最优化理论

陈鸿峥

2019.05*

目录

*Build 20190509

1 简介

1.1 优化概述

优化(optimization)：从一个可行解的集合中寻找出最好的元素

例 1.
- 最小二乘线性拟合（凸问题）
- 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
  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$\to$低秩矩阵补全
  电影很多，但类型不多，关联关系有限$\to$**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]$\|\mathbf{z}\|_\star$

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

1.2 分类

- 线性规划/非线性规划
- 凸规划/非凸规划（更好的分类）

目标函数凸函数，可行解集为凸集则是凸优化，一般容易求解

[1] 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

1.3 历史

- Newton-Raphson算法：求零点，等价于求$\min f^2(x)$
- Gauss-Seidel算法：求解线性方程组$A\mathbf{x}=\mathbf{b}$，等价于求$\min \|A\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2^2$
- Lagrange
- 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

2 凸集

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 2. 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

$$\forall x_1,x_2,\ldots,x_k\in\mathcal{C},\theta_1,\ldots,\theta_k\in\mathbb{R},\theta_1+\cdots+\theta_k=1:\ \theta_1x_1+\cdots+\theta_kx_k\in\mathcal{C}$$

- 仿射包*(hull)*：所有仿射组合的集合

$$\operatorname{aff}\mathcal{C}:=\{\theta_1x_1+\cdots+\theta_kx_k\mid\forall x_1,\ldots,x_k\in\mathcal{C},\theta_1+\cdots+\theta_k=1\}$$

- 凸集*(convex set)*

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

- 凸组合

$$\forall x_1,x_2,\ldots,x_k\in\mathcal{C},\theta_1,\ldots,\theta_k\in[0,1],\theta_1+\cdots+\theta_k=1:\ \theta_1x_1+\cdots+\theta_kx_k\in\mathcal{C}$$

- 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)*

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

  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：

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

- 凸锥包：类似前面定义

  由上面的定义易知，仿射组合/凸锥组合（强条件）一定是凸组合。

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

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

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$\mathbf{a} \perp (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$

定义 3 (欧式球(Euclidean ball))**.**

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

范数*(norm)*球可类似定义

定义 4 (椭球(ellipsoid))**.**

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

其中$P \succ 0$代表P**对称**且正定$(P = P^T)$

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

定义 5 (多面体(polyhedron))**.**

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

例 3.
- 空集、点、$\mathbb{R}^n$空间均为仿射
- 任意直线为仿射；若过原点则为凸锥
- $\mathbb{R}^n$空间的子空间[3]为仿射和凸锥
- 超平面为仿射
- 半空间、欧式球、椭球、多面体为凸集

定义 6 (仿射函数)**.**

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

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

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

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

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

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

反透视函数

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

若$c \in \operatorname{dom} P$为凸，则$P(c) := \{P(x), x \in c\}$为凸；反透视函数仍保持$c$的凸性。
考虑$\mathbb{R}^{n+1}$内的线段，$x = (\widetilde{x} \in \mathbb{R}^n, x_{n+1} \in \mathbb{R}_{++}), y = (\widetilde{y}, y_{n+1})$ 则经过透视函数仍是线段

分析.

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

定义 8 (线性分数函数)**.** 仿射函数

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

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

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

[3]零元、加法封闭、数乘封闭

[4]+代表≥ 0，++代表> 0

保凸性

- 凸集的交
- 仿射、逆仿射
- 透视函数
- 线性分数函数

3 凸函数

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

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

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

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

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

相当于每一个剖面上的低维函数都是凸的

3. 一阶条件*(first-order condition)*[5]

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

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

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

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

例 5. $f(x)=a^{\mathrm{T}}x+b$

分析. 有$\nabla f(x)=a$，进而

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

定义 10 (凸函数的扩展(extended-value)). 尽管凸函数的定义域为凸，但往往不好处理，那就将其扩展到

[5] $\nabla^{\mathrm{T}}f(x)=[\nabla f(x)]^{\mathrm{T}}$

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

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

指示/示信(indicator)函数不一定是凸的

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

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

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

分析. $\nabla^2 f(x) = P$

$P \in S_+^n$凸，$P \in S_{++}^n$严格凸

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

分析. 注意$\operatorname{dom} f$不是凸集

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

定义 11 (解析近似)**.** 无穷阶可微

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

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

分析.

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

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \begin{cases} \frac{-\mathrm{e}^{x_i}\mathrm{e}^{x_i}}{i} = j \\ i \neq j \end{cases}$$

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

求$Hessian$矩阵

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

将前面常量丢弃 [6]

$$a_i := v_i\sqrt{z_i} = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}, b_i = \sqrt{z_i}$$

$$\begin{aligned} v^{\mathrm{T}} H v &= (\mathbb{1}^{\mathrm{T}} z) v^{\mathrm{T}} \operatorname{diag}(z) v - v^{\mathrm{T}} z z^{\mathrm{T}} v \\ &= (\sum_i z_i)(\sum_i v_i^2 z_i) - (\sum_i v_i z_i)^2 \\ &= (b^{\mathrm{T}} b)(a^{\mathrm{T}} a) - (a^{\mathrm{T}} b)^2 \qquad \mathit{Cauchy} \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

定义 12 (范数). $p(x)$为范数

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

零范数$\|x\|_0$：非零元素数目，是伪范数（不符合第一个定义）

$\mathbb{R}^n$中的范数都是凸函数，正则化!

分析.

