最优化计算方法（简化版）
参考答案

丁思哲　邓展望　李天佑　陈铖　谢中林　俞建江
刘浩洋　文再文

版本：v1.01 （更新于 2022.05.09）

教材链接：https://bicmr.pku.edu.cn/~wenzw/optbook.html

目录

第一章　最优化简介

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

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

我们考虑优化问题：

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

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

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

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

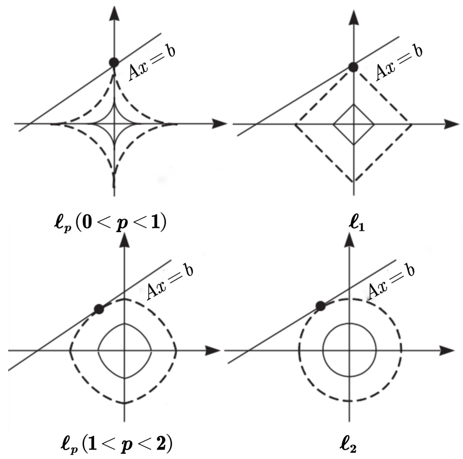

图 1.1　ℓ_p 范数优化问题的求解

□

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

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

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

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

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

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

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

解 (俞建江).

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

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

第二章　基础知识

2.1 证明：矩阵 A 的 2 范数等于其最大奇异值，即

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

解 (俞建江，丁思哲). 由矩阵 2 范数和向量 2 范数的定义，

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

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

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

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

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

其中 $\alpha_i \in \mathbb{R}$ 是系数.
将上式代入定义，得

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

也即 $\|A\|_2 \leqslant \lambda_1$.
另一方面，若取 $x = v_1$，则有

$$x^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}Ax = v_1^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}Av_1 = \lambda_1,$$

故 $\|A\|_2 \geqslant \lambda_1$.

综上,

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

2.2 证明如下有关矩阵范数的不等式:

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

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

解 (俞建江).

(a) 利用 F 范数的定义,

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

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

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

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

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

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

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

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

其中 U_B, V_B 都是正交矩阵,Σ_B 是对角矩阵.

利用矩阵内积的定义,

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

其中记 $\Sigma_B = \mathrm{diag}(\tilde{b}_1, \tilde{b}_2, \cdots, \tilde{b}_n)$.

规定 $\tilde{A} = U_B^{\mathrm{T}} A V_B = (\tilde{a_{ij}})_{m\times n}$，对 $\tilde{A}$ 的每个对角元 $\tilde{a}_{ii}$，成立

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

因此有

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

□

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

解 (俞建江). 由 A 是半正定矩阵，对 A 进行谱分解

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

其中 T 是正交矩阵，Σ_A 是对角线元素全非负的对角矩阵. 则

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

显然 TBT^{T} 也是半正定矩阵，其对角线元素都非负，因此

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

2.4 计算下列矩阵变量函数的导数.

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

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

解 (俞建江，丁思哲).

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

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

因此 $\nabla f(X)=ab^{\mathrm{T}}$.

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

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

因此 $\nabla f(X)=(A+A^{\mathrm{T}})X$.

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

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

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

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

的结论，成立

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

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

2.5 考虑二次不等式

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

其中 A 为 n 阶对称矩阵，设 C 为上述不等式的解集.

(a) 证明：当 A 正定时，C 为凸集；

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

解 (俞建江).

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

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

因此 $tx_1+(1-t)x_2\in C$，知 C 是凸集.

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

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

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

2.6 利用凸函数二阶条件证明如下结论:

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

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

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

解 (俞建江).

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

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

现在只需证明 $\nabla^2 f$ 半正定.

对 $\forall y=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^n(y\neq 0)$，成立

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

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

(b) 求海瑟矩阵，得

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

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

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

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

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

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

其中

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

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

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

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

2.7 证明定理 2.12.

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

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

即

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

因此 $f(x)$ 是凸函数.

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

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

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

2.8 求下列函数的共轭函数：

(a) 负熵：$\sum_{i=1}^{n} x_i \ln x_i$；

(b) 矩阵对数：$f(x) = -\ln\det(X)$；

(c) 最大值函数：$f(x) = \max_i x_i$；

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

解 (丁思哲).

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

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

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

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

因为

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

因此

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

故取 $X = -(Y^{\mathrm{T}})^{-1}$ 时，满足

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

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

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

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

故此时 $f^*(y) = 0$.

若不然，则或有 $\|y\|_1 > 1$. 不妨设 $j = \arg\max_i x_i$ 且 $y_j = 1 + \delta$（$\delta > 0$ 且其他坐标取 0），那么

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

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

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

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

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

分别对

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

中的变量 x, t 求其稳定点，得等式组

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

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

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

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

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

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

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

2.9 求下列函数的一个次梯度：

$$f(x)=\|Ax-b\|_2+\|x\|_2.$$

解 (俞建江). 一个次梯度为：

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

□

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

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

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

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

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

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

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

由于 y,g 均是任取的，不等式左边取极大，右边取极小，成立

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

□

第三章　典型优化问题

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

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

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

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

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

解 (丁思哲). 分别就本题存在的非线性项作如下转化：

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

根据以上变换的形式，各小问转化成的线性规划问题分别是:

(a)

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

(b)

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

(c)

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

(d)

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

□

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

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

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

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

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

解 (邓展望).

(a) 问题可写为

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

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

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

(b) 根据 (a) 的分析，同理可知

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

(c) 由于问题可写为

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

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

该问题有解当且仅当 $c=m\mathbf{1}$，其中 m 为常数.

(d) 问题可写为

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

设 c_j 为 $c_i(i=1...n)$ 中最小的项，则有

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

即解为 $x=(0,...1,...0)$，其中第 j 个分量取 1. □

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

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

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

(a) 试计算目标函数关于 X_1,X_2 的导数；

(b) 试给出该问题的最优解.

解 (俞建江). 将 a_i,b_i 整合成矩阵 A,B：

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

则目标函数等价于

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

□

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

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

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

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

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

请将上述问题表示成一个凸优化问题，并尽可能地简化.

解 (邓展望).

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

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

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

- 再根据单调非减性，由于

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

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

综上，凸优化问题可写为

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

□

3.5 考虑下面的复合优化问题：

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

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

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

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

求解该问题则可给出 x^* 每个分量的表达式．

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

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

(c) 否则 $x_i^*=0$. □

3.6 考虑下面的复合优化问题：

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

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

解 (邓展望)．按 **4.5** 题的方法，先给出 x_i 的表达式为

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

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

(a) 若 $d_i = 0$，则 $x_i^* = 0$.

(b) 若 $d_i \neq 0$，

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

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

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

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

解 (俞建江). 将原问题先化为:

$$\begin{aligned} \min_{y \in \mathbb{R}^m} \quad & -b^{\mathrm{T}} y, \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^m y_i A_i \preceq C. \end{aligned} \tag{3.1}$$

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

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

因为上式对 y 是仿射的，故对偶函数可以描述为

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

因此对偶问题可以写成

$$\begin{aligned} \min_{X \in \mathcal{S}^n} \quad & \langle C, X \rangle, \\ \text{s.t.} \quad & \langle A_i, X \rangle = b_i, \; i = 1, 2, \cdots, m, \\ & X \succeq 0. \end{aligned} \tag{3.2}$$

□

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

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

考虑如下半定规划问题:

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

试给出该问题最优解的表达式.

解 (俞建江). 最优解为 $X = 0$，证明如下.
考虑

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

由约束条件 $u_i^{\mathrm{T}} X u_i = 0 (i = m+1, m+2, \cdots, n)$ 得 $\langle C, X \rangle \geqslant 0$ 当且仅当 $u_i^{\mathrm{T}} X u_i = 0 (i = 1, 2, \cdots, m)$ 时取到等号. 记 $T = (u_1, u_2, \cdots, u_n)$，

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

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

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

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

试给出其一个半定规划松弛.

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

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

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

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

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

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

□

第四章 最优性理论

4.1 考虑优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad x^{\mathrm{T}}Ax + 2b^{\mathrm{T}}x,$$

其中 $A\in\mathcal{S}^n$，$b\in\mathbb{R}^n$．为了保证该问题最优解存在，A,b 需要满足什么性质?

解 (邓展望). A,b 需要满足 A 为半正定矩阵并且 $b\in\mathcal{R}(A)$（即 b 位于 A 的像空间中）. 实际上这也为充要条件. 定义

$$m(x) = \frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax + x^{\mathrm{T}}b \tag{4.1}$$

则我们有:

$\Leftarrow$: 由于 $g\in\mathcal{R}(B)$, 所以存在 p^* 满足 $Ap^* = -b$, 所以对任意 $\omega\in\mathbb{R}^n$, 我们都有

$$\begin{aligned} m(p^*+\omega) &= b^{\mathrm{T}}(p^*+\omega) + \frac{1}{2}(p^*+\omega)^{\mathrm{T}}A(p^*+\omega) \\ &= \left(b^{\mathrm{T}}p^* + \frac{1}{2}p^{*\top}Ap^*\right) + b^{\mathrm{T}}\omega + (Ap^*)^{\mathrm{T}}\omega + \frac{1}{2}\omega^{\mathrm{T}}A\omega \\ &= m(p^*) + \frac{1}{2}\omega^{\mathrm{T}}A\omega \geqslant m(p^*), \end{aligned}$$

由此可知 p^* 是 $m(p)$ 的最小值.

$\Rightarrow$: 若 p^* 是 $m(p)$ 的最小值, 所以 $\nabla m(p^*) = Ap^*+b=0$，$b\in\mathcal{R}(A)$. 再由于 $\nabla^2 m(p^*) = A$ 为半正定矩阵，结果得证.

