运筹学笔记

Fiddie

2020 年 10 月 9 日

Contents

笔者注: 这里的pdf是2019-2020上学期数学系《运筹学》课程的内容. 所有公式都是手打的, 模糊的插图是截图出来的, 而高清的插图是tikzpicture.

事实上这篇pdf许多内容都是不考的, **不考的内容都用(*)标出了**.

我打算定价**26元把本笔记(电子版)卖出**. 如果您喜欢这份笔记, 不妨扫描下方二维码给予打赏! 如果能备注姓名就更好了, 受小弟一拜!

支付宝 **微信**

注: 欢迎关注由NJU数学系学子运营的公众号——数学兔的极大理想!

注: 如果获得渠道不是从我本人获得的, 而是朋友给的, 而且喜欢这份笔记的话, 也希望能扫描上方支付二维码进行打赏!

第 1 章　线性规划

§ 1.1　线性规划简介

1.1.1　发展历史与典型问题

线性规划的一般形式是:

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

这里$x_1, \cdots, x_n$是决策变量. 目标函数、约束条件都是决策变量的线性函数的数学规划问题叫线性规划问题.

线性规划的标准形式:

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

非标准形式的线性规划均可转化为标准形式:

(1)$\max f(x) = -\min\{-f(x)\}$, 绝对值也可作转化: $|x| = \max\{x, -x\}$;

(2)对于含$\max\{d_1x_1, \cdots, d_nx_n\}$的式子, 可以考虑引入变量$y$, 满足约束条件$y \ge d_ix_i (i = 1, 2, \cdots, n)$.

(3)$\le$: 引入松弛变量; $\ge$: 引入剩余变量. 这两个符号的式子可以相互转化(取相反数).

(4)自由变量: 消元、分裂.

如果把标准形式用矩阵向量表示, 令$m < n, \operatorname{rank}(A) = m, b \ge 0$.

$$
c = (c_1, \cdots, c_n)^T, x = (x_1, \cdots, x_n)^T, b = (b_1, \cdots, b_m)^T, A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}_{m \times n}.
$$

则线性规划的标准形式可表示为: ($x \ge 0$表示x的所有分量超过0)

$$
\begin{aligned}
\min_{x}\quad & c^T x\\
\text{s.t.}\quad & Ax = b\\
& x \ge 0.
\end{aligned}
$$

这里x叫决策变量(向量), c叫价值系数(向量), b为资源向量, A是约束条件系数矩阵.

标准形式的另一种形式: 如果令$a_k = (a_{1k}, a_{2k}, \cdots, a_{mk})^T, (k = 1, 2, \cdots, n)$, 则标准形式也写为

$$
\begin{aligned}
\min\quad & c^T x\\
\text{s.t.}\quad & \sum_{j=1}^{n} x_j a_j = b\\
& x \ge 0.
\end{aligned}
$$

例 1.1.1 把下面的数学模型化为标准型.

$$\max z = 2x_1 + 3x_2,$$
$$\begin{cases} x_1 + \quad 2x_2 \le 8 \\ 4x_1 \qquad \le 16 \\ \qquad 4x_2 \le 12 \\ x_1, \quad x_2 \ge 0. \end{cases}$$

解: 在各不等式都加上松弛变量x_3, x_4, x_5, 把不等式变成等式. 这时得到标准型:

$$\max z = 2x_1 + 3x_2,$$
$$\begin{cases} x_1 & +2x_2 & +x_3 & & & = 8 \\ 4x_1 & & & +x_4 & & = 16 \\ & 4x_2 & & & +x_5 & = 12 \\ x_1, & x_2, & x_3, & x_4, & x_5 & \ge 0. \end{cases}$$

1.1.2 图解法

用画图的方法可以求解**二维**线性规划, 可能的情况: 最优解唯一、最优解无穷多、无界解、约束集为空.
基本观察: 线性规划若有有限最优解, 则最优解点一定位于约束集的边界上.

习题 1 (Week 2)

1. 用图解法求解如下线性规划问题:

$$\max \quad x_1 + 3x_2, \qquad \min \quad x_1 + 1.5x_2, \qquad \max \quad 2x_1 + 2x_2, \qquad \max \quad x_1 + x_2$$
$$\begin{cases} 5x_1 + 10x_2 \le 50 \\ x_1 + x_2 \ge 1 \\ x_2 \le 4 \\ x_1, x_2 \ge 0. \end{cases} \quad \begin{cases} x_1 + 3x_2 \ge 3 \\ x_1 + x_2 \ge 2 \\ x_1 \ge 0, x_2 \ge 0. \end{cases} \quad \begin{cases} x_1 - x_2 \ge -1 \\ -0.5x_1 + x_2 \le 2 \\ x_1 \ge 0, x_2 \ge 0. \end{cases} \quad \begin{cases} x_1 - x_2 \ge 0 \\ 3x_1 - x_2 \le -3 \\ x_1 \ge 0, x_2 \ge 0. \end{cases}$$

2. Let f be a piecewise linear function(分段线性函数) given by
$$f(x) = \max\{c_1^T x + d_1, \cdots, c_p^T x + d_p\}.$$
Convert the following problem to a linear programming problem:
$$\min_x \{f(x) : \text{s.t. } Ax = b, x \ge 0\}.$$

3. 下面数学规划模型在信号处理中被称为Basis Pursuit模型:
$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|x\|_1, \text{s.t. } Ax = b,$$
其中$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|, A \in \mathbb{R}^{m\times n}$(一般$m << n$), $b \in \mathbb{R}^n$. 在稀疏信号处理中, 该模型通常用来逼近下面的NP-难的组合优化问题:
$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|x\|_0, \text{s.t. } Ax = b,$$
其中$\|x\|_0$表示x的非零元素的个数. 试将Basis Pursuit模型转化为线性规划模型.

1.1.3 基本概念

下面A是$m \times n$矩阵$(m < n)$, $x \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}^m$. 引入一些定义:

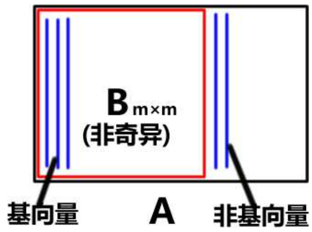
- **可行域**:指$\mathcal{F} = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b, x \ge 0\}$.

- **可行解**: 若$x \in \mathcal{F}$, 则x是一个**可行解**.
- **最优(可行)解**: 可行域中使得目标函数达到最优的点.
- **基**: 设B是A的一个m阶非奇异子矩阵, 则称B是线性规划问题的一个基.
- **基向量**: B的所有列向量都叫基向量, A的其他列向量称为非基向量.
- **基变量**: 与基向量相应的x的分量叫基变量, x的其他分量叫非基变量.

为了书写方便, 经常令x_B表示基变量, x_N表示非基变量, 此时$(x_B, x_N)^T$叫x的一个重排. 线性规划可写为

$$\min\{c_B^T x_B + c_N^T x_N : A_B x_B + A_N x_N = b, x_B \geq 0, x_N \geq 0\}.$$

在下面的图中, B是基, $x_1, x_2, \cdots, x_m$是基变量, $x_{m+1}, \cdots, x_n$是非基变量. 其余已在图中列出.



再引入定义

- **基解**: 令所有非基变量为0, 则$Ax = b$变为$Bx_B = b$. 不妨设基变量为x的前m个分量, 即$x_1, \cdots, x_m$. 称$x = (B^{-1}b, 0)^T$为线性方程组$Ax = b$的解.
- **基可行解**: 若基解的**非零分量**均为正, 则称其为基可行解.
- **可行基**: 对应于基可行解的基叫可行基.
- **最优基可行解**: 若线性规划问题的某最优解是基解, 则称其为最优基可行解.

注: 基解不一定是可行解.

根据基解的定义可知:

- 基解的非零分量个数最多为m;
- 若某基解的**非零分量**个数小于m, 则称其为**退化的**基解.
- 若某基解非退化, 则其非零分量对应的x的分量（共M个）为基变量.
- 基解的非零分量对应的A的列向量线性无关.
- 基解的数量不超过C_n^m个.
- 基解的非零分量可能为正或者负.
- 基可行解的数量不超过基解的数量, 从而不超过C_n^m个.
- 若某基可行解的非零元素(大于0的元素)的个数小于m, 则称其为**退化的基可行解**.

1.1.4 线性规划基本定理

定理 1.1.1 *线性规划问题*$\min\{c^T x : Ax = b, x \geq 0\}$, *其中*$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$*满足*$rank(A) = m$, *则:*

(1)若线性规划存在可行解, 则一定存在基可行解.

(2)若线性规划存在最优解, 则一定存在最优基可行解.

证明: (1)设$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$是个可行解, 即$Ax = b, x \geq 0$, 记$A$的列向量为$a_1, \cdots, a_n$, 则$Ax = b$可以写成$x_1 a_1 + \cdots + x_n a_n = b$. 设$x$共有$p$个分量大于0, 不妨设这$p$个分量是前$p$个, 从而

$$x_1 a_1 + \cdots + x_p a_p = b.$$

(上面不妨设$a_1, \cdots, a_p$不全为0, 否则$b = 0$, 此时显然有$x = 0$为基可行解) 下面作讨论:

(i)若$a_1, \cdots, a_p$线性无关, 则$p \leq m$. 若$p = m$, 则x是基解, 若$p < m$, 则x是退化的基解.

(ii)若$a_1,\cdots,a_p$线性相关, 则存在不全为0的系数$y_1,\cdots,y_p$使得$y_1a_1+\cdots+y_pa_p=0$. 不妨设至少有一个系数$y_i>0$. 则$\forall\varepsilon\in\mathbb{R}$, 有

$$(x_1-\varepsilon y_1)a_1+\cdots+(x_p-\varepsilon y_p)a_p=b.$$

令$y=(y_1,\cdots,y_p,0,\cdots,0)^T$, 则$A(x-\varepsilon y)=b,\forall\varepsilon\in\mathbb{R}$. 令$\varepsilon=\min\limits_i\{x_i/y_i:y_i>0\}$, 则$x-\varepsilon y\geq 0$, 则$x-\varepsilon y$是可行解. 另外$x-\varepsilon y$的非零分量(正分量)个数至多为$p-1$.

不断重复上面过程, 可以使得得到的也是可行解, 且满足非零元素对应的列向量组线性无关. 此时, 非零元素对应的列向量组就是初始向量组$\{a_1,\cdots,a_p\}$的极大无关组. 此时归结为第一种情况. □

(2)与(1)类似.

注: 每次消去至少一个正分量后, 相应的列向量组也消去至少一个列向量, 并且消去前后, 向量组的极大无关组保持不变. 这保证了一定可以通过此过程得到一个可行解, 其非零元素对应的列向量组线性无关, 并且为初始向量组的极大无关组.

注: 线性规划可能没有最优解(即有无界解), 也有可能有最优的非基可行解(此时一定有无穷多个解.

注: 线性规划的基可行解总数不超过C_n^m个, 逐个计算并比较函数值的方法仅在理论上可行.

1.1.5 凸集简介

引入定义:

- **凸集**: 设$C\subset\mathbb{R}^n$, 如果对$\forall x\in C,y\in C$以及$\forall\alpha\in(0,1)$, 都有$\alpha x+(1-\alpha)y\in C$, 则称$C$是凸集.
- **凸集的极点**: 设C是$\mathbb{R}^n$中的凸集, $x\in C$. 如果对任意的$y\in C,z\in C,y\neq z$, $\alpha\in(0,1)$, 都有$x\neq\alpha y+(1-\alpha)z$, 则称$x$为$C$的极点或顶点.
- **凸包**: 设$C\subset\mathbb{R}^n$是任意的集合, 则包含集合C的最小凸集称为C的凸包(convex hull), 记为$\text{conv}(C)$.
- 记$E(M)$为集合M中的极点构成的集合.

注: 根据定义, 凸集M中x是极点当且仅当$M\setminus\{x\}$是凸集.

关于conv的更多性质, 详见第二章第一节的“凸集”部分.

定理 1.1.2 *设$M\subset\mathbb{R}^n$是紧凸集, 则$\text{conv}E(M)=M$.*

证明: 参考冯德兴《凸分析基础》的定理1.6.5. □

定理 1.1.3 *考虑标准形式的线性规划, 如果约束集非空, 则可行域*

$$\mathcal{F}=\{x\in\mathbb{R}^n:Ax=b,x\geq 0\}$$

是凸的, 且是闭的.

证明: (1)凸: 设$x,y\in\mathcal{F}$, 即$Ax=b,Ay=b$, 则$\forall\alpha\in(0,1),A(\alpha x+(1-\alpha)y)=\alpha Ax+(1-\alpha)Ay=b,$. 由于$\alpha x+(1-\alpha)y\geq 0$, 则$\alpha x+(1-\alpha)y\in\mathcal{F}$, 从而$\mathcal{F}$是凸集.

(2)闭: 找一系列的$\{x_n\}\subset\mathcal{F}$使得$\lim\limits_{n\to\infty}x_n=x^*$, 则$Ax_k=b,\forall k\in\mathbb{N}$, 即$\|Ax_k-b\|_2=0$, 让$k\to\infty$可得$\|Ax^*-b\|_2=0$, 所以$Ax^*=b$, $x^*\in\mathcal{F}$. 也就是说任意$\mathcal{F}$中的极限点仍在$\mathcal{F}$中, 从而$\mathcal{F}$是闭集. □

定理 1.1.4 *若$\mathcal{F}=\{x\in\mathbb{R}^n:Ax=b,x\geq 0\}$有界, 则$\mathcal{F}=\text{conv}\{\mathcal{F}$的极点$\}$.*

证明: 由定理1.1.2, $\mathcal{F}$是有界闭凸集, 从而也是紧集. (欧氏空间中有界闭$\Leftrightarrow$紧). 根据定理1.1.2, 证完. □

注: 更一般的结果: $\mathbb{R}^n$中闭的有界凸集等于它的极点的闭凸包.

定理 1.1.5 (基可行解与极点的等价性) *设$rank(A)=m,\mathcal{F}=\{x\in\mathbb{R}^n:Ax=b,x\geq 0\}$. 则$x\in\mathcal{F}$为线性规划的基可行解当且仅当$x$为$\mathcal{F}$的极点.*

证明: "$\Rightarrow$": 设$x=(x_1,\cdots,x_m,0,\cdots,0)^T$是基可行解, 则

$$x_1a_1+\cdots+x_ma_m=b,$$

其中$a_1,\cdots,a_m$线性无关. (反证)假设存在$y,z\in\mathcal{F},y\neq z$以及$\alpha\in(0,1)$, 使得$x=\alpha y+(1-\alpha)z$, 易得$y$与$z$的最后面的$n-m$个分量都为0, 因此有

$$y_1a_1+\cdots+y_ma_m=b,z_1a_1+\cdots+z_ma_m=b.$$

由$a_1,\cdots,a_m$线性无关, 则$x=y=z$. 由反证法证完.

"$\Leftarrow$": 设$x\in\mathcal{F}$是极点, 不妨设x的全部非零分量(正分量)是前k个. 则有$x_1,\cdots,x_k>0$以及$x_1a_1+\cdots+x_ka_k=b$. 为了证明x是基可行解, 只需证明$a_1,\cdots,a_k$线性无关.

(反证)设$a_1,\cdots,a_k$线性相关, 则存在非平凡线性组合

$$y_1a_1+\cdots+y_ka_k=0.$$

定义$y=(y_1,\cdots,y_k,0,\cdots,0)^T$, 取$\varepsilon$充分小, 满足$x\pm\varepsilon y\geq 0$, 由$Ay=0$可知$x\pm\varepsilon y\in\mathcal{F}$. 而$x=\frac{1}{2}(x+\varepsilon y)+\frac{1}{2}(x-\varepsilon y)$, ' 这与$x\in\mathcal{F}$为极点矛盾. □

注: 定理表明: 每个基可行解对应一个顶点.

推论 1.1.6 *若$\mathcal{F}=\{x\in\mathbb{R}^n:Ax=b,x\geq 0\}$非空, 则它至少有一个极点.*

注: 若$\mathcal{F}$非空且有界, 则一定有最优解. 而若$\mathcal{F}$无界, 有可能无最优解, 如果有最优解则必定在顶点取到.

推论 1.1.7 *若某线性规划问题只有一个有限的最优解, 则这个最优解在约束集的极点上.*

推论 1.1.8 *约束集$\mathcal{F}$的极点个数有限.*

§ 1.2 单纯形法

当矩阵$A_{m\times n}$中的m,n较大时, "枚举法"是行不通的, 所以要找更有效的方法.

从一个基可行解(顶点)移动到另一个基可行解(顶点), 在移动的过程中, 目标函数值逐步改进, 直到到达最优基可行解.

定义 1.2.1 *一个由$d+1$个点构成的集合$\{x_1,x_2,\cdots,x_{d+1}\}\subset\mathbb{R}^d$满足*

$$\det\begin{pmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ x_1 & x_2 & \cdots & x_{d+1}\end{pmatrix}\neq 0.$$

则称这个点集是"在一般位置的"(in general position).

定义 1.2.2 (d维单纯形) *在$\mathbb{R}^d$内, $d+1$个"在一般位置"的点的凸包叫d维单纯形.*

比如: 0维单纯形是一个点, 1维单纯形是线段, 2维单纯形是三角形与它的内部, 3维单纯形是四面体与它的内部.

线性规划的标准型的等式约束条件记为

$$\begin{aligned}a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n&=b_1\\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n&=b_2\\ &\vdots\\ a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n&=b_m\end{aligned}$$

或者用矩阵形式记$Ax=b$, 则$m<n$且$\text{rank}(A)=m$. 把矩阵A的第i列向量记为$a^i,i\in\{1,2,\cdots,m\}$, 则

$$a^ix=b_i,i=1,2,\cdots m.$$

1.2.1 旋转

下面介绍旋转(pivot).

不妨设A的前m列线性无关. 用Gauss消去法, $Ax = b$可以化为下面的**典范形式(canonical form)**:

$$\begin{array}{cccccccc} x_1 & & & & +y_{1,m+1}x_{m+1} + \cdots + y_{1,n}x_n & = & y_{10} \\ & x_2 & & & +y_{2,m+1}x_{m+1} + \cdots + y_{2,n}x_n & = & y_{20} \\ & & \ddots & & & & \vdots \\ & & & x_m & +y_{m,m+1}x_{m+1} + \cdots + y_{m,n}x_n & = & y_{m0} \end{array}$$

相应地, $x_1, \cdots, x_m$叫**基变量(basic variables)**, 其他变量叫**非基变量(nonbasic)**, 而基解是

$$x_1 = y_{10}, \cdots, x_m = y_{m0}, x_{m+1} = 0, \cdots, x_n = 0.$$

或用向量记为$x = (y_0, 0)^T, y_0 = (y_{10}, \cdots, y_{m0})$.

称一个系统是呈“典范形式”的, 如果该系统经过对等式的重新排列以后, 增广矩阵变为

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & y_{1,m+1} & y_{1,m+2} & \cdots & y_{1,n} & y_{10} \\ & 1 & & & y_{2,m+1} & y_{2,m+2} & \cdots & y_{2,n} & y_{20} \\ & & \ddots & & & & & \vdots & \\ & & & 1 & y_{m,m+1} & y_{m,m+2} & \cdots & y_{m,n} & y_{m0} \end{pmatrix}$$

用旋转来解决的问题是这样的: 给定一个典范形式的系统, 假设基变量即将变成非基变量, 而非基变量即将变成基变量, 那么新的基变量集对应的典范形式是怎样的?

假设在典范形式系统中, 我们要把基变量$x_p, 1 \le p \le m$变成非基变量$x_q, q > m$, 当且仅当y_{pq}非零时我们才可以这样做, 而通过Gauss消去法可以完成. 设新系统中的系数是y'_{ij}, 则我们有

$$y'_{ij} = \begin{cases} \dfrac{y_{ij}}{y_{pq}}, & i = p, \\ y_{ij} - \dfrac{y_{pj}}{y_{pq}} y_{iq}, & i \ne p. \end{cases}, j = 1, 2, \cdots, n.$$

上面等式就是“旋转等式(pivot equation)”, 经常在线性规划中使用. 原来系统中的y_{pq}元素叫做“旋转元素(pivot element)”.

例 1.2.1 *考虑下面典范形式的系统*

$$\begin{array}{cccccc} 1 & & & 1 & 1 & -1 & 5 \\ & 1 & & 2 & -3 & 1 & 3 \\ & & 1 & -1 & 2 & -1 & -1 \end{array}$$

找出以x_4, x_5, x_6作为基变量的基解.

解: 略.

下面记A的所有列向量是$a_1, a_2, \cdots, a_n$. 设该系统已经转化为下面的典范形式:

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & y_{1,m+1} & y_{1,m+2} & \cdots & y_{1,n} & y_{10} \\ & 1 & & & y_{2,m+1} & y_{2,m+2} & \cdots & y_{2,n} & y_{20} \\ & & \ddots & & & & & \vdots & \\ & & & 1 & y_{m,m+1} & y_{m,m+2} & \cdots & y_{m,n} & y_{m0} \end{pmatrix} \tag{1.1}$$

则显然有

$$\forall j, a_j = y_{1j}a_1 + y_{2j}a_2 + \cdots + y_{mj}a_m.$$

如果我们想把基变量$x_p, 1 \leq p \leq m$变成非基变量$x_q, q > m$(这可以完成当且仅当$y_{pq} \neq 0$). 则上式等价于

$$a_p = \frac{1}{y_{pq}}a_q - \sum_{i=1, i\neq p}^{m} \frac{y_{iq}}{y_{pq}}a_i.$$

因此, 对任意的j, 结合上面两条式子, 我们有

$$\begin{aligned} a_j &= \sum_{i=1, i\neq p}^{m} y_{ij}a_i + y_{pj}a_p \\ &= \sum_{i=1, i\neq p}^{m} \left(y_{ij} - \frac{y_{pj}}{y_{pq}}y_{iq} \right) a_i + \frac{y_{pj}}{y_{pq}}a_q. \end{aligned}$$

于是我们再次得到了旋转公式

$$y'_{ij} = \begin{cases} \dfrac{y_{ij}}{y_{pq}}, & i = p, \\ y_{ij} - \dfrac{y_{pj}}{y_{pq}}y_{iq}, & i \neq p. \end{cases}, j = 1, 2, \cdots, n.$$

1.2.2 出基变量选取

线性规划的可行域是$\mathcal{F} = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b, x \geq 0\}$. 从一个基可行解开始, 如何得到一个新的基解且能保持可行性?

一般地, 我们不可能任意选一对变量, 使得它们交换以后能保持可行性. 但是, 我们可以任选一个非基变量, 让它变成基变量, 并决定哪个基变量变成非基变量. 为了方便, 我们作如下假设: 每个基可行解是非退化的. 如果假设不满足, 可以对单纯形法作适当的修改.

设$x = (x_1, \cdots, x_m, 0, \cdots, 0)^T$是基可行解, $(x_i > 0)$. 则

$$x_1a_1 + \cdots + x_ma_m = b.$$

假设我们已经决定了让$a_q(q > m)$进基, 在现在的基下, a_q可以表示为

$$a_q = y_{1q}a_1 + \cdots + y_{mq}a_m.$$

让$\varepsilon \geq 0$, 则

$$(x_1 - \varepsilon y_{1q})a_1 + \cdots + (x_m - \varepsilon y_{mq})a_m + \varepsilon a_q = b.$$

如果$y_{iq} \leq 0, i \in \{1, 2, \cdots, m\}$, 则$\mathcal{F}$是无界的. 否则, 我们让

$$\varepsilon = \min_{1\leq i\leq m} \left\{ \frac{x_i}{y_{iq}} : y_{iq} > 0 \right\}, p = \arg\min_{1\leq i\leq m} \left\{ \frac{x_i}{y_{iq}} : y_{iq} > 0 \right\}.$$

于是得到一组新的基, 用a_q来替换a_p, 且对应的基解保持可行性.

考虑下面的基可行解:

a_1	a_2	$\cdots$	a_m	a_{m+1}	$\cdots$	a_q	$\cdots$	a_n	b
1				$y_{1,m+1}$	$\cdots$	$y_{1,q}$	$\cdots$	$y_{1,n}$	y_{10}
	1			$y_{2,m+1}$	$\cdots$	$y_{2,q}$	$\cdots$	$y_{2,n}$	y_{20}
		$\ddots$							$\vdots$
			1	$y_{m,m+1}$	$\cdots$	$y_{m,q}$	$\cdots$	$y_{m,n}$	y_{m0}

根据可行性与非退化, 可以得到$y_{i0} > 0, i = 1, 2, \cdots, m$.

注意到$x_i = y_{i0}, i = 1, 2, \cdots, m$, 则

$$\boxed{p = \arg\min_{1 \le i \le m} \left\{ \frac{y_{i0}}{y_{iq}} : y_{iq} > 0 \right\}.}$$

例 1.2.2 *下面的情况如果要让a_4进基, 则出基的是哪个?*

a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	b
1			2	4	6	4
	1		1	2	3	3
		1	-1	2	1	1

解: 注意$\frac{4}{2} = 2, \frac{3}{1} = 3$, 则$p = \arg\min\{2, 3\} = \arg 2 = 1$, 即要让$a_1$出基. □

如果x_q进基、x_p出基, 则基可行解由

$$(y_{10}, \cdots, y_{p-1,0}, y_{p0}, y_{p+1,0}, \cdots, y_{m0}, 0, \cdots, 0, 0, 0, \cdots, 0)$$

变为

$$(y_{10} - \varepsilon y_{1q}, \cdots, y_{p-1,0} - \varepsilon y_{p-1,q}, 0, y_{p+1,0} - \varepsilon y_{p+1,q}, \cdots, y_{m0} - \varepsilon y_{mq}, 0, \cdots, 0, \varepsilon, 0, \cdots, 0)$$

这里$\varepsilon = \frac{y_{p0}}{y_{pq}}$, 新的目标函数值是

$$z_{new} = \sum_{i=1, i \ne p}^{m} c_i (y_{i0} - \varepsilon y_{iq}) + c_q \varepsilon.$$

1.2.3 进基变量选取

前面我们在确定了进基变量的条件下可以确定出基变量. 那进一步讲, 进基变量如何确定?

目标函数决定了哪个非基向量在当前的基可行解下要变成基向量. 设当前的基可行解是

$$x = (x_B, 0)^T = (y_{10}, \cdots, y_{m0}, 0, \cdots, 0)^T.$$

相应地, 我们可以得到一个典范形式的表(表1.1). 基变量和非基变量通过下面式子联系起来:

$$x_i = y_{i0} - \sum_{j=m+1}^{n} y_{ij} x_j, i = 1, 2, \cdots, m.$$

因此

$$\begin{aligned} z = c^T x &= \sum_{i=1}^{m} c_i \left(y_{i0} - \sum_{j=m+1}^{n} y_{ij} x_j \right) + \sum_{j=m+1}^{n} c_j x_j \\ &= \sum_{i=1}^{m} c_i y_{i0} + \sum_{j=m+1}^{n} \left(c_j - \sum_{i=1}^{m} c_i y_{ij} \right) x_j \\ &\triangleq z_0 + \sum_{j=m+1}^{n} (c_j - z_j) x_j. \end{aligned}$$

这是决定旋转元(进基的那一列)的最基本的关系式.

一般我们**选择满足$c_j < z_j$的变量进基**. 如果有多于一个非基变量满足$c_j < z_j$, 则可以用很多策略, 最简单的策略是选择最小的$c_j - z_j$(负得最多的). 如果$c_j \ge z_j, j = m+1, \cdots, n$, 则说明达到最优解, 可以停机.

选择了x_q进基以后($c_q < z_q$), 根据前一小节, 我们应该选x_p出基, 其中$p = \arg\min_i \left\{ \frac{y_{i0}}{y_{iq}} : y_{iq} > 0 \right\}$. 新的基可行解的目标函数值会比$z_0$小.

如果出现了$c_q < z_q, y_{iq} \le 0, \forall i$的情况, 则$\mathcal{F}$无界, 目标函数可以到负无穷.

如果出现$\arg\min_i \left\{ \frac{y_{i0}}{y_{iq}} : y_{iq} > 0 \right\}$.不唯一, 则这个情况就是退化情形, 如果不修正单纯形法, 可能会产生循环. 在许多情况下, 反循环手段是没什么必要的(一般不会出现循环). 但是, 在许多程序中都为了安全起见, 会配上反循环措施.

命题 1.2.1 (迭代过程中目标函数的递减性) *若x_q进基, x_p出基, 则$z_{new} - z_0 = \varepsilon r_q < 0$.*

定理 1.2.2 (最优解的情况) *如果对某个基可行解, $c_j \ge z_j, \forall j$成立, 则这个解是最优的.*

1.2.4 Bland反循环规则

Bland指出: 下面的步骤可以防止循环.

- 选择$j = \min\{j : r_j < 0\}$进基, 即r_j中负得最多的那一列.
- 如果上述j不唯一, 选列数靠前的.

1.2.5 几个例子

单纯形法计算步骤:

1. 找初始可行基, 确定初始基可行解, 建立初始单纯形表.
2. 如果$r_j \ge 0$, 则已达最优解, 停止计算, 否则循环执行下面步骤:
3. 选择满足$r_q < 0$的q确定进基变量.
4. 对$y_{iq} > 0, i = 1, 2, \cdots, m$, 计算$\frac{y_{i0}}{y_{iq}}$, 如果不存在$y_{iq} > 0$, 问题无界. 否则选$p = \arg\min \left\{ \frac{y_{i0}}{y_{iq}} \right\}$.
5. 作旋转, 返回第2步.

例 1.2.3 *用单纯形法求解:*

$$\begin{aligned} \max \quad & 3x_1 + x_3 + 3x_3 \\ s.t. \quad & 2x_1 + x_2 + x_3 \le 2 \\ & x_1 + 2x_2 + 3x_3 \le 5 \\ & 2x_1 + 2x_2 + x_3 \le 6 \\ & x_1, x_2, x_3 \ge 0. \end{aligned}$$

解: 先化为标准形:

$$\begin{aligned} \min \quad & -3x_1 - x_2 - x_3 + 0x_4 + 0x_5 + 0x_6 \\ \text{s.t.} \quad & \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \\ 6 \end{pmatrix} \\ & x_1 \geq 0, i = 1,2,3,4,5,6. \end{aligned}$$

初始的单纯形表为

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	b
	(2)	(1)	1	1	0	0	2
	1	2	(3)	0	1	0	5
	2	2	1	0	0	1	6
r^T	-3	-1	-3	0	0	0	0

上面加括号的为可以选择做旋转元的数. 为了计算方便, 我们选择(1), 这样a_2进基, a_4出基. 第二个单纯形表变为

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	b
	(2)	1	1	1	0	0	2
	-3	0	(1)	-2	1	0	1
	-2	0	-1	-2	0	1	2
r^T	-1	0	-2	1	0	0	2

下面选择(1), 这样a_3进, a_5出. 第三个单纯形表为

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	b
	(5)	1	0	(3)	-1	0	1
	-3	0	1	-2	1	0	1
	-5	0	0	-4	1	1	3
r^T	-7	0	0	-3	2	0	4

下面选择(5), 这样a_1进, a_2出. 第四个单纯形表为

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	b
	1	1/5	0	3/5	$-1/5$	0	1/5
	0	3/5	1	$-1/5$	2/5	0	8/5
	0	1	0	-1	0	1	4
r^T	0	7/5	0	6/5	3/5	0	27/5

现在$r \geq 0$, 因此我们找到了一个最优解: $x^* = \left(\frac{1}{5}, 0, \frac{8}{5}, 0, 0, 4\right)^T$. 而最优目标函数的(min)值为$-\frac{27}{5}$.

例 1.2.4 (退化的例子) *考虑*

$$\begin{aligned} \min \quad & -x_1 - x_2 - x_3 \\ s.t. \quad & x_1 + x_2 \leq 1 \\ & -x_2 + x_3 \leq 0 \\ & x_1, x_2, x_3 \geq 0. \end{aligned}$$

造成退化的原因是有过多(redundant)约束条件, 可能会导致单纯形法要迭代额外多次.

解: 注意到$x_2 \geq 0$可以由$-x_2+x_3 \leq 0$和$x_3 \geq 0$推出, 则有条件冗余, 转化为标准形式如下:

$$\begin{aligned} \min \quad & -x_1 - x_2 - x_3 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 + x_4 = 1 \\ & -x_2 + x_3 + x_5 = 0 \\ & x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \geq 0 \quad . \end{aligned}$$

初始的单纯形表为, $x = (0,0,0,1,0)$: (a_4, a_5是基向量)

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	b
	(1)	1	0	1	0	1
	0	-1	1	0	1	0
r^T	-1	-1	-1	0	0	0

第二个单纯形表, $x = (1,0,0,0,0)$. (a_1, a_5是基向量)

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	b
	1	1	0	1	0	1
	0	-1	(1)	0	1	0
r^T	0	0	-1	1	0	1

第三个单纯形表, $x = (1,0,0,0,0)$. (a_1, a_3是基向量)

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	b
	1	(1)	0	1	0	1
	0	-1	1	0	1	0
r^T	0	-1	0	1	1	1

最后一个单纯形表, $x = (0,1,1,0,0)$. (a_2, a_3是基向量)

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	b
	1	1	0	1	0	1
	1	0	1	1	1	1
r^T	1	0	0	2	1	2

则最优解达到.

例 1.2.5 (循环的例子) 考虑

$$\begin{aligned} \min \quad & -\frac{3}{4}x_1 + 20x_2 - \frac{1}{2}x_3 + 6x_4 \\ s.t. \quad & \frac{1}{4}x_1 - 8x_2 - x_3 + 9x_4 \leq 0 \\ & \frac{1}{2}x_1 - 12x_2 - \frac{1}{2}x_3 + 3x_4 \leq 0 \\ & x_3 \leq 1 \\ & x_1, x_2, x_3, x_4 \geq 0. \end{aligned}$$

解: 先化成标准形式:

$$\begin{aligned} \min \quad & -\frac{3}{4}x_1 + 20x_2 - \frac{1}{2}x_3 + 6x_4 \\ \text{s.t.} \quad & \frac{1}{4}x_1 - 8x_2 - x_3 + 9x_4 + x_5 = 0 \\ & \frac{1}{2}x_1 - 12x_2 - \frac{1}{2}x_3 + 3x_4 + x_6 = 0 \\ & x_3 + x_7 = 1 \\ & x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7 \geq 0. \end{aligned}$$

初始单纯形表, $x = (0,0,0,0,0,0,1)$, a_5, a_6, a_7是基向量:

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	b
	(1/4)	−8	−1	9	1	0	0	0
	1/2	−12	−1/2	3	0	1	0	0
	0	0	1	0	0	0	1	1
r^T	−3/4	20	−1/2	6	0	0	0	0

第二个单纯形表, $x = (0,0,0,0,0,0,1)$, a_1, a_6, a_7是基向量.

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	b
	1	−32	−4	36	4	0	0	0
	0	(4)	−15	−2	1	0	0	
	0	0	1	0	0	0	1	1
r^T	0	−4	−7/2	33	3	0	0	0

第三个单纯形表, $x = (0,0,0,0,0,0,1)$, a_1, a_2, a_7是基向量.

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	b
	1	0	(8)	−84	−12	8	0	0
	0	1	3/8	−15/4	−1/2	1/4	0	0
	0	0	1	0	0	0	1	1
r^T	0	0	−2	18	1	1	0	0

第四个单纯形表, $x = (0,0,0,0,0,0,1)$, a_2, a_3, a_7是基向量.

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	b
	1/8	0	1	−21/2	−3/2	1	0	0
	−3/64	1	0	(3/16)	1/16	−1/8	0	0
	−1/8	0	0	21/2	3/2	−1	1	1
r^T	1/4	0	0	−3	−2	3	0	0

第五个单纯形表, $x = (0,0,0,0,0,0,1)$, a_3, a_4, a_7是基向量.

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	b
	−5/2	56	1	0	(2)	−6	0	0
	−1/4	16/3	0	1	1/3	−2/3	0	0
	5/2	−56	0	0	−2	6	1	1
r^T	−1/2	16	0	0	−1	1	0	0

第六个单纯形表, $x = (0,0,0,0,0,0,1)$, a_4, a_5, a_7是基向量.

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	b
	−5/4	28	1/2	0	1	−3	0	0
	1/6	−4	−1/6	1	0	(1/3)	0	0
	0	0	1	0	0	0	1	1
r^T	−7/4	44	1/2	0	0	−2	0	0

第七个单纯形表, $x = (0,0,0,0,0,0,1)$, a_5, a_6, a_7是基向量:

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	b
	(1/4)	−8	−1	9	1	0	0	0
	1/2	−12	−1/2	3	0	1	0	0
	0	0	1	0	0	0	1	1
r^T	−3/4	20	−1/2	6	0	0	0	0

这个和第一个单纯形表一样, 因此循环的情况发生了. 注意这里没有遵循Bland's rule.

注: 退化情形与非退化情形的区别:

(1)非退化情形里每次旋转以后解会改变, 而目标函数在每次旋转后会改进. 而退化情形有可能在旋转以后不改变解, 目标函数可能不变.

(2)非退化的单纯形法通过有限步可完成, 而退化情形的单纯形法有可能产生循环, 但是如果我们用Bland's rule或者其他手段它就会变成有限步可完成.

(3)非退化情形中的两个不同单纯形表给出了两个不同的解. 而退化的情形有可能相同.

习题 2 (Week 4)

1. 用单纯形法求解
$$\begin{aligned} \min\ & -2x_1-4x_2-x_3-x_4 \\ \text{s.t.}\quad & x_1+3x_2+x_4\le 4 \\ & 2x_1+x_2\le 3 \\ & x_2+4x_3+x_4\le 3 \\ & x_i\ge 0, i=1,2,3,4. \end{aligned}$$

2. Solve the cycling example(例1.2.5) again by the simplex method with the Bland's anticycling rule.

§ 1.3 单纯形法的进一步讨论

基可行解有时候可以直接满足一个线性规划问题, 约束条件是$Ax\le b, x\ge 0$, 这里$b\ge 0$. 基可行解对应的线性规划问题的标准形式(含松弛变量)为
$$\begin{aligned} \min\quad & c^Tx+0^Ty \\ \text{s.t.}\quad & Ax+y=b \\ & x\ge 0, y\ge 0. \end{aligned}$$
但是有时候初始的基可行解并不明显.

1.3.1 人工变量法

"人工变量法"的引入是为了解决初始基可行解的问题. 为了寻找下面问题的基可行解(其中$b\ge 0$)
$$\begin{aligned} \min\quad & c^Tx\textbf{(LP)} \\ \text{s.t.}\quad & Ax=b, x\ge 0. \end{aligned}$$
首先我们解决一个辅助的线性规划问题(auxiliary LP):
$$\begin{aligned} \min\quad & \sum_{i=1}^m y_i\textbf{(ALP)} \\ \text{s.t.}\quad & Ax+y=b, x\ge 0, y\ge 0. \end{aligned}$$
这里$y=(y_1,\cdots,y_m)^T\in\mathbb{R}^m$是人工变量的向量. 问题(LP)有可行解当且仅当(ALP)目标函数的最小值是0, 且在$y=0$取到.

注意(ALP)已经是典范形式(canonical form), 且基可行解是$(x,y)=(0,b)$. 设(ALP)可以由单纯形法解出, 在每一步都可以得到基可行解. 如果(ALP)的最小值是0, 则最终的基解满足$y=0$, 在这种情况下, x的部分就能为系统$Ax=b, x\ge 0$提供基可行解.

