凸优化笔记: 对偶理论

Apple Zhang

2022年9月9日

1 基本概念

定义一个优化问题 (不一定是凸问题) 为:

$$p^* = \min_{\mathbf{x}} f_0(\mathbf{x})$$
s.t. $f_i(\mathbf{x}) \le 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$

$$h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

$$(1)$$

其中, p^* 表示该问题的最优值. 定义该问题的**定义域**为

$$\mathcal{D} = \left(\bigcap_{i=0}^{m} \operatorname{dom} f_{i}\right) \cap \left(\bigcap_{i=1}^{n} \operatorname{dom} h_{i}\right). \tag{2}$$

可行域 为满足约束条件的 x 的集合.

$$\mathcal{F} = \{ \mathbf{x} \in \mathcal{D} \mid f_i(\mathbf{x}) \le 0, \ i = 1, 2, \dots, m, \ h_i(\mathbf{x}) = 0, \ i = 1, 2, \dots, n \}.$$
 (3)

特别地,当 f_0, f_1, \dots, f_m 都是凸函数 (convex function)、 h_i 均为仿射函数时 (affine function),则 (1) 是一个凸问题.

定义 1. 优化问题 (1) 的拉格朗日函数定义为:

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu}) = f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^n \nu_i h_i(\mathbf{x}). \tag{4}$$

定义 2. 定义拉格朗日函数 $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu})$ 的对偶函数为:

$$g(\lambda, \nu) = \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} L(\mathbf{x}, \lambda, \nu). \tag{5}$$

对于对偶函数,其具有以下性质.

性质 1. 对于任何优化问题, 其对偶问题 $g(\lambda, \nu)$ 都是凹函数.

证明. 对任意 $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$, $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu})$ 关于 $\boldsymbol{\lambda}$ 和 $\boldsymbol{\nu}$ 是仿射函数,所以对偶函数 $g(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu})$ 关于 $(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu})$ 的 逐点下确界是凹函数.

性质 2. 对任意 $\lambda_i \geq 0$ $(i=1,2,\cdots,m)$ 和 $\nu \in \mathbb{R}^n$, 对偶函数是原问题最优值的下界,即

$$g(\lambda, \nu) \le p^*. \tag{6}$$

证明. 对原问题 (1) 的最优解 \mathbf{x}^* , 有 $f_i(\mathbf{x}^*) \leq 0$ 和 $h_i(\mathbf{x}^*) \leq 0$. 因此

$$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^{n} h_i(\mathbf{x}^*) = 0.$$
 (7)

从而拉格朗日函数满足:

$$L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu}) = f_0(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^n \lambda_i f_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^n h_i(\mathbf{x}^*) \le f_0(\mathbf{x}^*).$$
(8)

因此

$$g(\lambda, \nu) = \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} L(\mathbf{x}, \lambda, \nu) \le L(\mathbf{x}^*, \lambda, \nu) \le f_0(\mathbf{x}^*) = p^*.$$
(9)

根据对偶函数,定义原问题的Lagrange 对偶问题为

定义 3. 问题 (1) 的 Lagrange 对偶问题 (或简称对偶问题) 定义为

$$d^* = \max_{\lambda, \nu} g(\lambda, \nu), \quad \text{s.t. } \lambda \ge 0.$$
 (10)

其中, d^* 表示对偶问题的最优值.

根据性质 2, 可知 $d^* \leq p^*$, 该性质称为**弱对偶性**.

2 强对偶性

如果等式

$$d^* = p^*, (11)$$

成立,则称强对偶性成立. 一般情况下,强对偶性不一定成立. Slater 条件给出了强对偶性的一个充分不必要条件.

