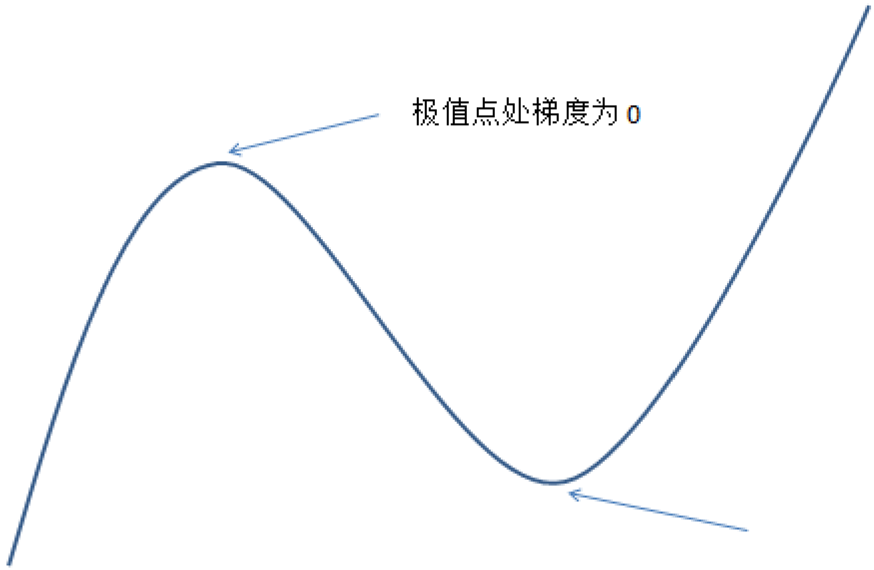
无约束优化问题

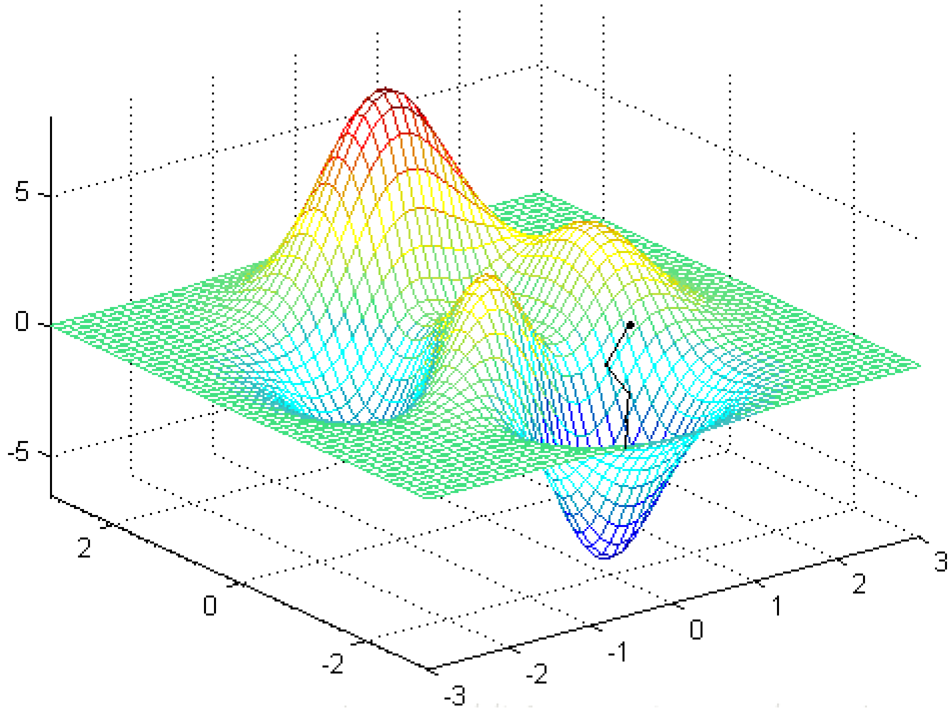
无约束的优化问题，一般就是要使一个表达式取到最小值：

$$minf(x)$$
$$\text{如果是换成问题}\ maxf(x)\text{一般情况会转成}\ min(-f(x))$$



所以在极值点处一定满足 $\frac{\partial f(x)}{\partial x}|_{x=x_0} = 0$，但这只是必要条件，具体还要根据实际情况判断是在 x_0 的领域内满足 $f(x) \geq f(x_0)$ 或者 $f(x) \leq f(x_0)$,比如 $f(x) = x^3$ 在 x = 0 处就不是极值点。