例 1.3.1 *寻找下面的基可行解:*

$$2x_1 + x_2 + 2x_3 = 4$$
$$3x_1 + 3x_2 + x_3 = 3$$
$$(x_1, x_2, x_3)^T \geq 0.$$

引入人工变量$x_4 \geq 0, x_5 \geq 0$以及目标函数$x_4 + x_5$, 则初始的表是

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
	2	1	2	1	0	4
	3	3	1	0	1	3
c^T	0	0	0	1	1	0

在开始单纯形表的解决步骤之前, 首先要把基变量下最后一行的值变为0, 于是就有第一个单纯形表:

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
	2	1	2	1	0	4
	(3)	3	1	0	1	3
r^T	-5	-4	-3	0	0	-7

下面作旋转, 让负得最多的元素(上表中红色括号的部分)进基, 得到第二个单纯形表:

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
	0	-1	$(4/3)$	1	$-2/3$	2
	1	1	$1/3$	0	$1/3$	1
r^T	0	1	$-4/3$	0	$5/3$	-2

最终单纯形表是

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
	0	$-3/4$	1	$3/4$	$-1/2$	$3/2$
	1	$5/4$	0	$-1/4$	$1/2$	$1/2$
r^T	0	0	0	1	1	0

在该表中, 人工变量都出基了, 因此把目标函数变成0, 就可以得到原始问题的基可行解(解方程组): $(x_1, x_2, x_3) = (\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2})$.

1.3.2 两阶段法

利用人工变量, 我们通过一个两阶段法来解决通常的线性规划问题:

阶段I: 引入人工变量并找到辅助线性规划问题(ALP)的基可行解(或者可以推出没有可行解存在). 注意我们只需要在**不含松弛变量的等式中引入人工变量**.

阶段II: 利用阶段I得到的基可行解, 原始的线性规划问题可以用单纯形法解决.

例 1.3.2 *考虑问题:*

$$\min 4x_1 + x_2 + x_3$$
$$2x_1 + x_2 + 2x_3 = 4$$
$$3x_1 + 3x_2 + x_3 = 3$$
$$(x_1, x_2, x_3)^T \geq 0.$$

在前一个例子中找到了基可行解. 去掉人工变量并且用新的代价系数来代替最后一行, 有

	x_1	x_2	x_3	b
	0	$-3/4$	1	$3/2$
	1	$5/4$	0	$1/2$
c^T	4	1	1	0

把基向量对应的最后一行变成0, 可得第一个单纯形表

$$\begin{array}{c|ccc|c}
 & x_1 & x_2 & x_3 & b \\
 & 0 & -3/4 & 1 & 3/2 \\
 & 1 & (5/4) & 0 & 1/2 \\
r^T & 0 & -13/4 & 0 & -7/2
\end{array}$$

保持迭代, 最终得到(计算过程省略了)

$$\begin{array}{c|ccc|c}
 & x_1 & x_2 & x_3 & b \\
 & 3/5 & 0 & 1 & 9/5 \\
 & 4/5 & 1 & 0 & 2/5 \\
r^T & 12/5 & 0 & 0 & -11/5
\end{array}$$

因此最优解是$(x_1, x_2, x_3) = \left(0, \frac{2}{5}, \frac{9}{5}\right)$.

例 1.3.3 自由变量*(free variable)*问题

$$\begin{aligned}
\min \quad & -2x_1 + 4x_2 + 7x_3 + x_4 + 5x_5 \\
s.t. \quad & -x_1 + x_2 + 2x_3 + x_4 + 2x_5 = 7 \\
& -x_1 + 2x_2 + 3x_3 + x_4 + x_5 = 6 \\
& -x_1 + x_2 + x_3 + 2x_4 + x_5 = 4 \\
& x_1 \text{ free}, \ (x_2, x_3, x_4, x_5) \geq 0.
\end{aligned}$$

由于x_1是自由变量, 则它可以通过从第一个等式代入其他等式从而被消掉. 于是下面的单纯形表

$$\begin{array}{cccccccc}
 & x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & b \\
 & -1 & 1 & 2 & 1 & 2 & 7 \\
 & -1 & 2 & 3 & 1 & 1 & 6 \\
 & -1 & 1 & 1 & 2 & 1 & 4 \\
c^T & -2 & 4 & 7 & 1 & 5 & 0
\end{array}$$

等价问题为

$$\begin{array}{cc|cccccc}
 & x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & b \\
 & 1 & -1 & -2 & -1 & -2 & -7 \\
\hline
 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 \\
 & 0 & 0 & -1 & 1 & -1 & -3 \\
c^T & 0 & 2 & 3 & -1 & 1 & -14
\end{array}$$

引入x_6, x_7, 则原始的表(阶段I)为(注意x_6, x_7是基变量, 最底下应该为0才对, 所以先化出来).

$$\begin{array}{cccccccc}
 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 & x_7 & b \\
 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\
 & 0 & 1 & -1 & 1 & 0 & 1 & 3 \\
c^T & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0
\end{array}$$

第一个单纯形表(阶段I)为

$$\begin{array}{cccccccc}
 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 & x_7 & b \\
 & -1 & -1 & 0 & (1) & 1 & 0 & 1 \\
 & 0 & 1 & -1 & 1 & 0 & 1 & 3 \\
r^T & 1 & 0 & 1 & -2 & 0 & 0 & -4
\end{array}$$

第二个单纯形表(阶段I)为

$$\begin{array}{cccccccc} & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 & x_7 & b \\ & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ & (1) & 2 & -1 & 0 & -1 & 1 & 2 \\ r^T & -1 & -2 & 1 & 0 & 2 & 0 & -2 \end{array}$$

最终的单纯形表(阶段I)为

$$\begin{array}{cccccccc} & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 & x_7 & b \\ & 0 & 1 & -1 & 1 & 0 & 1 & 3 \\ & 1 & 2 & -1 & 0 & -1 & 1 & 2 \\ r^T & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{array}$$

下面回到等价的reduced problem:

$$\begin{array}{cccccc} & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & b \\ & 0 & 1 & -1 & 1 & 3 \\ & 1 & 2 & -1 & 0 & 2 \\ c^T & 2 & 3 & -1 & 1 & -14 \end{array}$$

第一个单纯形表(阶段II):

$$\begin{array}{cccccc} & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & b \\ & 0 & 1 & -1 & 1 & 3 \\ & 1 & (2) & -1 & 0 & 2 \\ r^T & 0 & -2 & 2 & 0 & -21 \end{array}$$

最后一个单纯形表(阶段II):

$$\begin{array}{cccccc} & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & b \\ & -1/2 & 0 & -1/2 & 1 & 2 \\ & 1/2 & 1 & -1/2 & 0 & 1 \\ r^T & 1 & 0 & 1 & 0 & -19 \end{array}$$

最优解是$(x_2, x_3, x_4, x_5) = (0, 1, 0, 2)$. 这里$x_1$和最优的函数值可以计算出.

1.3.3 大M法

大M法(Big-M method)把两阶段法的两个阶段结合在一起变成只有一个步骤. 给定标准形式的线性规划问题:

$$\min \quad c^T x, \quad \text{s.t.} \quad Ax = b, (x \geq 0).$$

则和它相近的问题(approximating problem)是

$$\min \quad c^T x + M \sum_{i=1}^{m} y_i, \quad \text{s.t.} \quad Ax + y = b, (x, y \geq 0).$$

在这个问题中, $y = (y_1, \cdots, y_m)^T$是人工变量的向量, 而$M > 0$是很大的常数. 而$M\sum_{i=1}^{m} y_i$是非零y_i的“惩罚项(penalty term)”.

下面我们假设要用单纯形法解决这个问题. 如果原始问题有最优解, 则所有人工变量都会随着步骤的进行变成非基变量. 在这一步之后, 人工变量对应的列可以被移出单纯形表(就不会再回来了, 一步删一个人工变量, 因为M很大). 如果对应的基可行解不是最优, 继续迭代直到得到最优解. 如果所有人工变量都不能出基, 则原始问题要么无界要么没有最优解.

下面的论述是正确的:

(1)如果最优解满足y的那一部分都是0, 则x的部分就是原始问题的基可行解.

(2)如果对每个$M>0$, 最优解都满足$y\neq 0$, 则原始问题没有可行解. 这等价于: 如果原始问题有可行解, 则和它相近的问题必定对某个$M>0$有$y=0$.

(3)如果对每个$M>0$, 相近问题都无界, 则原始问题要么无界要么没可行解.

(4)设原始问题有有限的最优值为$V(\infty)$. 记$V(M)$是相近问题的最优解, 则$V(M)\leq V(\infty)$.

(5)对每个$M_1\leq M_2$, 都有$V(M_1)\leq V(M_2)$.

(6)存在$M_0>0$使得对$M\geq M_0$, 都有$V(M)=V(\infty)$, 因此大M法在足够大的M情况下能得到最优解.

例 1.3.4 *解决下面的问题:*

$$\begin{aligned} \max \quad & 3x_1+2x_2-x_3 \\ s.t. \quad & -4x_1+3x_2+x_3\geq 4 \\ & x_1-x_2+2x_3\leq 10 \\ & -2x_1+2x_2-x_3=-1 \\ & (x_1,x_2,x_3)\geq 0. \end{aligned} \iff \begin{aligned} \min \quad & -3x_1-2x_2+x_3 \\ s.t. \quad & -4x_1+3x_2+x_3-x_4=4 \\ & x_1-x_2+2x_3+x_5=10 \\ & 2x_1-2x_2+x_3=1 \\ & (x_1,x_2,x_3,x_4,x_5)\geq 0. \end{aligned}$$

解: 引入人工变量x_6,x_7. 问题变为

$$\begin{aligned} \min \quad & -3x_1-2x_2+x_3+Mx_6+Mx_7, \\ \text{s.t.} \quad & -4x_1+3x_2+x_3-x_4+x_6=4 \\ & x_1-x_2+2x_3+x_5=10 \\ & 2x_1-2x_2+x_3+x_7=1 \\ & (x_1,x_2,x_3,x_4,x_5,x_6,x_7)\geq 0. \end{aligned}$$

(注意上面第二个约束条件没有引入人工变量, 因为x_5是松弛变量, 本身可以作为基向量.) 则可以列出原始的表：

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	b
	-4	3	1	-1	0	1	0	4
	1	-1	2	0	1	0	0	10
	2	-2	1	0	0	0	1	1
r^T	-3	-2	1	0	0	M	M	

注意x_5不是人工变量, x_6,x_7是人工变量, 则在迭代过程中x_6,x_7会被移出单纯形表, 而x_5不会被移出单纯形表. 先化成初始单纯形表:

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	b
	-4	3	1	-1	0	1	0	4
	1	-1	2	0	1	0	0	10
	2	-2	(1)	0	0	0	1	1
r^T	$2M-3$	$-2-M$	$1-2M$	M	0	0	0	

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	b
	-6	(5)	0	-1	0	1	3
	-3	3	0	0	1	0	8
	2	-2	1	0	0	0	1
r^T	$6M-5$	$-5M$	0	M	0	0	

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
	$-6/5$	1	0	$-1/5$	0	$3/5$
	$3/5$	0	0	$3/5$	1	$31/5$
	$-2/5$	0	1	$-2/5$	0	$11/5$
r^T	-5	0	0	0	0	

最终变成

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
	0	1	0	1	2	13
	1	0	0	1	$5/3$	$31/3$
	0	0	1	0	$2/3$	$19/3$
r^T	0	0	0	5	$25/3$	

最优解为$\left(\frac{31}{3}, 13, \frac{19}{3}, 0, 0\right)$, 最优目标函数值是$\frac{152}{3}$.

习题 3 (Week 4)

1. 用两阶段法求解

$$\begin{aligned} \min \quad & -3x_1 + x_2 + 3x_3 - x_4 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + 2x_2 - x_3 + x_4 = 0 \\ & 2x_1 - 2x_2 + 3x_3 + 3x_4 = 9 \\ & x_1 - x_2 + 2x_3 - x_4 = 6 \\ & x_i \geq 0, i = 1, 2, 3, 4. \end{aligned}$$

2. 用大M法求解:

$$\begin{aligned} \max \quad & -5x_1 + 8x_2 \\ \text{s.t.} \quad & 3x_1 + x_2 \leq 6 \\ & x_1 - 2x_2 \geq 4 \\ & (x_1, x_2) \geq 0. \end{aligned}$$

§ 1.4 (*)单纯形法的矩阵形式

设$B \in \mathbb{R}^{m\times m}$是基矩阵, 即$B$是$A$的非奇异矩阵(nonsingular submatrix). 与前面一样, 我们假设B由A的前m列组成, 则对A, x, c进行分割, 得

$$A = (B, D), x^T = (x_B^T, x_D^T), c^T = (c_B^T, c_D^T).$$

标准线性规划可以写为

$$\begin{aligned} \min \quad & c_B^T x_B + c_D^T x_D \\ \text{s.t.} \quad & B x_B + D x_D = b \\ & x_B \geq 0, x_D \geq 0. \end{aligned}$$

让$x_D = 0$, 则可以得到$Ax = b$的基解$x = (B^{-1}b, 0)$. 如果B是可行基, 则上述基解也是基可行解.

基变量与非基变量的关系是

$$x_B = B^{-1}b - B^{-1}Dx_D.$$

消掉目标函数的基变量, 可以得到

$$z = c_B^T(B^{-1}b - B^{-1}Dx_D) + c_D^T x_D = c_B^T B^{-1}b + (c_D^T - c_B^T B^{-1}D)x_D.$$

这两个关系在单纯形法中非常重要. 向量$r_D^T \triangleq c_D^T - c_B^T B^{-1} D$是非基变量的相对价值向量(relative cost vector). 这个向量会被用来决定哪个向量进基.

初始的单纯形表形如

$$\begin{pmatrix} A & b \\ c^T & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B & D & b \\ c_B^T & c_D^T & 0 \end{pmatrix}$$

这不是通常的典范形式, 因此不能对应单纯形法步骤中的任何一步.

如果矩阵B是基, 则对应的单纯形表变成

$$\begin{pmatrix} I & B^{-1}D & B^{-1}b \\ 0 & c_D^T - c_B^T B^{-1} D & -c_B^T B^{-1} b \end{pmatrix}$$

这就是单纯形法的矩阵形式.

1.4.1 修改后的单纯形法

经验产生于大量的计算. 单纯形法在大概$m \sim 1.5m$的旋转操作就能收敛于最优基可行解. 特别地, 如果$m << n$, 则在迭代过程中, 旋转只会在小部分的列中发生. 由于其他列没有很明显被利用, 则在每次旋转后计算这些列产生的计算量在某种程度上有点浪费时间. 因此我们要修改单纯形法来减少没必要的计算.

给定当前基的逆矩阵B^{-1}, 以及$x_B = y_0 = B^{-1}b, x_D = 0$, 做下列步骤:

(1)计算当前的相对价值系数$r_D^T = c_D^T - c_B^T B^{-1} D$. 通过先计算$\lambda^T = c_B^T B^{-1}$然后再计算相对价值向量$r_D^T = c_D^T - \lambda^T D$. 如果$r_D \geq 0$, 则当前的解是最优的.

(2)通过选择负得最多的价值系数来决定哪个向量a_q进基, 并计算$y_q = B^{-1} a_q$, 可以得到用当前基线性表示的向量a_q.

(3)如果没有y_{iq}(y_q的第i个分量)比0大, 停机, 这个问题是无界的. 否则, 对满足$y_{iq} > 0$的i计算$\dfrac{y_{i0}}{y_{iq}}$决定哪个向量出基.

(4)更新B^{-1}与当前的解$B^{-1}b$, 并重做步骤(1).

如何更新B^{-1}? 我们只需说明A的Gauss消去法对应B^{-1}的Gauss消去法. 设当前的基是$B = (a_1, a_2, \cdots, a_m)$, 且想要$a_q$进基, a_p出基.

$$\begin{aligned}
A = (B, D) &\xrightarrow{B^{-1}} (I, B^{-1}D) \\
&= (B^{-1}a_1, \cdots, B^{-1}a_m, B^{-1}a_{m+1}, \cdots, B^{-1}a_n) \\
&= (e_1, \cdots, e_p, \cdots, e_m, y_{m+1}, \cdots, y_q, \cdots, y_n) \\
&\xrightarrow{Q} (Qe_1, \cdots, Qe_p, \cdots, Qe_m, Qy_{m+1}, \cdots, Qy_p, \cdots, Qy_n) \\
&= (e_1, \cdots, e_{p-1}, Qe_p, e_{p+1}, \cdots, e_m, Qy_{m+1}, \cdots, Qy_{q-1}, e_p, Qy_{q+1}, \cdots, Qy_n).
\end{aligned}$$

新的基是$\overline{B} = (a_1, \cdots, a_{p-1}, a_{p+1}, \cdots, a_m, a_q)$($a_p$被踢出去了). 显然有

$$(QB^{-1})\overline{B} = (e_1, \cdots, e_{p-1}, e_{p+1}, \cdots, e_m, e_p).$$

这是单位矩阵的一个列变换. 因此, 我们用同样的Gauss消去法, 通过把y_q变成e_p来更新B^{-1}.

第 2 章　凸分析初步

§ 2.1　凸集

2.1.1　凸集

引入如下定义:

- **线**: 通过点x_1, x_2的直线(line)是$x = \theta x_1 + (1-\theta)x_2, \theta \in \mathbb{R}$.
- **仿射集**: $L \subset \mathbb{R}^n$叫线性类(linear variety)或者仿射集(affine set), 若给定任意的$x, y \in L$, 对任意的$\theta \in \mathbb{R}$都有$\theta x + (1-\theta)y \in L$. 也就是说仿射集包含通过集合里面两个点的直线上的所有线段.

注: 设$L \subset \mathbb{R}^n$是个线性类, 容易证明对任意的$x_0 \in L$, 集合$L - x_0 \triangleq \{x - x_0 : x \in L\}$是$\mathbb{R}^n$的子空间, $L - x_0$的维数定义为L的维数.

例 2.1.1 *线性方程$Ax = b$的解集是仿射集. 反过来, 每个仿射集都可以这样表示.*

- **线段**: x_1, x_2之间的线段(line segment)包含所有点$x = \theta x_1 + (1-\theta)x_2$, 这里$0 < \theta < 1$.
- **凸集**: 集合$X \subset \mathbb{R}^n$叫凸集(convex set), 如果它包含集合里任两点连成的线段上的任意点, 即

$$x_1, x_2 \in X, 0 \le \theta \le 1 \Rightarrow \theta x_1 + (1-\theta)x_2 \in X.$$

- **数乘**: 设$\alpha \in \mathbb{R}$, 则$\alpha X = \{\alpha x : x \in X\}$.
- **Minkowski和**: $X + Y = \{x + y : x \in X, y \in Y\}$.
- **凸组合**: 如果存在$\alpha_i \ge 0, i = 1, 2, \cdots, m$使得$x = \alpha_1 x_1 + \cdots + \alpha_m x_m$, 且$\alpha_1 + \cdots + \alpha_m = 1$, 则称点$x$是$x_1, \cdots, x_m$的凸组合(convex conbination).
- **凸包**: 所有包含X的凸集的交（即包含X的最小的凸集）叫做X的凸包(convex hull), 记为$\mathrm{conv}X$.

凸集的基本性质:

- **(取交集封闭):** 设I是任意一个指标集, 如果集合$X_i \subset \mathbb{R}^n$都是凸的, 这里$i \in I$, 则集合$X = \bigcap_{i \in I} X_i$也是凸集.
- **(线性组合封闭):** 设X, Y是$\mathbb{R}^n$中的凸集, 令α, β为实数, 则$\alpha X + \beta Y$是凸集.
- **(内点与闭包封闭):** 如果$X \subset \mathbb{R}^n$凸, 则它的内点$\mathrm{int}X$与闭包$\overline{X}$都是凸集.

引理 2.1.1 *集合$\mathrm{conv}X$是X中所有点的凸组合.*

$$\mathrm{conv}X = \left\{ \sum_{i=1}^{k} \alpha_i x_i \middle| x_i \in X, a_i \ge 0, i = 1, 2, \cdots, k; \sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 1. \right\}$$

定理 2.1.2 (Carathéodory, 1907) *如果$X \subset \mathbb{R}^n$, 则集合$\mathrm{conv}X$中的每个元素是至多$n+1$个X中点的凸组合.*

证明: 任取$x \in \mathrm{conv}M$, 由前一定理, x可以写成M中元的凸组合. 即$x = \lambda_1 x_1 + \cdots + \lambda_m x_m$. 下面用反证法. (反证)若$m > n+1$, 则$x_1, \cdots, x_m$线性相关, 存在不全为0的实数$\alpha_1, \cdots, \alpha_m$, 使得

$$\boxed{\alpha_1 + \cdots + \alpha_m = 0, \alpha_1 x_1 + \cdots + \alpha_m x_m = 0.}\text{(第一个等式不太重要)}$$

不妨设$\alpha_m > 0$且设对于$\alpha_k > 0$的k满足$\dfrac{\lambda_m}{\alpha_m} \le \dfrac{\lambda_k}{\alpha_k}$. 对$1 \le k \le m$,取$\beta_k = \lambda_k - \dfrac{\lambda_m}{\alpha_m}\alpha_k$, 则$\beta_m = 0, \beta_k \ge 0, 1 \le k \le m-1$, 且

$$\sum_{k=1}^{m} \beta_k = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k - \frac{\lambda_m}{\alpha_m} \sum_{k=1}^{m} \alpha_k = 1.$$

另一方面, 我们有

$$\sum_{k=1}^{m-1}\beta_k x_k=\cdots=x, (\text{简单化简})$$

(相当于把所有分量都减去一定倍数) 从而我们把x写成M中$m-1$个元的凸组合, 这个过程可以重复进行下去, 直到x表示成M中至多$n+1$个点的凸组合. □

注: 逆命题不成立, 考虑凸集挖掉一点构成集合A, 它的闭包是凸集, 但A非凸.

注: 参考冯德兴《凸分析基础》.

定理 2.1.3 设集合$X\subset\mathbb{R}^n$凸, 则$\mathrm{int}X=\varnothing$当且仅当$X$包含在小于$n$维的线性类（仿射集）中.

2.1.2 保凸操作

建立集合X的凸性的方法:

(1)用定义: $x_1,x_2\in X, 0\le\theta\le 1\Rightarrow \theta x_1+(1-\theta)x_2\in X$.

(2)证明X可以从简单的凸集(超平面、半空间、范数诱导的球)作保持凸性的运算得到. 比如取交集、仿射变换、透视变换(perspective transformation)、分式线性变换.

(i)仿射变换(affine transformation): 设$f\in\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^m$是仿射变换, 即$f(x)=Ax+b, A\in\mathbb{R}^{m\times n}, b\in\mathbb{R}^m$.

(ii)透视变换: 透视函数$P:\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}^n$定义为$P(x,t)=\dfrac{x}{t}$, 定义域为$dom(P)=\{(x,t)|t>0\}$.

(iii)分式线性变换$f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^m$, $f(x)=\dfrac{Ax+b}{c^Tx+d}$, 定义域为$dom(f)=\{x|c^Tx+d>0\}$.

注: 在上面两个映射下, 像和原像都是凸集.

参考书：S. Boyd, L. Vandenberghe的《凸优化》.

习题 4 (补充习题)

1. 如果$A\subset B$且B是凸集, 则$\mathrm{conv}A\subset B$.
2. 设$A,B\in\mathbb{R}^n$是凸集, 则
$$\mathrm{conv}(A\cup B)=\{\lambda a+(1-\lambda)b:0\le\lambda\le 1, a\in A, b\in B\}.$$
3. $\mathbb{R}^n$中任意一个m维单纯形$\mathrm{conv}\{b_0,\cdots,b_m\}$ 中每一点表示成其顶点的凸组合的形式是唯一的.
4. 证明下面形式的Caratheodory定理: 设M是$\mathbb{R}^n$中非空子集, $y\in M, x\in\mathrm{conv}M$, 则存在点$x_1,\cdots,x_k\in M(k\le n)$, 使得$x\in\mathrm{conv}\{y,x_1,\cdots,x_k\}$.
5. 设M是$\mathbb{R}^n$中非负象限$\mathbb{R}^n_+$中的闭子集, 并设e_k是第k个分量为1, 其余分量为0的向量. 假定对于任意$x\in M$, 存在正实数$\lambda_1,\cdots,\lambda_n$, 使得$x+\lambda_k e_k\in M, \forall 1\le k\le n$, 证明: $\mathrm{conv}M$是闭子集.

习题的简单解答（如果有误欢迎指出）

1. **证明:** 设$x\in\mathrm{conv}A$, 则x可以写成A中元素的凸组合:
$$x=\sum_{i=1}^n\alpha_i x_i, x_i\in A, \alpha_i>0, \sum_{i=1}^n\alpha_i=1.$$
由于$A\in B$, 则x也是B中元素的凸组合, 从而$x\subset\mathrm{conv}B$. 由凸包的定义(B的凸包是包含B的最小凸集), $\mathrm{conv}B=B$, 则$\mathrm{conv}A\subset B$. □
2. **证明:** (1)先设$x\in\mathrm{conv}(A\cup B)$, 把$x$写成$A\cup B$中元素的凸组合:
$$x=\sum_{i=1}^n\alpha_i x_i, x_i\in A\cup B, \alpha_i>0, \sum_{i=1}^n\alpha_i=1.$$
x_i要么属于A, 要么属于B. 不妨设$x_1,\cdots,x_m$属于A, 其余属于B, 则
$$x=\sum_{i=1}^m\alpha_i x_i+\sum_{i=m+1}^n\alpha_i x_i,$$
记$\lambda=\sum\limits_{i=1}^m\alpha_i$, 再由$A,B$是凸集即可证完.
(2)略.

3. **证明:** 由于conv$\{b_0,\cdots,b_m\}$是m维的单纯形, 则向量$b_0,\cdots,b_m$线性无关. 记$x\in\mathrm{conv}\{b_0,\cdots,b_m\}$, 且

$$x=\sum_{i=0}^{m}\alpha_i b_i,\alpha_i\geq 0,\sum\alpha_i=1.$$

若还有

$$x=\sum_{i=0}^{m}\beta_i b_i,\beta_i\geq 0,\sum\beta_i=1,$$

两式相减可得$0=\sum_{i=0}^{m}(\alpha_i-\beta_i)b_i$, 由于$b_0,\cdots,b_m$线性无关, 则$\alpha_i-\beta_i=0$. □

4. **证明:** 记$x=\sum_{i=1}^{k}\lambda_i x_i$是凸组合, 由前面的Caratheodory定理, $k\leq n+1$. 若$k\leq n$, 则命题已证完(trivial), 只需证$k=n+1$的情况.

此时, $x_1,\cdots,x_{n+1},y$必线性相关, 从而存在不全为0的$\alpha_0,\alpha_1,\cdots,\alpha_{n+1}\in\mathbb{R}$, 使得

$$\alpha_0+\alpha_1+\cdots+\alpha_{n+1}=0,\alpha_0 y+\alpha_1 x_1+\cdots+\alpha_{n+1}x_{n+1}=0.$$

为了方便, 把y记为x_0, 且$\lambda_0=0$. 不妨设$\alpha_{n+1}>0$, 且对于$\alpha_k>0$的k满足$\frac{\lambda_{n+1}}{\alpha_{n+1}}\leq\frac{\lambda_k}{\alpha_k}$. 取

$$\beta_k=\lambda_k-\frac{\lambda_{n+1}}{\alpha_{n+1}}\alpha_k,k=0,1,\cdots,n$$

则$\beta_{n+1}=0,\beta_k\geq 0,k=0,1,2,\cdots,n$, 且$\sum_{k=0}^{n}\beta_k=1$. 且

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{n}\beta_k x_k&=\sum_{k=0}^{n}\left(\lambda_k-\frac{\lambda_{n+1}}{\alpha_{n+1}}\alpha_k\right)x_k\\&=x-\lambda_{n+1}x_{n+1}-\frac{\lambda_{n+1}}{\alpha_{n+1}}\cdot(-\alpha_{n+1}x_{n+1})=x.\end{aligned}$$

所以$x\in\mathrm{conv}\{y,x_1,\cdots,x_n\}$. □

5. (我也不会啊!)

§ 2.2 超平面

定义 2.2.1 (超平面(Hyperplane)) $\mathbb{R}^n$中的超平面是个$n-1$维的线性类.

注: 除去整个空间, 超平面是空间中的最大的线性类.

定理 2.2.1 (超平面的特征) 设$a\in\mathbb{R}^n,a\neq 0,b\in\mathbb{R}$, 集合$H\subset\mathbb{R}^n$是超平面当且仅当

$$H:=\{x\in\mathbb{R}^n|a^Tx=b\}.$$

证明: "$\Leftarrow$"容易验证H是个超平面.

"$\Rightarrow$": 设H是个超平面, 记$x_0\in H$并且定义$M=H-x_0$, 则M是$n-1$维子空间, 则正交补空间$M^\perp$是一维的. 取$a\in M^\perp,a\neq 0,b=a^Tx_0$, 容易验证$H=\{x\in\mathbb{R}^n:a^Tx=b\}$. □

定义 2.2.2 (半空间(halfspace)) 设$a\in\mathbb{R}^n,a\neq 0,b\in\mathbb{R}$, 对应超平面

$$H=\{x\in\mathbb{R}^n:a^Tx=b\}$$

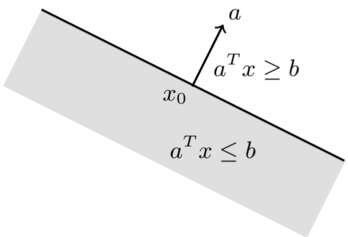
为闭的正半空间与负半空间

$$H_+=\{x\in\mathbb{R}^n:a^Tx\geq b\},H_-=\{x\in\mathbb{R}^n:a^Tx\leq b\}.$$

以及开的正半空间与负半空间

$$H_+^\circ=\{x\in\mathbb{R}^n:a^Tx>b\},H_-^\circ=\{x\in\mathbb{R}^n:a^Tx<b\}.$$

注: $a\in\mathbb{R}^n$称为**正规向量(normal vector)**. 超平面是仿射集且为凸集; 半空间为凸集.



下面引入更多定义.

- **Euclid球**: 以x_c为中心、r为半径的Euclid球(Euclidean ball)指
$$B(x_c, r) = \{x : \|x - x_c\|_2 \leq r\} = \{x_c + ru | \|u\|_2 \leq 1\}.$$
- **椭球**: 形如
$$\{x : (x - x_c)^T P^{-1}(x - x_c) \leq 1\}$$
这里P对称正定. 或者写$\{x_c + Au : \|u\|_2 \leq 1\}$, 其中$AA^T = P$.
- **范数**: 范数就是满足下面条件的函数$\|\cdot\|$:
(1)$\|x\| \geq 0$且$\|x\| = 0$当且仅当$x = 0$;
(2)$\|tx\| = |t|\|x\|, t \in \mathbb{R}$;
(3)$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.
- **范数诱导的球**(norm ball): 以x_c为球心、r为半径的球为$\{x | \|x - x_c\| \leq r\}$.

注: 范数诱导的球都是凸集, 因为有三角不等式.
- **多面体(polyhedra)**: 是许多线性不等式与等式$Ax \leq b, Cx = d$的解集.

注: 多面体是有限多个半空间与有限多个超平面的交集.
- **仿射包**: 设$C \subset \mathbb{R}^n$, 则C的**仿射包**(affine hull)(记为aff(C)) 包含所有C中所有点的线性组合. 即
$$\text{aff}(C) := \left\{ \sum_{i=1}^{k} \alpha_i x_i \middle| x_i \in C, \alpha_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2, \cdots, k; \sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 1 \right\}$$

注: 仿射包是包含C的最小仿射集.
- **相对内部**: 设$B = \{x : \|x\| \leq 1\}$是$\mathbb{R}^n$中的单位球, 则凸集C在$\mathbb{R}^n$中的相对内部(relative interior)指
$$ri(C) := \{x \in \text{aff}(C) | \exists \varepsilon > 0, (x + \varepsilon B) \cap \text{aff}(C) \subset C\}.$$

注: 相对内部是相对于仿射包来说的. 此外$A \subset B$不能推出$\text{ri}(A) \subset \text{ri}(B)$. 例如: 平面上的三角形记为$B$, 该三角形上的一条线段为$A$, 则$\text{ri}(A)$不包含于$\text{ri}(B)$.

§ 2.3 投影定理与超平面分离定理

定理 2.3.1 (投影定理) *集合$V \subset \mathbb{R}^n$是非空的闭凸集, 则$x \in \mathbb{R}^n$存在唯一的点$z \in V$, 使得z离x最近.*

下面记
$$\Pi_V(x) = \arg\min_{v \in V} \|v - x\|.$$
代表在空间V中离x最近的那个向量v. (用范数刻画"最近")

引理 2.3.2 *设$V \subset \mathbb{R}^n$非空的闭凸集, 且$x \in \mathbb{R}^n$, 则$z = \Pi_V(x)$当且仅当$z \in V$且*
$$\langle x - z, v - z \rangle \leq 0, \forall v \in V.$$
(等价于投影点的唯一性)

注: 如果V是个仿射集, 则$x - \Pi_V(x) \perp V$.

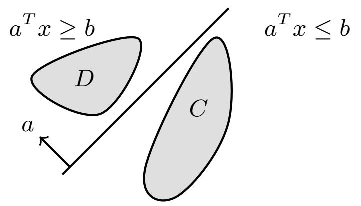
定理 2.3.3 (非扩张性(nonexpansiveness)) *设$V \subset \mathbb{R}^n$非空且为闭凸的, 则$\forall x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}^n$, 都有*
$$\|\Pi_V(x) - \Pi_V(y)\| \leq \|x - y\|.$$

超平面分离定理也叫凸集分离定理.

定理 2.3.4 (超平面分离定理) 设C, D是不相交的凸集, 则存在一个非零向量a与标量b使得

$$a^T x \leq b, \forall x \in C;$$
$$a^T x \geq b, \forall x \in D.$$

超平面$\{x : a^T x = b\}$分离了C和D, 叫做"**分离超平面**(seperating hyperspace)".

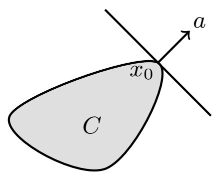


注: 严格的分离需要更多的假设, 比如C是闭集、D是**单点集(singleton)**.

定义 2.3.1 (支撑超平面(supporting hyperplane)) 边界∂C上的点x_0的支撑超平面是

$$\{x | a^T x = a^T x_0\},$$

这里$a \neq 0, a^T x \leq a^T x_0, \forall x \in C$.



定理 2.3.5 (支撑超平面定理) 如果C是凸集, 则在边界∂C上的每个点都存在一个支撑超平面.

定理 2.3.6 (分离超平面定理(separating hyperplane theorem)) 设$X \subset \mathbb{R}^n$非空的闭凸集, 记$x \notin X$, 则存在一个非零向量$y \in \mathbb{R}^n, \varepsilon > 0$使得

$$\langle y, v \rangle < \langle y, x \rangle - \varepsilon, \forall v \in X.$$

注: 若X开, 则点$x \in X$可能是个边界点, 可以得到这个定理的减弱版本:

定理 2.3.7 设$X \subset \mathbb{R}^n$非空的凸集, 记$x \notin X$, 则存在一个非零向量$y \in \mathbb{R}^n$使得

$$\langle y, v \rangle \leq \langle y, x \rangle, \forall v \in X.$$

注: 在两个被分离的目标都是凸集的时候, 分离也是可能完成的.

定理 2.3.8 设X_1, X_2是$\mathbb{R}^n$中非空的凸集, 若$X_1 \cap X_2 = \varnothing$, 则存在一个非零向量$y \in \mathbb{R}^n$使得

$$\langle y, x_1 \rangle \leq \langle y, x_2 \rangle, \forall x_1 \in X_1, x_2 \in X_2.$$

注: 如果两个集合都是闭凸且其中一个有界, 则严格的分离也可完成.

定理 2.3.9 设X_1, X_2是$\mathbb{R}^n$中非空的闭凸集, X_1有界. 若$X_1 \cap X_2 = \varnothing$, 则存在一个非零向量$y \in \mathbb{R}^n$和$\varepsilon > 0$, 使得

$$\langle y, x_1 \rangle \leq \langle y, x_2 \rangle - \varepsilon, \forall x_1 \in X_1, x_2 \in X_2.$$

注: 上面的有界条件是必须的. 比如$X_1 = \{x \in \mathbb{R}^2 | x_2 \leq 0\}, X_2 = \{x \in \mathbb{R}^2 | x_2 \geq e^{x_1}\}$不可以严格分开.

定理 2.3.10 (分离超平面定理) 设$C \subset \mathbb{R}^n$凸, $y \in \overline{C}^c$, 则存在一个非零向量$a \in \mathbb{R}^n$, 使得$a^T y < \inf\limits_{x\in C} a^T x$.

证明: 定义
$$\delta = \inf_{x\in C} \|x-y\| > 0.$$
存在一个点$x_0 \in \partial C$使得$\|x_0 - y\| = \delta$. 这是因为函数$f(x) = \|x-y\|$连续, 在有界的闭集的边界上取最小值. 而且很显然, 我们只需要考虑$x \in \overline{C} \cap B(y, 2\delta)$.

我们要证明$a = x_0 - y \neq 0$满足这个定理的结果. 设$x \in C, \forall \alpha \in [0,1]$, 点$(1-\alpha)x_0 + \alpha x \in \overline{C}$, 因此
$$\|(1-\alpha)x_0 + \alpha x - y\|^2 \geq \|x_0 - y\|^2.$$
把左边展开并让$\alpha \to 0$, 我们可以得到$(x_0 - y)^T (x - x_0) \geq 0$, 因此
$$\begin{aligned}(x_0 - y)^T x &\geq (x_0 - y)^T x_0 \\ &= (x_0 - y)^T y + (x_0 - y)^T (x_0 - y) \\ &= (x_0 - y)^T y + \delta^2.\end{aligned}$$
因此
$$\inf_{x\in C} (x_0 - y)^T x \geq (x_0 - y)^T y + \delta^2 > (x_0 - y)^T y.$$
让$a = x_0 - y$就行了. □

注: 这个定理与定理2.3.6是等价的.

下面都让$a = x_0 - y$.

例 2.3.1 超平面$H_1 := \{x \in \mathbb{R}^n : a^T x = a^T y\}$包含了$y$, 且在它的开的半平面$(H_1)_+^\circ$中包含$C$.

例 2.3.2 超平面$H_2 := \{x \in \mathbb{R}^n : a^T x = a^T \dfrac{x_0 + y}{2}\}$分离了$y$与$C$.

这是因为$a^T y < a^T \dfrac{x_0 + y}{2} < a^T x, \forall x \in C$. 显然分离超平面不是唯一的.

定理 2.3.11 (支撑超平面定理) 设$C \subset \mathbb{R}^n$凸, $y \in \partial C$, 则存在一个非零向量$a \in \mathbb{R}^n$, 使得$a^T y \leq \inf\limits_{x\in C} a^T x$.

