

最优化理论

陈鸿峥

2019.03*

目录

1	简介	1
1.1	优化概述	1
1.2	分类	2
1.3	历史	2
2	凸集	3
3	凸函数	6
4	凸优化问题	11
4.1	标准型	11
4.2	线性规划	13
5	对偶理论	17

1 简介

1.1 优化概述

优化(optimization): 从一个可行解的集合中寻找出最好的元素

例 1. • 最小二乘线性拟合 (凸问题)

*Build 20190328

- 深度神经网络（非凸，见下）

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1^{(i)} &= f_1(\mathbf{x}_0^{(i)}, \mathbf{w}_1) \\ &\dots = \dots \\ \mathbf{x}_n^{(i)} &= f_n(\mathbf{x}_{n-1}^{(i)}, \mathbf{w}_n) \\ \min \sum_{i=1}^m (\mathbf{y}^{(i)} - \mathbf{x}_n^{(i)})^2 \end{aligned}$$

- 图像处理，自然图像通常都是分块光滑的，原图 Φ_0 ，有噪声的新图 Φ
全变参(TV , *Total Variation*)范数，计算图像每个像素点左侧和下侧的差异

$$\|\Phi\|_{TV} = \sum_y \sum_x \sqrt{(\Phi(x, y) - \Phi(x, y-1))^2 + (\Phi(x, y) - \Phi(x-1, y))^2}$$

可得优化目标：近似自然图像，而且跟原图不能差太远

$$\min(\|\Phi\|_{TV} + \lambda \|\Phi - \Phi_0\|_F^2)$$

- 推荐系统：*Netflix*问题
矩阵横向为用户，纵向为电影，值为评分值(1~5)，问题是把矩阵补全，这样就可以做推荐了→低秩矩阵补全
电影很多，但类型不多，关联关系有限→近似低秩¹
低秩本来需要最小化 \mathbf{z} 的非零奇异值数目 $\|\mathbf{z}\|_0$ ，但是非凸的；转化为最小化和范数² $\|\mathbf{z}\|_*$

$$\begin{aligned} \min \quad & \|\mathbf{z}\|_* := \|\mathbf{z}\|_1 \\ s.t. \quad & \mathbf{z}_{ij} = \mathbf{M}_{ij}, (i, j) \in \Omega \end{aligned}$$

1.2 分类

- 线性规划/非线性规划
- 凸规划/非凸规划（更好的分类）

目标函数凸函数，可行解集为凸集则是凸优化，一般容易求解

1.3 历史

- Newton-Raphson算法：求零点，等价于求 $\min f^2(x)$
- Gauss-Seidel算法：求解线性方程组 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ ，等价于求 $\min \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2$
- Lagrange
- Kantorovich：苏联，线性规划，诺贝尔经济学奖

¹ A 的秩等于非零奇异值 $\sqrt{\text{eig}(A^T A)}$ 数目

²矩阵所有奇异值之和

- Dantzig: 美国, 优化决策, 线性规划单纯形
- Von Neumann: 线性规划问题对偶理论
- Karmarkar: 80年代, 线性规划内点法
- Nesterov: 后80年代, 非线性凸优化内点法
- 现代: 并行、随机算法

2 凸集

定义 1. 一些集合概念如下

- 仿射集 (*affine set*)

C 为仿射集 \iff 过 C 内任意两点的直线都在 C 内

$$\iff \forall x_1, x_2 \in C, \theta \in \mathbb{R}, \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in C$$

例 2. 用定义易证线性方程组的解集 $C = \{\mathbf{x} \mid A\mathbf{x} = \mathbf{b}\}$ 是仿射集; 反过来, 每一个仿射集都可以用线性方程组的解集表示

- 仿射组合

$$\forall x_1, x_2, \dots, x_k \in C, \theta_1, \dots, \theta_k \in \mathbb{R}, \theta_1 + \dots + \theta_k = 1 : \theta_1 x_1 + \dots + \theta_k x_k \in C$$

- 仿射包 (*hull*): 所有仿射组合的集合

$$\text{aff } C := \{\theta_1 x_1 + \dots + \theta_k x_k \mid \forall x_1, \dots, x_k \in C, \theta_1 + \dots + \theta_k = 1\}$$

- 凸集 (*convex set*)

C 为凸集 \iff 过 C 内任意两点的线段都在 C 内

$$\iff \forall x_1, x_2 \in C, \theta \in [0, 1], \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in C$$

- 凸组合

$$\forall x_1, x_2, \dots, x_k \in C, \theta_1, \dots, \theta_k \in [0, 1], \theta_1 + \dots + \theta_k = 1 : \theta_1 x_1 + \dots + \theta_k x_k \in C$$

- 凸包: 最小的凸集

$$\text{conv } C := \{\theta_1 x_1 + \dots + \theta_k x_k \mid \forall x_1, \dots, x_k \in C, \theta_1, \dots, \theta_k \in [0, 1], \theta_1 + \dots + \theta_k = 1\}$$

- 凸锥(*convex cone*)

$$\mathcal{C} \text{ 为凸锥} \iff \forall x_1, x_2 \in \mathcal{C}, \theta_1, \theta_2 \geq 0, \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 \in \mathcal{C}$$

除了空集的凸锥都得包含原点 (取 $\theta_1 = \theta_2 = 0$)

