

凸分析与优化定理证明复习与解答

S4097 王瑞恒

2024 年 12 月 12 日

目录

1	凸集理论相关	1
1.1	凸包、仿射包、锥与相对内部	1
1.2	Caratheodory 定理, 投影定理, 超平面分离	4
1.3	凸函数	7
1.4	回收锥	12
1.5	极点和极锥	17
1.6	多面体问题	22
1.7	约束优化问题	25
2	对偶理论问题	28
2.1	共轭函数	28
2.2	Min-max 问题	31
2.3	MCMC 框架理论	31
2.4	次微分与次梯度	37
2.5	切锥与法锥	48
3	凸优化相关算法	54
3.1	次梯度法	54
3.2	临近点法	57
3.3	ADMM 算法, 增广 Lagrange 函数	60
3.4	梯度下降法	62
3.5	近似点梯度法	67
3.6	加速算法	71
3.7	随机梯度下降	73
3.8	障碍函数法	75

1 凸集理论相关

1.1 凸包、仿射包、锥与相对内部

我们知道，凸集是保凸组合（非负系数且和为 1）的，仿射集把凸集系数非负的条件去掉，锥是保正数乘运算的。下面会说一些定理。有的定理证明过于简单则不提。

C 凸包的定义就是包含所有 C 的凸集之交集，假设 $C \subseteq \mathbb{R}^n$ 是凸集。

定理 1.1.1. 凸包是包含该集合的最小凸集，凸包运算的性质包括有

- $x \in \text{conv}(C) \Rightarrow \text{conv}(C \cap \{x\}) = \text{conv}(C)$
- $\text{conv}(C_1 \cap C_2) \subseteq \text{conv}(C_1) \cap \text{conv}(C_2)$ 。
- $\text{conv}(C_1 + C_2) = \text{conv}(C_1) + \text{conv}(C_2)$ ，对和有封闭性
- 如果 $x \in \text{conv}(C)$ ，则存在 C 中有限个向量 x_i 的凸组合表示 x

定理 1.1.2. 仿射集是对仿射组合封闭的集合，仿射包的性质包括有

- C 为仿射集，则 $\exists S$ 为一个线性子空间，使得 $C = x + S$
- 任意 C ，如果 $x \in \text{aff}(C)$ ，则 x 可以表示为 C 中有限个向量的 x_i 的仿射组合
- 如果 $0 \in C$ ，则 $\text{aff}(C)$ 是一个线性子空间。这只要把仿射集的平移 x 取为 0 就可以。

定理 1.1.3. 锥是包含该集合且保正数乘运算的集合，锥的性质有

- 锥不一定是凸集，也不一定包含原点，但锥的闭包必然有原点
- C_1, C_2 为锥，则 $C_1 \cap C_2, C_1 \times C_2, C_1 + C_2$ ，闭包 \overline{C} ，线性变换 $f(C)$ 都是锥。

除了凸包、仿射包、锥这三者之外，我们还定义相对内部。其给出了在高维空间内讨论低维子集的内部的方法。我们一般说的内部 C° 指 $\exists B(x, \epsilon)$ 一个开球邻域 $\subseteq C$ ，但在三维空间讨论圆盘就出现一个问题，三维空间 $B(x, \epsilon)$ 是一个球，不可能包含于一个二维圆盘。所以我们将 $B(x, \epsilon) \subseteq C$ 改为了 $B(x, \epsilon) \cap \text{aff}(C) \subseteq C$ 就是相对内部 $\text{ri}(C)$ 的定义。

定理 1.1.4. 一个非空凸集的相对内部非空，如果 C 是非空凸集，则

- 线段原理： $x \in \text{ri}(C)$ ， $y \in \overline{C}$ ，则 x, y 线段上的点除了 y 之外都在 $\text{ri}(C)$ 内
- 非空凸集的相对内部非空，且 $\text{aff}(\text{ri}(C)) = \text{aff}(C)$
- 线段延伸定理： $x \in \text{ri}(C)$ 当且仅当 $\forall y \in C, \exists \gamma > 0, x + \gamma(x - y) \in C$ 。
这个你可以看做 $(1 + \gamma)x - \gamma y$ 。综合上面的就是说， yx 线段上的点（可能除了端点）都在 $\text{ri}(C)$ 里，且往 x 外部延伸的线段也存在一段在 $\text{ri}(C)$ 内。
- $\text{cl}(C) = \text{cl}(\text{ri}(C))$ ， $\text{ri}(C) = \text{ri}(\text{cl}(C))$
- $\text{ri}(C_1 + C_2) = \text{ri}(C_1) + \text{ri}(C_2)$ ， $\text{ri}(C_1 \times C_2) = \text{ri}(C_1) \times \text{ri}(C_2)$
- $\text{ri}(C_1) \cap \text{ri}(C_2) \subseteq \text{ri}(C_1 \cap C_2)$ ，当二者有非空交集时取等

下面给出一些包含凸包、仿射包、生成锥的运算。

习题 1.1.1. 对任意 $C \subseteq \mathbb{R}^n$ 非空集合，求证

$$1. \text{aff}(C) = \text{aff}(\text{conv}(C)) = \text{aff}(\bar{C})$$

$$2. \text{cone}(C) = \text{cone}(\text{conv}(C))$$

证明. 详见 PPT

□

习题 1.1.2. C 是非空凸集, 则 $\mathbf{0} \in \text{ri}(C)$ 当且仅当 $\text{cone}(C) = \text{aff}(C)$

证明. 若 $\mathbf{0} \in \text{ri}(C) \subseteq C$, 首先 $\text{cone}(C) \subseteq \text{aff}(C)$ 是成立的, 因为我们可以取到这个仿射组合 $\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{0} = \alpha \mathbf{x} \in \text{cone}(C)$, 在 $\text{aff}(C)$ 里 $\alpha \in \mathbb{R}$, 而在锥里 $\alpha > 0$, 所以自然成立。下证 $\text{aff}(C) \subseteq \text{cone}(C)$: 当 $\mathbf{x} \in \text{aff}(C)$ 时, 则 $\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{x}_i$, $\alpha_i \in \mathbb{R}$, $\mathbf{x}_i \in C$ 。因为 $\mathbf{0} \in \text{ri}(C)$, 则 $\exists r > 0, \forall \mathbf{x} \in C$, 满足

$$\frac{r\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}, -\frac{r\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|} \in C$$

从而得到

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{x}_i = \sum_{i=1}^n \frac{|\alpha_i| \|\mathbf{x}_i\|}{r} \frac{\text{sgn}(\alpha_i) r \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_i\|}$$

左端的系数 $\frac{|\alpha_i| \|\mathbf{x}_i\|}{r}$ 是非负的, 从而我们可以得到仿射组合在生成锥的表达, 故 $\mathbf{x} \in \text{cone}(C)$ 。综合得到 $\text{aff}(C) = \text{cone}(C)$ 。

如果 $\text{aff}(C) = \text{cone}(C)$, 那么我们可以得到 $\mathbf{0} \in \text{aff}(C)$, $\forall \mathbf{x} \in \text{aff}(C) = \text{cone}(C)$, 则 $-\mathbf{x} \in \text{aff}(C) = \text{cone}(C)$ 。现在假设

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^m \alpha_i \mathbf{x}_i, -\mathbf{x} = \sum_{j=1}^n \beta_j \mathbf{y}_j, \alpha_j, \beta_j \geq 0, \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_j \in C$$

因此我们结合锥的性质有 $\frac{\mathbf{x}}{\sum_{i=1}^m \alpha_i} \in C, -\frac{\mathbf{x}}{\sum_{j=1}^n \beta_j} \in C$ 。因为 C 是凸集, 所以我们得到

$$\forall t \in [0, 1], \quad t \frac{\mathbf{x}}{\sum_{i=1}^m \alpha_i} - (1-t) \frac{\mathbf{x}}{\sum_{j=1}^n \beta_j} \in C$$

假设 $\text{aff}(C)$ 上面标准正交基是 $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_N\}$, 则我们假设

$$t \frac{\mathbf{e}_k}{\sum_{i=1}^m \alpha_i^{(k)}} - (1-t) \frac{\mathbf{e}_k}{\sum_{j=1}^n \beta_j^{(k)}} \in C$$

我们取

$$r = \min_{1 \leq k \leq N} \left\{ \frac{1}{2 \sum_{i=1}^m \alpha_i^{(k)}}, \frac{1}{2 \sum_{j=1}^n \beta_j^{(k)}} \right\}$$

结合正交基的性质, 以及 \mathbf{x} 可以表示为正交基的组合, 则有

$$B(\mathbf{0}, r) \cap \text{aff}(C) \subseteq \text{conv} \left(\bigcup_{k=1}^N \left[\frac{1}{\sum_{i=1}^m \alpha_i^{(k)}}, -\frac{1}{\sum_{j=1}^n \beta_j^{(k)}} \right] \right)$$

其中记 $[\mathbf{x}, \mathbf{y}] = \{t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}, 0 \leq t \leq 1\}$ 。这个按照相对内部的定义证得了 $\mathbf{0} \in \text{ri}(C)$

□

习题 1.1.3. $\text{aff}(\text{conv}(C)) \subseteq \text{aff}(\text{cone}(C))$, 如果 $\mathbf{0} \in \text{conv}(C)$ 时则反过来也成立

证明. 可以结合

$$\text{aff}(C) = \text{aff}(\text{conv}(C))$$

然后 $C \subseteq \text{cone}(C)$, 然后两边取仿射包则 $\text{aff}(\text{conv}(C)) = \text{aff}(C) \subseteq \text{aff}(\text{cone}(C))$ 。

如果 $\mathbf{0} \in \text{conv}(C)$, 我们结合 $\text{cone}(C) = \text{cone}(\text{conv}(C))$, 我们只要证明 $\text{aff}(\text{cone}(\text{conv}(C))) \subseteq \text{aff}(\text{conv}(C))$ 。这里我们把 $\text{conv}(C)$ 视为一个整体 D , 则 D 是凸集, 我们验证

$$\text{aff}(\text{cone}(D)) \subseteq \text{aff}(D)$$

就可以。我们注意到因为 $\mathbf{0} \in D$, 当 $\mathbf{x} \in \text{cone}(D)$ 时, 满足 $\forall \alpha > 0, \alpha \mathbf{x} \in \text{cone}(D)$ 。而 $\alpha \mathbf{x} = \alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{0} \in D$, 仿射组合时对 $\alpha, (1 - \alpha)$ 没有取值范围要求。这说明 \mathbf{x} 存在一个仿射组合, 因此 $\mathbf{x} \in \text{aff}(D)$ 。故 $\text{cone}(D) \subseteq \text{aff}(D)$, 两边取仿射包则

$$\text{aff}(\text{cone}(D)) \subseteq \text{aff}(\text{aff}(D)) = \text{aff}(D)$$

于是

$$\text{aff}(\text{cone}(\text{conv}(C))) = \text{aff}(\text{cone}(C)) \subseteq \text{aff}(\text{conv}(C))$$

故此时 $\text{aff}(\text{conv}(C)) = \text{aff}(\text{cone}(C))$, 得证。 \square

习题 1.1.4. 如果 C_1, C_2 是两个包含原点的凸锥, 则 $C_1 + C_2 = \text{conv}(C_1 \cup C_2)$

证明. 若 $\mathbf{x} \in C_1 + C_2$, 由锥对和的封闭性 $C_1 + C_2$ 是一个锥, 由锥的性质 $2\mathbf{x} \in C_1 + C_2$, 则

$$\exists \mathbf{x}_1 \in C_1, \mathbf{x}_2 \in C_2, 2\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2$$

因此 $\mathbf{x} = \frac{1}{2}\mathbf{x}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{x}_2$ 。而 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ 都属于 $C_1 \cup C_2$, 所以说明 \mathbf{x} 是 $C_1 \cup C_2$ 的凸组合, 故 $\mathbf{x} \in \text{conv}(C_1 \cup C_2)$, 因此 $C_1 + C_2 \subseteq \text{conv}(C_1 \cup C_2)$ 。

反过来, 因为 C_1, C_2 都包含原点, 所以 $C_1 = C_1 + \mathbf{0} \subseteq C_1 + C_2$, $C_2 = C_2 + \mathbf{0} \subseteq C_1 + C_2$, 因此

$$C_1 \cup C_2 \subseteq C_1 + C_2$$

两边取凸包则

$$\text{conv}(C_1 \cup C_2) \subseteq \text{conv}(C_1 + C_2) \xrightarrow{\text{凸包对和的封闭}} \text{conv}(C_1) + \text{conv}(C_2) \xrightarrow{C_1, C_2 \text{ 都是凸锥}} C_1 + C_2$$

证毕 \square

习题 1.1.5. 设 C 是 \mathbb{R}^n 中非空凸子集, 求证: $\text{cone}(C) = \bigcup_{\mathbf{x} \in C} \{\gamma \mathbf{x} | \gamma \geq 0\}$

证明. 如果 $\mathbf{x} \in \text{cone}(C)$, 如果 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 则取 $\gamma = 0$ 就可以。如果 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ 则

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{x}_i, \alpha_i \geq 0, \text{不全为 } 0, \mathbf{x}_i \in C$$

故我们有

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{x}_i = \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \right) \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{x}_i}{\sum_{i=1}^n \alpha_i}$$

取 $\mathbf{z} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{x}_i}{\sum_{i=1}^n \alpha_i}$, 又因为 \mathbf{z} 是 C 中元素的凸组合, C 是凸集, 故 $\mathbf{z} \in C$, 从而 \mathbf{x} 满足 $\mathbf{x} = \gamma \mathbf{z}, \mathbf{z} \in C, \gamma = \sum_{i=1}^n \alpha_i \geq 0$, 这说明 $\mathbf{x} \in \bigcup_{\mathbf{z} \in C} \{\gamma \mathbf{z} | \gamma \geq 0\}$ 。

反过来, 如果 $\mathbf{x} \in \bigcup_{\mathbf{z} \in C} \{\gamma \mathbf{z} | \gamma \geq 0\}$, 则 $\mathbf{x} = \gamma \mathbf{y}, \mathbf{y} \in C, \forall \gamma \geq 0$, 由于任意性, $\mathbf{x} \in \text{cone}(C)$ \square

习题 1.1.6. 已知 A, B 是 \mathbb{R}^n 的非空集合, 求证 $\text{conv}(A+B) = \text{conv}(A) + \text{conv}(B)$

证明. 如果 $\mathbf{x} \in \text{conv}(A+B)$, 则满足

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \alpha_i (\mathbf{a}_i + \mathbf{b}_i), \mathbf{a}_i \in A, \mathbf{b}_i \in B, \sum_{i=1}^n \alpha_i = 1, \alpha_i \geq 0$$

那么由于 $\sum_{i=1}^n \alpha_i (\mathbf{a}_i + \mathbf{b}_i) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{a}_i + \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{b}_i$, 而 $\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{a}_i \in \text{conv}(A)$, $\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{b}_i \in \text{conv}(B)$, 故 $\mathbf{x} \in \text{conv}(A) + \text{conv}(B)$ 。如果 $\mathbf{x} \in \text{conv}(A) + \text{conv}(B)$, 则

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^m \alpha_i \mathbf{a}_i + \sum_{j=1}^n \beta_j \mathbf{b}_j, \mathbf{a}_i \in A, \mathbf{b}_j \in B, \sum_{i=1}^m \alpha_i = \sum_{j=1}^n \beta_j = 1, \alpha_i, \beta_j \geq 0$$

我们结合 $\mathbf{a}_i + \mathbf{b}_j \in A+B$

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i \mathbf{a}_i + \sum_{j=1}^n \beta_j \mathbf{b}_j = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n \beta_j \right) \alpha_i \mathbf{a}_i + \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m \alpha_i \right) \beta_j \mathbf{b}_j = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \alpha_i \beta_j (\mathbf{a}_i + \mathbf{b}_j)$$

结合凸组合的定义 $\sum_{i=1}^m \alpha_i = \sum_{j=1}^n \beta_j = 1$, $\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \alpha_i \beta_j = \left(\sum_{i=1}^m \alpha_i \right) \left(\sum_{j=1}^n \beta_j \right) = 1$, 所以可得此时

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \alpha_i \beta_j (\mathbf{a}_i + \mathbf{b}_j) \in \text{conv}(A+B)$$

因此 $\text{conv}(A+B) = \text{conv}(A) + \text{conv}(B)$, 得证 \square

1.2 Caratheodory 定理, 投影定理, 超平面分离

定理 1.2.1. 假设 $C \subseteq \mathbb{R}^n$ 是非空集合, 那么

1. $\text{cone}(C)$ 中任一个向量都可以表示为 C 中 m 个线性无关的向量的正线性组合
2. $\text{conv}(C)$ 中任一个不属于 C 的向量, 都可以表示为 C 中 m 个向量的凸组合, 且 $m \leq n+1$

证明. 不失一般性我们假设 m 是使

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^m \alpha_i \mathbf{x}_i, \alpha_i > 0, \mathbf{x}_i \in C$$

成立的最小的，也就是一个线性组合 m 个系数全部不是 0。此时 \mathbf{x}_i 这一组向量必然线性无关。如果线性相关，那就说明存在一组不全为 0 的系数 λ_i 使得

$$\mathbf{0} = \sum_{i=1}^m \lambda_i \mathbf{x}_i$$

则我们有

$$\mathbf{x} = \mathbf{x} + \mathbf{0} = \sum_{i=1}^m \alpha_i \mathbf{x}_i - \sum_{i=1}^m c \lambda_i \mathbf{x}_i = \sum_{i=1}^m (\alpha_i - c \lambda_i) \mathbf{x}_i$$

因为 λ_i 不全为 0，我们可以取到一个 c 使得

$$\exists k, 1 \leq k \leq m, \text{ s.t. } \alpha_k - c \lambda_k = 0, \alpha_j - c \lambda_j \geq 0, j \neq k$$

这也就是说我们可以找到一个 c 使得 \mathbf{x}_i 中一个向量的加权组合系数是 0。这就与假设矛盾，因为假设是要求 α_i 全部不是 0。□

定理 1.2.2. 投影定理是我们在后面超平面会经常用的定理，其叙述如下：设 $C \subseteq \mathbb{R}^n$ 是非空闭凸集， $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$ ，则存在唯一向量 $\mathbf{x}^* \in C$ ，使得 $\|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|$ 最小化，此时 \mathbf{x}^* 就是 \mathbf{z} 在 C 上的投影，也就是 $\|\mathbf{x}^* - \mathbf{z}\| = \inf_{\mathbf{x} \in C} \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|$ ，此外还当且仅当满足

$$(\mathbf{z} - \mathbf{x}^*)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \leq 0 \quad \forall \mathbf{x} \in C$$

你可以理解为，集合外一点 \mathbf{z} 和集合里一点 \mathbf{x} ，则向量 $\mathbf{x}^* \mathbf{x}$ 和 $\mathbf{x}^* \mathbf{z}$ 的两个线段，夹角必然是直角或者钝角（内积是非正），因为如果夹角是锐角那 $\mathbf{x}^* \mathbf{z}$ 这个线段为半径的圆，内部有 $\mathbf{x}^* \mathbf{x}$ 线段上的点，从而在圆内，导致该半径不是最小，也就不是下确界。这个定理的证明只要知道是

$$f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|^2, \nabla f(\mathbf{x}^*)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \geq 0 \quad \forall \mathbf{x} \in C$$

利用可微分凸函数的一阶必要条件就行。

我们结合该投影定理，以及超平面定义（就是 $\mathbf{a}^T \mathbf{x} + b = 0$ ）得到支撑超平面定理是：

定理 1.2.3. 假设 $C \subseteq \mathbb{R}^n$ 是非空的凸集，向量 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ ，则如果 $\mathbf{y} \notin \text{ri}(C)$ ，则存在经过 \mathbf{y} 的超平面使得 C 属于该超平面的一个闭半空间。也就是

$$\exists \mathbf{a} \neq \mathbf{0}, \mathbf{a}^T \mathbf{y} \leq \mathbf{a}^T \mathbf{x}, \forall \mathbf{x} \in C$$

我们的思想就是结合投影定理，利用小于 0 的关系，它就是支撑的超平面。类比还有分离超平面定理

定理 1.2.4. 假设 C_1, C_2 是 \mathbb{R}^n 中的非空凸集，如果 $C_1 \cap C_2$ 是不相交的，则存在一个超平面把 C_1, C_2 分离。特别的如果 $C_2 - C_1$ 是闭集，那么存在一个超平面严格分离两个集合。

证明. $C_2 - C_1 = \{\mathbf{x} | \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 \in C_1, \mathbf{x}_2 \in C_2\}$ ，因为 $C_1 \cap C_2 = \emptyset$ ，所以不妨让 $\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 \geq \mathbf{0}$

否则就交换。用这个结合支撑超平面就知道

$$\exists \mathbf{a} \neq 0, \text{ s.t. } 0 = \mathbf{a}^T \mathbf{0} \leq \mathbf{a}^T (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \Rightarrow \mathbf{a}^T \mathbf{x}_2 \geq \mathbf{a}^T \mathbf{x}_1$$

于是 \mathbf{a} 分离 C_1, C_2 。而当 $C_2 - C_1$ 是闭集, 不妨 $C_2 - C_1$ 中范数最小的向量 $\mathbf{x}_2^* - \mathbf{x}_1^*$, 则

$$\mathbf{a} = \frac{\mathbf{x}_2^* - \mathbf{x}_1^*}{2}, \mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}_2^* + \mathbf{x}_1^*}{2}, b = \mathbf{a}^T \mathbf{x}^*$$

因为 $C_1 \cap C_2 = \emptyset$, 而当 $C_2 - C_1$ 是闭集时满足了 $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$ 。可以得到因为取的是范数最小的, \mathbf{x}_1^* 是 \mathbf{x}_2^* 在 $\text{cl}(C_1)$ 上的投影, \mathbf{x}_2^* 是 \mathbf{x}_1^* 在 $\text{cl}(C_2)$ 上的投影, 所以

$$(\mathbf{x}_2^* - \mathbf{x}_1^*)^T (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1^*) \leq 0, \quad (\mathbf{x}_1^* - \mathbf{x}_2^*)^T (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_2^*) \leq 0$$

注意到 $\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_1^* = \mathbf{a}$, 于是有

$$\mathbf{a}^T \mathbf{x}_1 \leq \mathbf{a}^T \mathbf{x}_1^* = \mathbf{a}^T \mathbf{x}^* + \mathbf{a}^T (\mathbf{x}_1^* - \mathbf{x}^*) = b - \|\mathbf{a}\|^2 < b$$

同理 $\mathbf{x}_2^* - \mathbf{x}^* = \mathbf{a}$, 类似也有

$$\mathbf{a}^T \mathbf{x}_2 \geq \mathbf{a}^T \mathbf{x}_2^* = \mathbf{a}^T \mathbf{x}^* + \mathbf{a}^T (\mathbf{x}_2^* - \mathbf{x}^*) = b + \|\mathbf{a}\|^2 > b$$

因此我们发现 $\mathbf{a}^T \mathbf{x}_1 < b < \mathbf{a}^T \mathbf{x}_2$, 说明 $\mathbf{a}^T \mathbf{x} = b$ 是严格分离 C_1, C_2 的超平面。□

实际上, 只要满足

$$\sup_{\mathbf{x}_1 \in C_1} \mathbf{a}^T \mathbf{x}_1 \leq \inf_{\mathbf{x}_2 \in C_2} \mathbf{a}^T \mathbf{x}_2$$

或者严格分离成立, 就是正常分离。下面看一些复习题

习题 1.2.1. 设 C_1, C_2 是非空凸集, C_2 是锥, 如存在一个超平面把 C_1, C_2 严格分离, 那么存在过原点的超平面, 其一闭半空间包含 C_2 且与 C_1 不交。

证明. 假设 $\mathbf{a}^T \mathbf{x}_2 < \beta < \mathbf{a}^T \mathbf{x}_1$, 现在取

$$b = \sup_{\mathbf{x}_2 \in C_2} \mathbf{a}^T \mathbf{x}_2$$

考虑闭半空间 $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{a}^T \mathbf{x} \leq b\}$, 则其包含了 C_2 。结合上确界的定义, $\beta \geq b$ 。而 $\beta < \mathbf{a}^T \mathbf{x}_1$, 说明

$$b < \mathbf{a}^T \mathbf{x}_1$$

这说明该超平面与 C_1 不相交。最后, 注意到 C_2 是一个锥, 所以 $\forall \gamma > 0, \gamma \mathbf{a}^T \mathbf{x} \leq b$, 这说明 b 必须是 0, 所以该超平面还经过原点。□

本题还可以这么说明, 就是把严格分离改为正常分离, 然后一个闭半空间包含另一个不交, 可以改为正常分离。因为正常分离要求就是一个上确界小于另一个下确界, 一块包含那上确界小于等于, 另一块因为上面严格不等号就小于另一个下确界, 也是正常分离。

习题 1.2.2. 设 $C \subseteq \mathbb{R}^{n+1}$ 是非空闭凸集, 且不包含直线, 求证, C 等于: 所有包含其对应于非垂直超平面的闭半空间的交集。

证明. 设题目要我们证明的是 $C = H$, 也就是把右边说的集合设为 H 。首先, 因为每个超平面都包含 C , 所以全部的交也包含 C , 这就是 $C \subseteq H$ 。

反过来, 任意取 $(x, w) \notin C$, 则存在一个非垂直的超平面把该点和 C 严格分离, 因为超平面的闭半空间包含了 C , 但不包含 (x, w) , 结合 H 的定义, $(x, w) \notin H$ 。

这个是因为例如我们假设 (x^*, w^*) 是该 (x, w) 在 C 上的投影, 注意到是闭集, 故不在 C 内的点是满足 $\text{dist}(x, C) > 0$ 是严格正的。因此我们可以取投影点和该外点的中点, 故存在超平面严格把该中点和 C 分离, 这时 (x, w) 就不在该超平面的闭半空间内, 按照定义 (要求是全部超平面闭半空间之交) 该点不在这个超平面的闭半空间内, 故不在 H 中

也就是说如不属于 C 也就不属于 H , 所以 $H \subseteq C$, 从而 $C = H$ □

1.3 凸函数

我们都知道凸函数的定义是

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$$

仿射函数、范数、以及二次函数 (当矩阵正定时) 都是。凸函数的水平集

$$S_\gamma = \{x \mid f(x) \leq \gamma\}$$

这里我们都假设 $f: C \rightarrow \mathbb{R}$ 。凸函数水平集都是凸的但反之不然。

我们希望把实值函数的值域加入正负无穷, 扩展实值函数里, 因为涉及无穷大小的比较所以我们无法直接使用原来定义来比较, 这时我们需要引入上镜图。

定理 1.3.1. 有了上镜图的定义, 我们判断一个函数的凸性, 当且仅当看上镜图的凸性, 上镜图定义为

$$\text{epi}(f) = \{(x, w) \mid x \in C, w \in \mathbb{R}, f(x) \leq w\}$$

一个实值函数是凸函数, 当且仅当其上镜图是凸集。这个证明非常简单, 只要按照凸函数和上镜图的定义带入就行。

在扩展的实值函数中, 也就是 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow [-\infty, \infty]$, 如果 f 恒为 $+\infty$ 上镜图空, f 在一点 $-\infty$ 该点所在值域轴上镜图是完整一条直线。一个扩展实值函数的上镜图非空也不含完整直线就称为正常的。

定理 1.3.2. 除了凸函数还有闭函数的定义, 如果一个函数的上镜图是闭集就称其为闭函数。另外, 我们还需要定义下半连续

$$f(x) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} f(x_n)$$

一个函数是闭函数, 当且仅当其下半连续。更一般的还当且仅当水平集为闭集。这里要注意水平集是凸集不一定函数是凸函数, 但水平集是闭集是函数是闭函数。

凸函数有很多保凸的运算。这些包括

1. 线性变换: $g(\mathbf{x}) = f(\mathbf{Ax})$, \mathbf{A} 是 $n \times n$ 矩阵, 对凸性和闭性都封闭
2. 非负组合: $\alpha f + \beta g, \alpha, \beta \geq 0$, 对凸性和闭性都封闭
3. 一族函数取上确界: $f(\mathbf{x}) = \sup_{\lambda \in \Lambda} f_{\lambda}(\mathbf{x})$, 对凸性和闭性都封闭
4. 部分极小化: $F(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ 中 $f(\mathbf{x}) = \inf_{\mathbf{z}} F(\mathbf{x}, \mathbf{z})$

对于可微分的凸函数, 可以通过下列方式判断

1. 一阶可微性: f 是凸函数当且仅当 $f(\mathbf{z}) - f(\mathbf{x}) \geq \nabla f(\mathbf{x})^T(\mathbf{z} - \mathbf{x}), \forall \mathbf{x}, \mathbf{z} \in C$
2. 二阶可微性: $\nabla^2 f(\mathbf{x})$ 是半正定 (严格正定) 矩阵, 则 f 是凸 (严格凸) 函数。如果 f 是凸函数且 C 是开集则 $\nabla^2 f(\mathbf{x})$ 半正定。

证明. 这里我们证明一下, 假设 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in C$ 而 $\mathbf{z} = \alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y}$, 则

$$f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{z}) \geq \nabla f(\mathbf{z})^T(\mathbf{x} - \mathbf{z}) \quad f(\mathbf{y}) - f(\mathbf{z}) \geq \nabla f(\mathbf{z})^T(\mathbf{y} - \mathbf{z})$$

于是

$$\alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{z}) + \nabla f(\mathbf{z})^T(\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y} - \mathbf{z}) = f(\mathbf{z})$$

说明 f 是凸函数。反过来, 当 f 是凸函数时取函数 g 满足

$$g(\alpha) = \frac{f(\mathbf{x} + \alpha(\mathbf{z} - \mathbf{x})) - f(\mathbf{x})}{\alpha}$$

取 $\mathbf{x} + \alpha_1 \mathbf{h} = \mathbf{y}_1, \mathbf{x} + \alpha_2 \mathbf{h} = \mathbf{y}_2$, 其中 $\mathbf{z} - \mathbf{x} = \mathbf{h}$, 假设 $0 < \alpha_1 < \alpha_2 \leq 1$, 则也就是说我们取了

$$\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \mathbf{z}$$

四个点。我们可以得到

$$f(\mathbf{y}_1) \leq \frac{\alpha_1}{\alpha_2} f(\mathbf{y}_2) + \left(1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right) f(\mathbf{x})$$

也就是

$$\frac{f(\mathbf{y}_1) - f(\mathbf{x})}{\alpha_1} \leq \frac{f(\mathbf{y}_2) - f(\mathbf{x})}{\alpha_2}$$

从这里我们不难看出

$$\frac{f(\mathbf{x} + \alpha_1 \mathbf{h}) - f(\mathbf{x})}{\alpha_1} \leq \frac{f(\mathbf{x} + \alpha_2 \mathbf{h}) - f(\mathbf{x})}{\alpha_2}$$