证明: 设$\{y_k\} \subset \overline{C}^c$是一族向量, 且$y_k \to y$, 设$\{a_k\}$是分离超平面定理里面构造的一族向量, 且满足$\|a_k\| = 1$(正规化), 且满足$a_k^T y_k < \inf\limits_{x\in C} a_k^T x$. 我们设$a_k \to a$(如果有必要, 取子列), 则$\forall x \in C$, 有
$$a^T y = \lim_{k\to\infty} a_k^T y_k \leq \lim_{k\to\infty} a_k^T x = a^T x.$$
右侧关于x取inf即可. □

注: 超平面$H = \{x \in \mathbb{R}^n : a^T x = a^T y\}$包含了$y$, 且在它的闭的半空间$H_+$中包含了$C$. H也叫C在y处的支撑超平面.

注: 这个定理相当于由分离超平面定理取一下极限即可得到.

定理 2.3.12 (投影定理) 设$C \subset \mathbb{R}^n$是闭凸的. 对任意$y \in \mathbb{R}^n$, 存在唯一的点$x_0 \in C$使得
$$\|y - x_0\| = \inf_{x\in C} \|y - x\|,$$
点x_0记为$\Pi_C(y)$叫做y在C上的投影, 满足
$$(\Pi_C(y) - y)^T (x - \Pi_C(y)) \geq 0, \forall x \in C.$$

证明: 在分离超平面定理的证明过程中, 存在$x_0 \in C$使得$\|y - x_0\| = \inf\limits_{x\in C} \|y - x\|$, 且$\forall x \in C$, 有$(x_0 - y)^T (x - x_0) \geq 0$. 如果存在$x_0' \in C$也满足$(x_0' - y)^T (x - x_0') \geq 0$, 则
$$(x_0 - y)^(x_0' - x_0) \geq 0, (x_0' - y)^T (x_0 - x_0') \geq 0$$
叠加两条式子可得$\|x_0 - x_0'\|_2 \leq 0$, 从而$x_0 = x_0'$. □

注: 与定理2.3.1和引理2.3.2等价.

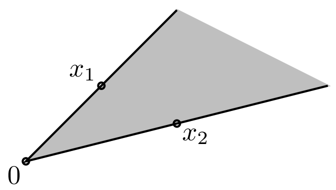
§ 2.4 (*)凸锥

不考. 用记号“$X \succeq 0$”表示矩阵X半正定. 而$X \succ 0$表示正定.

2.4.1 基本定义与性质

基本定义:

- 称K是个**锥(cone)**, 如果$\forall x \in K, \forall \alpha > 0, \alpha x \in K$.
- 若锥K是凸集, 称K是**凸锥(convex cone)**.
- x_1, x_2的**非负组合**是$x = \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$, 其中$\theta_1, \theta_2 \geq 0$.



注: 如果集合K包含0, 且包含所有K中的点的所有非负组合, 则集合K是锥.

- 设S^n, S^n_+, S^n_{++}分别是n阶对称矩阵、半正定对称矩阵和正定对称矩阵构成的集合.

$$S^n \triangleq \{X \in \mathbb{R}^{n\times n} : X^T = X\},$$

$$S^n_+ \triangleq \{X \in \mathbb{R}^{n\times n} : X \succeq 0\}.$$

$$S^n_{++} \triangleq \{X \in \mathbb{R}^{n\times n} : X \succ 0\}.$$

注: S^n_+是凸锥.

例 2.4.1 $\begin{pmatrix} x & y \\ y & z \end{pmatrix} \in S^2_+$.

引理 2.4.1 *设K是凸锥, 若$x_i \in K, \alpha_i > 0$对$i = 1, 2, \cdots, m$成立, 则$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i x_i \in K$.*

例 2.4.2 范数诱导的锥. $\{(x, t) : \|x\|_\beta \leq t, x \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}\}$.

注: 所有范数诱导的锥都是凸的. Euclid范数锥也叫“二阶锥”或者“冰激淋锥”、“Lorentz锥”.

引理 2.4.2 (生成锥, generated cone) *设X是凸集, 则集合$\operatorname{cone}(X) = \{\gamma x : x \in X, \gamma \geq 0\}$是个凸锥.*

例 2.4.3 设$\{x_1, \cdots, x_m\}$是$\mathbb{R}^n$中m个点. 则

$$C := \left\{ x = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i x_i \in \mathbb{R}^n : \alpha_i \geq 0, i = 1, 2, \cdots, m \right\}.$$

是个闭凸锥, 由$\{x_1, \cdots, x_m\}$生成.

- **可行方向锥(径向锥)**, the cone of feasible directions or radial cone. 设X是凸集, $x \in X$, 则凸锥

$$K_X(x) \triangleq \operatorname{cone}(X - x) = \{\tau(y - x) : y \in X, \tau \geq 0\}$$

  叫X在x处的可行方向锥, 或叫径向锥.

- **收缩锥(recession cone):** 设K是锥, 则集合

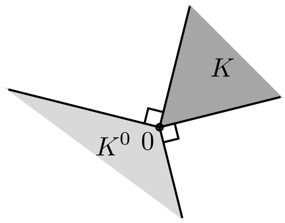
$$X_\infty := \{d \in \mathbb{R}^n : X + d \subset X\}$$

  是个凸锥, 叫X的收缩锥.

- **极锥(polar cone):** 设K是锥, 则集合

$$K^\circ := \{y : \langle y, x \rangle \leq 0, \forall x \in K\}$$

  叫X的极锥.



- **对偶锥(dual cone):** 对偶锥是极锥的相反数. 即
$$K^* := -K^\circ = \{y \in \mathcal{X} : \langle y, x\rangle \geq 0, \forall x \in K\}$$
- **自对偶锥(self-dual cone)**: 称K是自对偶的, 若$K^* = K$.

例 2.4.4 $(\mathbb{R}^n_+)^\circ = -\mathbb{R}^n_+, (\mathbb{R}^n_+)^* = \mathbb{R}^n_+$, $(S^n_+)^\circ = -S^n_+, (S^n_+)^* = S^n_+$. *它们也是自对偶锥.*

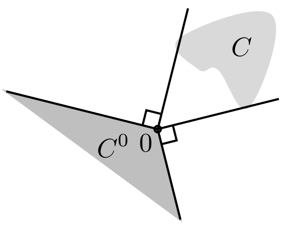
例 2.4.5 $K_1 \triangleq \{(x,t) : \|x\|_1 \leq t\}, K_1^* = \{(x,t) : \|x\|_\infty \leq t\}$. $K_2 \triangleq \{(x,t) : \|x\|_2 \leq t\}, K_2^* = \{(x,t) : \|x\|_2 \leq t\}$. *从而*$K_2$*是自对偶锥,* K_1*不是.*

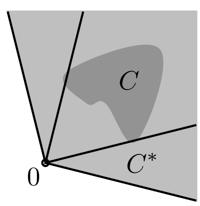
关于对偶锥, 有如下性质:
- 设K_i都是锥, $i = 1, 2, \cdots, m$. 则$K_1 + \cdots + K_m$也是锥, 且
$$(K_1 + K_2 + \cdots + K_m)^\circ = K_1^\circ \cap K_2^\circ \cap \cdots \cap K_m^\circ.$$
- 设K是凸锥, 则极锥K°是闭凸的, 此外$K^\circ = \overline{K}^\circ$.
- 设K是锥, $y \in \mathbb{R}^n$满足$x \in K$时$\langle y, x\rangle$有界, 则$y \in K^\circ$.
- 设K是闭凸锥, 则$(K^\circ)^\circ = K$.
- 设C是$\mathbb{R}^m$中的闭凸锥, $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$是矩阵, 则
$$K = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \in C\}$$
是闭凸锥, 且
$$K^\circ = \{A^T\lambda \in \mathbb{R}^n : \lambda \in C^\circ\}.$$

注: $\{x : Ax \leq 0\}^\circ = \{A^T\lambda : \lambda \geq 0\}$.

注: 这个性质可以推出**择一系统**定理：下面两个系统之一有解：(1)$Ax \leq 0, \langle c, x\rangle > 0$; (2)$c = A^T\lambda, \lambda \geq 0$.

注: 极锥和对偶锥也可以对一般的集合定义（不一定是锥或者凸集）.





更多性质: 设C, C_1, C_2是集合.
- C^*是闭凸集.
- $C_1 \subset C_2 \Rightarrow C_2^* \subset C_1^*$.
- 若C有非空内部, 则C^*不含直线.(即由一系列散点构成).
- 若C是锥且$\overline{C}$由散点构成, 则C^*有非空内部.
- C^{**}是包含C的最小凸锥的闭集

2.4.2 (*)锥的分离

引理 2.4.3 *设*K_1, K_2*是凸锥,* $K_1 \cap K_2 = \varnothing$. *则存在*$y_i \in K_i, i = 1, 2,$ *使得*$y_1 + y_2 = 0$.

证明: 由凸集分离定理, 存在$y \neq 0$使得
$$\langle y, x_1\rangle \leq \langle y, x_2\rangle, \forall x_1 \in K_1, x_2 \in K_2.$$
利用对偶锥的第三个性质, $y \in K_1^\circ, -y \in K_2^\circ$. 令$y_1 = y, y_2 = -y$即可. □

定理 2.4.4 设$K_i \subset \mathbb{R}^n$是凸锥, $i = 1, 2, \cdots, m$. 若$\bigcap_{i=1}^{m} K_i = \varnothing$, 则存在不全为0的$y_i \in K_i^\circ, i = 1, 2, \cdots, m$, 使得

$$y_1 + y_2 + \cdots + y_m = 0.$$

定理 2.4.5 设C是集合. 若$x \in C^\circ$, 则对任意的非零的$y \in C^\circ$, 都有$\langle y, x\rangle < 0$.

利用这两个定理, 可以建立一个计算锥的交的极锥的公式:

定理 2.4.6 设$K_1, \cdots, K_m$是$\mathbb{R}^n$中的凸锥. 若$K_1 \cap K_2^\circ \cap \cdots \cap K_m^\circ = \varnothing$, 则

$$(K_1 \cap K_2 \cap \cdots \cap K_m)^\circ = K_1^\circ + \cdots + K_m^\circ.$$

若$K_1, \cdots, K_m$还是个多面体, 则条件$K_1 \cap K_2^\circ \cap \cdots \cap K_m^\circ = \varnothing$可以去掉.

定理 2.4.7 设$K_i = \{x \in \mathbb{R}^n : A_i x \le 0$是多面体凸锥, 其中$A_i$是$l_i \times n$阶矩阵. 则

$$(K_1 \cap K_2 \cap \cdots \cap K_m)^\circ = K_1^\circ + \cdots + K_m^\circ.$$

例 2.4.6 设K_1, K_2是闭凸锥, A是$m \times n$阶矩阵. 若

$$0 \in \operatorname{int}\{Ax - y : x \in K_1, y \in K_2\},$$

则

$$\{x \in K_1 : Ax \in K_2\}^\circ = K_1^\circ + \overline{A^T\lambda : \lambda \in K_2^\circ}.$$

注: 若这些锥也是多面体, 则条件$0 \in \operatorname{int}\{Ax - y : x \in K_1, y \in K_2\}$,可以去掉, 且$\overline{A^T\lambda : \lambda \in K_2^\circ}$可以去掉上面的横线(即可以不是闭包).

2.4.3 (*)法锥

定义 2.4.1 (法锥, normal cone) 设$X \subset \mathbb{R}^n$是闭集, $x \in X$. 锥

$$N_X(x) := [\operatorname{cone}(X - x)]^\circ$$

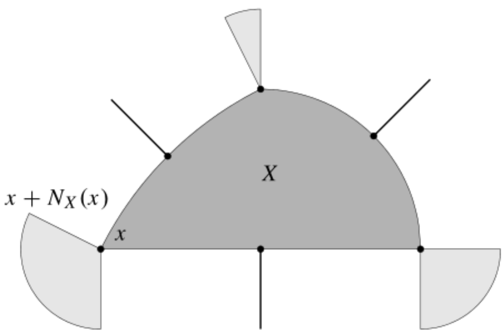
称为X在x处的法锥.

注: $\operatorname{cone}(X - x)$有时也记为$K_X(x)$. 法锥是极锥的一种, 也是闭凸集.

注: 从定义, $v \in N_X(x)$当且仅当$\langle v, y - x\rangle \le 0, \forall x \in X$.

定理 2.4.8 设$X \subset \mathbb{R}^n$是闭集, $x \in X$. 则

$$N_X(x) := \{v \in \mathbb{R}^n : \Pi_X(x + v) = x\}.$$



法锥的例子.

例 2.4.7 设$C \subset \mathbb{R}^n$是闭凸锥, $z \in \mathbb{R}^n$. 考虑投影$x = \Pi_C(z)$, 记$y = z - x$. 由于$\Pi_C(x + y) = x$, 由前一定理, $y \in N_C(x) = [K_C(x)]^\circ$.

§ 2.5 (*)极点

只要知道定义就好.

定义 2.5.1 (极点, extreme point) X是凸集, 点$x \in X$称作X中极点, 若不存在$x_1 \in X$与$x_2 \in X$使得$x = (x_1 + x_2)/2$.

注: 紧凸集的极点可以确定这个凸集.

定理 2.5.1 (Minkowski) 紧凸集$X \subset \mathbb{R}^n$与它的极点的集合的凸包相等. 即$X = \operatorname{conv}(E(X))$, 其中$E(X)$是$X$的所有极点构成的集合.

上述结论可以推广到无界凸集, 要用收缩锥的概念.

引理 2.5.2 闭凸集X有界当且仅当$X_\infty = \{0\}$.

定理 2.5.3 设闭凸集X有至少一个极点, 则X可以表示为$X = \operatorname{conv}(E(X)) + X_\infty$.

定理 2.5.4 设$m \times n$矩阵A, $X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b, x \geq 0\}$, 则$x \in X$是极点当且仅当$x$正分量对应的$A$那一行是线性无关的. 除此之外, 如果$X$有界, 则$X$也是基可行解集的凸包.

§ 2.6 凸函数

2.6.1 基本定义

引入记号如下:

- $\overline{\mathbb{R}} = \mathbb{R} \cup \{-\infty, +\infty\}$.
- $\|\cdot\|_\circ$代表$\mathbb{R}^n$中的任意范数.
- f的值域: $\operatorname{dom} f := \{x : f(x) < \infty\}$.
- f的图像(epigraph): $\operatorname{epi} f = \{(x, v) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} : f(x) \leq v\}$.

设$C \subset \mathbb{R}^n$是非空的凸集且$f : C \to \overline{\mathbb{R}}$. 引入定义:

- 称f是C中的**凸函数**(convex), 若

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y), \forall x, y \in C, \alpha \in (0,1).$$

注: 等价定义: f是凸函数等价于$\operatorname{epi} f$是凸集.

- 称f是C中的**严格凸函数**(strictly convex), 若

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) < \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y), \forall x, y \in C, x \neq y, \alpha \in (0,1).$$

- 称f是C中的**强凸函数**(strongly convex), 若

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y) - \frac{1}{2}\mu\alpha(1-\alpha)\|x-y\|^2, \forall x, y \in C, \alpha \in (0,1).$$

- 称f是C中的**凹函数**(concave), 若$-f$是凸函数.
- 把f称为**适定函数**(proper), 若$f(x) > -\infty, \forall x$, 且至少有一个$x$使得$f(x) < +\infty$. **注:** 函数$f : \mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$是不适定的情况有: (1)$f(x) = -\infty, \exists x$; 或者(2)$f(x) = +\infty, \forall x$. 我们下面都研究适定函数.
- **下半连续函数**: 函数$f : \mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$叫**下半连续**函数, 若对每个收敛序列$\{x_k\}$都有

$$f\left(\lim_{k\to\infty} x_k\right) \leq \liminf_{k\to\infty} f(x_k).$$

例 2.6.1 (范数) 范数函数$f(x)=\|x\|$。是适定的凸函数.

例 2.6.2 设$Z\subset\mathbb{R}^n$是闭凸集, 则**距离函数**

$$f(x)=\operatorname{dist}(x,Z)=\min_{z\in Z}\|x-z\|。$$

是适定的凸函数.

注: Z非凸, 则距离函数非凸.

定理 2.6.1 若$\{f_i\}_{i\in I}$是一族凸函数, 则$f(x)=\sup\limits_{i\in I}f_i(x)$也是凸函数.

例 2.6.3 $\lambda_{\max}(A)$是定义在$A\in S^n$的函数. 由于$\lambda_{\max}(A)=\max\limits_{\|y\|\le 1}y^TAy(=\langle y,Ay\rangle)$, 且每个函数$f_y(A)=y^TAy$是关于$A$的线性函数, 则$\lambda_{\max}(\cdot)$是凸函数.

注: $y^TAy=\operatorname{tr}(y^TAy)=\operatorname{tr}(yy^TA)=\langle yy^T,A\rangle$. (用了引理4.2.2).

定理 2.6.2 (Jensen不等式) 若f是凸函数, 则任意的凸组合$\sum\limits_{i=1}^m\alpha_ix_i$, 其中$\sum\limits_{i=1}^m\alpha_i$, 都满足

$$f\left(\sum_{i=1}^m\alpha_ix_i\right)\le\sum_{i=1}^m\alpha_if(x_i).$$

注: m个点的凸组合一定落在这m个点的凸包里.

定理 2.6.3 设f_i是凸函数, $c_i\ge 0$, $i=1,2,\cdots,m$, 则$\sum\limits_{i=1}^m c_if_i$是凸函数.

定理 2.6.4 函数$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$是下半连续的, 当且仅当$\operatorname{epi}f$是闭集.

定理 2.6.5 设$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$, 下水平集$M_\beta=\{x:f(x)\le\beta\}$.
(1)若f是凸函数, 则M_β是凸集.
(2)若f是下半连续的, 则M_β是闭集.

定理 2.6.6 设$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$是凸函数, X是凸集. 则凸优化问题$\min\limits_x\{f(x):x\in X\}$的解集是凸集.

定理 2.6.7 (凸集上的凸函数的最大值) 设$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$是凸函数, $X\subset\operatorname{dom}f$是有界闭凸集. 定义

$$\hat{X}=\arg\max_x\{f(x):x\in X\},$$

则$E(X)\cup\hat{X}=\varnothing$. 此外, 如果$f$还是仿射函数, 则

$$\hat{X}=\operatorname{conv}(E(X)\cup\hat{X}).$$

定理 2.6.8 考虑标准形式的线性规划问题, 可行解集是有界的, 则最优解集最优基可行解的凸包.

注: 如果可行解集无解, 有可能在收缩锥中存在一个射线, 在这条线上目标函数会向下递减到负无穷. 此时没有最优解.

2.6.2 光滑的凸函数

定理 2.6.9 设$C \subset \mathbb{R}^n$是非空开凸集, $f : C \to \mathbb{R}$连续可微, 则有如下结论:

- f是**凸函数**, 当且仅当$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(y - x), \forall x, y \in C$.
- f是**严格凸函数**, 当且仅当$f(y) > f(x) + \nabla f(x)^T(y - x), \forall x, y \in C, x \neq y$.
- 称f是**强凸函数**, 当且仅当$f(y) > f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \dfrac{1}{2}\mu\|x - y\|^2, \forall x, y \in C$ 其中$\mu > 0$是常数.

证明: (1)凸函数: "$\Rightarrow$": 对$x, y \in C, \alpha \in (0, 1)$, 则

$$f(\alpha y + (1 - \alpha)x) \leq \alpha f(y) + (1 - \alpha)f(x).$$

或者写$f(x + \alpha(y - x)) - f(x) \leq \alpha(f(y) - f(x))$. 让$\alpha \to 0^+$即可.

"$\Leftarrow$": 设$x, y \in C, \alpha \in (0, 1), z = \alpha x + (1 - \alpha)y$. 则①$f(x) \geq f(z) + \nabla f(z)^T(x - z)$, ②$f(y) \geq f(z) + \nabla f(z)^T(y - z)$. 让$\alpha\times$①$+(1 - \alpha)\times$②即可得$f$凸.

(2)严格凸: 证明与凸是类似的.

(3)强凸: 对$\mu > 0$, 容易证明f是强凸函数当且仅当$g = f - \dfrac{\mu}{2}\|\cdot\|^2$凸, 即

$$g(y) \geq g(x) + \nabla g(x)^T(y - x), \forall x, y \in C,$$

或者等价地

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{1}{2}\mu\|x - y\|^2, \forall x, y \in C.$$

证明完毕. □

定理 2.6.10 设$C \subset \mathbb{R}^n$是非空开凸集, $f : C \to \mathbb{R}$二次连续可微, 则有如下结论:

- f是**凸函数**, 当且仅当$\nabla^2 f(x)$半正定, $\forall x \in C$.
- f是**严格凸函数**, 当且仅当$\nabla^2 f(x)$正定, $\forall x \in C$.
- f是**强凸函数**, 当且仅当$d^T\nabla^2 f(x)d \geq \mu\|d\|^2, \forall x \in C, d \in \mathbb{R}^n$, 其中$\mu > 0$是常数.
  (即$\nabla^2 f(x) - \mu I_n$是C中半正定阵, 即$\nabla^2 f(x)$的最小特征值超过μ)

证明: 只讲一下大概思路. 考虑

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^T\nabla^2 f(\xi)(y - x)$$

或者

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^T\nabla^2 f(x)(y - x) + o(\|y - x\|^2)$$

即可. □

总结:

f是凸集C上的函数(带一定的光滑性), 则f是凸当且仅当下面其中一个成立: $(x, y \in C, \alpha \in (0, 1))$

- $f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$.
- $f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(y - x)$.
- $\langle\nabla f(x) - \nabla f(y), x - y\rangle \geq 0$.
- $\nabla^2 f(x)$半正定.

f是严格凸当且仅当下面其中一个成立: $(x, y \in C, x \neq y, \alpha \in (0, 1))$

- $f(\alpha x + (1 - \alpha)y) < \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$.
- $f(y) > f(x) + \nabla f(x)^T(y - x)$.
- $\langle\nabla f(x) - \nabla f(y), x - y\rangle > 0$.

注: $\nabla^2 f(x)$正定是"f严格凸"的充分但不必要条件.

f是强凸当且仅当下面其中一个成立: $(x, y \in C, \alpha \in (0, 1))$

- $f(\alpha x+(1-\alpha)y) \leq \alpha f(x)+(1-\alpha)f(y)-\dfrac{1}{2}\mu\alpha(1-\alpha)\|x-y\|^2$.
- $f(y) \geq f(x)+\nabla f(x)^T(y-x)+\dfrac{1}{2}\mu\|x-y\|^2$.
- $\langle \nabla f(x)-\nabla f(y), x-y\rangle \geq \mu\|x-y\|^2$.
- $\nabla^2 f(x)-\mu I_n$半正定.

2.6.3 不光滑的凸函数

例 2.6.4 $f(x)=\|x\|$。任意的范数函数在0处都是非光滑的. 比如说, *Euclid*范数只在0处非光滑, 而$\|x\|_1, \|x\|_\infty$在许多点都非光滑.

注: 不光滑的函数在优化问题中很普遍.

注: 光滑函数的梯度可以推广到非光滑函数, 特别地推广到非光滑的凸函数.

定理 2.6.11 (局部Lipschitz连续性) 设$f:\mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$是凸函数. 对任意的$x \in (\mathrm{dom}\, f)^\circ$, 存在$\delta>0$与*Lipschitz*常数$L$使得

$$|f(y)-f(x)| \leq L\|y-x\|, \text{当} \|y-x\|<\delta.$$

定义 2.6.1 (方向导数) 设$f:\mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$是凸函数. $x \in \mathrm{dom}\, f$. 则对任意的$d \in \mathbb{R}^n$, 下面式子

$$f'(x,d) := \lim_{t\to 0}\frac{f(x+td)-f(x)}{t} \tag{2.1}$$

称为f沿着方向d在x处的方向导数.

定理 2.6.12 (方向导数的存在性) 对任意的$x \in \mathrm{dom}\, f, d \in \mathbb{R}^n$, 极限*(2.1)*存在（有限或者无限都可以）. 此外, 若$x \in (\mathrm{dom}\, f)^\circ$, 则$f'(x;d)$对任意的$d \in \mathbb{R}^n$都是有限.

习题 5

1. 设f是$(0,+\infty)$上的递增凸函数. 证明: 或者f是常函数, 或者$\lim\limits_{x\to\infty} f(x)=+\infty$.
2. 设f是$(0,+\infty)$上的凸函数. 证明: $\lim\limits_{x\to\infty}\dfrac{f(x)}{x}$存在(可能为$+\infty$), 并且
$$\lim_{x\to\infty}\frac{f(x)}{x}=\lim_{x\to\infty}f'_+(x)=\lim_{x\to\infty}f'_-(x).$$
3. 设f是(a,b)上的凸函数, 且$[a,b]\subset(0,\infty)$. 证明: $f\left(\dfrac{1}{x}\right)$是$\left(\dfrac{1}{b},\dfrac{1}{a}\right)$上的凸函数当且仅当$xf(x)$是$(a,b)$上的凸函数.
4. 设$f:[0,2\pi]\to\mathbb{R}$是凸函数, $k\geq 1$是整数. 证明：$a_k=\displaystyle\int_0^{2\pi} f(x)\cos kx\mathrm{d}x \geq 0$.
5. 设$f:(a,b)\to\mathbb{R}$是连续函数, 证明: f是凸函数的充分必要条件是
$$\frac{1}{x_2-x_1}\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx \leq \frac{1}{2}[f(x_1)+f(x_2)], \forall a<x_1<x_2<b.$$
6. 设$K\subset\mathbb{R}^n$是凸集, $f:K\to\mathbb{R}$是凸函数. 且对于$\forall x\in K, f(x)\geq 0$. 证明: $f^2(x)$也是K上的凸函数, 并用例子说明条件$f(x)\geq 0$不能省略.
7. 设f,g是$\mathbb{R}^n$是适定凸函数, 则$f+g$是凸函数, 但未必是适定的.
8. 设f是$\mathbb{R}^n$是适定凸函数, 则$\forall\lambda\geq 0$, λf是适定凸函数.
9. **【2018期末】**给定$A\in\mathbb{R}^{m\times n}, b\in\mathbb{R}^m$, 以及凸函数$c_i:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}, i\in I$. 这里$I$为有限指标集. 证明: 集合$S=\{x\in\mathbb{R}^n: Ax=b, c_i(x)\leq 0, \forall i\in I\}$是凸集.
10. **【2018期末】**设$f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$是凸函数, $g:\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}_{++}\to\mathbb{R}$定义为
$$g(x,s)=sf(x/s), \forall(x,s)\in\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}_{++}.$$
这里$\mathbb{R}_{++}=\{s\in\mathbb{R}: s>0\}$. 证明: g为(x,s)的凸函数.

第 3 章　对偶理论

§ 3.1　对偶问题与Farkas引理

考虑标准形式的线性规划问题

$$p^* := \min c^T x, \text{s.t. } Ax = b, x \geq 0. \qquad \text{(PLP)}$$

下面问题是(PLP)问题的**对偶问题**：

$$d^* := \max b^T \lambda, \text{s.t. } \lambda \text{ free }, A^T \lambda \leq C. \qquad \text{(DLP)}$$

我们要搞清这两个线性规划的关系.

定义 3.1.1 (择一系统(alternative systems)) 两个线性等式和不等式的系统的解集如果最多只有一个是可行的, 则叫做*(弱)***择一的**, 如果两个系统恰好有一个可行, 则它们叫**强择一的**.

定理 3.1.1 (AS1) 下面两个系统的强择一的*:*

$$\mathcal{X} := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b, x \geq 0\},$$
$$\mathcal{Y} := \{y \in \mathbb{R}^m : A^T y \leq 0, b^T y > 0\}.$$

证明: "$\mathcal{X} \neq 0 \Rightarrow \mathcal{Y} = \varnothing$"：设$\mathcal{Y} \neq \varnothing$, 取$x \in \mathcal{X}, y \in \mathcal{Y}$, 则$0 \geq (A^T y)^T x = y^T A x = y^T b > 0$, 矛盾.

"$\mathcal{X} = \varnothing \Rightarrow \mathcal{Y} \neq \varnothing$"：定义$S := \{Ax \in \mathbb{R}^m : x \geq 0\}$, 这是非空的多边形集合, 则它是闭凸的. 而$\mathcal{X} = \varnothing$推出$b \notin S$. 根据分离超平面定理, 存在$y \in \mathbb{R}^m$使得

$$b^T y > \sup_{z \in S} y^T z = \sup_{x \geq 0} y^T A x.$$

根据$\sup\limits_{x \geq 0} y^T A x \geq 0$可得$b^T y > 0$. 因此一定有$A^T y \leq 0$, 否则$b^T y > +\infty$. 因此$\mathcal{Y}$不可以是空集, 因为$y \in \mathcal{Y}$. □

注: 点$y \in \mathcal{Y}$叫PLP问题的"infeasibility certificate".

注: 若$\mathcal{Y} \neq \varnothing$且DLP可行, 则DLP无界.

定理 3.1.2 (AS2) 下面两个系统是强择一的.

$$\mathcal{X} := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0, x \geq 0, c^T x < 0\},$$
$$\mathcal{Y} := \{y \in \mathbb{R}^m : A^T y \leq c\}.$$

注: 点$x \in \mathcal{X}$叫做DLP的不可行保证.

注: 如果$\mathcal{X} \neq \varnothing$, 则PLP一定无界.

定理 3.1.3 (AS3) 下面两个系统是弱择一的.

$$\mathcal{X} := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leq b\},$$
$$\mathcal{Y} := \{y \in \mathbb{R}^m : A^T y = 0, b^T y < 0, y \geq 0\}.$$

定理 3.1.4 (AS4) 下面两个系统是强择一的.

$$\mathcal{X} := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax < b\},$$
$$\mathcal{Y} := \{y \in \mathbb{R}^m : A^T y = 0, b^T y \leq 0, y \geq 0, y \neq 0\}.$$

定理 3.1.5 (Gordan, $b=0$ in AS4) . 下面两个系统是强择一的.

$$\mathcal{X} := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax < 0\},$$
$$\mathcal{Y} := \{y \in \mathbb{R}^m : A^T y = 0, y \geq 0, y \neq 0\}.$$

证明:

定理 3.1.6 (AS5) 下面两个系统是强择一的.

$$\mathcal{X} := \{x | Ax \leq 0, c^T x < 0\},$$
$$\mathcal{Y} := \{y | A^T y + c = 0, y \geq 0\}.$$

注: AS1与AS2分别对应PLP与DLP.

注: 上面所有的择一定理统称Farkas引理, 有许多对应于非标准形式的线性规划问题和它们对偶问题的其他形式. 证明方法是类似的.

注: 择一定理可以用来建立线性规划问题的强对偶性, 而强对偶性也可以反过来证择一定理. 它们都要依靠分离超平面定理.

定理 3.1.7 (Fredholm alternative) 设V是n维线性空间, $T : V \to V$是线性变换, 则下面两条只有其中一条满足:

- T是满射, 即对每个向量$v \in V$, 存在向量$u \in V$使得$T(u) = v$. (进一步, 由于T有限维, 则T也是单射, 从而T是满射)
- $\dim(\mathrm{Ker}(T)) > 0$.

用熟悉的语言来刻画就是: 下面两条只有其中一条满足:

- $Ax = b$有一个解.
- $A^T y = 0$有一个解, 且解满足$b^T y \neq 0$.

换言之, $Ax = b$有解(即$b \in \mathrm{range}(A)$)当且仅当对任意满足$A^T y = 0$的y都有$b^T y = 0$.

事实上, 我们有$\mathrm{Ker}(A^T) \oplus \mathrm{range}(A) = \mathbb{R}^m, \forall A \in \mathbb{R}^{m\times n}$.

习题 6 (Week 6)

证明AS2-AS5. (同时非空比较好推矛盾, 同时空要用凸集分离定理)

§ 3.2 线性规划的对偶理论

3.2.1 引入

考虑下面的对偶线性规划问题:

$$\text{原始问题(PLP)}: p^* = \min c^T x, \text{ s.t. } Ax = b, x \geq 0,$$
$$\text{对偶问题(DLP)}: d^* = \max b^T \lambda, \text{ s.t. } \lambda \text{ free }, A^T \lambda \leq c.$$

定理 3.2.1 (弱对偶原理) 设x, λ分别对应于原始问题与对偶问题的可行解, 则$b^T \lambda \leq c^T x$, 从而$d^* \leq p^*$(分别取上确界与下确界).

定理 3.2.2 (强对偶原理) 设上面的原始问题或对偶问题有可行解, 则$d^* = p^*$.

注: 有可能同时不可行.

3.2.2 弱对偶

记

$$\begin{aligned}&A\in\mathbb{R}^{m\times n},b\in\mathbb{R}^m,c\in\mathbb{R}^n\\&\mathcal{F}:=\{x\in\mathbb{R}^n:Ax=b,x\geq 0\},\\&\mathbb{R}^n_+:=\{x\in\mathbb{R}^n:x\geq 0\}.\end{aligned}$$

考虑下面标准形式的线性规划问题:

$$p^*:=\min_{x\in\mathbb{R}^n}\{c^Tx:\text{s.t.}Ax=b,x\geq 0\},(\text{PLP}),$$

要找下界, 就要定义PLP的**Lagrange函数**(复习一下多元微积分的Lagrange乘子法部分):

$$\mathcal{L}(x,\lambda,\mu)=c^Tx-\lambda^T(Ax-b)-\mu^Tx.$$

这是从$\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m\times\mathbb{R}^n$映往$\mathbb{R}$的函数. 容易知道, $\forall(\lambda,\mu)\in\mathbb{R}^m\times\mathbb{R}^n_+$,

$$\inf_{x\in\mathbb{R}^n}\mathcal{L}(x,\lambda,\mu)\leq\inf_{x\in\mathcal{F}}\mathcal{L}(x,\lambda,\mu)\leq\inf_{x\in\mathcal{F}}c^Tx=p^*,$$

可以得到p^*的最好的下界为

$$\begin{aligned}&\sup_{\lambda\in\mathbb{R}^m,\mu\in\mathbb{R}^n_+}\inf_{x\in\mathbb{R}^n}\mathcal{L}(x,\lambda,\mu)\\=&\sup_{\lambda\in\mathbb{R}^m,\mu\in\mathbb{R}^n_+}\begin{cases}b^T\lambda, & \text{当}c-A^T\lambda-\mu=0,\\-\infty, & \text{其余情况.}\end{cases}\\=&\sup_{\lambda\in\mathbb{R}^m,\mu\in\mathbb{R}^n_+}\{b^T\lambda:\ \text{s.t.}\ c-A^T\lambda-\mu=0\},\\=&\sup_{\lambda\in\mathbb{R}^m}\{b^T\lambda:c-A^T=\mu\geq 0\}.\end{aligned}$$

于是得到了PLP的对偶问题

$$d^*=\max_{\lambda\in\mathbb{R}^m}\{b^T\lambda:\ \text{s.t.}\ A^T\lambda\leq c\}.(\text{DLP}).$$

注: 推导对偶问题的一般方法是通过Lagrange函数联系起来. 许多书都直接给出来, 没有给推导过程.

定理 3.2.3 (弱对偶) *设p^*,d^*分别是PLP和DLP的解, 则$d^*\leq p^*$, 且*

(1)若x,λ分别是PLP,DLP的可行解, 则$b^T\lambda\leq d^*\leq p^*\leq c^Tx$.

(2)若x_0,λ_0分别是PLP,DLP的可行解, 且$b^T\lambda_0=c^Tx_0$, 则x_0,λ_0是对应问题的最优解. 此外, $b^T\lambda_0=d^*=p^*=c^Tx_0$.

(3)若$p^*=-\infty$即PLP有无界解, 则DLP不可行.

(4)若$d^*=+\infty$即DLP有无界解, 则PLP不可行.

下面记$\mathcal{F}_2:=\{x\in\mathbb{R}^n:Ax\geq b,x\geq 0\}$, 考虑如下形式的线性规划问题:

$$p_2^*:=\min_{x\in\mathbb{R}^n}\{c^Tx:\text{s.t.}Ax\geq b,x\geq 0\},(\text{PLP2}),$$

对应的**Lagrange函数**:

$$\mathcal{L}(x,\lambda,\mu)=c^Tx-\lambda^T(Ax-b)-\mu^Tx.$$

这是从$\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m\times\mathbb{R}^n$映往$\mathbb{R}$的函数. 容易知道, $\forall(\lambda,\mu)\in\mathbb{R}^m_+\times\mathbb{R}^n_+$,

$$\inf_{x\in\mathbb{R}^n}\mathcal{L}(x,\lambda,\mu)\leq\inf_{x\in\mathcal{F}_2}\mathcal{L}(x,\lambda,\mu)\leq\inf_{x\in\mathcal{F}_2}c^Tx=p_2^*,$$

可以得到p^*的最好的下界为

$$\begin{aligned}
&\sup_{\lambda\in\mathbb{R}^m_+,\mu\in\mathbb{R}^n_+}\ \inf_{x\in\mathbb{R}^n}\ \mathcal{L}(x,\lambda,\mu)\\
=&\sup_{\lambda\in\mathbb{R}^m_+,\mu\in\mathbb{R}^n_+}\begin{cases} b^T\lambda, & \text{当}c-A^T\lambda-\mu=0,\\ -\infty, & \text{其余情况}.\end{cases}\\
=&\sup_{\lambda\in\mathbb{R}^m_+,\mu\in\mathbb{R}^n_+}\{b^T\lambda:\ \text{s.t. } c-A^T\lambda-\mu=0\},\\
=&\sup_{\lambda\in\mathbb{R}^m}\{b^T\lambda: c-A^T-\mu\geq 0\}.
\end{aligned}$$

于是得到了PLP2的对偶问题

$$d_2^*=\max_{\lambda\in\mathbb{R}^m}\{b^T\lambda:\ \text{s.t. } A^T\lambda\leq c,\lambda\geq 0\}.\text{(DLP2)}.$$

DLP2与PLP2也有对应的弱对偶性: 把DLP与PLP的弱对偶定理中的p^*,d^*改为p_2^*,d_2^*即可.

