第二章 基础知识

修贤超

https://xianchaoxiu.github.io

目录

向量范数的定义

- **定义 2.1** 令记号 $\|\cdot\|:\ \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^+$ 是一种非负函数, 如果满足
  - **正定性** 对于 $\forall v \in \mathbb{R}^n$, 有 $\|v\| \geqslant 0$, 且 $\|v\| = 0$ 当且仅当 $v = 0_{n\times 1}$
  - **齐次性** 对于 $\forall v \in \mathbb{R}^n$ 和 $\alpha \in \mathbb{R}$, 有 $\|\alpha v\| = |\alpha|\|v\|$
  - **三角不等式** 对于 $\forall v, w \in \mathbb{R}^n$, 均成立 $\|v + w\| \leqslant \|v\| + \|w\|$

  则称 $\|\cdot\|$ 是定义在向量空间 $\mathbb{R}^n$ 上的**向量范数**

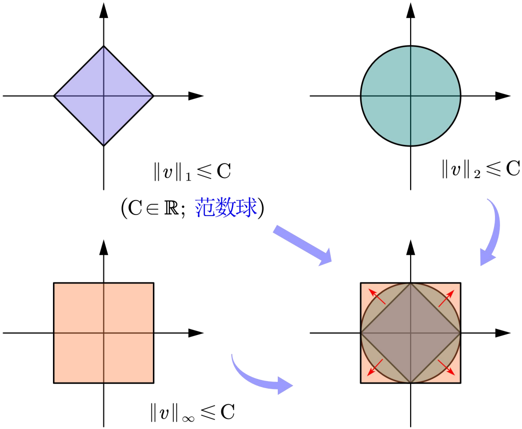
- 最常用的向量范数

$$\|v\|_p = \left(|v_1|^p + |v_2|^p + \cdots + |v_n|^p\right)^{\frac{1}{p}} \ (p \geq 1)$$

$$\|v\|_\infty = \max_{1\leqslant j\leqslant n} |v_j|$$

向量范数的定义

- 不同范数所度量的距离分别具有怎样的特征呢?



矩阵范数

- ℓ_1 范数 $\|A\|_1 = \sum_{i,j} |A_{ij}|$
- Frobenius 范数 $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} A_{ij}^2} = \sqrt{\mathrm{Tr}(AA^\top)}$
- 算子范数是一类特殊的矩阵范数，由向量范数诱导得到

$$\|A\|_{(m,n)} = \max_{x\in\mathbb{R}^n, \|x\|_{(n)}=1} \|Ax\|_{(m)}$$

  - $p = 1$ 时，$\|A\|_{p=1} = \max_{\|x\|_1=1} \|Ax\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|$
  - $p = 2$ 时，$\|A\|_{p=2} = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^\top A)}$，又称为 A 的**谱范数**
  - $p = \infty$ 时，$\|A\|_{p=\infty} = \max_{\|x\|_\infty=1} \|Ax\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$

矩阵范数

- 核范数

$$\|A\|_* = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i$$

- 矩阵内积

$$\langle A, B\rangle = \mathrm{Tr}(AB^\top) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}b_{ij}$$

- 命题 2.2 设 $A, B \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 则

$$|\langle A, B\rangle| \leqslant \|A\|_F\|B\|_F$$

等号成立当且仅当 A 和 B 线性相关，即柯西不等式

- 性质 同一矩阵空间内，矩阵范数彼此之间是相互等价的

目录

梯度

- 定义 2.2 给定函数 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$，且 f 在点 x 的一个邻域内有意义，若存在向量 $g\in\mathbb{R}^n$ 满足

$$\lim_{p\to 0}\frac{f(x+p)-f(x)-\langle g,p\rangle}{\|p\|}=0$$

其中 $\|\cdot\|$ 是任意的向量范数，称 f 在点 x 处可微（或 Fréchet 可微），g 为 f 在点 x 处的梯度，记作

$$\nabla f(x)=[\frac{\partial f(x)}{\partial x_1},\frac{\partial f(x)}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial f(x)}{\partial x_n}]^\top$$

