, & \dfrac{c_i(x)}{\sigma_k} + \lambda_i^k \geqslant 0 \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

代入 $\hat{F}(x, \lambda^k, \sigma_k)$，不再赘述.

(c) 本题的迭代格式为

$$\begin{aligned}& x^{k+1} = \arg\min_x \left\{ f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i^k c_i(x) + \frac{1}{2\sigma_k} \sum_{i \in \mathcal{I}} c_i^2(x) \right\}, \\ & \lambda^{k+1} = \lambda^k + \frac{c\left(x^{k+1}\right)}{\sigma_k}, \\ & \sigma_{k+1} = \min\left\{\rho\sigma_k, \bar{\sigma}\right\}.\end{aligned}$$

对比算法 7.5，本题迭代格式中的 $1/\sigma_k$ 对应与算法 7.5 中的 σ_k，因此算法本质上是一样的. 只是，本题的迭代格式中，σ_k 越小（趋于 0）则惩罚强度越大，而算法 7.5 中的情况则恰相反. □

7.8 对于 LASSO 问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2+\mu\|x\|_1,$$

写出该问题及其对偶问题的增广拉格朗日函数法.

解（丁思哲）.

LASSO 问题的增广拉格朗日函数法方法

LASSO 问题为

$$\min_{x} \quad \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2+\mu\|x\|_1,$$

设 $z\in\mathbb{R}^n$，将 LASSO 问题等价地写为

$$\begin{aligned}\min_{x} \quad & \frac{1}{2}\|z-b\|_2^2+\mu\|x\|_1,\\ \text{s.t.} \quad & Ax-z=0.\end{aligned}$$

上式的拉格朗日函数为

$$L(x,z,\lambda)=\frac{1}{2}\|z-b\|_2^2+\mu\|x\|_1+\lambda^{\mathrm{T}}(Ax-z),$$

则其增广拉格朗日函数为

$$L_\sigma(x,z,\lambda)=\frac{1}{2}\|z-b\|_2^2+\mu\|x\|_1+\lambda^{\mathrm{T}}(Ax-z)+\frac{1}{2}\sigma\|Ax-z\|_2^2.$$

因此，增广拉格朗日函数法迭代求解的基本框架为

$$\left(x^{k+1},z^{k+1}\right)=\underset{x,z}{\operatorname{argmin}}\left\{L_{\sigma_k}\left(x,z,\lambda^k\right)\right\}, \tag{7.2a}$$

$$\lambda^{k+1}=\lambda^k+\sigma_k\left(Ax^{k+1}-z^{k+1}\right), \tag{7.2b}$$

$$\sigma_{k+1}=\rho\sigma_k, \quad \sigma_k\uparrow\sigma_\infty<\infty. \tag{7.2c}$$

其中 (7.2a) 是求解最困难的地方. 除了利用投影梯度法或半光滑牛顿法联合变量求解 (x^{k+1},z^{k+1}) 以外，还可以利用最优性条件，将 z 用 x 来表示，进而可以只求关于 x 的问题.

(7.2a) 式中，关于 z 的极小化问题为

$$\min_{z} \quad \|z-b\|_2^2+\sigma\left\|Ax-z+\frac{\lambda}{\sigma}\right\|_2^2,$$

则解得 $z=\dfrac{1}{\sigma+1}(\sigma Ax+\lambda+b)$，将 z 的表达式代入 (7.2a) 式，可得

$$x^{k+1}=\arg\min_{x}\{L_{\sigma_k}(x;\lambda^k)\}.$$

LASSO 问题的对偶问题的增广拉格朗日函数法方法

先求 LASSO 问题的对偶问题．LASSO 问题的对偶函数为

$$\begin{aligned} g(y) &= \inf_{x,z} L(x,z,\lambda) \\ &= \inf_{x}\left\{\mu\|x\|_1+\lambda^{\mathrm{T}}Ax\right\}+\inf_{z}\left\{\frac{1}{2}\|z-b\|_2^2-\lambda^{\mathrm{T}}z\right\}. \end{aligned}$$

而

$$\inf_{x}\left\{\mu\|x\|_1+\lambda^{\mathrm{T}}Ax\right\}=\begin{cases}0, & \left\|A^{\mathrm{T}}\lambda\right\|_\infty\leqslant\mu,\\ -\infty, & \text{其它}.\end{cases}$$

$$\inf_{z}\left\{\frac{1}{2}\|z-b\|_2^2-\lambda^{\mathrm{T}}z\right\}=-\lambda^{\mathrm{T}}b-\frac{1}{2}\|\lambda\|_2^2.$$

则对偶问题为

$$\begin{aligned} \max_{x}\quad & -\frac{1}{2}\|\lambda\|_2^2-\lambda^{\mathrm{T}}b, \\ \text{s.t.}\quad & \left\|A^{\mathrm{T}}\lambda\right\|_\infty\leqslant\mu. \end{aligned}$$

引入变量 s，将 λ 改写成 y，对偶问题等价地写成

$$\begin{aligned} \max_{x}\quad & -\frac{1}{2}\|y\|_2^2-b^{\mathrm{T}}y, \\ \text{s.t.}\quad & A^{\mathrm{T}}y-s=0, \\ & \|s\|_\infty\leqslant\mu. \end{aligned}$$

对于上述对偶问题，增广拉格朗日函数为

$$\begin{aligned} L_\sigma(y,s,\lambda)=\frac{1}{2}\|y\|_2^2+b^{\mathrm{T}}y+\lambda^{\mathrm{T}}\left(A^{\mathrm{T}}y-s\right)+\frac{1}{2}\sigma\left\|A^{\mathrm{T}}y-s\right\|_2^2, \\ \|s\|_\infty\leqslant\mu. \end{aligned}$$

则增广拉格朗日函数法的迭代格式为

$$\left(y^{k+1},s^{k+1}\right)=\arg\min_{y,s}\left\{L_{\sigma_k}\left(y,s;\lambda^k\right)\right\}, \tag{7.3a}$$

$$\lambda^{k+1}=\lambda^k+\sigma_k\left(A^{\mathrm{T}}y^{k+1}-s^{k+1}\right), \tag{7.3b}$$

$$\sigma_{k+1}=\rho\sigma_k,\quad \sigma_k\uparrow\sigma_\infty\leqslant\infty. \tag{7.3c}$$

用最优性条件，在 (7.3a) 式中消去 s，得到极小化问题

$$\begin{aligned} \min_{s} \quad & \sigma \left\| A^{\mathrm{T}}y - s + \frac{\lambda}{\sigma} \right\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & \|s\|_\infty \leqslant \mu \end{aligned}$$

的解 $s = \mathcal{P}_{\|s\|_\infty \leqslant \mu}\left(A^{\mathrm{T}}y + \dfrac{\lambda}{\sigma}\right)$. 将 s 的表达式代入 (7.3a) 即可消去 s，只更新 y，从而减小了计算的困难. □

7.9 考虑线性规划问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad c^{\mathrm{T}}x, \quad \text{s.t.} \quad Ax = b,\ x \geqslant 0.$$

(a) 写出该问题及其对偶问题的增广拉格朗日函数法；

(b) 分析有限终止性.

解 (丁思哲).

(a) 线性规划原问题的增广拉格朗日函数为

$$L_\sigma(x, \lambda) = c^{\mathrm{T}}x + \lambda^{\mathrm{T}}(Ax - b) + \frac{1}{2}\sigma \|Ax - b\|_2^2, \quad x \geqslant 0.$$

根据增广拉格朗日函数，设计增广拉格朗日函数法迭代格式为

$$x^{k+1} = \arg\min_{x \geqslant 0} \left\{ L_{\sigma_k}\left(x, \lambda^k\right) \right\}, \tag{7.4a}$$

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \sigma_k \left(Ax^{k+1} - b\right), \tag{7.4b}$$

$$\sigma_{k+1} = \min\left\{\rho\sigma_k, \bar{\sigma}\right\}. \tag{7.4c}$$

线性规划的对偶问题为

$$\begin{aligned} \min_{y} \quad & b^{\mathrm{T}}y, \\ \text{s.t.} \quad & A^{\mathrm{T}}y + c \leqslant 0. \end{aligned}$$

引入松弛变量 s，等价于

$$\begin{aligned} \min_{y} \quad & -b^{\mathrm{T}}y, \\ \text{s.t.} \quad & A^{\mathrm{T}}y + s - c = 0, \\ & s \geqslant 0. \end{aligned}$$

根据上述对偶问题，增广拉格朗日函数为

$$L_\sigma(y,s,\lambda)=-b^{\mathrm{T}}y+\lambda^{\mathrm{T}}\left(A^{\mathrm{T}}y+s-c\right)+\frac{1}{2}\sigma\left\|A^{\mathrm{T}}y+s-c\right\|_2^2,$$

其中 $s\geqslant 0$. 由此设计增广拉格朗日函数法迭代格式为

$$\left(y^{k+1},s^{k+1}\right)=\underset{y,s\geqslant 0}{\arg\min}\left\{L_{\sigma_k}\left(y,s,\lambda^k\right)\right\}, \tag{7.5a}$$

$$\lambda^{k+1}=\lambda^k+\sigma_k\left(A^{\mathrm{T}}y^{k+1}+s^{k+1}-c\right), \tag{7.5b}$$

$$\sigma_{k+1}=\min\left\{\rho\sigma_k,\bar{\sigma}\right\}. \tag{7.5c}$$

用最优性条件将 (7.5a) 中的 s 用 y 表示，即对极小化问题

$$\begin{aligned}\min_{s}\quad & \sigma\left\|A^{\mathrm{T}}y+s-c+\frac{\lambda}{\sigma}\right\|_2^2\\ \text{s.t.}\quad & s\geqslant 0\end{aligned}$$

解得 $s=\mathcal{P}_{\mathbb{R}_+^n}(c-A^{\mathrm{T}}y-\lambda/\sigma)$. 将此式代入 (7.5a) 中即可.

