最优化: 建模、算法与理论

Chengxin Gong, Peking University
https://wqgcx.github.io/

2022 年 8 月 1 日

目录

1 最优化简介

最优化问题一般可以描述为

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & x \in \mathcal{X} \end{aligned}$$

其中 $x = (x_1, \cdots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ 是决策变量, $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 是目标函数, $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^n$ 是约束集合或可行域, 可行域包含的点称为可行解或可行点. 当 $\mathcal{X} = \mathbb{R}^n$ 时, 称为无约束优化问题. 集合 $\mathcal{X}$ 通常可以由约束函数 $c_i(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, i = 1, \cdots, m + l$ 表达为如下具体形式:

$$\begin{aligned} \mathcal{X} = \{x \in \mathbb{R}^n | c_i(x) \le 0, i = 1, \cdots, m, \\ c_i(x) = 0, i = m+1, \cdots, m+l\} \end{aligned}$$

在所有满足约束条件的决策变量中, 使目标函数取最小值的变量 x^* 成为优化问题的最优解.

对于一个算法, 给定初始点 x^0, 记其迭代产生的点列为 $\{x^k\}$, 如果 $\{x^k\}$ 在某种范数 $||\cdot||$ 的意义下满足

$$\lim_{k\to\infty} ||x^k - x^*|| = 0$$

且收敛的点 x^* 为一个局部 (全局) 极小解, 那我们称该算法为依点列收敛到局部 (全局) 极小解的. 进一步地, 如果从任意初始点出发, 算法都是依点列收敛到局部 (全局) 极小解的, 则称全局依点列收敛到局部 (全局) 极小解的. 类似地, 如果记对应的函数值序列为 $\{f(x^k)\}$, 我们还可以定义算法的 (全局) 依函数值收敛到局部 (全局) 极小值的概念.

Q-收敛速度 (Q 的含义为 “quotient”): 设 $\{x^k\}$ 为算法产生的迭代点列且收敛于 x^*, 若对充分大的 k 有

1. $$\frac{||x^{k+1} - x^*||}{||x^k - x^*||} \le a, a \in (0,1)$$
   则称算法 (点列) 是 Q-线性收敛的;

2. $$\lim_{k\to\infty} \frac{||x^{k+1} - x^*||}{||x^k - x^*||} = 0$$
   则称算法 (点列) 是 Q-超线性收敛的;

3. $$\lim_{k\to\infty} \frac{||x^{k+1} - x^*||}{||x^k - x^*||} = 1$$
   则称算法 (点列) 是 Q-次线性收敛的;

4. $$\frac{||x^{k+1} - x^*||}{||x^k - x^*||^r} \le a, a > 0$$
   则称算法 (点列) 是 Q-r 次收敛的 $(r > 1)$.

R-收敛速度 (R 的含义为 “root”): 设 $\{x^k\}$ 为算法产生的迭代点列且收敛于 x^*, 若存在 Q-线性收敛于 0 的非负序列 $\{t_k\}$ 并且

$$||x^k - x^*|| \leq t_k$$

对任意 k 成立, 则称算法 (点列) 是 R-线性收敛的. 类似定义 R-超线性收敛和 R-二次收敛等收敛速度. 我们也称算法 (点列) 的收敛速度为 $O(t_k)$.

2 基础知识

2.1 范数

矩阵范数:

$$l_1\text{范数: } ||A||_1 = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$

$$\text{Frobenius 范数: } ||A||_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{ij}^2}$$

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

$$\text{核范数: } ||A||_* = \sum_{i=1}^{r}\sigma_i$$

矩阵内积 (Frobenius 内积):

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

2.2 导数

梯度 Lipschitz 连续: 给定可微函数 f, 若存在 $L > 0$, 对任意的 $x, y \in \mathrm{dom} f$ 有

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

则称 f 是梯度 Lipschitz 连续的, 有时也简记为 L-光滑. 若 $f(x)$ 是梯度 L-Lipschitz 连续的, 则函数 $f(x)$ 有二次上界

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

若 $f(x)$ 还存在全局极小点 x^*, 则

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

Fréchet 可微: 对于以 $m \times n$ 矩阵 X 为自变量的函数 $f(X)$, 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, 就称矩阵变量函数 f 在 X 处 Fréchet 可微, 称 G 为梯度.

Gâteaux 可微: 设 $f(X)$ 为矩阵函数, 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

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

则称 f 在 X 处 Gâteaux 可微. 一般来说, 若 f 是 Fréchet 可微的, 则必定是 Gâteaux 可微的, 且二者意义下梯度相等, 但反过来不一定成立. 我们考虑的大多数可微函数都是 Fréchet 可微的, 因此无需具体区分两个梯度. 在实际中, Gâteaux 可微更容易操作.

2.3 广义实值函数

广义实值函数: 令 $\bar{\mathbb{R}} := \mathbb{R}\cup\{\pm\infty\}$ 为广义实数空间, 则映射 $f:\mathbb{R}^n \to \bar{\mathbb{R}}$ 称为广义实值函数.

适当函数: 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 $f(x) < +\infty$, 并且对于任意的 $x\in\mathcal{X}$, 都有 $f(x) > -\infty$, 那么称函数 f 关于集合 $\mathcal{X}$ 是适当的.

α-下水平集: 对于广义实值函数 $f:\mathbb{R}^n \to \bar{\mathbb{R}}$,

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

称为 f 的 α-下水平集.

上方图: 对于广义实值函数 $f:\mathbb{R}^n \to \bar{\mathbb{R}}$,

$$\mathrm{epi} f = \{(x,t)\in\mathbb{R}^{n+1}|t\ge f(x)\}$$

称为 f 的上方图.

闭函数: 设 $f:\mathbb{R}^n \to \bar{\mathbb{R}}$ 为广义实值函数, 若 $\mathrm{epi} f$ 是闭集, 则称 f 是闭函数.

下半连续函数: 设广义实值函数 $f:\mathbb{R}^n \to \bar{\mathbb{R}}$, 若对任意的 $x\in\mathbb{R}^n$, 有

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

则 $f(x)$ 为下半连续函数.

以下命题等价: 任意 α-下水平集都是闭集 $\Leftrightarrow$ $f(x)$ 下半连续 $\Leftrightarrow$ $f(x)$ 是闭函数.

2.4 凸集

仿射集: 如果过集合 C 中任意两点的直线都在 C 内, 则称 C 为仿射集, 即

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

凸集: 如果连接集合 C 中任意两点的线段都在 C 内, 则称 C 为凸集, 即

$$x_1,x_2\in C \Rightarrow \theta x_1+(1-\theta)x_2\in C, \forall 0\le\theta\le 1$$

仿射包: 设 $S\subset\mathbb{R}^n$, 称如下集合为 S 的仿射包:

$$\{x|x=\theta_1x_1+\theta_2x_2+\cdots+\theta_kx_k, x_1,x_2,\cdots,x_k\in S, \theta_1+\theta_2+\cdots+\theta_k=1\}$$

记为 affine S.

分离超平面定理: 如果 C 和 D 是不相交的两个凸集, 则存在非零向量 a 和常数 b, 使得

$$a^Tx\le b, \forall x\in C, \text{ 且} a^Tx\ge b, \forall x\in D$$

即超平面 $\{x|a^Tx=b\}$ 分离了 C 和 D.

支撑超平面: 给定集合 C 及其边界上一点 x_0, 如果 $a \neq 0$ 满足 $a^Tx \leq a^Tx_0, \forall x \in C$, 那么称集合

$$\{x|a^Tx = a^Tx_0\}$$

为 C 在边界点 x_0 处的支撑超平面. 如果 C 是凸集, 则在 C 的任意边界点处都存在支撑超平面.

2.5 凸函数

凸函数: 设函数 f 为适当函数, 如果 $\mathrm{dom}f$ 是凸集, 且

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

对所有的 $x, y \in \mathrm{dom}f, 0 \leq \theta \leq 1$ 都成立, 则称 f 是凸函数.

强凸函数: 若存在常数 $m > 0$, 使得

$$g(x) = f(x) - \frac{m}{2}||x||^2$$

是凸函数, 则称 $f(x)$ 是 m-强凸函数. 等价定义: 若存在 $m > 0$ 使得对任意的 $x, y \in \mathrm{dom}f$ 以及 $\theta \in (0,1)$, 有

$$f(\theta x + (1-\theta)y) \leq \theta f(x) + (1-\theta)f(y) - \frac{m}{2}\theta(1-\theta)||x-y||^2$$

凸函数判定定理: $f(x)$ 是凸函数当且仅当对任意的 $x \in \mathrm{dom}f, v \in \mathbb{R}^n, g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$,

$$g(t) = f(x+tv), \mathrm{dom}g = \{t|x+tv \in \mathrm{dom}f\}$$

是凸函数.

一阶条件: 对于定义在凸集上的可微函数 f, f 是凸函数当且仅当

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

梯度单调性: 设 f 是可微函数, 则 f 为凸函数当且仅当 $\mathrm{dom}f$ 为凸集且 ∇f 为单调映射, 即

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

2.6 共轭函数

共轭函数: 任一适当函数 f 的共轭函数定义为

$$f^*(y) = \sup_{x \in \mathrm{dom}f}\{y^Tx - f(x)\}$$

二次下界: 设 $f(x)$ 是 m-强凸函数, 则

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(y-x) + \frac{m}{2}||y-x||^2$$

Fenchel 不等式:

$$f(x) + f^*(y) \geq x^Ty$$

二次共轭函数:

$$f^{**}(x) = \sup_{y \in \mathrm{dom}f^*}\{x^Ty - f^*(y)\}$$

容知 $f^{**}(x) \leq f(x)$. 若 $f(x)$ 为闭凸函数, 则 $f^{**}(x) = f(x)$.

2.7 次梯度

次梯度: 设 f 为适当凸函数, x 是定义域 $\mathrm{dom} f$ 中的一点, 若向量 $g \in \mathbb{R}^n$ 满足

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

则称 g 为函数 f 在点 x 处的一个次梯度. 也称此梯度构成的集合 $\partial f(x)$ 为 f 在点 x 处的次微分.

次梯度存在性: 设 f 为凸函数, $\mathrm{dom} f$ 为其定义域, 如果 $x \in \mathrm{int}\ \mathrm{dom} f$, 则 $\partial f(x)$ 非空.