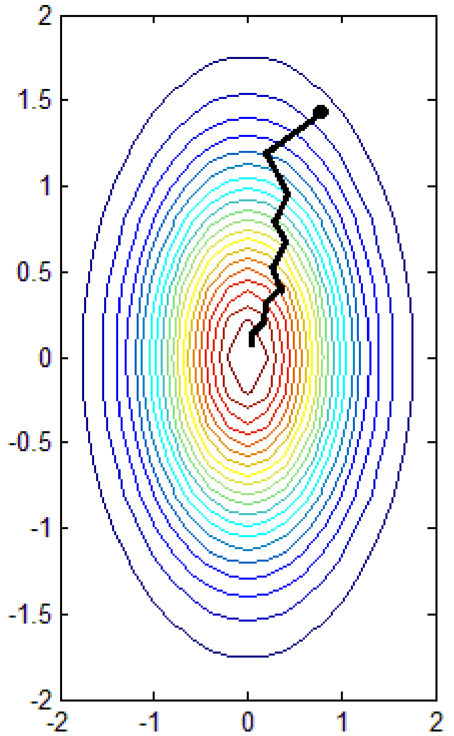
有些问题很难解时，就需要梯度下降法、牛顿法、坐标下降法之类的数值迭代算法了



梯度下降法

依靠梯度确定下降方向的方法叫做梯度下降法，流程如下：

1. 随机选择一个初始点或极值附近的点 x_0
2. 求解函数在 x_0 的梯度，然后从 x_0向前走一步，迭代式子为 $x_0^{t+1} = x_0^t - \alpha \nabla f(x)$,其中 α 是为防止梯度过在时，跳过极值点，或太小时，迭代次数增加。
3. 重复步骤 2，直到梯度达到某个最小值，或者所求 x 达到某个迭代差值。

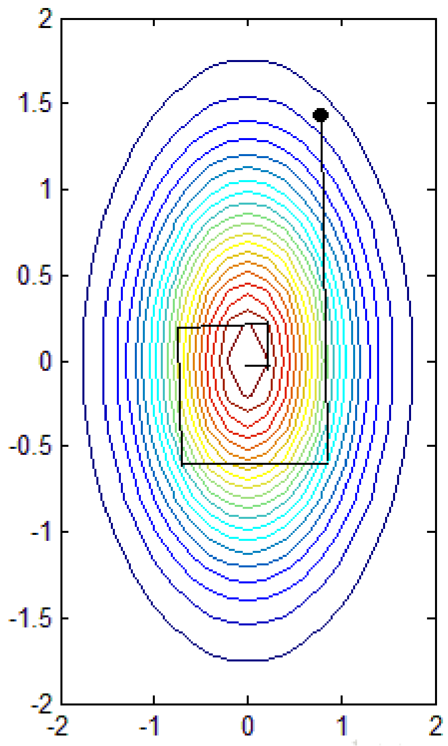


坐标下降法

假设目标函数是多元函数，如 $f(x, y)$, 轮流求出其中某个变量的偏导，得到最优点，然后向偏导方向移动，称为坐标下降法，因为偏导数是沿着某个坐标轴。

依靠梯度确定下降方向的方法叫做梯度下降法，流程如下：

1. 随机选择一个初始点或极值附近的点 x_0, y_0
2. 固定y_0求解函数在 x_0 的梯度，然后从 x_0向前走一步，迭代式子为 $x_1^{t+1} = x_0^t - \alpha \frac{\partial f(x,y)}{\partial x}$,其中 α 是为防止梯度过在时，跳过极值点，或太小时，迭代次数增加。
3. 固定 x_1,求解函数在y_0的梯度，然后从 y_0向前走一步，迭代式子为 $y_1^{t+1} = y_0^t - \alpha \frac{\partial f(x,y)}{\partial y}$
4. 重复2 和 3 ，直到满足条件