□

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

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

4.3 证明下列锥是自对偶锥：

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

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

解 (陈铖).

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4.4 考虑优化问题

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

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

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

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

KKT 条件给出了原问题最优解的两种可能，即 $\mu = 0$ 的情况下满足 $Ax + b = 0$，或者 $x^{\mathrm{T}} x - \varDelta^2 = 0$ 成立.
由于 $\|A^{-1} b\|$ 是原目标函数在约束情况下的最优解，因此若 $\|A^{-1} b\| \leqslant \varDelta$，则 $x = A^{-1} b$ 是最优解.
若 $\|A^{-1} b\| > \varDelta$，则原问题的最优解即等式约束下的最优解是

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

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

解 (陈铖)．首先计算 $f(x)$ 关于 x_1, x_2 的梯度.

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

对于一阶稳定点，令上述两式为 0，我们得到

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

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

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

有

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

注意到 $(0, 0)$ 和 $(-1, -1)$ 处海瑟矩阵都是正定矩阵. 因此都是局部最优点. 又根据 $f(0, 0) = f(-1, -1) = 0$ 知这两个点也为全局最优点. 另一方面，$(-0.5, -0.5)$ 处的海瑟矩阵为不定矩阵，因此是一个鞍点. □

4.6 给出下列优化问题的显式解：

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

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

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

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

解 (陈铖，邓展望).

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

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

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

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

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

对于第一行公式同时左乘 A，得到

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4.7 计算下列优化问题的对偶问题.

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

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

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

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

解 (陈铖).

(a) 引入拉格朗日乘子 λ，构造拉格朗日函数

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

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

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

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

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

(b) 令 $y=Ax-b$，原优化问题等价于

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

引入拉格朗日乘子 λ，构造拉格朗日函数

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

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

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

由此得到对偶问题

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

(c) 上述问题等价于

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

引入拉格朗日乘子 λ_1, λ_2，构造拉格朗日函数

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

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

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

由此得到对偶问题

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

(d) 引入拉格朗日乘子 λ，构造拉格朗日函数

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

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

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

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

由此得到对偶问题

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

□

4.8 如下论断正确吗？为什么？

对等式约束优化问题

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

考虑与之等价的约束优化问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x), \\ \text{s.t.} \quad & c_i^2(x) = 0,\ i \in \mathcal{E}. \end{aligned} \tag{4.2}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

由于约束都是线性约束，可以写成如下形式

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

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

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

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

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

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

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

因此得到 $d \in T_{\mathcal{X}}(x)$. □

4.10 考虑优化问题

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

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

解 (陈铖). 构造拉格朗日函数

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

对 x_1，x_2 分别求导，得到稳定性条件

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

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

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

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

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

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

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

注意 $L(x,\lambda,\nu)$ 关于 x 的海瑟矩阵为对角元均等于 $2(\lambda+\nu)$ 的对角矩阵，因此 $(0,0,\frac{1}{8},0)$ 为局部极小点，也是全局极小点. 其他的 KKT 点均为局部极大点，没有鞍点. □

解 (陈铖). 对 X 和 S 分别进行对角化 $X=Q\Lambda_1Q^{\mathrm{T}}$，$S=R\Lambda_2R^{\mathrm{T}}$. 则有

$$\langle X,S\rangle=\mathrm{Tr}(()XS)=\mathrm{Tr}(()Q\Lambda_1Q^{\mathrm{T}}R\Lambda_2R^{\mathrm{T}})=\mathrm{Tr}(()\Lambda_1Q^{\mathrm{T}}R\Lambda_2)=0,$$

其中 Λ_1,Λ_2 是对角矩阵，且对角元素从大到小排列. 由此可以得到 $q_1^{\mathrm{T}}r_1=0$.

注意到对非零特征值对应的特征向量更换位置，如将 R 的第二列更换到第一列，同样可得到 $q_1^{\mathrm{T}}q_2=0$，因此我们可以得到 $q_i^{\mathrm{T}}r_j=0$，q_i 为 X 的任意非零特征向量，r_j 为 S 的任意非零特征向量.

由此我们得到

$$\Lambda_1Q^{\mathrm{T}}R\Lambda_2=0.$$

又有

$$XS=0\Leftrightarrow Q\Lambda_1Q^{\mathrm{T}}R\Lambda_2R^{\mathrm{T}}=0\Leftrightarrow\Lambda_1Q^{\mathrm{T}}R\Lambda_2=0,$$

命题得证. □

4.11 考虑等式约束的最小二乘问题

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

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

(a) 写出该问题的对偶问题；

(b) 给出原始问题和对偶问题的最优解的显式表达式.

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

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

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

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

由此得到对偶问题

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

(b) 考虑原始问题的 KKT 条件

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

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

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

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

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

对偶问题则为简单的无约束问题，最优解的显式表达式为

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

4.12 考虑优化问题

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

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

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

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

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

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

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

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

由此得到对偶问题

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

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

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

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

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

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

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

由此得到

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

因此对偶问题为

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

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

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

□

4.13 考虑支持向量机问题

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

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

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

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

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

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

由此对偶问题为

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

对 ν 进一步分析，上述问题等价于

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

□

4.14 考虑优化问题

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

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

(b) 写出该问题的对偶问题，并求出对偶问题的最优解以及对偶间隙.

解 (丁思哲).

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

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

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

(b) 先化简原问题．由上一问的分析可知，原问题等价于

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

因此引入乘子 v，拉格朗日函数为

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

那么

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

因此对偶问题为

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

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

解 (邓展望)．首先写出该问题的拉格朗日函数：

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

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

$$-2XV^{\mathrm{T}}+2ZVV^{\mathrm{T}}-\mathbf{1}\lambda^{\mathrm{T}}=0, \tag{4.3a}$$

$$-2Z^{\mathrm{T}}X+2Z^{\mathrm{T}}ZV-2V(\mu\mu^{\mathrm{T}})=0, \tag{4.3b}$$

在 (4.3a) 右乘 V 再左乘 $\mathbf{1}$ 分别得：

$$-2X+2ZV-\mathbf{1}\lambda^{\mathrm{T}}V=0, \tag{4.4a}$$

$$-2\mathbf{1}^{\mathrm{T}}X-n\lambda^{\mathrm{T}}V=0, \tag{4.4b}$$

因此有

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

带入到(4.4a)可得

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

注 4.1 Z,V 的解不唯一. 因为若 $QQ^{\mathrm{T}}=I,Q\in R^{q\times q}$, 则 $ZQQ^{\mathrm{T}}V=ZV$．令 $\hat{Z}=ZQ$，$\hat{Q}=Q^{\mathrm{T}}V$，函数值不变.

第五章　无约束优化算法

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

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

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

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

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

故集合

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

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

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

于是集合 A_1 有下界.

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

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

□

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

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

并由此推出最速下降法的步长满足 (6.2.2) 式（见定理 6.2）．

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

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

于是精确线搜索步长为

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

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

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

5.3 利用定理 6.5 证明推论 6.2.

解 (谢中林)．已知

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

(1) 取 $\alpha_i=t,\forall i$ 即得

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

(2) 此时

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

因此定理可改写为

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

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

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

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

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

5.4 考虑非光滑函数

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

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

(a) 求出 $f(x)$ 的最小值点 x^* 和对应的函数值 f^*；

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

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

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

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

解 (谢中林).

(a) 引入辅助变量 t，原问题等价于

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

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

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

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

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

最小值 $f^* = -\dfrac{1}{2K}$.

(b) 由于

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

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

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

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

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

由于 $k < K$，因此 x^k 的第 K 个元素为 0，于是

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

5.5 考虑非平方 ℓ_2 正则项优化问题

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

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

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

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

解 (谢中林).

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

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

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

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

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

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

且等号可以在 $x = 0$ 处取到，因此最小值点为 $x = 0$.

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

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

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

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

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

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

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

(b) 若 $0 < \beta < 1$，则牛顿法发散；

(c) 试解释定理 6.6 在 (a) 中不成立的原因.

解 (谢中林).

(a) 在 $x \neq 0$ 时，牛顿方程为

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

分别在等式两边左乘 x^{T} 与 d^{T} 并化简得

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

由于 $\beta > 1$ 且 $\beta \neq 2$，故

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

这说明此时牛顿法是 Q-线性收敛的.

(b) 在 $0 < \beta < 1$ 时

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

牛顿法发散.

(c) 函数 $f(x)$ 的海瑟矩阵为

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

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

□

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

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

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

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

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

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

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

综上，A 半正定. $\square$

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

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

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

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

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

考虑 $k+1$ 时的情形，由于

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

故

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

当 $j \leqslant k-1$ 时，利用归纳假设，有

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

□

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

解 (谢中林). 假设

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

由割线方程得

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

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

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

□

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

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

给出了高斯 – 牛顿方程 (6.7.3) 的一个 ℓ_2 范数最小解.

解 (谢中林). 假设 d 也是高斯 – 牛顿方程的解，则

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

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

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

□

第六章　约束优化算法

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

解 (谢中林). 考虑

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

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

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

无下界. □

6.2 考虑等式约束优化问题

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

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

解 (谢中林). 该问题的二次罚函数为

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

利用一阶最优性条件得

$$x_2 x_3 = \frac{x_3 x_1}{2} = \frac{x_1 x_2}{3}.$$

由于 $x=(10,10,10)^{\mathrm{T}}$ 时 $P_E(x,\sigma)=-1000<0$，而当 x_i 中存在 0 时最小值必大于 0, 因此最小值点坐标全部非 0, 此时 $2x_2=x_1, 3x_3=x_1$，最优性条件等价于

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

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

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

于是在 $\sigma\to\infty$ 时,

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

利用 (7.1.5) 式，拉格朗日乘子为

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

由

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

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

6.3 考虑等式约束优化问题

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

定义一般形式的罚函数

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

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

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

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

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

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

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

解 (陈铖，丁思哲).