- 凸锥组合/非负线性组合:

$$\forall x_1, x_2, \dots, x_k \in \mathcal{C}, \theta_1, \dots, \theta_k \geq 0: \theta_1 x_1 + \dots + \theta_k x_k \in \mathcal{C}$$

- 凸锥包: 类似前面定义

由上面的定义易知, 仿射组合/凸锥组合 (强条件) 一定是凸组合。

定义 2 (超平面(hyperplane)与半空间(halfspace)). 超平面都是比原空间低一维

$$\{\mathbf{x} \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} = b, \mathbf{x}, \mathbf{a} \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}, \mathbf{a} \neq 0\}$$

超平面将空间划分为两个部分, 即半空间

$$\{\mathbf{x} \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} \leq b, \mathbf{a} \neq 0\}$$

若方程特解为 \mathbf{x}_0 , 则 $\mathbf{a} \perp (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$

定义 3 (欧式球(Euclidean ball)).

$$B(x_c, r) = \{x \mid \|x - x_c\|_2 \leq r\}$$

范数(*norm*)球可类似定义

定义 4 (椭球(ellipsoid)).

$$\varepsilon(x_c, P) = \{x \mid (x - x_c)^T P^{-1} (x - x_c) \leq 1\}, P \succ 0$$

其中 $P \succ 0$ 代表 P 对称且正定($P = P^T$)

分析. 定义内积 $\langle x^T P^{-1} y \rangle$ (需证满足内积条件), 进而 P -范数 $\|x\|_P := \sqrt{x^T P x}$ 是范数, 而椭球不过是 P -范数意义下的球, 由定理得椭球是凸的

定义 5 (多面体(polyhedron)).

$$P = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \leq b_i, \mathbf{c}_j^T \mathbf{x} = d_j, i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, p\}$$

例 3. • 空集、点、 \mathbb{R}^n 空间均为仿射

- 任意直线为仿射; 若过原点则为凸锥

- \mathbb{R}^n 空间的子空间³为仿射和凸锥
- 超平面为仿射
- 半空间、欧式球、椭球、多面体为凸集

定义 6 (仿射函数).

$$f: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m \quad f(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} + \mathbf{b}, A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$$

性质如下:

- $S \subset \mathbb{R}^n$ 为凸 $\implies f(S) = \{f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in S\}$ 为凸
- $C \subset \mathbb{R}^m$ 为凸 $\implies f^{-1}(C) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}) \in C\}$ 为凸

例 4. 两个集合的和 $S_1 + S_2 = \{x + y \mid x \in S_1, y \in S_2\}$ 保凸

分析. 直积 $S_1 \times S_2 = \{(x, y) \mid x \in S_1, y \in S_2\}$ 显然可以保凸 (相当于在两个集合同时画线)

令 $A = \begin{bmatrix} I & I \end{bmatrix}, \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix}^T, \mathbf{b} = 0$, 由仿射函数性质知

定义 7 (透视(perspective)函数⁴). 透视函数 $P: \mathbb{R}^{n+1} \mapsto \mathbb{R}^n, \text{dom } P = \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_{++}$ 定义如下

$$P(z, t) = \frac{z}{t}, z \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}_{++}$$

反透视函数

$$P^{-1}(c) := \{(x, t) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \frac{x}{t} \in c, t > 0\}$$

若 $c \in \text{dom } P$ 为凸, 则 $P(c) := \{P(x), x \in c\}$ 为凸; 反透视函数仍保持 c 的凸性。

考虑 \mathbb{R}^{n+1} 内的线段, $x = (\tilde{x} \in \mathbb{R}^n, x_{n+1} \in \mathbb{R}_{++}), y = (\tilde{y}, y_{n+1})$ 则经过透视函数仍是线段

分析.

$$P(\theta x + (1 - \theta)y) = \frac{\theta \tilde{x} + (1 - \theta)\tilde{y}}{\theta x_{n+1} + (1 - \theta)y_{n+1}} = \frac{\theta x_{n+1}}{\theta x_{n+1} + (1 - \theta)y_{n+1}} \frac{\tilde{x}}{x_{n+1}} + \frac{(1 - \theta)y_{n+1}}{\theta x_{n+1} + (1 - \theta)y_{n+1}} \frac{\tilde{y}}{y_{n+1}}$$

定义 8 (线性分数函数). 仿射函数

$$g(x) = \begin{bmatrix} A \\ C^T \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} b \\ d \end{bmatrix}, A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m, c \in \mathbb{R}^n, d \in \mathbb{R}$$

线性分数函数 $f: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m = p \circ g$

$$f(x) = \frac{Ax + b}{c^T x + d}, \text{dom } f = \{x \mid c^T x + d > 0\}$$

保凸性

- 凸集的交

³零元、加法封闭、数乘封闭

⁴++代表 ≥ 0 , +++代表 > 0

- 仿射、逆仿射
- 透视函数
- 线性分数函数

3 凸函数

定义 9 (凸函数). 1. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 为凸 $\iff \text{dom } f$ 为凸且 $\forall x, y \in \text{dom } f, \theta \in [0, 1]$

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

- 严格凸: $\theta \in (0, 1)$, 不等式不能取等
- 凹函数: 若 $-f$ 为凸

2. 高维定义: $f: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ 为凸 $\iff \text{dom } f$ 为凸

$$\forall x \in \text{dom } f, v \in \mathbb{R}^n : g(t) := f(x + tv) \text{ 为凸, } \text{dom } g = \{t \mid x + tv \in \text{dom } f\}$$

