最优化理论

陈鸿峥

2019.06*

目录

*Build 20190618

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

- 最小二乘法（凸问题）

$$\min \ \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2$$

- 深度神经网络（非凸，见下）

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

- 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→低秩矩阵补全
  矩阵横向为用户，纵向为电影，值为评分值($1 \sim 5$)，问题是把矩阵补全，这样就可以做推荐了
  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]$\|\mathbf{z}\|_\star$

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

以前常常把优化问题分为**线性规划/非线性规划**，但实际上**凸规划/非凸规划**才是更好的分类。

1.2 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：法国
- Kantoronc：苏联，线性规划，诺贝尔经济学奖
- 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

[1] A的秩等于非零奇异值$\sqrt{eig(A^{\mathrm{T}}A)}$数目
[2] 矩阵所有奇异值之和

2 凸集

2.1 基本概念

定义 1. 一些集合概念如下

- 仿射集*(affine set)*

$$\begin{aligned}\mathcal{C}\text{为仿射集} &\iff \text{过}\mathcal{C}\text{内任意两点的}\textbf{直线}\text{都在}\mathcal{C}\text{内}\\ &\iff \forall x_1, x_2 \in \mathcal{C}, \theta \in \mathbb{R}, \theta x_1 + (1-\theta)x_2 \in \mathcal{C}\end{aligned}$$

  例 1. 用定义易证线性方程组的解集$\mathcal{C} = \{\mathbf{x} \mid A\mathbf{x} = \mathbf{b}\}$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（多点扩展）

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

- 仿射包*(hull)*：所有仿射组合的集合

$$\operatorname{aff} \mathcal{C} := \{\theta_1 x_1 + \cdots + \theta_k x_k \mid \forall x_1, \ldots, x_k \in \mathcal{C}, \theta_1 + \cdots + \theta_k = 1\}$$

- 凸集*(convex set)*

$$\begin{aligned}\mathcal{C}\text{为凸集} &\iff \text{过}\mathcal{C}\text{内任意两点的}\textbf{线段}\text{都在}\mathcal{C}\text{内}\\ &\iff \forall x_1, x_2 \in \mathcal{C}, \theta \in \mathbf{[0,1]}, \theta x_1 + (1-\theta)x_2 \in \mathcal{C}\end{aligned}$$

- 凸组合

$$\forall x_1, x_2, \ldots, x_k \in \mathcal{C}, \theta_1, \ldots, \theta_k \in [0,1], \theta_1 + \cdots + \theta_k = 1: \ \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_k x_k \in \mathcal{C}$$

  分析. 由两点推多点可用数学归纳法

$$(1-\theta_{k+1})\left(\frac{\theta_1}{1-\theta_{k+1}} x_1 + \cdots + \frac{\theta_k}{1-\theta_{k+1}} x_k\right) + \theta_{k+1} x_{k+1} \in \mathcal{C}$$

- 凸包：最小的凸集

$$\operatorname{conv} \mathcal{C} := \{\theta_1 x_1 + \cdots + \theta_k x_k \mid \forall x_1, \ldots, x_k \in \mathcal{C}, \theta_1, \ldots, \theta_k \in [0,1], \theta_1 + \cdots + \theta_k = 1\}$$

- 凸锥*(convex cone)*

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

相当于x_1和x_2所夹的**正向区域**都在$\mathcal{C}$内，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：

$$\forall x_1,x_2,\ldots,x_k\in\mathcal{C},\theta_1,\ldots,\theta_k\geq 0:\ \theta_1x_1+\cdots+\theta_kx_k\in\mathcal{C}$$

- 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

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

超平面将空间划分为两个部分，即半空间

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

若方程特解为$\mathbf{x}_0$，则$\mathbf{a}\perp(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)$
注：想一下二维的情况，$a_1x_1+a_2x_2=b$就是一条直线
*Voronoi*描述：$\{x\mid\|x-a\|_2\leq\|x-b\|_2\}$为半空间，展开实际上为中位线描述

定义 3 (欧式球(Euclidean ball)).

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

范数*(norm)*球可类似定义

定义 4 (椭球(ellipsoid)).

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

其中$P\succ 0$且对称$(P=P^T)$，或记为$P\in\mathbb{S}_{++}$

分析. 定义内积$(\mathbf{x},\mathbf{y})=\mathbf{x}^{\mathrm{T}}Q\mathbf{y}$（其中$Q$为对称正定阵，满足内积条件：双线性、对称性、正定性），进而$\|\mathbf{x}\|_Q:=\sqrt{\mathbf{x}^{\mathrm{T}}Q\mathbf{x}}$是范数，而椭球不过是$Q$-范数意义下的球，由定理得椭球是凸的[3]

定义 5 (多面体(polyhedron)). 由超平面和半空间组成的集合

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

或用紧凑表示法[4]

$$P=\{\mathbf{x}\mid A\mathbf{x}\leq\mathbf{b},C\mathbf{x}=\mathbf{d}\}$$

[3]参见https://ljk.imag.fr/membres/Anatoli.Iouditski/cours/convex/chapitre_3.pdf
[4]这里$\mathbf{u}\succeq\mathbf{v}$为向量/分量不等式，即$\forall i:\ u_i\geq v_i$

例 2. 常见几何图形凸性分类如下，考虑**直线、正向区域和线段**很快可得出结论

	仿射	凸锥	凸集
空集	✓	✗	✓
点	✓	✗	✓
直线	✓	（过原点）✓	✓
$\mathbb{R}^n$空间	✓	✗	✓
$\mathbb{R}^n$空间的子空间[5]	✓	✓	✓
超平面	✓	✗	✓
半空间	✗	✗	✓
欧式球	✗	✗	✓
椭球	✗	✗	✓
多面体	✗	✗	✓

2.2 保凸运算

- 凸集的交：如超平面与半空间的交为多面体

  定理 1. 一个集合是凸集当且仅当它与任意直线的交是凸的

  分析. 充分性：直线为凸，凸集交凸集为凸
  必要性：取过x_1, x_2的直线，集合与该直线交为凸，则x_1, x_2的凸组合都在集合内，由x_1, x_2的任意性，该集合是凸的

  例 3. 若$A \succeq 0$，则二次不等式的解集

  $$\mathcal{C} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x}^{\mathrm{T}} A\mathbf{x} + \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + c \leq 0, A \in \mathbb{S}^n, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n, c \in \mathbb{R}\}$$

  为凸集

  分析. 考虑直线[6]$\{\hat{\mathbf{x}} + t\mathbf{v} \mid t \in \mathbb{R}\}$，有

  $$(\hat{\mathbf{x}} + t\mathbf{v})^{\mathrm{T}} A(\hat{\mathbf{x}} + t\mathbf{v}) + \mathbf{b}^{\mathrm{T}}(\hat{\mathbf{x}} + t\mathbf{v}) + c = \alpha t^2 + \beta t + \gamma$$

  交集为$\{\hat{\mathbf{x}} + t\mathbf{v} \mid \alpha t^2 + \beta t + \gamma \leq 0\}$
  由$A \succeq 0 \implies \alpha = \mathbf{v}^{\mathrm{T}} A\mathbf{v} \geq 0$，即与任意直线交为凸，故$\mathcal{C}$为凸集

- 仿射、逆仿射：如伸缩平移

  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：

[5] 零元、加法封闭、数乘封闭

[6] 此为直线的参数方程

- $S\subset\mathbb{R}^n$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$S_1+S_2=\{\mathbf{x}+\mathbf{y}\mid \mathbf{x}\in S_1,\mathbf{y}\in S_2\}$保凸

分析. 直积$S_1\times S_2=\{(\mathbf{x},\mathbf{y})\mid \mathbf{x}\in S_1,\mathbf{y}\in S_2\}$显然可以保凸（相当于在两个集合同时画线）令$A\leftarrow\begin{bmatrix}I & I\end{bmatrix},\mathbf{x}\leftarrow\begin{bmatrix}\mathbf{x} & \mathbf{y}\end{bmatrix}^{\mathrm{T}},\mathbf{b}\leftarrow 0$，由仿射函数性质得证

例 5. 两个集合的部分和$S=\{(x,y_1+y_2)\mid (x,y_1)\in S_1,(x,y_2)\in S_2,x\in\mathbb{R}^n,y_i\in\mathbb{R}^m\}$保凸

- 透视函数：对向量进行规范化，使得最后一维分量为1并舍弃

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

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

反透视函数

$$P^{-1}(\mathcal{C}):=\left\{(\mathbf{x},t)\in\mathbb{R}^{n+1}\middle|\frac{\mathbf{x}}{t}\in\mathcal{C},t>0\right\}$$

凸集经过透视函数和反透视函数依然是凸集

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

$$\begin{aligned}P(\theta\mathbf{x}+(1-\theta)\mathbf{y})&=\frac{\theta\tilde{\mathbf{x}}+(1-\theta)\tilde{\mathbf{y}}}{\theta\mathbf{x}_{n+1}+(1-\theta)\mathbf{y}_{n+1}}\\&=\frac{\theta\mathbf{x}_{n+1}}{\theta\mathbf{x}_{n+1}+(1-\theta)\mathbf{y}_{n+1}}\frac{\tilde{\mathbf{x}}}{\mathbf{x}_{n+1}}+\frac{(1-\theta)\mathbf{y}_{n+1}}{\theta\mathbf{x}_{n+1}+(1-\theta)\mathbf{y}_{n+1}}\frac{\tilde{\mathbf{y}}}{\mathbf{y}_{n+1}}\\&=\mu P(\mathbf{x})+(1-\mu)P(\mathbf{y})\end{aligned}$$

- 线性分数函数

定义 8 (线性分数函数). 仿射函数

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

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

$$f(\mathbf{x})=\frac{A\mathbf{x}+\mathbf{b}}{\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+d},\operatorname{dom}f=\left\{\mathbf{x}\mid\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+d>0\right\}$$

3 凸函数

3.1 基本概念与性质

定义 9 (凸函数). 凸函数的几种基本定义如下，注意凸函数的域都得是凸集

[7] +代表≥ 0，++代表>0

1. 原始定义：$f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$为凸 $\iff$ $\operatorname{dom} f$为凸，且

$$\forall \mathbf{x},\mathbf{y}\in\operatorname{dom} f,\theta\in[0,1]:\ f(\theta\mathbf{x}+(1-\theta)\mathbf{y})\leq\theta f(\mathbf{x})+(1-\theta)f(\mathbf{y})$$

- 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 $\iff$ $\operatorname{dom} f$为凸，且

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

相当于每一个剖面上的低维函数都是凸的（固定$\mathbf{x}$和$\mathbf{v}$变化t看凸性，则$\mathbf{x}+t\mathbf{v}$在一条直线上/超平面上移动）

3. 一阶条件*(first-order condition)*[8]：$f:\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}$为凸 $\iff$ $\operatorname{dom} f$为凸，且

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

即*Taylor*公式一阶展开

分析. 用高维定义证明，先证一维情况，然后设$g(t)=f(t\mathbf{y}+(1-t)\mathbf{x})$，并对$t$求导。由于$g(t)$是凸的，故用一维情况得证

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

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

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

分析. 同样先证明一维情况，然后设$g(t)=f(\mathbf{x}+t\mathbf{v})$，并对$t$求二阶导，类似可得证

例 6. $f(\mathbf{x})=\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+\mathbf{b}$

分析. 有$\nabla f(\mathbf{x})=\mathbf{a}$，进而

$$f(\mathbf{y})=\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}+\mathbf{b}\geq\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+\mathbf{b}+\mathbf{a}^{\mathrm{T}}(\mathbf{y}-\mathbf{x})=\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}+\mathbf{b}$$

例 7. 假设$f:\mathbb{R}\mapsto\mathbb{R}$为凸函数，$a<b$

1. $\forall x\in[a,b]:\ f(x)\leq\dfrac{b-x}{b-a}f(a)+\dfrac{x-a}{b-a}f(b)$
由$f(\theta a+(1-\theta)b)\leq\theta f(a)+(1-\theta)f(b)$，令

$$\theta a+(1-\theta)b=x\implies\theta=\frac{x-b}{a-b}$$

[8] $\nabla^{\mathrm{T}}f(\mathbf{x})=[\nabla f(\mathbf{x})]^{\mathrm{T}}$, $\nabla^2 f(\mathbf{x})$为$f(\mathbf{x})$的Hessian矩阵，其他关于矩阵微积分的知识请见附录B节

代入得证

2. $\forall x \in [a,b]:\ \dfrac{f(x)-f(a)}{x-a} \le \dfrac{f(b)-f(a)}{b-a} \le \dfrac{f(b)-f(x)}{b-x}$
展开等价于(1)式

3. 假设f可微，
$$f'(a) \le \frac{f(b)-f(a)}{b-a} \le f'(b)$$
由(2)式取极限可得

4. 假设f二次可微，有$f''(a) \ge 0$以及$f''(b) \ge 0$
令$b=x$，由(3)式，$f'(x)-f'(a) \ge 0 \implies f''(a) \ge 0$

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。 $\mathbf{x} \in \operatorname{dom} f \subset \mathbb{R}^n, \operatorname{dom} \widetilde{f} = \mathbb{R}^n$，会有

$$\widetilde{f}(\mathbf{x}) = \begin{cases} f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \operatorname{dom} f \\ +\infty & \mathbf{x} \notin \operatorname{dom} f \end{cases}$$

例 8 (示性(indicator)函数). 扩展值延伸的示性函数是凸的

$$\tilde{I}_{\mathcal{C}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \mathbf{x} \in \mathcal{C} \\ +\infty & \mathbf{x} \notin \mathcal{C} \end{cases}$$

定理 2. 若f为凸，可微，则$\exists \mathbf{x} \in \operatorname{dom} f, \nabla f(\mathbf{x}) = 0$

例 9. 二次函数$f(\mathbf{x}) = \dfrac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}} P \mathbf{x} + \mathbf{q}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + r$，$P \in \mathbb{S}^n$（对称矩阵），$\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$，$r \in \mathbb{R}$

分析. $\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(P+P^{\mathrm{T}})\mathbf{x} + \mathbf{q} \implies \nabla^2 f(\mathbf{x}) = P$
故$P \in \mathbb{S}^n_+$，$f(\mathbf{x})$为凸；$P \in \mathbb{S}^n_{++}$，$f(\mathbf{x})$严格凸

例 10. $f(x) = \dfrac{1}{x^2}$, $\operatorname{dom} f = \{x \in \mathbb{R}, x \neq 0\}$

分析. 注意$\operatorname{dom} f$不是凸集

3.2 常见例子

3.2.1 $\mathbb{R}$上的函数

- 仿射函数$f(x) = ax+b$
- 指数函数$f(x) = \mathrm{e}^{ax}$
- 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$f(x) = -x \log x$

3.2.2 $\mathbb{R}^n$上的函数

- 任意范数$f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|$（常被用来**正则化!**）

  分析. 由三角不等式

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y}, \theta \in [0,1]: \ \|\theta \mathbf{x} + (1-\theta)\mathbf{y}\| \leq \|\theta \mathbf{x}\| + \|(1-\theta)\mathbf{y}\| \leq \theta \|x\| + (1-\theta)\|y\|$$

- 极大值函数$f(\mathbf{x}) = \max\{x_1, \ldots, x_n\}, x \in \mathbb{R}^n$

  分析. 由原式定义

$$f(\theta \mathbf{x} + (1-\theta)\mathbf{y}) = \max_i(\theta x_i + (1-\theta)y_i) \leq \theta \max_i x_i + (1-\theta)\max_i y_i = \theta f(\mathbf{x}) + (1-\theta) f(\mathbf{y})$$

- 二次线性分式函数$f(\mathbf{x}, y) = x^2/y, (x,y) \in \mathbb{R}^2, y > 0$

  分析. 由二阶条件及半正定矩阵的分解判定法

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}, y) = \frac{2}{y^3}\begin{bmatrix} y^2 & -xy \\ -xy & x^2 \end{bmatrix} = \frac{2}{y^3}\begin{bmatrix} y \\ -x \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y \\ -x \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \succeq 0$$

- 指数和的对数$f(\mathbf{x}) = \log(\mathrm{e}^{x_1} + \cdots + \mathrm{e}^{x_n})$

  分析. 此即极大值函数的解析近似[9]，因有下式成立

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

  利用二阶条件证明凸性

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{\mathrm{e}^{x_i}}{\mathrm{e}^{x_1} + \cdots + \mathrm{e}^{x_n}}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \begin{cases} \frac{-\mathrm{e}^{x_i}\mathrm{e}^{x_j}}{(\mathrm{e}^{x_1}+\cdots+\mathrm{e}^{x_n})^2} & i \neq j \\ \frac{\mathrm{e}^{x_i}(\mathrm{e}^{x_1}+\cdots+\mathrm{e}^{x_{i-1}}+\mathrm{e}^{x_{i+1}}+\cdots+\mathrm{e}^{x_n})}{(\mathrm{e}^{x_1}+\cdots+\mathrm{e}^{x_n})^2} & i = j \end{cases}$$

$$\mathbf{z} := \begin{bmatrix} \mathrm{e}^{x_1} & \cdots & \mathrm{e}^{x_n} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$$

  得到*Hessian*矩阵

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{z})^2}((\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{z})\,\mathrm{diag}(\mathbf{z}) - \mathbf{z}\mathbf{z}^{\mathrm{T}})$$

---

[9]即无穷阶可微

将前面常量丢弃

$$
\begin{aligned}
\mathbf{v}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\mathbf{x})\mathbf{v} &= (\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{z})\mathbf{v}^{\mathrm{T}}\operatorname{diag}(\mathbf{z})\mathbf{v} - \mathbf{v}^{\mathrm{T}}\mathbf{z}\mathbf{z}^{\mathrm{T}}\mathbf{v} \\
&= \left(\sum_i z_i\right)\left(\sum_i v_i^2 z_i\right) - \left(\sum_i v_i z_i\right)^2 \\
&\qquad \text{令}\mathbf{a}_i := \mathbf{v}_i\sqrt{\mathbf{z}_i} = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}, b_i := \sqrt{\mathbf{z}_i} \\
&= (\mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{b})(\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{a}) - (\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{b})^2 \qquad Cauchy \\
&\geq 0
\end{aligned}
$$

进而$\nabla^2 f(\mathbf{x})$半正定，即$\nabla^2 f(\mathbf{x}) \succeq 0$

- 几何平均$f(\mathbf{x}) = \left(\prod_{i=1}^n x_i\right)^{1/n}$为凹函数

  分析.

$$
\frac{\partial^2 f}{\partial x_k \partial x_l} = \begin{cases} -(n-1)\dfrac{\left(\prod_{i=1}^n x_i\right)^{1/n}}{n^2 x_k^2} & k = l \\ \dfrac{\left(\prod_{i=1}^n x_i\right)^{1/n}}{n^2 x_k x_l} & k \neq l \end{cases}
$$

  进而

$$
\nabla^2 f(\mathbf{x}) = -\frac{\left(\prod_{i=1}^n x_i\right)^{1/n}}{n^2}\left(n\sum_{i=1}^n \frac{v_i^2}{x_i^2} - \left(\sum_{i=1}^n \frac{v_i}{x_i}\right)^2\right) \leq 0
$$

  同样由$Cauchy$不等式可证得

- 对数行列式$f(X) = \log\det(X), \operatorname{dom} f = \mathbb{S}_{++}^n$为凹函数

  分析. 用高维定义

$$
\begin{aligned}
g(t) &:= f(Z + tV) \\
&= \log\det(Z + tV) \\
&= \log\det(Z^{1/2}(I + tZ^{-1/2}VZ^{-1/2})Z^{1/2}), \quad Z^{1/2} \in \mathbb{S}_{++}^n, Z^{1/2}Z^{1/2} = Z \\
&= \log\det(Z) + \log\det(I + tZ^{-1/2}VZ^{-1/2}) \\
&= \log\det(Z) + \sum_{i=1}^n \log(1 + t\lambda_i)
\end{aligned}
$$

  （注：λ_i为$Z^{-1/2}VZ^{-1/2}$的特征值，1为单位阵I的特征值，故可相加；又行列式等于特征值之积，故等式成立）

  因此下式成立

$$
\begin{aligned}
g'(t) &= \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i}{1 + t\lambda_i} \\
g''(t) &= \sum_{i=1}^n -\frac{\lambda_i^2}{(1 + t\lambda_i)^2} \leq 0
\end{aligned}
$$

补充证明：对对称阵进行特征值分解$tZ^{1/2}VZ^{1/2}=tQ\Lambda Q^{\mathrm{T}}$，对角阵$\Lambda$即为 $QQ^{\mathrm{T}}=I$，Q为酉矩阵

$$
\begin{aligned}
I+tZ^{-1/2}VZ^{-1/2} &= QQ^{\mathrm{T}}+tQ\Lambda Q^{\mathrm{T}}=Q(I+t\Lambda)Q^{\mathrm{T}} \\
\log\det(I+tZ^{-1/2}VZ^{-1/2}) &= \log\det(Q)+\log\det(I+t\Lambda)+\log\det(Q^{\mathrm{T}})
\end{aligned}
$$

类似可证：

- $f(X)=\operatorname{tr}(X^{-1})$在$\operatorname{dom} f=\mathbb{S}^n_{++}$为凸函数
- $f(X)=(\det X)^{1/n}$在$\operatorname{dom} f=\mathbb{S}^n_{++}$为凹函数