牛顿法

牛顿法应用场景

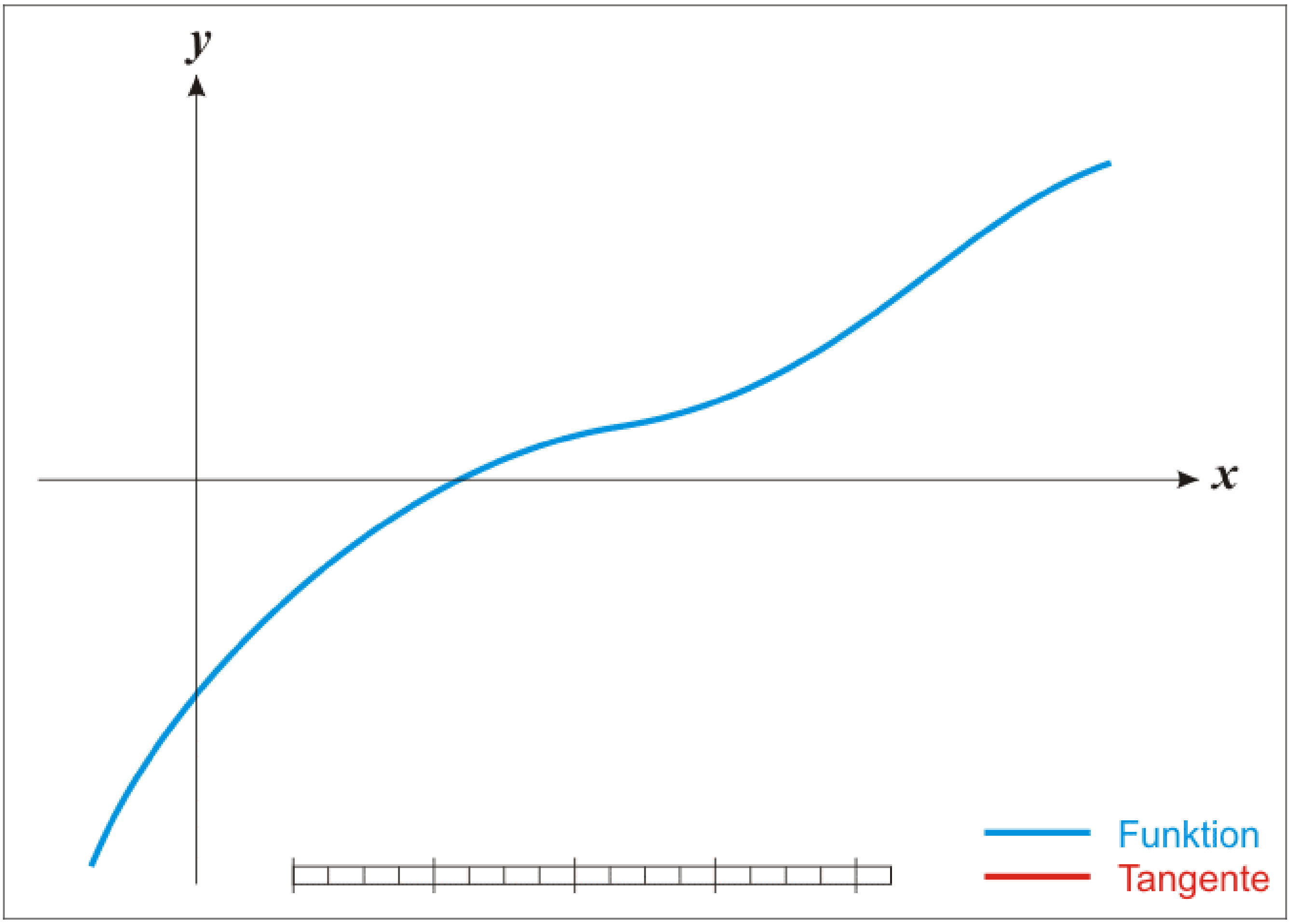
1. 求解方程的根
2. 最优化

前提泰勒公式(它表示的是某点附近领域内的近似值)