这说明 $g(\alpha)$ 关于 α 在 $(0, 1]$ 内单调递增。从而

$$\nabla f(\mathbf{x})^T(\mathbf{z} - \mathbf{x}) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} g(\alpha) \leq g(1) = f(\mathbf{z}) - f(\mathbf{x}) \quad \square$$

习题 1.3.1. 定义 $F: \mathbb{R}^{m+n} \rightarrow [-\infty, \infty]$ 是闭凸函数, 求证 $f(\mathbf{x}) = \inf_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m} F(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ 也是凸函数

证明. 这是凸函数的局部极小化的保凸运算, 如果 f 不是正常的, 上镜图是空的, 那 $f(\mathbf{x}) \equiv \infty$ 显然。下面考虑上镜图非空的情况。

取上镜图两个点 (\mathbf{x}, w) 和 (\mathbf{y}, v) 。且结合下确界定义满足存在序列 $\mathbf{z}_k, \mathbf{y}_k$ 使得

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{z}_k) \rightarrow f(\mathbf{x}), \quad F(\mathbf{y}, \mathbf{y}_k) \rightarrow f(\mathbf{y})$$

结合下确界, 也就是 f 的定义, 得到

$$f(\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}) \leq F(\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}, \alpha \mathbf{z}_k + (1 - \alpha) \mathbf{y}_k)$$

又因为 F 的凸性

$$F(\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}, \alpha \mathbf{z}_k + (1 - \alpha) \mathbf{y}_k) \leq \alpha F(\mathbf{x}, \mathbf{z}_k) + (1 - \alpha) F(\mathbf{y}, \mathbf{y}_k)$$

当 $k \rightarrow \infty$ 时右边变为

$$f(\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y}) \leq \alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha) f(\mathbf{y}) \leq \alpha w + (1 - \alpha) v$$

因此 (\mathbf{x}, w) 和 (\mathbf{y}, v) 的连线 $\alpha(\mathbf{x}, w) + (1 - \alpha)(\mathbf{y}, v) \in \text{epi}(f)$, 所以 $\text{epi}(f)$ 是凸集, 所以 f 是凸函数 \square

习题 1.3.2. 设 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 是凸函数, 如果 $x_1 < x_2 < x_3$, 则

$$\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \leq \frac{f(x_3) - f(x_1)}{x_3 - x_1} \leq \frac{f(x_3) - f(x_2)}{x_3 - x_2}$$

证明. 我们假设

$$g(x) = f(x_1) + \frac{f(x_3) - f(x_1)}{x_3 - x_1}(x - x_1) = f(x_3) + \frac{f(x_3) - f(x_1)}{x_3 - x_1}(x - x_3)$$

注意到

$$g(x_2) = \left(1 - \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1}\right) f(x_1) + \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} f(x_3) = \frac{x_3 - x_2}{x_3 - x_1} f(x_1) + \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} f(x_3)$$

我们结合

$$x_2 = \frac{x_3 - x_2}{x_3 - x_1} x_1 + \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} x_3$$

结合 f 是凸函数也就是

$$f(x_2) \leq \frac{x_3 - x_2}{x_3 - x_1} f(x_1) + \frac{x_2 - x_1}{x_3 - x_1} f(x_3) = g(x_2)$$

因此 $-f(x_2) \geq -g(x_2)$, 从而

$$\frac{f(x_3) - g(x_2)}{x_3 - x_2} \leq \frac{f(x_3) - f(x_2)}{x_3 - x_2}, \quad \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \leq \frac{g(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$$

把 $g(x_2) = f(x_3) + \frac{f(x_3) - f(x_1)}{x_3 - x_1}(x_2 - x_3)$ 带入左边, $g(x_2) = f(x_1) + \frac{f(x_3) - f(x_1)}{x_3 - x_1}(x_2 - x_1)$ 带

入右边, 则得到

$$\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \leq \frac{f(x_3) - f(x_1)}{x_3 - x_1} \leq \frac{f(x_3) - f(x_2)}{x_3 - x_2} \quad \square$$

习题 1.3.3. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 是可微凸函数, 求证, f 在非空凸集上是凸函数当且仅当满足 $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in C$

$$(\nabla f(\mathbf{y}) - \nabla f(\mathbf{x}))^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \geq 0$$

证明. 结合凸函数的一阶充要条件 $f(\mathbf{z}) \geq f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T(\mathbf{z} - \mathbf{x})$ 也就是

$$\nabla f(\mathbf{x})^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \leq f(\mathbf{y}) - f(\mathbf{x})$$

我们将 \mathbf{x}, \mathbf{y} 交换, 就是 \mathbf{y} 换成 \mathbf{x} , \mathbf{x} 换成 \mathbf{y} , 同样得到

$$\nabla f(\mathbf{y})^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \leq f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})$$

因此有

$$\nabla f(\mathbf{x})^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \leq f(\mathbf{y}) - f(\mathbf{x}) \leq \nabla f(\mathbf{y})^T(\mathbf{y} - \mathbf{x})$$

最右边减去最左边就有

$$(\nabla f(\mathbf{y}) - \nabla f(\mathbf{x}))^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \geq 0$$

反过来如果满足 $(\nabla f(\mathbf{y}) - \nabla f(\mathbf{x}))^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \geq 0$ 我们构造函数

$$g(t) = f(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x})), \quad g'(t) = \nabla f(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x}))^T(\mathbf{y} - \mathbf{x})$$

由于 \mathbf{x}, \mathbf{y} 有任意性, 则 $(\nabla f(\mathbf{y}) - \nabla f(\mathbf{x}))^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \geq 0$ 等价于

$$g'(t) - g'(0) \geq 0, \forall t \geq 0$$

从而有

$$f(\mathbf{y}) - f(\mathbf{x}) = g(1) - g(0) = \int_0^1 g'(t) dt \geq g'(0) = \nabla f(\mathbf{x})^T(\mathbf{y} - \mathbf{x})$$

因此满足凸函数的一阶充要条件, 故 f 是凸函数 □

习题 1.3.4. 利用凸函数的二阶条件, 判断

$$f(\mathbf{x}) = \log(\exp x_1 + \cdots + \exp x_n)$$

的凸性

证明. 我们假设 $S = \sum_{i=1}^n \exp(x_i)$ 则

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{\exp x_i}{S}$$

接着进一步求偏导数

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\exp x_i}{S} \chi_{i=j} - \frac{\exp x_i \cdot \exp x_j}{S^2}$$

取

$$\mathbf{z} = \left[\frac{\exp x_1}{S}, \dots, \frac{\exp x_n}{S} \right]$$

则二阶 Hessian 矩阵是

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \text{diag}(\mathbf{z}) - \mathbf{z}\mathbf{z}^T$$

我们假设

$$\mathbf{z} = [z_1, z_2, \dots, z_n]$$

则满足 $\sum_{i=1}^n z_i = 1$, 注意到

$$\mathbf{y}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{y} = \sum_{i=1}^n z_i y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n z_i y_i \right)^2$$

结合 Cauchy-Schwarz 不等式也就是

$$\left(\sum_{i=1}^n z_i y_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^n z_i \right) \geq \left(\sum_{i=1}^n \sqrt{z_i} \sqrt{z_i y_i^2} \right)^2 = \left(\sum_{i=1}^n z_i y_i \right)^2$$

说明 $\mathbf{y}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{y} \geq 0, \forall \mathbf{y}$. 所以说明二阶 Hessian 矩阵半正定, 因此 $f(\mathbf{x})$ 是凸函数 □

习题 1.3.5. 考虑函数

$$F(x, z) = \begin{cases} e^{-\sqrt{xz}} & x \geq 0, z \geq 0 \\ +\infty & \text{else} \end{cases}$$

证明 F 是闭凸函数

证明. 对于闭性可以由下半连续证得, 我们只考虑在 $x = 0, z = 0$ 部分的边界上, 可以发现确实当 $(x_n, z_n) \rightarrow (x, z)$ 有

$$F(x, z) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} F(x_n, z_n)$$

在两个分段内注意到 F 是连续的所以成立, 在边界上 \liminf 则取的是 $e^{-\sqrt{xz}}$ 对应的部分, 所以当然成立. 因此 F 下半连续, 故闭性得证.

我们考虑 F 的上镜图 $\text{epi}(F)$, 我们只看 $x, z \geq 0$ 的部分, 因为余下部分 $F = +\infty$ 的时候这部分的上镜图空. 假设

$$(x_1, z_1, w_1), (x_2, z_2, w_2) \in \text{epi}(F)$$

这也就是

$$w_1 \geq e^{-\sqrt{x_1 z_1}}, w_2 \geq e^{-\sqrt{x_2 z_2}}$$

从而 $\alpha, \beta \geq 0, \alpha + \beta = 1$ 时有

$$\alpha w_1 + \beta w_2 \geq \alpha e^{-\sqrt{x_1 z_1}} + \beta e^{-\sqrt{x_2 z_2}} \geq w_1^\alpha w_2^\beta = e^{-\alpha \sqrt{x_1 z_1} - \beta \sqrt{x_2 z_2}}$$

这里用到的其实是 Young 不等式也就是 $ab \leq \frac{a^p}{p} + \frac{b^q}{q}, \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$, 从而也就是 $\alpha = \frac{1}{p}, \beta = \frac{1}{q}$ 也

就有

$$\alpha a + \beta b \geq a^\alpha b^\beta$$

另一方面在 $\alpha, \beta, x_i, z_i \geq 0$ 的时候因为 $\alpha^2 x_1 z_1 + \beta^2 x_2 z_2 \leq (\alpha x_1 + \beta z_1)(\alpha x_2 + \beta z_2)$ 因此

$$\alpha w_1 + \beta w_2 \geq e^{-\alpha\sqrt{x_1 z_1} - \beta\sqrt{x_2 z_2}} \geq e^{-\sqrt{(\alpha x_1 + \beta z_1)(\alpha x_2 + \beta z_2)}} = F(\alpha x_1 + \beta z_1, \alpha x_2 + \beta z_2)$$

由此可得

$$(\alpha x_1 + \beta z_1, \alpha x_2 + \beta z_2, \alpha w_1 + \beta w_2) \in \text{epi}(F)$$

说明 $\text{epi}(F)$ 也就是 F 的上镜图是凸集, 所以 F 的凸性得证。所以 F 是闭凸函数。 \square

1.4 回收锥

我们定义回收方向 d 是满足条件

$$\forall x \in C, \forall \alpha \geq 0, x + \alpha d \in C$$

的方向, 所有 C 中回收方向的集合构成的是回收锥 R_C 。回收锥是包含原点的凸锥。

定理 1.4.1. 回收锥定理是: 如果 C 是闭凸集, 则回收锥也是闭凸集, $d \in R_C$ 当且仅当

$$\exists x \in C, \text{s.t. } \forall \alpha \geq 0, x + \alpha d \in C$$

注意回收锥的定义是 $\forall x \in C$, 是对全部 C 中的向量 x , 而定理告诉我们如果是闭集, 只要存在一个满足这样的条件就可以。

证明. 我们只反过来推, 正着显然。假设

$$\exists x \in C, \text{s.t. } \forall \alpha \geq 0, x + \alpha d \in C$$

现在任意取一 $y \in C$ 只要证明 $y + \alpha d \in C$ 就行。取 $z_k = x + kd$ 。如果 y 是 $\{z_k\}$ 中的一个元素, 那么得证。如果不是, 则我们考虑定义

$$d_k = \frac{z_k - y}{\|z_k - y\|} \|d\|$$

结合 $z_k = x + kd$ 得到

$$\frac{d_k}{\|d\|} = \frac{\|z_k - x\|}{\|z_k - y\|} \frac{d}{\|d\|} + \frac{x - y}{\|z_k - y\|}$$

显然, z_k 是无界的, 所以我们得到上面的式子右边第一项标量趋于 1, 第二项标量趋于 0, 因此可得 $d_k \rightarrow d$ 。假设有充分大的 k 使得

$$\|d\| \leq \|z_k - y\|$$

也就是说 $y + d_k$ 是在 y 和 z_k 的线段上。由于 $y + d_k \rightarrow y + d$, C 是闭集, 所以 $y + d \in C$ 。由于 y 的任意性, d 是一个回收方向。所以 $d \in R_C$, 得证。 \square

需要注意：当该定理成立时， C 必须是闭集。如果 C 不是闭集，那考虑 $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+ \cap \{(0,0)\}$ ，注意到 $(1,0)$ 和 $(0,1)$ 都是除了 $(0,0)$ 之外的回收方向，但这个第一象限除掉坐标轴补上原点后，在原点因为把坐标轴的边去掉了，所以不是原点的回收方向，当然也不可以在回收锥里。

定理 1.4.2. 此外，对于非空的闭凸集，回收锥还有如下性质

1. 回收锥包含非零方向当且仅当 C 是无界的
2. $R_C = R_{\text{ri}(C)}$
3. 如果 C_i 是闭凸集，且 $\bigcap_{i \in I} C_i \neq \emptyset$ ，则 $R_{\bigcap_{i \in I} C_i} = \bigcap_{i \in I} R_{C_i}$

证明. 按照回收锥定义，包含非零方向， $\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}$ ，只要 α 无穷大那就无界。反过来，如果无界，那我们取一组无界的序列 $\{\mathbf{z}_k\}$ ，对任意的 α 以及 $\mathbf{x} \in C$ 都满足

$$\exists k, \text{s.t. } \|\mathbf{z}_k - \mathbf{x}\| \geq \alpha$$

定义序列

$$\mathbf{d}_k = \frac{\mathbf{z}_k - \mathbf{x}}{\|\mathbf{z}_k - \mathbf{x}\|}$$

假设 \mathbf{d}_k 收敛到 \mathbf{d} ，则因为 $\|\mathbf{z}_k - \mathbf{x}\| \geq \alpha$ ，说明 $\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}_k$ 是在 \mathbf{x} 和 \mathbf{z}_k 之间。

因为 C 是凸集，所以 $\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}_k \in C$ 。而因为 C 是闭集，所以 $\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}_k \rightarrow \mathbf{x} + \alpha \mathbf{d} \in C$ ，从而我们找到了存在一个 \mathbf{x} 满足 $\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d} \in C$ ，故由上面的回收锥定理得到 \mathbf{d} 是一个回收方向。

下面证明 $R_C = R_{\text{ri}(C)}$ 。 $\text{ri}(C) \subseteq C$ 故正着推显然，反过来如果 $\mathbf{d} \in R_C$ 则 $\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d} \in C$ ，由相对内部的线段原理其实 $\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d} \in \text{ri}(C)$ 。所以其实 $\mathbf{d} \in R_{\text{ri}(C)}$ \square

同样注意：这里必须是闭集，否则不成立，如考虑

$$\{[0,1) \times [0,\infty)\} \cup \{(1,0)\}$$

因为在 x 轴维度上有界，故不可能回收方向在 x 轴里有分量。而即使是 $(0,1)$ 沿着 y 轴垂直的方向，在 $(1,0)$ 这一点向着 y 轴延伸不在集合里面，所以 $(1,0)$ 也不是回收方向，说明该区域没有非零的回收方向，但这个区是无界的。主要因为没有满足闭集条件。

定理 1.4.3. 非空闭凸集的回收锥，线性空间记为 L_C ，定义

$$L_C = R_C \cap R_{-C}$$

也可以把刚才我们在 R_C 中说的 $\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}, \alpha \geq 0$ 中的 $\alpha \geq 0$ 改为 $\alpha \in \mathbb{R}$ ，也就是要求 \mathbf{d} 和其相反的方向 $-\mathbf{d}$ 都要是回收方向。这里仍如果是闭凸集，则满足

1. L_C 是 \mathbb{R}^n 的线性子空间
2. $L_C = L_{\text{ri}(C)}$
3. $\bigcap_{i \in I} C_i \neq \emptyset$ ，则 $L_{\bigcap_{i \in I} C_i} = \bigcap_{i \in I} L_{C_i}$

下面我们举一个例子

定理 1.4.4. 假设集合

$$\{\mathbf{x} \mid \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c \leq 0\}$$

如果 \mathbf{A} 是半正定矩阵, \mathbf{b} 是非零向量, 求该集合的回收锥

证明. 如果 \mathbf{d} 是回收方向, 则满足

$$(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})^T \mathbf{A} (\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) + \mathbf{b}^T (\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) + c \leq 0 \quad \forall \alpha \geq 0, \mathbf{x} \in C$$

展开我们有

$$\alpha^2 \mathbf{d}^T \mathbf{A} \mathbf{d} + \alpha (\mathbf{b} + 2\mathbf{A} \mathbf{x})^T \mathbf{d} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + c \leq 0, \quad \forall \alpha \geq 0$$

我们把上面看做关于 α 的二次函数, 因为对 $\alpha \geq 0$ 的任意性, 二次函数的开口向下, 截距非正才可以满足 α 非负时恒成立。故

$$\mathbf{d}^T \mathbf{A} \mathbf{d} \leq 0$$

又因为 \mathbf{A} 是半正定矩阵, 故

$$\mathbf{d}^T \mathbf{A} \mathbf{d} \geq 0$$

所以 $\mathbf{d}^T \mathbf{A} \mathbf{d} = 0$ 才可以。进一步可以假设

$$\mathbf{A} = \mathbf{C}^T \mathbf{C}, \Rightarrow (\mathbf{C} \mathbf{d})^T \mathbf{C} \mathbf{d} = 0 \Rightarrow \mathbf{C} \mathbf{d} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{0}$$

化简也就是

$$\alpha \mathbf{b}^T \mathbf{d} + \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c \leq 0$$

此时因为 α 的任意性, 该一次函数必须斜率非正, 也就是 $\mathbf{b}^T \mathbf{d} \leq 0$ 才可以。综上得到

$$R_c = \{\mathbf{d} \mid \mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{0}, \mathbf{b}^T \mathbf{d} \leq 0\}, L_c = \{\mathbf{d} \mid \mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{0}, \mathbf{b}^T \mathbf{d} = 0\} \quad \square$$

定理 1.4.5. 凸集回收线性空间分解, 我们需要了解一个非空闭凸集, 如果 S 是 L_C 的任意子空间, 则

$$C = S + (C \cap S^\perp)$$

证明. 主要基于 $\mathbb{R}^n = S + S^\perp$, 如果 $\mathbf{x} \in C$, 则 $\mathbf{x} = \mathbf{d} + \mathbf{z}, \mathbf{d} \in S, \mathbf{z} \in S^\perp$ 。首先 $\mathbf{d} \in S \subseteq L_C$, 而 $-\mathbf{d} \in L_C$, 结合 L_C 回收锥的方向定义, $\mathbf{z} = \mathbf{x} - \mathbf{d} \in C$, 所以 $\mathbf{z} \in C \cap S^\perp$, 故 $C \subseteq S + (C \cap S^\perp)$ 。反过来, 如果 $\mathbf{x} \in S + (C \cap S^\perp)$, 则 $\mathbf{x} = \mathbf{d} + \mathbf{z}$, 因为 $\mathbf{d} \in S \subseteq L_C$ 是回收方向, $\mathbf{z} \in C$, 所以 $\mathbf{x} = \mathbf{d} + \mathbf{z} \in C$, 故反过来也成立, 得证。 \square

以上我们都讨论的是凸集合的回收锥和回收方向问题, 下面我们看一看凸函数的回收锥问题。凸函数的回收方向, 我们主要仍然从上图看。因为凸函数的上图是凸集, 其回收锥刻画的是函数的变化特性。沿着回收锥的水平方向函数值不单调递增

定理 1.4.6. 对于一个闭凸函数, $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 其所有的非空水平集

$$S_\gamma = \{\mathbf{x} \mid f(\mathbf{x}) \leq \gamma\}$$

都有相同的回收锥。我们记为 R_f ，且

$$R_f = \{\mathbf{d} | (\mathbf{d}, 0) \in R_{\text{epi}(f)}\}$$

这里 $R_{\text{epi}(f)}$ 就是上镜图的回收锥。

证明. 定义集合

$$V = \{(\mathbf{x}, \gamma) | f(\mathbf{x}) \leq \gamma\}$$

则 $V = \text{epi}(f) \cap \{(\mathbf{x}, \gamma) | \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\}$ ，结合回收锥对交的性质，我们有

$$R_V = R_{\text{epi}(f) \cap \{(\mathbf{x}, \gamma) | \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\}} = R_{\text{epi}(f)} \cap R_{\{(\mathbf{x}, \gamma) | \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\}}$$

这里面，我们可以得到 $R_{\{(\mathbf{x}, \gamma) | \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\}} = \{(\mathbf{d}, 0) | \mathbf{d} \in \mathbb{R}^n\}$ ，和上镜图交集我们得到

$$R_V = \{(\mathbf{d}, 0) | \mathbf{d} \in \text{epi}(f)\}$$

而 V 在 \mathbb{R}^n 上的投影就是 S_γ ，所以就有

$$R_{S_\gamma} = \{\mathbf{d} | \mathbf{d} \in \text{epi}(f)\}$$

所以水平集的回收锥和 γ 取值无关且都是同一个 □

需要注意必须是闭函数，否则考虑二元函数

$$f(x, y) = \begin{cases} -x & x > 0, y \geq 0 \\ y & x = 0, y \geq 0 \\ \infty & \text{else} \end{cases}$$

- 如果 $\gamma < 0$ 则 $S_\gamma = \{(x, y) | x \geq -\gamma, y \geq 0\}$, $(0, 1) \in R_{S_\gamma}$
- 如果 $\gamma = 0$ 则 $S_0 = \{(x, y) | x \geq -0, y \geq 0\} \cup \{(0, 0)\}$, $(0, 1) \notin S_0$

这时和 γ 的取值有关，主要在于不是闭函数，那么“交集的回收锥等于回收锥的交集”不成立。从上面我们定义闭凸函数 f 的非空水平集的回收锥，就是 f 的回收锥。凸函数的函数值和回收锥的关系是

1. 函数值沿着回收的方向是非增的
2. 函数值沿着非回收方向最终是单增的
3. 如果在有效定义域内，函数沿着一个方向的值增加，那么该方向就是 f 的回收方向。

类比回收锥 R_f ，我们知道沿回收锥方向函数非递增，我们还有回收线性空间 L_f ，如果 $\mathbf{d} \in L_f$ 则我们会发现有如下的性质：

1. \mathbf{d} 和 $-\mathbf{d}$ 是函数 f 的回收方向
2. 此时，沿着回收方向非递增，也非递减，因为负的方向也是回收的。故 $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})$

此时沿着这个方向是一个常数，所以，还可以把 L_f 称为 f 的常值空间。

此外，还有回收函数的定义，那就是：上图的回收锥 $R_{\text{epi}(f)}$ 对应的正常闭凸函数（正常是非恒正无穷且恒非负无穷），记为 $r_f(\mathbf{d})$ 满足

$$\text{epi}(r_f(\mathbf{d})) = R_{\text{epi}(f)}$$

这时我们有关系

定理 1.4.7. $R_f = \{\mathbf{d} | r_f(\mathbf{d}) \leq 0\}$, $L_f = \{\mathbf{d} | r_f(\mathbf{d}) = r_f(-\mathbf{d}) = 0\}$ 。此外，关于回收函数的表达， $\forall \mathbf{x} \in \text{dom}(f), \mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ 有

$$r_f(\mathbf{d}) = \sup_{\alpha > 0} \frac{f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) - f(\mathbf{x})}{\alpha} = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) - f(\mathbf{x})}{\alpha}$$

乍一看我们发现这不类似我们常见的多元函数的方向导数的表达式吗？但这把分母 α 从 0 改为无穷了。

最后给一些题目

习题 1.4.1. 如果 C 是非空凸集，求证： $R_C \subseteq R_{\text{cl}(C)}$, $\text{cl}(R_C) \subseteq R_{\text{cl}(C)}$

证明. $C \subseteq \text{cl}(C)$ ，所以结合回收锥定义第一个 $R_C \subseteq R_{\text{cl}(C)}$ 显然。

两边取闭包 $\text{cl}(R_C) \subseteq \text{cl}(R_{\text{cl}(C)})$ ，因为闭凸集的回收锥也是闭凸集，所以对闭集 $\text{cl}(C)$ 而言，也就是对右边， $\text{cl}(C)$ 的回收锥是闭集，也就是 $R_{\text{cl}(C)} = \text{cl}(R_{\text{cl}(C)})$ ，因此 $\text{cl}(R_C) \subseteq R_{\text{cl}(C)}$ ，得证。□

习题 1.4.2. 假设 C 是非空凸集，求证： $\mathbf{y} \in R_{\text{ri}(C)}$ 当且仅当存在 $\mathbf{x} \in \text{ri}(C)$ 使 $\forall \alpha > 0, \mathbf{x} + \alpha \mathbf{y} \in \text{ri}(C)$

证明. 不同于回收锥的定理，我们此时不需要 C 是闭集，这时在相对内部是满足类似其回收锥定理形式的。同样正推用回收锥定义显然，我们只看反过来的情况：

前一部分和原 PPT 的过程基本保持一致，我们重述一下。我们假设 $\exists \mathbf{x} \in \text{ri}(C)$ ，使得 $\forall \alpha \geq 0, \mathbf{x} + \alpha \mathbf{y} \in \text{ri}(C)$ ，现在取 $\forall \bar{\mathbf{x}} \in \text{ri}(C)$ ，我们令 $\mathbf{z}_k = \mathbf{x} + k\mathbf{y}$ ，结合定义我们就有 $\mathbf{z}_k \in \text{ri}(C)$ ，我们取

$$\mathbf{y}_k = \frac{\mathbf{z}_k - \bar{\mathbf{x}}}{\|\mathbf{z}_k - \bar{\mathbf{x}}\|} \|\mathbf{y}\|$$

那么有

$$\frac{\mathbf{y}_k}{\|\mathbf{y}\|} = \frac{\|\mathbf{z}_k - \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{z}_k - \bar{\mathbf{x}}\|} \frac{\mathbf{z}_k - \mathbf{x}}{\|\mathbf{z}_k - \mathbf{x}\|} + \frac{\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}}{\|\mathbf{z}_k - \bar{\mathbf{x}}\|} = \frac{\|\mathbf{z}_k - \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{z}_k - \bar{\mathbf{x}}\|} \frac{\mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|} + \frac{\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}}{\|\mathbf{z}_k - \bar{\mathbf{x}}\|}$$

注意到 $\{\mathbf{z}_k\}$ 是无界的序列，所以第一项的系数当 $k \rightarrow \infty$ 时趋于 1，第二项的系数在 $k \rightarrow \infty$ 时趋于 0。所以 $\mathbf{y}_k \rightarrow \mathbf{y}$ 。

对于充分大的 k 满足 $\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{y}_k$ 落在 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 \mathbf{z}_k 为端点的线段之间。因为 C 是凸集，故 $\text{ri}(C)$ 是凸集，所以 $\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{y}_k \in \text{ri}(C)$ 。

取极限，我们这时考虑 C 的闭包，极限必然在其闭包中，所以 $\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{y}_k \rightarrow \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{y} \in \text{cl}(C)$ 。

不失一般性，我们可以把 \mathbf{y} 换成 $2\alpha\mathbf{y}$ ，这个 α 具有任意性，这样 $\mathbf{z}_k = \mathbf{x} + 2\alpha k\mathbf{y}$ ，类似上面的过程，同样成立，所以得到 $\bar{\mathbf{x}} + 2\alpha\mathbf{y} \in \text{cl}(C)$, $\forall \alpha \geq 0$ 。又因为 $\bar{\mathbf{x}} \in \text{ri}(C)$ ，所以结合相对线段原理，在 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\bar{\mathbf{x}} + 2\alpha\mathbf{y}$ 上的连线，因为一个是相对内部，一个是闭包，除了端点之外，都在相对

内部之中。所以就有 $\bar{x} + \alpha y \in \text{ri}(C)$ 。结合 α 的任意性以及 $\bar{x} \in \text{ri}(C)$ 的任意性，我们就得到 y 是 $\text{ri}(C)$ 的回收方向，故 $y \in R_{\text{ri}(C)}$ ，得证。 \square

需要注意的是，前面的过程基本和原来的 PPT 上的过程完全一致，只有后面一部分，因为去掉了闭集的条件，但可以确保让其在闭包里，而相对内部和闭包的关联可以通关线段原理得到，也就是说：如果一个点在相对内部，另一个点在闭包上，那么除了闭包的那个端点外的线段（左闭右开）都是包含于相对内部之中的。

另外，如果 C 是凸集，则 $\text{ri}(C)$ 也是凸集，我们可以结合“圆的公切线”思想， $x, y \in \text{ri}(C)$ ，则 $B(x, \epsilon_2) \cap \text{aff}(C), B(y, \epsilon_2) \cap \text{aff}(C)$ 都可以包含于 C ，则因为 C 是凸集，故任意一个在 x 的圆盘上的点，和 y 的圆盘上的点，二者之间相连，都属于 C 之中。然后这样可以形成一个区域，这个区域内如取 $z = \alpha x + (1 - \alpha)y$ ，则以 z 为中心可以做出 $\min\{\epsilon_1, \epsilon_2\}$ 半径之内的圆盘，包含于 C ，所以说明 $z \in \text{ri}(C)$ ，从而 $\text{ri}(C)$ 是凸集。

1.5 极点和极锥

极点的定义是： $x \in C$ ， C 是非空凸集，如果 C 中任意不同于 x 的 y, z 以及 $\forall \alpha \in (0, 1)$ 使得

$$x = \alpha y + (1 - \alpha)z$$

均不成立，那么 x 就是 C 的极点和顶点。这里注意

1. 极点无法使用凸集的其他点的凸组和表示出来
2. 开集里没有极点。
3. 凸锥至多一个极点，如果有那就是原点
4. 凸多面体存在有限（或没有）个极点
5. 一个多面体上的凹函数，至少在某个极点取到最小值

我们自然要问了，什么时候极点存在，如何判断？

定理 1.5.1. C 是凸集，如果 C 属于超平面 H 对应的一个闭半空间，则 $C \cap H$ 的极点必然也是 C 的极点，且该极点属于 H 。反之也是成立的。

证明. 这告诉我们可以用支撑超平面去寻找极点。我们假设 x 是 $C \cap H$ 的极点，属于 H 显然，下证是 C 的极点。

如结论不真，则 x 不是 C 的极点，说明 $\exists y, z \neq x, \text{s.t. } x = \alpha y + (1 - \alpha)z, \alpha \in (0, 1)$ 成立。现假设

$$H = \{k | a^T x = a^T k, a \neq 0\}$$

C 所在闭半空间是

$$\{k | a^T x \geq a^T k, a \neq 0\}$$

因此有

$$a^T y \geq a^T x, a^T z \geq a^T x$$

又因为 $\mathbf{x} = \alpha\mathbf{y} + (1 - \alpha)\mathbf{z}$, 带入上面有

$$(1 - \alpha)\mathbf{a}^T\mathbf{y} \geq (1 - \alpha)\mathbf{a}^T\mathbf{z}, \alpha\mathbf{a}^T\mathbf{z} \geq \alpha\mathbf{a}^T\mathbf{y},$$

因为 $\alpha, (1 - \alpha)$ 都不是 0, 所以必须有 $\mathbf{a}^T\mathbf{y} = \mathbf{a}^T\mathbf{z}$, 进一步 $\mathbf{a}^T\mathbf{x} = \alpha\mathbf{a}^T\mathbf{y} + (1 - \alpha)\mathbf{a}^T\mathbf{z} = \mathbf{a}^T\mathbf{y}$, 所以 $\mathbf{a}^T\mathbf{y} = \mathbf{a}^T\mathbf{z} = \mathbf{a}^T\mathbf{x}$. 这说明

$$\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in H$$

这说明 $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in C \cap H$, 而 $\mathbf{x} = \alpha\mathbf{y} + (1 - \alpha)\mathbf{z}$, 这说明 \mathbf{x} 不是 $C \cap H$ 的极点, 因为是异于两个点的非零凸组合的表示了, 这就和 \mathbf{x} 是 $C \cap H$ 的极点矛盾了. 所以, \mathbf{x} 必须是 C 的极点. \square

上面是超平面寻找极点的方式, 下面给出直线的条件

定理 1.5.2. C 是非空闭凸集, 则 C 至少含有一个极点, 当且仅当 C 不包含直线

证明. 如果 \mathbf{x} 是 C 的极点, 但 C 包含直线, 假设 $\{\mathbf{y} + \alpha\mathbf{d}, |\alpha \in \mathbb{R}, \mathbf{d} \neq \mathbf{0}\}$ 是直线, 因为 C 是非空的闭凸子集, 所以由回收锥定理, $\mathbf{d} \in R_C$, 从而由回收锥定义, $\mathbf{x} + \alpha\mathbf{d} \in R_C \subseteq C$, 这里 $\alpha \in \mathbb{R}$, 说明 \mathbf{x} 也是在以 \mathbf{d} 为方向的直线里面, 此时 \mathbf{x} 不可能是极点, 故矛盾. 因此 \mathbf{x} 是极点时 C 不能包含直线.