次梯度的性质:

1. 设 f 是凸函数, 则对任何 $x \in \mathrm{dom} f$, $\partial f(x)$ 是闭凸集; 对任何 $x \in \mathrm{int}\ \mathrm{dom} f$, 则 $\partial f(x)$ 非空有界;

2. 设 $f(x)$ 在 $x_0 \in \mathrm{int}\ \mathrm{dom} f$ 处可微, 则 $\partial f(x) = \{\nabla f(x)\}$

3. 单调性: 设 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 凸, 则 $(u-v)^T(x-y) \geq 0$, 其中 $u \in \partial f(x), v \in \partial f(y)$.

透视函数: 定义函数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 的透视函数 $g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$,

$$g(x,t) = tf\left(\frac{x}{t}\right)$$

若 f 是凸函数, 则 g 是凸函数.

方向导数: 对于凸函数 f, 给定点 $x_0 \in \mathrm{dom} f$ 以及方向 $d \in \mathbb{R}^n$, 其方向导数定义为

$$\partial f(x_0; d) = \inf_{t>0} \frac{f(x_0 + td) - f(x_0)}{t}$$

若 $x_0 \in \mathrm{int}\ \mathrm{dom} f$, 则对任意的 $d \in \mathbb{R}^n, \partial f(x_0; d)$ 有限.

设 $f : \mathbb{R}^n \to (-\infty, +\infty]$ 是凸函数, $x_0 \in \mathrm{int}\ \mathrm{dom} f$, d 为 $\mathbb{R}^n$ 中任意方向, 则

$$\partial f(x_0; d) = \max_{g \in \partial f(x_0)} g^T d$$

次梯度的计算规则:

1. 凸函数的非负线性组合: 设 f_1, f_2 是凸函数, 且满足 $\mathrm{int}\ \mathrm{dom} f_1 \cap \mathrm{int}\ \mathrm{dom} f_2 \neq \emptyset$. 若 $f(x) = \alpha_1 f_1(x) + \alpha_2(x), \alpha_1, \alpha_2 \geq 0$, 则 $f(x)$ 的次微分

$$\partial f(x) = \alpha_1 \partial f_1(x) + \alpha_2 \partial f_2(x)$$

2. 线性变量替换: 设 h 为适当凸函数, 并且函数 f 满足

$$f(x) = h(Ax+b)$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{n \times m}, b \in \mathbb{R}^n$, 则

$$\partial f(x) = A^T \partial h(Ax+b)$$

3 优化建模

最小二乘法:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\sum_{i=1}^{m}(b_i-\phi_i(x))^2$$

正则化:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\sum_{i=1}^{m}(b_i-\phi_i(x))^2+\mu||x||_2^2$$

等价转换:

$$\min_x f(Ax+b)\Leftrightarrow\min_y f(y)\ \text{s.t.}\ y=Ax+b$$

$$\min_x f(x)=h(x)+r(x)\Leftrightarrow\min_{x,y} h(x)+r(y)\ \text{s.t.}\ x=y$$

松弛: 放大可行域, 简化原有约束

$$||x||_2=1\to X=xx^T\to X\in S^n,\mathrm{tr}(X)=1,X\succeq 0$$

线性回归:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\frac{1}{2}||Ax-b||_2^2$$

正则化线性回归:

- Tikhonov 正则化:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\frac{1}{2}||Ax-b||_2^2+\mu||x||_2^2\Leftrightarrow\min_{x\in\mathbb{R}^n}\frac{1}{2}||Ax-b||_2^2\ \text{s.t.}\ ||x||_2\le\sigma$$

- LASSO:

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

- 分组 LASSO:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\frac{1}{2}||Ax-b||_2^2+\mu\sum_{l=1}^{G}\sqrt{n_l}||x_{I_l}||_2$$

  其中 $|I_l|=n_l,\sum_{l=1}^{G}n_l=n$.

- 稀疏分组 LASSO:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\frac{1}{2}||Ax-b||_2^2+\mu_1\sum_{l=1}^{G}\sqrt{n_l}||x_{I_l}||_2+\mu_2||x||_1$$

逻辑斯蒂回归:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\sum_{i=1}^{m}\ln(1+\exp(-b_i\cdot a_i^Tx))$$

相位恢复: 本质是求解二次方程组

$$b_k^2=|\langle a_k,x\rangle|^2,k=1,2,\cdots,m$$

最小二乘模型:

$$\min_{x\in\mathbb{C}^n}\sum_{i=1}^{m}(|\langle a_i,x\rangle|^2-b_i^2)^2$$

相位提升: 注意到

$$|\langle a_i,x\rangle|^2=\bar{a}_i^T x\bar{x}^T a_i=\mathrm{tr}(x\bar{x}^T a_i\bar{a}_i^T)$$

令 $X=x\bar{x}^T$, 转化为

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(Xa_i\bar{a}_i^T)=b_i^2, i=1,2,\cdots,m, X\succeq 0, \mathrm{rank}(X)=1\\ \text{or }\min_X \mathrm{rank}(X),\quad \text{s.t. } \mathrm{tr}(Xa_i\bar{a}_i^T)=b_i^2, i=1,2,\cdots,m, X\succeq 0\end{aligned}$$

矩阵分离问题:

$$\min_{X,S\in\mathbb{R}^{m\times n}}\mathrm{rank}(X)+\mu||S||_0,\quad \text{s.t. } X+S=M$$

4 典型优化问题

线性规划:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} c^Tx,\quad \text{s.t. } Ax=b, Gx\le e$$

最小二乘问题:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\sum_{i=1}^{m}r_i^2(x)$$

其中 $r_i:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 是实值函数.

复合优化问题:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\phi(x)=f(x)+h(x)$$

其中 $f(x)$ 是光滑函数, $h(x)$ 可能是非光滑的.

随机优化问题:

$$\min_{x\in\mathcal{X}}\mathbb{E}_\xi[F(x,\xi)]+h(x)$$

假设有 N 个样本 $\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_N$, 定义 $f_i(x)=F(x,\xi_i)$, 得到优化问题

$$\min_{x\in\mathcal{X}} f(x):=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}f_i(x)+h(x)$$

半定规划:

$$\begin{aligned}\min c^Tx,\quad \text{s.t. } x_1A_1+x_2A_2+\cdots+x_nA_n+B\preceq 0, Gx=h\\ \text{or}\min\langle C,X\rangle,\quad \text{s.t. } \langle A_1,X\rangle+b_1=0,\cdots,\langle A_m,X\rangle+b_m=0, X\succeq 0\end{aligned}$$

矩阵优化:

$$\min_{X\in\mathcal{X}}\phi(X)$$

整数规划:

$$\min c^Tx,\quad \text{s.t. } Ax\le b, x_i\ge 0, x_i\in\mathbb{Z}, i=1,2,\cdots,n$$

5　最优性理论

5.1　最优化问题解的存在性

Weierstrass 定理: 考虑一个适当且闭的函数 $f : \mathcal{X} \to (-\infty, +\infty]$, 假设下面三个条件中任意一个成立: (1) $\text{dom} f := \{x \in \mathcal{X} | f(x) < +\infty\}$ 是有界的; (2) 存在一个常数 $\bar{\gamma}$ 使得下水平集 $C_{\bar{\gamma}} := \{x \in \mathcal{X} | f(x) \leq \bar{\gamma}\}$ 是非空且有界的; (3) f 是强制的, 即对于任意满足 $x^k \to +\infty$ 的点列 $\{x^k\} \subset \mathcal{X}$, 都有 $\lim\limits_{k \to \infty} f(x^k) = +\infty$; 那么优化问题 $\min\limits_{x \in \mathcal{X}} f(x)$ 的最小值点集是非空且紧的.

强拟凸函数: 给定凸集 $\mathcal{X}$ 和函数 $f : \mathcal{X} \to (-\infty, +\infty]$, 如果对任意的 $x \neq y$ 和 $\lambda \in (0, 1)$, 都有

$$f(\lambda x + (1-\lambda) y) < \max\{f(x), f(y)\}$$

我们称 f 是强拟凸的. 一般来说, 强拟凸函数不一定是凸函数, 但其任意一个下水平集都是凸集, 并可以包含一部分性质较好的非凸函数.

唯一性定理: 设 $\mathcal{X}$ 是 $\mathbb{R}^n$ 的一个非空、紧且凸的子集. 如果 $f : \mathcal{X} \to (-\infty, +\infty]$ 是适当、闭且强拟凸函数, 那么存在唯一的 x^* 满足

$$f(x^*) < f(x), \forall x \in \mathcal{X} \backslash \{x^*\}$$

5.2　无约束可微问题的最优性理论

下降方向: 对于可微函数 f 和点 $x \in \mathbb{R}^n$, 如果存在向量 d 满足

$$\nabla f(x)^T d < 0$$

则称 d 为 f 在点 x 处的一个下降方向.

一阶必要条件: 假设 f 在全空间 $\mathbb{R}^n$ 可微, 如果 x^* 是一个局部极小解, 那么

$$\nabla f(x^*) = 0$$

二阶最优性条件: 假设 f 在点 x^* 的一个开邻域内是二阶连续可微的, 则以下最优性条件成立:

1. 二阶必要条件: 如果 x^* 是一个局部极小点, 那么

$$\nabla f(x^*) = 0, \nabla^2 f(x^*) \succeq 0$$

2. 二阶充分条件: 如果在点 x^* 处有

$$\nabla f(x^*) = 0, \nabla^2 f(x^*) \succ 0$$

成立, 那么 x^* 为 f 的一个局部极小点.

5.3　无约束不可微问题的最优性理论

凸优化问题的一阶充要条件: 假设 f 是适当且凸的函数, 则 x^* 是问题 $\min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ 的一个全局极小点, 当且仅当

$$0 \in \partial f(x^*)$$

复合优化问题的一阶必要条件: 令 x^* 为问题 $\min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} \phi(x) = f(x) + h(x)$ 的一个局部极小点, 那么

$$-\nabla f(x^*) \in \partial h(x^*)$$

由于目标函数可能整体非凸, 因此一般没有一阶充分条件.

