最优化方法 (IV)

张宏鑫

2015-04-28

浙江大学计算机学院

签到

1. 请关注微信公众号：**RGB-Group**
2. 在该公众号中回复：**csmath**
3. 在该公众号中回复：姓名_学号
4. 三次不同时间输入：本教室**GPS**坐标（微信缺省功能）

1. 无约束非线性最优化

一. 无约束最优化问题

无约束最优化问题

$$\min \quad f(x)$$
$$s.t. \quad x \in R^n$$

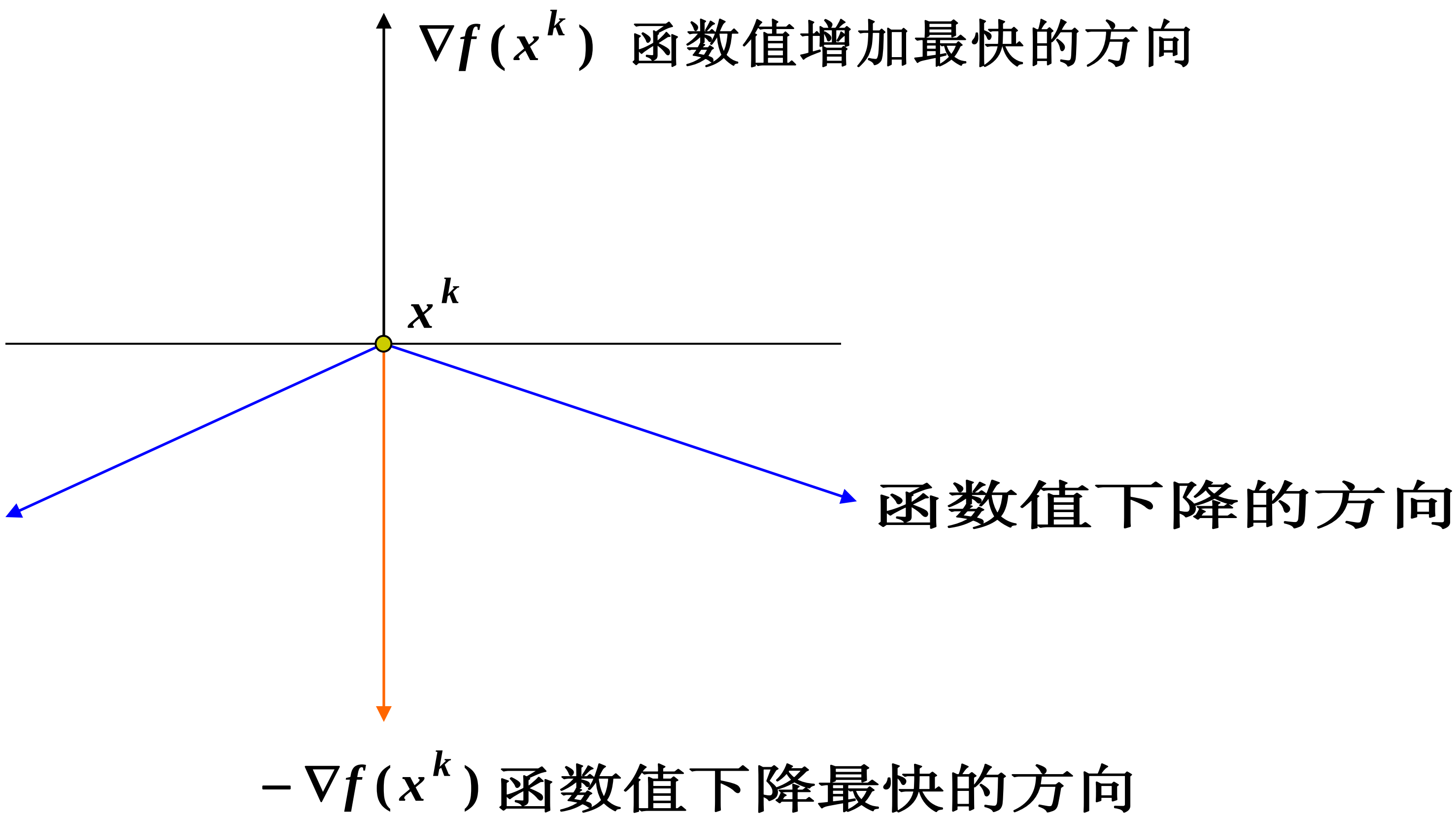
其中$f(x)$有一阶连续偏导数。

解析方法：利用函数的解析性质构造迭代公式使之收敛到最优解。

二. 梯度法（最速下降法）

迭代公式： $x^{k+1} = x^k + \lambda_k d^k$

如何选择下降最快的方向？



梯度法（最速下降法）：

1. 搜索方向：$d^k = -\nabla f(x^k)$，也称为最速下降方向；

2. 搜索步长：λ_k 取最优步长，即满足 $f(x^k+\lambda_k d^k)=\min\limits_{\lambda} f(x^k+\lambda d^k)$。

梯度法算法步骤：

1. 给定初始点 $x^1 \in R^n$，允许误差 $\varepsilon > 0$，令 $k=1$。

2. 计算搜索方向 $d^k = -\nabla f(x^k)$；

3. 若 $\|d^k\| \le \varepsilon$，则停止计算，x^k 为所求极值点；否则，求最优步长 λ_k

   使得 $f(x^k+\lambda_k d^k)=\min\limits_{\lambda} f(x^k+\lambda d^k)$。

4. 令 $x^{k+1} = x^k + \lambda_k d^k$，令 $k := k+1$，转2。

例. 用最速下降法求解 ： $\min \quad f(x) = x_1^2 + 3x_2^2$ ，

设初始点为 $x^1 = (2, 1)^T$ ，

求迭代一次后的迭代点 x^2。

解： $\because \quad \nabla f(x) = (2x_1, 6x_2)^T$ ，

$$\therefore \quad d^1 = -\nabla f(x^1) = (-4, -6)^T .$$

$$\therefore \quad x^1 + \lambda d^1 = (2 - 4\lambda, 1 - 6\lambda)^T .$$

令 $\varphi(\lambda) = f(x^1 + \lambda d^1) = (2 - 4\lambda)^2 + 3(1 - 6\lambda)^2$ ，

求解 $\min\limits_{\lambda} \varphi(\lambda)$

令 $\varphi'(\lambda) = -8(2 - 4\lambda) - 36(1 - 6\lambda) = 0 \Rightarrow \lambda_1 = \dfrac{13}{62}$

$$\therefore \quad x^2 = x^1 + \lambda_1 d^1 = \left(\frac{36}{31}, \frac{-8}{31}\right)^T$$

