

最优化方法

Methods of Optimization

目录

第一章 基础知识

1.1 数学规划

规划论，又称数学规划，是运筹学的分支，研究在约束条件下通过分配资源寻求目标函数极值的数学方法，应用于经济管理、工程设计和过程控制等领域。其核心是建立约束条件与目标函数的数学模型，这种数学模型的一般形式为

$$\begin{aligned} \text{Opt. } & f(x_i, y_j, \xi_k) \\ \text{s.t. } & g_h(x_i, y_j, \xi_k) \leq (=, \geq) 0 \\ & h = 1, 2, \dots, m \end{aligned}$$

其中， x_i 是控制变量， y_j 是已知参数， ξ_k 是随机因素， f 是目标函数， g_h 是约束函数。

按照目标函数和自变量取值范围的不同，数学规划可分为：

- 线性规划： f, g 都是线性函数；
- 非线性规划： f, g 中有非线性函数；
- 多目标规划： f 是向量函数；
- 整数规划：决策变量 x_i 为整数；
- 动态规划：含多阶段决策过程；
- 随机规划：含有随机因子。

若记

$$S = \{\mathbf{x} \mid g_h(x_i, y_j, \xi_k) \leq (=, \geq) 0\} \subseteq \mathbb{R}^n$$

为约束集合，则这种数学模型可进一步简记为

$$(f \ S) \begin{cases} \min & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} & \mathbf{x} \in S \end{cases}$$

其中 $\mathbf{x} \in S$ 称模型 $(f \ S)$ 的可行解。

定义 1.1 （全局最优解、最优值）

若对于 $\mathbf{x}^* \in S$ ，满足 $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ ， $\forall \mathbf{x} \in S$ ，则称 \mathbf{x}^* 为 $(f \ S)$ 的全局最优解（最优解），记作 g.opt. ，简记为 opt. 。称此时的 $f(\mathbf{x}^*)$ 为 $(f \ S)$ 的最优值（最优目标函数值）。

定义 1.2 (局部最优解)

若对于 $\mathbf{x}^* \in S$, $\exists \mathbf{x}^*$ 的某邻域 $U(\mathbf{x}^*)$, 使得 $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$, $\forall \mathbf{x} \in S$, 则称 \mathbf{x}^* 为 (f, S) 的局部最优解, 记作 l.opt.,

在上述定义中, 若当 $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$ 时有严格不等式成立, 则分别称 \mathbf{x}^* 为 (f, S) 的严格全局最优解和严格局部最优解.

1.2 基本概念和符号

接下来将约定一些术语的符号表示:

- \mathbb{R}^n —— n 维欧氏空间;
- $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^\top \in \mathbb{R}^n$ ——表示 \mathbb{R}^n 中的一个点或一个向量, 其中分量 $x_i \in \mathbb{R}$;
- $\mathbf{d} = (d_1, d_2, \dots, d_n)^\top \in \mathbb{R}^n$, 其中 $\mathbf{d} \neq \mathbf{0}$ ——表示从 0 指向 \mathbf{d} 的方向. 此外, 设 $\mathbf{d}^{(1)}, \mathbf{d}^{(2)} \in \mathbb{R}^n$, 若 $\exists \lambda > 0$, 使得 $\mathbf{d}^{(1)} = \lambda \mathbf{d}^{(2)}$, 则称 $\mathbf{d}^{(1)}, \mathbf{d}^{(2)}$ 是同方向的.
- $\mathbf{x} + \lambda \mathbf{d}$ ——表示从 \mathbf{x} 点出发, 沿 \mathbf{d} 方向移动 $\lambda \mathbf{d}$ 长度得到的点.

下面是对欧氏空间中向量的运算的定义.

定义 1.3 (向量的运算)

设 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^\top \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^\top \in \mathbb{R}^n$, 则

$$(1) \text{ 向量的内积运算: } \mathbf{x}^\top \mathbf{y} = \mathbf{y}^\top \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n x_i y_i;$$

$$(2) \text{ 向量长度: } \|\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}} = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2};$$

$$(3) \text{ 两点间距离: } \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|.$$

定理 1.1 (三角不等式)

$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, 有

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\| \quad (1.1)$$

【证明】对左式和右式分别平方后相减, 有

$$\begin{aligned} \text{左式}^2 - \text{右式}^2 &= (\mathbf{x} + \mathbf{y})^\top (\mathbf{x} + \mathbf{y}) - (\mathbf{x}^\top \mathbf{x} + \mathbf{y}^\top \mathbf{y} + 2\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|) \\ &= (\mathbf{x}^\top \mathbf{x} + \mathbf{y}^\top \mathbf{y} + 2\mathbf{x}^\top \mathbf{y}) - (\mathbf{x}^\top \mathbf{x} + \mathbf{y}^\top \mathbf{y} + 2\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|) \\ &= 2(\mathbf{x}^\top \mathbf{y} - \|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|) \end{aligned}$$

也即只需证明柯西不等式

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{y} \leq \|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|$$

成立即可. 于是我们构造关于 t 的方程

$$\|\mathbf{x} + t\mathbf{y}\|^2 = \mathbf{y}^\top \mathbf{y} t^2 + 2\mathbf{x}^\top \mathbf{y} t + \mathbf{x}^\top \mathbf{x} = 0$$

显然由于向量的模长一定非负, 故该方程至多有一个解, 也即该二次方程的判别式

$$\Delta = 4(\mathbf{x}^\top \mathbf{y})^2 - 4(\mathbf{x}^\top \mathbf{x})(\mathbf{y}^\top \mathbf{y}) \leq 0$$

从而柯西不等式得证, 从而原不等式得证.

【证毕】

定义 1.4 (点列的收敛)

设 $\{\mathbf{x}^{(n)}\}$ 是定义在 \mathbb{R}^n 上的点列, 若 $\exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 使得 $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{x}\| = 0$, 则称点列 $\{\mathbf{x}^{(n)}\}$ 收敛到 \mathbf{x} , 记作

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(n)} = \mathbf{x}$$

定义 1.5 (向量的大小关系)

设 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, 若 $\forall i \in \{1, 2, \dots, n\}$, 都有 $x_i \leq y_i$, 则称 $\mathbf{x} \leq \mathbf{y}$. 类似可规定 $\mathbf{x} \geq \mathbf{y}$, $\mathbf{x} < \mathbf{y}$, $\mathbf{x} > \mathbf{y}$.

显然, 在如上定义中, (\mathbb{R}^n, \leq) 并不是全序集(证明略). 特别地, $\mathbf{x} \leq \mathbf{0} \Leftrightarrow \forall i \in \{1, 2, \dots, n\}, x_i \leq 0$.

定理 1.2

设 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, 若 $\forall \mathbf{y} \geq \mathbf{0}$, 都有 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y} \leq \alpha$, 则有 $\mathbf{x} \leq \mathbf{0}$ 且 $\alpha \geq 0$.

