最优性理论:引言

- 在实际中最优化问题的形式多种多样. 给定一类具体的优化问题, 我们首先需要分析其解的存在性.
- 如果优化问题的解存在, 再考虑如何设计算法求出其最优解.
- 一般的非凸优化问题可能存在很多局部极小解, 但其往往也能够满足实际问题的要求.
- 对于这些局部(全局) 极小解的求解, 最优性理论是至关重要的.

最优化问题解的存在性

考虑优化问题

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & f(x), \\ \text{s.t.} \quad & x \in \mathcal{X}, \end{aligned}$$

其中$\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ 为可行域.

- 首先要考虑的是最优解的存在性, 然后考虑如何求出其最优解.
- 在数学分析课程中, 我们学习过Weierstrass 定理, 即定义在紧集上的连续函数一定存在最大(最小) 值点.
- 而在许多实际问题中, 定义域可能不是紧的, 目标函数也不一定连续, 因此需要将此定理推广来保证最优化问题解的存在性.

最优化问题解的存在性: 推广的Weierstrass 定理

定理 (推广的Weierstrass定理)

若函数$f : \mathcal{X} \to (-\infty, +\infty]$ 适当且闭, 且以下条件中任意一个成立:

1. $\mathrm{dom} f \overset{\mathrm{def}}{=\!=} \{x \in \mathcal{X} : f(x) < +\infty\}$ 是有界的;
2. 存在一个常数$\bar{\gamma}$ 使得下水平集
$$C_{\bar{\gamma}} \overset{\mathrm{def}}{=\!=} \{x \in \mathcal{X} : f(x) \leq \bar{\gamma}\}$$
是非空且有界的;
3. f 是强制的, 即对于任一满足$\|x^k\| \to +\infty$ 的点列$\{x^k\} \subset \mathcal{X}$, 都有
$$\lim_{k \to \infty} f(x^k) = +\infty,$$

则函数f 的最小值点集$\{x \in \mathcal{X} \mid f(x) \leq f(y),\ \forall y \in \mathcal{X}\}$ 非空且紧.

假设条件(2) 成立，且$t \stackrel{\text{def}}{=\!=} \inf_{x\in\mathcal{X}} f(x) = -\infty$.

- 由下确界的定义，存在点列$\{x^k\}_{k=1}^{\infty} \subset C_{\bar{\gamma}}$，使得$\lim\limits_{k\to\infty} f(x^k) = -\infty$.
- 由$C_{\bar{\gamma}}$ 有界知点列$\{x^k\}$ 存在聚点x^*.
- 由f 是闭函数知$\mathbf{epi}f$ 为闭集，因此$(x^*, t) \in \mathbf{epi}f$. 根据上方图的定义知$f(x^*) \le t = -\infty$，这与$f$ 适当矛盾，故$t \stackrel{\text{def}}{=\!=} \inf_{x\in\mathcal{X}} f(x)$ 有限.
- 由f 为闭函数知$C_{\bar{\gamma}}$ 为闭集，由假设知$C_{\bar{\gamma}}$ 有界，故为紧集.
- 由$f(x^*) = t$ 知最小值点集非空，且为紧集$C_{\bar{\gamma}}$ 的子集，而紧集的子集也是紧集，故最小值点集为非空紧集.

条件(1)(3)下的证明

假设条件(1)成立, 则$\mathrm{dom} f$ 是有界的.

- 由f 适当知存在$x_0 \in \mathcal{X}$ 使得$f(x_0) < +\infty$.
- 记$\bar{\gamma} = f(x_0)$, 此时f 的$\bar{\gamma}$ 下水平集$C_{\bar{\gamma}}$ 非空有界, 条件(2)成立.

假设条件(3)成立, 我们证明条件(2)成立.

- 用反证法, 假设存在一个无界的下水平集$C_{\bar{\gamma}}$, 那么可以取点列$\{x^k\} \subset C_{\bar{\gamma}}$ 使得$\lim\limits_{k\to\infty} \|x^k\| = +\infty$, $\lim\limits_{k\to\infty} f(x^k) = +\infty$, 这与$f(x^k) \le \bar{\gamma}$ 矛盾, 故此时f 的任意下水平集都有界, 条件(2)成立.

推广的Weierstrass定理:注记

- 推广的Weierstrass定理的三个条件在本质上都是保证$f(x)$ 的最小值不能在无穷远处取到.
- 因此我们可以仅在一个有界的下水平集中考虑$f(x)$ 的最小值.
- 定理仅要求$f(x)$ 为适当且闭的函数, 并不需要$f(x)$ 的连续性, 因此比数学分析中的Weierstrass定理应用范围更广.
- 当定义域不是有界闭集时, 对于强制函数$f(x) = x^2,\ x \in \mathcal{X} = \mathbb{R}$, 其全局最优解一定存在.
- 对于适当且闭的函数$f(x) = e^{-x},\ x \in \mathcal{X} = \mathbb{R}$, 它不满足三个条件中任意一个, 因此我们不能断言其全局极小值点存在.事实上, 其全局极小值点不存在.

解的存在唯一性

- 推广的Weierstrass定理给出了最优解的存在性条件，但其对应的解可能不止一个.
- 当最优解是唯一存在时，我们可以通过比较不同算法收敛至该解的速度来判断算法好坏.
- 但是如果问题有多个最优值点，不同的算法收敛到的最优值点可能不同，那么这些算法收敛速度的比较就失去了参考价值.
- 因此，最优化问题解的唯一性在理论分析和算法比较中扮演着重要角色.