收敛性

性质. 设 $f(x)$ 有一阶连续偏导数，若 步长 λ_k 满足

$$f(x^k+\lambda_k d^k)=\min_{\lambda} f(x^k+\lambda d^k)$$

则有 $\nabla f(x^k+\lambda_k d^k)^T d^k=0$。

证明： 令 $\varphi(\lambda)=f(x^k+\lambda d^k)$, 所以

$$\varphi'(\lambda)=\nabla f(x^k+\lambda d^k)^T d^k .$$

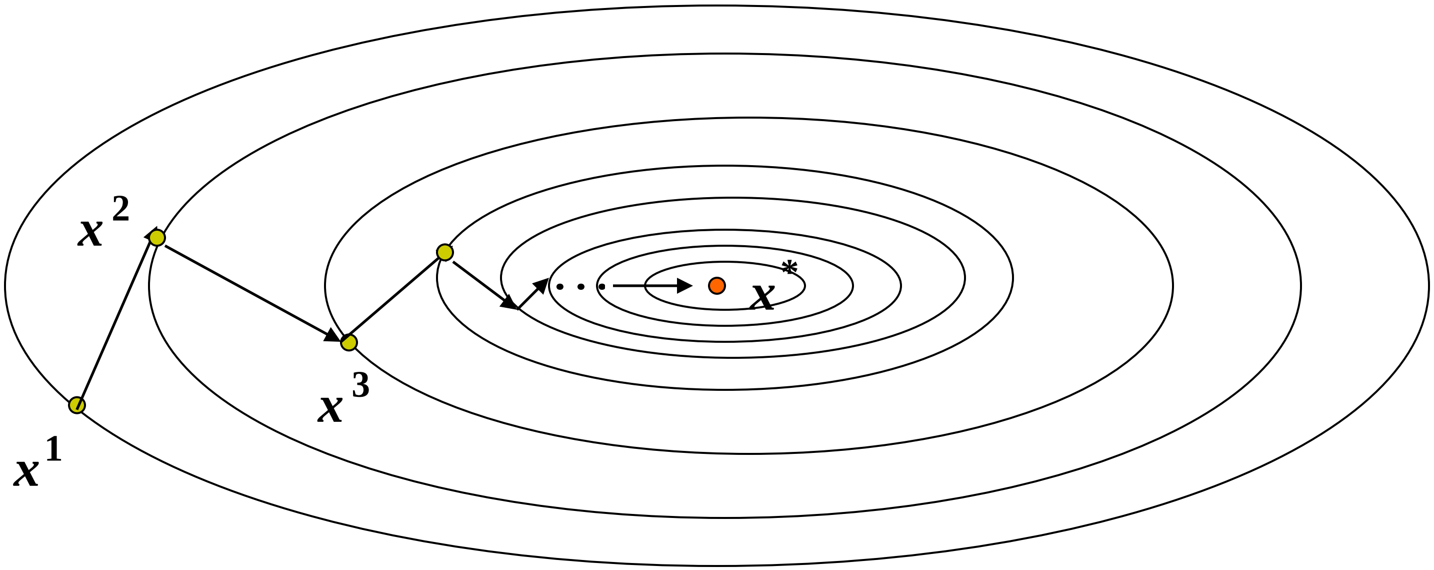
$$\because\ f(x^k+\lambda_k d^k)=\min_{\lambda} f(x^k+\lambda d^k)$$

$$\therefore\ \varphi'(\lambda_k)=\nabla f(x^k+\lambda_k d^k)^T d^k=0 .$$

注： 因为梯度法的搜索方向 $d^{k+1}=-\nabla f(x^k+\lambda_k d^k)$, 所以 $(d^{k+1})^T d^k=0\Rightarrow d^{k+1}\perp d^k$。