小结:

$$\begin{aligned}
&\text{(PLP):}\quad z=\min_{x\in\mathbb{R}^n}\{c^Tx:\text{s.t.}Ax=b,x\geq 0\},\\
&\text{(DLP):}\quad \omega=\max_{\lambda\in\mathbb{R}^n}\{b^T\lambda:\text{s.t.}\lambda\text{ free},A^T\lambda\leq c\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\text{(PLP2):}\quad z=\min_{x\in\mathbb{R}^n}\{c^Tx:\text{s.t.}Ax\geq b,x\geq 0\},\\
&\text{(DLP2):}\quad \omega=\max_{x\in\mathbb{R}^n}\{b^T\lambda:\text{s.t.}\lambda\geq 0,A^T\lambda\leq c\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\text{(PLP3):}\min_{x\in\mathbb{R}^n}c^Tx,\text{s.t.}Ax=b,Ex\geq f,Gx\leq h,x_I\geq 0,x_J\leq 0,x_K\text{ free}.\\
&\text{(DLP3):}\max_{x\in\mathbb{R}^n}b^Tu+f^Tv-h^Tw,\text{s.t.}u\text{ free},v\geq 0,w\geq 0,\\
&\qquad (c-A^Tu-E^Tv+G^Tw)_I\geq 0,\\
&\qquad (c-A^Tu-E^Tv+G^Tw)_J\leq 0,\\
&\qquad (c-A^Tu-E^Tv+G^Tw)_K=0,
\end{aligned}$$

对偶问题的对偶是本身. 原问题与对偶问题的对应关系：首先以PLP2与DLP2关系为例.

	x_1	x_2	$\cdots$	x_n	原关系	$\max\omega$
y_1	a_{11}	a_{12}	$\cdots$	a_{1n}	$\geq$	b_1
y_2	a_{21}	a_{22}	$\cdots$	a_{2n}	$\geq$	b_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\cdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
y_m	a_{m1}	a_{m2}	$\cdots$	a_{mn}	$\geq$	b_n
对偶关系	$\leq$	$\leq$	$\cdots$	$\leq$		
$\max z$	c_1	c_2	$\cdots$	c_n		

例 3.2.1 (原问题与对偶问题的转化的例子) 考虑

(PLP) $\max\ z=2x_1+3x_2,s.t.$

$$\begin{cases}x_1+2x_2\leq 8,\\ 4x_1\leq 16,\\ 4x_2\leq 12,\\ x_1,x_2\geq 0.\end{cases}$$

(DLP) $\max\ z=8y_1+16y_2+12y_3,s.t.$

$$\begin{cases}y_1+4y_2\geq 2,\\ 2y_1+4y_3\geq 3,\\ y_1,y_2,y_3\geq 0.\end{cases}$$

对于一般的情况：

原问题	对偶问题
变量$\begin{cases} n\text{个} \\ \geq 0 \\ \leq 0 \\ \text{无约束} \end{cases}$	$\left.\begin{matrix} n\text{个} \\ \geq 0 \\ \leq 0 \\ = \end{matrix}\right\}$约束条件
约束条件$\begin{cases} m\text{个} \\ \leq 0 \\ \geq 0 \\ = \end{cases}$	$\left.\begin{matrix} m\text{个} \\ \geq 0 \\ \leq 0 \\ \text{无约束} \end{matrix}\right\}$变量
约束条件右端项	目标函数变量系数
目标函数变量系数	约束条件右端项

例 3.2.2 *考虑*

$$(PLP) \quad \min z = 2x_1 + 3x_2 - 5x_3 + x_4, s.t. \qquad (DLP) \quad \max z = 5y_1 + 4y_2 + 6y_3, s.t.$$

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3x_3 + x_4 \geq 5, \\ 2x_1 \qquad + 2x_3 - x_4 \leq 4, \\ \qquad x_2 + x_3 + x_4 = 6, \\ x_1 \leq 0, x_2, x_3 \geq 0, x_4 \ free. \end{cases} \qquad \begin{cases} y_1 + 2y_2 \leq 2, \\ 2y_1 + y_3 \geq 3, \\ -3y_1 + 2y_2 + y_3 \geq -5, \\ y_1 - y_2 + y_3 = 1, \\ y_1 \leq 0, y_2 \geq 0, y_3\text{无约束}. \end{cases}$$

3.2.3 强对偶问题

定理 3.2.4 (强对偶定理) *若线性规划问题有有限最优解, 则它的对偶问题也有最优解, 且这两个解相同.*

证明: 设PLP的最优解是p^*, 定义

$$C = \left\{ \begin{pmatrix} tp^* - c^T x \\ tb - Ax \end{pmatrix} : x \geq 0, t \geq 0 \right\}.$$

先证C是闭的凸锥(略, 没那么好证.), 再证$(1, \mathbf{0}) \notin C$: 若不然, 存在$x_0 \geq 0, t_0 \geq 0$使得

$$1 = t_0 p^* - c^T x_0, 0 = t_0 b - Ax_0.$$

若$t_0 > 0$, 则x_0/t_0是PLP问题的可行解, 且

$$0 < \frac{1}{t_0} = p^* - c^T \frac{x_0}{t_0} \leq 0,$$

矛盾. 则$t_0 = 0$, $c^T x_0 = -1, Ax_0 = 0, x_0 \geq 0$. 设$x$是任意的PLP可行解, 则任意的$\alpha \geq 0, x + \alpha x_0$也是PLP的可行解. 对应的函数是

$$c^T(x + \alpha x_0) = c^T x + \alpha c^T x_0 \to -\infty (\alpha \to +\infty),$$

这与p^*有限矛盾. 因此$(1, \mathbf{0}) \notin C$. 也就是说,

$$(A, -b)(x, t)^T = 0, x \geq 0, t \geq 0, (c, -p^*)^T (x, t) = -1$$

无可行解. 根据Farkas引理(2nd form), 存在$\lambda \in \mathbb{R}^m$使得$(A, -b)^T \lambda \leq (c, -p^*)^T$, 即$A^T \lambda \leq c, b^T \lambda \geq p^*$. 而$A^T \lambda \leq c$说明$\lambda$是DLP的可行解, 而$b^T \lambda \geq p^*$与弱对偶性共同推出$d^* = p^*$. □

注: 证明$S = \{Ax|x \geq 0\}$是闭集非常重要.

注: Farkus引理就是择一原理. 注意$\{Ax = 0, x \geq 0, c^T x = -1\}$与$\{A^T y \leq c\}$是强择一的(两者之一有解).

总结：$-\infty = d^* < p^* = +\infty$可能发生! 有5种情况不能发生.

	p^*有限	$p^* = -\infty$	$p^* = +\infty$
d^*有限	$\surd$	$\times$	$\times$
$d^* = +\infty$	$\times$	$\times$	$\surd$
$d^* = -\infty$	$\times$	$\surd$	$\surd$

例 3.2.3 用对偶理论说明下面线性规划问题无最优解.

$$\min\ z = x_1 + x_2, s.t. \begin{cases} -x_1 + x_2 + x_3 \leq 2, \\ -2x_1 + x_2 - x_3 \leq 1, \\ x_1, x_2, x_3 \geq 0. \end{cases}$$

解: 写出它的对偶问题分析即可.

注: 若对偶问题无可行解, 则原问题无最优解! (最优解为∞)

§ 3.3 对偶问题与单纯形法的联系

定理 3.3.1 设原始问题有最优基可行解x对应于基B, 则满足$\lambda^T = c_B^T B^{-1}$的向量λ是对偶问题的最优解. 而且两个问题的最优解是相同的.

证明: 记$A = (B, D)$, x最优, 则$r_D^T = c_D^T - c_B^T B^{-1} D = c_D^T - \lambda^T D \geq 0$, 验证$\lambda^T b = c^T x$, 则$\lambda$是对偶问题的最优解. □

对偶单纯形法的步骤. 我们知道，对偶单纯形法的基本思想是保持对偶可行性和0-duality gap, 且不断优化对偶问题目标函数, 直到不能被提高.

1. 从一个初始的对偶基可行解(即$x = (B^{-1}b, 0)$, 但$B^{-1}b \geq 0$不一定满足, 而$\lambda^T A = c_B^T B^{-1} A \leq c^T$满足).
2. 每次迭代先决定出基变量.
3. 选择一个合适的进基变量.
4. 旋转直到最优.

给定当前的对偶可行基B, 即$\lambda^T = c_B^T B^{-1}$是对偶问题的可行解($\lambda^T A \leq c^T$), 如果$x_B = B^{-1} b \geq 0$, 则B也是原问题的可行基, 从而得最优解. 通过假设非退化性, 我们可以知道如果B不是原始问题的可行基, 则一定存在i使得$(x_B)_i < 0$, 从而i决定了哪个变量要出基.

为了简单起见, 我们设当前的基包含了A的前m列, 容易验证

$$\lambda^T a_j \begin{cases} = c_j, j = 1, 2, \cdots, m; \\ < c_j, j = m+1, \cdots, n. \end{cases}$$

为了确定对偶单纯形法的一次循环, 我们要找一个新的向量$\bar{\lambda}$, 使得其中一个不等式变成等式, 其中一个等式变成不等式, 同时提升目标函数的值. 在新的可行解里的m个等式决定了哪一个变量进基.

下面设B^{-1}的第i列是u^i, 则对于

$$\bar{\lambda}^T = \lambda^T - \varepsilon u^i,$$

我们有

$$\bar{\lambda}^T a_j = \lambda^T a_j - \varepsilon u^i a_j = \lambda^T a_j - \varepsilon y_{ij}.$$

其中y_{ij}是单纯形表的第ij个元素. 因此

$$\begin{cases} \bar{\lambda}^T a_j = c_j, j \in \{1, 2, \cdots, m\} \setminus \{i\}, \\ \bar{\lambda}^T a_j = c_i - \varepsilon, j = i, \\ \bar{\lambda}^T a_j = \lambda^T a_j - \varepsilon y_{ij}, j \in \{m+1, \cdots, n\}. \end{cases}$$

在$\bar{\lambda}$处的对偶目标函数变为

$$\bar{\lambda}^T b = \lambda^T b - \varepsilon u^i b = \lambda^T b - \varepsilon (x_B)_i.$$

通过上面的推导, 可以得到下面的对偶单纯形法详细步骤:

1. 列出初始单纯形表, 检查b**所在列的数字**(不同于单纯形法看的是r所在行的数字), 如果都是非负, 则已达到最优解. 否则至少还有一个负分量, 继续下一步计算.
2. 找出基变量: 在基中取b中负得最多的那一行的1对应的x_i出基.
3. 找进基变量: 检查x_i所在行的各系数$a_{ij}, j = 1, 2, \cdots, n$, 如果$a_{ij}$均大于0, 则无最优解, 停止计算; 否则, 让

$$\varepsilon_0 = \frac{(A^T\lambda)_k - c_k}{y_k} = \min_j \left\{ \frac{(A^T\lambda)_j - c_j}{y_{ij}} : y_{ij} < 0 \right\}.$$

(即找最后一行与x_i所在行的比值中最大负数对应的x_k), x_k就是进基变量.

4. 用a_k替换a_i构成新的基, 用这个基决定新的基可行解x_B.

例 3.3.1 用对偶单纯形法解决

$$\min \quad 3x_1 + 4x_2 + 5x_3, s.t. \begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 \geq 5, \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 \geq 6, \\ x_1, x_2, x_3 \geq 0. \end{cases}$$

解: 对偶问题为

$$\min \quad 5y_1 + 6y_2, s.t. \begin{cases} y_1 + 2y_2 \geq 3, \\ 2y_1 + 2y_2 \geq 4, \\ 3y_1 + y_2 \geq 5, \\ y_1, y_2 \geq 0 \end{cases}$$

对偶单纯形表为(其实就是原来的单纯形表)

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
-1	-2	-3	1	0	-5
(-2)	-2	-1	0	1	-6
3	4	5	0	0	0

选x_5出基, 因为-6在$b = \{-5, -6\}$中负得最多, 选x_1进基, 因为$\frac{3}{-2}$所有负的比值$\left\{\frac{3}{-2}, \frac{4}{-2}, \frac{5}{-1}\right\}$最大. 第二个单纯形表为

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
0	(-1)	$-5/2$	1	$-1/2$	-2
1	1	$1/2$	0	$-1/2$	3
0	1	$7/2$	0	$3/2$	9

选-1进基因为$-2 < 0$, 且$1/(-1)$在$\left\{\frac{1}{-1}, \frac{7/2}{-5/2}, \frac{3/2}{-1/2}\right\}$中最大. 最终的单纯形表为

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
0	1	5/2	−1	1/2	2
1	0	−2	1	−1	1
0	0	1	1	1	11

因此原始问题与对偶问题的最优解分别是$x=(1,2,0)^T,\lambda=(-1,-1)^T$.

习题 7 (补充练习)

出自清华《运筹学》第三版

1. 写出下列线性规划问题的对偶问题.

(1) $\min\ z=2x_1+2x_2+4x_3$, s.t. $\begin{cases}2x_1+3x_2+5x_3\geq 2\\3x_1+x_2+7x_3\leq 3\\x_1+4x_2+6x_3\leq 5\\x_1,x_2,x_3\geq 0\end{cases}$

(2) $\max\ z=x_1+2x_2+3x_3+4x_4$, s.t. $\begin{cases}-x_1+x_2-x_3-3x_4=5\\6x_1+7x_2+3x_3-5x_4\geq 8\\12x_1-9x_2-9x_3+9x_4\leq 20\\x_1,x_2\geq 0,x_3\leq 0,x_4\text{无约束}\end{cases}$

(3) $\min\ z=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}c_{ij}x_{ij}$, s.t. $\begin{cases}\sum_{j=1}^{n}x_{ij}=a_i,i=1,2,\cdots,m\\\sum_{i=1}^{m}x_{ij}=b_j,j=1,2,\cdots,n\\x_{ij}\geq 0\end{cases}$

(4) $\max\ z=\sum_{i=1}^{n}c_jx_j$, s.t. $\begin{cases}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j\leq b_i,i=1,2,\cdots,m_1\leq m\\\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j=b_i,i=m_1+1,m_1+1,\cdots,m\\x_j\geq 0,\text{当}j=1,2,\cdots,n_1\leq n\\x_j\text{无约束, 当}j=n_1+1,\cdots,n\end{cases}$

2. 设线性规划问题1是

$$\max z_1=\sum_{j=1}^{n}c_jx_j,$$

$$\text{s.t.}\begin{cases}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j\leq b_i,i=1,2,\cdots,m\\x_j\geq 0,j=1,2,\cdots,n\end{cases}$$

$(y_1^*,\cdots,y_m^*)$是其对偶问题的最优解. 又设线性规划问题2是

$$\max z_2=\sum_{j=1}^{n}c_jx_j,$$

$$\text{s.t.}\begin{cases}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j\leq b_i+k_i,i=1,2,\cdots,m\\x_j\geq 0,j=1,2,\cdots,n\end{cases}$$

其中k_i是给定的常数. 求证:

$$\max z_2 \le \max z_1 + \sum_{i=1}^{m} k_i y_i^*.$$

3. 已知线性规划问题

$$\max z = 2x_1 + x_2 + 5x_3 + 6x_4 \qquad \text{对偶变量}$$

$$\text{s.t.}\begin{cases} 2x_1 + x_3 + x_4 \le 8 & y_1 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 + 2x_4 \le 12 & y_2 \\ x_j \ge 0, j = 1,2,3,4 \end{cases}$$

的对偶问题的最优解是$y_1^* = 4, y_2^* = 1$. 试应用对偶问题的性质,求原问题的最优解.

4. 用对偶单纯形法求解下列线性规划问题.

(1) $\min\ z = x_1 + x_2$, s.t. $\begin{cases} 2x_1 + x_2 \ge 4 \\ x_1 + 7x_2 \ge 7 \\ x_1, x_2 \ge 0 \end{cases}$

(2) $\min\ z = 3x_1 + 2x_2 + x_3 + 4x_4$, s.t. $\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 5x_3 + x_4 \ge 0 \\ 3x_1 - x_2 + 7x_3 - 2x_4 \ge 2 \\ 5x_1 + 2x_2 + x_3 + 6x_4 \ge 15 \\ x_1, x_2, x_3, x_4 \ge 0 \end{cases}$

第4章 (*)锥线性规划

§4.1 基本定义

引入一些基本定义:

- **锥(cone)**: 称K是个**锥**, 如果$\forall x \in K, \forall \alpha > 0, \alpha x \in K$.
- 用记号"$X \succeq 0$"表示$X \in S^n$且X半正定.
- 设S^n, S_+^n分别是n阶对称矩阵和半正定对称矩阵.

$$S^n \triangleq \{X \in \mathbb{R}^{n\times n} : X^T = X\},$$
$$S_+^n \triangleq \{X \in \mathbb{R}^{n\times n} : X \succeq 0\}.$$

- 在S^n取内积

$$\langle X, Y\rangle = \sum_{i,j=1}^n X_{ij}Y_{ij} = \mathrm{tr}(X^TY), \forall X, Y \in S^n.$$

注: 显然S_+^n是个锥, 给定对称矩阵集$\{A_1, \cdots, A_m\} \subset S^n$, 则下面可以定义一个映射$\mathcal{A} : S^n \to \mathbb{R}^m$:

$$\mathcal{A}X \triangleq \begin{pmatrix} \langle A_1, X\rangle \\ \cdots \\ \langle A_m, X\rangle \end{pmatrix}, \forall X \in S^n.$$

- **二阶锥**: 也叫$Lorentz$锥. n维的二阶锥定义为

$$Q^n \triangleq \{(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n : \|x\|_2 \le t\}.$$

- **对偶锥**: 设K是$\mathcal{X}$中的锥, 集合

$$K^* := \{y \in \mathcal{X} : \langle y, x\rangle \ge 0, \forall x \in K\}$$

  也是锥, 叫K的**对偶锥**.

- **自对偶锥(self-dual cone)**: 称K是自对偶的, 若$K^* = K$.

注: 第一象限的锥是自对偶锥. $(\mathbb{R}_+^n)^* = \mathbb{R}_+^n$.

锥的例子:

- 用一堆向量的非负线性组合生成一个锥.

$$S\{Ax | x \ge 0\} = \left\{ \sum_{k=1}^n x_k a_k \,\middle|\, x_k \ge 0, k = 1, 2, \cdots, n \right\}.$$

  上面叫几个线性无关向量的**生成锥**.

- 标准线性规划: $\min\{c^T x : Ax = b, x \ge 0 (\Leftrightarrow x \in \mathbb{R}_+^n)\}$.
- 对称正定矩阵: $S_n^+ \triangleq \{X \in \mathbb{R}^{n\times n} | X^T = X, X \ge 0\}$.

定理 4.1.1 任意一个锥K的对偶锥K^*是凸集.

设$\mathcal{X}, \mathcal{Y}$分别是n, m维的实Euclid空间, 下面的问题叫做锥线性规划(conic linear programming)问题.

$$\textbf{CLP} \qquad p^* = \min_{x\in\mathcal{X}} \langle c, x\rangle,$$
$$\text{s.t.} \mathcal{A}x = b, x \in K.$$

其中: $\mathcal{A} : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$是线性映射, $K \subset \mathcal{X}$是锥, $b \in \mathcal{Y}, c \in \mathcal{X}$, CLP有线性的目标函数, 约束集是带有锥的仿射集的交. 所有的困难都藏在了锥里面, 其他因素都不会有影响. 显然, 线性规划是$\mathcal{X} = \mathbb{R}^n, \mathcal{Y} = \mathbb{R}^m, K = \mathbb{R}_+^n$, 且$\langle x, y\rangle = x^T y$的特殊情形.

§ 4.2 半定规划问题

记$C \in S^n, b \in \mathbb{R}^m$. 则下面的问题的线性规划的推广, 叫做半正定规划:

$$\textbf{SDP:} \min_{X \in S^n} \langle C, X \rangle, \text{s.t.} \mathcal{A}X = b, X \succeq 0.$$

显然SDP是CLP中的特殊情形, 其中$\mathcal{X} = S^n, \mathcal{Y} = \mathbb{R}^m, K = S_+^n$, 且$\langle X, Y \rangle = \sum_{i,j=1}^n X_{ij} Y_{ij} = \text{tr}(X^T Y)$.

例 4.2.1 (最大割问题) 记$G = (V, E)$是一个图, 有$n = |V|$个顶点, 记$w = E \to R$是G的边的权重函数, 即

$$w_{ij} = \begin{cases} w((i,j)), & (i,j) \in E; \\ 0, & otherwise. \end{cases}$$

记$W = (w_{ij})_{i,j=1,2,\cdots,n}$为矩阵, 第$ij$个元素是$w_{ij}$.

割*(cut)*指把V分割成两个集合S与$V \setminus S$, 则割$(S, V \setminus S)$指$size(S) = \sum_{i \in S, j \in V \setminus S} w_{ij}$.

最大割问题(max-cut problem): 寻找带权图(V, E, w)的最大割S. 这是一个NP-难的问题!(不知道多项式时间内能否完成)

问题转化: 对任意的$S \subset V$, 定义

$$x = (x_1, \cdots, x_n)^T, x_i = \begin{cases} 1, & i \in S \\ -1, & i \notin S. \end{cases}$$

问题转化为

$$\max t := \frac{1}{2} \sum_{i<j} w_{ij}(1 - x_i x_j), \text{s.t.} x_i \in \{-1, 1\}, \forall i \in V.$$

记$\mathbf{1} = (1, 1, \cdots, 1)^T \in \mathbb{R}^n$, 我们有如下命题: (注意$x_i^2 = 1$)

命题 4.2.1 记$t = \frac{1}{2} \sum_{i<j} w_{ij}(1 - x_i x_j), x_i \in \{-1, 1\}, \forall i \in V$, $C \triangleq \frac{1}{4}(\text{diag}(W\mathbf{1}) - W)$, 则$t = x^T C x$.

证明: 我们有

$$\begin{aligned} t &= \frac{1}{2} \sum_{i<j} w_{ij}(1 - x_i x_j) \\ &= \frac{1}{4} \left(2 \sum_{i<j} w_{ij} x_i^2 - 2 \sum_{i<j} w_{ij} x_i x_j \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(\sum_i \sum_j w_{ij} x_i^2 - \sum_i \sum_j w_{ij} x_i x_j \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(\sum_i \sum_j w_{ij} x_i^2 - x^T W x \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(\sum_i (W\mathbf{1})_i x_i^2 - x^T W x \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(x^T \text{diag}(W\mathbf{1}) x - x^T W x \right) \\ &= \frac{1}{4} x^T (\text{diag}(W\mathbf{1}) - W) x = x^T C x. \end{aligned}$$

证明完毕. □

在进一步对最大割问题转化前, 引入一个高等代数的定理.

引理 4.2.2 *对于矩阵A, B, C，有*$\mathrm{tr}(ABC) = \mathrm{tr}(BCA)$.

下面把x转化为X:
由$t = x^T Cx = \mathrm{tr}(x^T Cx) = \mathrm{tr}(Cxx^T) = \langle C, X\rangle$, 其中$X = xx^T \in S_+^n$.
而$x_i \in \{-1, 1\} \Leftrightarrow x_i^2 = 1 \Leftrightarrow \mathrm{diag}(X) = 1$.

引理 4.2.3 $X \in S_+^n$*(对称半正定)且*$\mathrm{rank}(X) = 1$*的充分必要条件是: $X = xx^T$对某个$x \in \mathbb{R}^n$成立.*

最大割问题变成:

$$\max\langle C, X\rangle, \mathrm{s.t.} \mathrm{diag}(X) = 1, \boxed{\mathrm{rank}(X) = 1}, X \succeq 0.$$

问题难就难在了上面方框部分. 它很难做到，就扔掉: 作SDP relaxation, 得到下面的更简单的半定问题(SDP). (少一个约束条件, 约束集合更大, 求得的最大值会比原来偏大, 但是可以得到上界)

$$\max\langle C, X\rangle, \mathrm{s.t.} \mathrm{diag}(X) = 1, X \succeq 0.$$

很多图论中的问题都转化为SDP，把难处理的条件都丢掉, 得到一个上界; (也有用其他方法来求下界) 然后再去找一个特殊的情况来改进上界(下界). 不一定要用SDP松弛, 以后整数线性规划也有一种松弛.

注: SDP问题应用很广泛.

§ 4.3 二阶锥线性规划

下面问题通常在鲁棒性(robust)优化问题中出现:

$$\textbf{SOCP}: \min_{x\in\mathbb{R}^n} c^T x, \ \text{s.t.} \ \|A_i x - b_i\|_2 \le c_i^T x + d_i, i = 1, 2, \cdots, m.$$

这里$c \in \mathbb{R}^n, A_i \in \mathbb{R}^{n_i\times n}, b_i \in \mathbb{R}^{n_i}, c_i \in \mathbb{R}^n, d_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2, \cdots, m$.

通过引入辅助变量, 这个问题可以转化为线性目标函数、线性约束条件以及二阶锥约束条件.

在鲁棒线性规划中, 考虑下面的问题:

$$\min c^T x, \ \text{s.t.} \ a_i^T x \le b_i, \forall a_i \in \mathcal{E}_i := \{\bar{a}_i + P_i u : \|u\|_2 \le 1\}, i = 1, 2, \cdots, m.$$

其中$P_i \succeq 0$. 鲁棒线性约束条件可以表示为

$$\max\{a_i^T x : a_i \in \mathcal{E}_i\} = \bar{a}_i^T x + \|P_i x\|_2 \le b_i,$$

这显然是一个二阶锥约束. 因此, 鲁棒线性规划问题可以表示为下面的SOCP:

$$\min c^T x, \ \text{s.t.} \ \bar{a}_i^T x + \|P_i x\|_2 \le b_i, i = 1, 2, \cdots, m. \tag{4.1}$$

SOCP与SDP、二阶锥问题有什么联系呢？显然, SOCP可以通过让$A_i \equiv 0, b_i \equiv 0 (i = 1, 2, \cdots, m)$退化为线性规划问题, 也就是说SOCP包含了线性规划问题. 注意到

$$\|x\|_2 \le t \Leftrightarrow \begin{pmatrix} t & x^T \\ x & tI \end{pmatrix} \succeq 0.$$

因此, SOCP问题(4.1)等价于SDP问题:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} c^T x, \mathrm{s.t.} \begin{pmatrix} c_i^T x + d_i & (A_i x - b_i)^T \\ A_i x - b_i & (c_i^T x + d_i) I \end{pmatrix} \succeq 0, i = 1, 2, \cdots, m.$$

显然, 通过限制$X \succeq 0$为正交矩阵可以把SDP退化为LP.

§ 4.4 凸优化

凸优化问题(convex optimization, CO)是CLP问题的一种. 通常的凸优化问题是在一个凸集上求凸函数的最小值. 凸优化问题的一个重要性质是任意的局部最优解也是全局最优解(期末原题要求证明). 我们考虑如下的CO:

$$\mathbf{CO}: \min f(x),\ \text{s.t. } c_i(x) \le 0, i = 1, 2, \cdots, m.$$

其中f, c_i都是$\mathbb{R}^n$上的凸函数. 显然, CO等价于

$$\mathbf{CO}: \min \alpha \text{ s.t. } \begin{cases} f(x) \le \alpha, \\ c_i(x) \le 0, i = 1, 2, \cdots, m. \end{cases}$$

因此, 上面等价于考虑如下的线性目标函数的凸优化问题:

$$\mathbf{CO}: \min\langle c, x\rangle \text{ s.t. } c_i(x) \le 0, i = 1, 2, \cdots, m.$$

对$i = 1, 2, \cdots, m$, 我们定义

$$C_i := \{(t, x)\imath\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n : t > 0, c_i(x/t) \le 0\}.$$

可以证明每个C_i都是凸锥(通常C_i不是闭集). 注意$c_i(x) \le 0$等价于$(1, x) \in C_i$, 上述凸优化问题可以重写为CLP:

$$\min \quad \langle (0, c), (t, x)\rangle, \text{s.t.} \quad \langle (1, 0), (t, x)\rangle = 1, (t, x) \in C_1 \cap C_2 \cap \cdots \cap C_m.$$

§ 4.5 通常约束条件

通常约束条件的优化问题(general constrained optimization) $\subset$ CLP.

通常约束条件优化问题形如

$$\min\{f(x) : \text{s.t.} x \in Q \subset \mathbb{R}^n\},$$

其中Q用一系列的非线性等式或不等式约束来刻画. 显然, 上述问题等价于

$$\min\{\alpha : \text{s.t.} x \in Q, f(x) \le \alpha\}.$$

因此, 这等价于考虑线性目标函数的通常约束条件优化问题:

$$\min\{\langle c, x\rangle : \text{s.t.} x \in Q\}. \qquad (*)$$

容易得到

$$\begin{aligned} x \in Q &\Leftrightarrow (x, 1) \in \{(y, 1) : y \in Q\} \subset \mathbb{R}^{n+1}, \\ &\Leftrightarrow (x, 1) \in \{(ty, t) : y \in Q, t = 1\}, \\ &\Leftrightarrow (x, 1) \in K \cap \{(y, t) : y \in \mathbb{R}^n, t = 1\}, \end{aligned}$$

其中, $K \triangleq \{(ty, t) : y \in Q, t \ge 0\}$是一个锥. 因此, 问题$(*)$可以重写为

$$\min\langle (c, 0), (x, t)\rangle, \text{s.t.}\langle (x, t), (0, 1)\rangle = 1, (x, t) \in K.$$

小结: 在下面锥线性规划(CLP)问题中

$$\mathbf{CLP}: \qquad p^* := \min_{x \in \mathcal{X}}\langle c, x\rangle, \text{s.t.}\mathcal{A}x = b, x \in K.$$

- $K=\mathbb{R}_+^n$: 线性规划; $K=\mathbb{S}_+^n$: 半定规划p $K=Q^n$: 二阶锥规划.
- K可以是上面三种锥的向量积.
- K也可以是其他锥: 范数锥、也可以考虑对称性与凸性等等.
- 凸优化与其他的非线性优化问题都可以重写为锥线性规划问题.

§ 4.6 锥线性规划问题的对偶问题

对偶问题的对偶锥例子:

$$\mathbf{P}\colon \min_x c^T x | Ax=b, x\in\mathbb{R}_+^n,$$

$$\mathbf{D}\colon \max_{y,s} b^T y | A^T y + s = c, s\in(\mathbb{R}_+^n)^*.$$

其中矩阵A, A^T可以看作线性变换: $A:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^m$, $A^T:\mathbb{R}^m\to\mathbb{R}^n$(叫$A$的伴随算子). 伴随算子满足(定义): 对任意的$x\in\mathbb{R}^n, y\in\mathbb{R}^m$, 有$\langle Ax,y\rangle=\langle x,A^T y\rangle$.

在一般的空间$\mathcal{X}$中, $\mathscr{A}:\mathcal{X}\to\mathbb{R}^n$, 则伴随算子$\mathscr{A}^T:\mathbb{R}^n\to\mathcal{X}$, 满足$\langle\mathscr{A}x,y\rangle=\langle x,\mathscr{A}^T y\rangle, \forall x\in\mathcal{X}, y\in\mathbb{R}^n$.

半定规划问题: $\min\langle C,X\rangle$, s.t. $\mathcal{A}X=b, X\in S_+^n$. $\mathcal{A}:S^n\to\mathbb{R}^n$, 定义

$$\mathscr{A}X \triangleq \begin{pmatrix}\langle A_1,X\rangle\\ \langle A_2,X\rangle\\ \vdots\\ \langle A_m,X\rangle\end{pmatrix}$$

根据

$$\langle\mathscr{A}X,y\rangle = y_1\langle A_1,X\rangle+\cdots+y_m\langle A_m,X\rangle=\langle y_1A_1+\cdots+y_mA_m,X\rangle=\langle X,y_1A_1+\cdots+y_mA_m\rangle.$$

那么伴随算子$\mathcal{A}^T:\mathbb{R}^m\to S^n$为$\mathcal{A}^T y=y_1A_1+y_2A_2+\cdots+y_mA_m$.

找$\mathbf{P}$: $\min\langle c,x\rangle$, s.t. $\mathcal{A}x=b, x\in K$的对偶问题. 构造Lagrange函数

$$\begin{aligned}L(x,y,s)&=\langle c,x\rangle+y^T(b-\mathcal{A}x)-\langle x,s\rangle\\&=b^Ty+\langle c,x\rangle-y^T\mathcal{A}x-\langle s,x\rangle\\&=b^Ty+\langle c,x\rangle-\mathcal{A}^Tyx-\langle s,x\rangle\\&=b^Ty+\langle c-\mathcal{A}^Ty-s,x\rangle, x\in\mathcal{X}, y\in\mathbb{R}^m, S\in\mathcal{X}.\end{aligned}$$

选合适的y,s使得$L(x,y,s)\le\langle c,x\rangle$. 只需要$\langle x,s\rangle\ge 0$. 对于$x\in K, y\in\mathbb{R}^m$, 取$S\in K^*$即可. (回顾定义, 对偶锥里面的所有向量与原来锥的向量作内积都大于等于0) 再取下确界, 则有($\mathcal{F}$是可行域)

$$\inf_{x\in\mathcal{F}} L(x,y,s)\le\inf_{x\in\mathcal{F}}\langle c,x\rangle=\mathbf{P}.$$

而

$$\inf_{x\in\mathcal{F}} L(x,y,s)\ge\sup_{y\in\mathbb{R}^m, s\in K^*}\inf_{x\in\mathcal{X}} L(x,y,s),$$

则

$$\sup_{y\in\mathbb{R}^m, s\in K^*}\inf_{x\in\mathcal{X}} L(x,y,s)\le\mathbf{P}.$$

则

$$\sup_{y\in\mathbb{R}^m, s\in K^*}\inf_{x\in\mathcal{X}} L(x,y,s)=\sup_{y\in\mathbb{R}^m, s\in K^*}\begin{cases}b^Ty, & c-\mathcal{A}^Ty-s=0.\\ -\infty, & c-\mathcal{A}^Ty-s\ne 0.\end{cases}$$

则**锥线性规划对偶问题(DCLP)**为

$$\max_{y\in\mathbb{R}^m} b^Ty, \text{s.t.}\quad c-\mathcal{A}^Ty\in K^*.$$

与线性规划完全类似的定理:

定理 4.6.1 (弱对偶性) 设p^*, d^*分别是CLP与$DCLP$的可行解，则$d^* \leq p^*$.

注: 原来问题的难易不用管, 可以知道一个界. 把$\langle c, x\rangle - b^T y$叫duality gap.

推论 4.6.2 设x, y分别是CLP,$DCLP$的可行解，若$\langle c, x\rangle = b^T y$，则$x, y$分别是对应问题的最优解.

逆命题(强对偶性)是否正确？即给定x是CLP的最优解, 存在DCLP的最优解y, 满足$\langle c, x\rangle = b^T y$？这是不对的. 反例:

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, A_2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

可以证明$-2 = d^* < p^* = 0$. 设$X \in \mathbb{R}^{3\times 3}, y \in \mathbb{R}^2$. $x_{12} = 0$, 原问题是$\min 2x_{12} = 0$. 对偶问题是$\max 2y_2$, 矩阵$C - \mathcal{A}^T y \succeq 0$(半正定, 各阶主子式大于0), 则$y_2 = -1$.

原因：锥线性规划没有择一性系统(Farkus lemma).

习题 8

1. 证明: $S = \{Ax | x \geq 0\}, A \in \mathbb{R}^{m\times n}, x \in \mathbb{R}^n$是个闭集.
   注: $\{\mathcal{A}x | x \in K\}$不一定是闭集.
2. 证明定理4.1.1: 任意一个锥K的对偶锥K^*是凸集.
3. 证明: 非负象限$\mathbb{R}^n_+$中半定规划问题(SDP)的锥
   $$S^n_+ = \{X \in \mathbb{R}^{n\times n} : X\text{半正定}\}$$
   是自对偶的.
4. 证明: 二阶锥
   $$Q^n = \{(t, x) : \|x\|_2 \leq t\}$$
   是自对偶的.

第 5 章 (*)内点法

§ 5.1 算法复杂度的基本概念

下面设$\mathcal{P}$是**问题类**, $\mathcal{Z}_P$是$\mathcal{P}$的**数据集**. 比如在标准的线性规划问题中有

$$\begin{aligned}
&\mathcal{Z}_P = \{Z = (A,b,c) : (A,b,c) \in \mathbb{R}^{m\times n} \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n\},\\
&\mathcal{P} = \{\min\{c^T x : \text{s.t.} Ax = b, x \geq 0\} : Z = (A,b,c) \in \mathcal{Z}_P\}.
\end{aligned}$$

5.1.1 算法复杂度简介

- $p \in \mathcal{P}$称为问题类$\mathcal{P}$的一个**实例(instance)**, 它由元素$Z \in \mathcal{P}$所决定.
- **算法**指一列能解决问题类$\mathcal{P}$的步骤. $\mathcal{A}_P$称为所有可能解决$\mathcal{P}$的算法集合.
- **操作复杂度(operation complexity)**指这个算法$A \in \mathcal{A}_P$执行了多少次运算与比较. 记为$c_0(A,Z)$.
- **迭代复杂度(iteration complexity)**指解决$p(Z) \in \mathcal{P}$的算法A的总迭代次数, 记为$c_i(A,Z)$.
- **最坏的复杂度(worst-case complexity)**$c(A) = \sup\{c(A,Z) : Z \in \mathcal{Z}_P\}$. 这里$c(A,Z)$指算法$A$用在数据$Z$的特定复杂度. $\mathcal{P}$的最坏复杂度为$c(\mathcal{P} = \inf\{c(A) : A \in \mathcal{A}_P\}$.
  分析$c(A), c(\mathcal{P})$比较有挑战性, 因为$\mathcal{P}$很多, 且$\mathcal{A}_\mathcal{P}$不确定.
- **基于大小的复杂度(size-based complexiy).** 设我们找到了上界$f_A(m,n,L)$(关于m,n,L的基于大小的算法A的复杂度)满足

  $$c(A,L) := \sup\{c(A,Z) : Z \in \mathcal{Z}_P, size(Z) \leq L\} \leq \cdots f_A(m,n,L)$$

  如果$f_A(m,n,L)$关于m,n,L是多项式, 则说算法A是多项式时间或者称A为多项式算法且问题$\mathcal{P}$是**多项式可解**的. 如果$f_A(m,n,L)$与L无关, 且关于m,n是多项式, 则说算法A是**强多项式算法**.
- **基于近似解的复杂度(error-based complexity)**. 记$\varepsilon > 0$为一个参数, 控制了解的精确性. 记$c(A,Z,\varepsilon)$是算法A通过数据集Z得到ε近似解的的总操作次数(定义了一个合适的度量), 则

  $$c(A,\varepsilon) := \sup_{Z\in\mathcal{Z}_P} c(A,Z,\varepsilon) \leq f_A(m,n,\varepsilon), \forall \varepsilon > 0$$

  称为基于近似解的复杂度.
- **基于条件的复杂度(condition-based complexity)**. 用来推导一个复杂度的界. 著名的例子是用最速下降法来求一个正定二次型函数的最小值: (回顾数值计算 II 第六章内容) $q(x) = 0.5x^T Qx + c^T x$. 序列$\{x^k\}$由如下产生.

  $$\|x^k - x^*\|_Q \leq \left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^k \|x^0 - x^*\|_Q$$

  其中x^*是解, $\kappa = \dfrac{\lambda_n}{\lambda_1}$为矩阵$Q$的条件数.
- 平均复杂度(average complexity): $c_{average}(A) := E_{Z\in\mathcal{Z}_P}(c(A,Z))$.
- 渐近复杂度(asymptotic complexity).

5.1.2 单纯形法不是多项式时间的

例 5.1.1 (Klee-Minty) 用单纯形法求解

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \sum_{j=1}^{n} 10^{n-j} x_j, \\
s.t. \quad & 2\sum_{j=1}^{i-1} 10^{i-j} x_j + x_i \leq 100^{i-1}, i = 1, 2, \cdots, n, \\
& x_j \geq 0, j = 1, 2, \cdots, n
\end{aligned}
$$

添加松弛变量以后, 问题可以变成标准形式.

这个问题需要迭代2^n-1次(遍历所有)才能到达解. n过大时就要迭代很多次(需要许多年) 设$n=50$, 计算机一秒钟可以做100万次旋转, 则需要用33年. 换一种进基、出基方法的话这个问题会变得简单很多, 但是换方法以后还能找其他最坏的例子.

5.1.3 椭球方法是解决线性规划问题的多项式时间算法

椭球算法是第一个被证明是多项式时间内解决线性规划问题的算法，适用于多项式时间内解决线性规划问题. 但这个算法没有被广泛使用.

