

18

Lagrange Multiplier

拉格朗日乘法

把有约束优化问题转化为无约束优化问题



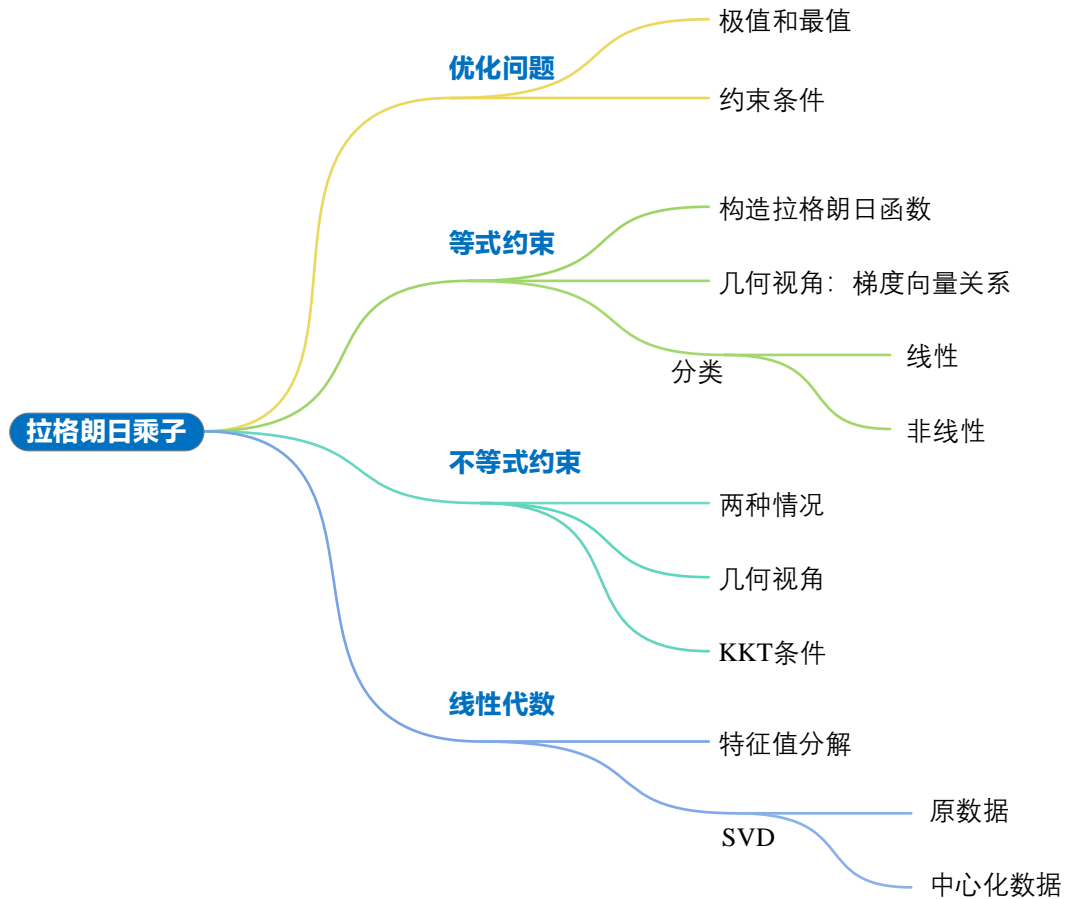
伟大的事情是由一系列小事情聚集在一起完成的。

Great things are done by a series of small things brought together.

—— 文森特·梵高 (Vincent van Gogh) | 荷兰后印象派画家 | 1853 ~ 1890



- ◀ `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- ◀ `numpy.linalg.svd()` 奇异值分解
- ◀ `sklearn.decomposition.PCA()` 主成分分析函数



18.1 回顾优化问题

本系列丛书《数学要素》第 19 章专门讲解过优化问题入门内容，本节稍作回顾。

极值、最值

优化问题好比在一定区域范围内，徒步寻找山谷或山峰。图 1 中的优化问题的目标函数 $f(x)$ 就是海拔，优化变量是 x 。

极值 (extrema 或 local extrema) 是**极大值**和**极小值**的统称。白话讲，极值是搜索区域内所有的山峰和山谷，图 1 中 A、B、C、D、E 和 F 这六个点横坐标 x 值对应极值点。

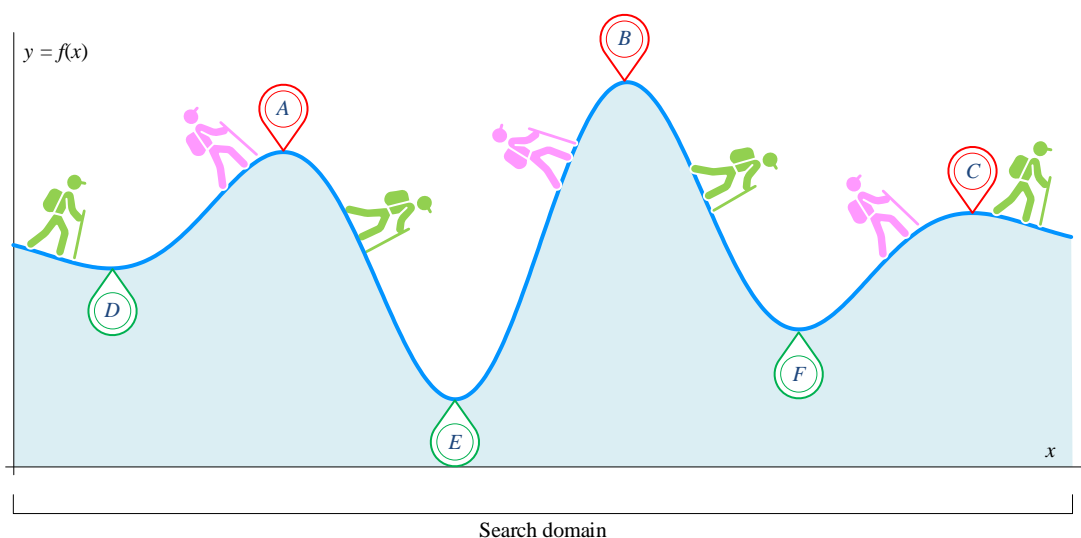


图 1. 爬上寻找山谷和山峰，图片来自《数学要素》

如果某个极值是整个指定搜索区域内的极大值或极小值，这个极值又被称作是**最大值** (maximum 或 global maximum) 或者**最小值** (minimum 或 global minimum)。最大值和最小值统称**最值** (global extrema)。

图 1 搜索域内有三座山峰 (A、B 和 C)，即搜索域极大值。而 B 是最高的山峰，因此 B 叫全局最大值，简称最大值，即站在 B 点一览众山小。E 是最深的山谷，因此 E 是全局最小值，简称最小值。

一般情况下，标准优化问题都是最小化优化问题。最大化优化问题的目标函数取个负号便转化为最小化优化问题。

含约束最小化优化问题

结合约束条件，完整最小化优化问题形式为：

$$\begin{aligned} \arg \min_x f(x) \\ \text{subject to: } l \leq x \leq u \\ Ax \leq b \\ A_{\text{eq}} x = b_{\text{eq}} \\ c(x) \leq 0 \\ c_{\text{eq}}(x) = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

上式中，约束条件分为五类，按先后顺序：(a) **上下界** (lower and upper bounds)；(b) **线性不等式** (linear inequalities)；(c) **线性等式** (linear equalities)；(d) **非线性不等式** (nonlinear inequalities)；(e) **非线性等式** (nonlinear equalities)。

最值出现的位置

《数学要素》还讲了如何利用导数和偏导数等数学工具求解一元和多元函数极值，本节就不再赘述。有必要的話，大家可以在学习本章之前先翻翻《数学要素》一册相关内容。

本节最后再回顾一下约束条件对最值点影响。当约束条件存在时，如图2所示最值可能出现在搜索区域内部或约束边界上。

本章介绍的拉格朗日乘子法就是一种能够把有约束优化问题转化成无约束优化问题的方法。

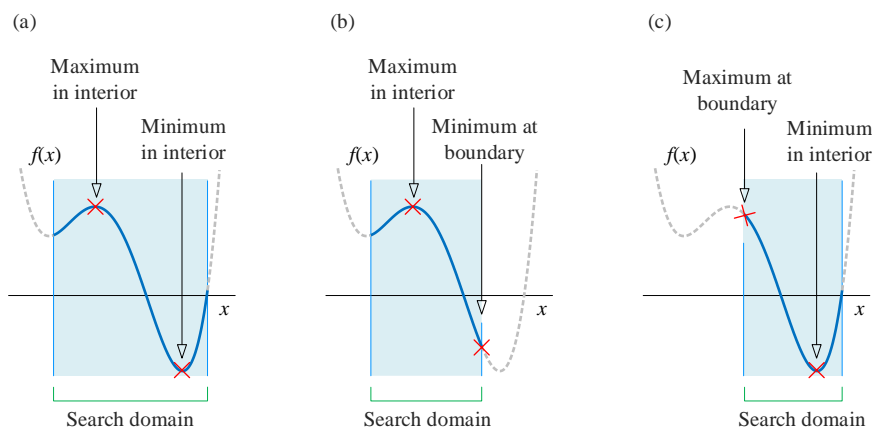


图 2. 最值和约束关系

18.2 等式约束条件

拉格朗日乘子法 (method of Lagrange multiplier) 可以把有约束的优化问题转化为无约束优化问题。拉格朗日乘子法是以十八世纪法国著名数学家**约瑟夫·拉格朗日** (Joseph Lagrange) 命名。

本章后续将主要从几何和向量视角来帮助大家理解拉格朗日乘子法。

极值出现的位置

给定含等式约束优化问题：

$$\begin{aligned} \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \\ \text{subject to: } h(\mathbf{x}) = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