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

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

因此由 $\varphi'(0)=0$ 得

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

结合题设和定理 7.2 可知 x^* 是问题的 KKT 点，且

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

其中 λ_i^* 是约束 $c_i(x^*)=0$ 对应的拉格朗日乘子.

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

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

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

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

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

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

其中 $c(x) = [c_i(x)]_{i \in \mathcal{E}}$．由于 $\nabla_x c(x^{k+1}) \nabla_x c(x^{k+1})^{\mathrm{T}}$ 是半正定矩阵，它有 $(n-m)$ 个特征值都是 0，不妨设所有非 0 的特征值为 $\{\rho_j\}_{j=1}^m$，它们与 σ_k 无关．

$\nabla^2_{xx} L(x, \lambda^*)$ 是定值矩阵，而海瑟矩阵的另一项是一个最大特征值趋近于正无穷的矩阵．因此当 $k \to \infty$ 时，可以在阶数意义上忽略定值矩阵的特征值．

综上，k 足够大时，海瑟矩阵的特征值趋近于 $\{\rho_j \sigma_k \varphi''(c_i(x^{k+1}))\}$．再对 $\varphi''(c_i(x^{k+1}))$ 在 $c_i(x^*) = 0$ 处做泰勒近似，展开到 s 阶，成立

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

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

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

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

并且

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

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

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

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

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

由 x_{k+1} 的定义，有

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

于是任取 $k > \bar{k}$，有

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

由 η 的任意性知

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

同理可得任取 $k > \bar{k}$，有

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

由 η 的任意性知

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

构造对于 $g_\mu(x)$ 的对数罚函数形式

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

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

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

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

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

在添加对数罚函数之后，不等式仍然成立，即可得到

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

对左右两边取极小，即可得到

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

由此

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

上式对于任意 μ 均成立，则有

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

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

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

综上可得

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

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

(b) 根据 (a) 的说法，对数罚函数法使得

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

在上式中使得 $\mu \to 0$，即有

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

再联立 (a) 中证明的结论，即有

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

(c) 固定对数罚函数的系数为 μ，即设

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

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

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

函数

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

Morrison 方法的迭代步骤如下：

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

试回答以下问题：

(a) 证明：$f(x^k)\leqslant f(x^*)$；

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

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

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

解 (丁思哲).

(a) 用反证法. 若 $f(x^k)>f(x^*)$，则有

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

这与题设矛盾. 因此，$f(x^k)\leqslant f(x^*)$.

(b) 由于 $v(M_k,x^k)\leqslant v(M_k,x^*)$，故有

$$\begin{aligned}M_{k+1}=M_k+\sqrt{v(M_k,x^k)}&\leqslant M_k+\sqrt{v(M_k,x^*)}\\&=M_k+|f(x^*)-M_k|,\end{aligned}$$

而 $f(x^*)\geqslant M_k$，则 $M_{k+1}\leqslant M_k+f(x^*)-M_k=f(x^*)$.

(c) 考虑 Morrison 方法中 $x^k\to x^*$ $(k\to\infty)$，则

$$\begin{aligned}M_{k+1}&=M_k+\sqrt{v(M_k,x^k)}\\&=M_k+\sqrt{(f(x^k)-M_k)^2+\sum_{i\in\mathcal{E}}c_i^2\,(x^k)}.\end{aligned}$$

$\exists N\in\mathbb{N}_+$，当 $\forall n\geqslant N$ 时，成立

$$\begin{aligned}M_{n+1}&=M_n+\sqrt{(f(x^n)-M_n)^2+\varepsilon_n}\\&\leqslant M_n+|f(x^n)-M_n|+\varepsilon_n,\end{aligned}$$

其中 $\varepsilon_n > 0$ 且 $n \to \infty$ 时 $\varepsilon_n \to 0$.
同理，$M_{n+1} \geqslant M_n + |f(x^n) - M_n| - \varepsilon_n$.
令 $n \to \infty$，且注意 $f(x^n) \to f(x^*)$，则有

$$\lim_{k\to\infty} M_{k+1} = \lim_{k\to\infty} M_k = f\left(x^*\right).$$

(d) 经过简单的计算可知，海瑟矩阵的 (i,j) 元为

$$2\frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial f}{\partial x_j} + 2\left(f - M\right)\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} + 2\sum_{k\in\mathcal{E}}\frac{\partial c_k}{\partial x_i}\frac{\partial c_k}{\partial x_j} + 2\sum_{k\in\mathcal{E}} c_k \frac{\partial^2 c_k}{\partial x_i \partial x_j}.$$

它与算法 7.1 的联系是，Morrison 方法仍为惩罚方法，这与算法 7.1 所属的方法类别一致.
算法 7.1 通过调节惩罚项 $\sum\limits_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right)$ 的权系数 σ_k 的大小施加惩罚，而 Morrison 方法是一类惩罚项自适应的方法，通过构造问题

$$\min_x \quad v\left(M_k, x\right)$$

以使 $\sum\limits_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right)$ 不断减小，最终完成优化.
从分析的角度看，将 Morrison 方法进一步写成

$$\begin{aligned}x^{k+1} = \arg\min_x\{f(x)[f(x) - 2M_k - 2\sqrt{v(M_k, x^k)}] + 2\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right)\} \\ + M_k^2 + (f(x^k) - M_k)^2 + 2M_k\sqrt{v(M_k, x^k)}.\end{aligned}$$

由 **(a)**，**(c)** 可得 $k \to \infty$ 时成立

$$\begin{aligned}\text{上式} &= f(x)(f(x) - 2f(x^*)) + 2\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right) + f^2(x^*) \\ &= (f(x) - f(x^*))^2 + 2\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right),\end{aligned}$$

因此 Morrison 方法在 k 足够大时，相当于对问题

$$\min_x\{|f(x) - f(x^*)|^2 + 2\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2\left(x\right)\}$$

求解.
所以，相比算法 7.1，Morrison 方法在运行后期的表现等同于将对 $f(x)$ 的优化换成对 $|f(x) - f(x^*)|^2$ 的优化，而直接取 $\sigma_k = 4$. □

6.7 考虑不等式约束优化问题

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

(a) 定义函数 $F(x) = \sup\limits_{\lambda_i \geqslant 0} \left\{ f(x) + \sum\limits_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x) \right\}$，证明：原问题等价于无约束优化问题 $\min\limits_x F(x)$；

(b) 定义函数

$$\hat{F}(x, \lambda^k, \sigma_k) = \sup_{\lambda_i \geqslant 0} \left\{ f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x) - \frac{\sigma_k}{2} \sum_{i \in \mathcal{I}} (\lambda_i - \lambda_i^k)^2 \right\},$$

求 $\hat{F}(x, \lambda^k, \sigma_k)$ 的显式表达式；

(c) 考虑如下优化算法：

$$\begin{aligned} x^k &= \arg\min_x \hat{F}(x, \lambda^k, \sigma_k), \\ \lambda^{k+1} &= \arg\max_{\lambda \geqslant 0} \left\{ \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x^k) - \frac{\sigma_k}{2} \sum_{i \in \mathcal{I}} (\lambda_i - \lambda_i^k)^2 \right\}, \\ \sigma_{k+1} &= \min\{\rho \sigma_k, \bar{\sigma}\}, \end{aligned}$$

试说明其与算法 7.5 的区别和联系.

解（丁思哲）. (a) 此证明实际上是 **“广义拉格朗日函数的极小极大问题与原问题等价”**.

原问题的广义拉格朗日函数为

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x), \quad \lambda_i \geqslant 0.$$

考虑关于 x 的函数

$$\begin{aligned} F(x) &= \sup_{\lambda_i \geqslant 0} L(x, \lambda) \\ &= \sup_{\lambda_i \geqslant 0} \left\{ f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x) \right\}, \end{aligned}$$

假设对某 x，若 x 违反约束，即 $\exists i \in \mathcal{I}$，使 $c_i(x) > 0$，则有

$$F(x) = \sup_{\lambda_i \geqslant 0} L(x, \lambda) \to \infty,$$

即 $F(x)$ 无定义．相反，若 x 不违反约束，则 $F(x) < \infty$，且取得 $\lambda_i = 0$.

因此，

$$\begin{aligned}\min_x \quad F(x) &= \min_x \sup_{\lambda_i \geqslant 0} \left\{ f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x) \right\} \\ &= \min_x \quad f(x) \quad \text{s.t.} \quad c_i(x) \leqslant 0 \ (i \in \mathcal{I}).\end{aligned}$$

这就说明问题彼此是等价的.

(b) 适当取 λ_i 的值，使得 $\hat{F}(x, \lambda^k, \sigma_k)$ 取极小值，由极小性原理，

$$\lambda_i = \frac{c_i(x)}{\sigma_k} + \lambda_i^k \quad (\sigma_k \neq 0). \tag{6.1}$$

对于(6.1)所定义的 λ_i，若 $\lambda_i \geqslant 0$，则 $\hat{F}(x, \lambda^k, \sigma_k)$ 的显式表达式为

$$\begin{aligned}\hat{F}(x, \lambda^k, \sigma_k) &= f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(\frac{c_i(x)}{\sigma_k} + \lambda_i^k \right) c_i(x) - \frac{\sigma_k}{2} \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(\frac{c_i(x)}{\sigma_k} \right)^2 \\ &= f(x) + \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(\frac{c_i^2(x)}{\sigma_k} + 2\lambda_i^k c_i(x) \right).\end{aligned}$$

否则，需将 λ_i 的表达式

$$\lambda_i = \begin{cases} \dfrac{c_i(x)}{\sigma_k} + \lambda_i^k, & \dfrac{c_i(x)}{\sigma_k} + \lambda_i^k \geqslant 0 \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

代入 $\hat{F}(x, \lambda^k, \sigma_k)$，不再赘述.

