大 学 教 材

优　化　选　讲

董 云 达 著

内 容 简 介

本书是作者在多年教学讲义的基础上编写而成的。它包含了优化的基本理论和方法。

首先，介绍了无约束优化方法：最陡下降法，共轭方向法，Newton-Raphson 方法，Davidon 变尺度法（也称拟 Newton 法）等基本的迭代方法。然后，又详细地介绍了约束优化的 Karush-Kuhn-Tucker 定理和相应的迭代方法：增广 Lagrange 乘子法，原始-对偶内点法，线性规划的原始对偶内点法，大规模半定规划的 Douglas-Rachford 方法等。书中的带*部分，可以跳过不讲。

本书的特色不求杂而全，只求取材精要，再进行透彻地论述。绝大部分是经典理论，也有少部分的最新结果。

作为大学教材，本书适合于数学专业的高年级本科生、研究生，也是广大教师和科研人员了解优化、研究优化的好帮手。

目录

经计算

$$\varphi(\alpha) = \alpha^3 - 3.9996\alpha, \quad \hat{\varphi}(\alpha) = 3\alpha^2 + 3.6\alpha - 4.$$

它们的图像如下所示，其中红色区间 [0.8907, 1.9999] 为 α 的可接受范围。

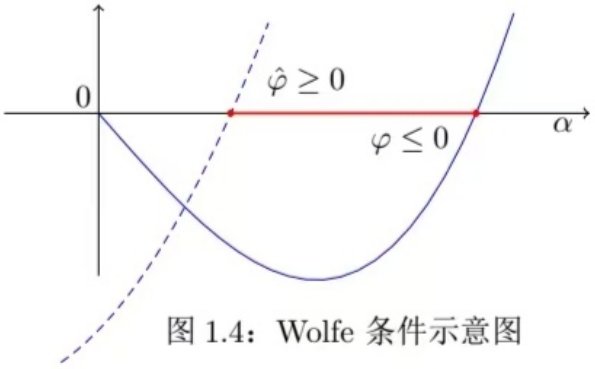

图 1.4：Wolfe 条件示意图

Wolfe 条件有一个加强的形式，即下面的强 Wolfe 条件：

$$f(x + \alpha d) \leq f(x) + c_1 \alpha \nabla f(x)^T d, \tag{1.13}$$

$$|\nabla f(x + \alpha d)^T d| \leq -c_2 \nabla f(x)^T d, \tag{1.14}$$

其中， $0 < c_1 < c_2 < 1$。

从上面的讨论，我们可以看出：只要 d 是 f 在 x 处的一个下降方向，那么无论 α 是由上述哪一个步长条件确定的，总有 $f(x + \alpha d) < f(x)$.

接下来，我们将考虑一个仅仅包含梯度信息的步长准则 — Dong 条件。假设 $f : R^n \to R$ 是连续可微凸的，$x, d \in R^n$，则由（1.6）可得

$$\left(\nabla f(x + \alpha d) - \nabla f(x + td)\right)^T \left(x + \alpha d - (x + td)\right) \geq 0.$$

当 $t \leq \alpha$ 时，我们就有

$$\left(\nabla f(x + \alpha d) - \nabla f(x + td)\right)^T d \geq 0.$$

结合

$$f(x + \alpha d) = f(x) + \int_0^\alpha d\, f(x + td) = f(x) + \int_0^\alpha \nabla f(x + td)^T d\, dt,$$

可以推导出

$$f(x + \alpha d) \leq f(x) + \alpha \nabla f(x + \alpha d)^T d, \quad \forall \alpha > 0. \tag{1.15}$$

于是，我们就有了下面确定步长的技巧 — Dong 条件：

$$c_2 \nabla f(x)^T d \leq \nabla f(x + \alpha d)^T d \leq c_1 \nabla f(x)^T d, \tag{1.16}$$

其中 $0 < c_1 < c_2 < 1$。

接下来的问题是：如何选取步长 α 呢？Cauchy 建议使用下面的精确线搜索

$$\min\{f(x-\alpha\nabla f(x)):\alpha\geq 0\}$$

来确定步长。于是我们就得到了下面的最陡下降法。

算法 2.1 最陡下降法 (steepest descent method)

0. 任取 $x^0\in R^n,\varepsilon>0$。令 $k:=0$。
1. 计算 $\nabla f(x^k)$。若 $\|\nabla f(x^k)\|\leq\varepsilon$，则算法停止。否则，计算 α_k

$$f(x^k-\alpha_k\nabla f(x^k))=\min_{\alpha\geq 0} f(x^k-\alpha\nabla f(x^k)). \tag{2.2}$$

2. 计算下一个迭代点 $x^{k+1}=x^k-\alpha_k\nabla f(x^k)$。令 $k:=k+1$。

注意：由 (2.2) 所确定的步长往往被称之为最优步长，通常取作

$$\alpha_k=\min\{\alpha:\nabla f(x^k-\alpha\nabla f(x^k))^T\nabla f(x^k)=0,\alpha\geq 0\}. \tag{2.3}$$

注意：对于精确线搜索下的最陡下降法来说，即相邻的两个迭代点处得负梯度方向是垂直的：$\nabla f(x^{k+1})^T\nabla f(x^k)=0$。于是，一旦靠近解点或者迭代点时必须通过狭长并且弯曲的“山谷”时，迭代过程会变得十分缓慢了。最著名的测试函数 – Rosenbrock 函数

$$f(x)=(1-x_1)^2+100(x_2-x_1^2)^2,\quad x^0=(-1.2,1)^T$$

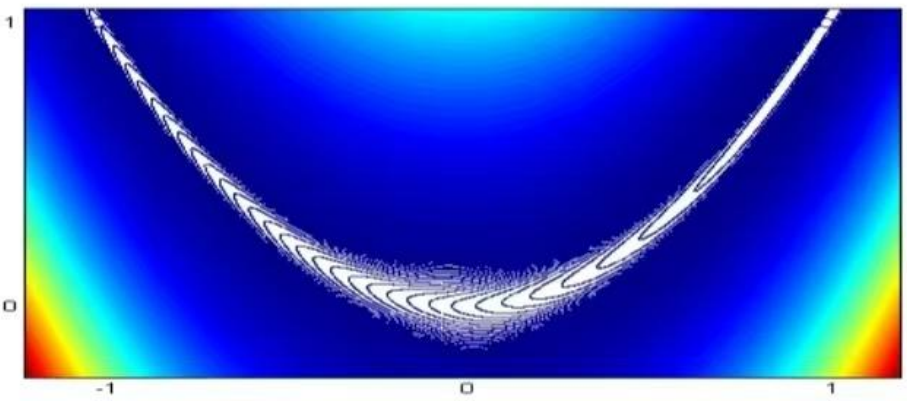

图2.1： Rosenbrock 函数等高线

可以较好说明这一点，因为从指定的初始点到解点 $x^*=(1,1)^T$，必须经过一条香蕉状的“山谷”，所以人们也形象地称之为香蕉函数。沿着这条“山谷”，从 x^0 出发，经过 0 附近，最终逼近或到达解点，其函数值依次为 24.2, 1, 0。