其中， $f(\mathbf{x})$ 和 $h(\mathbf{x})$ 为连续函数。 $h(\mathbf{x}) = 0$ 为等式约束条件。

构造拉格朗日函数 $L(\mathbf{x}, \lambda)$ ：

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda h(\mathbf{x}) \quad (3)$$

其中， λ 被称作拉格朗日乘子，或拉格朗日乘数。

通过 λ ，(2) 这个含等式约束优化问题便转化为一个无约束优化问题：

$$\begin{cases} \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \\ \text{subject to: } h(\mathbf{x}) = 0 \end{cases} \Rightarrow \arg \min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \lambda) \quad (4)$$

$L(\mathbf{x}, \lambda)$ 对 \mathbf{x} 和 λ 偏导，最优解必要（不是充分）条件为一阶偏导数都零：

$$\begin{cases} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \lambda) = \frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial \mathbf{x}} = \nabla f(\mathbf{x}) + \lambda \nabla h(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \\ \nabla_{\lambda} L(\mathbf{x}, \lambda) = \frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial \lambda} = h(\mathbf{x}) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

▲ 注意，(5) 存在一个重要前提，假定 $f(\mathbf{x})$ 和 $h(\mathbf{x})$ 在 \mathbf{x}^* 的某一邻域内均有连续一阶偏导。

(5) 中两式合并为：

$$\nabla_{\mathbf{x}, \lambda} L(\mathbf{x}, \lambda) = \mathbf{0} \quad (6)$$

求解上式得到驻点 \mathbf{x}^* 。然后进一步判断驻点是极大值、极小值还是鞍点。

对于大部分读者来说，理解拉格朗日算子方法最大难点可能在于下式：

$$\nabla f(\mathbf{x}) + \lambda \nabla h(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (7)$$

下面结合具体图形解释上式含义。

梯度向量方向

(7) 变形得到：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = -\lambda \nabla h(\mathbf{x}) \quad (8)$$

(8) 等式隐含一条重要信息， $f(\mathbf{x})$ 和 $h(\mathbf{x})$ 在驻点 \mathbf{x}^* 处梯度同向或者反向。

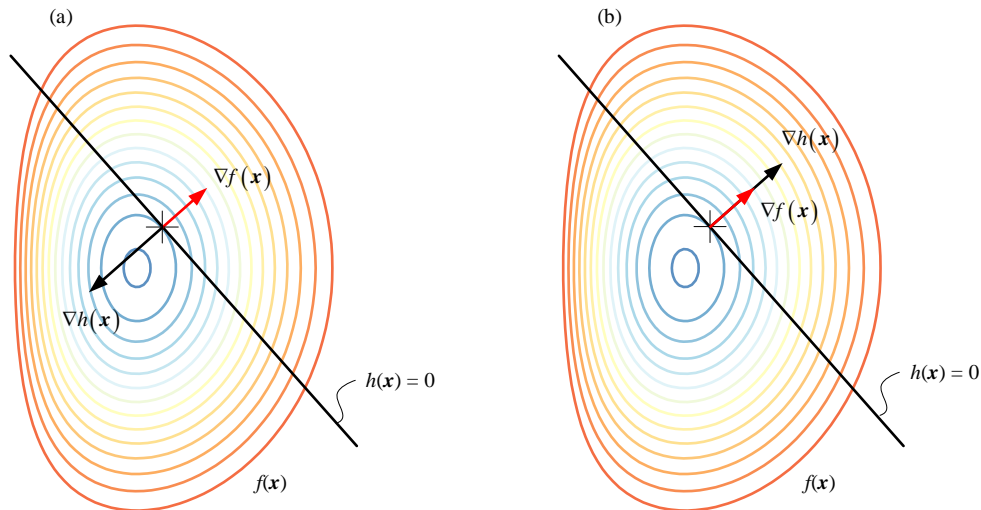


图 3. 线性等式约束条件拉格朗日算子几何意义

图 5 中彩色等高线展示目标函数 $f(\mathbf{x})$ 变化趋势。 $h(\mathbf{x})$ 为线性约束条件，变量取值范围限定在在图 5 黑色直线上。

若梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 和梯度 $\nabla h(\mathbf{x})$ 反向， λ 为正值，如图 5 (a) 所示。

如果梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 和梯度 $\nabla h(\mathbf{x})$ 正向， λ 为负值，如图 5 (b) 所示。

简单来说， $h(\mathbf{x}) = 0$ 约束下 $f(\mathbf{x})$ 取得极值条件是，某点处梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 和梯度 $\nabla h(\mathbf{x})$ 平行。从另外一个角度， $f(\mathbf{x})$ 取得极值时，极值点出现在 $h(\mathbf{x})$ 和 $f(\mathbf{x})$ 在平面内投影等高线相切位置。

局部视图

图 4 是图 5 (a) 局部视图，我们借助它进一步展示梯度平行的几何意义。

假设 A 点是极值点。如前文所述， A 点处，梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 和梯度 $\nabla h(\mathbf{x})$ 反向。梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 方向为函数 $f(\mathbf{x})$ 增大方向，梯度下降方向 $-\nabla f(\mathbf{x})$ 为函数 $f(\mathbf{x})$ 减小方向。

A 点处， $h(\mathbf{x})$ 在 \mathbf{x}^* 点处切线垂直于 $\nabla h(\mathbf{x})$ ，因此该切线也垂直于梯度负方向 $-\nabla f(\mathbf{x})$ 。从而， A 点处， $-\nabla f(\mathbf{x})$ 在 $h(\mathbf{x})$ 在 \mathbf{x}^* 点处切线方向向量投影对应长度为 0。

若沿着 $h(x) = 0$ 路径向左或者向右稍微偏离 A , $f(x)$ 都会增大, 因此 A 点在 $h(x) = 0$ 等式约束条件下为极小值点。

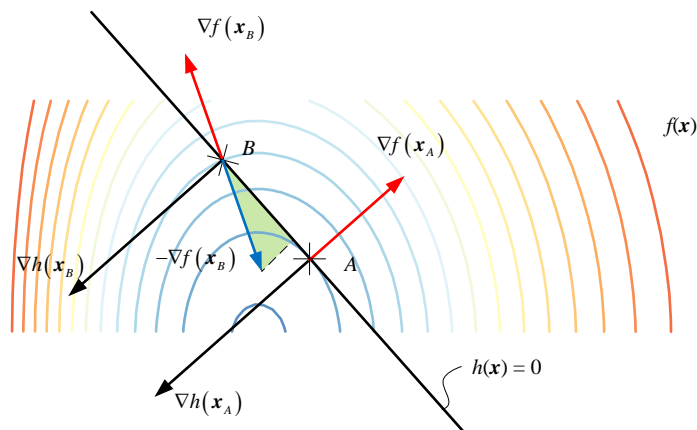


图 4. 梯度平行几何意义

再来看图 4 中 B 点, 同样找到 $f(x)$ 梯度负方向 $-\nabla f(x)$, 即 $f(x)$ 减小方向; 然后, 再找 B 点处 $h(x)$ 切线方向, 发现 $-\nabla f(x)$ 在此切线方向, 沿着 $f(x)$ 减小方向存在投影分量。这说明, 在 B 点沿着 $h(x)$ 向右下方行走, $f(x)$ 减小。

利用几何视角, 我们了解了 (7) 含义。

非线性等式约束条件

上述分析思路也同样适用于非线性等式约束条件。请大家自行分析图 5。

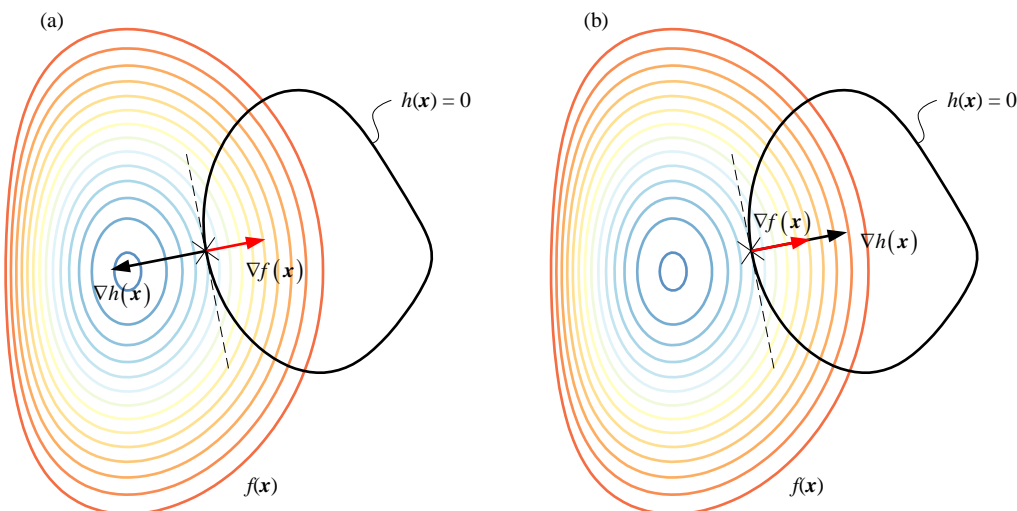


图 5. 非线性等式约束条件拉格朗日算子几何意义

进一步判断

用拉格朗日乘子计算出来的驻点到底是极大值、极小值、鞍点，还需要进一步的判断。

图 6 给出四种极值常见情况。如图 6 (a) 所示， $f(x)$ 自身为凹函数， $f(x)$ 等高线和 $h(x) = 0$ 相切于 A 点和 B 点。在 $h(x) = 0$ 约束条件下， $f(x)$ 在 A 点取得极大值，在 B 点取得极小值。