定理 1. 如果原问题是凸问题, 若存在一点 $x \in \text{relint } D$ 使得

$$f_i(\mathbf{x}) < 0 \ (i = 1, 2, \dots, m), \quad h_i(\mathbf{x}) = 0 \ (i = 1, 2, \dots, n).$$
 (12)

以上条件称为 Slater 条件,若原问题是凸问题且满足 Slater 条件,则强对偶性成立. 若 $f_i(\mathbf{x})$ 都是仿射函数,则 Slater 条件可以改为:存在 $\mathbf{x} \in \mathbf{relint} \mathcal{D}$ 使得

$$f_i(\mathbf{x}) \le 0 \ (i = 1, 2, \dots, m), \quad h_i(\mathbf{x}) = 0 \ (i = 1, 2, \dots, n).$$
 (13)

并非所有凸问题都满足 Slater 条件,但满足该条件的凸问题占绝大多数. 因此一般认为我们能见到的凸问题都满足强对偶性. 另外 Slater 条件是强对偶性的充分不必要条件,因此不满足该条件的优化问题也可能有强对偶性.

3 鞍点解释

3.1 鞍点

对于函数 f(w,z), 其中 $w \in W$ 、 $z \in Z$, 其总是满足极大极小不等式, 即:

$$\max_{z \in Z} \min_{w \in W} f(w, z) \le \min_{w \in W} \max_{z \in Z} f(w, z). \tag{14}$$

事实上,

$$\min_{w \in W} f(w, z) \le f(w, z) \le \max_{z \in Z} f(w, z) \tag{15}$$

则对任意 $w \in W$ 和 $z \in Z$ 有

$$\min_{w \in W} f(w, z) \le \max_{z \in Z} f(w, z) \tag{16}$$

因此无论 w,z 如何取值, 左侧的最大值总是小于右侧的最小值, 即

$$\max_{z \in Z} \min_{w \in W} f(w, z) \le \min_{w \in W} \max_{z \in Z} f(w, z).$$

如果 (14) 中的等号可以取到,即

$$\max_{z \in Z} \min_{w \in W} f(w, z) = \min_{w \in W} \max_{z \in Z} f(w, z)$$
(17)

则称 f(w,z) 具有鞍点性质, (w,z) 是函数 f 的鞍点.

定义 4. 对于函数 f(w,z), 若存在 $\tilde{w} \in W$ 以及 $\tilde{z} \in Z$ 满足

$$f(\tilde{w}, z) \le f(\tilde{w}, \tilde{z}) \le f(w, \tilde{z}),\tag{18}$$

则称 (\tilde{w}, \tilde{z}) 为鞍点.

不等式 (18) 表明 $f(w, \tilde{z})$ 在 \tilde{w} 取得最小值, $f(\tilde{w}, z)$ 在 \tilde{z} 取得最大值:

$$\min_{w \in W} f(w, \tilde{z}) = f(\tilde{w}, \tilde{z}) = \max_{z \in Z} f(\tilde{w}, z). \tag{19}$$

3.2 强对偶性的鞍点解释

为了方便讨论,本节假设原问题中不存在等式约束,即

$$p^* = \min_{\mathbf{x}} f_0(\mathbf{x})$$
s.t. $f_i(\mathbf{x}) \le 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$ (20)

定理 2. 原问题 (20) 的最优值 p^* 等于:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \max_{\lambda \ge \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \lambda). \tag{21}$$

证明. 已知对偶问题为

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^n \lambda_i f_i(\mathbf{x}).$$
 (22)

根据 $f_i(\mathbf{x})$ 的取值不同可作以下讨论:

- 若 $\forall i = 1, 2, \dots, m$ 均有 $f_i(\mathbf{x}) \leq 0$,则 $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ 关于每一个 λ_i 都为单调递减. 由此则说明 $\max_{\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = L(\mathbf{x}, \mathbf{0}) = f_0(\mathbf{x})$.
- 若 $\exists i_0$ 使得 $f_{i_0}(\mathbf{x}) > 0$,则 $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ 关于 λ_{i_0} 单调递增,因此取 $\lambda_{i_0} = +\infty$ 可以取最大值. 即 $\max_{\boldsymbol{\lambda} > \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = +\infty$.

因此有

$$\theta(\mathbf{x}) = \max_{\lambda \ge 0} L(\mathbf{x}, \lambda) = \begin{cases} f_0(\mathbf{x}), & f_i(\mathbf{x}) \le 0, i = 1, 2, \dots, m \\ +\infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$
 (23)

对于 $x \in \mathcal{D}$ 最小化 $\theta(\mathbf{x})$,由于 $f_0(\mathbf{x}) < +\infty$,则有

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \max_{\lambda \geq \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \lambda) = \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \theta(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{x}} f_0(\mathbf{x}), \quad f_i(\mathbf{x}) \leq 0, \ i = 1, 2, \cdots, m.$$
 (24)

这就说明了 (21) 的最优值等于 p^* .