算法 3.5 FR 方法

0. 选取 $x^0 \in R^n$, 计算 $d^0 = -g^0$。$k := 0$。

1. 利用某种方式确定步长 α_k。计算 $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$。

2. 计算 $g^k = g(x^k)$ 以及

$$\beta_{k+1} = \|g^{k+1}\|^2 / \|g^k\|^2, \tag{3.16}$$

$$d^{k+1} = -g^{k+1} + \beta_{k+1} d^k. \tag{3.17}$$

令 $k := k + 1$。

在 1969 年，Polak 和 Ribière 没有采用 (3.16) 的取法而是取

$$\beta_{k+1} = \frac{(g^{k+1} - g^k)^T g^{k+1}}{\|g^k\|^2}. \tag{3.18}$$

接下来，我们验证：在精确线搜索下，当 (3.15) 中的 f 为严格凸二次函数时，(3.16)，(3.18) 与线性共轭梯度法中的共轭参数

$$\beta_{k+1} = \frac{(g^{k+1})^T A d^k}{(d^k)^T A d^k}$$

是等价的。实际上，结合

$$Ax^{k+1} - b = Ax^k - b + \alpha_k A d^k \quad \Leftrightarrow \quad g^{k+1} = g^k + \alpha_k A d^k,$$

其中 $g^k = Ax^k - b$，我们有

$$\beta_{k+1} = \frac{(g^{k+1})^T A d^k}{(d^k)^T A d^k} = \frac{(g^{k+1})^T (g^{k+1} - g^k)}{(d^k)^T (g^{k+1} - g^k)}.$$

而在精确线搜索下呢，最右端分母满足

$$(d^k)^T (g^{k+1} - g^k) = -(g^k)^T d^k = -(g^k)^T (-g^k + \beta_k d^{k-1}) = \|g^k\|^2.$$

这就证明了与(3.18)有关的等价性。与(3.16)有关的等价性，再结合

$$\begin{aligned}(g^{k+1})^T g^k =& (g^{k+1})^T (-d^k + \beta_k d^{k-1}) \\ =& -(g^{k+1})^T d^k + \beta_k (g^{k+1})^T d^{k-1}\end{aligned}$$

和定理 3.2.1 (b) 即可。从这个意义上讲，在共轭参数的选取方式上，(3.16)，(3.18) 可以分别看作线性情形的一个推广。

在 1985 年，Al-Baali 利用下面的强 Wolfe 条件

$$f(x^k + \alpha_k d^k) \le f(x^k) + c_1 \alpha_k (g^k)^T d^k, \tag{3.19}$$

$$|g(x^k + \alpha_k d^k)^T d^k| \le -c_2 (g^k)^T d^k, \tag{3.20}$$

结合引理 4.4.2，可以断定：$x^+ \in \mathrm{int}X$。接下来，我们证明第二个结论。暂时约定 $\delta = \delta(f,x)$。于是，我们就有

$$\delta = \sqrt{d_N^T \nabla^2 f(x) d_N}, \quad \nabla f(x)^T d_N = -\delta^2.$$

再利用，便可以知道

$$\begin{aligned} f(x + \frac{1}{1+\delta} d_N) &\le f(x) + \frac{1}{1+\delta} \nabla f(x)^T d_N - \frac{1}{1+\delta} \sqrt{d_N^T \nabla^2 f(x) d_N} \\ &\quad - \ln\left(1 - \frac{1}{1+\delta} \sqrt{d_N^T \nabla^2 f(x) d_N}\right) \\ &= f(x) - \frac{\delta^2}{1+\delta} - \frac{\delta}{1+\delta} - \ln\left(1 - \frac{\delta}{1+\delta}\right) \\ &= f(x) - \delta + \ln(1-\delta). \end{aligned}$$

从而，结论成立。 □

定理 4.5.2 *如果 $x \in intX$，那么下面的不等式成立*

$$\delta(f, x^+) \le 2\delta^2(f,x).$$

证 对于所有的 $h \in R^n$，定义 $\psi(t) = \nabla f(x + td_N)^T h$。当 $0 \le t \le 1/(1+\delta)$ 时，它是二次连续可微的，并且

$$\psi'(t) = d_N^T \nabla^2 f(x + td_N) h, \quad \psi''(t) = \nabla^3 f(x + td_N)[h, d_N, d_N].$$

则

$$\begin{aligned} |\psi''(t)| &= |\nabla^3 f(x + td_N)[h, d_N, d_N]| \\ &\le 2\sqrt{h^T \nabla^2 f(x + td_N) h}\; d_N^T \nabla^2 f(x + td_N) d_N. \end{aligned}$$

结合引理 4.4.2 中的不等式 (iii)，进一步可以知道

$$\begin{aligned} |\psi''(t)| &\le 2(1 - t\delta)^{-3} \sqrt{h^T \nabla^2 f(x) h}\; d_N^T \nabla^2 f(x) d_N \\ &= 2\sqrt{h^T \nabla^2 f(x) h}\; \delta^2 (1 - t\delta)^{-3}. \end{aligned}$$

当然，这也意味着

$$\psi''(t) \le 2\sqrt{h^T \nabla^2 f(x) h}\; \delta^2 (1 - t\delta)^{-3}.$$

积分两次，$\psi(\frac{1}{1+\delta})$ 不会超过

$$\psi(0) + \frac{1}{1+\delta}\psi'(0) + \sqrt{h^T \nabla^2 f(x) h} \int_0^{\frac{1}{1+\delta}} \int_0^t 2\delta^2 (1 - \tau\delta)^{-3}\, d\tau\, dt,$$