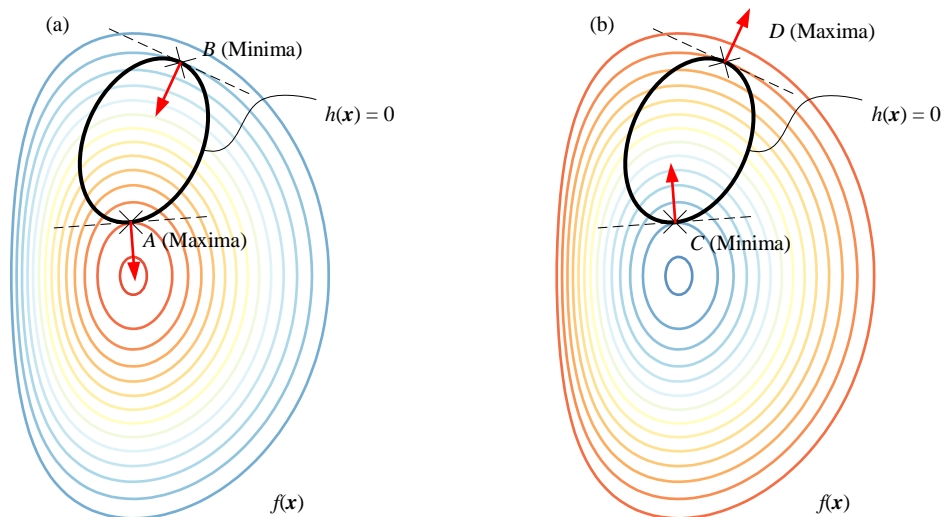


图 6. 四种极值情况

而在图 6 (b)， $f(x)$ 自身为凸函数， $f(x)$ 等高线和 $h(x) = 0$ 相切于 C 点和 D 点；在 $h(x) = 0$ 约束条件下， $f(x)$ 在 C 点取得极小值，在 D 点取得极大值。

⚠ 这里请大家注意，如果 $h(x) = 0$ 为等式约束， $h(x)$ 自身函数值变化趋势不是需要考虑问题。但是，不等式约束条件就不得不考虑不等式约束函数自身变化趋势，本章后续将讨论这个内容。



说个题外话，**拉格朗日点** (Lagrangian point) 很可能比本章介绍的拉格朗日乘法更出名。

两个天体环绕运行，比如太阳-地球 (日-地)，地球-月亮 (地-月)，在空间中可以找到两个天体引力平衡五个点，如图 7 所示的 $L_1 \sim L_5$ 。

在 $L_1 \sim L_5$ 这五个点任意一点放置质量可以忽略不计的第三个天体，使其和另外两个天体保持相对静止，以相同模式运转，这就是所谓的**三体问题** (three-body problem)。

实际情况，第三天体不可能在拉格朗日点保持相对静止；人造卫星一般会围绕拉格朗日点附近运转，完成观测或中继等任务，以节省大量燃料。

詹姆斯·韦伯空间望远镜位绕“日-地”拉格朗日 L_2 点运转。嫦娥二号完成探月任务后，专门飞往“日-地”拉格朗日 L_2 点进行科学探测。

我国探月时用到的鹊桥中继星就是绕“地-月”拉格朗日 L_2 点运转。

之所以聊到这个话题是因为图 7 所示引力场等高线图和驻点、极值、梯度向量场这些概念都有密切的关系。

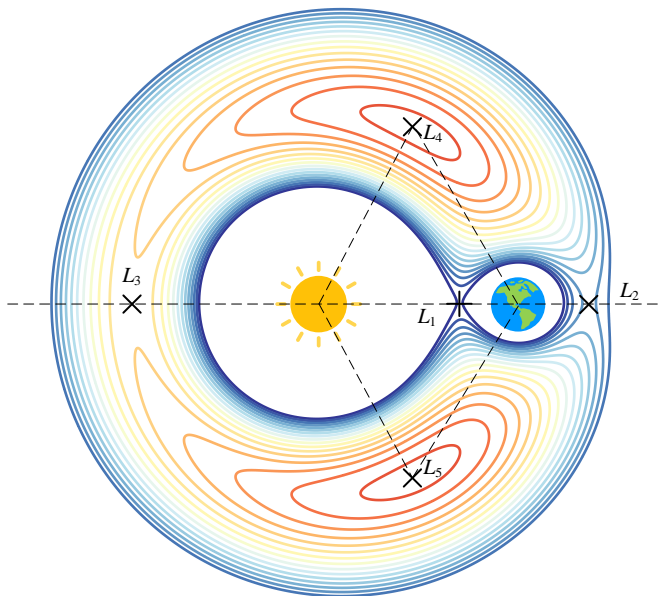


图 7. 五个拉格朗日点

18.3 线性等式约束

下面用一个简单例子来验证上一节介绍的内容。

给定一个优化问题如下：

$$\begin{aligned} \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) &= x_1^2 + x_2^2 \\ \text{subject to: } h(\mathbf{x}) &= x_1 + x_2 - 1 = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

这是一个二次规划问题，含一个线性等式约束条件 $h(\mathbf{x}) = 0$ 。

利用矩阵运算，(9) 可以写成：

$$\begin{aligned} \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) &= \mathbf{x}^T \mathbf{x} = \|\mathbf{x}\|_2^2 \\ \text{subject to: } h(\mathbf{x}) &= x_1 + x_2 - 1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}^T \mathbf{x} = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

根据上一章内容，请大家自行计算两个函数的梯度向量。

图 8 所示为 $h(x)$ 梯度向量场。观察图像，我们发现 $h(x) = 0$ 对应一条直线，直线上不同点处的梯度向量均垂直于该直线。

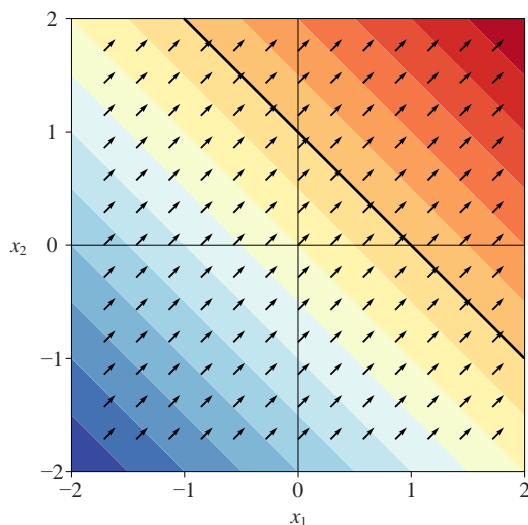


图 8. $h(x)$ 梯度向量场

如图 9 所示， x_1x_2 平面上，目标函数 $f(x)$ 的等高线是一组同心圆。等式约束条件 $x_1 + x_2 - 1 = 0$ 对应图中黑色直线。我们的优化解只能在 $x_1 + x_2 - 1 = 0$ 限定的直线上选取。

图 9 中，黄色箭头代表 $h(x)$ 梯度方向，图中的黑色箭头是 $f(x)$ 梯度向量场。当同心圆和等式约束相切于 A 点， $f(x)$ 取得最小值。黑色直线上任何偏离 A 点位置都会导致目标函数 $f(x)$ 增大。

显然，这一点处 $f(x)$ 和 $h(x)$ 梯度方向一致，或称平行。

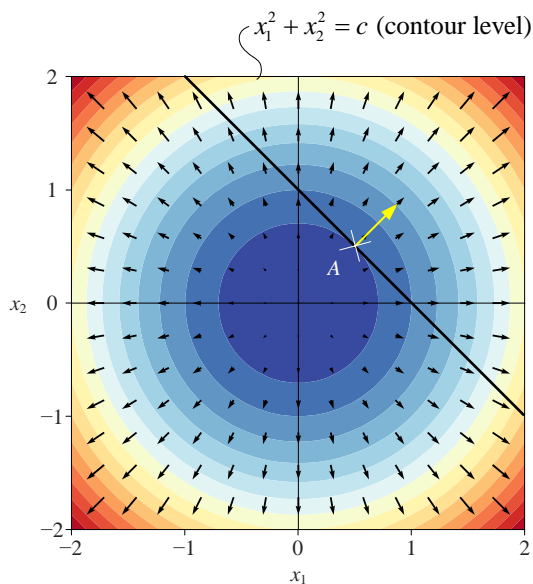


图 9. 拉格朗日算子求解二次规划，极值点处 $f(x)$ 和 $h(x)$ 梯度同向， λ 小于 0

拉格朗日函数

构造拉格朗日函数 $L(\mathbf{x}, \lambda)$:

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = x_1^2 + x_2^2 + \lambda(x_1 + x_2 - 1) \quad (11)$$

构造下列偏导为 0 等式组并求解 (x_1, x_2, λ) :

$$\begin{cases} \frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial x_1} = 2x_1 + \lambda = 0 \\ \frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial x_2} = 2x_2 + \lambda = 0 \\ \frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial \lambda} = x_1 + x_2 - 1 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = \frac{1}{2} \\ x_2 = \frac{1}{2} \\ \lambda = -1 \end{cases} \quad (12)$$

λ 为负值，这说明在优化解处，梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 和梯度 $\nabla h(\mathbf{x})$ 同向。

将 $\lambda = -1$ 代回 (11) 得到如图 10 所示的拉格朗日函数 $L(\mathbf{x}, \lambda = -1)$ 平面等高线。图 10 中我们发现 $L(\mathbf{x}, \lambda = -1)$ 最小值位置就是 (12) 求解得到的优化解。

从图像角度，我们将图 9 这个含有线性等式约束的优化问题转化成图 10 这个无约束优化问题。

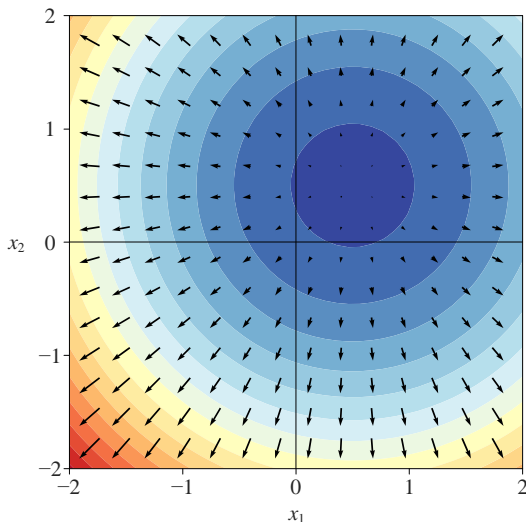


图 10. 拉格朗日函数平面等高线

另外一种记法

请读者注意，很多文献 λ 前采用负号，拉格朗日函数 $L(\mathbf{x}, \lambda)$ 则为：

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) - \lambda h(\mathbf{x}) \quad (13)$$