【证明】取 $\mathbf{y} = \mathbf{0}$, 则 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y} = 0$, 从而 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y}$ 的上界 $\alpha \geq 0$. 假设 $\mathbf{x} \leq \mathbf{0}$ 不成立, 则 $\exists i \in \{1, 2, \dots, n\}$, 使得 $x_i > 0$. 令 $y_i \rightarrow +\infty$, 则有 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y} \rightarrow +\infty$, 从而与 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y}$ 有上界 α 矛盾, 故必有 $\mathbf{x} \leq \mathbf{0}$. **【证毕】**

该命题还有以下等价表述:

- 若 $\forall \mathbf{y} \leq \mathbf{0}$, 都有 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y} \leq \alpha$, 则有 $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ 且 $\alpha \geq 0$;
- 若 $\forall \mathbf{y} \geq \mathbf{0}$, 都有 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y} \geq \alpha$, 则有 $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ 且 $\alpha \leq 0$;
- 若 $\forall \mathbf{y} \leq \mathbf{0}$, 都有 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y} \geq \alpha$, 则有 $\mathbf{x} \leq \mathbf{0}$ 且 $\alpha \leq 0$.

1.3 子空间、正交子空间

定义 1.6 (子空间)

设 $\mathbf{d}^{(i)} \in \mathbb{R}^n, i = 1, 2, \dots, m$ 是线性无关的向量组, 称集合 $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{x} = \sum_{j=1}^m \alpha_j \mathbf{d}^{(j)}, \alpha_j \in \mathbb{R}\}$ 是由向量 $\mathbf{d}^{(1)}, \mathbf{d}^{(2)}, \dots, \mathbf{d}^{(m)}$ 生成的子空间, 记作 $L(\mathbf{d}^{(1)}, \mathbf{d}^{(2)}, \dots, \mathbf{d}^{(m)})$, 简记作 L .

可以看到, $\forall L \subseteq \mathbb{R}^n$, 都有 $0 \in L$. 若令 $\mathbf{A} = (\mathbf{d}^{(1)}, \mathbf{d}^{(2)}, \dots, \mathbf{d}^{(m)}) \in \mathbb{R}^{n \times m}, \boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)^\top \in \mathbb{R}^m$, 则

$$\mathbf{x} \in L \Leftrightarrow \exists \boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^m, \mathbf{x} = \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}$$

并且 $\text{Rank}(\mathbf{A}) = m$, 也就是说 \mathbf{A} 是列满秩的. 我们将会在接下来的证明中用到这个性质.

定义 1.7 (正交子空间)

称集合 $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x}^\top \mathbf{y} = 0, \forall \mathbf{y} \in L\}$ 为子空间 L 的正交子空间, 记作 L^\perp .

不难看出 $\forall L \subseteq \mathbb{R}^n$, 都有 $0 \in L^\perp$. 且有

$$\mathbf{x} \in L^\perp \Leftrightarrow \forall \mathbf{y} \in L, \mathbf{x}^\top \mathbf{y} = 0$$

$$\Leftrightarrow \forall \boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^m, \mathbf{x}^\top \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} = 0$$

定理 1.3 (子空间投影定理)

设 L 为 \mathbb{R}^n 的子空间, 则 $\forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$, 则必有以下两个命题成立:

- (1) $\exists! \mathbf{x} \in L, \mathbf{y} \in L^\perp$, 使得 $\mathbf{z} = \mathbf{x} + \mathbf{y}$;
- (2) 在 (1) 中的 \mathbf{x} 为问题

$$\min_{\mathbf{u}} \|\mathbf{z} - \mathbf{u}\|$$

$$\text{s.t. } \mathbf{u} \in L$$

的唯一解, 且该问题的最优值为 (1) 中的 $\|\mathbf{y}\|$.

【证明】 (1) 先证明存在性. 我们从线性方程近似解的求法得到灵感. (2) 中问题的目标实质上是求线性方程 $\mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{z}$ 在 \mathbb{R}^m 中的近似解, 为此我们将左右两边左乘 \mathbf{A}^\top , 于是得到正规方程

$$\mathbf{A}^\top \mathbf{A} \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{A}^\top \mathbf{z}$$

由于 \mathbf{A} 是列满秩的, 所以 $\mathbf{A}^\top \mathbf{A}$ 是可逆的, 所以 $\boldsymbol{\alpha} = (\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{z}$, 所以取

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{z}$$

接下来只需证 $\mathbf{z} - \mathbf{A}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{z} \in L^\perp$. 由于

$$\begin{aligned} & (\mathbf{z} - \mathbf{A}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{z})^\top \mathbf{A} \boldsymbol{\beta} \\ &= \mathbf{z}^\top \mathbf{A} \boldsymbol{\beta} - \mathbf{z}^\top \mathbf{A} (\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{A} \boldsymbol{\beta} \\ &= \mathbf{z}^\top \mathbf{A} \boldsymbol{\beta} - \mathbf{z}^\top \mathbf{A} \mathbf{E} \boldsymbol{\beta} \\ &= 0 \end{aligned}$$

$\forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^m$ 都成立, 所以 $\mathbf{z} - \mathbf{A}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{z} \in L^\perp$, 也即取 $\mathbf{y} = \mathbf{z} - \mathbf{A}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{z} \in L^{\text{bot}}$ 即可. 存在性证毕.

接下来证明唯一性. 假设在子空间 L 中, $\exists \mathbf{p} \neq \mathbf{x}$, 使得 $\exists \mathbf{q} \in L^\perp, \mathbf{z} = \mathbf{p} + \mathbf{q}$, 则有 $\mathbf{q} = \mathbf{x} + \mathbf{y} - \mathbf{p}$, 但是

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^\top \mathbf{q} &= \mathbf{x}^\top (\mathbf{x} + \mathbf{y} - \mathbf{p}) \\ &= \mathbf{x}^\top \mathbf{x} - \mathbf{x}^\top \mathbf{p} \\ &\neq 0 \end{aligned}$$

与 $\exists \mathbf{q} \in L^\perp$ 矛盾, 所以假设不成立, 唯一性得证.

(2) 考查函数 $f(t) = \|\mathbf{z} - \mathbf{x} - t\mathbf{v}\|^2, \forall \mathbf{v} \in L$ 且 $\mathbf{v} \neq 0$, 则要证明目标问题的唯一解是 \mathbf{x} , 即证明 $f(t)$ 取最小值当且仅当 $t = 0$, 也即证明 $\forall \mathbf{v} \in L, f'(0) = 0$, 且 $\forall t \neq 0, f'(t) \neq 0$, 而

$$\begin{aligned} f'(t) &= -2\mathbf{y}^\top \mathbf{v} + 2t\mathbf{v}^\top \mathbf{v} \\ &= 2t\mathbf{v}^\top \mathbf{v} \end{aligned}$$

所以上述命题成立, 从而目标问题的唯一解就是 (1) 中的 \mathbf{x} , 代入 $\mathbf{u} = \mathbf{x}$ 即得到目标问题最优值为 $\|\mathbf{y}\|$. 【证毕】

定理 1.4

设 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, 若 $\forall \mathbf{y} \in L$, 都有 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y} \leq \alpha$, 则有 $\mathbf{x} \in L^\perp$ 且 $\alpha \geq 0$.