反过来, 如果 C 不包含直线, 则我们从维数进行数学归纳证明. $n = 1$ 时一维空间里, 不包含直线显然存在极点. 假设对 $n = k$ 维成立, 则考虑对 $n = k + 1$ 维.

因为 C 没有直线, 因此 $\exists \mathbf{x} \in C, \mathbf{y} \notin C$, 使得连接 \mathbf{x}, \mathbf{y} 的线段上包含 C 的相对边界. 假设相对边界点为 \mathbf{z} , 因为 C 是闭集, 所以 $\mathbf{z} \in C$. 而 $\mathbf{z} \notin \text{ri}(C)$

此时考虑经过 \mathbf{z} 的超平面, 由支撑超平面定理可得存在过 \mathbf{z} 的超平面使 C 包含于该超平面的半空间内. 这个时候 $C \cap H$ 是 \mathbb{R}^k 内且不含直线. 在刚才我们假设了 k 维时, $C \cap H$ 内必然含有极点, 而结合刚才的超平面极点存在定理, 我们就得到 $C \cap H$ 的极点, 也是 C 的极点, 这样我们就完成了归纳证明. 主要思想就是用超平面的思想降一维, 就到了归纳的假设, 然后这时用超平面极点存在定理即可. \square

定理 1.5.3. 假设 \mathbb{R}^n 中多面体集合

$$P = \{\mathbf{x} | \mathbf{a}_j^T \mathbf{x} \leq b_j, 1 \leq j \leq r\}$$

则 \mathbf{v} 是 P 的极点, 当且仅当集合

$$A_v = \{\mathbf{a}_j | \mathbf{a}_j^T \mathbf{v} = b_j\}$$

含有 n 个线性无关的向量。

证明. 假设线性无关向量的个数少于 n , 则此时

$$\mathbf{a}_j^T \mathbf{x} = 0, \forall \mathbf{a}_j \in A_v$$

存在非零解 \mathbf{w} . 从而对充分小的 γ , 当 $\mathbf{v} \in P$ 时 $\mathbf{v} + \gamma\mathbf{w} \in P, \mathbf{v} - \gamma\mathbf{w} \in P$, 这和 $\mathbf{v} \in P$ 是 P 的极点矛盾. 所以线性无关向量的个数为 n .

反过来, 当 A_v 是 n 个线性无关的向量构成, 如果 v 不是多面体的极点, 则

$$\exists y, z, v = \alpha y + (1 - \alpha)z, \alpha \in (0, 1)$$

这时对 $\forall a_j \in A_v$ 得到

$$b_j = a_j^T v = \alpha a_j^T y + (1 - \alpha)a_j^T z \leq \alpha b_j + (1 - \alpha)b_j = b_k$$

所以必须有 $\alpha_j^T y = \alpha_j^T z = b_j$ 。因为结合假设 A_v 是 n 个线性无关的向量构成, 所以线性方程组

$$a_j^T w = 0, \forall a_j \in A_v$$

存在唯一解, 故 $y = z = v$, 和 y, z 不同于 v 矛盾, 所以 v 是极点。

□

除了极点外我们还定义了极锥

$$C^* = \{y \mid y^T x \leq 0, \forall x \in C\}$$

需要注意的是

1. C^* 是闭凸锥, 因为是所有闭半空间的交集
2. 如果 C 是线性的子空间, 那么 $C^* = C^\perp$, 且 $C = (C^\perp)^\perp$
3. C 是闭凸锥, 则 C^* 可以看做对 C 的等价描述。

关于极锥我们有如下的运算性质, 需要掌握

定理 1.5.4. 如果 C 非空, 则 $C^* = (\text{cl}(C))^* = (\text{conv}(C))^* = (\text{cone}(C))^*$

证明. 我们需要清楚

$$X \subseteq Y \Rightarrow Y^* \subseteq X^*$$

因此 $(\text{cl}(C))^* \subseteq C^*$ 。当 $y \in C^*$, 则 $\forall \{x_k\}, y^T x_k \leq 0$, 所以 $\forall x \in \text{cl}(C), y^T x \leq 0$, 因此 $y \in (\text{cl}(C))^*$, 所以 $C^* \subseteq (\text{cl}(C))^*$, 故 $C^* = (\text{cl}(C))^*$ 。

类似我们还得到当 $y^T x \leq 0, y^T z \leq 0$ 时 x, z 的凸组合会满足也是 $y^T x \leq 0$, 所以说也有 $C = (\text{conv}(C))^*$

而 $y^T x \leq 0$ 则 $y^T \alpha x \leq 0, \alpha > 0$ 时, 也就是 $x \in \text{cone}(C)$ 也满足了 $y^T x \leq 0$ 。所以类似又有 $C^* = (\text{cone}(C))^*$ 。 □

定理 1.5.5. 如果 C 是非空的锥, 则

$$(C^*)^* = \text{cl}(\text{conv}(C))$$

证明. 分三种情况

1. 如果 C 是闭的凸锥, 那结合极锥的定义

$$\mathbf{y}^T \mathbf{x} \leq 0, \forall \mathbf{x} \in C, \mathbf{y} \in C^*$$

我们可以认为是 $\mathbf{y} \in C^*$, 但这时交换以下 $\mathbf{x}^T \mathbf{y} \leq 0$, 从而又可以认为 $\mathbf{x} \in (C^*)^*$, 这说明 $C \subseteq (C^*)^*$. 下证 $(C^*)^* \subseteq C$.

假设对 $\forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$, 其在 C 上投影是 \mathbf{z}^* , 那么结合投影定理

$$(\mathbf{z} - \mathbf{z}^*)^T (\mathbf{x} - \mathbf{z}^*) \leq 0, \forall \mathbf{x} \in C$$

因为 C 是闭凸锥, 所以结合 \mathbf{x} 的任意性我们取 $\mathbf{x} = \mathbf{0}, 2\mathbf{z}^*$, 也就是 $\mathbf{0} \in C, 2\mathbf{z}^* \in C$ 带入

$$(\mathbf{z} - \mathbf{z}^*)^T \mathbf{z}^* \geq 0, (\mathbf{z} - \mathbf{z}^*)^T \mathbf{z}^* \leq 0 \Rightarrow (\mathbf{z} - \mathbf{z}^*)^T \mathbf{z}^* = 0$$

因此可得 $(\mathbf{z} - \mathbf{z}^*)^T \mathbf{x} \leq 0, \forall \mathbf{x} \in C$, 这说明 $\mathbf{z} - \mathbf{z}^* \in C^*$. 于是又得到

$$(\mathbf{z} - \mathbf{z}^*)^T \mathbf{z} \leq 0, \forall \mathbf{z} \in (C^*)^*$$

从而得到

$$(\mathbf{z} - \mathbf{z}^*)^T (\mathbf{z} - \mathbf{z}^*) \leq 0$$

说明只能 $\mathbf{z} - \mathbf{z}^* = \mathbf{0}$, 从而 $\mathbf{z} = \mathbf{z}^* \in C$, 所以 $(C^*)^* \subseteq C$, 从而 $(C^*)^* = C$

2. 如果不是闭凸的锥, 则

$$\text{cl}(\text{conv}(C)) = (\text{cl}(\text{conv}(C))^*)^*$$

又知 $C^* = (\text{cl}(\text{conv}(C)))^*$, 所以两边再次取极锥就是

$$(C^*)^* = (\text{cl}(\text{conv}(C))^*)^* = \text{cl}(\text{conv}(C))$$

3. 如果 C 是任意凸集用

$$C^* = (\text{cl}(\text{cone}(C)))^* \xrightarrow{\text{cl}(\text{cone}(C)) \text{ 是闭凸锥}} (C^*)^* = \text{cl}(\text{cone}(C))$$

□

下面看一些极锥的题

习题 1.5.1. 如果 C_1, C_2 是非空的锥, 则 $(C_1 + C_2)^* = C_1^* \cap C_2^*$

证明. 如果 $\mathbf{y} \in (C_1 + C_2)^*$, 则 $\mathbf{y}^T (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2) \leq 0, \mathbf{x}_1 \in C_1, \mathbf{x}_2 \in C_2$. 因为 C_1, C_2 是锥, 所以 $\mathbf{0} \in \text{cl}(C_1), \mathbf{0} \in \text{cl}(C_2)$, 所以我们令 $\mathbf{x}_2 \rightarrow \mathbf{0}$, 则得到 $\mathbf{y}^T \mathbf{x}_1 \leq 0$, 同样 $\mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{0}$ 则 $\mathbf{y}^T \mathbf{x}_2 \leq 0$. 所以我们得到

$$\mathbf{y}^T \mathbf{x}_1 \leq 0, \mathbf{y}^T \mathbf{x}_2 \leq 0$$

结合 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ 的任意性也就是

$$\mathbf{y} \in C_1^*, \mathbf{y} \in C_2^*, \mathbf{y} \in C_1^* \cap C_2^*$$

反过来, 如果 $\mathbf{y} \in C_1^* \cap C_2^*$, 则

$$\mathbf{y}^T \mathbf{x}_1 \leq 0, \mathbf{y}^T \mathbf{x}_2 \leq 0, \forall \mathbf{x}_1 \in C_1, \mathbf{x}_2 \in C_2$$

所以 $\mathbf{y}^T(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2) \leq 0$, 因为 $\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2 \in C_1 + C_2$, 因此结合任意性我们就有 $\mathbf{y} \in (C_1 + C_2)^*$ 。

综上有 $(C_1 + C_2)^* = C_1^* \cap C_2^*$ \square

习题 1.5.2. $C \subseteq \mathbb{R}^n$ 是非空的闭凸锥, 如果 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 求证, 如果 \mathbf{y} 是 \mathbf{x} 在 C 上的投影, 当且仅当 $\mathbf{y} \in C, (\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{y} = 0, (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \in C^*$

证明. 当 \mathbf{y} 是 C 上投影时, \mathbf{y} 因为 C 是闭凸集, 所以 \mathbf{y} 存在且唯一。结合投影定理

$$(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T(\mathbf{z} - \mathbf{y}) \leq 0, \forall \mathbf{z} \in C$$

因为 C 是锥, 所以 $2\mathbf{y}, \frac{1}{2}\mathbf{y} \in C$, 所以我们将 \mathbf{z} 分别取 $2\mathbf{y}, \frac{1}{2}\mathbf{y}$ 就可以有

$$-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{y} \leq 0, (\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{y} \leq 0$$

因此必须有 $(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{y} = 0$, 且同时带入上面有 $(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{z} \leq 0, \forall \mathbf{z} \in C$ 。这就说明 $\mathbf{x} - \mathbf{y} \in C^*$ 。

反过来, 如果 $\mathbf{y} \in C$, 且 $(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{y} = 0, \mathbf{x} - \mathbf{y} \in C^*$ 说明

$$(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{z} \leq 0, (\mathbf{x} - \mathbf{y})^T(\mathbf{z} - \mathbf{y}) \leq 0, \forall \mathbf{z} \in C$$

因此结合投影定理, \mathbf{y} 是 \mathbf{x} 在 C 上的投影。 \square

习题 1.5.3. 设 C 是 \mathbb{R}^n 的非空闭凸集, 求证: C 的所有边界点都是 C 的极点当且仅当 C 的每一个支撑超平面于 C 交于唯一的支撑点

证明. 如果 ∂C 是 C 的边界点也都是 C 的极点, 那么假设 $\forall \mathbf{x} \in \partial C$ 是 C 的极点, H 是 C 经过 \mathbf{x} 的支撑超平面, 那么 $\mathbf{x} \in C \cap H$ 。如果支撑点不唯一, 那么设 $\mathbf{y} \neq \mathbf{x}, \mathbf{y} \in C \cap H$ 同样是支撑点也是极点, 则因为 C, H 都是凸集 (超平面是凸集), 故 $C \cap H$ 是凸集, 所以 $\alpha \mathbf{x} + (1 - \alpha) \mathbf{y} \in C \cap H$, 这说明 \mathbf{x}, \mathbf{y} 连线都是 C 的极点, 而这显然是和极点的定义矛盾的! 所以支撑的点必须唯一。

反过来, 如果每个支撑超平面的支撑点 (必然也是边界点) 都是唯一的, 那么结合极点超平面定理, 该点就是 $C \cap H$ 的极点, 结合极点存在定理, 也是 C 的极点。这样对所有的超平面取并集, 就得到所有边界点都是极点了。 \square

习题 1.5.4. 设 C 是 \mathbb{R}^n 中的非空锥集合, 求证:

$$L_{C^*} = (\text{aff}(C))^\perp$$

证明. 如果 $\mathbf{d} \in L_{C^*}$, 则 $\forall \mathbf{y} \in C^*, \alpha \in \mathbb{R}, \mathbf{y} + \alpha \mathbf{d} \in C^*$ 。再结合极锥定义, $\forall \mathbf{x} \in C$ 满足

$$\mathbf{y} + \alpha \mathbf{d} \in C^* \Rightarrow \forall \mathbf{x}, \mathbf{x}^T \mathbf{y} + \alpha \mathbf{x}^T \mathbf{d} \leq 0$$

注意到 α 在实数空间里有任意性, 因此只要 $\mathbf{x}^T \mathbf{d}$ 不是 0, 就意味着 $\mathbf{x}^T \mathbf{y} + \alpha \mathbf{x}^T \mathbf{d}$ 可以取到任意一个实数, 不可能恒非正。所以必须有 $\mathbf{x}^T \mathbf{d} = 0$ 。而 $\mathbf{x} \in C \subseteq \text{aff}(C)$, 这就说明 $\mathbf{d} \in (\text{aff}(C))^\perp$ 。反过来, 如果 $\mathbf{d} \in (\text{aff}(C))^\perp$, 则 $\mathbf{d}^T \mathbf{x} = -\mathbf{d}^T \mathbf{x} = 0, \forall \mathbf{x} \in C$ 。这就说明, 当 $\forall \mathbf{y} \in C^*$ 满足 $\mathbf{y}^T \mathbf{x} \leq 0, \forall \mathbf{x} \in C$, 则有 $(\mathbf{y} + \alpha \mathbf{d})^T \mathbf{x} \leq 0, \forall \alpha \in \mathbb{R}$, 有 $\mathbf{y} + \alpha \mathbf{d} \in C^*, \alpha \in \mathbb{R}$, 结合 L_C 的定义, $\forall \mathbf{y} \in C^*, \forall \alpha \in \mathbb{R} \Rightarrow \mathbf{y} + \alpha \mathbf{d} \in C^*$, 这就有 $\mathbf{d} \in L_{C^*}$ 。综上我们得到了 $L_{C^*} = (\text{aff}(C))^\perp$ \square

1.6 多面体问题

我们知道, 在三维空间里, 一个多面体差不多是几个平面围成的一个区域。类比的, 在高维空间里多面体可以表示为多个超平面围成的空间, 也就是几个超平面闭半空间之交集

$$C = \{\mathbf{x} | \mathbf{a}_j^T \mathbf{x} \leq 0, 1 \leq j \leq r\}$$

此外我们还定义有限生成锥

$$C = \text{cone}(\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r\}) = \left\{ \mathbf{x} \left| \mathbf{x} = \sum_{j=1}^r \mu_j \mathbf{a}_j, \mu_j \geq 0, 1 \leq j \leq r \right. \right\}$$

则 C 是有限生成锥。这里我们有一个非常重要的定理

定理 1.6.1. Minkowski-Werl 定理: 一个集合是有限生成锥当且仅当它是多面体锥, 一个集合 P 是多面体当且仅当存在非空有限点集 $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_m\}$ 和有限生成锥满足

$$P = \text{conv}(\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_m\}) + C$$

也就是

$$P = \left\{ \mathbf{x} \left| \mathbf{x} = \sum_{j=1}^m \mu_j \mathbf{v}_j + \mathbf{y}, \sum_{j=1}^m \mu_j = 1, \mu_j \geq 0, 1 \leq j \leq m, \mathbf{y} \in C \right. \right\}$$

证明. 如果 P 是多面体, 也就是

$$P = \{\mathbf{x} | \mathbf{a}_j^T \mathbf{x} \leq b_j, 1 \leq j \leq r\}$$

这里 $\mathbf{a}_j \in \mathbb{R}^n, b_j \in \mathbb{R}$ 。我们考虑 \mathbb{R}^{n+1} 的多面体锥

$$\hat{P} = \{(\mathbf{x}, w) | w \geq 0, \mathbf{a}_j^T \mathbf{x} \leq b_j w, 1 \leq j \leq r\}$$

按照定义知道

$$P = \{\mathbf{x} | (\mathbf{x}, 1) \in \hat{P}\}$$

结合”集合是有限生成锥当且仅当是多面体锥”这说明 \hat{P} 是多面体锥, 也就是有限生成锥, 也就是

$$\hat{P} = \left\{ (\mathbf{x}, w) \left| \mathbf{x} = \sum_{j=1}^m \nu_j \bar{\mathbf{v}}_j, w = \sum_{j=1}^m \nu_j \bar{d}_j, 1 \leq j \leq m \right. \right\}$$

这里 $\bar{\mathbf{v}}_j \in \mathbb{R}^n, \bar{d}_j \in \mathbb{R}$ 。注意到因为 $\forall(\mathbf{x}, w) \in \hat{P}, w \geq 0$, 所以 $\bar{d}_j \geq 0$, 下面我们分为

$$J^+ = \{j | \bar{d}_j > 0\}, J^0 = \{j | \bar{d}_j = 0\}$$

现在我们取

$$j \in J^+, \nu_j \bar{d}_j = \mu_j, \bar{\mathbf{v}}_j = \bar{d}_j \mathbf{v}_j$$

$$j \in J^0, \nu_j \bar{d}_j = \mu_j, \bar{\mathbf{v}}_j = \mathbf{v}_j$$

这样我们就可以把 \hat{P} 写成

$$\hat{P} = \left\{ (\mathbf{x}, w) \left| \mathbf{x} = \sum_{j \in J^+ \cup J^0} \mu_j \mathbf{v}_j, w = \sum_{j \in J^+} \mu_j, \mu_j \geq 0 \right. \right\}$$

取 $w = 1$, 那么 $(\mathbf{x}, 1) \in \hat{P}$, 而此时 $w = 1$ 时对应 \mathbf{x} 就是在 P 里, 所以

$$P = \left\{ \mathbf{x} \left| \mathbf{x} = \sum_{j \in J^+ \cup J^0} \mu_j \mathbf{v}_j, \sum_{j \in J^+} \mu_j = 1, \mu_j \geq 0 \right. \right\}$$

相当于对于 J^+ 部分相当于取凸包, 对 J^0 部分取生成锥

$$\left\{ \mathbf{x} \left| \mathbf{x} = \sum_{j \in J^+} \mu_j \mathbf{v}_j, \sum_{j \in J^+} \mu_j = 1, \mu_j \geq 0, \forall j \in J^+ \right. \right\} + \left\{ \mathbf{x} \left| \mathbf{x} = \sum_{j \in J^0} \mu_j \mathbf{v}_j, \mu_j \geq 0, \forall j \in J^0 \right. \right\}$$

左边是 $\text{conv}(\{\mathbf{v}_j | j \in J^+\})$ 一个凸包, 右边是一个有限生成锥, 这就说明一个多面体就可以表示为一个有限点集的凸包与有限生成锥之和。

反过来, 如果 P 是具有这样的形式, 那直接利用

$$P = \{\mathbf{x} | (\mathbf{x}, 1) \in \hat{P}\}$$

因为 \hat{P} 看形式是有限生成锥, 故当然是多面体, 因为一个集合是有限生成锥当且仅当是多面体锥, 所以 P 也就是多面体锥 \square

对于多面体代数的运算包含

1. 对非空交集封闭
2. 对笛卡尔积封闭
3. 对线性变换封闭, 且线性变换下的像和原像都是封闭的
4. 对向量和封闭

这个只要结合

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_m], \mathbf{C} = [\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \dots, \mathbf{c}_n]$$

满足

$$\mathbf{A}\mathbf{x} \leq \mathbf{b}, \quad \mathbf{C}\mathbf{x} \leq \mathbf{d}$$

这是对交的封闭。对笛卡尔积的封闭为

$$T = \begin{bmatrix} A & O \\ O & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} b \\ d \end{bmatrix}$$

习题 1.6.1. 现在假设 P 是 \mathbb{R}^n 中的多面体, 也就是

$$P = \left\{ x \mid x = \sum_{j=1}^m \mu_j v_j + y, \sum_{j=1}^m \mu_j = 1, \mu_j \geq 0, 1 \leq j \leq m, y \in C \right\}$$

也就是 C 是有限生成锥, 求证

1. $R_P = C$, 也就是 P 的回收锥是该多面体表示的有限生成锥 C
2. P 的任何极点等于某一个 v_i , 且 v_i 不可表示为 $v_j (j \neq i)$ 的凸组合

证明. 证明如下

1. 如果 $d \in R_P$, 那么满足

$$\forall x \in P, \alpha \geq 0, x + \alpha d \in P$$

现在 $x = \sum_{j=1}^m \mu_j v_j + y \in P$, 则我们得到 $x + \alpha d = \sum_{j=1}^m \mu_j v_j + y + \alpha d \in P$, 这里我们看出 $y + \alpha d \in C$. 因为 C 是有限生成锥, 是多面体锥, 也就是

$$C = \{x \mid a_j^T x \leq 0, 1 \leq j \leq r\}$$

我们知道 $y \in C, a_j^T y \leq 0$, 则 $y + \alpha d \in C$ 说明 $a_j^T y + \alpha a_j^T d \leq 0$, 因为 $\alpha \geq 0$ 的任意性, 必须有 $a_j^T d \leq 0$, 这说明 $d \in C$.

反过来如果 $d \in C$, 则 $\forall x \in P, x = \sum_{j=1}^m \mu_j v_j + y, y \in C$, 因为 C 是一个有限生成锥, 结合刚才我们写的有限生成锥的形式:

$$d \in C, a_j^T d \leq 0, y \in C, a_j^T y \leq 0$$

所以 $a_j^T (y + \alpha d) \leq 0, \forall \alpha \geq 0$, 所以 $y + \alpha d \in C$, 说明 $x + \alpha d = \sum_{j=1}^m \mu_j v_j + y + \alpha d \in P$,

结合 $x \in P, \forall \alpha \geq 0$ 的条件我们就得到 $d \in R_P$, 所以 $R_P = C$

2. 假设 P 的任意极点是 x_0 , 则 $\forall x_1, x_2 \in P$ 满足 $\forall \alpha \in (0, 1), x_0 \neq \alpha x_1 + (1 - \alpha)x_2$, 如果我们按照 P 里的形式写, 那么这就是

$$x_0 = \sum_{j=1}^m \mu_{0j} v_j + y_0 \neq \alpha \sum_{j=1}^m \mu_{1j} v_j + \alpha y_1 + (1 - \alpha) \sum_{j=1}^m \mu_{2j} v_j + (1 - \alpha) y_2$$

这里满足 $y_1, y_2 \in C, \sum_{j=1}^n \mu_{kj} = 1, \mu_{kj} \geq 0, k \in \{0, 1, 2\}$. 结合任意性, 现在我们取 $\mu_{0j} = \mu_{1j} = \mu_{2j}$, 则 $y_0 \neq \alpha y_1 + (1 - \alpha)y_2$, 说明 y_0 是 C 的极点. 因为 C 是一个锥, 故其极点

必须是原点, $\mathbf{y}_0 = \mathbf{0}$ 。所以

$$\mathbf{x}_0 = \sum_{j=1}^m \mu_{0j} \mathbf{v}_j$$

这也就是说 \mathbf{x}_0 是在凸包里的, 这是一个凸组合。因此一定存在一个 $i, 1 \leq i \leq m$, 满足 $\mu_{0i} > 0$, 如有一个 $\mu_{0i} = 1$ 就是取 1, 那么 $\mathbf{x}_0 = \mathbf{v}_i$, 这个极点就是 \mathbf{v}_i 了。

如果 μ_{0i} 没有严格取 1 的, 那么我们就假设

$$\mathbf{x}_0 = \sum_{j=1}^m \mu_{0j} \mathbf{v}_j = \mu_{0i} \mathbf{v}_i + \sum_{j=1, j \neq i}^m \mu_{0j} \mathbf{v}_j = \mu_{0i} \mathbf{v}_i + (1 - \mu_{0i}) \sum_{j=1, j \neq i}^m \frac{\mu_{0j}}{1 - \mu_{0i}} \mathbf{v}_j$$

我们假设 $P = X + C, X = \text{conv}(\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\})$ 。我们结合 $\sum_{j=1}^m \mu_{0j} = 1$ 的条件注意到

$$\mathbf{z} = \sum_{j=1, j \neq i}^m \frac{\mu_{0j}}{1 - \mu_{0i}} \mathbf{v}_j$$

也就是 \mathbf{z} 是 $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{i-1}, \mathbf{v}_{i+1}, \dots, \mathbf{v}_m\}$ 的凸组合, 必然在 X 中, \mathbf{v}_i 也是在 X 中, 另外 $\mathbf{x}_0 = \mu_{0i} \mathbf{v}_i + (1 - \mu_{0i}) \mathbf{z}$, 这里已经假设 $\mu_{0i} > 0$, 这就说明 \mathbf{x}_0 已经是一个凸组合 (μ_{0i} 假设严格大于 0 且小于 1, 不含端点) 了, 这和 \mathbf{x}_0 是极点的假设矛盾了, 所以说 μ_{0i} 必须一个严格取 1, 余下全部是 0, 这说明 \mathbf{x}_0 如果是极点就一定是某个 \mathbf{v}_i 。

如果 $\mathbf{v}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^m \mu_j \mathbf{v}_j$ 是余下 \mathbf{v}_j 的凸组合, 则存在 $\mu_k > 0$, 结合刚才的过程我们可以推到 \mathbf{v}_i 会等于 $\mathbf{v}_k, k \in \{1, \dots, i-1, i+1, \dots, m\}$, 这是不可能的, 矛盾, 所以 \mathbf{v}_i 不可以表示为余下 $\mathbf{v}_j (j \neq i)$ 的凸组合。

□

1.7 约束优化问题

我们知道优化问题

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \quad \text{s.t. } \mathbf{x} \in X$$

这里 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, 如果 $X \subseteq \mathbb{R}^n$ 非空

1. $\mathbf{x} \in X \cap \text{dom}(f)$, 则 \mathbf{x} 为可行解

2. 如 $X \cap \text{dom}(f) \neq \emptyset$ 则问题可解

另外我们知道, 凸优化问题, 也就是 f 为凸函数且 X 是凸集, 此时局部极小值是全局极小值。现在我们讨论最优解的试试, 假设 X^* 是 $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ 上最小值点的集合, 则

$$X^* = \bigcap_{k=0}^{\infty} \{\mathbf{x} \in X \mid f(\mathbf{x}) \leq \gamma_k\}$$

其中 $\{\gamma_k\}$ 是单调递减且趋于 $\inf_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x})$, 这里 X^* 非空说明 f 最优解存在, X^* 有界。我们知道, 经典的 Weierstrass 定理是:

连续函数在紧（有界闭）集上可以取到最小值

这个大家都知道用有限覆盖可以证明。另外，水平集是紧集，则 X^* 是非空紧集。下面我们要给出 Weierstrass 定理更一般的形式

定理 1.7.1. 先定义强制的：就是 $\forall \{x_k\}$ ，满足 $\|x_k\| \rightarrow \infty$ ， $\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k) = \infty$ ，则 f 强制。则 Weierstrass 定理叙述如下：假设 f 是正常闭函数，则只要满足下列条件，则最优解构成的集合 X^* 是非空紧集：

1. $\text{dom}(f)$ 是有界的
2. 存在 f 的非空有界水平集
3. f 是强制的

另外，凸优化的 Weierstrass 定理：如果 f 是闭凸函数且 X 是闭凸集， $X \cap \text{dom}(f) \neq \emptyset$ ，则 f 在 X 上的最小值点集合 X^* 非空紧，当且仅当 X, f 没有公共的非零回收方向。

证明. 因为 $X \cap \text{dom}(f) \neq \emptyset$ ，因此

$$f^* = \inf_{x \in X} f(x) < \infty$$

如果标量序列 $\gamma_k \rightarrow f^*$ ，考虑集合

$$V_k = \{x | f(x) \leq \gamma_k\}$$

则

$$X^* = \bigcap_{k=1}^{\infty} (X \cap V_k)$$

因为是闭凸集，结合回收锥“交的回收锥是回收锥是交”得到

$$R_{X^*} = \bigcap_{k=1}^{\infty} R_{X \cap V_k} = \bigcap_{k=1}^{\infty} (R_X \cap R_{V_k}) = \bigcap_{k=1}^{\infty} (R_X \cap R_f) = R_X \cap R_f$$

结合回收锥性质，在闭凸集时，如果包含非零方向必然无界，所以当 X^* 是非空紧集时 R_{X^*} 必须只有零方向。这就说明

$$R_X \cap R_f = R_{X^*} = \{0\}$$

所以 X, f 没有公共的非零回收方向 □

如果 X 和 f 有公共非零的回收方向，那么如 $f(x) = e^x$ ， X^* 是空集，因为 e^x 没有最小值。或者 $f(x) = \text{ReLU}(x)$ ， X^* 是非正实数集合，非空但是无界。这里面 X^* 和 f 都是有公共的非零回收方向的。