$L(\mathbf{x}, \lambda)$ 对 \mathbf{x} 和 λ 偏导为 0 对应等式组为：

$$\begin{cases} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \lambda) = \frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial \mathbf{x}} = \nabla f(\mathbf{x}) - \lambda \nabla h(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \\ \nabla_{\lambda} L(\mathbf{x}, \lambda) = \frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial \lambda} = h(\mathbf{x}) = 0 \end{cases} \quad (14)$$

这种拉格朗日函数构造，若梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 和梯度 $\nabla h(\mathbf{x})$ 同向， λ 为正值。如果梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 和梯度 $\nabla h(\mathbf{x})$ 反向， λ 为负值。不管 λ 前是正还是负，都不会影响结果。本章后续也会使用 (13) 这种形式。

18.4 非线性等式约束

本节再看一个线性规划问题实例，它约束条件为非线性等式约束：

$$\begin{aligned} \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) &= x_1 + x_2 \\ \text{subject to: } h(\mathbf{x}) &= x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \end{aligned} \quad (15)$$

图 11 所示为， $f(\mathbf{x})$ 和 $h(\mathbf{x}) = 0$ 梯度向量场。大家自己是否能够根据图 11 梯度向量之间的关系，判断 (15) 极大值和极小值位置。

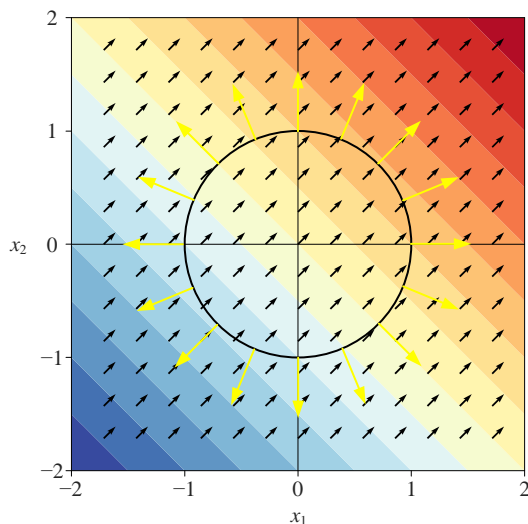


图 11. $f(\mathbf{x})$ 和 $h(\mathbf{x}) = 0$ 梯度向量场

拉格朗日函数

构造拉格朗日函数 $L(\mathbf{x}, \lambda)$ 如下：

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = x_1 + x_2 + \lambda(x_1^2 + x_2^2 - 1) \quad (16)$$

根据偏导为 0 构造如下等式组：

$$\begin{cases} \frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial x_1} = 1 + 2x_1\lambda = 0 \\ \frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial x_2} = 1 + 2x_2\lambda = 0 \\ \frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial \lambda} = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = -\frac{1}{2\lambda} \\ x_2 = -\frac{1}{2\lambda} \\ x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \end{cases} \quad (17)$$

根据上述等式组构造 λ 等式，并求解 λ ：

$$\left(\frac{1}{2\lambda}\right)^2 + \left(\frac{1}{2\lambda}\right)^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (18)$$

λ 取正值获得极小值：

$$\begin{cases} x_1 = -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ x_2 = -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \lambda = \frac{\sqrt{2}}{2} \end{cases} \quad (19)$$

λ 取正值，获得极大值。图 12 所示为拉格朗日函数 $L(\mathbf{x}, \lambda = \sqrt{2}/2)$ 对应的平面等高线图。同样，利用拉格朗日乘法，我们将如图 11 所示的含有非线性等式约束的优化问题，转化成如图 12 所示的无约束优化问题。

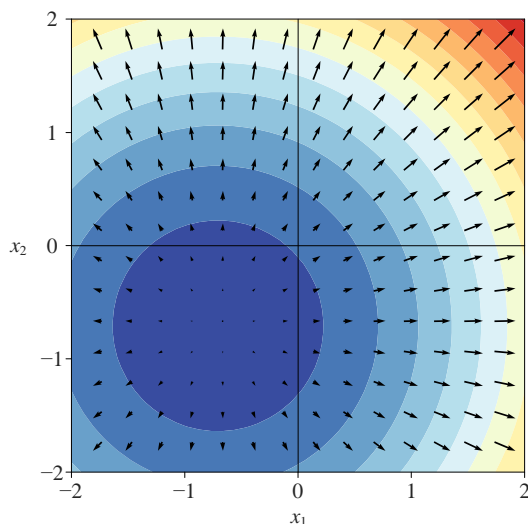


图 12. 拉格朗日函数等高线

18.5 不等式约束

本节介绍如何用 **KKT** (Karush-Kuhn-Tucker) 条件将本章前文介绍的拉格朗日乘法推广到不等式约束问题。

给定如下不等式约束优化问题：

$$\begin{aligned} \arg \min_x & f(\mathbf{x}) \\ \text{subject to: } & g(\mathbf{x}) \leq 0 \end{aligned} \quad (20)$$

其中， $f(\mathbf{x})$ 和 $g(\mathbf{x})$ 为连续函数。

几何视角

如图 13 所示，黑色曲线和图 5 一样代表等式情况，即 $g(\mathbf{x}) = 0$ 。图 13 中浅蓝色区域代表 $g(\mathbf{x}) < 0$ 情况。

优化解 \mathbf{x}^* 出现位置有两种情况：第一种情况， \mathbf{x}^* 出现在边界上 (蓝色线)，约束条件有效，如图 13 (a)；第二种情况， \mathbf{x}^* 出现在不等式区域内 (浅蓝色)，约束条件无效，如图 13 (b)。

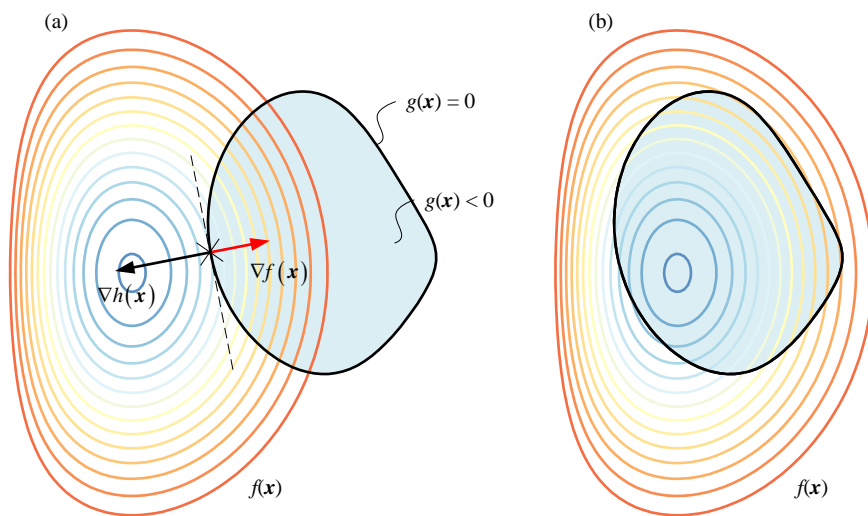


图 13. 不等式约束条件下拉格朗日乘法两种情况

在图 13(a) 中，第一种情况等价于图 5 讨论情况，即 $g(\mathbf{x}) = 0$ 成立。

在图 13(b) 中， \mathbf{x}^* 出现在 $g(\mathbf{x}) < 0$ 蓝色区域内。对于凸函数，如果在优化解的邻域内 $f(\mathbf{x})$ 有连续的一阶偏导数，可以直接通过 $\nabla f(\mathbf{x}) = 0$ 获得最优点，此时 λ 为 0。这种情况，含约束优化问题变成无约束问题。

结合上述两种情况， $\lambda g(\mathbf{x}) = 0$ 恒成立。也就是说，要么 $g(\mathbf{x}) = 0$ ，要么 $\lambda = 0$ 。

判断极值点性质

进一步讨论图 13 (a) 对应的情况。如图 14 所示，不等式内部区域 $g(\mathbf{x}) < 0$ ，而边界 $g(\mathbf{x}) = 0$ 。而黑色边界外， $g(\mathbf{x}) > 0$ 。因此，在黑色边界 $g(\mathbf{x}) = 0$ 上，梯度向量指向区域外部。

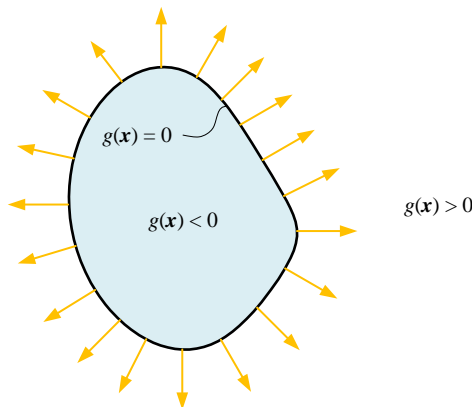


图 14. 不等式约束梯度方向

图 15 所示为 $\nabla f(\mathbf{x})$ 和梯度 $\nabla g(\mathbf{x})$ 反向和同向两种情况。

图 15 (a) 中，A 点处， $f(\mathbf{x})$ 梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 是黑色箭头，指向右上方。而 A 点处， $g(\mathbf{x})$ 梯度 $\nabla g(\mathbf{x})$ 是橙色箭头和 $\nabla f(\mathbf{x})$ 同向。A 点为 $g(\mathbf{x}) \leq 0$ 不等式条件约束下 $f(\mathbf{x})$ 极大值。