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

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

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

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

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

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

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

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

保持函数凸性

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

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

- 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，$A\in\mathbb{R}^{m\times n},b\in\mathbb{R}^n$，$\operatorname{dom}g=\{x\mid Ax+b\in\operatorname{dom}f\}$

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

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

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

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

– 其实只是在定义域上改变，而不是改变值域，因而函数凸性不会改变

- 两个函数的极大值函数，f_1,f_2为凸

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

- 任意个凸函数极大值函数为凸

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

- 无限个凸函数，$y\in A$，$f(x,y)$对于x为凸，则

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

例 8. 点x到集合C的最远距离

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

位移对于范数凸性不会有影响

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

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

- $r = 1$：$f(x) = x[1] = \max\{x_1, \ldots, x_n\}$，每一项都是$\mathbf{e}_i^{\mathrm{T}} x_i$
- $r > 1$：$f(x) = \max\{x_{i_1} + \cdots + x_{i_r} \mid 1 \leq i_1 < i_2 < \cdots < i_r \leq n\}$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

若$f(x)$为凸，则$g(x, t)$相对于(x, t)联合凸

例 12.
- $f(x) = x^{\mathrm{T}} x$, $g(x, t) = x^{\mathrm{T}} x / t$
- $f(x) = -\log x$, $g(x, t) = t \log(t/x)$
- $u, v \in \mathbb{R}_{++}^n$, $g(u, v) = \sum_{i=1}^n u_i \log(u_i/v_i)$，信息论常用，衡量相似性，$KL$散度

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

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

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

拟凸函数有很好的性质→单模态/单峰函数
凸函数与凸集联系

- 凸函数定义域为凸集
- 凸函数的α次水平集为凸集

4 凸优化问题

4.1 标准型

广义定义：极小化凸函数，约束为凸集

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

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

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

例 13.

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

定理 2. 凸问题局部最优等价于全局最优

分析. 若x为局部最优

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

反证法，设x不是全局最优，y为全局最优，$f_0(x) > f_0(y)$
$z = \theta x + (1-\theta)y$,$\theta = \frac{R}{2\|y-x\|_2}$

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

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

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

矛盾

可微凸目标函数
无约束$\min f_0(x), \nabla f_0^\star(x) = 0$

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

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

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

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

分析. $x^\star$最优，$Ax^\star = b, \forall y Ay = b$

$$\langle \nabla f_0(x^\star), y - x^\star \rangle \geq 0$$
$$\begin{cases} y = x^\star + v \\ Av = 0 \end{cases}, v \in \operatorname{Nul} A$$
$$\forall v \in \operatorname{Nul} A, \langle \nabla f_0(x^\star), v \rangle \geq 0$$

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

例 15. 正约束$\min f_0(x), s.t. x \geq 0$

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

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

1. 若$\nabla f_0(x^\star) \ngeq 0$有矛盾（负数行乘上正无穷），故$\nabla f_0(x^\star) \geq 0$
2. 令$y = 0$，有$0 \geq \langle \nabla f_0(x^\star), x^\star \rangle \implies \sum_{i=1} n(\nabla f_0(x^\star)_i x^\star) \leq 0$
   前面≥ 0，进而互补松弛条件
3. $x^\star \geq 0$

4.2 线性规划

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

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

$\mathbf{s}$为松弛变量(slack variable)
用$\mathbf{x}^+$和$\mathbf{x}^-$拆分，得到$\mathbf{x} = \mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-, \mathbf{x}^+ \ge 0, \mathbf{x}^- \ge 0, \mathbf{s} \ge 0$

例 16 (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$c_1, \ldots, c_n$

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

其中$i = 1, \ldots, m, j = 1, \ldots, n$

线性分数规划

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

等价于

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

分析. 证明两个问题等价，P_0与P_1
若x在P_0内可行

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

若(y, z)在P_1中可行

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

若$z = 0$，x_0为P_0的可行解

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

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

代入看所有条件结论都相同

二次规划(Quadratic Programming)

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

二次约束二次规划(QCQP)

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2}p_0x + q_0^{\mathrm{T}}x + r_0, p \succ 0 \\ \text{s.t.} \quad & \frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}p_ix + q_i^{\mathrm{T}}x + r_i \le 0, i = 1, \dots, m, p_i \succ 0 \\ & Ax = b \end{aligned}$$

最小二乘问题

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

$$\frac{1}{2}(x^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}Ax - 2b^{\mathrm{T}}Ax + b^{\mathrm{T}}b)$$

一范数规范化最小二乘

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

本来用零范数，但用一范数拟合

改写

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

Basic Pursuit

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

原式很难平衡两者，下式只需考虑$\|x\|_1$的影响

岭回归(Ridge)：所有x差距不要太大

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

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

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

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

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

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

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

$\mathbb{R}^{n\times n}, b_i \in \mathbb{R}$

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

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

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

谱范数代表$A(x)$的最大奇异值[7]

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

例 18 (最快分布式线性平均)**.**

$$x(t) = Px(t-1)$$

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

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

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

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

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

$$\min \max\{|\lambda_2|, |\lambda_n|\}$$

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

---

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

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

多目标优化问题：帕累托最优解
若有另一解在某个指标上更好，则必有指标更差

帕累托最优值/帕累托最优面

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

若$f_{01}(x), \ldots, f_{0q}(x)$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

拉格朗日函数(Lagrangian function)

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

拉格朗日乘子(multiplier)

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

拉格朗日对偶函数

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

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

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

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

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

$x^\star$原问题最优解

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

$$
L(x^\star, \lambda, v) = f_0(x^\star) + (\cdots) \leq P^\star
$$

$$
g(\lambda, v) = \inf_{x\in\mathcal{D}} L(x, \lambda, v) \leq L(x^\star, \lambda, v) \leq P^\star
$$

例 19.