(b) 仿照基追踪问题的增广拉格朗日函数法证明其有限终止性的思路进行.

线性规划的增广拉格朗日函数见 (**7.9**a)，其更新格式见(7.4a). 只考虑 $x^k\geqslant 0$ 的情况，设迭代的第一步取 $x^0=\lambda^0=0$，并设 x^{k+1} 是 $L_\sigma(x,\lambda^k)$ 的全局极小点，则

$$0\in c+\sigma A^{\mathrm{T}}(Ax^{k+1}-b+\frac{\lambda^k}{\sigma}).$$

因此本问题亦满足引理 7.1，只不过在证明中将 $\|x\|_1$ 换成 $c^{\mathrm{T}}x$ 即可. 同样地，本问题亦满足引理 7.2.

下证本问题满足定理 7.8，即具有有限终止性. 由引理 7.2，只需证存在 K，对任意 $k\geqslant K$，$Ax^k=b$. 由于线性规划问题的可行域非空，存在 $\hat{x}$ 满足 $\|A\hat{x}-b\|=0$. 再由引理 7.1(2)、(**7.9**b)以及 $c^{\mathrm{T}}x$ 的凸性，存在 K，对任意 $k\geqslant K$，均有

$$\frac{\sigma}{2}\left\|Ax^k-b\right\|^2\leqslant c^{\mathrm{T}}\hat{x}-c^{\mathrm{T}}x^k+(\lambda^k)A(\hat{x}-x^k)+\frac{\sigma}{2}\left\|A\hat{x}-b\right\|^2\leqslant 0.$$

因此对任意 $k\geqslant K$，$Ax^k=b$，故若只考虑 $x^k\geqslant 0$，则增广拉格朗日法具有解线性规划问题的有限终止性. □

7.10 证明：方程 (7.3.5) 的系数矩阵非奇异当且仅当 A 是行满秩的.

解 (丁思哲).

(⇐) 若 A 行满秩，则 AA^{T} 正定，亦有 $AL_s^{-1}L_xA^{\mathrm{T}}$ 正定. 那么，方程 (7.3.5) 有唯一解 (见 7.3.6)，这说明方程的系数矩阵是非奇异的.

(⇒) 若系数矩阵非奇异，则方程有解且唯一，利用消元法，得方程

$$\left(AL_s^{-1}L_xA^{\mathrm{T}}\right)\Delta y = r_p - AL_s^{-1}r_c + AL_s^{-1}L_x r_d$$

也有确定的唯一解. 这说明 $AL_s^{-1}L_xA^{\mathrm{T}}$ 非奇异，而只有 AA^{T} 非奇异，从而 A 行满秩. □

7.11 给出求解方程 (7.3.5)（即内点法线性系统子问题）的详细过程.

解 (邓展望). 由题可得下列等式：

$$A^{\mathrm{T}}\Delta y + \Delta s = r_d, \tag{7.6a}$$

$$L_s\Delta x + L_x\Delta s = r_c, \tag{7.6b}$$

$$A\Delta x = r_p. \tag{7.6c}$$

从等式 (7.6b) 可得

$$\Delta s = L_x^{-1}r_c - L_x^{-1}L_s\Delta x,$$

代入 (7.6a) 得

$$A^{\mathrm{T}}\Delta y + L_x^{-1}r_c - L_x^{-1}L_s\Delta x = r_d.$$

由此求得

$$\Delta x = -L_s^{-1}(L_x\Delta s - r_c), \tag{7.7}$$

其中

$$\Delta s = r_d - A^{\mathrm{T}}\Delta y. \tag{7.8}$$

最后将 (7.8) 代入 (7.6b)，等式两边乘以 $AL_s^{-1}L_x$，再将 (7.7) 代入所得式子则得到

$$\Delta y = (AL_s^{-1}L_xA^{\mathrm{T}})^{-1}(r_p + AL_s^{-1}(L_x r_d - r_c)).$$ □

7.12 对线性规划问题 (7.3.1) 中的原始问题 (P)，构造带等式约束的内点罚函数子问题

$$\begin{aligned}
\min \quad & c^{\mathrm{T}}x - \tau\sum_{i=1}^{n}\ln x_i, \\
\text{s.t.} \quad & Ax = b,
\end{aligned}$$

其中 $\tau > 0$ 为罚因子. 试说明求解该问题等价于求解中心路径方程 (7.3.8), 并且进一步说明当 $\tau \to 0$ 时, 该问题的解收敛于满足 KKT 方程 (7.3.2) 的点.

解 (邓展望). 考虑带等式约束的内点罚函数子问题的 KKT 条件:

$$
\begin{aligned}
c &= A^{\mathrm{T}} y + \frac{\tau}{x}, \\
Ax &= b, \\
x &> 0,
\end{aligned} \tag{7.9}
$$

其中的分式表示逐分量相除. 令 $s = \dfrac{\tau}{x}$, 则原问题变为:

$$
\begin{aligned}
Ax &= b, \\
A^{\mathrm{T}} y + s &= c, \\
x_i s_i &= \tau_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \\
x \geqslant 0&, s \geqslant 0.
\end{aligned} \tag{7.10}
$$

这正好对于 (7.3.8) 的 KKT 条件, 所以求解该问题等价于求解中心路径方程 (7.3.8).
令 $\tau \to 0$, 此时(7.10)与原问题 KKT 条件相等, 所以当 $\tau \to 0$ 时, 该问题的解收敛于满足 KKT 方程 (7.3.2) 的点. □

7.13 详细说明在算法 7.7 中如何选取最大的 α 使得 $\alpha \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$.

解 (邓展望). 由方程 (7.3.5) 可知, 想要找到最大的 α 只需要保证在下一步迭代时 (x, y, s), 满足 $x_i y_i \geqslant \gamma\mu$ 即可.
这是关于 α 的 n 个二次不等式:

$$
\begin{aligned}
x_i^{k+1} s_i^{k+1} &= (x_i^k + \alpha \Delta x_i^k)(s_i^k + \alpha \Delta s_i^k) \\
&= x_i^k s_i^k + \alpha (x_i^k \Delta s_i^k + s_i^k \Delta x_i^k) + \alpha^2 (\Delta s_i^k \Delta x_i^k),
\end{aligned}
$$

当 $\Delta s_i^k \Delta x_i^k < 0$ 时, α_i 需满足

$$
\alpha_i \leqslant \frac{-(\Delta s_i^k x_i^k + s_i^k \Delta x_i^k) + \sqrt{\delta^k}}{-2 \Delta s_i^k \Delta x_i^k},
$$

其中

$$
\delta^k = \left(\Delta s_i^k x_i^k + s_i^k \Delta x_i^k\right)^2 - 4 \left(\Delta s_i^k \Delta x_i^k\right) \left(s_i^k x_i^k - \gamma \mu^k\right).
$$

当 $\Delta s_i^k \Delta x_i^k > 0$ 且 $\Delta s_i^k x_i^k + s_i^k \Delta x_i^k > 0$ 或 $\delta^k < 0$ 时，α_i 自动满足条件.

当 $\Delta s_i^k \Delta x_i^k > 0$，$\Delta s_i^k x_i^k + s_i^k \Delta x_i^k < 0$ 且 $\delta^k > 0$ 时，α_i 需满足

$$\alpha_i \geqslant \frac{-\left(\Delta s_i^k x_i^k + s_i^k \Delta x_i^k\right) + \sqrt{\delta^k}}{-2\Delta s_i^k \Delta x_i^k},$$

$$\alpha_i \leqslant \frac{-\left(\Delta s_i^k x_i^k + s_i^k \Delta x_i^k\right) - \sqrt{\delta^k}}{-2\Delta s_i^k \Delta x_i^k}.$$

综上，令

$$\mathcal{C}_1 = \{i | \Delta s_i^k \Delta x_i^k < 0, i = 1, 2, ...n\},$$
$$\mathcal{C}_2 = \{i | \Delta s_i^k \Delta x_i^k > 0, \Delta s_i^k x_i^k + s_i^k \Delta x_i^k < 0, \delta^k > 0, i = 1, 2, ...n\},$$

则

$$\alpha = \max\left\{\left(\bigcap_{i=1}^{n} \alpha_i\right) \cap \left(\bigcap_{j=1}^{n} \alpha_j\right), i \in \mathcal{C}_1, j \in \mathcal{C}_2\right\}. \qquad \square$$

7.14 考虑部分变量为自由变量（即无非负约束）的线性规划问题：

$$\begin{aligned} \min_{x,y} \quad & c^{\mathrm{T}} x + d^{\mathrm{T}} y, \\ \text{s.t.} \quad & A_1 x + A_2 y = b, \\ & x \geqslant 0, \end{aligned}$$

在这里注意变量 y 没有非负约束. 试推导求解此问题的原始 − 对偶算法，给出类似于 (7.3.5) 式的方程组并给出其解的显式表达式.