将 (5.22) 写成

$$\tilde{M} = M(I - \frac{ss^T M}{s^T Ms} + \frac{M^{-1}yy^T}{s^T y}).$$

两边取行列式，并且利用引理 5.5.1

$$\det(I + uv^T + wz^T) = (1 + v^T u)(1 + z^T w) - (u^T z)(v^T w)$$

(该公式的推导要求 $1 + v^T u$ 和 $1 + z^T w$ 不同时为 0，这儿的假设条件正好使之满足)，则有

$$\det(\tilde{M}) = \det(M)\frac{s^T y}{s^T Ms} = \det(M)\frac{s^T y}{\|s\|^2}\frac{1}{q}.$$

两边取对数

$$\ln\det(\tilde{M}) = \ln\det(M) - \ln q + \ln\frac{s^T y}{\|s\|^2}. \tag{5.24}$$

将 (5.23) 减去 (5.24)，并且利用 $\varphi(\cdot) = \mathrm{trace}(\cdot) - \ln\det(\cdot)$，整理可以得到

$$\varphi(\tilde{M}) = \varphi(M) + 1 - \frac{q}{\cos^2\theta} + \ln\frac{q}{\cos^2\theta} + \ln\cos^2\theta + \frac{\|y\|^2}{s^T y} - \ln\frac{s^T y}{\|s\|^2} - 1.$$

既然对于所有的 $t > 0$ 总有 $1 - t + \ln t \le 0$ 以及根据假设条件 (5.19)

$$\frac{s^T y}{\|s\|^2} \ge \mu, \quad \frac{\|y\|^2}{s^T y} \le \bar{\mu}, \tag{5.25}$$

那么我们就有: $c := \bar{\mu} - \ln\mu - 1 > 0$ 以及

$$\varphi(\tilde{M}) \le \varphi(M) + \ln\cos^2\theta + c.$$

重新写出上、下标，则有

$$\varphi(M_{k+1}) \le \varphi(M_k) + \ln\cos^2\theta_k + c \le \varphi(M_0) + \textstyle\sum_{j=0}^{k}\ln\cos^2\theta_j + (k+1)c.$$

由于当 M 正定时，

$$\varphi(M) = \mathrm{trace}(M) - \ln\det(M) = \textstyle\sum(\lambda_i - \ln\lambda_i) > 0,$$

其中 λ_i 为 M 的特征值，所以，我们可以推导出

$$k \min_{j=0,\ldots,k-1}\{-\ln\cos^2\theta_j\} \le \textstyle\sum_{j=0}^{k-1}(-\ln\cos^2\theta_j) < \varphi(M_0) + kc.$$

这个不等式表明，当 $k > \varphi(M_0)$ 时，我们有

$$\min_{j=0,\ldots,k-1}\{-\ln\cos^2\theta_j\} < \varphi(M_0)/k + c < 1 + c.$$

Levenberg-Marquardt 方法的好处在于：一是使子问题 (6.6) 仅有一个极小点；二是该子问题比 (6.4) 更容易求解；三是有较好的收敛性。

有趣的是，$d^k = d^k(\mu_k)$ 既是下降方向，同时又包含了步长信息。显然，就这一点而言，它是与最速下降法中的搜索方向截然不同。对于参数 $\tilde{\mu}_k$ 的选取，也值得细心对待。当 ρ_k 接近于 1 时，说明线性逼近效果较好，可以在下一步使该参数尽可能地变小，从而 (6.7) 中的系数矩阵就可以包含问题数据本身的更多信息了。

记 $d(\mu) = -(J^TJ + \mu I)^{-1}J^Tr$。下面讨论，当 μ 变化时，其长度和方向的基本性质。

引理 6.3.1 当 $\mu \uparrow +\infty$ 时，$\|d(\mu)\| \downarrow 0$。

证 当 $\mu > 0$ 时，$J^TJ + \mu I$ 是正定的，从而存在正交阵 U 使得

$$(J^TJ + \mu I)^{-1} = U^T \mathrm{diag}\,(1/(\lambda_1 + \mu), \cdots, 1/(\lambda_n + \mu))\, U,$$

其中 λ_i, $i = 1, ..., n$, 为矩阵 J^TJ 的所有特征值。令 UJ^Tr 的第 i 个分量为 v_i，则有

$$\|d(\mu)\|^2 = \textstyle\sum_{i=1}^n v_i^2/(\lambda_i + \mu)^2.$$

证完。 □

类似地，我们可以证明下面的结论成立。

引理 6.3.2 负梯度方向 $-\nabla f = -J^Tr$ 与 $d(\mu)$ 的夹角 $\theta(\mu)$ 关于 $\mu > 0$ 是递减的。

证 记号 $\sum_{i=1}^n$ 用 $\sum$ 来代替。当 $\mu > 0$ 时，对称矩阵 $J^TJ + \mu I$ 是正定的，从而存在正交阵 U 使得

$$(J^TJ + \mu I)^{-1} = U^T \mathrm{diag}\,(1/(\lambda_1 + \mu), \cdots, 1/(\lambda_n + \mu))\, U,$$

其中 λ_i, $i = 1, ..., n$ 为矩阵 J^TJ 的所有特征值。令 UJ^Tr 的第 i 个分量为 v_i，则负梯度方向 $-J^Tr$ 与 $d(\mu) = -(J^TJ + \mu I)^{-1}J^Tr$ 的夹角 $\theta(\mu)$ 满足

$$\cos\theta(\mu) = \frac{(J^Tr)^T(J^TJ + \mu I)^{-1}J^Tr}{\|J^Tr\|\|(J^TJ + \mu I)^{-1}J^Tr\|} = \frac{\sum v_i^2/(\lambda_i + \mu)}{\|v\|\left(\sum v_i^2/(\lambda_i + \mu)^2\right)^{1/2}}.$$

于是，我们可以算出 $\frac{d}{d\mu}\cos\theta(\mu)$，它是一个比式，分子为

$$\left(\sum \frac{v_i^2}{\lambda_i + \mu}\right)\left(\sum \frac{v_i^2}{(\lambda_i + \mu)^3}\right) - \left(\sum \frac{v_i^2}{(\lambda_i + \mu)^2}\right)^2$$