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

分析.

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

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

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

因而得到对偶问题

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

例 20.

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

分析. 注意λ前面符号，要化为一般形式

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

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

对偶问题，由于要极大，故不考虑负无穷部分

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

逆过来求解

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

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

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

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

对偶的对偶不一定回去，线性规划才满足

例 21.

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

分析.

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

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

补充求梯度：$2(w + \operatorname{diag}(v))x = 0$

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

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

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

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

对偶间隙(duality gap)：$p^\star - d^\star \ge 0$

- 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slater条件满足，$p^\star = d^\star$

定义 16 (相对内点(relative interior))**.**

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

定理 3 (Slater条件)**.**

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

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

例 22. *二次规划(QP)*

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

Slater条件$\{x \mid Ax = b\}$*非空*

例 23. *二次约束二次规划(QCQP)*

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2} x^{\mathrm{T}} P_0 x + q_0^{\mathrm{T}} + r_0 \\ \text{s.t.} \quad & \frac{1}{2} x^{\mathrm{T}} P_i x + q_i^{\mathrm{T}} x + r_i \leq 0, \quad i = 1, \ldots, m \end{aligned}$$

$P_0, \ldots, P_i$*半正定*

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

例 24.

$$\begin{aligned} \min \quad & x, x \in \mathbb{R} \\ \text{s.t.} \quad & xleq0 \\ & -x \leq 0 \end{aligned}$$

分析.

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

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

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

$$\Longrightarrow p^\star = d^\star = 0$$

置信域问题

$$
\begin{aligned}
\min \quad & x^{\mathrm{T}}Ax+b^{\mathrm{T}}x \\
\text{s.t.} \quad & x^{\mathrm{T}}x \le 1 \\
& A \not\succeq 0
\end{aligned}
$$

依然可以得到$p^\star = d^\star$

几何解释

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

$$G = \{(f_1(x), f_0(x)) \mid x \in \mathcal{D}\}$$

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

$$L(x,\lambda) = f_0(x) + \lambda f_1(x)$$

$$g(\lambda) = \inf_{x\in\mathcal{D}}\{f_0(x)+\lambda f_1(x)\}$$

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

$$\lambda \ge 0, \max g(\lambda)$$

注意问题必须要有可行解

经济学解释：满足原材料约束下，利润最多价格$\lambda_i \ge 0$

$$g(\lambda) = \inf_x f_(x) + \lambda_1 f_1(x) + \cdots + \lambda_m f_m(x) = \inf_x L(x,\lambda)$$

则$g(\lambda)$为对偶函数，市场$p^\star$损失最小（$g(\lambda)\le p^\star$）

$$d^\star = \sup_{lambda\ge 0} g(\lambda)$$

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

多目标优化解释

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

$$\min_x f_0(x) + \lambda_1 f_1(x) + \cdots + \lambda_m f_m(x)$$

鞍点(saddle point)解释

$$f(w,z), w \in S_w, z \in S_z$$

极小极大不等式

$$\sup_{z \in S_z} \inf_{w \in S_w} f(wz) \le \inf_{w \in S_w} \sup_{z \in S_z} f(w,z)$$

若有$(\tilde{w}, \tilde{z})$使得

$$(\tilde{w}, \tilde{z}) = \arg \max_{z \in S_z} \min_{w \in S_w} f(w,z)(\tilde{w}, \tilde{z}) \quad = \arg \min_{w \in S_w} \max_{z \in S_z} f(w,z)$$

则$(\tilde{w}, \tilde{z})$为鞍点

有下面不等式成立

$$f((\tilde{w}, z)) \le f(\tilde{w}, \tilde{z}) \le f(w, \tilde{z}), \forall z \in S_z, w \in S_w$$

即从一个方向望过去是最小，从另一个方向望过去是最大

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

$$d^\star = \sup_{\lambda \ge 0} g(\lambda) = \sup_{\lambda \ge 0} \inf_x L(x,\lambda) \implies p^\star \ge d^\star$$

如果$L(x,\lambda)$有鞍点，则必有$p^\star = d^\star$

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则是非常好的点

若$(\tilde{x}, \tilde{\lambda})$为$L(x,\lambda)$鞍点 $\iff p^\star = d^\star$且$\tilde{x}, \tilde{\lambda}$为原对偶问题最优解 $\implies$ 若为鞍点，$p^\star = d^\star$

$$\sup_{\lambda \ge 0} \inf_x L(x,\lambda) = \inf_x \sup_{\lambda \ge 0} L(x,\lambda)$$

已知$(\tilde{x},\tilde{\lambda})$为左边最优

$$\tilde{\lambda}=\arg\max_{\lambda\geq 0}\inf_{x}L(x,\lambda)$$

$$\tilde{x}=\arg\inf_{x}\sup_{\lambda\geq 0}L(x,\lambda)$$

则$\tilde{\lambda}$对偶最优，$\tilde{x}$为原问题最优

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

定理 4. *$(\tilde{x},\tilde{\lambda})$为拉格朗日函数鞍点$\iff p^\star=d^\star$，且$(\tilde{x},\tilde{\lambda})$为原对偶的最优解*