解 (邓展望). 写出关于原问题的拉格朗日函数：

$$L(x, y, \lambda, s) = c^{\mathrm{T}} x + d^{\mathrm{T}} y - \lambda^{\mathrm{T}}(A_1 x + A_2 y - b) - s^{\mathrm{T}} x.$$

由一阶最优性条件有：

$$A_1^{\mathrm{T}} \lambda + s = c, \tag{7.11a}$$
$$A_2^{\mathrm{T}} = d, \tag{7.11b}$$
$$A_1 x + A_2 y = b, \tag{7.11c}$$
$$x_i s_i = 0, \quad i = 1, ..., n, \tag{7.11d}$$
$$(x, s) \geqslant 0, \tag{7.11e}$$

也即

$$
F\left(x,y,\lambda,s\right)=\begin{bmatrix} A_1^{\mathrm{T}}\lambda+s-c \\ A_2^{\mathrm{T}}\lambda-d \\ A_1x+A_2y-b \\ L_xL_s\mathbf{1} \end{bmatrix}=0, \qquad (x,s)\geqslant 0. \tag{7.12}
$$

与标准线性规划情况类似，该问题的中心路径方程定义为 (7.11)，其中 (7.11d) 替换为 $x_is_i=\tau$，$i=1,2,\cdots,n$.
则该问题关于 $\tau=\sigma\mu$ 的牛顿方程为

$$
\begin{bmatrix} 0 & 0 & A_1^{\mathrm{T}} & I \\ 0 & 0 & A_2^{\mathrm{T}} & 0 \\ A_1 & A_2 & 0 & 0 \\ L_s & 0 & 0 & L_x \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta\lambda \\ \Delta s \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -r_c \\ -r_d \\ -r_b \\ -L_xL_s\mathbf{1}+\sigma\mu\mathbf{1} \end{bmatrix}. \tag{7.13}
$$

其中 $r_b=A_1x+A_2y-b, r_c=A_1^{\mathrm{T}}\lambda+s-c, r_d=A_2^{\mathrm{T}}-d$.
消去 Δs 可得

$$
\begin{bmatrix} 0 & 0 & A_2^{\mathrm{T}} \\ A_1 & A_2 & 0 \\ -D^{-2} & 0 & A_1^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta\lambda \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -r_d \\ -r_b \\ -r_c+s-\sigma\mu X^{-1}e \end{bmatrix},
$$

其中 $D=L_s^{-\frac{1}{2}}L_x^{\frac{1}{2}}$.
再消去 Δx 得

$$
\begin{aligned}
-D^{-2}\Delta x+A_1^{\mathrm{T}}\Delta\lambda &= -r_c+s-\sigma\mu X^{-1}\mathbf{1}, \\
\Delta x &= -D^2(r_c+s-\sigma\mu X^{-1}\mathbf{1}-A_1^{\mathrm{T}}\Delta\lambda).
\end{aligned}
$$

最终得到

$$
\begin{aligned}
\begin{bmatrix} 0 & A_2^{\mathrm{T}} \\ A_2 & A_1D^2A_1^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \Delta y \\ \Delta\lambda \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} -r_d \\ -r_b+A_1D^2\left(-r_c+s-\sigma\mu X^{-1}\mathbf{1}\right) \end{bmatrix}, \\
\Delta x &= -D^2\left(-r_c+s-\sigma\mu X^{-1}1-A_1^{\mathrm{T}}\Delta\lambda\right), \\
\Delta s &= -s+\sigma\mu X^{-1}1-D^{-2}\Delta x.
\end{aligned}
$$

□

第八章　复合优化算法

8.1 证明例 8.1 中的 (3)(4) 的邻近算子的形式.

解 (丁思哲).

(3) 的邻近算子形式

$u = \text{prox}_{th}(x)$ 的最优性条件为

$$x - u \in \partial h(u) = \{tAu + tb\},$$

故 $u = (I + tA)^{-1}(x - tb)$(注意 A 对称正定).

(4) 的邻近算子形式

$u = \text{prox}_{th}(x)$ 的最优性条件为，对 $\forall x_i$，满足

$$x_i - u_i \in \partial h(u)_i = \left\{-\frac{t}{u_i}\right\}, \quad u_i > 0, x_i > 0.$$

故解得 $u_i = \dfrac{x_i + \sqrt{x_i^2 + 4t}}{2}$. $\square$

8.2 证明例 8.2 中的运算法则成立.

解 (丁思哲).

(1) 设 $u = \text{prox}_h(x)$，则由最优性条件，

$$\begin{aligned} u = \text{prox}_h(x) &\Leftrightarrow x - u \in \partial h(u) \\ &\Leftrightarrow x - u \in \partial g(\lambda u + a). \quad (\lambda > 0) \end{aligned}$$

设 $\alpha = \lambda u + a$，根据次梯度线性映射计算法则，有

$$u = \text{prox}_h(x) \Leftrightarrow x - \frac{\alpha}{\lambda} + \frac{a}{\lambda} \in \lambda \partial g(\alpha) = \partial \lambda g(\alpha),$$

故

$$
\begin{aligned}
u = \operatorname{prox}_h(x) &\Leftrightarrow \lambda x + a - \alpha \in \partial \lambda^2 g(\alpha) \\
&\Leftrightarrow \alpha = \operatorname{prox}_{\lambda^2 g}(\lambda x + a).
\end{aligned}
$$

再代入 $\alpha = \lambda u + a$，得到

$$
u = \frac{1}{\lambda}(\operatorname{prox}_{\lambda^2 g}(\lambda x + a) - a) = \operatorname{prox}_h(x).
$$

(2) 与 (1) 几乎一致的做法，注意

$$
x - u \in \partial h(u) \Leftrightarrow x - u \in \partial \lambda g\left(\frac{u}{\lambda}\right),
$$

设 $\alpha = \dfrac{u}{\lambda}$，则可导出

$$
u = \lambda \operatorname{prox}_{\lambda^{-1} g}(\lambda^{-1} x) = \operatorname{prox}_h(x).
$$

(3) 与 (1) 几乎一致的做法，注意

$$
x - u \in \partial h(u) \Leftrightarrow \partial g(u) + a,
$$

则 $u = \operatorname{prox}_g(x - a)$.

(4) 设 β 为邻近算子，有

$$
\begin{aligned}
\beta = \operatorname{prox}_h(x) &\Leftrightarrow x - \beta \in \partial h(\beta) \\
&\Leftrightarrow x - \beta \in \partial g(\beta) + u(\beta - a) \\
&\Leftrightarrow \frac{x + ua}{u + 1} - \beta \in \partial \frac{1}{u + 1} g(\beta) \\
&\Leftrightarrow \beta = \operatorname{prox}_{\theta g}(\theta x + (1 - \theta) a),
\end{aligned}
$$

其中 θ 如定理所定义.

(5) 取邻近算子 $\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \operatorname{prox}_h\left(\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right)$，则

$$
\begin{aligned}
&\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \in \partial h\left(\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}\right) \\
\Leftrightarrow \quad &\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \in \partial \varphi_1(u) + \partial \varphi_2(v),
\end{aligned}
$$

由此可得 $u = \operatorname{prox}_{\varphi_1}(x), v = \operatorname{prox}_{\varphi_2}(y)$，那么

$$
\operatorname{prox}_h\left(\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \operatorname{prox}_{\varphi_1}(x) \\ \operatorname{prox}_{\varphi_2}(y) \end{bmatrix}.
$$

□

8.3 求下列函数的邻近算子：

(a) $f(x)=I_C(x)$，其中 $C=\{(x,t)\in\mathbb{R}^{n+1}|\|x\|_2\leqslant t\}$；

(b) $f(x)=\inf\limits_{y\in C}\|x-y\|$，其中 C 是闭凸集；

(c) $f(x)=\dfrac{1}{2}(\inf\limits_{y\in C}\|x-y\|)^2$，其中 C 是闭凸集.

解 (丁思哲).

(a) 由定义，临近算子

$$
\begin{aligned}
u&=\arg\min_{u}\left\{I_C(u)+\frac{1}{2}\|u-x\|^2\right\}\\
&=\arg\min_{\|u\|_2\leqslant t}\{\|u-x\|^2\}\\
&=\mathcal{P}_{\|x\|_2\leqslant t}(x).
\end{aligned}
$$

(b) $f(x)=\inf\limits_{y\in C}\|x-y\|$. 我们先求 f 在 $\hat{x}$ 处的次梯度.

若 $f(\hat{x})=0$，则 $g=0$；若 $f(\hat{x})>0$，取 $\hat{y}$ 为 $\hat{x}$ 在 C 上的投影，即 $\hat{y}=\mathcal{P}_C(\hat{x})$，则次梯度为

$$
g\in\partial\|\hat{x}-\mathcal{P}_C(\hat{x})\|\subseteq\partial f(\hat{x}).
$$

特别，若 $\|\cdot\|\triangleq\|\cdot\|_2$，则 $\hat{x}\neq\mathcal{P}_C(\hat{x})$ 时，

$$
g=\frac{\hat{x}-\mathcal{P}_C(\hat{x})}{\|\hat{x}-\mathcal{P}_C(\hat{x})\|_2}\in\partial f(\hat{x}),
$$

故设 $u=\operatorname{prox}_f(x)$，则 $x-u\in\partial f(u)$，结合上式可知

$$
x-u\in\begin{cases}\partial\|u-\mathcal{P}_C(u)\|, & f(u)>0,\\ \{0\}, & f(u)=0.\end{cases}
$$

因此当 $x=y$ 时, $u=x$; 当 $x\neq y$ 时, u 满足 $x-u\in\|u-\mathcal{P}_C(u)\|$. 特别，若 $\|\cdot\|\,iangleq\,\|\cdot\|_2$，则 $x\neq y$ 时，$x-u=\dfrac{u-\mathcal{P}_C(u)}{\|u-\mathcal{P}_C(u)\|}$，进而从中解出 u 即可.