(c) 本题的迭代格式为

$$\begin{aligned}x^{k+1} &= \arg\min_x \left\{ f\left(x\right) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i^k c_i\left(x\right) + \frac{1}{2\sigma_k} \sum_{i \in \mathcal{I}} c_i^2\left(x\right) \right\}, \\ \lambda^{k+1} &= \lambda^k + \frac{c\left(x^{k+1}\right)}{\sigma_k}, \\ \sigma_{k+1} &= \min\left\{\rho\sigma_k, \bar{\sigma}\right\}.\end{aligned}$$

对比算法 7.5，本题迭代格式中的 $1/\sigma_k$ 对应与算法 7.5 中的 σ_k，因此算法本质上是一样的. 只是，本题的迭代格式中，σ_k 越小（趋于 0）则惩罚强度越大，而算法 7.5 中的情况则恰相反. □

6.8 对于 LASSO 问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2+\mu\|x\|_1,$$

写出该问题及其对偶问题的增广拉格朗日函数法.

解 (丁思哲).

LASSO 问题的增广拉格朗日函数法方法

LASSO 问题为

$$\min_x \quad \frac{1}{2}\left\|Ax-b\right\|_2^2+\mu\left\|x\right\|_1,$$

设 $z\in\mathbb{R}^n$，将 LASSO 问题等价地写为

$$\begin{aligned}\min_x \quad & \frac{1}{2}\left\|z-b\right\|_2^2+\mu\left\|x\right\|_1,\\ \text{s.t.} \quad & Ax-z=0.\end{aligned}$$

上式的拉格朗日函数为

$$L(x,z,\lambda)=\frac{1}{2}\left\|z-b\right\|_2^2+\mu\left\|x\right\|_1+\lambda^{\mathrm{T}}\left(Ax-z\right),$$

则其增广拉格朗日函数为

$$L_\sigma\left(x,z,\lambda\right)=\frac{1}{2}\left\|z-b\right\|_2^2+\mu\left\|x\right\|_1+\lambda^{\mathrm{T}}\left(Ax-z\right)+\frac{1}{2}\sigma\left\|Ax-z\right\|_2^2.$$

因此，增广拉格朗日函数法迭代求解的基本框架为

$$\left(x^{k+1},z^{k+1}\right)=\underset{x,z}{\operatorname{argmin}}\left\{L_{\sigma_k}\left(x,z,\lambda^k\right)\right\}, \tag{6.2a}$$

$$\lambda^{k+1}=\lambda^k+\sigma_k\left(Ax^{k+1}-z^{k+1}\right), \tag{6.2b}$$

$$\sigma_{k+1}=\rho\sigma_k, \quad \sigma_k\uparrow\sigma_\infty<\infty. \tag{6.2c}$$

其中 (6.2a) 是求解最困难的地方. 除了利用投影梯度法或半光滑牛顿法联合变量求解 (x^{k+1},z^{k+1}) 以外，还可以利用最优性条件，将 z 用 x 来表示，进而可以只求关于 x 的问题.

(6.2a) 式中，关于 z 的极小化问题为

$$\min_z \quad \|z-b\|_2^2+\sigma\left\|Ax-z+\frac{\lambda}{\sigma}\right\|_2^2,$$

则解得 $z=\dfrac{1}{\sigma+1}\left(\sigma Ax+\lambda+b\right)$，将 z 的表达式代入 (6.2a) 式，可得

$$x^{k+1}=\arg\min_x\{L_{\sigma_k}(x;\lambda^k)\}.$$

LASSO 问题的对偶问题的增广拉格朗日函数法方法

先求 LASSO 问题的对偶问题. LASSO 问题的对偶函数为

$$
\begin{aligned}
g(y) &= \inf_{x,z} L(x,z,\lambda) \\
&= \inf_{x}\left\{\mu\|x\|_1 + \lambda^{\mathrm{T}}Ax\right\} + \inf_{z}\left\{\frac{1}{2}\|z-b\|_2^2 - \lambda^{\mathrm{T}}z\right\}.
\end{aligned}
$$

而

$$
\inf_{x}\left\{\mu\|x\|_1 + \lambda^{\mathrm{T}}Ax\right\} = \begin{cases} 0, & \left\|A^{\mathrm{T}}\lambda\right\|_\infty \leqslant \mu, \\ -\infty, & \text{其它}. \end{cases}
$$

$$
\inf_{z}\left\{\frac{1}{2}\|z-b\|_2^2 - \lambda^{\mathrm{T}}z\right\} = -\lambda^{\mathrm{T}}b - \frac{1}{2}\|\lambda\|_2^2.
$$

则对偶问题为

$$
\begin{aligned}
\max_{x} \quad & -\frac{1}{2}\|\lambda\|_2^2 - \lambda^{\mathrm{T}}b, \\
\text{s.t.} \quad & \left\|A^{\mathrm{T}}\lambda\right\|_\infty \leqslant \mu.
\end{aligned}
$$

引入变量 s，将 λ 改写成 y，对偶问题等价地写成

$$
\begin{aligned}
\max_{x} \quad & -\frac{1}{2}\|y\|_2^2 - b^{\mathrm{T}}y, \\
\text{s.t.} \quad & A^{\mathrm{T}}y - s = 0, \\
& \|s\|_\infty \leqslant \mu.
\end{aligned}
$$

对于上述对偶问题，增广拉格朗日函数为

$$
\begin{aligned}
L_\sigma(y,s,\lambda) &= \frac{1}{2}\|y\|_2^2 + b^{\mathrm{T}}y + \lambda^{\mathrm{T}}\left(A^{\mathrm{T}}y - s\right) + \frac{1}{2}\sigma\left\|A^{\mathrm{T}}y - s\right\|_2^2, \\
&\|s\|_\infty \leqslant \mu.
\end{aligned}
$$

则增广拉格朗日函数法的迭代格式为

$$
\left(y^{k+1}, s^{k+1}\right) = \underset{y,s}{\arg\min}\left\{L_{\sigma_k}\left(y,s;\lambda^k\right)\right\}, \tag{6.3a}
$$

$$
\lambda^{k+1} = \lambda^k + \sigma_k\left(A^{\mathrm{T}}y^{k+1} - s^{k+1}\right), \tag{6.3b}
$$

$$
\sigma_{k+1} = \rho\sigma_k, \quad \sigma_k \uparrow \sigma_\infty \leqslant \infty. \tag{6.3c}
$$

用最优性条件，在 (6.3a) 式中消去 s，得到极小化问题

$$
\begin{aligned}
\min_{s} \quad & \sigma\left\|A^{\mathrm{T}}y - s + \frac{\lambda}{\sigma}\right\|_2^2 \\
\text{s.t.} \quad & \|s\|_\infty \leqslant \mu
\end{aligned}
$$

的解 $s=\mathcal{P}_{\|s\|_\infty\leqslant\mu}\left(A^{\mathrm{T}}y+\dfrac{\lambda}{\sigma}\right)$. 将 s 的表达式代入 (6.3a) 即可消去 s，只更新 y，从而减小了计算的困难. □

6.9 考虑线性规划问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\quad c^{\mathrm{T}}x,\quad \text{s.t.}\quad Ax=b,\ x\geqslant 0.$$

写出该问题以及其对偶问题的增广拉格朗日函数法.

解（丁思哲）. 线性规划原问题的增广拉格朗日函数为

$$L_\sigma(x,\lambda)=c^{\mathrm{T}}x+\lambda^{\mathrm{T}}(Ax-b)+\frac{1}{2}\sigma\|Ax-b\|_2^2,\quad x\geqslant 0.$$

根据增广拉格朗日函数，设计增广拉格朗日函数法迭代格式为

$$x^{k+1}=\mathop{\arg\min}_{x\geqslant 0}\left\{L_{\sigma_k}\left(x,\lambda^k\right)\right\},\tag{6.4a}$$

$$\lambda^{k+1}=\lambda^k+\sigma_k\left(Ax^{k+1}-b\right),\tag{6.4b}$$

$$\sigma_{k+1}=\min\left\{\rho\sigma_k,\bar{\sigma}\right\}.\tag{6.4c}$$

线性规划的对偶问题为

$$\begin{aligned}\min_{y}\quad & b^{\mathrm{T}}y,\\ \text{s.t.}\quad & A^{\mathrm{T}}y+c\leqslant 0.\end{aligned}$$

引入松弛变量 s，等价于

$$\begin{aligned}\min_{y}\quad & -b^{\mathrm{T}}y,\\ \text{s.t.}\quad & A^{\mathrm{T}}y+s-c=0,\\ & s\geqslant 0.\end{aligned}$$

根据上述对偶问题，增广拉格朗日函数为

$$L_\sigma(y,s,\lambda)=-b^{\mathrm{T}}y+\lambda^{\mathrm{T}}\left(A^{\mathrm{T}}y+s-c\right)+\frac{1}{2}\sigma\left\|A^{\mathrm{T}}y+s-c\right\|_2^2,\quad s\geqslant 0,$$

由此设计增广拉格朗日函数法迭代格式为

$$\left(y^{k+1},s^{k+1}\right)=\mathop{\arg\min}_{y,s\geqslant 0}\left\{L_{\sigma_k}\left(y,s,\lambda^k\right)\right\},\tag{6.5a}$$

$$\lambda^{k+1}=\lambda^k+\sigma_k\left(A^{\mathrm{T}}y^{k+1}+s^{k+1}-c\right),\tag{6.5b}$$

$$\sigma_{k+1}=\min\left\{\rho\sigma_k,\bar{\sigma}\right\}.\tag{6.5c}$$

用最优性条件将 (6.5a) 中的 s 用 y 表示，即对极小化问题

$$\begin{aligned} \min_{s} \quad & \sigma \left\| A^{\mathrm{T}} y + s - c + \frac{\lambda}{\sigma} \right\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & s \geqslant 0 \end{aligned}$$

解得 $s = \mathcal{P}_{\mathbb{R}^n_+}(c - A^{\mathrm{T}} y - \lambda/\sigma)$. 将此式代入 (6.5a) 中即可. $\square$

第七章　复合优化算法

7.1 证明例 8.2 中的运算法则成立.

