

数值计算

一、数值稳定性

1. 在计算机中执行数学运算需要使用有限的比特位来表达实数，这会引入近似误差。

近似误差可以在多步数值运算中传递、积累，从而导致理论上成功的算法失败。因此数值算法设计时要考虑将累计误差最小化。

2. 当从头开始实现一个数值算法时，需要考虑数值稳定性。当使用现有的数值计算库（如 `tensorflow`）时，不需要考虑数值稳定性。

1.1 上溢出、下溢出

1. 一种严重的误差是下溢出 `underflow`：当接近零的数字四舍五入为零时，发生下溢出。

许多函数在参数为零和参数为一个非常小的正数时，行为是不同的。如：对数函数要求自变量大于零，除法中要求除数非零。

2. 一种严重的误差是上溢出 `overflow`：当数值非常大，超过了计算机的表示范围时，发生上溢出。

3. 一个数值稳定性的例子是 `softmax` 函数。

设 $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ ，则 `softmax` 函数定义为：

$$\text{softmax}(\vec{x}) = \left(\frac{\exp(x_1)}{\sum_{j=1}^n \exp(x_j)}, \frac{\exp(x_2)}{\sum_{j=1}^n \exp(x_j)}, \dots, \frac{\exp(x_n)}{\sum_{j=1}^n \exp(x_j)} \right)^T$$

当所有的 x_i 都等于常数 c 时，`softmax` 函数的每个分量的理论值都为 $\frac{1}{n}$ 。

- 考虑 c 是一个非常大的负数（比如趋近负无穷），此时 $\exp(c)$ 下溢出。此时 $\frac{\exp(c)}{\sum_{j=1}^n \exp(c)}$ 分母为零，结果未定义。
 - 考虑 c 是一个非常大的正数（比如趋近正无穷），此时 $\exp(c)$ 上溢出。 $\frac{\exp(c)}{\sum_{j=1}^n \exp(c)}$ 的结果未定义。
4. 为了解决 `softmax` 函数的数值稳定性问题，令 $\vec{z} = \vec{x} - \max_i x_i$ ，则有 $\text{softmax}(\vec{z})$ 的第 i 个分量为：

$$\begin{aligned} \text{softmax}(\vec{z})_i &= \frac{\exp(z_i)}{\sum_{j=1}^n \exp(z_j)} = \frac{\exp(\max_k x_k) \exp(z_i)}{\exp(\max_k x_k) \sum_{j=1}^n \exp(z_j)} \\ &= \frac{\exp(z_i + \max_k x_k)}{\sum_{j=1}^n \exp(z_j + \max_k x_k)} \\ &= \frac{\exp(x_i)}{\sum_{j=1}^n \exp(x_j)} \\ &= \text{softmax}(\vec{x})_i \end{aligned}$$

- 当 \vec{x} 的分量较小时， \vec{z} 的分量至少有一个为零，从而导致 $\text{softmax}(\vec{z})_i$ 的分母至少有一项为 1，从而解决了下溢出的问题。
 - 当 \vec{x} 的分量较大时， $\text{softmax}(\vec{z})_i$ 相当于分子分母同时除以一个非常大的数 $\exp(\max_i x_i)$ ，从而解决了上溢出。
5. 当 \vec{x} 的分量 x_i 较小时， $\text{softmax}(\vec{x})_i$ 的计算结果可能为 0。此时 $\log \text{softmax}(\vec{x})$ 趋向于负无穷，因此存在数值稳定性问题。
 - 通常需要设计专门的函数来计算 $\log \text{softmax}$ ，而不是将 `softmax` 的结果传递给 `log` 函数。

- $\log \text{softmax}(\cdot)$ 函数应用非常广泛。通常将 softmax 函数的输出作为模型的输出。由于一般使用样本的交叉熵作为目标函数，因此需要用到 softmax 输出的对数。

6. softmax 名字的来源是 hardmax 。

- hardmax 把一个向量 \vec{x} 映射成向量 $(0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$ 。即： \vec{x} 最大元素的位置填充 1，其它位置填充 0。
- softmax 会在这些位置填充 $0.0 \sim 1.0$ 之间的值（如：某个概率值）。

1.2 Conditioning

1. Conditioning 刻画了一个函数的如下特性：当函数的输入发生了微小的变化时，函数的输出的变化有多大。

对于 Conditioning 较大的函数，在数值计算中可能有问题。因为函数输入的舍入误差可能导致函数输出的较大变化。

2. 对于方阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ，其条件数 condition number 为：

$$\text{condition number} = \max_{1 \leq i, j \leq n, i \neq j} \left| \frac{\lambda_i}{\lambda_j} \right|$$

其中 $\lambda_i, i = 1, 2, \dots, n$ 为 \mathbf{A} 的特征值。

- 方阵的条件数就是最大的特征值除以最小的特征值。
- 当方阵的条件数很大时，矩阵的求逆将对误差特别敏感（即： \mathbf{A} 的一个很小的扰动，将导致其逆矩阵一个非常明显的变化）。
- 条件数是矩阵本身的特性，它会放大那些包含矩阵求逆运算过程中的误差。

二、梯度下降法

1. 梯度下降法是求解无约束最优化问题的一种常见方法，优点是实现简单。

2. 对于函数： $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ，假设输入 $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ ，则定义梯度：

$$\nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} f(\vec{x}), \frac{\partial}{\partial x_2} f(\vec{x}), \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} f(\vec{x}) \right)^T$$

函数的驻点满足： $\nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}) = \vec{0}$ 。

3. 沿着方向 \vec{u} 的方向导数 $\text{directional derivative}$ 定义为：

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{f(\vec{x} + \alpha \vec{u}) - f(\vec{x})}{\alpha}$$

其中 \vec{u} 为单位向量。

方向导数就是 $\frac{\partial}{\partial \alpha} f(\vec{x} + \alpha \vec{u})$ 。根据链式法则，它也等于 $\vec{u}^T \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x})$ 。

3. 为了最小化 f ，则寻找一个方向：沿着该方向，函数值减少的速度最快（换句话说，就是增加最慢）。即：

$$\begin{aligned} & \min_{\vec{u}} \vec{u}^T \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}) \\ & s. t. \quad \|\vec{u}\|_2 = 1 \end{aligned}$$

假设 \vec{u} 与梯度的夹角为 θ ，则目标函数等于： $\|\vec{u}\|_2 \|\nabla_{\vec{x}} f(\vec{x})\|_2 \cos \theta$ 。

考虑到 $\|\vec{u}\|_2 = 1$ ，以及梯度的大小与 θ 无关，于是上述问题转化为：

$$\min_{\theta} \cos \theta$$

于是： $\theta^* = \pi$ ，即 \vec{u} 沿着梯度的相反的方向。即：梯度的方向是函数值增加最快的方向，梯度的相反方向是函数值减小的最快的方向。

因此：可以沿着负梯度的方向来降低 f 的值，这就是梯度下降法。

4. 根据梯度下降法，为了寻找 f 的最小点，迭代过程为： $\vec{x}' = \vec{x} - \epsilon \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x})$ 。其中： ϵ 为学习率，它是一个正数，决定了迭代的步长。

迭代结束条件为：梯度向量 $\nabla_{\vec{x}} f(\vec{x})$ 的每个成分为零或者非常接近零。

5. 选择学习率有多种方法：

- 一种方法是：选择 ϵ 为一个小的、正的常数。
- 另一种方法是：给定多个 ϵ ，然后选择使得 $f(\vec{x} - \epsilon \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}))$ 最小的那个值作为本次迭代的学习率（即：选择一个使得目标函数下降最大的学习率）。

这种做法叫做线性搜索 `line search`。

- 第三种方法是：求得使 $f(\vec{x} - \epsilon \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}))$ 取极小值的 ϵ ，即求解最优化问题：

$$\epsilon^* = \arg \min_{\epsilon, \epsilon > 0} f(\vec{x} - \epsilon \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}))$$

这种方法也称作最速下降法。

- 在最速下降法中，假设相邻的三个迭代点分别为： $\vec{x}^{<k>}$, $\vec{x}^{<k+1>}$, $\vec{x}^{<k+2>}$ ，可以证明： $(\vec{x}^{<k+1>} - \vec{x}^{<k>}) \cdot (\vec{x}^{<k+2>} - \vec{x}^{<k+1>}) = 0$ 。即相邻的两次搜索的方向是正交的！

证明：

$$\begin{aligned}\vec{x}^{<k+1>} &= \vec{x}^{<k>} - \epsilon^{<k>} \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}^{<k>}) \\ \vec{x}^{<k+2>} &= \vec{x}^{<k+1>} - \epsilon^{<k+1>} \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}^{<k+1>})\end{aligned}$$

根据最优化问题，有：

$$\epsilon^{<k>} = \arg \min_{\epsilon, \epsilon > 0} f(\vec{x}^{<k+1>})$$

将 $\vec{x}^{<k+1>} = \vec{x}^{<k>} - \epsilon \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}^{<k>})$ 代入，有：

$$f(\vec{x}^{<k+1>}) = f(\vec{x}^{<k>} - \epsilon \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}^{<k>}))$$