分析. 右推左，$(\tilde{x},\tilde{\lambda})$原对偶可行

$$f_i(\tilde{x})\leq 0,i=1,\dots,m,\tilde{\lambda}\geq 0$$

因$p^\star=d^\star$，有

$$\begin{aligned}f_0(\tilde{x})&=g(\tilde{\lambda})\\ &=\inf_{x}\{f_0(x)+\sum_{i=1}^{m}\tilde{\lambda}_i f_i(x)\}\\ &\leq f_0(\tilde{x})+\sum_{i=1}^{m}\tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{x})\\ &\leq f_0(\tilde{x})\end{aligned}$$

进而不等号都得为等号

1. $\inf_x L(x,\tilde{\lambda})=L(\tilde{x},\tilde{\lambda})$
2. $f_0(\tilde{x})=\sup_{\lambda\geq 0}\{f_0(\tilde{x})+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i f_i(\tilde{x})\}=\sup_{\lambda\geq 0}L(\tilde{x},\lambda)$

$$\implies L(\tilde{x},\tilde{\lambda})=\sup_{\lambda\geq 0}L(\tilde{x},\lambda)$$

$$\implies (\tilde{x},\tilde{\lambda})\text{是}L(x,\lambda)\text{的鞍点}$$

一般优化问题的对偶理论

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

不一定是凸问题，但$p^\star=d^\star$，最优解满足什么条件？

对偶问题

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

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

$$f_i(x^\star)\leq 0, i=1,\dots,m, \quad h_i(x^\star)=0, i=1,\dots,p, \quad \lambda^\star \geq 0$$

$$\begin{aligned}p^\star = d^\star \implies f_0(x^\star) &= g(\lambda^\star, v^\star)\\ &= \inf_x\{f_0(x)+\sum_{i=1}^m \lambda_i^\star f_i(x)+\sum_{i=1}^p v_i^\star h_i(x)\}\\ &\leq f_0(x^\star)+\sum_{i=1}^m \lambda_i^\star f_i(x^\star)+\sum_{i=1}^p v_i^\star h_i(x^\star)\\ &\leq f_0(x^\star)\end{aligned}$$

同上理，不等号全取等

1. $\lambda_i^\star f_i(x^\star)=0, \forall i=1,\dots,m$
2. $x^\star = \arg\min_x L(x,\lambda^\star,v^\star)$

若f_0, f_i, h_i均可微，则必要条件为

$$\frac{\partial L(x,\lambda^\star,v^\star)}{\partial x}\bigg|_{x=x^\star}=0$$

可微优化问题的KKT(Karush-Kuhn-Tucker)条件

- $f_i(x^\star)\leq 0, i=1,\dots,m$ primal feasibility
- $h_i(x^\star)=0, i=1,\dots,p$ primal feasibility
- $\lambda^\star \geq 0$ dual feasibility
- $\lambda_i^\star f_i(x^\star)=0, i=1,\dots,m$ complementarity slackness(对偶互斥条件)
- $\frac{\partial L(x,\lambda^\star,v^\star)}{\partial x}\bigg|_{x=x^\star}=0$ stablity

定理 5. *若原问题为凸，则KKT条件为***充要条件**

分析. 必要性已证，证明充分性

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

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

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

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

例 25 (Waterfilling算法)**.** 共n个信道*(channel)*

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

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

分析. *KKT*条件

- $x^\star \geq 0$
- $\mathbb{1}^{\mathrm{T}} x^\star = 1$
- $\lambda^\star \geq 0$
- $x_i^\star \lambda_i^\star = 0, \forall i$

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

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

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

$$\implies v^\star \frac{1}{\alpha_i + x_i^\star}, i = 1,\ldots,n$$

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

若$v^\star > \frac{1}{\alpha_i} \implies x_i^\star = 0$
若$v^\star < \frac{1}{\alpha_i}$

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

进而

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

结合$\sum_i x_i^\star = 1$，即注水算法

Motivation：误差，调整参数测灵敏度

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

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

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

布尔线性规划问题做松弛(relaxation)

$$
x_i \in \{0, 1\} \implies 1 \geq x_i \geq 0
$$

6 优化算法

6.1 简介

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

罚函数法

$$
\begin{aligned}
\min f_0(x) + \frac{\lambda}{2} \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 \\
\tilde{x} = \arg\min_x F \\
\nabla f_0(\tilde{\lambda}) + \lambda A^{\mathrm{T}}(A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
L(x,v) &= f_0(x) + v^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x}-\mathbf{b}) \\
\Longrightarrow\ g(v) &= \inf_x f_0(x) + v^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x}-\mathbf{b}) \\
v &= \lambda(A\tilde{\mathbf{x}}-\mathbf{b}) \\
\Longrightarrow g(\lambda(A\tilde{x}-\mathbf{b}) &= \inf_x f_0(x) + \lambda(A\tilde{x}-b)^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x}-\mathbf{b}) \\
\nabla f_0(x) + \lambda A^{\mathrm{T}}(A\tilde{x}-\mathbf{b}) &= 0
\end{aligned}
$$

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

log-barrier

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

$\min f_0(x)$可微，凸，无约束

1. 所有算法都是迭代的

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} d^{(k)}$$

   $\alpha \geq 0$为步长，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

$$\alpha^{(k)} = \arg\min_{\alpha \geq 0} f_0(x^{(k)} + \alpha d^{(k)})$$

3. 关键问题是选方向

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！

不精确线搜索(Armijo Rule)：一阶泰勒展开

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

6.2 梯度下降法

$d^{(k)} = -\nabla f_0(x^{(k)})$

- 能否收敛
- 收敛到哪里
- 收敛速度

假设

0. 基本假设：f为可微的凸函数，

$$x^\star = \arg\min_x f_0(x)$$

存在且有限，$f_0(x^\star)$有限

1. Lipschitz连续梯度

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

等价定义：

a. 若$f_0(x)$二阶可微

$$\nabla^2 f_0(x) \preceq LI, \forall x$$

b. 下界

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

c. 上界

$$\langle \nabla f_0(x) - \nabla f_0(y), x-y\rangle \leq L\|x-y\|$$

d. 当函数为凸时

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

2. 强凸性(strong convexity)

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

二阶可微情况下的等价定义

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

例 26.