定理 7.7.2 *(Tucker 定理)* 设 $D \in R^{m\times n}$，则不等式组

$$Dx \geq 0,\ D^T y = 0,\ y \geq 0$$

总存在一组解 $(\bar{x}, \bar{y})$ 使得 $D\bar{x} + \bar{y} > 0$。

证 记 $D^T = (d^1, d^2, \cdots, d^m)$。构造相应的集合

$$X_1 = \left\{ \sum_{i\neq 1} - y_i d^i : y_i \geq 0, i \neq 1 \right\}. \tag{7.36}$$

分两种情形进行讨论。

情形一 $d^1 \in X_1$。此时，必然存在 $y_i \geq 0,\ i = 2, ..., m$ 使得

$$d^1 = \sum_{i\neq 1} - y_i d^i.$$

令 $x^1 = 0,\ y^1 = (1, y_2, ..., y_m)^T$，则 (x^1, y^1) 是不等式组的解，并且 $Dx^1 + y^1$ 的第一个分量为正。

情形二 $d^1 \notin X_1$。考虑到 X_1 是一个非空闭凸锥，用点到闭凸锥分离定理，可以知道：存在一个 $p \in R^n$ 使得

$$p^T d^1 < 0 \leq p^T x, \quad \forall x \in X_1.$$

既然 $-d^i, i = 2, ..., m$ 都属于 X_1，那么

$$(d^i)^T(-p) = p^T(-d^i) \geq 0,\ \ i = 2, ..., m.$$

另外，我们也有 $(d^1)^T(-p) > 0$. 令 $x^1 = -p,\ y^1 = 0$，则 (x^1, y^1) 是不等式组的解，并且 $Dx^1 + y^1$ 的第一个分量为正。

类似(7.36)，我们构造相应的集合

$$X_2 = \left\{ \sum_{i\neq 2} - y_i d^i : y_i \geq 0, i \neq 2 \right\}.$$

然后，分 $d^2 \in X_2$和 $d^2 \notin X_2$两种情形进行讨论，可以得到 (x^2, y^2), 它是不等式组的解，并且 $Dx^2 + y^2$ 的第二个分量为正。

依此类推，我们断言：对于每个 i，都存在相应的 (x^i, y^i) 使得

$$Dx^i \geq 0,\ D^T y^i = 0,\ y^i \geq 0,\ Dx^i + y^i \text{的第 } i \text{ 个分量为正.}$$

令 $\bar{x} = \sum_{i=1}^m x^i,\ \bar{y} = \sum_{i=1}^m y^i$，则 $(\bar{x}, \bar{y})$ 是不等式组的解，并且

$$D\bar{x} + \bar{y} = \sum_{i=1}^m (Dx^i + y^i).$$

由于 $Dx^i + y^i$ 的每个分量都是非负的以及它的第 i 个分量为正，从而 $D\bar{x} + \bar{y}$ 的每个分量都是正的。 □

其中 $\mu > 0$, $\rho > 0$。由于一元函数 $(\max\{0,t\})^2$ 在 $t=0$ 处的左导数和右导数相等，从而它是处处可导的，并且

$$\frac{d}{dt}(\max\{0,t\})^2 = 2\max\{0,t\}, \tag{8.11}$$

所以，这个惩罚函数 $p(x,\mu,\rho)$ 关于 x 的梯度为

$$\nabla f(x) - \mu\rho\sum_{i=1}^{l}\max\{0,\ -g_i(x)\}\nabla g_i(x) + \mu\sum_{j=1}^{m}h_j(x)\nabla h_j(x).$$

下面，我们给出一般约束下的二次惩罚函数法。

算法 8.3 二次惩罚函数法

0. 选取初始惩罚因子 $\mu_0 > 0$, $\rho_0 > 0$。$k := 0$。
1. 计算子问题 $\min p(x,\mu_k,\rho_k)$ 的全局极小点，然后，作为 x^k。
2. 选取 $\mu_{k+1} > \mu_k$。计算

$$c_k := \sum_{i=1}^{l}(\max\{0,\ -g_i(x^k)\})^2,\ \ \hat{c}_k := \sum_{j=1}^{m}h_j^2(x^k).$$

若 $c_k > 2\hat{c}_k$，则 $\rho_{k+1} > \rho_k$。否则，$\rho_{k+1} = \rho_k$。令 $k := k+1$。

对于二次惩罚函数法，我们刚才给出了自适应地校正 ρ_k 的策略：在迭代的第 k 步，首先，计算出第 k 个迭代点违反不等式的程度 c_k 以及违反等式约束的程度 $\hat{c}_k$。如果前者较大，那么我们应该（在下一次迭代中）加大 ρ 的值以便加大相应的惩罚因子 $\rho\mu$。否则，保持不变。从某种意义上讲，它在两者之间起了协调、平衡的作用。

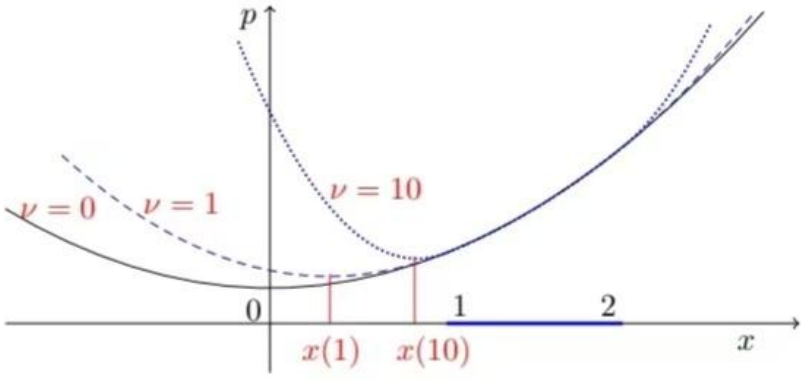

图 8.1：二次惩罚函数法收敛行为示意图

例子 8.2.2 考察下面的一维极小化问题

$$\min\ f(x) = x^2 + 1, \quad \text{s.t. } x - 1 \geq 0,\ 2 - x \geq 0.$$

其中 z 称为 Lagrange 乘子或对偶变量。一阶最优性条件为

$$F(x,\lambda,z):=\begin{pmatrix}\nabla f(x)-\sum_{i=1}^{l}z_i\nabla g_i(x)\\ -\mu e+\Lambda Ze\\ g(x)-\lambda\end{pmatrix}=0,\ \ \lambda>0,\ z>0, \tag{9.7}$$