相当于每一个剖面上的低维函数都是凸的

3. 一阶条件 (first-order condition)⁵

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

4. 二阶条件: $f: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ 为凸 $\iff \text{dom } f$ 为凸

$$\forall x \in \text{dom } f : \nabla^2 f(x) \succeq 0$$

- 凹函数: $\nabla^2 f(x) \preceq 0$
- 严格凸: $\iff \nabla^2 f(x) \succ 0$, 反例 $f(x) = x^4$ (在一个点斜率不变并不要紧)

例 5. $f(x) = a^T x + b$

分析. 有 $\nabla f(x) = a$, 进而

$$f(y) = a^T y + b \geq a^T x + b + a^T (y - x) = a^T y + b$$

定义 10 (凸函数的扩展(extended-value)). 尽管凸函数的定义域为凸, 但往往不好处理, 那就将其扩展到全空间。 $x \in \text{dom } f \subset \mathbb{R}^n, \text{dom } \tilde{f} = \mathbb{R}^n$, 会有

$$\tilde{f}(x) = \begin{cases} f(x) & x \in \text{dom } f \\ +\infty & x \notin \text{dom } f \end{cases}$$

⁵ $\nabla^T f(x) = [\nabla f(x)]^T$

指示/示信(indicator)函数不一定是凸的

$$f(x) = \begin{cases} 0 & x \in C \\ +\infty & x \notin C \end{cases}$$

定理 1. 若 f 为凸, 可微, 则 $\exists x \in \text{dom } f, \nabla f(x) = 0$

例 6. 二次函数 $f(x) = \frac{1}{2}x^T Px + q^T x + r$, $P \in S^n$ (对称矩阵), $q^T \in \mathbb{R}^n$, $r \in \mathbb{R}$

分析. $\nabla^2 f(x) = P$

$P \in S_+^n$ 凸, $P \in S_{++}^n$ 严格凸

例 7. $f(x) = \frac{1}{x^2}$, $\text{dom } f = \{x \in \mathbb{R}, x \neq 0\}$

分析. 注意 $\text{dom } f$ 不是凸集

- 指数函数 $f(x) = e^{ax}$
- 幂函数 $f(x) = x^a$
- 绝对值的幂函数 $f(x) = |x|^p, x \in \mathbb{R}, p > 0$: $p \in [1, +\infty)$ 凸, $p \in (0, 1)$ 既不凸又不凹

分析.

$$f''(x) = \begin{cases} p(p-1)x^{p-2} & x > 0 \\ p(p-1)(-x)^{p-2} & x < 0 \end{cases}$$

- 对数函数 $f(x) = \log x$
- 熵 $f(x) = -x \log x$
- 极大值函数 $f(x) = \max\{x_1, \dots, x_n\}, x \in \mathbb{R}^n$

定义 11 (解析近似). 无穷阶可微

极大值函数的解析近似是 $f(x) = \log(e^{x_1} + \dots + e^{x_n})$

$$\max\{x_1, \dots, x_n\} \leq f(x) \leq \max\{x_1, \dots, x_n\} + \log n$$

分析.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_i} &= \frac{e^{x_i}}{e^{x_1} + \dots + e^{x_n}} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} &= \begin{cases} \frac{-e^{x_i} e^{x_i}}{(e^{x_1} + \dots + e^{x_n})^2} = -\frac{e^{x_i}}{e^{x_1} + \dots + e^{x_n}} & i = j \\ \frac{-e^{x_i} e^{x_j}}{(e^{x_1} + \dots + e^{x_n})^2} & i \neq j \end{cases} \\ z &:= [e^{x_1} \quad \dots \quad e^{x_n}]^T \end{aligned}$$

求 Hessian 矩阵

$$H = \frac{1}{(\mathbb{1}^T z)^2} (-z \cdot z^T + (\mathbb{1}^T z) \text{diag}(z))$$

将前面常量丢弃⁶

$$\begin{aligned}
 a_i &:= v_i \sqrt{z_i} = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^T, b_i = \sqrt{z_i} \\
 v^T H v &= (\mathbb{1}^T z) v^T \text{diag}(z) v - v^T z z^T v \\
 &= \left(\sum_i z_i \right) \left(\sum_i v_i^2 z_i \right) - \left(\sum_i v_i z_i \right)^2 \\
 &= (b^T b)(a^T a) - (a^T b)^2 \quad \text{Cauchy} \\
 &\geq 0
 \end{aligned}$$

定义 12 (范数). $p(x)$ 为范数

1. $p(ax) = |a|p(x)$
2. $p(x+y) \leq p(x) + p(y)$
3. $p(x) = 0 \iff x = 0$

零范数 $\|x\|_0$: 非零元素数目, 是伪范数 (不符合第一个定义)

\mathbb{R}^n 中的范数都是凸函数, 正则化!