解 (丁思哲).

(1) 设 $u=\mathrm{prox}_h(x)$，则由最优性条件，

$$\begin{aligned} u=\mathrm{prox}_h(x) &\Leftrightarrow x-u\in\partial h(u) \\ &\Leftrightarrow x-u\in\partial g(\lambda u+a). \quad (\lambda>0) \end{aligned}$$

设 $\alpha=\lambda u+a$，根据次梯度线性映射计算法则，有

$$u=\mathrm{prox}_h(x)\Leftrightarrow x-\frac{\alpha}{\lambda}+\frac{a}{\lambda}\in\lambda\partial g(\alpha)=\partial\lambda g(\alpha),$$

故

$$\begin{aligned} u=\mathrm{prox}_h(x) &\Leftrightarrow \lambda x+a-\alpha\in\partial\lambda^2 g(\alpha) \\ &\Leftrightarrow \alpha=\mathrm{prox}_{\lambda^2 g}(\lambda x+a). \end{aligned}$$

再代入 $\alpha=\lambda u+a$，得到

$$u=\frac{1}{\lambda}(\mathrm{prox}_{\lambda^2 g}(\lambda x+a)-a)=\mathrm{prox}_h(x).$$

(2) 与 (1) 几乎一致的做法，注意

$$x-u\in\partial h(u)\Leftrightarrow x-u\in\partial\lambda g\left(\frac{u}{\lambda}\right),$$

设 $\alpha=\dfrac{u}{\lambda}$，则可导出

$$u=\lambda\,\mathrm{prox}_{\lambda^{-1}g}(\lambda^{-1}x)=\mathrm{prox}_h(x).$$

(3) 与 (1) 几乎一致的做法，注意

$$x-u\in\partial h(u)\Leftrightarrow\partial g(u)+a,$$

则 $u=\mathrm{prox}_g(x-a)$.

(4) 设 β 为邻近算子，有

$$\begin{aligned}\beta = \mathrm{prox}_h(x) &\Leftrightarrow x - \beta \in \partial h(\beta)\\ &\Leftrightarrow x - \beta \in \partial g(\beta) + u(\beta - a)\\ &\Leftrightarrow \frac{x+ua}{u+1} - \beta \in \partial \frac{1}{u+1} g(\beta)\\ &\Leftrightarrow \beta = \mathrm{prox}_{\theta g}(\theta x + (1-\theta)a),\end{aligned}$$

其中 θ 如定理所定义.

(5) 取邻近算子 $\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \mathrm{prox}_h\left(\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right)$，则

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \in \partial h\left(\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}\right)\\ \Leftrightarrow\ &\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \in \partial \varphi_1(u) + \partial \varphi_2(v), \end{aligned}$$

由此可得 $u = \mathrm{prox}_{\varphi_1}(x), v = \mathrm{prox}_{\varphi_2}(y)$，那么

$$\mathrm{prox}_h\left(\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{prox}_{\varphi_1}(x) \\ \mathrm{prox}_{\varphi_2}(y) \end{bmatrix}.$$

□

7.2 求下列函数的邻近算子：

(a) $f(x) = I_C(x)$，其中 $C = \{(x,t) \in \mathbb{R}^{n+1} | \|x\|_2 \leqslant t\}$；

(b) $f(x) = \inf\limits_{y \in C} \|x - y\|$，其中 C 是闭凸集；

(c) $f(x) = \frac{1}{2}(\inf\limits_{y \in C} \|x - y\|)^2$，其中 C 是闭凸集.

解 (丁思哲).

(a) 由定义，临近算子

$$\begin{aligned} u &= \arg\min_u \left\{ I_C(u) + \frac{1}{2}\|u - x\|^2 \right\}\\ &= \arg\min_{\|u\|_2 \leqslant t} \{\|u - x\|^2\}\\ &= \mathcal{P}_{\|x\|_2 \leqslant t}(x). \end{aligned}$$

(b) $f(x)=\inf\limits_{y\in C}\|x-y\|$. 我们先求 f 在 $\hat{x}$ 处的次梯度.
若 $f(\hat{x})=0$，则 $g=0$；若 $f(\hat{x})>0$，取 $\hat{y}$ 为 $\hat{x}$ 在 C 上的投影，即 $\hat{y}=\mathcal{P}_C(\hat{x})$，则次梯度为

$$g\in\partial\|\hat{x}-\mathcal{P}_C(\hat{x})\|\subseteq\partial f(\hat{x}).$$

特别，若 $\|\cdot\|\triangleq\|\cdot\|_2$，则 $\hat{x}\neq\mathcal{P}_C(\hat{x})$ 时，

$$g=\frac{\hat{x}-\mathcal{P}_C(\hat{x})}{\|\hat{x}-\mathcal{P}_C(\hat{x})\|_2}\in\partial f(\hat{x}),$$

故设 $u=\operatorname{prox}_f(x)$，则 $x-u\in\partial f(u)$，结合上式可知

$$x-u\in\begin{cases}\partial\|u-\mathcal{P}_C(u)\|, & f(u)>0,\\ \{0\}, & f(u)=0.\end{cases}$$

因此当 $x=y$ 时, $u=x$; 当 $x\neq y$ 时, u 满足 $x-u\in\|u-\mathcal{P}_C(u)\|$.
特别，若 $\|\cdot\| iangleq \|\cdot\|_2$，则 $x\neq y$ 时，$x-u=\dfrac{u-\mathcal{P}_C(u)}{\|u-\mathcal{P}_C(u)\|}$，进而从中解出 u 即可.

(c) $f(x)=\dfrac{1}{2}\inf\limits_{y\in C}\|x-y\|^2$，求 f 在 $\hat{x}$ 处的次梯度.
若 $f(\hat{x})=0$，则 $g=0$；否则，取 $\hat{y}=\mathcal{P}_C(\hat{x})$，则

$$g\in\partial\left(\frac{1}{2}\|\hat{x}-\mathcal{P}_C(\hat{x})\|^2\right).$$

特别地，若 $\|\cdot\|\triangleq\|\cdot\|_2$，则 $y=\hat{x}-\mathcal{P}_C(\hat{x})$. 设 $u=\operatorname{prox}_f(x)$，则由极小化原理可知

$$x-u\in\partial\left(\frac{1}{2}\|u-\mathcal{P}_C(u)\|^2\right).$$

特别地，若 $\|\cdot\|\triangleq\|\cdot\|_2$，则 u 进一步满足 $2u-\mathcal{P}_C(u)=x$. □

7.3 对一般复合优化问题的加速算法（算法 8.9），试证明：

(a) 当 $t_k=\gamma_k\lambda_k$ 且 $h(x)=0$ 时，算法 8.9 等价于第二类 Nesterov 加速算法；

(b) 当 $t_k=\lambda_k$ 时，算法 8.9 等价于近似点梯度法.

解 (丁思哲).

(a) 在算法 8.9 中，更新 z^k, y^k, x^k 的方式为

$$z^k = \gamma_k y^{k-1} + (1-\gamma_k)x^{k-1}, \tag{7.1}$$
$$y^k = \mathrm{prox}_{\lambda_k h}(y^{k-1} - \lambda_k \nabla f(z^k)), \tag{7.2}$$
$$x^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(z^k - t_k \nabla f(z^k)). \tag{7.3}$$

取 $t_k = \gamma_k \lambda_k$，则 (7.2) 式化为

$$y^k = \mathrm{prox}_{\frac{t_k}{\gamma_k} h}(y^{k-1} - \frac{t_k}{\gamma_k}\nabla f(z^k)).$$

最后证明 $x^k = (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^k$ 即可．注意(7.1)式有

$$(1-\gamma_k)x^{k-1} = z^k - \gamma_k y^{k-1},$$

故即证

$$x^k = z^k + \gamma_k(y^k - y^{k-1}). \tag{7.4}$$

由定义，

$$x^k = \arg\min_u \left\{ t_k h(u) + \frac{1}{2}\left\| u - z^k + t_k \nabla f(z^k) \right\|^2 \right\},$$

取 $\alpha = (u - z^k)/\gamma_k + y^{k-1}$，代入上式，即产生问题

$$\min_\alpha \left\{ \lambda_k h(\alpha) + \frac{1}{2}\left\| \alpha - y^{k-1} + \lambda_k \nabla f(z^k) \right\|^2 \right\},$$

这恰好对应 (7.2) 式，我们知道极小点为 $\alpha = y^k$．因此，对 $\alpha = (u-z^k)/\gamma_k + y^{k-1}$，分别优化上述 2 个问题，代入 $\alpha = y^k$，$u = x^k$，得到 (7.4)式，证毕.