5.4 对偶理论

考虑约束优化问题:

$$\begin{aligned}
&\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)\\
&\text{s.t. } c_i(x)\le 0, i\in\mathcal{I}\\
&\qquad c_i(x)=0, i\in\mathcal{E}
\end{aligned}$$

拉格朗日函数: $m=|\mathcal{I}|, p=|\mathcal{E}|, L:\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m_+\times\mathbb{R}^p\to\mathbb{R}$

$$L(x,\lambda,\nu)=f(x)+\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i c_i(x)+\sum_{i\in\mathcal{E}}\nu_i c_i(x)$$

拉格朗日对偶函数: $g:\mathbb{R}^m_+\times\mathbb{R}^p\to[-\infty,+\infty)$ 是拉格朗日函数 $L(x,\lambda,\nu)$ 对于 $\lambda\in\mathbb{R}^m_+,\nu\in\mathbb{R}^p$ 关于 x 取的下确界:

$$g(\lambda,\nu)=\inf_{x\in\mathbb{R}^n} L(x,\lambda,\nu)$$

弱对偶原理: 对于任意的 $\lambda\ge 0$ 和 ν, 拉格朗日对偶函数给出了约束优化问题最优值的一个下界, 即

$$g(\lambda,\nu)\le p^*, \lambda\ge 0$$

拉格朗日对偶问题:

$$\max_{\lambda\ge 0,\nu} g(\lambda,\nu)=\max_{\lambda\ge 0,\nu}\inf_{x\in\mathbb{R}^n} L(x,\lambda,\nu)$$

记对偶问题的最优解为 q^*, 称 p^*-q^* 为对偶间隙. 如果对偶间隙为 0, 称强对偶原理成立.

适当锥: 称满足如下条件的锥 K 为适当锥: (1) K 是凸锥; (2) K 是闭集; (3) K 是实心的, 即内部非空; (4) K 是尖的, 即对任意非零向量 x, 若 $x\in K$, 则 $-x\notin K$, 也即 K 中无法容纳直线. 适当锥可以诱导出广义不等式, 它定义了全空间上的偏序关系:

$$x\preceq_K y\Leftrightarrow y-x\in K$$

对偶锥: 令 K 为全空间 Ω 的子集, 称集合

$$K^*=\{y\in\Omega|\langle x,y\rangle\ge 0,\forall x\in K\}$$

为其对偶锥, 其中 $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 是 Ω 上的一个内积.

广义不等式的约束优化问题拉格朗日函数的构造: 考虑优化问题

$$\begin{aligned}
&\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)\\
&\text{s.t. } c_i(x)\preceq_{K_i} 0, i\in\mathcal{I}\\
&\qquad c_i(x)=0, i\in\mathcal{E}
\end{aligned}$$

构造如下拉格朗日函数:

$$L(x,\lambda,\nu)=f(x)+\sum_{i\in\mathcal{I}}\langle c_i(x),\lambda_i\rangle+\sum_{i\in\mathcal{E}}\nu_i c_i(x), \lambda_i\in K_i^*, \nu_i\in\mathbb{R}$$

5.5 一般约束优化问题的最优性理论

切锥: 给定可行域 $\mathcal{X}$ 及其内一点 x, 若存在可行序列 $\{z_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \mathcal{X}$ 逼近 x 以及正标量序列 $\{t_k\}_{k=1}^{\infty}, t_k \to 0$ 满足

$$\lim_{k\to\infty} \frac{z_k - x}{t_k} = d$$

则称向量 d 为 $\mathcal{X}$ 在点 x 处的一个切向量. 所有点 x 处的切向量构成的集合称为切锥, 用 $T_{\mathcal{X}}(x)$ 表示.

几何最优性条件: 假设可行点 x^* 是约束优化问题的一个局部极小点. 如果 $f(x)$ 和 $c_i(x), i \in \mathcal{I}\cup\mathcal{E}$ 在点 x^* 是可微的, 那么

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

等价于

$$T_{\mathcal{X}}(x^*) \cap \{d | \nabla f(x^*)^T d < 0\} = \emptyset$$

线性化可行方向锥: 对于可行点 $x \in \mathcal{X}$, 该点处的积极集 $A(x)$ 定义为两部分下标的集合, 一部分是等式约束对应的下标, 另外一部分是不等式约束中等号成立的约束对应的下表, 即

$$A(x) = \mathcal{E} \cup \{i \in \mathcal{I} | c_i(x) = 0\}$$

进一步地, 点 x 处的线性化可行方向锥定义为

$$F(x) = \{d | d^T \nabla c_i(x) = 0, \forall i \in \mathcal{E}; d^T \nabla c_i(x) \leq 0, \forall i \in A(x) \cap \mathcal{I}\}$$

设 $c_i(x), i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ 一阶连续可微, 则对任意可行点 x 有

$$T_{\mathcal{X}}(x) \subset F(x)$$

线性无关约束品性: 给定可行点 x 及相应的积极集 $A(x)$. 如果积极集对应的约束函数的梯度, 即 $\nabla c_i(x), i \in A(x)$, 是线性无关的, 则称线性无关约束品性 (LICQ) 在点 x 处成立. 如果 LICQ 成立, 则有 $T_{\mathcal{X}}(x) = F(x)$.

Mangasarian-Fromovitz 约束品性: 给定可行点 x 及相应的积极集 $A(x)$. 如果存在一个向量 $w \in \mathbb{R}^n$ 使得 $\nabla c_i(x)^T w < 0, \forall i \in A(x) \cap \mathcal{I}; \nabla c_i(x)^T w = 0, \forall i \in \mathcal{E}$, 并且等式约束对应的梯度集 $\{\nabla c_i(x), i \in \mathcal{E}\}$ 是线性无关的, 则称 MFCQ 在点 x 处成立. LICQ 可以推出 MFCQ, 但反之不然. 如果 MFCQ 成立, 也可证明 $T_{\mathcal{X}}(x) = F(x)$.

线性约束品性: 如果所有的约束函数 $c_i(x), i \in \mathcal{I} \cup \mathcal{E}$ 都是线性的, 则称线性约束品性成立. 此时 $T_{\mathcal{X}}(x) = F(x)$.

Farkas 引理: 设 p 和 q 是两个非负整数, 给定向量组 $\{a_i \in \mathbb{R}^n, i = 1, 2, \cdots, p\}, \{b_i \in \mathbb{R}^n, i = 1, 2, \cdots, q\}, c \in \mathbb{R}^n$. 满足以下条件: $d^T a_i = 0, i = 1, 2, \cdots, p, d^T b_i \geq 0, i = 1, 2, \cdots, q, d^T c < 0$ 的 d 不存在当且仅当存在 $\lambda_i, i = 1, 2, \cdots, p$ 和 $\mu_i \geq 0, i = 1, 2, \cdots, q$, 使得

$$c = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i a_i + \sum_{i=1}^{q} \mu_i b_i$$

KKT 条件: 假设 x^* 是约束优化问题的一个局部最优点. 如果 $T_{\mathcal{X}}(x^*) = F(x^*)$ 成立, 那么存在拉格朗日乘子 λ_i^* 使得如下条件成立:

$$\text{稳定性条件} \quad \nabla_x L(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{I}\cup\mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) = 0$$

$$
\begin{aligned}
\text{原始可行性条件} \quad & c_i(x^*) = 0, \forall i \in \mathcal{E} \\
\text{原始可行性条件} \quad & c_i(x^*) \le 0, \forall i \in \mathcal{I} \\
\text{对偶可行性条件} \quad & \lambda_i^* \ge 0, \forall i \in \mathcal{I} \\
\text{互补松弛条件} \quad & \lambda_i^* c_i(x^*) = 0, \forall i \in \mathcal{I}
\end{aligned}
$$

临界锥: 设 (x^*, λ^*) 满足 KKT 条件, 定义临界锥为

$$C(x^*, \lambda^*) = \{d \in F(x^*) | \nabla c_i(x^*)^T d = 0, \forall i \in A(x^*) \cap \mathcal{I} \text{ 且 } \lambda_i^* > 0\}$$

二阶必要条件: 假设 x^* 是约束优化问题的一个局部最优解, 并且 $T_{\mathcal{X}}(x^*) = F(x^*)$ 成立. 令 λ^* 为相应的拉格朗日乘子, 即 (x^*, λ^*) 满足 KKT 条件, 那么

$$d^T \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d \ge 0, \forall d \in C(x^*, \lambda^*)$$

二阶充分条件: 假设在可行点 x^* 处, 存在一个拉格朗日乘子 λ^*, 使得 (x^*, λ^*) 满足 KKT 条件. 如果

$$d^T \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d > 0, \forall d \in C(x^*, \lambda^*), d \ne 0$$

那么 x^* 为约束优化问题的一个严格局部极小解.

5.6 带约束凸优化问题的最优性理论

考虑凸优化问题:

$$
\begin{aligned}
& \min_{x \in D} f(x) \\
& \text{s.t. } \; c_i(x) \le 0, i = 1, 2, \cdots, m \\
& \qquad Ax = b
\end{aligned}
$$

其中 $f(x)$ 为适当的凸函数, $c_i(x), i = 1, 2, \cdots, m$ 是凸函数且 $\mathrm{dom} c_i = \mathbb{R}^n$.

相对内点集: 给定集合 D, 记其仿射包为 affine D, 集合 D 的相对内点集定义为

$$\mathrm{relint} D = \{x \in D | \exists r > 0, \text{s.t.} B(x, r) \cap \mathrm{affine} D \subset D\}$$

Slater 约束品性: 对于凸优化问题, 存在 $x \in \mathrm{relint} D$ 满足

$$c_i(x) < 0, i = 1, 2, \cdots, m, Ax = b$$

则称对此问题 Slater 约束品性满足. 有时也称该约束品性为 Slater 条件. 如果凸优化问题满足 Slater 条件, 则强对偶原理成立.

凸问题 KKT 条件: 对于凸优化问题, 如果 Slater 条件成立, 那么 x^*, λ^* 分别是原始、对偶全局最优解当且仅当

$$
\begin{aligned}
\text{稳定性条件} \quad & 0 \in \partial f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i^* \partial c_i(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* a_i \\
\text{原始可行性条件} \quad & Ax^* = b, \forall i \in \mathcal{E} \\
\text{原始可行性条件} \quad & c_i(x^*) \le 0, \forall i \in \mathcal{I} \\
\text{对偶可行性条件} \quad & \lambda_i^* \ge 0, \forall i \in \mathcal{I} \\
\text{互补松弛条件} \quad & \lambda_i^* c_i(x^*) = 0, \forall i \in \mathcal{I}
\end{aligned}
$$

6 无约束优化算法

6.1 线搜索方法

线搜索方法:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$$

称 d^k 为迭代点 x^k 处的搜索方向, α^k 为相应的步长. 这里要求 d^k 是一个下降方向.

精确线搜索算法:

$$\alpha_k = \arg\min_{\alpha>0} f(x^k + \alpha d^k)$$

Armijo 准则: 设 d^k 是点 x^k 处的下降方向, 若

$$f(x^k + \alpha d^k) \le f(x^k) + c_1 \alpha \nabla f(x^k)^T d^k$$

则称步长 α 满足 Armijo 准则, 其中 $c_1 \in (0,1)$ 是一个常数.