为求 $f(\vec{x}^{<k+1>})$ 极小值，则求解： $\frac{\partial f(\vec{x}^{<k>} - \epsilon \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}^{<k>}))}{\partial \epsilon} \Big|_{\epsilon = \epsilon^{<k>}} = 0$ 。

根据链式法则：

$$\frac{\partial f(\vec{x}^{<k>} - \epsilon \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}^{<k>}))}{\partial \epsilon} = \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}^{<k>} - \epsilon \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}^{<k>})) \cdot [-\nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}^{<k>})] = 0$$

即： $\nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}^{<k+1>}) \cdot \nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}^{<k>}) = 0$ 。则有： $(\vec{x}^{<k+2>} - \vec{x}^{<k+1>}) \cdot (\vec{x}^{<k+1>} - \vec{x}^{<k>}) = 0$ 。

- 此时迭代的路线是锯齿形的，因此收敛速度较慢。

6. 某些情况下如果梯度向量 $\nabla_{\vec{x}} f(\vec{x})$ 的形式比较简单，则可以直接求解方程： $\nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}) = \vec{0}$ 。

此时不用任何迭代，直接获得解析解。

7. 梯度下降算法：

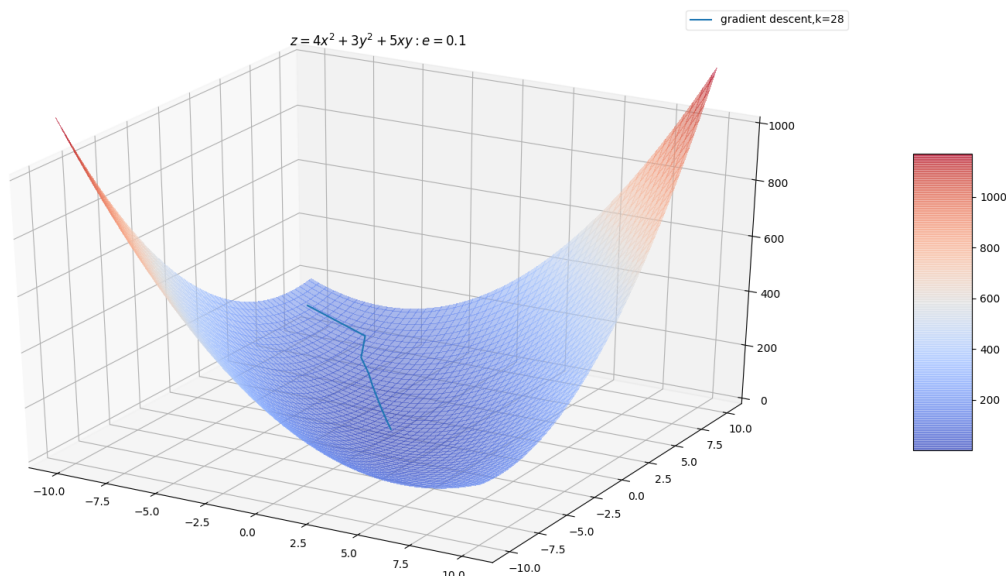
- 输入：
 - 目标函数 $f(\vec{x})$
 - 梯度函数 $g(\vec{x}) = \nabla f(\vec{x})$

- 计算精度 e
- 输出: $f(\bar{\mathbf{x}})$ 的极小点 $\bar{\mathbf{x}}^*$
- 算法步骤:
 - 选取初始值 $\bar{\mathbf{x}}^{<0>} \in \mathbb{R}^n$, 置 $k = 0$ 。
 - 迭代, 停止条件为: 梯度收敛或者目标函数收敛。迭代步骤为:
 - 计算目标函数 $f(\bar{\mathbf{x}}^{<k>})$, 计算梯度 $\bar{\mathbf{g}}_k = g(\bar{\mathbf{x}}^{<k>})$ 。
 - 若梯度 $|\bar{\mathbf{g}}_k| < e$, 则停止迭代, $\bar{\mathbf{x}}^* = \bar{\mathbf{x}}$ 。
 - 若梯度 $|\bar{\mathbf{g}}_k| \geq e$, 则令 $\bar{\mathbf{p}}_k = -\bar{\mathbf{g}}_k$, 求 ϵ_k : $\epsilon_k = \min_{\epsilon \leq 0} f(\bar{\mathbf{x}}^{<k>} + \epsilon \bar{\mathbf{p}}_k)$ 。

通常这也是个最小化问题。但是可以给定一系列的 ϵ_k 的值, 如:

`[10, 1, 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001]`。然后从中挑选使得目标函数最小的那个。

- 令 $\bar{\mathbf{x}}^{<k+1>} = \bar{\mathbf{x}}^{<k>} + \epsilon_k \bar{\mathbf{p}}_k$, 计算 $f(\bar{\mathbf{x}}^{<k+1>})$ 。
 - 若 $|f(\bar{\mathbf{x}}^{<k+1>}) - f(\bar{\mathbf{x}}^{<k>})| < e$ 或者 $|\bar{\mathbf{x}}^{<k+1>} - \bar{\mathbf{x}}^{<k>}| < e$ 时, 停止迭代, 此时 $\bar{\mathbf{x}}^* = \bar{\mathbf{x}}$ 。
 - 否则, 令 $k = k + 1$, 计算梯度 $\bar{\mathbf{g}}_k = g(\bar{\mathbf{x}}^{<k>})$ 继续迭代。



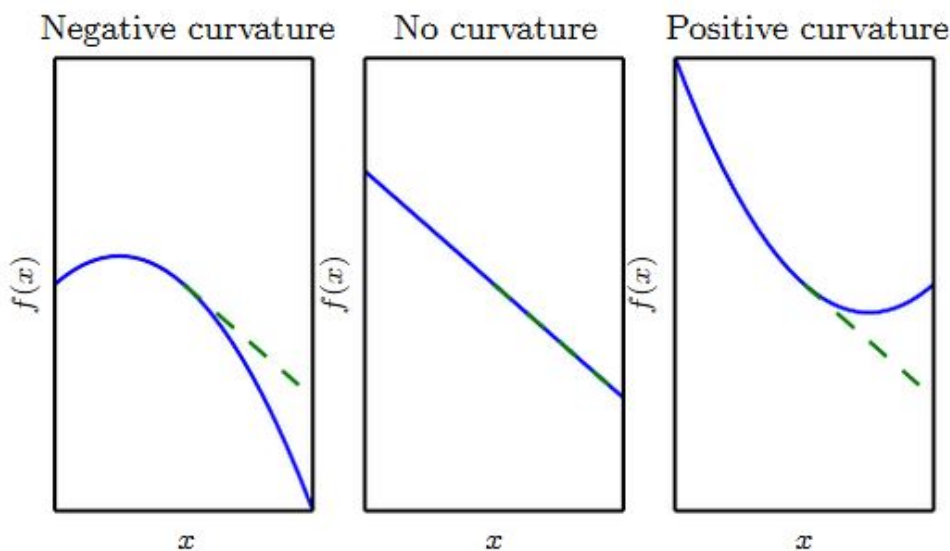
8. 当目标函数是凸函数时, 梯度下降法的解是全局最优的。通常情况下, 梯度下降法的解不保证是全局最优的。
9. 梯度下降法的收敛速度未必是最快的。

三、二阶导数与海森矩阵

3.1 海森矩阵

1. 二阶导数 $f''(x)$ 刻画了曲率。假设有一个二次函数 (实际任务中, 很多函数不是二次的, 但是在局部可以近似为二次函数):
 - 如果函数的二阶导数为零, 则它是一条直线。如果梯度为 1, 则当沿着负梯度的步长为 ϵ 时, 函数值减少 ϵ 。
 - 如果函数的二阶导数为负, 则函数向下弯曲。如果梯度为 1, 则当沿着负梯度的步长为 ϵ 时, 函数值减少的量大于 ϵ 。

- 如果函数的二阶导数为正，则函数向上弯曲。如果梯度为1，则当沿着负梯度的步长为 ϵ 时，函数值减少的量少于 ϵ 。



2. 当函数输入为多维时，定义海森矩阵：

$$\mathbf{H}(f)(\vec{\mathbf{x}}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_1} f & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} f & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_n} f \\ \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_1} f & \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_2} f & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_n} f \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_1} f & \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_2} f & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_n} f \end{bmatrix}$$

即海森矩阵的第 i 行 j 列元素为： $\mathbf{H}_{i,j} = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} f(\vec{\mathbf{x}})$ 。

3. 当二阶偏导是连续时，海森矩阵是对称阵，即有： $\mathbf{H} = \mathbf{H}^T$ 。

在深度学习中大多数海森矩阵都是对称阵。

4. 对于特定方向 $\vec{\mathbf{d}}$ 上的二阶导数为： $\vec{\mathbf{d}}^T \mathbf{H} \vec{\mathbf{d}}$ 。