$$f(x)=f(x_0)+f^{'}(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2!}f^{''}(x_0)(x-x_0)^2+\ldots+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0)(x-x_0)^2+R_n(x)$$

牛顿法－求方程的根

牛顿法是一种在实数域和复数域上近似求解方程的方法。方法是使用函数$f(x)$的泰勒级数的前面几项来寻找方程$f(x)=0$的根。牛顿法最大的特点就在于它的收敛速度很快。



直观的理解是：求一阶导数为斜率，可以算出斜率方程，求出该方程与X轴交点即为下一个逼近X值。

$$\begin{cases} f(x_0) = f^{'}(x_0) * x_0 + b, \text{斜率方程在}(x_0, f(x_0)) \\ 0 = f^{'}(x_0) * x_1 + b \end{cases}$$

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f^{'}(x_0)}$$

也可以通过一阶泰勒级数

$$f(x) = f(x_0) + f^{'}(x_0) * (x - x_0)$$

$$\text{令：} f(x_1) \text{是近似解，则有} f(x_1) = 0 \text{即：}$$

$$f(x_0) + f^{'}(x_0) * (x - x_0) = 0$$

$$\text{所以 } x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f^{'}(x_0)}$$

$$\text{更一般迭代过程为：}$$

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f^{'}(x_n)}$$

牛顿法－最优化

求函数的极大或极小值，可以转化为求导数为0，这个必要条件，首先函数使用泰勒级数近似即

$$f(x)=f(x_0)+f^{'}(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2!}f^{''}(x_0)(x-x_0)^2+...+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0)(x-x_0)^2+R_n(x),\text{取二阶可导即}$$
$$f(x)=f(x_0)+f^{'}(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2!}f^{''}(x_0)(x-x_0)^2$$
$$f^{'}(x)=f^{'}(x_0)+f^{''}(x_0)(x-x_0),\text{令}f^{'}(x)=0\text{则}$$
$$x_{n+1}=x_n-\frac{f^{'}(x_n)}{f^{''}(x_n)}$$

上面的求值只是针对 x 为一维的情况，当X为一个向量时，泰勒级数为：

$$f(x)=f(x^k)+\nabla f(x^k)(x-x^k)+\frac{1}{2}(x-x^k)^TH(x^k)(x-x^k),\text{其中}H(x^k)\text{为海塞矩阵}$$
$$\text{对函数求导}$$
$$f^{'}(x)=\nabla f(x^k)+H(x^k)(x-x^k)$$
$$\text{令导数为}0,\text{设}g_k=\nabla f(x^k),H(x^k)=H_k$$
$$x=x^k-H^{-1}(x^k)\nabla f(x^k)$$
$$x^{k+1}=x^k-H_k^{-1}g_k$$
$$\text{由于海塞矩阵的逆矩阵计算复杂，所以使用近似的矩阵替代，也称为拟拟牛顿法}$$

拟牛顿法－最优化

待写

有等式约束的优化问题(拉格朗日乘子法)