分析.

$$\forall x, y, \theta \in [0, 1] p(\theta x + (1 - \theta)y) \leq \theta p(x) + (1 - \theta)p(y)$$

行列式的对数 $f(x) = \log \det(x)$, $\text{dom } f = S_{++}^n$ $n=1$ 凹函数 证 $n > 1$ 也为凹, 用高维定义

$$\begin{aligned}
 g(t) &= f(z + tv) \\
 &= \log \det(z + tv) \\
 &= \log \det(z^{1/2}(I + tz^{1/2}vz^{-1/2})z^{1/2}), \quad z^{1/2} \in S_{++}^n, z^{1/2}z^{1/2} = z \\
 &= \log \det(z) + \log \det(I + tz^{1/2}vz^{-1/2}) \\
 &= \log \det(z) + \sum_{i=1}^n \log(1 + t\lambda_i), \quad \lambda_i = z^{-1/2}vz^{1/2} \text{ 的特征值}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 g'(t) &= \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i}{1 + t\lambda_i} \\
 g''(t) &= \sum_{i=1}^n -\frac{\lambda_i^2}{(1 + t\lambda_i)^2}
 \end{aligned}$$

补充证明: 对对称阵特征值分解 $tz^{1/2}vz^{1/2} = tQ\Lambda Q^T$, 对角阵 Λ 即为 $QQ^T = I$, Q 为酉矩阵

$$I + tz^{-1/2}vz^{-1/2} = QQ^T + tQ\Lambda Q^T = Q(I + t\Lambda)Q^T$$

$$\log \det(I + tz^{-1/2}vz^{-1/2}) = \log \det(Q) + \log \det(I + t\Lambda) + \log \det(Q^T)$$

保持函数凸性

⁶ H 半正定, 则 $\forall v \in \mathbb{R}^n : v^T H v \geq 0$

- 非负加权和 f_1, \dots, f_m 为凸, 定义域 \mathbb{R}^n

$$f := \sum_{i=1}^m w_i f_i, w_i \geq 0$$

- 非负积分 $f(x, y)$ 对 $y \in A$ 均为凸 (A 不一定为凸), $w(y) \geq 0$

$$g(x) := \int_{y \in A} w(y) f(x, y) dy$$

- 仿射映射 $f: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ 为凸, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m$, $\text{dom } g = \{x \mid Ax + b \in \text{dom } f\}$

$$g(x) := f(Ax + b)$$

分析. — $\text{dom } f$ 为凸, 则 $\text{dom } g$ 为凸

— $\forall x, y \in \text{dom } g, \forall \theta \in [0, 1]$

$$\begin{aligned} g(\theta x + (1 - \theta)y) &= f(A(\theta x + (1 - \theta)y) + b) \\ &= f(\theta(Ax + b) + (1 - \theta)(Ay + b)) \\ &\leq \theta f(Ax + b) + (1 - \theta)f(Ay + b) \\ &= \theta g(x) + (1 - \theta)g(y) \end{aligned}$$

— 其实只是在定义域上改变, 而不是改变值域, 因而函数凸性不会改变

- 两个函数的极大值函数, f_1, f_2 为凸

$$f(x) := \max\{f_1(x), f_2(x)\}, \text{dom } f = \text{dom } f_1 \cap \text{dom } f_2$$

- 任意个凸函数极大值函数为凸

$$f(x) = \max\{a_1^T x + b_1, \dots, a_m^T x + b_m\}$$

- 无限个凸函数, $y \in A$, $f(x, y)$ 对于 x 为凸, 则

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

例 8. 点 x 到集合 C 的最远距离

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

位移对于范数凸性不会有影响

例 9. $x \in \mathbb{R}^n$, $x[i]$ 为第 i 大元素, $x[1] \geq x[2] \geq \dots \geq x[r] \geq \dots \geq x[n]$

$$f(x) := \sum_{i=1}^r x[i]$$

– $r = 1$: $f(x) = x[1] = \max\{x_1, \dots, x_n\}$, 每一项都是 $\mathbf{e}_i^T x_i$

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

- 函数的组合: $h: \mathbb{R}^k \mapsto \mathbb{R}, g: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^k$

$$f := h \circ g: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$$

先考虑 $n = k = 1, \text{dom } g = \mathbb{R}^n, \text{dom } h = \mathbb{R}^k, \text{dom } f = \mathbb{R}$, h, g 二阶可微

$$f'(x) = h'(g(x)) \cdot g'(x)$$

$$f''(x) = h''(g(x))(g'(x))^2 + h'(g(x))g''(x) > 0$$

即当 g 为凸, h 为凸且不降; g 为凹, h 为凸且不增时, $f(x)$ 为凸

(若定义域非全空间) 当 g 为凸, h 为凸, 扩展值函数 \tilde{h} 不降; g 为凹, h 为凸, \tilde{h} 不增时, $f(x)$ 为凸

例 10. g 为凸, $\exp g(x)$ 为凸; g 为凹, $g > 0$, $\log g(x)$ 为凹; g 为凸, $g > 0$, $1/g(x)$ 为凸

例 11. $g(x) = x^2, \text{dom } g = \mathbb{R}, h(y) = 0, \text{dom } h = [1, 2], f = h \circ g$, 注意 \tilde{h} 并非不降!