习题 1.7.1. 假设 X 是凸集， $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 的所有水平集是凸集，且 $X \cap \text{dom}(f) \neq \emptyset$ ，假设 $f^* = \inf_{x \in X} f(x)$ ，如果 f 在 X 的任意线段上不取常数，求证 f 的局部极小值点，是全局的极小值点。

证明. 若结论不真, \mathbf{x}^* 是局部而非全局的极小值点, 设存在 $\mathbf{y} \in X, \text{s.t. } f(\mathbf{y}) < f(\mathbf{x}^*)$, 下面我们考虑水平集:

$$S_{f(\mathbf{x}^*)} = \{\mathbf{x} | f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}^*)\}$$

则由水平集的凸性, $\forall \alpha \in [0, 1], \alpha \mathbf{x}^* + (1 - \alpha) \mathbf{y} \in S_{f(\mathbf{x}^*)}$, 说明该线段上的点都不超过 $f(\mathbf{x}^*)$ 。

- 如果 $\exists \alpha \in (0, 1), \forall \beta \in [\alpha, 1]$, 使得 $f(\beta \mathbf{x}^* + (1 - \beta) \mathbf{y}) = f(\mathbf{x}^*)$, 则与 “任意线段不取常数” 矛盾, 因为在 $[\alpha, 1]$ 上取了 $f(\mathbf{x}^*)$
- 否则, 在 $\alpha = 1$ 的 α 无论多小的左邻域内也就是 $\exists \beta, (\beta, 1)$ 内必须存在小于 $f(\mathbf{x}^*)$ 的值, 也就是 $\forall \alpha \in (0, 1), \exists \beta \in [\alpha, 1]$ 使得 $f(\beta \mathbf{x}^* + (1 - \beta) \mathbf{y}) < f(\mathbf{x}^*)$, 这个 β 在 $(0, 1)$ 内有任意性, 所以此时 \mathbf{x}^* 将不是局部极小值, 矛盾。

所以无论哪种情况, 都必须是全局极小值。也就是说如果在 \mathbf{x}^* 的邻域一段, 不存在一段恒为 $f(\mathbf{x}^*)$ 的值, 那么不管距离 \mathbf{x}^* 有多近, 因为在水平集里面 (必须不超过) 且不取等, 那就必须是小于, 从而无论多近都能找到更小的, 这就不是局部极小值了。其本质就是命题否定一下, 只不过水平集里, 等于的对立面就是小于。 \square

2 对偶理论问题

2.1 共轭函数

我们定义共轭函数如下： $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^+$ ，其中 $\mathbb{R}^+ = \mathbb{R} \cup \{-\infty, \infty\}$ ， f 是扩展实值函数，其共轭函数 f^* 定义为

$$f^*(\mathbf{y}) = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\mathbf{x}^T \mathbf{y} - f(\mathbf{x})\}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$$

类比共轭函数的共轭就是二次共轭 f^{**}

$$f^{**}(\mathbf{x}) = \sup_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \{\mathbf{y}^T \mathbf{x} - f^*(\mathbf{y})\}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

我们注意

1. f^* 是闭凸函数
2. 如果 f 是正常（上图非空无直线）时 f^* 不一定正常
3. 如果 f 是凸函数，那么 f^* 是正常凸函数当且仅当 f 是正常函数

共轭函数实际上是 Legendre 变换，考虑 $F(\mathbf{x}, \mathbf{y}), G(\mathbf{u}, \mathbf{y})$ ，我们对 F 求全微分也就是

$$dF = \sum_{i=1}^n \frac{\partial F}{\partial x_i} dx_i + \sum_{i=1}^n \frac{\partial F}{\partial y_i} dy_i$$

取 $u_i = \frac{\partial F}{\partial x_i}$ ，则我们前面 $\sum_{i=1}^n \frac{\partial F}{\partial x_i} dx_i = \sum_{i=1}^n u_i dx_i = \sum_{i=1}^n d(x_i u_i) - \sum_{i=1}^n x_i du_i$ ，移项有

$$\sum_{i=1}^n x_i du_i - \sum_{i=1}^n \frac{\partial F}{\partial y_i} dy_i = \sum_{i=1}^n d(x_i u_i) - dF = d\left(\sum_{i=1}^n x_i u_i - F\right) = d(\mathbf{u}^T \mathbf{x} - F)$$

我们现在取 $G(\mathbf{u}, \mathbf{y}) = \mathbf{u}^T \mathbf{x} - F(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ ，上面移项的式子就是 dG 。我们可以看出这个 $G(\mathbf{u}, \mathbf{y})$ 就是我们共轭函数的形式！如何从几何的意义解释：函数和切线联系在一起，这个 \mathbf{u} 是每点切线的斜率（导数），也就是超平面的法向量。共轭函数其实是切线在值轴上的负截距。或者在一元函数空间里，你可以想象 $kx - f(x)$ 的差距变化。注意是直线减函数，然后 x 里取上确界。下面举一些例子：

习题 2.1.1. $f(x) = \alpha x - \beta$ 的共轭函数：我们知道是

$$f^*(y) = \sup_{x \in \mathbb{R}} \{(y - \alpha)x - \beta\} = \begin{cases} \beta & y = \alpha \\ +\infty & y \neq \alpha \end{cases}, \quad f^{**}(x) = \sup_{y \in \mathbb{R}} \{yx - f(y)\} = \alpha x - \beta = f(x)$$

当过原点的直线 $y = kx$ 直线和 $f(x)$ 不平行， $k \neq \alpha$ 时必然相交，交点的一左侧或者一右侧会使得差值无穷，等于时那自然就是负截距。这样就可以秒掉。

习题 2.1.2. $f(x) = |x|$ 的共轭函数是

$$f^*(y) = \sup_{x \in \mathbb{R}} \{yx - |x|\} = \begin{cases} \sup_{x \in \mathbb{R}^+} (y-1)x & x \geq 0 \\ \sup_{x \in \mathbb{R}^-} (y+1)x & x \leq 0 \end{cases} = \begin{cases} 0 & |y| \leq 1 \\ +\infty & |y| > 1 \end{cases}$$

二次共轭函数为

$$f^{**}(x) = \sup_{y \in \mathbb{R}} \{xy - f^*(y)\} = \sup_{|y| \leq 1} \{xy - 0\} = |x| = f(x)$$

习题 2.1.3. $f(x) = \frac{c}{2}x^2 (c > 0)$ 的共轭函数是

$$f^*(y) = \sup_{x \in \mathbb{R}} \left\{ xy - \frac{c}{2}x^2 \right\} = \frac{y^2}{2c}$$

这可以看做有关 x 的二次函数, 在对称轴 $\frac{y}{c}$ 这上取最值。注意到二次函数 (开口向上) 的共轭函数仍然是二次函数, 于是不难看出再次共轭函数就是把前面的 $\frac{1}{c}$ 取倒数也就是

$$f^{**}(x) = \frac{c}{2}x^2 = f(x)$$

习题 2.1.4. $f(x) = \max\{0, x^2 - 1\}$ 的共轭函数是

$$f(y) = \sup_{x \in \mathbb{R}} \{xy - f(x)\} = \sup_{x \in \mathbb{R}} \begin{cases} xy & |x| \leq 1 \\ -x^2 + xy + 1 & |x| \geq 1 \end{cases} = \max \left\{ \frac{y^2}{4} + 1, |y| \right\}$$

这是结合最大值在边界 $x = \pm 1$ 或对称轴 $\frac{y}{2}$ 中取, 所以得到

$$f^*(y) = \begin{cases} \frac{y^2}{4} + 1 & |y| > 2 \\ |y| & |y| \leq 2 \end{cases}$$

不难看出 f 的上镜图是闭凸的, 因此 $f = f^{**}$, 或者直接看定义

$$f^{**}(x) = \sup_{y \in \mathbb{R}} \{xy - f^*(y)\}$$

习题 2.1.5. $f(x) = \begin{cases} \sqrt{1-x^2} & |x| < 1 \\ +\infty & |x| \geq 1 \end{cases}$ 的共轭函数是

$$f^*(y) = \sup_{x \in \mathbb{R}} \{yx - f(x)\} = \sup_{|x| < 1} \{yx - \sqrt{1-x^2}\} := \sup_{|x| < 1} g(x)$$

对 x 求导得到 $g'(x) = y + \frac{x}{\sqrt{1-x^2}}$, 二次求导 $g''(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} + \frac{x^2}{(1-x^2)\sqrt{1-x^2}} > 0$, $g'(x)$

单调递增, $g(x)$ 的上下确界在端点, $\max\{g(-1), g(1)\}$ 也就是

$$\sup_{|x|<1} \{y, -y\} = |y|$$

所以 $f^*(y) = |y|$ 。从而

$$f^{**}(x) = \sup_{y \in \mathbb{R}} \{xy - f^*(y)\} = \sup_{y \in \mathbb{R}} \{xy - |y|\} = \sup \begin{cases} (x-1)y & y \geq 0 \\ (x+1)y & y \leq 0 \end{cases} = \begin{cases} +\infty & |x| > 1 \\ 0 & |x| \leq 1 \end{cases}$$

关于共轭函数我们有一个非常重要的定理, 需要重点掌握

定理 2.1.1. $f(x) \geq f^{**}(x)$, 如果 f 是正常闭凸函数则可以取等为 $f = f^{**}$

证明. 结合共轭函数 $f^*(y) = \sup_{x \in \mathbb{R}^n} \{x^T y - f(x)\}$ 可得

$$f^*(y) \geq x^T y - f(x) \Rightarrow f(x) \geq y^T x - f^*(y)$$

而此时我们不难发现对右边的 y 取上确界就是

$$f(x) \geq \sup_{y \in \mathbb{R}^n} \{x^T y - f^*(y)\} = f^{**}(x)$$

因为 $f \geq f^{**}$, 所以 $\text{epi}(f) \subseteq \text{epi}(f^{**})$, 下面看当 f 正常闭凸时反过来取等的情况。若结论不真, 则 $\exists (x, \gamma) \in \text{epi}(f^{**}), \notin \text{epi}(f)$ 。因为 f 是闭凸函数, 上镜图是闭凸集, 利用非垂直超平面分离定理可得存在非垂直超平面把 (x, γ) 和 $\text{epi}(f)$ 严格分离。所以 $\exists (y, \zeta), \zeta \neq 0$ 使得

$$y^T z + \zeta w < c < y^T x + \zeta \gamma, \forall (z, w) \in \text{epi}(f)$$

因为 w 可以任意大, 这是因为在上镜图, 所以必须 $\zeta < 0$, 不妨取 $\zeta = -1$ 否则同除以 $|\zeta|$ 就行, 也就是

$$y^T z - w < c < y^T x - \gamma, \forall (z, w) \in \text{epi}(f)$$

因为 $(x, \gamma) \in \text{epi}(f^{**}), \gamma \geq f^{**}(x)$, 且 $(z, f(z))$ 在上镜图里, 结合 w 的任意性不妨取 $w = f(z)$ 也就是

$$y^T z - f(z) < c < y^T x - f^{**}(x)$$

这时对左面的 z 取上确界有

$$f^*(y) = \sup_{z \in \mathbb{R}^n} \{y^T z - f(z)\} \leq c < y^T x - f^{**}(x)$$

所以 $f^{**}(x) < y^T x - f^*(y)$, 这和 $f^{**}(x) = \sup_{y \in \mathbb{R}^n} \{y^T x - f^*(y)\}$ 的定义矛盾, 所以得证 \square

习题 2.1.6. 考虑 f_1, f_2 都是 $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ 的正常闭凸函数, 则 $f_1(x) \leq f_2(x), \forall x \in \mathbb{R}^n$ 当且仅当 $f_1^*(y) \geq f_2^*(y)$

证明. 只要根据共轭函数的定义

$$f^*(\mathbf{y}) = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\mathbf{x}^T \mathbf{y} - f(\mathbf{x})\}$$

当 $f_1(\mathbf{x}) \leq f_2(\mathbf{x})$ 时 $\mathbf{x}^T \mathbf{y} - f_1(\mathbf{y}) \geq \mathbf{x}^T \mathbf{y} - f_2(\mathbf{y})$, 两边对 \mathbf{y} 取上确界就是 $f_1^*(\mathbf{y}) \geq f_2^*(\mathbf{y})$ 。类似同样 $f_1^*(\mathbf{y}) \geq f_2^*(\mathbf{y})$ 得到 $f_1^{**}(\mathbf{x}) \leq f_2^{**}(\mathbf{x})$, 当 f_1, f_2 都是闭凸函数时二次共轭等于其本身, 所以可推回到 $f_1(\mathbf{x}) \leq f_2(\mathbf{x})$ \square

上面的定理非常重点。需要记住

2.2 Min-max 问题

考虑一个博弈问题, 在二手车买卖交易的时候, 对于极大极小问题可以抽象为

$$\begin{cases} \min_{\mathbf{x}} \sup_{\mathbf{z} \in Z} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \\ \text{s.t. } \mathbf{x} \in X \end{cases} \quad \begin{cases} \max_{\mathbf{z}} \inf_{\mathbf{x} \in X} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \\ \text{s.t. } \mathbf{z} \in Z \end{cases}$$

遵循“车主多卖钱, 买家少花钱”的利益驱使, 车主 Z 会设法抬高卖价也就是 $\sup_{\mathbf{z} \in Z} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{z})$, 这时买家会尽可能 \min 成交价以少花钱; 另一边买家 X 设法降低成交价格以寻便宜也就是 $\inf_{\mathbf{x} \in X} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{z})$, 这时卖家的问题就是 \max 成交价以多卖钱。

我们希望找到极大极小等式

$$\sup_{\mathbf{z} \in Z} \inf_{\mathbf{x} \in X} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \inf_{\mathbf{x} \in X} \sup_{\mathbf{z} \in Z} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{z})$$

等号不一定能取到, 这是强对偶关系成立。但幸运的是若对偶关系始终成立, 也就是小于等于号是成立的。这是因为

$$\inf_{\mathbf{x} \in X} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{z}^*) \leq \inf_{\mathbf{x} \in X} \sup_{\mathbf{z} \in Z} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{z})$$

两边 \mathbf{z} 再取上确界即可得到。在我们很多优化的问题中还会定义鞍点这一概念, 我们常说鞍点就是一个方向上最小, 而另一个方向上最大。严格定义是:

$$\phi(\mathbf{x}^*, \mathbf{z}) \leq \phi(\mathbf{x}^*, \mathbf{z}^*) \leq \phi(\mathbf{x}, \mathbf{z}^*), \forall \mathbf{x} \in X, \mathbf{z} \in Z$$

当且仅当

$$\sup_{\mathbf{z} \in Z} \phi(\mathbf{x}^*, \mathbf{z}) = \phi(\mathbf{x}^*, \mathbf{z}^*) = \inf_{\mathbf{x} \in X} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{z}^*)$$

也就是在这个鞍点满足了车主尽可能定价高多卖钱, 同时买家尽可能成交价低少花钱。

2.3 MCMC 框架理论

这一部分可以说是凸优化中重要必会的一块。我们需要理解原问题和对偶问题。我们说一下 MCMC 的两个 MC 是什么。假设 $M \subseteq \mathbb{R}^{n+1}$

1. MC-1: 极小共同问题: M 和 $n+1$ 轴的公共点中第 $n+1$ 个分量最小的点

2. MC-2: 极大交叉问题: 找出“把 M 包含于其上闭半空间的超平面”和“ $n+1$ 轴交点”之中, 第 $n+1$ 个分量最大的点

其数学模型可以记为 (非常重要)

1. 极小公共点问题优化模型

$$\min w \quad \text{s.t. } (\mathbf{0}, w) \in M$$

最优解是

$$w^* = \inf_{(\mathbf{0}, w) \in M} w$$

2. 极大交叉点问题的优化模型

$$\max q(\boldsymbol{\mu}) = \inf_{(\mathbf{u}, w) \in M} \{w + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\} \quad \text{s.t. } \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n$$

最优解记为

$$q^* = \sup_{\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n} q(\boldsymbol{\mu})$$

这里我们说一下极大交叉的问题。我们知道, \mathbb{R}^{n+1} 里看成 $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$, 超平面的法向量假设是 $(\boldsymbol{\mu}, 1)$, 标量 (就是平移的量) 是 ξ 也就是

$$H_{\boldsymbol{\mu}, \xi} = \{(\mathbf{u}, w) \mid w + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u} = \xi\}$$

其和 $n+1$ 轴的交点是 $(\mathbf{0}, \xi)$, 因为 M 在该超平面的上半空间里, 所以

$$\xi \leq w + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}, \forall (\mathbf{u}, w) \in M$$

所以

$$\xi \leq \inf_{(\mathbf{u}, w) \in M} \{w + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\}$$

当我们把 $(\boldsymbol{\mu}, 1)$ 固定住, 交叉点 ξ 是 $q(\boldsymbol{\mu})$ 就是上面的表达式。下面我们举若干例子体会一下 MCMC 的框架下原问题和对偶问题是什么。

定理 2.3.1. 共轭函数对偶问题: 已知 f 是正常闭凸函数, 可以得到

$$f(\mathbf{x}) = f^{**}(\mathbf{x}) = \sup_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \{\mathbf{x}^T \mathbf{y} - f^*(\mathbf{y})\}$$

考虑 f 的上镜图

$$\text{epi}(f) = \{(\mathbf{x}, w) \mid f(\mathbf{x}) \leq w\} = \{(\mathbf{x}, w) \mid \sup_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \{\mathbf{x}^T \mathbf{y} - f^*(\mathbf{y})\} \leq w\} = \bigcap_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \{(\mathbf{x}, w) \mid \mathbf{x}^T \mathbf{y} - w \leq f^*(\mathbf{y})\}$$

现在假设 f 的上镜图就是集合 M , 那么第一个极小公共点 MC 就满足是 $w^* = f(\mathbf{0})$ 。我们写出

第二个极大交叉点 MC 的优化目标是

$$q(\boldsymbol{\mu}) = \inf_{\{(u,w) \in \text{epi}(f)\}} \{w + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\} = \inf_{(u,w) | f(u) \leq w} \{w + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\}$$

此时我们把 w 替换为 $f(\mathbf{u})$ 则

$$q(\boldsymbol{\mu}) = \inf_{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n} \{f(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\} = - \sup_{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n} \{(-\boldsymbol{\mu})^T \mathbf{u} - f(\mathbf{u})\} = -f^*(-\boldsymbol{\mu})$$

此时我们对 q 取上确界, 也就是

$$q^* = \sup_{\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n} q(\boldsymbol{\mu}) = \sup_{\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n} [-f^*(-\boldsymbol{\mu})] = \sup_{\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n} \{0 \cdot (-\boldsymbol{\mu}) - f^*(-\boldsymbol{\mu})\} = f^{**}(\mathbf{0}) = f(\mathbf{0}) = w^*$$

最后 2 个等号用到了当 f 是正常闭凸函数时, $f = f^{**}$, 以及刚才我们说的 $w^* = f(\mathbf{0})$, 此时就有

$$w^* = q^*$$

也就是说, $f(\mathbf{0}) = f^{**}(\mathbf{0})$ 在正常闭凸函数的时候, 中间其是符合 $MCMC$ 框架的

定理 2.3.2. 一般优化问题的对偶: 考虑最小化 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 现在我们引入 $F: \mathbb{R}^{n+r} \rightarrow \mathbb{R}$ 满足

$$f(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x}, \mathbf{0})$$

现在假定 $p(\mathbf{u}) = \inf_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} F(\mathbf{x}, \mathbf{u})$, 这里 \mathbf{u} 是扰动项, $p(\mathbf{u})$ 是原函数经过扰动过后的最优解, 也就是

$$p(\mathbf{0}) = \inf_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} F(\mathbf{x}, \mathbf{0}) = \inf_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x})$$

设 M 是 p 的上镜图, 则 $MCMC$ 原始问题为

$$w^* = p(\mathbf{0}) = \inf_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} F(\mathbf{x}, \mathbf{0}) = \inf_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x})$$

考虑对偶函数

$$q(\boldsymbol{\mu}) = \inf_{\{(u,w) | p(u) \leq w\}} \{w + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\} = \inf_{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^r} \{p(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\}$$

这时 $p(\mathbf{u})$ 换成 $F(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ 则

$$q(\boldsymbol{\mu}) = \inf_{(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{n+r}} \{F(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\}$$

然后

$$q^* = \sup_{\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^r} q(\boldsymbol{\mu})$$

这就是对偶问题

定理 2.3.3. 约束优化的问题是

$$\min_{x \in X} f(x) \quad \text{s.t.} \quad g(x) \leq 0$$

也就是 $g_i(x) \leq 0, 1 \leq i \leq k$ 。我们定义扰动约束集合

$$C_u = \{x \in X, g(x) \leq u\}, u \in \mathbb{R}^r, \quad F(x, u) = \begin{cases} f(x) & x \in C_u \\ +\infty & x \notin C_u \end{cases}$$

这时 $\forall x \in C_0$ 满足 $F(x, 0) = f(x)$ 。我们定义原始函数 $p(u)$ 是

$$p(u) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} F(x, u) = \inf_{x \in X, g(x) \leq u} f(x)$$

相当于考虑 C_u 中, $MCMC$ 的原始问题是

$$w^* = p(0) = \inf_{x \in X, g(x) \leq 0} f(x)$$

另一方面

$$q(\mu) = \inf_{u \in \mathbb{R}^r} \{p(u) + \mu^T u\} = \inf_{x \in X, g(x) \leq u} \{f(x) + \mu^T u\} = \begin{cases} \inf_{x \in X} \{f(x) + \mu^T g(x)\} & \mu \geq 0 \\ -\infty & \text{else} \end{cases}$$

对其取上确界则得到 $MCMC$ 的对偶问题是

$$q^* = \sup_{\mu} q(\mu)$$

这里我们就不难发现 $\mu^T g(x)$ 这就是 *Lagrange* 乘子问题。 $q(\mu)$ 是对偶函数, 也就是 *Lagrannge* 函数。特别的如果是线性规划也就是

$$\min_x c^T x, \quad \text{s.t.} \quad a_i^T x \geq b_i, 1 \leq i \leq r$$

那么 $g(x) \leq 0$ 其实就是 $b - Ax = g(x) \leq 0$, 上面的 $q(\mu)$ 是

$$q(\mu) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} \{c^T x + \mu^T (b - Ax)\}$$

当 $\sum_{i=1}^r \mu_i a_i = c$ 时, 上面取下确界就是 (该条件不满足时, 上面的 $q(\mu)$ 是负无穷)

$$\sum_{j=1}^n \mu_j a_j = c, \mu \geq 0, \quad q(\mu) = \mu^T b$$

所以对偶问题 $q^* = \sup_{\mu} q(\mu)$ 也就是

$$\max_{\mu} \mu^T b, \quad \text{s.t.} \quad A^T \mu = c, \mu \geq 0$$

这是我们熟悉的。

以上几个例子，我们理解了 MCMC 的框架下的原始问题和对偶问题。一个 q^* 一个 w^* ，实际上 $q^* \leq w^*$ 是恒成立的，这时称为弱对偶，而如果取等则是强对偶。这个可以结合

$$q(\mu) \leq \inf_{(u,w) \in M} \{w + \mu^T u\} \leq \inf_{(0,w) \in M} w = w^*$$

然后左边对 μ 去取上确界就有弱对偶问题恒成立。那么什么时候可以取等，也就是强对偶成立？

定理 2.3.4. 如果同时满足 $\bar{M} = M + \{(0, w) \mid w \geq 0\}$ 是凸集，且 $w^* < \infty, w^* = \infty$ 时不包含垂直线，则 $q^* = w^*$ 当且仅当对任意的 $\{(u_n, w_n)\}_n$ 序列而言， $u_n \rightarrow 0$ 有 $w^* \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} w_n$

证明. 如果 $q^* = w^*$ ，当 $u_n \rightarrow 0$ ，则因为

$$q(\mu) = \inf_{(u,w) \in M} \{w + \mu^T u\} \leq w_n + \mu^T u_n$$

只要 $n \rightarrow \infty$ 即可得到 $q(\mu) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} w_k$ 从而

$$w^* = q^* = \sup_{\mu \in \mathbb{R}^n} q(\mu) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} w_n$$

反过来当 $w^* \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} w_k$ 时就有

$$(0, w^* - \varepsilon) \notin \text{cl}(\bar{M})$$

结合非垂直超平面分离订立就得到

$$w^* - \varepsilon < q^* < w^*$$

故 ε 任意性可得 $q^* = w^*$ □

用这个定理我们可以得到如果函数 f 的上镜图是 M ，且 $f(0) = w^* < \infty$ ，则 $q^* = w^*$ 当且仅当 f 在 0 处下半连续。

习题 2.3.1. 考虑 $F: \mathbb{R}^{n+m} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个正常函数， F^* 是 F 的共轭函数，定义 $p(\mu) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} F(x, \mu)$ ，考虑 MCMC 框架，设 $M = \text{epi}(p)$ ，极大交叉点问题的对偶函数为 $q(\mu) = \inf_{(u,w) \in M} \{w + \mu^T u\}$ ，且 h 是 p 的共轭函数，求证

$$h(\mu) = F^*(0, \mu), q(\mu) = -F^*(0, -\mu)$$

证明. 只要知道

$$h(\boldsymbol{\mu}) = \sup_{\mathbf{u}} \{\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u} - p(\mathbf{u})\} = \sup_{\mathbf{u}} \{\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u} - \inf_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}, \mathbf{u})\} = \sup_{(\mathbf{x}, \mathbf{u})} \{\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u} - F(\mathbf{x}, \mathbf{u})\}$$

而注意到

$$\sup_{(\mathbf{x}, \mathbf{u})} \{\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u} - F(\mathbf{x}, \mathbf{u})\} = \sup_{(\mathbf{x}, \mathbf{u})} \{\mathbf{0}^T \mathbf{x} + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u} - F(\mathbf{x}, \mathbf{u})\} = F^*(\mathbf{0}, \boldsymbol{\mu})$$

以及

$$q(\boldsymbol{\mu}) = \inf_{(\mathbf{u}, w) \in M} \{w + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\} = \inf_{p(\mathbf{u}) \leq w} \{w + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\} = \inf_{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m} \{p(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\} = \inf_{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m} \left\{ \inf_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} F(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u} \right\}$$

而最右边等于

$$\inf_{(\mathbf{x}, \mathbf{u})} \{F(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\} = - \sup_{(\mathbf{x}, \mathbf{u})} \{-F(\mathbf{x}, \mathbf{u}) - \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\} = - \sup_{(\mathbf{x}, \mathbf{u})} \{\mathbf{0}^T \mathbf{x} + \boldsymbol{\mu}^T (-\mathbf{u}) - F(\mathbf{x}, \mathbf{u})\} = -F^*(\mathbf{0}, -\boldsymbol{\mu})$$

于是得证 □

习题 2.3.2. 假设 f 是凸函数, X 是凸集, 考虑优化问题

$$\min_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x}), \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} = b_i, 1 \leq i \leq m$$

定义

$$M = \{(\mathbf{a}_1^T \mathbf{x} - b_1, \dots, \mathbf{a}_m^T \mathbf{x} - b_m, f(\mathbf{x})) | \mathbf{x} \in X\}$$

请推导出极大交叉点问题的模型, 且证明向上扩展的集合 $\bar{M} = M + \{(\mathbf{0}, w)\}$ 是凸集, 并且当 X 是紧集且 $w^* < \infty$ 时, 有 $q^* = w^*$

证明. 极大交叉点的问题就是

$$q(\boldsymbol{\mu}) = \inf_{(\mathbf{u}, w) \in M} \{w + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{u}\}$$

的形式, 带入问题就是

$$q(\boldsymbol{\mu}) = \inf_{\mathbf{x}} \left\{ f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \mu_i (\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i) \right\}$$

这是我们熟悉的拉格朗日乘子。我们假设

$$X_1 = (\mathbf{a}_1^T \mathbf{x}_1 - b_1, \dots, \mathbf{a}_m^T \mathbf{x}_1 - b_m, w_1), X_2 = (\mathbf{a}_1^T \mathbf{x}_2 - b_1, \dots, \mathbf{a}_m^T \mathbf{x}_2 - b_m, w_2)$$

因为 X 是凸集, 所以 $\alpha \mathbf{x}_1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}_2 \in X$, 且因为 f 是凸函数, $f(\alpha \mathbf{x}_1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_1) + (1 - \alpha) f(\mathbf{x}_2) \leq \alpha w_1 + (1 - \alpha) w_2$ 这其实就是凸集凸函数得到上镜图凸。所以 M 的向上扩展是凸集。如果 X 是紧集, 那么对每个序列 \mathbf{x}_k 不妨设收敛于 \mathbf{x} (否则取子列, 因为紧集必然存在收敛的子列), 此时满足

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} f(\mathbf{x}_k) = f(\mathbf{x})$$

又因为 w^* 是原问题 $f(\mathbf{x})$ 的最优解, 所以 $w^* \leq f(\mathbf{x})$, 从而

$$w^* \leq f(\mathbf{x}) = \liminf_{k \rightarrow \infty} f(\mathbf{x}_k) \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} w_k$$

所以结合 MCMC 第一强对偶定理得到此时 $q^* = w^*$ □

习题 2.3.3. 考虑二维极小化问题

$$\min_{x_1, x_2} f(x_1, x_2) = e^{-x_1} \quad \text{s.t.} \quad \frac{x_1^2}{x_2} \leq 0, x_2 > 0$$

用 MCMC 框架验证上面问题的原始最优值和对偶最优值, 并验证是否存在对偶间隙

证明. 原始问题写出形式就是

$$\begin{cases} \min_{x_1, x_2} & f(x_1, x_2) = e^{-x_1} \\ \text{s.t.} & \frac{x_1^2}{x_2} \leq 0, (x_1, x_2) \in X = \{(x_1, x_2) | x_2 > 0\} \end{cases}$$

因为 $x_1^2 \geq 0, x_2 > 0$, 故 $\frac{x_1^2}{x_2} \geq 0$, 但是约束又有 ≤ 0 , 所以 $\frac{x_1^2}{x_2} = 0$, 所以 $x_1 = 0$, 原始问题的解为 $f = 1$, 在 $x_1 = 0, x_2 > 0$ 时恒为 1。而结合我们刚才写的约束优化对偶形式, 对偶问题是

$$\begin{cases} \max_{\mu \geq 0} \min_{(x_1, x_2) \in X} & e^{-x_1} + \mu \frac{x_1^2}{x_2} \\ \text{s.t.} & \mu \geq 0 \end{cases}$$

求解该问题可得 $e^{-x_1} = 2\mu \frac{x_1}{x_2}$ 以及 $\mu \frac{x_1^2}{x_2} = 0$, 得到对偶问题的最优值是 0, 对偶间隙是 1。 □