回退法: 寻找满足 Armijo 准则的步长, 选取

$$\alpha_k = \gamma^{j_0} \hat{\alpha}$$

其中

$$j_0 = \min\{j = 0, 1, \cdots | f(x^k + \gamma^j \hat{\alpha} d^k) \le f(x^k) + c_1 \gamma^j \hat{\alpha} \nabla f(x^k)^T d^k\}$$

Goldstein 准则: 设 d^k 是点 x^k 处的下降方向, 若

$$\begin{aligned} f(x^k + \alpha d^k) \le & f(x^k) + c\alpha \nabla f(x^k)^T d^k \\ f(x^k + \alpha d^k) \ge & f(x^k) + (1-c)\alpha \nabla f(x^k)^T d^k \end{aligned}$$

则称步长 α 满足 Goldstein 准则, 其中 $c \in (0, \frac{1}{2})$. Goldstein 准则能够使得函数值充分下降, 但它可能避开了最优的函数值.

Wolfe 准则: 设 d^k 是点 x^k 处的下降方向, 若

$$\begin{aligned} f(x^k + \alpha d^k) &\le f(x^k) + c_1 \alpha \nabla f(x^k)^T d^k \\ \nabla f(x^k + \alpha d^k)^T d^k &\ge c_2 \nabla f(x^k)^T d^k \end{aligned}$$

则称步长 α 满足 Wolfe 准则, 其中 $c_1, c_2 \in (0,1)$ 为给定的常数且 $c_1 < c_2$.

Grippo 准则: 设 d^k 是点 x^k 处的下降方向, $M > 0$ 为给定的正整数. 若

$$f(x^k + \alpha d^k) \le \max_{0 \le j \le \min\{k, M\}} f(x^{k-j}) + c_1 \alpha \nabla f(x^k)^T d^k$$

则称步长 α 满足 Grippo 准则, 其中 $c_1 \in (0,1)$ 为给定的常数.

Zoutendijk 条件: 考虑一般的迭代格式, 且满足 Wolfe 准则. 假设目标函数 f 下有界、连续可微且梯度 L-Lipschitz 连续, 那么

$$\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2 \theta_k ||\nabla f(x^k)||^2 < \infty$$

其中 $\cos\theta_k$ 为负梯度 $-\nabla f(x^k)$ 和下降方向 d^k 夹角的余弦.

6.2 梯度类算法

梯度下降法:

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f(x^k)$$

考虑正定二次函数

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$$

其最优值点位 x^*. 若使用梯度法并选取 α_k 位精确线搜索步长, 即

$$\alpha_k = \frac{||\nabla f(x^k)||^2}{\nabla f(x^k)^T A \nabla f(x^k)}$$

则梯度法关于迭代点列 $\{x^k\}$ 是 Q-线性收敛的, 即

$$||x^{k+1} - x^*||_A^2 \leq \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_n}{\lambda_1 + \lambda_n}\right)^2 ||x^k - x^*||_A^2$$

其中 λ_1, λ_n 分别为 A 的最大、最小特征值, $||x||_A := \sqrt{x^T Ax}$ 为由正定矩阵 A 诱导的范数.

设函数 $f(x)$ 为凸的梯度 L-Lipschitz 连续函数, $f^* = f(x^*) = \inf_x f(x)$ 存在且可达. 如果步长 α_k 取为常数 α 且满足 $0 < \alpha \leq \frac{1}{L}$, 那么由梯度法迭代得到的点列 $\{x^k\}$ 的函数值收敛到最优值, 且在函数值的意义下收敛速度为 $O(\frac{1}{k})$.

设函数 $f(x)$ 为 m-强凸的梯度 L-Lipschitz 连续函数, $f^* = f(x^*) = \inf_x f(x)$ 存在且可达. 如果步长 α 满足 $0 < \alpha < \frac{2}{m+L}$, 那么由梯度法迭代得到的点列 $\{x^k\}$ 收敛到 x^*, 且为 Q-线性收敛.

Barzilar-Borwein 方法: 选取的 α_k 是如下两个最优问题之一的解:

$$\min_{\alpha} ||\alpha y^{k-1} - s^{k-1}||^2$$
$$\min_{\alpha} ||y^{k-1} - \alpha^{-1} s^{k-1}||^2$$

其中我们引入记号 $s^{k-1} = x^k - x^{k-1}$ 以及 $y^{k-1} = \nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})$. 容易验证解是

$$\alpha_{\text{BB1}}^k = \frac{(s^{k-1})^T y^{k-1}}{(y^{k-1})^T y^{k-1}} \text{ 和} \alpha_{\text{BB2}}^k = \frac{(s^{k-1})^T s^{k-1}}{(s^{k-1})^T y^{k-1}}$$

计算两种 BB 步长的任何一种仅仅需要函数相邻两步的梯度信息和迭代点信息, 不需要任何线搜索算法. 对于一般的问题, 通过上式计算的步长可能过大或过小, 因此还需要将步长做上界和下界的截断, 即选取 $0 < \alpha_m < \alpha_M$ 使得

$$\alpha_m \leq \alpha_k \leq \alpha_M$$

还需注意的是 BB 方法本身是非单调方法, 有时也配合非单调收敛准则使用以获得更好的实际效果. 对于正定二次函数, BB 方法有 Q-超线性收敛速度.

6.3 次梯度算法

次梯度算法: 假设 $f(x)$ 是凸函数, 但不一定可微.

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k g^k, g^k \in \partial f(x^k)$$

其中 $\alpha_k > 0$ 是步长. 它通常有如下四种选择:

1. 固定步长 $\alpha_k = \alpha$;
2. 固定 $||x^{k+1} - x^k||$, 即 $\alpha_k||g^k||$ 为常数;
3. 消失步长 $\alpha_k \to 0$ 且 $\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k = +\infty$;
4. 选取 α_k 使其满足某种线搜索准则.

设 $f(x)$ 是凸函数, 则 $f(x)$ 是 G-Lipschitz 连续的当且仅当 $f(x)$ 是次梯度是有界的, 即

$$||g|| \leq G, \forall g \in \partial f(x), x \in \mathbb{R}^n$$

收敛性分析: 对无约束优化问题, 假设目标函数 $f(x)$ 满足:

1. f 为凸函数;
2. f 至少存在一个有限的极小值点 x^*, 且 $f(x^*) > -\infty$;
3. f 为 Lipschitiz 连续的, 即

$$|f(x) - f(y)| \leq G||x - y||, \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

其中 $G > 0$ 为 Lipschitz 常数.

次梯度算法的收敛性: 在假设的前提下, 设 $\{\alpha_k > 0\}$ 为任意步长序列, $\{x^k\}$ 是次梯度算法产生的迭代序列, 则对任意的 $k \geq 0$, 有

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

其中 x^* 是 $f(x)$ 的一个全局极小值点, $f^* = f(x^*)$, $\hat{f}^k$ 为前 k 次迭代 $f(x)$ 的最小值, 即

$$\hat{f}^k = \min_{0 \leq i \leq k} f(x^i)$$

推论:

1. 取 $\alpha_i = t$ 为固定步长, 则
$$\hat{f}^k - f^* \leq \frac{||x^0 - x^*||^2}{2kt} + \frac{G^2 t}{2}$$
2. 取 α_i 使得 $||x^{i+1} - x^i||$ 固定, 即 $\alpha_i||g^i|| = s$ 为常数, 则
$$\hat{f}^k - f^* \leq \frac{G||x^0 - x^*||^2}{2ks} + \frac{Gs}{2}$$
3. 取 α_i 为消失步长, 即 $\alpha_i \to 0$ 且 $\sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i = +\infty$, 则
$$\hat{f}^k - f^* \leq \frac{||x^0 - x^*||^2 + G^2 \sum_{i=0}^{k} \alpha_i^2}{2 \sum_{i=0}^{k} \alpha_o}$$

进一步可得 $\hat{f}^k$ 收敛到 f^*.

6.4 牛顿类算法

经典牛顿法: 考虑二阶泰勒展开

$$f(x^k+d^k)=f(x^k)+\nabla f(x^k)^T d^k+\frac{1}{2}(d^k)^T\nabla^2 f(x^k)d^k+o(||d^k||^2)$$

将等式右边看成关于 d^k 的函数对其极小化, 可以得到

$$\nabla^2 f(x^k)d^k=-\nabla f(x^k)$$

因此更新格式为

$$x^{k+1}=x^k-[\nabla^2 f(x^k)]^{-1}\nabla f(x^k)$$

收敛性: 假设目标函数 f 是二阶连续可微的函数, 且海瑟矩阵在最优点 x^* 的一个邻域 $N_\delta(x^*)$ 内是 Lipschitz 连续的, 即存在常数 $L>0$ 使得

$$||\nabla^2 f(x)-\nabla^2 f(y)||\le L||x-y||,\forall x,y\in N_\delta(x^*)$$

如果函数 $f(x)$ 在点 x^* 处满足 $\nabla f(x^*)=0,\nabla^2 f(x^*)\succ 0$, 则对于牛顿迭代法有如下结论:

1. 如果初始点离 x^* 足够近, 则牛顿法产生的迭代点列 $\{x^k\}$ 收敛到 x^*;
2. $\{x^k\}$ 收敛到 x^* 的速度是 Q-二次的;
3. $\{||\nabla f(x^k)||\}$Q-二次收敛到 0.

非精确牛顿法: 对于非精确解 d^k, 引入向量 r^k 来表示残差, 则非精确牛顿方向满足

$$\nabla^2 f(x^k)d^k=-\nabla f(x^k)+r^k$$

这里假设相对误差满足

$$||r^k||\le\eta_k||\nabla f(x^k)||$$

显然牛顿法的收敛性依赖于相对误差 η_k 的选取.

非精确牛顿法的收敛性: 设函数 $f(x)$ 二阶连续可微, 且在最小值点 x^* 处的海瑟矩阵正定, 则在非精确牛顿法中:

1. 若存在常数 $t<1$ 使得 η_k 满足 $0<\eta_k<t,k=1,2,\cdots$, 则该算法收敛速度是 Q-线性的;
2. 若 $\lim\limits_{k\to\infty}\eta_k=0$, 则该算法收敛速度是 Q-超线性的;
3. 若 $\eta_k=O(||\nabla f(x^k)||)$, 则该算法收敛速度是 Q-二次的.