(c) $f(x)=\dfrac{1}{2}\inf\limits_{y\in C}\|x-y\|^2$，求 f 在 $\hat{x}$ 处的次梯度.

若 $f(\hat{x})=0$，则 $g=0$；否则，取 $\hat{y}=\mathcal{P}_C(\hat{x})$，则

$$
g\in\partial\left(\frac{1}{2}\|\hat{x}-\mathcal{P}_C(\hat{x})\|^2\right).
$$

特别地，若 $\|\cdot\| \triangleq \|\cdot\|_2$，则 $y = \hat{x} - \mathcal{P}_C(\hat{x})$. 设 $u = \mathrm{prox}_f(x)$，则由极小化原理可知

$$x - u \in \partial\left(\frac{1}{2}\|u - \mathcal{P}_C(u)\|^2\right).$$

特别地，若 $\|\cdot\| \triangleq \|\cdot\|_2$，则 u 进一步满足 $2u - \mathcal{P}_C(u) = x$. □

8.4 对矩阵函数我们也可类似地定义邻近算子，只需将向量版本中的 ℓ_2 范数替换为 F 范数，即

$$\mathrm{prox}_f(X) = \mathop{\arg\min}_{U \in \mathbf{dom}\, f} f(U) + \frac{1}{2}\|U - X\|_F^2.$$

试求出如下函数的邻近算子表达式：

(a) $f(U) = \|U\|_1$，其中 $\mathbf{dom}\, f = \mathbb{R}^{m\times n}$；

(b) $f(U) = -\ln\det(U)$，其中 $\mathbf{dom}\, f = \{U \mid U \succ 0\}$，这里邻近算子的自变量 X 为对称矩阵（不一定正定）；

(c) $f(U) = I_C(U)$，其中 $C = \{U \in \mathcal{S}^n \mid U \succeq 0\}$；

(d) $f(U) = \|U\|_*$，其中 $\mathbf{dom}\, f = \mathbb{R}^{m\times n}$.

解（丁思哲）. 首先说明当变量为矩阵时，成立类似定理 8.2 的最优性条件. 设 $U \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 且 $U = \mathrm{prox}_f(X)$，则

$$U = \mathop{\arg\min}_{U \in \mathbf{dom}\, f}\{f(U) + \frac{1}{2}\|U - X\|_F^2\}.$$

由最优性条件，$0 \in \partial f(U) + U - X$，故 $X - U \in \partial f(U)$.
反之，由于 $X - U \in \partial f(U)$，故由对 f 在 U 处次梯度的定义，对 $\forall B \in \mathbb{R}^{m\times n}$，

$$f(B) \geqslant f(U) + \mathrm{Tr}((X - U)^{\mathrm{T}}(B - U)),$$

上式两边同时加上 $\|B - X\|_F^2/2$，并取

$$B = \mathop{\arg\min}_{B}\{\mathrm{Tr}((X - U)^{\mathrm{T}}(B - U)) + \frac{1}{2}\|B - X\|_F^2\},$$

解得 $B = U$. 因此，成立

$$f(B) + \frac{1}{2}\|B - X\|_F^2 \geqslant f(U) + \frac{1}{2}\|U - X\|_F^2, \quad \forall B \in \mathbb{R}^{m\times n}.$$

根据定义，$U = \mathrm{prox}_f(X)$．因此成立最优性条件：

$$U = \mathrm{prox}_f(X) \Leftrightarrow X - U \in \partial f(U).$$

接下来我们对各具体情形分析.

(a) 用以上最优性条件作解．此时 $f(U) = \|U\|_1$，则成立

$$X - U \in \partial \|U\|_1 .$$

根据次梯度的定义，可以推知

$$\partial \|U\|_1 = \{G \in \mathbb{R}^{m\times n} : \|G\|_\infty \leqslant 1, \langle U, G\rangle_F = \|U\|_1\},$$

由此可得 G 的一个解为 $G = \mathrm{sign}(U)$．因此，U 的一个解可由下式定义：

$$X - U = \mathrm{sign}(U),$$

它实际上也是邻近算子所满足的等式.
另外，若 $\|U\|_1 \triangleq \sum_{i,j} |U_{ij}|$，则类似向量的情形，即可解得邻近算子矩阵满足

$$\mathrm{prox}_f(U) = \begin{cases} U_{ij} - 1, & U_{ij} > 1, \\ U_{ij} + 1, & U_{ij} < -1, \\ 0, & \text{其它}. \end{cases}$$

(b) 从本题开始，我们使用一类奇异值分解的方法.
定理　对于绝对对称函数 g，若 U 成立奇异值分解

$$U = A\mathrm{Diag}(\sigma(U))B^{\mathrm{T}},$$

其中 A, B 正交，则

$$\partial(g \circ \sigma)(U) = \{A\mathrm{Diag}(\alpha)B^{\mathrm{T}} \mid \alpha \in \partial g(\sigma(U))\},$$

进而

$$\mathrm{prox}_{g\circ\sigma}(U) = A\mathrm{Diag}\left(\mathrm{prox}_g(\sigma(U))\right) B^{\mathrm{T}}.$$

具体的证明不再赘述，读者可参考本题给出的参考文献[1].

对 U 的奇异值分解，由于 $f(U)=-\ln(\det(U))$，参考以上定理，即

$$g(\sigma(U))=-\sum_{i=1}^{n}\ln(\sigma(U)_i),$$

因此

$$\operatorname{prox}_g(\sigma(U))_i=\frac{\sigma(U)_i+\sqrt{\sigma(U)_i^2+4}}{2}.$$

(参考 $\operatorname{prox}_f(x)$ 的求法)，故由上式即可表示具体的邻近算子形式为

$$\operatorname{prox}_f(U)=A\mathrm{Diag}(\operatorname{prox}_g(\sigma(U)))B^{\mathrm{T}}.$$

(c) 对于核范数，仍采用奇异值分解的做法，此时

$$g(\sigma(U))=\|\sigma(U)\|_1.$$

因此

$$\operatorname{prox}_g(\sigma(U))_i=\begin{cases}\sigma(U)_i-1, & \sigma(U)_i>1,\\ \sigma(U)_i+1, & \sigma(U)_i<-1,\\ 0, & \text{其它}.\end{cases}$$

并由上式可具体给出邻近算子的形式

$$\operatorname{prox}_f(U)=A\mathrm{Diag}(\operatorname{prox}_g(\sigma(U)))B^{\mathrm{T}}.$$

(d) $f(U)=I_C(U)$，根据定义，

$$\begin{aligned}\operatorname{prox}_f(U)&=\arg\min_U\{f(U)+\frac{1}{2}\|U-X\|_F^2\}\\&=\arg\min_U\{I_C(U)+\frac{1}{2}\|U-X\|_F^2\}\\&=\arg\min_{U\in C}\|U-X\|_F^2\\&=\mathcal{P}_C(U).\end{aligned}$$

其中，注意投影是以 $\|\cdot\|_F$ 为距离而考虑的. □

8.5 对一般复合优化问题的加速算法（算法 8.9），试证明：

[1] http://lcsl.mit.edu/data/silviavilla/Teaching_files/20141008_mit.pdf

(a) 当 $t_k = \gamma_k\lambda_k$ 且 $h(x) = 0$ 时，算法 8.9 等价于第二类 Nesterov 加速算法；

(b) 当 $t_k = \lambda_k$ 时，算法 8.9 等价于近似点梯度法.

解 (丁思哲).

(a) 在算法 8.9 中，更新 z^k, y^k, x^k 的方式为

$$z^k = \gamma_k y^{k-1} + (1-\gamma_k)x^{k-1}, \tag{8.1}$$

$$y^k = \mathrm{prox}_{\lambda_k h}(y^{k-1} - \lambda_k \nabla f(z^k)), \tag{8.2}$$

$$x^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(z^k - t_k \nabla f(z^k)). \tag{8.3}$$

取 $t_k = \gamma_k\lambda_k$，则 (8.2) 式化为

$$y^k = \mathrm{prox}_{\frac{t_k}{\gamma_k}h}(y^{k-1} - \frac{t_k}{\gamma_k}\nabla f(z^k)).$$

最后证明 $x^k = (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^k$ 即可. 注意(8.1)式有

$$(1-\gamma_k)x^{k-1} = z^k - \gamma_k y^{k-1},$$

故即证

$$x^k = z^k + \gamma_k(y^k - y^{k-1}). \tag{8.4}$$

由定义，

$$x^k = \arg\min_u \left\{ t_k h(u) + \frac{1}{2}\left\| u - z^k + t_k \nabla f(z^k) \right\|^2 \right\},$$

取 $\alpha = (u - z^k)/\gamma_k + y^{k-1}$，代入上式，即产生问题

$$\min_\alpha \left\{ \lambda_k h(\alpha) + \frac{1}{2}\left\| \alpha - y^{k-1} + \lambda_k \nabla f(z^k) \right\|^2 \right\},$$

这恰好对应 (8.2) 式，我们知道极小点为 $\alpha = y^k$. 因此，对 $\alpha = (u-z^k)/\gamma_k + y^{k-1}$，分别优化上述 2 个问题，代入 $\alpha = y^k$，$u = x^k$，得到 (8.4)式，证毕.