- 函数透视: $P: \mathbb{R}^{n+1} \mapsto \mathbb{R}^n, \text{dom } P \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_{++}, P(z, t) = \frac{z}{t}$

$$f: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}, g(x, t) = tf\left(\frac{x}{t}\right), \text{dom } g = \{(x, t) \mid \frac{x}{t} \in \text{dom } f\}, g: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_{++} \mapsto \mathbb{R}$$

若 $f(x)$ 为凸, 则 $g(x, t)$ 相对于 (x, t) 联合凸

例 12. – $f(x) = x^T x, g(x, t) = x^T x/t$

– $f(x) = -\log x, g(x, t) = t \log(t/x)$

– $u, v \in \mathbb{R}_{++}^n, g(u, v) = \sum_{i=1}^n u_i \log(u_i/v_i)$, 信息论常用, 衡量相似性, KL 散度

$$D_{KL} := \sum_{i=1}^n \left(u_i \log \frac{u_i}{v_i} - u_i + v_i \right)$$

定义 13 (α 次水平集(α -sub level set)). $f: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}, C_\alpha = \{x \in \text{dom } f \mid f(x) \leq \alpha\}$

定义 14 (拟凸函数(quasi-convex)). α 次水平集为凸集 $\iff f$ 为拟凸函数

拟凸函数有很好的性质 \rightarrow 单模态/单峰函数

凸函数与凸集联系

- 凸函数定义域为凸集
- 凸函数的 α 次水平集为凸集

4 凸优化问题

4.1 标准型

广义定义：极小化凸函数，约束为凸集

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && f_0(\mathbf{x}) \\ & \text{subject to} && f_i(\mathbf{x}) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & && h_j(\mathbf{x}) = 0 \quad j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

- 优化变量 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$
- 目标/损失函数 $f_0 : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$
- 不等式约束函数 $f_i : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$
- 等式约束函数 $h_j : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$
- 域 $\mathcal{D} = \bigcap_{i=1}^m \text{dom } f_i \cap \bigcap_{j=1}^p \text{dom } h_j$
- 可行解 $\mathcal{X} = \{\mathbf{z} \mid f_i(\mathbf{z}) \leq 0, h_j(\mathbf{z}) = 0, i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, p\}$
- 最优值 $P^* = \inf\{f_0(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$
- 最优解 $\mathbf{x}^* \iff \forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{z} \in \mathcal{X} : f_0(\mathbf{z}) \geq f_0(\mathbf{x}^*)$
- 最优解集 $\mathcal{X}^* = \{\mathbf{x}^* \mid f_0(\mathbf{x}^*) = P^*, \mathbf{x}^* \in \mathcal{X}\}$
- ε -次最优解集 $\mathcal{X}_\varepsilon = \{\mathbf{x} \mid f_0(\mathbf{x}) \leq P^* + \varepsilon, \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$
- 局部最优 $\exists R > 0, f_0(x) = \inf\{f_0(\mathbf{z}) \mid \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \mathbf{z} \in \mathcal{X}, \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\| \leq R\}$
- 局部最优解集 $\mathcal{X}_{local} = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{x} \text{ 为局部最优}\}$

狭义定义： $f_i(x), i = 0, 1, \dots$ 为凸函数， $h_i(x)$ 为仿射函数

例 13.

$$\begin{aligned} \min & f_0(x) = x_1^2 + x_2^2 \\ \text{s.t.} & f_1(x) = \frac{x_1}{1+x_2^2} \leq 0 \implies x_1 \leq 0 \\ & h_1(x) = (x_1 + x_2)^2 = 0 \implies x_1 + x_2 = 0 \end{aligned}$$

定理 2. 凸问题局部最优等价于全局最优

分析. 若 x 为局部最优

$$\exists R > 0 : f_0(x) = \inf\{f_0(z) \mid z \in \mathcal{X}, x \in \mathcal{X}, \|x - z\|_2 \leq R\}$$

反证法，设 x 不是全局最优， y 为全局最优， $f_0(x) > f_0(y)$

$$z = \theta x + (1 - \theta)y, \theta = \frac{R}{2\|y - x\|_2}$$

$$\|z - x\|_2 = \frac{R\|y - x\|_2}{2\|y - x\|_2} = \frac{R}{2}$$

由 $\|z - x\|_2 \leq R \implies f_0(x) \leq f_0(z)$, 有

$$f_0(z) \leq \theta f_0(x) + (1 - \theta)f_0(y) < \theta f_0(z) + (1 - \theta)f_0(z) = f_0(z)$$

矛盾

可微凸目标函数

无约束 $\min f_0(x), \nabla f_0^*(x) = 0$

$$\forall x, y : f_0(y) \geq f_0(x) + \langle \nabla f_0(x), y - x \rangle$$

$$f_0(y) \geq f_0(x^*) + \langle \nabla f_0(x^*), y - x^* \rangle = f_0(x^*)$$

有约束 $\min f_0(x), s.t. x \in \mathcal{X}$

$$x^* \in \mathcal{X}, \langle \nabla f_0(x^*), y - x^* \rangle \geq 0, \forall y \in \mathcal{X}$$

例 14. 等式约束 $\min f_0(x), \text{dom } f_0 \subset \mathbb{R}^n, f_0$ 可微, 使得 $Ax = b$

分析. x^* 最优, $Ax^* = b, \forall y \in \mathcal{X}, Ay = b$

$$\langle \nabla f_0(x^*), y - x^* \rangle \geq 0$$

$$\begin{cases} y = x^* + v \\ Av = 0 \end{cases}, v \in \text{Nul } A$$

$$\forall v \in \text{Nul } A, \langle \nabla f_0(x^*), v \rangle \geq 0$$

1. $\text{Nul } A = \{0\}$

2. A 不可逆, $\nabla f_0(x^*) \perp \text{Nul } A$

例 15. 正约束 $\min f_0(x), s.t. x \geq 0$

分析. 若 x^* 最优, $\iff x^* \geq 0, \forall y \geq 0, \langle \nabla f_0(x^*), y - x^* \rangle \geq 0$

$$\iff \langle \nabla f_0(x^*), y \rangle \geq \langle \nabla f_0(x^*), x^* \rangle$$