根据以上的结论,可以总结以下两个式子:

$$p^* = \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \max_{\lambda > \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \lambda), \tag{25}$$

$$d^* = \max_{\lambda > 0} \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} L(\mathbf{x}, \lambda), \tag{26}$$

讨论拉格朗日函数的鞍点性质,有以下的鞍点定理.

定理 3 (鞍点定理). $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ 有鞍点 $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}})$ 是强对偶性存在,且 $\tilde{\mathbf{x}}$ 为原问题的最优解、 $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$ 为对偶问题最优解的充要条件.

证明. (\Rightarrow) 若 $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ 有鞍点 $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}})$, 则显然 $p^* = d^*$, 即强对偶性存在. 由于

$$\tilde{\mathbf{x}} = \arg\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \max_{\lambda \ge \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \lambda) = \arg\min_{\mathbf{x}} f_0(\mathbf{x}), \quad f_i(\mathbf{x}) \le 0, \ i = 1, 2, \cdots, m.$$
 (27)

$$\tilde{\lambda} = \arg \max_{\lambda \ge 0} \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} L(\mathbf{x}, \lambda) = \arg \max_{\lambda \ge 0} g(\lambda). \tag{28}$$

因此 $\tilde{\mathbf{x}}$ 为原问题的最优解、 $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$ 为对偶问题最优解.

 (\Leftarrow) 若已知 $\tilde{\mathbf{x}}$ 是原问题最优解, $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$ 为对偶问题最优解,且强对偶性存在,则有

$$f_0(\tilde{\mathbf{x}}) = g(\tilde{\boldsymbol{\lambda}}) \tag{29}$$

$$= \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \left\{ f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^n \tilde{\lambda}_i f_i(\mathbf{x}) \right\}, \quad \text{definition of } g(\tilde{\lambda})$$
 (30)

$$\leq f_0(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^n \tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}), \quad \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) \leq L(\tilde{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\lambda})$$
(31)

$$\leq f_0(\tilde{\mathbf{x}}), \qquad \lambda_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) \leq 0.$$
 (32)

由于等式两端 $f_0(\mathbf{x})$ 推知中间的 \leq 全部都要取等号. 因此,根据第三行可知 $f_0(\tilde{\mathbf{x}}) = L(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}})$,根据第二行和第三行可知

$$L(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}) \le L(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}).$$
 (33)

根据第三行和第四行可知 $\tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) = 0$.

$$L(\tilde{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\lambda}) = f_0(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^n \lambda_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) \le f_0(\tilde{\mathbf{x}}) = L(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}).$$
(34)

综合 (33) 和 (34) 可得

$$L(\tilde{\mathbf{x}}, \lambda) \le L(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\lambda}) \le L(\mathbf{x}, \tilde{\lambda})$$
 (35)

因此 $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}})$ 为 $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ 的鞍点.

鞍点定理说明如果强对偶性满足,则最优解是拉格朗日函数 $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ 的鞍点. 因此如果已经求得对偶问题的最优解 $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$,则原问题的最优解为

$$\tilde{\mathbf{x}} = \arg\min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}). \tag{36}$$

4 KKT 条件

对于任何优化问题

$$\min_{\mathbf{x}} f_0(\mathbf{x})$$
s.t. $f_i(\mathbf{x}) \le 0$, $i = 1, 2, \dots, m$

$$h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$
(37)

假设 f_0, f_1, \dots, f_m 以及 h_1, h_2, \dots, h_n 均可微(简称这样的问题为可微凸问题),并且对偶间隙为零(即强对偶性成立).