图 15(b) 中，B 点处， $\nabla f(\mathbf{x})$ 和 $\nabla g(\mathbf{x})$ 方向相反。B 点是 $g(\mathbf{x}) \leq 0$ 不等式条件约束下 $f(\mathbf{x})$ 极小值。

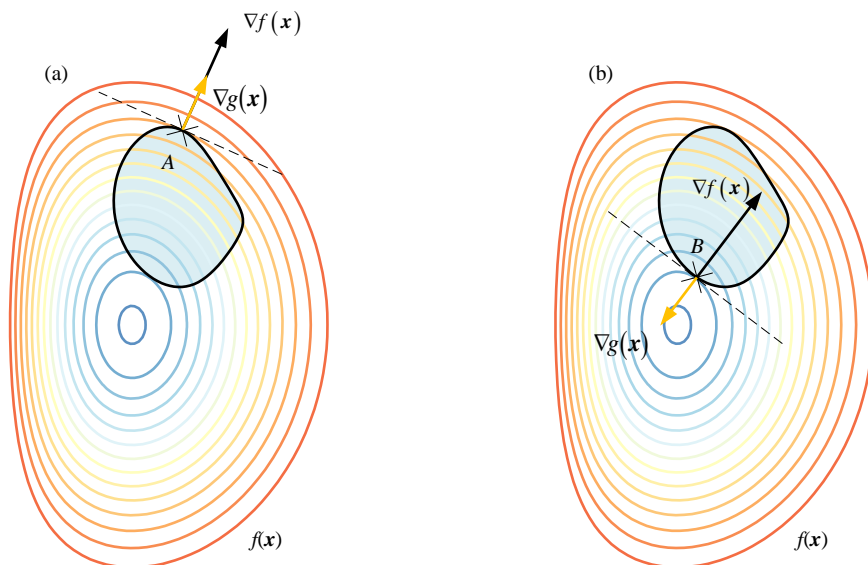


图 15. 梯度向量同方向和反方向

KKT 条件

结合以上讨论，对于 $g(\mathbf{x}) \leq 0$ 不等式条件约束下 $f(\mathbf{x})$ 最小值问题，构造如下拉格朗日函数 $L(\mathbf{x}, \lambda)$:

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda g(\mathbf{x}) \quad (21)$$

极值点 \mathbf{x}^* 出现位置满足以下条件:

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{x}) + \lambda \nabla g(\mathbf{x}) = 0 \\ g(\mathbf{x}) \leq 0 \\ \lambda \geq 0 \\ \lambda g(\mathbf{x}) = 0 \end{cases} \quad (22)$$

以上这些条件合称 KKT 条件。

两类约束条件

在不等式 $g(\mathbf{x}) \leq 0$ 约束条件下及等式约束 $h(\mathbf{x}) = 0$ 条件下，构造最小化 $f(\mathbf{x})$ 优化问题:

$$\begin{aligned} & \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \\ & \text{subject to: } g(\mathbf{x}) \leq 0, h(\mathbf{x}) = 0 \end{aligned} \quad (23)$$

构造拉格朗日函数:

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda_h h(\mathbf{x}) + \lambda_g g(\mathbf{x}) \quad (24)$$

KKT 条件如下:

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{x}) + \lambda_h \nabla h(\mathbf{x}) + \lambda_g \nabla g(\mathbf{x}) = 0 \\ h(\mathbf{x}) = 0 \\ g(\mathbf{x}) \leq 0 \\ \lambda_g \geq 0 \\ \lambda_g g(\mathbf{x}) = 0 \end{cases} \quad (25)$$

多个约束条件

有以上讨论，把结论推广到多个等式约束和多个不等式约束情况。

对于如下优化问题:

$$\begin{aligned} & \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \\ & \text{subject to: } \begin{cases} g_j(\mathbf{x}) \leq 0, & j=1, \dots, m \\ h_i(\mathbf{x}) = 0, & i=1, \dots, n \end{cases} \end{aligned} \quad (26)$$

构造如下拉格朗日函数：

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \sum \lambda_{h,i} h_i(\mathbf{x}) + \sum \lambda_{g,j} g_j(\mathbf{x}) \quad (27)$$

(27) 对应的 KKT 条件如下：

$$\begin{cases} \nabla_{\mathbf{x}, \lambda} L(\mathbf{x}, \lambda) = 0 \\ h_i(\mathbf{x}) = 0 \\ g_j(\mathbf{x}) \leq 0 \\ \lambda_{g,j} \geq 0 \\ \lambda_{g,j} g_j(\mathbf{x}) = 0, \quad \forall j \end{cases} \quad (28)$$

18.6 再谈特征值分解：优化视角

这一节介绍一些线性代数中会遇到的含约束优化问题。利用拉格朗日乘法，它们最终都可以用特征值分解求解。

第一个优化问题

给定如下优化问题：

$$\begin{aligned} & \arg \max_{\mathbf{v}} \mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{v} \\ & \text{subject to: } \mathbf{v}^T \mathbf{v} = 1 \end{aligned} \quad (29)$$

其中， \mathbf{A} 为对称矩阵。

构造拉格朗日函数：

$$L(\mathbf{v}, \lambda) = \mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{v} - \lambda (\mathbf{v}^T \mathbf{v} - 1) \quad (30)$$

⚠ 注意，为了满足特征值分解常用记法，(30) 中 λ 前加了负号。

$L(\mathbf{v}, \lambda)$ 对 \mathbf{v} 偏导为 0，得到等式：

$$\frac{\partial L(\mathbf{v}, \lambda)}{\partial \mathbf{v}} = 2\mathbf{A}\mathbf{v} - 2\lambda\mathbf{v} = 0 \quad (31)$$

整理得到：

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \quad (32)$$

最大化问题中，最优解 \mathbf{v} 对应矩阵 \mathbf{A} 最大特征值。

如果是最小化问题，即：

$$\begin{aligned} \arg \min_{\mathbf{v}} \quad & \mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{v} \\ \text{subject to: } & \mathbf{v}^T \mathbf{v} = 1 \end{aligned} \quad (33)$$

最优解 \mathbf{v} 对应矩阵 \mathbf{A} 最小特征值。

第二个优化问题

给定如下优化问题：

$$\arg \max_{\mathbf{v}} \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{v}}{\mathbf{v}^T \mathbf{v}} \quad (34)$$

这就是本书第 14 章讲的瑞利商。上述优化问题等价于 (29)。

而最小化优化问题：

$$\arg \min_{\mathbf{v}} \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{v}}{\mathbf{v}^T \mathbf{v}} \quad (35)$$

等价于 (33)。

第三个优化问题

给定优化问题：

$$\begin{aligned} \arg \max_{\mathbf{v}} \quad & \mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{v} \\ \text{subject to: } & \mathbf{v}^T \mathbf{B} \mathbf{v} = 1 \end{aligned} \quad (36)$$

构造拉格朗日函数：

$$L(\mathbf{v}, \lambda) = \mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{v} - \lambda (\mathbf{v}^T \mathbf{B} \mathbf{v} - 1) \quad (37)$$

$L(\mathbf{v}, \lambda)$ 对 \mathbf{v} 偏导为 0，得到等式：

$$\frac{\partial L(\mathbf{v}, \lambda)}{\partial \mathbf{v}} = 2\mathbf{A}\mathbf{v} - 2\lambda\mathbf{B}\mathbf{v} = 0 \quad (38)$$

整理得到：

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{B}\mathbf{v} \quad (39)$$

上式相当于对 $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$ 进行特征值分解。特别地，当 $\mathbf{B} = \mathbf{I}$ 时对应 (29)。

第四个优化问题

给定优化问题：

$$\arg \max_x \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x}} \quad (40)$$

上式实际上是瑞利商的一般式。这个优化问题等价于 (36)。

第五个优化问题

给定优化问题：

$$\begin{aligned} \arg \min_v \quad & \|\mathbf{A} \mathbf{v}\| \\ \text{subject to: } & \|\mathbf{v}\| = 1 \end{aligned} \quad (41)$$

它实际上等价于：

$$\arg \min_v \left(\frac{\|\mathbf{A} \mathbf{v}\|}{\|\mathbf{v}\|} \right)^2 = \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{v}}{\mathbf{v}^T \mathbf{v}} \quad (42)$$

式中，对 \mathbf{A} 是否为对称矩阵没有限制，因为 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ 为对称矩阵。对 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ 的特征值分解，便可以解决这个优化问题。这个优化问题实际上就是我们要在下一节讨论的 SVD 分解。