(b) $\lambda_k = t_k$ 时，算法 8.9 为

$$z^k = \gamma_k y^{k-1} + (1-\gamma_k)x^{k-1}, \tag{7.5}$$
$$y^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(y^{k-1} - t_k \nabla f(z^k)), \tag{7.6}$$
$$x^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(z^k - t_k \nabla f(z^k)). \tag{7.7}$$

若证明其与近似点梯度法等价，只需要证明 $y^k = x^k$.
由 (7.7) 得

$$x^k = \arg\min_u \left\{ t_k h(u) + \frac{1}{2}\left\| u - z^k + t_k \nabla f(z^k) \right\|^2 \right\},$$

令 $\alpha = u + (1-\gamma_k)x^{k-1} - (1-\gamma_k)y^{k-1}$，代入上式，即产生问题

$$\min_{\alpha}\{t_k h(\alpha) + \frac{1}{2}\left\|\alpha - y^{k-1} + t_k\nabla f(z^k)\right\|^2\},$$

这恰好对应 (7.6) 式，我们知道极小点为 $\alpha = y^k$. 因此，对 $\alpha = (u-z^k)/\gamma_k + y^{k-1}$，分别优化上述 2 个问题，代入 $\alpha = y^k$，$u = x^k$，得到 $x^k = y^k$，证毕. □

7.4 假设 f 是闭凸函数，证明 Moreau 分解的推广成立，即对任意的 $\lambda > 0$ 有

$$x = \mathrm{prox}_{\lambda f}(x) + \lambda\,\mathrm{prox}_{\lambda^{-1}f^*}\left(\frac{x}{\lambda}\right) \quad \forall x.$$

提示：利用 *Moreau* 分解的结论.

解 (邓展望). 由 Moreau 分解的结论可知

$$\mathrm{prox}_{\lambda f}(x) = x - \mathrm{prox}_{(\lambda f)^*}(x) = x - \mathrm{prox}_{\lambda f^*(\cdot/\lambda)}(x),$$

再根据 prox 算子的性质可知若 $f(x) = \lambda g(x/\lambda)$，则有

$$\mathrm{prox}_f(x) = \lambda\,\mathrm{prox}_{g/\lambda}(x/\lambda).$$

再代入 f^* 得

$$x = \mathrm{prox}_{\lambda f}(x) + \lambda\,\mathrm{prox}_{\lambda^{-1}f^*}\left(\frac{x}{\lambda}\right), \quad \forall x.$$ □

7.5 写出关于 LASSO 问题的鞍点问题形式，并写出原始 – 对偶混合梯度算法和 Chambolle-Pock 算法.

解 (丁思哲). LASSO 问题的形式为

$$\min_x \quad \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2 + \mu\|x\|_1,$$

记 $f(x) = \mu\|x\|_1$，$h(x) = \|x-b\|_2^2/2$，则 $f(x)$ 与 $h(x)$ 都是适当的闭凸函数，且 $h(x)$ 具有自共轭性.

鞍点形式 (a) 及其算法

设 $h(x)$ 的共轭函数为 $h^*(z)$，则鞍点问题的形式为

$$\min_x \max_z\{f(x) - h^*(z) + z^{\mathrm{T}}Ax\}.$$

其中 $h^*(z) = \sup\limits_{y\in\mathbf{dom}\,h} \{z^{\mathrm{T}}y - \|y-b\|_2^2/2\}$.

由最优性条件，对 $h^*(z)$ 取 $y = z + b$，得 $h^*(z) = \|z\|_2^2/2 + z^{\mathrm{T}}b$，故鞍点问题的形式具体为

$$\min_x \max_z \left\{\mu\|x\|_1 + z^{\mathrm{T}}Ax - \frac{1}{2}\|z\|_2^2 - b^{\mathrm{T}}z\right\}. \tag{7.8}$$

对于鞍点问题，可设计 PDHG 算法. 具体而言，在第 $k+1$ 步的更新中，先固定 x^k，对 z^k 做梯度上升；再固定 z^k，对 x^k 做梯度下降. 因此，迭代格式为

$$\begin{aligned}
z^{k+1} &= \arg\max_z \left\{-h^*(z) + (z-z^k)^{\mathrm{T}}Ax^k - \frac{1}{2\delta_k}\left\|z-z^k\right\|_2^2\right\} \\
&= \mathrm{prox}_{\delta_k h^*}(z^k + \delta_k Ax^k) \\
&= \frac{\delta_k(Ax^k - b) + z^k}{\delta_k + 1}. \\
x^{k+1} &= \arg\min_x \left\{f(x) + (x-x^k)^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}z^{k+1} + \frac{1}{2\alpha_k}\left\|x-x^k\right\|_2^2\right\} \\
&= \mathrm{prox}_{\alpha_k f}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}}z^{k+1}) \\
&= \mathrm{prox}_{\alpha_k\mu\|\cdot\|_1}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}}z^{k+1}).
\end{aligned}$$

上述迭代格式对应的 Chambolle-Pock 算法为

$$\begin{aligned}
z^{k+1} &= \frac{\delta_k(Ay^k - b) + z^k}{\delta_k + 1}, \\
x^{k+1} &= \mathrm{prox}_{\alpha_k\mu\|\cdot\|_1}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}}z^{k+1}), \\
y^{k+1} &= 2x^{k+1} - x^k.
\end{aligned}$$

鞍点形式 (b) 及其算法

再以格式 (8.5.11) 写鞍点形式. LASSO 问题等价于

$$\begin{aligned}
\min_{x,z} \quad & \mu\|x\|_1 + \frac{1}{2}\|z-b\|_2^2, \\
\text{s.t.} \quad & Ax - z = 0,
\end{aligned}$$

并不妨设 $f(x) = \mu\|x\|_1$，且 $h(z) = \|z-b\|_2^2/2$.

直接用带约束问题的拉格朗日函数定义鞍点问题，即

$$\begin{aligned}
&\min_{x,z} \max_\lambda \quad L(x,z;\lambda) \\
=&\min_{x,z} \max_\lambda \left\{\mu\|x\|_1 + \frac{1}{2}\|z-b\|_2^2 + \lambda^{\mathrm{T}}(Ax-z)\right\}.
\end{aligned}$$

这种鞍点问题也对应一类 PDHG 算法. 具体而言，在第 $k+1$ 步迭代，先固定 (x^k, z^k)，更新 λ^k；再固定 λ^{k+1}，联合更新 (x^k, z^k). 其格式为

$$\begin{aligned}\lambda^{k+1} &= \arg\max_{\lambda}\left\{(Ax^k - z^k)^{\mathrm{T}}(\lambda - \lambda^k) - \frac{1}{2\delta_k}\left\|\lambda - \lambda^k\right\|_2^2\right\} \\ &= \lambda^k + \delta_k(Ax^k - z^k),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(x^{k+1}, z^{k+1}) &= \arg\min_{x,z}\Big\{f(x) + h(z) + (\lambda^{k+1})^{\mathrm{T}}(A(x - x^k) - (z - z^k)) \\ &\quad + \frac{1}{2\alpha_k}\left\|x - x^k\right\|_2^2 + \frac{1}{2\beta_k}\left\|z - z^k\right\|_2^2\Big\} \\ &= \big(\mathrm{prox}_{\alpha_k f}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}}\lambda^{k+1}), \mathrm{prox}_{\beta_k h}(z^k + \beta_k\lambda^{k+1})\big) \\ &= \left(\mathrm{prox}_{\alpha_k f}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}}\lambda^{k+1}), \frac{z^k + \beta_k(b + \lambda^{k+1})}{\beta_k + 1}\right).\end{aligned}$$

上述迭代格式对应的 Chambolle-Pock 算法为

$$\begin{aligned}\lambda^{k+1} &= \lambda^k + \delta_k(Ap^k - q^k), \\ x^{k+1} &= \mathrm{prox}_{\alpha_k f}(x^k - \alpha_k A^{\mathrm{T}}\lambda^{k+1}), \\ z^{k+1} &= \frac{z^k + \beta_k(b + \lambda^{k+1})}{\beta_k + 1}, \\ p^{k+1} &= 2x^{k+1} - x^k, \\ q^{k+1} &= 2z^{k+1} - z^k.\end{aligned}$$

最后课本中还列举了一类鞍点格式 (8.5.12)，如上做法，故不再赘述.

□

7.6 设函数 $f(x_1, x_2) = |x_1 - x_2| - \min\{x_1, x_2\}$，其定义域为 $[0,1]\times[0,1]$. 试推导基于格式 (8.4.3) 的分块坐标下降法（x_1 和 x_2 分别看做一个变量块），此算法是否收敛?

解 (丁思哲). 由于 $\min\{x_1, x_2\} = (x_1 + x_2 - |x_1 - x_2|)/2$，故函数可进一步写成

$$f(x_1, x_2) = \frac{3}{2}|x_1 - x_2| - \frac{1}{2}(x_1 + x_2).$$

将 x_1, x_2 视为 2 个变量块，进行分块下降.

当固定 x_1 时，解得

$$x_1 = \arg\min_{x_2} \quad f(x_1, x_2),$$

同理可得当固定 x_2 时，解得

$$x_2 = \arg\min_{x_1} \quad f(x_1, x_2),$$

因此基于格式 (8.4.3) 的分块下降法为

$$\begin{cases} x_2^{k+1} = x_1^k, \\ x_1^{k+1} = x_2^{k+1}. \end{cases}$$

由上述格式立即可得算法收敛，因为 $x_1^{k+1} = x_1^k$，而

$$x_2^{k+2} = x_1^{k+1} = x_1^k = x_2^{k+1}.$$

但明显该算法在本例不具有全局优化的能力. □

7.7 试对分组 LASSO 问题（即例 8.7）推导出基于格式 (8.4.4) 的分块坐标下降法.