1. 若 $\nabla f_0(x^*) \not\geq 0$ 有矛盾 (负数行乘上正无穷), 故 $\nabla f_0(x^*) \geq 0$

2. 令 $y = 0$, 有 $0 \geq \langle \nabla f_0(x^*), x^* \rangle \implies \sum_{i=1}^n (\nabla f_0(x^*))_i x^*_i \leq 0$
前面 ≥ 0 , 进而互补松弛条件

3. $x^* \geq 0$

4.2 线性规划

$$\begin{aligned}
 & \min \quad c^T \mathbf{x} + \mathbf{d} \\
 & \text{s.t.} \quad G\mathbf{x} \leq \mathbf{h} \\
 & \quad \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b} \\
 \\
 & \min \quad c^T \mathbf{x} + \mathbf{d} \\
 & \text{s.t.} \quad G\mathbf{x} + \mathbf{s} = \mathbf{h} \\
 & \quad \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b} \\
 & \quad \quad \mathbf{s} \geq 0
 \end{aligned}$$

\mathbf{s} 为松弛变量(slack variable)

用 \mathbf{x}^+ 和 \mathbf{x}^- 拆分, 得到 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-$, $\mathbf{x}^+ \geq 0, \mathbf{x}^- \geq 0, \mathbf{s} \geq 0$

例 16 (食谱问题). m 种营养元素不小于 b_1, \dots, b_m , n 种食物, 单位含量 a_{1j}, \dots, a_{mj} , 食物量 x_1, \dots, x_n , 价格 c_1, \dots, c_n

$$\begin{aligned}
 & \min \quad \sum_{j=1}^n c_j x_j \\
 & \text{s.t.} \quad \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \geq b_i \\
 & \quad \quad x_j \geq 0
 \end{aligned}$$

其中 $i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$

线性分数规划

$$\begin{aligned}
 & \min \quad f_0(x) = \frac{c^T x + d}{e^T x + f}, \text{dom } f = \{x \mid e^T x + f > 0\} \\
 & \text{s.t.} \quad \quad \quad Gx \leq h \\
 & \quad \quad \quad Ax = b
 \end{aligned}$$

等价于

$$\begin{aligned}
 & \min \quad c^T y + dz \\
 & \text{s.t.} \quad Gy - hz \leq 0 \\
 & \quad \quad Ay - bz = 0 \\
 & \quad \quad e^T y + fz = 1 \\
 & \quad \quad z \geq 0
 \end{aligned}$$

分析. 证明两个问题等价, P_0 与 P_1

若 x 在 P_0 内可行

$$y = \frac{x}{e^T x + f}, z = \frac{1}{e^T x + f}$$

若 (y, z) 在 P_1 中可行

$$x = \frac{y}{z} (z \neq 0)$$

若 $z = 0$, x_0 为 P_0 的可行解

$$x = x_0 + ty, t \geq 0$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{c^T(x_0 + ty) + d}{e^T(x_0 + ty) + f} = c^T y$$

代入看所有条件结论都相同

二次规划(Quadratic Programming)

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2} x^T p x + q^T x + r, \quad p \succ 0 \\ \text{s.t.} \quad & Gx \leq h \\ & Ax = b \end{aligned}$$

二次约束二次规划(QCQP)

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2} p_0 x + q_0^T x + r_0, \quad p \succ 0 \\ \text{s.t.} \quad & \frac{1}{2} x^T p_i x + q_i^T x + r_i \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad p_i \succ 0 \\ & Ax = b \end{aligned}$$

最小二乘问题

$$\begin{aligned} \min_x \quad & \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & b = Ax + e \\ & \frac{1}{2} (x^T A^T A x - 2b^T A x + b^T b) \end{aligned}$$

一范数规范化最小二乘

$$\min \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 + \lambda_1 \|x\|_1$$

本来用零范数，但用一范数拟合

改写

$$\|x\|_1 = \mathbb{1}^T \mathbf{x}^+ + \mathbb{1}^T \mathbf{x}^-$$

Basic Pursuit

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & \|x\|_1 \leq \varepsilon_1 \end{aligned}$$

原式很难平衡两者，下式只需考虑 $\|x\|_1$ 的影响

岭回归(Ridge): 所有 x 差距不要太大

$$\min \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 + \frac{1}{2} \lambda_2 \|x\|_2^2$$

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & \|x\|_2^2 \leq \varepsilon_2 \end{aligned}$$

投资组合问题(portfolio optimization): 初始价格 x_1, \dots, x_n , 最终价格 P_1x_1, \dots, P_nx_n

$$\begin{aligned} \max \quad & P_1x_1 + \dots + P_nx_n \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + \dots + x_n = B \\ & x_1, \dots, x_n \geq 0 \end{aligned}$$

$\bar{P} = \mathbb{E}(P)$ 已知, $\Sigma = \mathbb{D}(P)$

$$\begin{aligned} \min \quad & x^T \Sigma x \\ \text{s.t.} \quad & p^T x \geq r_{\min} \\ & x_1 + \dots + x_n = B \\ & x_1, \dots, x_n \geq 0 \end{aligned}$$