【证明】取 $\mathbf{y} = 0$, 则 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y} = 0$, 从而 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y}$ 的上界 $\alpha \geq 0$. 假设 $\mathbf{x} \notin L^\perp$, 则由子空间投影定理的 (1), $\exists \mathbf{x}^{(1)} \in L, \mathbf{x}^{(2)} \in L^\perp$, 使得 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(1)} + \mathbf{x}^{(2)}$, 那么

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^\top \mathbf{y} &= (\mathbf{x}^{(1)} + \mathbf{x}^{(2)})^\top \mathbf{y} \\ &= \mathbf{x}^{(1)\top} \mathbf{y} + \mathbf{x}^{(2)\top} \mathbf{y} \\ &= \mathbf{x}^{(1)\top} \mathbf{y} \end{aligned}$$

令 $\mathbf{y} = \lambda \mathbf{x}^{(1)}$ 且 $\lambda \rightarrow +\infty$, 则 $\mathbf{x}^{(1)\top} \mathbf{y} \rightarrow +\infty$, 与 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y}$ 有上界 α 矛盾, 故必有 $\mathbf{x} \in L^\perp$. 【证毕】

该命题还有以下等价表述:

- 若 $\forall \mathbf{y} \in L$, 都有 $\mathbf{x}^\top \mathbf{y} \geq \alpha$, 则有 $\mathbf{x} \in L^\perp$ 且 $\alpha \leq 0$.

1.4 多元函数及其导数

多元函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 可看作一个 n 维向量 \mathbf{x} 的函数 $f(\mathbf{x})$. 受篇幅所限, 我们并不给出矩阵导数的定义, 具体请参见《矩阵分析》课程相关内容. 在此我们只不加证明地给出一些常用函数的矩阵导数 (即其梯度).

定理 1.5 (一些常见函数的梯度)

- 线性函数: $f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^\top \mathbf{x} + d$, $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}$, $\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$;
- 二次函数: $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^\top \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{c}^\top \mathbf{x} + d$, $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{c}$, $\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \mathbf{Q}$, 其中 \mathbf{Q} 为对称阵.
- 向量值线性函数: $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{d} \in \mathbb{R}^m$, $\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}} = \mathbf{A}^\top$.

接下来依旧不加证明地介绍多元函数的 Taylor 展开式及中值定理. 此处不加证明是因为此内容可以被读者在任何一本《数学分析》教材中找到.

定理 1.6 (Taylor 展开式)

设 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 在 \mathbf{x}^* 的某邻域内分别一阶、二阶可微, 则分别有:

- 一阶 Taylor 展开式: $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \nabla f^\top(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + o(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|)$;
- 二阶 Taylor 展开式: $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \nabla f^\top(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + o(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|^2)$.

定理 1.7 (中值定理)

设 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 在 \mathbf{x}^* 的某邻域 $U(\mathbf{x}^*)$ 内二阶可导, 则 $\forall \mathbf{x} \in U(\mathbf{x}^*)$, 都有:

- Lagrange 中值定理: $\exists \lambda \in (0, 1)$, 记 $\mathbf{x}_\lambda = \mathbf{x}^* + \lambda(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)$, 则有

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \nabla f^\top(\mathbf{x}_\lambda)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)$$

- Taylor 中值定理: $\exists \mu \in (0, 1)$, 记 $\mathbf{x}_\mu = \mathbf{x}^* + \mu(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)$, 则有

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \nabla f^\top(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}_\mu)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)$$

定义 1.8 (方向导数)

设 $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 为非空凸集, 函数 $f: S \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathbf{x}^* \in S$, 方向 $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, 若 $\exists \lambda > 0$, 使得 $\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d} \in S$ (通常令 λ 充分小, 此时称 \mathbf{d} 为可行方向), 且此时极限

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{f(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}^*)}{\lambda}$$

存在, 则称 $f(\mathbf{x})$ 在点 \mathbf{x}^* 沿方向 \mathbf{d} 的方向导数存在, 记作 $f'(\mathbf{x}^*; \mathbf{d})$.

定理 1.8 (方向导数和梯度的关系)

若 $f(\mathbf{x})$ 在 \mathbf{x}^* 处可微, 则

$$f'(\mathbf{x}^*; \mathbf{d}) = \nabla f^\top(\mathbf{x}^*) \mathbf{d}$$

【证明】应用 $f(\mathbf{x})$ 的一阶展开式，则

$$\begin{aligned}\lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{f(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}^*)}{\lambda} &= \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{f(\mathbf{x}^*) + \nabla f^\top(\mathbf{x}^*)(\lambda \mathbf{d}) + o(\lambda \|\mathbf{d}\|)}{\lambda} \\&= \nabla f^\top(\mathbf{x}^*)\mathbf{d} + \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{o(\lambda \|\mathbf{d}\|)}{\lambda} \\&= \nabla f^\top(\mathbf{x}^*)\mathbf{d} + \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{o(\lambda \|\mathbf{d}\|)}{\lambda \|\mathbf{d}\|} \cdot \|\mathbf{d}\| \\&= \nabla f^\top(\mathbf{x}^*)\mathbf{d}\end{aligned}$$

【证毕】

1.5 凸集、凸函数和凸规划

1.5.1 凸集

1. 凸集、凸组合

定义 1.9 (凸集)

设 $S \subseteq \mathbb{R}^n$, 若 $\forall \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in S, \lambda \in [0, 1]$, 必有

$$\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)} \in S$$

则称 S 为凸集.

规定单点集 $\{\mathbf{x}\}$ 和空集 \emptyset 都是凸集. 需要注意的是, 方程 $\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(2)} + \lambda(\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(2)})$, $\lambda \in [0, 1]$ 表示连接 $\mathbf{x}^{(1)}$ 和 $\mathbf{x}^{(2)}$ 的线段.

例 1.1 设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, 证明以下命题成立:

(1) 集合 $S = \{\mathbf{x} \mid A\mathbf{x} = \mathbf{b}\}$ 是凸集;

(2) 集合 $S = \{\mathbf{x} \mid A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}\}$ 是凸集.

【证明】 (1) 任取 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in S, \lambda \in [0, 1]$, 则都有

$$\begin{aligned} & A(\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)}) \\ &= \lambda A\mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) A\mathbf{x}^{(2)} \\ &= \lambda \mathbf{b} + (1 - \lambda) \mathbf{b} \\ &= \mathbf{b} \end{aligned}$$

从而 $\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)} \in S$, 故 S 是凸集.

(2) 任取 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in S, \lambda \in [0, 1]$, 则都有

$$\begin{aligned} & A(\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)}) \\ &= \lambda A\mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) A\mathbf{x}^{(2)} \\ &\leq \lambda \mathbf{b} + (1 - \lambda) \mathbf{b} \\ &= \mathbf{b} \end{aligned}$$

从而 $\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)} \in S$, 故 S 是凸集.

【证毕】

在介绍凸集的性质之前, 我们先对一些将要用到的名词进行必要的说明.

定义 1.10 (内点、内点集、开集)

设 $S \subseteq \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \in S$, 如果存在一个开球 $B(\mathbf{x}, \varepsilon) = \{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| < \varepsilon\}$, 使得 $B(\mathbf{x}, \varepsilon) \subseteq S$, 则称 \mathbf{x} 是 S 的内点, S 的内点的全体称为 S 的内点集, 记作 $\text{int}(S)$.

进一步地, 如果 $\text{int}(S) = S$, 则称 S 是开集

所以 $\mathbf{x} \in \text{int}(S) \Leftrightarrow \exists \varepsilon > 0, (\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| < \varepsilon \Rightarrow \mathbf{y} \in S)$.

定义 1.11 (聚点、闭包)

设 $S \subseteq \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 如果 $\forall \varepsilon > 0$ 都有 $B(\mathbf{x}, \varepsilon) \cap S \neq \emptyset$, 则称 \mathbf{x} 是 S 的聚点, S 的聚点的全体称为 S 的闭包, 记作 \bar{S} .