- 如果对区域 D 上的每一个点 x 都有 $\nabla f(x)$ 存在，则称 f 在 D 上可微

海瑟矩阵

- 定义 2.3 如果函数 $f(x): \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 在点 x 处的二阶偏导数 $\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j}$ 都存在，则 f 在点 x 处的海瑟矩阵为

$$\nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_3} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_3} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_3} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

- 当 $\nabla^2 f(x)$ 在区域 D 上的每个点 x 处都存在时，称 f 在 D 上二阶可微
- 若 $\nabla^2 f(x)$ 在 D 上还连续，则称 f 在 D 上二阶连续可微

梯度利普希茨连续

- **定义 2.4** 给定可微函数 f，若存在 $L>0$，对任意的 $x,y\in \mathrm{dom}\ f$ 有

$$\|\nabla f(x)-\nabla f(y)\|\le L\|x-y\|$$

则称 f 是梯度利普希茨连续的，相应利普希茨常数为 L

- **引理 2.1** 设可微函数 $f(x)$ 的定义域为 $\mathbb{R}^n$ 且为梯度 L-利普希茨连续的，则函数 $f(x)$ 有二次上界

$$f(y)\le f(x)+\nabla f(x)^\top(y-x)+\frac{L}{2}\|y-x\|^2,\quad \forall\ x,y\in \mathrm{dom}\ f$$

- $f(x)$ 定义域的要求可减弱为凸集

梯度利普希茨连续

- **推论 2.1** 设可微函数 $f(x)$ 的定义域为 $\mathbb{R}^n$ 且存在一个全局极小点 x^*, 若 $f(x)$ 为梯度 L -利普希茨连续的, 则对任意的 x 有

$$\frac{1}{2L}\|\nabla f(x)\|^2 \le f(x) - f(x^*)$$

证明 由于 x^* 是全局极小点，有

$$f(x^*) \le f(y) \le f(x) + \nabla f(x)^\top (y-x) + \frac{L}{2}\|y-x\|^2$$

上式对任意的 y 均成立，因此可对不等号右边取下确界

$$\begin{aligned} f(x^*) &\le \inf_{y\in\mathbb{R}^n}\{f(x) + \nabla f(x)^\top (y-x) + \frac{L}{2}\|y-x\|^2\} \\ &= f(x) - \frac{1}{2L}\|\nabla f(x)\|^2 \end{aligned}$$

矩阵变量函数的导数

- 对于函数 $f(X)$，若存在矩阵 $G \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 满足

$$\lim_{V\to 0} \frac{f(X+V) - f(X) - \langle G, V\rangle}{\|V\|} = 0$$

其中 $\|\cdot\|$ 是任意矩阵范数，称矩阵变量函数 f 在 X 处 Fréchet 可微，G 为 f 在 Fréchet 可微意义下的梯度，记为

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} \\ \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{bmatrix}$$

矩阵变量函数的导数

- 定义 2.5 如果对任意方向 $V \in \mathbb{R}^{m\times n}$，存在矩阵 $G \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 满足

$$\lim_{V\to 0} \frac{f(X+V) - f(X) - \langle G, V\rangle}{\|V\|} = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\lim_{t\to 0} \frac{f(X+tV) - f(X) - t\langle G, V\rangle}{t} = 0$$

则称 f 关于 X *Gâteaux* 可微，G 为 f 在 X 处 *Gâteaux* 可微意义下的梯度

- 当 f 是 Fréchet 可微函数时，f 也是 Gâteaux 可微的，且梯度相等

例 2.1

- 线性函数 $f(X) = \mathrm{Tr}(AX^\top B)$

$$\lim_{t\to 0} \frac{f(X+tV)-f(X)}{t} = \lim_{t\to 0} \frac{\mathrm{Tr}(A(X+tV)^\top B) - \mathrm{Tr}(AX^\top B)}{t}$$
$$= \mathrm{Tr}(AV^\top B) = \langle BA, V\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \nabla f(X) = BA$$