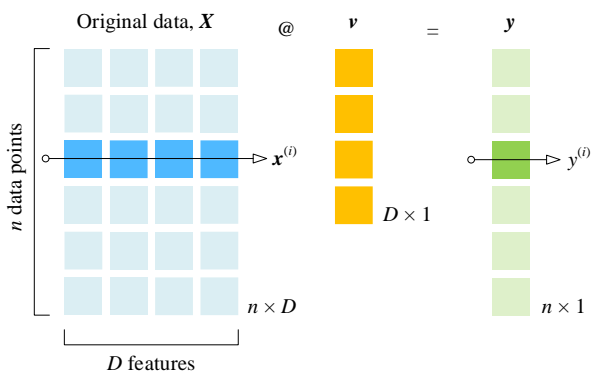
18.7 再谈 SVD：优化视角

本章最后从优化视角讨论 SVD 分解。

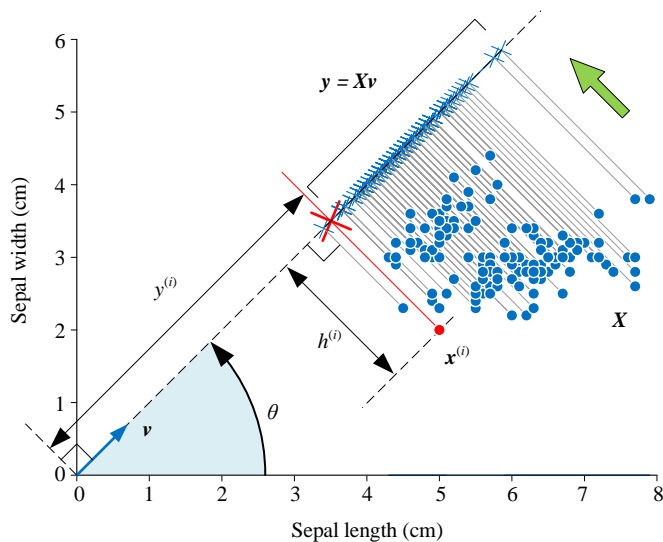
如图 16 所示，数据矩阵 \mathbf{X} 中任意行向量 $\mathbf{x}^{(i)}$ 在 \mathbf{v} 上投影，得到标量投影结果为 $y^{(i)}$ ：

$$\mathbf{x}^{(i)} \mathbf{v} = y^{(i)} \quad (43)$$

其中， \mathbf{v} 为单位向量。

图 16. 数据矩阵 X 中任意行向量 $x^{(i)}$ 在 v 上投影

如图 17 所示, $y^{(i)}$ 就是 $x^{(i)}$ 在 v 上坐标, $h^{(i)}$ 为 $x^{(i)}$ 到 v 的距离。

图 17. $x^{(i)}$ 在 v 上投影

整个数据矩阵 X 在 v 上投影得到向量 y :

$$Xv = y \quad (44)$$

从优化问题角度, SVD 分解等价于最大化 $y^{(i)}$ 平方和:

$$\max_v \sum_{i=1}^n (y^{(i)})^2 \quad (45)$$

上式相当于, 最小化 $h^{(i)}$ 平方和:

$$\max \sum_{i=1}^n \left(h^{(i)}\right)^2 \quad (46)$$

而,

$$\sum_{i=1}^n \left(y^{(i)}\right)^2 = \|\mathbf{y}\|_2^2 = \mathbf{y}^T \mathbf{y} = (\mathbf{X}\mathbf{v})^T (\mathbf{X}\mathbf{v}) = \mathbf{v}^T \underset{G}{\mathbf{X}^T \mathbf{X}} \mathbf{v} \quad (47)$$

大家是否看到了 (42) 的影子。

构造如下优化问题:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &= \arg \max_{\mathbf{v}} \mathbf{v}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{v} \\ \text{subject to: } &\mathbf{v}^T \mathbf{v} = 1 \end{aligned} \quad (48)$$

(48) 等价于:

$$\mathbf{v}_1 = \arg \max_{\mathbf{v}} \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{v}}{\mathbf{v}^T \mathbf{v}} \quad (49)$$

利用 L^2 范数, (48) 还等价于:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &= \arg \max_{\mathbf{v}} \|\mathbf{X}\mathbf{v}\| \\ \text{subject to: } &\|\mathbf{v}\| = 1 \end{aligned} \quad (50)$$

(48) 也等价于:

$$\mathbf{v}_1 = \arg \max_{\mathbf{v}} \frac{\|\mathbf{X}\mathbf{v}\|}{\|\mathbf{v}\|} \quad (51)$$

\mathbf{X} 的奇异值 s_1 为:

$$s_1 = \|\mathbf{X}\mathbf{v}_1\| \quad (52)$$

也就是说, s_1 的平方值为 \mathbf{X} 所有行向量代表的坐标点在 \mathbf{v}_1 方向上标量投影的平方值:

$$s_1^2 = \|\mathbf{X}\mathbf{v}_1\|_2^2 = \|\mathbf{y}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(y^{(i)}\right)^2 \quad (53)$$

顺序求解其他右奇异值向量

确定第一右奇异值向量 \mathbf{v}_1 之后, 我们可以构造类似如下优化问题依次求解其他右奇异值向量:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_2 &= \arg \max_{\mathbf{v}} \|\mathbf{X}\mathbf{v}\| \\ \text{subject to: } &\|\mathbf{v}\| = 1, \mathbf{v} \perp \mathbf{v}_1 \end{aligned} \quad (54)$$

上式等价于:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_2 &= \arg \max_{\mathbf{v}} \mathbf{v}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{v} \\ \text{subject to: } &\|\mathbf{v}\| = 1, \mathbf{v} \perp \mathbf{v}_1 \end{aligned} \quad (55)$$

中心化数据

数据矩阵 \mathbf{X} 中每一列数据 \mathbf{x}_j 分别减去本列均值可以得到中心化数据 \mathbf{X}_c 。利用广播原则， \mathbf{X} 减去行向量 $\mathbf{E}(\mathbf{X})$ 得到 \mathbf{X}_c ：

$$\mathbf{X}_c = \mathbf{X} - \mathbf{E}(\mathbf{X}) \quad (56)$$

⚠ 特别强调，SVD 分解中心化数据 \mathbf{X}_c 得到的结果不同于本节前文结果。

如图 18 所示， \mathbf{v} 上投影得到向量 \mathbf{y} ：

$$\mathbf{X}_c \mathbf{v} = \mathbf{y}_c \quad (57)$$

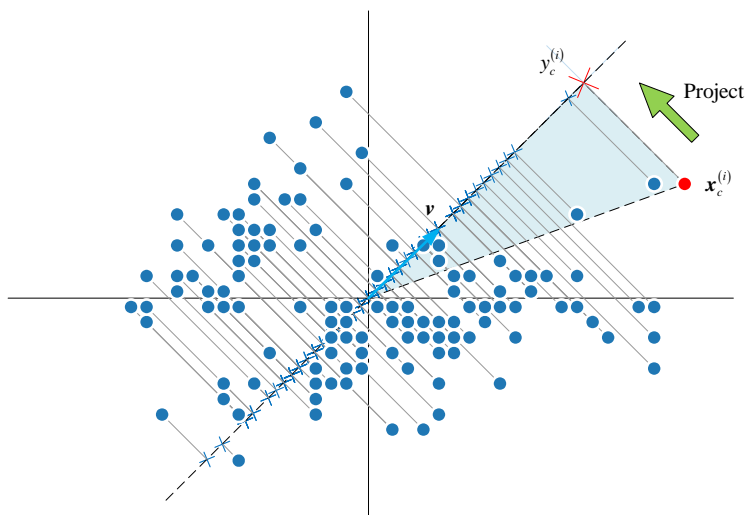


图 18. 中心化数据在 \mathbf{v} 上投影

图 18 对应的优化问题为：

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{c-1} &= \arg \max_{\mathbf{v}} \|\mathbf{X}_c \mathbf{v}\| \\ \text{subject to: } &\|\mathbf{v}\| = 1 \end{aligned} \quad (58)$$

\mathbf{X}_c 的最大奇异值 s_{c-1} 为：

$$s_{c-1} = \|\mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-1}\| \quad (59)$$

也就是说， s_{c-1} 的平方为所有点在 \mathbf{v}_{c-1} 方向上标量投影的平方值：

$$\begin{aligned}
 s_1^2 &= \|\mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-1}\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(y_c^{(i)}\right)^2 = \|\mathbf{y}_c\|_2^2 = \mathbf{y}_c^T \mathbf{y}_c \\
 &= (\mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-1})^T (\mathbf{X}_c \mathbf{v}_{c-1}) = \mathbf{v}_{c-1}^T \underbrace{\mathbf{X}_c^T \mathbf{X}_c}_{(n-1)\Sigma} \mathbf{v}_{c-1} = (n-1) \mathbf{v}_{c-1}^T \Sigma \mathbf{v}_{c-1}
 \end{aligned} \tag{60}$$

大家可能会对 (60) 感到困惑，SVD 分解怎么和协方差矩阵 Σ 扯到一起？这是本书最后三章要回答的问题。

18.8 再谈数据正交投影：优化视角

本章最后从优化视角再谈数据正交投影。

正交投影

鸢尾花数据集的前两列构造数据矩阵 $\mathbf{X}_{150 \times 2}$ 。给定规范正交基 $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]$ ， \mathbf{v}_1 和横轴正方向夹角为 θ 。

如图 19 所示， \mathbf{X} 在 \mathbf{v}_1 方向标量投影结果为 $\mathbf{y}_1 = \mathbf{X}\mathbf{v}_1$ 。 \mathbf{y}_1 为长度为 150 的列向量， \mathbf{y}_1 是 \mathbf{X} 在 \mathbf{v}_1 方向的坐标。如图 20 所示， \mathbf{X} 在 \mathbf{v}_2 方向标量投影结果为 $\mathbf{y}_2 = \mathbf{X}\mathbf{v}_2$ ， \mathbf{y}_2 是 \mathbf{X} 在 \mathbf{v}_2 方向的坐标。