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

区别于严格凸(strictly convex)，强凸一定是严格凸

定理 6. 严格凸函数只有一个最小值点

分析. 反证法，假设x, y均为最小值点，且$x \neq y$

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

定理 7. 若$f_0(x)$有*Lipschitz*连续梯度，常数L，若$\alpha \in (0, \frac{2}{L})$，则有

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

即以$O(\frac{1}{k})$速度收敛

分析. 1° 点的单调性：与任意$x^\star$的距离在缩小

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

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

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

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

3° 函数值的充分下降（即证明收敛性）

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

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

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

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

错位相消可得结论$O(\frac{1}{k})$收敛速度

定理 8. 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

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

分析.

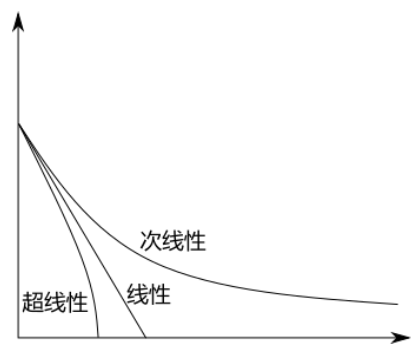
$$\begin{aligned}\left\|x^{(k)}-x^{\star}\right\|^{2} &= \left\|x^{(k)}-\alpha\nabla f_{0}(x^{(k)})-x^{\star}\right\|^{2} \\ &= \left\|x^{(k)}-x^{\star}\right\|^{2}-2\alpha\langle x^{(k)}-x^{\star},\nabla f_{0}(x^{(k)})\rangle+\alpha^{2}\left\|\nabla f_{0}(x^{(k)})\right\|^{2} \\ &\leq \left\|x^{(k)}-x^{\star}\right\|^{2}-\frac{2\alpha}{\mu+L}\left\|\nabla f_{0}(x)\right\|^{2}+\alpha^{2}\left\|\nabla f_{0}(x^{(k)})\right\|^{2} \qquad \text{内积不等式} \\ &\leq RHS\end{aligned}$$

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

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

- 次线性收敛
- 线性收敛
- 超线性收敛



例 27.

$$f_{0}(x)=\frac{1}{2}\left\|Ax-b\right\|_{2}^{2}$$

分析.

$$x^{(0)}\rightarrow x^{(1)}$$

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

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

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

可以通过预处理(precondition)来解决条件数糟糕的问题

f_0，Lipschitz连续梯度(L)，强凸(μ)，函数值收敛性

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

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

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

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

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

Armijo Rule

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

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

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

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

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

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

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

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

梯度下降法的解释1

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

将f_0在$x^{(k)}$处进行一阶Taylor展开

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

求梯度

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

解释2

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

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

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

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

通过改变不同的范数，有不同的特性

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

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

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

$$\alpha^{(k)} = \arg\min f_0(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}), \alpha_{\max} \geq \alpha \geq \alpha_{\min}$$

6.3 非光滑优化问题

6.3.1 次梯度法

$$\min f_0(x), \qquad f_0\text{连续，凸，不可微}$$

梯度下降法→次梯度(subgradient)法

$g_0(x) \in \partial f_0(x)$（注意凹函数则对应的是supgradient）

$$f_0(y) \geq f_0(x) + \langle g_0(x), y - x \rangle, \forall y$$

$f(x) = |x|$在零点处次梯度为$[-1, 1]$

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

只要有$0 \in \partial f_0(x_0)$就有最优解$x = x_0$

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

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$\frac{1}{\sqrt{k}}$

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

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

$$\bar{x}^{(k)} := \frac{\sum_{i=0}^{k} \alpha^{(i)} x^{(i)}}{\sum_{i=0}^{k} \alpha^{(i)}}$$

$$f_0(\bar{x}^{(k)}) - f_0(x^\star)$$

假设函数Lipschitz连续

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

$\forall x^\star$最优

$$\begin{aligned}
&\left\|x^{(k+1)} - x^\star\right\|^2 = \left\|x^{(k)} - \alpha^{(k)} g_0(x^{(k)}) - x^\star\right\|^2 \\
&= \left\|x^{(k)} - x^\star\right\|^2 - 2\langle \alpha^{(k)} g_0(x^{(k)}), x^{(k)} - x^\star \rangle + (\alpha^{(k)})^2 \left\|g_0(x^{(k)})\right\|^2 \\
&\leq \left\|x^{(k)} - x^\star\right\|^2 - 2(\alpha^{(k)})^2 (f_0(x^{(k)}) - f_0(x^\star)) + (\alpha^{(k)})^2 G^2 \\
&\implies \left\|x^{(k+1)} - x^\star\right\|^2 \leq \left\|x^{(0)} - x^\star\right\|^2 - 2\sum_{i=0}^{k} \alpha^{(i)} (f_0(x^{(i)}) - f_0(x^\star)) + \sum_{i=0}^{k} (\alpha^{(i)})^2 G^2 \\
&\implies 2\sum_{i=0}^{k} \alpha^{(i)} (f_0(x^{(i)}) - f_0(x^\star)) \leq \left\|x^{(0)} - x^\star\right\|^2 + \sum_{i=0}^{k} (\alpha^{(i)})^2 G^2
\end{aligned}$$