(b) $\lambda_k = t_k$ 时，算法 8.9 为

$$z^k = \gamma_k y^{k-1} + (1-\gamma_k)x^{k-1}, \tag{8.5}$$

$$y^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(y^{k-1} - t_k \nabla f(z^k)), \tag{8.6}$$

$$x^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(z^k - t_k \nabla f(z^k)). \tag{8.7}$$

若证明其与近似点梯度法等价，只需要证明 $y^k = x^k$.
由 (8.7) 得

$$x^k = \arg\min_u \left\{ t_k h(u) + \frac{1}{2} \left\| u - z^k + t_k \nabla f(z^k) \right\|^2 \right\},$$

令 $\alpha = u + (1-\gamma_k)x^{k-1} - (1-\gamma_k)y^{k-1}$，代入上式，即产生问题

$$\min_\alpha \{ t_k h(\alpha) + \frac{1}{2} \left\| \alpha - y^{k-1} + t_k \nabla f(z^k) \right\|^2 \},$$

这恰好对应 (8.6) 式，我们知道极小点为 $\alpha = y^k$. 因此，对 $\alpha = (u-z^k)/\gamma_k + y^{k-1}$，分别优化上述 2 个问题，代入 $\alpha = y^k$，$u = x^k$，得到 $x^k = y^k$，证毕. □

8.6 假设 f 是闭凸函数，证明 Moreau 分解的成立，即

$$x = \operatorname{prox}_f(x) + \operatorname{prox}_{f^*}(x) \quad \forall x.$$

解 (邓展望). 令 $u = \operatorname{prox}_f(x)$，则有 $x - u \in \partial f(u)$. 再根据引理 8.5 的证明过程可知 $u \in \partial f^*(x-u)$，所以 $x - u = \operatorname{prox}_{f^*}(x)$. 因此

$$\operatorname{prox}_f(x) + \operatorname{prox}_{f^*}(x) = u + (x-u) = x.$$ □

8.7 假设 f 是闭凸函数，证明 Moreau 分解的推广成立，即对任意的 $\lambda > 0$ 有

$$x = \operatorname{prox}_{\lambda f}(x) + \lambda \operatorname{prox}_{\lambda^{-1} f^*}\left(\frac{x}{\lambda}\right) \quad \forall x.$$

提示：利用 Moreau 分解的结论.

解 (邓展望). 由 Moreau 分解的结论可知

$$\operatorname{prox}_{\lambda f}(x) = x - \operatorname{prox}_{(\lambda f)^*}(x) = x - \operatorname{prox}_{\lambda f^*(\cdot/\lambda)}(x),$$

再根据 prox 算子的性质可知若 $f(x) = \lambda g(x/\lambda)$，则有

$$\operatorname{prox}_f(x) = \lambda \operatorname{prox}_{g/\lambda}(x/\lambda).$$

再代入 f^* 得

$$x = \operatorname{prox}_{\lambda f}(x) + \lambda \operatorname{prox}_{\lambda^{-1} f^*}\left(\frac{x}{\lambda}\right), \quad \forall x.$$ □

8.8 根据不等式 (8.5.23) 推导不等式 (8.5.24).

解 (丁思哲). 将 (8.5.23) 中的两式相加，并注意到

$$2(x-x^{k+1})^{\mathrm{T}}(x^k-x^{k+1}) = \left\|x^k-x^{k+1}\right\|^2 + \left\|x-x^{k+1}\right\|^2 + \left\|x-x^k\right\|^2$$

(对 z 的情况同理)，联立即可得 (8.5.24) 式. □

8.9 写出关于 LASSO 问题的鞍点问题形式，并写出原始 – 对偶混合梯度算法和 Chambolle-Pock 算法.

解 (丁思哲). LASSO 问题的形式为

$$\min_x \quad \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2 + \mu\|x\|_1,$$

记 $f(x)=\mu\|x\|_1$，$h(x)=\|x-b\|_2^2/2$，则 $f(x)$ 与 $h(x)$ 都是适当的闭凸函数，且 $h(x)$ 具有自共轭性.

鞍点形式 (a) 及其算法

设 $h(x)$ 的共轭函数为 $h^*(z)$，则鞍点问题的形式为

$$\min_x \max_z \{f(x) - h^*(z) + z^{\mathrm{T}}Ax\}.$$

其中 $h^*(z) = \sup\limits_{y\in\mathbf{dom}\, h}\{z^{\mathrm{T}}y - \|y-b\|_2^2/2\}$.

由最优性条件，对 $h^*(z)$ 取 $y=z+b$，得 $h^*(z)=\|z\|_2^2/2+z^{\mathrm{T}}b$，故鞍点问题的形式具体为

$$\min_x \max_z \left\{\mu\|x\|_1 + z^{\mathrm{T}}Ax - \frac{1}{2}\|z\|_2^2 - b^{\mathrm{T}}z\right\}. \tag{8.8}$$

对于鞍点问题，可设计 PDHG 算法. 具体而言，在第 $k+1$ 步的更新中，先固定 x^k，对 z^k 做梯度上升；再固定 z^k，对 x^k 做梯度下降. 因此，迭代格式为

$$\begin{aligned}
z^{k+1} &= \arg\max_z \left\{-h^*(z) + (z-z^k)^{\mathrm{T}}Ax^k - \frac{1}{2\delta_k}\left\|z-z^k\right\|_2^2\right\} \\
&= \mathrm{prox}_{\delta_k h^*}(z^k + \delta_k Ax^k) \\
&= \frac{\delta_k(Ax^k-b)+z^k}{\delta_k+1}.
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
x^{k+1} &= \arg\min_x \left\{ f(x) + (x-x^k)^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} z^{k+1} + \frac{1}{2\alpha_k} \left\| x - x^k \right\|_2^2 \right\} \\
&= \mathrm{prox}_{\alpha_k f}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}} z^{k+1}) \\
&= \mathrm{prox}_{\alpha_k \mu \|\cdot\|_1}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}} z^{k+1}).
\end{aligned}
$$

上述迭代格式对应的 Chambolle-Pock 算法为

$$
\begin{aligned}
z^{k+1} &= \frac{\delta_k(Ay^k - b) + z^k}{\delta_k + 1}, \\
x^{k+1} &= \mathrm{prox}_{\alpha_k \mu \|\cdot\|_1}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}} z^{k+1}), \\
y^{k+1} &= 2x^{k+1} - x^k.
\end{aligned}
$$

鞍点形式 (b) 及其算法

再以格式 (8.5.11) 写鞍点形式．LASSO 问题等价于

$$
\begin{aligned}
\min_{x,z} \quad & \mu \|x\|_1 + \frac{1}{2} \|z - b\|_2^2, \\
\text{s.t.} \quad & Ax - z = 0,
\end{aligned}
$$

并不妨设 $f(x) = \mu \|x\|_1$，且 $h(z) = \|z-b\|_2^2/2$.

直接用带约束问题的拉格朗日函数定义鞍点问题，即

$$
\begin{aligned}
& \min_{x,z} \max_{\lambda} \quad L(x,z;\lambda) \\
=& \min_{x,z} \max_{\lambda} \left\{ \mu \|x\|_1 + \frac{1}{2} \|z-b\|_2^2 + \lambda^{\mathrm{T}}(Ax - z) \right\}.
\end{aligned}
$$

这种鞍点问题也对应一类 PDHG 算法．具体而言，在第 $k+1$ 步迭代，先固定 (x^k, z^k)，更新 λ^k；再固定 λ^{k+1}，联合更新 (x^k, z^k)．其格式为

$$
\begin{aligned}
\lambda^{k+1} &= \arg\max_{\lambda} \left\{ (Ax^k - z^k)^{\mathrm{T}}(\lambda - \lambda^k) - \frac{1}{2\delta_k} \left\| \lambda - \lambda^k \right\|_2^2 \right\} \\
&= \lambda^k + \delta_k (Ax^k - z^k),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
(x^{k+1}, z^{k+1}) &= \arg\min_{x,z} \Big\{ f(x) + h(z) + (\lambda^{k+1})^{\mathrm{T}}(A(x - x^k) - (z - z^k)) \\
&\qquad + \frac{1}{2\alpha_k} \left\| x - x^k \right\|_2^2 + \frac{1}{2\beta_k} \left\| z - z^k \right\|_2^2 \Big\} \\
&= \left(\mathrm{prox}_{\alpha_k f}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}} \lambda^{k+1}), \mathrm{prox}_{\beta_k h}(z^k + \beta_k \lambda^{k+1}) \right) \\
&= \left(\mathrm{prox}_{\alpha_k f}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}} \lambda^{k+1}), \frac{z^k + \beta_k(b + \lambda^{k+1})}{\beta_k + 1} \right).
\end{aligned}
$$

上述迭代格式对应的 Chambolle-Pock 算法为

$$\begin{aligned}
\lambda^{k+1} &= \lambda^k + \delta_k(Ap^k - q^k), \\
x^{k+1} &= \mathrm{prox}_{\alpha_k f}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}}\lambda^{k+1}), \\
z^{k+1} &= \frac{z^k + \beta_k(b + \lambda^{k+1})}{\beta_k + 1}, \\
p^{k+1} &= 2x^{k+1} - x^k, \\
q^{k+1} &= 2z^{k+1} - z^k.
\end{aligned}$$

最后课本中还列举了一类鞍点格式 (8.5.12)，如上做法，故不再赘述.

□

8.10 设函数 $f(x_1, x_2) = |x_1 - x_2| - \min\{x_1, x_2\}$，其定义域为 $[0,1] \times [0,1]$. 试推导基于格式 (8.4.3) 的分块坐标下降法（x_1 和 x_2 分别看做一个变量块），此算法是否收敛?