考虑下面的线性不等式组

$$\Omega = \{y \in \mathbb{R}^m : y^T a_j \leq c_j, j = 1, 2, \cdots, n\}.$$

我们下面要寻找Ω中的一个点, 这等价于解一个线性规划问题. 两个假设:

- 存在一个向量$y_0 \in \mathbb{R}^m$以及标量$M > 0$, 使得$E_0 = S(y_0, M) := \{y : \|y - y_0\| \leq M\} \supset \Omega$.
- 若Ω非空, 则存在一个标量$r > 0$使得Ω包含形如$S(y^*, r)$的球.

$\mathbb{R}^m$中的**椭球**形如

$$E = \{y \in \mathbb{R}^m : (y - z)^T Q(y - z) \leq 1\},$$

其中$z \in \mathbb{R}^m$是球心, Q是对称正定阵. 把这个椭球记为$\mathrm{ell}(z, Q)$.

基本事实:

- $\mathrm{ell}(z, Q)$的各条(对称)轴的方向是Q的特征向量,
- 轴的长度为$\lambda_j^{-1/2}, j = 1, 2, \cdots, m$, 其中$\lambda_i$是$Q$的特征值.
- 椭球E的体积为
$$\mathrm{vol}(E) = \mathrm{vol}(S(0, 1))(\det Q)^{-1/2}.$$
- 前面所述的$E_0 = \mathrm{ell}\left(y_0 = \dfrac{1}{M^2} I\right)$, 则$\mathrm{vol}(E_0) = \mathrm{vol}(S(0, 1))M^m$.

构造一系列椭球$E_k = \mathrm{ell}(y_k, B_k^{-1})$, 其中$B_k$是对称正定阵, 在椭球算法的迭代过程中, 由于$\Omega \subset E_k$, 从而可以判断是否有$y_k \in \Omega$. 如果满足, 则已经找到了$\Omega$中的一个点; 如果不满足, 至少有一个约束条件不满足, 设$a_j^T y_k > c_j$, 则

$$\Omega \subset \frac{1}{2} E_k = \{y \in \mathbb{R}^m : a_j^T y \leq a_j^T y_k\} \cup E_k$$

为E_k的一半(即穿过y_k把椭球切成两半, 取其中一半). 下一个椭球E_{k+1}取为包含$\frac{1}{2}E_k$的按体积最小的椭球. 具体构造如下:

设$\tau = \dfrac{1}{m+1}, \delta = \dfrac{m^2}{m^2 - 1}, \sigma = 2\tau$, 定义

$$
\begin{aligned}
y_{k+1} &= y_k - \frac{\tau}{\sqrt{a_j^T B_j a_j}} B_k a_j, \\
B_{k+1} &= \delta\left(B_k - \delta \frac{B_k a_j a_j^T B_k}{a_j^T B_k a_j}\right).
\end{aligned}
$$

则$E_{k+1}=\mathrm{ell}(y_{k+1},B_{k+1}^{-1}$是包含$(1/2)E_k$的按体积最小椭球. 此外

$$\frac{\mathrm{vol}E_{k+1}}{\mathrm{vol}E_k}<e^{-\frac{1}{2(m+1)}}<1.$$

容易证明, 把椭球算法切成两半需要$O(m)$次迭代. 经过不超过$O(m^2\log_2(M/r))$次迭代, E_k的中心$y_k\in\Omega$, 即找到满足了所有线性不等式的解.

粗略来讲, 一次迭代需要用$O(m^2)$次算术运算, 则总共需要$O(m^4\log_2\frac{M}{r})$的计算量.

5.1.4 解析中心

设$S\subset\mathbb{R}^n$, 如下定义:

$$S=\{x\in\mathbb{R}^n:h_i(x)=0,i=1,2,\cdots,m_1;g_j(x)\geq 0,j=1,2,\cdots,m_2\},$$

其中h_i,g_j是$\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$的连续函数. S的**内点**定义为(与拓扑意义上的内点不同)

$$S^\circ=\{x\in\mathbb{R}^n:h_i(x)=0,i=1,2,\cdots,m_1;g_j(x)>0,j=1,2,\cdots,m_2\},$$

我们假设它非空. 下面的函数定义在S°上, 叫S的**势函数(potential function)**

$$\psi(x):=-\sum_{j=1}^{m_2}\log g_j(x),x\in S^\circ.$$

定义 5.1.1 (解析中心) *S的解析中心由一个(或一族)向量构成, 为势函数的最小值:*$\arg\min_{x\in\mathbb{R}^n}\{\psi(x):x\in S^\circ$.

例 5.1.2 *方体$S=[0,1]^n=\{x\in\mathbb{R}^n:x_i\geq 0,1-x_i\geq 0,i=1,2,\cdots,n\}$ 解析中心为$S=(1/2,\cdots,1/2)$.*

解: $\psi(x)=-\sum_{i=1}^n\ln x_i-\sum_{i=1}^n\ln(1-x_i)$, 它的梯度为

$$D\psi(x)=-(1/x_1,\cdots,1/x_n)^T-(-1/(1-x_1),\cdots,-1/(1-x_n))^T=0.$$

解得$x_i=\frac{1}{2}$. □

注: 不同集合的描述得到的解析中心不同! 比如可以写$S=[0,1]^n=\{x\in\mathbb{R}^n:x_i\geq 0,(1-x_i)^3\geq 0,i=1,2,\cdots,n\}$,.

引理 5.1.1 *设$f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$是可微的凸函数, $A\in\mathbb{R}^{m\times n},b\in\mathbb{R}^m$, 则$f$在点$x$的梯度为*

$$Df(x)=(f_{x_1},\cdots,f_{x_n})^T,$$

则$x^*\in\mathbb{R}^m$是$\min_x\{f(x):Ax=b\}$的最优解当且仅当存在$y^*\in\mathbb{R}^m$, 使得$Df(x^*)=A^Ty^*,Ax^*=b$, 即$D_x\mathcal{L}(x^*,y^*)=0$, 这里$\mathcal{L}(x,y):=f(x)-y^T(Ax-b)$.

证明: 如果(x^*,y^*)是最优的, 则$D_x\mathcal{L}(x^*,y^*)=Df(x^*)+A^Ty^*=0,D_y\mathcal{L}(x^*,y^*)=Ax^*-b=0$, 必要性成立.

"凸"保证了充分性: 若$\mathcal{L}(x,y^*)$是关于x凸的, 则对任意的可行解x, 有

$$\mathcal{L}(x,y^*)\geq\mathcal{L}(x^*,y^*)+D_x(x^*,y^*)^T(x-x^*).\square$$

例 5.1.3 *$S=\{x\in\mathbb{R}^n:Ax=b,x\geq 0\}$的解析中心, 即$\min_x\{-\sum_{i=1}^n\log x_i:Ax=b,x>0\}$ 通过如下等式定义:*

$$Ax=b$$

$$A^Ty+s=0$$

$$x\circ s=\mathbf{1}.$$

其中$y\in\mathbb{R}^m,x,s\in\mathbb{R}^n,\mathbf{1}=(1,1,\cdots,1)^T\in\mathbb{R}^n$, 且$x\circ s:=(x_1s_1,x_2s_2,\cdots,x_ns_n)^T$.

§ 5.2 内点法介绍

5.2.1 内点法思想

对于$Ax^* = b, x^* \geq 0; A^T y^* + s^* = c, s^* \geq 0$, 当$(x^*)^T s^* = 0$时就是最优解. 内点法就是让$x^*, s^*$严格大于0, 找充分小的$\varepsilon$, 当$|(x^*)^T s^*| < \varepsilon$时就接近最优解.

考虑下面的线性规划问题(标准形式)

$$\mathbf{LP}\text{: } p^* = \min_x c^T x, \text{s.t.} Ax = b, x \geq 0$$

设可行域

$$\mathcal{F}_P^\circ = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b, x > 0\}$$

是非空的. 并假设LP的最优解有界. 对每个$\mu \geq 0$, 定义下面的**障碍问题**(barrier problem):

$$\mathbf{BP}\text{: } \min_x c^T x - \mu \sum_{j=1}^n \log x_j, \text{s.t.} Ax = b, x > 0.$$

可以证明BP的最优解满足

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ A^T y + s &= c \\ x \circ s &= \mu \mathbf{1}. \end{aligned}$$

注意$x > 0, s > 0$必定成立, 因此x和(y, s)分别关于原始问题和对偶问题可行的. 对应原始问题可行解与对偶问题可行解的duality gap为

$$x^T s = \sum_{i=1}^n x_i s_i = n\mu.$$

(违反了取最优解的条件$x^T s$. 可以取$\mu = \dfrac{\varepsilon}{n}, 0 < \varepsilon << 1$, 让这个违反值很小, 得到个近似解.)

设$x(\mu) = \arg\min_\alpha \{c^T x - \mu \sum_{i=1}^n \log x_i | Ax = b\}$, 则$\lim_{\mu \to 0} x(\mu) = x^*$(起作用的是$c^T x$. $\lim_{\mu \to \infty} x(\mu)$趋向于解析中心. (起作用的是$\mu \sum_{i=1}^n \log x_i$部分)

从x^*到解析中心有条原始中心路径(primal central path), 它就是$\{x(\mu) \in \mathbb{R}^n : \mu \geq 0\}$.

线性方程组的条件数是$O(1\mu)$的, μ越小, 线性方程组越难解.

每次迭代取不同的μ. (上一次解出来的点作为下一次的初始点), 每次μ都要下降. 但μ不能太小. 要解一系列的Barrier Problem.

可以参考Lieven Vandenberghe的个人主页, 那里有详细讲内点法的ppt, 且配了精美图片.

第 6 章　整数规划问题

定义 6.0.1 (松弛问题) 不考虑整数约束条件, 由余下的目标函数和约束条件构成的规划问题叫做这个整数规划问题的松弛问题.

整数规划问题的一般形式:

$$\min / \max \quad z = c^T x, \text{s.t.} Ax = b, x \geq 0, x \text{ 的部分或全部分量是整数}$$

通过对松弛问题的最优解进行舍入化整得到的点, 或者不可行, 或者可行但非最优.

整数规划问题解的特征:

- 整数规划问题的可行解集合是它松弛问题可行解集合的一个子集, 任意两个可行解的凸组合不一定满足整数约束条件, 因而不一定仍为可行解.
- 整数规划问题的可行解一定是它的松弛问题的可行解（反之不一定）
- 整数规划问题的最优解的目标函数值不会优于其松弛问题的最优解的目标函数值.

§ 6.1　分支定界法

分支定界法的步骤:

1. 求整数规划的松弛问题最优解. 若松弛问题的最优解满足整数要求, 则得到整数规划的最优解, 否则转下一步.
2. 分支: 任意选一个非整数解的变量x_i, 在整数规划中加上约束
$$x_i \leq \lfloor x_i \rfloor, x_i \geq \lfloor x_i \rfloor + 1$$
组成两个新的整数规划问题, 称为分支.
3. 求解所有分支问题的松弛问题, 得到各松弛问题的解以及函数值.
   (1) 若某分支的松弛问题的解是整数, 并且目标函数值优于其他分支问题的松弛问题的目标值, 则将其他分支剪去不再计算.
   (2) 若还存在其他分支, 其松弛问题的解为非整数, 并且目标值优于目前找到的最优的整数解的目标值, 则需要为原整数规划问题的最优目标函数确定下界与上界, 且继续分支, 再检查(如果所找的解不在界里面, 剪支), 直到得到最优解.

例 6.1.1 用分支定界法求解整数规划问题

$$\textbf{\textit{ILP:}} \min \quad z = -x_1 - 5x_2, s.t. \begin{cases} x_1 - x_2 \geq -2, \\ 5x_1 + 6x_2 \leq 30, \\ x_1 \leq 4, x_1, x_2 \geq 0 \text{且都为整数}. \end{cases}$$

解: 首先去掉整数约束, 变成一般线性规划问题

$$\textbf{LP:} \min \quad z = -x_1 - 5x_2, \text{s.t.} \begin{cases} x_1 - x_2 \geq -2, \\ 5x_1 + 6x_2 \leq 30, \\ x_1 \leq 4, x_1, x_2 \geq 0. \end{cases}$$

解得$x = (18/11, 40/11), z = -218/11 \approx -19.8$, 这也是原整数规划问题最优函数值的下界. 对于$x_1 = 18/11$, 利用约束条件$x_1 \leq 1, x_1 \geq 2$把原来的整数规划问题变成两个分支ILP1与ILP2.

$$\textbf{ILP1:} \min \quad z=-x_1-5x_2, \qquad \text{s.t.} \begin{cases} x_1-x_2\geq -2,\\ 5x_1+6x_2\leq 30,\\ x_1\leq 4,\\ x_1\leq 1,\\ x_1,x_2\geq 0\text{且都为整数}. \end{cases}$$

$$\textbf{ILP2:} \min \quad z=-x_1-5x_2, \qquad \text{s.t.} \begin{cases} x_1-x_2\geq -2,\\ 5x_1+6x_2\leq 30,\\ x_1\leq 4,\\ x_1\geq 2,\\ x_1,x_2\geq 0\text{且都为整数}. \end{cases}$$

求解对应的松弛问题LP1,LP2得

$$\textbf{LP1:} x=(1,3), z=-16,$$

$$\textbf{LP2:} x=(2,10/3), z=-56/3\approx -18.7,$$

分支ILP1已经探明, 剪支. 而LP2的最优函数值$-56/3<-16$, 分支ILP2可能存在函数值小于-16的整数解, 继续计算. 最优整数值满足≤ -16.

在ILP2中分别加入条件$x_2\leq 3, x_2\geq 4$, 得到新问题:

$$\textbf{ILP21:} \min \quad z=-x_1-5x_2, \qquad \text{s.t.} \begin{cases} x_1-x_2\geq -2,\\ 5x_1+6x_2\leq 30,\\ x_1\leq 4, x_1\geq 2\\ x_2\leq 3,\\ x_1,x_2\geq 0\text{且都为整数}. \end{cases}$$

$$\textbf{ILP22:} \min \quad z=-x_1-5x_2, \qquad \text{s.t.} \begin{cases} x_1-x_2\geq -2,\\ 5x_1+6x_2\leq 30,\\ x_1\leq 4, x_1\geq 2\\ x_2\geq 4,\\ x_1,x_2\geq 0\text{且都为整数}. \end{cases}$$

求解对应的松弛问题LP21,LP22可得

$$\textbf{LP21:} x=(2.4,3), z=-87/5\approx -17.4,$$

LP22:无可行解, 剪支

LP21的解仍比-16小, 继续对LP21进行分支.

加入$x_1\leq 2, x_1\geq 3$得到

$$\textbf{ILP211:} \min \quad z=-x_1-5x_2, \qquad \text{s.t.} \begin{cases} x_1-x_2\geq -2,\\ 5x_1+6x_2\leq 30,\\ x_1\leq 4, x_1\geq 2, x_2\leq 3\\ x_1\leq 2,\\ x_1,x_2\geq 0\text{且都为整数}. \end{cases}$$

$$\textbf{ILP212:} \min \quad z=-x_1-5x_2, \qquad \text{s.t.} \begin{cases} x_1-x_2\geq -2,\\ 5x_1+6x_2\leq 30,\\ x_1\leq 4, x_1\geq 2, x_2\leq 3\\ x_1\geq 3,\\ x_1,x_2\geq 0\text{且都为整数}. \end{cases}$$

分别求出对应松弛问题LP211,LP212的最优解为

$$\textbf{LP211:} x=(2,3), z=-17,$$

$$\textbf{LP212:} x=(3,2.5), z=-15.5.$$

找到更好的整数解-17. 而LP212的值比-17大, 剪. 综上, 最优解是$(2,3)$.

分支定解法算法评价:

- 优点: 通过解LP来解ILP, 而LP的理论、算法、软件相当成熟.
- 缺点: 对大、难的ILP问题, 分支分层可能非常多, 本质上相当于枚举法. 分支分层很多时, 需要解很多LP; 分层越深, LP的约束条件越多, 程序实现需考虑到简化约束条件、热启动等加速技巧.

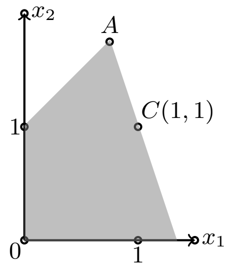
§ 6.2 割平面法

基本思想: 首先不考虑变量是整数的条件, 得到松弛问题. 若得到非整数的最优解, 增加能割去非整数解的线性约束条件(割平面),使得原可行域被切割掉一部分, 而这部分只包含非整数解, 不包含任何整数可行解. 割平面法指出怎样找到适当的割平面, 使得切割后最终得到这样的可行域：它第一个整数极点恰好是问题的最优解.

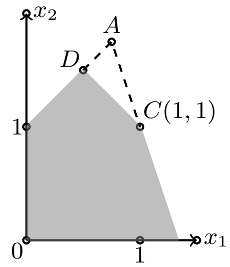
例 6.2.1 求解下面问题.

$$\min \quad z=-x_1-x_2, s.t. \begin{cases} -x_1+x_2\le 1 \\ 3x_1+x_2\le 4 \qquad x_1,x_2\ge 0\text{且都为整数} \end{cases}$$

解: 先不考虑整数约束条件, 求得相应的松弛问题的最优解为$(x_1,x_2)=(3/4,7/4), \min \quad z=-5/2$. 下图中阴影部分为松弛问题的可行域, 记为R.



$\Longrightarrow$



现在设想, 如果能找到像CD那样的直线去切割可行域R, 去掉三角形域ACD, 那么具有整数坐标的$C(1,1)$就是域R'的一个极点. 若在域R'上优化目标函数, 而得到的最优解恰好是C点, 则得到原整数线性规划问题的解. 解法的关键是怎样构造一个这样的“割平面”CD, 尽管它可能不是唯一的, 也可能不是一步可以求到的.

在原问题的前两个不等式增加非负松弛变量x_3,x_4, 使得两式变成等式约束:

$$-x_1+x_2+x_3=1,$$

$$3x_1+x_2+x_4=4.$$

不考虑整数约束条件, 用单纯形表解题:

x_1	x_2	x_3	x_4	b
−1	1	1	0	1
3	1	0	1	4
−1	1	0	0	0

$\Longrightarrow$

x_1	x_2	x_3	x_4	b
1	0	−1/4	1/4	3/4
0	1	3/4	1/4	7/4
0	0	1/2	1/2	5/2

目前得到的解不满足整数要求, 需要考虑将可行域割去一部分, 再求最优解. 而割去的部分不含整数可行点, 可从最终计算表中得到非整数变量对应的关系式:

$$x_1-\frac{1}{4}x_3+\frac{1}{4}x_4=\frac{3}{4}$$

$$x_2+\frac{3}{4}x_3+\frac{1}{4}x_4=\frac{7}{4}$$

为了得到整数最优解, 将上式变量的系数和常数项分解为整数和**非负真分数**两部分之和:

$$(1+0)x_1+\left(-1+\frac{3}{4}\right)x_3+\left(0+\frac{1}{4}\right)x_4=0+\frac{3}{4}$$

$$(1+0)x_2+\left(0+\frac{3}{4}\right)x_3+\left(0+\frac{1}{4}\right)x_4=1+\frac{3}{4}$$

把整数部分与分数部分分开, 分别移到等式左右两边, 得到

$$x_1-x_3=\frac{3}{4}-\left(\frac{3}{4}x_3+\frac{1}{4}x_4\right)$$

$$x_2-1=\frac{3}{4}-\left(\frac{3}{4}x_3+\frac{1}{4}x_4\right)$$

由于x_1,x_2是非负整数, 则x_3,x_4也是非负整数. 上式左端为整数, 则右端也为整数, 因此有$\frac{3}{4}-\left(\frac{3}{4}x_3+\frac{1}{4}x_4\right)\le 0$, 或写为$-3x_3-x_4\le -3$, 这就是一个**切割方程**, 把它作为约束条件加入原来的问题中, 再解. 引入非负松弛变量x_5:

$$-3x_3-x_4+x_5=-3.$$

单纯形表变为

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
1	0	$-1/4$	$1/4$	0	$3/4$
0	1	$3/4$	$1/4$	0	$7/4$
0	0	-3	-1	1	-3
0	0	$1/2$	$1/2$	0	$5/2$

$\xrightarrow{\text{对偶单纯形法}}$

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
1	0	0	$1/3$	$-1/12$	1
0	1	0	0	$1/4$	1
0	0	1	$1/3$	$-1/3$	1
0	0	0	$1/3$	$1/6$	2

此时x_1, x_2都是整数, 解题完成. □

注: 新得到的约束条件$-3x_3 - x_4 \le -3$等价于$x_2 \le 1$, 仅需把

$$x_3 = 1 + x_1 - x_2$$

$$x_4 = 4 - 3x_1 - x_2$$

代入即可. 而$x_2 \le 1$把可行域中$x_2 > 1$的部分切割掉(即前面图中的D恰为$(0,1)$), 被切割掉的部分不含整数点, 且在切割后的可行域上优化目标函数恰好得到整数解.

注: 求切割方程步骤如下:

1. 设x_i是相应线性规划最优解中为分数值的一个基变量（若不存在, 则已经最优）, 由最终的单纯形表得
$$x_i + \sum_{j\in K} y_{ij}x_j = b_i,$$
其中$i \in Q$(Q为基变量的下标集合), $j \in K$ (K表示非基变量的下标集合).
2. 把b_i, y_{ij}部分解成整数部分N与非负真分数f之和, 即
$$b_i = N_i + f_i$$
$$y_{ij} = N_{ij} + f_{ij}$$
其中$0 < f_i < 1, 0 \le f_{ij} < 1$. 代入得$x_i + \sum_j N_{ij}x_j - N_i = f_i - \sum_j f_{ij}x_j$.
3. 考虑变量(包括松弛变量)为整数的约束条件, 这时上式从左边看必须为整数, 从右边看, 由于$0 < f_i < 1$, 则不可能为正, 即
$$f_i - \sum_{j\in K} f_{ij}x_j \le 0$$
这就是个切割方程.

注: 切割方程真正进行了切割, 因为至少把非整数最优解这一点割掉了. 但是没有割掉整数解, 因为相应的线性规划的任意整数可行解都满足切割方程. 得到切割方程后, 先对切割方程化简, 使得系数均为整数, 再引入松弛变量; 切割方程假如最后一张单纯形表后, 右端项一定为负, 其他分量都为正, 因此使用对偶单纯形法仅需一次旋转运算.

注: 割平面法有可能收敛很慢, 因此很少单独使用, 可以与其他方法(如分支定界法)配合使用通常有效.

§ 6.3 解0-1规划的隐枚举法

求0-1整数线性规划问题

$$\min / \max\ c^T x, \text{s.t.} Ax = b, x \in \{0,1\}^n.$$

当然可以用分支定界法或者割平面法求解, 现在介绍新方法.

枚举法有2^n种情况, 首先用可行性条件进行过滤, 进一步比较函数值, 选出最优解. 当n较小时有效. 而**隐枚举法**改进枚举法, 对最小化问题, 求解基本步骤如下:

1. 寻找一个初始可行解x_0, 得到最优目标函数值的上界z_0.
2. 按照完全枚举法列出2^n种情况, 当组合解x_j对应的目标函数值z_j大于z_0时, 过滤掉; $z_j \le z_0$时, 进一步检验是否满足约束条件, 得到可行解.
3. 根据z_j的值确定最优解.
4. 这里上界z_0可以逐渐减小, 当某个可行解对应的目标函数值z_j小于z_0时, 将z_j作为新的上界.

例 6.3.1 求解下面问题.

$$\min \quad z=-6x_1-2x_2-3x_3-5x_4, s.t. \begin{cases} 4x_1+2x_2+x_3+3x_4\le 10 \\ 3x_1-5x_2+x_3+6x_4\ge 4 \\ 2x_1+x_2+x_3-x_4\le 3 \\ x_1+2x_2+4x_3+5x_4\le 10 \\ x\in\{0,1\}^4 \end{cases}$$

解: 首先第一个约束条件$4x_1+2x_2+x_3+3x_4\le 10$可以去掉, 因为对任意$x\in\{0,1\}^4$, 该约束都满足. 观察到可行解$x_0=(1,0,0,1)$, 对应$z_0=-11$. 把它假如约束条件, 得

$$\min \quad z=-6x_1-2x_2-3x_3-5x_4, \text{s.t.} \begin{cases} -6x_1-2x_2-3x_3-5x_4\le -11 \\ 3x_1-5x_2+x_3+6x_4\ge 4 \\ 2x_1+x_2+x_3-x_4\le 3 \\ x_1+2x_2+4x_3+5x_4\le 10 \\ x\in\{0,1\}^4 \end{cases}$$

列出2^4种情况, 分别代入约束条件, 判断是否可行: (得到-14以后, 把第一个约束条件的-11改为-14)

	(x_1,x_2,x_3,x_4)	(a)	(b)	(c)	(d)	目标函数值
1	(0,0,0,0)	×				
2	(0,0,0,1)	×				
3	(0,0,1,0)	×				
4	(0,0,1,1)	×				
5	(0,1,0,0)	×				
6	(0,1,0,1)	×				
7	(0,1,1,0)	×				
8	(0,1,1,1)	×				
9	(1,0,0,0)	×				
10	(1,0,0,1)	√	√	√	√	-11
11	(1,0,1,0)	×				
12	(1,0,1,1)	√	√	√	√	-14
13	(1,1,0,0)	×				
14	(1,1,0,1)	√	√	√	√	-13
15	(1,1,1,0)	√				
16	(1,1,1,1)	√	√	√	×	

注: 选用不同的初始可行解, 计算量不一样. 一般地, 求最大化问题时, 首先考虑目标函数系数最大的变量等于1.

当目标函数求最小值时, 先考虑目标函数系数最大的变量等于0, 对于上例, 目标函数为$-6x_1-2x_2-3x_3-5x_4$, 先将它重新排列为$-2x_2-3x_3-5x_4-6x_1$, 再对(x_2,x_3,x_4,x_1)取值为$(0,0,0,1),(0,0,1,0)\cdots$进行逐一排查. 在计算过程中, 当目标函数值得到改进时, 应使用新的界以减少计算量.

§ 6.4 解指派问题的匈牙利算法

6.4.1 标准形式的最小化指派问题

指派问题形如

$$\begin{aligned} \min/\max \quad & \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} c_{ij}x_{ij} \\ s.t. \quad & \sum_{j=1}^{n} x_{ij}=1, i=1,2,\cdots,n \\ & \sum\sum_{i=1}^{n} x_{ij}=1, j=1,2,\cdots,n \\ & x_{ij}\in\{0,1\}, i,j=1,2,\cdots,n \end{aligned}$$

把$C=(c_{ij})_{n\times n}$叫**系数矩阵**或**效率矩阵**. 同样可记$X=(x_{ij})$, 则目标函数可记为$f(X)=\langle C,X\rangle$.

指派问题的性质: 将效率矩阵C的某一行或某一列加上一个任意常数m到矩阵D, 以D为效率矩阵的指派问题与以C为效率矩阵的指派问题具有相同的解. (证明: 验证$f_C(X)=f_D(X)-m$即可)

求解指派问题的方法有**匈牙利算法**, 它利用了上面的性质, 由W.W.Kuhn于1955年提出, 利用了匈牙利数学家D. Konig关于矩阵中独立元素的定理.

匈牙利算法适用的条件: (1)最小化问题, (2)人与事的数目相等, (3)效率$c_{ij}\geq 0$.

如果不满足上述条件, 应该**把问题转化以满足上述条件**, 之后用匈牙利算法求解.

下面用效率矩阵为例来说明匈牙利算法计算步骤.

例 6.4.1 $C=\begin{pmatrix}4&8&7&15&12\\7&9&17&14&10\\6&9&12&8&7\\6&7&14&6&10\\6&9&12&10&6\end{pmatrix}$.

Step 1:变换系数矩阵: 每一行都减去所在行的最小元素. 在所得矩阵中, 每一列都减去所在列的最小元素. 这样系数矩阵中每行与每列都至少有一个零元素, 同时不出现负元素.

$$C\to\begin{pmatrix}0&4&3&11&8\\0&2&10&7&3\\0&3&6&2&1\\0&1&8&0&4\\0&3&6&4&0\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}0&3&0&11&8\\0&1&7&7&3\\0&2&3&2&1\\0&0&5&0&4\\0&2&3&4&0\end{pmatrix}=C'.$$

位于不同行、不同列的零元素叫独立零元素.

注: 对于效率非负的指派问题, 并且目标是最小化, 若能在系数矩阵中找到n个位于不同行不同列的零元素, 则对应的指派方案总费用为0, 从而一定是最小的(因为效率非负).

注: 在选择零元素时, 当同一行或列上有多个零元素时, 选择其一, 则其余的零元素不能被选择, 而成为多余的(被选中的零元素的位置对应的x_{ij}将被赋值为1, 因为一个人只能做一件事, 而一件事只能由一个人来做). 因此, 关键并不在于有多少个零元素, 而要看独立零元素的数目. (独立零元素分布在不同行和不同列中).

Step 2: 在变换后的效率矩阵中确定独立零元素. 方法如下:

1. 从只有一个0 元素的行(列)开始, 给这个0 元素加圈, 记作$\circledcirc$. (此人只能做此事, 或此事只能由该人去做.)
2. 划去$\circledcirc$所在列(行)的其他0 元素, 记作$\varnothing$. (此事已经不能再由其他人去做, 或此人已经不能做其他事情).
3. 反复进行1、2步, 直到所有0 元素都被圈出和划掉为止.
4. 若仍有没有划圈的0 元素, (即在所有的行与列的零元素都不止一个), 可任意选其中一个0元素加圈, 同时划去其同行与同列中其他零元素. 当过程结束时, 被画圈的元素就是独立零元素.

$$\begin{pmatrix}\varnothing&3&\circledcirc&11&8\\\circledcirc&1&7&7&3\\\varnothing&2&3&2&1\\\varnothing&\circledcirc&5&\varnothing&4\\\varnothing&2&3&4&\circledcirc\end{pmatrix}$$

- 若独立零元素有n个, 则已得到最优解(独立零元素所对应变量$x_{ij}=1$, 其余为0).
- 若不足n个, 表示还不能确定最优指派方案, 需要画出能**覆盖所有零元素的最少数目的直线集合**: 步骤如下.

1. 对没有$\circledcirc$的行打$\surd$号;
2. 对已打$\surd$号的行中所有含$\varnothing$元素的列打$\surd$号;
3. 再对打有$\surd$号的列中含$\circledcirc$元素的行打$\surd$号;
4. 重复(2) , (3) 直到得不出新的打$\surd$号的行、列为止
5. 对没有打$\surd$号的行画一横线(删除线), 有打$\surd$号的列画一纵线,这就得到覆盖所有0元素的最少直线数. (在这个例子中, 第一、四、五行画删除线, 第一列画删除线)

Step 3: 继续变换系数矩阵, 方法是在未被直线覆盖的元素中找到最小的元素. 对未被直线覆盖的元素中找出最小的元素. 对未被直线覆盖的元素所在的行(列)中个元素(包括被划去的元素)都减去这一最小元素, 这样在未被直线覆盖的元素中会出现新的零元素, 同时已被直线覆盖的元素中出现负数, 为了消除负数, 在所在的行都加上该最小元素即可.

$$C' = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 & 11 & 8 \\ 0 & 1 & 7 & 7 & 3 \\ 0 & 2 & 3 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 4 \\ 0 & 2 & 3 & 4 & 0 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 & 11 & 8 \\ -1 & 0 & 6 & 6 & 2 \\ -1 & 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 4 \\ 0 & 2 & 3 & 4 & 0 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & 3 & 0 & 11 & 8 \\ 0 & 0 & 6 & 6 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 5 & 0 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 0 \end{pmatrix} = C''$$

返回**Step 2**加圈, 得到$C'' = \begin{pmatrix} 1 & 3 & \circledcirc & 11 & 8 \\ \varnothing & \circledcirc & 6 & 6 & 2 \\ \circledcirc & 1 & 2 & 1 & \varnothing \\ 1 & \varnothing & 5 & \circledcirc & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & \circledcirc \end{pmatrix}$. 所以最优解为$X = \begin{pmatrix} & & 1 & & \\ & 1 & & & \\ 1 & & & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$.

6.4.2 非标准形式的指派问题

- 最大化指派问题: 设最大化指派问题的效率矩阵C的最大元为m, 令矩阵$B = m - C$, 则只需要求B的最小化指派问题.
- 若一个人可以做多件事, 把这个人化作相同的k个人来接受指派, 这k个人做同一件事的费用系数都一样.
- 若人多事少, 添加一些虚拟的事, 被各个人做的费用取为0, 理解为这些虚拟的事是非常容易的, 任何人都可以完美的完成.
- 若人少事多, 比如m人n事, $m < n$,

  添加$n - m$个虚拟的人, 这些虚拟的人做各事情的费用取为0, 理解为这些虚拟的人可以不需要任何代价并且完美的完成任何一件事. 此时, 指派结果会筛选m件事情指派给m人, 其余$n - m$件事情不会被指派.

  若第i人可以做t_i件事情, 则将第i人的价值系数复制t_i份, 若最后行数多于列数, 添加零列(不需要做虚拟的事情)使得列数相等. 若最后行数仍少于列数, 添加零行(无所不能的人), 最终只能是有些事不会被指派.
- 某事一定不能由某人做的指派问题: 把相应的费用系数取足够大的数M.

例 6.4.2 *把5件事指派给3个人, 每人最多只能做两件事, 费用系数矩阵如下: (每行对应一人, 每列对应一事). 如何指派?*

$$C = \begin{pmatrix} 4 & 8 & 7 & 15 & 12 \\ 7 & 9 & 17 & 14 & 10 \\ 6 & 9 & 12 & 8 & 7 \end{pmatrix}.$$

解: 因为每人最多做两件事, 可将每个人化为相同的两个人, 得到新的费用系数矩阵:

$$C = \begin{pmatrix} 4 & 8 & 7 & 15 & 12 \\ 4 & 8 & 7 & 15 & 12 \\ 7 & 9 & 17 & 14 & 10 \\ 7 & 9 & 17 & 14 & 10 \\ 6 & 9 & 12 & 8 & 7 \\ 6 & 9 & 12 & 8 & 7 \end{pmatrix}.$$

上面1,2行对应第一人; 3,4行对应第二人; 5,6行对应第三人. 现在有6人5事, 可以创造一个虚拟的事情, 任何人都

不需要花费任何代价就可以完成:

$$C'' = \begin{pmatrix} 4 & 8 & 7 & 15 & 12 & 0 \\ 4 & 8 & 7 & 15 & 12 & 0 \\ 7 & 9 & 17 & 14 & 10 & 0 \\ 7 & 9 & 17 & 14 & 10 & 0 \\ 6 & 9 & 12 & 8 & 7 & 0 \\ 6 & 9 & 12 & 8 & 7 & 0 \end{pmatrix}.$$

最后一列对应虚拟的事. 之后用匈牙利算法.

习题 9 (Week 10)

1. 用分支定界法求解(松弛问题可借助计算机或图解法)

$$\min \quad z = -4x_1 - 3x_2, \text{s.t.} \begin{cases} 3x_1 + 2x_2 \le 25, \\ 4x_1 + 5x_2 \le 50, \\ x_1, x_2 \ge 0 \text{且都为整数} \end{cases}$$

2. 用割平面法求解

$$\min \quad z = -4x_1 - 3x_2, \text{s.t.} \begin{cases} 6x_1 + 4x_2 \le 30, \\ x_1 + 2x_2 \le 10, \\ x_1, x_2 \ge 0 \text{且都为整数} \end{cases}$$

3. 用隐枚举法求解

$$\min \quad z = 3x_1 + 7x_3 - x_3 + x_4, \text{s.t.} \begin{cases} 2x_1 - x_2 + x_3 - x_4 \ge 1 \\ x_1 - x_2 + 6x_3 + 4x_4 \ge 8 \\ 5x_1 + 3x_2 + x_4 \ge 5 \\ x \in \{0,1\}^4 \end{cases}$$

4. 求下列费用系数矩阵的最小化指派问题：(注: 自行构造模型)

$$\begin{pmatrix} 10 & 11 & 4 & 2 & 8 \\ 7 & 11 & 10 & 14 & 12 \\ 5 & 6 & 9 & 12 & 14 \\ 13 & 15 & 11 & 10 & 7 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 & 6 & 2 & 6 \\ 7 & 1 & 4 & 4 \\ 3 & 8 & 5 & 8 \\ 6 & 4 & 3 & 7 \\ 5 & 2 & 4 & 3 \\ 5 & 7 & 6 & 2 \end{pmatrix}$$

5. **(往年题)**人事部门欲安排4人到4个不同岗位工作, 每个岗位一个人. 经过考核, 四人在不同岗位的成绩（百分制）如下表所示. 如何安排他们的工作使得总成绩最好？

人员\工作	A	B	C	D
甲	85	92	73	90
乙	95	87	78	95
丙	82	83	79	90
丁	86	90	80	88

补充习题: 清华《运筹学》第三版.

6. **(5.2)**用分支定界法求解

$$\max \quad z=x_1+x_2, \text{s.t.} \begin{cases} x_1+\dfrac{9}{14}x_2 \le \dfrac{51}{14} \\ -2x_1+x_2 \le \dfrac{1}{3}, \\ x_1,x_2 \ge 0\text{且都为整数} \end{cases}$$

7. **(5.3)**用割平面法求解

$$\max \quad z=x_1+x_2, \text{s.t.} \begin{cases} 2x_1+x_2 \le 6, \\ 4x_1+5x_2 \le 20, \\ x_1,x_2 \ge 0\text{且都为整数} \end{cases}$$

8. **(5.6)**求解0-1规划:

$$(1)\ \min \quad z=4x_1+3x_2+2x_3, \qquad \text{s.t.} \begin{cases} 2x_1-5x_2+3x_3 \le 4 \\ 4x_1+x_2+3x_3 \ge 3 \\ x_2+x_3 \ge 1 \\ x_1,x_2,x_3 \in \{0,1\} \end{cases}$$

$$(2)\ \min \quad z=2x_1+5x_2+3x_3+4x_4, \qquad \text{s.t.} \begin{cases} -4x_1+x_2+x_3+x_4 \ge 0 \\ -2x_1+4x_2+2x_3+4x_4 \ge 4 \\ x_1+x_2-x_3+x_4 \ge 1 \\ x_1,x_2,x_3,x_4 \in \{0,1\} \end{cases}$$

9. **(5.7)**有4 个工人, 要指派他们分别完成4 种工作, 每人做各种工作所消耗的时间如下表所示, 问指派哪个人去完成哪种工作, 可使总的消耗时间为最小?

人员\工种	A	B	C	D
甲	15	18	21	24
乙	19	23	22	18
丙	26	17	16	19
丁	19	21	23	17

§ 6.5 动态规划问题

动态规划是一种解决棘手问题的方法, 把大问题变成小问题, 先解决小问题, 以逐步达到解决大问题的方法. 与线性规划等不同的是, 动态规划是一种解决问题的思想, 不是某一具体数学模型.

- 动态规划可帮助在给定约束条件下找到最优解.
- 在问题可分解为彼此独立且离散的子问题时, 可以用动态规划求解.
- 每种动态规划解决方案都涉及网格.
- 网格中的值通常就是要优化的值(例如: 背包问题中商品的价值).
- 每个单元格都是一个子问题, 因此应考虑如何把问题分解成子问题, 有助于找出网格的坐标轴.

例 6.5.1 (背包问题) *小偷的背包容量为4个单位, 供待偷的物品、价值、体积如下:*

物品	价值	体积
音响	3000	4
笔记本电脑	2000	3
吉他	1500	1

Step 1.制作表格, 每一行对应一个物品, 每列为不同容量的背包:

	容量1	容量2	容量3	容量4
吉他(G)				
音响(S)				
笔记本电脑(L)				

Step 2.逐行填入数字, 表格填完后, 解题完成.