其中 $e=(1,\cdots,1)^T$ 以及

$$\Lambda:=\mathrm{diag}(\lambda_1,\cdots,\lambda_l),\ Z:=\mathrm{diag}(z_1,\cdots,z_l),\ g=(g_1,\cdots,g_l)^T.$$

注意：在上面这个最优性条件中，除了 $F(x,\lambda,z)=0$，还包括 $\lambda>0$ 以及 $z>0$。要求 $\lambda>0$ 是显然的，只有这样，相应的对数内点函数才有意义。再根据 $-\mu e+\Lambda Ze=0$，就必须做出 $z>0$ 这样的要求了。

已知 (x^k,λ^k,z^k) 以及 $\lambda^k>0,\ z^k>0$。找 $\Delta x^k,\ \Delta\lambda^k,\ \Delta z^k$, 使得

$$F(x^k,\lambda^k,z^k)+F'(x^k,\lambda^k,z^k)\begin{pmatrix}\Delta x^k\\ \Delta\lambda^k\\ \Delta z^k\end{pmatrix}=0, \tag{9.8}$$

其中

$$F'(x^k,\lambda^k,z^k)=\begin{pmatrix}M_k & 0 & -J_k^T\\ 0 & Z_k & \Lambda_k\\ J_k & -I & 0\end{pmatrix},\ \ M_k:=\nabla^2 f(x^k)-\sum_{i=1}^{l}z_i^k\nabla^2 g_i(x^k)$$

为 F 在 (x^k,λ^k,z^k) 的 Jacobi 矩阵而 J_k 是 g 在 x^k 处的 Jacobi 矩阵。线性方程组 (9.8) 称为原始对偶系统。

接下来，我们考虑 (9.8) 的一个等价形式

$$\begin{aligned}&M_k\Delta x^k-J_k^T\Delta z^k=-\nabla f(x^k)+\textstyle\sum z_i^k\nabla g_i(x^k),\\ &Z_k\Delta\lambda^k+\Lambda_k\Delta z^k=\mu e-\Lambda_k Z_k e, &(9.9)\\ &J_k\Delta x^k-\Delta\lambda^k=\lambda^k-g(x^k), &(9.10)\end{aligned}$$

其中 $\sum$ 表示 $\sum_{i=1}^{l}$。由于 Z_k 是可逆的，所以可以从 (9.9)中解得 $\Delta\lambda^k$。然后，再将之代入 (9.10)。于是，我们就有

$$\begin{pmatrix}-M_k & J_k^T\\ J_k & Z_k^{-1}\Lambda_k\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Delta x^k\\ \Delta z^k\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\nabla f(x^k)-\sum z_i^k\nabla g_i(x^k)\\ \lambda^k-g(x^k)-\mu Z_k^{-1}e-\Lambda_k e\end{pmatrix},$$

$$\Delta\lambda^k=-Z_k^{-1}\Lambda_k\Delta z^k+\mu Z_k^{-1}e-\Lambda_k e.$$

由于这个线性方程组的系数矩阵是对称的，所以一个常用的直接解法是 LDL^T 分解。具体地讲，先给出该系数矩阵的 LDL^T 分解，其中 L 是一个单位下三角矩阵

证 根据 (10.18)，我们有

$$\sqrt{\frac{z_i}{x_i}}\Delta x_i+\sqrt{\frac{x_i}{z_i}}\Delta z_i=\frac{\mu_{\min}}{\sqrt{x_iz_i}}-\sqrt{x_iz_i}-\frac{\Delta x_i^a\Delta z_i^a}{\sqrt{x_iz_i}}.$$

两边平方后，对 $i=1,..,n$ 求和，右端为

$$\begin{aligned}&\sum_{i=1}^n\left(\frac{\mu_{\min}^2}{x_iz_i}+x_iz_i+\frac{(\Delta x_i^a\Delta z_i^a)^2}{x_iz_i}-2\mu_{\min}-2\mu_{\min}\frac{\Delta x_i^a\Delta z_i^a}{x_iz_i}+2\Delta x_i^a\Delta z_i^a\right)\\&\le\frac{n\mu_{\min}^2}{\gamma t}+nt+\frac{1}{16}nt+\frac{1}{16\gamma}n^2t-2n\mu_{\min}+\frac{n\mu_{\min}}{2\gamma},\end{aligned}$$

其中的不等式用到了 $x_iz_i\ge\gamma t$, $(\Delta x^a)^T\Delta z^a=0$ 以及引理 10.5.3。而两边平方后的左端为

$$\begin{aligned}&\sum_{i=1}^n\left(\frac{z_i}{x_i}(\Delta x_i)^2+\frac{x_i}{z_i}(\Delta z_i)^2\right)+2\Delta x^T\Delta z\\&=\sum_{i=1}^n\left(\frac{z_i}{x_i}(\Delta x_i)^2+\frac{x_i}{z_i}(\Delta z_i)^2\right)\\&\ge\sum_{i=1}^n2|\Delta x_i\Delta z_i|.\end{aligned}$$

从而

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n|\Delta x_i\Delta z_i|&\le\frac{1}{2}\left(\frac{n\mu_{\min}^2}{\gamma t}+nt+\frac{1}{16}nt+\frac{1}{16\gamma}n^2t+(\frac{1}{2\gamma}-2)n\mu_{\min}\right)\\&\le n^2t\gamma^{-1}\left(\frac{1}{32}+\frac{25\gamma}{32n}-\frac{\gamma^2}{2n}\right)\\&<0.1n^2t\gamma^{-1},\end{aligned}$$

其中最后的不等式用到了引理 10.5.1 中 $\mu_{\min}\le\gamma t$ 的结论。 □

引入记号

$$(x(\alpha),\lambda(\alpha),z(\alpha)):=(x,\lambda,z)+\alpha(\Delta x,\Delta\lambda,\Delta z),\ \ t(\alpha):=x(\alpha)^Tz(\alpha)/n.$$