$$\sum_{i=0}^{k}\alpha^{(i)}(f_0(x^{(i)})-f_0(x^\star))\geq\left(\sum_{i=0}^{k}\alpha^{(i)}\right)\inf_{i=0,\dots,k}(f_0(x^{(i)})-f_0(x^\star))$$

$$\Longrightarrow\inf_{i=0,\dots,k}(f_0(x^{(i)})-f_0(x^\star))\leq\frac{\left\|x^{(0)}-x^\star\right\|^2+G^2\sum_{i=0}^{k}(\alpha^{(i)})^2}{2\sum_{i=0}^{k}\alpha^{(i)}}$$

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$O(\frac{\log k}{\sqrt{k}})$，可以证明在该假设下该收敛速度最优

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

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

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

另$N=\max\{N_1,N_2\},\forall k>N$

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

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

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x有界的

6.3.2 邻近点梯度法(proximal gradient method)

有**结构**，不可微

$$\min f_0(x)=s(x)+r(x)$$

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

$$r(x),\hat{x}\cdot\alpha>0$$

邻近点投影(proximal mapping)

$$\min_x r(x)+\frac{1}{2\alpha}\left\|x-\hat{x}\right\|^2$$

例 28 (LASSO)**.**

$$f_0(x)=\frac{1}{2}\|y-Ax\|^2+\lambda\|x\|_1$$

分析. 本来想优化*0*-范数，但因为不好做，故变为优化*1*-范数

$$\arg\min\lambda\|x\|_1+\frac{1}{2\alpha}\|x-\hat{x}\|^2$$

*Hessian*矩阵是单位阵，好解得多

$$\lambda\sum_{i=1}^n\|x_i\|+\frac{1}{2\alpha}\sum_{i=1}^n(x_i-\hat{x}_i)^2$$

由于每一维并没有耦合在一起，因此相当于每一个维度都最优化

$$\arg\min\lambda|x_i|+\frac{1}{2\alpha}(x_i-\hat{x}_i)^2$$

$$0\in\lambda\partial|x_i|+\frac{1}{\alpha}(x_i-\hat{x}_i)$$

1. 若$x_i>0$，则

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

$$\implies x_i=\hat{x}_i-\alpha\lambda,\hat{x}_i>\alpha\lambda$$

2. 若$x_i<0$，则

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

$$\implies x_i=\hat{x}_i+\alpha\lambda,\hat{x}_i<\alpha\lambda$$

3. 若$x_i=0$，则

$$0\in[-\lambda,\lambda]-\frac{1}{\alpha}\hat{x}_i\implies 0\in[-\lambda-\frac{1}{\alpha}\hat{x}_i,\lambda-\frac{1}{\alpha}\hat{x}_i]$$

$$0\geq-\lambda-\frac{1}{\alpha}\hat{x}_i\implies\hat{x}_i\geq-\lambda\alpha,\hat{x}_i\leq\lambda\alpha$$

画软门限*(soft thresholding)*图，横轴$\hat{x}_i$，纵轴x_i

- $x^{(k+\frac{1}{2})}=x^{(k)}-\alpha A^{\mathrm{T}}(Ax^{(k)}-y)$
- $x^{(k)}=\arg\min_x\lambda\|x\|_1+\frac{1}{2\alpha}\left\|x-x^{(\frac{1}{2})}\right\|^2$

即*ISTA*算法

例 29 (盒限制(box constrained)优化问题)**.**

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

分析.

$$\begin{aligned}\arg\min r(x)+\frac{1}{2\alpha}\|x-\hat{x}\|^2 \\ &= \arg\min \frac{1}{2\alpha}\|x-\hat{x}\|^2 \\ &s.t. \forall i, x_i \in [l_i, u_i]\end{aligned}$$

如果有约束$x \in \mathcal{C}$

- $x^{(k+\frac{1}{2})} = x^{(k)} - \alpha \nabla S(x^{(k)})$
- $x^{(k+1)} = \arg\min_x I_{\mathcal{C}}(x^{(k+\frac{1}{2})}) + \frac{1}{2\alpha}\left\|x - x^{(k+\frac{1}{2})}\right\|^2 = \arg\min_x \frac{1}{2\alpha}\left\|x - x^{(k+\frac{1}{2})}\right\|^2, x \in \mathcal{C}$
- 相当于做投影，故称投影梯度法