- 第一行为吉他行, 意味着小偷要将吉他装入背包. 在每个单元格, 都要做一个决定: 偷还是不偷? (目标: 找出价值最高的物品组合). 而在该行只有吉他可以选择与这个单元格一样, **每个单元格都将包含当前可装入背包的所有商品**. (容量x所在列代表背包容量为x时可装物品价值总数的最大值)

	容量1	容量2	容量3	容量4
吉他(G)	1500,G	1500,G	1500,G	1500,G
音响(S)				
笔记本电脑(L)				

如果只有一个吉他可以选择, 则可装入的商品的最大价值是1500.

- 音响行: 此时可供选择的商品为1个吉他和1个音响. 在每一行, 可偷的商品都为当前的商品以及之前各行对应的商品, 因此还不能选择笔记本电脑.

	容量1	容量2	容量3	容量4
吉他(G)	1500,G	1500,G	1500,G	1500,G
音响(S)	1500,G	1500,G	1500,G	3000,S
笔记本电脑(L)				

- 电脑行：同样方式处理

	容量1	容量2	容量3	容量4
吉他(G)	1500,G	1500,G	1500,G	1500,G
音响(S)	1500,G	1500,G	1500,G	3000,S
笔记本电脑(L)	1500,G	1500,G	2000,L	3500,L&G

注: 如果再添加一件可供选择的商品, 例如华为P30 pro(价值2000, 体积1, 记为H), 此时不需要重新计算前面的表格, 只需要把华为放入最后一行, 继续填写该表格即可.

	容量1	容量2	容量3	容量4
吉他(G)	1500,G	1500,G	1500,G	1500,G
音响(S)	1500,G	1500,G	1500,G	3000,S
笔记本电脑(L)	1500,G	1500,G	2000,L	3500,L&G
华为(H)	2000,H	3500,H&G	3500,H&G	4000,H&L

注: 每一列从上到下, 最大价值不会降低. 行的排列顺序发生变化时, 最后一行的结果不会发生变化.

注: 如果增加一件更小的商品(比如项链, 价值1000, 容量0.5), 此时需要考虑粒度更细的表格：$0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4$.

注: 动态规划方法无法解决“偷走商品一部分”的问题, 此时要用贪婪算法.

注: 最优解可能导致背包没装满! 假如可供选择偷窃的还有一个钻石, 个头非常大, 占去3.5单位的容量, 价值100万, 比其他商品都值钱多了, 毫无疑问, 肯定偷！ 此时剩余0.5单位容量就什么都装不下了.

注: 还有更多可以用动态规划求解的问题, 不再举例了.

可以参考`https://homepages.cwi.nl/~lex/`查阅组合优化问题资料.

习题 10 (补充练习)

1. 在“背包问题”中, 若还有一件MP3(价值1000, 体积1), 要偷吗？
2. **(2019期中)**你要去野营, 有一个容量为6的背包, 需要决定该携带下面哪些东西. 其中每样东西都有相应的价值, 价值越大意味着越重要：

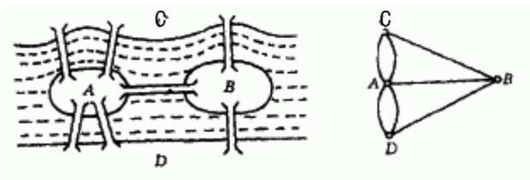
物品	价值	体积
水	10	3
书	3	1
食物	9	2
夹克	5	2
相机	6	1

第 7 章 图论

§ 7.1 图论的发展历史

图论是专门研究图的理论的一门数学分支，属离散数学范畴，与运筹学有交叉, 近300 年历史，发展历史大体分为三个阶段：

- 十八世纪中叶到十九世纪中叶：多数问题产生于游戏, 最具代表性的是所谓的Euler 七桥一笔画问题(1736 年).
- 十九世纪中叶到二十世纪中叶：图论问题大量出现，如Hamilton 问题, 地图染色的四色问题、可平面性问题等。期间也出现用图解决实际问题, 如Cayley 把树应用于化学领域，Kirchhoff 用树去研究电网络等.
- 二十世纪中叶以后：由生产管理、军事、交通、运输、计算机网络等方面提出实际问题, 以及大型计算机使大规模问题的求解成为可能，特别是以Ford 和Fulkerson 建立的网络流理论, 与线性规划、动态规划等优化理论和方法相互渗透，促进了图论对实际问题的应用。



德国哥尼斯堡（现名加里宁格勒）城中有一条河叫普雷格尔河，它将城分成两部分, 河中有两个小岛. 十八世纪时，河两边及小岛之间共有七座桥, 当时人们提出这样的问题：有没有办法从某处出发，经过各桥一次且仅一次最后回到原地？

1736年瑞士数学家Euler发表“根据几何位置的解题方法”一文, 有效地解决了此类问题, 是有记载的第一篇图论论文. 此类问题也称Euler回路问题(经过每条边一次且仅一次的回路), Euler被认为是图论的创始人.

Hamilton回路是1857年英国数学家Hamilton提出: 给出一个正12面体图形，共有20个顶点表示20个城市, 要求从某个城市出发沿着棱线寻找一条经过每个城市一次而且仅一次, 最后回到原处的周游世界线路（并不要求经过每条边）.

图论中图是由点和边构成，可以反映一些对象之间的关系。一般情况下图中点的相对位置如何、点与点之间联线的长短曲直, 对于反映对象之间的关系并不是重要的。

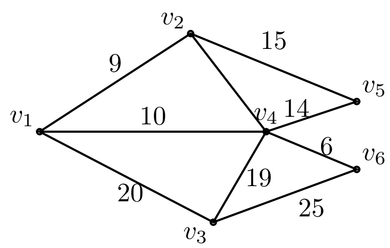
§ 7.2 图的基本概念

7.2.1 基本定义

基本定义: （相关例子参考《离散数学》笔记）

- 若用点表示研究的对象，用边表示这些对象之间的联系, 则**图**G可以定义为点和边的集合, 记作$G = \{V, E\}$. 其中V为点集, E为边集. 若E中点对无序，则称G为**无向图**；否则，称为**有向图**. 有向图也记为$D = (V, A)$.
- V中元素叫**顶点**, 用v表示，E中元素叫**边**, 用e表示. 对每条边可用它所连接的点表示, 比如e_1连接了v_1, v_2记作：$e_1 = [v_1, v_2]$. 对有向图，E中的元素叫做**弧**.
- 在无向图中, 如果$e = [v_i, v_j]$, 则v_i, v_j称为e的**端点**. 在有向图中, 顶点u到顶点v的弧记为(u, v), u为起点，v为终点.
- 若v_i, v_j与同一条边关联, 称点v_i, v_j**相邻**. 若边e_i, e_j有公共端点, 称边e_i, e_j**相邻**.
- 如果边e的两个端点一样, 称该边为**环**.
- 如果两个点之间多于一条边，称为**多重边**. (有向图中两顶点间有不同方向的两条边，不是多重边).

- 对无环、无多重边的图称作**简单图**.
- 与某一个点v相关联的边的数目称为点v的**度**(也叫**次**), 记作$d(v)$. 次为奇数的点称作奇点, 次为偶数的点称作偶点.
- 次为1的点称为**悬挂点**, 连接悬挂点的边称为**悬挂边**. 次为0 的点称作**孤立点**.
- 一个图G的**次(度)**等于各点的次(度)之和.
- 图中某些点和边的交替序列, 若其中各边互不相同, 且对任意v_{t-1}和v_t均相邻称为**链**.用μ表示:
$$\mu = \{v_1, e_2, v_2, \cdots, e_k, v_k\}.$$
- **初等链**: 链中所含的点均不相同(边一定不相同，因此初等链一定是简单链);
- 起点与终点重合的链($v_1 = v_k$)称作**圈**.
- **初等圈**：圈中所含的点均不相同(边一定不相同，因此初等圈一定是简单圈);
注：如无说明，仅考虑初等链与初等圈.
- 如果每一对顶点之间至少存在一条链, 称这样的图为**连通图**, 否则称图**不连通**.
- **二部图**：二部图$G = (V, E)$的点集V可以分为两各非空子集X, Y, 其中$X \cup Y = V$, $X \cap Y = \varnothing$, 且同一集合中任意两个顶点均不相邻.
- **子图**：设图$G_1 = (V_1, E_1), G_2 = (V_2, E_2)$, 如果有$V_1 \subseteq V_2, E_1 \subseteq E_2$, 称$G_1$是$G_2$的**子图**.
- **支撑子图**：设图$G_1 = (V_1, E_1), G_2 = (V_2, E_2)$, 如果有$V_1 = V_2, E_1 \subseteq E_2$, 称$G_1$是$G_2$的**支撑子图**.
- **导出子图**： 若$V' \subseteq V, E' = \{[u, v] \in E : u, v \in V'\}$, 称$G'$是$G$中由$V'$导出的子图.
- **基础图**：有向图$D = (V, A)$中去除所有边的方向得到的图$G = (V, E)$称为其基础图.
- **路**：设$u, v \in V$, 且G为D的基础图. 若G中有连接u, v的链, 且该链中的每一条边，作为D中的弧，方向均一致, 并且为从u到v, 则称该链为从u到v的路;
- **回路**：起点终点相同的路;
- **赋权图**： 设图$G = (V, E)$, 对G的每一条边(v_i, v_j), 相应赋予数量指标w_{ij}称为边(v_i, v_j)的**权**, 赋予权的图G称为**网络(或赋权图)**.



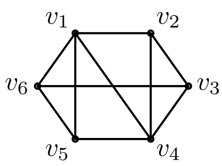
- 端点无序的赋权图称为**无向网络**, 端点有序的赋权图称为**有向网络**.
- 有向图中, 以v_i为始点的边数称为点v_i的**出度**, 用$d^+(v_i)$表示; 以v_i为终点的边数称为点v_i的**入度**, 用$d^-(v_i)$表示; v_i点的出度和入度之和就是该点的度. 有向图中, 所有顶点的入度之和等于所有顶点的出度之和.

7.2.2 图的矩阵描述

为了在计算机中存储一个图, 可以采用如下方法: 邻接矩阵、关联矩阵、权矩阵.

- **邻接矩阵**： 对于图$G = (V, E)$, $|V| = n$, $|E| = m$, 有$n \times n$阶方阵$A = (a_{ij})_{n\times n}$, 其中
$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & v_i, v_j\text{有关联边}, \\ 0, & \text{其它}. \end{cases}$$
- **权矩阵**：对于图$G = (V, E)$, $|V| = n$, $|E| = m$, 有$m \times n$阶矩阵$M = (m_{ij})_{n\times m}$, 其中
$$m_{ij} = \begin{cases} 2, & v_i\text{是}e_j\text{的两个端点}, \\ 1, & v_i\text{是}e_j\text{的一个端点}, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases}$$
- **关联矩阵**：对于赋权图$G = (V, E)$, 边(v_i, v_j)有权w_{ij}, 构造矩阵$B = (b_{ij})_{n\times n}$, 其中
$$b_{ij} = \begin{cases} w_{ij}, & (v_i, v_j) \in E, \\ 0, & \text{其它}. \end{cases}$$

例 7.2.1 下图所表示的图可以构造邻接矩阵A如下:



$$A_{6\times 6} = \begin{array}{c} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \end{array} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

7.2.3 图的基本性质

定理 7.2.1 任何图中，顶点度数之和等于所有边数的2倍.

证明: 由于每条边必与两个顶点关联，在计算点的度时, 每条边均被计算了两次，所以顶点次数的总和等于边数的2倍. □

定理 7.2.2 任何图中，次为奇数的顶点必为偶数个.

证明: 设V_1和V_2分别为图G中奇点与偶点的集合, $|V| = m$, 由前一定理,

$$\sum_{v\in V_1} d(v) + \sum_{v\in V_2} d(v) = 2m,$$

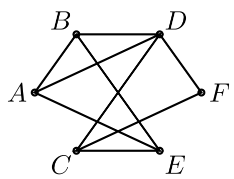
而$2m$是偶数, 偶点的度之和也是偶数, 则奇点的度之和也是偶数, 从而奇点的个数必须是偶数. □

§ 7.3 图的建模问题

例 7.3.1 有甲, 乙, 丙, 丁, 戊, 已6名运动员报名参加A,B,C,D,E,F这6个项目的比赛. 下表中打√的是各运动员报名参加的比赛项目. 问6个项目的比赛顺序应如何安排，做到每名运动员都不连续地参加两项比赛.

	A	B	C	D	E	F
甲	√		√			
乙	√	√		√		
丙			√		√	
丁	√				√	
戊	√	√			√	
己			√	√		√

解: 把比赛项目作为研究对象, 用点表示. 如果2个项目有同一名运动员参加, 在代表这两个项目的点之间连一条线, 可得下图.

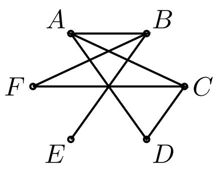


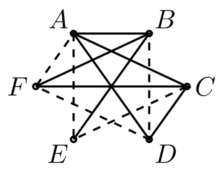
在图中找到一个点序列，使得依次排列的两点不相邻, 即能满足要求(即在补图中找Hamilton回路). 如：

- A, C, B, F, E, D
- D, E, F, B, C, A

例 7.3.2 一个班级的学生共计选修A、B、C、D、E、F六门课程，其中一部分人同时选修D、C、A，一部分人同时选修B、C、F，一部分人同时选修B、E，还有一部分人同时选修A、B，期终考试要求每天考一门课，六天内考完，为了减轻学生负担，要求每人都不会连续两天参加考试，试设计一个考试日程表.

解: 以每门课程为一个顶点，共同被选修的课程之间用边相连, 得图，按题意，相邻顶点对应课程不能连续考试，不相邻顶点对应课程允许连续考试, 因此，作图的补图，问题是在图中寻找一条哈密顿道路，如C－E－A－F－D－B, 就是一个符合要求的考试课程表.





§ 7.4 最小赋权树算法

7.4.1 树的基本定义与性质

- 把无圈的连通图称为**树**.
- 设图$K = (V, E')$是图$G = (V, E)$的一支撑子图. 如果图K是一个树, 那么称K是G的一个**支撑树**. 一个图G有支撑树的充要条件是G是连通图.
- 如果对于$G = (V, E)$中的每一条$[v_i, v_j]$, 相应地有一个数w_{ij}, 那么称这样的图G为**赋权图**, w_{ij}称为边$[v_i, v_j]$的**权**.
- 如果图$T = (V, E')$是图G的一个支撑树, 那么称E'上所有边的权之和为**支撑树T的权**，记作$S(T)$.
- 如果图G的支撑树T^*的权$S(T^*)$在G的所有支撑树T中的权最小, 即$S(T^*) = \min S(T)$, 那么称T^*是G的**最小支撑树**.

树的基本性质:(证明见离散数学笔记)

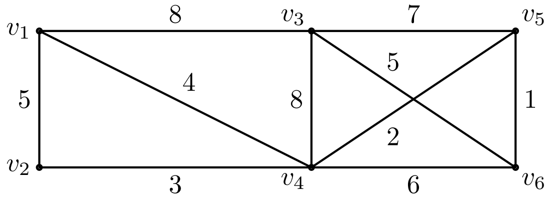
- 任何树中必存在次为1的点.
- n个顶点的树必有$n-1$条边.
- 图G是一个树的充分必要条件是任意两个顶点之间有且仅有一条链.
- 树连通，但去掉任一条边，必变为不连通.
- 在树中不相邻的两个点之间加一条边，恰得到一个圈.
- 设图$G = (V, E)$是一个树, 顶点数$p(G) \geq 2$, 那么图G中至少有两个悬挂点.

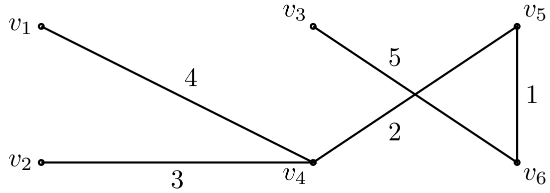
7.4.2 最小赋权树算法

(1)**破圈法**: 任取一圈, 去掉圈中最长边, 直到无圈.

(2)**(Kruskal)避圈法:** 去掉G中所有边，得到n个孤立点；然后加边. 加边的原则为: 从最短边开始添加, 加边的过程中不能形成圈, 直到点点连通(即: $n-1$条边).

例 7.4.1 求下面图的最小树.





用两种方法得到的最小树如上, 最小权为15.

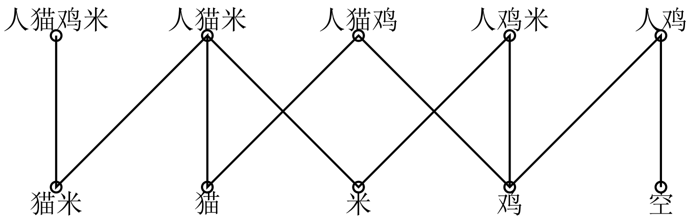
§ 7.5 最短路问题算法

就是从给定的网络图中找出一点到各点或任意两点之间距离最短的一条路. 最短路问题是图论中十分重要的最优化问题之一，它作为一个经常被用到的基本工具, 可以解决生产实际中的许多问题, 比如城市中的管道铺设，线路安排，工厂布局，设备更新等等; 也可以用于解决其它的最优化问题.

- 设赋权有向图$D=(V,A)$, 对每个弧$a=(v_i,v_j)$, 相应有权w_{ij}, v_s,v_t是D中两个顶点, P是D中从v_s到v_t的任意一条路, 定义**路的权**是P中所有弧权的和, 记作$S(P)$.
- **最短路问题**就是找一条从v_s到v_t的路P_0, 使得$S(P_0)=\min_P S(P)$. 把P_0叫做从v_s到v_t的**最短路**. P_0的权$S(P_0)$叫做从v_s到v_t的**距离**，记作$d(v_s,v_t)$.
- 由于D是有向图，$d(v_s,v_t)$与$d(v_t,v_s)$一般不相等.
- 重要定理: 若序列$\{v_1,\cdots,v_n\}$是v_1到v_n的最短路, 则序列$\{v_1,\cdots,v_{n-1}\}$是从v_1到v_{n-1}的最短路.

例 7.5.1 一个人带着猫、鸡、米, 欲从河的左岸到右岸, 每次只能带一件东西过河. 猫与鸡、鸡与米不能在无人看管的情况下放在一起. 问：至少需要多少次渡河才能把这些全带到对岸?

解: 用求最短路方法解决. 把点表示河岸的状态, 边e_{ij}表示由状态v_i经一次渡河到状态v_j, 边e_k权都定为1.



共有2种方案.

7.5.1 Dijkstra标号算法

Edsger Wybe Dijkstra (1930-2002, 荷兰人), 计算机科学家、1972年获图灵奖，与Donald Knuth并称为当代最伟大的计算机科学家. 他于1956年设计的最短路标号算法是迄今为止最有效地算法（**非负权**）.

设图的起点是v_s, 终点是v_t,以v_i为起点, v_j为终点的弧记为(i,j), 距离记为d_{ij}.

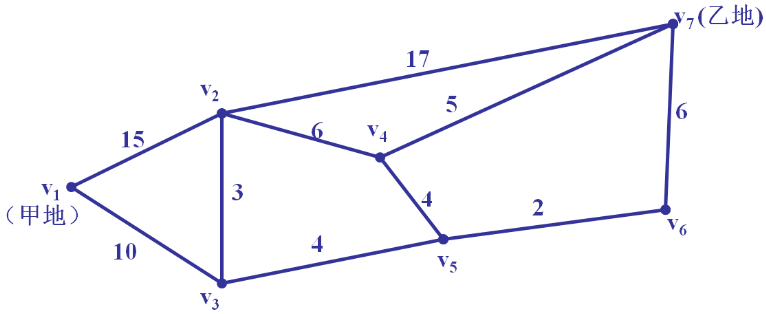
- P标号(点标号)：$b(i)$, 起点v_s到点v_i的最短路的长度;
- T标号(边标号)：$k(i,j)=b(i)+d_{ij}$，

步骤如下:

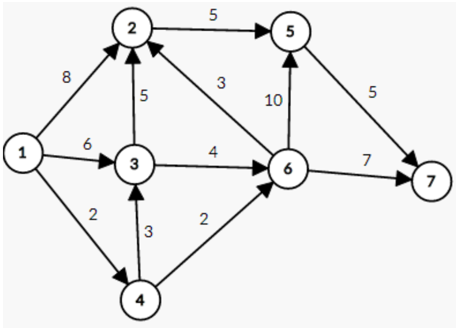
1. 令起点的标号$b(s)=0$.
2. 找出所有v_i已标号v_j未标号的弧集合$B=\{(i,j)\}$, 如果这样的弧不存在或v_t已标号则计算结束;
3. 计算集合B中弧$k(i,j)=b(i)+d_{ij}$的标号.
4. 选一个点标号$b(l)=\min_j\{k(i,j)|(i,j)\in B\}$, 在终点$v_l$处标号$b(l)$, 返回到第2步.

7.5.2 最短路问题的应用

例 7.5.2 电信公司准备准备在甲、乙两地沿路架设一条光缆线, 问如何架设使其光缆线路最短? 下图给出了甲乙两地间的交通图. 权数表示两地间公路的长度（单位：公里）



例 7.5.3 求下图v_1到v_7的最短路长及最短路线.



解: (1)开始让起点v_1标号为0, 此时$B_1 = \{(1,2),(1,3),(1,4)\}$, 这三条弧的标号分别为

$$d_{12} = 8, d_{13} = 6, d_{14} = 2.$$

d_{14}是最小的, 因此把v_4标号为2, 作下一步操作.

(2)此时, $B_2 = \{(1,2),(1,3),(4,3),(4,6)\}$, 标号分别为

$$d_{12} = 8, d_{13} = 6, d_{43} = 2+3 = 5, d_{46} = 2+2 = 4,$$

其中d_{46}是最小的, 因此把v_6标号为4, 作下一步操作.

(3)此时, $B_3 = \{(1,2),(1,3),(4,3),(6,2),(6,5),(6,7)\}$, 标号分别为

$$d_{12} = 8, d_{13} = 6, d_{43} = 2+3 = 5, d_{62} = 4+3 = 7, d_{65} = 4+10 = 14, d_{67} = 4+7 = 11,$$

其中d_{43}是最小的, 因此把v_3标号为5, 作下一步操作.

(4)此时, $B_4 = \{(1,2),(6,2),(6,5),(6,7),(3,2)\}$, 标号分别为

$$d_{12} = 8, d_{62} = 4+3 = 7, d_{65} = 4+10 = 14, d_{67} = 4+7 = 11, d_{32} = 5+5 = 10,$$

其中d_{62}是最小的, 因此把v_2表还为7, 作下一步操作.

(5)此时, $B_5 = \{(6,5),(6,7),(2,5)\}$, 标号分别为

$$d_{65} = 4+10 = 14, d_{67} = 4+7 = 11, d_{25} = 7+5 = 12,$$

其中d_{67}是最小的, 因此把v_7表还为11, 此时终点已经标号, 计算结束.

因此, 从v_1到v_7的最短路长是11, 最短路线是$v_1 \to v_4 \to v_6 \to v_7$. □

注: 从上例知, 只要某点已标号, 说明已找到起点v_s到该点的最短路线及最短距离, 因此可以将每个点标号，求出v_s到任意点的最短路线. 如果某个点v_j不能标号，说明v_s不可达v_j.

注: 无向图最短路的求法只需将上述步骤2中的弧改成边即可.

Dijkstra算法只适用于全部权为非负情况，如果某边上权为负的，算法失效. 此时可采用逐次逼近算法(参见清华大学运筹学教材，迭代算法).

例 7.5.4 (设备更新问题) 设备更新问题。某公司使用一台设备，在每年年初, 公司就要决定是购买新的设备还是继续使用旧设备. 如果购置新设备，就要支付一定的购置费，当然新设备的维修费用就低. 如果继续使用旧设备，可以省去购置费，但维修费用就高了. 请设计一个五年之内的更新设备的计划，使得五年内购置费用和维修费用总的支付费用最小. 已知：设备每年的年初价格表如下.

年份	1	2	3	4	5
年初价格	11	11	12	12	13

设备维修费如下表.

使用年数	$0-1$	$1-2$	$2-3$	$3-4$	$4-5$
每年维修费用	5	6	8	11	18

解: 将问题转化为最短路问题. 用v_i表示“第i年年初购进一台新设备”, 弧(v_i, v_j)表示第i年年初购进的设备一直使用到第j年年初.

把所有弧的权数计算如下表，把权数赋到图中，再用Dijkstra算法求最短路.

年份	1	2	3	4	5	6
1		16	22	30	41	59
2			16	22	30	41
3				17	23	31
4					17	27
5						18
6						

用Dijksra算法计算可知最短路径是$v_1 \to v_3 \to v_6$或$v_1 \to v_4 \to v_6$, 最短距离是53.

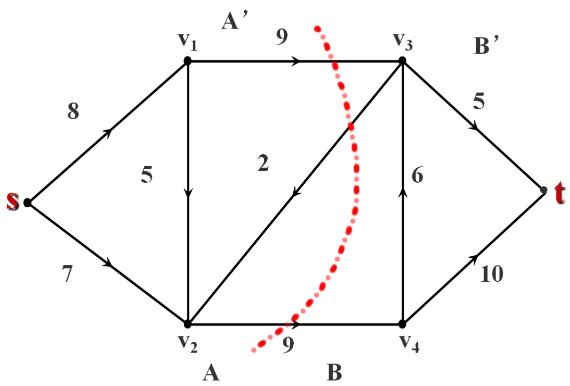
§ 7.6 网络的最大流问题

7.6.1 基本概念

如何制定一个运输计划使生产地到销售地的产品输送量最大, 这就是一个网络最大流问题. 考虑有向图$D = (V, A)$. 定义

- **容量网络:** 网络上的每条弧(v_i, v_j)都给出一个最大的通过能力, 称为该弧的**容量**, 简记为c_{ij}. 容量网络中通常规定一个**发点**(也称**源点**，记为s) 和一个**收点**(也称**汇点**，记为t), 网络中其他点称为**中间点**.
- **网络的最大流**指网络（带流量限制或赋权的有向图）中从发点到收点之间允许通过的最大流量.
- **流**是指加在网络各条弧上的实际流量，对加在弧(v_i, v_j)上的负载量记为f_{ij}. 若$f_{ij} = 0$, 称为零流.
- 满足以下条件的一组流称为**可行流**.
  1. 容量限制条件: 容量网络上所有的弧满足：$0 \le f_{ij} \le c_{ij}$.
  2. 中间点平衡条件: $\sum\limits_{j:(i,j)\in A} f(v_i, v_j) - \sum\limits_{k:(k,i)\in A} f(v_k, v_i) = 0, i \ne s, t$.
  3. 若以$v(f)$表示网络中从$s \to t$的流量, 则有：
  $$v(f) = \sum_{j:(s,j)\in A} f(v_s, v_j) - \sum_{k:(k,t)\in A} f(v_k, v_t) = 0.$$
- 任何网络上一定存在可行流. 显然，零流即是可行流.
- **网络最大流问题**：使$v(f)$值达到最大的可行流. 网络最大流问题是线性规划的特殊情形:
  $$\max v(f), \text{s.t.} f_{ij}\text{满足可行流条件}.$$
- **割**指容量网络中将发点和收点分割开, 并使$s \to t$的流中断的一组弧的集合. **割容量**是组成割集合中的各条弧的容量之和, 记为
  $$c(V, \overline{V}) = \sum_{(i,j)\in(V,\overline{V})} c(v_i, v_j).$$

如下图中, AA'将网络上的点分割成$V, \overline{V}$两个集合. 并且有$s \in V, t \in \overline{V}$. 称弧的集合$\{(v_1, v_3), (v_2, v_4)\}$是一个割, 且$V \to \overline{V}$的流量为18.



定理 7.6.1 设网络N中一个从s到t的可行流f的流量为$v(f)$, (V,V')为N的任意一个割集, 则

$$v(f)=f(V,V')-f(V',V).$$

推论 7.6.2 网络N中任意可行流f的流量$v(f)$和割集(V,V')有$v(f)\le c(V,V')$.

证明: $v(f)=f(V,V')-f(V',V)\le f(V,V')\le c(V,V')$. □

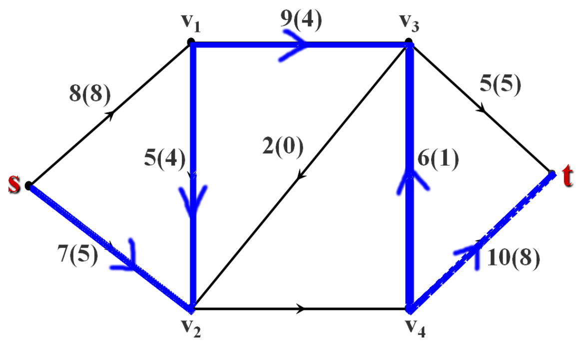
推论 7.6.3 最大流量$v^*(f)$不大于最小割集的容量, 即$v^*(f)\le \min\{c(V,V')\}$.

定理 7.6.4 (最大流最小割定理) 在网络中$s\to t$的最大流量=最小割集的容量, 即$v^*(f)=c^*(V,V')$.

- **增广链:** 设f是一个可行流, μ是从发点v_s到收点v_t的一条链. 若μ满足以下条件, 则称之为（关于可行流f的）增广链:
  1. 在该链上所有指向为$s\to t$的弧（称为前向弧，顺向弧，记作μ^+）都非饱和, 即
  $$(v_i,v_j)\in\mu^+\Rightarrow 0\le f_{ij}<c_{ij}.$$
  2. 在该链上所有指向为$t\to s$的弧（称为后向弧，逆向弧，记作μ^-）流量均大于零（非零流）, 即
  $$(v_i,v_j)\in\mu^-\Rightarrow 0< f_{ij}\le c_{ij}.$$

定理 7.6.5 网络N中的可行流f是最大流当且仅当N中不包含f的增广链.

在下面例子中, 括号中的数字给出一个可行流, $s\to v_2\to v_1\to v_3\to v_4\to t$为该可行流的一个增广链（增流链）. 弧旁数字记为$(c_{ij},f_{ij})$.



7.6.2 有关算法

求网络最大流的**Ford-Fulkerson标号（原始对偶）算法**基本思想: 由一个流开始，系统地搜寻增广链，然后在此链上增流，继续这个增流过程，直至不存在增广链. 算法:(Ford-Fulkerson, 1962)

1. 找出第一个可行流, 例如所有弧的流量$f_{ij}=0$.
2. 用标号的方法找一条增广链.
   (1) 首先给发点s标号(∞), 标号中的数字表示允许的最大调整量.
   (2) 选择一个点v_i(已标号)并且另一端未标号的弧沿着某条链向收点t检查: 如果弧的起点为v_i, 并且有$f_{ij}<C_{ij}$，则给v_j标号为$(C_{ij}-f_{ij})$. 如果弧的方向指向v_i, 并且有$f_{ji}>0$，则v_j标号(f_{ji}).
3. 重复第2步, 可能出现两种结局:
   (1) 标号过程中断, t无法标号, 说明网络中不存在增广链，目前流量为最大流. 同时可以确定最小割集，记已标号的点集为V, 未标号的点集合为V', 则(V,V')为网络的最小割.
   (2) t得到标号, 反向追踪在网络中找到一条从s到t的由标号点及相应的弧连接而成的增广链. 继续第4步.
4. 修改流量. 设原图可行流为f，令

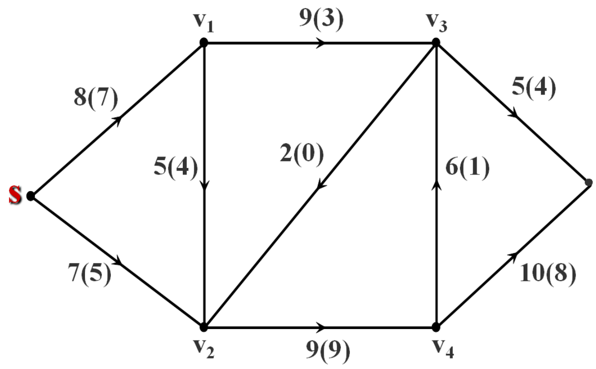
$$f'=\begin{cases} f+\varepsilon, & \text{对增广链上所有前向弧,}\\ f-\varepsilon, & \text{对增广链上所有后向弧,}\\ f, & \text{所有非增广链上的弧,}\end{cases}$$

得到网络上一个新的可行流f.. 其中

$$\varepsilon = \min\{\min_{\mu^+}\{c_{ij} - f_{ij}\}, \min_{\mu^-}\{f_{ij}\}\}.$$

5. 擦除图上所有标号，重复1-4步，直到图中找不到任何增广链，计算结束.

例 7.6.1 用标号算法求下图中$s \to t$的最大流量，并找出最小割.



解: Step 1:给s标号(∞).

Step 2. 检查与s点相邻的未标号的点, 由$f_{s1} < c_{s1}$, 故对v_1标号$\varepsilon(1) = \min\{\infty, c_{s1} - f_{s1}\} = 1$.

Step 3. 检查与v_1点相邻的未标号的点, 由$f_{13} < c_{13}$, 故对v_3标号$\varepsilon(3) = \min\{1, c_{13} - f_{13}\} = \min\{1, 6\} = 1$.

Step 4. 检查与v_3点相邻的未标号的点, 由于$f_{3t} < c_{3t}$, 故对v_t标号$\varepsilon(t) = \min\{1, c_{3t} - f_{3t}\} = \min\{1, 1\} = 1$. 此时找到一条增广链$s \to v_1 \to v_3 \to t$.

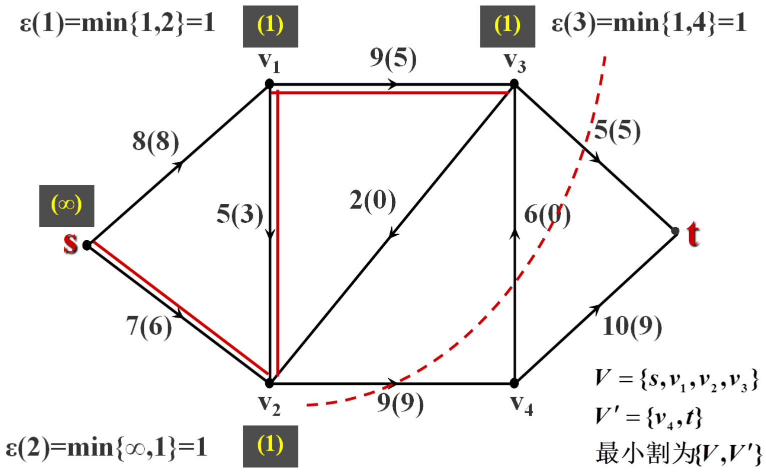
Step 5. 修改增广链上边的流量(全部是前向弧, 都+1), 非增广链上的流量不变, 得到新的可行流.

Step 6. 擦除所有标号，重复上述标号过程，寻找另外的增广链. (步骤同上)

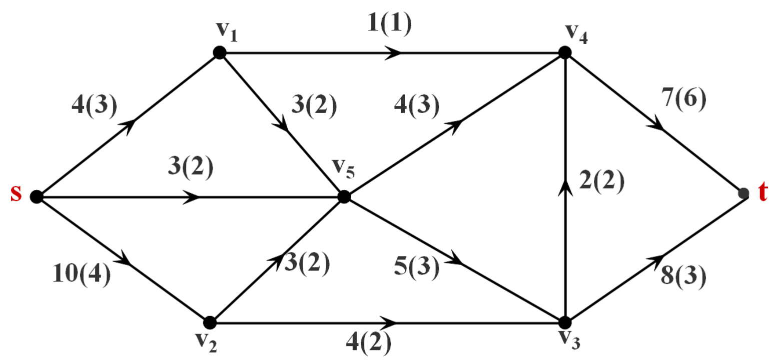
Step 7. 修改增广链上的流量(前向弧+1, 后向弧−1), 非增广链上的流量不变，得到新的可行流.

Step 8. 擦除所有标号，重复上述标号过程，寻找另外的增广链.

在求解过程中会终止, 从而可得最小割为$\{V, V'\}$, 其中$V = \{s, v_1, v_2, v_3\}, V' = \{v_4, t\}$.



例 7.6.2 求下图中$s \to t$的最大流量，并找出最小割.



解: 略, ppt的124-137页.

§ 7.7 最小费用最大流问题

给网络$D=(V,A,C)$, 弧$(v_i,v_j)\in A$上, 容量c_{ij}, 单位流量的费用$b(v_i,v_j)\geq 0$(简记为b_{ij}).

最小费用最大流问题: 求一个最大流f, 使流的总输送费用

$$b(f)=\sum_{(v_i,v_j)\in A} b_{ij}f_{ij}$$

取最小值.

要寻求最小费用的最大流，首先考查一下, 当沿着一条关于可行流f的增广链μ, 以$\theta=1$调整f, 得到新的可行流f'时(显然$v(f')=v(f)+1$), $b(f')$比$b(f)$增加多少? 不难看出

$$b(f')-b(f)=\sum_{\mu^+} b_{ij}(f'_{ij}-f_{ij})-\sum_{\mu^-} b_{ij}(f'_{ij}-f_{ij})=\sum_{\mu^+} b_{ij}-\sum_{\mu^-} b_{ij}.$$

把它称为这条增广链μ的**费用**.

可以证明, 若f是流量为$v(f)$的所有可行流中费用最小者, 而μ是关于f的所有增广链中费用最小的增广链, 那么沿μ去调整f，得到的可行流f'就是流量为$v(f')$的所有可行流中的最小费用流. 这样，当f'是最大流时，它也就是所要求的最小费用最大流了.

注意到，由于$b_{ij}\geq 0$, 所以$f=0$必是流量为0的最小费用流. 这样，总可以从$f=0$开始. 一般地，设已知f是流量$v(f)$的最小费用流, 余下的问题就是如何去寻求关于f的最小费用增广链. 为此，可构造一个赋权有向图$W(f)$, 它的顶点是原网络D的顶点, 而把D中的每一条弧(v_i,v_j)变成两个相反方向的弧(v_i,v_j)和(v_j,v_i). 定义$W(f)$中弧的权w_{ij}为

$$w_{ij}=\begin{cases} b_{ij}, f_{ij}<c_{ij},\\ +\infty, f_{ij}=c_{ij}.\end{cases}$$

$$w_{ij}=\begin{cases} -b_{ij}, f_{ij}>0,\\ +\infty, f_{ij}=0.\end{cases}$$

(长为$+\infty$的弧可以从$W(f)$中略去)

于是在网络D中寻求关于f的最小费用增广链就等价于在赋权有向图$W(f)$中, 寻求从v_s到v_t的最短路. 因此有如下算法:

- 开始取$f^{(0)}=0$.
- 一般情况下: 若在第$k-1$步得到最小费用流$f(k-1)$, 则构造赋权有向图$W(f(k-1))$，在$W(f(k-1))$中，寻求从v_s到v_t的最短路.
- 若不存在最短路(即最短路权是$+\infty$), 则$f(k-1)$就是最小费用最大流.
- 若存在最短路, 则在原网络D中得到相应的增广链μ, 在增广链μ上对$f(k-1)$进行调整. 调整量为

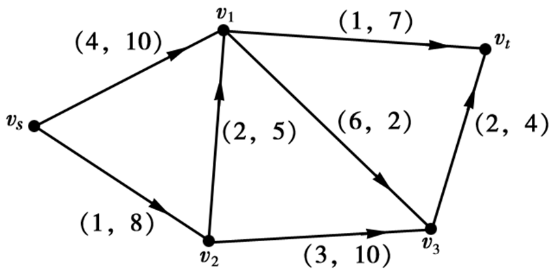
$$\theta=\min\left[\min_{\mu^+}(c_{ij}-f_{ij}^{(k-1)}),\min_{\mu^-}(f_{ij}^{(k-1)})\right]$$

令

$$f_{ij}^{(k)}=\begin{cases} f_{ij}^{(k-1)}+\theta, & (v_i,v_j)\in\mu^+,\\ f_{ij}^{(k-1)}-\theta, & (v_i,v_j)\in\mu^-,\\ f_{ij}^{(k-1)}, & (v_i,v_j)\notin\mu,\end{cases}$$

得到新的可行流$f(k)$, 再对$f(k)$重复上述步骤.