假设 10.5.1 *正数 $\gamma<0.01$ 以及正数 α 满足*

$$\alpha<(2.5-5\gamma)\gamma^2/n^2.$$

引理 10.5.5 *对于 Salahi 预估校正算法来说，若假设 10.5.1 成立，则*

$$(x(\alpha),\lambda(\alpha),z(\alpha))\in\mathcal{N}_\infty^-(\gamma).$$

证 先梳理一下要证什么。(i) $(x(\alpha),\lambda(\alpha),z(\alpha))$ 仍然满足原始对偶线性约束条件。(ii) $x(\alpha)>0$, $z(\alpha)>0$。(iii) $x_i(\alpha)z_i(\alpha)-\gamma\frac{x(\alpha)^Tz(\alpha)}{n}\ge0$, $i=1,...,n$。

11.7 解线性规划的逐步二次规划方法

对于标准的线性规划，它有多种数值方法。这儿，我们将要讨论的方法是，首先利用对数障碍函数法，将标准的线性规划转化为一个等式约束的极小化问题。并且写出相应的 Lagrange 函数。接下来，利用 Newton-Raphson 方法，解 Lagrange 函数所确定的驻点方程。最后，我们将说明，这样一个处理过程为什么等价于一个逐步二次规划方法。

考虑标准的线性规划

$$\min\ c^T x, \quad \text{s.t. } Ax = b,\ x \geq 0,$$

其中 $c \in R^n$, $b \in R^m$, $A \in R^{m\times n}$ 是行线性无关的。一个密切相关的问题是

$$\min\ f(x) := c^T x - \mu \sum_{i=1}^{n} \ln x_i, \quad \text{s.t. } Ax = b, \tag{11.12}$$

其中 $\mu > 0$ 是一个障碍因子。由线性约束下优化问题的 KKT 定理，存在 $\lambda \in R^m$, x 为 Lagrange 函数 $f(x) - \lambda^T(Ax - b)$ 的驻点，即

$$F(x,\lambda) = \begin{pmatrix} \nabla f(x) - A^T\lambda \\ -Ax + b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

在 (x^k, λ^k) 处，相应的 Newton-Raphson 方向满足

$$J(x^k,\lambda^k)\begin{pmatrix} \Delta x^k \\ \Delta\lambda^k \end{pmatrix} = -F(x^k,\lambda^k), \tag{11.13}$$

其中 J 为 F 在该点处 Jacobi 矩阵

$$J(x^k,\lambda^k) = \begin{pmatrix} \nabla^2 f(x^k) & -A^T \\ -A & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu X_k^{-2} & -A^T \\ -A & 0 \end{pmatrix}.$$

由 μX_k^{-2} 的正定性，该矩阵可逆。

引入辅助函数 $\phi(x,\lambda) := \|F(x,\lambda)\|^2$，则 $\nabla\phi(x,\lambda) = 2J(x,\lambda)^T F(x,\lambda)$。结合 (11.13)

$$\nabla\phi(x^k,\lambda^k)^T\begin{pmatrix} \Delta x^k \\ \Delta\lambda^k \end{pmatrix} = -2\phi(x^k,\lambda^k).$$

这个等式表明，如果 (x^k, λ^k) 不是最优解，那么 $\begin{pmatrix} \Delta x^k \\ \Delta\lambda^k \end{pmatrix}$ 是 ϕ 在 (x^k, λ^k) 处的一个下降方向。由此，我们给出下面的迭代方法。

相加可以得到

$$\begin{aligned} f(y)+g(Qy-q) &\geq f(x)+g(Qx-q)+\langle s+Q^T\hat{s}, y-x\rangle \\ &= f(x)+g(Qx-q). \end{aligned}$$

这表明：x 为问题 (12.17) 的一个解点。由于这是一个凸优化，从而该点也是一个全局极小点。 □

特别地，若 $g=\delta_C$, 其中 C 为一个非空闭凸集合，则 (12.17) 变为

$$\min\ f(x), \quad \text{s.t.}\ \ Qx-q\in C. \tag{12.18}$$

接下来，我们考虑凸优化问题的另一基本形式

$$\min\ f(x), \quad \text{s.t.}\ \ g_i(x)\leq 0,\ i=1,...,l, \tag{12.19}$$

其中 $f\colon E\to R$ 是一个闭的真凸函数，每一个 $g_i\colon E\to R$ 都是连续可微凸函数。

定理 12.10.2 *考虑问题 (12.19)。记 $g:=\max\{g_1,...,g_l\}$. 假设 $\mathrm{ri\ dom}f\cap\mathrm{ri\ dom}g\neq\emptyset$ 或者在每一个 g_i 都是分片线性的条件下假设 $\mathrm{ri\ dom}f\cap\mathrm{dom}g\neq\emptyset$. 若 x^* 为该问题的一个解点，则存在一组实数 $\lambda_0^*,\lambda_1^*,...,\lambda_l^*$ 使得*

$$\lambda_0^*\geq 0,\ \lambda_1^*\geq 0,...,\ \lambda_l^*\geq 0,\ \lambda_0^*+\lambda_1^*+...+\lambda_l^*=1, \tag{12.20}$$

$$0\in\lambda_0^*\partial f(x^*)+\textstyle\sum_{i=1}^l\lambda_i^*\nabla g_i(x^*), \tag{12.21}$$

$$\lambda_i^*\geq 0,\ g_i(x^*)\leq 0,\ \lambda_i^*g_i(x^*)=0,\quad i=1,...,l. \tag{12.22}$$

证 考察下面的辅助函数

$$\varphi(x)=\max\{f(x)-f(x^*),g_1(x),...,g_l(x)\}.$$

显然，$\varphi(x)$ 在其有效域上总是非负的。同时，定理 12.6.4表明：φ 是一个闭的真凸函数。所以，x^* 是凸函数 $\varphi(x)$ 的一个极小点。相应的最优性条件为

$$0\in\partial\varphi(x^*).$$

结合定理 12.8.7 可以知道

$$0\in co\{\partial f(x^*),\ \nabla g_i(x^*)\colon i\in I(x^*)\},$$

其中 $I(x^*):=\{i\colon g_i(x^*)=0\}$. 从而，存在一组实数 $\lambda_0^*,\lambda_i^*,\ i\in I(x^*)$, 使得

$$\begin{aligned} &\lambda_0^*\geq 0,\ \lambda_i^*\geq 0,\ \lambda_0^*+\textstyle\sum_i\lambda_i^*=1,\quad i\in I(x^*),\\ &0\in\lambda_0^*\partial f(x^*)+\textstyle\sum_i\lambda_i^*\nabla g_i(x^*),\quad i\in I(x^*). \end{aligned}$$