- 二次函数 $f(X,Y) = \|XY - A\|_F^2$

$$\begin{aligned} f(X,Y+tV) - f(X,Y) &= \|X(Y+tV) - A\|_F^2 - \|XY - A\|_F^2 \\ &= 2\langle tXV, XY - A\rangle + t^2\|XV\|_F^2 \\ &= 2t\langle V, X^\top(XY-A)\rangle + \mathcal{O}(t^2) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial Y} = 2X^\top(XY - A)$$

The Matrix Cookbook

[http://matrixcookbook.com]

Kaare Brandt Petersen
Michael Syskind Pedersen

Version: November 15, 2012

2.5.2 Second Order

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \mathrm{Tr}(\mathbf{X}^2) = 2\mathbf{X}^T \tag{106}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \mathrm{Tr}(\mathbf{X}^2\mathbf{B}) = (\mathbf{X}\mathbf{B} + \mathbf{B}\mathbf{X})^T \tag{107}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \mathrm{Tr}(\mathbf{X}^T\mathbf{B}\mathbf{X}) = \mathbf{B}\mathbf{X} + \mathbf{B}^T\mathbf{X} \tag{108}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \mathrm{Tr}(\mathbf{B}\mathbf{X}\mathbf{X}^T) = \mathbf{B}\mathbf{X} + \mathbf{B}^T\mathbf{X} \tag{109}$$

目录

广义实值函数

- 在最优化领域，经常涉及量取 inf（sup）操作，可能为无穷
- 定义 2.6 令 $\overline{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \{\pm\infty\}$ 为广义实数空间，则映射

$$f:\ \mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$$

  称为广义实值函数
- 规定
  - $-\infty < \alpha < \infty, \forall \alpha \in \mathbb{R}$
  - $(+\infty) + (+\infty) = +\infty, \quad (+\infty) + \alpha = +\infty, \forall \alpha \in \mathbb{R}$

适当函数

- 定义 2.7 给定广义实值函数 f 和非空集合 $\mathcal{X}$，如果存在 $x \in \mathcal{X}$ 使得 $f(x) < +\infty$，并且对任意的 $x \in \mathcal{X}$ 都有 $f(x) > -\infty$，则称函数 f 是关于集合 $\mathcal{X}$ 的适当函数
- 具体含义
  - 至少有一处取值不为正无穷
  - 处处取值不为负无穷
- 对于适当函数 f，规定其定义域

$$\operatorname{dom} f = \{x \mid f(x) < +\infty\}$$

- 若无特殊说明，定理中所讨论的函数均为适当函数

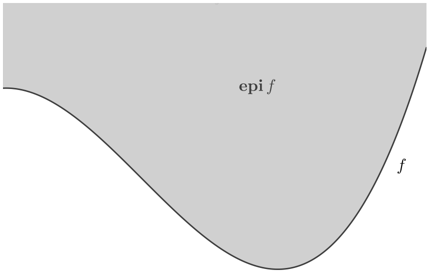
闭函数

- **定义 2.8** 设 f 为广义实值函数，α-下水平集定义为

$$C_\alpha = \{x \mid f(x) \le \alpha\}$$

- **定义 2.9** 设 f 为广义实值函数，上方图定义为

$$\operatorname{epi} f = \{(x,t) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid f(x) \le t\}$$

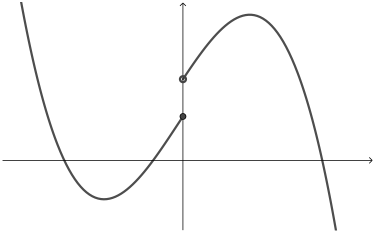


下半连续函数

- **定义 2.10** 设 f 为广义实值函数，若 $\text{epi } f$ 为闭集，则称 f 为**闭函数**
- **定义 2.11** 设 f 为广义实值函数，若对任意的 $x \in \mathbb{R}^n$，有

$$\liminf_{y \to x} f(y) \geq f(x)$$

则 $f(x)$ 为**下半连续函数**



闭函数与下半连续函数

- **定理 2.2** 设广义实值函数 $f: \mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$，则以下命题等价
  - $f(x)$ 的任意 α-下水平集都是闭集
  - $f(x)$ 是下半连续的
  - $f(x)$ 是闭函数
- **性质**
  - 若 f 与 g 均为适当的闭（下半连续）函数，并且 $\mathrm{dom}\ f \cap \mathrm{dom}\ g \neq \emptyset$，则 $f+g$ 也是闭（下半连续）函数
  - 若 f 为闭（下半连续）函数, 则 $f(Ax+b)$ 也为闭（下半连续）函数