解 (丁思哲). 由于 $\min\{x_1, x_2\} = (x_1 + x_2 - |x_1 - x_2|)/2$，故函数可进一步写成

$$f(x_1, x_2) = \frac{3}{2}|x_1 - x_2| - \frac{1}{2}(x_1 + x_2).$$

将 x_1, x_2 视为 2 个变量块，进行分块下降.

当固定 x_1 时，解得

$$x_1 = \arg\min_{x_2} \quad f(x_1, x_2),$$

同理可得当固定 x_2 时，解得

$$x_2 = \arg\min_{x_1} \quad f(x_1, x_2),$$

因此基于格式 (8.4.3) 的分块下降法为

$$\begin{cases} x_2^{k+1} = x_1^k, \\ x_1^{k+1} = x_2^{k+1}. \end{cases}$$

由上述格式立即可得算法收敛，因为 $x_1^{k+1} = x_1^k$，而

$$x_2^{k+2} = x_1^{k+1} = x_1^k = x_2^{k+1}.$$

但明显该算法在本例不具有全局优化的能力. □

8.11 试对分组 LASSO 问题（即例 8.7）推导出基于格式 (8.4.4) 的分块坐标下降法.

解 (邓展望). 首先写出该问题的形式：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2+\mu_1\sum_{\ell=1}^{G}\sqrt{n_\ell}\|x_{\mathcal{I}_\ell}\|_2, \tag{8.9}$$

所以可知第 i 块变量即为 x 的第 i 组分量. 为了方便起见，记 $A=(A_1,...,A_G), x^{\mathrm{T}}=(x_1,...,x_G)$ 则每次迭代目标函数可化简为

$$\begin{aligned}
&\arg\min_{x_i}\left\{\frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2+\mu_1\sum_{\ell=1}^{G}\sqrt{n_\ell}\|x_{\mathcal{I}_\ell}\|_2\right\}\\
&=\arg\min_{x_i}\left\{\frac{1}{2}\|A_ix_i\|_2^2+\Big(\sum_{k\neq i}x_k^{\mathrm{T}}A_k^{\mathrm{T}}-b^{\mathrm{T}}\Big)A_ix_i+\mu_i\sqrt{n_i}\|x_i\|_2\right\}\\
&=\arg\min_{x_i}\left\{\frac{1}{2}x_i^{\mathrm{T}}M_ix_i+p_i^{\mathrm{T}}x_i+\lambda\|x_i\|\right\},
\end{aligned}$$

其中 $M_k=A_k^{\mathrm{T}}A_k, p_k^{\mathrm{T}}=(\sum\limits_{k\neq i}x_k^{\mathrm{T}}A_k^{\mathrm{T}}-b^{\mathrm{T}})A_i, \lambda=\mu_i\sqrt{n_i}$. 由最优性条件可得当 $x_i\neq 0$ 时方程

$$M_ix_i+p_i=\frac{x_i}{\|x_i\|}$$

成立. 若 $\|p_i\|\leqslant\lambda$，则有 $p_i^{\mathrm{T}}x_i+\lambda\|x_i\|\geqslant 0$，此时 $x_i=0$. 而若 $x_i=0$，则有 $p_i+\lambda g_0=0$，其中 g_0 为 $\|x\|$ 在 $x=0$ 处的次梯度；又由于 $\|g_0\|\leqslant 1$，故有 $\|p_i\|\leqslant\lambda$. 所以 $x_i=0$ 为最优解的充分必要条件为 $\|p_i\|\leqslant\lambda$. 综上, 若 $\|p_i\|\leqslant\lambda$ 则 $x_i=0$, 否则 $x_i=(M_i+\dfrac{\lambda}{\|x_i\|})^{-1}p_i$. □

注：方程

$$M_ix_i+p_i=\frac{x_i}{\|x_i\|}$$

的求解可用信赖域方法，具体可见：

Q,Z.,Scheinberg, K. & Goldfarb,D. Efficient block-coordinate descent algorithms for the Group Lasso.Math.Prog. Comp.5,143-169(2013).

8.12 考虑最大割问题的非凸松弛

$$\begin{aligned}
\min\quad & \left\langle C, V^{\mathrm{T}}V\right\rangle,\\
\text{s.t.}\quad & \|v_i\|=1,\ i=1,2,\cdots,n,\\
& V=[v_1,v_2,\cdots,v_n]\in\mathbb{R}^{p\times n}.
\end{aligned}$$

仿照算法 8.12 的构造过程，推导出使用格式 (8.4.4) 的分块坐标下降法.

解 (丁思哲). 仿照算法 8.12 的构造，使用格式 (8.4.4)，对于本例，更新格式为

$$v_i^{k+1} = \arg\min \|v_i\| = 1 \left\{ \left(\sum_{j \neq i} C_{ji} v_j^{\mathrm{T}} \right) v_i + \frac{L_i^k}{2} \left\| v_i - v_i^k \right\|^2 \right\}.$$

若 $\sum\limits_{j \neq i} C_{ji} v_j \neq L_i^k v_i^k$，通过消去其中的二次项，得到更新

$$v_i^{k+1} = \frac{L_i^k v_i^k - \sum_{j \neq i} C_{ji} v_j}{\left\| L_i^k v_i^k - \sum_{j \neq i} C_{ji} v_j \right\|}.$$

因此迭代算法如下所示. □

算法 8.1 最大割问题的分块坐标下降法 *

1. 初始化 v_i^0，且使得 $\left\|v_i^0\right\| = 1$；设置 $\{L_i^k\}_{k=0}$.
2. **while** 未达到收敛要求 **do**
3.   **for** $i = 1, 2, \cdots, n$ **do**
4.   计算 $b_i^k = L_i^k v_i^k - \sum\limits_{j \neq i} C_{ji} v_j, \quad (b_i^k \neq 0)$.
5.   更新 $v_i^{k+1} = \dfrac{b_i^k}{\|b_i^k\|}$.
6. $k \to k+1$.
7.   **end for**
8. **end while**

8.13 考虑约束优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & \max\{e^{-x} + y, y^2\}, \\ \text{s.t.} \quad & y \geqslant 2, \end{aligned}$$

其中 $x, y \in \mathbb{R}$ 为自变量.

(a) 通过引入松弛变量 z，试说明该问题等价于

$$\begin{aligned} \min \quad & \max\{e^{-x} + y, y^2\} + I_{\mathbb{R}_+}(z), \\ \text{s.t.} \quad & y - z = 2; \end{aligned}$$

(b) 推导 (a) 中问题的对偶问题，并求出原始问题的最优解；

(c) 对 (a) 中的问题形式，使用 ADMM 求解时可能会遇到什么问题?

解 (邓展望).

(a) 引入松弛变量 z, 将原问题变为：

$$\begin{aligned} \min \quad & \max\{e^{-x}+y, y^2\}, \\ \text{s.t.} \quad & y-z=2, z \geqslant 0. \end{aligned}$$

则可知原问题等价于

$$\begin{aligned} \min \quad & \max\{e^{-x}+y, y^2\} + I_{\mathbb{R}_+}(z), \\ \text{s.t.} \quad & y-z=2. \end{aligned}$$

(b) 写出 (a) 的拉格朗日函数：

$$L(x,y,\lambda,z) = \max\{e^{-x}+y, y^2\} + I_{\mathbb{R}_+}(z) + \lambda(y-z-2).$$

又若求 $\inf\limits_{x,y,z} L(x,y,\lambda,z)$，此时应有 $\lambda \leqslant 0, x=+\infty, z=0$.
所以成立

$$\inf_{x,y,z} L(x,y,\lambda,z) = \begin{cases} -2\lambda, & \lambda \geqslant -1, \\ 1-\lambda, & \lambda \in [-2,-1] \\ -2\lambda - \dfrac{\lambda^2}{4}, & \lambda < -2. \end{cases}$$

求解该问题得 $z=0, x=\infty, y=2, \lambda=-4$.

(c) 由于在迭代过程中每一步为

$$\begin{aligned} (x^{k+1}, y_{k+1}) = \mathop{\arg\min}_{(x,y)} \{ & \max\{e^{-x}+y, y^2\} + I_{\mathbb{R}_+}(z) + \\ & \lambda(y-z-2) + \frac{\rho}{2}(y-z-2)^2\}, \end{aligned}$$

若初始条件为 $z=0, \lambda=0$，此时无法在 $\mathbb{R}^2$ 中找到最小值点 (x,y)，因此 ADMM 的子迭代不是良定义的. 必须对原问题进行某种变形. □

8.14 写出对于线性规划对偶问题运用 ADMM 的迭代格式，以及与之等价的对于原始问题的 DRS 格式，并指出 ADMM 和 DRS 算法更新变量之间的关系.