等式约束一般形式如下：

$$minf(x)$$
$$s.t. h(x)=0$$

高等数学拉格朗日乘子法推导

$$z=f(x,y),\text{求极值函数}$$
$$\varphi=f(x,y)=0,\text{约束条件}$$

假定在(x_0,y_0)的某一邻域内$f(x,y)$ 与 $\varphi(x,y)$ 均有连续的一阶偏导数，而$\varphi_y(x_0,y_0)\neq 0$[表示y的偏导]

$$设\ y=\varphi(x)$$
$$则：z=f(x,\varphi(x))$$
$$按一元函数求极值，求偏导：[\frac{\partial z}{\partial x}]_{x=x_0}=f_x(x_0,y_0)+f_y(x_0,y_0)[\frac{\partial y}{\partial x}]_{x=x_0}=0$$
$$\varphi=f(x,y)根据隐函数求导公式有：[\frac{\partial y}{\partial x}]_{x=x_0}=-\frac{\varphi_x(x_0,y_0)}{\varphi_y(x_0,y_0)},其中\varphi_x表示函数对x求偏导$$
$$[\frac{\partial z}{\partial x}]_{x=x_0}=f_x(x_0,y_0)-f_y(x_0,y_0)*(\frac{\varphi_x(x_0,y_0)}{\varphi_y(x_0,y_0)})=0$$
$$则有：\frac{f_x(x_0,y_0)}{\varphi_x(x_0,y_0)}=\frac{f_y(x_0,y_0)}{\varphi_y(x_0,y_0)}$$
$$令：\frac{f_x(x_0,y_0)}{\varphi_x(x_0,y_0)}=\frac{f_y(x_0,y_0)}{\varphi_y(x_0,y_0)}=-\lambda,$$
$$即比较是线性关系：\nabla f(x,y)=-\lambda\nabla\varphi(x,y)$$

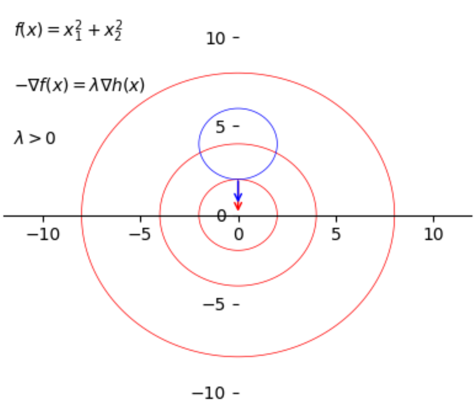
求解方程组：

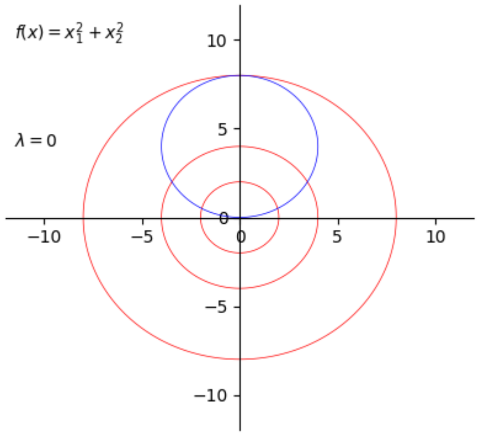
$$f(x,y)=\begin{cases}f_x(x_0,y_0)+\lambda*\varphi_x(x_0,y_0)=0\\f_y(x_0,y_0)+\lambda*\varphi_y(x_0,y_0)=0\\\varphi(x,y)=0\end{cases}$$

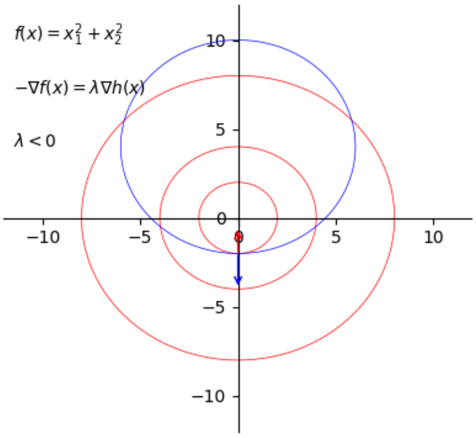
其实相当于根据函数及约束条件构建函数：

$$L(x,y)=f(x,y)+\lambda*\varphi(x,y),分别对x,y求偏导$$

从上面推导(参考高等数学)过程发现，$f(x)$ 的梯度与约束条件的梯度 $h(x)$ 平行，即有线性关系，从一张图直观感受一下它们的关系。（下图红色箭头表示，求极小值函数的负梯度，红色圈表示，极值函数的等高线。蓝色表示约束条件和在当前约束条件下的正梯度，对于圆圈而言，梯度垂直向外）