6.5 拟牛顿类算法

割线方程:

$$\nabla f(x^k)=\nabla f(x^{k+1})+\nabla^2 f(x^{k+1})(x^k-x^{k+1})+O(||x^k-x^{k+1}||^2)$$

令 $s^k=x^{k+1}-x^k,y^k=\nabla f(x^{k+1})-\nabla f(x^k)$, 得到

$$\nabla^2 f(x^{k+1})s^k+O(||s^k||^2)=y^k$$

忽略高阶项 $||s^k||^2$, 我们希望海瑟矩阵的近似矩阵满足方程

$$y^k = B^{k+1}s^k$$

或者其逆的近似矩阵 H^{k+1} 满足方程

$$s^k = H^{k+1}y^k$$

并称以上两式为割线方程. 注意到近似矩阵 B^k 的正定性是一个很关键的因素, 由于 $(s^k)^T B^{k+1}s^k = (s^k)^T y^k$, 因此条件

$$(s^k)^T y^k > 0$$

为 B^{k+1} 正定的一个必要条件, 我们要求该条件始终满足, 称为曲率条件.

拟牛顿算法更新框架:

1. 计算方向 $d^k = -(B^k)^{-1}\nabla f(x^k)$ 或 $d^k = -H^k\nabla f(x^k)$;
2. 通过线搜索找到合适的步长 $\alpha_k > 0$, 令 $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$;
3. 更新海瑟矩阵的近似矩阵 B^{k+1} 或其逆的近似矩阵 H^{k+1}.

秩一更新:

$$B^{k+1} = B^k + auu^T$$

根据割线方程,

$$B^{k+1}s^k = (B^k + auu^T)s^k = y^k \Rightarrow (a\cdot u^T s^k)u = y^k - B^k s^k$$

注意到 $a\cdot u^T s^k$ 是一个标量, 因此不妨令 $u = y^k - B^k s^k$, 知 $a = \frac{1}{(y^k - B^k s^k)^T s^k}$, 因此最终得到的更新格式为

$$B^{k+1} = B^k + \frac{(y^k - B^k s^k)(y^k - B^k s^k)^T}{(y^k - B^k s^k)^T s^k}$$

类似地, 有

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

SR1 公式虽然结构简单, 但不能保证矩阵的正定性.

秩二更新 (BFGS 公式):

$$B^{k+1} = B^k + auu^T + bvv^T$$

根据割线方程,

$$(a\cdot u^T s^k)u + (b\cdot v^T s^k)v = y^k - B^k s^k$$

不妨令 $u = y^k, a\cdot u^T s^k = 1, v = B^k s^k, b\cdot v^T s^k = -1$, 得到更新方式

$$B^{k+1} = B^k + \frac{y^k(y^k)^T}{(s^k)^T y^k} - \frac{B^k s^k(B^k s^k)^T}{(s^k)^T B^k s^k}$$

假设 $H^k = (B^k)^{-1}$, 可立即推出

$$H^{k+1} = (I - \rho_k s^k (y^k)^T)^T H^k (I - \rho_k s^k (y^k)^T) + \rho_k s^k (s^k)^T$$

其中 $\rho_k = \frac{1}{(s^k)^T y^k}$.

秩二更新 (DFP 公式): 利用第二个割线方程对 H^k 推导秩二修正的拟牛顿修正, 我们将得到基于 H^k 的拟牛顿矩阵更新

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

类似地有

$$B^{k+1} = (I - \rho_k y^k (s^k)^T)^T B^k (I - \rho_k y^k (s^k)^T) + \rho_k y^k (y^k)^T$$

BFGS 全局收敛性: 假设初始矩阵 B^0 是对称正定矩阵, 目标函数 $f(x)$ 是二阶连续可微函数, 下水平集 $L = \{x \in \mathbb{R}^n | f(x) \leq f(x^0)\}$ 是凸的, 并且存在正数 m 以及 M 使得对于任意的 $z \in \mathbb{R}^n$ 以及任意的 $x \in L$ 有 $m||z||^2 \leq z^T \nabla^2 f(x) z \leq M||z||^2$. 则采用 BFGS 格式并结合 Wolfe 线搜索的拟牛顿算法全局收敛到 $f(x)$ 的极小值点 x^*.

BFGS 收敛速度: 设 $f(x)$ 二阶连续可微, 在最优点 x^* 的一个邻域内海瑟矩阵 Lipschitz 连续, 且使用 BFGS 迭代格式收敛到 f 的最优点 x^*. 若迭代点列 $\{x^k\}$ 满足

$$\sum_{k=1}^{\infty} ||x^k - x^*|| < +\infty$$

则 $\{x^k\}$ 为 Q-超线性收敛到 x^*.

6.6 信赖域算法

信赖域算法框架:

$$f(x^k + d) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x^k + td) d$$

其中 $t \in (0, 1)$ 为和 d 有关的正数. 和牛顿法相同, 我们利用 $f(x)$ 的一个二阶近似来刻画 $f(x)$ 在点 $x = x^k$ 处的性质:

$$m_k(d) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T B^k d$$

使用二阶泰勒展开来近似目标函数 $f(x)$, 但泰勒展开是函数的局部性质, 仅对模长较小的 d 有意义. 因此我们仅在如下球内考虑 $f(x)$ 的近似:

$$\Omega_k = \{x^k + d \,|\, ||d|| \leq \Delta_k\}$$

其中 $\Delta_k > 0$ 是一个和迭代有关的参数. 我们称 Ω_k 为信赖域, Δ_k 为信赖域半径. 我们希望在信赖域内 $m_k(d)$ 可以很好近似 $f(x)$. 因此信赖域每一步都需要求解如下子问题:

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} m_k(d) \quad \text{s.t. } ||d|| \leq \Delta_k$$

在子问题中仍需要确定信赖域半径 Δ_k. 我们引入如下定义来衡量 $m_k(d)$ 近似程度的好坏:

$$\rho_k = \frac{f(x^k) - f(x^k + d^k)}{m_k(0) - m_k(d^k)}$$

其中 d^k 为求解子问题得到的迭代方向. 如果 ρ_k 接近 1, 说明近似比较成功, 应当扩大 Δ_k; 如果较小, 那么应该缩小 Δ_k; 如果实在太小, 还应当拒绝本次更新.

d^* 是信赖域子问题

$$\min m(d) = f + g^T d + \frac{1}{2} d^T B d \quad \text{s.t. } ||d|| \leq \Delta$$

的全局极小解当且仅当 d^* 是可行的且存在 $\lambda \geq 0$ 使得

$$
\begin{aligned}
(B+\lambda I)d^* &= -g \\
\lambda(\Delta - ||d^*||) &= 0 \\
(B+\lambda I) &\succeq 0
\end{aligned}
$$

可以看出, 最优解是以 λ 为参数的一族向量. 我们定义

$$d(\lambda) = -(B+\lambda I)^{-1}g$$

则只需要寻找合适的 λ 使得上式成立即可. 根据互补条件, 当 $\lambda > 0$ 时, 必有 $||d(\lambda)|| = \Delta$; 根据半正定条件, λ 须大于等于 B 的最小特征值的相反数. 设 B 有特征值分解 $B = Q\Lambda Q^T$, 其中 $Q = [q_1, q_2, \cdots, q_n]$ 是正交矩阵, $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$ 是对角矩阵, $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$ 是 B 的特征值. 为了方便, 下面仅考虑 $\lambda_1 \leq 0$ 且 λ_1 是单特征值根的情形. 对 $\lambda > -\lambda_1 \geq 0$, 我们可直接写出 $d(\lambda)$ 的表达式

$$d(\lambda) = -Q(\Lambda+\lambda I)^{-1}Q^T g = -\sum_{i=1}^{n} \frac{q_i^T g}{\lambda_i + \lambda} q_i$$

这正是 $d(\lambda)$ 的正交分解. 由正交性可容易求出

$$||d(\lambda)||^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{(q_i^T g)^2}{(\lambda_i + \lambda)^2}$$

可以看出当 $\lambda > -\lambda_1$ 且 $q_1^T g \neq 0$ 时, $||d(\lambda)||^2$ 是关于 Λ 的严格减函数, 由介质定理, $||d(\lambda)|| = \Delta$ 的解必存在且唯一. 根据上面的分析, 寻找 λ^* 已经转化为一个一元方程球根问题, 可以使用牛顿法求解, 求得 λ^* 后, 根据第一式可求出迭代方向 d^*.

如果 $q_1^T g = 0$, 记 $M = \lim\limits_{\lambda \to -\lambda_1 +} ||d(\lambda)||$. 当 $M \geq \Delta$ 时, 仍然可以根据介质定理得出 λ^* 的存在性.; 而当 $M < \Delta$ 时, 无法利用前面的分析求出 λ^* 和 d^*. 此时信赖域子问题变得比较复杂, 称为 "困难情形". 此时 $\lambda^* = -\lambda_1$, 通解可以写为

$$d(\alpha) = -\sum_{i=2}^{n} \frac{q_i^T g}{\lambda_i - \lambda_1} q_i + \alpha q_1, \alpha \in \mathbb{R}$$

由正交性,

$$||d(\alpha)||^2 = \alpha^2 + \sum_{i=2}^{n} \frac{(q_i^T g)^2}{(\lambda_i - \lambda_1)^2}$$

注意在困难情形中有 $M = \sqrt{\sum_{i=2}^{n} \frac{(q_i^T g)^2}{(\lambda_i - \lambda_1)^2}} < \Delta$, 因此必存在 α^* 使得

$$||d(\alpha^*)|| = \Delta$$

.

6.7 非线性最小二乘问题算法

考虑参数模型:

$$b = \phi(a; x) + \epsilon$$

l_2 范数平方损失函数

$$f(x)=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}||b_i-\phi(a_i;x)||^2$$

一般形式:

$$f(x)=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{m}r_j^2(x)$$

这是一个无约束优化问题, 我们直接给出梯度和海瑟矩阵:

$$\nabla f(x)=J(x)^T r(x)$$
$$\nabla^2 f(x)=J(x)^T J(x)+\sum_{i=1}^{m}r_i(x)\nabla^2 r_i(x)$$

其中 $J(x)\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 是向量值函数 $r(x)$ 在点 x 处的雅可比矩阵.