- 如果 $\vec{\mathbf{d}}$ 是海森矩阵的特征向量，则该方向上的二阶导数就是对应的特征值。
- 如果 $\vec{\mathbf{d}}$ 不是海森矩阵的特征向量，则该方向上的二阶导数就是所有特征值的加权平均，权重在 $(0, 1)$ 之间。且与 $\vec{\mathbf{d}}$ 夹角越小的特征向量对应的特征值具有更大的权重。
- 最大特征值确定了最大二阶导数，最小特征值确定最小二阶导数。

3.2 海森矩阵与学习率

1. 将 $f(\vec{\mathbf{x}})$ 在 $\vec{\mathbf{x}}_0$ 处泰勒展开： $f(\vec{\mathbf{x}}) \approx f(\vec{\mathbf{x}}_0) + (\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)^T \vec{\mathbf{g}} + \frac{1}{2}(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)^T \mathbf{H}(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)$ 。其中： $\vec{\mathbf{g}}$ 为 $\vec{\mathbf{x}}_0$ 处的梯度； \mathbf{H} 为 $\vec{\mathbf{x}}_0$ 处的海森矩阵。

根据梯度下降法： $\vec{\mathbf{x}}' = \vec{\mathbf{x}} - \epsilon \nabla_{\vec{\mathbf{x}}} f(\vec{\mathbf{x}})$ 。

应用在点 $\vec{\mathbf{x}}_0$ ，有： $f(\vec{\mathbf{x}}_0 - \epsilon \vec{\mathbf{g}}) \approx f(\vec{\mathbf{x}}_0) - \epsilon \vec{\mathbf{g}}^T \vec{\mathbf{g}} + \frac{1}{2} \epsilon^2 \vec{\mathbf{g}}^T \mathbf{H} \vec{\mathbf{g}}$ 。

- 第一项代表函数在点 $\vec{\mathbf{x}}_0$ 处的值。
 - 第二项代表由于斜率的存在，导致函数值的变化。
 - 第三项代表由于曲率的存在，对于函数值变化的矫正。
2. 注意：如果 $\frac{1}{2} \epsilon^2 \vec{\mathbf{g}}^T \mathbf{H} \vec{\mathbf{g}}$ 较大，则很有可能导致：沿着负梯度的方向，函数值反而增加！
- 如果 $\vec{\mathbf{g}}^T \mathbf{H} \vec{\mathbf{g}} \leq 0$ ，则无论 ϵ 取多大的值，可以保证函数值是减小的。

- 如果 $\vec{g}^T \mathbf{H} \vec{g} > 0$ ，则学习率 ϵ 不能太大。若 ϵ 太大则函数值增加。
 - 根据 $f(\vec{x}_0 - \epsilon \vec{g}) - f(\vec{x}_0) < 0$ ，则需要满足： $\epsilon < \frac{2\vec{g}^T \vec{g}}{\vec{g}^T \mathbf{H} \vec{g}}$ 。若 $\epsilon \geq \frac{2\vec{g}^T \vec{g}}{\vec{g}^T \mathbf{H} \vec{g}}$ ，则会导致沿着负梯度的方向函数值在增加。
 - 考虑最速下降法，选择使得 f 下降最快的 ϵ ，则有： $\epsilon^* = \arg \min_{\epsilon, \epsilon > 0} f(\vec{x}_0 - \epsilon \vec{g})$ 。求解 $\frac{\partial}{\partial \epsilon} f(\vec{x}_0 - \epsilon \vec{g}) = 0$ 有： $\epsilon^* = \frac{\vec{g}^T \vec{g}}{\vec{g}^T \mathbf{H} \vec{g}}$ 。

根据 $\vec{g}^T \mathbf{H} \vec{g} > 0$ ，很明显有： $\epsilon^* < \frac{2\vec{g}^T \vec{g}}{\vec{g}^T \mathbf{H} \vec{g}}$ 。

3. 由于海森矩阵为实对称阵，因此它可以进行特征值分解。假设其特征值从大到小排列为： $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ 。

海森矩阵的瑞利商为： $R(\vec{x}) = \frac{\vec{x}^T \mathbf{H} \vec{x}}{\vec{x}^T \vec{x}}, \vec{x} \neq \vec{0}$ 。可以证明：

$$\lambda_n \leq R(\vec{x}) \leq \lambda_1$$

$$\lambda_1 = \max_{\vec{x} \neq \vec{0}} R(\vec{x})$$

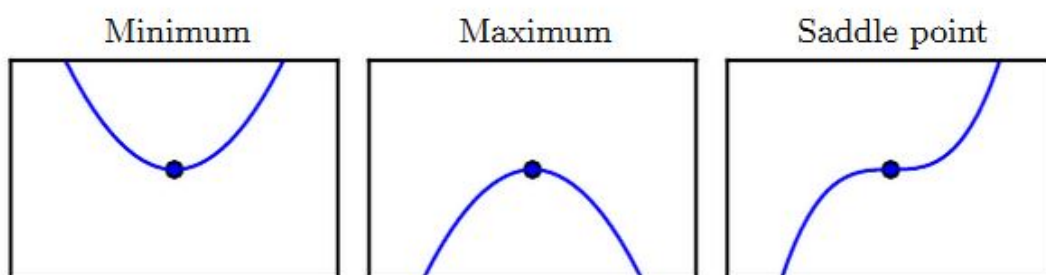
$$\lambda_n = \min_{\vec{x} \neq \vec{0}} R(\vec{x})$$

根据 $\epsilon^* = \frac{\vec{g}^T \vec{g}}{\vec{g}^T \mathbf{H} \vec{g}} = \frac{1}{R(\vec{g})}$ 可知：海森矩阵决定了学习率的取值范围。最坏的情况下，梯度 \vec{g} 与海森矩阵最大特征值 λ_1 对应的特征向量平行，则此时最优学习率为 $\frac{1}{\lambda_1}$ 。

3.3 驻点与全局极小点

1. 满足导数为零的点（即 $f'(x) = 0$ ）称作驻点。驻点可能为下面三种类型之一：

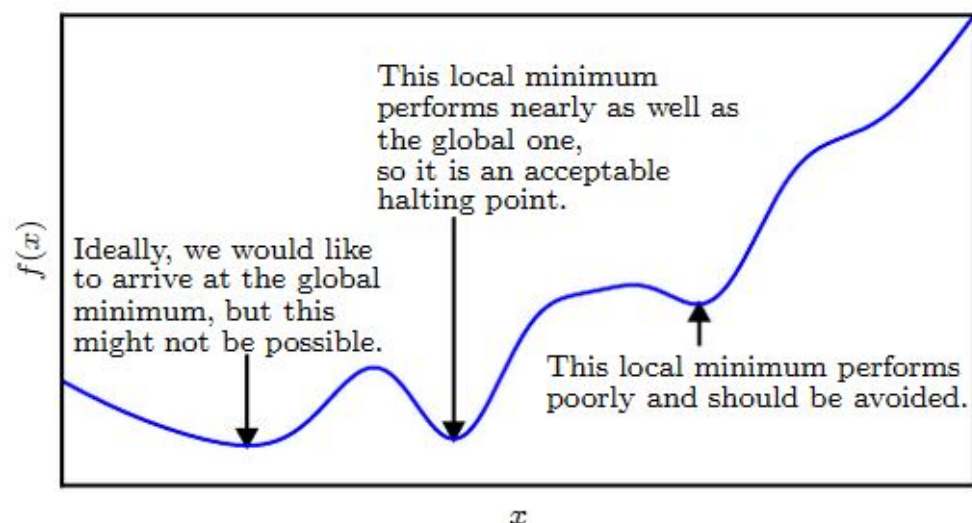
- 局部极小点：在 x 的一个邻域内，该点的值最小。
- 局部极大点：在 x 的一个邻域内，该点的值最大。
- 鞍点：既不是局部极小，也不是局部极大。



