

凸优化笔记: 对偶理论

Apple Zhang

2022 年 5 月 5 日

1 基本概念

定义一个优化问题 (不一定是凸问题) 为:

$$\begin{aligned} p^* = \min_{\mathbf{x}} f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } f_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \\ h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (1)$$

其中, p^* 表示该问题的最优值. 定义该问题的定义域为

$$\mathcal{D} = \left(\bigcap_{i=0}^m \text{dom } f_i \right) \cap \left(\bigcap_{i=1}^n \text{dom } h_i \right). \quad (2)$$

可行域 为满足约束条件的 \mathbf{x} 的集合.

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

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:

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

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

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

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 $g(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu})$ 都是凹函数.

证明. 对任意 $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$, $g(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu})$ 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. \square

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

$$g(\lambda, \nu) \leq p^*. \quad (6)$$

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

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

从而拉格朗日函数满足:

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

因此

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

□

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

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

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

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

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 $\mathbf{x} \in \text{relint } \mathcal{D}$ 使得

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

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 $\mathbf{x} \in \text{relint } \mathcal{D}$ 使得

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

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:

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

事实上,

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

则对任意 $w \in W$ 和 $z \in Z$ 有

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

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

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

如果 (14) 中的等号可以取到, 即

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

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

$$f(\tilde{w}, z) \leq f(\tilde{w}, \tilde{z}) \leq f(w, \tilde{z}), \quad (18)$$

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:

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

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

$$\begin{aligned} p^* &= \min_{\mathbf{x}} f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } f_i(\mathbf{x}) &\leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (20)$$

定理 2. 原问题 (20) 的最优值 p^* 等于:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \max_{\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}). \quad (21)$$

证明. 已知对偶问题为

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

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 $\max_{\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = +\infty$.

因此有

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

综合 (33) 和 (34) 可得

$$L(\tilde{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\lambda}) \leq L(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}) \leq L(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}) \quad (35)$$

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

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

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

4 KKT 条件

对于任何优化问题

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & f_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \\ & h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (37)$$

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 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

$$f_i(\tilde{\mathbf{x}}) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (38)$$

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

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

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

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

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

$$f_i(\tilde{\mathbf{x}}) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (43)$$

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

$$\tilde{\lambda}_i \geq 0. \quad (45)$$

以及

$$\begin{aligned} d^* &= g(\tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}}) = \min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}}) \\ &\leq L(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\boldsymbol{\lambda}}, \tilde{\boldsymbol{\nu}}) \\ &= f_0(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^n \tilde{\nu}_i h_i(\tilde{\mathbf{x}}) \\ &\leq f_0(\tilde{\mathbf{x}}) = p^*. \end{aligned} \quad (46)$$

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

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

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:

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

而同时, 根据 (46) 的最后两行, 得知

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

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

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

以上证明了 KKT 条件的必要性. \square

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

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

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. \square

根据以上的结论容易得出：

定理 6. 对于满足 Slater 条件的可微凸问题中，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>.