3.3 保凸运算

- 非负加权和$f_1,\ldots,f_m$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），$w(y)\geq 0$

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

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

$$g(\mathbf{x}):=f(A\mathbf{x}+\mathbf{b})$$

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

$$
\begin{aligned}
\forall\mathbf{x},\mathbf{y}\in\operatorname{dom} g,\forall\theta\in[0,1]:\ g(\theta\mathbf{x}+(1-\theta)\mathbf{y}) &= f(A(\theta\mathbf{x}+(1-\theta)\mathbf{y})+\mathbf{b}) \\
&= f(\theta(A\mathbf{x}+\mathbf{b})+(1-\theta)(A\mathbf{y}+\mathbf{b})) \\
&\leq \theta f(A\mathbf{x}+\mathbf{b})+(1-\theta)f(A\mathbf{y}+\mathbf{b}) \\
&= \theta g(\mathbf{x})+(1-\theta)g(\mathbf{y})
\end{aligned}
$$

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/逐点(pointwise)最大函数，f_1,f_2为凸

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

例 11. $\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n$，$x[i]$为第$i$大元素，$x[1]\geq x[2]\geq\cdots\geq x[r]\geq\cdots\geq x[n]$

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

    * $r=1$：$f(\mathbf{x})=x[1]=\max\{x_1,\dots,x_n\}$，每一项都是$\mathrm{e}_i^{\mathrm{T}}x_i$
    * $r>1$：$f(\mathbf{x})=\max\{x_{i_1}+\cdots+x_{i_r}\mid 1\le i_1<i_2<\cdots<i_r\le n\}$
    即从$\mathbf{x}$的分量中选取r个分量进行求和的所有可能组合的最大值，即$n!/(r!(n-r)!)$个线性函数的逐点最大，故为凸

- 任意个凸函数极大值函数为凸（分片线性函数）

$$f(x)=\max\{\mathbf{a}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+\mathbf{b}_1,\dots,\mathbf{a}_m^{\mathrm{T}}+\mathbf{b}_m\}$$

- 无限个凸函数，$\mathbf{y}\in A$，$f(\mathbf{x},\mathbf{y})$对于$\mathbf{x}$为凸，则$g(\mathbf{x})=\sup_{\mathbf{y}\in A}f(\mathbf{x},\mathbf{y})$为凸

例 12. 点$\mathbf{x}$到集合$\mathcal{C}$的最远距离

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

位移对于范数凸性不会有影响

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

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

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

$$\begin{aligned}f'(\mathbf{x})&=h'(g(\mathbf{x}))\cdot g'(\mathbf{x})\\f''(\mathbf{x})&=h''(g(\mathbf{x}))(g'(\mathbf{x}))^2+h'(g(\mathbf{x}))g''(\mathbf{x})>0\end{aligned}$$

即当满足以下任一条件时，$f(\mathbf{x})$为凸

  - g为凸，h为凸且不降
  - g为凹，h为凸且不增
  - （若定义域非全空间）g为凸，h为凸，扩展值函数$\tilde{h}$不降
  - （若定义域非全空间）g为凹，h为凸，$\tilde{h}$不增

例 13. g为凸，$\exp g(\mathbf{x})$为凸；g为凹，$g>0$，$\log g(\mathbf{x})$为凹；g为凸，$g>0$，$1/g(\mathbf{x})$为凸

例 14. $g(\mathbf{x})=\mathbf{x}^2,\operatorname{dom}g=\mathbb{R}$，$h(y)=0,\operatorname{dom}h=[1,2]$，$f=h\circ g$，注意$\tilde{h}$并非不降！

- 函数透视：$f:\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R},g:\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}_{++}\mapsto\mathbb{R}$

$$g(\mathbf{x},t)=tf\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right),\operatorname{dom}g=\left\{(\mathbf{x},t)\mid\frac{\mathbf{x}}{t}\in\operatorname{dom}f\right\}$$

若$f(\mathbf{x})$为凸，则$g(\mathbf{x},t)$相对于$(\mathbf{x},t)$联合凸

分析. 考虑点$(\mathbf{x},t)$和$(\mathbf{y},s)$，有

$$
\begin{aligned}
f\left(\frac{\theta\mathbf{x}+(1-\theta)\mathbf{y}}{\theta t+(1-\theta)s}\right) =& f\left(\frac{\theta t}{\theta t+(1-\theta)s}\frac{\mathbf{x}}{t}+\frac{(1-\theta)s}{\theta t+(1-\theta)s}\frac{\mathbf{y}}{s}\right) \\
\leq& \frac{\theta t}{\theta t+(1-\theta)s}f\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right)+\frac{(1-\theta)s}{\theta t+(1-\theta)s}f\left(\frac{\mathbf{y}}{s}\right)
\end{aligned}
$$

例 15. 考虑$\mathbb{R}_{++}$上的凸函数$f(x)=-\log x$，其透视函数为

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

在$\mathbb{R}^2_{++}$上为凸函数，称g为关于t和x的**相对熵**。
进而可定义高维的相对熵$\mathbf{u},\mathbf{v}\in\mathbb{R}^n_{++}$

$$g(\mathbf{u},\mathbf{v})=\sum_{i=1}^n u_i\log(u_i/v_i)$$

由于是一系列u_i,v_i相对熵的和，故也是关于$(\mathbf{u},\mathbf{v})$的凸函数。
另一方面可以定义$\mathbf{u},\mathbf{v}\in\mathbb{R}^n_{++}$之间的*Kullback-Leibler/KL*散度

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

由于是$(\mathbf{u},\mathbf{v})$相对熵和线性函数的和，因此也是凸函数

分析. 设

$$f(\mathbf{u})=\sum_{i=1}^n u_i\log u_i \qquad (\nabla f(\mathbf{u}))_i=\log u_i+1$$

由$f(\mathbf{u})$的凸性可得

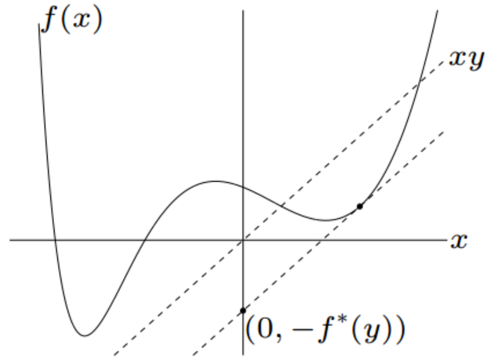
$$D_{KL}(\mathbf{u},\mathbf{v})=f(\mathbf{u})-f(\mathbf{v})-\nabla f(\mathbf{v})^{\mathrm{T}}(\mathbf{u}-\mathbf{v})\geq 0$$

3.4 共轭函数

定义 11 (函数的共轭(conjugate))**.** 设函数$f:\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}, f^\star:\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}$

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

几何意义即函数$f(\mathbf{x})$到不同斜率直线的垂直距离最大值,$\mathbf{y}$可粗略理解为斜率，且$\mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$一定过原点



由于$f^\star(\mathbf{x})$为一系列$\mathbf{y}$的凸函数的逐点上确界，故$f^\star$为凸函数

例 16. 一些共轭函数的例子如下

- 仿射函数：$f(x)=ax+b$，显然当斜率为a时（即平行），共轭函数才有界，故共轭函数定义域为单点集$\{a\}$，且$f^\star(a)=-b$
- 最大熵函数：$f(\mathbf{x})=\sum_{i=1}^n x_i\log x_i$

  分析. 按照定义进行拆分计算即可

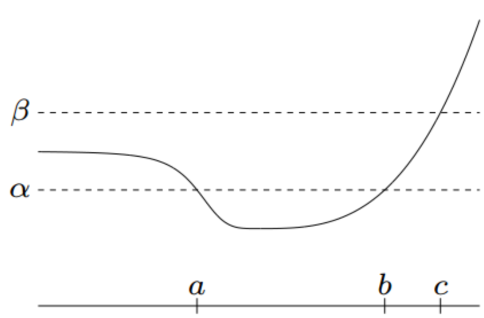
$$\begin{aligned} f^\star(\mathbf{y}) &= \sup_{\mathbf{x}}\sum_{i=1}^n x_i\log x_i \\ &= \sum_{i=1}^n \sup_{x_i}\left(y_ix_i - x_i\log x_i\right) \qquad \text{求导可得} \\ &= \sum_{i=1}^n \mathrm{e}^{y_i-1} \end{aligned}$$

3.5 拟凸函数

定义 12 (α次水平集(α-sub level set))**.** $f:\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}$，$C_\alpha=\{\mathbf{x}\in\operatorname{dom}f\mid f(\mathbf{x})\le\alpha\}$

定义 13 (拟凸函数(quasi-convex))**.** 所有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→单模态/单峰函数

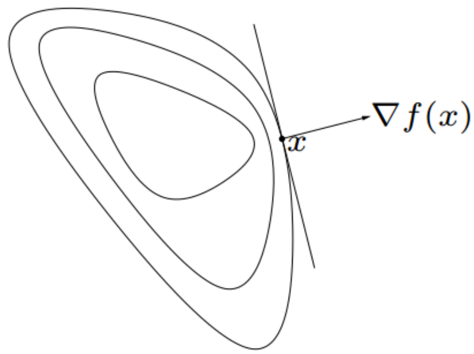


定理 3. 可微拟凸函数判定条件

- 一阶条件：$\mathrm{dom}\, f$为凸集，且

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathrm{dom}\, f: \ f(\mathbf{y}) \leq f(\mathbf{x}) \implies \nabla f(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}(\mathbf{y}-\mathbf{x}) \leq 0$$

当$\nabla f(\mathbf{x}) \neq 0$时，即$\nabla f(\mathbf{x})$在$\mathbf{x}$处定义了水平集$\{\mathbf{y} \mid f(\mathbf{y}) \leq f(\mathbf{x})\}$的支撑超平面

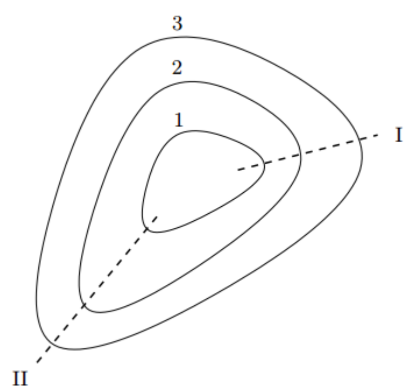


分析. 同样考虑一维的情况，然后通过高维定义进行映射

- 二阶条件：

$$\forall \mathbf{x} \in \mathrm{dom}\, f, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n: \ \mathbf{y}^{\mathrm{T}} \nabla f(\mathbf{x}) = 0 \implies \mathbf{y}^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{y} \geq 0$$

例 17 ((拟)凸函数的判定)**.** 如下图，水平集显然凸（线段都在水平集内），故为拟凸函数，但对于直线II，水平集间距离并不是越来越密，故不是凸函数



凸函数、拟凸函数与凸集联系

- 凸函数定义域为凸集，凸函数一定是拟凸函数
- 凸函数的次水平集为凸集，次水平集为凸集的为拟凸函数

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

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

- 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$h_j : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$
- 定义域$\mathcal{D} = \bigcap_{i=0}^m \operatorname{dom} f_i \cap \bigcap_{i=1}^p \operatorname{dom} h_i$（注意不一定可行）
- 可行解$\mathcal{X} = \{\mathbf{z} \mid f_i(\mathbf{z}) \le 0, h_j(\mathbf{z}) = 0, i = 1,\dots,m, j = 1,\dots,p\}$
- 最优值(primal) $p^\star = \inf\{f_0(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$
- 最优解$\mathbf{x}^\star \iff \forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{z} \in \mathcal{X} :\ f_0(\mathbf{z}) \ge f_0(\mathbf{x}^\star)$
- 最优解集$\mathcal{X}^\star = \{\mathbf{x}^\star \mid f_0(\mathbf{x}^\star) = p^\star, \mathbf{x}^\star \in \mathcal{S}\}$
- ε-次优解集$\mathcal{X}_\varepsilon = \{\mathbf{x} \mid f_0(\mathbf{x}) \le p^\star + \varepsilon, \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$
- 局部最优$\exists R > 0, f_0(\mathbf{x}) = \inf\{f_0(\mathbf{z}) \mid \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \mathbf{z} \in \mathcal{X}, \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\| \le R\}$，即邻域内下确界
- 局部最优解集$\mathbf{x}_{local} = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{x}\text{为局部最优}\}$

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

例 18. 将问题变换为标准型

$$
\begin{array}{lll}
\min & f_0(x) = x_1^2 + x_2^2 & \\
\text{s.t.} & f_1(x) = \dfrac{x_1}{1 + x_2^2} \le 0 & \implies x_1 \le 0 \\
 & h_1(x) = (x_1 + x_2)^2 = 0 & \implies x_1 + x_2 = 0
\end{array}
$$

定理 4. 凸问题局部最优等价于全局最优

分析. 若$\mathbf{x}$为局部最优

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

反证法，设$\mathbf{x}$不是全局最优，$\mathbf{y}$为全局最优，即$f_0(\mathbf{x}) > f_0(\mathbf{y})$

取$\mathbf{z}=(1-\theta)\mathbf{x}+\theta\mathbf{y}$为$\mathbf{x},\mathbf{y}$连线上一点，令$\theta=\frac{R}{2\|\mathbf{y}-\mathbf{x}\|_2}$，使$\mathbf{z}$能够落在$\mathbf{x}$的邻域内

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

由$\|\mathbf{z}-\mathbf{x}\|_2\le R \implies f_0(\mathbf{x})\le f_0(\mathbf{z})$，又结合$f_0(\mathbf{x})>f_0(\mathbf{y})$，有

$$f_0(\mathbf{z})\le\theta f_0(\mathbf{x})+(1-\theta)f_0(\mathbf{y})<\theta f_0(\mathbf{z})+(1-\theta)f_0(\mathbf{z})=f_0(\mathbf{z})$$

左边第一个不等号由凸函数定义，第二个不等号由推导出的条件，故矛盾

定理 5. 对于可微凸目标函数$f_0(\mathbf{x})$，最优解满足以下条件

- 无约束问题$\min f_0(\mathbf{x})$，$\mathbf{x}^\star$为最优解，当且仅当$\mathbf{x}^\star\in\mathcal{X}$，且

$$\nabla f_0(\mathbf{x}^\star)=0$$

分析. 由凸函数的性质

$$\forall\mathbf{x},\mathbf{y}:\ f_0(\mathbf{y})\ge f_0(\mathbf{x})+\langle\nabla f_0(\mathbf{x}),\mathbf{y}-\mathbf{x}\rangle$$

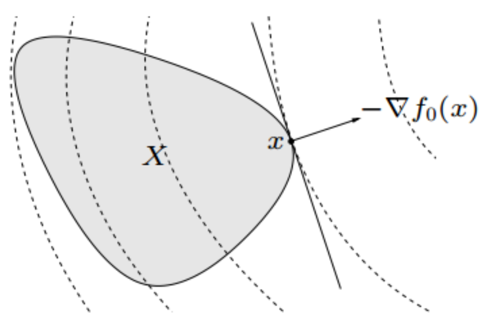
进而

$$f_0(\mathbf{y})\ge f_0(\mathbf{x}^\star)+\langle\nabla f_0(\mathbf{x}^\star),\mathbf{y}-\mathbf{x}\rangle=f_0(\mathbf{x}^\star)$$

- 有约束问题$\min f_0(\mathbf{x}),\ s.t.\,\mathbf{x}\in\mathcal{X}$，$\mathbf{x}^\star$为最优解，当且仅当$\mathbf{x}^\star\in\mathcal{X}$，且

$$\forall\mathbf{y}\in\mathcal{X}:\langle\nabla f_0(\mathbf{x}^\star),\mathbf{y}-\mathbf{x}^\star\rangle\ge 0$$

相当于$-\nabla f_0(\mathbf{x})$在$\mathbf{x}$上定义了可行解集的支撑超平面



例 19 (等式约束). 设f_0可微，

$$\begin{aligned}\min\quad & f_0(\mathbf{x})\\ \text{s.t.}\quad & A\mathbf{x}=\mathbf{b}\end{aligned}$$

分析. 设$\mathbf{x}^\star$为最优解，有$A\mathbf{x}^\star = \mathbf{b}$，则最优解需满足

$$\forall \mathbf{y}, A\mathbf{y} = \mathbf{b}: \langle \nabla f_0(\mathbf{x}^\star), \mathbf{y} - \mathbf{x}^\star \rangle \geq 0$$

对$\mathbf{y}$进行改写

$$\begin{cases} \mathbf{y} = \mathbf{x}^\star + \mathbf{v} \\ A\mathbf{v} = \mathbf{0} \end{cases}, \mathbf{v} \in \operatorname{Nul} A$$

故最优解条件变为

$$\forall \mathbf{v} \in \operatorname{Nul} A: \langle \nabla f_0(\mathbf{x}^\star), \mathbf{v} \rangle \geq 0$$

那么

1. A可逆，$\operatorname{Nul} A = \{\mathbf{0}\}$
2. A不可逆，$\nabla f_0(\mathbf{x}^\star) \perp \operatorname{Nul} A$

例 20 (非负约束)**.** 设f_0可微，

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x} \succeq \mathbf{0} \end{aligned}$$

分析. 最优性条件为

$$\mathbf{x}^\star \succeq \mathbf{0}, \forall \mathbf{y} \succeq \mathbf{0}: \langle \nabla f_0(\mathbf{x}^\star), \mathbf{y} - \mathbf{x}^\star \rangle \geq 0 \iff \langle \nabla f_0(\mathbf{x}^\star), \mathbf{y} \rangle \geq \langle \nabla f_0(\mathbf{x}^\star), \mathbf{x}^\star \rangle$$

1. 若$\nabla f_0(\mathbf{x}^\star) \prec 0$，则存在矛盾（$\mathbf{y} - \mathbf{x}$全为正），故$\nabla f_0(\mathbf{x}^\star) \succeq 0$
2. 取$\mathbf{y} = \mathbf{0}$，有

$$0 \geq \langle \nabla f_0(\mathbf{x}^\star), \mathbf{x}^\star \rangle \implies \sum_{i=1}^{n} (\nabla f_0(\mathbf{x}^\star))_i x_i^\star \leq 0 \implies (\nabla f_0(\mathbf{x}^\star))_i x_i^\star = 0$$

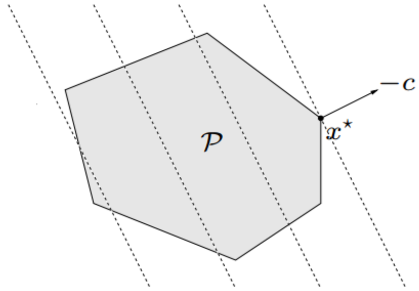
得到**互补松弛条件**，即$\mathbf{x}$与$\nabla f_0(\mathbf{x}^\star)$的稀疏模式必须是互补的
总结来说，最优性条件为

$$\mathbf{x}^\star \succeq \mathbf{0} \qquad \nabla f_0(\mathbf{x}^\star) \succeq \mathbf{0} \qquad (\nabla f_0(\mathbf{x}^\star))_i x_i^\star = 0, i = 1, \ldots, n$$

4.2 线性规划

当目标函数和约束函数都是仿射时，问题称为线性规划(Linear Programming, LP)

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



通过引入松弛变量，对原问题进行变换

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

进一步，将$\mathbf{x}$表示为两个非负变量$\mathbf{x}^+$和$\mathbf{x}^-$的差，即$\mathbf{x}=\mathbf{x}^++\mathbf{x}^-$，得到**标准型线性规划问题**（不等式都是分量的非负约束）

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

例 21 (食谱问题)**.** m种营养元素不小于$b_1,\ldots,b_m$，n种食物，单位含量$a_{1j},\ldots,a_{mj}$，食物量$x_1,\ldots,x_n$，价格$c_1,\ldots,c_n$

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

其中$i=1,\ldots,m,j=1,\ldots,n$

例 22 (线性分数规划). 拟凸优化问题

$$\begin{aligned}\min \quad & f_0(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+d}{\mathbf{e}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+f}, \operatorname{dom}\mathbf{f} = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{e}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+f>0\} \\ \text{s.t.} \quad & G\mathbf{x} \preceq \mathbf{h} \\ & A\mathbf{x} = \mathbf{b}\end{aligned}$$

等价于

$$\begin{aligned}\min_{\mathbf{y},z} \quad & \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}+dz \\ \text{s.t.} \quad & G\mathbf{y}-\mathbf{h}z \preceq 0 \\ & A\mathbf{y}-\mathbf{b}z = 0 \\ & \mathbf{e}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}+fz = 1 \\ & z \geq 0\end{aligned}$$

分析. 证明两个问题等价，P_0与P_1
若$\mathbf{x}$在P_0内可行

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

若$(\mathbf{y},z)$在P_1中可行

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

若$z=0$，x_0为P_0的可行解

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + t\mathbf{y}, t \geq 0$$

$$\lim_{t\to\infty} \frac{\mathbf{c}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_0+t\mathbf{y})+d}{\mathbf{e}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_0+t\mathbf{y})+f} = \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$$