引入 λ_i^*, 其中 $i\in\{1,...l\}$ 但不属于 $I(x^*)$. 令这些引入的 $\lambda_i^*=0$. 证完。 □

13.7 一致有界性原则与共鸣定理

在 1876 年，P. du Bois Reymond 构造了一个周期为 2π 的连续函数，使得其 Fourier 级数在给定的点处发散。在总结前人五十年来大量工作的基础上，Banach 和 Steinhaus 通过借鉴 Osgood 定理的证明方法，抽象提取出了共鸣(resonance)定理。它刻画了有界线性算子族的基本性质，从而成为泛函分析中最为重要的研究成果之一。

引理 13.7.1 *设 T 是从 Banach 空间 $\mathcal{B}$ 映射到赋范线性空间 $\mathcal{Y}$ 上的有界线性算子。则对于任意的 $x\in\mathcal{B}$ 和 $r>0$，有*

$$\sup\{\|Tx'\|\colon x'\in\mathcal{B}(x,r)\}\geq r\|T\|,$$

其中 $\mathcal{B}(x,r)=\{x'\in\mathcal{B}\colon \|x'-x\|\leq r\}$。

证 对于任意的 $\xi\in\mathcal{B}$，我们有

$$\begin{aligned}2\max\{\|T(x+\xi)\|,\|T(x-\xi)\|\}&\geq\|T(x+\xi)\|+\|T(x-\xi)\|\\&\geq\|T(x+\xi-(x-\xi))\|\\&=2\|T\xi\|.\end{aligned}\tag{13.13}$$

由线性算子范数的定义得 $\sup\{\|T(r^{-1}\xi)\|\colon \|r^{-1}\xi\|\leq 1\}\geq\|T\|$ (以二维空间为例，前者在单位圆面上取而后者在单位圆周上取上确界。当然，由于 T 是有界线性的，所以实际上两者的上确界相等)。于是，我们就有

$$\forall\,\xi\in\mathcal{B}(0,r),\ \sup\|T\xi\|=r\sup\|T(r^{-1}\xi)\|\geq r\|T\|.$$

另一方面，因为当 $\xi\in\mathcal{B}(0,r)$ 时，$x\pm\xi\in\mathcal{B}(x,r)$，所以

$$\sup\{\|Tx'\|\colon x'\in\mathcal{B}(x,r)\}\geq\max\{\|T(x+\xi)\|,\|T(x-\xi)\|\}.$$

在（13.13）式两边关于 $\xi\in\mathcal{B}(0,r)$ 取上确界即可。 □

定理 13.7.1 *(一致有界性原则) 设 $\mathcal{F}$ 是一族从 Banach 空间 $\mathcal{B}$ 映射到赋范线性空间 $\mathcal{Y}$ 上的的有界线性算子。若任给的 $T\in\mathcal{F}$ 是逐点有界的，即对于所有的 $x\in\mathcal{B}$，都存在相应的 $\beta_x>0$ 使得 $\|Tx\|\leq\beta_x$，则必然存在不再依赖于 x 的 $\beta>0$ 使得*

$$\|T\|\leq\beta,\quad\forall T\in\mathcal{F}.$$

讨论 取 $\mathcal{B}$ 和 $\mathcal{Y}$ 为一维实空间，$T_n(x)=nx$, $n=1,2,\ldots$ 是一族线性算子。试问：满足上述定理的题设条件吗？举例说明：如果 $\mathcal{B}$ 换成不完备的赋范线性空间，那么一致有界性原则不成立。

一致有界性原则的逆否命题为下面的共鸣定理。

特别地，若 $\{\lambda_k\}$ 有正的下界，则

$$|A(x^k)-0|^2 \le o(1/k), \quad k=1,2,....$$

证 根据迭代公式 (14.13), 我们有

$$\lambda_k^{-1}(x^k - x^{k+1}) \in A(x^{k+1}). \tag{14.21}$$

再根据假设 $0 \in A(x^*)$ 以及 A 的单调性，我们进一步有

$$\begin{aligned} &\langle x^{k+1}-x^*,\ \lambda_k^{-1}(x^k-x^{k+1})-0\rangle \ge 0 \quad \overset{\lambda_k>0}{\Longrightarrow} \\ &\langle x^{k+1}-x^*,\ x^k-x^{k+1}\rangle \ge 0. \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} \|x^k-x^*\|^2 &= \|x^k-x^{k+1}+x^{k+1}-x^*\|^2 \\ &= \|x^k-x^{k+1}\|^2 + 2\langle x^k-x^{k+1},\ x^{k+1}-x^*\rangle + \|x^{k+1}-x^*\|^2 \\ &\ge \|x^k-x^{k+1}\|^2 + \|x^{k+1}-x^*\|^2. \end{aligned} \tag{14.22}$$

因此

$$\|x^{k+1}-x^*\|^2 \le \|x^k-x^*\|^2 - \|x^k-x^{k+1}\|^2. \tag{14.23}$$

可以推出

$$|x^{k+1}-A^{-1}(0)|^2 \le |x^k-A^{-1}(0)|^2 - \lambda_k^2\|\lambda_k^{-1}(x^k-x^{k+1})\|^2.$$

这表明：序列 $\{|x^k-A^{-1}(0)|\}$ 单调递减有下界，从而它的极限 l 存在。因此，我们有

$$\begin{aligned} &|x^{k+1}-A^{-1}(0)|^2 - l^2 \\ \le &|x^k-A^{-1}(0)|^2 - l^2 - \lambda_k^2\|\lambda_k^{-1}(x^k-x^{k+1})\|^2. \end{aligned} \tag{14.24}$$

引入记号

$$\alpha_k := \sqrt{|x^k-A^{-1}(0)|^2-l^2}, \quad \beta_k := \lambda_k^2, \quad \gamma_k := \|\lambda_k^{-1}(x^k-x^{k+1})\|^2.$$

那么根据定理 14.4.1 和 Dong 引理，我们有：当假设 (14.20) 成立时，我们有

$$\|\lambda_k^{-1}(x^k-x^{k+1})\|^2 \textstyle\sum_{i=0}^k \lambda_i^2 \le 2\sqrt{|x^0-A^{-1}(0)|^2-l^2}\,\varepsilon_k,$$

$$\lim_{k\to+\infty}\varepsilon_k = \lim_{k\to+\infty}\sqrt{|x^k-A^{-1}(0)|^2-l^2} = 0.$$

再结合 (14.21) 即可。

算法 15.3 算法 15.1 的一个特例

0. 选取 $x^0 \in \mathrm{dom}\, B$ 和 $u^0 \in \mathcal{G}$. 令 $k:=0$.