锯齿现象

在极小点附近，目标函 数可以用二次函数近似 ，其等值面近似椭球面。



最速下降方向反映了目标函数的一种局部性质
它只是局部目标函数值下降最快的方向
最速下降法是线性收敛的算法

三. 共轭梯度法

1. 共轭方向和共轭方向法

定义 设 A 是 $n\times n$ 的对称正定矩阵，对于 R^n 中的两个非零向量 d^1 和 d^2,

若有 $d^{1^T} A d^2 = 0$，则称 d^1 和 d^2 关于 A 共轭。

设 $d^1, d^2, \cdots, d^k$ 是 R^n 中一组非零向量，如果 它们两两关于 A

共轭，即 $d^{i^T} A d^j = 0, i \neq j, i, j = 1, 2, \cdots, k$。

则称这组方向是关于 A 共轭的，也称它们是一 组 A 共轭方向。

注：如果 A 是单位矩阵，则

$$d^{1^T} \cdot I \cdot d^2 = 0 \Rightarrow d^{1^T} \cdot d^2 = 0$$

$$\Rightarrow d^1 \perp d^2$$

共轭是正交的推广。

定理 1. 设 A是 n阶对称正定矩阵，$d^1, d^2, \cdots, d^k$ 是 k 个 A 共轭的非零向量，则这个向量组线 性无关。

证明 设存在实数 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_k$，使得

$$\sum_{i=1}^{k} \alpha_i d^i = 0,$$

上式两边同时左乘 $d^{jT} A$，则有

$$\sum_{i=1}^{k} \alpha_i d^{jT} A d^i = 0,$$

因为 $d^1, d^2, \cdots, d^k$ 是 k 个 A 共轭的向量，所以上式 可化简为

$$\alpha_j d^{jT} A d^j = 0 .$$

因为 $d^j \neq 0$,而 A是正定矩阵，所以 $d^{jT} A d^j > 0$，

所以 $\alpha_j = 0$，$j = 1, 2, \cdots, k$。

因此 $d^1, d^2, \cdots, d^k$ 线性无关。

几何意义

设有二次函数

$$f(x)=\frac{1}{2}(x-\bar{x})^T A(x-\bar{x})$$

其中 A 是 $n\times n$ 对称正定矩阵， $\bar{x}$ 是一个定点。

则函数 $f(x)$ 的等值面 $\frac{1}{2}(x-\bar{x})^T A(x-\bar{x})=c$

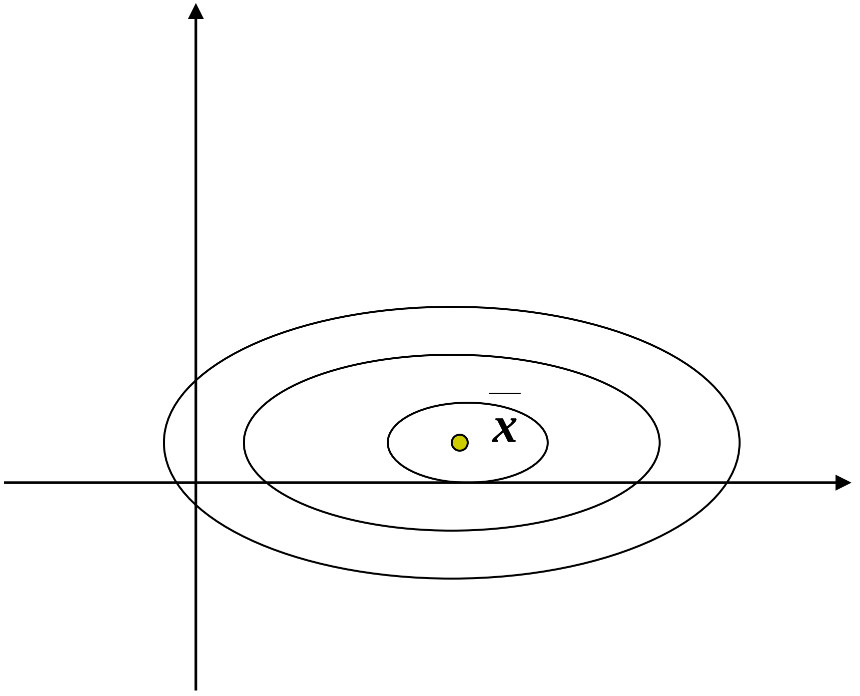
是以 $\bar{x}$ 为中心的椭球面。

由于 $\nabla f(\bar{x})=A(\bar{x}-\bar{x})=0,$

而 $\nabla^2 f(\bar{x})=A,$

因为A 正定，所以$\nabla^2 f(\bar{x})=A>0,$

因此 $\bar{x}$ 是 $f(x)$ 的极小点。



设 $x^{(0)}$ 是在某个等值面上的一 点，$d^{(1)}$ 是 R^n中的一个方向，

$x^{(0)}$沿着 $d^{(1)}$ 以最优步长搜索得到点 $x^{(1)}$。

则 $d^{(1)}$是点 $x^{(1)}$所在等值面的切向量。

该等值面在点 $x^{(1)}$ 处的法向量为

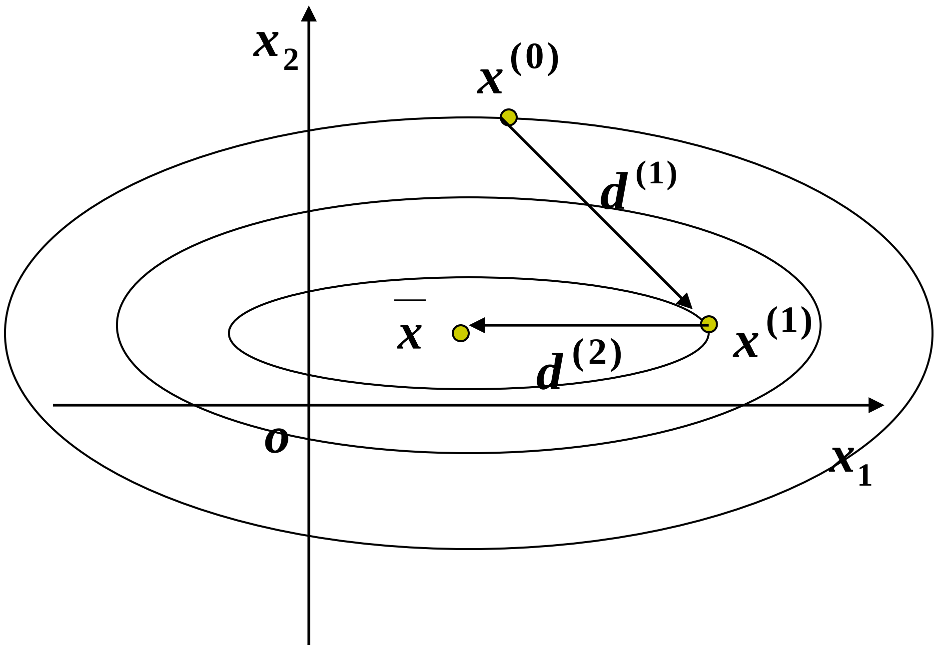
$$\nabla f(x^{(1)}) = A(x^{(1)} - \bar{x}).$$

则 $d^{(1)}$ 与 $\nabla f(x^{(1)})$ 正交，

即 $d^{(1)T}\nabla f(x^{(1)}) = 0,$

令 $d^{(2)} = \bar{x} - x^{(1)},$

所以 $d^{(1)T} A d^{(2)} = 0,$



即等值面上一点处的切 向量与由这一点指向极 小点的向量关于 A 共轭。

定理 2. 设有函数 $f(x)=\frac{1}{2}x^TAx+b^Tx+c$，

其中 A 是 n 阶对称正定矩阵。$d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(k)}$ 是一组 A 共轭向量。

以任意的 $x^{(1)}\in R^n$ 为初始点，依次沿 $d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(k)}$ 进行搜索，

得到点 $x^{(2)},x^{(3)},\cdots,x^{(k+1)}$，则 $x^{(k+1)}$ 是函数 $f(x)$ 在 $x^{(1)}+B_k$ 上的

极小点，其中

$$B_k=\{x\,|\,x=\sum_{i=1}^{k}\lambda_i d^{(i)},\lambda_i\in R\}$$

是由 $d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(k)}$ 生成的子空间。特别地，当 $k=n$ 时，$x^{(n+1)}$ 是

$f(x)$ 在 R^n 上的唯一极小点。

推论 在上述定理条件下，必有

$$\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(i)}=0,\quad i=1,2,\cdots,k。$$

共轭方向法

对于极小化问题

$$\min \quad f(x)=\frac{1}{2}x^T Ax+b^T x+c,$$

其中 A 是正定矩阵，称下述算 法为共轭方向法 ：

(1) 取定一组 A 共轭方向 $d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(n)}$；

(2) 任取初始点 $x^{(1)}$，依次按照下式由 $x^{(k)}$ 确定点 $x^{(k+1)}$，

$$\begin{cases} x^{(k+1)}=x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)} \\ f(x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)})=\min\limits_{\lambda} f(x^{(k)}+\lambda d^{(k)}) \end{cases}$$

直到某个 $x^{(k)}$ 满足 $\nabla f(x^{(k)})=0$。

注 由定理2可知，利用共轭方向法 求解上述极小化问题， 至多经过 n 次迭代必可得到最优解 。

如何选取一组共轭方向?

2. 共轭梯度法

Fletcher – Reeves 共轭梯度法：

$$\min \quad f(x) = \frac{1}{2} x^T A x + b^T x + c$$

其中 $x \in R^n$, A是对称正定矩阵，$b \in R^n$, c是常数。

基本思想：将共轭性和最速下降方 向相结合，利用已知迭 代点处的梯度方向构造一组 共轭方向，并沿此方向 进行搜索，求出函数的极小点。

以下分析算法的具体步骤。

(1) 任取初始点 $x^{(1)}$，第一个搜索方向取为 $d^{(1)} = -\nabla f(x^{(1)})$；

(2) 设已求得点 $x^{(k+1)}$，若 $\nabla f(x^{(k+1)}) \neq 0$，令 $g_{k+1} = \nabla f(x^{(k+1)})$，

则下一个搜索方向 $d^{(k+1)}$ 按如下方式确定：

令 $$d^{(k+1)} = -g_{k+1} + \beta_k d^{(k)} \qquad (1)$$

如何确定 β_k?