解 (邓展望). 首先写出该问题的形式：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2 + \mu_1 \sum_{\ell=1}^{G} \sqrt{n_\ell}\|x_{\mathcal{I}_\ell}\|_2, \tag{7.9}$$

所以可知第 i 块变量即为 x 的第 i 组分量. 为了方便起见，记 $A = (A_1, ..., A_G), x^{\mathrm{T}} = (x_1, ..., x_G)$ 则每次迭代目标函数可化简为

$$\begin{aligned} &\arg\min_{x_i} \left\{ \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2 + \mu_1 \sum_{\ell=1}^{G} \sqrt{n_\ell}\|x_{\mathcal{I}_\ell}\|_2 \right\} \\ &= \arg\min_{x_i} \left\{ \frac{1}{2}\|A_i x_i\|_2^2 + \Big(\sum_{k\neq i} x_k^{\mathrm{T}} A_k^{\mathrm{T}} - b^{\mathrm{T}} \Big) A_i x_i + \mu_i\sqrt{n_i}\|x_i\|_2 \right\} \\ &= \arg\min_{x_i} \left\{ \frac{1}{2}x_i^{\mathrm{T}} M_i x_i + p_i^{\mathrm{T}} x_i + \lambda\|x_i\| \right\}, \end{aligned}$$

其中 $M_k = A_k^{\mathrm{T}} A_k, p_k^{\mathrm{T}} = (\sum\limits_{k\neq i} x_k^{\mathrm{T}} A_k^{\mathrm{T}} - b^{\mathrm{T}})A_i, \lambda = \mu_i\sqrt{n_i}$. 由最优性条件可得当 $x_i \neq 0$ 时方程

$$M_i x_i + p_i = \frac{x_i}{\|x_i\|}$$

成立. 若 $\|p_i\| \leqslant \lambda$，则有 $p_i^{\mathrm{T}} x_i + \lambda \|x_i\| \geqslant 0$，此时 $x_i = 0$. 而若 $x_i = 0$，则有 $p_i + \lambda g_0 = 0$，其中 g_0 为 $\|x\|$ 在 $x = 0$ 处的次梯度；又由于 $\|g_0\| \leqslant 1$，故有 $\|p_i\| \leqslant \lambda$. 所以 $x_i = 0$ 为最优解的充分必要条件为 $\|p_i\| \leqslant \lambda$. 综上, 若 $\|p_i\| \leqslant \lambda$ 则 $x_i = 0$, 否则 $x_i = (M_i + \dfrac{\lambda}{\|x_i\|})^{-1} p_i$. $\square$

注：方程

$$M_i x_i + p_i = \frac{x_i}{\|x_i\|}$$

的求解可用信赖域方法，具体可见：

Q,Z.,Scheinberg, K. & Goldfarb,D. Efficient block-coordinate descent algorithms for the Group Lasso.Math.Prog. Comp.5,143-169(2013).

7.8 考虑约束优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & \max\{e^{-x} + y, y^2\}, \\ \text{s.t.} \quad & y \geqslant 2, \end{aligned}$$

其中 $x, y \in \mathbb{R}$ 为自变量.

(a) 通过引入松弛变量 z，试说明该问题等价于

$$\begin{aligned} \min \quad & \max\{e^{-x} + y, y^2\} + I_{\mathbb{R}_+}(z), \\ \text{s.t.} \quad & y - z = 2; \end{aligned}$$

(b) 推导 (a) 中问题的对偶问题，并求出原始问题的最优解；

(c) 对 (a) 中的问题形式，使用 ADMM 求解时可能会遇到什么问题?

解 (邓展望).

(a) 引入松弛变量 z, 将原问题变为：

$$\begin{aligned} \min \quad & \max\{e^{-x} + y, y^2\}, \\ \text{s.t.} \quad & y - z = 2, z \geqslant 0. \end{aligned}$$

则可知原问题等价于

$$\begin{aligned} \min \quad & \max\{e^{-x} + y, y^2\} + I_{\mathbb{R}_+}(z), \\ \text{s.t.} \quad & y - z = 2. \end{aligned}$$

(b) 写出 (a) 的拉格朗日函数:

$$L(x,y,\lambda,z)=\max\{e^{-x}+y,y^2\}+I_{\mathbb{R}_+}(z)+\lambda(y-z-2).$$

又若求 $\inf\limits_{x,y,z} L(x,y,\lambda,z)$, 此时应有 $\lambda\leqslant 0, x=+\infty, z=0$.
所以成立

$$\inf_{x,y,z} L(x,y,\lambda,z)=\begin{cases}-2\lambda, & \lambda\geqslant -1,\\ 1-\lambda, & \lambda\in[-2,-1]\\ -2\lambda-\dfrac{\lambda^2}{4}, & \lambda<-2.\end{cases}$$

求解该问题得 $z=0, x=\infty, y=2, \lambda=-4$.

(c) 由于在迭代过程中每一步为

$$\begin{aligned}(x^{k+1},y_{k+1})=\arg\min_{(x,y)}\{&\max\{e^{-x}+y,y^2\}+I_{\mathbb{R}_+}(z)+\\ &\lambda(y-z-2)+\frac{\rho}{2}(y-z-2)^2\},\end{aligned}$$

若初始条件为 $z=0,\lambda=0$, 此时无法在 $\mathbb{R}^2$ 中找到最小值点 (x,y), 因此 ADMM 的子迭代不是良定义的. 必须对原问题进行某种变形. □

7.9 写出对于线性规划对偶问题运用 ADMM 的迭代格式, 以及与之等价的对于原始问题的 DRS 格式, 并指出 ADMM 和 DRS 算法更新变量之间的关系.

解 (陈铖). 首先考虑线性规划的对偶问题

$$\begin{aligned}\max\quad & b^{\mathrm{T}}y,\\ \text{s.t.}\quad & A^{\mathrm{T}}y+s=c,\\ & s\geqslant 0.\end{aligned}$$

通过引入乘子 λ, 构造增广拉格朗日函数

$$L_\rho(s,y,\lambda)=-b^{\mathrm{T}}y-\langle\lambda,A^{\mathrm{T}}y+s-c\rangle+\frac{\rho}{2}\|A^{\mathrm{T}}y+s-c\|^2.$$

对于 y 子问题，

$$\begin{aligned}
y^{k+1} &= \arg\min_{y} L_\rho(s^k, y, \lambda^k) \\
&= \arg\min_{y} \left\{ -(A\lambda^k + b)^{\mathrm{T}} y + \frac{\rho}{2} \|A^{\mathrm{T}} y + s^k - c\|^2 \right\} \\
&= \frac{1}{\rho}(AA^{\mathrm{T}})^{-1}(A\lambda^k + b + \rho A(c - s^k)).
\end{aligned}$$

对于 s 子问题，

$$\begin{aligned}
s^{k+1} &= \arg\min_{s \geqslant 0} L_\rho(s, y^{k+1}, \lambda^k) \\
&= \arg\min_{s \geqslant 0} \left\{ -\langle \lambda^k, s \rangle + \frac{\rho}{2} \|A^{\mathrm{T}} y^{k+1} + s - c\|^2 \right\} \\
&= \max\{c - A^{\mathrm{T}} y^{k+1} + \frac{1}{\rho}\lambda^k, 0\}.
\end{aligned}$$

对于乘子 x，我们使用常规更新，由此得到 ADMM 的迭代格式

$$\begin{aligned}
y^{k+1} &= \frac{1}{\rho}(AA^{\mathrm{T}})^{-1}(A\lambda^k + b + \rho A(c - s^k)), \\
s^{k+1} &= \max\{c - A^{\mathrm{T}} y^{k+1} + \frac{1}{\rho}\lambda^k, 0\}, \\
\lambda^{k+1} &= \lambda^k - \tau\rho(A^{\mathrm{T}} y^{k+1} + s^{k+1} - c).
\end{aligned}$$

现在我们引入示性函数，将上述问题改写为可分的凸问题的形式：

$$\begin{aligned}
\min \quad & -b^{\mathrm{T}} y + I_{\{s|s \geqslant 0\}}(s), \\
\text{s.t.} \quad & A^{\mathrm{T}} y + s = c.
\end{aligned}$$

令 $f_1(y) = -b^{\mathrm{T}} y$，$f_2(s) = I_C(s)$，其对偶问题为无约束的复合优化问题

$$\min_{x} \quad c^{\mathrm{T}} x + f_1^*(-Ax) + f_2^*(-x).$$

由共轭函数的定义，

$$f_1^*(z) = I_{\{z|z=-b\}}(z), \quad f_2^*(z) = I_{\{z|z \leqslant 0\}}(z).$$

由此得到无约束符合复合优化问题

$$\min_{x} \quad c^{\mathrm{T}} x + I_{\{x|Ax=b\}}(x) + I_{\{x|x \geqslant 0\}}(x).$$

注意到这个问题等价于线性规划的原问题.令 $f(x)=c^{\mathrm{T}}x+I_{\{x|Ax=b\}}(x)$, $h(x)=I_{\{x|x\geqslant 0\}}(x)$，使用 DRS 算法，得到迭代格式

$$\begin{aligned}
u^{k+1} &= \mathrm{prox}_{tf}(x^k-w^k)\\
&= \mathcal{P}_{\{x|Ax=b\}}(x^k-w^k-tc)\\
&= x^k-w^k-tc-A^{\mathrm{T}}(AA^{\mathrm{T}})^{-1}(A(x^k-w^k-tc)-b),\\
x^{k+1} &= \mathrm{prox}_{th}(w^k+u^{k+1})\\
&= \max\{w^k+u^{k+1},0\},\\
w^{k+1} &= w^k+u^{k+1}-x^{k+1}.
\end{aligned}$$