高斯-牛顿法: 既然海瑟矩阵有关 $r_i(x)$ 的二阶导数项不易求出, 高斯-牛顿法不去计算这一部分, 直接使用 $J(x)^T J(x)$ 作为海瑟矩阵的近似矩阵来求解牛顿方程. 我们用 J^k 简记 $J(x^k)$. 高斯-牛顿法产生的下降方向 d^k 满足

$$(J^k)^T J^k d^k=-(J^k)^T r^k$$

实际上, 这是如下线性最小二乘问题的最优性条件:

$$\min_d \frac{1}{2}||J^k d+r^k||^2$$

在求解这一问题时, 只需要对 J^k 做 QR 分解, 无需计算 $(J^k)^T J^k$.

全局收敛性: 如果每个残差函数 r_j 在有界下水平集 $L=\{x|f(x)\le f(x^0)\}$ 的一个邻域 N 内是 Lipschitz 连续可微的, 并且雅可比矩阵 $J(x)$ 在 N 内满足一致满秩条件

$$||J(x)z||\ge\gamma||z||,\forall x\in N$$

且补偿满足 Wolfe 准则, 则对高斯-牛顿法得到的序列 $\{x^k\}$ 有

$$\lim_{k\to\infty}(J^k)^T r^k=0$$

局部收敛性: 设 $r_i(x)$ 二阶连续可微, x^* 是最小二乘问题的最优解, 海瑟矩阵 $\nabla^2 f(x)$ 和其近似矩阵 $J(x)^T J(x)$ 均在点 x^* 的一个邻域内 Lipschitz 连续, 泽当高斯-牛顿算法步长 α_k 恒为 1 时,

$$||x^{k+1}-x^*||\le C||((J^*)^T J^*)^{-1}H^*||\cdot||x^k-x^*||+O(||x^k-x^*||^2)$$

其中 $H^*=\sum_{i=1}^{m}r_i(x^*)\nabla^2 r_i(x^*)$ 为海瑟矩阵 $\nabla^2 f(x^*)$ 去掉 $J(x^*)^T J(x^*)$ 的部分, $C>0$ 为常数.

LMF 方法:

$$(J^T J+\lambda I)d=-J^T r$$

即每一步都求解子问题

$$\min_d \frac{1}{2}||Jd+r||_2^2+\lambda||d||_2^2$$

根据 ρ_k 修改 λ_k.

大残差问题的拟牛顿法:

$$B^k=(J^k)^T J^k+T^k$$

其中 T^k 是海瑟矩阵第二部分 $\sum_{j=1}^m r_j(x^k)\nabla^2 r_j(x^k)$ 的近似. 计算可知 T^k 满足的拟牛顿条件为

$$T^{k+1}s^k \approx \hat{y}^k$$

其中

$$s^k = x^{k+1} - x^k, \hat{y}^k = (J^{k+1})^T r^{k+1} - (J^k)^T r^{k+1}$$

7 约束优化算法

7.1 罚函数法

等式约束的二次罚函数: 对等式约束最优化问题, 定义二次罚函数为

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

迭代时 $\sigma \to +\infty$.

二次罚函数法的收敛性 1: 设 x^{k+1} 是 $P_E(x,\sigma_k)$ 的全局极小解, σ_k 单调上升趋于无穷, 则 $\{x^k\}$ 的每个极限点 x^* 都是原问题的全局极小解.

二次罚函数法的收敛性 2: 设 $f(x)$ 和 $c_i(x), i\in\mathcal{E}$ 连续可微, 正数序列 $\epsilon_k \to 0, \sigma_k \to +\infty$. 子问题的解满足 $||\nabla_x P_E(x^{k+1},\sigma_k)|| \le \epsilon_k$, 而对 $\{x^k\}$ 的任何极限点 x^*, 都有 $\{\nabla c_i(x^*), i\in\mathcal{E}\}$ 线性无关, 则 x^* 是等式约束最优化问题的 KKT 点, 且

$$\lim_{k\to\infty}(-\sigma_k c_i(x^{k+1})) = \lambda_i^*, \forall i \in \mathcal{E}$$

其中 λ_i^* 是约束 $c_i(x^*) = 0$ 对应的拉格朗日乘子.

一般约束的二次罚函数: 对一般约束最优化问题, 定义二次罚函数为

$$P(x,\sigma) = f(x) + \frac{1}{2}\sigma \left[\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x) + \sum_{i\in\mathcal{I}} \widetilde{c}_i^2(x)\right]$$

其中等式右端第二项称为惩罚项, $\widetilde{c}_i(x) = \max\{c_i(x), 0\}$, 常数 $\sigma > 0$ 称为罚因子.

内点罚函数: 如果想要使得子问题最优解序列从可行域内部逼近最优解, 则需要构造内点罚函数. 在迭代时始终要求自变量 x 不能违反约束, 主要用于不等式约束优化问题.

对数罚函数:

$$P_I(x,\sigma) = f(x) - \sigma \sum_{i\in\mathcal{I}} \ln(-c_i(x))$$

迭代时 $\sigma \to 0$.

精确罚函数: 前面介绍的二次罚函数和对数罚函数都必须令罚因子趋于正无穷或零, 这会带来一定的数值困难. 对于有些罚函数不需要这么做, 称为精确罚函数.

l_1 罚函数:

$$P(x,\sigma) = f(x) + \sigma \left[\sum_{i\in\mathcal{E}} |c_i(x)| + \sum_{i\in\mathcal{I}} \widetilde{c}_i(x)\right]$$

7.2 增广拉格朗日函数法

等式约束的增广拉格朗日函数:

$$L_\sigma(x,\lambda)=f(x)+\sum_{i\in\mathcal{E}}\lambda_i c_i(x)+\frac{1}{2}\sigma\sum_{i\in\mathcal{E}}c_i^2(x)$$

即在拉格朗日函数的基础上添加了约束的二次罚函数. 在第 k 次迭代, 给定罚因子 σ_k 和乘子 λ^k, 增广拉格朗日函数 $L_{\sigma_k}(x,\lambda^k)$ 的最小值点 x^{k+1} 满足

$$\nabla_x L_{\sigma_k}(x^{k+1},\lambda^k)=\nabla f(x^{k+1})+\sum_{i\in\mathcal{E}}(\lambda_i^k+\sigma_k c_i(x^{k+1}))\nabla c_i(x^{k+1})=0$$

对于原优化问题, 其最优解以及相应的乘子 λ^* 需满足

$$\nabla f(x^*)+\sum_{i\in\mathcal{E}}\lambda_i^*\nabla c_i(x^*)=0$$

因此, 对于充分大的 k, 应有

$$\lambda_i^*\approx\lambda_i^k+\sigma_k c_i(x^{k+1})\Leftrightarrow c_i(x^{k+1})\approx\frac{1}{\sigma_k}(\lambda_i^*-\lambda_i^k)$$

所以当 λ_i^k 足够接近 λ_i^* 时, 点 x^{k+1} 处的约束违反度会远小于 $\frac{1}{\sigma_k}$. 这表明, 乘子的一个有效更新格式为

$$\lambda_i^{k+1}=\lambda_i^k+\sigma_k c_i(x^{k+1}),\forall i\in\mathcal{E}$$

这样, 我们就得到了增广拉格朗日法.

增广拉格朗日函数法的收敛性: 假设乘子列 $\{\lambda^k\}$ 是有界的, 罚因子 $\sigma_k\to+\infty,k\to\infty$, 算法中精度 $\eta_k\to 0$ (精度条件 $||\nabla_x L_{\sigma_k}(x,\lambda^k)||\le\eta_k$), 迭代点列 $\{x^k\}$ 的一个子序列 $\{x^{k_j+1}\}$ 收敛到 x^*, 并且在点 x^* 处 LICQ 成立. 那么存在 λ^*, 满足

$$\lambda^{k_j+1}\to\lambda^*,j\to\infty;\nabla f(x^*)+\nabla c(x^*)\lambda^*=0,c(x^*)=0$$

一般约束的增广拉格朗日函数: 引入松弛变量得到如下等价形式

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

构造拉格朗日函数

$$L(x,s,\lambda,\mu)=f(x)+\sum_{i\in\mathcal{E}}\lambda_i c_i(x)+\sum_{i\in\mathcal{I}}\mu_i(c_i(x)+s_i),s_i\ge 0,i\in\mathcal{I}$$

二次罚函数为

$$p(x,s)=\sum_{i\in\mathcal{E}}c_i^2(x)+\sum_{i\in\mathcal{I}}(c_i(x)+s_i)^2$$

增广拉格朗日函数

$$L_\sigma(x,s,\lambda,\mu)=f(x)+\sum_{i\in\mathcal{E}}\lambda_i c_i(x)+\sum_{i\in\mathcal{I}}\mu_i(c_i(x)+s_i)+\frac{\sigma}{2}p(x,s),s_i\ge 0,i\in\mathcal{I}$$

在第 k 步迭代中, 给定乘子 λ^k,η^k 和罚因子 σ_k, 我们需要求解如下问题

$$\min_{x,s} L_{\sigma_k}(x,s,\lambda^k,\mu^k), \text{s.t. } s\geq 0$$

以得到 x^{k+1},s^{k+1} 其中一种方法是消去 s, 求解关于 x 的优化问题. 固定 x, 关于 s 的子问题可以表示为

$$\min_{s\geq 0}\sum_{i\in\mathcal{I}}\mu_i(c_i(x)+s_i)+\frac{\sigma_k}{2}\sum_{i\in\mathcal{I}}(c_i(x)+s_i)^2$$

根据凸优化问题的最优性理论, s 为以上问题的一个全局最优解当且仅当

$$s_i=\max\{-\frac{\mu_i}{\sigma_k}-c_i(x),0\}$$

带入原式, 有

$$L_{\sigma_k}(x,\lambda^k,\mu^k)=f(x)+\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i c_i(x)+\frac{\sigma_k}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}}c_i^2(x)+\frac{\sigma_k}{2}\sum_{i\in\mathcal{I}}\left(\max\left\{\frac{\mu_i}{\sigma_k}+c_i(x),0\right\}^2-\frac{\mu_i^2}{\sigma_k^2}\right)$$

最优解 x^{k+1},s^{k+1} 满足

$$0=\nabla f(x^{k+1})+\sum_{i\in\mathcal{E}}(\lambda_i^k+\sigma_k c_i(x^{k+1}))\nabla c_i(x^{k+1})+\sum_{i\in\mathcal{I}}(\mu_i^k+\sigma_k(c_i(x^{k+1})+s_i^{k+1}))\nabla c_i(x^{k+1})$$

$$s_i^{k+1}=\max\{-\frac{\mu_i^k}{\sigma_k}-c_i(x^{k+1}),0\}, i\in\mathcal{I}$$

约束违反度为

$$v_k(x^{k+1})=\sqrt{\sum_{i\in\mathcal{E}}c_i^2(x^{k+1})+\sum_{i\in\mathcal{I}}\max\{c_i(x^{k+1}),-\frac{\mu_i^k}{\sigma_k}\}^2}$$

每次计算出子问题的近似解 x^{k+1} 后, 算法需要判断约束违反度是否满足精度要求. 若满足, 则进行乘子更新, 并提高子问题求解精度, 罚因子不变; 若不满足, 则不进行乘子的更新, 并适当增大罚因子以得到约束违反度更小的解.