半定规划(semi-definite programming, SDP) (矩阵意义下的线性规划问题): $X \in \mathbb{R}^{n \times n}, C \in \mathbb{R}^{n \times n}, A_i \in \mathbb{R}^{n \times n}, b_i \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} \min \quad & \text{tr}(CX) \\ \text{s.t.} \quad & \text{tr}(A_i X) = b_i, i = 1, \dots, p \\ & X \succeq 0 \end{aligned}$$

例 17 (谱范数极小化问题). 矩阵多项式 $A(x) = A_0 + x_1A_1 + \dots + x_nA_n, A_i \in \mathbb{R}^{p \times q}$

$$\min_x \|A(x)\|_2$$

谱范数代表 $A(x)$ 的最大奇异值⁷

$$\begin{aligned} \min_{x,s} \quad & S \\ \text{s.t.} \quad & A^T(x)A(x) \preceq SI \end{aligned}$$

例 18 (最快分布式线性平均).

$$\begin{aligned} x(t) &= Px(t-1) \\ P &= \begin{bmatrix} P_{11} & \dots & P_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ P_{n1} & \dots & P_{nn} \end{bmatrix}, P\mathbb{1} = \mathbb{1} \end{aligned}$$

其中 $(i, j) \in E$ 或 $i = j$, $P_{ij} \neq 0$; 否则 $P_{ij} = 0$

$P = P^T, P_{ij} = P_{ji}, P_{ij} > 0$

$P \succeq 0, P_{ij} \geq 0$

⁷谱范数是诱导范数, F-范数(Frobenias) $\|A(x)\|_F$ 才算是矩阵意义下的2范数

只要图是连通图，则一定会收敛

收敛速度与第二大/特征值绝对值/有关

$$1 = \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq -1$$

即收敛速度由 $\max\{|\lambda_2|, |\lambda_n|\}$ 决定

$$\begin{aligned} & \min \max\{|\lambda_2|, |\lambda_n|\} \\ \max\{|\lambda_2|, |\lambda_n|\} &= \left\| P - \frac{1}{n} \mathbb{1} \mathbb{1}^T \right\| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \min \quad & t := \left\| P - \frac{1}{n} \mathbb{1} \mathbb{1}^T \right\|_2 \\ \text{s.t.} \quad & P \mathbb{1} = \mathbb{1} \\ & P = P^T \\ & P \succeq 0 \\ & P_{ij} = 0, \quad (i, j) \neq E \wedge i \neq j \\ & -tI \preceq P - \frac{1}{n} \mathbb{1} \mathbb{1}^T \preceq tI \end{aligned}$$

多目标优化问题：帕累托最优解

若有另一解在某个指标上更好，则必有指标更差

帕累托最优值/帕累托最优面

$\min f_{01}$ 与 $\min f_{02}$ 的交点为理想点(oracle)

若 $f_{01}(x), \dots, f_{0q}(x)$ 为凸， \mathcal{X} 为凸

$$\begin{aligned} \min \quad & \lambda_1 f_{01}(x) + \dots + \lambda_q f_{0q}(x), \quad \lambda_1, \dots, \lambda_q \geq 0 \\ \text{s.t.} \quad & x \in \mathcal{X} \end{aligned}$$

1. 能找到一个Pareto最优解

2. 遍历 $\lambda_1, \dots, \lambda_q$ ，可找到全部

岭回归的多目标优化表示

$$\begin{cases} \min \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 \\ \min \frac{1}{2} \|x\|_2^2 \end{cases}$$

5 对偶理论

拉格朗日函数(Lagrangian function)

$$L(x, \lambda, v) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p v_i h_i(x), \text{dom } L = D \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p$$

拉格朗日乘子(multiplier)

- 原变量(primal variable): $\lambda = [\lambda_1 \ \cdots \ \lambda_m]^T$
- 对偶变量(dual variable): $v = [v_1 \ \cdots \ v_p]^T$

拉格朗日对偶函数

$$\begin{aligned} g(\lambda, v) &= \inf_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda, v) \\ &= \inf_{x \in \mathcal{D}} \left(f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{i=1}^p v_i h_i(x) \right) \end{aligned}$$

注意遍历域是 $\mathcal{D} = \bigcap_{i=1}^m \text{dom } f_i \cap \bigcap_{i=1}^p \text{dom } h_i$, 而不是可行解集 \mathcal{X}

- $g(\lambda, v)$ 一定是关于 λ 和 v 的凹函数 (关于 λ 和 v 的仿射函数, 注意 x 为常数)
- $\forall \lambda \geq 0, \forall v, g(\lambda, v) \leq P^*$

对偶(dual)问题

$$\begin{aligned} \max \quad & g(\lambda, v) \\ \text{s.t.} \quad & \lambda \geq 0 \end{aligned}$$

其最优解记为 D^* , 则 $D^* \leq P^*$, 即给出了原问题的一个最优下界

x^* 原问题最优解

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m \lambda_i f_0(x^*) + \sum_{i=1}^p v_i h_i(x^*) &\leq 0 \\ L(x^*, \lambda, v) = f_0(x^*) + (\cdots) &\leq P^* \\ g(\lambda, v) = \inf_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda, v) &\leq L(x^*, \lambda, v) \leq P^* \end{aligned}$$

例 19.

$$\begin{aligned} \min \quad & x^T x \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b \end{aligned}$$

分析.