现在我们讨论 ADMM 和 DRS 算法更新变量之间的关系. 根据定理 8.15 可知，在由 DRS 算法产生的更新中，分别存在

$$\begin{aligned}
x_1^k &\in \partial f_1^*(-Au^{k+1}),\\
x_2^k &\in \partial f_2^*(-x^{k+1}),
\end{aligned}$$

再令 $w^{k+1}=-tx_2^k$，$\lambda^k=-x^{k+1}$，则导出

$$\begin{aligned}
x_1^{k+1} &= \arg\min_{x_1}\left\{-b^{\mathrm{T}}x_1-(\lambda^k)^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}x_1+\frac{t}{2}\|A^{\mathrm{T}}x_1+x_2^k-c\|^2\right\},\\
x_2^{k+1} &= \arg\min_{x_2}\left\{I_C(x_2)-(\lambda^k)^{\mathrm{T}}x_2+\frac{t}{2}\|A^{\mathrm{T}}x_1^{k+1}+x_2-c\|^2\right\},\\
\lambda^{k+1} &= \lambda^k-t(A^{\mathrm{T}}x_1^{k+1}+x_2^{k+1}-c),
\end{aligned}$$

对比可发现 ADMM 算法中的 y 对应 DRS 算法推出的 x_1，s 对应 x_2，且 DRS 是 ADMM 算法的一类特殊形式，其中 $\rho=t$ 且 $\tau=1$. □

7.10 考虑 ℓ_0 范数优化问题的罚函数形式：

$$\min \quad \lambda\|x\|_0+\frac{1}{2}\|Ax-b\|^2,$$

其中 $A\in\mathbb{R}^{m\times n}, m<n$ 为实矩阵，$\|\cdot\|_0$ 为 ℓ_0 范数，即非零元素的个数. 试针对 ℓ_0 范数优化问题形式化推导具有两个变量块的 ADMM 格式. 在算法中每个子问题是如何求解的?

解 (陈铖). 考虑上述问题的等价形式：

$$\begin{aligned}
\min \quad & \lambda\|z\|_0+\frac{1}{2}\|Ax-b\|^2,\\
\mathrm{s.t.} \quad & x=z.
\end{aligned}$$

写出该问题的增广拉格朗日函数. 引入乘子 λ 作用在约束 $x=z$ 上,

$$L_\rho(x,z,\lambda)=\|z\|_0+\frac{1}{2}\|Ax-b\|^2+\lambda^{\mathrm{T}}(x-z)+\frac{\rho}{2}\|x-z\|^2.$$

在第 $(k+1)$ 步, 交替方向乘子法分别求解关于 x 和 z 的子问题更新 x^{k+1} 和 y^{k+1}.
对于 x 子问题,

$$\begin{aligned}
x^{k+1}&=\arg\min_x L_\rho(x,z^k,\lambda^k)\\
&=\arg\min_x\left\{\frac{1}{2}\|Ax-b\|^2+\frac{\rho}{2}\left\|x-z^k+\frac{1}{\rho}\lambda^k\right\|^2\right\}\\
&=(A^{\mathrm{T}}A+\rho I)^{-1}(A^{\mathrm{T}}b+\rho z^k-\lambda^k).
\end{aligned}$$

对于 z 子问题,

$$\begin{aligned}
z^{k+1}&=\arg\min_z L_\rho(x^{k+1},z,\lambda^k)\\
&=\arg\min_z\left\{\|z\|_0+\frac{\rho}{2}\left\|x^{k+1}-z+\frac{1}{\rho}\lambda^k\right\|^2\right\}.
\end{aligned}$$

注意到对于 z^{k+1} 的某一分量, 若其不为零, 则取值与 $x^{k+1}+\dfrac{1}{\rho}\lambda^k$ 的对应分量相等是目标函数最小. 令 $c=x^{k+1}+\dfrac{1}{\rho}\lambda^k$, 则 z^{k+1} 满足

$$z_i^{k+1}=\begin{cases}c_i, & \dfrac{\rho}{2}c_i^2\geqslant 1,\\ 0, & \dfrac{\rho}{2}c_i^2<1.\end{cases}$$

对于乘子 λ, 有常规更新

$$\lambda^{k+1}=\lambda^k+\tau\rho(x^{k+1}-z^{k+1}).$$

因此两个子问题都存在显式解. □

7.11 试说明 LASSO 对偶问题中, 若在问题 (8.6.27) 中对约束

$$A^{\mathrm{T}}y+z=0$$

引入乘子 x, 则 x 恰好对应 LASSO 原始问题 (8.6.26) 中的自变量.

解 (邓展望). 写出该问题的拉格朗日函数:

$$b^{\mathrm{T}}y+\frac{1}{2}\|y\|^2+I_{\|z\|_\infty\leqslant\mu}(z)-x^{\mathrm{T}}(A^{\mathrm{T}}y+z). \tag{7.10}$$

再由

$$\begin{aligned}&\inf_{y,z} b^{\mathrm{T}}y+\frac{1}{2}\|y\|^2+I_{\|z\|_\infty\leqslant\mu}(z)-x^{\mathrm{T}}(A^{\mathrm{T}}y+z)\\ =&\inf_{y,z}\frac{1}{2}\|y-Ax-b\|^2-\frac{1}{2}\|Ax-b\|^2+I_{\|z\|_\infty\leqslant\mu}(z)-x^{\mathrm{T}}z \\ =&-\frac{1}{2}\|Ax-b\|^2-\mu\|x\|_1,\end{aligned} \tag{7.11}$$

所以该问题的对偶问题为

$$\max \quad -\mu\|x\|_1-\frac{1}{2}\|Ax-b\|^2, \tag{7.12}$$

它与 LASSO 问题等价. 所以, 拉格朗日乘子 x 对应原问题自变量 x. □

7.12 实现关于 LASSO 问题使用以下算法的程序, 并比较它们的效率

(a) 近似点梯度算法;

(b) Nesterov 加速算法;

(c) 交替方向乘子法;

(d) Chambolle-Pock 算法;

(e) 分块坐标下降法;

(f) 随机近似点梯度算法.

解. 见教材代码主页, 此处从略. □

7.13 设 $f(x)=\dfrac{1}{N}\displaystyle\sum_{i=1}^{N}f_i(x)$, 其中每个 $f_i(x)$ 是可微函数, 且 $f(x)$ 为梯度 L-利普希茨连续的. $\{x^k\}$ 是由随机梯度下降法产生的迭代序列, s_k 为第 k 步随机抽取的下标. 证明:

$$\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)\|^2]\leqslant\mathbb{E}[\|x^k-x^*\|^2]+\alpha_k\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)-\nabla f(x^k)\|^2],$$

其中 x^* 是 $f(x)$ 的一个最小值点, α_k 为第 k 步的步长.

订正 原问题有误, 应改为证明:

$$\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)\|^2]\leqslant L^2\mathbb{E}[\|x^k-x^*\|^2]+\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)-\nabla f(x^k)\|^2].$$

解 (邓展望).

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k)\|^2] = \mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k) - \nabla f(x^k) + \nabla f(x^k)\|^2] \\
&= \mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k) - \nabla f(x^k)\|^2] + \mathbb{E}[(\nabla f_{s_k}(x^k) - \nabla f(x^k))^{\mathrm{T}}(\nabla f(x^k))] \\
&\quad + \mathbb{E}[\|\nabla f(x^k)\|^2] \\
&= \mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k) - \nabla f(x^k)\|^2] + \mathbb{E}[(\nabla f_{s_k}(x^k) - \nabla f(x^k))^{\mathrm{T}}(\nabla f(x^k))] \\
&\quad + \mathbb{E}[\|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^*)\|^2] \\
&\leqslant L^2\mathbb{E}[\|x^k - x^*\|^2] + \mathbb{E}[\|\nabla f_{s_k}(x^k) - \nabla f(x^k)\|^2].
\end{aligned}
$$

□

7.14 在 SAGA 算法中，每一步的下降方向取为：

$$
v^k = \nabla f_{s_k}(x^k) - g_{s_k}^{k-1} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g_i^{k-1},
$$

假设初值 $g_i^0 = 0, i = 1, 2, \cdots, N$，证明：

$$
\mathbb{E}[v^k | s_1, s_2, \cdots, s_{k-1}] = \nabla f(x^k).
$$

解 (邓展望).

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}[v^k | s_1, s_2, \cdots, s_{k-1}], \\
&= \mathbb{E}[\nabla f_{s_k}(x^k) - g_{s_k}^{k-1} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g_i^{k-1} | s_1, s_2, \cdots, s_{k-1}] \\
&= \mathbb{E}[\nabla f_{s_k}(x^k)] + \mathbb{E}[-g_{s_k}^{k-1} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g_i^{k-1} | s_1, s_2, \cdots, s_{k-1}] \\
&= \nabla f(x^k) - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g_i^{k-1} + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g_i^{k-1} \\
&= \nabla f(x^k).
\end{aligned}
$$

□

更新历史

2021.12.21-2022.05.09

- 版本 v1.0 更新．本次更新主要提供教材全部习题的参考解答（包括资料），是正式发布的第一版．
- **（最新）**版本 v1.01 更新．本次更新修改了部分题目的答案．

致谢

本书内容在北京大学数学科学学院多次开设的“凸优化”和“大数据分析中的算法”课程中使用，感谢选课同学的反馈和支持.