凸优化问题的增广拉格朗日函数法: 增广拉格朗日函数为

$$L_\sigma(x,\lambda)=f(x)+\frac{\sigma}{2}\sum_{i=1}^m\left(\max\left\{\frac{\lambda_i}{\sigma}+c_i(x),0\right\}^2-\frac{\lambda_i^2}{\sigma^2}\right)$$

给定一列单调递增的乘子 $\sigma_k\to\sigma_\infty$, 以及初始乘子 λ^0, 其增广拉格朗日函数法为

$$x^{k+1}\approx\arg\min_{x\in\mathbb{R}^n}L_{\sigma_k}(x,\lambda^k), \lambda^{k+1}=\max\{0,\lambda^k+\sigma_k c(x^{k+1})\}$$

7.3 线性规划内点法

原始-对偶算法: 首先写出原始问题和对偶问题

$$\begin{aligned}
&(\mathrm{P})\quad \min\quad c^Tx &&(\mathrm{D})\quad \max\quad b^Ty\\
&\qquad\ \ \text{s.t.}\quad Ax=b &&\qquad\ \ \text{s.t.}\quad A^Ty+s=c\\
&\qquad\qquad\quad x\geq 0 &&\qquad\qquad\quad s\geq 0
\end{aligned}$$

并写出 KKT 条件:

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ A^T y + s &= c \\ x_i s_i &= 0, i = 1, 2, \cdots, n \\ x \geq 0&, s \geq 0 \end{aligned}$$

原始-对偶算法作为一种内点法, 实际上是利用上述条件不断在可行域的内部产生迭代点的过程. 具体来说, 其构造的解满足第 1、2、4 个条件, 但智能近似满足第 3 个条件. 这意味着 $x_i s_i > 0, i = 1, 2, \cdots, n$, 这意味着 (x, s) 为可行域的相对内点. 我们希望 $x_i s_i \to 0, \forall i$, 因此定义互补条件违反度的度量

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i s_i = \frac{x^T s}{n}$$

也称为对偶间隙. 因此, 线性规划原始-对偶算法的目标是给定当前可行点 (x, y, s), 寻找下一个点

$$(\widetilde{x}, \widetilde{y}, \widetilde{s}) = (x, y, s) + (\Delta x, \Delta y, \Delta s)$$

使得如下条件成立

$$A^T \widetilde{y} + \widetilde{s} = c, \widetilde{s} > 0; \quad A\widetilde{x} = b, \widetilde{x} > 0; \quad \widetilde{x}_i \widetilde{s}_i = \sigma\mu, i = 1, 2, \cdots, n$$

其中 $0 < \sigma < 1$ 是给定的常数, 我们希望迭代下一步时对偶间隙将会缩小一个比例 σ. 这也被称为扰动 KKT 条件. 通过近似求解得到

$$\begin{aligned} \Delta y &= (AL_s^{-1} L_x A^T)^{-1} (r_p + AL_s^{-1}(L_x r_d - r_c)) \\ \Delta s &= r_d - A^T \Delta y \\ \Delta x &= -L_s^{-1}(L_x \Delta s - r_c) \end{aligned}$$

其中 $L_x = \mathrm{diag}(x), L_s = \mathrm{diag}(s), r = (r_p, r_d, r_c) = (b - Ax, c - s - A^T y, \sigma\mu\mathbf{1} - x \odot s)$. 若更新后 $(\widetilde{x}, \widetilde{y}, \widetilde{s})$ 不是可行解, 可以采用线搜索中的回溯法来确定一个合适的更新

$$(x^{k+1}, y^{k+1}, s^{k+1}) = (x^k, y^k, z^k) + \alpha_0 \rho^{k_0} (\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta s^k)$$

路径追踪算法: 中心路径: 给定参数 $\tau > 0$, 点 (x_τ, y_τ, s_τ) 满足如下方程:

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ A^T y + s &= c \\ x_i s_i &= \tau, \quad i = 1, 2, \cdots, n \\ x > 0&, s > 0 \end{aligned}$$

则称单参数曲线

$$C = \{(x_\tau, y_\tau, s_\tau) | \tau > 0\}$$

为中心路径, 该方程为中心路径方程. 我们希望迭代点列应该在中心路径 C 附近移动, 跟随曲线 C 直至到达最优值点. 考虑严格可行域

$$F^0 = \{(x, y, s) | Ax = b, A^T y + s = c, x > 0, s > 0\}$$

并定义中心路径邻域为

$$N_{-\infty}(\gamma) = \{(x, y, s) \in F^0 | x_i s_i \geq \gamma\mu, \forall i\}$$

通常取 γ 为一个很小的正数. 算法每次选取最大的 $\alpha \in (0,1]$ 使得下一步迭代点 $(x^{k+1}, y^{k+1}, s^{k+1}) = (x^k, y^k, s^k) + \alpha_k(\Delta x, \Delta y, \Delta s)$ 落在 $N_{-\infty}(\gamma)$ 内, 其中 $(\Delta x, \Delta y, \Delta s)$ 仍通过原始-对偶算法的更新公式求解.

原始-对偶算法的收敛性: 给定参数 $0 < \gamma < \sigma < 1$, 设 $\mu_k = \frac{(x^k)^T s^k}{n}$ 为路径追踪算法产生的对偶间隙, 且初值 $(x^0, y^0, s^0) = N_{-\infty}(\gamma)$, 则存在与维数 n 无关的常数 c, 使得对任意的 k 有

$$\mu_{k+1} \leq (1 - \frac{c}{n})\mu_k$$

进一步地, 对任意给定的精度 $\epsilon \in (0,1)$, 存在迭代步数 $K = O(n \ln \frac{1}{\epsilon})$ 使得

$$\mu_k \leq \epsilon\mu_0, \forall k \geq K$$

8 复合优化算法

考虑复合优化问题:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \phi(x) = f(x) + h(x)$$

其中 $f(x)$ 为可微函数, $h(x)$ 可能为不可微函数.

8.1 近似点梯度法

邻近算子: 对于一个凸函数 h, 定义它的邻近算子为

$$\text{prox}_h(x) = \underset{u \in \text{dom}h}{\arg\min} \left\{ h(u) + \frac{1}{2}||u - x||^2 \right\}$$

如果 h 是适当且闭的凸函数, 则对任意的 x, $\text{prox}_h(x)$ 的值存在且唯一, 且

$$u = \text{prox}_h(x) \Leftrightarrow x - u \in \partial h(u)$$

近似点梯度法的迭代公式:

$$x^{k+1} = \text{prox}_{t_k h}(x^k - t_k \nabla f(x^k))$$

收敛性分析假设: (1) f 在其定义域 $\mathbb{R}^n$ 内为凸, ∇f 在常数 L 意义下 Lipschitz 连续; (2) h 是适当的闭凸函数; (3) 函数 $\phi(x) = f(x) + h(x)$ 的最小值 ϕ^* 是有限的, 并且在点 x^* 处可以取到.

收敛性: 在如上假设下, 取定步长为 $t_k = t \in (0, \frac{1}{L}]$, 设 $\{x^k\}$ 是由近似点梯度法产生的序列, 则

$$\phi(x^k) - \phi^* \leq \frac{1}{2kt}||x^0 - x^*||^2$$

8.2 Nesterov 加速算法

FISTA 算法: 考虑复合优化问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \phi(x) = f(x) + h(x)$$

其中 $f(x)$ 是连续可微的凸函数且梯度是 Lipschitz 连续的, $h(x)$ 是适当的闭凸函数.

$$\begin{aligned}
y^k &= x^{k-1} + \frac{k-2}{k+1}(x^{k-1} - x^{k-2}) \\
x^k &= \mathrm{prox}_{t_k h}(y^k - t_k \nabla f(y^k))
\end{aligned}$$

其收敛速度是 $O(\frac{1}{k^2})$.

第二类 Nesterov 加速算法:

$$\begin{aligned}
z^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^{k-1} \\
y^k &= \mathrm{prox}_{(t_k/\gamma_k)h}(y^{k-1} - \frac{t_k}{\gamma_k}\nabla f(z^k)) \\
x^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^k
\end{aligned}$$

可取 $\gamma_k = \frac{2}{k+1}, t_k = \frac{1}{L}$.

第三类 Nesterov 加速算法:

$$\begin{aligned}
z^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^{k-1} \\
y^k &= \mathrm{prox}_{(t_k \sum_{i=1}^k 1/\gamma_i)h}(-t_k \sum_{i=1}^k \frac{1}{\gamma_i}\nabla f(z^i)) \\
x^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^k
\end{aligned}$$

FISTA 算法的收敛性分析: 若固定步长 $t_k = \frac{1}{L}$, 则

$$\phi(x^k) - \phi(x^*) \le \frac{2L}{(k+1)^2}||x^0 - x^*||^2$$

8.3 近似点算法

近似点算法: 考虑优化问题:

$$\min_x \phi(x)$$

其中 ϕ 是一个适当的闭凸函数, 并不要求是可微的或连续的. 算法格式:

$$\begin{aligned}
x^{k+1} &= \mathrm{prox}_{t_k\phi}(x^k) \\
&= \arg\min_u \left(\phi(u) + \frac{1}{2t_k}||u - x^k||_2^2\right)
\end{aligned}$$

近似点算法收敛性: 设 ϕ 是适当的闭凸函数, 最优值 ϕ^* 有限且在点 x^* 处可达, 则对该算法有

$$\phi(x^k) - \phi^* \le \frac{||x^0 - x^*||_2^2}{2\sum_{i=1}^k t_i}$$

8.4 分块坐标下降法

考虑优化问题

$$\min_{x\in\mathcal{X}} F(x_1, x_2, \cdots, x_s) = f(x_1, x_2, \cdots, x_s) + \sum_{i=1}^s r_i(x_i)$$

我们按照 $x_1, x_2, \cdots, x_s$ 的次序依次固定其他 $(s-1)$ 块变量极小化 F, 完成一块变量的极小化后, 它的值便立即被更新到变量空间中, 更新下一块变量时将使用每个变量最新的值. 定义辅助函数

$$f_i^k(x_i) = f(x_1^k, x_{i-1}^k, x_i, x_{i+1}^{k-1}, \cdots, x_s^{k-1})$$

在每一步更新中, 通常使用以下三种更新格式之一:

$$\begin{aligned}
x_i^k &= \arg\min_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ f_i^k(x_i) + r_i(x_i) \right\} \\
x_i^k &= \arg\min_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ f_i^k(x_i) + r_i(x_i) + \frac{L_i^{k-1}}{2} ||x_i - x_i^{k-1}||_2^2 \right\} \\
x_i^k &= \arg\min_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ \langle \nabla f_i^k(\hat{x}_i^{k-1}), x_i - \hat{x}_i^{k-1} \rangle + r_i(x_i) + \frac{L_i^{k-1}}{2} ||x_i - \hat{x}_i^{k-1}||_2^2 \right\}
\end{aligned}$$

在第三个格式中, $\hat{x}_i^{k-1}$ 采用外推定义

$$\hat{x}_i^{k-1} = x_i^{k-1} + \omega_i^{k-1}(x_i^{k-1} - x_i^{k-2})$$

其中 $w_i^k \geq 0$ 是外推的权重.