2. 全局极小点： $x^* = \arg \min_x f(x)$ 。

- 全局极小点可能有一个或者多个。
- 在深度学习中，目标函数很可能具有非常多的局部极小点，以及许多位于平坦区域的鞍点。这使得优化非常不利。

因此通常选取一个非常低的目标函数值，而不一定要全局最小值。



3. 二阶导数可以配合一阶导数来决定驻点的类型：

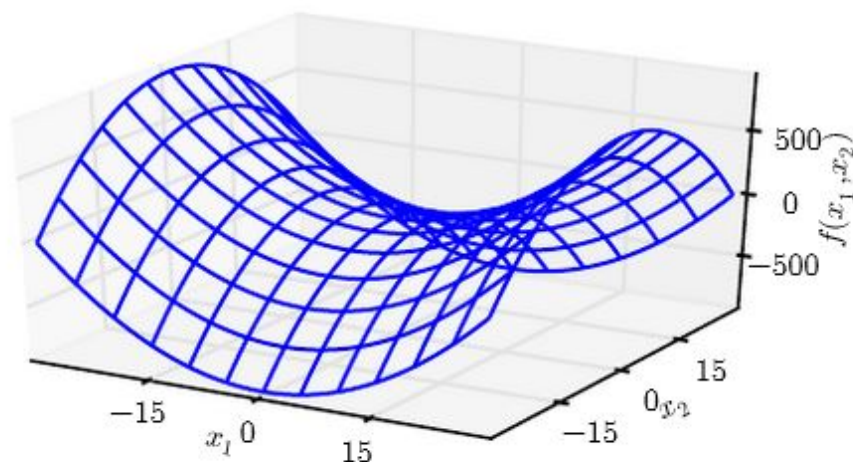
- 局部极小点： $f'(x) = 0, f''(x) > 0$ 。
- 局部极大点： $f'(x) = 0, f''(x) < 0$ 。
- $f'(x) = 0, f''(x) = 0$ ：驻点的类型可能为任意三者之一。

4. 对于多维的情况类似有：

- 局部极小点： $\nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}) = 0$ ，且海森矩阵为正定的（即所有的特征值都是正的）。
当海森矩阵为正定时，任意方向的二阶偏导数都是正的。
- 局部极大点： $\nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}) = 0$ ，且海森矩阵为负定的（即所有的特征值都是负的）。
当海森矩阵为负定时，任意方向的二阶偏导数都是负的。
- $\nabla_{\vec{x}} f(\vec{x}) = 0$ ，且海森矩阵的特征值中至少一个正值、至少一个负值时，为鞍点。
- 当海森矩阵非上述情况时，驻点类型无法判断。

下图为 $f(\vec{x}) = x_1^2 - x_2^2$ 在原点附近的等值线。其海森矩阵为一正一负。

- 沿着 x_1 方向，曲线向上弯曲；沿着 x_2 方向，曲线向下弯曲。
- 鞍点就是在一个横截面内的局部极小值，另一个横截面内的局部极大值。



四、牛顿法

1. 梯度下降法有个缺陷：它未能利用海森矩阵的信息。

- 当海森矩阵的条件数较大时，不同方向的梯度的变化差异很大。

- 在某些方向上，梯度变化很快；在有些方向上，梯度变化很慢。

- 梯度下降法未能利用海森矩阵，也就不知道应该优先搜索导数长期为负或者长期为正的方向。

本质上应该沿着负梯度方向搜索。但是沿着该方向的一段区间内，如果导数一直为正或者一直为负，则可以直接跨过该区间。前提是：必须保证该区间内，该方向导数不会发生正负改变。

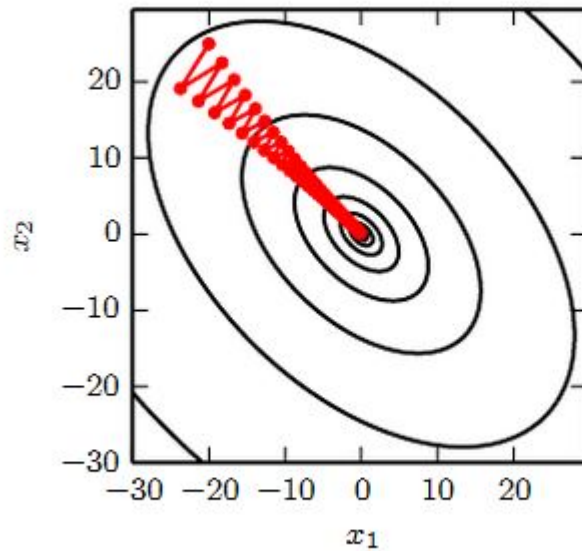
- 当海森矩阵的条件数较大时，也难以选择合适的步长。

- 步长必须足够小，从而能够适应较强曲率的地方（对应着较大的二阶导数，即该区域比较陡峭）。

- 但是如果步长太小，对于曲率较小的地方（对应着较小的二阶导数，即该区域比较平缓）则推进太慢。

2. 下图是利用梯度下降法寻找函数最小值的路径。该函数是二次函数，海森矩阵条件数为 5，表明最大曲率是最小曲率的5倍。红线为梯度下降的搜索路径。

它没有用最速下降法，而是用到线性搜索。如果是最速下降法，则相邻两次搜索的方向正交。



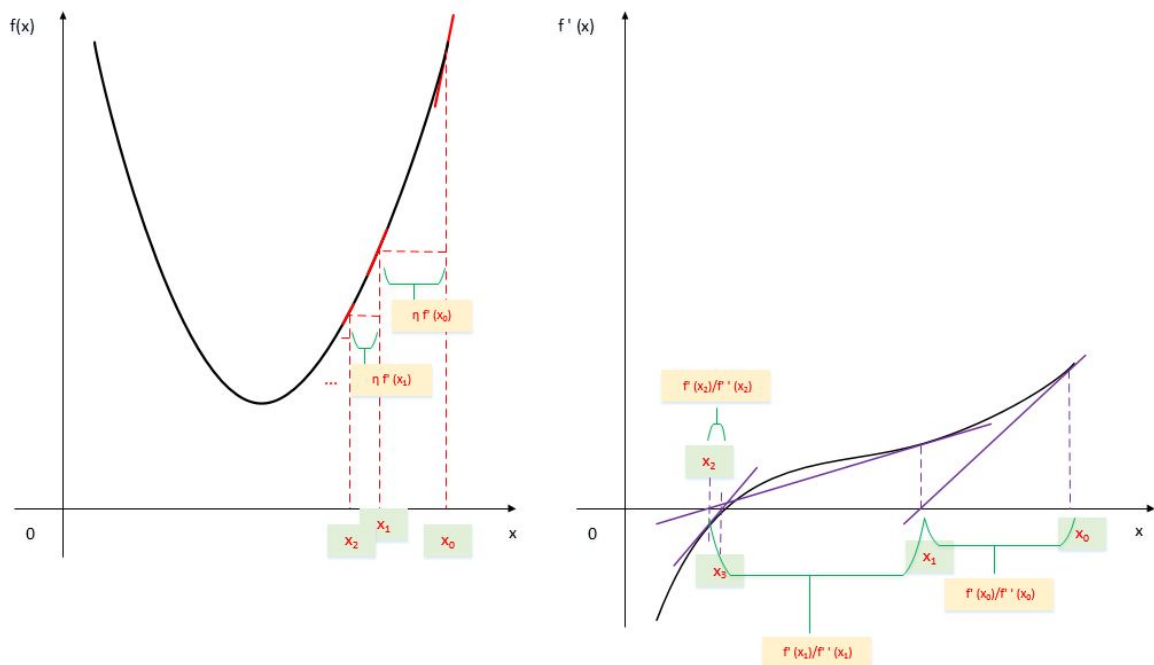
3. 牛顿法结合了海森矩阵。

考虑泰勒展开式： $f(\vec{x}) \approx f(\vec{x}_0) + (\vec{x} - \vec{x}_0)^T \vec{g} + \frac{1}{2}(\vec{x} - \vec{x}_0)^T \mathbf{H}(\vec{x} - \vec{x}_0)$ 。其中 \vec{g} 为 \vec{x}_0 处的梯度； \mathbf{H} 为 \vec{x}_0 处的海森矩阵。

如果 \vec{x} 为极值点，则有： $\frac{\partial}{\partial \vec{x}} f(\vec{x}) = \vec{0}$ ，则有： $\vec{x}^* = \vec{x}_0 - \mathbf{H}^{-1} \vec{g}$ 。

- 当 f 是个正定的二次型，则牛顿法直接一次就能到达最小值点。
- 当 f 不是正定的二次型，则可以在局部近似为正定的二次型，那么则采用多次牛顿法即可到达最小值点。

4. 一维情况下，梯度下降法和牛顿法的原理展示：



- 梯度下降法：下一次迭代的点 $\vec{x}^{<k+1>} = \vec{x}^{<k>} - \epsilon_k \nabla f(\vec{x})$ 。

对于一维的情况，可以固定 $\epsilon_k = \eta$ 。由于随着迭代的推进， $f'(x)$ 绝对值是减小的（直到0），因此越靠近极值点， $\Delta(x)$ 越小。

- 牛顿法：目标是 $\nabla f(\vec{x}) = 0$ 。

在一维情况下就是求解 $f'(x) = 0$ 。牛顿法的方法是：以 $x = x^{<k>}$ 做 $y = f'(x)$ 切线，该切线过点 $(x^{<k>}, f'(x^{<k>}))$ 。该切线在 x 轴上的交点就是： $x^{<k+1>} = x^{<k>} - \frac{f'(x^{<k>})}{f''(x^{<k>})}$ 。

