数值最优化讲义

王浩

2023 年 12 月 21 日

1　约束规划问题的最优性条件

对于一个约束优化问题，我们如何来刻画其最优解？这对于算法设计至关重要。我们首先从约束凸规划入手，考虑如下的问题

$$\min_{x} \quad f(x) \quad \text{s.t. } x \in \Omega, \tag{1.1}$$

其中 Ω 为闭凸集。定义如下的法锥

$$N_\Omega(x) := \{d \mid d^T(y-x) \le 0, \quad \forall y \in \Omega\}.$$

以及 Indicator 函数

$$I_\Omega(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x \in \Omega \\ +\infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

定理 1.1. （复合优化问题的一阶必要性条件）令 x^* 为问题

$$\min \ \psi(x) := f(x) + h(x)$$

的一个局部极小点，其中 f 为光滑函数（未必凸），h 为凸函数（未必光滑），则

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

证明. 因为 x^* 为一个局部极小点，所以对于任意单位向量的 d 和足够小的 $t > 0$ 有：

$$f(x^* + td) + h(x^* + td) \ge f(x^*) + h(x^*).$$

根据方向导数定义

$$\psi'(x^*; d) = \lim_{t \to 0+} \frac{\psi(x^* + td) - \psi(x^*)}{t} = \nabla f(x^*)^T d + \partial h(x^*; d) = \nabla f(x^*)^T d + \sup_{\theta \in \partial h(x^*)} \theta^T d.$$

根据反证法，如果 $-\nabla f(x^*) \not\partial h(x^*)$，则根据分离定理，知存在 d 以及常数 b 使得

$$\theta^T d < b < -\nabla f(x^*)^T d, \quad \forall \theta \in \partial h(x^*).$$

根据 $\partial h(x^*)$ 为有界闭集可知对于此方向 d，

$$\psi'(x^*; d) = \nabla f(x^*)^T d + \sup_{\theta \in \partial h(x^*)} \theta^T d < 0.$$

这说明对于充分小的 t，

$$\psi(x^* + td) < \psi(x^*).$$

这与 x^* 的局部极小性矛盾。因此 $-\nabla f(x^*) \in \partial h(x^*)$. □

可以验证，对于任意 $x^* \in \Omega$，Indicator 函数的次微分即为法锥。

$$I_\Omega(x) \geq I_\Omega(x^*) + g^T(x - x^*) \iff g \in N_\Omega(x^*).$$

于是有以下定理。

定理 1.2. *假定 Ω 为闭凸集，f 为连续可微函数。如果 x^* 为问题(1.1)的局部最优解，则成立*

$$-\nabla f(x^*) \in N_\Omega(x^*).$$

证明. 根据无约束优化 □

定理 1.3. *假定 Ω 为闭凸集，f 为连续可微的凸函数，则 x^* 为问题(1.1)的全局最优当且仅当*

$$-\nabla f(x^*) \in N_\Omega(x^*).$$

证明. 假设 $-\nabla f(x^*) \in N_\Omega(x^*)$。根据凸性，我们有对于所有的 $y \in \Omega$ 满足

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

其中最后一个不等式来自于假设 $-\nabla f(x^*) \in N_\Omega(x^*)$ 以及 $N_\Omega(x^*)$ 的定义。所以 x^* 为全局最优解。

现在假定 $-\nabla f(x^*) \notin N_\Omega(x^*)$。则存在 $y \in \Omega$ 满足 $-\nabla f(x^*)^T(y - x^*) > 0$。我们就可以得到一个可行方向 $y - x^*$ 使得 $f(x^* + \alpha(y - x^*)) < f(x^*)$ 对于充分小的 α 都成立。这说明 x^* 并不是局部极小点。矛盾。 □

现在考虑一般的非线性约束优化问题

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E}; \\ & c_i(x) \leq 0,\ i \in \mathcal{I}. \end{aligned} \tag{1.2}$$

这里假定 $c_i, i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ 一阶连续可微。我们记可行集 $\Omega = \{x \mid c_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E}; c_i(x) \leq 0,\ i \in \mathcal{I}\}$。定义问题的 Lagrange 函数为

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

约束优化的最优性刻画和无约束优化的最优性刻画是可以类比的。对于无约束优化，我们只需要关心下降方向，如果在一个点处（在 $\mathbb{R}_n$ 中）找不到可以下降的方向，我们就可以认为这个点达到局部极小。然而对于约束优化，我们并不需要在所有方向都无法下降。因为有些方向会使得我们离开可行域，变得不可行，这些方向即使是下降的，对于我们的问题也是没有意义的。所以我们只关心那些使得我们保持可行的方向上，目标函数是否能够带来下降即可。

定义 1.4 (可行方向)**.** 向量 $w \neq 0$ 称为 Ω 的可行方向，如果存在 $\epsilon > 0$ 使得线段 $\{x + \tau w \mid 0 \leq \tau \leq \epsilon\}$ 全部在 Ω 内。这样方向的集合记为 F。

但是这样的定义，对于有些问题，是不存在可行方向的。所以我们需要以下更宽泛的定义。基于此，我们先定义以下“序列可行方向集/切锥”（limiting feasible direction set/tangent cone）和“序列可行方向/切方向”（limiting feasible direction/tangent）的定义。

定义 1.5 (序列可行方向，切方向)**.** 给定集合 Ω 及其内一点 $x^* \in \Omega$。如果有可行序列 $\{z^k\} \to x$ 和正数序列 $\{t_k\} \to 0$，使得

$$\lim_{k \to \infty} \frac{z^k - x^*}{t_k} = d, \tag{1.3}$$

则 d 被称为序列可行方向。在 x^* 处的所有切向量集合被称为切锥（序列可行方向集），记为 $T_\Omega(x^*)$。

根据锥的定义，很明显能看出如上定义的切锥的确是一个锥。切锥的定义并不需要约束集合 Ω 必须要表述为如(1.2)中的那种形式。所以它对于约束集合是一个几何的刻画，而不是一种代数的刻画。而(1.3)的一个等价描述即为

$$z^k = x^* + t_k d + o(t_k). \tag{1.4}$$

另外对序列可行方向的一个等价定义为。给定集合 Ω 及其内一点 $x^* \in \Omega$。如果有可行序列 $\{z^k\} \to x$ 和正数序列 $\{t_k\} \to 0$ 以及定长度的可行方向序列 $\{d^k\}$ 满足 $\|d^k\| = \tau > 0$，使得

$$x^k - x^* = t_k d^k, \tag{1.5}$$

则 $\{d^k\}$ 的聚点被称为切方向（序列可行方向）。

另外，我们有以下结果。

性质 1.6. *切锥为闭集合，并且满足*

$$\text{cl } F(x) \subset T_\Omega(x). \tag{1.6}$$

证明. 考虑序列 $\{d^k\} \subset T_\Omega(x)$，并且假设 $\{d^k\} \to d$，现在证明 $d \in T_\Omega(x)$。因为 $d^k \in T_\Omega(x)$，存在 $x^k \in \Omega$ 以及 $\lambda_k > 0$，使得 $\|x^k - x\| < 1/k$ 并且 $\|\lambda_k(x^k - x) - d^k\| < 1/k$。那么，显然 $\{x^k\} \to x$，并且由三角不等式，可得 $\|\lambda_k(x^k - x) - d\| \leq \|\lambda_k(x^k - x) - d^k\| + \|d^k - d\|$，并且右端的两项收敛到 0。所以 $T_\Omega(x)$ 为闭集合。