上图分三种场景来说明线性关系：

1. 场景一约束函数不包含求极值函数的最小值或最大值，两个梯度方向刚好相同 $\lambda>0$

$$
\begin{aligned}
f(x_1,x_2)&=x_1^2+x_2^2, \text{求极值函数}\\
h(x_1,x_2)&=x_1^2+(x_2-4)^2-1=0, \text{约束条件}\\
L(x_1,x_2)&=x_1^2+x_2^2+\lambda(x_1^2+(x_2-4)^2-1)
\end{aligned}
$$

最终求出$\lambda=3$

2. 场景二约束函数刚好经过求极值函数的最小值或最大值点 $\lambda=0$

$$
\begin{aligned}
f(x_1,x_2)&=x_1^2+x_2^2, \text{求极值函数}\\
h(x_1,x_2)&=x_1^2+(x_2-4)^2-16=0, \text{约束条件}\\
L(x_1,x_2)&=x_1^2+x_2^2+\lambda(x_1^2+(x_2-4)^2-16)
\end{aligned}
$$

最终求出$\lambda=0$，因为不需要约束条件下也求出该极值，所以可以为0

3. 场景三约束函数的圈包含求极值函数的最小值或最大值点，两梯度刚好相反 $\lambda<0$

$$f(x_1,x_2)=x_1^2+x_2^2,\text{求极值函数}$$
$$h(x_1,x_2)=x_1^2+(x_2-4)^2-36=0,\text{约束条件}$$
$$L(x_1,x_2)=x_1^2+x_2^2+\lambda(x_1^2+(x_2-4)^2-36)$$
$$\text{最终求出}\lambda=-\frac{1}{3}$$

当有多个等式约束条件时，线性叠加就行，最终等式约束优化问题为：

$$L(x)=f(x)+\sum_{i=1}^{n}\lambda_i h_i(x),\text{其中}i\text{表示约束条件个数}$$

有不等式约束的优化问题(常常使用的方法就是KKT条件)

当约束条件变成 $g(x_1,x_2)\le 0$ 时，可以直观理解成约束条件刚好是一个圆包括它的边界，那么可以分为两种场景

1. 约束条件包含极值 (条件是 $\mu * g(x)=0$)

   1.极值在边界上,则此时 $g(x)=0$,且 $\mu=0$

   2.极值不在边界上，此时求极值不需要约束条件即 $\mu=0$
2. 约束条件不包含极值 (条件是： $\mu>0$)

   不包含极值，则极值一定在相切的地方，直观上理解，它只能沿着等高线，而不会包含极值，因此有 $-\nabla f(x)$与 $\nabla g(x)$同方向，所以 $-\nabla f(x)=\mu\nabla g(x)$,其中 $\mu>0$

综上所述求极值场景：

$$\begin{aligned}&min f(x)\\&s.t. h(x)=0\\&s.t. g(x)\le 0\end{aligned}$$

KTT 条件为：

$$\begin{cases}\nabla f(x)+\sum_{i=1}^{n}\nabla\lambda_i h_i(x)+\sum_{j=1}^{m}\nabla\mu_j g_j(x)\\ \mu_j * g_j(x)=0\\ \mu_j\ge 0\\ h_i(x)=0\\ g_j(x)\le 0\end{cases}$$

参考自：

梯度比较：https://www.jianshu.com/p/ee39eca29117

正定矩阵理解：

常见几种优化方法：https://www.cnblogs.com/shixiangwan/p/7532830.html

理解拉格朗日乘子法(KKT)：https://blog.csdn.net/weixin_41500849/article/details/80493712

《高等数学下册》

牛顿法参考(图)：https://www.cnblogs.com/shixiangwan/p/7532830.html

拟牛顿法推导参考：https://www.cnblogs.com/liuwu265/p/4714396.html