要求 $d^{(k+1)}$ 和 $d^{(k)}$ 关于 A 共轭。

则在（1）式两边同时左乘 $d^{(k)^T} A$，得

$$0 = d^{(k)^T} A d^{(k+1)} = -d^{(k)^T} A g_{k+1} + \beta_k d^{(k)^T} A d^{(k)}$$

解得 $$\beta_k = \frac{d^{(k)^T} A g_{k+1}}{d^{(k)^T} A d^{(k)}} \qquad (2)$$

(3) 搜索步长的确定：

已知迭代点 $x^{(k)}$和搜索方向 $d^{(k)}$,利用一维搜索确定最优 步长 λ_k，

即求解 $\min\limits_{\lambda} \quad f(x^{(k)}+\lambda d^{(k)})$。

记 $\varphi(\lambda)=f(x^{(k)}+\lambda d^{(k)})$,

令 $\varphi'(\lambda)=\nabla f(x^{(k)}+\lambda d^{(k)})^T d^{(k)}=0$,

即有 $[A(x^{(k)}+\lambda d^{(k)})+b]^T d^{(k)}=0$,

令 $g_k=\nabla f(x^{(k)})=Ax^{(k)}+b$，则有

$$[g_k+\lambda A d^{(k)}]^T d^{(k)}=0,$$

解得 $$\lambda_k=-\frac{g_k^T d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}} \qquad (3)$$

定理3 对于正定二次函数 $f(x)=\frac{1}{2}x^T Ax+b^T x+c$，FR算法在 $m\le n$ 次一维搜索后即终止，并且对所有的 $i(1\le i\le m)$，下列关系成立

(1) $d^{(i)^T} Ad^{(j)}=0$，$j=1,2,\cdots,i-1$;

(2) $g_i^{\ T} g_j=0$，$j=1,2,\cdots,i-1$;

(3) $g_i^T d^{(i)}=-g_i^T g_i$。

注

（1）由定理3可知搜索方向 $d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(m)}$ 是 A 共轭的。

(2) 算法中第一个搜索方向必须取负梯度方向，否则构造的搜索方向不能保证共轭性。

(3) 由定理3的（3）可知，$g_i^T d^{(i)}=-g_i^T g_i=-\|g_i\|^2<0$，

所以 $d^{(i)}$ 是迭代点 $x^{(i)}$ 处的下降方向。

(4) 由定理3，*FR*算法中β_i的计算公式可以简化。

$$\beta_i = \frac{d^{(i)^T} A g_{i+1}}{d^{(i)^T} A d^{(i)}} = \frac{g_{i+1}{}^T A d^{(i)}}{d^{(i)^T} A d^{(i)}}$$

$$= \frac{g_{i+1}{}^T A[(x^{(i+1)} - x^{(i)})/\lambda_i]}{d^{(i)^T} A[(x^{(i+1)} - x^{(i)})/\lambda_i]}$$

$$\because \quad g_i = \nabla f(x^{(i)}) = A x^{(i)} + b.$$

$$\therefore \quad \beta_i = \frac{g_{i+1}{}^T (g_{i+1} - g_i)}{d^{(i)^T} (g_{i+1} - g_i)} = \frac{\| g_{i+1} \|^2}{-d^{(i)^T} g_i}$$

$$= \frac{\| g_{i+1} \|^2}{\| g_i \|^2} \qquad (4)$$

FR算法步骤：

1. 任取初始点 $x^{(1)}$，精度要求 ε，令 $k=1$。

2. 令 $g_1=\nabla f(x^{(1)})$，若 $\|g_1\|<\varepsilon$，停止，$x^{(1)}$为所求极小点；

   否则，令 $d^{(1)}=-g_1$，利用公式（3）计算 λ_1，令 $x^{(2)}=x^{(1)}+\lambda_1 d^{(1)}$。

3. 令 $g_{k+1}=\nabla f(x^{(k+1)})$，若 $\|g_{k+1}\|<\varepsilon$，停止，$x^{(k+1)}$为所求极小点；

   否则，令 $d^{(k+1)}=-g_{k+1}+\beta_k d^{(k)}$，其中 β_k 用公式（4）计算。

   令 $k:=k+1$。

4. 利用公式（3）计算 λ_k，令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)}$，转3。

例 用 FR 算法求解下述问题：

$$\min \quad f(x)=2x_1^2+x_2^2$$

初始点取为 $x^{(1)}=(2,2)^T$。

解：$\because \quad f(x)=\frac{1}{2}(x_1,x_2)\begin{bmatrix}4 & 0\\0 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}, \quad \therefore \quad A=\begin{bmatrix}4 & 0\\0 & 2\end{bmatrix}.$

$$\nabla f(x)=(4x_1,2x_2)^T.$$

第1次迭代：

令 $\quad d^{(1)}=-g_1=(-8,-4)^T,$

而 $\quad \lambda_1=-\dfrac{g_1^T d^{(1)}}{d^{(1)T}Ad^{(1)}}$

$$=-\frac{(8,4)\begin{bmatrix}-8\\-4\end{bmatrix}}{(-8,-4)\begin{bmatrix}4 & 0\\0 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-8\\-4\end{bmatrix}}=\frac{5}{18}$$

所以 $x^{(2)} = x^{(1)} + \lambda_1 d^{(1)}$

$$= (2,2)^T + \frac{5}{18}(-8,-4)^T = (\frac{-2}{9},\frac{8}{9})^T$$

第 2次迭代:

$$\because \quad g_2 = (\frac{-8}{9},\frac{16}{9})^T.$$

$$\therefore \quad \beta_1 = \frac{\| g_2 \|^2}{\| g_1 \|^2} = \frac{(\frac{-8}{9})^2 + (\frac{16}{9})^2}{8^2 + 4^2} = \frac{4}{81}.$$

$$\therefore \quad d^{(2)} = -g_2 + \beta_1 d^{(1)}$$

$$= (\frac{8}{9},\frac{-16}{9})^T + \frac{4}{81}(-8,-4)^T$$

$$= \frac{40}{81}(1,-4)^T$$

$$\because \quad \lambda_2 = -\frac{g_2^T d^{(2)}}{d^{(2)T} A d^{(2)}}$$

$$= -\frac{\frac{40}{81}\left(\frac{-8}{9}, \frac{16}{9}\right)\begin{bmatrix} 1 \\ -4 \end{bmatrix}}{\left(\frac{40}{81}\right)^2 (1,-4)\begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ -4 \end{bmatrix}} = \frac{9}{20}$$

$$\therefore \quad x^{(3)} = x^{(2)} + \lambda_2 d^{(2)}$$

$$= \left(\frac{-2}{9}, \frac{8}{9}\right)^T + \frac{9}{20} \times \frac{40}{81}(1,-4)^T$$

$$= (0,0)^T$$

$$\because \quad g_3 = (0,0)^T$$

$\therefore$ $x^{(3)}$即为所求极小点。

3. 用于一般函数的共轭梯度法

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ s.t. \quad & x \in R^n \end{aligned}$$