推广到多维情况下就是： $\vec{x}^{<k+1>} = \vec{x}^{<k>} - \mathbf{H}_k^{-1} \vec{g}_k$ 。

5. 当位于一个极小值点附近时，牛顿法比梯度下降法能更快地到达极小值点。

如果在一个鞍点附近，牛顿法效果很差，因为牛顿法会主动跳入鞍点。而梯度下降法此时效果较好（除非负梯度的方向刚好指向了鞍点）。

6. 仅仅利用了梯度的优化算法（如梯度下降法）称作一阶优化算法，同时利用了海森矩阵的优化算法（如牛顿法）称作二阶优化算法。

7. 牛顿法算法：

- 输入：

- 目标函数 $f(\vec{x})$
- 梯度 $g(\vec{x}) = \nabla f(\vec{x})$
- 海森矩阵 $\mathbf{H}(\vec{x})$
- 精度要求 e

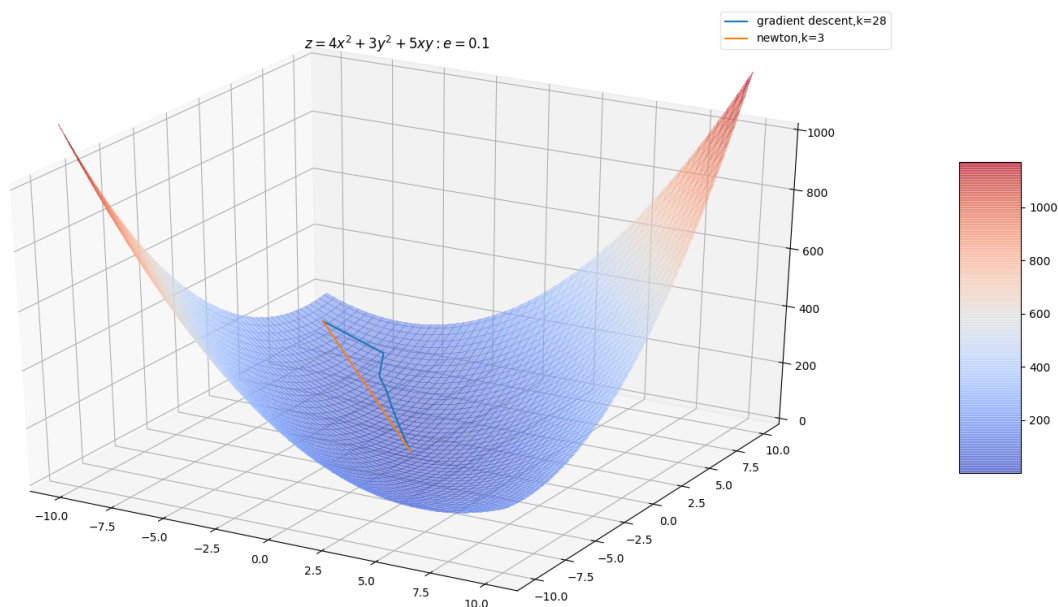
- 输出： $f(\vec{x})$ 的极小值点 \vec{x}^*

- 算法步骤：

- 选取初始值 $\vec{x}^{<0>} \in \mathbb{R}^n$ ，置 $k = 0$ 。
- 迭代，停止条件为：梯度收敛。迭代步骤为：
 - 计算 $\vec{g}_k = g(\vec{x}^{<k>})$ 。
 - 若 $|\vec{g}_k| < e$ ，则停止计算，得到近似解 $\vec{x} = \vec{x}^*$ 。
 - 若 $|\vec{g}_k| \geq e$ ，则：
 - 计算 $\mathbf{H}_k = \mathbf{H}(\vec{x}^{<k>})$ ，并求 \vec{p}_k ，使得： $\mathbf{H}_k \vec{p}_k = -\vec{g}_k$ 。
 - 置 $\vec{x}^{<k+1>} = \vec{x}^{<k>} + \vec{p}_k$ 。
 - 置 $k = k + 1$ ，继续迭代。

8. 梯度下降法中，每一次 \vec{x} 增加的方向一定是梯度相反的方向 $-\epsilon_k \nabla_k$ 。增加的幅度由 ϵ_k 决定，若跨度过大容易引发震荡。

而牛顿法中，每一次 \vec{x} 增加的方向是梯度增速最大的反方向 $-\mathbf{H}_k^{-1} \nabla_k$ （它通常情况下与梯度不共线）。增加的幅度已经包含在 \mathbf{H}_k^{-1} 中（也可以乘以学习率作为幅度的系数）。



9. 深度学习中的目标函数非常复杂，无法保证可以通过上述优化算法进行优化。因此有时会限定目标函数具有 Lipschitz 连续，或者其导数 Lipschitz 连续。

- Lipschitz 连续的定义：对于函数 f ，存在一个 Lipschitz 常数 \mathcal{L} ，使得：

$$\forall \vec{x}, \vec{y}, |f(\vec{x}) - f(\vec{y})| \leq \mathcal{L} \|\vec{x} - \vec{y}\|_2$$

- Lipschitz 连续的意义是：输入的一个很小的变化，会引起输出的一个很小的变化。

与之相反的是：输入的一个很小的变化，会引起输出的一个很大的变化

10. 凸优化在某些特殊的领域取得了巨大的成功。但是在深度学习中，大多数优化问题都难以用凸优化来描述。

凸优化的重要性在深度学习中大大降低。凸优化仅仅作为一些深度学习算法的子程序。

五、拟牛顿法

5.1 原理

1. 在牛顿法的迭代中，需要计算海森矩阵的逆矩阵 \mathbf{H}^{-1} ，这一计算比较复杂。

可以考虑用一个 n 阶矩阵 $\mathbf{G}_k = G(\vec{x}^{<k>})$ 来近似代替 $\mathbf{H}_k^{-1} = H^{-1}(\vec{x}^{<k>})$ 。

2. 先看海森矩阵满足的条件： $\vec{g}_{k+1} - \vec{g}_k = \mathbf{H}_k(\vec{x}^{<k+1>} - \vec{x}^{<k>})$ 。

- 令 $\vec{y}_k = \vec{g}_{k+1} - \vec{g}_k$, $\vec{\delta}_k = \vec{x}^{<k+1>} - \vec{x}^{<k>}$ 。则有： $\vec{y}_k = \mathbf{H}_k \vec{\delta}_k$ ，或者 $\mathbf{H}_k^{-1} \vec{y}_k = \vec{\delta}_k$ 。

这称为拟牛顿条件。

- 根据牛顿法的迭代： $\vec{x}^{<k+1>} = \vec{x}^{<k>} - \mathbf{H}_k^{-1} \vec{g}_k$ ，将 $f(\vec{x})$ 在 $\vec{x}^{<k>}$ 的一阶泰勒展开：

$$\begin{aligned} f(\vec{x}^{<k+1>}) &= f(\vec{x}^{<k>}) + f'(\vec{x}^{<k>})(\vec{x}^{<k+1>} - \vec{x}^{<k>}) \\ &= f(\vec{x}^{<k>}) + \vec{g}_k^T (-\mathbf{H}_k^{-1} \vec{g}_k) = f(\vec{x}^{<k>}) - \vec{g}_k^T \mathbf{H}_k^{-1} \vec{g}_k \end{aligned}$$

当 \mathbf{H}_k 是正定矩阵时，总有 $f(\vec{x}^{<k+1>}) < f(\vec{x}^{<k>})$ ，因此每次都是沿着函数递减的方向迭代。

3. 如果选择 \mathbf{G}_k 作为 \mathbf{H}_k^{-1} 的近似时， \mathbf{G}_k 同样要满足两个条件：

- \mathbf{G}_k 必须是正定的。

- \mathbf{G}_k 满足拟牛顿条件： $\mathbf{G}_{k+1}\bar{\mathbf{y}}_k = \bar{\delta}_k$ 。

因为 \mathbf{G}_0 是给定的初始化条件，所以下标从 $k+1$ 开始。

按照拟牛顿条件，在每次迭代中可以选择更新矩阵 $\mathbf{G}_{k+1} = \mathbf{G}_k + \Delta\mathbf{G}_k$ 。

4. 正定矩阵定义：设 \mathbf{M} 是 $n \times n$ 阶方阵，如果对于任何非零向量 $\bar{\mathbf{x}}$ ，都有 $\bar{\mathbf{x}}^T \mathbf{M} \bar{\mathbf{x}} > 0$ ，就称 \mathbf{M} 正定矩阵。

- 正定矩阵判定：
 - 判定定理1：对称阵 \mathbf{M} 为正定的充分必要条件是： \mathbf{M} 的特征值全为正。
 - 判定定理2：对称阵 \mathbf{M} 为正定的充分必要条件是： \mathbf{M} 的各阶顺序主子式都为正。
 - 判定定理3：任意阵 \mathbf{M} 为正定的充分必要条件是： \mathbf{M} 合同于单位阵。
- 正定矩阵的性质：
 - 正定矩阵一定是非奇异的。奇异矩阵的定义：若 $n \times n$ 阶矩阵 \mathbf{M} 为奇异阵，则其的行列式为零，即 $|\mathbf{M}| = 0$ 。
 - 正定矩阵的任一主子矩阵也是正定矩阵。
 - 若 \mathbf{M} 为 $n \times n$ 阶对称正定矩阵，则存在唯一的主对角线元素都是正数的下三角阵 \mathbf{L} ，使得 $\mathbf{M} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ ，此分解式称为 正定矩阵的乔列斯基 (Cholesky) 分解。
 - 若 \mathbf{M} 为 $n \times n$ 阶正定矩阵，则 \mathbf{M} 为 $n \times n$ 阶可逆矩阵。
- 正定矩阵在某个合同变换下可化为标准型，即对角矩阵。
- 所有特征值大于零的对称矩阵也是正定矩阵。