另外，根据定义，显然有 $F(x) \subset T_\Omega(x)$。故命题关系成立。 □

极端案例的切方向 T_Ω 永远是非空的，因为 $0 \in T_\Omega$。对于 $\Omega = \mathbb{R}^n$，$T_\Omega = \mathbb{R}^n$。如果 x 为 Ω 的内点，则有 $T_\Omega(x) = \mathbb{R}^n$。如果 Ω 为单点集 $\Omega = \{a\}$，则 $T_\Omega(x) = \{0\}$；其实只要 x 为 Ω 的孤立点，则不存在可行的序列 $x^\nu \to x$ 除非 $x^\nu \equiv x$。

盒子的切方向 如果 $I = I_1 \times \ldots \times I_n$，其中 I_j 为 $\mathbb{R}$ 中的区间，则在 $x = (x_1, ..., x_n) \in X$（即每个 $x_j \in I_j$），成立

$$T_I(x) = T_{I_1}(x_1) \times \ldots \times T_{I_n}(x_n),$$

其中

$$T_{I_j}(x_j) = \begin{cases} [0, \infty) & \text{如果 } x_j \text{ 为区间 } I_j \text{ 的左端点} \\ (-\infty, 0] & \text{如果 } x_j \text{ 为区间 } I_j \text{ 的右端点} \\ (-\infty, \infty) & \text{如果 } x_j \text{ 在区间 } I_j \text{ 的内部} \\ [0, 0] & \text{如果 } I_j \text{ 为单点区间，并且包含 } x_j \end{cases}$$

非负卦限的切方向 $X = \mathbb{R}^n_+$ 为一个盒子，为区间 $I_j = [0, \infty)$ 的笛卡尔积。在这种情况下，$w \in T_\Omega(x)$ 当且仅当 $w_j \geq 0$ 对于所有的 $x_j = 0$ 成立。如果 $x_j > 0$，则 w_j 可以为任意实数。

凸集合的切方向 Ω 为凸集。则 [1, Theorem 6.9]

$$T_\Omega(x) = \text{cl}\{s(y - x) \mid y \in \Omega, s \geq 0\}.$$

利用切锥的定义，我们就可以给出约束优化的一个一般性的必要性条件刻画。相比于无约束优化的最优性条件（在局部极小点处找不到下降方向），此时的条件应该是我们在那些“能保持可行”的方向里面找不到下降方向。也就是说，在切锥里不存在下降方向。这一结论 [4] 总结在下面的定理中。

定理 1.7 (几何必要最优性条件)**.** *假设可行点 x^* 是问题(1.2)的局部极小点，则有*

$$\nabla f(x^*)^T d \geq 0, \quad \forall d \in T_\Omega(x^*).$$

证明. 反证法。假设切锥里存在有一个方向 d 使得 $\nabla f(x^*)^T d < 0$。那么令 $\{z^k\}$ 和 $\{t_k\}$ 为切锥定义1.5里所指的序列。那么我们有

$$
\begin{aligned}
f(z^k) =& f(x^*) + (z^k - x^*)^T \nabla f(x^*) + o(\|z^k - x^*\|) \\
=& f(x^*) + t_k \nabla f(x^*)^T d + o(t_k),
\end{aligned}
$$

其中第二个等式由(1.4)可得。由于 $\nabla f(x^*)^T d < 0$，一阶项最终要比余量项占优，使得对于充分小的 t_k，

$$f(z^k) < f(x^*) + \tfrac{1}{2} t_k \nabla f(x^*)^T d, \quad \forall \text{充分大的} k.$$

因此，在 x^* 任意的邻域内，我们都能找到可行点使得该处的目标函数值比 $f(x^*)$ 要严格小，这和 x^* 是局部极小矛盾。 □

如果我们对于一般非凸情况也依然定义所谓的法锥（normal cone），

$$N_\Omega(x^*) = \{v \mid v^T d \le 0, \quad \forall d \in T_\Omega(x^*)\}.$$

显然，这样定义下的法锥是切锥的“极锥”。另外，根据上述凸集合切锥的定义，显然上述对法锥定义的拓展对于凸的情况依然等价于凸集合切锥的定义。于是我们可以统一的把凸和非凸情况下的几何最优性条件写作

$$-\nabla f(x^*) \in N_\Omega(x^*).$$

1.1 Karush-Kuhn-Tucker 必要条件

切锥的概念虽然可以让我们能够统一的刻画局部极小点。然而它的定义却导致我们一般很难对切锥有一个具体的刻画。即便是想获取切锥里的某一个元素，都需要选取序列和求极限。鉴于此，我们尝试用更简单的方式来刻画我们关心的那些使得我们能够保持可行的方向。对于一般约束的问题(1.2)，我们就引入如下定义的“线性化可行方向集”（linearized feasible direction set）的定义。

定义 1.8 (线性化可行方向集)**.** 给定问题(1.2)的可行点 x 以及积极集 $\mathcal{A}(x)$，在 x 处的线性化可行方向集 $F(x)$ 定义为

$$\mathcal{F}(x) = \left\{ d \in \mathbb{R}^n \;\middle|\; \begin{array}{l} d^T \nabla c_i(x) = 0, \forall i \in \mathcal{E}, \\ d^T \nabla c_i(x) \le 0, \forall i \in \mathcal{A}(x) \end{array} \right\}.$$

线性化可行方向集又被称为线性化锥（linearized cone）。相比起切方向和切锥，线性化可行方向集合的刻画就具有可操作性，至少通过求解一个线性规划，即可得到一个线性化可行方向。假如在问题(1.2)的局部极小点处，我们可以利用线性化可行方向集合，有类似几何最优性条件定理(1.7)一样的结论：

$$\text{猜测：在局部极小点 } x^* \text{ 处成立 } \nabla f(x^*)^T d \ge 0, \quad \forall d \in \mathcal{F}(x^*). \tag{1.7}$$

那么根据 Farkas 引理[1]，以下的这两个系统有且只有一个有解（也就是不能同时有解，也不能同时无解）

$$
\begin{aligned}
&\text{系统 1：} \nabla f(x)^T d < 0, \quad d \in \mathcal{F}(x); \\
&\text{系统 2：} \nabla f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x)} \nabla c(x) \lambda = 0, \lambda_i \ge 0, i \in \mathcal{A}(x).
\end{aligned}
\tag{1.8}
$$

从而，条件(1.7)等价于系统 1 中的条件无解，这意味着系统 2 中的条件成立，似乎我们就已经得到了一个一阶必要最优性条件来刻画局部极小点。

记 f 在 x^* 处的下降方向为

$$\mathcal{D}(x^*) = \{d \in \mathbb{R}^n \mid \nabla f(x^*)^T d < 0\}.$$

[1]该引理的介绍见下一节，这里暂且跳过。

几何最优性条件为 $\mathcal{D}(x^*)\cap T_\Omega(x^*)=\emptyset$，(1.7) 等价于 $\mathcal{D}(x^*)\cap\mathcal{F}(x^*)$。然而事实上，在局部解处后者通常并不能得到满足，除非做出以下的假定。

$$\boxed{\mathcal{D}(x^*)\cap\mathcal{F}(x^*)=\mathcal{D}(x^*)\cap T_\Omega(x^*).} \tag{$\mathcal{CQ}$}$$

如果对于某些问题，假设($\mathcal{CQ}$)成立，那么我们就可以由定理1.7和上面所给出的 Farkas 引理，知道在问题(1.2)的极小点处，(1.8)中的系统 2 必有解。于是就得到如下的一阶必要最优性条件，也就是所谓的 Karush-Kuhn-Tucker（KKT）条件。