对用于正定二次函数的 共轭梯度法进行修改：

(1) 第一个搜索方向仍取最 速下降方向，即 $d^{(1)} = -\nabla f(x^{(1)})$。

其它搜索方向按下式计 算：

$$d^{(i+1)} = -\nabla f(x^{(i+1)}) + \beta_i d^{(i)},$$

其中 $\beta_i = \dfrac{\| \nabla f(x^{(i+1)}) \|^2}{\| \nabla f(x^{(i)}) \|^2}$。

(2) 搜索步长 λ_i不能利用公式（3）计算，需由一维搜索 确定。

(3) 算法在有限步迭代后不 一定能满足停止条件， 此时可采取如下措施：

以 n 次迭代为一轮，每次完 成一轮搜索后，如果还 没有求得极小点，则以上一轮 的最后一个迭代点作为 新的初始点，取最速下降方向作为第 一个搜索方向，开始下 一轮搜索。

注 在共轭梯度法中，也可 采用其它形式的公式计 算 β_i，如

$$\beta_i = \frac{g_{i+1}^T (g_{i+1} - g_i)}{g_i^T g_i}$$

（ *PRP* 共轭梯度法 ）。

2. 约束非线性最优化

约束优化最优性条件

约束最优化问题通常写为

$$\min f(\mathbf{x})$$

$$\text{s.t. } c_i(\mathbf{x})=0,\ i\in E=\{1,\ldots,m_e\},$$

$$c_i(\mathbf{x})\geq 0,\ i\in I=\{m_e+1,\ldots,m\}$$

在$\mathbf{x}^*$处的非积极约束

设$\mathbf{x}^*$为一个局部极小点，若不等式约束i_0有, $c_{i0}(\mathbf{x}^*)>0$, 则可将第i_0个约束去掉，且$\mathbf{x}^*$仍然是去掉第i_0个约束条件的问题的局部极小点。称约束c_{i0}在$\mathbf{x}^*$处是非积极的。

定义：$I(\boldsymbol{x}) = \{\, i \mid c_i(\boldsymbol{x}) \leq 0,\ \ i \in I\}$; $A(\boldsymbol{x}) = E \cup I(\boldsymbol{x})$ 为$\boldsymbol{x}$点处的积极集合。

一阶最优性条件

Kuhn - Tucker 必要条件：

若x^*是问题P的一个局部极小点，如 果$\nabla c_i\left(x^*\right)\left(i \in E \cup I\left(x^*\right)\right)$线性无关，

则必存在 $\lambda_i^* (i = 1,\dots, m)$，使得

$$\nabla f\left(x^*\right) = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* \nabla c_i\left(x^*\right), \qquad (*)$$

$$\lambda_i^* \geq 0,\quad \lambda_i^* c_i\left(x^*\right) = 0, i \in I. \qquad (**)$$

满足上述两式的点称为 K - T点。与该定理联系密切 的是Lagrange 函数：

$$L(x, \lambda) = f(x) - \lambda^T c(x).$$

则(*)条件等价于 $\nabla_x L = 0$。λ称为Lagrange 乘子。

二阶必要条件

定义：设 x^*是$K-T$点， λ^*称为相应的 $Lagrange$乘子，若存在序列 $\{d_k\}$和$\{\delta_k>0\}$使得

$$x^* + \delta_k d_k \in X$$

$$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* c_i\left(x^* + \delta_k d_k\right) = 0, i \in I.$$

且有$d_k \to d$， $\delta_k \to 0$，则称 d为x^*处的序列零约束方向。 在x^*处的所有序列零约束方向的集合记为 $S(x^*, \lambda^*)$.

二阶必要性条件：

设x^*为局部极小点， λ^*称为相应的 $Lagrange$乘子，则必有

$d^T \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d \geq 0, \forall d \in S(x^*, \lambda^*)$. 其中$L(x, \lambda)$为$Lagrange$函数。

稍加强可得充分性条件 ：

设x^*为$K-T$点， λ^*称为相应的 $Lagrange$乘子，若

$d^T \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d > 0, \forall 0 \neq d \in S(x^*, \lambda^*)$, 则$x^*$为局部严格极小点。

可行方向法

- 可行方向法即要去每次迭代产生的点$\boldsymbol{x}_k$都是约束优化问题的可行点。
- 关键在于每一步寻找可行下降方向：

$$\mathbf{d}^T \nabla f\left(\mathbf{x}_k\right) < 0, \mathbf{d} \in FD(\mathbf{x}_k, X).$$

可行方向：设$\bar{x} \in X, 0 \neq d \in R^n$,如存在$\delta > 0$使得$\bar{x} + td \in X$,则称$d$为$\bar{x}$处的可行方向。$X$在$\bar{x}$处的所有可行方向集合记为$FD(\bar{x}, X)$。

变量消去法

考虑等式约束问题

$$\min f(\mathbf{x}),$$
$$s.t.\ \ c(\mathbf{x})=0$$

设有变量分解$\mathbf{x}=\begin{bmatrix}\mathbf{x}_B\\ \mathbf{x}_N\end{bmatrix}$,其中$x_B\in R^m$，$x_N\in R^{n-m}$.

则$c(x)=0$可改写为

$$c\left(x_B,x_N\right)=0. \qquad (1)$$

假定可以从(1)解出$x_B=\phi\left(x_N\right)$，则原问题等价于

$$\min_{x_N\in R^{n-m}} f\left(x_B,x_N\right)=f\left(\phi\left(x_N\right),x_N\right)=\tilde{f}\left(x_N\right).$$

称$\tilde{g}\left(x_N\right)=\nabla_{x_N}\tilde{f}\left(x_N\right)$为既约梯度。

变量消去法

不难验证

$$\tilde{g}\left(x_N\right)=\frac{\partial f\left(x_B,x_N\right)}{\partial x_N}+\frac{\partial x_B^T}{\partial x_N}\frac{\partial f\left(x_B,x_N\right)}{\partial x_B},$$

从(1)可得

$$\frac{\partial x_B^T}{\partial x_N}\frac{\partial c\left(x_B,x_N\right)^T}{\partial x_B}+\frac{\partial c\left(x_B,x_N\right)^T}{\partial x_N}=0.$$

假设 $\frac{\partial c\left(x_B,x_N\right)^T}{\partial x_B}$ 非奇异，可得到

$$\tilde{g}\left(x_N\right)=\frac{\partial f\left(x_B,x_N\right)}{\partial x_N}-\frac{\partial c\left(x_B,x_N\right)^T}{\partial x_N}\left(\frac{\partial c\left(x_B,x_N\right)^T}{\partial x_B}\right)^{-1}\frac{\partial f\left(x_B,x_N\right)}{\partial x_B}$$