实际上我们应该注意到, 约束问题中对偶问题就是交换最大最小, 因为

$$\sup_{\mu \geq 0} \inf_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + \mu^T \mathbf{g}(\mathbf{x})\} \leq \inf_{\mathbf{x} \in X} \sup_{\mu \geq 0} \{f(\mathbf{x}) + \mu^T \mathbf{g}(\mathbf{x})\}$$

而约束为 $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}$ 所以当 $\mu \geq \mathbf{0}$ 时 $\mu^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0$, 当且仅当 $\mu = \mathbf{0}$ 成立。此时右边就是 $\inf_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x})\}$, 就是我们要求的最小化 $f(\mathbf{x})$ 的优化问题

2.4 次微分与次梯度

我们都知道连续不一定可导可微分, 例如 $y = |x|$ 在原点并不可导。为了考虑不可微的情况, 我们引入次微分, 这是在微分的基础上推广一些内容。次梯度的定义就是

$$\mathbf{g} \in \mathbb{R}^n, f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}) + \mathbf{g}^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}), \forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$$

几何意义右边就是: f 的上镜图 $\text{epi}(f)$ 在 $(\mathbf{x}, f(\mathbf{x}))$ 点处的非垂直支撑超平面 (就相当于“切线”)

举一个例子, 我们知道 $y = |x|$ 在 0 处不可导, 但是从次微分次梯度的角度看, 我们看在 $(0, 0)$ 处找过该点一条线且函数的上镜图全包含在该线上面。不难看出斜率在 $[-1, 1]$ 之间的过 $(0, 0)$ 的直线都满足这一点, 所以 $y = |x|$ 在该点的次微分就是 $[-1, 1]$ 的任一个值。而余下部分是可导的, 余下的点就照样按导数走就是次微分。我们记

$$f(x) = |x|, \partial f(x) = \begin{cases} -1 & x \in (-\infty, 0) \\ [-1, 1] & x = 0 \\ 1 & x \in (0, \infty) \end{cases}$$

下面我们再看些

习题 2.4.1. 求 $f(x) = \begin{cases} -\sqrt{x} & 0 \leq x \leq 1 \\ +\infty & \text{else} \end{cases}$ 的次微分 $\partial f(x)$ 。画出图像我们知道, 在 $0 < x < 1$

的时候仍然跟着原导数走, 也就是 $-\frac{1}{2\sqrt{x}}$ 。而当 $x = 1$ 时看图像我们注意到在 $x = 1$ 点切线斜率 $-\frac{1}{2}$, 不过对于 $x = 1$ 处满足 $f(z) - f(1) \geq g(z - 1)$, 当 $z \notin [0, 1]$ 时 $f(z) = +\infty$, 显然因为 z 有限, 所以就这部分的 z 而言 g 无论取多少都是满足的。而对于 $[0, 1]$ 部分的 z 结合原来的导数走。因此在 $x = 1$ 点的次微分应该是 $[-\frac{1}{2}, +\infty)$ 。对于 $x = 0$ 在那一点我们发现切线斜率趋于负无穷, 在其余的点 $f(z) - f(x)$ 中 $f(x)$ 总是 $+\infty$, 因此此时无论 z 处在找那个位置, 都无法比较, 所以除了 $(0, 1]$ 区间之外的点的次微分都是空集。综上

$$\partial f(x) = \begin{cases} -\frac{1}{2\sqrt{x}} & x \in (0, 1) \\ [-\frac{1}{2}, +\infty) & x = 1 \\ \emptyset & \text{else} \end{cases}$$

习题 2.4.2. 求 $f(x) = e^{|x|}$ 的次微分 ∂f 以及 f 的共轭函数的次微分。我们不难看出在原点不可导, 余下点都按导数走就行。 $f(x)$ 的左导数是 -1 而右导数是 1 , 所以 f 的次微分是

$$\partial f = \begin{cases} -e^{-x} & x < 0 \\ [-1, 1] & x = 0 \\ e^x & x > 0 \end{cases}$$

f 的共轭函数是

$$f^*(y) = \sup_{x \in \mathbb{R}} \{xy - e^{|x|}\}$$

可以结合过原点的直线, 旋转让斜率不同, 估算直线到函数铅垂线的距离最小值就行。当斜率在 $[-1, 1]$ 之间的时候, 因为 $e^{|x|}$ 没有斜率绝对值大于 1 的, 所以最小的距离就是 $(0, 1)$ 在原点与 $(0, 0)$ 之间, 因此此时共轭函数值是负距离 -1 。而到了斜率在此外的时候就可以考虑切线, 在

$x = \pm \log y$ 不难发现是两个切点。从而我们得到

$$f^* = \begin{cases} y \log y - y & y > 1 \\ -1 & -1 \leq y \leq 1 \\ -y \log(-y) + y & y < -1 \end{cases}$$

对应求一下次微分，我们关注在 -1 的左导数和 1 的右导数都是 0 。所以说到底其实这个函数是可导的。不过我们这么写

$$\partial f^* = \begin{cases} \log y & y > 1 \\ 0 & -1 \leq y \leq 1 \\ -\log(-y) & y < -1 \end{cases}$$

其实这个次微分是连续唯一的。

习题 2.4.3. 求函数 $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|$ 的次微分。注意到 $\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}$ ，也就是

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \left(\frac{x_1}{\|\mathbf{x}\|}, \dots, \frac{x_n}{\|\mathbf{x}\|} \right)$$

当 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ 的时候 $f(\mathbf{x})$ 可微，因此次微分就是 $\nabla f(\mathbf{x})$ 。当 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 的时候按定义

$$f(\mathbf{z}) \geq f(\mathbf{0}) + \mathbf{g}^T(\mathbf{z} - \mathbf{0}) \Rightarrow \mathbf{g}^T \mathbf{z} \leq \|\mathbf{z}\|$$

这不难看出 $\mathbf{g}^T \mathbf{z} \leq \|\mathbf{g}\| \|\mathbf{z}\|$ ，满足该条件的 \mathbf{g} 应该是单位闭球的集合，所以次梯度就是

$$\partial f(\mathbf{x}) = \begin{cases} \nabla f(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|} & \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \\ B(\mathbf{0}, 1) & \mathbf{x} = \mathbf{0} \end{cases}$$

习题 2.4.4. 求函数 $f(x) = \begin{cases} |x| - 2\sqrt{1-x} & -3 \leq x \leq 1 \\ +\infty & \text{else} \end{cases}$ 的次微分。展开就是

$$f(x) = \begin{cases} -x - 2\sqrt{1-x} & -3 \leq x \leq 0 \\ x - 2\sqrt{1-x} & 0 \leq x \leq 1 \\ +\infty & \text{else} \end{cases}$$

我们把 $f(x)$ 的前两段求导分别是 $-1 + \frac{1}{\sqrt{1-x}}$ 和 $1 + \frac{1}{\sqrt{1-x}}$ 。注意到在 -3 处左导数是 $-\infty$,

右导数是 $-\frac{1}{2}$, 在 0 处的左导数是 0, 右导数是 2, 而在 1 处的左右导数是 $+\infty$ 。所以次微分是

$$\partial f(x) = \begin{cases} 1 + \frac{1}{\sqrt{1-x}} & 0 < x < 1 \\ -1 + \frac{1}{\sqrt{1-x}} & -3 < x < 0 \\ (-\infty, -\frac{1}{2}] & x = -3 \\ [0, 2] & x = 0 \\ \emptyset & \text{else} \end{cases}$$

$\text{dom}(f)$ 的边界处次微分是空集或无界的。除此之外我们还要知道一个示性函数

$$\delta_C(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \mathbf{x} \in C \\ +\infty & \text{else} \end{cases}$$

当 $\mathbf{x} \notin C$ 时 $\partial\delta_C(\mathbf{x}) = \emptyset$ 。当 $\mathbf{x} \in C$ 时, \mathbf{g} 是示性函数的次梯度, 当满足

$$\delta_C(\mathbf{z}) \geq \delta_C(\mathbf{x}) + \mathbf{g}^T(\mathbf{z} - \mathbf{x}), \forall \mathbf{z} \in C$$

这等价于

$$\mathbf{g}^T(\mathbf{z} - \mathbf{x}) \leq 0, \forall \mathbf{z} \in C$$

这其实就是示性函数的次微分

$$\partial\delta_C(\mathbf{x}) = \{\mathbf{g} | \mathbf{g}^T(\mathbf{z} - \mathbf{x}) \leq 0, \forall \mathbf{z} \in C\}$$

这是集合在 C 在 \mathbf{x} 处的法锥, 记为 $N_C(\mathbf{x})$ 。我们都知道每个可微的函数在可微点是存在一个切平面, 对次微分而言的不可微点, 其支撑超平面的法向量在一个范围之内, 其实这个范围之内是个锥, 因此叫法锥。另外我们回忆一下 C 集合的极锥定义是 $\{\mathbf{y} | \mathbf{y}^T \mathbf{x} \leq 0, \forall \mathbf{x} \in C\}$, 因此还可以看出, 法锥是 $C - \{\mathbf{x}\}$ 的极锥。

下面说几个重要的次梯度定理

定理 2.4.1. 如果 f 在 \mathbf{x} 点是可微的, 那么 $\nabla f(\mathbf{x})$ 就是在该点唯一的次梯度。因为

$$f(\mathbf{x}) + \alpha \mathbf{g}^T \mathbf{d} \leq f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}) + \alpha \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{d} + o(|\alpha|)$$

所以取 $\mathbf{d} = \nabla f(\mathbf{x}) - \mathbf{g}$ 有

$$(\mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{g})^T (\mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{g}) = \|\mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{g}\|_2^2 \leq -\frac{o(|\alpha|)}{\alpha}$$

令 $\alpha \rightarrow 0$ 就可得到 $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{g}$

我们知道一个函数如果一阶可微, 那么极小点 (局部或全局) 的必要条件是 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$ 。有了次微分的定义, 我们可以找到凸函数的一个充要条件

定理 2.4.2. 凸函数最优性充要条件: $f(x): C \rightarrow \mathbb{R}$ 是凸函数, $\forall x \in \mathbb{R}^n$, 满足 $\partial f(x)$ 非空。则 x 是局部极小值点的充要条件是 $0 \in \partial f(x)$

证明. 凸函数的局部极小值就是全局极小值。极小值点的定义 x^* 是 $\forall z \in C, f(x^*) \leq f(z)$ 。不难看出

$$\forall z \in C, f(x^*) \leq f(z) \Leftrightarrow f(z) \geq f(x^*) = f(x^*) + 0^T(z - x^*), \forall z \in C \Leftrightarrow 0 \in \partial f(x^*)$$

是正反推。因此充分性和必要性都得证。 \square

我们现在问一个问题, 一个函数的共轭函数次微分是什么性质? 我们结合共轭函数的定义

$$f^*(y) = \sup_x \{y^T x - f(x)\} \Rightarrow x^T y \leq f(x) + f^*(y), \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

这个不等式很关键。如果取等, 那说明 $f^*(y) = \sup_x \{x^T y - f(x)\}$, 取等时的 x 和 y 与 f, f^* 的次微分有重要的联系。这个称为共轭次梯度定理, 非常关键

定理 2.4.3. 如果 f 是正常凸函数, f^* 是其共轭函数, 给定 (x, y) , 则如下两个关系等价:

$$1. x^T y = f(x) + f^*(y)$$

$$2. y \in \partial f(x)$$

如 f 是闭函数, 那么还会和 $x \in \partial f^*(y)$ 等价。

证明. 这是因为如果 x 就是取到上确界的那个向量也就有

$$y^T x - f(x) = f^*(y) = \sup_z \{y^T z - f(z)\}$$

从而

$$f(z) - y^T z \geq f(x) - y^T x \Rightarrow f(z) \geq f(x) + y^T(z - x)$$

这就说明 $y \in \partial f(x)$, 反过来也一样, 所以 1 和 2 等价。如果 f 是闭的函数, 那 $f = f^{**}$, 我们整体再一次取共轭

$$y^T x - f^*(x) = f^{**}(y) = \sup_z \{y^T z - f^*(z)\} = f(y)$$

相当于下面把 f 和 f^* 交换一下, 也就是 $x \in \partial f^*(y)$ \square

由此不难得到的推论

1. f^* 在 $y \in \text{int}(\text{dom}(f^*))$ 处可微当且仅当存在唯一 x 取到

$$\sup_z \{y^T z - f(z)\}$$

的上确界。这是因为取到上确界的唯一也就意味着次梯度唯一, 一旦唯一那就是那一点的唯一微分, 因此就可微了

2. f 的极小值点集合

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} \{\mathbf{x}^T \mathbf{y} - f(\mathbf{x})\} = \partial f^*(\mathbf{y})$$

共轭次梯度定理我们有如下应用：我们定义 X 集合，在 \mathbf{y} 处的支撑函数是

$$\sigma_X(\mathbf{y}) = \sup_{\mathbf{x} \in X} \{\mathbf{y}^T \mathbf{x}\}$$

为了计算次梯度，我们构造函数

$$r(\mathbf{z}) = \sigma_X(\mathbf{z} + \mathbf{y})$$

因此 $\partial \sigma_X(\mathbf{y}) = \partial r(\mathbf{0})$ 。 r 的共轭函数是

$$r^*(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}) - \mathbf{y}^T \mathbf{x}$$

δ 是 $\operatorname{cl}(\operatorname{conv}(X))$ 的示性函数。在共轭次梯度定理推论带入 $r = f^*$ 则 $\partial r(\mathbf{0})$ 是 $\delta(\mathbf{x}) - \mathbf{y}^T \mathbf{x}$ 的极小点的集合。或者 $\partial \sigma_{\bar{C}}(\mathbf{y})$ 是 $\mathbf{y}^T \mathbf{x}$ 在 $\mathbf{x} \in \operatorname{cl}(\operatorname{conv}(X))$ 的极大值点的集合。

实值多面体函数的次微分，我们考虑

$$f(\mathbf{x}) = \max_{1 \leq i \leq r} \{\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + b_i\}$$

其中 $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n, b_i \in \mathbb{R}$ 。我们定义 \mathbf{x} 的有效指标集

$$A_{\mathbf{x}} = \{j | \mathbf{a}_j^T \mathbf{x} + b_j = f(\mathbf{x})\}$$

定义函数

$$r(\mathbf{x}) = \max\{\mathbf{a}_j^T \mathbf{x} | j \in A_{\mathbf{x}}\}$$

是集合 $\{\mathbf{a}_j | j \in A_{\mathbf{x}}\}$ 的支撑函数。可以看出其上镜图是将 $\operatorname{epi}(f)$ 经平移 $-(\mathbf{x}, f(\mathbf{x}))$ 得到。我们画图可看出

$$\partial f(\mathbf{x}) = \partial r(\mathbf{0})$$

从而

$$\partial f(\mathbf{x}) = \operatorname{conv}(\{\mathbf{a}_j | j \in A_{\mathbf{x}}\})$$

此外，对次微分的运算含有如下性质

定理 2.4.4. 链式法则：假设 f 是凸函数，矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ，如果 $F(\mathbf{x}) = f(\mathbf{A}\mathbf{x})$ ，则

$$1. \mathbf{A}^T \partial f(\mathbf{A}\mathbf{x}) \subseteq \partial F(\mathbf{x}) = \partial f(\mathbf{A}\mathbf{x})$$

2. 如果 f 是多面体函数，或者是 \mathbf{A} 的值域包含 $\operatorname{dom}(f)$ 的一个内点，则上面的包含关系可以取到等号

证明. 如果 $\mathbf{x} \notin \operatorname{dom}(f)$ ，则 $\partial F(\mathbf{x}) = \mathbf{A}^T \partial f(\mathbf{A}\mathbf{x}) = \emptyset$ 。当 $\mathbf{x} \in \operatorname{dom}(f)$ 时则如果 $\mathbf{d} \in \mathbf{A}^T \partial f(\mathbf{A}\mathbf{x})$ ，

那满足 $\exists \mathbf{g} \in \partial f(\mathbf{Ax})$ 使得 $\mathbf{d} = \mathbf{A}^T \mathbf{g}$, 从而 $\forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$ 有

$$\begin{aligned} F(\mathbf{z}) - F(\mathbf{x}) - (\mathbf{z} - \mathbf{x})^T \mathbf{d} &= f(\mathbf{Az}) - f(\mathbf{Ax}) - (\mathbf{z} - \mathbf{x})^T \mathbf{A}^T \mathbf{g} \\ &= f(\mathbf{Az}) - f(\mathbf{Ax}) - (\mathbf{Az} - \mathbf{Ax})^T \mathbf{g} \geq 0 \end{aligned}$$

说明 $\mathbf{d} \in \partial F(\mathbf{x})$ 。所以 $\mathbf{A}^T \partial f(\mathbf{Ax}) \subseteq \partial F(\mathbf{x})$ 。如果反过来成立, 当 $\mathbf{d} \in \partial F(\mathbf{x})$ 的时候, 得到

$$F(\mathbf{z}) \geq F(\mathbf{x}) + (\mathbf{z} - \mathbf{x})^T \mathbf{d} \geq 0, \forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$$

也就是

$$f(\mathbf{Az}) - \mathbf{z}^T \mathbf{d} \geq f(\mathbf{Ax}) - \mathbf{x}^T \mathbf{d}$$

说明 $(\mathbf{Ax}, \mathbf{x})$ 是下面问题的最优解

$$\begin{cases} \min_{\mathbf{y}, \mathbf{z}} & f(\mathbf{y}) - \mathbf{z}^T \mathbf{d} \\ \text{s.t.} & \mathbf{y} \in \text{dom}(f), \mathbf{y} = \mathbf{Az} \end{cases}$$

如果 f 是多面体, 则 f 的有效定义域又是多面体, 则结合多面体凸优化的问题的强对偶定理, 可得强对偶关系成立且对偶的最优解存在或者如果 \mathbf{A} 的值域包含了 $\text{dom}(f)$ 相对内部的点, 则结合线性等式约束凸优化问题的强对偶关系得到强对偶关系成立。

也就是说题中反过来的条件都是暗示了强对偶关系成立。且都存在对偶最优解使得

$$(\mathbf{Ax}, \mathbf{x}) \in \underset{\mathbf{y}, \mathbf{z}}{\text{argmin}} \{f(\mathbf{y}) - \mathbf{z}^T \mathbf{d} + \lambda^T (\mathbf{Az} - \mathbf{y})\}$$

注意到对 \mathbf{z} 是无约束的, 所以 $\nabla_{\mathbf{z}} L(\mathbf{y}, \mathbf{z}, \lambda) = 0$, 对 \mathbf{z} 求梯度为 0 得到 $\mathbf{A}^T \lambda = \mathbf{d}$ 。从而把 \mathbf{d} 代入回上面有

$$\mathbf{Ax} \in \underset{\mathbf{y}}{\text{argmin}} \{f(\mathbf{y}) - \lambda^T \mathbf{y}\}$$

因此可也得到

$$f(\mathbf{y}) - \lambda^T \mathbf{y} \geq f(\mathbf{Ax}) - \lambda^T \mathbf{Ax} \Rightarrow f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{Ax}) + \lambda^T (\mathbf{y} - \mathbf{Ax}), \forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$$

这就说明 $\lambda \in \partial f(\mathbf{Ax})$, 也就是 $\mathbf{d} = \mathbf{A}^T \lambda \in \mathbf{A}^T \partial f(\mathbf{Ax})$ 得证。□

对于函数和的次微分有

定理 2.4.5. f_i 是凸函数, $1 \leq i \leq m$, 如果 $F = \sum_{i=1}^n f_i$, 则有

1. $\sum_{i=1}^m \partial f_i(\mathbf{x}) \subseteq \partial F(\mathbf{x})$
2. $\bigcap_{i=1}^m \text{ri}(\text{dom}(f_i)) \neq \emptyset$, 则上面的包含关系可以取等

类似上面只要把 $\mathbf{Ax} = (\mathbf{x}, \mathbf{x}, \dots, \mathbf{x})$ 也就是 m 个 \mathbf{x} 拼在一起就可以。

下面我们讨论一下次微分和方向导数的关系：我们假设在 \mathbf{x} 点处，沿着方向 \mathbf{d} 的导数是

$$f'(\mathbf{x}, \mathbf{d}) = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) - f(\mathbf{x})}{\alpha}$$

这里 α 是非增趋于 0 的。也可以写为

$$f'(\mathbf{x}, \mathbf{d}) = \inf_{\alpha > 0} \frac{f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) - f(\mathbf{x})}{\alpha}$$

定理 2.4.6. 我们定义 $(\text{cl } f')(\mathbf{x}; \cdot)$ 是方向导数 $f'(\mathbf{x}; \cdot)$ 的闭包，则我们成立如下结论

1. 如果 $\mathbf{x} \in \text{dom}(f)$ 且 ∂f 非空，则 $(\text{cl } f')(\mathbf{x}; \cdot)$ 是 $\partial f(\mathbf{x})$ 的支撑函数。
2. 如果 $\mathbf{x} \in \text{ri}(\text{dom}(f))$ ，则 $f'(\mathbf{x}; \cdot)$ 是闭函数，且是 $\partial f(\mathbf{x})$ 的支撑函数

证明. 注意到 $f'(\mathbf{x}; \cdot)$ 的共轭函数是

$$\delta(\mathbf{y}) = \sup_{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n} \{\mathbf{d}^T \mathbf{y} - f'(\mathbf{x}; \mathbf{d})\}$$

结合方向导数的下确界的表达公式我们得到

$$\forall \gamma > 0, f'(\mathbf{x}; \gamma \mathbf{d}) = \gamma f'(\mathbf{x}; \mathbf{d})$$

从而

$$\gamma \delta(\mathbf{y}) = \sup_{\mathbf{d}} \{\gamma \mathbf{d}^T \mathbf{y} - \gamma f'(\mathbf{x}; \mathbf{d})\} = \sup_{\mathbf{d}} \{\gamma \mathbf{d}^T \mathbf{y} - f'(\mathbf{x}; \gamma \mathbf{d})\}$$

所以 $\delta(\mathbf{y}) = \gamma \delta(\mathbf{y})$ ，从而 δ 函数值只有 0 或者 $+\infty$ ，是一个集合的示性函数。该集合定义为

$$\begin{aligned} Y &= \{\mathbf{y} | \delta(\mathbf{y}) \leq 0\} \\ &= \{\mathbf{y} | \sup_{\mathbf{d}} \{\mathbf{d}^T \mathbf{y} - f'(\mathbf{x}; \mathbf{d})\} \leq 0\} \\ &= \{\mathbf{y} | \mathbf{d}^T \mathbf{y} \leq f'(\mathbf{x}; \mathbf{d}), \forall \mathbf{d}\} \end{aligned}$$

结合前面的结论有 $Y = \partial f(\mathbf{x})$ 。这里我们就得到凸函数的共轭函数恰好就是次微分 $\partial f(\mathbf{x})$ 的示性函数。结合共轭定理， $f'(\mathbf{x}; \cdot)$ 也是正常函数。结合闭凸集的示性函数和支撑函数之间的共轭性，就得到 $(\text{cl } f')(\mathbf{x}; \cdot)$ 是次微分 $\partial f(\mathbf{x})$ 的支撑函数。□

习题 2.4.5. 集合 $C = \{\mathbf{x} | \|\mathbf{x}\|_2 \leq 1\}$ ，求其支撑函数是

$$\sigma_C(\mathbf{y}) = \sup_{\|\mathbf{x}\|_2 \leq 1} \{\mathbf{y}^T \mathbf{x} \mid \frac{\mathbf{y}^T \mathbf{x} \leq \|\mathbf{y}\|_2 \|\mathbf{x}\|_2 \leq \|\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2 \leq 1} \leq \|\mathbf{y}\|_2$$

且在 $\mathbf{x} = \frac{\mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|_2}$ 时可以取等。所以 $\sigma_C(\mathbf{y}) = \|\mathbf{y}\|_2$

习题 2.4.6. 集合

$$C = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \sum_{i=1}^n x_i = 1, x_i \geq 0 \right\}$$

的支撑函数我们知道

$$\sigma_C(\mathbf{y}) = \sup_{\mathbf{x} \in C} \{\mathbf{x}^T \mathbf{y}\} = \sup_{\|\mathbf{x}\|_1=1} \left\{ \sum_{i=1}^n x_i y_i \right\} \leq \max_{1 \leq i \leq n} \{y_i\} \cdot \sup_{\|\mathbf{x}\|_1=1} \sum_{i=1}^n x_i = \max_{1 \leq i \leq n} \{y_i\}$$

假设 $y_i = \max\{y_i\}_{i=1}^n$, 则在 $\mathbf{x} = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ 即第 i 个分量取 1 余下取 0 时取到等号。所以 $\sigma_C(\mathbf{y}) = \max_{1 \leq i \leq n} \{y_i\} = \|\mathbf{y}\|_\infty$ (当 y_i 全部小于 0 时为 0)

习题 2.4.7. 集合

$$C = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, |x_i| \leq 1, 1 \leq i \leq n\}$$

的支撑函数我们知道

$$\sigma_C(\mathbf{y}) = \sup_{\mathbf{x} \in C} \{\mathbf{x}^T \mathbf{y}\} = \sup_{\|\mathbf{x}\|_\infty \leq 1} \left\{ \sum_{i=1}^n x_i y_i \right\} \leq \sum_{i=1}^n |y_i|$$

且在 $\mathbf{x} = (\text{sgn}(y_1), \dots, \text{sgn}(y_n))$ 时取到等号。所以 $\sigma_C(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n |y_i| = \|\mathbf{y}\|_1$

习题 2.4.8. 求证, 一个函数的共轭函数可以由其上镜图的支撑函数表示, 也就是 $f^*(\mathbf{y}) = \sigma_{\text{epi}(f)}(\mathbf{y}, -1)$

证明. 这是因为

$$\sigma_{\text{epi}(f)}(\mathbf{y}, -1) = \sup_{(\mathbf{x}, w) \in \text{epi}(f)} \{\mathbf{y}^T \mathbf{x} - w\} = \sup_{f(\mathbf{x}) \leq w} \{\mathbf{y}^T \mathbf{x} - w\} = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\mathbf{y}^T \mathbf{x} - f(\mathbf{x})\} = f^*(\mathbf{y})$$

故成立 □

习题 2.4.9. 求证: 一个凸函数 f , f^* 是其共轭函数, 则 $\text{dom}(f)$ 的支撑函数是 f^* 的回收函数。

证明. 共轭函数的定义是

$$f^*(\mathbf{y}) = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\mathbf{x}^T \mathbf{y} - f(\mathbf{x})\}$$

我们考虑函数 $h_{(\mathbf{x}, w)}(\mathbf{y}) = \mathbf{x}^T \mathbf{y} - w$, 其中 $(\mathbf{x}, w) \in \text{epi}(f^*)$, 我们就注意到共轭函数 f^* 是 $h_{(\mathbf{x}, w)}$ 关于 (\mathbf{x}, w) 在上镜图中逐点取上确界。 $\text{epi}(f^*)$ 是 $h_{(\mathbf{x}, w)}(\mathbf{y})$ 的所有上镜图的交集, 也就是说

$$\text{epi}(f^*) = \bigcap_{(\mathbf{x}, w) \in \text{epi}(f^*)} \text{epi}(h_{(\mathbf{x}, w)})$$

结合回收锥定理, $\text{epi}(f^*)$ 的回收锥是所有的仿射函数 $h_{(\mathbf{x}, w)}(\mathbf{y})$ 上镜图的回收锥的交集。又因为 $h_{(\mathbf{x}, w)}(\mathbf{y})$ 的上镜图是

$$\text{epi}(h_{(\mathbf{x}, w)}) = \{(\mathbf{y}, u) \mid \mathbf{x}^T \mathbf{y} - w \leq u\}$$

其回收锥是

$$R_{\text{epi}(h_{(\mathbf{x}, w)})} = \{(\mathbf{y}, u) \mid \mathbf{x}^T \mathbf{y} \leq u\}$$

因此我们得到

$$R_{\text{epi}(f^*)} = \bigcap_{\mathbf{x} \in \text{dom}(f^*)} \{(\mathbf{y}, u) \mid \mathbf{x}^T \mathbf{y} \leq u\}$$

这里结合了凸函数的回收锥性质, 因为 $R_{\text{epi}(f^*)}$ 是 f^* 的回收函数 r_{f^*} 的上镜图, 所以就有

$$r_{f^*}(\mathbf{y}) = \sup_{\mathbf{x} \in \text{dom}(f)} \{\mathbf{x}^T \mathbf{y}\}$$

右侧是 $\text{dom}(f)$ 支撑函数的定义, 所以我们得到 f^* 的回收函数是 $\text{dom}(f)$ 的支撑函数。 \square

习题 2.4.10. 已知 f 是 $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 的凸函数, $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, $\phi(t) = f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y})$, 求证

$$\partial\phi(t) = \{(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{d} \mid \mathbf{d} \in \partial f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y})\}$$

证明. 如果 $\mathbf{d} \in \partial f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y})$, 则

$$\phi(a) - \phi(t) - (a-t)(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{d} = f(a\mathbf{x} + (1-a)\mathbf{y}) - f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}) - (a-t)(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{d}$$

按照 $\partial f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y})$ 的定义, 则右端应该大于等于 0, 所以

$$\phi(a) \geq \phi(t) + (a-t)(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{d}$$

说明 $(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{d} \in \partial\phi(t)$ 。下面证明反过来也是成立的。

假设 $g \in \partial\phi(t)$, 则

$$\forall a, \phi(a) \geq \phi(t) + (a-t)g$$

也就是

$$\forall a, f(a\mathbf{x} + (1-a)\mathbf{y}) - ag \geq f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}) - tg$$

说明 $(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}, t)$ 是下面问题的最优解

$$\begin{cases} \min_{\mathbf{z}, a} & f(\mathbf{z}) - ag \\ \text{s.t.} & \mathbf{z} \in \text{dom}(f), \mathbf{z} = a\mathbf{x} + (1-a)\mathbf{y} \end{cases}$$

结合线性等式的约束凸优化问题可得, 强对偶关系成立, 且至少存在一个对偶最优的 $\boldsymbol{\lambda}$ 满足

$$(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}, t) \in \underset{\mathbf{z}, a}{\text{argmin}} \{f(\mathbf{z}) - ag + \boldsymbol{\lambda}^T(a\mathbf{x} + (1-a)\mathbf{y} - \mathbf{z})\}$$

而上面的优化问题对 a 是无约束的。我们对 a 极小化, 也就是 $\nabla_a L(\mathbf{z}, a, \boldsymbol{\lambda}) = 0$, 得到 $-g + \boldsymbol{\lambda}^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0 \Rightarrow g = \boldsymbol{\lambda}^T(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ 。我们把这个 g 带入到上面的式子就是

$$t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y} \in \underset{\mathbf{z}}{\text{argmin}} \{f(\mathbf{z}) + \boldsymbol{\lambda}^T(\mathbf{y} - \mathbf{z})\}$$

另一边对 $t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}$ 结合 argmin 的定义我们还有

$$f(\mathbf{z}) + \boldsymbol{\lambda}^T(\mathbf{y} - \mathbf{z}) \geq f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{y} - \boldsymbol{\lambda}^T(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y})$$