定理 1.9 (KKT 条件)**.** *假定 x^* 为问题(1.2)的局部极小点，并且在 x^* 处正则性条件成立。则存在乘子 $\lambda_i, i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}$ 使得 (x^*,λ^*) 满足以下条件:*

$$\begin{aligned}
\nabla_x L(x,\lambda)=\nabla f(x)+\sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}\lambda_i\nabla c_i(x)&=0, && \text{稳定性条件，} \textit{stationarity}\\
c_i(x)&=0, \quad i\in\mathcal{E} && \text{原可行条件，} \textit{primal feasibility}\\
c_i(x)&\le 0, \quad i\in\mathcal{I} && \text{原可行条件，} \textit{primal feasibility}\\
\lambda_i&\ge 0, \quad i\in\mathcal{I} && \text{对偶可行条件，} \textit{dual feasibility}\\
\lambda_i c_i(x)&=0, \quad i\in\mathcal{I} && \text{互补条件，} \textit{complementarity.}
\end{aligned} \tag{1.9}$$

根据上面的定理，对于可行的 x^*，如果其为局部极小点且正则性条件满足，则必满足

$$\nabla f(x^*)+\sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{A}(x^*)}\lambda_i\nabla c_i(x^*)=0;\quad \lambda_i\ge 0, i\in\mathcal{A}(x^*) \tag{1.10}$$

如果是凸规划，则上述条件如果成立，则意味着得到全局最优解，也就是该条件是充分的。

定理 1.10 (凸规划一阶充分性条件)**.** *如果问题(1.2)中的函数 f, $c_i, i\in\mathcal{I}$ 为凸函数，且 $c_i, i\in\mathcal{E}$ 为仿射函数，如果在 (x^*,λ^*) 为 KKT 点，则 x^* 为原问题的全局最优解。*

证明. 令 $x^k\neq x^*$ 为任意的可行解，则由于 $c_i(x^k)=c_i(x^*)+\nabla c_i(x^*)^T(x^k-x^*), i\in\mathcal{E}$ 以及 $\lambda_i^*\ge 0, c_i(x^*)\le 0$, $i\in\mathcal{I}$，利用 KKT 条件以及问题的凸性，得到

$$f(x^k)\ge f(x^k)+\sum_{i\in\mathcal{A}\cup\mathcal{I}}\lambda_i^* c_i(x^k)\ge f(x^*)+\nabla f(x^*)^T(x^k-x^*)+\sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}\lambda_i^*(c_i(x^*)+(x^k-x^*)^T\nabla c_i(x^*)).$$

由 KKT 条件可知 $\nabla f(x^*)+\sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}\lambda_i^*\nabla c_i(x^*)=0$。所以 $f(x^k)\ge f(x^*)$。 □

1.2 Fritz-John 必要性条件 *

在上一小节中我们根据问题的几何性质得到了最优解的 KKT 必要条件，但这一条件要求约束满足一定的性质。在这一小节中我们给出另外一种形式的必要性条件，也就是 Fritz-John 必要性条件，它由 John 在 1948 年的时候提出 [5]。

定理 1.11 (Fritz-John 必要条件)**.** *假定 x^* 为问题(1.2)的局部极小点。则存在 ρ^* 以及乘子 $\lambda_i^*, i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}$ 使得 (x^*,λ^*) 满足以下条件:*

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

(2) $\rho^*\ge 0$, $\lambda_i^*\ge 0, \quad i\in\mathcal{I}.$

(3) $\lambda_0^*, \lambda_i^*, i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}$ *不全为 0*

(4) *对于 x^* 的任意邻域 N，存在 $x\in N$ 使得 $\lambda_i^* c_i(x)>0$ 对于任何的 $\lambda_i\neq 0, i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}$。另外，如果 $\lambda_i^*, i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}$ 不全为 0，则这样的 x 可以选取到使得 $f(x)<f(x^*)$ 满足。*

注 1.12. (1) Fritz-John 条件的第（4）条事实上蕴含了互补条件。注意 x^* 是可行的，满足 $c_i(x^*) \le 0$, $i \in \mathcal{I}$。如果 $\lambda_i^* > 0, c_i(x^*) < 0, i \in \mathcal{I}$，则显然对于 x^* 充分小的邻域，并不能保证 $\lambda_i^* c_i(x) > 0$。

(2) 与 KKT 条件类似，我们可以将 Fritz-John 条件概括为

$$\begin{aligned} \rho\nabla f(x) + \sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}} \lambda_i \nabla c_i(x) = 0,& \\ c_i(x) = 0, \quad & i \in \mathcal{E} \\ c_i(x) \le 0, \quad & i \in \mathcal{I} \\ \rho \ge 0, \lambda_i \ge 0, \quad & i \in \mathcal{I} \\ (\rho, \lambda) \ne 0 & \\ \lambda_i c_i(x) = 0, \quad & i \in \mathcal{I}. \end{aligned} \tag{1.11}$$

可见，只要有 $\rho \ne 0$，Fritz-John 条件就等价为 KKT 条件。

下面我们给出 Fritz-John 条件的证明（参见 [6]）。

证明. 证明的思路是忽略问题中的约束，同时因为违反约束而给目标加上一个惩罚，由此得到一个无约束的优化问题，从而可以采用合适的最优化条件处理该优化问题。随着我们增加惩罚并逐渐趋向于极限，就可以逼近到原问题的最优性条件。为了实现这一思路，对于 $k = 1, 2, \ldots$，考虑如下的“惩罚”问题，

$$\begin{aligned} \min \quad & F^k(x) := f(x) + \frac{k}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}}(c_i(x))^2 + \frac{k}{2}\sum_{i\in\mathcal{I}}(c_i^+(x))^2 + \frac{1}{2}\|x - x^*\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & x \in B(x^*, \epsilon). \end{aligned} \tag{1.12}$$

这里，对于 $i \in \mathcal{I}$，$c_i^+(x) = \max\{c_i(x), 0\}$, $\epsilon > 0$ 使得邻域 $B(x^*, \epsilon)$ 中所有的可行的 x，$f(x^*) \le f(x)$。函数 $(c_i^+(x))^2$ 连续可微，其梯度为 $2c_i^+(x)\nabla c_i(x)$。这样的构造，是因为 $\frac{k}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}}(c_i(x))^2$ 为等式约束违反量的惩罚，$\frac{k}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}}(c_i^+(x))^2$ 为不等式违反量的惩罚，由于我们只对局部最小值 x^* 邻域 S 中的点感兴趣，所以引进临近项 $\frac{1}{2}\|x - x^*\|_2^2$，以使得远离 x^* 的点得到惩罚。

对于 $k = 1, 2, \ldots$，由 Weierstrass 定理可知问题(1.12)的最优解存在，记为 x^k。我们首先来证明序列 $\{x^k\}$ 收敛到 x^*。根据 F^k 的定义以及 x^* 的可行性，我们有

$$f(x^k) \le F^k(x) = f(x^k) + \frac{k}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}}(c_i(x^k))^2 + \frac{k}{2}\sum_{i\in\mathcal{I}}(c_i^+(x^k))^2 + \frac{1}{2}\|x^k - x^*\|_2^2 \le F^k(x^*) = f(x^*). \tag{1.13}$$

我们下面证明约束在 x^k 处的违反量收敛到 0。事实上，给(1.13)两边同时除以 k，得到

$$\frac{f(x^k)}{k} \le \frac{f(x^k)}{k} + \frac{1}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}}(c_i(x^k))^2 + \frac{1}{2}\sum_{i\in\mathcal{I}}(c_i^+(x^k))^2 + \frac{1}{2k}\|x^k - x^*\|_2^2 \le \frac{f(x^*)}{k}. \tag{1.14}$$

由于序列 $\{f(x^k)\}$ 在 $B(x^*, \epsilon)$ 上有界，所以我们有 $\lim\limits_{k\to\infty} \frac{f(x^k)}{k} = 0$。由(1.14)得到

$$\lim_{k\to\infty}\left(\frac{f(x^k)}{k} + \frac{1}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}}(c_i(x^k))^2 + \frac{1}{2}\sum_{i\in\mathcal{I}}(c_i^+(x^k))^2 + \frac{1}{2k}\|x^k - x^*\|_2^2\right) = 0.$$