代入看所有条件结论都相同

4.3 二次规划

当凸优化问题的目标函数为（凸）二次型且约束函数为仿射时，该问题称为二次规划(Quadratic Programming, QP)

$$\begin{aligned}\min \quad & \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}P\mathbf{x}+\mathbf{q}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+r,\ P \succ 0 \\ \text{s.t.} \quad & G\mathbf{x} \preceq \mathbf{h} \\ & A\mathbf{x} = \mathbf{b}\end{aligned}$$

其中$P \in \mathbb{S}_+^n, G \in \mathbb{R}^{m\times n}, A \in \mathbb{R}^{p\times n}$

若不等式约束也是（凸）二次型，则成为二次约束二次规划(QCQP)

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}P_0\mathbf{x}+\mathbf{q}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+r_0, P_0 \succ 0 \\
\text{s.t.} \quad & \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}P_i\mathbf{x}+\mathbf{q}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+r_i \leq 0\,, i=1,\ldots,m \\
& A\mathbf{x}=\mathbf{b}
\end{aligned}
$$

其中$P_i \in \mathbb{S}_+^n$

几类优化/规划问题对比如下

	目标函数	不等式约束	等式约束
凸优化	凸	凸	仿射
线性规划	仿射	仿射	仿射
二次规划	二次型	仿射	仿射
二次约束二次规划	二次型	二次型	仿射

例 23 (最小二乘问题的改写)**.**

$$
\begin{aligned}
\min_{\mathbf{x}} \quad & \frac{1}{2}\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2^2 \\
\text{s.t.} \quad & A\mathbf{x}+\mathbf{e}=\mathbf{b}
\end{aligned}
$$

分析. 一范数规范化最小二乘

$$
\min \frac{1}{2}\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2^2+\lambda\|\mathbf{x}\|_1
$$

本来用零范数，但用一范数拟合，改写

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

Basic Pursuit

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

原式很难平衡两者，下式只需考虑$\|\mathbf{x}\|_1$的影响

采用岭回归*(Ridge)*：所有$\mathbf{x}$差距不要太大

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

可得类似的问题改写

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

例 24 (投资组合问题(portfolio optimization))**.** 初始价格$x_1,\dots,x_n$，最终价格$P_1x_1,\dots,P_nx_n$

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

分析. $\bar{P}=\mathbb{E}\left(P\right)$已知，$\Sigma=\mathbb{D}\left(P\right)$

$$\begin{aligned}\min\quad & \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\Sigma\mathbf{x}\\ \text{s.t.}\quad & \mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\geq r_{\min}\\ & \mathbf{1}^T\mathbf{x}=1,\mathbf{x}\succeq\mathbf{0}\end{aligned}$$

二次锥规划问题(SOCP)

$$\begin{aligned}\min\quad & \mathbf{f}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\\ \text{s.t.}\quad & \|A_i\mathbf{x}+\mathbf{b}_i\|_2\leq\mathbf{c}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+\mathbf{d}_i\\ & F\mathbf{x}=\mathbf{g}\end{aligned}$$

4.4 广义不等式约束

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

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

例 25 (谱范数极小化问题)**.** 矩阵多项式$A(\mathbf{x})=A_0+x_1A_1+\cdots+x_nA_n,A_i\in\mathbb{R}^{p\times q}$

$$\min_{\mathbf{x}}\|A(\mathbf{x})\|_2$$

谱范数代表$A(\mathbf{x})$的最大奇异值[10]

分析. 这是一个$q\times q$矩阵不等式约束的凸优化问题

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

[10] 谱范数是诱导范数，F-范数(Frobenias)$\|A(\mathbf{x})\|_F$才算是矩阵意义下的2范数

例 26 (最快分布式线性平均)**.** 图的最速混合*Markov*链

$$\mathbf{x}(t) = P\mathbf{x}(t-1)$$

其中P为邻接矩阵

$$P = \begin{bmatrix} P_{11} & \cdots & P_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{n1} & \cdots & P_{nn} \end{bmatrix}, P\mathbf{1} = \mathbf{1}$$

其中$(i,j) \in E$或$i = j$，$P_{ij} \neq 0$；否则$P_{ij} = 0$
$P = P^{\mathrm{T}}, P_{ij} = P_{ji}$，$P_{ij} > 0, P \succeq 0, P_{ij} \geq 0$

分析. 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

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

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

$$\min \max\{|\lambda_2|, |\lambda_n|\}$$
$$\max\{|\lambda_2|, |\lambda_n|\} = \left\| P - \frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^{\mathrm{T}} \right\|$$

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

4.5 多目标优化

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

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

1. 能找到一个Pareto最优解
2. 遍历$\lambda_1, \ldots, \lambda_q$，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

5.1 拉格朗日对偶

定义 14 (拉格朗日函数(Lagrangian function))**.** $f_i(\mathbf{x})$和$h_j(\mathbf{x})$含义同*4.1*节，前者不等式约束*(*≤ 0*)*，后者等式约束。

$$\begin{aligned} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}) &= f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{p} v_i h_i(\mathbf{x}) \\ &= f_0(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{v}^{\mathrm{T}} \mathbf{h}(\mathbf{x}),\ \operatorname{dom} L = \mathcal{D} \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \end{aligned}$$

定义 15 (拉格朗日乘子(multiplier))**.** 对偶变量即拉格朗日乘子

- 原变量*(primal variable)*：$\mathbf{x}$
- 对偶变量*(dual variable)*：$\boldsymbol{\lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & \lambda_m \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$，$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 & \cdots & v_p \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$

定义 16 (拉格朗日对偶函数)**.**

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

注意遍历域是$\mathcal{D} = \bigcap_{i=0}^{m} \operatorname{dom} f_i \cap \bigcap_{i=1}^{p} \operatorname{dom} h_i$，而不是可行解集$\mathcal{X}$

如果约束f和h为标量，那么v和λ也对应改为标量；如果有多个向量约束，可对应添加对偶变量

有以下两点性质：

- $g(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v})$一定是关于$\boldsymbol{\lambda}$和$\mathbf{v}$的凹函数（关于$\boldsymbol{\lambda}$和$\mathbf{v}$的仿射函数，注意$\mathbf{x}$为常数）
- $\forall \boldsymbol{\lambda} \succeq \mathbf{0}, \forall \mathbf{v}:\ g(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}) \leq p^\star$

定义 17 (对偶(dual)问题)**.**

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

其最优解记为$d^\star$，则$d^\star \leq p^\star$，即给出了原问题*(primal)*的一个**最优下界**

分析. 记$\mathbf{x}^\star$为原问题最优解，由优化问题定义有

$$\sum_{i=1}^{m}\lambda_i f_0(\mathbf{x}^\star)+\sum_{i=1}^{p}v_i h_i(\mathbf{x}^\star)\le 0$$

又$p^\star=f_0(\mathbf{x}^\star)$为原问题最优解，将$\mathbf{x}^\star$代入*Lagrange*函数中

$$L(\mathbf{x}^\star,\boldsymbol{\lambda},\mathbf{v})=f_0(\mathbf{x}^\star)+\left(\sum_{i=1}^{m}\lambda_i f_0(\mathbf{x}^\star)+\sum_{i=1}^{p}v_i h_i(\mathbf{x}^\star)\right)\le p^\star$$

进而推出

$$d^\star=g(\boldsymbol{\lambda}^\star,\mathbf{v}^\star)=\inf_{\mathbf{x}\in\mathcal{D}}L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda}^\star,\mathbf{v}^\star)\le L(\mathbf{x}^\star,\boldsymbol{\lambda}^\star,\mathbf{v}^\star)\le p^\star$$

例 27 (最小二乘)**.**

$$\begin{aligned}\min\quad & \|\mathbf{x}\|_2=\mathbf{x}^\mathrm{T}\mathbf{x}\\ \text{s.t.}\quad & A\mathbf{x}=\mathbf{b}\end{aligned}$$

分析.

$$\begin{aligned}L(\mathbf{x},\mathbf{v})&=\mathbf{x}^\mathrm{T}\mathbf{x}+\mathbf{v}^\mathrm{T}(A\mathbf{x}-\mathbf{b})\\ g(\mathbf{v})&=\inf_{\mathbf{x}\in\mathcal{D}}L(\mathbf{x},\mathbf{v})\\ &=\inf_{\mathbf{x}\in\mathcal{D}}\left(\mathbf{x}^\mathrm{T}\mathbf{x}+\mathbf{v}^\mathrm{T}A\mathbf{x}-\mathbf{v}^\mathrm{T}\mathbf{b}\right)\qquad\text{求最小值相当于求导/求梯度代入}\\ &=\left(-\frac{A^\mathrm{T}\mathbf{v}}{2}\right)^\mathrm{T}\left(-\frac{A^\mathrm{T}\mathbf{v}}{2}\right)+\mathbf{v}^\mathrm{T}A\left(-\frac{A^\mathrm{T}\mathbf{v}}{2}\right)-\mathbf{v}^\mathrm{T}\mathbf{b}\\ &=-\frac{1}{4}\mathbf{v}^\mathrm{T}AA^\mathrm{T}\mathbf{v}-\mathbf{b}^\mathrm{T}\mathbf{v}\end{aligned}$$

补充求梯度：$\nabla_\mathbf{x}L(\mathbf{x},\mathbf{v})=2\mathbf{x}+(\mathbf{v}^\mathrm{T}A)^\mathrm{T}=0\implies\mathbf{x}=-\frac{A^\mathrm{T}\mathbf{v}}{2}$

因而得到对偶问题

$$\max_{\mathbf{v}}\left(-\frac{1}{4}\mathbf{v}^\mathrm{T}AA^\mathrm{T}\mathbf{v}-\mathbf{b}^\mathrm{T}\mathbf{v}\right)$$

例 28 (标准线性规划)**.**

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

分析. 1° 注意$\boldsymbol{\lambda}$前面符号，要化为一般形式

$$L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda},\mathbf{v})=\mathbf{c}^\mathrm{T}\mathbf{x}-\boldsymbol{\lambda}^\mathrm{T}\mathbf{x}+\mathbf{v}^\mathrm{T}(A\mathbf{x}-\mathbf{b})$$

$$
\begin{aligned}
g(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}) &= \inf_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v}) \\
&= \inf_{\mathbf{x}} \left((\mathbf{c} - \boldsymbol{\lambda} + A^{\mathrm{T}}\mathbf{v})^{\mathrm{T}}\mathbf{x} - \mathbf{v}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \right) \\
&\qquad \text{一次式应直接分拆变量和常量，由于}\mathbf{x}\text{可以任取，故会到负无穷} \\
&= \begin{cases} -\infty & \mathbf{c} - \boldsymbol{\lambda} + A^{\mathrm{T}}\mathbf{v} \neq 0 \\ -\mathbf{v}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} & \mathbf{c} - \boldsymbol{\lambda} + A^{\mathrm{T}}\mathbf{v} = 0 \end{cases}
\end{aligned}
$$

由于要极大，故不考虑负无穷部分，得到对偶问题如下

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

2° 考虑对偶问题的对偶，先将对偶问题变为极小化问题

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

$$
L(\mathbf{v}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{v} - \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(A^{\mathrm{T}}\mathbf{v} + \mathbf{c})
$$

$$
\begin{aligned}
g(\boldsymbol{\lambda}) &= \inf_{\mathbf{v}} L(\mathbf{v}, \boldsymbol{\lambda}) \\
&= \inf_{\mathbf{v}} \left((\mathbf{b} - A\boldsymbol{\lambda})^{\mathrm{T}}\mathbf{v} - \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{c} \right) \\
&= \begin{cases} -\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{c} & \mathbf{b} - A\boldsymbol{\lambda} = 0 \\ -\infty & \mathbf{b} - A\boldsymbol{\lambda} \neq 0 \end{cases}
\end{aligned}
$$

得到新的对偶问题

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

会发现，对偶的对偶不一定回去，线性规划才满足

例 29 (二路分划(two-way partitioning))**.** 非凸问题，考虑可行解集有2^n个离散点，将$\{1, \ldots, n\}$分划到两个集合中，W_{ij}是将i, j指派到同一个集合的开销，$-W_{ij}$是将i, j指派到不同集合的开销

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

分析. 变为平方等式约束

$$
\begin{aligned}
L(\mathbf{x},\mathbf{v}) &= \mathbf{x}^{\mathrm{T}}W\mathbf{x} + \sum_{i=1}^{n} v_i(x_i^2-1) \\
g(\mathbf{v}) &= \inf_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x},\mathbf{v}) \\
&= \inf_{\mathbf{x}} \left(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}W\mathbf{x} + \sum_{i=1}^{n} v_i x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} v_i\right) \qquad \text{二次项放对角线} \\
&= \inf_{\mathbf{x}} \left(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\left(W + \mathrm{diag}(\mathbf{v})\right)\mathbf{x} - \mathbf{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{v}\right) \\
&= \begin{cases} -\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{v} & W + \mathrm{diag}(\mathbf{v}) \succeq \mathbf{0} \\ -\infty & otherwise \end{cases}
\end{aligned}
$$

其中

$$
\mathrm{diag}(\mathbf{v}) = \begin{bmatrix} v_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & v_n \end{bmatrix}
$$

得到对偶问题如下

$$
\begin{aligned}
\max_{\mathbf{v}} \quad & -\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{v} \\
\text{s.t.} \quad & W + \mathrm{diag}(\mathbf{v}) \succeq \mathbf{0}
\end{aligned}
$$

取$\mathbf{v} = -\lambda_{\min}(W)\mathbf{1}$，得到

$$
W + \mathrm{diag}(\mathbf{v}) = W - \lambda_{\min}(W)I \succeq 0
$$

由此得到$p^\star$的一个下界

$$
p^\star \geq -\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{v} = n\lambda_{\min}(W)
$$

例 30 (共轭函数)**.**

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f_0(\mathbf{x}) \\
\text{s.t.} \quad & A\mathbf{x} \preceq \mathbf{b} \\
& C\mathbf{x} = \mathbf{d}
\end{aligned}
$$

分析.

$$
\begin{aligned}
L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda},\mathbf{v}) &= f_0(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x}-\mathbf{b}) + \mathbf{v}^{\mathrm{T}}(C\mathbf{x}-\mathbf{d}) \\
&= f_0(\mathbf{x}) + (A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda} + C^{\mathrm{T}}\mathbf{v})^{\mathrm{T}}\mathbf{x} - \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} - \mathbf{v}^{\mathrm{T}}\mathbf{d} \\
g(\boldsymbol{\lambda},\mathbf{v}) &= \inf_{\mathbf{x}} \left(f_0(\mathbf{x}) + (A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda} + C^{\mathrm{T}}\mathbf{v})^{\mathrm{T}}\mathbf{x} - \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} - \mathbf{v}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}\right) \\
&= -\sup_{\mathbf{x}} \left(-(A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda} + C^{\mathrm{T}}\mathbf{v})^{\mathrm{T}}\mathbf{x} - f_0(\mathbf{x})\right) - \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} - \mathbf{v}^{\mathrm{T}}\mathbf{d} \\
&= -f_0^\star(-(A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda} + C^{\mathrm{T}}\mathbf{v})) - \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} - \mathbf{v}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}
\end{aligned}
$$

5.2 对偶间隙

定义 18 (对偶间隙(duality gap))**.** $p^\star - d^\star \geq 0$

- *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**$p^\star \neq d^\star$
2. 对于凸问题，若满足Slater条件，则$p^\star = d^\star$

定义 19 (相对内点(relative interior))**.** *存在一个邻域所有的点都落在集合内，即多元微积分中内点的概念。而相对内点则是考虑仿射包*aff $\mathcal{D}$*的情况*

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

定理 6 (Slater条件)**.** *强对偶对于下列凸问题成立*

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

若它严格可行，即

$$\exists \mathbf{x} \in \operatorname{relint}\mathcal{D},\ s.t.\ f_i(\mathbf{x}) < 0,\ i = 1, \dots, m,\ A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

例 31. *二次规划(QP)*

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

Slater条件$\{\mathbf{x} \mid A\mathbf{x} = \mathbf{b}\}$*非空*

凸问题+Slater条件 $\Longrightarrow$ $p^\star = d^\star$，但有可能不满足Slater条件也依然强对偶，如下面的例子。

例 32.

$$\begin{aligned} \min \quad & x,\ x \in \mathbb{R} \\ \text{s.t.} \quad & x \leq 0 \\ & -x \leq 0 \end{aligned}$$

分析.

$$L(x, \lambda_1, \lambda_2) = x + \lambda_1 x - \lambda_2 x = (1 + \lambda_1 - \lambda_2)x$$

$$g(\lambda_1, \lambda_2) = \inf_{x \in \mathbb{R}} (1 + \lambda_1 - \lambda_2)x = \begin{cases} 0 & 1 + \lambda_1 - \lambda_2 = 0 \\ -\infty & otherwise \end{cases}$$

得到对偶问题

$$
\begin{aligned}
\max_{\lambda_1,\lambda_2} \quad & 0 \\
\text{s.t.} \quad & 1+\lambda_1-\lambda_2=0
\end{aligned}
$$

可以推出$p^\star = d^\star = 0$

例 33 (置信域问题)**.**

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \mathbf{x}^{\mathrm{T}} A\mathbf{x} + \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} \\
\text{s.t.} \quad & \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} \leq 1 \\
& A \nsucceq 0
\end{aligned}
$$

依然可以得到$p^\star = d^\star$

5.3 对偶问题的几种解释

5.3.1 几何解释

考虑问题只有一个约束$f_1(\mathbf{x}) \leq 0$，记$\mathcal{G} = \{(f_1(\mathbf{x}), f_0(\mathbf{x})) \mid \mathbf{x} \in \mathcal{D}\}$，则原问题最优解

$$p^\star = \inf\{t \mid (u,t) \in \mathcal{G}, u \leq 0\}$$

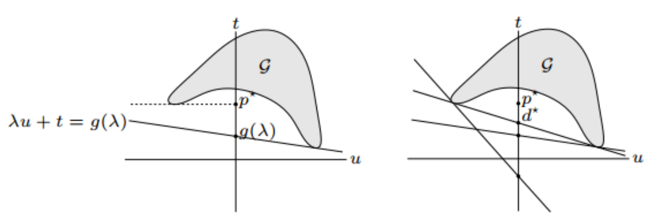
对偶函数如下，相当于给定斜率，在$\mathcal{G}$内找点使$t+\lambda u$最小

$$g(\lambda) = \inf\{t + \lambda u \mid (u,t) \in \mathcal{G}\}$$

对偶问题为

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

左图即在$u \leq 0$的部分找t的最小值，得到$p^\star$；右图得到对偶函数的最大值$d^\star$



注意问题必须要有可行解！

5.3.2 经济学解释

满足原材料约束下，利润最多，价格$\lambda_i \geq 0$，极小化成本

$$g(\boldsymbol{\lambda}) = \inf_{\mathbf{x}} \left(f_0(\mathbf{x}) + \lambda_1 f_1(\mathbf{x}) + \cdots + \lambda_m f_m(\mathbf{x})\right) = \inf_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$$

则$g(\boldsymbol{\lambda})$为对偶函数，市场$p^\star$损失最小（$g(\boldsymbol{\lambda}) \leq \mathbf{p}^\star$）

$$d^\star = \sup_{\boldsymbol{\lambda}} g(\boldsymbol{\lambda})$$

市场平衡点，均衡市场$p^\star = d^\star$，最优/影子价格$\boldsymbol{\lambda}^\star$

5.3.3 多目标优化解释

$$\begin{cases} \min f_0(\mathbf{x}) & 1 \\ \min f_1(\mathbf{x}) & \lambda_1 \\ \vdots & \vdots \\ \min f_m(\mathbf{x}) & \lambda_m \end{cases}$$

$$\min_{\mathbf{x}} \left(f_0(\mathbf{x}) + \lambda_1 f_1(\mathbf{x}) + \cdots + \lambda_m f_m(\mathbf{x})\right)$$

5.3.4 鞍点(saddle point)解释

考虑函数$f(\mathbf{w}, \mathbf{z}), \mathbf{w} \in \mathcal{W}, \mathbf{z} \in \mathcal{Z}$ 极小极大不等式 [11]

$$\sup_{\mathbf{z}\in\mathcal{Z}} \inf_{\mathbf{w}\in\mathcal{W}} f(\mathbf{w}, \mathbf{z}) \leq \inf_{\mathbf{w}\in\mathcal{W}} \sup_{\mathbf{z}\in\mathcal{Z}} f(\mathbf{w}, \mathbf{z})$$

定义 20 (鞍点). *若有$(\tilde{\mathbf{w}}, \tilde{\mathbf{z}})$使得*

$$(\tilde{\mathbf{w}}, \tilde{\mathbf{z}}) = \arg\max_{\mathbf{z}\in\mathcal{Z}} \min_{\mathbf{w}\in\mathcal{W}} f(\mathbf{w}, \mathbf{z})$$

$$(\tilde{\mathbf{w}}, \tilde{\mathbf{z}}) = \arg\min_{\mathbf{w}\in\mathcal{W}} \max_{\mathbf{z}\in\mathcal{Z}} f(\mathbf{w}, \mathbf{z})$$