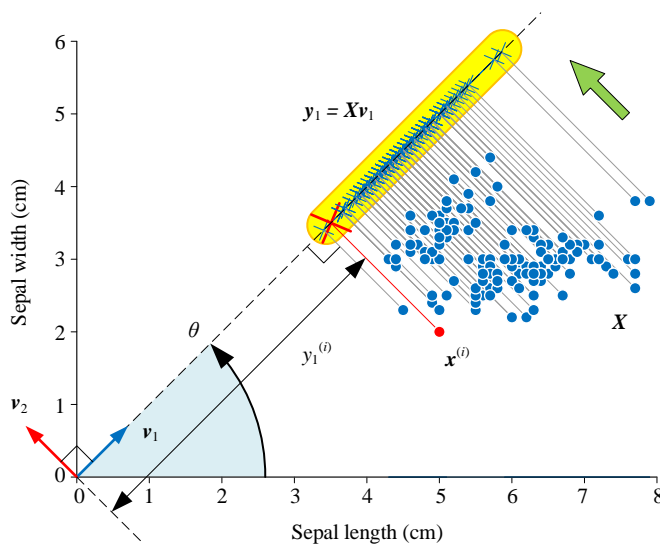
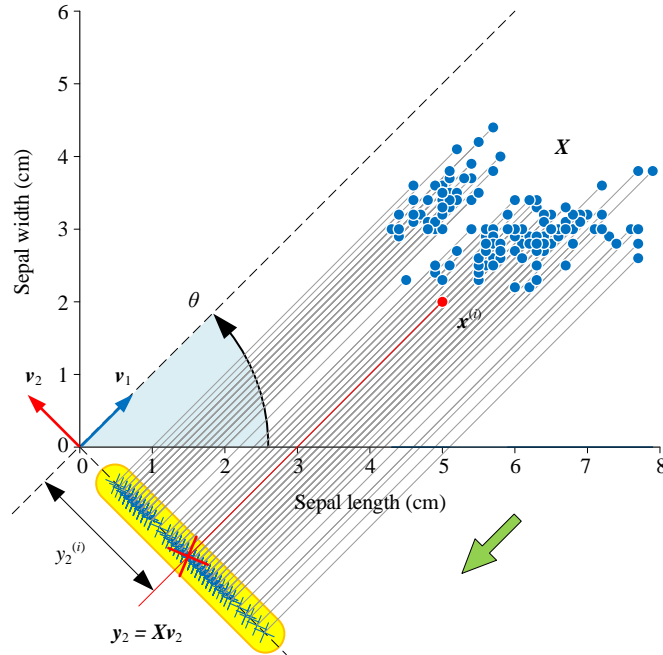


图 19. \mathbf{X} 在 \mathbf{v}_1 上投影

图 20. X 在 v_2 上投影

向量特征、向量之间关系

观察图 19 和图 20，容易发现 y_1 和 y_2 随 θ 变化。

作为列向量， y_1 和 y_2 各自有其模 ($\|y_1\|$ 、 $\|y_2\|$)，表征向量长度。以 $\|y_1\|$ 为例， $\|y_1\|^2$ 写成：

$$\|y_1\|_2^2 = y_1^T y_1 = (Xv_1)^T Xv_1 = v_1^T X^T X v_1 = v_1^T G v_1 \quad (61)$$

两者的向量内积 ($\langle y_1, y_2 \rangle$)、夹角 ($\cos(y_1, y_2)$)、夹角的余弦值 ($\text{angle}(y_1, y_2)$) 可以用来度量 y_1 和 y_2 的关系，即：

$$\langle y_1, y_2 \rangle = y_1^T y_2 = y_1^T X v_2, \quad \cos(y_1, y_2) = \frac{y_1^T y_2}{\|y_1\| \|y_2\|}, \quad \text{angle}(y_1, y_2) = \arccos\left(\frac{y_1^T y_2}{\|y_1\| \|y_2\|}\right) \quad (62)$$

也就是说，上述几个量值都会随着 θ 变化。有了变化，就会有最大值、最小值，这就进入了优化视角。

将 y_1 和 y_2 写成 $Y = [y_1, y_2] = XV$ ， Y 格拉姆矩阵可以写成：

$$G_Y = Y^T Y = (XV)^T Xv = V^T X^T X V = V^T G_X V \quad (63)$$

将 $V = [v_1, v_2]$ 代入 (63)，展开得到：

$$G_Y = V^T G_X V = \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \end{bmatrix} G_X \begin{bmatrix} v_1 & v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1^T G_X v_1 & v_1^T G_X v_2 \\ v_2^T G_X v_1 & v_2^T G_X v_2 \end{bmatrix} \quad (64)$$

统计视角

从数据统计视角来看，如图 21 所示，数据矩阵 X 在规范正交基 $[v_1, v_2]$ 投影的结果 y_1 和 y_2 无非就是两列数值。 y_1 和 y_2 肯定都有自己统计量，比如均值 ($E(y_1)$ 、 $E(y_2)$)、方差 ($\text{var}(y_1)$ 、 $\text{var}(y_2)$)、标准差 ($\text{std}(y_1)$ 、 $\text{std}(y_2)$)。而 y_1 和 y_2 之间也存在协方差 ($\text{cov}(y_1, y_2)$)、相关性系数 ($\text{corr}(y_1, y_2)$) 这两个重要的统计量。

而上述统计度量值同样随着 θ 变化。

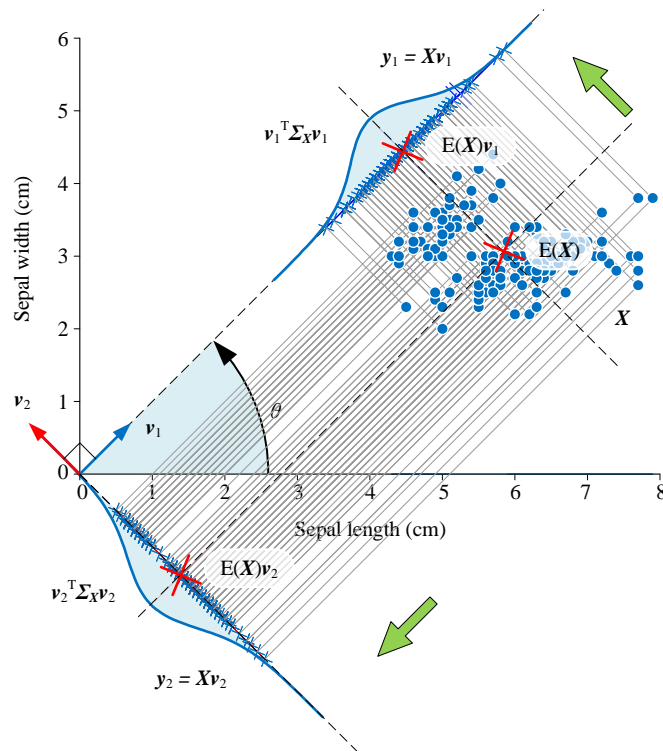
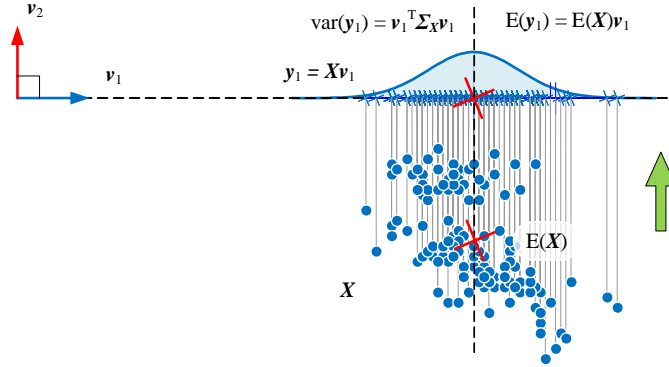
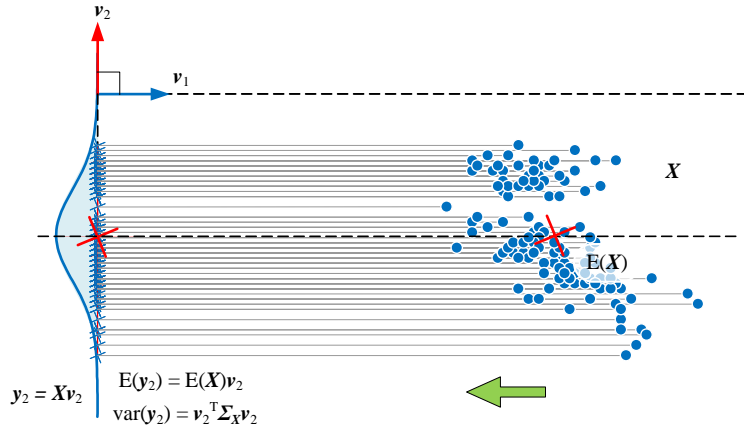


图 21. X 在 $[v_1, v_2]$ 上投影

图 22 和图 23 展示一系列重要统计运算，下面逐个来说。 y_1 和 y_2 均值 (期望值) $E(y_1)$ 和 $E(y_2)$ 为：

$$E(y_1) = E(Xv_1) = E(X)v_1, \quad E(y_2) = E(Xv_2) = E(X)v_2 \quad (65)$$

这相当于数据质心 $E(X) = [E(x_1), E(x_2)]$ 分别向 v_1 和 v_2 投影。

图 22. y_1 的统计学特点图 23. y_2 的统计学特点

y_1 和 y_2 的方差 $\text{var}(y_1)$ 和 $\text{var}(y_2)$ 为：

$$\text{var}(y_1) = v_1^T \Sigma_X v_1, \quad \text{var}(y_2) = v_2^T \Sigma_X v_2 \quad (66)$$

而 y_1 和 y_2 的协方差为：

$$\text{cov}(y_1, y_2) = v_1^T \Sigma_X v_2 = \text{cov}(y_2, y_1) = v_2^T \Sigma_X v_1 \quad (67)$$

特别地，将 y_1 和 y_2 写成 $Y = [y_1, y_2]$ ， Y 的协方差矩阵可以写成：

$$\Sigma_Y = \begin{bmatrix} \text{var}(y_1) & \text{cov}(y_1, y_2) \\ \text{cov}(y_2, y_1) & \text{var}(y_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1^T \Sigma_X v_1 & v_1^T \Sigma_X v_2 \\ v_2^T \Sigma_X v_1 & v_2^T \Sigma_X v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \end{bmatrix} \Sigma_X \begin{bmatrix} v_1 & v_2 \end{bmatrix} = V^T \Sigma_X V \quad (68)$$

比较 (64) 和 (68)，我们发现协方差矩阵和格拉姆矩阵存在大量相似性。本书最后三章和《概率统计》还会继续深入讨论这一内容。

优化视角

下面，我们用图 24 这幅图展示本节前文介绍的有关 y_1 和 y_2 各种量化关系随 θ 变化。

请大家注意图 24 中两组 θ 位置 A 、 C 、 E 、 G 和 B 、 D 、 F 、 H 。当 θ 位于 A 、 C 、 E 、 G 时， $\|y_1\|^2$ 和 $\|y_2\|^2$ 取得极值，这四个位置对应 y_1 和 y_2 垂直，即 $y_1 \perp y_2$ 。