此外，由于 $\|x^k - x^*\|_2 \le \epsilon, k = 1, 2, \ldots$，我们有 $\lim\limits_{k\to\infty} \|x^k - x^*\|_2^2/(2k) = 0$。由此得到

$$\lim_{k\to\infty} \frac{k}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}}(c_i(x^k))^2 = 0, \quad \lim_{k\to\infty} \frac{k}{2}\sum_{i\in\mathcal{I}}(c_i^+(x^k))^2 = 0. \tag{1.15}$$

设 $\hat{x}$ 为序列 $\{x^k\}$ 的聚点。注意这样的点必然存在，因为 $\{x^k\} \subset B(x^*, \epsilon)$。由(1.15)可知，$c_i(\hat{x}) = 0, i \in \mathcal{E}$ 以及 $c_i(\hat{x}) \le 0, i \in \mathcal{I}$。并且根据(1.13)我们有

$$f(x^k) + \frac{1}{2}\|x^k - x^*\|_2^2 \le f(x^*).$$

由于 f 的连续性，就有当 $k\to\infty$，可得

$$f(x^*)+\frac{1}{2}\|\hat{x}-x^*\|_2^2\leq f(x^*).$$

而另一方面，由于 $\hat{x}\in B(x^*,\epsilon)$，我们有 $f(x^*)\leq f(\hat{x})$，这就意味着 $\|\hat{x}-x^*\|_2^2=0$。由于 $\hat{x}$ 是 $\{x^k\}$ 的任一聚点，这说明序列 $\{x^k\}$ 收敛到 x^*。特别的，对于充分大的 k，x^k 是 $B(x^*,\epsilon)$ 的内点，这意味着 x^k 是 F^k 的一个无约束优化的局部最小点。所以对于充分大的 k，我们可以应用无约束优化的必要条件得到

$$0=F^k(x^k)=\nabla f(x^k)+\sum_{i\in\mathcal{E}}(kc_i(x^k))\nabla c_i(x^k)+\sum_{i\in\mathcal{I}}(kc_i^+(x^k))\nabla c_i(x^k)+x^k-x^*. \tag{1.16}$$

对于充分大的 k，令

$$\rho^k=\sqrt{1+\sum_{i\in\mathcal{E}}(kc_i(x^k))^2+\sum_{i\in\mathcal{I}}(kc_i^+(x^k))^2}$$

以及

$$u^k=\frac{1}{\delta^k}\geq 0;\quad \lambda_i^k=\frac{kc_i(x^k)}{\delta^k}\geq 0, i\in\mathcal{E};\quad \lambda_i^k=\frac{kc_i^+(x^k)}{\delta^k}\geq 0, i\in\mathcal{I}. \tag{1.17}$$

在(1.16)两边同时除以 δ^k 可得

$$\rho^k\nabla f(x^k)+\sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}\lambda_i^k\nabla c_i(x^k)+\frac{1}{\delta^k}(x^k-x^*)=0. \tag{1.18}$$

通过 δ^k 的构造，我们可知

$$(\rho^k)^2+\sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}(\lambda_i^k)^2=1. \tag{1.19}$$

也就是说序列 $\{(\rho^k,\lambda^k)\}$ 有界。于是可以通过合适的选取收敛子序列，得到序列的某个聚点 (ρ,λ)。这样定理的 (1)(2)(3) 就得到了证明。

为了证明定理的 (4) 部分，设 $\bar{\mathcal{E}}=\{i\in\mathcal{E}\mid\lambda_i\neq 0\}$ 以及 $\bar{\mathcal{I}}=\{i\in\mathcal{I}\mid\lambda_i>0\}$，则对于充分大的 k，我们必有 $\lambda_i\lambda_i^k>0, i\in\bar{\mathcal{E}}\cup\bar{\mathcal{I}}$。结合(1.17)，说明对于所有的 $i\in\bar{\mathcal{E}}\cup\bar{\mathcal{I}}$，成立 $\lambda_i c_i(x^k)>0$。注意 x^* 的每个邻域一定包含着序列 $\{x^k\}$ 中的某个 x^k。这样就证明了全部结论。 □

1.3 约束规范

我们在 §1.1里讨论了在约束满足($\mathcal{CQ}$)的前提下，局部极小解处 KKT 条件成立；在 §1.2 里讨论了局部极小解处 Fritz-John 条件必然成立，并且当目标前面的系数 $\rho\neq 0$ 时，Fritz-John 则蜕变为 KKT 条件。我们在这一节来讨论局部极小解处的 KKT 乘子存在性，也就是保证 KKT 条件成立的充分性条件，或者说保证 Fritz-John 条件中 $\rho\neq 0$ 的充分性条件。这两种不同的视角，代表从几何视角和从代数视角来审视 KKT 乘子的存在性。

在 §1.1里的讨论里，我们可以看出，只要对于可行集（或者约束函数）施加某些性质，就可以保证正则性假设成立，进而 KKT 条件在局部极小解处存在。这种所需的性质就叫做约束规范（CQ，constraint qualification）。比如($\mathcal{CQ}$)就是一个能够保证 KKT 条件成立的很宽松的性质。我们下面来讨论什么情况下，能够保证($\mathcal{CQ}$)满足。一个理想的情况就是 $T_\Omega(x^*)=\mathcal{F}(x^*)$。然而通常情况下，这两个集合并不等价，$\mathcal{F}(x^*)$ 要比 $T_\Omega(x^*)$ 要大的多，我们并不能保证在极小点处，从 $\mathcal{F}(x^*)$ 中找不到下降方向。

性质 1.13. *考虑问题(1.2)的可行点 x^*，成立*

$$T_\Omega(x^*)\subset\mathcal{F}(x^*).$$

证明. 令 $d\in T_\Omega(x^*)$，$\{z^k\}$ 和 $\{t_k\}$ 为切锥定义1.5里所指的序列。对于 $i\in\mathcal{E}$，利用 Taylor 定理以及(1.4)，我们有

$$\begin{aligned}0&=\frac{1}{t_k}c_i(z^k)\\&=\frac{1}{t_k}[c_i(x^*)+t_k\nabla c_i(x^*)^Td+o(t_k)]\\&=\nabla c^i(x^*)^Td+\tfrac{o(t_k)}{t_k}.\end{aligned}$$

令 $k \to \infty$，即可得 $\nabla c^i(x^*)^T d = 0$。同样的，对于 $i \in \mathcal{A}(x^*)$，

$$\begin{aligned}0 &\geq \frac{1}{t_k} c_i(z^k) \\ &= \frac{1}{t_k}[c_i(x^*) + t_k \nabla c_i(x^*)^T d + o(t_k)] \\ &= \nabla c^i(x^*)^T d + \tfrac{o(t_k)}{t_k}.\end{aligned}$$

令 $k \to \infty$，我们有 $\nabla c^i(x^*)^T d \leq 0$。综上，我们证明了 $d \in \mathcal{F}(x^*)$。 □

所以为了考察对偶乘子的存在性，我们可以强制假设在 x^* 处 $\mathcal{F}(x^*) = T_\Omega(x^*)$ 成立，这就是一个约束规范，在 Kuhn 和 Tucker 在 1951 年证明 KKT 条件的时候，就假设该条件成立。该条件又被称为所谓的 Abadie CQ，这是由法国数学家 Jean Abadie 命名 [2]，该 CQ 有时候也被称为约束集合的正规性（regular）[3] 或者拟正规性（quasi-regular）[6]。

定义 1.14 (Abadie CQ)**.** 考虑(1.2)及其可行点 x^*，如果 $\mathcal{F}(x^*) = T_\Omega(x^*)$，则称 Abadie CQ 在 x^* 处成立。