则$(\tilde{\mathbf{w}}, \tilde{\mathbf{z}})$为鞍点，即下面不等式成立

$$\forall \mathbf{z} \in \mathcal{Z}, \mathbf{w} \in \mathcal{W}: \ f(\tilde{\mathbf{w}}, \mathbf{z}) \leq f(\tilde{\mathbf{w}}, \tilde{\mathbf{z}}) \leq f(\mathbf{w}, \tilde{\mathbf{z}})$$

[11] 补充证明：$\mathbf{x}_0$和$\mathbf{y}_0$可看作常量

$$f(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0) \leq \sup_{\mathbf{y}} f(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}), \ \forall \mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0 \qquad \text{确保在}\mathbf{x}\text{方向上的单调性}$$

$$\inf_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}_0) \leq \inf_{\mathbf{x}} \sup_{\mathbf{y}} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \ \forall \mathbf{y}_0$$

$$\sup_{\mathbf{y}} \inf_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq \inf_{\mathbf{x}} \sup_{\mathbf{y}} f(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

相当于从一个方向望过去是最小，从另一个方向望过去是最大

考虑拉格朗日函数

$$
\begin{aligned}
&L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda}) = f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(\mathbf{x}) \\
\Longrightarrow\ &\sup_{\boldsymbol{\lambda}\succeq\mathbf{0}} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda}) = \sup_{\boldsymbol{\lambda}\succeq\mathbf{0}} \left\{ f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(\mathbf{x}) \right\} = \begin{cases} f_0(\mathbf{x}) & f_i(\mathbf{x}) \le 0, i = 1,\ldots,m \\ +\infty & \text{otherwise} \end{cases} \\
\Longrightarrow\ &p^\star = \inf_{\mathbf{x}} \{ f_0(\mathbf{x}) \mid f_i(\mathbf{x}) \le 0, i = 1,\ldots,m \} = \inf_{\mathbf{x}} \sup_{\boldsymbol{\lambda}\succeq\mathbf{0}} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda})
\end{aligned}
$$

由极小极大不等式可得

$$
d^\star = \sup_{\boldsymbol{\lambda}\succeq 0} \inf_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda}) \le \inf_{\mathbf{x}} \sup_{\boldsymbol{\lambda}\succeq 0} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda}) = p^\star
$$

鞍点在无约束优化问题中是很糟糕的点（所有方向上梯度为0），但是有约束优化问题中则是非常好的点。

定理 7. $(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\boldsymbol{\lambda}})$为拉格朗日函数鞍点 $\Longleftrightarrow$ $p^\star = d^\star$，且$(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\boldsymbol{\lambda}})$为原对偶问题的最优解

$$
\begin{cases}
\tilde{\mathbf{x}} = \arg\inf_{\mathbf{x}} \sup_{\boldsymbol{\lambda}\succeq\mathbf{0}} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda}) \\
\tilde{\boldsymbol{\lambda}} = \arg\max_{\boldsymbol{\lambda}\succeq\mathbf{0}} \inf_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda})
\end{cases}
$$

分析. 右推左，$(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\boldsymbol{\lambda}})$为原对偶问题可行解

$$
f_i(\tilde{\mathbf{x}}) \le 0, i = 1,\ldots,m, \tilde{\boldsymbol{\lambda}} \succeq \mathbf{0}
$$

因$p^\star = d^\star$，有

$$
\begin{aligned}
f_0(\tilde{\mathbf{x}}) &= g(\tilde{\boldsymbol{\lambda}}) \\
&= \inf_{\mathbf{x}} \left\{ f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \tilde{\lambda}_i f_i(\mathbf{x}) \right\} && \text{最小值必然比其他值都小} \\
&\le f_0(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^{m} \tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) && \text{约束条件} \\
&\le f_0(\tilde{\mathbf{x}})
\end{aligned}
$$

进而不等号都得为等号，还可得到

1. $\inf_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x},\tilde{\boldsymbol{\lambda}}) = L(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\boldsymbol{\lambda}})$（由第一条不等式）
2. $f_0(\tilde{\mathbf{x}}) = \sup_{\boldsymbol{\lambda}\succeq\mathbf{0}} \left\{ f_0(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) \right\} = \sup_{\boldsymbol{\lambda}\succeq\mathbf{0}} L(\tilde{\mathbf{x}},\boldsymbol{\lambda}) = L(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\boldsymbol{\lambda}})$（由第二条不等式）

故右推左成立

5.4 一般优化问题的对偶理论

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f_0(\mathbf{x}) \\
\text{s.t.} \quad & f_i(\mathbf{x}) \le 0, \quad i = 1, \dots, m \\
& h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, p
\end{aligned}
$$

不一定是凸问题，但$p^\star = d^\star$，最优解满足什么条件？

设其对偶问题为下式

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

分析. 设$(\mathbf{x}^\star, \boldsymbol{\lambda}^\star, \mathbf{v}^\star)$为原对偶最优解，则$(\mathbf{x}^\star, \boldsymbol{\lambda}^\star, \mathbf{v}^\star)$为原对偶可行解

$$
f_i(\mathbf{x}^\star) \le 0, i = 1, \dots, m, \quad h_i(\mathbf{x}^\star) = 0, i = 1, \dots, p, \quad \boldsymbol{\lambda}^\star \ge 0
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{p}^\star = \mathbf{d}^\star \implies f_0(\mathbf{x}^\star) &= g(\boldsymbol{\lambda}^\star, \mathbf{v}^\star) \\
&= \inf_{\mathbf{x}} \left\{ f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^\star f_i(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{p} v_i^\star h_i(\mathbf{x}) \right\} \qquad \text{将inf拆掉} \\
&\le f_0(\mathbf{x}^\star) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^\star f_i(\mathbf{x}^\star) + \sum_{i=1}^{p} v_i^\star h_i(\mathbf{x}^\star) \qquad \text{原问题约束} \\
&\le f_0(\mathbf{x}^\star)
\end{aligned}
$$

同上理，不等号全取等，有

1. $\lambda_i^\star f_i(\mathbf{x}^\star) = 0, \forall i = 1, \dots, m$
2. $\mathbf{x}^\star = \arg\min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^\star, \mathbf{v}^\star)$

若f_0, f_i, h_i均可微，则必要条件为

$$
\left. \frac{\partial L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^\star, \mathbf{v}^\star)}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^\star} = 0
$$

定理 8 (KKT条件)**.** *假设$f_0, \dots, f_m, h_1, \dots, h_p$可微，无论这些函数是否凸，最优解必须满足KKT(Karush-Kuhn-Tucker, KKT)条件*

- *原始可行性(primal feasibility)*：$f_i(\mathbf{x}^\star) \le 0, i = 1, \dots, m$
- *原始可行性(primal feasibility)*：$h_i(\mathbf{x}^\star) = 0, i = 1, \dots, p$
- *对偶可行性(dual feasibility)*：$\boldsymbol{\lambda}^\star \succeq \mathbf{0}$
- *对偶互斥条件(complementarity slackness)*：$\lambda_i^\star f_i(\mathbf{x}^\star) = 0, i = 1, \dots, m$
- *稳定性(stablity)*：$\left. \frac{\partial L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^\star, \mathbf{v}^\star)}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^\star} = 0$

*若原问题为凸，则KKT条件为最优解的***充要条件**

分析. 必要性已证，证明充分性

若$(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\mathbf{v}})$满足$KKT$条件 $\Longrightarrow$ $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\mathbf{v}})$最优，其中，$\tilde{\mathbf{x}}$为原问题可行解，$(\tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\mathbf{v}})$为对偶问题可行解

证明思路：$g(\tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\mathbf{v}}) = f_0(\tilde{\mathbf{x}})$

$L(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\mathbf{v}})$为$\mathbf{x}$的凸函数，则$\tilde{\mathbf{x}}$使$L(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\mathbf{v}})$最小

$$\begin{aligned} g(\tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\mathbf{v}}) &= \inf_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\mathbf{v}}) \\ &= L(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\mathbf{v}}) \\ &= f_0(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^{m} \tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^{p} \tilde{v}_i h_i(\tilde{\mathbf{x}}) \\ &= f_0(\tilde{\mathbf{x}}) \end{aligned}$$

例 34 (Water-filling)**.** 共n个信道*(channel)*

$$\textit{source} \longleftrightarrow \textit{destination}$$

$$\begin{aligned} \min \quad & -\sum_{i=1}^{n} \log(\alpha_i + x_i), \alpha_i > 0 \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x} \succeq \mathbf{0} \\ & \mathbf{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} = 1 \end{aligned}$$

分析. 拉格朗日函数，注意$\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$项符号

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, v) = -\sum_{i=1}^{n} \log(\alpha_i + x_i) - \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + v(\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} - 1)$$

KKT条件如下

- 原始可行性：$\mathbf{x}^\star \succeq 0$
- 原始可行性：$\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}^\star = 1$
- 对偶可行性：$\boldsymbol{\lambda}^\star \succeq \mathbf{0}$
- 对偶互斥条件：$\lambda_i^\star x_i^\star = 0, \forall i$
- 稳定性条件：

$$\left(\frac{\partial L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, v)}{\partial \mathbf{x}}\right)_i = -\frac{1}{\alpha_i + x_i} - \lambda_i + v$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\alpha_i + x_i^\star} - \lambda_i^\star + v^\star = 0, \forall i \\ \Longrightarrow & \; v^\star = \frac{1}{\alpha_i + x_i^\star} + \lambda_i^\star, i = 1, \ldots, n \\ \Longrightarrow & \; v^\star \geq \frac{1}{\alpha_i + x_i^\star} \end{aligned}$$

或消去λ_i，由对偶互斥条件有

$$x_i^\star \left(v^\star - \frac{1}{\alpha_i + x_i^\star} \right) = 0$$

若$v^\star \geq \frac{1}{\alpha_i} > \frac{1}{\alpha_i + x_i^\star}$，则

$$x_i^\star = 0,\ \lambda_i = v - \frac{1}{\alpha_i}$$

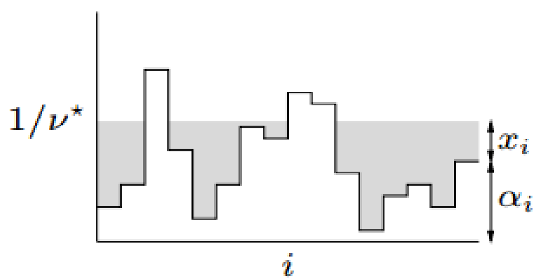
若$\frac{1}{\alpha_i + x_i^\star} \leq v^\star < \frac{1}{\alpha_i}$，则

$$\begin{aligned} x_i^\star &> 0 \\ v^\star &= \frac{1}{\alpha_i + x_i^\star} \\ x_i^\star &= \frac{1}{v^\star} - \alpha_i \end{aligned}$$

综上有

$$x_i^\star = \max \left\{ 0, \frac{1}{v^\star} - \alpha_i \right\}$$

结合$\sum_i x_i^\star = 1$，即注水算法



n个块，每块高度为α_i，用单位水量填充面积，最终的高度为$1/v^\star$

定义 21 (扰动(perturbed)问题)**.**

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s.t.} \quad & f(x) \leq u_i\,, \quad i = 1, \ldots, m \\ & h_i(x) = w_i, \quad i = 1, \ldots, p \end{aligned}$$

新问题的最优解记为$p^\star(\mathbf{u}, \mathbf{w})$

定理 9. 若原始问题为凸，则$p^\star(\mathbf{u}, \mathbf{w})$是$(u, w)$的凸函数

定理 10. 设$(\boldsymbol{\lambda}^\star, \mathbf{v}^\star)$为未被扰动的问题的对偶问题的最优解，则

$$\forall \mathbf{u}, \mathbf{w}:\ p^\star(\mathbf{u}, \mathbf{w}) \geq p^\star(0, 0) - \boldsymbol{\lambda}^{\star\mathrm{T}} \mathbf{u} - \mathbf{v}^{\star\mathrm{T}} \mathbf{w}$$

分析. 由强对偶性有

$$\begin{aligned}p^\star(0,0) = g(\boldsymbol{\lambda}^\star, \mathbf{v}^\star) &\le f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^\star f_i(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{p} \mathbf{v}^\star h_i(\mathbf{x}) \qquad g(\boldsymbol{\lambda}^\star, \mathbf{v}^\star)\text{定义} \\ &\le f_0(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\star\mathrm{T}}\mathbf{u} + \mathbf{v}^{\star\mathrm{T}}\mathbf{w} \qquad \boldsymbol{\lambda}^\star \succeq \mathbf{0}\end{aligned}$$

定理 11. 若原始问题为凸，对偶间隙为*0*，$p^\star(\mathbf{u}, \mathbf{w})$在$(0,0)$可微，则

$$\boldsymbol{\lambda}_i^\star = -\frac{\partial p^\star(0,0)}{\partial u_i} \qquad \mathbf{v}_i^\star = -\frac{\partial p^\star(0,0)}{\partial w_i}$$

6 优化算法

6.1 简介

例 35.

$$\begin{aligned}\min \quad & f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & A\mathbf{x} = \mathbf{b}\end{aligned}$$

分析. *1°* 罚函数法*(penalty function)*

$$\min F(\mathbf{x}) := f_0(\mathbf{x}) + \frac{\lambda}{2}\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2$$

$$\tilde{\mathbf{x}} = \arg\min_{\mathbf{x}} F \implies \nabla f_0(\tilde{\mathbf{x}}) + \lambda A^{\mathrm{T}}(A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = 0$$

2° 拉格朗日函数方法

$$\begin{aligned}& L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = f_0(\mathbf{x}) + \mathbf{v}^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x} - \mathbf{b}) \\ \implies & g(\mathbf{v}) = \inf_{\mathbf{x}} \left(f_0(\mathbf{x}) + \mathbf{v}^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x} - \mathbf{b})\right) \\ & \mathbf{v} = \lambda(A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) \\ \implies & g(\lambda(A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b})) = \inf_{\mathbf{x}} \left(f_0(\mathbf{x}) + \lambda(A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b})^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x} - \mathbf{b})\right)\end{aligned}$$

例 36.

$$\begin{aligned}\min \quad & f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & A\mathbf{x} \ge \mathbf{b}\end{aligned}$$

分析. *log-barrier*函数

$$\min f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} u_i \log(a_i^{\mathrm{T}}\mathbf{x} - b_i)$$

考虑这样的问题，$f_0(\mathbf{x})$可微，凸，无约束，即

$$\min \quad f_0(\mathbf{x})$$

1. 所有算法都是迭代的
$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\mathbf{d}^{(k)}$$
$\alpha \geq 0$为步长，$\mathbf{d}$为方向，所有算法本质上都是选择方向与步长的问题
2. 如何选择步长$\alpha^{(k)}$
$$\begin{cases} \text{确定步长} & \begin{cases} \text{固定步长} \\ \text{变化步长（递减步长）} \end{cases} \\ \text{搜索步长} \end{cases}$$
最优步长：线搜索问题，给定当前点及方向
$$\alpha^{(k)} = \arg\min_{\alpha \geq 0} f_0(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha\mathbf{d}^{(k)})$$
   (a) 黄金分割法(0.618法)/优选法求解线搜索问题：这样做的采样复杂度很低，之前算过的点很容易被再用！
   (b) 不精确线搜索(Armijo Rule)/回溯直线搜索：一阶泰勒展开

Algorithm 1 不精确线搜索

1: $\alpha^{(k)} = \alpha_{\max}, \mu \in (0, 1/2)$
2: **if** $f_0(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\mathbf{d}^{(k)}) > f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \mu\alpha^{(k)}\langle\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}), \mathbf{d}^{(k)}\rangle$ **then**
3: $\quad\alpha^{(k+1)} \leftarrow \alpha^{(k)}\beta, \beta \in (0, 1)$
4: **else**
5: $\quad$Stop

而实际上没有必要求最优步长，在该方向上的差异并没有太大
3. 关键问题是选方向
而针对不同的优化问题，核心关键点都在于求解KKT条件！

6.2 梯度下降法

取$\mathbf{d}^{(k)} = -\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})$，则迭代格式为

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha^{(k)}\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})$$

关注下面几个问题

- 能否收敛

- 收敛到哪里
- 收敛速度

6.2.1 前提假设

0. 基本假设：f为可微的凸函数，

$$\mathbf{x}^\star = \arg\min_{\mathbf{x}} f_0(\mathbf{x})$$

存在且有限，$f_0(\mathbf{x}^\star)$有限

1. Lipschitz连续梯度[12]

$$\exists L \geq 0, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y}: \ \|\nabla f_0(\mathbf{x}) - \nabla f_0(\mathbf{y})\| \leq L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$$

等价定义：

a. 若$f_0(\mathbf{x})$二阶可微

$$\forall \mathbf{x}: \ \nabla^2 f_0(\mathbf{x}) \preceq LI$$

b. 下界

$$\langle \nabla f_0(\mathbf{x}) - \nabla f_0(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle \geq \frac{1}{L} \|\nabla f_0(\mathbf{x}) - \nabla f_0(\mathbf{y})\|^2$$

c. 上界

$$\langle \nabla f_0(\mathbf{x}) - \nabla f_0(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle \leq L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2$$

d. 当函数为凸时

$$0 \leq f_0(\mathbf{y}) - f_0(\mathbf{x}) - \langle \nabla f_0(\mathbf{x}), \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle \leq \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$$

2. 强凸性(strong convexity)：即加了正则化项

$$\exists \mu > 0, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y}: \ f_0(\mathbf{y}) \geq f_0(\mathbf{x}) + \langle \nabla f_0(\mathbf{x}), \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle + \frac{\mu}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$$

二阶可微情况下的等价定义

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

例 37. *判断下列函数是否符合Lipschitz连续梯度及强凸性条件*

$$\begin{array}{lll} f_0(\mathbf{x}) = \mathbf{1}^\mathrm{T}\mathbf{x} & L = 0 & \text{✗} \\ f_0(\mathbf{x}) = \dfrac{1}{2}\|\mathbf{x}\|_2^2 & L = 1 & \mu = 1 \\ f_0(\mathbf{x}) = \dfrac{1}{4}\|\mathbf{x}\|_2^4 & \text{✗} & \text{✗} \end{array}$$

区别于严格凸(strictly convex)，强凸一定是严格凸

定理 12. *严格凸函数只有一个最小值点*

[12] 一些基本性质可见https://xingyuzhou.org/blog/notes/Lipschitz-gradient

分析. 反证法，假设$\mathbf{x},\mathbf{y}$均为最小值点，且$\mathbf{x}\neq\mathbf{y}$

$$f_0(\mathbf{y}) > f_0(\mathbf{x}) + \langle \nabla f_0(\mathbf{x}), \mathbf{x}-\mathbf{y}\rangle = f_0(\mathbf{x})$$

与$f_0(\mathbf{y})$的最小值矛盾

定理 13. 若$f_0(\mathbf{x})$有*Lipschitz*连续梯度，常数L，若$\alpha\in(0,\frac{2}{L})$，则有

$$\forall \mathbf{x}^\star:\ f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - f_0(\mathbf{x}^\star) \le \frac{2(f_0(\mathbf{x}^{(0)}) - f_0(\mathbf{x}^\star))\left\|\mathbf{x}^{(0)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2}{2\left\|\mathbf{x}^{(0)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2 + k\alpha(2-L\alpha)(f_0(\mathbf{x}^{(0)})-f_0(\mathbf{x}^\star))}$$

即以$O(\frac{1}{k})$速度收敛

分析. 1° 点的单调性：与任意$\mathbf{x}^\star$的距离在缩小

$$\forall \mathbf{x}^\star:\ \left\|\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2 \le \left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2$$

$$\begin{aligned}
LHS &= \left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star-\alpha\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \\
&= \left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2 - 2\alpha\langle \mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star, \nabla f_0(\mathbf{x}^k)\rangle + \alpha^2\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\| \\
&\le \left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2 + \alpha(\alpha-\frac{2}{L})\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \qquad \text{注意到}\nabla f_0(\mathbf{x}^\star)=0\text{，利用}Lipschitz\text{连续梯度} \\
&\le \left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2
\end{aligned}$$

2° 函数值的单调性：$f_0(\mathbf{x}^{(k+1)})\le f_0(\mathbf{x}^{(k)})$（注意下降可能非常缓慢，并不一定收敛）

$$\begin{aligned}
f_0(\mathbf{x}^{(k+1)}) &\le f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \langle \nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}), \mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k)}\rangle + \frac{L}{2}\left\|\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k)}\right\|^2 \\
&= f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \alpha\left(1-\frac{L\alpha}{2}\right)\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \\
&\le f_0(\mathbf{x}^{(k)})
\end{aligned}$$

3° 函数值的充分下降（即证明收敛性）

$$f_0(\mathbf{x}^{(k+1)}) - f_0(\mathbf{x}^\star) \le f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - f_0(\mathbf{x}^\star) - \omega\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2$$

$$\begin{aligned}
f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - f_0(\mathbf{x}^\star) &\le \langle f_0(\mathbf{x}^{(k)}), \mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star\rangle \\
&= \langle \nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \nabla f_0(\mathbf{x}^\star), \mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star\rangle \\
&\le \left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \nabla f_0(\mathbf{x}^\star)\right\|\left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star\right\| \qquad Cauchy \\
&\le \left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|\left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star\right\|
\end{aligned}$$

$$\Delta^{(k+1)} \leq \Delta^{(k)} - \frac{\omega}{\left\|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^\star\right\|^2}(\Delta^{(k)})^2$$

$$\frac{1}{\Delta^{(k+1)}} \leq \frac{1}{\Delta^{(k+1)}} - \frac{\omega}{\left\|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^\star\right\|^2}\frac{\Delta^{(k)}}{\Delta^{(k+1)}}$$