解 (陈铖). 首先考虑线性规划的对偶问题

$$
\begin{aligned}
\max \quad & b^{\mathrm{T}} y, \\
\text{s.t.} \quad & A^{\mathrm{T}} y + s = c, \\
& s \geqslant 0.
\end{aligned}
$$

通过引入乘子 λ，构造增广拉格朗日函数

$$
L_\rho(s, y, \lambda) = -b^{\mathrm{T}} y - \langle \lambda, A^{\mathrm{T}} y + s - c \rangle + \frac{\rho}{2} \|A^{\mathrm{T}} y + s - c\|^2.
$$

对于 y 子问题，

$$
\begin{aligned}
y^{k+1} &= \arg\min_y L_\rho(s^k, y, \lambda^k) \\
&= \arg\min_y \left\{ -(A\lambda^k + b)^{\mathrm{T}} y + \frac{\rho}{2} \|A^{\mathrm{T}} y + s^k - c\|^2 \right\} \\
&= \frac{1}{\rho} (AA^{\mathrm{T}})^{-1} (A\lambda^k + b + \rho A(c - s^k)).
\end{aligned}
$$

对于 s 子问题，

$$
\begin{aligned}
s^{k+1} &= \arg\min_{s \geqslant 0} L_\rho(s, y^{k+1}, \lambda^k) \\
&= \arg\min_{s \geqslant 0} \left\{ -\langle \lambda^k, s \rangle + \frac{\rho}{2} \|A^{\mathrm{T}} y^{k+1} + s - c\|^2 \right\} \\
&= \max\{c - A^{\mathrm{T}} y^{k+1} + \frac{1}{\rho} \lambda^k, 0\}.
\end{aligned}
$$

对于乘子 x，我们使用常规更新，由此得到 ADMM 的迭代格式

$$
\begin{aligned}
y^{k+1} &= \frac{1}{\rho} (AA^{\mathrm{T}})^{-1} (A\lambda^k + b + \rho A(c - s^k)), \\
s^{k+1} &= \max\{c - A^{\mathrm{T}} y^{k+1} + \frac{1}{\rho} \lambda^k, 0\}, \\
\lambda^{k+1} &= \lambda^k - \tau\rho(A^{\mathrm{T}} y^{k+1} + s^{k+1} - c).
\end{aligned}
$$

现在我们引入示性函数，将上述问题改写为可分的凸问题的形式：

$$
\begin{aligned}
\min \quad & -b^{\mathrm{T}} y + I_{\{s | s \geqslant 0\}}(s), \\
\text{s.t.} \quad & A^{\mathrm{T}} y + s = c.
\end{aligned}
$$

令 $f_1(y) = -b^{\mathrm{T}} y$，$f_2(s) = I_C(s)$，其对偶问题为无约束的复合优化问题

$$
\min_x \quad c^{\mathrm{T}} x + f_1^*(-Ax) + f_2^*(-x).
$$

由共轭函数的定义，

$$f_1^*(z) = I_{\{z|z=-b\}}(z), \quad f_2^*(z) = I_{\{z|z\leqslant 0\}}(z).$$

由此得到无约束符合复合优化问题

$$\min_x \quad c^{\mathrm{T}}x + I_{\{x|Ax=b\}}(x) + I_{\{x|x\geqslant 0\}}(x).$$

注意到这个问题等价于线性规划的原问题.令 $f(x) = c^{\mathrm{T}}x + I_{\{x|Ax=b\}}(x)$，$h(x) = I_{\{x|x\geqslant 0\}}(x)$，使用 DRS 算法，得到迭代格式

$$\begin{aligned}
u^{k+1} &= \mathrm{prox}_{tf}(x^k - w^k) \\
&= \mathcal{P}_{\{x|Ax=b\}}(x^k - w^k - tc) \\
&= x^k - w^k - tc - A^{\mathrm{T}}(AA^{\mathrm{T}})^{-1}(A(x^k - w^k - tc) - b), \\
x^{k+1} &= \mathrm{prox}_{th}(w^k + u^{k+1}) \\
&= \max\{w^k + u^{k+1}, 0\}, \\
w^{k+1} &= w^k + u^{k+1} - x^{k+1}.
\end{aligned}$$

现在我们讨论 ADMM 和 DRS 算法更新变量之间的关系. 根据定理 8.15 可知，在由 DRS 算法产生的更新中，分别存在

$$\begin{aligned}
x_1^k &\in \partial f_1^*(-Au^{k+1}), \\
x_2^k &\in \partial f_2^*(-x^{k+1}),
\end{aligned}$$

再令 $w^{k+1} = -tx_2^k$，$\lambda^k = -x^{k+1}$，则导出

$$\begin{aligned}
x_1^{k+1} &= \arg\min_{x_1} \left\{ -b^{\mathrm{T}}x_1 - (\lambda^k)^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}x_1 + \frac{t}{2}\|A^{\mathrm{T}}x_1 + x_2^k - c\|^2 \right\}, \\
x_2^{k+1} &= \arg\min_{x_2} \left\{ I_C(x_2) - (\lambda^k)^{\mathrm{T}}x_2 + \frac{t}{2}\|A^{\mathrm{T}}x_1^{k+1} + x_2 - c\|^2 \right\}, \\
\lambda^{k+1} &= \lambda^k - t(A^{\mathrm{T}}x_1^{k+1} + x_2^{k+1} - c),
\end{aligned}$$

对比可发现 ADMM 算法中的 y 对应 DRS 算法推出的 x_1，s 对应 x_2，且 DRS 是 ADMM 算法的一类特殊形式，其中 $\rho = t$ 且 $\tau = 1$. □

8.15 相关系数矩阵逼近问题的定义为

$$\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2}\|X - G\|_F^2, \\
\text{s.t.} \quad & X_{ii} = 1, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \\
& X \succeq 0.
\end{aligned}$$

其中自变量 X 取值于对称矩阵空间 $\mathcal{S}^n$，G 为给定的实对称矩阵．这个问题在金融领域中有重要的应用．由于误差等因素，根据实际观测得到的相关系数矩阵的估计 G 往往不具有相关系数矩阵的性质（如对角线为 1，正定性），我们的最终目标是找到一个和 G 最接近的相关系数矩阵 X．试给出满足如下要求的算法：

(a) 对偶近似点梯度法，并给出化简后的迭代公式；

(b) 针对原始问题的 ADMM ，并给出每个子问题的显式解.

解 (谢中林).

(a) 直接利用例 8.17 的结论，取

$$
\begin{aligned}
f(X) &= \frac{1}{2}\|X-G\|_F^2, \\
C_1 &= \{X_{ii}=1, \quad i=1,2,\cdots,n\}, \quad C_2=\{X\succeq 0\}.
\end{aligned}
$$

且 C_1, C_2 都由对称矩阵构成．于是对偶近似点梯度法为

$$
\begin{aligned}
X^{k+1} &= \arg\min_X \left\{\frac{1}{2}\|X-G\|_F^2+\left\langle \sum_{i=1}^2 Z_i^k, X\right\rangle\right\}, \\
Y_i^{k+1} &= \mathcal{P}_{C_i}\left(\frac{Z_i^k}{t}+X^{k+1}\right), \quad i=1,2, \\
Z_i^{k+1} &= Z_i^k+t\left(X^{k+1}-Y_i^{k+1}\right), \quad i=1,2.
\end{aligned}
$$

利用习题 **8.4** 的结论，化简后的形式为

$$
\begin{aligned}
X^{k+1} &= G-Z_1-Z_2, \\
Y_1^{k+1} &= \begin{cases} \left(\dfrac{Z_1^k}{t}+X^{k+1}\right)_{ij}, & i\neq j, \\ 1, & i=j, \end{cases} \\
Y_2^{k+1} &= A\mathrm{diag}(\mathrm{prox}_g(\sigma(\frac{Z_2^k}{t}+X^{k+1})))B^{\mathrm{T}}, \\
Z_1^{k+1} &= Z_1^k+t\left(X^{k+1}-Y_1^{k+1}\right), \\
Z_2^{k+1} &= Z_2^k+t\left(X^{k+1}-Y_2^{k+1}\right).
\end{aligned}
$$

其中

$$
\frac{Z_2^k}{t}+X^{k+1}=A\mathrm{diag}(\sigma(\frac{Z_2^k}{t}+X^{k+1}))B^{\mathrm{T}},
$$

且 A, B 正交.

(b) 仍采用上一小问的记号，用 $I_{C_i}(\cdot)$ 表示集合 C_i 的指示函数，原问题等价于

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2}\|X-G\|_F^2 + I_{C_1}(X) + I_{C_2}(Y), \\ \text{s.t.} \quad & X = Y. \end{aligned}$$

其增广拉格朗日函数为

$$L_\rho(X,Y,Z) = \frac{1}{2}\|X-G\|_F^2 + I_{C_1}(X) + I_{C_2}(Y) + \langle Z, X-Y\rangle + \frac{\rho}{2}\|X-Y\|_F^2.$$

继续利用习题 **8.4** 的结论，得到针对原问题的 ADMM：

$$\begin{aligned} X^{k+1} &= \begin{cases} \dfrac{1}{1+\rho}\left(\rho Y^k + G - Z^k\right)_{ij}, & i \neq j, \\ 1, & i = j, \end{cases} \\ Y^{k+1} &= A\mathrm{diag}(\mathrm{prox}_g(\sigma(\frac{Z^k}{\rho} + X^{k+1})))B^{\mathrm{T}}, \\ Z^{k+1} &= Z^k + \rho\left(X^{k+1} - Y^{k+1}\right), \quad i = 1,2. \end{aligned}$$

其中

$$\frac{Z^k}{\rho} + X^{k+1} = A\mathrm{diag}(\sigma(\frac{Z^k}{\rho} + X^{k+1}))B^{\mathrm{T}},$$

且 A, B 正交. □

8.16 鲁棒主成分分析问题是将一个已知矩阵 M 分解成一个低秩部分 L 和一个稀疏部分 S 的和，即求解如下优化问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & \|L\|_* + \lambda\|S\|_1, \\ \text{s.t.} \quad & L + S = M, \end{aligned}$$

其中 L, S 均为自变量. 写出求解鲁棒主成分分析问题的 ADMM 格式，并说明如何求解每个子问题. *提示：可以利用习题* **8.4** *的结论.*

解 (陈铖). 首先写出该问题的增广拉格朗日函数. 引入乘子 Λ 作用在约束 $L + S = M$ 上，

$$L_\rho(L,S,\Lambda) = \|L\|_* + \lambda\|S\|_1 + \langle \Lambda, L+S-M\rangle + \frac{\rho}{2}\|L+S-M\|_F^2.$$

在第 $(k+1)$ 步，交替方向乘子法分别求解关于 L 和 S 的子问题更新 L^{k+1} 和 S^{k+1}.