定义 1.12 (超平面)

设 $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$, $\beta \in \mathbb{R}$, 称集合 $H = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{x} = \beta\}$ 是超平面, 简记作 $H: \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{x} = \beta$.

定义 1.13 (支撑超平面)

设 $S \subseteq \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x}_0 \in S$, 若超平面 $H: \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{x} = \beta$ 满足:

(i) $\exists \mathbf{x}^{(0)} \in S$, 使得 $\mathbf{x}^{(0)} \in H$;

(ii) $\forall \mathbf{x} \in S$, $\boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{x} \leq \beta$

则称 H 是 S 的支撑超平面.

定义 1.14 (分离超平面)

设 $S_1, S_2 \subseteq \mathbb{R}^n$, 且 $S_1 \cap S_2 = \emptyset$. 若存在超平面 $H: \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{x} = \beta$, 使得 $\forall \mathbf{x}^{(1)} \in S_1$, $\boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{x}^{(1)} \geq \beta$, 且 $\forall \mathbf{x}^{(2)} \in S_2$, $\boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{x}^{(2)} \leq \beta$, 则称 H 是 S_1, S_2 的分离超平面.

定理 1.9 (凸集的性质)

凸集有以下性质:

- (1) 凸集的交是凸集;
- (2) 凸集的内点集是凸集;
- (3) 凸集的闭包是凸集;
- (4) 凸集边界上任意点存在支撑超平面;
- (5) 两个互相不交的凸集之间存在分离超平面.

【证明】 (1) 设 S_1, S_2 都是凸集, 即证明 $S_1 \cap S_2$ 是凸集, 也即证明 $\forall \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in (S_1 \cap S_2)$, $\forall \lambda \in [0, 1]$, 都有 $\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)} \in (S_1 \cap S_2)$. 由于 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in (S_1 \cap S_2)$, 则有 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in S_1$ 且 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in S_2$, 故 $\forall \lambda \in [0, 1]$, 都有 $\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)} \in S_1$ 且 $\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)} \in S_2$, 所以 $\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)} \in (S_1 \cap S_2)$, 原命题得证.

(2) 设 S 是一凸集, $\text{int}(S)$ 是其内点集, 任取 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in \text{int}(S)$, $\lambda \in [0, 1]$, 则 $\exists r > 0$, 使得

$$\|\mathbf{y}^{(1)} - \mathbf{x}^{(1)}\| \leq r \Rightarrow \mathbf{y}^{(1)} \in S,$$

$$\|\mathbf{y}^{(2)} - \mathbf{x}^{(2)}\| \leq r \Rightarrow \mathbf{y}^{(2)} \in S$$

可以证明内点定义中使用开球和使用闭球是等价的, 这里为了讨论方便, 我们使用有闭球的定义. 要证明 $\text{int}(S)$ 是凸集, 即证明 $\mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)} \in \text{int}(S)$, 也即证明 $\exists \varepsilon > 0$, 使得

$$\|\mathbf{z} - (\mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)})\| \leq \varepsilon \Rightarrow \mathbf{z} \in S$$

我们由三角不等式得到启发, 于是上述逻辑式的前件的左式可以作如下放缩:

$$\begin{aligned}
 & \|z - (x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)})\| \\
 &= \|z - \lambda y^{(1)} - (1 - \lambda)y^{(2)} + \lambda(y^{(1)} - x^{(1)}) + (1 - \lambda)(y^{(2)} - x^{(2)})\| \\
 &\leq \|z - \lambda y^{(1)} - (1 - \lambda)y^{(2)}\| + \|\lambda(y^{(1)} - x^{(1)})\| + \|(1 - \lambda)(y^{(2)} - x^{(2)})\| \\
 &\leq \|z - \lambda y^{(1)} - (1 - \lambda)y^{(2)}\| + \lambda r + (1 - \lambda)r \\
 &= \|z - \lambda y^{(1)} - (1 - \lambda)y^{(2)}\| + r
 \end{aligned}$$

其中 $y^{(1)}, y^{(2)}$ 满足 $\|y^{(i)} - x^{(i)}\| \leq r, i = 1, 2$, 所以 $y^{(1)}, y^{(2)} \in S$, 故 $\forall \lambda \in [0, 1], y^{(1)} + (1 - \lambda)y^{(2)} \in S$.

我们要保证 $z \in S$, 那么只需要控制 $\varepsilon = r$, 于是就有

$$0 \leq \|z - \lambda y^{(1)} - (1 - \lambda)y^{(2)}\| \leq r - r = 0$$

从而 $z = \lambda y^{(1)} + (1 - \lambda)y^{(2)} \in S$, 也即待证命题: $\exists \varepsilon = r > 0$, 使得

$$\|z - (x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)})\| \leq \varepsilon \Rightarrow z \in S$$

的前件可推出后件, 从而 $x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)} \in \text{int}(S)$, 待证命题得证.

(3) 我们先证明一个引理: $x \in \bar{S}$ 当且仅当存在一个点列 $\{x^{(n)}\} \subset S$ 满足 $\lim_{n \rightarrow \infty} x^{(n)} = x$. (实际上这正是聚点的另一等价定义)

先证 \Rightarrow . 对每一个整数 n , 取 $\varepsilon_n = \frac{1}{n}$, 则能得到一个开球列 $\{B(x, \varepsilon_n)\}$. 应用选择公理, 从这个开球列中依次取一个点, 排成一个点列 $\{x^{(n)}\}$, 则必然有

$$\|x^{(n)} - x\| = \frac{1}{n} \rightarrow 0$$

再证 \Leftarrow . 由于 $\lim_{n \rightarrow \infty} x^{(n)} = x$, 则 $\forall \varepsilon > 0$, 都 $\exists N > 0$, 使得 $\|x^{(n)} - x\| < \varepsilon$ 对于 $\forall n > N$ 成立, 从而 $\forall \varepsilon > 0$, 都一定存在一个 n , 使得 $x^{(n)} \in B(x, \varepsilon)$ 并且 $x^{(n)} \in S$, 从而 $x^{(n)} \in B(x, \varepsilon) \cap S$, 故 $B(x, \varepsilon) \cap S \neq \emptyset$, 所以 $x \in \bar{S}$. 从而引理得证.

任取 $x, y \in \bar{S}$, $\lambda \in [0, 1]$, 由引理, $\exists \{x^{(n)}\}, \{y^{(n)}\} \subset S$, 使得 $x^{(n)} \rightarrow x, y^{(n)} \rightarrow y$. 构造点列 $\{\lambda x^{(n)} + (1 - \lambda)y^{(n)}\}$, 则由 $\{x^{(n)}\}, \{y^{(n)}\} \subset S$ 以及 S 是凸集, 有 $\{\lambda x^{(n)} + (1 - \lambda)y^{(n)}\} \in S$. 由 $x^{(n)} \rightarrow x, y^{(n)} \rightarrow y$, 知 $\{\lambda x^{(n)} + (1 - \lambda)y^{(n)}\} \rightarrow \lambda x + (1 - \lambda)y$, 所以根据引理, $\lambda x + (1 - \lambda)y \in \bar{S}$. 原命题得证.

(4) 暂时懒得写.

(5) 暂时懒得写.