错位相消可得结论$O(\frac{1}{k})$收敛速度

定理 14. 若f_0有$Lipschitz$连续梯度，常数L，强凸函数n，步长$\alpha \in (0, \frac{2}{\mu+L}]$，则

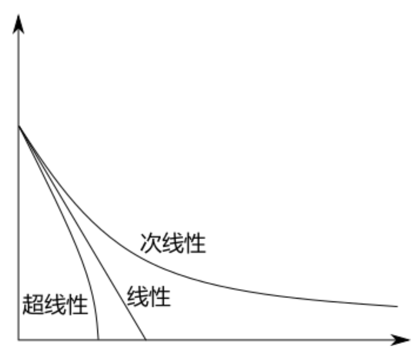
$$\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\right\|^2 \leq \left(1 - \frac{2\alpha\mu L}{\mu + L}\right)^k \left\|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^\star\right\|^2$$

分析.

$$\begin{aligned}
\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\right\|^2 &= \left\|\mathbf{x}^{(k)} - \alpha\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \mathbf{x}^\star\right\|^2 \\
&= \left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\right\|^2 - 2\alpha\langle\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star, \nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\rangle + \alpha^2\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \\
&\leq \left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\right\|^2 - \frac{2\alpha}{\mu + L}\left\|\nabla f_0(\mathbf{x})\right\|^2 + \alpha^2\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \qquad \text{内积不等式} \\
&\leq RHS
\end{aligned}$$

$$1 - \frac{4\mu L}{(\mu + L)^2} = \frac{(L-\mu)^2}{(L+\mu)^2} = \frac{\left(\frac{L}{\mu} - 1\right)^2}{\left(\frac{L}{\mu} + 1\right)^2}$$

L为$Hessian$矩阵的最大特征值，μ为$Hessian$矩阵的最小特征值，则$\frac{L}{\mu}$为该矩阵的**条件数**



不同收敛速度

例 38.

$$f_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\left\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\right\|_2^2$$

分析.

$$\mathbf{x}^{(0)} \to \mathbf{x}^{(1)}$$

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} - \alpha(\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{b}) = \mathbf{b}$$

条件数糟糕的病态矩阵收敛速度是非常糟糕的，会出现zig-zag的情况，如下面的矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 10^{-4} \end{bmatrix}$$

可以通过预处理(precondition)来解决条件数糟糕的问题

6.2.2 收敛性分析

$f_0(\mathbf{x})$，Lipschitz连续梯度(L)，强凸(μ)，考虑**函数值收敛性**

$$\begin{aligned}
\tilde{f}_0(\alpha^{(k)}) &= f_0(\mathbf{x}^{(k+1)}) = f_0(\mathbf{x}^{(k)} - \alpha^{(k)}\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})) \\
&\le f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \langle \nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}), -\alpha^{(k)}\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\rangle + \frac{L}{2}\left\|-\alpha^{(k)}\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \\
&= f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \frac{L(\alpha^{(k)})^2 - 2\alpha^{(k)}}{2}\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2
\end{aligned}$$

- $\alpha^{(k)} = \alpha_{exact}^{(k)}$精确线搜索

$$\begin{aligned}
&\tilde{f}_0(\alpha_{exact}^{(k)}) \le \tilde{f}_0\left(\frac{1}{L}\right) = f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \frac{1}{2L}\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \\
\Longrightarrow\ &\tilde{f}_0(\alpha_{exact}^{(k)}) - f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - f_0(\mathbf{x}^\star) - \frac{1}{2L}\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \le \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)(f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + f_0(\mathbf{x}^\star))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_0(\mathbf{x}^\star) &\ge f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \langle \nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}), \mathbf{x}^\star - \mathbf{x}^{(k)}\rangle + \frac{\mu}{2}\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\right\|^2 \\
&\ge f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \frac{\mu}{2}\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\right\|^2 - \frac{1}{2\mu}\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 + \frac{\mu}{2}\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\right\|^2 \qquad ab \ge -\frac{\mu}{2}a^2 - \frac{1}{2\mu}b^2 \\
&= f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \frac{1}{2\mu}\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2
\end{aligned}$$

$$f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - f_0(\mathbf{x}^\star) \le \frac{1}{2\mu}\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2$$

- Armijo Rule

$$\tilde{f}_0(\alpha^{(k)}) = f_0(\mathbf{x}^{(k+1)}) \le f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \frac{L(\alpha^{(k)})^2 - 2\alpha^{(k)}}{2}\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2$$

$$\tilde{f}_0(\alpha^{(k)}) = f_0(\mathbf{x}^{(k+1)}) \le f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \nabla\alpha^{(k)}\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2$$

首先说明，若$0 \le \alpha^{(k)} \le \frac{1}{L}$时，

$$\tilde{f}_0(\alpha^{(k)}) \le f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \gamma\alpha^{(k)}\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2$$

当$\alpha^{(k)} \in [0, \frac{1}{2}]$时，

$$-\alpha^{(k)} + \frac{L}{2}(\alpha^{(k)})^2 \le -\frac{\alpha^{(k)}}{2} \iff \frac{L}{2}(\alpha^{(k)})^2 \le \frac{\alpha^{(k)}}{2} \iff L\cdot\alpha^{(k)} \le 1$$

$$
\begin{aligned}
f_0(\mathbf{x}^{(k+1)}) &\leq f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \frac{L(\alpha^{(k)})^2 - 2\alpha^{(k)}}{2} \left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \\
&\leq f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \frac{\alpha^{(k)}}{2} \left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \\
&\leq f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \gamma\alpha^{(k)} \left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
f_0(\mathbf{x}^{(k+1)}) &\leq f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - \min\left\{\gamma\alpha_{\max}, \frac{\gamma\beta}{L}\right\} \left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \\
\implies f_0(\mathbf{x}^{(k+1)}) - f_0(\mathbf{x}^\star) &\leq \left(1 - \min\left\{2\mu\gamma\alpha_{\max}, \frac{2\mu\gamma\beta}{L}\right\}\right)(f_0(\mathbf{x}^{(k)}) - f_0(\mathbf{x}^\star))
\end{aligned}
$$

6.2.3 梯度下降法的解释

- 解释一

$$
\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha^{(k)}\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})
$$

将f_0在$\mathbf{x}^{(k)}$处进行一阶Taylor展开

$$
f_0(\mathbf{x}) \approx f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \langle\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}), \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}\rangle + \frac{1}{2\alpha^{(k)}}\left\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}\right\|^2
$$

求梯度

$$
\begin{aligned}
&\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \frac{1}{\alpha^{(k)}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}) = 0 \\
\implies &\alpha^{(k)}\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)} = 0 \\
\implies &\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha^{(k)}\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})
\end{aligned}
$$

- 解释二

$$
f_0(\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{v}) \approx f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \langle\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}), \mathbf{v}\rangle
$$

$$
\mathbf{d}^{(k)} = \arg\min_{\mathbf{v}}\{\langle\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}), \mathbf{v}\rangle \mid \|\mathbf{v}\| = 1\}
$$

若采用2-范数，可得标准化的负梯度方向(normalized negative gradient)

$$
\mathbf{d}^{(k)} = \frac{-\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})}{\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|_2}
$$

通过改变不同的范数，有不同的特性

进而有**坐标下降法/交替极小化**(coordinate descent/alternating direction)

$$
\mathbf{d}^{(k)} = \mathbf{e}_{k \mod n}
$$

注意，这里$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$，$n \mod n = n$

6.3 非光滑优化问题

6.3.1 次梯度法

同样考虑f_0连续，凸，不可微

$$\min\ f_0(\mathbf{x})$$

梯度**下降**法→次梯度(subgradient)法[13]

定义 22 (次梯度)**.** *若$g_0(\mathbf{x}) \in \partial f_0(\mathbf{x})$（注意凹函数则对应的是supgradient）为$f_0(\mathbf{x})$的一个次梯度，则*

$$\forall \mathbf{y}:\ f_0(\mathbf{y}) \geq f_0(\mathbf{x}) + \langle g_0(\mathbf{x}), \mathbf{y}-\mathbf{x}\rangle$$

即过该点的直线都要在整条曲线的下方，则该直线的斜率范围为次梯度取值

如$f(\mathbf{x}) = |\mathbf{x}|$在零点处次梯度为$[-1,1]$。

次梯度法迭代格式如下

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha^{(k)} g_0(\mathbf{x}^{(k)})$$

只要有$0 \in \partial f_0(\mathbf{x}_0)$就有最优解$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$

对于梯度法来说，关键在于选择步长

- 固定步长$\alpha^{(k)} = \alpha$
- 不可加但平方可加，如$\frac{1}{k}$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \alpha^{(k)} = \infty \qquad \sum_{k=0}^{\infty} (\alpha^{(k)})^2 < \infty$$

- 不可加递减，如$\frac{1}{\sqrt{k}}$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \alpha^{(k)} = 0 \qquad \lim_{k\to\infty} \alpha^{(k)} \to 0$$

考虑次梯度法的**收敛速度**

$$\inf_{i=0,\ldots,k} (f_0(\mathbf{x}^{(i)}) - f_0(\mathbf{x}^\star))$$

假设函数Lipschitz连续

$$\exists G > 0, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y}:\ \|f_0(\mathbf{x}) - f_0(\mathbf{y})\| \leq G\,\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|$$

[13]如果激活函数为非光滑的（如ReLU），那么出来的函数也是非光滑的，就要用次梯度

对任意最优解$\mathbf{x}^\star$，有

$$
\begin{aligned}
&\left\|\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2=\left\|\mathbf{x}^{(k)}-\alpha^{(k)}g_0(\mathbf{x}^{(k)})-\mathbf{x}^\star\right\|^2\\
&=\left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2-2\langle\alpha^{(k)}g_0(\mathbf{x}^{(k)}),\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star\rangle+(\alpha^{(k)})^2\left\|g_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2 \qquad \text{拆平方}\\
&\leq\left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2-2(\alpha^{(k)})^2(f_0(\mathbf{x}^{(k)})-f_0(\mathbf{x}^\star))+(\alpha^{(k)})^2G^2 \qquad \text{多次迭代}\\
&\implies\left\|\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2\leq\left\|\mathbf{x}^{(0)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2-2\sum_{i=0}^k\alpha^{(i)}(f_0(\mathbf{x}^{(i)})-f_0(\mathbf{x}^\star))+\sum_{i=0}^k(\alpha^{(i)})^2G^2\\
&\implies 2\sum_{i=0}^k\alpha^{(i)}(f_0(\mathbf{x}^{(i)})-f_0(\mathbf{x}^\star))\leq\left\|\mathbf{x}^{(0)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2+\sum_{i=0}^k(\alpha^{(i)})^2G^2\\
&\sum_{i=0}^k\alpha^{(i)}(f_0(\mathbf{x}^{(i)})-f_0(\mathbf{x}^\star))\geq\left(\sum_{i=0}^k\alpha^{(i)}\right)\inf_{i=0,\ldots,k}(f_0(\mathbf{x}^{(i)})-f_0(\mathbf{x}^\star))\\
&\implies\inf_{i=0,\ldots,k}(f_0(\mathbf{x}^{(i)})-f_0(\mathbf{x}^\star))\leq\frac{\left\|\mathbf{x}^{(0)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2+G^2\sum_{i=0}^k(\alpha^{(i)})^2}{2\sum_{i=0}^k\alpha^{(i)}}
\end{aligned}
$$

这是一个紧的界

- 固定步长得到上界$\frac{G^2\alpha}{2}$，以$f(x)=|x|$为例
- 不可加平方可加一定收敛，若步长为$\frac{1}{k}$，收敛速度为$\frac{1}{\log k}$（幂级数积分取上下界$\sum_{i=0}^k\frac{1}{i}=O(\log k)$）
- 不可加平方不可加同样收敛，若步长为$\frac{1}{\sqrt{k}}$，收敛速度为$O\left(\frac{\log k}{\sqrt{k}}\right)$，可以证明在该假设下该收敛速度最优

$$\lim_{k\to\infty}\inf_{i=0,\ldots,k}\left(f_0(\mathbf{x}^{(i)})-f_0(\mathbf{x}^\star)\right)=0$$

$$\forall\varepsilon>0,\exists N_1\in\mathbb{Z},\forall i>N_1:\ \alpha^{(i)}\leq\frac{\varepsilon}{G^2}$$

$$\exists N_2\in\mathbb{Z},\forall k>N_2:\ \sum_{i=0}^k\alpha^{(i)}\geq\frac{1}{\varepsilon}\left(\left\|\mathbf{x}^{(0)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2+G^2\sum_{i=0}^{N_1}(\alpha^{(i)})^2\right)$$

令$N=\max\{N_1,N_2\},\forall k>N$

$$\frac{\left\|\mathbf{x}^{(0)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2+G^2\sum_{i=0}^{N_1}(\alpha^{(i)})^2}{2\sum_{i=0}^k\alpha^{(i)}}+\frac{\left\|\mathbf{x}^{(0)}-\mathbf{x}^\star\right\|^2+G^2\sum_{i=N_1+1}^k(\alpha^{(i)})^2}{2\sum_{i=0}^{N_1}\alpha^{(i)}+2\sum_{i=N_1+1}^k\alpha^{(i)}}\leq\frac{\varepsilon}{2}+\frac{\varepsilon}{2}=\varepsilon$$

$$\text{第二项} \leq \frac{G^2 \sum_{i=N_1+1}^{k} \alpha^{(i)} \frac{\varepsilon}{G^2}}{2\sum_{i=0}^{N_1} \alpha^{(i)} + 2\sum_{i=N_1+1}^{k} \alpha^{(i)}} \leq \frac{\varepsilon}{2}$$

实际上这个假设一般情况下不成立，但是我们只需保证在优化路径上成立即可，也有设置$\mathbf{x}$有界的

6.3.2 邻近点梯度法(proximal gradient method)

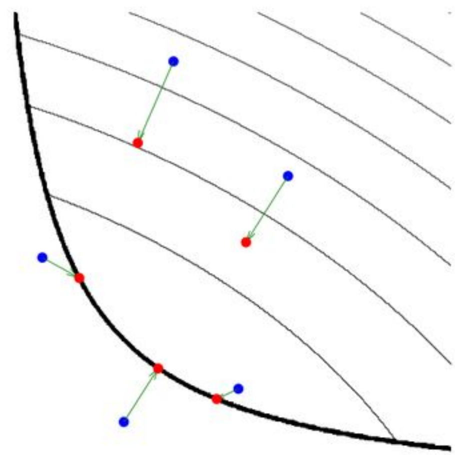
考虑有**结构**，不可微的函数

$$\min f_0(\mathbf{x}) = s(\mathbf{x}) + r(\mathbf{x})$$

- s: smooth，可微，易求导
- r: regularization，不可微，易求邻近点投影

定义 23 (邻近点投影(proximal mapping)). 函数r和平衡参数α的近端算子

$$\text{prox}_r\, \hat{\mathbf{x}} = \arg\min_{\mathbf{x}} \left(r(\mathbf{x}) + \frac{1}{2\alpha} \|\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}\|_2^2 \right)$$



注：邻近点/近端投影字面上理解即对点$\hat{\mathbf{x}}$关于r下降方向的邻近点。如上图，黑细线为r的水平集，黑粗线为定义域边界，蓝色点为$\hat{\mathbf{x}}$，红色为作用该算子后的点，这些点都统一朝着函数最小的方法前进[14]。

邻近点梯度法迭代格式如下

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha^{(k)} \nabla s(\mathbf{x}^{(k)}) \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = \text{prox}_r\, \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = \arg\min_{\mathbf{x}} \left(r(\mathbf{x}) + \frac{1}{2\alpha} \left\| \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} \right\|_2^2 \right) \end{cases}$$

例 39 (LASSO).

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 + p \|\mathbf{x}\|_1$$

[14]详细见https://zhuanlan.zhihu.com/p/37444622

分析. 设

$$\begin{cases} s(\mathbf{x}) := \frac{1}{2}\left\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\right\|_2^2 \\ r(\mathbf{x}) := p\left\|\mathbf{x}\right\|_1 \end{cases}$$

其中，$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$，$\mathbf{b}, \mathbf{e} \in \mathbb{R}^m$（在本题中$m = 50, n = 100$），$s(\mathbf{x})$为光滑函数，$r(\mathbf{x})$为非光滑函数，则原式

$$f(\mathbf{x}) = s(\mathbf{x}) + r(\mathbf{x})$$

先求$r(\mathbf{x})$的邻近点投影

$$\operatorname{prox}\hat{\mathbf{x}} = \arg\min_{\mathbf{x}} \left(p\left\|\mathbf{x}\right\|_1 + \frac{1}{2\alpha}\left\|\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}}\right\|_2^2\right)$$

对上式右侧展开有

$$\arg\min_{\mathbf{x}} \left(p\sum_{i=1}^{n}|x_i| + \frac{1}{2\alpha}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\hat{x}_i)^2\right)$$

注意到上式对于下标i相互独立，故要求上式的最小值，等价于对每一个下标i求最小值后求和，即

$$\arg\min_{x_i} \left(p|x_i| + \frac{1}{2\alpha}(x_i-\hat{x}_i)^2\right),\ \forall i$$

由不可微函数的极值判断条件有

$$0 \in \left(\partial_{x_i} p|x_i| + \frac{1}{\alpha}(x_i-\hat{x}_i)\right),\ \forall i$$

对每一个x_i进行分类讨论

- 若$x_i > 0$，则$|x_i|$对于x_i可微，即$\partial_{x_i}|x_i| = 1$，有

  $$p + \frac{1}{\alpha}(x_i-\hat{x}_i) = 0$$

  整理得

  $$x_i = \hat{x}_i - \alpha p$$

  由于$x_i > 0$，故$\hat{x}_i - \alpha p > 0$，即$\hat{x}_i > \alpha p$

- 若$x_i < 0$，则$|x_i|$对于x_i可微，即$\partial_{x_i}|x_i| = -1$，有

  $$-p + \frac{1}{\alpha}(x_i-\hat{x}_i) = 0$$

  整理得

  $$x_i = \hat{x}_i + \alpha p$$

  由于$x_i < 0$，故$\hat{x}_i + \alpha p < 0$，即$\hat{x}_i < -\alpha p$

- 若$x_i = 0$，则$|x_i|$对于x_i不可微，需要求次梯度，$\partial_{x_i}|x_i| = [-1, 1]$，即

  $$0 \in \left[-p - \frac{\hat{x}_i}{\alpha}, p - \frac{\hat{x}_i}{\alpha}\right]$$

那么，需要满足

$$\begin{cases} p - \dfrac{\hat{x}_i}{\alpha} \geq 0 \\ -p - \dfrac{\hat{x}_i}{\alpha} \leq 0 \end{cases}$$

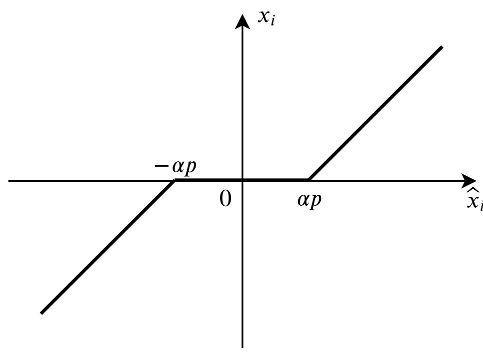
推得

$$\hat{x}_i \in [-\alpha p, \alpha p]$$

综上，有

$$x_i = \begin{cases} \hat{x}_i + \alpha p & \hat{x}_i < -\alpha p \\ 0 & \hat{x}_i \in [-\alpha p, \alpha p] \\ \hat{x}_i - \alpha p & \hat{x}_i > \alpha p \end{cases}$$

可以得到下图的软门限*(soft-thresholding)*曲线



进一步，得到邻近点梯度下降法的迭代式如下

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha \nabla s(\mathbf{x}^{(k)}) = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha A^T(A\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{b}) \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = \operatorname{prox} \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = \arg\min_{\mathbf{x}} \left(p \left\| \mathbf{x} \right\|_1 + \dfrac{1}{2\alpha} \left\| \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} \right\|_2^2 \right) \end{cases}$$

其中，$x^{(k+\frac{1}{2})}$可直接计算，$x^{(k+1)}$的显式解可由软门限求得。
此算法即迭代阈值收缩*(Iterative shrinkage-thresholding algorithm,ISTA)*算法

例 40 (盒限制(box constrained)优化问题)**.**

$$f_0(\mathbf{x}) = s(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{n} I(x_i \in [l_i, u_i])$$

分析. 构造邻近点投影

$$\begin{aligned} \arg\min \quad & \frac{1}{2\alpha} \left\| \mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}} \right\|^2 \\ \text{subject to} \quad & x_i \in [l_i, u_i], \forall i \end{aligned}$$