变量消去法

令$\lambda = \left(\frac{\partial c(x_B, x_N)^T}{\partial x_B}\right)^{-1} \frac{\partial f(x_B, x_N)}{\partial x_B}$,则发现可以将

既约梯度写成$L\arg range$函数在既约空间上的梯度

$$\tilde{g}(x_N) = \frac{\partial}{\partial x_N}\left[f(x) - \lambda^T c(x)\right]$$

或者说，有

$$\nabla_x L(x, \lambda) = \begin{bmatrix} 0 \\ \tilde{g}(x_N) \end{bmatrix}$$

变量消去法

故既约梯度可看作$Lagrange$函数之梯度的非零部分。

利用既约梯度，可以构造无约束优化问题的线搜索方向。

例如可取最速下降方向

$$\tilde{d}_k = -\tilde{g}\left(\left(x_N\right)_k\right),$$

或拟牛顿方向

$$\tilde{d}_k = -H_k \tilde{g}\left(\left(x_N\right)_k\right)。$$

在无约束问题上作线性搜索，等价于对原目标函数

$f(x)$在曲线

$$c\left(x_B, \left(x_N\right)_k + \alpha \tilde{d}_k\right) = 0 \qquad （2）$$

上作曲线搜索。因为$\phi(x)$的解析表达式并不知道，故

作一维搜索时，每个试探步长$\alpha > 0$都要用(2)来求解x_B.

变量消去法

1。给出可行点$x_1, \varepsilon \geq 0, k=1$

2。计算$\dfrac{\partial c(x_k)^T}{\partial x} = \begin{bmatrix} A_B \\ A_N \end{bmatrix}$，其中划分使得$A_B$非奇异；

计算$\lambda = \left(\dfrac{\partial c(x_B, x_N)^T}{\partial x_B} \right)^{-1} \dfrac{\partial f(x_B, x_N)}{\partial x_B}$及$\tilde{g}\left((x_N)_k\right) = \dfrac{\partial}{\partial x_N}\left[f(x) - \lambda^T c(x) \right]$。

3。如果$\|\tilde{g}_k\| \leq \varepsilon$，则停止；否则利用某种方式产生下降方向$\tilde{d}_k$,即使得

$\tilde{d}_k \tilde{g}_k < 0;$

4。$\min\limits_{\alpha \geq 0} f\left(\phi\left((x_N)_k + \alpha \tilde{d}_k\right), (x_N)_k + \alpha \tilde{d}_k\right)$进行线性搜索给出$\alpha_k > 0$,令

$x_{k+1} = \left(\phi\left((x_N)_k + \alpha_k \tilde{d}_k\right), (x_N)_k + \alpha_k \tilde{d}_k\right), k = k+1,$

转2步。

广义消去法

考虑更一般的形式。任意非奇异矩阵$S \in R^{n\times n}$，以及变量替换

$x = Sw$

对w进行变量分离$w = \begin{bmatrix} w_B \\ w_N \end{bmatrix}$。利用约束条件$c(x)=0$进行变量消去

得到$w_B = \phi(w_N)$。于是原问题等价于

$$\min_{w_N \in R^{n-m}} f\left(S_B w_B + S_N w_N\right) = \tilde{f}\left(w_N\right)$$

可直接计算得到$\nabla_{w_n} \tilde{f}\left(w_N\right) = \tilde{g}\left(\left(x_N\right)_k\right) = \left(S_k\right)_N \left[\nabla f(x) - \nabla c(x)^T \lambda\right]$，

其中λ满足$\left(S_k\right)_B \left[\nabla f(x) - \nabla c(x)^T \lambda\right] = 0$。

广义消去法

1。给出可行点$x_1, \varepsilon \geq 0, k=1$

2。以某种方式构造一非奇异矩阵S_k,且有划分$S_k = \left[(S_k)_B, (S_k)_N \right]$,使得$(S_k)_B^T \dfrac{\partial c(x_k)^T}{\partial x}$非奇异；

根据$(S_k)_B \left[\nabla f(x) - \nabla c(x)^T \lambda \right] = 0$计算$\lambda$，以及计算$\tilde{g}\left((x_N)_k \right) = (S_k)_N \left[\nabla f(x) - \nabla c(x)^T \lambda \right]$。

3。如果$\|\tilde{g}_k\| \leq \varepsilon$，则停止；否则利用某种方式产生下降方向$\tilde{d}_k$,即使得

$$\tilde{d}_k \tilde{g}_k < 0;$$

4。$\min\limits_{\alpha \geq 0} f\left((S_k)_B \phi\left((w_k)_N + \alpha \tilde{d}_k \right), (S_k)_B \left((x_k)_N + \alpha \tilde{d}_k \right) \right)$进行线性搜索给出$\alpha_k > 0$,令

$$x_{k+1} = \left((S_k)_B \phi\left((w_k)_N + \alpha_k \tilde{d}_k \right), (S_k)_B \left((x_k)_N + \alpha_k \tilde{d}_k \right) \right), k = k+1,$$

转2步。

若$S_k=I$，广义消去法就是变量消去法。

投影梯度法

广义消去法每次迭代的 变量增量 $x_{k+1}-x_k$ 由两部分组成，

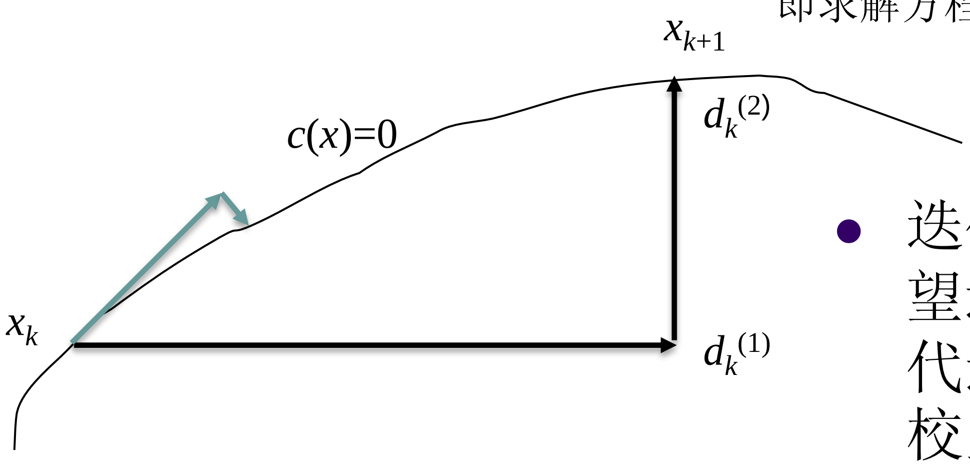
$x_{k+1}=x_k+d_k^{(1)}+d_k^{(2)}$，其中

$$d_k^{(1)}=\alpha_k(S_k)_N\tilde{d}_k,\ d_k^{(2)}=(S_k)_B\left[\varphi\left((w_k)_N+\alpha_k\tilde{d}_k\right)-(w_k)_B\right]$$