例 7.7.1 求如下图所示的最小费用最大流, 弧旁边数字为(b_{ij}, c_{ij}).



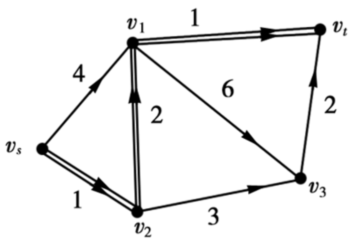
解: (1) 取$f(0) = 0$为初始可行流.

(2) 构造赋权有向图$W(f(0))$, 并求出从v_s到v_t的最短路(v_s, v_2, v_1, v_t), 如下图(a)(双箭头即为最短路).

(3) 在原网络D中，与这条最短路相应的增广链为$\mu = (v_s, v_2, v_1, v_t)$.

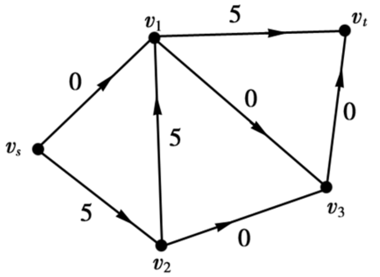
(4) 在μ上进行调整，$\theta = 5$，得$f(1)$(图(b)). 按照上述算法依次得$f(1), f(2), f(3), f(4)$，流量依次为5,7,10,11; 构造相应的赋权有向图为$W(f(1)), W(f(2)), W(f(3)), W(f(4))$. 如图所示.

(5)注意到$W(f(4))$中已不存在从v_s到v_t的最短路，所以$f(4)$为最小费用最大流.



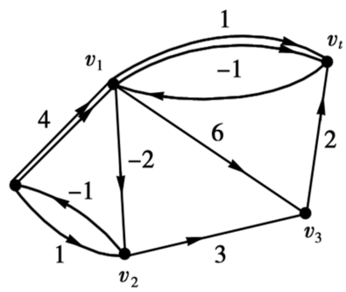
(a)

$W\ (f^{(0)})$



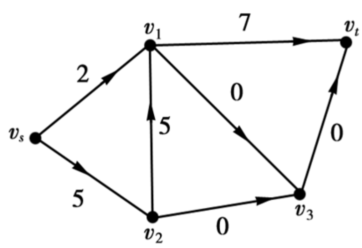
(b)

$f^{(1)}$，$v(f^{(1)})=5$



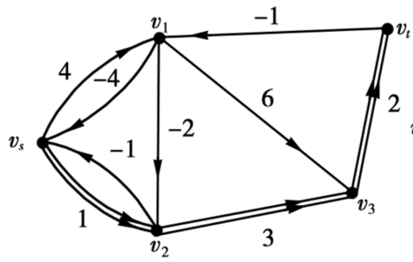
(c)

$W\ (f^{(1)})$



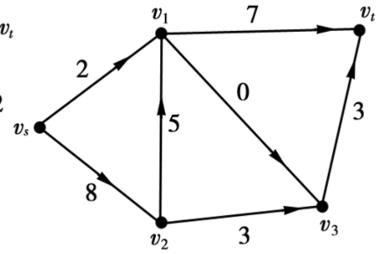
(d)

$f^{(2)}$，$v(f^{(2)})=7$



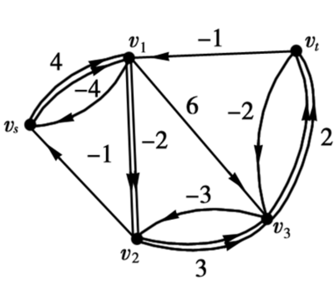
(e)

$W\ (f^{(2)})$



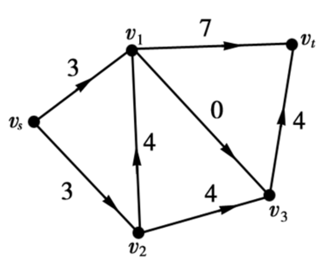
(f)

$f^{(3)}$，$v(f^{(3)})=10$



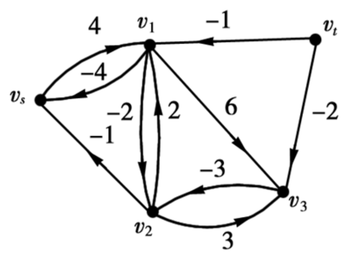
(g)

$W\ (f^{(3)})$



(h)

$f^{(4)}$，$v(f^{(4)})=11$



(i)

$W\ (f^{(4)})$

§ 7.8 (*)中国邮递员问题

7.8.1 一笔画问题

引入定义:

- 给定一个连通多重图G，若存在一条链, 过且仅过每边一次, 则称这条链为**Euler链**.
- 若存在一个简单圈，过且仅过每边一次，称这个圈为**Euler圈**. 一个图若有Euler圈，则称为**Euler图**.
- **割边:** 设e是连通图G的一个边, 如果从G中丢去e，图变成不连通，则称e是图G的割边.

注: 树中的每一个边都是割边.

显然，一个图若能一笔画出，这个图必是欧拉图(出发点与终止点重合)或含有欧拉链(出发点与终止点不同).

定理 7.8.1 (Euler) *设G是个非平凡的连通图, 则: G为Euler图$\Leftrightarrow$ G的每个顶点都是偶次点.*

证明: "$\Rightarrow$" 设w为G中一条闭Euler迹. 由于G中每个点至少关联一条边, w经过G每个顶点, 如果顶点v在w中出现k次, 则$d_G(v) = 2k$.

"$\Leftarrow$" 设G各顶点均为偶次点, G不可能是树. (因为树有至少2个1次点) 而G连通, 则G必含圈. 设C_1为G的一个圈, 则$G - E(C_1)$中各个顶点仍为偶次点(全部圈上的点都少2度, 奇偶性不变). 若$G - E(C_1)$还有边, 则$G - E(C_1)$各边连通分支都不是树, 则它还有圈C_2. $G - E(C_1) - E(C_2)$中各顶点仍为偶次点. 如此下去可知G是若干个边不相交的圈的并(对圈的个数归纳), 从而有闭Euler迹. □

推论 7.8.2 *连通图G有开Euler链$\Leftrightarrow$ G中恰有两个奇次点.*

证明: 设奇点为u, v, 连接uv, 则可以得到一条新边(如果u, v本来就有边, 则这条边是多重边), 从而可以得到多重图G', 它没有奇点. 由前面定理, G'是Euler图, 去掉uv边就是Euler链. □

注: 根据前面两个定理, 可以识别一个图是否有一笔画方法. 下面的问题是：如何把它一笔画出来.

Fleury算法: 设$G = (V, E)$是**无奇点**的连通图, 把

$$\mu_k = (v_{i_0}, e_{i_1}, v_{i_1}, e_{i_2}, v_{i_2}, \cdots, v_{i_{k-1}}, e_{i_k}, v_{i_k})$$

记为在第k步得到的简单链. 记$E_k = \{e_{i_1}, \cdots, e_{i_k}\}$, $\overline{E}_k = E \setminus E_k$, $G_k = (V, \overline{E}_k)$.

Step 1:开始$k = 0$时, 令$\mu_0 = (v_{i_0})$, 其中v_{i_0}是图G中任意一点, $E_0 = \varnothing, G_0 = G$.

Step 2:在G_k中选择一条关联边$e_{i_{k+1}} = [v_{i_k}, v_{i_{k+1}}]$, 使得$e_{i_{k+1}}$不是$G_k$的割边(除非$e_{i_{k+1}}$是$G_k$的悬挂点, 此时在$G_k$中的悬挂边选为$e_{i_{k+1}}$). 令

$$\mu_{k+1} = (v_{i_0}, e_{i_1}, v_{i_1}, e_{i_2}, v_{i_2}, \cdots, v_{i_{k-1}}, e_{i_k}, v_{i_k}, e_{i_{k+1}}, v_{i_{k+1}})$$

重复这个过程，直到选不到所要求的边为止.

注: 可以证明：这时的简单链必定终止于v_{i_0}, 并且就是我们要求的图G的欧拉圈.

注: 如果$G = (V, E)$是恰有两个奇点的连通图, 只需要取v_{i_0}是图G的一个奇点就可以了. 最终得到的简单链就是图中联结两个奇点的欧拉链.

7.8.2 奇偶点图上作业法

中国邮递员问题: 一个邮递员送信, 要走完他负责投递的全部街道, 完成任务后回到邮局, 应该按照怎样的路线走, 所走的路程最短?

若把它抽象为图的语言，就是：给定一个连通图，在每边e_i上赋予一个非负的权$w(e_i)$, 要求一个圈(未必是简单的), 过每边至少一次，并使圈的总权最小. 这个问题是我国学者管梅谷在1962年首先提出的, 因此在国际上通称为中国邮递员问题.

如果在某邮递员负责的范围内，街道图中没有奇点, 那么他就可以从邮局出发，走过每条街道一次，且仅一次，最后回到邮局, 所走的路程也就是最短路程. 对于有奇点的街道图, 就必须在某些街道上重复走一次或多次.

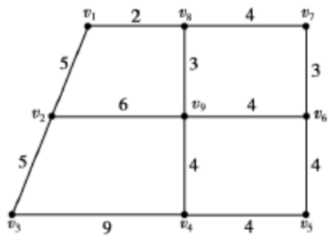
如果在某条路线中, 边$[v_i, v_j]$上重复走了几次, 我们在图中v_i, v_j之间增加几条边, 令每条边的权和原来的权相等, 并把新增加的边称为**重复边**. 于是这条路线就是相应的新图中的欧拉圈.

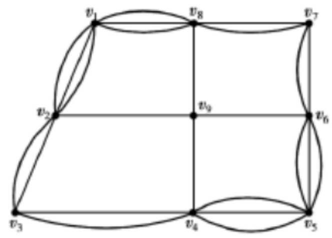
显然, 两条邮递路线的总权的差必等于相应的重复边总权的差. 因而，中国邮递员问题可以叙述为: **在一个有奇点的图中，要求增加一些重复边，使新图不含奇点，并且重复边的总权为最小.** 我们把使新图不含奇点而增加的重复边, 简称为**可行(重复边)方案**, 使总权最小的可行方案称为**最优方案**. 现在的问题是第一个可行方案如何确定, 在确定一个可行方案后, 怎么判断这个方案是否为最优方案? 若不是最优方案，如何调整这个方案?

下面所说的求最优邮递路线的方法，通常称为**奇偶点图上作业法**.

Step 1: 确定第一个可行方案: 在前面我们已经证明, 在任何一个图中，奇点个数必为偶数. 所以如果图中有奇点，就可以把它们配成对. 又因为图是连通的, 故每一对奇点之间必有一条链, 我们把这条链的所有边作为重复边加到图中去, 可见新图中必无奇点, 这就给出了第一个可行方案.

例 7.8.1 在下图中的街道图, 有四个奇点v_2, v_4, v_6, v_8.





把它们分成两对: v_2, v_4为一对、v_6, v_8为一对. 在左图中, 连接v_2, v_4的链有好几条, 任取一条, 例如$(v_2, v_1, v_8, v_7, v_6, v_5, v_4)$, 把边$(v_2, v_1), (v_1, v_8), (v_8, v_7), (v_7, v_6)$,$(v_6, v_5), (v_5, v_4)$作为重复边加到图中, 同样取$v_6, v_8$的一条链$(v_8, v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6)$, 把边$(v_8, v_1), (v_1, v_2), (v_2, v_3), (v_3, v_4), (v_4, v_5), (v_5, v_6)$作为重复边加到图中, 得到右图. 对应于这个方法的总权是51. (所有数相加)

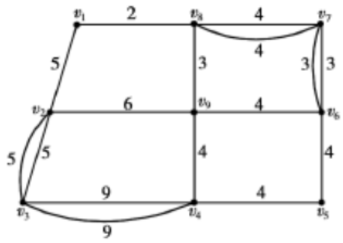
Step 2: 调整可行方案，使重复边总权下降. 首先，从右图中可以看出，在边$[v_1, v_2]$上有两条重复边, 如果把它们都从图中去掉，图仍然无奇点. 即剩下的重复边还是一个可行方案, 而总长度却有所下降. 同样道理，$[v_1, v_8], [v_4, v_5], [v_5, v_6]$上的重复边也是如此. 一般情况下，若边$[v_i, v_j]$上有两条或两条以上的重复边时，从中去掉偶数条，就能得到一个总权较小的可行方案.

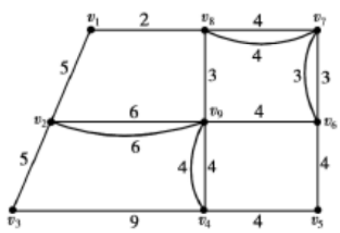
- 在最优方案中，**图的每一边上最多有一条重复边**.

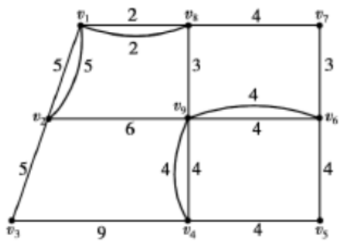
依此，可以调整为下左图，重复边总权下降为21. 其次，我们还可以看到，如果把图中某个圈上的重复边去掉, 而给原来没有重复边的边加上重复边, 图中仍没有奇点. 因而如果在某个圈上重复边的总权大于这个圈的总权的一半, 像上面所说的那样作一次调整，将会得到一个总权下降的可行方案.

- 在最优方案中，图中每个圈上的重复边的总权不大于该圈总权的一半.

如在下左图中，圈$(v_2, v_3, v_4, v_9, v_2)$的总权为24，但圈上重复边总权为14，大于该圈总权的一半. 因此可以作一次调整，以$(v_2, v_9), (v_9, v_4)$上的重复边代替$(v_2, v_3), (v_3, v_4)$上的重复边，使重复边总权下降为17，如下中图.







Step 3: 判断最优方案的标准. 从上面的分析中可知，一个最优方案一定是满足上面两个要点的可行方案, 反之，可以证明一个可行方案若满足上面两个要点，则这个可行方案一定是最优方案. 根据这样的判断标准，对给定的可行方案，检查它是否满足上面两个要点. 若满足，所得方案即为最优方案；若不满足，则对方案进行调整, 直至上面两个要点均得到满足时为止.

检查上中图的圈$(v_1, v_2, v_9, v_6, v_7, v_8, v_1)$, 它的重复边总权为13, 而圈的总权为24, 不满足, 经调整得上右图. 重复边总权下降为15. 此时上面两个要点都满足, 于是得到最优方案. □

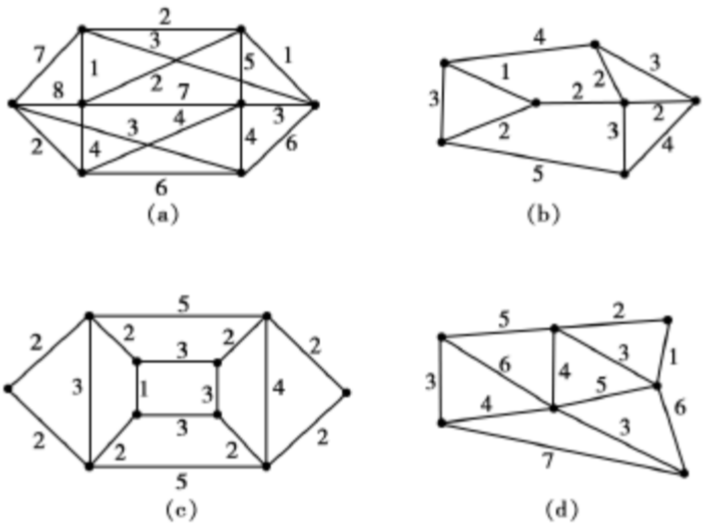
注： 方法的主要困难在于检查第(2)个要点.

注： 中国邮递员问题的改进算法是Edmonds给出的。其算法涉及图的对集(matching)问题.

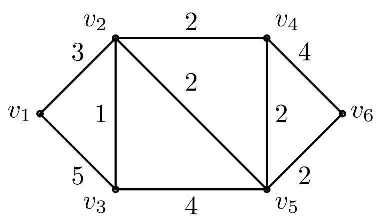
网络优化是一类组合优化问题. 网络优化中，一个有名的问题是所谓旅行推销员问题(Traveling Salesman Problem) (也称为货郎担问题)：一个推销员要到若干个城市推销产品，然后回到出发点. 已知每两个城市之间的距离，他应如何选择其旅行路线，使每个城市经过一次且仅仅一次, 并且总的行程最短?表面上看，这个问题与中国邮递员问题很相似, 但实际上，这是一个非常困难的问题，至今没有一个求最优旅行路线的有效方法.

习题 11 (补充练习) 出自清华《运筹学》第三版.

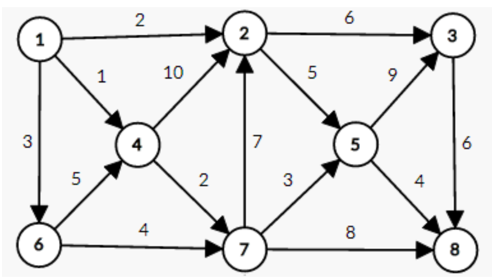
1. **(10.3)**用破圈法和避圈法求下图中各个图的最小树.



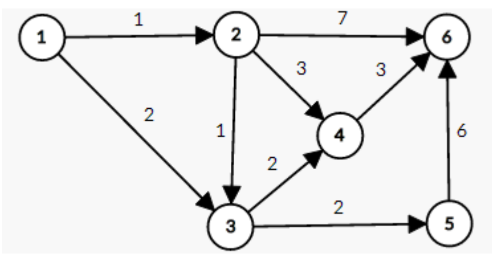
2. 求下面无向图从v_1到v_6的最短距离.



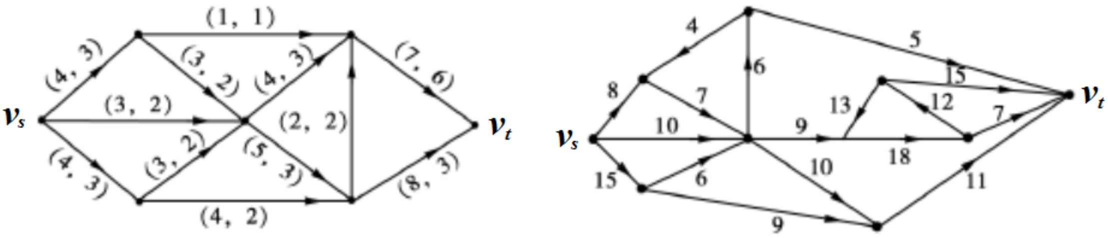
3. **(2018期末)**求下面有向图从v_1到v_8的最短距离.



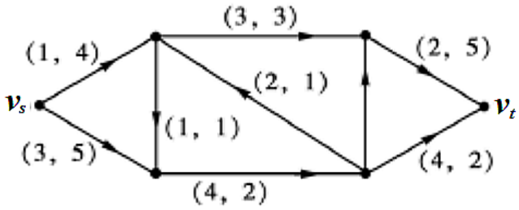
4. 求下图中从v_1到另外任意一点的最短路径.



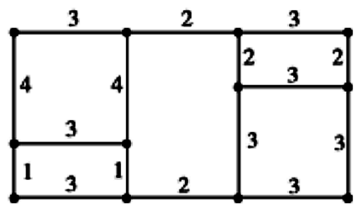
5. 完成例7.5.2的最短路问题.
6. 完成例7.6.2的最大流问题.
7. **(10.12),(10.13)**求解下面两个最大流问题. 第一个图的弧旁数字是(c_{ij}, f_{ij}).



8. **(10.15)**求解如下图所示的网络的最小费用最大流, 弧旁数字是(b_{ij}, c_{ij}).



9. **(10.16)**求解如下图所示的中国邮递员问题.



10. **(10.17)**设$G=(V,E)$是一个简单图, $\delta(G)=\min\limits_{v\in V}\{d(v)\}$ 称为G**的最小次**, 证明:
    (1) 若$\delta(G)\geq 2$, 则G必有圈.
    (2) 若$\delta(G)\geq 2$, 则G必有包含至少$\delta(G)+1$条边的圈.
11. **(10.18)**设G是不含奇点的连通图, 证明: G不含割边.

第8章　博弈论

博弈论(Game theory)又称对策论, 是自古以来的政治家和军事家都很注意研究的问题. 20世纪40年代形成并发展起来的. 1944年, von Neumann与Morgenstern的《博弈论与经济行为》一书出版, 标志着现代系统博弈理论的初步形成. 20世纪50年代, Nash建立了非合作博弈的“Nash均衡”理论, 标志着博弈的新时代开始, 是Nash在经济博弈论领域划时代的贡献. 1994年, Nash获得了诺贝尔经济学家, 他提出的Nash均衡概念在非合作博弈理论中有核心作用. 由于Nash均衡的提出和不断完善, 为博弈论广泛应用于经济学、管理学、社会学、政治学、军事科学等领域奠定了坚实的理论基础.

博弈论是研究具有斗争或竞争性质现象的数学理论和方法. 一般认为, 它是现代数学的一个新分支, 是运筹学的一个重要学科. 对策论发展的历史并不长, 但由于它研究的问题与政治、经济、军事活动乃至一般的日常生活等有着密切联系, 并且处理问题的方法具有明显特色, 所以日益引起广泛注意.

在日常生活中, 经常会看到一些相互之间具有斗争或竞争性质的行为, 如下棋、打牌、体育比赛等。还比如战争活动中的双方, 都力图选取对自己最有利的策略, 千方百计去战胜对手. 在政治方面, 国际间的谈判, 各种政治力量之间的斗争, 各国际集团之间的斗争等无一不具有斗争的性质。在经济活动中, 各国之间、各公司企业之间的经济谈判, 企业之间为争夺市场而进行的竞争等, 举不胜举.

齐王赛马: 战国时期, 有一天齐王提出要与田忌赛马, 双方约定从各自的上、中、下三个等级的马中各选一匹参赛, 每匹马均只能参赛一次, 每一次比赛双方各出一匹马, 负者要付给胜者千金. 已经知道, 在同等级的马中, 田忌的马不如齐王的马, 而如果田忌的马比齐王的马高一等级, 则田忌的马可取胜. 当时, 田忌手下的一个谋士孙膑给他出了个主意: 每次比赛时先让齐王牵出他要参赛的马, 然后来用下马对齐王的上马, 用中马对齐王的下马, 用上马对齐王的中马. 比赛结果, 田忌二胜一负, 夺得千金。由此看来, 两个人各采取什么样的出马次序对胜负是至关重要的.

§8.1　基本定义

对策行为的三个基本要素:

- **局中人**: 在一个对策行为(或一局对策)中, 有权决定自己行动方案的对策参加者, 称为局中人. 一般要求一个对策中至少要有两个局中人. 并且, 局中人都是**贪婪且理智**的. 如在齐王赛马”的例子中, 局中人是齐王和田忌.
- **策略集**: 一局对策中, 可供局中人选择的一个实际可行的完整的行动方案称为一个策略. 参加对策的每一局中人,都有自己的策略集. 一般, 每一局中人的策略集中至少应包括两个策略.
- **赢得函数(支付函数)**: 在一局对策中, 各局中人选定的策略形成的策略组叫一个**局势**, 即若s_i是第i个局中人的一个策略, 则n个局中人的策略组

  $$s = (s_1, s_2, \cdots, s_n)$$

  就是一个局势. 全体局势的集合S可用各局中人策略集的Dicartes积表示, 即

  $$S = S_1 \times S_2 \times \cdots \times S_n.$$

  当一个局势出现后, 对策的结果也就定了. 也就是说, 对任一局势$s \in S$, 局中人i可以得到一个赢得值$H_i(s)$显然, $H_i(s)$是局势s的函数, 称为第i个局中人的赢得函数.

在“齐王赛马”的例子中, 如果用(上, 中, 下)表示以上马、中马、下马依次参赛这样一个次序, 这就是一个完整的行动方案, 即为一个策略. 可见, 局中人齐王和田忌各自都有6个策略: (上, 中, 下)、(上, 下, 中)、(中, 上, 下)、(中, 下, 上)、(下, 中, 上)、(下, 上, 中). 局中人集合为$I = \{1, 2\}$, 齐王和田忌的策略集可分别用

$$S_1 = \{\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_6\}, S_2 = \{\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_6\}$$

表示. 这样, 齐王的任意策略α_i和田忌的任意策略β_j形成了一个局势s_{ij}. 如果$\alpha_1 =$(上, 中, 下), $\beta_1 =$(上, 中, 下), 则在局势s_{11}下齐王的赢得值为$H_1(s_{11}) = 3$, 田忌的赢得值为$H_2(s_{11}) = -3$.

§ 8.2 矩阵对策

在众多的对策模型中, 占有重要地位是**二人有限零和对策**, 又称**矩阵对策**. 这类对策是到目前为止在理论研究和求解方法方面都比较完善的一个对策分支. 矩阵对策可以说是一类最简单的对策模型, 其研究思想和方法十分具有代表性, 体现了对策论的一-般思想和方法, 且矩阵对策的基本结果也是研究其他对策模型的基础.

在矩阵对策中, 一般用I,II分别表示两个局中人, 并设局中人I有m个纯策略$\{\alpha_1,\cdots,\alpha_m\}$, 局中人II有$n$个纯策略$\{\beta_1,\cdots,\beta_n\}$. 则局中人I,II的纯策略集分别为

$$S_1=\{\alpha_1,\cdots,\alpha_m\},S_2=\{\beta_1,\cdots,\beta_n\}.$$

当局中人I选定纯策略α_i, 局中人II选定纯策略β_j后, 就形成了一个局势, 对任一局势(α_i,β_j), 记局中人I的赢得值为a_{ij}, 称

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn}\end{pmatrix}$$

为局中人I的**赢得矩阵**(或局中人II的**支付矩阵**). 由于假定对策是零和的, 故局中人II的赢得矩阵为$-A$.

例 8.2.1 *在田忌赛马中齐王的赢得矩阵是*

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1\\ 1 & 3 & 1 & 1 & -1 & 1\\ 1 & -1 & 3 & 1 & 1 & 1\\ -1 & 1 & 1 & 3 & 1 & 1\\ 1 & 1 & -1 & 1 & 3 & 1\\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 3\end{pmatrix}$$

从左到右的策略分别是(上, 中, 下)、(上, 下, 中)、(中, 上, 下)、(中, 下, 上)、(下, 中, 上)、(下, 上, 中).

当局中人I, II的纯策略集, 以及局中人I的赢得矩阵A确定后, 一个矩阵对策也就给定了. 通常把一个**矩阵对策**记为

$$G=\{I,II;S_1,S_2;A\}\qquad \text{或}\qquad G=\{S_1,S_2;A\}.$$

8.2.1 最优纯策略

定义 8.2.1 (最优纯策略) *设有矩阵对策$G=\{S_1,S_2,A\}$, 其中*

$$S_1=\{\alpha_1,\cdots,\alpha_m\},S_2=\{\beta_1,\cdots,\beta_n\},A=(a_{ij})_{m\times n}.$$

若存在$i^*\in\{1,2,\cdots,m\},j^*\in\{1,2,\cdots,n\}$, 使得

$$a_{i^*j^*}=\max_i\min_j a_{ij}=\min_j\max_i a_{ij}$$

*成立, 则称$(\alpha_{i^*},\beta_{j^*})$是矩阵对策$G$**在纯策略意义下的解**. (或**平衡局势**). α_{i^*},β_{j^*}分别叫局中人I, II的**最优纯策略**. 记$V_G=a_{i^*j^*}$, 并称其为**矩阵对策的值**.*

注: 在矩阵对策中, 两个局中人都采取最优纯策略（如果存在）才是理智的行动.

如何求解两个局中人的最优纯策略？理智的局中人应该采取理智的行为. 博弈的时候, 考虑到对方必然会设法使自己的所得最少这一点, 就应该从各自可能出现的最不利的情形中选择一种最有利的情形作为决策的依据, 这就是所谓的**“理智行为”**, 也是对策双方实际上都能接受的一种稳妥的方法.

- 局中人I的策略: $i^*=\arg\max_i\min_j a_{ij}$.
- 局中人II的策略: $j^*=\arg\max_j\min_i(-a_{ij})=\arg\min_j\max_i a_{ij}$.

例 8.2.2 矩阵对策$G=\{S_1,S_2,A\}$, 其中$S_1=\{\alpha_1,\cdots,\alpha_4\}$, $S_2=\{\beta_1,\beta_2,\beta_3\}$,

$$\begin{pmatrix} -6 & 1 & -8 \\ 3 & 2 & 4 \\ 9 & -1 & -10 \\ -3 & 0 & 6 \end{pmatrix}$$

在这个例子中, 局中人的最优纯策略是(α_2,β_2), 因为$a_{22}=\max\limits_i\min\limits_j a_{ij}=\min\limits_j\max\limits_i a_{ij}$. 元素$a_{22}$是所在行的最小元素, 所在列的最大元素.

定理 8.2.1 (纯策略意义下有解的条件) 矩阵对策$G=\{S_1,S_2;A\}$在纯策略意义下有解, 当且仅当存在纯局势$(\alpha_{i^*},\beta_{j^*})$, 使得

$$a_{ij^*}\le a_{i^*j^*}\le a_{i^*j},\forall i=1,2,\cdots,m,j=1,2,\cdots,n.$$

证明: "$\Leftarrow$": 由于$\forall i,j$都有$a_{ij^*}\le a_{i^*j^*}\le a_{i^*j}$, 则
$$\max_i a_{ij}^*\le a_{i^*j^*}\le\min_j a_{i^*j}.$$
由于$\min\limits_j\max\limits_i a_{ij}\le\max\limits_i a_{ij^*}$且$\min\limits_j a_{i^*j}\le\max\limits_i\min\limits_j a_{ij}$, 则
$$\min_j\max_i a_{ij}^*\le a_{i^*j^*}\le\max_i\min_j a_{i^*j}.$$
另外, 下式永远成立
$$\max_i\min_j a_{i^*j}\le\min_j\max_i a_{ij}^*,$$
综上有
$$\min_j\max_i a_{ij}^*=a_{i^*j^*}=\max_i\min_j a_{i^*j}.$$
由定义证完.

"$\Leftarrow$": 根据定义, 存在$i^*\in\{1,2,\cdots,m\},j^*\in\{1,2,\cdots,n\}$使得
$$\min_j\max_i a_{ij}^*=a_{i^*j^*}=\max_i\min_j a_{i^*j}.$$
因此有
$$a_{i^*j^*}=\min_j a_{i^*j}=\max_i a_{ij^*},$$
对一切$i\in\{1,2,\cdots,m\},j\in\{1,2,\cdots,n\}$, 都有
$$a_{ij^*}\le\max_i a_{ij^*}=\max_j a_{i^*j}\le a_{i^*j}.$$
证明完毕. □

定义 8.2.2 (鞍点) 设$f(x,y)$是一个定义在$x\in A,y\in B$上的实值函数, 若存在$x^*\in A,y^*\in B$, 使得对一切$x\in A,y\in B$都有

$$f(x,y^*)\le f(x^*,y^*)\le f(x^*,y),$$

则称(x^*,y^*)是函数f的鞍点.

注: 矩阵对策在纯策略意义下有解的充分必要条件是$a_{i^*j^*}$是矩阵A的**鞍点** (也称为**对策的鞍点**).

注: 纯策略意义下达到最优解时的直观解释：设$a_{i^*j^*}$是矩阵A的鞍点, 当局中人I选择策略α_{i^*}时, 局中人II为了减少损失, 只会选择策略β_{j^*}. 当局中人II选择策略β_{j^*}时, 局中人I为了增加所得, 也之后选择策略α_{i^*}.

例 8.2.3 设矩阵对策$G=\{S_1,S_2;A\}$, 其中$S_1=\{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_4\}$, $S_2=\{\beta_1,\beta_2,\beta_3,\beta_4\}$, 赢得矩阵为
$$A=\begin{pmatrix} 6 & 5 & 6 & 5 \\ 1 & 4 & 2 & -1 \\ 8 & 5 & 7 & 5 \\ 0 & 2 & 6 & 2 \end{pmatrix}$$

解: 直接在A提供的赢得表上计算, 有

$$\begin{array}{c} \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \\ \max \end{array} \begin{array}{c} \left(\begin{array}{cccc} \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_4 \\ 6 & 5 & 6 & 5 \\ 1 & 4 & 2 & -1 \\ 8 & 5 & 7 & 5 \\ 0 & 2 & 6 & 2 \end{array}\right) \\ \\ \begin{array}{cccc} 8 & 5^* & 7 & 5^* \end{array} \end{array} \begin{array}{c} \min \\ 5^* \\ -1 \\ 5^* \\ 0 \\ \\ \\ \end{array}$$

于是

$$\min_j \max_i a_{ij}^* = \max_i \min_j a_{i^*j} = a_{i^*j^*} = 5,$$

其中$i^* = 1, 3, j^* = 2, 4$. 故$(\alpha_1, \beta_2), (\alpha_1, \beta_4), (\alpha_3, \beta_2), (\alpha_3, \beta_4)$都是对策的解, 且$V_G = 5$.

注: 一般矩阵对策的解都是不唯一的. 对策的解有如下性质.

定理 8.2.2 *若$(\alpha_{i_1}, \beta_{j_1}), (\alpha_{i_2}, \beta_{j_2})$都是矩阵对策$G$的解, 则:*

(1)无差别性: $a_{i_1j_1} = a_{i_2j_2}$.

(2)可交换性: $(\alpha_{i_1}, \beta_{j_2}), (\alpha_{i_2}, \beta_{j_1})$也是解.

这两条性质表明, 矩阵对策的值是唯一的, 即当局中人I采用构成解的最优纯策略时, 能保证他的赢得V_G不依赖于对方的纯策略.

8.2.2 矩阵对策的混合策略

在前面已经指出, 局中人存在纯策略意义下的最优解的充要条件是

$$\max_j \min_i a_{ij} = \min_i \max_j a_{ij}.$$

当$\max\limits_j \min\limits_i a_{ij} < \min\limits_i \max\limits_j a_{ij}$, 不存在纯策略意义下的最优解, 此时局中人如何进行博弈?

设有矩阵对策$G = \{S_1, S_2; A\}$, 其中$S_1 = \{\alpha_1, \cdots, \alpha_m\}, S_2 = \{\beta_1, \cdots, \beta_n\}, A = (a_{ij})_{m\times n}$, 记

$$S_1^* = \left\{x \in \mathbb{R}^m : x \geq 0, \sum_{i=1}^m x_i = 1\right\}$$

$$S_2^* = \left\{y \in \mathbb{R}^m : y \geq 0, \sum_{i=1}^m y_j = 1\right\}$$

则S_1^*, S_2^*分别称为局中人I和II的**混合策略集**(或策略集); $x \in S_1^*$与$y \in S_2^*$分别称为局中人I和II的**混合策略**(或策略). 称(x, y)为一个**混合局势**(或局势), 局中人I的赢得函数是

$$E(x, y) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i y_j = x^T A y.$$

得到的新对策记为$G^* = \{S_1^*, S_2^*, E\}$, 叫对策$G$的**混合扩充**.

注: (1)纯策略是混合策略的特例, 例如局中人I的纯策略α_k可理解为混合策略$x = e_k$.

(2)混合策略x可理解为当两个局中人多次重复进行对策G时, 局中人I分别采取纯策略$\alpha_1, \cdots, \alpha_m$的频率.

(3)若只进行一次对策, 混合策略x可理解为局中人I对各纯策略的偏爱程度.

当局中人I采取某混合策略x时, 在最不利的情况下他只能赢得

$$\min_{y\in S_2^*} E(x, y).$$

因此, 局中人I会采取混合策略使得在最不利情况下的赢得最大化, 即

$$\max_{x\in S_1^*} \min_{y\in S_2^*} E(x, y).$$

同理, 局中人II考虑如下问题

$$\min_{y\in S_2^*} \max_{x\in S_1^*} E(x, y).$$

上面极大极小、极小极大问题均有意义, 因为E是关于(x,y)连续, 且S_1^*, S_2^*为有界闭集, 下式恒成立:

$$\max_{x\in S_1^*}\min_{y\in S_2^*} E(x,y) \le \min_{y\in S_2^*}\max_{x\in S_1^*} E(x,y).$$

定义 8.2.3 *设$G^*=\{S_1^*,S_2^*,E\}$是矩阵对策$G=\{S_1,S_2,A\}$的混合扩充. 若*

$$\max_{x\in S_1^*}\min_{y\in S_2^*} E(x,y) = \min_{y\in S_2^*}\max_{x\in S_1^*} E(x,y),$$

*则称其值, 记为V_G, 为对策G的值. 称使上面等式的混合局势(x^*,y^*)为矩阵对策G在**混合策略意义下的解** (或简称**解**), x^*与y^*分别称为局中人I和II的**最优混合策略** (或简称**最优策略**).*

注: 一般, 对$G=\{S_1,S_2,A\}$及其混合扩充$G^*=\{S_1^*,S_2^*,E\}$不加区别, 通常都用$G=\{S_1,S_2,A\}$表示. 当G在纯策略意义下无解时, 自动认为讨论的是在混合策略意义下的解. 相应的局中人I的赢得函数是$E(x,y)$.

当G在纯策略意义下有解时, 上述V_G定义与前面定义一致. 设G在混合策略意义下的解是(x^*,y^*), 则$V_G = E(x^*,y^*)$.

定理 8.2.3 *矩阵对策$G=\{S_1,S_2;A\}$在混合策略意义下有解的充分必要条件为: 存在$x^*\in S_1^*, y^*\in S_2^*$使得$(x^*,y^*)$为$E(x,y)$的一个鞍点, 即对一切$x\in S_1^*, y\in S_2^*$都有*

$$E(x,y^*) \le E(x^*,y^*) \le E(x^*,y).$$

证明: 与纯策略情形完全一致, 只需$E(x,y)\leftrightarrow a_{ij}, x\leftrightarrow i, y\leftrightarrow h$. □

例 8.2.4 *求矩阵对策$G=\{S_1,S_2;A\}$的解, 其中局中人I的赢得矩阵A为*

$$A=\begin{pmatrix}3 & 6\\ 5 & 4\end{pmatrix}$$

局中人应该采取何种决策进行博弈?