【证毕】

定义 1.15 (凸组合)

设 $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(m)} \in \mathbb{R}^n$. 若 $\forall j \in \{1, 2, \dots, m\}, \lambda_j \geq 0$ 且 $\sum_{j=1}^m \lambda_j = 1$, 则称 $\sum_{j=1}^m \lambda_j x^{(j)}$ 为 $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(m)}$ 的凸组合.

定理 1.10 (凸集和凸组合的关系)

S 是凸集 $\Leftrightarrow S$ 中任意有限点的凸组合属于 S .

【证明】 先证 \Rightarrow . 使用数学归纳法. 即证明 S 中任意 m 个点的凸组合属于 S . $m = 1, 2$ 时, 由于 S 是凸集, 所以显然成立. 假设 $m = k$ 时, 结论成立, 往证 $m = k + 1$ 时结论也成立, 即证明当 $\sum_{j=1}^{k+1} \lambda_j = 1$ 时 $\sum_{j=1}^{k+1} \lambda_j \mathbf{x}_j \in S$. 由于 $m = k$ 时结论成立, 则有:

$$\frac{\sum_{j=1}^k \lambda_j \mathbf{x}_j}{\sum_{j=1}^k \lambda_j} = \sum_{j=1}^k \frac{\lambda_j}{\sum_{i=1}^k \lambda_i} \mathbf{x}_j \in S$$

从而

$$\sum_{j=1}^{k+1} \lambda_j \mathbf{x}^{(j)} = \sum_{j=1}^k \lambda_j \mathbf{x}^{(j)} + \lambda_{k+1} \mathbf{x}^{(k+1)} = \sum_{j=1}^k \lambda_j \cdot \frac{\sum_{j=1}^k \lambda_j \mathbf{x}^{(j)}}{\sum_{j=1}^k \lambda_j} + \lambda_{k+1} \mathbf{x}^{(k+1)} \in S$$

结论得证.

再证 \Leftarrow . 取 $m = 2$, 则若 $\lambda_1, \lambda_2 > 0$ 且 $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$, 都有 $\lambda_1 \mathbf{x}^{(1)} + \lambda_2 \mathbf{x}^{(2)} \in S$, 这正是凸集的定义, 从而结论成立. **【证毕】**

定义 1.16 (凸包)

设非空集合 $S \subseteq \mathbb{R}^n$, 由 S 中所有有限点的凸组合所构成的集合, 被称为 S 的凸包, 记作 $\text{cov}(S)$.

定理 1.11 (凸集和凸包的关系)

如果 S 是凸集, 那么 $\text{cov}(S) = S$.

【证明】 由定理 1.8 知, $\text{cov}(S) \subseteq S$, 下证 $S \subseteq \text{cov}(S)$. 一个点的凸组合就是其本身, 所以只要 $\mathbf{x} \in S$, 那么这个点本身的凸组合 $\mathbf{x} \in \text{cov}(S)$, 所以 $S \subseteq \text{cov}(S)$. **【证毕】**

定义 1.17 (多胞形)

设 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)} \in \mathbb{R}^n$. 由 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)}$ 的所有凸组合构成的集合称为多胞形, 记作 $H(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)})$.

定义 1.18 (单纯形)

设 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)} \in \mathbb{R}^n$. 若多胞形 $H(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)})$ 满足 $\mathbf{x}^{(2)} - \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(3)} - \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{x}^{(1)}$ 线性无关, 则称该多胞形是单纯形.

2. 凸锥、半正组合

定义 1.19 (锥、凸锥)

设 $S \subseteq \mathbb{R}^n$, 若 $\forall \mathbf{x} \in S, \lambda > 0$, 必有 $\lambda \mathbf{x} \in S$, 则称 S 为以 0 为顶点的**锥**. 若 S 还是凸集, 则称 S 为**凸锥**.

规定 $\{0\}, \mathbb{R}^n$ 都是凸锥. 锥不一定包含 0.

定义 1.20 (半正组合)

设 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)} \in \mathbb{R}^n$. 若 $\forall j \in \{1, 2, \dots, m\}, \lambda_j \geq 0$ 且 $\sum_{j=1}^m \lambda_j > 0$, 则称 $\sum_{j=1}^m \lambda_j \mathbf{x}^{(j)}$ 为 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)}$ 的**半正组合**.

定理 1.12 (凸锥和半正组合的关系)

S 是凸锥 $\Leftrightarrow S$ 中任意有限点的半正组合属于 S .

【证明】 先证 \Rightarrow . 即证若 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)} \in S$. 且 $\forall j \in \{1, 2, \dots, m\}, \lambda_j \geq 0$ 且 $\sum_{j=1}^m \lambda_j > 0$,

则称 $\sum_{j=1}^m \lambda_j \mathbf{x}^{(j)} \in S$. 注意到:

$$\sum_{j=1}^m \lambda_j \mathbf{x}^{(j)} = \sum_{j=1}^m \lambda_j \cdot \sum_{i=1}^m \frac{\lambda_j}{\sum_{i=1}^m \lambda_i} \mathbf{x}^{(j)}$$

其中: $\sum_{j=1}^m \frac{\lambda_j}{\sum_{i=1}^m \lambda_i} \mathbf{x}^{(j)}$ 正是 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)}$ 的凸组合, 由定理 1.8 知, $\sum_{j=1}^m \frac{\lambda_j}{\sum_{i=1}^m \lambda_i} \mathbf{x}^{(j)} \in S$. 此外,

由 $\sum_{j=1}^m \lambda_j > 0$ 以及锥的定义, 有

$$\sum_{j=1}^m \lambda_j \cdot \sum_{j=1}^m \frac{\lambda_j}{\sum_{i=1}^m \lambda_i} \mathbf{x}^{(j)} \in S$$

即原命题得证.

再证 \Leftarrow . 显然任意有限点的凸组合一定是其半正组合, 从而由定理 1.8 的 \Leftarrow , S 是凸集. 我们仿照定理 1.8 的证明方法, 一个点 \mathbf{x} 的半正组合正是 $\lambda \mathbf{x}, \lambda > 0$, 而 “若 $\forall \mathbf{x} \in S, \lambda > 0$, 则 $\lambda \mathbf{x} \in S$ ” 正是锥的定义. 因此原命题得证. **【证毕】**

1.5.2 凸函数

1. 凸函数

定义 1.21 (凸函数)

设集合 $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 为凸集, 函数 $f: S \rightarrow \mathbb{R}$. 11122 若 $\forall \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in S, \lambda \in (0, 1)$, 均有

$$f(\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)}) \leq \lambda f(\mathbf{x}^{(1)}) + (1 - \lambda) f(\mathbf{x}^{(2)})$$

则称 $f(\mathbf{x})$ 为凸集 S 上的凸函数.

若进一步有上面不等式以严格不等式成立, 则称 $f(\mathbf{x})$ 为凸集 S 上的严格凸函数. 当 $-f(\mathbf{x})$ 为凸函数 (严格凸函数时), 则称 $f(\mathbf{x})$ 为凹函数 (严格凹函数).