5. 合同矩阵：两个实对称矩阵 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 是合同的，当且仅当存在一个可逆矩阵 \mathbf{P} ，使得 $\mathbf{A} = \mathbf{P}^T \mathbf{B} \mathbf{P}$

- \mathbf{A} 的合同变换：对某个可逆矩阵 \mathbf{P} ，对 \mathbf{A} 执行 $\mathbf{P}^T \mathbf{A} \mathbf{P}$ 。

5.2 DFP 算法

1. DFP 算法 (Davidon-Fletcher-Powell) 选择 \mathbf{G}_{k+1} 的方法是：

假设每一步迭代中 \mathbf{G}_{k+1} 是由 \mathbf{G}_k 加上两个附加项构成： $\mathbf{G}_{k+1} = \mathbf{G}_k + \mathbf{P}_k + \mathbf{Q}_k$ ，其中 $\mathbf{P}_k, \mathbf{Q}_k$ 是待定矩阵。此时有： $\mathbf{G}_{k+1}\bar{\mathbf{y}}_k = \mathbf{G}_k\bar{\mathbf{y}}_k + \mathbf{P}_k\bar{\mathbf{y}}_k + \mathbf{Q}_k\bar{\mathbf{y}}_k$ 。

为了满足拟牛顿条件，可以取： $\mathbf{P}_k\bar{\mathbf{y}}_k = \bar{\delta}_k$ ， $\mathbf{Q}_k\bar{\mathbf{y}}_k = -\mathbf{G}_k\bar{\mathbf{y}}_k$ 。

这样的 $\mathbf{P}_k, \mathbf{Q}_k$ 不止一个。例如取：

$$\mathbf{P}_k = \frac{\bar{\delta}_k \bar{\delta}_k^T}{\bar{\delta}_k^T \bar{\mathbf{y}}_k}, \quad \mathbf{Q}_k = -\frac{\mathbf{G}_k \bar{\mathbf{y}}_k \bar{\mathbf{y}}_k^T \mathbf{G}_k}{\bar{\mathbf{y}}_k^T \mathbf{G}_k \bar{\mathbf{y}}_k}$$

则迭代公式为：

$$\mathbf{G}_{k+1} = \mathbf{G}_k + \frac{\bar{\delta}_k \bar{\delta}_k^T}{\bar{\delta}_k^T \bar{\mathbf{y}}_k} - \frac{\mathbf{G}_k \bar{\mathbf{y}}_k \bar{\mathbf{y}}_k^T \mathbf{G}_k}{\bar{\mathbf{y}}_k^T \mathbf{G}_k \bar{\mathbf{y}}_k}$$

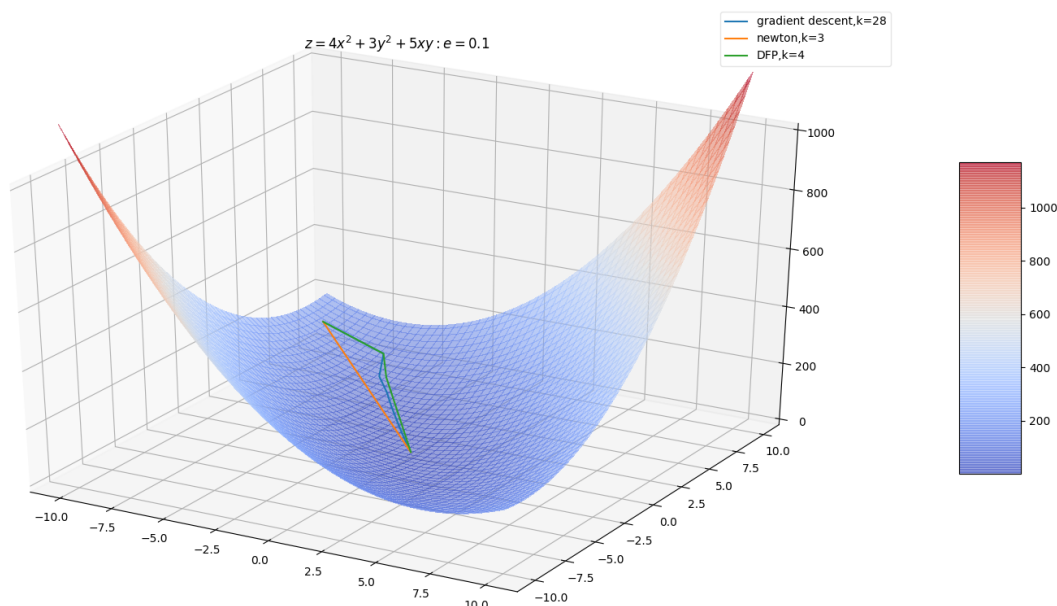
可以证明：如果初始矩阵 \mathbf{G}_0 是正定的，则迭代过程中每个矩阵 \mathbf{G}_k 都是正定的。

2. DFP 算法：

- 输入：
 - 目标函数 $f(\bar{\mathbf{x}})$
 - 梯度 $g(\bar{\mathbf{x}}) = \nabla f(\bar{\mathbf{x}})$
 - 精度要求 ϵ
- 输出： $f(\bar{\mathbf{x}})$ 的极小值点 $\bar{\mathbf{x}}^*$
- 算法步骤：

- 选取初始值 $\bar{\mathbf{x}}^{<0>} \in \mathbb{R}^n$, 取 \mathbf{G}_0 为正定对称矩阵, 置 $k = 0$ 。
- 迭代, 停止条件: 梯度收敛。迭代步骤:
 - 计算 $\bar{\mathbf{g}}_k = g(\bar{\mathbf{x}}^{<k>})$ 。
 - 若 $|\bar{\mathbf{g}}_k| < e$, 则停止计算, 得到近似解 $\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{x}}^*$ 。
 - 若 $|\bar{\mathbf{g}}_k| \geq e$, 则:
 - 计算 $\bar{\mathbf{p}}_k = -\mathbf{G}_k \bar{\mathbf{g}}_k$ 。
 - 一维搜索: 求 ϵ_k : $\epsilon_k = \min_{\epsilon \geq 0} f(\bar{\mathbf{x}}^{<k>} + \epsilon \bar{\mathbf{p}}_k)$ 。
 - 设置 $\bar{\mathbf{x}}^{<k+1>} = \bar{\mathbf{x}}^{<k>} + \epsilon_k \bar{\mathbf{p}}_k$ 。
 - 计算 $\bar{\mathbf{g}}_{k+1} = g(\bar{\mathbf{x}}^{<k+1>})$ 。若 $|\bar{\mathbf{g}}_{k+1}| < e$, 则停止计算, 得到近似解 $\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{x}}^*$ 。
 - 否则计算 \mathbf{G}_{k+1} , 置 $k = k + 1$, 继续迭代。

3. DFP 算法中, 每一次 $\bar{\mathbf{x}}$ 增加的方向是 $-\mathbf{G}_k \nabla_k$ 的方向。增加的幅度由 ϵ_k 决定, 若跨度过大容易引发震荡。



5.2 BFGS 算法

1. BFGS 是最流行的拟牛顿算法。DFP 算法中, 用 \mathbf{G}_k 逼近 \mathbf{H}^{-1} 。换个角度看, 可以用矩阵 \mathbf{B}_k 逼近海森矩阵 \mathbf{H} 。此时对应的拟牛顿条件为: $\mathbf{B}_{k+1} \vec{\delta}_k = \vec{\mathbf{y}}_k$ 。

因为 \mathbf{B}_0 是给定的初始化条件, 所以下标从 $k + 1$ 开始。

2. 令: $\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \mathbf{P}_k + \mathbf{Q}_k$, 有: $\mathbf{B}_{k+1} \vec{\delta}_k = \mathbf{B}_k \vec{\delta}_k + \mathbf{P}_k \vec{\delta}_k + \mathbf{Q}_k \vec{\delta}_k$ 。

可以取 $\mathbf{P}_k \vec{\delta}_k = \vec{\mathbf{y}}_k$, $\mathbf{Q}_k \vec{\delta}_k = -\mathbf{B}_k \vec{\delta}_k$ 。寻找合适的 $\mathbf{P}_k, \mathbf{Q}_k$, 可以得到 BFGS 算法矩阵的 \mathbf{B}_{k+1} 的迭代公式:

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \frac{\vec{\mathbf{y}}_k \vec{\mathbf{y}}_k^T}{\vec{\mathbf{y}}_k^T \vec{\delta}_k} - \frac{\mathbf{B}_k \vec{\delta}_k \vec{\delta}_k^T \mathbf{B}_k}{\vec{\delta}_k^T \mathbf{B}_k \vec{\delta}_k}$$

可以证明, 若 \mathbf{B}_0 是正定的, 则迭代过程中每个矩阵 \mathbf{B}_k 都是正定的。

3. BFGS 算法:

◦ 输入:

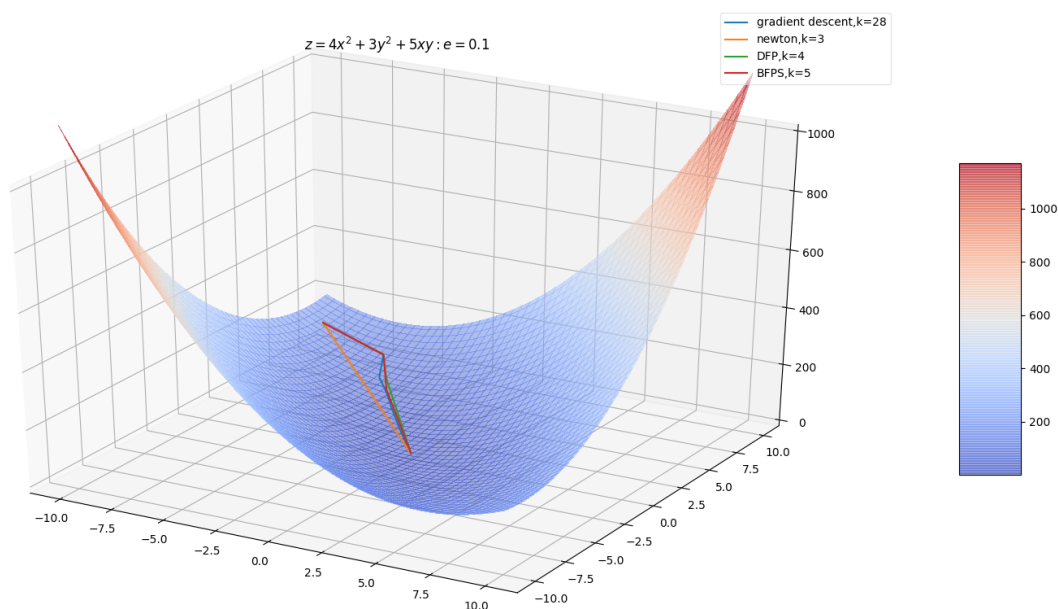
- 目标函数 $f(\bar{\mathbf{x}})$
- 梯度 $g(\bar{\mathbf{x}}) = \nabla f(\bar{\mathbf{x}})$

- 精度要求 e
- 输出: $f(\bar{\mathbf{x}})$ 的极小值点 $\bar{\mathbf{x}}^*$
- 算法步骤:
 - 选取初始值 $\bar{\mathbf{x}}^{<0>} \in \mathbb{R}^n$, 取 \mathbf{B}_0 为正定对称矩阵, 置 $k = 0$ 。
 - 迭代, 停止条件为: 梯度收敛。迭代步骤为:
 - 计算 $\bar{\mathbf{g}}_k = g(\bar{\mathbf{x}}^{<k>})$ 。
 - 若 $|\bar{\mathbf{g}}_k| < e$, 则停止计算, 得到近似解 $\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{x}}^*$ 。
 - 若 $|\bar{\mathbf{g}}_k| \geq e$, 则:
 - 由 $\mathbf{B}_k \bar{\mathbf{p}}_k = -\bar{\mathbf{g}}_k$ 求出 $\bar{\mathbf{p}}_k$ 。

这里表面上看需要对矩阵求逆。但是实际上 \mathbf{B}_k^{-1} 有迭代公式。根据 Sherman-Morrison 公式以及 \mathbf{B}_k 的迭代公式, 可以得到 \mathbf{B}_k^{-1} 的迭代公式。

- 一维搜索: 求 ϵ_k : $\epsilon_k = \min_{\epsilon \geq 0} f(\bar{\mathbf{x}}^{<k>} + \epsilon \bar{\mathbf{p}}_k)$ 。
- 设置 $\bar{\mathbf{x}}^{<k+1>} = \bar{\mathbf{x}}^{<k>} + \epsilon_k \bar{\mathbf{p}}_k$ 。
- 计算 $\bar{\mathbf{g}}_{k+1} = g(\bar{\mathbf{x}}^{<k+1>})$ 。若 $|\bar{\mathbf{g}}_{k+1}| < e$, 则停止计算, 得到近似解 $\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{x}}^*$ 。
- 否则计算 \mathbf{B}_{k+1} , 置 $k = k + 1$, 继续迭代。

4. BFPS 算法中, 每一次 $\bar{\mathbf{x}}$ 增加的方向是 $-\mathbf{B}_k^{-1} \nabla_k$ 的方向。增加的幅度由 ϵ_k 决定, 若跨度过大容易引发震荡。



5.3 Broyden 类算法

1. 若记 $\mathbf{G}_k = \mathbf{B}_k^{-1}$, $\mathbf{G}_{k+1} = \mathbf{B}_{k+1}^{-1}$, 则对式子:

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \frac{\bar{\mathbf{y}}_k \bar{\mathbf{y}}_k^T}{\bar{\mathbf{y}}_k^T \bar{\delta}_k} - \frac{\mathbf{B}_k \bar{\delta}_k \bar{\delta}_k^T \mathbf{B}_k}{\bar{\delta}_k^T \mathbf{B}_k \bar{\delta}_k}$$

使用两次 Sherman-Morrison 公式可得:

$$\mathbf{G}_{k+1} = (\mathbf{I} - \frac{\vec{\delta}_k \vec{\mathbf{y}}_k^T}{\vec{\delta}_k^T \vec{\mathbf{y}}_k}) \mathbf{G}_k (\mathbf{I} - \frac{\vec{\delta}_k \vec{\mathbf{y}}_k^T}{\vec{\delta}_k^T \vec{\mathbf{y}}_k})^T + \frac{\vec{\delta}_k \vec{\delta}_k^T}{\vec{\delta}_k^T \vec{\mathbf{y}}_k}$$

2. 令 DFP 算法获得的 \mathbf{G}_{k+1} 的迭代公式记作：

$$\mathbf{G}^{DFP} = \mathbf{G}_k + \frac{\vec{\delta}_k \vec{\delta}_k^T}{\vec{\delta}_k^T \vec{\mathbf{y}}_k} - \frac{\mathbf{G}_k \vec{\mathbf{y}}_k \vec{\mathbf{y}}_k^T \mathbf{G}_k}{\vec{\mathbf{y}}_k^T \mathbf{G}_k \vec{\mathbf{y}}_k}$$

由 BFGS 算法获得的 \mathbf{G}_{k+1} 的迭代公式记作：

$$\mathbf{G}^{BFGS} = (\mathbf{I} - \frac{\vec{\delta}_k \vec{\mathbf{y}}_k^T}{\vec{\delta}_k^T \vec{\mathbf{y}}_k}) \mathbf{G}_k (\mathbf{I} - \frac{\vec{\delta}_k \vec{\mathbf{y}}_k^T}{\vec{\delta}_k^T \vec{\mathbf{y}}_k})^T + \frac{\vec{\delta}_k \vec{\delta}_k^T}{\vec{\delta}_k^T \vec{\mathbf{y}}_k}$$

他们都满足拟牛顿条件，所以他们的线性组合： $\mathbf{G}_{k+1} = \alpha \mathbf{G}^{DFP} + (1 - \alpha) \mathbf{G}^{BFGS}$ 也满足拟牛顿条件，而且是正定的，其中 $0 \leq \alpha \leq 1$ 。

这样获得了一族拟牛顿法，称为 Broyden 类算法。

3. Sherman-Morrison 公式：假设 \mathbf{A} 是 n 阶可逆矩阵， $\vec{\mathbf{u}}, \vec{\mathbf{v}}$ 是 n 维列向量，且 $\mathbf{A} + \vec{\mathbf{u}} \vec{\mathbf{v}}^T$ 也是可逆矩阵，则：

$$(\mathbf{A} + \vec{\mathbf{u}} \vec{\mathbf{v}}^T)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1} \vec{\mathbf{u}} \vec{\mathbf{v}}^T \mathbf{A}^{-1}}{1 + \vec{\mathbf{v}}^T \mathbf{A}^{-1} \vec{\mathbf{u}}}$$