迭代过程是先得到 $d_k^{(1)}$，再在 $d_k^{(2)}$ 方向上迭代得到正确的 步长。

在 $d_k^{(2)}$ 方向上迭代的过程就是 利用 $c(x)=0$ 求解 w_B 的过程。

即求解方程 $c\left((S_k)_B w_B+(S_k)_N\left[(w_k)_N+\alpha\tilde{d}_k\right]\right)=0$



- 迭代方式存在不合理之处。本来希望迭代点都在可行域上，但具体迭代过程却是先远离可行域，然后再校正回可行域中。
- 希望离开程度尽可能小？沿线性化方向。迭代过程可以更快的收敛。

线性化可行方向：

设$x^* \in$可行域$X, d \in R^n$

$d^T \nabla c_i(x^*) = 0, i \in E; d^T \nabla c_i(x^*) \geq 0, i \in I(x^*)$

则d为X的x^*处的线性化可行方向。

为使$d_k^{(1)}$沿线性化可行方向，应 选取S_k使得$(S_k)_N^T \nabla c(x_k)^T = 0.$

设$A_k = \nabla c(x_k)^T$,则由$(S_k)_N$的列向量所张成的子空 间就是A_k^T的零空间。

而另一方面， $P = I - A_k(A_k^T A_k)^{-1} A_k^T$为到该零空间的投影算 子。

当在广义消去法中用最 速下降法时，可得 $d_k^{(1)} = -\alpha_k (S_k)_N (S_k)_N^T \nabla f(x_k)$,

因为$d_k^{(1)}$为线性可行方向，故 $d_k^{(1)}$在A_k^T的零空间中，进而可知 $(S_k)_N (S_k)_N^T$

为投影算子 P。

在计算中，可利用 A_k的QR分解，

$A_k = QR = [Y_k \quad Z_k] \begin{bmatrix} R_k \\ 0 \end{bmatrix}, A_k \in R^{n \times m}, Q$为正交阵， $Y_k \in R^{n \times m}$， $Z_k \in R^{n \times (n-m)}$,

$R_k \in R^{m \times m}$可逆上三角矩阵。可取 $(S_k)_N = Z_k, (S_k)_B = I$。

若将搜索方向换成 $d_k = -Z_k z_k, z_k \in R^{n-m}$,且满足$z_k^T \tilde{g}_k < 0$，则算法是一个一般形式的线性化可行 方向法，简称可行方向 法。

罚函数法

- 利用目标函数和约束函数构造具有“罚性质”的函数

$$P(\mathbf{x})= P(f(\mathbf{x}), c(\mathbf{x}))$$

所谓的罚性质，即要求对于可行点$P(\mathbf{x})=f(\mathbf{x})$, 当约束条件破坏很大时，$P(\mathbf{x})>>f(\mathbf{x})$

定义约束违反度函数：

$$C^{(-)}(\mathbf{x})=(c_1^{(-)}(\mathbf{x}), \ldots, c_m^{(-)}(\mathbf{x})),$$

其中：

$$c_i^{(-)}(\mathbf{x})=c_i(\mathbf{x}),\ i=1,\ldots,m_e;$$
$$c_i^{(-)}(\mathbf{x})=\min\{c_i(\mathbf{x}), 0\},\ i=m_e+1,\ldots,m$$

罚函数法

罚函数一般可表示为目 标函数与一项与 $c(x)$有关的“罚项”之和， 即

$$P(x)=f(x)+h(c^{(-)}(x))$$

罚项是定义在 R^m上的函数，满足 $h(0)=0, \lim_{\|c\|\to\infty} h(c)=+\infty$

最早的罚函数是 $Courant$罚函数，定义如下

$$P(x)=f(x)+\sigma\left\|c^{(-)}(x)\right\|_2^2,\sigma>0$$是一正常数，罚因子。

事实上，更一般的可定 义为

$$P(x)=f(x)+\sigma\left\|c^{(-)}(x)\right\|^{\alpha}，\alpha>0.$$

罚函数法

一般定义为

$$P(x)=f(x)+\sigma\left\|c^{(-)}(x)\right\|^{\alpha}, \quad \alpha>0.$$

若罚函数在可行域边界 上取值为无穷，则称为 内点罚函数。

内点罚函数仅适合不等 式约束问题。

常见有倒数罚函数和对 数罚函数：

$$P(x)=f(x)+\sigma^{-1}\sum_{i=1}^{m}\frac{1}{c_i(x)}, \quad P(x)=f(x)+\sigma^{-1}\sum_{i=1}^{m}\log c_i(x)$$

内点罚函数在可行域的 边界上形成一堵无穷高 的“障碍墙”，

所以也称为障碍罚函数 。

罚函数法的基本点是 ：

每次迭代（求解一个无 约束优化问题）增加罚 函数因子，直到使 $\left\|c^{(-)}(x)\right\|$缩小到给定误差。

罚函数法

设x^*为原问题的$K-T$点，而x^*一般不是$Courant$函数的稳定点。为了克服这一缺点，引入参 数$\theta=(\theta_1,\ldots,\theta_m)$，其中$\theta_i\geq 0(i=m_e+1,\ldots,m)$。则

$$P(x)=f(x)+\sum_{i=1}^{m_e}\left[-\lambda_i c_i(x)+\frac{1}{2}\sigma_i(c_i(x))^2\right]+$$

$$\sum_{i=m_e+1}^{m}\begin{cases}-\lambda_i c_i(x)+\dfrac{1}{2}\sigma_i(c_i(x))^2,\text{如}\,c_i(x)<\lambda_i/\sigma_i\\ -\dfrac{1}{2}\lambda_i^2/\sigma_i,\text{否则}\end{cases}$$

其中$\lambda_i=\sigma_i\theta_i$

2. 二次规划

非线性最优化

- 最优化的问题的一般形式为

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

$f(\mathbf{x})$为目标函数，$X \subset E^n$为可行域。
如$X = E^n$，则以上最优化问题为无约束最优化问题。

约束最优化问题通常写为

$$\begin{aligned} &\text{Min } f(\mathbf{x}) \\ &\text{s.t. } c_i(\mathbf{x})=0,\ i \in E, \\ &\qquad c_i(\mathbf{x}) \geq 0,\ i \in I, \end{aligned}$$

其中E, I分别为等式约束的指标集和不等式约束的指标集，$c_i(\mathbf{x})$是约束函数。

非线性优化中的概念

- 可行点，可行域
- 极小，全局极小（总体极小点），全局严格极小，局部极小，局部严格极小
- 积极与非积极，积极约束，非积极约束
- 可行方向集，线性可行方向集，序列可行方向集
- Farkas引理与K-T条件
- 以上参见《最优化理论与方法》第八章