定理 1.13 (Jesen 不等式)

$f(\mathbf{x})$ 为凸集 S 上的凸函数的充要条件是 S 上任意有限点的凸组合的函数值不大于各点函数值的凸组合, 即 $\forall \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)} \in S$, 对于任意的序列 $\{\lambda_j\}_{j=1}^m$ 满足 $\forall j \in \{1, 2, \dots, m\}, \lambda_j \geq 0$ 且 $\sum_{j=1}^m \lambda_j = 1$, 都有

$$f\left(\sum_{j=1}^m \lambda_j \mathbf{x}^{(j)}\right) \leq \sum_{j=1}^m \lambda_j f(\mathbf{x}^{(j)})$$

【证明】我们仿照定理 1.8 进行证明. 先证 \Rightarrow . 使用数学归纳法. $m = 1$ 时, 待证命题显然成立. $m = 2$ 时, 待证命题与凸函数定义等价, 故其也成立. 设 $m = k$ 时, 待证命题成立, 往证 $m = k + 1$ 时命题也成立. 这里为了讨论方便, 令 $\sum_{j=1}^k \lambda_j = \theta$, 则

$$\begin{aligned} f\left(\sum_{j=1}^{k+1} \lambda_j \mathbf{x}^{(j)}\right) &= f\left(\sum_{j=1}^k \lambda_j \mathbf{x}^{(j)} + \lambda_{k+1} \mathbf{x}^{(k+1)}\right) \\ &= f\left(\theta \sum_{j=1}^k \frac{\lambda_j}{\theta} \mathbf{x}^{(j)} + \lambda_{k+1} \mathbf{x}^{(k+1)}\right) \\ &\leq \theta f\left(\sum_{j=1}^k \frac{\lambda_j}{\theta} \mathbf{x}^{(j)}\right) + \lambda_{k+1} f(\mathbf{x}^{(k+1)}) \\ &\leq \theta \left(\sum_{j=1}^k \frac{\lambda_j}{\theta} f(\mathbf{x}^{(j)})\right) + \lambda_{k+1} f(\mathbf{x}^{(k+1)}) \\ &= \sum_{j=1}^{k+1} \lambda_j f(\mathbf{x}^{(j)}) \end{aligned}$$

命题得证.

再证 \Leftarrow . 取 $m = 2$ 时即可, 因为这正是凸函数的定义. 命题得证.

【证毕】

例 1.2 设 f_1, f_2 是凸函数, 判断:

- (1) 设 $\lambda_1, \lambda_2 > 0$, $\lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2$ 是否为凸函数? $\lambda_1 f_1 - \lambda_2 f_2$ 是否为凸函数?
- (2) $f(\mathbf{x}) = \max\{f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x})\}$ 是否为凸函数? $g(\mathbf{x}) = \min\{f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x})\}$ 是否为凸函数?

【解】(1) $\lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2$ 是凸函数. 设 f_1, f_2 定义域的交集为 S , 则 $\forall \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in S, \forall \lambda > 0$,

都有

$$\begin{aligned} & \lambda_1 f_1(\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1-\lambda)\mathbf{x}^{(2)}) + \lambda_2 f_2(\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1-\lambda)\mathbf{x}^{(2)}) \\ & \leq \lambda_1(\lambda f_1(\mathbf{x}^{(1)}) + (1-\lambda)f_1(\mathbf{x}^{(2)})) + \lambda_2(\lambda f_2(\mathbf{x}^{(1)}) + (1-\lambda)f_2(\mathbf{x}^{(2)})) \\ & = \lambda(\lambda_1 f_1(\mathbf{x}^{(1)}) + \lambda_2 f_2(\mathbf{x}^{(1)})) + (1-\lambda)(\lambda_1 f_1(\mathbf{x}^{(2)}) + \lambda_2 f_2(\mathbf{x}^{(2)})) \end{aligned}$$

$\lambda_1 f_1 - \lambda_2 f_2$ 不一定是凸函数, 构造反例如下: 令 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 2, f_1(x) = f_2(x) = x^2$, 从而 $\lambda_1 f_1(x) - \lambda_2 f_2(x) = -x^2$ 在 \mathbb{R} 上是凹函数. 若要构造正例, 只需要调整上述反例中的 λ_1, λ_2 , 使得 $\lambda_1 > \lambda_2$ 即可.

(2) $f(\mathbf{x}) = \max\{f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x})\}$ 是凸函数. 设 f_1, f_2 定义域的交集为 S , 则 $\forall \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} \in S, \forall \lambda > 0$, 都有

$$f_1(\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1-\lambda)\mathbf{x}^{(2)}) \leq \lambda f_1(\mathbf{x}^{(1)}) + (1-\lambda)f_1(\mathbf{x}^{(2)}) \leq \lambda f(\mathbf{x}^{(1)}) + (1-\lambda)f(\mathbf{x}^{(2)})$$

同理, 有

$$f_2(\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1-\lambda)\mathbf{x}^{(2)}) \leq \lambda f(\mathbf{x}^{(1)}) + (1-\lambda)f(\mathbf{x}^{(2)})$$

从而

$$\begin{aligned} & f(\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1-\lambda)\mathbf{x}^{(2)}) \\ & = \max\{f_1(\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1-\lambda)\mathbf{x}^{(2)}), f_2(\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1-\lambda)\mathbf{x}^{(2)})\} \\ & \leq \lambda f(\mathbf{x}^{(1)}) + (1-\lambda)f(\mathbf{x}^{(2)}) \end{aligned}$$

$g(\mathbf{x}) = \min\{f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x})\}$ 不一定是凸函数. 考虑如下反例: 令 $f_1(x) = x^2, f_2(x) = (x-1)^2$, 则 $g(0) = \min\{0, 1\} = 0, g(1) = \min\{1, 0\} = 0, g\left(\frac{1}{2}\right) = \min\left\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right\} = \frac{1}{4}$, 然而:

$$g\left(\frac{1}{2} \cdot 0 + \frac{1}{2} \cdot 1\right) = g\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4} > \frac{1}{2}g(0) + \frac{1}{2}g(1)$$

因此 $g(x)$ 不是凸函数.

【解毕】

定理 1.14 (凸函数的性质)

设 $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 为非空凸集, 函数 $f: S \rightarrow \mathbb{R}$, 则有:

- (1) 若 f 是凸函数, 则 f 在 $\text{int}(S)$ 上连续;
- (2) 若 f 是凸函数, 则其对任意方向的方向导数 (若方向可行) 存在;
- (3) 设 S 是开集, f 在 S 上可微, 则 f 是凸函数的充要条件是 $\forall \mathbf{x}^* \in S$, 都有

$$f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*) + \nabla f^\top(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)$$

$\forall \mathbf{x} \in S$ 都成立. 进一步地, 如果 f 是严格凸函数, 则其充要条件是上述不等式的严格不等式成立;

- (4) 设 S 是开集, f 在 S 上二次可微, 则:

- (i) f 是凸函数的充要条件是 $\forall \mathbf{x} \in S, \nabla^2 f(\mathbf{x})$ 是半正定的;
- (ii) 若 $\forall \mathbf{x} \in S, \nabla^2 f(\mathbf{x})$ 是正定的, 则 f 是严格凸函数.

【证明】(1) 以下基于估计 $f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^{(0)})$ 的上下界的证明来自知乎用户 @cvgmt.