但需要注意的是，Abadie CQ 只是保证乘子成立的充分性条件，并不是必要的。也就是说，即使 Abadie CQ 违反，依然可能有($\mathcal{CQ}$)成立。我们有以下例子。

例 1.15. *考虑* $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^2 \mid x_2 \leq x_1^3, x_2 \geq 0\}$。*考虑点* $x^* = (0,0)^T$ *以及方向* $p = (-1,0)^T \in T_\Omega$，*易见不存在可行序列满足与其方向序列收敛于* p。*因此此例中，*$T_\Omega(x^*) \neq \mathcal{F}(x^*)$。*也就是 Abadie CQ 不成立。然而考虑如下的两个优化问题*

$$\min_{x \in \Omega} x_2 \qquad \min_{x \in \Omega} x_1.$$

二者的解都是 $x^* = (0,0)^T$。*可以验证对于前者，假设*($\mathcal{CQ}$)*依然满足，所以 KKT 条件在此处满足。但对于后者，有* $(-1,0)^T \in T_\Omega(x^*) \cap \mathcal{D}(x^*)$，*然而* $\mathcal{F}(x^*) \cap \mathcal{D}(x^*) = \emptyset$，*于是 KKT 条件在此处不满足。*

如果我们能够验证 Abadie CQ 是否成立，就可以轻松得到乘子的存在性。然而此 CQ 一般来说，并不是很好验证。所以人们希望能够得到更好验证的条件，来保证乘子的存在性。常见的比如线性约束（Linear Constraint Quality，LCQ），线性无关约束规范（Linear Independent Constraint Quality，LICQ），Slater CQ 以及 Mangasarian-Fromovitz constraint qualification (MFCQ)。

定义 1.16 (MFCQ)**.** 对于(1.2)的可行点 x 存在 $d \in \mathbb{R}_n$ 使得

$$\begin{aligned}&\nabla c_i(x^*)^T d = 0,\, i \in \mathcal{E}, \\ &\nabla c_i(x^*)^T d < 0,\, i \in \mathcal{A}(x^*),\end{aligned} \tag{1.20}$$

并且 $\{\nabla c_i(x^*) \mid i \in \mathcal{E}\}$ 线性无关。则称约束在 x^* 处满足 MFCQ。

MFCQ 是比 Abadie CQ 要强的一个条件，也就是 MFCQ 成立的时候，Abadie CQ 必然成立，所以 MFCQ 能够保证 KKT 乘子的存在性。我们跳过这个结论的证明，有兴趣的可以参见 [4, Proposition 5.36]。

定理 1.17 (MFCQ $\Longrightarrow$ Abadie CQ)**.** *假设问题(1.2)在* x^* *附近一阶连续可微，则如果 MFCQ 在* x^* *处成立，则 Abadie CQ 也必然成立。*

但即使我们没有上面这个定理，也可以从代数的角度利用 Fritz-John 条件直接证明 MFCQ 成立时，KKT 乘子的存在性。

定理 1.18 (MFCQ $\Longrightarrow$ KKT)**.** *假如* x^* *为问题(1.2)的极小点，并且 MFCQ 在* x^* *处成立，则存在乘子* λ^* *使得* (x^*, λ^*) *满足 KKT 条件。*

证明. 由于存在 ρ^*, λ^* 使得 (x^*, ρ^*, λ^*) 满足 Fritz-John 条件，我们只需要证明在此时 Fritz-John 条件中 $\rho^* > 0$。我们采用反证法，假定 $\rho_* = 0$，那么必然在乘子中存在 $\lambda_i^* \neq 0$，满足

$$\sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) = 0. \tag{1.21}$$

可知在 $\mathcal{A}(x^*)$ 必然存在有这样的乘子 $\lambda_j^* > 0, j \in \mathcal{A}(x^*)$，因为否则就得到 $\sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) = 0$ 对于不全为 0 的 $\lambda_i^*, i \in \mathcal{E}$ 成立，然而这和 $\{\nabla c_i(x^*), i \in \mathcal{E}\}$ 的线性无关前提矛盾。

根据 MFCQ 的前提假设，存在 $d \in \mathbb{R}^n$ 使得(1.20)成立。所以我们有

$$\sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*)^T d + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*)^T d = \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*)^T d \le \lambda_j^* \nabla c_j(x^*)^T d < 0.$$

然而这和(1.21)矛盾。所以必有 $\rho_* > 0$。 □

MFCQ 总体来说是比 Abadie CQ 更容易验证的性质，比如可以通过求解如下的线性规划来验证

$$\begin{aligned} \min \quad & 0 \\ \text{s.t.} \quad & \nabla c_i(x^*)^T d = 0, \quad i \in \mathcal{E}, \\ & \nabla c_i(x^*)^T d \le -1, \ i \in \mathcal{A}(x^*). \end{aligned} \tag{1.22}$$

很明显，MFCQ 成立当且仅当上述的线性规划是可行的并且 $\{\nabla c_i(x^*) \mid i \in \mathcal{E}\}$ 线性无关。该线性规划的对偶问题，给出了 MFCQ 的一个对偶形式。

性质 1.19 (对偶 MFCQ)**.** *考虑问题(1.2)及其可行点 x^*。MFCQ 在 x^* 成立当且仅当 $u_i = 0, i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x^*)$ 是下面系统的唯一解*

$$\sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x^*)} u_i \nabla c_i(x^*) = 0, \quad u_i \ge 0. \tag{1.23}$$

证明. 线性规划(1.22)的对偶问题为

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} u_i \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x^*)} u_i \nabla c_i(x^*) = 0 \\ & u_i \ge 0, i \in \mathcal{A}(x^*). \end{aligned} \tag{1.24}$$

此线性规划问题是可行的（所有变量为 0 即为可行解）。所以根据线性规划的强对偶，所以(1.22)可行当且仅当(1.24)的最优值有限（具体的说，最优值取值应为 0，这是因为问题(1.22)的目标恒为 0）。当 MFCQ 成立时，显然对于(1.24)来说，$u_i = 0, i \in \mathcal{A}(x^*)$（根据强对偶），$u_i = 0, i \in \mathcal{E}$（因为 $\nabla c_i(x^*), i \in \mathcal{E}$ 线性无关）。反之，如果(1.24)只有唯一解为 0，可以直接得到 $\nabla c_i(x^*), i \in \mathcal{E}$ 线性无关，并且(1.22)可行，也就是 MFCQ 成立。 □

MFCQ 成立的时候，不但能推出对偶乘子是存在的，而且还能推出乘子即使不唯一，乘子的集合也是有界的。

定理 1.20 (MFCQ $\Longrightarrow$ 乘子集合有界)**.** *假定 x^* 为问题(1.2)的局部极小点，并且 KKT 条件在 x^* 成立，令*

$$\Lambda(x^*) := \left\{ \lambda \;\middle|\; \begin{array}{r} \nabla_x L(x, \lambda) = \nabla f(x) + \displaystyle\sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i \nabla c_i(x) = 0, \\ \lambda_i \ge 0, \quad \lambda_i c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{I} \end{array} \right\}.$$

则 $\Lambda(x^*)$ 为紧集当且仅当 MFCQ 在 x^* 成立。

证明. (⇒) 如果 MFCQ 在 x^* 不成立，根据对偶 MFCQ 条件，那么系统(1.23)存在一个非 0 解，也就是 $u_i, i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x^*)$ 不全为 0。取 $u_i = 0, i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(x^*)$，则可见对于任何 $\lambda \in \Lambda(x^*)$, $\lambda + tu \in \Lambda(x^*)$ 对于任意 $t > 0$ 都成立。