定义 $\mathbf{5}$ (KKT条件). 设 $\tilde{\mathbf{x}}$ 、 $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$ 和 $\tilde{\boldsymbol{\nu}}$ 为原问题和对偶问题的某一组最优解. 则该问题的 Karush-Kuhn-Tucker (KKT) 条件为

$$f_i(\tilde{\mathbf{x}}) \le 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m \tag{38}$$

$$h_i(\tilde{\mathbf{x}}) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{39}$$

$$\tilde{\lambda}_i \ge 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m$$
 (40)

$$\tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m$$
 (41)

$$\nabla_{\mathbf{x}} f_0(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i \nabla_{\mathbf{x}} f_i(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^n \tilde{\nu}_i \nabla_{\mathbf{x}} h_i(\mathbf{x}) = 0.$$
(42)

KKT 条件可以分为三个部分:

- 满足可行域,即(38),(39);
- 互补松弛,即(40),(41);
- 导数为零,即(42).

KKT 条件是重要的优化手段,如果强对偶性成立,则 KKT 条件给出了原问题最优解的必要条件.

定理 4. 对可微的任意优化问题,若强对偶性成立,则 KKT 条件是原问题取得最优解的必要条件

证明. 已知强对偶性成立,设 $\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}}$ 为原问题、对偶问题的最优解,则有

$$f_i(\tilde{\mathbf{x}}) \le 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m, \tag{43}$$

$$h_i(\tilde{\mathbf{x}}) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, n. \tag{44}$$

$$\tilde{\lambda}_i \ge 0. \tag{45}$$

以及

$$d^* = g(\tilde{\lambda}, \tilde{\nu}) = \min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \tilde{\lambda}, \tilde{\nu})$$

$$\leq L(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\lambda}, \tilde{\nu})$$

$$= f_0(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^n \tilde{\nu}_i h_i(\tilde{\mathbf{x}})$$

$$\leq f_0(\tilde{\mathbf{x}}) = p^*.$$
(46)

注意到强对偶性存在,即 $d^* = p^*$,则两个不等号都应该取等号,因此就可以推知

$$L(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}}) = \min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}}). \tag{47}$$

而又由于 $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu})$ 对 \mathbf{x} 可微, 因此其一阶最优性条件需满足:

$$\nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}}) = \nabla_{\mathbf{x}} f_0(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i \nabla_{\mathbf{x}} f_i(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^n \tilde{\nu}_i \nabla_{\mathbf{x}} h_i(\mathbf{x}) = 0.$$
 (48)

而同时,根据(46)的最后两行,得知

$$\sum_{i=1}^{m} \tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) = 0. \tag{49}$$

由于 $\tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) \leq 0$,但对每项求和却为零,说明

$$\lambda_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) = 0. \tag{50}$$

以上证明了 KKT 条件的必要性.

更进一步,对于可微凸问题,有以下的结论.

定理 5. 如果 (37) 是凸问题, 并且 f_0, f_1, \dots, f_m 以及 h_1, h_2, \dots, h_n 均可微. 则满足 KKT 条件的是原问题和对偶问题的最优解.

证明. 若已知 $\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*$ 满足 KKT 条件,则有

$$g(\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*) = \min_{\mathbf{x}} f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^n \lambda_i^* f_i(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^n \nu_i^* h_i(\mathbf{x})$$
$$= f_0(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^n \lambda_i^* f_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^n \nu_i^* h_i(\mathbf{x}^*)$$
$$= f_0(\mathbf{x}^*)$$
 (51)

其中,第一行到第二行的原因是 $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*)$ 关于 \mathbf{x} 为凸函数,且有 (42). 第二行到第三行的原因是 $\lambda_i^* f_i(\mathbf{x}^*) = 0$ 以及 $h_i(\mathbf{x}^*) = 0$. 等式 (51) 说明了问题 (37) 的对偶间隙为零(强对偶性成立),因此说明 $\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*$ 为原问题和对偶问题的最优解.

根据以上的结论容易得出:

定理 6. 对于满足 Slater 条件的可微凸问题, KKT 条件是最优性的充要条件.

因此,KKT条件对于凸优化是十分重要的.大多凸优化算法都需要查找满足KKT条件的解,从而就能找到原问题的最优解.

参考资料

- [1] Boyd S, Boyd S P, Vandenberghe L. Convex optimization [M]. Cambridge university press, 2004.
 - [2] https://www.bilibili.com/video/BV1Jt411p7jE.