如果有约束$\mathbf{x}\in\mathcal{C}$

$$\begin{cases}\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}=\mathbf{x}^{(k)}-\alpha\nabla S(\mathbf{x}^{(k)})\\ \mathbf{x}^{(k+1)}=\arg\min_{\mathbf{x}}\left(I_{\mathcal{C}}(\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})})+\frac{1}{2\alpha}\left\|\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}\right\|^2\right)=\arg\min_{\mathbf{x}}\frac{1}{2\alpha}\left\|\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})}\right\|^2,\mathbf{x}\in\mathcal{C}\end{cases}$$

相当于做投影，故称投影梯度法

$$\begin{aligned}0&\in\partial r(\mathbf{x}^{(k+1)})+\frac{1}{\alpha}(\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})})\\ 0&=\partial r(\mathbf{x}^{(k+1)})+\frac{1}{\alpha}(\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k)}+\alpha\nabla S(\mathbf{x}^{(k)}))\\ \mathbf{x}^{(k+1)}&=\mathbf{x}^{(k)}-\alpha\nabla S(\mathbf{x}^{(k)})-\alpha\partial r(\mathbf{x}^{(k+1)})\end{aligned}$$

数值计算：显式方法（次梯度法）→隐式方法（邻近点梯度法—需要先知道下一步信息，但是这是可以做的，因为有邻近点）

* 邻近点投影法的收敛性能与梯度下降法类似

例 41 (矩阵补全)**.** $Y\in\mathbb{R}^{m\times n},\{Y_{ij},(i,j)\in\Omega\}$

$$\min_B\left(\frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in\Omega}(Y_{ij}-B_{ij})^2+\lambda\,\mathrm{rank}(B)\right)$$

分析. 同*LASSO*，由于矩阵的秩（奇异值向量*0*-范数）不好求，改为矩阵的和范数$\|\cdot\|$（奇异值向量*1*-范数），即

$$\min_B\left(\frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in\Omega}(Y_{ij}-B_{ij})^2+\lambda\left\|B\right\|_\star\right)$$

其中，

$$\left\|B\right\|_\star:=\sum_{i=1}^n\sigma_i(B)$$

$$\min\left(\frac{1}{2}\left\|P_\Omega(B-Y)\right\|_F^2+\lambda\left\|B\right\|_\star\right)$$

若原矩阵中该项不存在，P_Ω为0；存在的话则保持不变

$$\nabla B\left(\frac{1}{2}\left\|P_\Omega\right\|(B-Y)_F^2\right)=P_\Omega(B-Y)$$

对B做奇异值分解，U为酉矩阵

$$\partial\left\|B\right\|_\star=\{UDV^{\mathrm{T}},B=U\Sigma V^{\mathrm{T}},d=\partial\left\|\sigma\right\|_1\}$$

邻近点梯度迭代格式为

$$\begin{cases} B^{(k+\frac{1}{2})} = B^k - \alpha P_\Omega(B^k - Y) \\ B^{(k+1)} = \arg\min_B \left(\lambda \|B\|_\star + \frac{1}{2\alpha}\left\|B - B^{(k+\frac{1}{2})}\right\|_F^2\right) \end{cases}$$

求次梯度

$$0 \in \lambda\partial \|B\|_\star + \frac{1}{\alpha}(B - B^{(k+\frac{1}{2})})$$

$$0 \in \left[\lambda UDV^\mathrm{T} + \frac{1}{\alpha}(B - B^{(k+\frac{1}{2})})\right],\ B = U\Sigma V^\mathrm{T},\ D = \partial \|\sigma\|_1$$

$$0 \in \left\{\lambda UDV^\mathrm{T} + \frac{1}{\alpha}(V\Sigma V^\mathrm{T} - B^{(k+\frac{1}{2})})\right\}$$

$$\exists V:\ 0 = \alpha\lambda UDV^\mathrm{T} + V\Sigma V^\mathrm{T} - B^{(k+\frac{1}{2})}$$

$$B^{(k+\frac{1}{2})} = U(\alpha\lambda D + \Sigma)V^\mathrm{T}$$

对$B^{(k+\frac{1}{2})}$进行奇异值分解

$$B^{(k+\frac{1}{2})} = U\Sigma^{(k+\frac{1}{2})}V$$

$$T_i = \alpha\lambda d_i + \sigma_i$$

若$\sigma_i \neq 0 \implies \tau_i = \alpha\lambda + \sigma_i$
若$\sigma_i = 0 \implies \tau_i \in [-\alpha\lambda + \sigma_i, \alpha\lambda + \sigma_i]$

$$\begin{cases} \sigma_i = \tau_i - \alpha\lambda & \tau_i > \alpha\lambda \\ \sigma_i = 0 & \tau_i \leq \alpha\lambda \end{cases}$$

该算法称为矩阵软门限算法

6.4 二阶优化方法

6.4.1 牛顿法

牛顿法(Newton's method)：要求$f_0(\mathbf{x})$二阶可微，强凸，考虑不同方向，用Taylor展开有

$$\begin{aligned} \min f_0(\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}) &\approx \min_{\mathbf{d}} \left(f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \langle\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}), \mathbf{d}\rangle\right) \\ &\approx \min_{\mathbf{d}} \left(f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})^\mathrm{T}\mathbf{d} + \frac{1}{2}\mathbf{d}^\mathrm{T}\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k)})\mathbf{d}\right) \end{aligned}$$

对$\mathbf{d}$求梯度有

$$\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k)})\mathbf{d} = 0$$

$$\implies \mathbf{d} = -(\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k)}))^{-1}\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}) \to \text{牛顿方向}$$

得到牛顿法的迭代格式如下

$$\mathbf{x}^{(k+1)}=\mathbf{x}^{(k)}-\alpha^{(k)}(\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k)}))^{-1}\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})$$

其中$\alpha^{(k)}$为搜索步长。

看下降方向只要看其与负梯度方向是否小于90度

$$\begin{aligned}&\langle-\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}),-(\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k)}))^{-1}\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\rangle\\=&\nabla^{\mathrm{T}} f_0(\mathbf{x}^{(k)})(\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k)}))^{-1}\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\end{aligned}$$

假设$\nabla^2 f_0(\mathbf{x})$Lipschitz连续

- 若$\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|_2>\eta$，阻尼(damped)牛顿段
  用Armijo Rule算步长，$\exists\gamma>0$，$f_0(\mathbf{x}^{(k+1)})-f_0(\mathbf{x}^{(k)})\leq-\gamma$
- 若$\left\|\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\right\|_2\leq\eta$，纯牛顿段
  $\alpha=1, f_0(\mathbf{x}^{(k+1)})-f_0(\mathbf{x}^\star)\leq\Delta(\frac{1}{2})^{2^k},\exists\Delta>0$，超线性收敛

多了二阶信息，往最优解跑的速度会越来越快

例 42.

$$\begin{aligned}\min\quad&\frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}P\mathbf{x}+\mathbf{q}^{\mathrm{T}}\mathbf{r}+c\\ \text{s.t.}\quad&P\succ 0\end{aligned}$$

分析. *对于二阶强凸问题，只需1步到达最优解；但用梯度下降法，与条件数相关*

与Newton-Raphson算法的联系：将其扩展至高维的凸问题

$$\mathbf{x}^{(k+1)}=\mathbf{x}^{(k)}-\frac{g(\mathbf{x}^{(k)})}{g'(\mathbf{x}^{(k)})}$$

6.4.2 拟牛顿法

拟牛顿法(quasi-Newton)：希望像一阶算法一样好算，又像二阶算法一样收敛快

1. 构造$(\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k)}))^{-1}$的近似矩阵$G^{(k)}$（直接的想法）
2. 构造$\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k)})$的近似矩阵$B^{(k)}$，且容易求逆

在$\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(k+1)}$点处做Taylor展开

$$\begin{aligned}&f_0(\mathbf{x})\approx f_0(\mathbf{x}^{(k+1)})+\langle\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k+1)}),\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(k+1)}\rangle+\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(k+1)})^{\mathrm{T}}\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k+1)})(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(k+1)})\\ \Longrightarrow\ &\nabla f_0(\mathbf{x})\approx\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k+1)})+\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k+1)})(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(k+1)})\\ \Longrightarrow\ &\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\approx\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k+1)})+\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k+1)})(\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^{(k+1)})\\ \Longrightarrow\ &\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})-\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k+1)})\approx\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k+1)})(\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^{(k+1)})\end{aligned}$$

$$\begin{cases}\mathbf{q}^{(k)} = \nabla f_0(\mathbf{x}^{(k+1)}) - \nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}) \\ \mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\end{cases} \implies \begin{cases}\mathbf{q}^{(k)} = B^{(k+1)}\mathbf{p}^{(k)} \\ \mathbf{p}^{(k)} = G^{(k+1)}\mathbf{q}^{(k)}\end{cases}$$

1. 近似$G^{(k)}$

$$G^{(k+1)} = G^{(k)} + \Delta G^{(k)}$$

   a. 秩1校正（希望G中不要有太多元素，故用低秩矩阵做近似）

$$\Delta G^{(k)} = \alpha^{(k)}\mathbf{z}^{(k)}(\mathbf{z}^{(k)})^{\mathrm{T}}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{p}^{(k)} = G^{(k+1)}\mathbf{q}^{(k)} &= G^{(k)}\mathbf{q}^{(k)} + \alpha^{(k)}\mathbf{z}^{(k)}(\mathbf{z}^{(k)})^{\mathrm{T}}\mathbf{q}^{(k)} \\ \implies \Delta G^{(k)} &= \frac{(\mathbf{p}^{(k)} - G^{(k)}\mathbf{q}^{(k)})(\mathbf{p}^{(k)} - G^{(k)}\mathbf{q}^{(k)})^{\mathrm{T}}}{(\mathbf{q}^{(k)})^{\mathrm{T}}(\mathbf{p}^{(k)} - G^{(k)}\mathbf{q}^{(k)})}\end{aligned}$$

   稳定性很有问题，分母接近0的时候，越接近最优解越不稳定

   b. 秩2校正(Dandon-Fletcher-Power, DFP)

$$\Delta G^{(k)} = \frac{\mathbf{p}^{(k)}(\mathbf{p}^{(k)})^{\mathrm{T}}}{(\mathbf{p}^{(k)})^{\mathrm{T}}\mathbf{q}^{(k)}} - \frac{G^{(k)}\mathbf{q}^{(k)}(\mathbf{q}^{(k)})^{\mathrm{T}}G^{(k)}}{(\mathbf{q}^{(k)})^{\mathrm{T}}G^{(k)}\mathbf{q}^{(k)}}$$

   前后项都为秩1矩阵，数值稳定性强

2. 近似$B^{(k)}$(Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shermo, BFGS)

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} + \frac{\mathbf{q}^{(k)}(\mathbf{q}^{(k)})^{\mathrm{T}}}{(\mathbf{q}^{(k)})^{\mathrm{T}}\mathbf{p}^{(k)}} - \frac{B^{(k)}\mathbf{p}^{(k)}(\mathbf{p}^{(k)})^{\mathrm{T}}B^{(k)}}{(\mathbf{p}^{(k)})^{\mathrm{T}}B^{(k)}\mathbf{p}^{(k)}}$$

- 拟牛顿法以后可能很有用，因为结合一二阶优化优点
- 找核心问题（Hessian矩阵难算），然后就去解决
- 用**结构信息**，都对结构进行限制（一股脑就用Adam优化器，这是不对的，要分析问题结构）

有限内存(limited memory)—LM-BFGS

6.5 约束满足的牛顿法

考虑有约束优化问题

$$\begin{aligned}\min\quad & f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.}\quad & A\mathbf{x} = \mathbf{b}\end{aligned}$$

本质上都是在考虑它的KKT条件

$$\begin{cases}A\mathbf{x}^\star = \mathbf{b} \\ \nabla f_0(\mathbf{x}^\star) + A^{\mathrm{T}}\mathbf{v}^\star = 0\end{cases}$$

例 43.

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}P\mathbf{x}+\mathbf{q}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+r, P\succeq 0 \\ \text{s.t.} \quad & A\mathbf{x}=\mathbf{b} \end{aligned}$$

分析. 等价于KKT条件

$$\begin{cases} A\mathbf{x}^\star=\mathbf{b} \\ P\mathbf{x}^\star+\mathbf{q}+A^{\mathrm{T}}\mathbf{v}^\star=0 \end{cases}$$

等价于

$$\begin{bmatrix} P & A^{\mathrm{T}} \\ A & \mathbf{0} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{x}^\star \\ \mathbf{v}^\star \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -\mathbf{q} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix}$$

若方程组非线性，那就做一个线性化，近似等价于二阶近似的Taylor展开

$$\begin{aligned} \underset{\mathbf{d}}{\arg\min} \quad & f_0(\mathbf{x}^{(k)}+\mathbf{d})=\mathbf{d}^{(k)}\approx f_0(\mathbf{x}^{(k)})+\langle\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}),\mathbf{d}\rangle+\frac{1}{2}\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k)})\mathbf{d}=\mathbf{d}^{(k)} \\ \text{subject to} \quad & A(\mathbf{x}^{(k)}+\mathbf{d})=\mathbf{b} \end{aligned}$$

写出问题关于$\mathbf{d}$的KKT条件，可得约束满足牛顿法的迭代格式

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k)}) & A^{\mathrm{T}} \\ A & \mathbf{0}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{d}^{(k)} \\ \mathbf{v}^{(k)} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)}) \\ \mathbf{b}-A\mathbf{x}^{(k)} \end{bmatrix}$$

若$\mathbf{x}^{(0)}$可行，$A\mathbf{x}^{(0)}=\mathbf{b}$，之后的$\mathbf{x}^{(k+1)}=\mathbf{x}^{(k)}+\alpha^{(k)}\mathbf{d}^{(k)}$也可行。

6.6 原对偶方法

6.6.1 拉格朗日乘子法/对偶分解法

$$L(\mathbf{x},\mathbf{v})=f_0(\mathbf{x})+\langle\mathbf{v},A\mathbf{x}-\mathbf{b}\rangle$$

更新原变量和对偶变量，迭代格式如下

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)}=\arg\min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x},\mathbf{v}^{(k)}) \\ \mathbf{v}^{(k+1)}=\mathbf{v}^{(k)}+\alpha^{(k)}(A\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{b}) \end{cases}$$

$\alpha^{(k)}$可以是固定步长，也可以是递减步长

即为**找鞍点**，$\mathbf{x}$方向上找最小值，本来$\mathbf{v}$方向上要找最大值，但容易到正无穷。因此换种方法$\mathbf{v}^{(k)}$做一个保守的计算，每一步都走一个很小的步长。实际上$A\mathbf{x}-\mathbf{b}$即为$\nabla_{\mathbf{v}}L(\mathbf{x},\mathbf{v})$，故属于梯度上升法。

例 44.

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2}x^2 \\ \text{s.t.} \quad & x = 1 \end{aligned}$$

分析.

$$\begin{aligned} L(x, v) &= \frac{1}{2}x^2 + v(x-1) \\ &= \frac{1}{2}x^2 + vx - v \end{aligned}$$

6.6.2 原对偶次梯度法

$\mathbf{v}$才是最关键的，只是在寻找最优$\mathbf{v}$的时候顺带找到了$\mathbf{x}$（收敛到$\mathbf{v}^\star$的同时也找到了$\mathbf{x}^\star$），考虑对偶函数

$$D(\mathbf{v}) = \inf_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{v})$$

$D(\mathbf{v})$为凹函数，关注$-D(\mathbf{v})$

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = \arg\min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{v}^{(k)}) \\ \mathbf{v}^{(k+1)} = \mathbf{v}^{(k)} - \alpha^{(k)}(-(A\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{b})) \end{cases}$$

若$f_0(\mathbf{x})$为凸，$\hat{\mathbf{x}} = \arg\min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\lambda}})$

$$\begin{aligned} D(\mathbf{v}) &= \inf_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \\ &= \inf_{\mathbf{x}} \left(f_0(\mathbf{x}) + \langle \mathbf{v}, A\mathbf{x} + \mathbf{b} \rangle\right) \\ &\le f_0(\hat{\mathbf{x}}) + \langle \mathbf{v}, A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \rangle \\ &= f_0(\hat{\mathbf{x}}) + \langle \boldsymbol{\lambda}, A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \rangle + \langle \mathbf{v} - \hat{\boldsymbol{\lambda}}, A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \rangle \\ &= D(\hat{\boldsymbol{\lambda}}) + \langle \mathbf{v} - \hat{\boldsymbol{\lambda}}, A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \rangle \\ -D(\mathbf{v}) &\ge -D(\hat{\boldsymbol{\lambda}}) + \langle \mathbf{v} - \hat{\boldsymbol{\lambda}}, -(A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) \rangle \end{aligned}$$

进而$-(A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b})$为$-D(\boldsymbol{\lambda})$在$\hat{\boldsymbol{\lambda}}$的次梯度

这个算法一般来说性能不好，在机器学习里面很多时候都被乱用，有时候可以，有时候不行。

- 在什么情况下它是好用的？对偶函数是可微的，采用固定步长。
- 对偶函数$D(\mathbf{v})$何时可微？任何$-D(\boldsymbol{\lambda})$都具有$-(A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b})$的形式，得到当$f_0(\mathbf{x})$**严格凸**时，$f_0(\mathbf{x}) + \langle \hat{\boldsymbol{\lambda}}, A\mathbf{x} - \mathbf{b} \rangle$严格凸，进而$D(\mathbf{v})$可微

既然计算量出在$\mathbf{x}^{(k+1)}$，那么想办法近似

$$\begin{cases}\mathbf{x}^{(k+1)} & = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha^{(k)}\partial_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{v}^{(k)}) \\ \mathbf{v}^{(k+1)} & = \mathbf{v}^{(k)} + \alpha^{(k)}\partial_{\mathbf{v}} L(\mathbf{x}^{(k+1)}, \mathbf{v}) = \mathbf{v}^{(k)} + \alpha^{(k)}(A\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{b}) \\ & \to \mathbf{v}^{(k)} + \alpha^{(k)}(A\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{b})\end{cases}$$

由于$\mathbf{v}^{(k+1)}$需要等待$\mathbf{x}^{(k+1)}$，将其换成下式可以不用等待；但由于两个方向都不精确，故收敛性质糟糕。

6.6.3 增广拉格朗日法

增广拉格朗日法(Augumented Lagrange Method, ALM)：当函数不是严格凸时，依然能得到很好的效果

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & A\mathbf{x} = \mathbf{b} \end{aligned}$$

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = f_0(\mathbf{x}) + \langle \mathbf{v}, A\mathbf{x} - \mathbf{b} \rangle = f_0(\mathbf{x}) + \mathbf{v}^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x} - \mathbf{b})$$

增广拉格朗日函数（即在最后补充$c/2\left\|f_i(\mathbf{x})\right\|_2^2$的正则化项）

$$L_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = f_0(\mathbf{x}) + \langle \mathbf{v}, A\mathbf{x} - \mathbf{b} \rangle + \frac{c}{2}\left\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\right\|^2, c > 0$$

增广拉格朗日函数是下面问题的拉格朗日函数

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(\mathbf{x}) + \frac{c}{2}\left\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\right\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & A\mathbf{x} = \mathbf{b} \end{aligned}$$

两个问题的原对偶最优解相同

设$(\mathbf{x}^\star, \mathbf{v}^\star)$为原问题最优解，分别有以下两个KKT条件

$$\begin{cases} A\mathbf{x}^\star = \mathbf{b} \\ \left.\dfrac{\partial L(\mathbf{x}, \mathbf{v}^\star)}{\partial \mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^\star} = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} A\mathbf{x}^\star = \mathbf{b} \\ \left.\dfrac{\partial L_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}^\star)}{\partial \mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^\star} = 0 \end{cases}$$

对于原问题有

$$\left.\nabla_{\mathbf{x}}(f_0(\mathbf{x}) + \langle \mathbf{v}^\star, A\mathbf{x} - \mathbf{b} \rangle)\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^\star} = 0$$

对于对偶问题有

$$
\begin{aligned}
&\nabla_{\mathbf{x}}\left(f_0(\mathbf{x})+\langle\mathbf{v}^\star, A\mathbf{x}-\mathbf{b}\rangle+\frac{c}{2}\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\|^2\right)\Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^\star}\\
=&\nabla_{\mathbf{x}}\left(\frac{c}{2}\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\|^2\right)\Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^\star} \qquad \text{原问题最优解代入}\\
=&cA^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x}^\star-\mathbf{b})=0
\end{aligned}
$$

得到增广拉格朗日法的迭代格式

$$
\begin{cases}
\mathbf{x}^{(k+1)}=\arg\min_{\mathbf{x}} L_c(\mathbf{x},\mathbf{v}^{(k)})\\
\mathbf{v}^{(k+1)}=\mathbf{v}^{(k)}+c(A\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{b})
\end{cases}
$$

只要原问题是凸问题，无论c怎么取（c刚好就是固定步长），该算法总是可以收敛（不考虑计算精度的问题），只是收敛速度不同

例 45.