我们先证明：凸函数 $f(\mathbf{x})$ 在其定义域的内点集上处处有上界. 设凸函数 $f(\mathbf{x})$ 及其定义域为 S , 则 $\forall \mathbf{x}^{(0)} \in \text{int}(S)$, 都一定存在一个充分小的 $r > 0$, 使得以 $\mathbf{x}^{(0)}$ 为中心的正方体包含在 $\text{int}(S)$ 中. 由凸函数的定义

$$f(\lambda \mathbf{x}^{(1)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(2)}) \leq \lambda f(\mathbf{x}^{(1)}) + (1 - \lambda) f(\mathbf{x}^{(2)})$$

容易得到凸函数的最大值一定在线段端点上取得. 反复应用上述定义, 最终能够证明凸函数的最大值一定在正方形的端点处取得. ^①

下面考虑以 $\mathbf{x}^{(0)}$ 为圆心, r 为半径的闭球 $\bar{B}(\mathbf{x}^{(0)}, r)$ (包含于上述正方形), 则由上面的证明, 知道 $f(\mathbf{x})$ 在该闭球上一定有上界, 从而一定有上确界, 记作 M_r . 我们先来估计 $f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^{(0)})$ 的上界. 在 $\bar{B}(\mathbf{x}^{(0)}, r)$ 内任取一点 \mathbf{x} , 连接 $\mathbf{x}^{(0)}$ 和 \mathbf{x} 并延长到球面上, 交于一点 \mathbf{y} , 从而 \mathbf{x} 在以 $\mathbf{x}^{(0)}$ 和 \mathbf{y} 为端点的线段上, 则由凸函数的定义, 有

$$f(\mathbf{x}) \leq \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|}{r} f(\mathbf{x}^{(0)}) + \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\|}{r} f(\mathbf{y})$$

其中 $\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\|}{r} + \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|}{r} = 1$, 从而有

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^{(0)}) &\leq -\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\|}{r} f(\mathbf{x}^{(0)}) + \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|}{r} f(\mathbf{y}) \\ &= \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\|}{r} (f(\mathbf{y}) - f(\mathbf{x}^{(0)})) \\ &\leq \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\| \cdot \frac{M_r - f(\mathbf{x}^{(0)})}{r} \end{aligned}$$

接下来估计 $f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^{(0)})$ 的下界. 类似地, 在 $\bar{B}(\mathbf{x}^{(0)}, r)$ 内任取一点 \mathbf{x}' , 连接 \mathbf{x}' 和 $\mathbf{x}^{(0)}$ 并延长到球面上, 交于一点 \mathbf{y}' , 从而 $\mathbf{x}^{(0)}$ 在以 \mathbf{x}' 和 \mathbf{y}' 为端点的线段上, 则由凸函数的定义, 有

$$f(\mathbf{x}^{(0)}) \leq \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}^{(0)}\|}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\| + r} f(\mathbf{x}) + \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\|}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\| + r} f(\mathbf{y})$$

其中 $\frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}^{(0)}\|}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\| + r} + \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\|}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\| + r} = 1$, 从而有:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^{(0)}) &\geq \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\|}{r} f(\mathbf{x}^{(0)}) - \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\|}{r} f(\mathbf{y}) \\ &= \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\|}{r} (f(\mathbf{x}^{(0)}) - f(\mathbf{y})) \\ &\geq \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\| \cdot \frac{f(\mathbf{x}^{(0)}) - M_r}{r} \end{aligned}$$

综上, 有

$$|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^{(0)})| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\| \cdot \frac{|M_r - f(\mathbf{x}^{(0)})|}{r}$$

将 r 保持为不是无穷小的固定值, 从而 $\frac{|M_r - f(\mathbf{x}^{(0)})|}{r}$ 为一有限值, 并且令 $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}^{(0)}$, 从而 $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\| \rightarrow 0$, 于是由夹挤准则, $|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^{(0)})| \rightarrow 0$, 于是连续性得证.

(2) 设凸函数 $f(\mathbf{x})$ 的定义域为 S , $\forall \mathbf{x} \in S$ 及其可行方向 \mathbf{d} , 即证明函数

$$g(\lambda) = \frac{f(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{d}) - f(\mathbf{x})}{\lambda}$$

^①这个条件还有另一种基于 Minkowski-Weyl 定理 (见定理??) 的证明方法. 由上述定理, 正方体 (或任意有界凸多面体) 实际上是其顶点集的凸包. 之后应用 Jensen 不等式进行证明即可.

在 0^+ 处有定义且极限存在. 取充分小的 $\delta > 0$, 由于 \mathbf{d} 是可行方向, 故其在 $(0, \delta)$ 上有定义. 下证其在 0^+ 处极限存在. 取 $0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \delta$, 由 f 的凸性, 有:

$$f(\mathbf{x} + \lambda_1 \mathbf{d}) \leq \frac{\lambda_1}{\lambda_2} f(\mathbf{x} + \lambda_2 \mathbf{d}) + \left(1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right) f(\mathbf{x})$$

整理得

$$g(\lambda_1) = \frac{f(\mathbf{x} + \lambda_1 \mathbf{d}) - f(\mathbf{x})}{\lambda_1} \leq \frac{f(\mathbf{x} + \lambda_2 \mathbf{d}) - f(\mathbf{x})}{\lambda_2} = g(\lambda_2)$$

由 λ_1, λ_2 及 δ 的任意性, 有 $g(\lambda)$ 在 0 的任意右半去心邻域内单调递增, 从而极限 $\lim_{\lambda \rightarrow 0^+} g(\lambda)$ 为有限数或 $-\infty$.

(3)

(4)

【证毕】

例 1.3 若 $f(x) = \begin{cases} 2, & x = \pm 1, \\ x^2, & -1 < x < 1 \end{cases}$, 容易验证 f 是凸函数, 但是 f 在边界点上不连续.

2. 水平集

定义 1.22 (水平集)

设集合 $S \subseteq \mathbb{R}^n$, 函数 $f: S \rightarrow \mathbb{R}$, $\alpha \in \mathbb{R}$, 称 $S_\alpha = \{\mathbf{x} \in S \mid f(\mathbf{x}) \leq \alpha\}$ 为 $f(\mathbf{x})$ 在 S 上的 α 水平集.

水平集的概念相当于在地形图中, 海拔高度不高于某一数值的区域.

定理 1.15 (凸函数的水平集是凸集)

设集合 $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 是凸集, 函数 $f: S \rightarrow \mathbb{R}$ 是凸函数, 则对 $\forall \alpha \in \mathbb{R}$, S_α 是凸集.

【证明】

【证毕】

上述定理的逆不真.

例 1.4 考虑分段函数 $f(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0 \end{cases}$, 函数非凸, 但其任意水平集是凸集.

1.5.3 凸规划

定义 1.23 (凸规划)

(1) 若 (f, S) 中的 S 为凸集, f 是 S 上的凸函数, 优化目标为 \min 时, 则称 (f, S) 为凸规划;

(2) 若 (f, gh) 中的 f, g_i 为凸函数, h_j 为线性函数, 则称 (f, gh) 为凸规划.

定义 1.24 (凸优化的最优解)

设 (f, S) 为凸优化. 若 \mathbf{x}^* 为问题 (f, S) 的 l.opt., 则 \mathbf{x}^* 为 g.opt. 进一步地, 若 f 是严格凸函数, 则 \mathbf{x}^* 是 (f, S) 的唯一 g.opt.

【证明】**【证毕】**

1.6 多面体、极点、极方向

定义 1.25 (半空间)

设超平面 $H: \alpha^\top x = \beta \subseteq \mathbb{R}^n$, 则这个超平面把 \mathbb{R}^n 分成两部分 $\{x \in \mathbb{R}^n \mid \alpha^\top x \geq \beta\}$ 和 $\{x \in \mathbb{R}^n \mid \alpha^\top x \leq \beta\}$, 这样的两部分称为闭半空间, 若有严格不等式成立, 则称其为开半空间.