特别值得注意的是，不管 θ 怎么变， $\|y_1\|^2$ 和 $\|y_2\|^2$ 之和为定值：

$$\|y_1\|_2^2 + \|y_2\|_2^2 = y_1^T y_1 + y_2^T y_2 = 6654.24 = \|x_1\|_2^2 + \|x_2\|_2^2 = x_1^T x_1 + x_2^T x_2 \quad (69)$$

这是因为矩阵迹的重要性质—— $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$ ，即：

$$\text{tr}(G_Y) = \text{tr}(V^T G_X V) = \text{tr}((V^T G_X) V) = \text{tr}\left(V V^T G_X\right) = \text{tr}(G_X) \quad (70)$$

G_Y 的迹为：

$$\text{tr}\left(\underbrace{\begin{bmatrix} y_1^T y_1 & y_1^T y_2 \\ y_2^T y_1 & y_2^T y_2 \end{bmatrix}}_{G_Y}\right) = y_1^T y_1 + y_2^T y_2 = \|y_1\|_2^2 + \|y_2\|_2^2 \quad (71)$$

而 G_X 的迹为：

$$\text{tr}\left(\underbrace{\begin{bmatrix} x_1^T x_1 & y_1^T x_2 \\ x_2^T x_1 & x_2^T x_2 \end{bmatrix}}_{G_X}\right) = x_1^T x_1 + x_2^T x_2 = \|x_1\|_2^2 + \|x_2\|_2^2 \quad (72)$$

特别地，如果 (70) 中 V 来自于特征值分解，则 (71) 等于两个特征值之和：

$$y_1^T y_1 + y_2^T y_2 = x_1^T x_1 + x_2^T x_2 = \lambda_1 + \lambda_2 \quad (73)$$

当 θ 位于 B 、 D 、 F 、 H 时， $\text{var}(y_1)$ 和 $\text{var}(y_2)$ 取得极值，对应 y_1 和 y_2 线性无关，即相关性系数为 0，不同于 $y_1 \perp y_2$ 。同样值得注意的是，不管 θ 怎么变， $\text{var}(y_1)$ 和 $\text{var}(y_2)$ 之和为定值：

$$\text{var}(y_1) + \text{var}(y_2) = 0.8756 \quad (74)$$

同样地，

$$\text{tr}(\Sigma_Y) = \text{tr}(V^T \Sigma_X V) = \text{tr}((V^T \Sigma_X) V) = \text{tr}\left(V V^T \Sigma_X\right) = \text{tr}(\Sigma_X) \quad (75)$$

Σ_Y 的迹为：

$$\text{tr}\left(\underbrace{\begin{bmatrix} \text{var}(y_1) & \text{cov}(y_1, y_2) \\ \text{cov}(y_2, y_1) & \text{var}(y_2) \end{bmatrix}}_{G_Y}\right) = \text{var}(y_1) + \text{var}(y_2) \quad (76)$$

而 Σ_X 的迹为：

$$\text{tr} \left(\underbrace{\begin{bmatrix} \text{var}(\mathbf{x}_1) & \text{cov}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \\ \text{cov}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & \text{var}(\mathbf{x}_2) \end{bmatrix}}_{G_{\mathbf{x}}} \right) = \text{var}(\mathbf{x}_1) + \text{var}(\mathbf{x}_2) \quad (77)$$

也就是说：

$$\text{var}(\mathbf{y}_1) + \text{var}(\mathbf{y}_2) = \text{var}(\mathbf{x}_1) + \text{var}(\mathbf{x}_2) = 0.8756 \quad (78)$$

这一点非常重要，大家将会在主成分分析看到它的应用。

本章前文介绍的各种优化问题的优化解都有自己的几何意义，请大家格外注意。

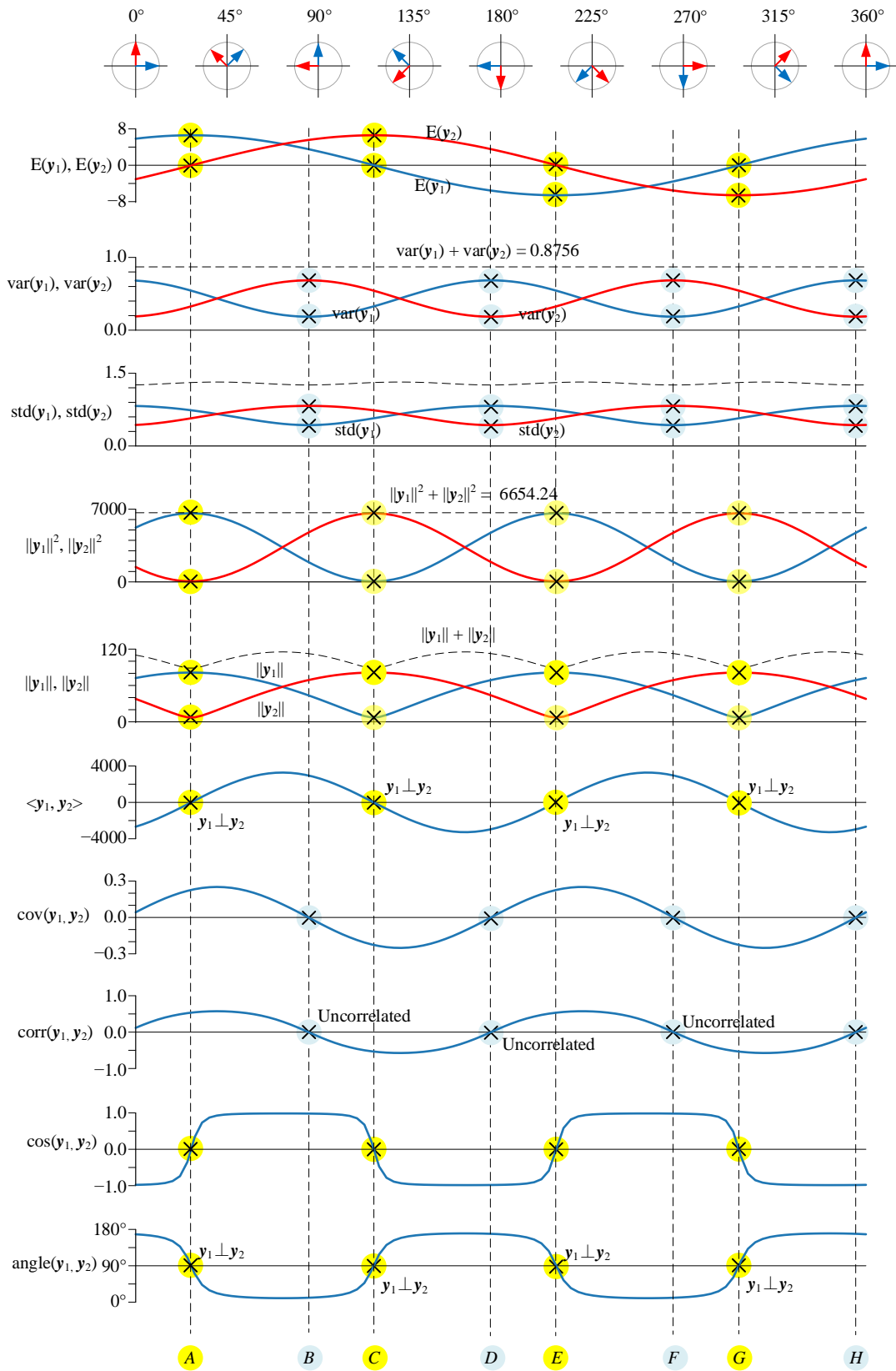
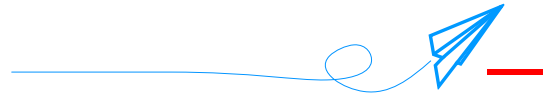


图 24. y_1 和 y_2 各种量化关系随 θ 变化



约束条件影响优化问题解的位置，拉格朗日乘法可以把有约束优化问题转化为无约束优化问题。本章分别从等式约束和不等式约束两方面来展开。需要大家格外注意的是，如何利用梯度向量理解拉格朗日乘法？此外，对于不等式约束，KKT 条件中每个式子背后的数学思想是什么？

本章又从优化视角深入讨论了特征值分解和 SVD 分解。请大家特别注意，SVD 分解中，分解对象可以分别为原始数据矩阵和中心化数据矩阵。两者的 SVD 分解结果有着很大差异。本书最后还会深入探讨，请大家留意。

本章最后从优化视角回顾了数据正交投影，建立了向量和统计描述之间的关系，这是本书最后四章将深入探讨的内容。

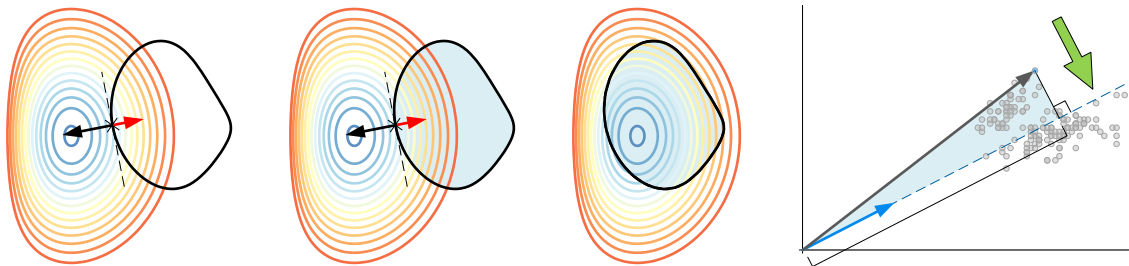


图 25. 总结本章重要内容的四副图