1. 选取 $\alpha_k > 0$. 计算

$$x^k(\alpha_k) = (I + \alpha_k B)^{-1}(x^k - \alpha_k Q^* u^k),$$

记 $\bar{x}^k = x^k(\alpha_k)$. 选取 β_k 满足 (15.12) 并且找到 $\bar{u}^k$ 使得

$$\left(\beta_k I + D^{-1}\right)(\bar{u}^k) \ni \beta_k u^k + Q\bar{x}^k - q. \tag{15.29}$$

若 $\bar{x}^k = x^k$, $\bar{u}^k = u^k$, 停止. 否则, 进入步2.

2. 计算

$$d_x^k = \alpha_k^{-1}(x^k - \bar{x}^k) - Q^*(u^k - \bar{u}^k), \tag{15.30}$$

$$d_u^k = \beta_k(u^k - \bar{u}^k), \tag{15.31}$$

$$\gamma_k = \frac{\langle x^k - \bar{x}^k, d_x^k\rangle + \langle u^k - \bar{u}^k, d_u^k\rangle}{\|d_x^k\|^2 + \|d_u^k\|^2}. \tag{15.32}$$

选取 $\theta_k \in (0, 2]$, 并且计算

$$x^{k+1} = P_{\mathcal{C}}[x^k - \theta_k\gamma_k d_x^k], \quad u^{k+1} = u^k - \theta_k\gamma_k d_u^k, \tag{15.33}$$

其中 $\mathcal{C} = \mathrm{dom}\, B$. 令 $k:=k+1$, 并且转入步1.

下面，我们讨论算法 15.3 在深度学习中的应用。

将 (15.2) 中的最小二乘项变一下，则

$$\min_x \ \|(e,\, XH)x - p\|_1/n + \lambda\left(|x_2| + \ldots + |x_r|\right) + \lambda\left\|\begin{pmatrix} 0 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & H \end{pmatrix} x\right\|_1. \tag{15.34}$$

显然，(15.34) 一个等价形式为

$$\min_{x\in\mathcal{R}^{r+1}} \ |x_2| + \cdots + |x_r| + \|Qx - q\|_1, \tag{15.35}$$

其中

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{n\lambda}e & \frac{1}{n\lambda}XH \\ 0 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & H \end{pmatrix}, \quad q = \begin{pmatrix} \frac{1}{n\lambda}p \\ 0 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$

注意：矩阵 Q 的行数和列数分别为 $n + d + 1$ 和 $r + 1$。

记

$$f(x) = |x_2| + \cdots + |x_r|, \quad g(\cdot) = \|\cdot\|_1.$$

算法 16.3 算法 15.1 应用于半定规划

0. 选取 $X^0 \in S^n$ 和 $u^0 \in R^m$. 令 $k:=0$.

1. 选取 $\alpha_k > 0$. 计算

$$\bar{X}^k = [X^k - \alpha_k(C + \mathcal{A}^T u^k)]_+ . \tag{16.25}$$

选取 β_k 满足 (16.31) 并且找到 $\bar{u}^k$ 使得

$$\bar{u}^k = u^k + \beta_k^{-1}(\mathcal{A}\bar{X}^k - b). \tag{16.26}$$

若 $\bar{X}^k = X^k$, $\bar{u}^k = u^k$, 停止. 否则, 进入步2.

2. 计算

$$d_x^k = \alpha_k^{-1}(X^k - \bar{X}^k) - \mathcal{A}^T(u^k - \bar{u}^k), \tag{16.27}$$

$$d_u^k = \beta_k(u^k - \bar{u}^k), \tag{16.28}$$

$$\gamma_k = \frac{\langle X^k - \bar{X}^k, d_x^k\rangle + \langle u^k - \bar{u}^k, d_u^k\rangle}{\|d_x^k\|_F^2 + \|d_u^k\|^2}. \tag{16.29}$$

选取 $\theta_k \in (0, 2]$, 并且计算

$$X^{k+1} = X^k - \theta_k\gamma_k d_x^k, \quad u^{k+1} = u^k - \theta_k\gamma_k d_u^k, \tag{16.30}$$

令 $k:=k+1$, 并且转入步1.

至于 β_k, 我们建议

$$\beta_k \geq \frac{2\varepsilon - \varepsilon^2 + \alpha_k^2\|AA^T\|}{2(2-\varepsilon)\alpha_k}, \quad 0 < \varepsilon < 2. \tag{16.31}$$

它对应于 (15.14).

注意两点：(16.26) 由 Moreau 恒等式得到；调用 ARPACK 库中隐式重启的 *Arnoldi* 算法来计算

$$M := X^k - \alpha_k(C + \mathcal{A}^T u^k)$$

到正半定锥上的近似（非精确!）投影。具体地讲，假设理论上 M 的谱分解为

$$M = \lambda_1 z^1(z^1)^T + \cdots + \lambda_n z^n(z^n)^T$$

则 M 到正半定锥上的投影为

$$M_+ = \max\{0, \lambda_1\}z^1(z^1)^T + \cdots + \max\{0, \lambda_n\}z^n(z^n)^T$$

而近似投影为：若 M 的最大特征值 $\lambda_1 \leq 0$, 则 M_+ 为零矩阵。否则，我们有

$$M_+ \overset{\epsilon}{\approx} \max\{0, \lambda_1\}z^1(z^1)^T + \cdots + \max\{0, \lambda_r\}z^r(z^r)^T,$$

索 引