(⇐) 由于 $\Lambda(x^*)$ 非紧，那么必有乘子序列 $\{\lambda^k\} \subset \Lambda(x^*)$ 满足 $\|\lambda^j\| \to \infty$。不失一般性，我们可以假设 $\lambda_i^k / \|\lambda^k\| \to u_i^* \neq 0$ 成立（而 $\lambda_i^k \equiv 0, i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(x^*)$）。然而这样就有

$$
\begin{aligned}
u_i^* &\geq 0, \quad i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x^*), \\
u_i^* c_i(x^*) &= \lim_{k \to \infty} \frac{u_i^k c_i(x^*)}{\|u^k\|} = 0, \quad i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x^*), \\
\sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x^*)} u_i^* \nabla c_i(x^*) &= \lim_{k \to \infty} \frac{\nabla_x L(x^*, u^k)}{\|u^k\|} = 0.
\end{aligned}
$$

所以，根据 MFCQ 的对偶形式可知，MFCQ 在 x^* 处必不成立。 □

下面给出常见的线性约束（Linear Constraint Quality, LCQ），线性无关约束规范（Linear Independent Constraint Quality，LICQ）以及对于凸优化的 (Strong) Slater CQ。

定义 1.21 (LCQ, LICQ, Slater CQ)**.** 对于(1.2)的可行点 x

(1) 如果 $c_i(x), i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}$ 为线性约束，即

$$\Omega = \{x \mid a_i^T x \leq b_i, i = 1, ..., s; a_i^T x = b_i, i = s+1, ..., m.\}$$

则 LCQ 成立。（该条件有时也被叫做正规性（regular）[6]）

(2) 如果 $\{\nabla c_i(x), i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x)\}$ 线性无关，则 LICQ 成立。

(3) 假定等式约束 $c_i(x), i \in \mathcal{E}$ 都是仿射的，不等式约束 $c_i(x), i \in \mathcal{E}$ 都是凸函数，并且存在可行点使得

$$c_i(x^*) < 0, i \in \mathcal{A}(x^*).$$

则称 (Strong) Slater CQ 处成立。

这三个 CQ 都是比 MFCQ 要强的条件。我们总结在下面。

性质 1.22 (LCQ $\Longrightarrow$ Abadie CQ, LICQ $\Longrightarrow$ MFCQ, Slater CQ $\Longrightarrow$ MFCQ)**.** *考虑问题(1.2)的可行点 x^*。*

(1) 如果 LCQ 在 x^* 成立，则 $F(x^*) = T_\Omega(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$。

(2) 如果 LICQ 在 x^* 成立，则 MFCQ 也在 x^* 处成立。并且其对偶乘子还是唯一的。

(3) 如果 Slater CQ 在 x^* 成立，则 MFCQ 也在 x^* 处成立。

证明. (1) 根据定义，$F(x^*) = T_\Omega(x^*)$ 是显然的。下面证明 $T_\Omega(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$。根据多面体的线性可行方向集合的定义，对于任何的可行的 x^*，

$$\mathcal{F}(x^*) = \begin{cases} a_i^T w \leq 0 & i = 1, ..., s, \\ a_i^T w = 0 & i = s+1, ..., m. \end{cases} \tag{1.25}$$

根据性质1.13，我们只需要证明 $\mathcal{F}(x^*) \subset T_\Omega(x^*)$ 即可。对于任意的向量 $w \in \mathcal{F}$，我们可以选序列 $\{x^k\}$ 其中 $x^k = x^* + w/k$。显然这样的 x^k 都是可行的。而 $w = \lim_{k \to \infty} (x^k - x^*)/(1/k) \in T_\Omega(x^*)$ 成立。

(2) 显然当 LICQ 成立时，根据 MFCQ 的对偶形式可知，MFCQ 也必成立。因此 LICQ 是比 MFCQ 要求更强的一个条件。另外也易见，$-\nabla f(x^*)$ 在向量组 $\{\nabla c_i(x^*) \mid i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x^*)\}$ 上的分解是唯一的，也就是说乘子是唯一的。

(3) 考虑到等式约束都是线性的，不失一般性，我们可以假设他们都是线性无关的，否则我们可以删除冗余的线性等式约束，得到等价的新问题进行讨论。利用不等式的凸性，我们有

$$0 > c_i(x^*) \geq c_i(x^*) + \nabla c_i(x^*)^T(x^* - x^*) = \nabla c_i(x^*)^T(x^* - x^*), \quad i \in \mathcal{A}(x^*).$$

而对于放射等式约束，由于 x^* 可行，显然有

$$0 = \nabla c_i(x^*)^T(x^* - x^*), \quad i \in \mathcal{E}.$$

令 $d = x^* - x^*$，显然可见 MFCQ 在 x^* 满足。 □

1.4 二阶条件

像提出 KKT 条件的角度一样，我们考虑线性可行方向集合的子集合，即所谓的“临界锥”。

定义 1.23 (临界锥)**.** 考虑问题(1.2)的 KKT 点 $(x^*, \bar{\lambda})$，称以下所定义的锥为临界锥：

$$\mathcal{C}(x^*, \lambda^*) = \{w \in T_\Omega(x^*) \mid \nabla c_i(x^*)^T w = 0, \quad \forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \text{ 并且} \lambda_i^* > 0\}.$$

显然

$$w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*) \iff \begin{cases} \nabla c_i(x^*)^T w = 0, & \forall i \in \mathcal{E}, \\ \nabla c_i(x^*)^T w = 0, & \forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \text{ 并且} \lambda_i^* > 0, \\ \nabla c_i(x^*)^T w \leq 0, & \forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \text{ 并且} \lambda_i^* = 0. \end{cases}$$

并且有对于任意的 $w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$

$$\lambda_i^* \nabla c_i(x^*)^T w = 0 \quad \forall\ i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}.$$

而且，由于 KKT 条件成立，我们知道对于任意的 $w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$

$$\nabla f(x^*)^T w = \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* w^T \nabla c_i(x^*) = 0. \tag{1.26}$$

$\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$ 其实就是下面约束集合的线性可行化方向集

$$\Gamma := \begin{cases} c_i(x^*) = 0, & i \in \mathcal{E} \cup \{i \mid i \in \mathcal{A}(x^*), \lambda_i^* > 0\}, \\ c_i(x^*) \leq 0, & i \in \{i \mid i \in \mathcal{A}(x^*), \lambda_i^* = 0\} \subset \Omega. \end{cases}$$

显然 $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*) \subset T_\Omega(x^*)$。如果我们假设对于 Γ，其也满足正则性假设（regularity assumption），也就是其线性可行化方向集合等价于其切锥，

$$T_\Gamma(x^*) = \mathcal{F}_\Gamma(x^*),$$

我们就可以得到以下的二阶必要性条件。

定理 1.24 (二阶必要条件)**.** *假设 x^* 为问题(1.2)的局部极小点，且满足正则性假设 $T_\Omega(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$ 满足，则存在 Lagrange 乘子 λ^* 使得 (x^*, λ^*) 满足 KKT 条件。对于这样的 λ^*，如果 $T_\Gamma(x^*) = \mathcal{F}_\Gamma(x^*)$ 满足，则*

$$w^T \nabla^2 L(x^*, \lambda^*) w \geq 0, \quad \forall w \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*).$$

证明. 第一部分是显然的，现在我们只证明第二部分关于二阶条件部分。对于任何的 $p \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$，存在对于 Γ 的可行序列 $\{x^k\}$，$\{t_k\} \to 0$ 以及方向序列 $\{p^k\} \to p$ 满足 $\|p^k\| \equiv 1$ 并且 $\{x^k\} \subset \Gamma$ 以及 $x^k = x^* + t_k p^k$。由于 $p \in T_\Gamma(x^*)$，对于充分大的 k，必然满足 $x^k \in \Gamma$ 并且 $c_i(x^k) < 0, i \in \mathcal{I} \subset \mathcal{A}(x^*)$。所以

$$L(x, \lambda^*) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i^* c_i(x).$$