从而得到

$$f(\mathbf{z}) \geq f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}) + \boldsymbol{\lambda}^T(\mathbf{z} - (t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}))$$

这就说明 $\boldsymbol{\lambda} \in \partial f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y})$ 。结合刚才对于 a 任意性的无约束优化的 $g = \boldsymbol{\lambda}^T(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ 从而

$$g = \boldsymbol{\lambda}^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = (\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \boldsymbol{\lambda}, g \in \{(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T \mathbf{d} \mid \mathbf{d} \in \partial f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y})\}$$

从而反过来也成立, 故结论得证 □

习题 2.4.11. 考虑极小化下面的问题

$$\min_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x})$$

其中 f 是凸函数, 且 $X = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \leq b_i, 1 \leq i \leq r\}$ 。求证: 当 \mathbf{x}^* 是最优解, 当且仅当满足

$$1. \mu_i^* \geq 0, \text{ 且 } \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* < b_i \text{ 时的 } \mu_i^* = 0$$

$$2. \mathbf{0} \in \partial f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^r \mu_i^* \mathbf{a}_i$$

证明. 拉格朗日对偶问题是

$$\max_{\boldsymbol{\mu} \geq \mathbf{0}} q(\boldsymbol{\mu}) = \max_{\boldsymbol{\mu} \geq \mathbf{0}} \inf_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{g}(\mathbf{x})\}$$

这里 $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = (\mathbf{a}_1^T \mathbf{x} - b_1, \dots, \mathbf{a}_r^T \mathbf{x} - b_r) \leq \mathbf{0}$ 可以看出这是线性不等式的约束优化问题, 结合对偶定理得到此时强对偶满足, $q^* = f^*$, 且对偶解存在对应的 $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}^*$ 。

如果 \mathbf{x}^* 是最优解, 对应到对偶那边的最优解是 $\boldsymbol{\mu}^*$, 则

$$f(\mathbf{x}^*) = q(\boldsymbol{\mu}^*) = \inf_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left\{ f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^r \mu_i^* g_i(\mathbf{x}) \right\} \leq f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^r \mu_i^* g_i(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x}^*)$$

最右边倒数第二个不等号是按照 \inf 的定义, 最后一个不等号是因为 $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}$ 且 $\boldsymbol{\mu} \geq \mathbf{0}$, 所以 $\mu_i^* g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ 。由此我们发现该式两端都是 $f(\mathbf{x}^*)$, 故必须所有不等号全部取等。所以不难看出

$$\sum_{i=1}^r \mu_i^* g_i(\mathbf{x}^*) = 0$$

又因为 $\mu_i^* \geq 0$, 而 $g_i(\mathbf{x}^*) \leq 0$, 所以满足 $\mu_i^* > 0$ 对应的 $g_i(\mathbf{x}^*)$ 必须等于 0, 所以当 $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x}^* - b_i < 0$ 时的 $\mu_i^* = 0$ 。而此时因为中间取等了, \mathbf{x}^* 还是如下问题最优解

$$\mathbf{x}^* \in \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left\{ f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^r \mu_i^* g_i(\mathbf{x}) \right\}$$

故 \mathbf{x}^* 是最优解时结合凸函数的最优性充要条件有

$$\mathbf{0} \in \partial \left(f + \sum_{i=1}^r \mu_i^* g_i \right) (\mathbf{x}^*) = \partial f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^r \mu_i^* \partial g_i(\mathbf{x}^*) = \partial f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^r \mu_i^* \mathbf{a}_i$$

这里第一个等号是因为 $\bigcap_{i=1}^r \text{ri}(\text{dom}(g_i)) \cap \text{ri}(\text{dom}(f)) = \mathbb{R}^n$ 非空, 则次微分可加性成立。

反过来, 假设 μ^* 是对偶问题最优解, 则我们结合上面

$$q(\mu^*) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ f(x) + \sum_{i=1}^r \mu_i^* g_i(x) \right\} \leq f(x^*) + \sum_{i=1}^r \mu_i^* g_i(x^*) \leq f(x^*)$$

当满足 $0 \in \partial f(x^*) + \mu^T g(x^*)$ 时只要知道充要条件可以得到 x^* 是 $f + \mu^T g$ 的极小值点, 于是第一个不等号是取等的。又知道 $g_i(x) \leq 0, \mu_i^* \geq 0$ 且在 $g_i(x) < 0$ 的时候 $\mu_i^* = 0$, 所以始终有 $\mu_i^* g_i(x) = 0$, 所以第二个不等号也是取等的, 所以

$$q(\mu^*) = f(x^*)$$

结合强对偶条件, 所以 x^* 是 f 的极小值点, 也就是最优解。 \square

Remark: 这是我们熟悉的 KKT 条件。其相当于拉格朗日乘子法的推广, 确保所有的边界约束都是有效的。

2.5 切锥与法锥

我们在最优化的问题中会经常讨论一些可行方向和下降方向之间的关系。假设 x^* 是函数 f 在 X 凸集上的极小值点, 那么 x^* 处最优需要满足必要提哦案件

$$\nabla f(x^*)^T (x - x^*) \geq 0, \forall x \in X$$

假设 f 是光滑的。意味着 f 沿着从 x^* 到 X 中任一个其他向量 x 的方向的斜率是非负的。进一步, 如果 X 不一定凸, 则满足

$$\nabla f(x^*)^T y \geq 0$$

这里 y 是满足 $x^* + \alpha y \in X, \alpha$ 在一定的小范围之内。我们定义可行方向如下: 假设 $X \subseteq \mathbb{R}^n, x \in X$, 如果存在 β 使得 $\forall y \in \mathbb{R}^n, \forall \alpha \in [0, \beta]$ 都有

$$x + \alpha y \in X, \forall x \in X, y \in \mathbb{R}^n, \forall \alpha \in [0, \beta]$$

则说 y 是集合 X 在 x 处的可行方向。 x 点处所有的可行方向集称为可行方向集, 记作 $F_X(x)$ 。 $F_X(x)$ 是一个锥且包含原点, 因为零方向当然可行, 且按照定义延伸 y 的方向延伸量比其小的都算在可行方向里。这里我们注意 X 是凸集时, $\alpha > 0, y \in X$, 满足

$$\alpha(y - x) \in F_X(x)$$

我们定义切锥和法锥如下:

定理 2.5.1. 假设 X 是 \mathbb{R}^n 中子集, $x \in X$, 考虑 $y \in \mathbb{R}^n$, 如果 $y = 0$ 或者 $y \neq 0$ 且存在序列

$\{x_k\} \subseteq X$, 满足 $x_k \neq x, \forall k$, 以及

$$x_k \rightarrow x, \frac{x_k - x}{\|x_k - x\|} \rightarrow \frac{y}{\|y\|}$$

则称 y 是 X 在 x 处的切方向。集合 X 在 x 处所有切方向构成的集合称为 X 在 x 的切锥, 也记为 $T_X(x)$

可能看不太懂切锥和法锥, 不过这里我再给出切锥的一个等价定义, 那就是平移到原点后的锥的闭包, 也就是如果 C 是非空凸集, 则

$$T_C(x) = \begin{cases} \emptyset & x \notin C \\ \text{cl}(\text{cone}(C - x)) & x \in C \end{cases}$$

相当于我们把集合中的 x 平移到原点, 然后对其求锥包再闭包。

习题 2.5.1. 我们分析集合 $X = \{(x_1, x_2) | x_2 \geq (x_1 + 1)^2, x_2 \geq (x_1 - 1)^2\}$ 的切锥。我们对 $y = (x+1)^2, y = (x-1)^2$ 两个函数在 0 处求导可以得到是 ± 2 。我们发现经过 $(0, 1)$ 斜率为 ± 2 的两条直线构成的锥上面部分, 包含了整个 X 集合。从而不难推断出 $T_X((0, 1)) = \{(x, y) | y \geq 2|x|\}$; 如果在 $y = (x-1)^2$ 左段的抛物线上则是 $y \geq -2x$ 直线的右半边为切锥, 如果在 $y = (x+1)^2$ 右段的抛物线上则是 $y \geq 2x$ 直线的左半边为切锥。如果在凸集的内点则为整个 \mathbb{R}^2 , 因此

$$T_X = \begin{cases} \mathbb{R}^2 & (x, y) \in X^\circ \\ \{(x, y) | y \geq 2x\} & y = (x+1)^2, x \neq 0 \\ \{(x, y) | y \geq -2x\} & y = (x-1)^2, x \neq 0 \\ \{(x, y) | y \geq 2|x|\} & (x, y) = (0, 1) \end{cases}$$

习题 2.5.2. 考虑集合

$$C = \left\{ (x_1, x_2) \mid x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_2 \leq x_1 + 1, x_2 \geq \frac{1}{2}x_1^2 \right\}$$

我们考虑 $(0, 0)$ 点的切锥, 注意到该区域是一条斜率为 1 的直线、一个顶点在原点的抛物线、一条竖直的线段围成。由于抛物线在原点切线就是 x 轴, 从而不难看出 C 在 $(0, 1)$ 的切锥, 就是整个含有 x, y 正半轴的第一象限, 也就是

$$T_C((0, 0)) = \{(x, y) \mid x \geq 0, y \geq 0\}$$

其法锥就是该切锥的极锥, 注意到是凸集, 因此

$$N_C((0, 0)) = \{(x, y) \mid x \leq 0, y \leq 0\}$$

再看 $(0, 1)$ 点, 我们把坐标系的原点平移到 $(0, 1)$ 后发现其切锥的两个边界一个是沿着 $y = x$ 斜率为 1 的方向, 另一个是沿着 y 轴的负方向, 因此该点的切锥, 应该是下面的第四象限加上第

一象限的一半中靠近 x 轴的一块 (含坐标轴和边界), 也就是

$$T_C((0,1)) = \{(x,y) \mid x \geq 0, y \leq x\}$$

对应的法锥就是边界向着反方向做垂线围成的区域, 是第二象限的一半中靠近 x 轴的一块 (含坐标轴和边界), 是

$$N_C(0,1) = \{(x,y) \mid x \leq 0, x+y \leq 0\}$$

实际上切方向还有一个等价定义。那就是如下:

定理 2.5.2. X 是 \mathbb{R}^n 的子集, $x \in X$, 如果 y 是切方向, 则当且仅当 $\exists \{x_n\} \subseteq X$, 以及 $\{\alpha_n\}$ 满足 $\alpha_n \rightarrow 0$, $\frac{x_n - x}{\alpha_n} \rightarrow y$

关于切锥和可行方向我们有关系

1. $T_X(x)$ 是闭锥, 也就是切锥都是锥且为闭集
2. $\text{cl}(F_X(x)) \subseteq T_X(x)$
3. 如果 X 是凸集, 则 $F_X(x), T_X(x)$ 是凸集, 且此时 $\text{cl}(F_X(x)) = T_X(x)$

证明.

1. 假设 $\{y_k\}$ 是 $T_X(x)$ 的序列, $y_k \rightarrow y$, 如果 $y = 0$ 显然, 当 $y \neq 0$ 的时候, 由切方向定义我们可以得到 $\forall k, \exists \{x_k^i\} \subseteq X$, 满足 $x_k^i \neq x$ 且

$$\lim_{i \rightarrow \infty} x_k^i = x, \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{x_k^i - x}{\|x_k^i - x\|} = \frac{y_k}{\|y_k\|}$$

这也就是

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \left\| \frac{x_k^i - x}{\|x_k^i - x\|} - \frac{y_k}{\|y_k\|} \right\| = 0$$

利用三角不等式有

$$\left\| \frac{x_k^i - x}{\|x_k^i - x\|} - \frac{y}{\|y\|} \right\| \leq \left\| \frac{x_k^i - x}{\|x_k^i - x\|} - \frac{y_k}{\|y_k\|} \right\| + \left\| \frac{y_k}{\|y_k\|} - \frac{y}{\|y\|} \right\|$$

右端第一项按上面趋于 0, 而第二项结合 $y_k \rightarrow y$ 的假设趋于 0, 所以说明

$$\lim_{i \rightarrow \infty} x_k^i = x, \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{x_k^i - x}{\|x_k^i - x\|} = \frac{y}{\|y\|}$$

所以 $y \in T_X(x)$, 这说明 $T_X(x)$ 是闭集, 也就是闭锥。

2. 可以结合上面的切方向的定义得到, 可行方向一定是切方向。因此 $F_X(x) \subseteq T_X(x)$, 因为 $T_X(x)$ 本身是闭集, 故两边取闭包就得到

$$\text{cl}(F_X(x)) \subseteq T_X(x)$$

3. 先证明 $F_X(\mathbf{x})$ 是凸集, 假设

$$\mathbf{y}_1 = \alpha_1(\mathbf{z}_1 - \mathbf{x}), \mathbf{y}_2 = \alpha_2(\mathbf{z}_2 - \mathbf{x})$$

是两个 $F_X(\mathbf{x})$ 中元素, 也就是 $\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2 \in X$, 则考虑凸组合

$$\begin{aligned} \gamma_1 \mathbf{y}_1 + \gamma_2 \mathbf{y}_2 &= \gamma_1 \alpha_1(\mathbf{z}_1 - \mathbf{x}) + \gamma_2 \alpha_2(\mathbf{z}_2 - \mathbf{x}) \\ &= (\gamma_1 \alpha_1 + \gamma_2 \alpha_2) \left(\frac{\gamma_1 \alpha_1}{\gamma_1 \alpha_1 + \gamma_2 \alpha_2} \mathbf{z}_1 + \frac{\gamma_2 \alpha_2}{\gamma_1 \alpha_1 + \gamma_2 \alpha_2} \mathbf{z}_2 - \mathbf{x} \right) \\ &= \alpha(\bar{\mathbf{z}} - \mathbf{x}) \end{aligned}$$

这里面 $\bar{\mathbf{z}}$ 是 $\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2$ 的凸组合, 当 X 是凸集时 $\bar{\mathbf{z}}$ 也在 X 中。这样我们就可以得到 $\gamma_1 \mathbf{y}_1 + \gamma_2 \mathbf{y}_2$ 也是一个 $\alpha(\mathbf{z} - \mathbf{x})$ 的形式。所以说明 $\gamma_1 \mathbf{y}_1 + \gamma_2 \mathbf{y}_2 \in F_X(\mathbf{x})$ 。故 $F_X(\mathbf{x})$ 是凸集。下面证明 $T_X(\mathbf{x}) \subseteq \text{cl}(F_X(\mathbf{x}))$ 。

假设 $\{\mathbf{x}_k\} \subseteq X, \alpha_k \rightarrow 0$ 且

$$\mathbf{y}_k = \frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}}{\alpha_k} \rightarrow \mathbf{y}$$

因为 X 是凸集, 所以 $\forall k$, 方向 \mathbf{y}_k 是 \mathbf{x} 处的可行方向, 因此 $\mathbf{y} \in \text{cl}(F_X(\mathbf{x}))$, 所以

$$T_X(\mathbf{x}) \subseteq \text{cl}(F_X(\mathbf{x}))$$

从而 $T_X(\mathbf{x}) = \text{cl}(F_X(\mathbf{x}))$, 进而因为凸集的闭包仍然凸集, 所以 $F_X(\mathbf{x})$ 是凸集, $T_X(\mathbf{x})$ 也是凸集。

□

刚才我们在说切锥, 下面说说法锥。假设 $X \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x} \in X, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$, 如果存在 $\{\mathbf{x}_k\} \subseteq X, \{\mathbf{z}_k\}$ 使得

$$\mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x} \quad \mathbf{z}_k \rightarrow \mathbf{z} \quad \mathbf{z}_k \in T_X(\mathbf{x}_k)^*, \quad \forall k$$

则 \mathbf{z} 是 X 在 \mathbf{x} 处的法向量, X 在 \mathbf{x} 处的所有法向量的集合称为 X 在 \mathbf{x} 点的法锥, 记为 $N_X(\mathbf{x})$ 。我们定义在 \mathbf{x} 如果满足

$$N_X(\mathbf{x}) = T_X(\mathbf{x})^*$$

则称为 X 在 \mathbf{x} 点是正则的, 或规范的。这里 $*$ 的记号表示极锥。

下面有一个切锥和法锥的关系非常重要

定理 2.5.3. 假设 X 是 \mathbb{R}^n 的非空凸子集, 则满足

1. $\forall \mathbf{x} \in X$ 满足

$$\mathbf{z} \in T_X(\mathbf{x})^* \Leftrightarrow \mathbf{z}^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \leq 0, \quad \forall \mathbf{y} \in X$$

2. X 在所有 $\mathbf{x} \in X$ 处是正则的, 且

$$T_X(\mathbf{x})^* = N_X(\mathbf{x}), T_X(\mathbf{x}) = N_X(\mathbf{x})^*$$

证明. 证明如下:

1. 如果对 $\forall \mathbf{y} \in X$, 有

$$F_X(\mathbf{x}) \subseteq T_X(\mathbf{x}), (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \in F_X(\mathbf{x}) \subseteq T_X(\mathbf{x})$$

如果 $\mathbf{z} \in T_X(\mathbf{x})^*$, 则满足 $\forall \mathbf{y} \in X, \mathbf{z}^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \leq 0$.

反过来如果 \mathbf{z} 满足 $\mathbf{z}^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \leq 0, \forall \mathbf{y} \in X$, 假设 $\mathbf{z} \notin T_X(\mathbf{x})$, 则 $\exists \mathbf{y}^* \in T_X(\mathbf{x})$ 满足

$$\mathbf{z}^T \mathbf{y}^* > 0$$

此时, 因为 $\text{cl}(F_X(\mathbf{x})) = T_X(\mathbf{x})$, 这是因为凸集, 则 $\exists \{\mathbf{y}_k\} \subseteq F_X(\mathbf{x})$ 且 $\mathbf{y}_k \rightarrow \mathbf{y}^*$, 则满足

$$\mathbf{y}_k = \alpha_k(\mathbf{x}_k - \mathbf{x})$$

$\alpha_k > 0, \mathbf{x}_k \in X$, 因为 $\mathbf{z}^T \mathbf{y}^* > 0$, 所以说明对充分大的 k , 必然有 $\alpha_k \mathbf{z}^T(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}) > 0$, 而这和假设 $\mathbf{z}^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \leq 0$ 是矛盾的. 所以 $\mathbf{z} \in T_X(\mathbf{x})^*$

2. 这是规范性的证明. 如果 $\mathbf{x} \in X, \mathbf{z} \in N_X(\mathbf{x})$, 存在序列 $\{\mathbf{x}_k\} \subseteq X, \{\mathbf{z}_k\}$ 满足

$$\mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x}, \mathbf{z}_k \rightarrow \mathbf{z}, \mathbf{z}_k \in T_X(\mathbf{x}_k)^*$$

结合上一个条件 $\mathbf{y} \in X$ 有

$$\mathbf{z}_k^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}_k) \leq 0$$

取极限有

$$\mathbf{z}^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \leq 0$$

所以 $\mathbf{z} \in T_X(\mathbf{x})^*$, 所以 $N_X(\mathbf{x}) \subseteq T_X(\mathbf{x})^*$ 成立. 而结合原有的 $T_X(\mathbf{x})^* \subseteq N_X(\mathbf{x})$, 从而

$$T_X(\mathbf{x})^* = N_X(\mathbf{x})$$

因为 \mathbf{x} 是凸集, 结合极锥定理, 又可得到

$$T_X(\mathbf{x}) = N_X(\mathbf{x})^*$$

□

习题 2.5.3. 假设 C_1, C_2 是 \mathbb{R}^n 中非空的凸子集, 求证

$$T_{C_1 \cap C_2}(\mathbf{x}) \subseteq T_{C_1}(\mathbf{x}) \cap T_{C_2}(\mathbf{x}), N_{C_1}(\mathbf{x}) + N_{C_2}(\mathbf{x}) \subseteq N_{C_1 \cap C_2}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in C_1 \cap C_2$$

证明. 如果 $\mathbf{y} \in T_{C_1 \cap C_2}(\mathbf{x})$, 则 $\exists \{\mathbf{x}_k\} \subseteq C_1 \cap C_2$ 且 $\mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x}, \alpha_k \rightarrow 0$ 满足 $\frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}}{\alpha_k} \rightarrow \mathbf{y}$. 因为 $\{\mathbf{x}_k\} \subseteq C_1$, 所以改成 $\mathbf{y} \in T_{C_1}(\mathbf{x})$ 也成立, 同样的改成 $\mathbf{y} \in T_{C_2}(\mathbf{x})$ 也成立, 所以 $\mathbf{y} \in T_{C_1}(\mathbf{x}) \cap T_{C_2}(\mathbf{x})$. 得证

如果 $\mathbf{y}_1 \in N_{C_1}(\mathbf{x}), \mathbf{y}_2 \in N_{C_2}(\mathbf{x})$, 则 $\exists \{\mathbf{y}_{1k}\} \rightarrow \mathbf{y}_1, \{\mathbf{y}_{2k}\} \rightarrow \mathbf{y}_2, \{\mathbf{x}_k\} \rightarrow \mathbf{x}$ 满足

$$\mathbf{y}_{1k} \in T_{C_1 \cap C_2}(\mathbf{x}_k)^*, \mathbf{y}_{2k} \in T_{C_1 \cap C_2}(\mathbf{x}_k)^*$$

结合极锥的定义, $\forall \mathbf{z} \in T_{C_1 \cap C_2}(\mathbf{x}_k)^*, \mathbf{y}_{1k}^T \mathbf{z} \leq 0, \mathbf{y}_{2k}^T \mathbf{z} \leq 0$, 则 $(\mathbf{y}_{1k} + \mathbf{y}_{2k})^T \mathbf{z} \leq 0$, 则 $\mathbf{y}_{1k} + \mathbf{y}_{2k} \in T_{C_1 \cap C_2}(\mathbf{x}_k)^* = N_{C_1 \cap C_2}(\mathbf{x}_k)$ 。又知道 $\mathbf{y}_{1k} \rightarrow \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_{2k} \rightarrow \mathbf{y}_2$, 所以 $k \rightarrow \infty$ 就可以得到

$$\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2 \in N_{C_1 \cap C_2}(\mathbf{x})$$

这里用到了凸集之交、和仍然是凸集。所以得证。 \square

习题 2.5.4. 设 X 是 \mathbb{R}^n 中的凸集, $\mathbf{x} \in X$, 证明 $T_X(\mathbf{x})$ 是子空间当且仅当 $N_X(\mathbf{x})$ 是子空间。

证明. 注意到 $T_X(\mathbf{x}), N_X(\mathbf{x})$ 都是锥, 所以当 $\mathbf{z} \in T_X(\mathbf{x})$ 有 $\alpha_1 \mathbf{z}, \alpha_2 \mathbf{z} \in T_X(\mathbf{x})$ 。当 $T_X(\mathbf{x})$ 是线性子空间时, α_1, α_2 可以取遍实数, 且 $\alpha_1 \mathbf{z} + \alpha_2 \mathbf{z} \in T_X(\mathbf{x})$ 。只要知道 $T_X(\mathbf{x}) = N_X(\mathbf{x})^*$, 所以 $\forall \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2 \in N_X(\mathbf{x})$ 满足

$$\mathbf{y}_1^T \alpha_1 \mathbf{z} \leq 0, \mathbf{y}_2^T \alpha_2 \mathbf{z} \leq 0$$

所以 $(\alpha_1 \mathbf{y}_1 + \alpha_2 \mathbf{y}_2)^T \mathbf{z} \leq 0$, 所以 $\alpha_1 \mathbf{y}_1 + \alpha_2 \mathbf{y}_2 \in T_X(\mathbf{x})^* = N_X(\mathbf{x})$, 故说明 $N_X(\mathbf{x})$ 是子空间。因为凸集中切锥和法锥的关系, 上面过程切锥和法锥全部对调交换, 则很快也得到反过来也成立。所以命题得证。 \square

习题 2.5.5. 计算 $C = \{\mathbf{x} | \mathbf{a}^T \mathbf{x} \leq b, \mathbf{a} \neq \mathbf{0}\}$ 中在每一点的切锥和法锥。

证明. 超平面是凸集, 故切锥是可行方向。当 \mathbf{x} 不在超平面上时, 也就是 $\mathbf{a}^T \mathbf{x} < b$, 此时每个方向都是可行方向切锥为 \mathbb{R}^n 。当 \mathbf{x} 在超平面上时, 则切锥为 $\{\mathbf{d} | \mathbf{a}^T \mathbf{d} \leq 0\}$, 因为如果 $\mathbf{a}^T \mathbf{d} > 0$ 时, $\mathbf{a}^T(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) > b$, 说明 \mathbf{d} 不是可行方向。因为超平面是凸集, 所以法锥就是切锥的极锥, 所以当 $\mathbf{a}^T \mathbf{x} < b$ 的时候法锥是 $\{\mathbf{0}\}$ 仅包含原点, 而当 $\mathbf{a}^T \mathbf{x} = b$ 时的法锥则就是 \mathbf{a} 的生成锥, 应该是 $\{k\mathbf{a} | k \geq 0\}$ \square

习题 2.5.6. 已知 $C = \{\mathbf{x} | \|\mathbf{x}\| \leq 1\}$, 求 C 中每一点的切锥和法锥

证明. 同样看可行方向即可, 如果 \mathbf{x} 在球内部, $\|\mathbf{x}\| < 1$ 时, 则每个方向都可行, 所以切锥是 \mathbb{R}^n , 如 \mathbf{x} 在球面上, 则切锥为 $\{\mathbf{y} | \mathbf{x}^T \mathbf{y} \leq 0\}$ 。球本身是凸集, 则切锥的极锥是法锥, 则当 $\|\mathbf{x}\| < 1$ 时法锥为 $\{\mathbf{0}\}$, 而 $\|\mathbf{x}\| = 1$ 时的法锥为 $\{k\mathbf{x} | k \geq 0\}$ \square

3 凸优化相关算法

3.1 次梯度法

在之前我们知道，一个可微分的凸函数，其最优性的条件是满足 $\forall \mathbf{x} \in X$ 有

$$\nabla f(\mathbf{x}^*)^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \geq 0$$

我们把其推广到次梯度情形就是

定理 3.1.1. \mathbf{x}^* 是凸函数 f 在凸集 $X \subseteq \mathbb{R}^n$ 上的极小点的充要条件是存在一个次梯度 $\mathbf{g} \in \partial f(\mathbf{x}^*)$ 满足

$$\mathbf{g}^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \geq 0, \forall \mathbf{x} \in X$$

这其实就是负的次梯度方向属于 X 在 \mathbf{x}^* 点的法锥，就是

$$-\mathbf{g} \in N_X(\mathbf{x}^*) = \left\{ \mathbf{g} \mid \mathbf{g}^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \leq 0, \forall \mathbf{x} \in X \right\}$$

对于不可微分的目标函数，可以考虑使用次梯度法进行求解。次梯度法的一般迭代格式是

$$\mathbf{x}_{k+1} = P_X(\mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}_k)$$

这里面 \mathbf{g}_k 是 f 在 \mathbf{x}_k 的一个次梯度， α_k 就是步长因子，而 P_X 是集合 X 上的欧氏投影算子。次梯度投影的算子不会增加到任何可行点的距离，也就是

$$\|P_X(\mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}_k) - \mathbf{x}\| \leq \|(\mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}_k) - \mathbf{x}\|, \forall \mathbf{x} \in X$$

下面我们分析一下次梯度法的收敛性

定理 3.1.2. 假设 $\{\mathbf{x}_k\}$ 是次梯度法迭代得到的序列，则 $\forall \mathbf{y} \in X, k \geq 0$ ，满足

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{y}\|_2^2 \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|_2^2 - 2\alpha_k(f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{y})) + \alpha_k^2 \|\mathbf{g}_k\|_2^2$$

且如果 $f(\mathbf{y}) < f(\mathbf{x}_k)$ ，且 $\alpha_k \in \left(0, \frac{2(f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{y}))}{\|\mathbf{g}_k\|_2^2}\right)$ 则

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{y}\|_2^2 \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|_2^2$$

证明. 结合投影算子非扩张的性质，也就是不会增加距离，得到

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{y}\|_2^2 &= \|P_X(\mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}_k) - \mathbf{y}\|_2^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}_k - \mathbf{y}\|_2^2 \\ &= \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|_2^2 - 2\alpha_k \mathbf{g}_k^T(\mathbf{x}_k - \mathbf{y}) + \alpha_k^2 \|\mathbf{g}_k\|_2^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|_2^2 - 2\alpha_k(f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{y})) + \alpha_k^2 \|\mathbf{g}_k\|_2^2 \end{aligned}$$

其中最后一个不等号是由次梯度定义得到。结合此，只要 α_k 在 $\left(0, \frac{2(f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{y}))}{\|\mathbf{g}_k\|_2^2}\right)$ 范围内，上式右边两项和是小于 0 的，所以此时有

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{y}\|_2^2 \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|_2^2$$

于是得证 □

特别，我们如果考虑次梯度有界，也就是 $\|\mathbf{g}_k\| \leq C$ ，然后上面令 $\mathbf{y} = \mathbf{x}^*$ ，我们可以得到当步长 α 足够小时，就有

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|_2^2 \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

下面我们记

$$f^* = \inf_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x}), X^* = \{\mathbf{x} \in X \mid f(\mathbf{x}) = f^*\}$$

是最优值和最优解的集合。以及

$$f_k^{\text{best}} = \inf\{f_1, \dots, f_k\}, f_\infty = \lim_{k \rightarrow \infty} f_k^{\text{best}}$$

是算法迭代点列最小函数值极限。也就是前面 k 个最小，然后对 k 去取极限。另外对于次梯度法，步长的选取也需要注意。下面分析一些

定理 3.1.3. 固定步长收敛分析： $\{\mathbf{x}_k\}$ 是次梯度方法迭代的序列， α_k 是固定的 α ，且假设次微分有界 c ，则满足

1. 若 $f^* = -\infty$ ，则 $f_\infty = f^*$
2. 若 $f^* > -\infty$ ，则 $f_\infty \leq f^* + \frac{\alpha c^2}{2}$

证明. 第一个显然成立，假设第二个不成立，则 $\exists \epsilon > 0$ 满足

$$f_\infty > f^* + \frac{\alpha c^2}{2} + 2\epsilon$$

假设 $\hat{\mathbf{y}} \in X$ 满足

$$f_\infty > f(\hat{\mathbf{y}}) + \frac{\alpha c^2}{2} + 2\epsilon$$

假设对足够大的 K ，满足 $\forall k \geq K$ ，有

$$f(\mathbf{x}_k) \geq f_\infty - \epsilon$$

相加得到

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\hat{\mathbf{y}}) \geq \frac{\alpha c^2}{2} + \epsilon$$

结合次梯度距离的性质定理得到

$$\begin{aligned}\|\mathbf{x}_{k+1} - \hat{\mathbf{y}}\|^2 &\leq \|\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{y}}\|^2 - 2\alpha(f(\mathbf{x}_k) - f(\hat{\mathbf{y}})) + \alpha^2 c^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{y}}\|^2 - 2\alpha \left(\frac{\alpha c^2}{2} + \epsilon \right) + \alpha^2 c^2 \\ &= \|\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{y}}\|^2 - 2\alpha\epsilon\end{aligned}$$