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2}x_1^2+\frac{1}{2}x_2^2\\
\text{s.t.} \quad & x_1=1
\end{aligned}
$$

分析.

$$
L(\mathbf{x},v)=\frac{1}{2}x_1^2+\frac{1}{2}x_2^2+v(x_1-1)
$$

$$
\frac{\partial L(\mathbf{x},v^\star)}{\partial\mathbf{x}}\Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^\star}=0=\begin{bmatrix}x_1+v^\star\\ x_2\end{bmatrix}
$$

增广拉格朗日法

$$
L_{c^{(k)}}(\mathbf{x},v)=\frac{1}{2}x_1^2+\frac{1}{2}x_2^2+v(x_1-1)+\frac{c^{(k)}}{2}(x_1-1)^2
$$

$$
\mathbf{x}^{(k+1)}=\arg\min L_{c^{(k)}}(\mathbf{x},v^{(k)})
$$

$$
\begin{cases}
x_1+v^{(k)}+c^{(k)}(x_1-1)=0\\
x_2=0
\end{cases}
\implies \mathbf{x}^{(k+1)}=\begin{bmatrix}\frac{c^{(k)}-v^{(k)}}{c^{(k)}+1}\\ 0\end{bmatrix}
$$

$$
\begin{aligned}
v^{(k+1)}&=v^{(k)}+c^{(k)}(x_1^{(k+1)}-1)\\
&=v^{(k)}+c^{(k)}\left(\frac{c^{(k)}-v^{(k)}}{c^{(k)}+1}-1\right)\\
&=\frac{v^{(k)}}{c^{(k)}+1}-\frac{c^{(k)}}{c^{(k)}+1}
\end{aligned}
$$

$$
v^{(k+1)}-v^\star=v^{(k+1)}+1=\frac{v^{(k)}}{c^{(k)}+1}+\frac{1}{c^{(k)}+1}=\frac{v^{(k)}-v^\star}{c^{(k)}+1}
$$

可以看出取一个固定步长，且大于零，增广拉格朗日的收敛是非常好的（线性收敛）

对于特殊的一些非凸问题，增广拉格朗日也是有效的，如把问题改成

$$\min\left(-\frac{1}{2}x_1^2+\frac{1}{2}x_2^2\right)$$

6.6.4 交替方向乘子法

交替方向乘子法(alternating direction method of multipliers, ADMM)同样探究**有结构**的优化问题。

$$\begin{aligned}\min_{\mathbf{x},\mathbf{y}} \quad & f(\mathbf{x})+g(\mathbf{y})\\ \text{s.t.} \quad & A\mathbf{x}+B\mathbf{y}=0\end{aligned}$$

考虑增广拉格朗日函数

$$\begin{aligned}L_c(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{v}) &= f(\mathbf{x})+g(\mathbf{y})+\langle \mathbf{v}, A\mathbf{x}+B\mathbf{y}\rangle+\frac{c}{2}\|A\mathbf{x}+B\mathbf{y}\|_2^2\\ &= f(\mathbf{x})+g(\mathbf{y})+\frac{c}{2}\left(\left\|A\mathbf{x}+B\mathbf{y}+\frac{\mathbf{v}}{c}\right\|_2^2-\left\|\frac{\mathbf{v}}{c}\right\|_2^2\right)\end{aligned}$$

若直接用下面的迭代格式

$$\begin{cases}(\mathbf{x}^{(k+1)},\mathbf{y}^{(k+1)})=\arg\min_{\mathbf{x},\mathbf{y}} L_c(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{v}^{(k)})\\ \mathbf{v}^{(k+1)}=\mathbf{v}^{(k)}+c(A\mathbf{x}^{(k+1)}+B\mathbf{y}^{(k+1)})\end{cases}$$

由于在$\|A\mathbf{x}+B\mathbf{y}\|_2^2$中，$\mathbf{x}$和$\mathbf{y}$结合在一起，不好优化，故用交替的方法（选主元）来解决

$$\begin{cases}\mathbf{x}^{(k+1)} & =\arg\min_{\mathbf{x}} L_c(\mathbf{x},\mathbf{y}^{(k)},\mathbf{v}^{(k)})\\ & \iff \arg\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})+\frac{c}{2}\left\|A\mathbf{x}+B\mathbf{y}^{(k)}+\frac{\mathbf{v}^{(k)}}{c}\right\|_2^2 \qquad \text{配方，关于}\mathbf{y}^{(k)}\text{的项为常数项，可忽略}\\ \mathbf{y}^{(k+1)} & =\arg\min_{\mathbf{y}} L_c(\mathbf{x}^{(k+1)},\mathbf{y},\mathbf{v}^{(k)})\\ & \iff \arg\min_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y})+\frac{c}{2}\left\|A\mathbf{x}^{(k+1)}+B\mathbf{y}+\frac{\mathbf{v}^{(k)}}{c}\right\|_2^2\\ \mathbf{v}^{(k+1)} & =\mathbf{v}^{(k)}+c(A\mathbf{x}^{(k+1)}+B\mathbf{y}^{(k+1)})\end{cases}$$

两块的算法依然具有很好的收敛性，但是多块的交替方向乘子法不一定可以收敛。

例 46 (LASSO)**.**

$$\min\ \frac{1}{2}\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2^2+p\|\mathbf{x}\|_1$$

分析. 对原问题进行变形，等价于下述约束问题

$$\begin{aligned}\min \quad & \frac{1}{2}\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2^2+p\|\mathbf{y}\|_1\\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x}-\mathbf{y}=\mathbf{0}\end{aligned}$$

构造增广拉格朗日函数

$$L_c(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{v}) = \frac{1}{2}\left\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\right\|_2^2 + p\left\|\mathbf{y}\right\|_1 + \mathbf{v}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) + \frac{c}{2}\left\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\right\|_2^2$$

可以得到交替方向乘子法的迭代格式

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = \arg\min_{\mathbf{x}} L_c(\mathbf{x},\mathbf{y}^{(k)},\mathbf{v}^{(k)}) \\ \mathbf{y}^{(k+1)} = \arg\min_{\mathbf{y}} L_c(\mathbf{x}^{(k+1)},\mathbf{y},\mathbf{v}^{(k)}) \\ \mathbf{v}^{(k+1)} = \mathbf{v}^{(k)} + c(\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{y}^{(k+1)}) \end{cases}$$

对$\mathbf{x}^{(k+1)}$展开并配方，并将非主元项忽略，可求得上式与下面的式子等价

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = \arg\min_{\mathbf{x}} \left(\frac{1}{2}\left\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\right\|_2^2 + \frac{c}{2}\left\|\mathbf{x}-\mathbf{y}^{(k)}+\frac{\mathbf{v}^{(k)}}{c}\right\|_2^2\right) \\ \mathbf{y}^{(k+1)} = \arg\min_{\mathbf{y}} \left(p\left\|\mathbf{y}\right\|_1 + \frac{c}{2}\left\|\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{y}+\frac{\mathbf{v}^{(k)}}{c}\right\|_2^2\right) \\ \mathbf{v}^{(k+1)} = \mathbf{v}^{(k)} + c(\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{y}^{(k+1)}) \end{cases}$$

对于$\mathbf{x}^{(k+1)}$，可直接通过求梯度的方法得到显式解，得到

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (A^{\mathrm{T}}A + cI)^{-1}(A^{\mathrm{T}}\mathbf{b} + c\mathbf{y}^{(k)} - \mathbf{v}^{(k)})$$

对于$\mathbf{y}^{(k+1)}$，由于涉及*1*-范数，故需要求次微分，设$z_i = x_i^{(k+1)} + \dfrac{v_i^{(k)}}{c}$，可得到类似的软门限表达式

$$y_i = \begin{cases} z_i - \dfrac{p}{c} & z_i > \dfrac{p}{c} \\ 0 & z_i \in \left[-\dfrac{p}{c}, \dfrac{p}{c}\right] \\ z_i + \dfrac{p}{c} & z_i < -\dfrac{p}{c} \end{cases}$$

进而可以迭代求解。

6.7 总结

本质上都是在求解KKT条件!

<table>
<tr><td rowspan="4">无约束优化问题</td><td rowspan="2">一阶方法</td><td>梯度下降法/次梯度法</td><td>$\mathbf{x}^{(k+1)}=\mathbf{x}^{(k)}-\alpha\partial f_0(\mathbf{x})$</td></tr>
<tr><td>邻近点梯度法</td><td>$\begin{cases}\mathbf{x}^{(k+1/2)}=\mathbf{x}^{(k)}-\alpha\nabla s(\mathbf{x})\\ \mathbf{x}^{(k+1)}=\arg\min_{\mathbf{x}}\left(r(\mathbf{x})+\frac{1}{2\alpha}\left\Vert\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(k+1/2)}\right\Vert_2^2\right)\end{cases}$</td></tr>
<tr><td rowspan="2">二阶方法</td><td>牛顿法</td><td>$\mathbf{x}^{(k+1)}=\mathbf{x}^{(k)}-\alpha(\nabla^2 f_0(\mathbf{x}))^{-1}\nabla f_0(\mathbf{x})$</td></tr>
<tr><td>拟牛顿法</td><td>见前文</td></tr>
<tr><td rowspan="4">有约束优化问题</td><td colspan="2">约束满足牛顿法</td><td>$\begin{bmatrix}\nabla^2 f_0(\mathbf{x}^{(k)}) & A^{\mathrm{T}}\\ A & \mathbf{0}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{d}^{(k)}\\ \mathbf{v}^{(k)}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\nabla f_0(\mathbf{x}^{(k)})\\ \mathbf{b}-A\mathbf{x}^{(k)}\end{bmatrix}$</td></tr>
<tr><td rowspan="3">原对偶方法</td><td>对偶分解法</td><td>$\begin{cases}\mathbf{x}^{(k+1)}=\arg\min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x},\mathbf{v}^{(k)})\\ \mathbf{v}^{(k+1)}=\mathbf{v}^{(k)}+\alpha(A\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{b})\end{cases}$</td></tr>
<tr><td>增广拉格朗日法</td><td>$\begin{cases}\mathbf{x}^{(k+1)}=\arg\min_{\mathbf{x}} L_c(\mathbf{x},\mathbf{v}^{(k)})\\ \mathbf{v}^{(k+1)}=\mathbf{v}^{(k)}+c(A\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{b})\end{cases}$</td></tr>
<tr><td>交替方向乘子法</td><td>$\begin{cases}\mathbf{x}^{(k+1)}=\arg\min_{\mathbf{x}} L_c(\mathbf{x},\mathbf{y}^{(k)},\mathbf{v}^{(k)})\\ \mathbf{y}^{(k+1)}=\arg\min_{\mathbf{y}} L_c(\mathbf{x}^{(k+1)},\mathbf{y},\mathbf{v}^{(k)})\\ \mathbf{v}^{(k+1)}=\mathbf{v}^{(k)}-c(A\mathbf{x}^{(k+1)}+B\mathbf{y}^{(k+1)})\end{cases}$</td></tr>
</table>

7 大数据中的优化问题与算法

7.1 并行优化

$$\begin{tikzcd}
 & \text{master } g(\mathbf{x}) \arrow[dl] \arrow[d] \arrow[dr] & \\
\text{worker1 } f_1(\mathbf{x}) & \text{worker2 } f_2(\mathbf{x}) & \text{worker3 } f_3(\mathbf{x})
\end{tikzcd}$$

$$\min_{\mathbf{x}}\ g(\mathbf{x})+\sum_{i=1}^{N} f_i(\mathbf{x})$$

针对LASSO问题，每个人都有一个样本$(A_i,\mathbf{b}_i)$，最小化样本之和，以及正则化项

$$\begin{cases}(A_1,\mathbf{b}_1)\implies\frac{1}{2}\Vert A_1\mathbf{x}-\mathbf{b}_1\Vert_2^2\\ \vdots\\ (A_N,\mathbf{b}_N)\implies\frac{1}{2}\Vert A_N\mathbf{x}-\mathbf{b}_N\Vert_2^2\\ g(\mathbf{x})=v\Vert\mathbf{x}\Vert_1\end{cases}$$

原问题即为

$$\min_x\ v\Vert\mathbf{x}\Vert_1+\frac{c}{2}\left\Vert\begin{bmatrix}A_1 & \cdots & A_N\end{bmatrix}\mathbf{x}-\begin{bmatrix}\mathbf{b}_1 & \cdots & \mathbf{b}_N\end{bmatrix}\right\Vert_2^2$$

7.1.1 并行邻近点梯度法

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha \sum_{i=1}^N \nabla f_i(\mathbf{x}^{(k)}) \\ \mathbf{x}^{(k+1)} = \arg\min_{\mathbf{x}} g(\mathbf{x}) + \frac{1}{2\alpha} \left\| \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+\frac{1}{2})} \right\|_2^2 \end{cases}$$

计算简单，只需求梯度，但所有梯度类问题都依赖于条件数。通信开销大。

7.1.2 对偶分解法

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i=1}^N f_i(\mathbf{x}_i) + g(\mathbf{z}) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x}_i = \mathbf{z}, \forall i \end{aligned}$$

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^N f_i(\mathbf{x}_i) + g(\mathbf{z}) + \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{x}_i \mathbf{z} \rangle$$

$$(\mathbf{x}^{(k+1)}, \mathbf{z}^{(k+1)}) = \arg\min_{\mathbf{x},\mathbf{z}} L(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{v}^{(k)})$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} \mathbf{x}_i^{(k+1)} = \arg\min_{\mathbf{x}_i} \left(f_i(\mathbf{x}_i) + \langle \mathbf{v}_i^{(k)}, \mathbf{x}_i \rangle \right) \\ \mathbf{z}^{(k+1)} = \arg\min_{\mathbf{z}_i} \left(g(\mathbf{z}) - \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{v}_i^{(k)}, \mathbf{z} \rangle \right) \\ \mathbf{v}_i^{(k+1)} = \mathbf{v}_i^{(k)} + \alpha \left(\mathbf{x}_i^{(k+1)} - \mathbf{z}^{(k+1)} \right) \end{cases}$$

不依赖于条件数，但每一步都需要求解一个最优解，不一定好求。通信开销小，但拉格朗日类方法收敛性差。

7.1.3 增广拉格朗日函数

$$\sum_{i=1}^n f_i(\mathbf{x}_i) + g(\mathbf{z}) + \sum_{i=1}^n \langle \boldsymbol{\lambda}_i, \mathbf{x} - \mathbf{z} \rangle + \frac{c}{2} \sum_{i=1}^n \|\mathbf{x}_i - \mathbf{z}\|^2$$

正则项会产生$\mathbf{x}_i$和$\mathbf{z}$的交叉项，不好处理

注意到$\mathbf{x}_i$之间是没有依赖的，故采用交替方向乘子法，加了增广项，可用固定步长达到最优解

$$\begin{cases} \mathbf{x}_i^{(k+1)} & = \arg\min_{\mathbf{x}_i} \left(f_0(\mathbf{x}_i) + \langle \boldsymbol{\lambda}_i^{(k)}, \mathbf{x}_i \rangle + \frac{c}{2} \left\| \mathbf{x}_i - \mathbf{z}^{(k)} \right\|^2 \right) \\ \mathbf{z}^{(k+1)} & = \arg\min_{\mathbf{z}_i} \left(g(\mathbf{z}) - \sum_{i=1}^n \langle \boldsymbol{\lambda}_i^{(k)}, \mathbf{z} \rangle + \frac{c}{2} \sum_{i=1}^n \left\| \mathbf{x}_i^{(k+1)} - \mathbf{z} \right\|^2 \right) \\ \boldsymbol{\lambda}^{(k+1)} & = \boldsymbol{\lambda}^{(k)} + c(\mathbf{x}_i^{(k+1)} - \mathbf{z}^{(k+1)}) \end{cases}$$

每次要多传一倍的变量，以通信量开销换性能提升

7.2 无中心分布式优化

考虑无向图

$$
\begin{tikzcd}
 & o \arrow[r] \arrow[dl] \arrow[dr] & o \arrow[d] \\
o \arrow[dr] & & o \arrow[dl] \arrow[d] \\
 & o \arrow[uu] & o \arrow[l]
\end{tikzcd}
$$

每个结点自己优化，协同决策

$$\min \sum_{i=1}^{n} f_i(\mathbf{x})$$

7.2.1 梯度下降法

梯度下降法，但由于去中心，$\mathbf{x}^{(k)}$无处摆放

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha^{(k)} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\mathbf{x}^{(k)})$$

那就每一个点分配一个本地变量$\mathbf{x}_i$，对邻居的更新做一个加权平均

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \sum_{i=1}^{n} \omega_{ij} \mathbf{x}_j^{(k)} - \alpha^{(k)} \sum_{i=1}^{n} \omega_{ij} \nabla f_j(\mathbf{x}_j^{(k)})$$

其中

$$W = \left[\omega_{ij}\right] = \begin{cases} \omega_{ij} \neq 0 & (i,j) \in E, i = j \\ \omega_{ij} = 0 & \text{otherwise} \end{cases}, W = W^{\mathrm{T}}, W\mathbf{1} = \mathbf{1}$$

在不可信的系统里面，存在个人隐私等信息，故更激进些，采用自己的梯度进行更新（在本地进行梯度下降），在无人机系统中非常常见

$$\mathbf{x}_i^{(k+1)} = \sum_{i=1} \omega_{ij} \mathbf{x}_j^{(k)} - \alpha^{(k)} \nabla f_i(\mathbf{x}_i^{(k)})$$

非常糟糕的算法，如果采用固定步长，则找不到最优解

分析. 反证法，假设$\mathbf{x}_i^{(k)} \to \mathbf{x}^\star$，将$\mathbf{x}^\star$代入

$$\mathbf{x}^\star = \sum_{j=1}^{n} \omega_{ij} \mathbf{x}^\star - \alpha \nabla f_i(\mathbf{x}^\star) \iff \nabla f_i(\mathbf{x}^\star) = 0$$

但原问题最优解

$$\sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\mathbf{x}^\star) = 0$$

与上面的式子不等价

7.2.2 对偶分解法

改成有约束优化的形式

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \sum_{i=1}^{n} f_i(\mathbf{x}_i) \\
\text{s.t.} \quad & \mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2 = \cdots = \mathbf{x}_n
\end{aligned}
$$

写出拉格朗日函数，对偶分解法

$$
\sum_{i=1}^{n} f_i(\mathbf{x}_i) + \sum_{(i,j)\in E} \langle \boldsymbol{\lambda}_{ij}, \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \rangle
$$

别人的东西都在对偶变量中体现，求同存异

$$
\begin{cases}
\mathbf{x}_i^{(k+1)} = \arg\min\limits_{\mathbf{x}_i} \left(f_i(\mathbf{x}_i) + \sum\limits_{(i,j)\in E} (\boldsymbol{\lambda}_{ij}^{(k)}, \mathbf{x}_i) - \sum\limits_{(j,i)\in E} \langle \boldsymbol{\lambda}_{ij}, \mathbf{x}_i \rangle \right) \\
\boldsymbol{\lambda}_{ij}^{(k+1)} = \boldsymbol{\lambda}_{ij}^{(k)} + \alpha^{(k)}(\mathbf{x}_i^{(k+1)} - \mathbf{x}_j^{(k+1)}) - \sum\limits_{(j,i)\in E} \langle \boldsymbol{\lambda}_{ij}^{(k)} \mathbf{x}_i \rangle
\end{cases}
$$

依然要采用递减步长，才能保证收敛

7.2.3 交替方向乘子法

$$
\begin{tikzcd}
\mathbf{x}_i \arrow[r, bend left, "\mathbf{z}_{ij}"] & \mathbf{x}_j \arrow[l, bend left, "\mathbf{z}_{ji}"]
\end{tikzcd}
$$

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \sum_{i=1}^{n} f_i(\mathbf{x}_i) \\
\text{s.t.} \quad & \mathbf{x}_i = \mathbf{z}_{ij}, \forall (i,j) \in E \\
& \mathbf{x}_j = \mathbf{z}_{ji}, \forall (i,j) \in E
\end{aligned}
$$

可分线性约束，进而可以用交替方向乘子法

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n} f_i(\mathbf{x}_i) &+ \sum_{(i,j)\in E} \left(\langle \boldsymbol{\alpha}_{ij}, \mathbf{x}_i - \mathbf{z}_j \rangle + \langle \boldsymbol{\beta}_{ij} k \mathbf{x}_j - \mathbf{z}_{ji} \rangle \right) \\
&+ \sum_{(i,j)\in E} \frac{c}{2} \left(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{z}_{ij}\|^2 + \|\mathbf{x}_j - \mathbf{z}_{ij}\|^2 \right)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{cases}
\mathbf{x}_i^{(k+1)} & = \arg\min_{\mathbf{x}_i} f_i(\mathbf{x}_i) + \sum_{(i,j)\in E} \langle \alpha_{ij}^{(k)}, \mathbf{x}_i \rangle + \sum_{(i,j)\in E} \langle \boldsymbol{\beta}_{ji}^{(k)}, \mathbf{x}_i \rangle \\
& + \frac{c}{2} \sum_{(i,j)\in E} \left\| \mathbf{x}_i - \mathbf{z}_j^{(k)} \right\|^2 + \frac{c}{2} \sum_{(i,j)\in E} \left\| \mathbf{x}_i - \mathbf{z}_{ji}^{(k)} \right\|^2 \\
\mathbf{z}_j^{(k+1)} & = \cdots \\
\boldsymbol{\alpha}_{ij}^{(k+1)} & = \cdots \\
\boldsymbol{\beta}_{ij}^{(k+1)} & = \cdots
\end{cases}
$$