目录

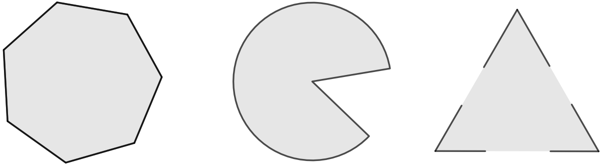
凸集的几何定义

- **定义 2.12** 若过集合 $\mathcal{C}$ 中的任意两点的直线都在 $\mathcal{C}$ 内，则称 $\mathcal{C}$ 为**仿射集**，即

$$x_1, x_2 \in \mathcal{C} \quad \Rightarrow \quad \theta x_1 + (1-\theta)x_2 \in \mathcal{C}, \forall \theta \in \mathbb{R}$$

- **定义 2.13** 若连接集合 $\mathcal{C}$ 中的任意两点的线段都在 $\mathcal{C}$ 内，则称 $\mathcal{C}$ 为**凸集**，即

$$x_1, x_2 \in \mathcal{C} \quad \Rightarrow \quad \theta x_1 + (1-\theta)x_2 \in \mathcal{C}, \forall 0 \leqslant \theta \leqslant 1$$



(a) (b) (c)

凸集的性质

- 若 $\mathcal{S}$ 是凸集, 则 $k\mathcal{S} = \{ks \mid k \in \mathbb{R}, s \in \mathcal{S}\}$ 是凸集
- 若 $\mathcal{S}$ 和 $\mathcal{T}$ 均是凸集, 则 $\mathcal{S} + \mathcal{T} = \{s + t \mid s \in \mathcal{S}, t \in \mathcal{T}\}$ 是凸集
- 若 $\mathcal{S}$ 和 $\mathcal{T}$ 均是凸集, 则 $\mathcal{S} \cap \mathcal{T}$ 是凸集

  证明 设 $x, y \in \mathcal{S} \cap \mathcal{T}$ 且 $\theta \in [0, 1]$. 由于 $\mathcal{S}$ 和 $\mathcal{T}$ 均为凸集, 则

$$\theta x + (1 - \theta)y \in \mathcal{S} \cap \mathcal{T}$$

- 凸集的内部和闭包都是凸集
- 任意多凸集的交都是凸集

凸组合和凸包

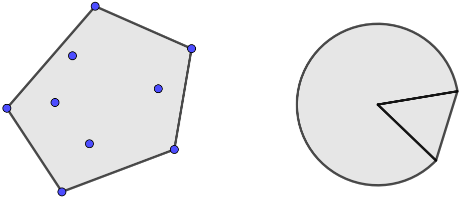
- 形如

$$x = \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \cdots + \theta_k x_k$$

$$\theta_1 + \cdots + \theta_k = 1, \theta_i \geqslant 0, i = 1, \cdots, k$$

  的点称为 $x_1, \cdots, x_k$ 的凸组合

- 集合 $\mathcal{S}$ 的所有点的凸组合构成的点集为 $\mathcal{S}$ 的凸包, 记为 $\operatorname{conv} \mathcal{S}$

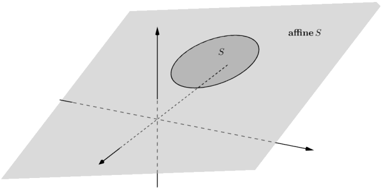


- $\operatorname{conv} \mathcal{S}$ 是包含 $\mathcal{S}$ 的最小凸集

仿射组合和仿射包

- 定义 2.14 形如
$$x = \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \cdots + \theta_k x_k$$
$$\theta_1 + \cdots + \theta_k = 1, \theta_i \in \mathbb{R}, i = 1, \cdots, k$$
的点称为 $x_1, \cdots, x_k$ 的仿射组合