对于 L 子问题，

$$\begin{aligned}
L^{k+1} &= \arg\min_L L_\rho(L, S^k, \varLambda^k) \\
&= \arg\min_L \left\{ \|L\|_* + \frac{\rho}{2}\left\| L + S^k - M + \frac{1}{\rho}\varLambda^k \right\|_F^2 \right\} \\
&= \arg\min_L \left\{ \frac{1}{\rho}\|L\|_* + \frac{1}{2}\left\| L + S^k - M + \frac{1}{\rho}\varLambda^k \right\|_F^2 \right\} \\
&= U\mathrm{Diag}\left(\mathrm{prox}_{(1/\rho)\|\cdot\|_1}(\sigma(A))\right) V^{\mathrm{T}}.
\end{aligned}$$

其中 $A = M - S^k - \frac{1}{\rho}\varLambda^k$，$\sigma(A)$ 为 A 的所有非零奇异值构成的向量并且 $U\mathrm{Diag}\,(\sigma(A))\,V^{\mathrm{T}}$ 是 A 的约化奇异值分解.
对于 S 子问题，

$$\begin{aligned}
S^{k+1} &= \arg\min_S L_\rho(L^{k+1}, S^k, U^k) \\
&= \arg\min_S \left\{ \lambda\|S\|_1 + \frac{\rho}{2}\left\| S + L^{k+1} - M + \frac{1}{\rho}\varLambda^k \right\|_F^2 \right\} \\
&= \mathrm{prox}_{(\lambda/\rho)\|\cdot\|_1}(M - L^{k+1} - \frac{1}{\rho}\varLambda^k),
\end{aligned}$$

此处 $Z = \mathrm{prox}_{(\lambda/\rho)\|\cdot\|_1}(Y)$ 满足

$$Z_{ij} = \mathrm{sign}(Y_{ij})\max\{|Y_{ij}| - \frac{\lambda}{\rho}, 0\}.$$

对于乘子 $\varLambda$，有常规更新

$$\varLambda^{k+1} = \varLambda^k + \tau\rho(L^{k+1} + S^{k+1} - M).$$

因此对于 L 子问题和 S 子问题都有显式解. □

8.17 考虑 ℓ_0 范数优化问题的罚函数形式：

$$\min \quad \lambda\|x\|_0 + \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2,$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}, m < n$ 为实矩阵，$\|\cdot\|_0$ 为 ℓ_0 范数，即非零元素的个数. 试针对 ℓ_0 范数优化问题形式化推导具有两个变量块的 ADMM 格式. 在算法中每个子问题是如何求解的?

解 (陈铖). 考虑上述问题的等价形式:

$$\begin{aligned} \min \quad & \lambda\|z\|_0 + \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2, \\ \text{s.t.} \quad & x = z. \end{aligned}$$

写出该问题的增广拉格朗日函数. 引入乘子 λ 作用在约束 $x=z$ 上,

$$L_\rho(x,z,\lambda) = \|z\|_0 + \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2 + \lambda^{\mathrm{T}}(x-z) + \frac{\rho}{2}\|x-z\|^2.$$

在第 $(k+1)$ 步, 交替方向乘子法分别求解关于 x 和 z 的子问题更新 x^{k+1} 和 y^{k+1}.
对于 x 子问题,

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \arg\min_x L_\rho(x, z^k, \lambda^k) \\ &= \arg\min_x \left\{ \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2 + \frac{\rho}{2}\left\| x - z^k + \frac{1}{\rho}\lambda^k \right\|^2 \right\} \\ &= (A^{\mathrm{T}}A + \rho I)^{-1}(A^{\mathrm{T}}b + \rho z^k - \lambda^k). \end{aligned}$$

对于 z 子问题,

$$\begin{aligned} z^{k+1} &= \arg\min_z L_\rho(x^{k+1}, z, \lambda^k) \\ &= \arg\min_z \left\{ \|z\|_0 + \frac{\rho}{2}\left\| x^{k+1} - z + \frac{1}{\rho}\lambda^k \right\|^2 \right\}. \end{aligned}$$

注意到对于 z^{k+1} 的某一分量, 若其不为零, 则取值与 $x^{k+1} + \dfrac{1}{\rho}\lambda^k$ 的对应分量相等是目标函数最小. 令 $c = x^{k+1} + \dfrac{1}{\rho}\lambda^k$, 则 z^{k+1} 满足

$$z_i^{k+1} = \begin{cases} c_i, & \dfrac{\rho}{2}c_i^2 \geqslant 1, \\ 0, & \dfrac{\rho}{2}c_i^2 < 1. \end{cases}$$

对于乘子 λ, 有常规更新

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \tau\rho(x^{k+1} - z^{k+1}).$$

因此两个子问题都存在显式解. $\square$

8.18 试说明 LASSO 对偶问题中，若在问题 (8.6.27) 中对约束

$$A^{\mathrm{T}}y + z = 0$$

引入乘子 x，则 x 恰好对应 LASSO 原始问题 (8.6.26) 中的自变量.

解 (邓展望). 写出该问题的拉格朗日函数：

$$b^{\mathrm{T}}y + \frac{1}{2}\|y\|^2 + I_{\|z\|_\infty \leqslant \mu}(z) - x^{\mathrm{T}}(A^{\mathrm{T}}y + z). \tag{8.10}$$

再由

$$\begin{aligned} &\inf_{y,z} b^{\mathrm{T}}y + \frac{1}{2}\|y\|^2 + I_{\|z\|_\infty \leqslant \mu}(z) - x^{\mathrm{T}}(A^{\mathrm{T}}y + z) \\ =& \inf_{y,z} \frac{1}{2}\|y - Ax - b\|^2 - \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 + I_{\|z\|_\infty \leqslant \mu}(z) - x^{\mathrm{T}}z \\ =& -\frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 - \mu\|x\|_1, \end{aligned} \tag{8.11}$$

所以该问题的对偶问题为

$$\max \quad -\mu\|x\|_1 - \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2, \tag{8.12}$$

它与 LASSO 问题等价. 所以，拉格朗日乘子 x 对应原问题自变量 x. □

8.19 实现关于 LASSO 问题使用以下算法的程序，并比较它们的效率

(a) 近似点梯度算法；

(b) Nesterov 加速算法；

(c) 交替方向乘子法；

(d) Chambolle-Pock 算法；

(e) 分块坐标下降法；

(f) 随机近似点梯度算法.

解. 见教材代码主页，此处从略. □

8.20 设 $f(x)=\dfrac{1}{N}\sum\limits_{i=1}^{N}f_i(x)$，其中每个 $f_i(x)$ 是可微函数，且 $f(x)$ 为梯度 L-利普希茨连续的. $\{x^k\}$ 是由随机梯度下降法产生的迭代序列，s_k 为第 k 步随机抽取的下标. 证明：

$$\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)\|^2]\leqslant \mathbb{E}[\|x^k-x^*\|^2]+\alpha_k\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)-\nabla f(x^k)\|^2],$$

其中 x^* 是 $f(x)$ 的一个最小值点，α_k 为第 k 步的步长.

订正　　原问题有误，应改为证明：

$$\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)\|^2]\leqslant L^2\mathbb{E}[\|x^k-x^*\|^2]+\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)-\nabla f(x^k)\|^2].$$

解 (邓展望).

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)\|^2]=\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)-\nabla f(x^k)+\nabla f(x^k)\|^2]\\
&=\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)-\nabla f(x^k)\|^2]+\mathbb{E}[(\nabla f_{s_k}(x^k)-\nabla f(x^k))^{\mathrm{T}}(\nabla f(x^k))]\\
&\quad+\mathbb{E}[\|\nabla f(x^k)\|^2]\\
&=\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)-\nabla f(x^k)\|^2]+\mathbb{E}[(\nabla f_{s_k}(x^k)-\nabla f(x^k))^{\mathrm{T}}(\nabla f(x^k))]\\
&\quad+\mathbb{E}[\|\nabla f(x^k)-\nabla f(x^*)\|^2]\\
&\leqslant L^2\mathbb{E}[\|x^k-x^*\|^2]+\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)-\nabla f(x^k)\|^2].
\end{aligned}$$

□

8.21 在 SAGA 算法中，每一步的下降方向取为：

$$v^k=\nabla f_{s_k}(x^k)-g_{s_k}^{k-1}+\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}g_i^{k-1},$$

假设初值 $g_i^0=0, i=1,2,\cdots,N$，证明：

$$\mathbb{E}[v^k|s_1,s_2,\cdots,s_{k-1}]=\nabla f(x^k).$$

解 (邓展望).

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}[v^k|s_1, s_2, \cdots, s_{k-1}],\\
&= \mathbb{E}[\nabla f_{s_k}(x^k) - g_{s_k}^{k-1} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g_i^{k-1}|s_1, s_2, \cdots, s_{k-1}]\\
&= \mathbb{E}[\nabla f_{s_k}(x^k)] + \mathbb{E}[-g_{s_k}^{k-1} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g_i^{k-1}|s_1, s_2, \cdots, s_{k-1}] \qquad \square\\
&= \nabla f(x^k) - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g_i^{k-1} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g_i^{k-1}\\
&= \nabla f(x^k).
\end{aligned}
$$