无约束二次最优化

$$\min f(\mathbf{x}) = \tfrac{1}{2}\,\mathbf{x}^{\mathrm{T}} H\mathbf{x} + \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{x},\ \mathbf{x} \in R^{n}$$

H是对称阵

基本解法：求导然后找局部极值。

二次规划的一般形式

$$\min\ f(\mathbf{x}) = \tfrac{1}{2}\,\mathbf{x}^{\mathrm{T}}H\mathbf{x}+\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{x},\ \mathbf{x}\in R^{n}$$
$$\text{s.t. } A\mathbf{x}\leq\mathbf{b} \qquad (1)$$

- 当H为对称矩阵时，被称为**二次规划**(Quadratic Programming，记作QP)。
- 特别，当H**正定**时，目标函数为凸函数，线性约束下可行域又是凸集。上式被称为**凸二次规划**。

二次规划的一般形式

$$\min \ f(\mathbf{x}) = \tfrac{1}{2}\,\mathbf{x}^{\mathrm{T}}H\mathbf{x}+\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{x},\ \mathbf{x}\in R^{n}$$

$$\text{s.t. } \boldsymbol{a}_i{}^T\boldsymbol{x} \ge b_i, i \in I, \qquad (1)$$

$$\boldsymbol{a}_i{}^T\boldsymbol{x} = b_i, i \in E.$$

- 当H为对称矩阵时，被称为二次规划(Quadratic Programming，记作QP)。

- 特别，当H正定时，目标函数为凸函数，线性约束下可行域又是凸集。上式被称为凸二次规划。

二次规划的性质

- QP是一种最简单的非线性规划。QP有如下良好的性质，当H是半正定时：
  - K-T条件不仅是最优解的必要条件，而且是充分条件；
  - 局部最优解就是全局最优解。

等式约束下的二次规划

$$\min\ f(\mathbf{x}) = ½\, \mathbf{x}^{\mathrm{T}} H\mathbf{x} + \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{x},\ \mathbf{x} \in R^n$$

$$\text{s.t. } A\mathbf{x} = \mathbf{b} \qquad (2)$$

求解方法：Lagrange乘子法，求解以下无约束二次最优化问题。

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \tfrac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}} H\mathbf{x} + \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(A\mathbf{x} - \mathbf{b})$$

令$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$对$\mathbf{x}$和$\boldsymbol{\lambda}$的导数为零，得线性方程组

$$H\mathbf{x} + \mathbf{c}^{\mathrm{T}} + A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda} = 0$$

$$A\mathbf{x} - \mathbf{b} = \mathbf{0}$$

可解得$\mathbf{x}$，即为上式的解。

凸二次规划的有效集方法（1）

- 直观解释：将不起作用约束去掉，将起作用约束作为等式约束，通过解一系列等式约束的二次规划来实现不等式约束的优化。

- 基本原理：若$\mathbf{x}$为问题（1）的最优解，则它也是问题

$$
\begin{aligned}
&\min \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}H\mathbf{x}+\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} \\
&\text{s.t. } \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{x}=b_i, i\in I
\end{aligned}
\qquad (3)
$$

- 的最优解，其中$\mathbf{a}_i$是A的第i行，I为起作用约束指标集（有效集）。
- 反之，若$\mathbf{x}$为（1）的可行解，又是（3）的K-T点，且相应的乘子$\lambda_i \geq 0$，则$\mathbf{x}$为（1）的最优解。

凸二次规划的有效集方法（2）

- 算法步骤（迭代法）：
  - 设当前迭代点为$\mathbf{x}_k$， 它也是（1）的可行解。该点的有效集记作 I_k， 为寻求$\mathbf{x}_k$点的迭代方向$\mathbf{d}$，用乘子法求解

$$\min \frac{1}{2}(\mathbf{x}_k+\mathbf{d})^{\mathrm{T}} H(\mathbf{x}_k+\mathbf{d})+\mathbf{c}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k+\mathbf{d})$$

$$\text{s.t. } \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{d}=0, i\in I_k$$

  - 若所得最优值$\mathbf{d}_k$=0， 则$\mathbf{x}_k$是（3）的最优解。
    - 为判断它是否（1）的最优解， 考察对应于有效约束的乘子 $\lambda_i \geq 0$是否成立。若成立， 则$\mathbf{x}_k$是K-T点， 由二次规划性质$\mathbf{x}_k$是（1）的最优解。

凸二次规划的有效集方法（3）

- 算法步骤（迭代法）：

$$\min \frac{1}{2}(\mathbf{x}_k+\mathbf{d})^{\mathrm{T}} H(\mathbf{x}_k+\mathbf{d})+\mathbf{c}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k+\mathbf{d})$$

$$\text{s.t. } \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{d}=0, i\in I_k$$

- 若最优值$\mathbf{d}_k\neq 0$，则取$\mathbf{x}_{k+1}=\mathbf{x}_k+\alpha\mathbf{d}_k$，在$\mathbf{x}_{k+1}$为可行点的条件下确定$\mathbf{d}_k$方向的步长$\alpha_k$
  - 如果存在p不在I_k中，使得$\mathbf{a}_p\mathbf{x}_{k+1}=\mathrm{b}_p$，则将$p$加入有效集

- 如果存在I_k中的指标q，使得$\lambda_i<0$, 则$\mathbf{x}^{(k)}$不是最优解，从有效集中去掉q

可行步长的选取：阻塞约束

$$\alpha_k = \min\{1, \min_{i \notin I_k, \mathbf{a}_i^T \mathbf{d}_k < 0} \frac{b_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}_k}{\mathbf{a}_i^T \mathbf{d}_k}\}$$

- $a_k = 1$时，对应约束集不影响，保持不变
- $a_k < 1$时，对应约束称为阻塞约束，此时沿着$\mathbf{d}_k$运动，会被不在指标集中的约束给阻塞了，约束集因此改变。

凸二次规划实例

- SVM …

- libSVM代码
  - http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm/
  - 有效集方法

更多凸二次规划

- 线性互补问题(LCP)，Lemke算法

- 可行方向法：
  - Zoutendijk可行方向法
  - Rosen梯度投影法
  - Wolfe既约梯度法
- 罚函数法
- 逐次二次规划法
- 信赖域法

Homework 05

- 实现SVM：
  - Kernel：线性核，指数核
  - 使用python
- 二次规划方法：
  - 有效集方法
  - 奖励 => 其他更高效的优化方法
- 5次编程作业，请统一提供一个实验报告
  - 格式与课程论文的要求相似

The End

- 数学学习是一种修行
- 大音希声，大象无形
  - 节选自《道德经》

无所得，即是得
以是得，无所得

--《金刚经》

新浪微博：@浙大张宏鑫

微信公众号：