- 集合 $\mathcal{S}$ 的所有点的仿射组合构成的点集为 $\mathcal{S}$ 的仿射包, 记为 affine $\mathcal{S}$



- affine $\mathcal{S}$ 是包含 $\mathcal{S}$ 的最小仿射集

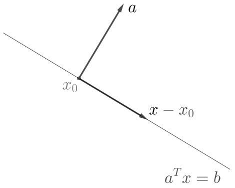
锥组合和凸锥

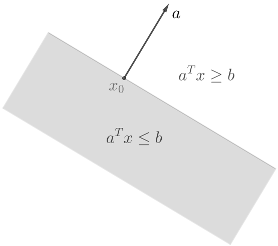
- 形如
$$x = \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_k x_k, \theta_i > 0, i = 1, \cdots, k$$
的点称为 $x_1, \cdots, x_k$ 的**锥组合**
- 若集合 $\mathcal{S}$ 中任意点的锥组合都在 $\mathcal{S}$ 中, 则称 $\mathcal{S}$ 为**凸锥**

- 锥组合不要求系数的和为 1

超平面和半空间

- 任取非零向量 $a \in \mathbb{R}^n$，称 $\{x \mid a^\top x = b\}$ 为超平面，$\{x \mid a^\top x \leqslant b\}$ 为半空间
- 满足线性等式和不等式组的点的集合 $\{x \mid Ax \leqslant b, Cx = d\}$ 称为多面体





- 超平面是仿射集和凸集，半空间是凸集但不是仿射集
- 多面体是有限个半空间和超平面的交

球和椭球

- 称空间中到点 x_c 的距离小于等于定值 r 的集合为(欧几里得) 球, 即

$$\mathrm{B}(x_c, r) = \{x \mid \|x - x_c\|_2 \leqslant r\} = \{x_c + ru \mid \|u\| \leqslant 1\}$$

- 设形如

$$\{x \mid (x - x_c)^\top P^{-1}(x - x_c) \leqslant 1\} = \{x_c + Au \mid \|u\|_2 \leqslant 1\}$$

的集合为椭球, 其中 x_c 为椭球中心, P 为对称正定, 且 A 非奇异

- 令 $\|\cdot\|$ 是任意一个范数, 称

$$\{x \mid \|x - x_c\| \leqslant r\}$$

为中心为 x_c 半径为 r 的范数球

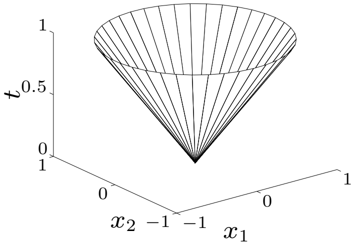
范数锥

- 形如

$$\{(x,t) \mid \|x\| \leqslant t\}$$

  的集合为**范数锥**

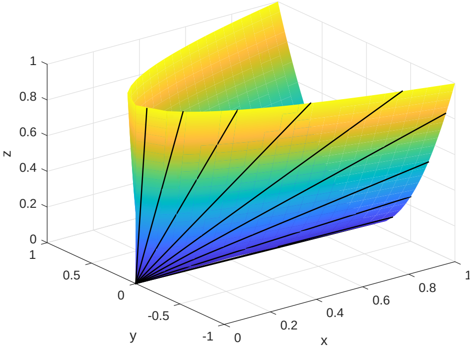
- 使用 $\|\cdot\|_2$ 度量距离的锥为二次锥，也称冰淇淋锥



- 范数球和范数锥都是凸集

(半) 正定锥

- 记 $\mathcal{S}^n$ 为**对称矩阵**的集合，即 $\mathcal{S}^n = \{X \in \mathbb{R}^{n\times n} \mid X^\top = X\}$
- 记 $\mathcal{S}^n_+$ 为**半正定矩阵**的集合，即 $\mathcal{S}^n_+ = \{X \in \mathcal{S}^n \mid X \succeq 0\}$
- 记 $\mathcal{S}^n_{++}$ 为**正定矩阵**的集合，即 $\mathcal{S}^n_{++} = \{X \in \mathcal{S}^n \mid X \succ 0\}$