定义 1.26 (多面体)

有限个闭半空间的交称为多面体.

由定义看出, 多面体实际上由一系列线性不等式组定义, 故一般可以将其写作 $\{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \leq b\}$, 其中 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$. 其中我们选取一种特殊的多面体 $\{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$, 称其为标准型多面体.

定义 1.27 (极点)

设 $S \subseteq \mathbb{R}^n$, $x \in S$, 若不存在 $x^{(1)}, x^{(2)} \in S$, $x^{(1)} \neq x^{(2)}$, 使得 $x = \lambda x^{(1)} + (1 - \lambda)x^{(2)}$, 则称 x 是 S 的极点 (或顶点).

定义 1.28 (极方向)

设 $S \subseteq \mathbb{R}^n$, $d \in \mathbb{R}^n$, 若 d 是 S 的可行方向 (见方向导数的定义), 且不能被表示为 S 的两个不同可行方向的非负组合, 则称 d 是 S 的极方向.

定理 1.16 (极点特征)

设多面体 $S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$, 其中 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 行满秩, 则 x 是多面体 S 的极点的充要条件是存在分解 $A = (B, N)$, 使得

- (i) B 为 m 阶可逆阵;
- (ii) $x = (x_B^\top, x_N^\top)^\top$ (分解方式与 A 相同), 其中 $x_B = B^{-1}b \geq 0$, $x_N = 0$.

【证明】

【证毕】

例 1.5 证明: 多面体 $S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$ 中必存在有限多的极点.

【证明】

【证毕】

例 1.6 设多面体 $S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$, 在以下条件下, 求该多面体的极点:

$$(1) A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 4 & 5 & 1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 3 \\ 6 \end{pmatrix};$$

$$(2) A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 65 \\ 40 \\ 75 \end{pmatrix}.$$

【解】

【解毕】

定理 1.17 (极方向特征)

设多面体 $S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$, 其中 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 行满秩, 则

(1) d 是 S 的方向的充要条件是 $Ad = 0$ 且 $d \geq 0$;

(2) d 是 S 的极方向的充要条件是存在分解 $A = (B, N)$, 使得

(i) B 为 m 阶可逆阵;

(ii) $d = (d_B^\top, d_N^\top)^\top$ (分解方式与 A 相同), 其中 $d_B = -B^{-1}a_j \geq 0$, $d_N = e_j$. 这里 e_j 是第 j 个元素为 1, 其余元素为 0 的单位向量. j 是使得 N 中的列向量 a_j 满足 $B^{-1}a_j \leq 0$ 的下标.

【证明】

【证毕】

例 1.7 证明: 多面体 $S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$ 中必有极点, 且个数不超过 $(n-m)C_n^m$.

【证明】

【证毕】

例 1.8 设多面体 $S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$, 其中 $A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 & -6 & 0 \\ 0 & 4 & 5 & -5 & 1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 3 \\ 6 \end{pmatrix}$, 求

该多面体的极方向.

【解】

【解毕】

定理 1.18 (表示定理, Minkowski-Weyl)

设多面体 $S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$, 其中 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 行满秩, $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(k)}$ 为所有极点, $d^{(1)}, d^{(2)}, \dots, d^{(l)}$ 为所有极方向, 则 $\forall x \in S$, 存在序列 $\{\lambda_i\}_{i=1}^k, \{\mu_j\}_{j=1}^l$, 其中:

(1) $\lambda_i > 0, i = 1, 2, \dots, k$, 且 $\sum_{i=1}^k \lambda_i = 1$;

(2) $\mu_j \geq 0, j = 1, 2, \dots, l$, 使得

$$x = \lambda_1 x^{(1)} + \lambda_2 x^{(2)} + \dots + \lambda_k x^{(k)} \quad (\text{极点的凸组合})$$

$$+ \mu_1 d^{(1)} + \mu_2 d^{(2)} + \dots + \mu_l d^{(l)} \quad (\text{极方向的半正组合})$$

特别地, 如果上述多面体 S 是有界的, 则有 $\mu_j = 0$.

【证明】

【证毕】

第二章 线性规划

2.1 线性规划模型

2.1.1 线性规划的定义

定义 2.1 (线性规划的一般形式)

$$\begin{aligned}
 \max(\min) \quad & z = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n \\
 \text{s.t.} \quad & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \leq (=, \geq) b_1 \\
 & a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \leq (=, \geq) b_2 \\
 & \vdots \\
 & a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \leq (=, \geq) b_m \\
 & x_1, x_2, \cdots, x_n \in \mathbb{R}
 \end{aligned}$$

我们为了方便解决问题，常把上述一般形式转化为标准形式：

定义 2.2 (线性规划的标准形式)

$$\begin{aligned}
 \max \quad & z = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n \\
 \text{s.t.} \quad & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\
 & a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\
 & \vdots \\
 & a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \\
 & x_1, x_2, \cdots, x_n \geq 0
 \end{aligned}$$

为了研究问题的方便，我们将其写成矩阵形式

$$\begin{aligned}
 \max \quad & z = \mathbf{c}^\top \mathbf{x} \\
 \text{s.t.} \quad & \mathbf{Ax} = \mathbf{b} \\
 & \mathbf{x} \geq 0
 \end{aligned}$$

其中， $\mathbf{c}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ ， $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ ， $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 。

不难发现, 标准形式有区别于一般形式的以下四个特点:

- 目标最大化;
- 约束为等式;
- 决策变量均非负;
- 右端项非负.

接下来我们将会讨论如何将一般形式一步步转化为标准形式.

2.1.2 将一般形式转化为标准形式

1. 极小目标极大化

在标准形式中, 要求优化目标为极大化目标函数值. 若目标函数为

$$\min f = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n$$

则令 $z = -f$, 从而上述极小化问题与下面的极大化问题

$$\max z = -c_1x_1 - c_2x_2 - \cdots - c_nx_n$$

有相同的最优解, 但它们的最优解的目标函数值相差一个符号, 即

$$\min f = -\max z$$

2. 约束条件不为等式

在标准形式中, 要求每约束条件均为等式. 若约束条件为小于等于号, 即设第 i 个约束条件为

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n \leq b_i$$

则可以引入一个松弛变量 s , 使得

$$s = b_i - (a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n)$$

从而 $s \geq 0$, 也具有非负约束, 这时新的约束条件成为

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n + s = b_i$$

若约束条件为大于等于号, 即设第 i 个约束条件为

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n \geq b_i$$

相似地, 也可以引入一个松弛变量 s , 使得

$$s = (a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n) - b_i$$

从而 $s \geq 0$, 也具有非负约束, 这时新的约束条件成为

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n - s = b_i$$

3. 变量无符号限制

在标准形式中, 要求每一个变量均有非负约束. 当某一个变量 x_j 没有非负约束时, 可以令

$$x_j = x'_j - x''_j$$

其中 $x'_j, x''_j \geq 0$, 即用两个非负数之差表示一个无符号限制的变量.

4. 右端项有负值

在标准形式中, 要求每一个约束条件右端均为正值. 当某一个右端项系数为负时, 假设是第 i 个, 即

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n = b_i \leq 0$$

则把该等式两端同时乘以 -1 , 得到

$$-a_{i1}x_1 - a_{i2}x_2 - \cdots - a_{in}x_n = -b_i \geq 0$$