六、约束优化

1. 在有的最优化问题中，希望输入 $\vec{\mathbf{x}}$ 位于特定的集合 \mathbb{S} 中，这称作约束优化问题。

集合 \mathbb{S} 内的点 $\vec{\mathbf{x}}$ 称作可行解。集合 \mathbb{S} 也称作可行域。

2. 约束优化的一个简单方法是：对梯度下降法进行修改，每次迭代后，将得到的新的 $\vec{\mathbf{x}}$ 映射到集合 \mathbb{S} 中。

如果使用线性搜索：则每次只搜索那些使得新的 $\vec{\mathbf{x}}$ 位于集合 \mathbb{S} 中的那些 ϵ 。

- 另一个做法：将线性搜索得到的新的 $\vec{\mathbf{x}}$ 映射到集合 \mathbb{S} 中。
- 或者：在线性搜索之前，将梯度投影到可行域的切空间内。

3. 在约束最优化问题中，常常利用拉格朗日对偶性将原始问题转换为对偶问题，通过求解对偶问题而得到原始问题的解。

4. 约束最优化问题的原始问题：假设 $f(\vec{\mathbf{x}}), c_i(\vec{\mathbf{x}}), h_j(\vec{\mathbf{x}})$ 是定义在 \mathbb{R}^n 上的连续可微函数。考虑约束最优化问题：

$$\begin{aligned} \min_{\vec{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n} & f(\vec{\mathbf{x}}) \\ s. t. & c_i(\vec{\mathbf{x}}) \leq 0, i = 1, 2, \dots, k; \quad h_j(\vec{\mathbf{x}}) = 0, j = 1, 2, \dots, l \end{aligned}$$

可行域由等式和不等式确定： $\mathbb{S} = \{\vec{\mathbf{x}} \mid c_i(\vec{\mathbf{x}}) \leq 0, i = 1, 2, \dots, k; \quad h_j(\vec{\mathbf{x}}) = 0, j = 1, 2, \dots, l\}$ 。

6.1 原始问题

1. 引入拉格朗日函数：

$$L(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\alpha}, \vec{\beta}) = f(\vec{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^k \alpha_i c_i(\vec{\mathbf{x}}) + \sum_{j=1}^l \beta_j h_j(\vec{\mathbf{x}})$$

这里 $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$, α_i, β_j 是拉格朗日乘子, $\alpha_i \geq 0$ 。

$L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta})$ 是 $\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta}$ 的多元非线性函数。

2. 定义函数：

$$\theta_P(\vec{x}) = \max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta})$$

其中下标 P 表示原始问题。则有：

$$\theta_P(\vec{x}) = \begin{cases} f(\vec{x}), & \text{if } \vec{x} \text{ satisfy original problem's constraint} \\ +\infty, & \text{or else.} \end{cases}$$

- 若 \vec{x} 满足原问题的约束，则很容易证明 $L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta}) = f(\vec{x}) + \sum_{i=1}^k \alpha_i c_i(\vec{x}) \leq f(\vec{x})$ ，等号在 $\alpha_i = 0$ 时取到。
- 若 \vec{x} 不满足原问题的约束：
 - 若不满足 $c_i(\vec{x}) \leq 0$ ：设违反的为 $c_{i_0}(\vec{x}) > 0$ ，则令 $\vec{\alpha}_{i_0} \rightarrow \infty$ ，有：

$$L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta}) = f(\vec{x}) + \sum_{i=1}^k \alpha_i c_i(\vec{x}) \rightarrow \infty。$$
 - 若不满足 $h_j(\vec{x}) = 0$ ：设违反的为 $h_{j_0}(\vec{x}) \neq 0$ ，则令 $\vec{\beta}_{j_0} h_{j_0}(\vec{x}) \rightarrow \infty$ ，有：

$$L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta}) = f(\vec{x}) + \sum_{i=1}^k \alpha_i c_i(\vec{x}) + \vec{\beta}_{j_0} h_{j_0}(\vec{x}) \rightarrow \infty。$$

3. 考虑极小化问题：

$$\min_{\vec{x}} \theta_P(\vec{x}) = \min_{\vec{x}} \max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta})$$

则该问题是与原始最优化问题是等价的，即他们有相同的问题。

- $\min_{\vec{x}} \max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta})$ 称为广义拉格朗日函数的极大极小问题。
- 为了方便讨论，定义原始问题的最优值为： $p^* = \min_{\vec{x}} \theta_P(\vec{x})$ 。

6.2 对偶问题

1. 定义 $\theta_D(\vec{\alpha}, \vec{\beta}) = \min_{\vec{x}} L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta})$ ，考虑极大化 $\theta_D(\vec{\alpha}, \vec{\beta})$ ，即：

$$\max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} \theta_D(\vec{\alpha}, \vec{\beta}) = \max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} \min_{\vec{x}} L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta})$$

问题 $\max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} \min_{\vec{x}} L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta})$ 称为广义拉格朗日函数的极大极小问题。它可以表示为约束最优化问题：

$$\begin{aligned} \max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} \theta_D(\vec{\alpha}, \vec{\beta}) &= \max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} \min_{\vec{x}} L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta}) \\ \text{s.t. } \alpha_i &\geq 0, i = 1, 2, \dots, k \end{aligned}$$

称为原始问题的对偶问题。

为了方便讨论，定义对偶问题的最优值为： $d^* = \max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} \theta_D(\vec{\alpha}, \vec{\beta})$ 。

2. 定理一：若原问题和对偶问题具有最优值，则：

$$d^* = \max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} \min_{\vec{x}} L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta}) \leq \min_{\vec{x}} \max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} L(\vec{x}, \vec{\alpha}, \vec{\beta}) = p^*$$

- 推论一：设 \vec{x}^* 为原始问题的可行解，且 $\theta_P(\vec{x}^*)$ 的值为 p^* ； $\vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*$ 为对偶问题的可行解， $\theta_D(\vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*)$ 值为 d^* 。

如果有 $p^* = d^*$ ，则 $\vec{x}^*, \vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*$ 分别为原始问题和对偶问题的最优解。

3. 定理二：假设函数 $f(\vec{x})$ 和 $c_i(\vec{x})$ 为凸函数， $h_j(\vec{x})$ 是仿射函数；并且假设不等式约束 $c_i(\vec{x})$ 是严格可行的，即存在 \vec{x} ，对于所有 i 有 $c_i(x) < 0$ 。则存在 $\vec{x}^*, \vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*$ ，使得： \vec{x}^* 是原始问题 $\min_{\vec{x}} \theta_P(\vec{x})$ 的解， $\vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*$ 是对偶问题 $\max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} \theta_D(\vec{\alpha}, \vec{\beta})$ 的解，并且 $p^* = d^* = L(\vec{x}^*, \vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*)$ 。
4. 定理三：假设函数 $f(\vec{x})$ 和 $c_i(\vec{x})$ 为凸函数， $h_j(\vec{x})$ 是仿射函数；并且假设不等式约束 $c_i(\vec{x})$ 是严格可行的，即存在 \vec{x} ，对于所有 i 有 $c_i(x) < 0$ 。则存在 $\vec{x}^*, \vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*$ ，使得 \vec{x}^* 是原始问题 $\min_{\vec{x}} \theta_P(\vec{x})$ 的解， $\vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*$ 是对偶问题 $\max_{\vec{\alpha}, \vec{\beta} : \alpha_i \geq 0} \theta_D(\vec{\alpha}, \vec{\beta})$ 的解的充要条件是： $\vec{x}^*, \vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*$ 满足下面的 Karush-kuhn-Tucker (KKT) 条件：

$$\begin{aligned}\nabla_{\vec{x}} L(\vec{x}^*, \vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*) &= 0 \\ \nabla_{\vec{\alpha}} L(\vec{x}^*, \vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*) &= 0 \\ \nabla_{\vec{\beta}} L(\vec{x}^*, \vec{\alpha}^*, \vec{\beta}^*) &= 0 \\ \vec{\alpha}_i^* c_i(\vec{x}^*) &= 0, i = 1, 2, \dots, k \\ c_i(\vec{x}^*) &\leq 0, i = 1, 2, \dots, k \\ \vec{\alpha}_i^* &\geq 0, i = 1, 2, \dots, k \\ h_j(\vec{x}^*) &= 0, j = 1, 2, \dots, l\end{aligned}$$

5. 仿射函数：仿射函数即由 1 阶多项式构成的函数。

一般形式为 $f(\vec{x}) = \mathbf{A}\vec{x} + b$ 。这里： \mathbf{A} 是一个 $m \times k$ 矩阵， \vec{x} 是一个 k 维列向量， b 是一个 m 维列向量。

它实际上反映了一种从 k 维到 m 维的空间线性映射关系。

6. 凸函数：设 f 为定义在区间 \mathcal{X} 上的函数，若对 \mathcal{X} 上的任意两点 \vec{x}_1, \vec{x}_2 和任意的实数 $\lambda \in (0, 1)$ ，总有 $f(\lambda\vec{x}_1 + (1 - \lambda)\vec{x}_2) \leq \lambda f(\vec{x}_1) + (1 - \lambda)f(\vec{x}_2)$ ，则 f 称为 \mathcal{X} 上的凸函数。