并且有 $L(x^k,\lambda^*)=f(x^k)$，$L(x^*,\lambda^*)=f(x^*)$，$\nabla_x L(x^*,\lambda^*)=0$（根据 KKT 条件）。于是利用 Lagrange 函数 $L(x,\lambda^*)$ 关于 x 在 x^* 处进行二阶展开

$$f(x^k)=L(x^k,\lambda^*)=f(x^*)+\tfrac{1}{2}t_k^2{p^k}^T\nabla_{xx}^2L(x^*,\lambda^*)p^k+o(t_k^2).$$

因为 x^* 为局部极小，所有的收敛到 x^* 的可行序列 $\{x^k\}$ 都必须满足 $f(x^k)\geq f(x^*)$ 对于充分大的 k 都成立，因此上式意味着

$$\tfrac{1}{2}{p^k}^T\nabla_{xx}^2L(x^*,\lambda^*)p^k+o(1)\geq 0.$$

取极限即可得所要结果。 □

我们也可以利用切锥的定义，对最优性做出充分性条件的刻画。critical cone grad 0

定理 1.25. *假定问题(1.2)中的函数都是二阶连续可微的。假定 (x^*,λ^*) 为问题(1.2) 的 KKT 点，并且满足*

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

对于所有满足 $d\in\mathcal{C}(x^*,\lambda^*),d\neq 0$ 成立。那么存在 $\epsilon>0$，$\nu>0$ 使得

$$f(x)\geq f(x^*)+\nu\|x-x^*\|^2$$

对于所有的 Ω 满足 $\|x-x^*\|\leq\epsilon$ 的 x 都成立。因此，x^* 为(1.2)的严格局部极小点。

证明. 假设这样的 $\epsilon>0,\nu>0$ 并不存在，那么存在序列 $\{x^k\}\subset\Omega,\{v^k\}\subset\mathbb{R}_+$ 满足 $x^k\to x^*$, $\nu^k\searrow 0$, 且

$$f(x^k)\leq f(x^*)+\nu^k\|x^k-x^*\|^2$$

对于 $k=1,2,\ldots$ 都成立。对于所有的 $x\in\Omega$，我们知道 $\lambda_i^*c_i(x^*)\leq 0,i\in\mathcal{I}$，$\lambda_i^*c_i(x^*)=0,i\in\mathcal{E}$。所以

$$L(x^k,\lambda^*)\leq f(x^k)\leq f(x^*)+\nu^k\|x^k-x^*\|^2=L(x^*,\lambda^*)+\nu^k\|x^k-x^*\|^2.$$

因此根据 Taylor 展开成立

$$f(x^k)=f(x^*)+\nabla f(x^*)^T(x^k-x^*)+o(\|x^k-x^*\|)\leq f(x^*)+\nu^k\|x^k-x^*\|^2 \tag{1.27}$$

由于 $\{x^k\}\subset\Omega$，不失一般性，我们可以令（至少可以合适的选取子序列）得到

$$d^k=\frac{x^k-x^*}{\|x^k-x^*\|}\to d\in T_\Omega(x^*)\subset\mathcal{F}(x^*).$$

在(1.27)两边同时除以 $\|x^k-x^*\|$ 并且取极限，就有 $\nabla f(x^*)^Td\leq 0$。

而另一方面，如果有 $i\in\mathcal{A}(x^*),\lambda_i>0$ 对应着 $\nabla c_i(x^*)^Td<0$。则从 KKT 条件以及 $d\in\mathcal{F}(x^*)$ 就可以得到

$$\nabla f(x^*)^Td=-\sum_{i\in\mathcal{A}(x^*)}\lambda_i^*\nabla c_i(x^*)^Td>0.$$

矛盾。所以 $i\in\mathcal{A}(x^*),\lambda_i>0$ 对应着 $\nabla c_i(x^*)^Td=0$。也就是由于 $d\in\mathcal{C}(x^*,\lambda^*)$。

现在利用 $L(x^k,\lambda^*)$ 在 x^* 处的 Taylor 展开（注意这里 $\nabla_xL(x^*,\lambda^*)=0$）

$$\begin{aligned}&L(x^*,\lambda^*)+\frac{1}{2}(x^k-x^*)^T\nabla_x^2L(x^*,\lambda^*)(x^k-x^*)+o(\|x^k-x^*\|^2)\\ \leq\ &L(x^*,\lambda^*)+\nu^k\|x^k-x^*\|^2.\end{aligned} \tag{1.28}$$

然而如果我们在(1.28)除以 $\|x^k-x^*\|^2$ 取极限，就有 $d^T\nabla_x^2L(x^*,\lambda^*)d\leq 0$, 矛盾。 □

1.5 Farkas 引理

定理 1.26 (Farkas 引理)**.** *对于 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$b \in \mathbb{R}^n$，下面两个系统有且只有一个有解。*

(I) $A^T\lambda = b, \lambda \geq 0$。

(II) $Ax \leq 0$，$b^T x > 0$。

证明. 我们可以利用线性规划的原对偶问题来讨论

$$\max_u \ 0^T u \quad \text{s.t } A^T u = b, u \geq 0 \tag{P}$$

$$\min_x \ -b^T x \quad \text{s.t. } Ax \leq 0. \tag{D}$$

现在假设 Farkas 引理中的 (I) 成立。也就是(P)可行，则其必有最优解，因为其目标恒为 0。线性规划强对偶告诉我们对偶问题(D)也必须有解，并且最优值也是 0。所以成立 $-b^T x \geq 0$，并且等式可以在某满足 $Ax \leq 0$ 的 x 处取得。也就是说 $b^T x \leq 0$ 对于所有满足 $Ax \leq 0$ 的 x 都成立。这说明引理中的（II）不成立。

另一方面，如果（I）不成立，则(P)不可行。因为 $x = 0$ 对于(D)可行，强对偶理论告诉我们 (D)肯定无（下）界。所以存在 x 满足 $Ax \leq 0$，并且 $b^T x > 0$。这说明引理中的（II）成立。 □

利用上面的引理，可以得到 Farkas 引理的另外一种形式。

定理 1.27. *对于 $B \in \mathbb{R}^n \times m$，$C \in \mathbb{R}^{n\times p}$，对于任何的 $g \in \mathbb{R}^n$，下面的两个系统*

(I) $g \in K = \{By + Cw \mid y \geq 0\}$。

(II) 存在 $d \in \mathbb{R}^n$ 使得 $g^T d < 0, B^T d \geq 0, C^T d = 0$。

有且只有一个成立。

利用该引理就可以轻松证得如定理(1.9)中的结论。

1.6 KKT 条件的力学解释与应用

物理上的平衡点以及稳定性归根结底其实是受力的平衡。如果一个物体不受力，或者说合外力为零的情况下，它的运动状态就不会发生改变。这时候我们就说它很稳定。如果受力不平衡了，那么它就处于一个不稳定的状态，那么就需要进行变速运动。这对应着我们的一阶条件。

而且二阶条件也对应着系统的稳定状态。求一个系统的稳定点，在力学上一般首先求势能函数。然后求导得一阶令导数等于 0 的时候为平衡点再次求导得二阶，二阶导数大于 0 的时候为稳定平衡，小于 0 的时候不稳定，等于 0 的时候随遇平衡。势能函数一阶导数等于零，二阶导数大于零，就是势能极小值点，也就是稳定平衡点，比如山谷，若二阶导数小于零，就是不稳定平衡点，比如山顶。