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

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）

收敛性能与梯度下降法类似

例 30 (矩阵补全)**.** $Y \in \mathbb{R}^{m\times n}, \{Y_{ij}, (i,j) \in \Omega\}$

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

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

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

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

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

其中P_Ω为0，若原矩阵中该项不存在；存在的话则保持不变

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

对B做奇异值分解，U为酉矩阵

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

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

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

$$0 \in [\lambda UDV^{\mathrm{T}} + \frac{1}{\alpha}(B - B^{(k+\frac{1}{2})})]$$

$$B = U\Sigma V^{\mathrm{T}},\ d = \partial \|\sigma\|_1$$

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

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

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

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*(soft thresholding)*算法

一阶方法总结：

- 梯度下降法
- 次梯度法：在随机/不确定性优化问题中很有效
- 邻近点梯度法

6.4 二阶优化方法

6.4.1 牛顿法

牛顿法(Newton's method)：要求$f_0(x)$二阶可微，强凸

$$\min f_0(x^{(k)} + v) \approx \min_{\|v\|=1} f_0(x^{(k)}) + \langle \nabla f_0(x^{(k)}), v \rangle$$

$$\approx \min_v f_0(x^{(k)}) + \langle \nabla f_0(x^{(k)}), v\rangle + \frac{1}{2} v^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(x^{(k)}) v$$
$$\Longrightarrow \nabla f_(x^{(k)}) + \nabla^2 f(x^{(k)}) v = 0$$
$$\Longrightarrow v = -(\nabla^2 f(x^{(k)}))^{-1} \nabla f_0(x^{(k)}) \rightarrow \text{牛顿方向}$$

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

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

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

假设$\nabla^2 f(x)$Lipschitz连续

- 若$\left\|\nabla f_0(x^{(k)})\right\|_2 > \eta$，阻尼(damped)牛顿段
  用Armijo Rule算步长，$\exists \gamma > 0$，$f_0(x^{(k+1)}) - f_0(x^{(k)}) \leq -\gamma$
- 若$\left\|\nabla f_0(x^{(k)})\right\|_2 \leq \eta$，纯牛顿段
  $\alpha = 1, f_0(x^{(k+1)}) - f_0(x^{\star}) \leq \Delta(\frac{1}{2})^{2^k}, \exists \Delta > 0$，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 31. $\min \frac{1}{2} x^{\mathrm{T}} px + q^{\mathrm{T}} r + c, P \succ 0$

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

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

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

在$x = k+1$点处做Taylor展开

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

$$q^{(k)} = \nabla f_0(x^{(k+1)}) - \nabla f_0(x^{(k)})$$
$$p^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$$

$$\begin{cases} q^{(k)} = B^{(k+1)} p^{(k)} \\ p^{(k)} = G^{(k+1)} q^{(k)} \end{cases}$$

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）

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

$$p^{(k)} = G^{(k+1)} q^{(k)} = G^{(k)} q^{(k)} + \alpha^{(k)} z^{(k)} (z^{(k)})^{\mathrm{T}} q^{(k)}$$
$$\Longrightarrow \Delta G^{(k)} = \frac{(p^{(k)} - G^{(k)} q^{(k)})(p^{(k)} - G^{(k)} q^{(k)})^{\mathrm{T}}}{(q^{(k)})^{\mathrm{T}} (p^{(k)} - G^{(k)} q^{(k)})}$$

   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)

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

   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)

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

- 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 有约束优化方法

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s.t.} \quad & x \in C \end{aligned}$$

变为

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

本质上都是在考虑它的KKT条件

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

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

等价于KKT条件

$$
\begin{cases}
Ax^\star = b \\
px^\star + q + A^{\mathrm{T}} v^\star = 0
\end{cases}
$$

等价于

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

6.5.1 约束满足的牛顿法

若方程组非线性，那就做一个线性化

$$
\begin{aligned}
\underset{d}{\arg\min} \quad & f_0(x^{(k)} + d) = d^{(k)} \\
\text{subject to} \quad & A(x^{(k)} + d) = b
\end{aligned}
$$

近似等价于（二阶近似Taylor展开）

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

写出问题关于d的KKT条件，可得等价条件

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

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

6.5.2 拉格朗日乘子法/对偶分解法

$$L(x,v)=f_0(x)+\langle Ax-b,v\rangle$$

更新原变量和对偶变量

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

$\alpha^{(k)}$可以是固定步长，也可以是递减步长

即为**找鞍点**，x方向上找最小值，本来v方向上要找最大值，但容易到正无穷。因此换种方法$v^{(k)}$做一个保守的计算，每一步都走一个很小的步长。

例 32.

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

分析.

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

对偶次梯度法：v才是最关键的，只是在寻找最优v的时候顺带找到了x（收敛到$v^\star$的同时也找到了$x^\star$）

$$D(v)=\inf_x L(x,v)$$

$D(v)$为凹函数，关注$-D(v)$

$$\begin{cases}-(Ax^{(k+1)}-b)\\ x^{(k+1)}=\arg\min_x L(x,v^{(k)})\end{cases}$$

$$v^{(k+1)}=v^{(k)}-\alpha^{(k)}(-(Ax^{(k+1)})-b)$$

若$f_0(x)$为凸，若$\hat{x}=\arg\min_x L(x,\hat{\lambda})$，则$-(A\hat{x}-b)$为$-D(\lambda)$在$\hat{\lambda}$的次梯度

$$\forall v:\ -D(\lambda)\geq -D(\hat{\lambda})+\langle v-\hat{\lambda},g(\hat{\lambda})\rangle$$

$$\begin{aligned}D(v)&=\inf_x L(x,v)\\ &=\inf_x f_0(x)+\langle v,Ax+b\rangle\\ &\leq f_0(\hat{x})+\langle v,A\hat{x}-b\rangle\\ &=f_0(\hat{x})+\langle\lambda,A\hat{x}-b\rangle+\langle v-\hat{\lambda},A\hat{x}-b\rangle\\ &=D(\hat{\lambda})+\langle v-\hat{\lambda},A\hat{x}-b\rangle\end{aligned}$$

$$-D(v) \geq -D(\hat{\lambda}) + \langle v - \hat{\lambda}, -(A\hat{x} - b) \rangle$$