这么做反复几次得到

$$\begin{aligned}\|\mathbf{x}_{k+1} - \hat{\mathbf{y}}\|^2 &\leq \|\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{y}}\|^2 - 2\alpha\epsilon \\ &\leq \|\mathbf{x}_{k-1} - \hat{\mathbf{y}}\|^2 - 4\alpha\epsilon \\ &\leq \dots \\ &\leq \|\mathbf{x}_K - \hat{\mathbf{y}}\|^2 - 2(k+1-K)\alpha\epsilon.\end{aligned}$$

当 k 足够大时, $(k+1-K)\alpha\epsilon$ 趋于无穷, 所以该不等式不可能恒成立, 这是一个矛盾! \square

实际上我们可以得到到达阈值误差所需的迭代步数的估计为

$$f_T^{\text{best}} = \min_{0 \leq k \leq T} f(\mathbf{x}_k) \leq f^* + \frac{\alpha c^2 + \epsilon}{2} \quad T = \left\lceil \frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2}{\alpha\epsilon} \right\rceil$$

同样反证假设如果 $\forall 0 \leq k \leq T$ 有

$$f(\mathbf{x}_k) > f^* + \frac{\alpha c^2 + \epsilon}{2}$$

则在上面的次梯度距离性质定理, 得到

$$\begin{aligned}\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 &\leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 - 2\alpha(f(\mathbf{x}_k) - f^*) + \alpha^2 c^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 - (\alpha^2 c^2 + \alpha\epsilon) + \alpha^2 c^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 - \alpha\epsilon\end{aligned}$$

对 $k \in [0, T]$ 累加得到

$$0 \leq \|\mathbf{x}_{T+1} - \mathbf{x}^*\|_2^2 \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2 - (T+1)\alpha\epsilon$$

而结合 T 的定义, 应该是 $T\alpha\epsilon \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$ 的, 这里是 $(T+1)\alpha\epsilon \geq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$, 故矛盾
除了恒定步长之外还有归零步长, 是满足

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k = 0, \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k = +\infty$$

则 $f_\infty = f^*$ 。还有动态步长, 假设 f^* 已知, 取

$$\alpha_k = \gamma_k \frac{f(\mathbf{x}_k) - f^*}{\|\mathbf{g}_k\|_2^2}, 0 \leq \gamma_k \leq 2$$

令 $\gamma_k = 1$ ，则如果次微分有界为 c ，则

$$f_T^{\text{best}} - f^* \leq \frac{c\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|}{\sqrt{T+1}}$$

次梯度法的收敛性结论可以叙述如下：

定理 3.1.4. 假设 f 是凸函数且次梯度有界，上界为 G ，则对任意步长的序列 $\{\alpha_k\}$ ，满足

$$2\left(\sum_{i=0}^k \alpha_i\right)(f^k - f^*) \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2 + \sum_{i=0}^k \alpha_i^2 G^2$$

其中

$$f^k = \min_{1 \leq i \leq k} \{f(\mathbf{x}_i)\}$$

证明. 结合迭代定义得到

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|_2^2 &= \|\mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2 \\ &= \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2 - 2\alpha_k \mathbf{g}_k^T (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) + \alpha_k^2 \|\mathbf{g}_k\|_2^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2 - 2\alpha_k (f(\mathbf{x}_k) - f^*) + \alpha_k^2 G^2 \end{aligned}$$

这里最后一个不等式是结合次梯度定义 $\mathbf{g}_k \in \partial f(\mathbf{x}_k)$ 以及次梯度有上界的结论。移项得到

$$2\alpha_k (f(\mathbf{x}_k) - f^*) \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2 - \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|_2^2 + \alpha_k^2 G^2$$

从 0 到 k 求和，并且结合 f^k 的定义就得到

$$2\left(\sum_{i=0}^k \alpha_i\right)(f^k - f^*) \leq 2\sum_{i=0}^k \alpha_i (f(\mathbf{x}_i) - f^*) \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2 + \sum_{i=0}^k \alpha_i^2 G^2$$

于是得证。特别的如果步长为定值 t 那就有

$$f^k - f^* \leq \frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2}{2kt} + \frac{G^2 t}{2}$$

当然实际上这要依赖于步长的选取，我们一般会确保 $\sum_{i=1}^n \alpha_i^2$ 有界，在这种情况下两边除以一个 k ，是收敛的。或者是满足 $G^2 t$ 对 k 的阶数小于 1 □

3.2 临近点法

我们知道，在优化一个函数，除了找一个下降序列，也就是 $\{\mathbf{x}_k\}$ 使得 $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k)$ ，还可以是找 f 的近似 $F_k(\mathbf{x})$ 满足

$$\mathbf{x}_{k+1} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in X_k} F_k(\mathbf{x})$$

假设 f 是闭凸函数，则临近点算法迭代格式是

$$\mathbf{x}_{k+1} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left\{ f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2c_k} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2^2 \right\}$$

c_k 是正则化参数。也就是我们假设了

$$F_k(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2c_k} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2^2$$

注意到 \mathbf{x}_{k+1} 是 $F_k(\mathbf{x})$ 取最小值的点，所以有 $f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq F_k(\mathbf{x}_{k+1}) \leq F_k(\mathbf{x}_k) = f(\mathbf{x}_k)$ ，是递减的序列。这一算法可以确保 $\{f(\mathbf{x}_k)\}$ 序列是递减的，而次梯度法不能满足序列递减。相邻两个点的次梯度的条件满足

$$\frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1}}{c_k} \in \partial f(\mathbf{x}_{k+1})$$

这是因为 \mathbf{x}_{k+1} 是 $F_k(\mathbf{x})$ 的极小值点，所以 $\mathbf{0}$ 属于 $F_k(\mathbf{x}_{k+1})$ 的次微分中，对 $F_k(\mathbf{x})$ 求次微分有

$$\mathbf{0} \in \partial F_k(\mathbf{x}_{k+1}) = \partial f(\mathbf{x}_{k+1}) + \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{c_k}$$

对应的相邻点距离不等式是

定理 3.2.1. 对闭凸函数 f ，用临近点算法得到的任意 \mathbf{x}_k ，以及 $c_k > 0$ ，对任意 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ 有

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{y}\|_2^2 \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|_2^2 - 2c_k(f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{y})) - \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1}\|_2^2$$

这其实就是三角不等式展开，然后右边部分中间的一项是一个内积，用次梯度部分定义就可得。

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|_2^2 &= \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1} + \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{y}\|_2^2 \\ &= \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1}\|_2^2 + \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{y}\|_2^2 + 2(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1})^T(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{y}) \\ &\geq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1}\|_2^2 + \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{y}\|_2^2 + 2c_k(f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)) \end{aligned}$$

如果取 $\mathbf{y} = \mathbf{x}^*$ ，则

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|$$

迭代的点序列到最优解点距离单调递减。具体而言，什么情况下 Proximal 算法是收敛的呢？

定理 3.2.2. 假设 $\{\mathbf{x}_k\}$ 是 Proximal 算法的迭代点序列，如果 $\sum_{n=0}^{\infty} c_n = +\infty$ ，也就是 $\{c_n\}$ 级数发散到无穷大，则 $f(\mathbf{x}_k) = f_k \rightarrow f^*$ ，且 $\{\mathbf{x}_k\} \rightarrow \mathbf{x}^* \in X^*$ ，如果 X^* 是非空时

证明. 因为我们刚才得到 $f(\mathbf{x}_k)$ 迭代值序列是单调递减的，所以其极限或者是 $-\infty$ 或者是有一个下界。如果有下界则必收敛，需要证明如收敛那收敛到的极限就是 f^* 。利用上面的不等式

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{y}\|_2^2 \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|_2^2 - 2c_k(f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{y}))$$

则反复把 k 从 0 取到 N 则

$$\|\mathbf{x}_{N+1} - \mathbf{y}\|_2^2 + 2 \sum_{k=0}^N c_k (f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{y})) \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}\|_2^2$$

也就是说

$$2 \sum_{k=0}^N c_k (f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{y})) \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}\|_2^2$$

当 $N \rightarrow \infty$, 假设不收敛到 f^* , 也就是 $f_\infty > f^*$, 则存在一个 $\hat{\mathbf{y}}$ 使得 $f_\infty > f(\hat{\mathbf{y}}) > f^*$, 因为 $\{f(\mathbf{x}_k)\}$ 序列单调递减, 所以 $f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\hat{\mathbf{y}}) \geq f_\infty - f(\hat{\mathbf{y}}) > 0$, 结合 $\sum_{n=0}^{\infty} c_n = +\infty$, 以及上面取 $\mathbf{y} = \hat{\mathbf{y}}$ 之后就得

$$2(f_\infty - f(\hat{\mathbf{y}})) \sum_{k=0}^{\infty} c_k \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{y}\|_2^2$$

左边是趋于正无穷而右边有限, 得出矛盾, 于是 $f_\infty = f^*$ 是必须的。当 X^* 是非空时上面的不等式取 $\mathbf{y} = \mathbf{x}^*$ 则

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|_2^2 \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|_2^2 - 2c_k (f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}^*))$$

从而 $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2$ 单调递减, 则 $\{\mathbf{x}_k\}$ 是有界的, 故必然存在收敛子序列。假设 \mathbf{x}^+ 是序列的聚点 (存在收敛到该点的子序列), 因为 $f(\mathbf{x}_k)$ 单调递减到 f^* , 则

$$f(\mathbf{x}^+) \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \inf_{k \in \mathcal{I}} f(\mathbf{x}_k) = f^*$$

所以 $\mathbf{x}^+ \in X^*$ 。 □

此外还有 Fenchel 对偶框架, 此时我们考虑优化问题

$$\begin{cases} \min & f_1(\mathbf{x}) + f_2(\mathbf{A}\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \end{cases}$$

也就是 $f_1(\mathbf{x}_1) + f_2(\mathbf{x}_2)$ 满足 $\mathbf{x}_2 = \mathbf{A}\mathbf{x}_1$ 。其对偶的函数是

$$q(\boldsymbol{\lambda}) = \inf_{\mathbf{x}_1 \in \text{dom}(f_1), \mathbf{x}_2 \in \text{dom}(f_2)} \{f_1(\mathbf{x}_1) + f_2(\mathbf{x}_2) + \boldsymbol{\lambda}^T (\mathbf{x}_2 - \mathbf{A}\mathbf{x}_1)\}$$

这也就是

$$\inf_{\mathbf{x}_1 \in \mathbb{R}^n} \{f_1(\mathbf{x}_1) - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{A}\mathbf{x}_1\} + \inf_{\mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^n} \{f_2(\mathbf{x}_2) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{x}_2\}$$

其对偶问题是

$$\begin{cases} \min & f_1^*(\mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda}) + f_2^*(-\boldsymbol{\lambda}) \\ \text{s.t.} & \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m \end{cases}$$

当且仅当下面三个条件之一时强对偶关系成立且 $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ 是对偶问题最优解对。

$$1. \mathbf{x}^* \in \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} \{f_1(\mathbf{x}) - \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda}^*\}$$

2. $\mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda} \in \partial f_1(\mathbf{x}^*)$, 且 $-\boldsymbol{\lambda}^* \in \partial f_2(\mathbf{A}\mathbf{x}^*)$

3. $\mathbf{x}^* \in \partial f_1^*(\mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda}^*)$, 且 $\mathbf{A}\mathbf{x}^* \in \partial f_2^*(-\boldsymbol{\lambda}^*)$

我们回到 Proximal 算法, 则可以写成

$$f_1(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), \quad f_2(\mathbf{x}) = \frac{1}{2c_k} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2^2$$

其对偶问题是

$$f_1^*(\boldsymbol{\lambda}) + f_2^*(-\boldsymbol{\lambda})$$

求解的共轭函数

$$f_1^* = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\mathbf{x}^T \boldsymbol{\lambda} - f(\mathbf{x})\}, \quad f_2^* = \mathbf{x}_k^T \boldsymbol{\lambda} + \frac{c_k}{2} \|\boldsymbol{\lambda}\|_2^2$$

结合 Fenchel 对偶最优性条件

$$\boldsymbol{\lambda}_{k+1} \in \partial f_1(\mathbf{x}_{k+1}), \quad -\boldsymbol{\lambda}_{k+1} \in \partial f_2(\mathbf{x}_{k+1}), \quad \boldsymbol{\lambda}_{k+1} = \frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1}}{c_k}$$

则对偶 Proximal 算法的对偶问题可写为

$$\boldsymbol{\lambda}_{k+1} \in \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^n} \left\{ f^*(\boldsymbol{\lambda}) - \mathbf{x}_k^T \boldsymbol{\lambda} + \frac{c_k}{2} \|\boldsymbol{\lambda}\|_2^2 \right\}$$

对应的原问题的迭代点

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - c_k \boldsymbol{\lambda}_{k+1}$$

结合次梯度定理

$$\mathbf{0} \in \partial f(\mathbf{x}^*), \quad \mathbf{x}^* \in \partial f^*(\mathbf{0}), \quad \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \in \partial f(\mathbf{x}_{k+1}), \quad \mathbf{x}_{k+1} \in \partial f^*(\boldsymbol{\lambda}_{k+1})$$

3.3 ADMM 算法, 增广 Lagrange 函数

在优化问题

$$\begin{cases} \min & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} & \mathbf{x} \in X, \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \end{cases}$$

我们都知道 Lagrange 乘子法, 在 MCMC 的框架下原问题是

$$p(\mathbf{u}) = \inf_{\mathbf{x} \in X, \mathbf{u} = \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}} f(\mathbf{x})$$

其对偶的问题函数

$$q(\boldsymbol{\lambda}) = \inf_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})\}$$

Proximal 算法的迭代格式

$$\boldsymbol{\lambda}_{k+1} = \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{\lambda}} \left\{ q(\boldsymbol{\lambda}) - \frac{1}{2c_k} \|\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_k\|_2^2 \right\}$$

其对偶 Proximal 算法的迭代格式

$$\mathbf{u}_{k+1} = \underset{\mathbf{u}}{\operatorname{argmin}} \left\{ p(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\lambda}_k^T \mathbf{u} + \frac{c_k}{2} \|\mathbf{u}\|_2^2 \right\}$$

这里面, $\boldsymbol{\lambda}_{k+1} = \boldsymbol{\lambda}_k + c_k \mathbf{u}_{k+1}$ 。结合 MCMC 里 p 的定义, 对偶 Proximal 算法, 问题可以进一步表示为

$$\inf_{\mathbf{x} \in X} \left\{ f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_k^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) + \frac{c_k}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 \right\}$$

上面的函数我们就定义为增广 Lagrange 函数

$$L_{c_k}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_k^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) + \frac{c_k}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2$$

分为两步

1. 极小化 Lagrange 函数

$$\mathbf{x}_{k+1} \in \underset{\mathbf{x} \in X}{\operatorname{argmin}} L_{c_k}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}_k)$$

2. Lagrange 乘子更新

$$\boldsymbol{\lambda}_{k+1} = \boldsymbol{\lambda}_k + c_k (\mathbf{Ax}_{k+1} - \mathbf{b})$$

在 Fenchel 问题框架下的优化问题也就是

$$\begin{cases} \min & f_1(\mathbf{x}) + f_2(\mathbf{z}) \\ \text{s.t.} & \mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{z} = \mathbf{Ax} \end{cases}$$

其增广拉格朗日函数

$$L_c(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\lambda}) = f_1(\mathbf{x}) + f_2(\mathbf{z}) + \boldsymbol{\lambda}^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{z}) + \frac{c}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{z}\|_2^2$$

ADMM 的算法迭代格式如下: 是三步迭代

1. \mathbf{x} 极小化

$$\mathbf{x}_{k+1} \in \underset{\mathbf{x}}{\operatorname{argmin}} L_c(\mathbf{x}, \mathbf{z}_k, \boldsymbol{\lambda}_k)$$

2. \mathbf{z} 极小化

$$\mathbf{z}_{k+1} \in \underset{\mathbf{z}}{\operatorname{argmin}} L_c(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\lambda}_k)$$

3. 更新 $\boldsymbol{\lambda}_k$

$$\boldsymbol{\lambda}_{k+1} = \boldsymbol{\lambda}_k + c(\mathbf{Ax}_{k+1} - \mathbf{z}_{k+1})$$

或者还有一种, 上面约束换为 $\mathbf{Ax} + \mathbf{Bz} = \mathbf{d}$, 而此时迭代的增广 Lagrange 函数为

$$L_c(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \boldsymbol{\lambda}) = f_1(\mathbf{x}) + f_2(\mathbf{z}) + \boldsymbol{\lambda}^T (\mathbf{Ax} + \mathbf{Bz} - \mathbf{d}) + \frac{c}{2} \|\mathbf{Ax} + \mathbf{Bz} - \mathbf{d}\|_2^2$$

对应迭代格式里最后一个更新 λ_k 就改为

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + c(\mathbf{A}\mathbf{x}_{k+1} + \mathbf{B}\mathbf{z}_{k+1} - \mathbf{d})$$

那对于 ADMM 的迭代格式的算法，收敛性如何？

1. $\{\mathbf{x}_k, \mathbf{z}_k, \lambda_k\}$ 的点序列是有界序列, $\{\mathbf{x}_k\}$ 序列的极限点是 Fenchel 优化问题的最优解, $\{\lambda_k\}$ 收敛到对偶问题最优解
2. $\{\mathbf{A}\mathbf{x}_k - \mathbf{z}_k\}$ 收敛到 $\mathbf{0}$
3. 若 $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ 可逆, 则 $\{\mathbf{x}_k\}$ 收敛到原问题最优解

3.4 梯度下降法

常做深度学习接触到的几乎都是梯度下降法及其变种。我们都知道梯度下降法的迭代格式

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} - \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})$$

在梯度下降法我们考虑二次近似函数

$$f(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}_{k-1}) - \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}_{k-1}) + \frac{1}{2\alpha} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}_{k-1}\|_2^2$$

我们都知道在深度学习中步长（也就是学习率）很重要，太大就不收敛了，小了又速度慢，因此有一定的技巧，如 decay 等策略。对于步长我们也都知道精确线性搜索

$$\alpha = \underset{s}{\operatorname{argmin}} f(\mathbf{x}_{k-1} - s \nabla f(\mathbf{x}_{k-1}))$$

就是我们希望确定该方向下降量能够最大，但实际上做到这种精确线性搜索一般都难，因为效率会低下。我们有回溯线性搜索方法。主要是步长如果没有使函数下降达到一定量，则缩小步长：

1. 给定 $\alpha = \alpha_0$, 令 β, γ 都是参数, $0 < \beta < 1$
2. 我们检验不等式关系

$$f(\mathbf{x} - \alpha \nabla f(\mathbf{x})) > f(\mathbf{x}) - \gamma \alpha \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2$$

3. 一般如果上面不等式成立, 则步长 α 缩小, $\alpha = \beta \alpha$ 直到不成立为止。

4. 更新迭代 $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})$

我们考虑正定凸二次函数 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{G} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c$, 极小值点满足 $\mathbf{G} \mathbf{x}^* + \mathbf{b} = \mathbf{0}$ 。则迭代方向 $\mathbf{d}_k = -\nabla f(\mathbf{x}_k) = -\mathbf{G} \mathbf{x}_k - \mathbf{b}$, 可以得到最优步长应该是 $\alpha_k = \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_k^T \mathbf{G} \mathbf{g}_k}$, 其中 $\mathbf{g}_k = \nabla f(\mathbf{x}_k)$ 。因此此时迭代的格式是

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_k^T \mathbf{G} \mathbf{g}_k} \mathbf{g}_k$$

精确线性搜索满足 $\mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{d}_k = 0$, 也就是 $\mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{g}_k = \mathbf{d}_{k+1}^T \mathbf{d}_k = 0$, 也就是说最速下降法（且选择精确线性搜索）相邻两次下降的方向是正交的，这就是一个锯齿现象！而且越是接近目标点，步长越小，则收敛越慢！

另外对于正定的二次函数 $\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{G} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c$, 最速下降法收敛速度满足

$$\frac{\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|_G^2}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_G^2} \leq \left(\frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}} \right)^2$$

其中 $\lambda_{\max}, \lambda_{\min}$ 是 \mathbf{G} 的最大特征值与最小的特征值。也可以结合

$$\text{cond}(\mathbf{G}) = \|\mathbf{G}\|_2 \|\mathbf{G}^{-1}\|_2 = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$$

上面的也可以写作

$$\left(\frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}} \right)^2 = \left(\frac{\text{cond}(\mathbf{G}) - 1}{\text{cond}(\mathbf{G}) + 1} \right)^2$$

当 \mathbf{G} 偏向病态时, 条件数变大时, 收敛速度慢, 而如果条件数小则收敛速度快。

下面分析收敛性。假设 ∇f 是 L Lipschitz 连续的函数

$$\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\| \leq L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$$

定理 3.4.1. 如果 f 是可微的凸函数, $\nabla f(\mathbf{x})$ 是 Lipschitz 连续的, 且常数 L , 则满足二次上界

$$f(\mathbf{y}) \leq f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{L}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2$$

证明. 我们考虑 $g(t) = f(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x}))$, 则 $g'(t) = \nabla f(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x}))^T (\mathbf{y} - \mathbf{x})$, 则得到

$$\begin{aligned} f(\mathbf{y}) - f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) &= g(1) - g(0) - \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \\ &= \int_0^1 g'(t) dt - \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \\ &= \int_0^1 [\nabla f(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x}))^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x})] dt \\ &= \int_0^1 [\nabla f(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x})) - \nabla f(\mathbf{x})]^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) dt \\ &\leq \int_0^1 tL \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2 dt \\ &= \frac{L}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2 \end{aligned}$$

结论得证 □

定理 3.4.2. $f(\mathbf{x})$ 是 \mathbb{R}^n 上的可微凸函数, 则 $\nabla f(\mathbf{x})$ 满足 L -Lipschitz 连续当且仅当 $\nabla f(\mathbf{x})$ 有余强制性, 也就是

$$(\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}))^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \geq \frac{1}{L} \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2^2$$

证明. 如果 f 的梯度是 L -lipshitz 连续, 我们考虑构造一个函数 $g(\mathbf{x})$ 满足

$$g(\mathbf{x}) = \frac{L}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{x} - f(\mathbf{x})$$

我们得到

$$\begin{aligned} (\nabla g(\mathbf{x}) - \nabla g(\mathbf{y}))^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) &= L\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 - (\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}))^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\ &\geq L\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 - \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2 \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2 \geq 0 \end{aligned}$$

结合我们之前证明的凸函数另一个充要条件判定, 我们得到 $g(\mathbf{x})$ 是凸函数。我们再构造

$$f_{\mathbf{x}}(\mathbf{z}) = f(\mathbf{z}) - \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{z}, \quad f_{\mathbf{y}}(\mathbf{z}) = f(\mathbf{z}) - \nabla f(\mathbf{y})^T \mathbf{z}$$

不难验证 $f_{\mathbf{x}}(\mathbf{z})$ 和 $f_{\mathbf{y}}(\mathbf{z})$ 都是凸函数且同样满足 L -Lipschitz 连续。从而结合上面的条件得到 $g_{\mathbf{x}}(\mathbf{z}) = \frac{L}{2} \mathbf{z}^T \mathbf{z} - f_{\mathbf{x}}(\mathbf{z})$ 和 $g_{\mathbf{y}}(\mathbf{z}) = \frac{L}{2} \mathbf{z}^T \mathbf{z} - f_{\mathbf{y}}(\mathbf{z})$ 是凸函数。因此有

$$g_{\mathbf{x}}(\mathbf{z}_2) \geq g_{\mathbf{x}}(\mathbf{z}_1) + \nabla g_{\mathbf{x}}(\mathbf{z}_1)^T(\mathbf{z}_2 - \mathbf{z}_1)$$

整理之后可以得到 $f_{\mathbf{x}}(\mathbf{z})$ 也是满足二次上界的, 也就是

$$f_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}) \leq f_{\mathbf{x}}(\mathbf{z}) + (\nabla f(\mathbf{z}) - \nabla f(\mathbf{x}))^T(\mathbf{y} - \mathbf{z}) + \frac{L}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{z}\|_2^2$$

注意到 $\nabla f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, 且由于是凸函数, 所以说明 \mathbf{x} 是 $f_{\mathbf{x}}(\mathbf{z})$ 的全局最小值点。我们结合二次上界的一个推论: \mathbf{x}^* 是全局最小值点时

$$f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{y}) \leq f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{L}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2$$

注意到对任意的 \mathbf{y} 都成立, 所以我们对 \mathbf{y} 取右端的下确界, 求偏导后可以得到 $\mathbf{y} = \mathbf{x} - \frac{\nabla f(\mathbf{x})}{L}$ 时有

$$f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x}) - \frac{1}{2L} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2$$

利用这个推论, 并结合 $f_{\mathbf{x}}(\mathbf{z})$ 中 \mathbf{x} 是最小值点我们得到

$$f_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}) - f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{y}) - f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{x})^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \geq \frac{1}{2L} \|\nabla f_{\mathbf{x}}(\mathbf{y})\|_2^2 = \frac{1}{2L} \|\nabla f(\mathbf{y}) - \nabla f(\mathbf{x})\|_2^2$$

以上过程对 $f_{\mathbf{y}}(\mathbf{z})$ 类似同理, $f_{\mathbf{y}}(\mathbf{z})$ 在 \mathbf{y} 处取最小值, 也就是

$$f_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y}) - \nabla f(\mathbf{y})^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \geq \frac{1}{2L} \|\nabla f_{\mathbf{y}}(\mathbf{x})\|_2^2 = \frac{1}{2L} \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2^2$$

两不等式相加得到

$$(\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}))^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \geq \frac{1}{L} \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2^2$$

故 $f(\mathbf{x})$ 的余强制性得证。反过来如果满足余强制性可以由 Cauchy-Schwarz 不等式

$$\frac{1}{L} \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2^2 \leq (\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}))^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \leq \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2 \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$$

除以一个 $\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|$ 就得到 ∇f 是 L -Lipschitz 连续的。 \square

结合上面的定理我们有推论：也就是下降引理：如果 f 的梯度满足 L -Lipschitz 连续则任取步长 $\alpha_k > 0$ 有

$$f(\mathbf{x}_k) \leq f(\mathbf{x}_{k-1}) - \alpha_k \left(1 - \frac{\alpha_k L}{2}\right) \|\nabla f(\mathbf{x}_{k-1})\|_2^2$$

这里只要注意到把 $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} - \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})$ 就得到是

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k) &\leq f(\mathbf{x}_{k-1}) + \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})^T (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}) + \frac{L}{2} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}\|_2^2 \\ &= f(\mathbf{x}_{k-1}) - \alpha_k \|\nabla f(\mathbf{x}_{k-1})\|_2^2 + \frac{L\alpha_k^2}{2} \|\nabla f(\mathbf{x}_{k-1})\|_2^2 \end{aligned}$$

如果 α 固定取 $\alpha \leq \frac{1}{L}$ 则我们有结论

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \leq \frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2}{2\alpha k}$$

证明. 我们利用上面的下降引理, 并结合 $\alpha \leq \frac{1}{L}$ 有

$$f(\mathbf{x}_k) \leq f(\mathbf{x}_{k-1}) - \frac{\alpha}{2} \|\nabla f(\mathbf{x}_{k-1})\|_2^2$$

结合 f 的凸性有

$$f(\mathbf{x}_{k-1}) \leq f^* + \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})^T (\mathbf{x}_{k-1} - \mathbf{x}^*)$$

联立这两式得

$$f(\mathbf{x}_k) \leq f^* + \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})^T (\mathbf{x}_{k-1} - \mathbf{x}^*) - \frac{\alpha}{2} \|\nabla f(\mathbf{x}_{k-1})\|_2^2$$

这里面右端可以写成

$$f(\mathbf{x}_k) \leq f^* + \frac{1}{2\alpha} \left(\|\mathbf{x}_{k-1} - \mathbf{x}^*\|_2^2 - \|\mathbf{x}_{k-1} - \mathbf{x}^* - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})\|_2^2 \right)$$

利用 $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})$ 的定义就得到

$$f(\mathbf{x}_k) \leq f^* + \frac{1}{2\alpha} \left(\|\mathbf{x}_{k-1} - \mathbf{x}^*\|_2^2 - \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2 \right)$$

把 k 从 1 开始累加得到

$$\sum_{i=1}^k (f(\mathbf{x}_i) - f^*) \leq \frac{1}{2\alpha} (\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2 - \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2) \leq \frac{1}{2\alpha} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

因为 $f(\mathbf{x}_k)$ 单调递减, 则

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* \leq \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k (f(\mathbf{x}_i) - f^*) \leq \frac{1}{2\alpha k} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

得证 □

如果 α 是回溯步长则

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \leq \frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2}{2\alpha_{\min}k}$$

这里 $\alpha_{\min} = \min\{1, \frac{\beta}{L}\}$, 只要知道 $\alpha_i \geq \alpha_{\min}$ 仿照上面的过程就可以得证。

对于 f 如果是 m -强凸函数, 也就是满足 $f(\mathbf{x}) - \frac{m}{2}\|\mathbf{x}\|_2^2$ 对 $m > 0$ 仍然是凸函数。其满足

$$f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{m}{2}\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2$$

则对强凸函数的梯度下降, 如果 $\alpha < \frac{1}{L+m}$, 则满足存在 γ 使得

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* \leq \gamma^k \frac{L}{2} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

证明. 对于 $\mathbf{x}^+ = \mathbf{x} - \alpha \nabla f(\mathbf{x})$, 得到

$$f(\mathbf{x}^+) - f^* \leq \frac{L}{2} \|\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

这是结合了我们在刚才证得的二次上界定理, 而 \mathbf{x}^* 处点因为取到极小值, $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ 。则可以写成

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}^+) - f^* &\leq \frac{L}{2} \|\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^*\|_2^2 \\ &= \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^* - \alpha \nabla f(\mathbf{x}^*)\|_2^2 \\ &= \frac{L}{2} (\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_2^2 - 2\alpha \nabla f(\mathbf{x})^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + \alpha^2 \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2) \\ &\leq \frac{L}{2} \left[\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_2^2 - \frac{2\alpha Lm}{L+m} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_2^2 - \frac{2\alpha}{L+m} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2 + \alpha^2 \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2 \right] \\ &= \frac{L}{2} \left[\left(1 - \frac{2\alpha Lm}{L+m}\right) \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_2^2 - \left(\alpha^2 - \frac{2\alpha}{L+m}\right) \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2 \right] \\ &\leq \frac{L}{2} \left(1 - \frac{2\alpha Lm}{L+m}\right) \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_2^2 \end{aligned}$$