$$L(x, v) = x^T x + v^T (Ax - b)$$

$$\begin{aligned}
g(v) &= \inf_{x \in \mathcal{D}} L(x, v) \\
&= \inf_{x \in \mathcal{D}} x^T x + v^T A x - v^T b \\
&= \left(-\frac{A^T v}{2}\right)^T \left(-\frac{A^T v}{2}\right) + v^T A \left(-\frac{A^T v}{2}\right) - v^T b \\
&= -\frac{1}{4} v^T A A^T v - b^T v
\end{aligned}$$

补充求梯度: $2x + A^T v = 0 \implies x = -\frac{A^T v}{2}$

因而得到对偶问题

$$\max_v -\frac{1}{4} v^T A A^T v - b^T v$$

例 20.

$$\begin{aligned}
\min \quad & c^T x \\
\text{s.t.} \quad & A x = b \\
& x \geq 0
\end{aligned}$$

分析. 注意 λ 前面符号, 要化为一般形式

$$L(x, \lambda, v) = c^T x - \lambda^T x + v^T (A x - b)$$

$$\begin{aligned}
g(\lambda, v) &= \inf_x L(x, \lambda, v) \\
&= \inf_x (c - \lambda + A^T v)^T x - v^T b \\
&= \begin{cases} -\infty & c - \lambda + A^T v \neq 0 \\ -v^T b & c - \lambda + A^T v = 0 \end{cases}
\end{aligned}$$

对偶问题, 由于要极大, 故不考虑负无穷部分

$$\begin{aligned}
\max_{\lambda, v} \quad & -v^T b \\
\text{s.t.} \quad & c - \lambda + A^T v = 0 \\
& \lambda \geq 0
\end{aligned}$$

反过来求解

$$\begin{aligned}
\min \quad & b^T v \\
\text{s.t.} \quad & A^T v + c \geq 0
\end{aligned}$$

$$L(v, \lambda) = b^T v - \lambda^T (A^T v + c)$$

$$\begin{aligned}
g(\lambda) &= \inf_v L(v, \lambda) \\
&= \inf (b - A\lambda)^T v - \lambda^T c \\
&= \begin{cases} -\lambda^T c & b - A\lambda = 0 \\ -\infty & b - A\lambda \neq 0 \end{cases}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\max \quad & -\lambda^T c \\
\text{s.t.} \quad & b - A\lambda = 0 \\
& \lambda \geq 0
\end{aligned}$$

对偶的对偶不一定回去，线性规划才满足

例 21.

$$\begin{aligned}
\min \quad & x^T w x \\
\text{s.t.} \quad & x_i = \pm 1, \quad i = 1, \dots, n
\end{aligned}$$

分析.

$$L(x, v) = x^T w x + \sum_{i=1}^n v_i (x_i^2 - 1)$$

$$\begin{aligned}
g(v) &= \inf_x L(x, v) \\
&= \inf_x x^T w x + \sum_{i=1}^n v_i x_i^2 - \sum_{i=1}^n v_i \\
&= \inf_x x^T (w + \text{diag } v) x - \mathbb{1}^T v = \begin{cases} -\mathbb{1}^T v & w + \text{diag}(v) \succeq 0 \\ -\infty & \text{otherwise} \end{cases}
\end{aligned}$$

补充求梯度： $2(w + \text{diag}(v))x = 0$

$$\begin{aligned}
\max_v \quad & -\mathbb{1}^T v \\
\text{s.t.} \quad & w + \text{diag}(v) \succeq 0
\end{aligned}$$

定义 15 (函数的共轭). $f: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}, f^*(y) = \sup_{x \in \text{dom } f} (y^T x - f(x))$, 几何意义即到不同斜率直线的距离最大值

$$\begin{aligned}
& \min && f_0(x) \\
& \text{s.t.} && Ax \leq b \\
& && cx = d
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L(x, \lambda, v) &= f_0(x) + \lambda^T(Ax - b) + v^T(cx - d) \\
&= f_0(x) + (A^T\lambda + c^Tv)^T x - \lambda^T b - v^T d \\
g(\lambda, v) &= \inf_x f_0(x) + (A^T\lambda + c^Tv)^T x - \lambda^T b - v^T d \\
&= -\sup_x -(A^T\lambda + c^Tv)^T x - f_0 \\
&= -f_0^*(-(A^T\lambda + c^Tv)) - \lambda^T b - v^T d
\end{aligned}$$

对偶间隙(duality gap): $p^* - d^* \geq 0$

- 弱对偶: 严格大于0
 - 强对偶: 对偶间隙为0
1. 对于非凸问题, 通常 $p^* \neq d^*$
 2. 对于凸问题, 若slater条件满足, $p^* = d^*$

定义 16 (相对内点(relative interior)).

$$relint D = \{x \in D \mid B(x, r) \cap \text{aff } D \subset D, \exists r > 0\}$$

定理 3 (Slater条件).

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

$\exists x \in relint D$ 使得 $f_i(x) < 0, i = 1, \dots, m, Ax = b$

例 22. 二次规划(QP)

$$\begin{aligned}
& \min && x^T x \\
& \text{s.t.} && Ax = b
\end{aligned}$$

Slater条件 $\{x \mid Ax = b\}$ 非空

例 23. 二次约束二次规划(QCQP)

$$\begin{array}{ll}\min & \frac{1}{2}x^{\text{T}}P_0x + q_0^{\text{T}}x + r_0 \\ \text{s.t.} & \frac{1}{2}x^{\text{T}}P_ix + q_i^{\text{T}}x + r_i \leq 0, \quad i = 1, \dots, m\end{array}$$

P_0, \dots, P_i 半正定