7.3 有限和优化

n个样本，每个样本为$f_i(\mathbf{x})$

$$
\min_{\mathbf{x}} \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f_i(\mathbf{x})
$$

等价于期望极小化问题

$$
\min_{\mathbf{x}} \quad \mathbb{E}\left(f_i(\mathbf{x}, \xi)\right)
$$

$$
\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\mathbf{x}^{(k)})
$$

将k改为$i^{(k)}$，随机梯度下降(Stochastic gradient descent, SGD)，取了一个无偏的估计[Bottou, NIPS 2010]

$$
\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha^{(k)} \nabla f_{i^{(k)}}(\mathbf{x}^{(k)})
$$

注意这里需要采用变步长，否则无法收敛到最优解

$$
\begin{cases}
\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha^{(k)} \nabla f_{i^{(k)}}(\mathbf{x}^{(k)}) \\
\mathbf{x}^\star = \mathbf{x}^\star - \alpha^{(k)} \nabla f_{i^{(k)}}(\mathbf{x}^\star)
\end{cases}
\quad \Longrightarrow \quad \nabla f_{i^{(k)}}(\mathbf{x}^\star) = 0
$$

若问题强凸，$O(\frac{1}{k}) \to O(\frac{1}{k})$；凸，$O(\frac{1}{\sqrt{k}}) \to O(\frac{1}{\sqrt{k}})$
梯度噪声的问题：选的随机梯度与真正的全梯度不同

7.4 方差消减

方差消减(Variance Reduction)：挑选样本数目增大时，方差会减小

1. 小批量(mini-batch)
2. SURG、SAG、SAGA

$$
\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \frac{\alpha}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{y}_i^{(k)}
$$

对于每一个样本都存储一个梯度值

$$\mathbf{y}_i^{(k)} = \begin{cases} \nabla f_i(\mathbf{x}^{(k)}) & i = i^{(k)} \\ \mathbf{y}_i^{(k-1)} & i \neq i^{(k)} \end{cases}$$

当时间足够长，每一个里面都存在最优梯度

$$\mathbf{x}^\star = \mathbf{x}^\star - \frac{\alpha}{n}\sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\mathbf{x}^\star)$$

相当于用空间换时间

7.5 深度神经网络

$$\min \quad \sum_{i=1}^{S} E^{(i)}$$

其中，

$$E^{(i)} = \frac{1}{2}\left\|\mathbf{x}_n^{(i)} - Y^{(i)}\right\|^2$$

为损失函数，$\mathbf{x}_n$为第n层的网络输出$f_n(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{w}_n)$，与有限和优化问题相同

反向传播算法(Back propagation)：自底向上求出E相对于$\mathbf{x}_n$和$\mathbf{w}_n$的梯度

$$\begin{cases} \dfrac{\partial E^{(i)}}{\partial \mathbf{x}_n^{(i)}} = \mathbf{x}_n^{(i)} - Y^{(i)} \\ \dfrac{\partial E^{(i)}}{\partial \mathbf{w}_n} = \dfrac{\partial E^{(i)}}{\partial \mathbf{x}_n^{(i)}} \dfrac{\partial \mathbf{x}_n^{(i)}}{\partial \mathbf{w}_n} = \dfrac{\partial E^{(i)}}{\partial \mathbf{x}_n^{(i)}} \dfrac{\partial f_n(\mathbf{x}_n^{(i)}, \mathbf{w}_n)}{\partial \mathbf{w}_n} \end{cases}$$

7.6 在线优化与动态优化

7.6.1 在线优化

在线优化(Online Learning)：样本不是已有的，而是依照时间给出的

$$\min \quad \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} f_t(\mathbf{x})$$

迭代格式为

$$\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{x}_t - \alpha_t \nabla f_t(\mathbf{x}_t)$$

Regret分析：将当前值丢进下一刻的优化函数中，如果优化效果好，说明有预测能力

7.6.2 动态优化

$$\min \quad f_t(\mathbf{x})$$

梯度下降迭代格式为

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_{t-1} - \alpha \nabla f_t(\mathbf{x}_{t-1})$$

7.7 Nesterov加速

Nesterov加速$\min f(\mathbf{x})$：$O\left(\frac{1}{k^2}\right)$

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{y}^{(k)} - \dfrac{1}{L}\nabla f(\mathbf{y}^{(k)}) \\ \mathbf{y}^{(k+1)} = (1-\boldsymbol{\gamma}^{(k)})\mathbf{x}^{(k+1)} + \boldsymbol{\gamma}^{(k)}\mathbf{x}^{(k)} \\ \boldsymbol{\beta}^{(k)} = \dfrac{1+\sqrt{1+4(\boldsymbol{\beta}^{(k-1)})^2}}{2},\ \boldsymbol{\beta}^{(0)} = 0 \\ \boldsymbol{\gamma}^{(k)} = \dfrac{1-\boldsymbol{\beta}^{(k)}}{\boldsymbol{\beta}^{(k+1)}} \end{cases}$$

构造两个序列，$\mathbf{y}$为辅助序列，利用问题本身**历史信息**，做一个凸组合（先跳一步，从$\mathbf{y}^{(k)}$开始做梯度下降）。权重为$\boldsymbol{\gamma}$，不同时刻权重不同，引入$\boldsymbol{\beta}$系数。

Trick：为避免权重趋于0（$\mathbf{x}$和$\mathbf{y}$趋同），加速了n步后重新设置$\boldsymbol{\beta}$为0。

梯度下降相当于对f做一个二阶近似，二阶Taylor展开。

$$\xrightarrow{\mathbf{x}^{(k)}} f(\mathbf{x}) \longrightarrow \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})$$

Nesterov加速是针对确定性优化问题，而机器学习是随机优化问题。

A 线性代数基础

A.1 非奇异矩阵

关于可逆矩阵的性质如下：

- 可逆矩阵即非奇异(non-singular)矩阵
- 行列式为0
- 满秩

A.2 内积与范数

定义 24 (标准内积). 标准向量内积

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n : \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{y} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

标准矩阵内积

$$\forall X, Y \in \mathbb{R}^{m \times n} = \mathrm{tr}(X^{\mathrm{T}} Y) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} X_{ij} Y_{ij}$$

定义 25 (向量范数). $\|\cdot\|$为范数需要满足以下三个条件

1. 齐次：$\|a\mathbf{x}\| = |a| \|\mathbf{x}\|$
2. 正定：$\|\mathbf{x}\| \geq 0 \iff \mathbf{x} = \mathbf{0}$时取等
3. 三角不等式：$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$

常见的向量范数如下，注意每个元素都要加**绝对值**

- 0-范数：非零元素数目，是伪范数（不符合第一个定义）
- 1-范数：绝对值之和
$$\|\mathbf{x}\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n|$$
- 2-范数：欧几里得距离
$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2}$$
- p-范数：p次方之和的p次根
$$\|\mathbf{x}\|_p = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p}$$
- 无穷范数(Chebyshev)：最大值
$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max\{|x_1|, \ldots, |x_n|\}$$

定义 26 (矩阵的范数). 对于n阶方阵A，若对应非负实数$\|A\|$，满足

1. $\|A\| \geq 0$，当且仅当$A = \mathbf{0}$时等号成立

2. 对任意$\alpha \in \mathbb{R}$，$\|\alpha A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$

3. 对任意两个n阶方阵A和$\mathbf{B}$，满足三角不等式$\|A + \mathbf{B}\| \leq \|A\| + \|\mathbf{B}\|$

4. 对任意两个n阶方阵A和$\mathbf{B}$，满足矩阵乘法要求$\|A\mathbf{B}\| \leq \|A\| \cdot \|\mathbf{B}\|$

则称$\|A\|$为方阵A的矩阵范数。

记$\rho(A) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$为$A$的谱半径，这里$\lambda_i$为$A$的特征值，则常见的矩阵范数定义如下

- 1-范数：绝对值之和
$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$
- 2-范数/谱范数：$A^{\mathrm{T}}A$的谱半径
$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^{\mathrm{T}}A)}$$
- 无穷范数：最大值
$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$
- Frobenius(F-)范数：注意F-范数才是向量2-范数的直接推广
$$\|X\|_F = \left(\mathrm{tr}(X^T X)\right)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} X_{ij}^2\right)^{1/2}$$

A.3 二次型

定义 27 (二次型). $Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} A \mathbf{x}$，其中$A$是对称矩阵

将二次型合并为矩阵的写法，平方项放对角线，交叉项取一半对称写. 以三元二次型为例，观察下面各个元素的去向.

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} A \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \\ = a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{33}x_3^2 + (a_{12} + a_{21})x_1x_2 + (a_{13} + a_{31})x_1x_3 + (a_{23} + a_{32})x_2x_3 \end{aligned}$$

定义 28 (正定(positive definite)矩阵). 若矩阵A满足

$$\forall\, \mathbf{z} \neq 0 :\ \mathbf{z}^{\mathrm{T}} A \mathbf{z} > 0$$

则称A为正定矩阵。

定义 29 (合同(congruent)矩阵). 若存在可逆矩阵C使得$C^{\mathrm{T}}AC = B$，则称A为B合同，记作$A \simeq B$

定义 30 (主子式). 从n阶矩阵中选取行号和列号相同的i列，行列交汇处的元素形成的行列式称为n阶矩阵的一个i阶主子式。如果挑选$1 \sim i$行和$1 \sim i$列，则成为该矩阵的i阶**顺序**主子式。

正定矩阵A的等价命题如下

- A的所有顺序主子式均为正
- A的所有主子式均为正
- A的特征值均为正

半正定矩阵的等价命题如下

- A的所有主子式非负
- A的特征值均非负
- 有实矩阵C使$A = C^{\mathrm{T}}C$

A.4 特征值分解

定义 31 (谱分解/特征值分解). 假设$A \in \mathbb{S}^n$，则A可被分解为$A = Q\Lambda Q^T$，其中$Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$为正交矩阵，满足$Q^{\mathrm{T}}Q = I$，而$\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$

利用特征值可将行列式和迹表示成

$$\det A = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i \qquad \mathrm{tr}\, A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

而谱范数和F-范数同样可表示为

$$\|A\|_2 = \max_{i=1,\ldots,n} |\lambda_i| = \max\{\lambda_1, -\lambda_n\} \qquad \|A\|_F = \left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2\right)^{1/2}$$

最大和最小特征值满足

$$\lambda_{\max}(A) = \sup_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}^{\mathrm{T}}A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}} \qquad \lambda_{\min}(A) = \inf_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}^{\mathrm{T}}A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}}$$

特别地，对于任意$\mathbf{x}$，有

$$\lambda_{\min}(A)\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} \leq \mathbf{x}^{\mathrm{T}}A\mathbf{x} \leq \lambda_{\max}(A)\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$$

令$A \in \mathbb{S}^n_+$的特征值分解为$A = Q\,\mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)Q^{\mathrm{T}}$，则定义$A$的（对称）平方根为

$$A^{1/2} = Q\,\mathrm{diag}(\lambda_1^{1/2}, \ldots, \lambda_n^{1/2})Q^{\mathrm{T}}$$

平方根$A^{1/2}$是矩阵方程$X^2 = A$的唯一的对称半正定的解

A.5 奇异值分解

定义 32 (奇异值分解(SVD)). 假设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}, \mathrm{rank}\, A = r$，那么$A$可被分解为$A = U\Sigma V^{\mathrm{T}}$，其中$U \in \mathbb{R}^{m\times r}$，满足$U^{\mathrm{T}}U = I$，$V \in \mathbb{R}^{n\times r}$满足$V^{\mathrm{T}}V = I$，而$\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$满足

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$$

U的列向量被称为A的左奇异向量，V的列向量被称为右奇异向量，σ_i称为奇异值，进而奇异值分解可写成

$$A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^{\mathrm{T}}$$

其中$u_i \in \mathbb{R}^m$为左奇异向量，$v_i \in \mathbb{R}^n$为右奇异向量

最大最小奇异值可写为

$$\sigma_{\max}(A) = \sup_{\mathbf{x},\mathbf{y}\neq\mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}^{\mathrm{T}} A\mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\|_2 \|\mathbf{y}\|_2} = \sup_{\mathbf{y}\neq\mathbf{0}} \frac{\|A\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{y}\|_2}$$

$$\sigma_{\min}(A) = \begin{cases} \sigma_r(A) & r = \min\{m,n\} \\ 0 & r = \min\{m,n\} \end{cases}$$

定义 33 (条件数). 非奇异矩阵的$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$的条件数定义为

$$\operatorname{cond}(A) = \|A\|_2 \left\|A^{-1}\right\|_2 = \frac{\sigma_{\max}(A)}{\sigma_{\min}(A)}$$

B 矩阵微积分

B.1 基本定义

定义 34 (可微). 设$f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$，若$f$在$\mathbf{x}$处可微，则存在矩阵$Df(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{m\times n}$满足

$$\lim_{\mathbf{z}\in\operatorname{dom} f, \mathbf{z}\neq\mathbf{x}, \mathbf{z}\to\mathbf{x}} \frac{\|f(\mathbf{z}) - f(\mathbf{x}) - Df(\mathbf{x})(\mathbf{z}-\mathbf{x})\|_2}{\|\mathbf{z}-\mathbf{x}\|_2} = 0$$

则称$Df(\mathbf{x})$为f在$\mathbf{x}$处的导数（或$Jacobian$矩阵，具有唯一性）。若$\operatorname{dom} f$为开集，且f在定义域内处处可微，则称为可微函数，并将$\mathbf{z}$的仿射函数

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + Df(\mathbf{x})(\mathbf{z}-\mathbf{x})$$

称为f在$\mathbf{x}$处的一次逼近

通过推导可知

$$Df(\mathbf{x})_{ij} = \frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial x_j},\ i = 1,\ldots,m,\ j = 1,\ldots,n$$

定义 35 (梯度). 对于实函数$f \ :\mapsto \mathbb{R}$，导数$Df(\mathbf{x})$是$1\times n$的矩阵，即行向量，它的转置称为函数的梯度$\nabla f(\mathbf{x}) = Df(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}$，为一个列向量，每一项是偏导数

$$\nabla f(\mathbf{x})_i = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i},\ i = 1,\ldots,n$$

一次逼近可改写为

$$f(\mathbf{x}) + \nabla^{\mathrm{T}} f(\mathbf{x})(\mathbf{z}-\mathbf{x})$$

定理 15 (链式法则). 设$f:\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}^m$在$\mathbf{x}\in\operatorname{int}\operatorname{dom}f$处可微，$g:\mathbb{R}^m\mapsto\mathbb{R}^p$在$f(\mathbf{x})\in\operatorname{int}\operatorname{dom}g$处可微，定义复合函数为$h(\mathbf{z})=g(f(\mathbf{z}))$，则$h$在$\mathbf{x}$处可微，导数为

$$Dh(\mathbf{x})=Dg(f(\mathbf{x}))Df(\mathbf{x})$$

注意是$Jacobi$矩阵才符合链式法则，不是梯度!

考虑复合仿射函数$g(\mathbf{x})=f(A\mathbf{x}+\mathbf{b})$，由链式法则应该得到$Dg(\mathbf{x})=Df(A\mathbf{x}+\mathbf{b})A$，当$f$为实函数时才有如下的梯度公式

$$\nabla g(\mathbf{x})=A^{\mathrm{T}}\nabla f(A\mathbf{x}+\mathbf{b})$$

定义 36 (二阶导数). 如果f在$\mathbf{x}$处二阶可微，则f在$\mathbf{x}\in\operatorname{int}\operatorname{dom}f$处的二阶导数或$Hessian$矩阵为

$$(\nabla^2f(\mathbf{x}))_{ij}=\frac{\partial^2f(\mathbf{x})}{\partial x_i\partial x_j},\ i=1,\ldots,n,\ j=1,\ldots,n$$

进而得到二阶逼近（也是$Taylor$展开）

$$\hat{f}(\mathbf{x})=f(\mathbf{x})+\nabla f(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}(\mathbf{z}-\mathbf{x})+\frac{1}{2}(\mathbf{z}-\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\nabla^2f(\mathbf{x})(\mathbf{z}-\mathbf{x})$$

满足

$$\lim_{\mathbf{x}\in\operatorname{dom}f,\mathbf{z}\neq\mathbf{x},\mathbf{z}\to\mathbf{x}}\frac{|f(\mathbf{z})-\hat{f}(\mathbf{z})|}{\|\mathbf{z}-\mathbf{x}\|_2^2}=0$$

与雅可比矩阵的关系

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

B.2 实值函数对向量的导数

设$f(\mathbf{x}):\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}$，劈形算子$\nabla$默认对$\mathbf{x}$求导，可以得到以下公式。

1. $\nabla(\mathbf{v}^{\mathrm{T}}\mathbf{x})=\mathbf{v}$

   分析. 展开，对每一个元素讨论
   $$\frac{\partial\mathbf{v}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}}{\partial x_i}=\frac{\partial\sum_{i=1}^nv_ix_i}{\partial x_i}=v_i$$

2. $\nabla\|\mathbf{x}\|_2^2=\nabla(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x})=2\mathbf{x}$

   分析. 法一：考虑每一元素
   $$\frac{\partial\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}}{\partial x_i}=\frac{\partial\sum_{i=1}^nx_i^2}{\partial x_i}=2x_i$$
   法二：变量多次出现的求导法则，下标c代表视为常数
   $$\nabla(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x})=\nabla(\mathbf{x}_c^{\mathrm{T}}\mathbf{x})+\nabla(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_c)=2\nabla(\mathbf{x}_c^{\mathrm{T}}\mathbf{x})=2\mathbf{x}_c=2\mathbf{x}$$

3. $\nabla(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}A\mathbf{x})=(A+A^{\mathrm{T}})\mathbf{x}$

分析. 变量多次出现的求导法则

$$
\begin{aligned}
LHS &= \nabla(\mathbf{x}_c^{\mathrm{T}} A\mathbf{x}) + \nabla(\mathbf{x}^{\mathrm{T}} A\mathbf{x}_c) \\
&= \nabla((A^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_c)^{\mathrm{T}}\mathbf{x}) + \nabla((A\mathbf{x}_c)^{\mathrm{T}}\mathbf{x}) \\
&= A^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_c + A\mathbf{x}_c \\
&= RHS
\end{aligned}
$$

4. $\nabla\left(\frac{1}{2}\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2^2\right) = A^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x}-\mathbf{b})$

分析. 法一：展开括号，逐一求导

$$
\begin{aligned}
LHS &= \frac{1}{2}(\nabla((A\mathbf{x}-\mathbf{b})^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x}-\mathbf{b}))) \\
&= \frac{1}{2}(\nabla(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}A\mathbf{x}) - \nabla(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}\mathbf{b}) - \nabla(\mathbf{b}^{\mathrm{T}}A\mathbf{x}) + \nabla(\mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{b})) \\
&= \frac{1}{2}((A^{\mathrm{T}}A + (A^{\mathrm{T}}A)^{T})\mathbf{x} - A^{\mathrm{T}}\mathbf{b} - A^{\mathrm{T}}\mathbf{b}) \\
&= A^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x}-\mathbf{b}) \\
&= RHS
\end{aligned}
$$

法二：线性变换的求导公式

$$
\begin{aligned}
LHS &= \frac{1}{2}A^{\mathrm{T}}\nabla_{A\mathbf{x}-\mathbf{b}}\|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2^2 \\
&= A^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x}-\mathbf{b}) \\
&= RHS
\end{aligned}
$$

B.3 向量值函数对向量的导数

设$\mathbf{f}:\mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$，则劈形算子

$$
\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{f} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} = \left[\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}\right]_{ij} = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right]
$$

得到一个$m\times n$的矩阵，即为雅可比(Jacobi)矩阵

1. $\nabla_{\mathbf{x}}(A\mathbf{x}) = A$

分析. 基于此式，由乘法法则可以推出

$$
\begin{aligned}
\nabla\mathbf{x}^T\mathbf{x} &= (\nabla\mathbf{x}^{\mathrm{T}})\mathbf{x} + \mathbf{x}^{\mathrm{T}}(\nabla\mathbf{x}) \\
&= (\nabla(I\mathbf{x})^{\mathrm{T}})\mathbf{x} + \mathbf{x}^{\mathrm{T}}(\nabla I\mathbf{x}) \\
&= I\mathbf{x} + \mathbf{x}^{\mathrm{T}}I \\
&= 2\mathbf{x}
\end{aligned}
$$

2. $\nabla^2 f = \nabla(\nabla f)$：Hessian矩阵

分析. *Hessian*矩阵其实是$\mathbf{x}$到∇f的*Jacobi*矩阵

$$(\nabla^2 f)_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^{\mathrm{T}}} = \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \partial \mathbf{x}}$$

C 参考资料

1. *Convex optimization*, Stephen Boyd and Lieven Vandenberghe
2. 凸优化（2018年秋季-北京大学），http://bicmr.pku.edu.cn/~wenzw/opt-2018-fall.html
3. 机器学习中的矩阵/向量求导，https://zhuanlan.zhihu.com/p/25063314
4. 矩阵求导术，https://zhuanlan.zhihu.com/p/24709748
5. *The Matrix Cookbook*, Kaare Brandt Petersen, Michael Syskind Pedersen