8.5 对偶算法

考虑优化问题:

$$\text{(P)} \quad \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad \phi(x) = f(x) + h(Ax)$$

其中 f, h 都是闭凸函数, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 为实数矩阵. 通过引入约束 $y = Ax$, 可以写出等价约束优化问题:

$$\begin{aligned}
\min \quad & f(x) + h(y) \\
\text{s.t.} \quad & y = Ax
\end{aligned}$$

引入拉格朗日乘子, 得到拉格朗日函数

$$L(x, y, z) = f(x) + h(y) - z^T(y - Ax) = (f(x) + (A^T z)^T x) + (h(y) - z^T y)$$

从而对偶问题为

$$\text{(D)} \quad \max_{z} \quad \phi(z) = -f^*(-A^T z) - h^*(z)$$

强凸函数共轭函数的性质: 设 $f(x)$ 是适当且闭的强凸函数, 其强凸参数为 $\mu > 0$, $f^*(y)$ 是 $f(x)$ 的共轭函数, 则 $f^*(y)$ 在全空间 $\mathbb{R}^n$ 上有定义, 且 $f^*(y)$ 是梯度 $\frac{1}{\mu}$-Lipschitz 连续的可微函数.

考虑在对偶问题上应用近似点梯度法, 更新格式为

$$z^{k+1} = \text{prox}_{th^*}(z^k + tA\nabla f^*(-A^T z^k))$$

引入变量 $x^{k+1} = \nabla f^*(-A^T z^k)$, 利用共轭函数的性质得 $-A^T z^k \in \partial f(x^{k+1})$. 因此迭代格式等价于

$$\begin{aligned}
x^{k+1} &= \arg\min_x \{f(x) + (A^T z^k)^T x\} \\
z^{k+1} &= \text{prox}_{th^*}(z^k + tAx^{k+1})
\end{aligned}$$

Moreau 分解: 设 f 是定义在 $\mathbb{R}^n$ 上的适当的闭凸函数, 则对任意的 $x \in \mathbb{R}^n$,

$$x = \text{prox}_{\lambda f}(x) + \lambda \text{prox}_{\lambda^{-1} f^*}(\frac{x}{\lambda})$$

其中 $\lambda > 0$ 为任意正实数. 因此,

$$z^k + tAx^{k+1} = \text{prox}_{th^*}(z^k + tAx^{k+1}) + t\text{prox}_{t^{-1}h}(\frac{z^k}{t} + Ax^{k+1}) = z^{k+1} + t\text{prox}_{t^{-1}h}(\frac{z^k}{t} + Ax^{k+1})$$

因此迭代格式等价于

$$\begin{aligned}
x^{k+1} &= \arg\min_x \{f(x) + (z^k)^T Ax\} \\
y^{k+1} &= \text{prox}_{t^{-1}h}(\frac{z^k}{t} + Ax^{k+1}) \\
&= \arg\min_y \left\{ h(y) - (z^k)^T (y - Ax^{k+1}) + \frac{t}{2} ||Ax^{k+1} - y||_2^2 \right\} \\
z^{k+1} &= z^k + t(Ax^{k+1} - y^{k+1})
\end{aligned}$$

考虑原约束优化问题的拉格朗日函数和增广拉格朗日函数

$$\begin{aligned}
L(x, y, z) &= f(x) + h(y) - z^T (y - Ax) \\
L_t(x, y, z) &= f(x) + h(y) - z^T (y - Ax) + \frac{t}{2} ||y - Ax||_2^2
\end{aligned}$$

则迭代格式可以改写为

$$\begin{aligned}
x^{k+1} &= \arg\min_x L(x, y^k, z^k) \\
y^{k+1} &= \arg\min_y L_t(x^{k+1}, y, z^k) \\
z^{k+1} &= z^k + t(Ax^{k+1} - y^{k+1})
\end{aligned}$$

称为交替极小化方法.

收敛性分析: 给定初始值 z^0, x^0, 序列 $\{(x^k, z^k)\}$ 由交替极小化方法生成, 假设 f 是强凸的闭函数 (强凸参数为 μ), 且步长 $t \in (0, \frac{\mu}{||A||_2^2}]$, 则 $\{z^k\}$ 收敛到对偶问题的解, $\{x^k\}$ 收敛到原问题的解.

8.6 交替方向乘子法

考虑凸问题:

$$\begin{aligned}
\min_{x_1, x_2} \quad & f_1(x_1) + f_2(x_2) \\
\text{s.t.} \quad & A_1 x_1 + A_2 x_2 = b
\end{aligned}$$

写出其增广拉格朗日函数:

$$L_\rho(x_1, x_2, y) = f_1(x_1) + f_2(x_2) + y^T (A_1 x_1 + A_2 x_2 - b) + \frac{\rho}{2} ||A_1 x_1 + A_2 x_2 - b||_2^2$$

其迭代格式为

$$(x_1^{k+1}, x_2^{k+1}) = \arg\min_{x_1, x_2} L_\rho(x_1^k, x_2^k, y^k)$$

$$y^{k+1} = y^k + \tau\rho(A_1 x_1^{k+1} + A_2 x_2^{k+1} - b)$$

其中 τ 为步长. 在实际问题中, 第一步迭代有时候比较困难, 我们可以考虑对 x_1 和 x_2 交替求极小.

DRS 算法: 用于求解无约束组合优化问题

$$\min_{x} \quad \phi(x) = f(x) + h(x)$$

其中 f 和 h 是凸函数. 迭代格式为

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \mathrm{prox}_{th}(z^k) \\ y^{k+1} &= \mathrm{prox}_{tf}(2x^{k+1} - z^k) \\ z^{k+1} &= z^k + y^{k+1} - x^{k+1} \end{aligned}$$

等价迭代格式: 引入辅助变量 $w^k = z^k - x^k$, 得到

$$\begin{aligned} y^{k+1} &= \mathrm{prox}_{tf}(x^k - w^k) \\ x^{k+1} &= \mathrm{prox}_{th}(w^k + y^{k+1}) \\ w^{k+1} &= w^k + y^{k+1} - x^{k+1} \end{aligned}$$

或者写成关于 z^k 的不动点迭代的形式

$$z^{k+1} = T(z^k)$$

其中

$$T(z) = z + \mathrm{prox}_{tf}(2\mathrm{prox}_{th}(z) - z) - \mathrm{prox}_{th}(z)$$

8.7 随机优化算法

考虑随机优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad f(x) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f_i(x)$$

随机梯度下降:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\alpha_k}{|I_k|}\sum_{s\in I_k} \nabla f_s(x^k)$$

其中 $I_k \subset \{1, 2, \cdots, N\}$.

动量方法:

$$\begin{aligned} v^{k+1} &= \mu_k v^k - \alpha_k \nabla f_{s_k}(x^k) \\ x^{l+1} &= x^k + v^{k+1} \end{aligned}$$

Nesterov 加速算法:

$$\begin{aligned} y^{k+1} &= x^k + \mu_k(x^k - x^{k-1}) \\ x^{k+1} &= y^{k+1} - \alpha_k \nabla f_{s_k}(y^{k+1}) \end{aligned}$$

其中 $\mu_k = \frac{k-1}{k+2}$, 步长 α_k 是一个固定的值或者由线搜索确定.

AdaGrad: 令 $g_k = \nabla f_{s_k}(x^k)$, 引入向量

$$G^k = \sum_{i=1}^{k} g^i \odot g^i$$

迭代格式为

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k - \frac{\alpha}{\sqrt{G^k + \epsilon \mathbf{1}_n}} \odot g^k \\ G^{k+1} &= G^k + g^{k+1} \odot g^{k+1} \end{aligned}$$

RMSProp: 令

$$M^{k+1} = \rho M^k + (1-\rho) g^{k+1} \odot g^{k+1}, \quad R^k = \sqrt{M^k + \epsilon \mathbf{1}_n}$$

迭代格式为

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k - \frac{\alpha}{R^k} \odot g^k \\ M^{k+1} &= \rho M^k + (1-\rho) g^{k+1} \odot g^{k+1} \end{aligned}$$

AdaDelta: 令

$$D^k = \rho D^{k-1} + (1-\rho) \Delta x^k \odot \Delta x^k, \quad T^k = \sqrt{D^k + \epsilon \mathbf{1}_n}$$

迭代格式为

$$\begin{aligned} M^k &= \rho M^{k-1} + (1-\rho) g^k \odot g^k \\ \Delta x^k &= -\frac{T^{k-1}}{R^k} \odot g^k \\ D^k &= \rho D^{k-1} + (1-\rho) \Delta x^k \odot \Delta x^k \end{aligned}$$

Adam: 令

$$\begin{aligned} S^k &= \rho_1 S^{k-1} + (1-\rho_1) g^k \\ M^k &= \rho_2 M^{k-1} + (1-\rho_2) g^k \odot g^k \\ \hat{S}^k &= \frac{S^k}{1-\rho_1^k} \\ \hat{M}^k &= \frac{M^k}{1-\rho_2^k} \end{aligned}$$

这里 ρ_1^k, ρ_2^k 分别表示 ρ_1, ρ_2 的 k 次方. 迭代格式为

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\alpha}{\sqrt{\hat{M}^k + \epsilon \mathbf{1}_n}} \odot \hat{S}^k$$