进而得到$-(A\hat{x}-b)$就是一个次梯度

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$D(v)$何时可微？

任何$-D(\lambda)$都具有$-(A\hat{x}-b)$的形式，得到当$f_0(x)$**严格凸**时，$f_0(x)+\langle \hat{\lambda}, Ax-b \rangle$严格凸，进而$D(v)$可微

原对偶次梯度法：计算量出在$x^{(k+1)}$，那么想办法近似

$$\begin{cases} x^{(k+1)} & = x^{(k)} - \alpha^{(k)} \partial_x L(x, v^{(k)}) \\ v^{(k+1)} & = v^{(k)} + \alpha^{(k)} \partial_v L(x^{(k+1)}, v) \\ & v^{(k)} + \alpha^{(k)} (Ax^{(k+1)} - b) \end{cases}$$

$v^{(k+1)}$需要等待$x^{(k+1)}$，将其换成下式可以不用等待

$$v^{(k)} + \alpha^{(k)} (Ax^{(k)} - b)$$

由于两个方向都不精确，故收敛性质糟糕。

6.5.3 增广(augmented)拉格朗日法

：当函数不是严格凸时，依然能得到很好的效果

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

$$L(x,v) = f_0(x) + \langle v, Ax-b \rangle$$

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

增广拉格朗日函数是另一个问题的拉格朗日函数

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

两个问题的原对偶最优解相同

设$(x^\star, v^\star)$为原问题最优解

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

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

$$
\nabla_x)(f_0(x) + \langle v^\star, Ax - b\rangle)\Big|_{x=x^\star} = 0
$$

$$
\begin{aligned}
&\nabla_x)(f_0(x) + \langle v^\star, Ax - b\rangle + \frac{c}{2}\left\|Ax - b\right\|^2)\Big|_{x=x^\star} = 0 \\
=&\nabla_x(\frac{c}{2}\left\|Ax - b\right\|^2) \\
=&cA^{\mathrm{T}}(Ax - b)\Big|_{x=x^\star} = 0
\end{aligned}
$$

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

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 33.

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

分析.

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

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

增广拉格朗日法

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

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

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

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

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

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

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

$$
\min -\frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2
$$

6.5.4 交替方向乘子法

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

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f_1(x) + f_2(x) \\
\text{s.t.} \quad & Ax + By = 0
\end{aligned}
$$

$$
L_c(x,y,v) = f_1(x) + f_2(y) + \langle v, Ax+By\rangle + \frac{c}{2}\|Ax+By\|_2^2
$$

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

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

$$
\begin{cases}
x^{(k+1)} = \arg\min_x L_c(x, y^{(k)}, v^{(k)}) \\
\qquad = \arg\min_x f_1(x) + \langle v^{(k)}, Ax\rangle + \frac{c}{2}\left\|Ax + By^{(k)}\right\|_2^2 \\
\qquad \iff \arg\min_x f_1(x) + \frac{c}{2}\left\|Ax + By^{(k)} + \frac{v^{(k)}}{c}\right\|_2^2 \qquad \text{配方，关于}y^{(k)}\text{的项为常数项，可忽略} \\
y^{(k+1)} = \arg\min_y L_c(x^{(k+1)}, y, v^{(k)}) \\
\qquad \iff \arg\min_y f_1(x) + \frac{c}{2}\left\|Ax^{(k+1)} + By + \frac{v^{(k)}}{c}\right\|_2^2 \\
v^{(k+1)} = v^{(k)} + c(Ax^{(k+1)} + By^{(k+1)})
\end{cases}
$$

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 34 (LASSO)**.**

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

分析. 写成交替方向乘子法的格式

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

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

对于x可以求出显式解

$$\begin{aligned} & A^{\mathrm{T}}(Ax-b) + c(x - y^{(k)} + \frac{v^{(k)}}{c}) \\ \Longrightarrow \ & (A^{\mathrm{T}}A + cI)x = A^{\mathrm{T}}b + cy^{(k)} - v^{(k)} \end{aligned}$$

同样对于y也可以求出显式解

6.5.5 并行优化

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

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

针对LASSO问题，每个人都有一个样本(A_i, b_i)，最小化样本之和，以及正则化项

$$\begin{cases} (A_1, b_1) \implies \frac{1}{2}\|A_1 x - b_1\|_2^2 \\ \vdots \\ (A_n, b_n) \implies \frac{1}{2}\|A_N x - b_N\|_2^2 \\ g(x) = v\|x\|_1 \end{cases}$$

原问题即为

$$\min_x v\|x\|_1 + \frac{c}{2}\left\|\begin{bmatrix} A_1 & \cdots & A_N \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} b_1 & \cdots & b_N \end{bmatrix}\right\|_2^2$$

并行梯度下降法

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

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。

对偶分解法

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

$$\begin{cases} L(x, z, v) = \sum i = 1^N f_i(x_i) + g(z) + \sum_{i=1}^{N} \langle v_i, x_i z \rangle \end{cases}$$

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

$$\Longrightarrow \begin{cases} x_i^{(k+1)} = \arg\min_{x_i} f_i(x_i) + \langle v_i^{(k)}, x_i \rangle \\ z^{(k+1)} = \arg\min_{z_i} g(z) - \sum_{i=1}^{N} \langle v_i^{(k)}, z \rangle \\ v_i^{(k+1)} = v_i^{(k)} + \alpha \langle x_i^{(k+1)}, z^{(k+1)} \rangle \end{cases}$$

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。