注意第一个不等号是结合 $g(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) - \frac{m}{2}\|\mathbf{x}\|_2^2$ 是凸的, 结合 $f(\mathbf{x})$ 的梯度 L -Lipschitz 连续我们可得到 $g(\mathbf{x})$ 的梯度 $\nabla g(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) - m\mathbf{x}$ 是 $(L-m)$ -Lipschitz 连续, 利用余强制性得到

$$(\nabla g(\mathbf{x}) - \nabla g(\mathbf{y}))^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \geq \frac{1}{L-m} \|\nabla g(\mathbf{x}) - \nabla g(\mathbf{y})\|_2^2$$

然后取 $\nabla g(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) - m\mathbf{x}$ 也就是

$$\begin{aligned} &(\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}))^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) - m\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 \\ &\geq \frac{1}{L-m} [\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2^2 - 2m(\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}))^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + m^2\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2] \end{aligned}$$

移项得到

$$\frac{L+m}{L-m}(\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}))^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \geq \frac{1}{L-m}\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2^2 + \frac{Lm}{L-m}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$$

也就是带入到第一个不等号的

$$(\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}))^T(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \geq \frac{1}{L+m}\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2^2 + \frac{Lm}{L+m}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$$

最后一个不等号是利用了 $\alpha \leq \frac{1}{L+m}$ 的条件。因此得到

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* \leq \frac{L}{2}\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2 \leq \frac{L}{2}\left(1 - \frac{2\alpha Lm}{L+m}\right)\|\mathbf{x}_{k-1} - \mathbf{x}^*\|_2^2 \leq \dots \leq \frac{L}{2}\left(1 - \frac{2\alpha Lm}{L+m}\right)^k \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

故 $1 - \frac{2\alpha Lm}{L+m}$ 是满足条件的 γ ，因此得证 □

3.5 近似点梯度法

我们先介绍临近算子：对 h 凸函数，定义为

$$\text{prox}_h(\mathbf{u}) = \underset{\mathbf{u} \in \text{dom}(h)}{\text{argmin}} \left[h(\mathbf{u}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|_2^2 \right]$$

也就是数说距离 \mathbf{x} 不太远，且 $h(\mathbf{u})$ 的值相对也是小的。其和次梯度关系：如 h 是正常的闭凸函数则

$$\mathbf{u} \in \text{prox}_h(\mathbf{x}) \Leftrightarrow \mathbf{x} - \mathbf{u} \in \partial h(\mathbf{u})$$

且此时 $\text{prox}_h(\mathbf{x})$ 的值存在且唯一。设是因为 $\mathbf{u} \in \text{prox}_h(\mathbf{x})$ 结合 argmin 的条件就是

$$\mathbf{0} \in \partial h(\mathbf{u}) + (\mathbf{u} - \mathbf{x})$$

而如果 $\mathbf{x} - \mathbf{u} \in \partial h(\mathbf{u})$ 则用次梯度定义

$$h(\mathbf{v}) \geq h(\mathbf{u}) + (\mathbf{x} - \mathbf{u})^T(\mathbf{v} - \mathbf{u}), \forall \mathbf{v} \in \text{dom}(h)$$

则

$$h(\mathbf{v}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{v} - \mathbf{x}\|_2^2 \geq h(\mathbf{u}) + (\mathbf{x} - \mathbf{u})^T(\mathbf{v} - \mathbf{u}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{v} - \mathbf{x}\|_2^2 \geq h(\mathbf{u}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{v} - \mathbf{x}\|_2^2$$

结合 \mathbf{v} 的任意性说明 \mathbf{u} 是最小值对应点。下面我举一些例子，例如 $h(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_1$ 则

$$\text{prox}_{th}(\mathbf{x}) = \text{sgn}(\mathbf{x}) \max\{|\mathbf{x}| - t, 0\}$$

对于如下无约束优化 $f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) + h(\mathbf{x})$ ，这里只要求 g 是可微分， h 不做要求。近似点梯度算法的迭代格式

$$\mathbf{x}_{k+1} = \text{prox}_{t_k h}(\mathbf{x}_k - t_k \nabla g(\mathbf{x}_k))$$

当 $h(\mathbf{x}) = 0$ 时, 则等价于

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - t_k \nabla g(\mathbf{x}_k)$$

这是梯度下降法。当 $h(\mathbf{x}) = \delta_C(\mathbf{x})$ 时等价于

$$\mathbf{x}_{k+1} = P_C(\mathbf{x}_k - t_k \nabla g(\mathbf{x}_k))$$

这是投影梯度法。还有 $h(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_1$, 为软门限迭代法为

$$\mathbf{x}_{k+1} = \text{prox}_{th}(\mathbf{x}_k - t_k \nabla g(\mathbf{x}_k))$$

这里面

$$\text{prox}_{th}(\mathbf{u})_i = \begin{cases} u_i - t & u_i \geq t \\ 0 & -t \leq u_i \leq t \\ u_i + t & u_i \leq -t \end{cases}$$

也就有

1. $h(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_1$, 则 $\text{prox}_{th}(\mathbf{x}) = \text{sgn}(\mathbf{x}) \max\{0, \mathbf{x} - |t|\}$
2. $h(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2$, 则 $\text{prox}_{th}(\mathbf{x}) = \left(1 - \frac{t}{\|\mathbf{x}\|_2}\right) \chi_{\|\mathbf{x}\|_2 \geq t}$
3. $h(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c$, 则 $\text{prox}_{th}(\mathbf{x}) = (\mathbf{I} + t\mathbf{A})^{-1}(\mathbf{x} - t\mathbf{b})$

对于邻近算子, 其定义和基本计算推导得到如下规则

1. $h(\mathbf{x}) = g(\lambda \mathbf{x} + \mathbf{a})$, 则 $\text{prox}_h(\mathbf{x}) = \frac{1}{\lambda}(\text{prox}_{\lambda^2 g}(\lambda \mathbf{x} + \mathbf{a}) - \mathbf{a})$
2. $h(\mathbf{x}) = \lambda g\left(\frac{\mathbf{x}}{\lambda}\right)$, 则 $\text{prox}_h(\mathbf{x}) = \lambda \text{prox}_{\lambda^{-1}g}\left(\frac{\mathbf{x}}{\lambda}\right)$
3. $h(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) + \mathbf{a}^T \mathbf{x}$, 则 $\text{prox}_h(\mathbf{x}) = \text{prox}_g(\mathbf{x} - \mathbf{a})$
4. $h(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) + \frac{u}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{a}\|_2^2$, 则 $\text{prox}_h(\mathbf{x}) = \text{prox}_{\frac{g}{1+u}}\left(\frac{1}{1+u} \mathbf{x} + \frac{u}{1+u} \mathbf{a}\right)$

下面我们来考虑复合优化问题: $f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) + h(\mathbf{x})$, 其中 g 可微, 而 h 不一定可微。近似点梯度法的迭代格式是

$$\mathbf{x}_{k+1} = \text{prox}_{t_k h}(\mathbf{x}_k - t_k \nabla g(\mathbf{x}_k))$$

这里 g 是光滑, h 非光滑部分。我们记 $\mathbf{x}^+ = \text{prox}_{th}(\mathbf{x} - t \nabla g(\mathbf{x}))$ 则结合临近点映射

$$\mathbf{x}^+ = \underset{\mathbf{u}}{\text{argmin}} \left[h(\mathbf{u}) + \frac{1}{2t} \|\mathbf{u} - \mathbf{x} + t \nabla g(\mathbf{x})\|_2^2 \right]$$

这里可以记

$$q(\mathbf{u}) = g(\mathbf{x}) + \nabla g(\mathbf{x})^T (\mathbf{u} - \mathbf{x}) + \frac{1}{2t} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|_2^2$$

则上面就等价于

$$\mathbf{x}^+ = \underset{\mathbf{u}}{\text{argmin}} (h(\mathbf{u}) + q(\mathbf{u}))$$

也就是说 $q(\mathbf{u})$ 是 $g(\mathbf{u})$ 在 \mathbf{x} 点简单的局部二次近似函数。则 \mathbf{x}^+ 是 $h(\mathbf{u})$ 和 $q(\mathbf{u})$ 的极小点。由邻近算子的定义展开迭代公式

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_{k+1} &= \operatorname{argmin}_{\mathbf{u}} \left\{ h(\mathbf{u}) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}_k + t_k \nabla g(\mathbf{x}_k)\|_2^2 \right\} \\ &= \operatorname{argmin}_{\mathbf{u}} \left\{ h(\mathbf{u}) + g(\mathbf{x}_k) + \nabla g(\mathbf{x}_k)^T (\mathbf{u} - \mathbf{x}_k) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}_k\|_2^2 \right\}\end{aligned}$$

基于以上，结合最优性条件，近似点梯度算法可以写成如下格式

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - t_k \nabla g(\mathbf{x}_k) - t_k \mathbf{d}_k, \quad \mathbf{d}_k \in \partial h(\mathbf{x}_{k+1})$$

也就是说，对前面的可微光滑的 g 执行正常梯度下降，而对不一定光滑的 h 则使用次梯度的下降。对 L -Lipschitz 的函数可以取步长 $t_k = t \leq \frac{1}{L}$ 。如果 L 未知可以使用线性准则

$$g(\mathbf{x}_{k+1}) \leq g(\mathbf{x}_k) + \nabla g(\mathbf{x}_k)^T (\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\|_2^2$$

对于收敛性，我们假设

1. g 是凸函数， h 是正常闭凸函数
2. ∇g 是 L -Lipschitz 连续的
3. $f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) + h(\mathbf{x})$ 的最小值 f^* 是有限的且在 \mathbf{x}^* 点取到

则收敛性满足

1. 假定取步长 $t_k = t \leq \frac{1}{L}$ ，则满足

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \leq \frac{1}{2kt} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

2. 如果从某个 $t = t^*$ 开始进行回溯，也就是 $t \leftarrow \beta t$ 直到满足

$$g(\mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x})) \leq g(\mathbf{x}) - t\nabla g(\mathbf{x})^T G_t(\mathbf{x}) + \frac{t}{2} \|G_t(\mathbf{x})\|_2^2$$

则

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* \leq \frac{1}{2kc} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2, \quad c = \min\{t^*, \beta/L\}$$

其中这里我们定义梯度映射的公式

$$G_t(\mathbf{x}) = \frac{1}{t}(\mathbf{x} - \operatorname{prox}_{th}(\mathbf{x} - t\nabla g(\mathbf{x})))$$

这其实就是迭代的搜索方向

$$\mathbf{x}_{k+1} = \operatorname{prox}_{th}(\mathbf{x}_k - t\nabla g(\mathbf{x}_k)) = \mathbf{x}_k - tG_t(\mathbf{x}_k)$$

但请注意这个 G_t 不是 $g + h$ 的次梯度。可以得到

$$G_t(\mathbf{x}) - \nabla g(\mathbf{x}) \in \partial h(\mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x}))$$

下面我们把步长恒定的收敛性证明一下：

证明. 先证明：

$$f(\mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x})) \leq f(\mathbf{z}) + G_t(\mathbf{x})^T(\mathbf{x} - \mathbf{z}) - \frac{t}{2}\|G_t(\mathbf{x})\|_2^2$$

考虑 $f = g + h$ ，其中 g 可微，对 g 由 Lipschitz 连续的性质和二次上界

$$g(\mathbf{y}) \leq g(\mathbf{x}) + \nabla g(\mathbf{x})^T(\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{L}{2}\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2$$

取 $\mathbf{y} = \mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x})$ 则

$$g(\mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x})) \leq g(\mathbf{x}) - t\nabla g(\mathbf{x})^T G_t(\mathbf{x}) + \frac{t^2 L}{2}\|G_t(\mathbf{x})\|_2^2$$

最后一个因为 $t \in \left(0, \frac{1}{L}\right)$ 也可以写成

$$g(\mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x})) \leq g(\mathbf{x}) - t\nabla g(\mathbf{x})^T G_t(\mathbf{x}) + \frac{t}{2}\|G_t(\mathbf{x})\|_2^2$$

由于 h, g 都是凸函数，则

$$h(\mathbf{z}) \geq h(\mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x})) + (G_t(\mathbf{x}) - \nabla g(\mathbf{x}))^T(\mathbf{z} - \mathbf{x} + tG_t(\mathbf{x}))$$

以及

$$g(\mathbf{z}) \geq g(\mathbf{x}) + \nabla g(\mathbf{x})^T(\mathbf{z} - \mathbf{x})$$

以及

$$h(\mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x})) \leq h(\mathbf{z}) - (G_t(\mathbf{x}) - \nabla g(\mathbf{x}))^T(\mathbf{z} - \mathbf{x} + tG_t(\mathbf{x}))$$

将这些联立，结合 $f = g + h$ ，也就是（为方便看清楚移项）

$$\begin{aligned} g(\mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x})) &\leq g(\mathbf{z}) - \nabla g(\mathbf{x})^T(\mathbf{z} - \mathbf{x}) - t\nabla g(\mathbf{x})^T G_t(\mathbf{x}) + \frac{t}{2}\|G_t(\mathbf{x})\|_2^2 \\ h(\mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x})) &\leq h(\mathbf{z}) + \nabla g(\mathbf{x})^T(\mathbf{z} - \mathbf{x}) + t\nabla g(\mathbf{x})^T G_t(\mathbf{x}) - t\|G_t(\mathbf{x})\|_2^2 - G_t(\mathbf{x})^T(\mathbf{z} - \mathbf{x}) \end{aligned}$$

就有

$$f(\mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x})) \leq f(\mathbf{z}) + G_t(\mathbf{x})^T(\mathbf{x} - \mathbf{z}) - \frac{t}{2}\|G_t(\mathbf{x})\|_2^2$$

这样如果 $\mathbf{x}^+ = \mathbf{x} - tG_t(\mathbf{x})$ ，并取 $\mathbf{z} = \mathbf{x}^*$ ，就有

$$f(\mathbf{x}^+) - f^* \leq G_t(\mathbf{x})^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) - \frac{t}{2}\|G_t(\mathbf{x})\|_2^2 = \frac{1}{2t}(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_2^2 - \|\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^*\|_2^2)$$

从而在梯度映射中 $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - tG_t(\mathbf{x}_k)$ 就是

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* \leq \frac{1}{2t}(\|\mathbf{x}_{k-1} - \mathbf{x}^*\|_2^2 - \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2)$$

同样类似之前，把 k 从 1 到 k 相加，可得到

$$\sum_{i=1}^k (f(\mathbf{x}_i) - f^*) \leq \frac{1}{2t}(\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2 - \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2) \leq \frac{1}{2t}\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

并且结合单调递减的性质

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* \leq \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k (f(\mathbf{x}_i) - f^*) \leq \frac{1}{2kt}\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

得证

□

3.6 加速算法

通常，梯度下降法的收敛率一般为 $O(1/k)$ ，而 Nesterov 通过改进这一算法使得其收敛速度变为 $O(1/k^2)$ 使得手来你加速。我们以梯度下降法为例：假设 $\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{x}_k - t_k \nabla f(\mathbf{x}_k)$ ，我们讲相邻两步迭代的辅助点 $\mathbf{v}_k, \mathbf{v}_{k+1}$ 可以得到下一个迭代点 \mathbf{x}_{k+1} 也就是

$$\mathbf{x}_{k+1} = (1 - \gamma_k)\mathbf{v}_{k+1} + \gamma_k\mathbf{v}_k$$

这里面

$$\lambda_0 = 0, \lambda_k = \frac{1 + \sqrt{1 + 4\lambda_{k-1}^2}}{2}, \gamma_k = \frac{1 - \lambda_k}{\lambda_{k+1}}$$

其加速收敛的效果，如果 $\eta = 1/\beta$ 是恒步长则

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* \leq \frac{2\beta\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2}{k^2}$$

FISTA 算法是基于 Nesterov 的近似点梯度算法，第一步先沿着前两步移动方向产生一个新的点，然后新的一个点进行一步近似梯度迭代，也就是

$$\mathbf{x}_k = \text{prox}_{t_k h}(\mathbf{y}_k - t_k \nabla g(\mathbf{y}_k))$$

其迭代格式有 2 种，迭代格式 1 为：

1. $\mathbf{y}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \frac{k-2}{k+1}(\mathbf{x}_{k-1} - \mathbf{x}_{k-2})$
2. $\mathbf{x}_k = \text{prox}_{t_k h}(\mathbf{y}_k - t_k \nabla g(\mathbf{y}_k))$

还有迭代格式 2

1. $\mathbf{y}_k = (1 - \gamma_k)\mathbf{x}_{k-1} + \gamma_k\mathbf{v}_k$
2. $\mathbf{x}_k = \text{prox}_{t_k h}(\mathbf{y}_k - t_k \nabla g(\mathbf{y}_k))$

$$3. \mathbf{v}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \frac{1}{\gamma_k}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1})$$

对于迭代格式 2, 如果取 $\gamma_k = \frac{2}{k+1}$ 则和第一个迭代格式等价。我们有如下结论: 假设

$$\gamma_k = \frac{2}{k+1}, t_k = \frac{1}{L}$$

以及 $f = g + h$, g 是凸函数且 ∇g 是 L -Lipschitz 连续的, h 是正常闭凸函数, $f = g + h$ 的最小值 f^* 在 \mathbf{x}^* 点取到且是有限的, 则 FISTA 算法迭代格式 2 有

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* \leq \frac{2L}{(k+1)^2} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

证明. 由 $\mathbf{x}_k = \text{prox}_{t_k h}(\mathbf{y}_k - t_k \nabla g(\mathbf{y}_k))$, 由最优条件性

$$-\mathbf{x}_k + \mathbf{y}_k - t_k \nabla g(\mathbf{y}_k) \in t_k \partial h(\mathbf{x}_k)$$

由次梯度定义

$$t_k h(\mathbf{x}) \geq t_k h(\mathbf{x}_k) + (-\mathbf{x}_k + \mathbf{y}_k - t_k \nabla g(\mathbf{y}_k))^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)$$

由于 g 的梯度 Lipschitz 连续, 故存在二次上界

$$g(\mathbf{x}_k) \leq g(\mathbf{y}_k) + \nabla g(\mathbf{y}_k)^T (\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k\|_2^2$$

这里用到了 $t_k = \frac{1}{L}$ 的假设, 我们是这么假设的。由此可得

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k) &= g(\mathbf{x}_k) + h(\mathbf{x}_k) \\ &\leq h(\mathbf{x}) + g(\mathbf{y}_k) + \nabla g(\mathbf{y}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}_k) + \frac{1}{t_k} (\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k\|_2^2 \\ &\leq h(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x}) + \frac{1}{t_k} (\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k\|_2^2 \\ &= f(\mathbf{x}) + \frac{1}{t_k} (\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k\|_2^2 \end{aligned}$$

这里面第一个不等号是上面两个式子结合, 一步是 $\nabla g(\mathbf{y}_k)^T (\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k) + \nabla g(\mathbf{y}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) = \nabla g(\mathbf{y}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}_k)$, 第二个不等号是利用了 g 的凸性有 $g(\mathbf{x}) \geq g(\mathbf{y}_k) + \nabla g(\mathbf{y}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}_k)$ 。我们上面取 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_{k-1}$ 和 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ 则 ‘

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* - (1 - \gamma_k)(f(\mathbf{x}_{k-1}) - f^*) \leq \frac{1}{t_k} (\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k)^T ((1 - \gamma_k)\mathbf{x}_{k-1} + \gamma_k \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k\|_2^2$$

结合迭代格式

$$\begin{cases} \mathbf{v}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \frac{1}{\gamma_k}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}) \\ \mathbf{y}_k = (1 - \gamma_k)\mathbf{x}_{k-1} + \gamma_k \mathbf{v}_{k-1} \end{cases}$$

则上式转化为

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* - (1 - \gamma_k)(f(\mathbf{x}_{k-1}) - f^*) \leq \frac{1}{2t_k} [\|\mathbf{y}_k - (1 - \gamma_k)\mathbf{x}_{k-1} - \gamma_k\mathbf{x}^*\|_2^2 - \|\mathbf{x}_k - (1 - \gamma_k)\mathbf{x}_{k-1} - \gamma_k\mathbf{x}^*\|_2^2]$$

也就是

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* - (1 - \gamma_k)(f(\mathbf{x}_{k-1}) - f^*) \leq \frac{\gamma_k^2}{2t_k} (\|\mathbf{v}_{k-1} - \mathbf{x}^*\|_2^2 - \|\mathbf{v}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2)$$

结合我们的 t_k, γ_k 的表达式有

$$\frac{1 - \gamma_k}{\gamma_k^2} t_k \leq \frac{1}{\gamma_{k-1}^2} t_{k-1} \quad (k+1)(k-1) \leq k^2$$

上式可以转化为

$$\frac{t_k}{\gamma_k^2} (f(\mathbf{x}_k) - f^*) + \frac{1}{2} \|\mathbf{v}_k - \mathbf{x}^*\|_2^2 \leq \frac{t_{k-1}}{\gamma_{k-1}^2} (f(\mathbf{x}_{k-1}) - f^*) + \frac{1}{2} \|\mathbf{v}_{k-1} - \mathbf{x}^*\|_2^2 \leq \dots \leq \frac{t_1}{\gamma_1^2} (f(\mathbf{x}_1) - f^*) + \frac{1}{2} \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

在 γ_k 的定义中, $\gamma_1 = 1, \mathbf{v}_0 = \mathbf{x}_0$, 则可以转化为

$$\frac{t_1}{\gamma_1^2} (f(\mathbf{x}_1) - f^*) + \frac{1}{2} \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{x}^*\|_2^2 \leq \frac{(1 - \gamma_1)t_1}{\gamma_1^2} (f(\mathbf{x}_0) - f^*) + \frac{1}{2} \|\mathbf{v}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2 = \frac{1}{2} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

最后可以得到

$$\frac{t_k}{\gamma_k^2} (f(\mathbf{x}_k) - f^*) \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

而带入 $t_k = \frac{1}{L}, \gamma_k = \frac{2}{k+1}$ 则得到

$$f(\mathbf{x}_k) - f^* \leq \frac{2L}{(k+1)^2} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2$$

结论得证 □

3.7 随机梯度下降

常接触深度学习的人必然都知道 SGD。我们都知道监督学习对 (\mathbf{x}, y) 的数据-label 对, 假设模型 f 是一个网络, 则我们需要 $\min \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p(\mathbf{x})} [L(f(\mathbf{x}), y)]$ 这个损失函数。现实中数据的概率分布一般未知, 故我们一般是随机取 N 个。梯度也就是

$$\nabla f(\mathbf{x}_k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(\mathbf{x}_k)$$

大 Batch 梯度下降, 计算的开销会非常大, 例如我们在 CIFAR-10 图像分类, 那大 Batch 梯度下降就等价于 Batch size 为 50000, 所有图片都 load 上来。这显然是非常不可行的, 非常容易 Cuda out of memory。所以有时我们随机只选择一个样本来做梯度下降, 这就是 SGD, 基本迭代格式也就是

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \nabla f_{s_k}(\mathbf{x}_k) \quad s_k \sim U\{1, \dots, N\}$$

这个梯度是一个无偏估计，也就是

$$\mathbb{E}_{s_k \sim U\{1, \dots, N\}}[\nabla f_{s_k}(\mathbf{x}_k) | \mathbf{x}_k] = \nabla f(\mathbf{x}_k)$$

实际在深度学习中我们都是取一个 batch 的 batch size，例如 32 64 等等。也就是说

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \frac{1}{|I_k|} \sum_{s \in I_k} \nabla f_s(\mathbf{x}_k)$$

每次只取一个梯度下降毕竟也很极端。我们也都知道 SGD+Momentum 引入动量的方法迭代格式是

$$\begin{cases} \mathbf{v}_{k+1} = \mu_k \mathbf{v}_k - \alpha_k \nabla f_{s_k}(\mathbf{x}_k) \\ \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{v}_{k+1} \end{cases}$$

这一个动量赋予了迭代点惯性，一般而言 SGD 很容易陷入局部极小值，而动量的引入可以确保在陷入极小值点时由于惯性不会马上停下来，从而可能跳出该局部极小值点。一般而言 $\mu_k < 1$ ，通常取 0.5 以上，而等于 0 时就是原来的 SGD 了。另外 Adagrad 的迭代格式

$$\begin{cases} \mathbf{g}_k = \nabla f_{s_k}(\mathbf{x}_k) \\ G_k = \sum_{i=1}^k \mathbf{g}_i \odot \mathbf{g}_i \\ \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{\alpha}{\sqrt{G_k} + \epsilon} \odot \mathbf{g}_k \\ G_{k+1} = G_k + \mathbf{g}_{k+1} \odot \mathbf{g}_{k+1} \end{cases}$$

除此之外 RMSProp、Adam、AdamW 这些优化器，Adam 是目前几乎最主流的。这些都是 SGD 的变种，在实现中以 mini-batch 整体为单位的意义上进行 SGD 下降。

下面，我们来讨论下 SGD 的收敛性。假设每个 f_i 都是凸函数，且存在次梯度，改为随机次梯度算法，设满足

1. 所有 $f_i(\mathbf{x})$ 都是闭凸函数且存在次梯度
2. 随机次梯度的二阶矩一致有界，也就是 $\forall \mathbf{x}, s_k$ 有

$$\mathbb{E}_{s_k} [\|\mathbf{g}_k\|_2^2] \leq M^2 < \infty, \mathbf{g}_k \in \partial f_{s_k}(\mathbf{x}_k)$$

3. 迭代随机点序列处处有界， $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}\| \leq R < \infty$

则在以上假设之下我们有

$$\sum_{k=1}^K \alpha_k \mathbb{E}[f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*)] \leq \frac{1}{2} \mathbb{E}[\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|_2^2] + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \alpha_k^2 M^2$$

证明. 我们取 $\xi_k = g_k - \mathbb{E}[g_k | \mathbf{x}_k]$, 则

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 &\leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 + \alpha_k (f(\mathbf{x}_k) - f^*) \\ &\quad + \frac{\alpha_k^2}{2} \|g_k\|^2 + \alpha_k \langle \xi_k, \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k \rangle \end{aligned}$$

两边求期望得到

$$\alpha_k \mathbb{E}[f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*)] \leq \frac{1}{2} \mathbb{E}[\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2] - \frac{1}{2} \mathbb{E}[\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2] + \frac{1}{2} \alpha_k^2 M^2.$$

最后对 k 从 1 到 K 求和即可得证。 □

在假设条件下, 令 $A_K = \sum_{k=1}^K \alpha_k$, 定义 $\bar{\mathbf{x}}_K = \frac{1}{A_K} \sum_{k=1}^K \alpha_k \mathbf{x}_k$, 则:

$$\mathbb{E}[f(\bar{\mathbf{x}}_K) - f(\mathbf{x}^*)] \leq \frac{R^2 + \sum_{k=1}^K \alpha_k^2 M^2}{2 \sum_{k=1}^K \alpha_k}.$$

由 f 的凸性和上面的定理有:

$$A_K \mathbb{E}[f(\bar{\mathbf{x}}_K) - f(\mathbf{x}^*)] \leq \sum_{k=1}^K \alpha_k \mathbb{E}[f(\bar{\mathbf{x}}_K) - f(\mathbf{x}^*)] \leq \frac{R^2 + \sum_{k=1}^K \alpha_k^2 M^2}{2}$$

然后两边除以 A_K 即可。

3.8 障碍函数法

就是罚函数方法。我们考虑不等式优化问题

$$\begin{cases} \min & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} & \mathbf{x} \in X, g_i(\mathbf{x}) \leq 0, 1 \leq i \leq r \end{cases}$$

X 是闭凸集, 优化问题的可行域相对内部为

$$S = \{\mathbf{x} \in X | g_i(\mathbf{x}) < 0, 1 \leq i \leq r\}$$

在内点算法中给我们需要在代价函数中加入一个定义在以上点集合上面的障碍函数 $B(\mathbf{x})$, 如果约束函数 $g_i(\mathbf{x})$ 从负趋于 0, 则对应障碍函数 $B(\mathbf{x})$ 趋于无穷。也就是说迭代的点接近边界的时候我们会让函数值变大, 以给予一定的惩罚。常用的障碍函数也就是

$$B(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^r \ln(-g_i(\mathbf{x})) \quad B(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^r \frac{1}{g_i(\mathbf{x})}$$

其迭代点序列方式为

$$\mathbf{x}_k = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in S} \{f(\mathbf{x}) + \epsilon_k B(\mathbf{x})\}$$

其中 $\{\epsilon_k\} \rightarrow 0$ 且单调递减。整个思想就是我们要迫使一开始的迭代点在内部出现，不要接近边界，而后面随着惩罚函数系数变小，可以让点慢慢靠近边界（有时候一般最小值都在约束的边界上出现）。例如

$$\min_{(x_1, x_2)} \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 \quad B(x_1, x_2) = -\log(x_1 - 2)$$

则迭代序列是

$$\mathbf{x}_k = \operatorname{argmin}_{x_1 > 2} \left\{ \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 - \epsilon_k \log(x_1 - 2) \right\}$$

不难看出在 $(1 + \sqrt{1 + \epsilon_k}, 0)$ 是对应的 ϵ_k 。我们下面证明障碍函数法产生的点序列 $\{\mathbf{x}_k\}$ 的每个极限点是原始约束优化问题的极小值。

证明. 假设 $\{\mathbf{x}_{k_s}\}$ 是 $\{\mathbf{x}_k\}$ 的一个子序列，其极限点是 $\bar{\mathbf{x}}_s$ ，如果 $\bar{\mathbf{x}}_s \in S$ 则因为障碍函数 B 在 S 上面连续，所以

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \epsilon_k B(\mathbf{x}_k) = \lim_{k \rightarrow \infty} \epsilon_k B(\bar{\mathbf{x}}_s) = 0$$

如果 $\bar{\mathbf{x}}_s$ 在 S 的边界上则

$$\lim_{k \rightarrow \infty} B(\bar{\mathbf{x}}_s) = \infty$$

两种情况下都有 $\liminf_{k \rightarrow \infty} \epsilon_k B(\mathbf{x}_k) \geq 0$ 因此

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \{f(\mathbf{x}_k) + \epsilon_k B(\mathbf{x}_k)\} = f(\bar{\mathbf{x}}_s) + \liminf_{k \rightarrow \infty} \{\epsilon_k B(\mathbf{x}_k)\} \geq f(\bar{\mathbf{x}}_s)$$

如果 $\bar{\mathbf{x}}_s$ 不是全局极小值点，则必然存在可行解 \mathbf{x}^* 满足 $f(\mathbf{x}^*) < f(\bar{\mathbf{x}}_s)$ 结合线段原理存在 $\tilde{\mathbf{x}}$ 满足 $f(\tilde{\mathbf{x}}) < f(\bar{\mathbf{x}}_s)$ ，但是又结合 \mathbf{x}_k 是 argmin 的定义有

$$f(\mathbf{x}_k) + \epsilon_k B(\mathbf{x}_k) \leq f(\tilde{\mathbf{x}}) + \epsilon_k B(\tilde{\mathbf{x}})$$

进而 $f(\bar{\mathbf{x}}_s) \leq f(\tilde{\mathbf{x}})$ ，这就和上面的矛盾，从而成立 □