对于矩阵 $\begin{pmatrix} x & y \\ y & z \end{pmatrix}$，其特征值应全部大于等于 0

$$\Downarrow$$

$$\{(x, y, z) \mid x \geqslant 0, z \geqslant 0, xz \geqslant y^2\}$$

仿射变换的保凸性

- 设 $f:\ \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 是仿射变换，即 $f(x) = Ax + b,\ A \in \mathbb{R}^{m\times n}, b \in \mathbb{R}^m$，则

$$\mathcal{S} \subseteq \mathbb{R}^n\text{是凸集} \quad \Rightarrow \quad f(\mathcal{S}) = \{f(x) \mid x \in \mathcal{S}\}\text{是凸集}$$

$$\mathcal{C} \subseteq \mathbb{R}^m\text{是凸集} \quad \Rightarrow \quad f^{-1}(\mathcal{C}) = \{x \mid f(x) \in \mathcal{C}\}\text{是凸集}$$

- 双曲锥 $\{x \mid x^\top Px \leqslant (c^\top x)^2, c^\top x \geqslant 0, P \in \mathcal{S}^n_+\}$ 是凸集

证明　双曲锥可以转化为二阶锥

$$\{x \mid \|Ax\|_2 \leqslant c^\top x, c^\top x \geqslant 0, A^\top A = P\}$$

而二阶锥可由二次锥 $\{(x,t) \mid \|x\|_2 \leqslant t, t \geqslant 0\}$ 经过仿射变换得到

分离超平面定理

- **定理 2.3** 如果 $\mathcal{C}$ 和 $\mathcal{D}$ 是不相交的凸集, 则存在非零向量 a 和常数 b, 使得

$$a^\top x \leqslant b, \forall x \in \mathcal{C} \quad 且 \quad a^\top x \geqslant b, \forall x \in \mathcal{D}$$

即超平面 $\{x \mid a^\top x = b\}$ 分离了 $\mathcal{C}$ 和 $\mathcal{D}$

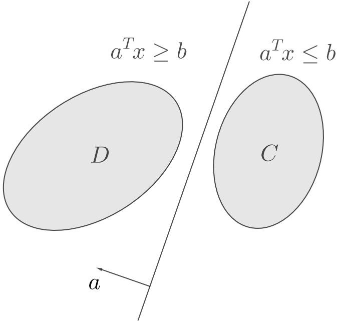
- **定理 2.4** 如果存在非零向量 a 和常数 b, 使得

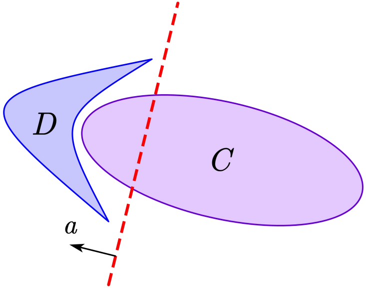
$$a^\top x < b, \forall x \in \mathcal{C} \quad 且 \quad a^\top x > b, \forall x \in \mathcal{D},$$

即超平面 $\{x \mid a^\top x = b\}$**严格**分离了 $\mathcal{C}$ 和 $\mathcal{D}$

分离超平面的示意

- 在 $\mathbb{R}^2$ 中的 2 个凸集使用超平面即可轻松划分, 但遇到非凸集合就必须使用更加复杂的平面





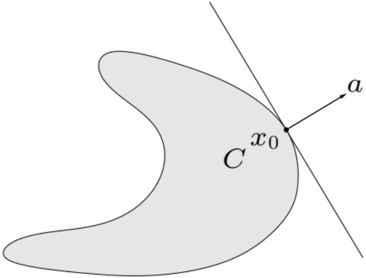
支撑超平面

- 定义 2.5 给定集合 $\mathcal{C}$ 及其边界点 x_0, 如果 $a \neq 0$ 满足 $a^\top x \leqslant a^\top x_0, \forall x \in \mathcal{C}$, 则称集合

$$\{x \mid a^\top x = a^\top x_0\}$$

为 $\mathcal{C}$ 在边界点 x_0 处的支撑超平面

- 定理 2.5 若 $\mathcal{C}$ 是凸集, 则 $\mathcal{C}$ 的任意边界点处都存在支撑超平面



Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