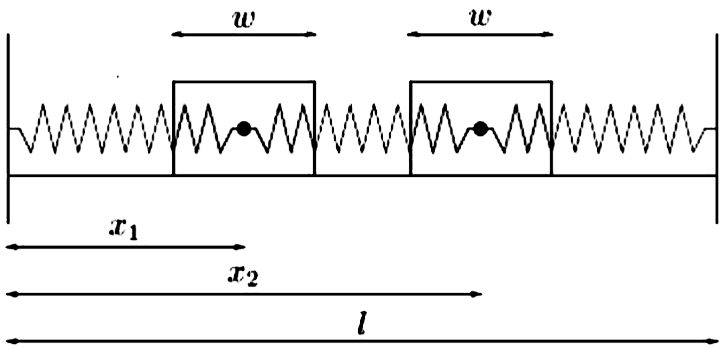

图 1: 两个滑块以及左面和右面的墙壁用弹簧连在一起，滑块的宽度为 $w > 0$，滑块不可能穿入墙内或者另外一个滑块内。

KKT 条件在力学背景下有很直观的解释（当然，这也是 Lagrange 对此进行研究的初衷）。下面我们用一个简单的例子来说明力学解释。图1所示的系统中，两个滑块以及左面和右面的墙壁用三个弹簧连载一起。两个滑块的位置用 $x = (x_1, x_2)^T \in \mathbb{R}^2$ 表示。其中 x_1 是左面滑块的位置（质心），x_2 是右面滑块的位置（质心）。左面墙壁位置设为 0，右面墙壁位置设为 l。

弹簧的弹性势能可以表示成滑块位置的函数，即

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}k_1 x_1^2 + \frac{1}{2}k_2(x_2 - x_1)^2 + \frac{1}{2}k_3(l - x_2)^2.$$

其中 $k_1, k_2, k_3 > 0$ 分别是三个弹簧的弹性系数，那么势能函数满足的约束不等式为

$$x_1 - \frac{w}{2} \geq 0,\ -x_1 + x_2 - w \geq 0,\ -x_2 - \frac{w}{2} + l \geq 0.$$

系统的平衡位置 x^* 即为势能函数在上述约束条件下的最小值点。

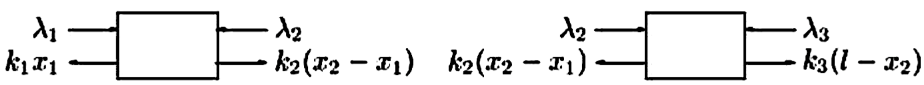

图 2: 两个滑块以及左面和右面的墙壁用弹簧连在一起，滑块的宽度为 $w > 0$，滑块不可能穿入墙内或者另外一个滑块内。

这些约束称为运动约束，代表的意义是两个滑块的宽度 $w > 0$，而且滑块不能穿入另外一个滑块内或者墙壁内。那么受力平衡点 x^* 就是二次规划

$$\begin{aligned}
\min_{x_1, x_2} \quad & \frac{1}{2}k_1 x_1^2 + \frac{1}{2}k_2(x_2 - x_1)^2 + \frac{1}{2}k_3(l - x_2)^2 \\
\text{s.t.} \quad & x_1 - \frac{w}{2} \geq 0, \\
& -x_1 + x_2 - w \geq 0, \\
& -x_2 - \frac{w}{2} + l \geq 0.
\end{aligned}$$

记该问题的 Lagrange 乘子为 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$，那么该二次规划问题的 KKT 条件由以下几部分组成：运动约束，非负约束 $\lambda_i \geq 0, i = 1, 2, 3$，互补松弛条件

$$\lambda_1(x_1 - w/2) = 0,\ \lambda_2(-x_1 + x_2 - w) = 0,\ \lambda_3(-x_2 + w/2 - l) = 0. \tag{1.29}$$

以及 Lagrange 函数的零梯度条件

$$\begin{bmatrix} k_1x_1 - k_2(x_2 - x_1) \\ k_2(x_2 - x_1) - k_3(l - x_2) \end{bmatrix} - \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} - \lambda_2 \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} - \lambda_3 \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} = 0. \tag{1.30}$$

如图2所示，施加在每个滑块上的力，包括由弹簧产生的弹力和滑块之间以及滑块和墙壁间如果接触时所产生的力，总和必为 0。该图上面一行显示的是 Lagrange 乘子，也即滑块与滑块、滑块与墙壁之间的接触力。下面一行显示了弹簧的弹力。这里的 Lagrange 乘子可以被解释为滑块与滑块、滑块与墙壁之间所产生的接触力，那么可以将等式(1.30)理解为在两个滑块上作用的力分别达到平衡。等式(1.30)中第一个等式表示作用在第一个滑块上的力的总和为 0，其中 $-k_1x_1$ 为左边的弹簧作用在左边滑块上的弹力，$k_2(x_2 - x_1)$ 为中间的弹簧所产生的弹力，λ_1 为左边墙壁所施加的接触力，$-\lambda_2$ 为右边滑块所作用的接触力。接触力必然垂直于接触面并向外（约束条件中的 $\lambda_1 \geq 0, -\lambda_2 \leq 0$ 即说明了这样的事实），并且当滑块与接触面发生接触的时候，接触力才为非零（这是互补松弛条件(1.29)中前两个等式所表示的意思）。同样的，我们也可以解释等式(1.30)中的第二个等式，互补松弛条件中最后一个等式代表的意思为如果右面的滑块和右面的墙壁没有发生接触，那么 λ_2 为 0。

在这个模型里，势能函数和约束函数都为凸函数，而且如果两面墙之间有足够的空间容纳两个滑块，即 $2w \leq l$，那么 Slater 约束规范自然成立。所以我们可以得到，系统的最优解可以由 KKT 条件给出。同样这也是系统的受力平衡点。

附录

性质 1.28. 设函数 $h : \to \mathbb{R}_+$ 为 $h(x) = (max\{0, x\})^2$，则 h 连续可微，且 $h'(x) = 2\max\{0, x\}$。

证明. 设 $x, t \in \mathbb{R}$，则

$$\frac{h(x+t) - h(x)}{t} = \frac{(\max\{0, x+t\} + \max\{0, t\})^2}{t} = \begin{cases} 2x + t, & x > 0, -|x| \leq t \leq |x|, \\ 0, & x < 0, -|x| \leq t \leq |x|, \\ (\max\{0, t\})^2/t, & x = 0. \end{cases}$$

于是有

$$\lim_{t \to 0^+} \frac{h(x+t) - h(x)}{t} = \lim_{t \to 0^-} \frac{h(x+t) - h(x)}{t} = \begin{cases} 2x, & x > 0 \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

这也就证明了 $h'(x) = 2\max\{0, x\}$，并且可见 $h'(x)$ 是连续的。 □

参考文献

[1] Rockafellar, R. Tyrrell, and Roger J-B. Wets. Variational analysis. Vol. 317. *Springer Science & Business Media*, 2009.

[2] C. Geiger, C. Kanzow: Theory and numerics of restricted optimization tasks . Springer, 2002. ISBN 3-540-42790-2.

[3] J. V. Burke, University of Washington, Math 516, Lecture Notes, 2017. Available from: https://sites.math.washington.edu/ burke/crs/516/notes/.

[4] Andréasson, Niclas, Anton Evgrafov, and Michael Patriksson. An introduction to continuous optimization: foundations and fundamental algorithms. Courier Dover Publications, 2020.

[5] John F. (2014) Extremum Problems with Inequalities as Subsidiary Conditions. In: Giorgi G., Kjeldsen T. (eds) Traces and Emergence of Nonlinear Programming. Birkhäuser, Basel.

[6] D. P. Bertsekas. Nonlinear Programming. Athena Scientific, Belmont, Mas- sachusetts, second edition, 1999.

[7] Rockafellar, Ralph Tyrell. Convex analysis. Princeton university press, 2015.

[8] Hiriart-Urruty, Jean-Baptiste. "On optimality conditions in nondifferentiable programming." Mathematical Programming 14.1 (1978): 73-86.

[9] Luenberger, David G. Optimization by vector space methods. John Wiley & Sons, 1997.