解: 这个矩阵在纯策略意义下无解. 设$x=(x_1,x_2)^T, y=(y_1,y_2)^T$为局中人I, II的混合策略. 混合策略集为$\{(u,v)^T\in\mathbb{R}^2: u,v\ge 0, u+v=1\}$. 局中人I的赢得函数为

$$E(x,y)=x^TAy=-4\left(x_1-\frac{1}{4}\right)\left(y_1-\frac{1}{2}\right)+\frac{9}{2}.$$

易见$x^*=\left(\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right)^T, y^*=\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)^T$为$E(x,y)$的鞍点, 为两个局中人的最优混合策略, $V_G=\frac{9}{2}$. □

注: 一般矩阵对策在纯策略意义下的解往往是不存在的; 一般矩阵对策在混合策略意义下的解总是存在的.

通过一个构造性的证明, 导出求解矩阵对策的基本方法: 线性规划方法.

8.2.3 解矩阵对策的线性规划法

下面将引入记号:

- 当局中人I取纯策略α_i时, 其赢得函数记为$E(e_i,y)$, 即
$$E(e_i,y)=\sum_{j=1}^n a_{ij}y_j.$$
- 当局中人II取纯策略β_j时, 其赢得函数记为$E(x,e_j)$, 即
$$E(x,e_j)=\sum_{i=1}^m a_{ij}x_i.$$

由上, 有

$$\begin{aligned}E(x,y)=\sum_{i=1}^m\sum_{j=1}^n a_{ij}x_1y_j &= \sum_{i=1}^m\left(\sum_{j=1}^n a_{ij}y_j\right)x_i=\sum_{i=1}^m E(e_i,y)x_i,\\ &=\sum_{j=1}^n\left(\sum_{i=1}^m a_{ij}x_i\right)y_j=\sum_{j=1}^n E(x,e_j)y_j,\end{aligned}$$

定理 8.2.4 (矩阵对策最优混合策略的刻画) *矩阵对策$G=\{S_1,S_2;A\}$在混合策略意义下有解的充分必要条件是: 存在$x^*\in S_1^*,y^*\in S_2^*$使得对任意$i=1,2,\cdots,m$以及$j=1,2,\cdots,n$都有*

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}y_j^*=E(e_i,y^*)\le E(x^*,y^*)\le E(x^*,e_j)=\sum_{i=1}^m a_{ij}x_i^*.$$

即当局中人I采取策略$x=x*$时, 局中人II采取$y=y^*$优于采取任何一个纯策略$y=e_j$. 当局中人II采取策略$y=y^*$时, 局中人I采取$x=x^*$优于任何一个纯策略$x=e_i$.

证明: "$\Leftarrow$": 存在$x^*\in S_1^*,y^*\in S_2^*$使得对任意的$x\in S_1^*,y\in S_2^*$, 都有

$$E(e_i,y^*)\le E(x^*,y^*)\le E(x^*,e_j).$$

取$x=e_i,y=e_j(i=1,2,\cdots,m,j=1,2,\cdots,n)$即可.

"$\Rightarrow$": 对一切$x\in S_1^*,y\in S_2^*$都有:

$$E(x,y^*)=\sum_{i=1}^m E(e_i,y^*)x_i\le E(x^*,y^*)\sum_{i=1}^m x_i=E(x^*,y^*)$$

$$E(x^*,y)=\sum_{j=1}^n E(x^*,e_j)y_j]geqE(x^*,y^*)\sum_{j=1}^n y_j=E(x^*,y^*).$$

因此

$$E(x,y^*)\le E(x^*,y^*)\le E(x^*,y).$$

矩阵对策G在混合策略意义下有解. □

定理 8.2.5 (矩阵对策最优混合策略存在性, von Neumann, 1944) *任一矩阵对策$G=\{S_1,S_2;A\}$在混合策略意义下一定有解.*

证明: 只需证明存在$x^*,y*$使得

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}y_j^*=E(e_i,y^*)\le E(x^*,y^*),i=1,\cdots,m.$$

$$\sum_{i=1}^m a_{ij}x_i^*=E(x^*,e_j)\ge E(x^*,y^*),j=1,\cdots,n,$$

$$\sum_{i=1}^m x_i^*=1,x^*\ge 0,$$

$$\sum_{j=1}^n y_j^*=1,y^*\ge 0.$$

为此考虑如下一对线性规划问题:

$$\begin{array}{ll}\max\limits_{x,u} & u,\\ \text{s.t.} & \sum\limits_{i=1}^m a_{ij}x_i\ge u,j=1,2,\cdots,n,\\ & \sum\limits_{i=1}^m x_i=1,x\ge 0.\end{array}\quad \text{与} \quad \begin{array}{ll}\min\limits_{y,v} & v,\\ \text{s.t.} & \sum\limits_{j=1}^n a_{ij}y_j\le u,j=1,2,\cdots,n,\\ & \sum\limits_{j=1}^n y_j=1,y\ge 0.\end{array}$$

写成矩阵形式为

$$\mathbf{P}:\begin{array}{ll}\max\limits_{x,u} & u,\\ \text{s.t.} & A^Tx\ge u\mathbf{1}_n,\\ & \mathbf{1}_m^Tx=1,x\ge 0,\end{array}\quad \text{与} \quad \mathbf{D}:\begin{array}{ll}\min\limits_{y,v} & v,\\ \text{s.t.} & Ay\le v\mathbf{1}_m,\\ & \mathbf{1}_n^Ty=1,y\ge 0.\end{array}$$

这两个问题互为对偶, 且均可行. 由强对偶定理, 存在(x^*,u^*)与(y^*,v^*)分别为原问题与对偶问题的最优解, 且$u^*=v^*$. 记$w^*:=u^*=v^*$. 由可行性可得$x^*\in S_1^*,y^*\in S_2^*$, 且对任意的$i,j$都有

$$E(e_i,y^*)=\sum_{j=1}^n a_{ij}y_j^*\le w^*\le\sum_{i=1}^m a_{ij}x_i^*=E(x^*,e_j).$$

另外,

$$E(x^*,y^*)=\sum_{i=1}^{m}E(e_i,y^*)x_i^*\le w^*\sum_{i=1}^{m}x_i^*=w^*,$$
$$E(x^*,y^*)=\sum_{j=1}^{n}E(x^*,e_j)y_j^*\ge w^*\sum_{j=1}^{n}y_j^*=w^*.$$

因此, $w^*=E(x^*,y^*)$且对任意的i,j都有

$$E(e_i,y^*)\le E(x^*,y^*)\le E(x^*,e_j).$$

即(x^*,y^*)是对策G的解, 证完. □

记矩阵对策G的解集为$T(G)$, 对策的值为$V(G)$.

定理 8.2.6 (加法性质) *设有两个矩阵对策$G_1=\{S_1,S_2;A_1\}$与$G_2=\{S_1,S_2;A_2\}$, 其中$A_1=(a_{ij}),A_2=(a_{ij}+L)$, L为任意常数, 则: (1)$V_{G_2}=V_{G_1}+L$; (2)$T_{G_1}=T_{G_2}$.*

定理 8.2.7 (数乘性质) *设有两个矩阵对策$G_1=\{S_1,S_2;A_1\}$与$G_2=\{S_1,S_2;\alpha A\}$, 其中$\alpha>0$为任意常数, 则: (1)$V_{G_2}=\alpha V_{G_1}$; (2)$T_{G_1}=T_{G_2}$.*

注: 定理表明, 求矩阵对策G的解可通过解如下一对线性规划得到:

$$\mathbf{P}:\quad \max_{x,u}\ u,\quad \text{s.t.}\ A^Tx\ge u\mathbf{1}_n,\ \mathbf{1}_m^Tx=1,x\ge 0,\qquad 与\qquad \mathbf{D}:\quad \min_{y,v}\ v,\quad \text{s.t.}\ Ay\le v\mathbf{1}_m,\ \mathbf{1}_n^Ty=1,y\ge 0.$$

不妨设对策值$v^*=V(G)>0$（否则可以考虑$A\leftarrow A+|v^*|+1$）. 作变换$x\leftarrow x/v,y\leftarrow y/v$. (可在模型中加入约束$v\ge v^*/2>0$, 不改变解), 把问题**P,D**转化为

$$\mathbf{P}':\quad \min_{x}\ \mathbf{1}_m^Tx,\quad \text{s.t.}\ A^Tx\ge\mathbf{1}_n,\ x\ge 0,\qquad 与\qquad \mathbf{D}':\quad \max_{y}\ \mathbf{1}_n^Ty,\quad \text{s.t.}\ Ay\le\mathbf{1}_m,\ y\ge 0.$$

设已求得$\mathbf{P}',\mathbf{D}'$的最优解, 分别为x^*,y^*. 令$v^*=\dfrac{1}{\mathbf{1}_m^Tx^*}$, 则对策$G$的解$T(G)=(v^*x^*,v^*y^*)$, 对策的值$V(G)=v^*$.

例 8.2.5 *求矩阵对策$G=\{S_1,S_2;A\}$的解, 其中*

$$A=\begin{pmatrix}3&6\\5&4\end{pmatrix}$$

该问题可以变成如下的线性规划模型:

$$\mathbf{P}':\quad \min_{x}\ x_1+x_2,\quad \text{s.t.}\ 3x_1+5x_2\ge 1,\ 6x_1+4x_2\ge 1,\ x\ge 0.\qquad 与\qquad \mathbf{D}':\quad \max_{y}\ y_1+y_2,\quad \text{s.t.}\ 3y_1+6y_2\le 1,\ 5y_1+4y_2\le 1,\ y\ge 0.$$

用单纯形法来求解对偶问题. 第一张表为

y_1	y_2	y_3	y_4	b
3	6	1	0	1
5	4	0	1	1
-1	-1	0	0	0

最后一张表为

y_1	y_2	y_3	y_4	b
0	1	5/18	$-1/6$	1/9
1	0	$-2/9$	1/3	1/9
0	0	1/18	1/6	2/9

D'的最优解与最优函数值分别为$(1/9,1/9),2/9$. P'的最优解与最优函数值分别为$(1/18,1/6),2/9$. 从而对策G的值为$v^*=V(G)=\dfrac{9}{2}$. 对策的解为

$$x^*=v^*(1/18,1/6)=(1/4,3/4),y^* \quad =v^*(1/9,1/9)=(1/2,1/2).$$

例 8.2.6 (掷硬币游戏) 甲乙两人玩掷硬币游戏. 甲提议:"让我们各自亮出硬币的一面, 或正或反. 如果我们都是正面, 那么我给你3元, 如果我们都是反面, 我给你1元, 剩下的情况你给我2元就可以了. "这个游戏公平吗?

甲　乙	*head*	*tail*
head	$(-3,3)$	$(2,-2)$
tail	$(2,-2)$	$(-1,1)$

设甲乙各自出正面的概率分别是p和q, 则各自需要解决的问题是:

- 甲：选择适当的p使得$-8pq+3p+3q-1=(3-8q)p+3q-1$最大.
- 乙：选择适当的q使得$8pq-3p-3q+1=(8p-3)q-3p+1$最大.

每个人决策的原则: 不论对方作出何种决策, 都使得自己的利益最大化(或损失最小化). 对乙而言:

- $q<3/8\Rightarrow p=1\Rightarrow$甲的期望收益(等于乙损失)$>1/8$.
- $q>3/8\Rightarrow p=0\Rightarrow$甲的期望收益(等于乙损失)$>1/8$.
- $q=3/8\Rightarrow p\in[0,1]\Rightarrow$甲的期望收益(等于乙损失)$=1/8$.

对甲而言:

- $p<3/8\Rightarrow q=1\Rightarrow$乙的期望收益$>-1/8$(等于甲损失$<1/8$)
- $p>3/8\Rightarrow q=0\Rightarrow$乙的期望收益$>-1/8$(等于甲损失$<1/8$)
- $p=3/8\Rightarrow q\in[0,1]\Rightarrow$乙的期望收益$=-1/8$(等于甲损失$=1/8$)

Nash均衡点是$(p,q)=(3/8,3/8)$: 任何人都不能通过单方改变自己的决策使得自己的收益更大（损失更小）.

§ 8.3 (*)Gale-Shapley算法

8.3.1 博弈论的发展

博弈论的发展确实还不够完善, 因为它建立在太理想化的假设上. 然而, 博弈论的思想和概念早就对实际局势冲突的解决提供了深刻而重要的洞察.

博弈论的必要前提是: 局中人合理的行动, 以一种本质上是无从区分是非的、自我服务的利己主义的方式做出的决策. 然而, 博弈论中抽象的局中人与现实世界中的决策者的关系, 有些像牛顿力学中质点系与物理世界中的物体的关系.

"博弈论的目的在于深刻的见解, 而不是解法." 也许这可以解释为什么提出求解线性规划单纯形算法的G.Dantzig没有获得诺贝尔经济学奖.

如前所述, 博弈论的研究可以追溯到上个世纪初, 数以百计的数学家和经济学家为其发展作出了许多里程碑式的贡献.

冯・诺依曼(1903-1957) 1928年证明极小极大定理, 1944年与奥斯卡・摩根斯特恩发表《博弈论与经济行为》. 1945年冯・诺依曼领导的小组, 发表了一个全新的"存储程序通用电子计算机方案"——EDVAC (Electronic Discrete Variable Automatic Computer). 他因此被誉为现代计算机之父.

1994年诺贝尔经济学奖获得者是John C. Harsanyi, John F. Nash Jr., Reinhard Selten, 在非合作博弈的均衡分析理论方面做出了开创性的贡献, 对博弈论和经济学产生了重大影响.

1996年诺贝尔经济学奖获得者是James A. Mirrlees和William Vickrey, 前者在信息经济学理论领域做出了重大贡献, 尤其是不对称信息条件下的经济激励理论. 后者在信息经济学、激励理论、博弈论等方面都做出了重大贡献.

2001年诺贝尔经济学奖获得者是George A. Akerlof, A. Michael Spence和Joseph E. Stiglitz, 为不对称信息市场的一般理论奠定了基石. 他们的理论迅速得到了应用, 从传统的农业市场到现代的金融市场.

2005年诺贝尔经济学奖获得者是Robert J. Aumann和Thomas C. Schelling, 通过博弈论分析促进了对冲突与合作的理解. ……

到本世纪初, 算法博弈论(Algorithmic Game Theory)开始逐渐兴起. 人们将研究的重点放到"网络博弈"的统一框架下, 以此来探索实现(大型)网络优化控制的有效方法. 这一新的交叉研究方向吸引着许多世界著名的理论计算机科学家致力于这方面的研究.

8.3.2 Gale-Shapley算法

2012年诺贝尔经济学奖授予了两名美国经济学家一哈佛大学教授埃尔文罗斯(Alvin E. Roth), 和加州大学洛杉矶分校教授罗伊德沙普利(Lloyd S. Shapley)获奖, 以表彰他们对"稳定分配理论和市场设计实践"做出的贡献. "盖尔-沙普利算法"也被称为"延迟接受算法"(deferred-acceptance algorithm), 它是盖尔和沙普利在1962年为了寻找稳定匹配而设计出的一个市场机制. 市场一方(医疗机构)向另一方中(医学院学生)提出要约, 每个学生会对自己接到的要约进行考虑, 然后抓住自己青睐的(认为它是可接受的), 拒绝其它的. 该算法的一个关键之处在于, 合意的要约不会立即被接受, 而只是被"抓住"(hold on to), 也就是"延迟接受". 要约被拒绝后, 医疗机构才可向另一名医学院学生发出新的要约. 整个程序一直持续到没有机构再希望发出新的要约为止, 此时学生们才最终接受各自"抓住"的要约.

假如你是一位红娘。现有若干个单身男子登门求助, 还有同样多的单身女子也前来征婚. 如果你已经知道这些女孩儿在每个男孩儿心目中的排名, 以及男孩儿们在每个女孩儿心中的排名, 你应该怎样为他们牵线匹配呢?

最理想的匹配方案当然是, 每个人的另一半正好都是自己的"第一选择". 但绝大多数情况下都不可能实现。比方说, 男1号最喜欢的是女1号, 而女1号的最爱不是男1号; 或者好几个男孩儿最喜欢的都是同一个女孩儿, 当这种最为理想的匹配方案无法实现时, 怎样的匹配方案才能令人满意呢?

理想的匹配固然重要, 但是**和谐**才是配对的关键. 如果男1号和女1号各有各的对象, 但男1号觉得, 比起自己现在的, 女1号更好一些; 女1号也发现, 在自己心目中, 男1号的排名比现男友更靠前. 这样一来, 这两人就可能抛弃各自现在的对象. 如果出现了这种情况, 我们就说这个配对是**不稳定的**.

例 8.3.1 (不稳定的例子) *设A,B为男, $1,2$为女, 喜好顺序为: $A(1,2),B(1,2),1(B,A),2(A,B)$, 现在如果已经分配到$A,1$为一对; $B,2$为一对, 但是1更喜欢B, B也更喜欢1, 于是原来的配对方式是不稳定的.*

一个匹配虽然不能让每个人都得到最满意的, 但它必须是**稳定**. 换言之, 对于每一个人, 在他/她心目中比他/她当前伴侣更好的异性, 都不会认为他/她也是一个更好的选择. 一个非常自然问题就是: 稳定的匹配总存在吗？如何找到一个稳定的匹配？

美国数学家盖尔和沙普利设计并证明了一种寻找稳定匹配的策略. 不管男女各有多少人, 也不管他们的偏好如何, 应用这种策略后总能得到一个稳定的匹配. 换句话说, 他们证明了**稳定匹配总是存在的**.

实际上, "配对游戏"不仅有过实际应用, 且该算法的应用竟比算法本身的提出还早10年. 1952年美国就开始用此法给医学院的学生安排工作, 即"全国住院医师配对项目": 各医院从尚未拒绝这一职位的学生中选出最佳人选并发送聘用通知, 当学生收到来自各医院的聘用通知后, 系统会根据他所填写的意愿表自动将其分配到意愿最高的职位, 并拒绝掉其他的职位. 如此反复, 直到每个学生都分配到了工作. 那时人们并不知道该流程可保证工作分配的稳定性, 只是凭直觉认为这是很合理的. 直到1962年盖尔和沙普利才系统地研究了这个流程, 提出了稳定婚姻问题, 并证明了该算法的正确性.

Gale-Shapley策略(算法): 男孩儿将一轮一轮地去追求他中意的女孩儿, 女孩儿可以选择接受或者拒绝他的追求者. 第一轮, 每个男孩儿都选择自己名单上排在首位的女孩儿, 并向她表白. 此时, 一个女孩儿可能面对的情况有三种:

- 没有人跟她表白: 女孩儿只需要继续坚持.

- 只有一人跟她表白: 接受他的表白, 答应暂时和他做情侣.
- 有不止一个人跟她表白: 从所有追求者中选择自己最中意的那一位, 答应和他暂时做情侣, 并拒绝所有其他追求者.

第一轮结束后, 有些男孩儿已经有女朋友了, 有些男孩儿仍然是单身.

在第二轮追女行动中, 每个单身男孩儿都从所有还没拒绝过他的女孩儿中选出自己最中意的那一个, 并向她表白, **不管她现在是否是单身**. 和第一轮一样, 女孩儿们需要从表白者中选择最中意的一位, 拒绝其他追求者. 注意, 如果这个女孩儿已经有男朋友了, 当她遇到了更好的追求者时, 她必须**拒绝掉现在的男友**, 投向新的追求者的怀抱. 这样, 一些单身男孩儿将会得到女友, 那些已经有了女友的男孩儿也可能重新变成单身.

在以后的每一轮中, 单身男孩儿继续追求列表中的下一个女孩儿, 女孩儿则从包括现男友在内的所有追求者中选择最好的一个, 并对其他人说不. 这样一轮一轮地进行下去, 直到某个时候所有人都不再单身, 下一轮将不会有任何新的表白发生, 整个过程自动结束. 此时的婚姻搭配就一定是稳定的了.

例 8.3.2 *现有A,B,C,D四个男生与$1,2,3,4$四个女生, 喜欢对方的顺序分别为*

$$\begin{array}{ll} A(3,4,2,1) & 1(A,D,C,B) \\ B(3,2,4,1) & 2(A,B,C,D) \\ C(1,3,4,2) & 3(A,C,D,B) \\ D(2,4,3,1) & 4(B,A,D,C) \end{array}$$

解: 见PPT的第90页. 一共进行三轮. 最终的结果是$[A,3],[B,2],[C,1],[D,4]$各自为一对.

定理 8.3.1 *Gale-Shapley算法给出的匹配是稳定的.*

证明: 首先注意到, 随着轮数的增加, 一个男孩儿追求的对象总是越来越糟, 而一个女孩儿的男友只可能变得越来越好. 假设男A和女a各自有各自的对象, 但与各自现有的对象相比较, 男A更喜欢女a. 因此, 男A之前肯定已经跟女a表白过. 既然女a最后没有跟男A在一起, 说明女a拒绝了男A, 也就是说她有了比男A更好的男孩儿. 所以, 两个人虽然不是一对, 但都觉得对方比自己现在的伴侣好, 这样的情况是不可能发生的, 即匹配一定是稳定的. □

注: 可以证明, 这种男追女、女拒男的方案对男性更有利. 事实上, 稳定匹配往往不止一种, 然而Gale-Shapley算法给出的匹配可以保证, 每一位男性得到的伴侣都是所有可能的稳定匹配中最理想的一个: 同时每一位女性得到的伴侣都是所有可能的稳定匹配中最差的一个. 倘若有某位女性知道所有其他人的偏好情况, 经过精心计算, 她有可能发现, 故意拒绝本不该拒绝的追求者(暂时答应一个较差的男性做情侣), 或许有机会等来更好的男性. 因而, 在实际生活中应用Gale-Shapley算法, 不得不考虑博弈中的**欺诈行为**.

Gale-Shapley算法的局限性. 例如, 它无法处理某些不分男女的稳定匹配问题: 假设每个宿舍可住两个人, 且$2n$个学生中每一个学生对其余$2n-1$个学生的偏好评价, 如何寻找一个宿舍的稳定分配呢? 此时, Gale-Shapley算法就失效了. 而事实上, 宿舍的稳定分配问题中有可能不存在稳定的分配.

如何评判一个宿舍分配方案的优劣是一个基本的问题. 稳定匹配问题还有很多其他的变种, 有些问题是属于NP-完全问题类, 至今仍然没有(也不大可能有)一种有效的求解算法.

习题 12

1. 对于例8.2.6, 用线性规划法求双方的最优混合策略.
2. **(2018期末)**给定矩阵对策$G=\{I,II;S_1,S_2;A\}$, 其中局中人I的赢得矩阵A为

$$A=\begin{pmatrix} -3 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$$

   写出局中人I和II为寻求最优混合策略所需求解的一对线性规划问题.(无需求解)
3. (*)对例8.3.2的婚姻匹配问题, 改为让女孩儿开始追男孩儿, 男孩儿拒绝女孩儿, 用Gale-Shapley算法求出一个稳定匹配.

第 9 章　无约束优化

无约束优化: unconstrained optimization.

§ 9.1　无约束优化问题简介

优化问题的通常形式：$(f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}, X\subset\mathbb{R}^n)$

$$\min f(x), \text{s.t.} x\in X.$$

而无约束条件优化问题的形式是: $(X=\mathbb{R}^n)$

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$$

非线性规划: $f, c_i:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}, i=1,2,\cdots,m$. 其中至少一个函数$c_i(x)$是非线性的.

$$\min f(x), \text{s.t.} \begin{cases} c_i(x)=0, & i=1,2,\cdots,m_e, \\ c_i(x)\le 0, & i=m_e+1,\cdots,m. \end{cases}$$

例 9.1.1 (最小二乘问题(least squares problems)) *形如$\min\|Ax-b\|^2$, 它的解析解是$x^*=(A^TA)^{-1}A^Tb$. 有可靠、成熟且高效的算法和软件解决它. 计算的时间复杂度是$O(n^2k)(A\in\mathbb{R}^{k\times n}$. 许多问题可以辨认为最小二乘问题.*

可以用一些技术来把问题变成最小二乘问题(正则化技术)：有一种问题是

$$\min\|\mathscr{A}X-b\|^2+\tau\text{rank}(X),$$

其中$\tau>0$, 通过τ调整数据拟合的重要性还是矩阵的秩的重要性.

用nuclear norm范数$\|X\|_*$表示rank(x), 对X作SVD分解$X=U\Sigma V^T$, 则$\|X\|_*=\sigma_1+\sigma_2+\cdots+\sigma_k$. 这是一种正则化.

在图像处理中, 一张图片的数据的全变差通常比较小, 设X是一张图片,

$$\min\|\mathscr{A}X-b\|^2+\tau\|DX\|_1,$$

其中D代表作变差, (一张照片近似颜色的区域比较大, 稀疏性很强), 取1范数后相当于离散化.

很多时候不知道要一个什么样的解, 不知道在最小二乘问题后面加什么, 那就用神经网络实现, 把整个问题放在一个网络上优化, 而且要防止数据过拟合.

定义 9.1.1 (凸优化问题) *若$X\subset\mathbb{R}^n$是凸集, $f:X\to\mathbb{R}$是凸函数, 则问题$\min\{f(x):x\in X\}$叫一个凸优化问题.*

通常演讲形如下面的凸优化问题:

$$\min f(x),\ \text{s.t.} \begin{cases} Ax=b, \\ c_i(x)\le 0, i=1,2,\cdots,m. \end{cases}$$

其中$c_i:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$都是凸函数, $i=1,2,\cdots,m$.

注: 把$Ax=b$换成$c(x)=0$, $c(x)$凸, 此时不一定是个凸优化问题.

凸优化问题没有解析解, 但是是有可靠且高效的算法, 计算的时间复杂度大概是$\max\{n^3,n^2m,F\}$, 其中F是计算f_i的一阶、二阶导数的时间开销.

通常一个问题很难辨认为凸优化问题, 有很多技巧去把问题转化为凸优化问题. 但是, 很多问题可以用凸优化方法来解决.

凸优化问题的目标是找个全局最优解, 但是通常的非线性规划问题(目标函数或者约束条件不一定是凸)找全局最优解太难了, 所以需要做一些妥协. 有时候只能保证寻找一个KKT/stationary point.

§ 9.2 可微性基本定义

设$f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$, 我们考虑无约束优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x).$$

我们现在把眼光放在连续可微函数空间, 即$f\in C^1(\mathbb{R}^n)$. 主要因为很多算法都是基于导数来构建的(比如梯度、Hessian), 有一些不需要用导数信息的算法非常有用.

定义 9.2.1 (梯度(gradient)) *若$f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$是连续可微的, 即$f\in C^1$, 则把$f$的梯度记为*

$$\nabla f(x)=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}(x)\\ \vdots\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_n}(x)\end{pmatrix}.$$

定义 9.2.2 (Hessian) *若$f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$, 满足$f\in C^2$, 则把$f$的Hessian矩阵记为*

$$\nabla^2 f(x)=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1\partial x_1}(x) & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1\partial x_2}(x) & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1\partial x_n}(x)\\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2\partial x_1}(x) & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2\partial x_2}(x) & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2\partial x_n}(x)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n\partial x_1}(x) & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n\partial x_2}(x) & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n\partial x_n}(x)\end{pmatrix}.$$

若$x,y\in\mathbb{R}^n$, 则有如下性质: (结合微分中值定理、泰勒展开等)

- $f(y)=f(x)+\nabla f(\xi)^T(y-x)$, 对某个$\xi\in(x,y)$.
- $f(y)=f(x)+\nabla f(x)^T(y-x)+o(\|y-x\|)$.
- $f(y)=f(x)+\int_0^1\nabla f(x+t(y-x))^T(y-x)\mathrm{d}t$. (常用!)
- $f(y)=f(x)+\nabla f(x)^T(y-x)+\dfrac{1}{2}(y-x)^T\nabla^2 f(\xi)(y-x)$, 对某个$\xi\in(x,y)$.
- $f(y)=f(x)+\nabla f(x)^T(y-x)+\dfrac{1}{2}(y-x)^T\nabla^2 f(x)(y-x)+o(\|y-x\|^2)$.

下面引入“下降方向”的概念. 我们知道任意$x,d\in\mathbb{R}^n$, 由Taylor展开得

$$f(x+td)=f(x)+t\nabla f(x)^Td+o(t).$$

从而“$\nabla f(x)^Td<0$”当且仅当“存在$\delta>0$, 使得$f(x+td)<f(x),\forall t\in(0,\delta)$”.

定义 9.2.3 (下降方向(descent direction)) *设$f\in C^1(\mathbb{R}^n),x\in\mathbb{R}^n$, 把向量$d\in\mathbb{R}^n$叫$f$在$x$处的**下降方向**, 若$\nabla f(x)^Td<0$.*

定理 9.2.1 (一阶必要条件) *设$f\in C^1(\mathbb{R}^n)$. 若$x^*\in\mathbb{R}^n$是f的局部极小值点, 则$\nabla f(x^*)=0$.*

证明: 由于$x^*\in\mathbb{R}^n$是f的局部极小值点, 则在x^*处没有下降方向, 即$\forall d\in\mathbb{R}^n$, 有$\nabla f(x^*)^Td\ge 0$. 令$d=-\nabla f(x^*)$即可. □

定义 9.2.4 (稳定点(stationary point)) *点$x^*\in\mathbb{R}^n$叫函数f的稳定点, 若$\nabla f(x^*)=0$.*

定理 9.2.2 (二阶必要条件) *设$f\in C^2(\mathbb{R}^n)$, 若$x^*\in\mathbb{R}^n$是f的局部极小值点, 则$\nabla f(x^*)=0$且$\nabla^2 f(x^*)\succeq$ (半正定).*

证明: 由Taylor展开, $\forall\alpha>0,d\in\mathbb{R}^n$, 都有

$$\frac{f(x^*+\alpha d)-f(x^*)}{\alpha^2}=\frac{1}{2}d^T\nabla^2 f(x^*)d+o(1).$$

(反证)如果$\nabla^2 f(x^*)$不是半正定, 即存在$d\in\mathbb{R}^n$使得$d^T\nabla^2 f(x^*)d<0$, 则当$\alpha>0$充分小时, $\frac{1}{2}d^T\nabla^2 f(x^*)d+o(1)<0$, 所以$f(x^*+\alpha d)<f(x^*)$. 这与$x^*$是极小值点矛盾. 因此$\nabla^2 f(x^*)$半正定. □

定理 9.2.3 (二阶充分条件) 设$f \in C^2(\mathbb{R}^n)$, 若$\nabla f(x^*) = 0$且$\nabla^2 f(x^*) \succ 0$（正定）, 则$x^* \in \mathbb{R}^n$是f的严格局部极小值点.

证明: 由于$f \in C^2(\mathbb{R}^n), \nabla^2 f(x^*)$正定, 则存在$\delta > 0$使得$\nabla^2 f(x)$在球$B(x^*, \delta)$内都正定. $\forall d \in \mathbb{R}^n$满足$0 < \|d\| < \delta$, 都有

$$f(x^* + d) = f(x^*) + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x^* + \theta d) d, \exists \theta \in (0, 1).$$

由于$\nabla^2 f(x^* + \theta d)$正定, 则$f(x^* + d) > f(x^*)$, 所以$x^*$是$f$的严格极小值点. □

定理 9.2.4 (约束凸规划) 设$C \subset \mathbb{R}^n$是非空凸集, $f : C \to \mathbb{R}$. 设$x^* \in C$是$\min\limits_{x \in C} f(x)$是局部极小值点, 则:
(1)若f凸, 则x^*也是全局的极小值点.
(2)若f严格凸, 则x^*是唯一的全局极小值点.

定理 9.2.5 (无约束可微凸规划) 设$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$是可微的凸函数, 则$x^*$是全局最小值的充分必要条件是$\nabla f(x^*) = 0$.

证明: "⇒: " 由条件, $\forall x \in \mathbb{R}^n$, 都有$f(x) \geq f(x^*) + \nabla f(x^*)^T (x - x^*) = f(x^*)$.
"⇐" : 略. □
下面设$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$.

定义 9.2.5 称$g \in \mathbb{R}^n$是f在$x \in \mathbb{R}^n$处的**次梯度**, 若$f(y) \geq f(x) + \langle g, y - x \rangle . \forall y \in \mathbb{R}^n$.

注: 把f在x处的所有次导数构成的集合记作$\partial f(x)$. 若$x \in \operatorname{ri} \operatorname{dom}(f)$, 则$\partial f(x) \neq \varnothing$.

定理 9.2.6 (无约束广义实函数凸规划) 设$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. 点$x^*$是$f(x)$的全局最小值点当且仅当$0 \in \partial f(x^*)$.

证明: x^*是全局最小值点当且仅当$f(x) \geq f(x^*) + \langle 0, x - x^* \rangle, \forall x \in \mathbb{R}^n$. 这等价于$0 \in \partial f(x^*)$. □

§9.3 (*)次可微性

这部分内容不作考察范围.

定义 9.3.1 (次梯度与次微分) 设$f : \mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$是适定的凸函数, $x \in \operatorname{dom} f$. 满足

$$f(y) \geq f(x) + \langle g, y - x \rangle, \forall y \in \mathbb{R}^n \tag{9.1}$$

的向量$g \in \mathbb{R}^n$叫f在x的次梯度. 把f在x的所有次梯度叫f在x的次微分, 记为$\partial f(x)$.

注: 不等式(9.1)叫**"次梯度不等式"**. 通常$\partial f(x)$是空集, 如果$\partial f(x)$非空, 则f叫x处**次可微**.

引理 9.3.1 设$f : \mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$是适定的凸函数, $x \in \operatorname{dom} f$. 向量$g$是$f$在$x$处的次梯度当且仅当

$$f'(x; d) \geq \langle g, d \rangle, \forall d \in \mathbb{R}^n.$$

定理 9.3.2 设$f : \mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$是适定凸函数. 设$x \in \operatorname{int} \operatorname{dom} f$, 则$\partial f(x)$非空闭凸且有界. 另外, $\forall d \in \mathbb{R}^n$,

$$f'(x; d) = \max_{g \in \partial f(x)} \langle g, d \rangle, \forall d \in \mathbb{R}^n.$$

注: 事实上, 对任意的$x \in \operatorname{dom} f$, $\partial f(x)$都是闭凸集. (当$\operatorname{dom} f$是空集, 当然空集也是闭凸的), 且如果$x \in \operatorname{ri} \operatorname{dom} f$, 则$\partial f(x) \neq \varnothing$. (注意$f$是凸集, 从而$\operatorname{dom} f$也是凸集, 则$\operatorname{ri} \operatorname{dom} f \neq \varnothing$. $\partial f(x)$的有界性依赖于$x \in \operatorname{int} \operatorname{dom} f$.

注: 上述方向导数的公式可以推广到边界点, 其中边界点处f是次可微的.

引理 9.3.3 设$f : \mathbb{R}^n \to \overline{\mathbb{R}}$是凸函数, 在$x$处次可微. 则对任意的$d \in \mathbb{R}^n$, 都有

$$\liminf_{h \to d} f'(x; h) = \sup_{g \in \partial f(x)} \langle g, d \rangle.$$

引理 9.3.4 凸函数$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$在$x$处可微当且仅当: 次导数$\partial f(x)$只有一个元素, 这个元素就是$f$在$x$处的梯度.

证明: 见Rockafellar书上的242页定理25.1. □

定义 9.3.2 (最速梯度方向, steepest descent direction) 设$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$是凸函数, 在$x$处次可微, 则$x$处的最速梯度方向$\hat{d}$是

$$\hat{d}=\arg\min_{\|d\|\le 1} f'(x;d).$$

引理 9.3.5 设$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$在$x$处连续, $0\notin\partial f(x)$. 则f在x处的最速梯度方向形如

$$\hat{d}=-\frac{g}{\|g\|}, g=\Pi_{\partial f(x)}(0).$$

定义 9.3.3 (对偶范数) 设$\|\cdot\|_\circ$是任意范数, 则它的对偶范数$\|\cdot\|_*$记为

$$\|y\|_*=\sup_{\|x\|_\circ\le 1}\langle x,y\rangle.$$

注: 显然有如下的不等式

$$\langle x,y\rangle\le\|x\|_\circ\|y\|_*.$$

容易证明$\|\cdot\|_1$与$\|\cdot\|_\infty$互为对偶范数, 且$\|\cdot\|_2$是自对偶的.

例 9.3.1 (范数的次导数) 任意范数$\|\cdot\|_\circ$在x处的次导数为

$$\partial\|x\|_\circ=\{g:\|g\|_*\le 1,\langle g,x\rangle=\|x\|_\circ\},$$

特别地

$$\partial\|x\|_\circ=\begin{cases}\{g:\|g\|_*\le 1\}, & x=0,\\ \{g:\|g\|_*=1,\langle g,x\rangle=\|x\|_\circ\}, & x\ne 0.\end{cases}$$

例 9.3.2 (距离函数的次导数) 设$Z\subset\mathbb{R}^n$是闭凸集. $\|\cdot\|_\circ$是个范数. 考虑距离函数

$$f(x)=\operatorname{dist}(x,Z)=\min_{z\in Z}\|x-z\|_\circ.$$

距离函数是个凸函数. 取$\hat{z}=\Pi_Z(x)$（它是良好定义的, 因为Z是闭集）. 若范数$\|\cdot\|_\circ$不是严格闭凸集, 则$\Pi_Z(x)$有可能不是单点集. 对任意的x, 我们有

$$\partial f(x)=N_Z(\hat{z})\cap\partial\|x-\hat{z}\|_\circ.$$

如果$\Pi_Z(x)$不是单点集, 上述集合的右边对任意的投影$\hat{z}$都会保持不变.

在Euclid范数下, 设$x\notin Z,\hat{z}=\Pi_Z(x)\ne x$且

$$\partial\|x-\Pi_Z(x)\|=\left\{\frac{x-\Pi_Z(x)}{\|x-\Pi_Z(x)\|}\right\}$$

是单点集, $x-\Pi_Z(x)\in N_Z(\Pi_Z(x))$. 因此, $\partial f(x)$也是个单点集, 从而f在x处可微, 梯度为

$$\nabla f(x)=\frac{x-\Pi_Z(x)}{\|x-\Pi_Z(x)\|}.$$

□

例 9.3.3 (上界存在的次导数) 设I是有限的指标集, 对每个$i\in I$, f_i是可微凸函数. 则

$$\partial f(x)=\operatorname{conv}\{\nabla f_i(x):i\in A(x)\}.$$

其中$A(x)=\{i\in I:f_i(x)=f(x)\}$是关于$x$的集合.

例 9.3.4 (指示函数(indicator function)的次导数) 设C是非空闭凸集, 考虑C的指示函数

$$\delta_C(x)=\begin{cases}0, & x\in C,\\ +\infty, & o.w.\end{cases}$$

容易得到

$$\partial\delta_C(x)=\begin{cases}N_C(x), & x\in C,\\ \varnothing, & o.w.\end{cases}$$

特别地, 若C是闭凸锥, 则$\partial\delta_C(0)=N_C(0)=C^\circ$.

引理 9.3.6 (数乘性质) 设$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$是凸函数, $\alpha>0$, $h(x)=\alpha f(x)$. 则h是凸函数且$\partial h(x)=\alpha\partial f(x)$.

引理 9.3.7 (链式法则) 设$f:\mathbb{R}^m\to\overline{\mathbb{R}}$是凸函数, A是$m\times n$矩阵, $h(x)=f(Ax)$. 则$\partial h(x)=A^T\partial f(Ax)$.

证明: 看Rockafeller书的P225的定理23.9.

例 9.3.5 设$A\in S^n_{++}$且$h(x)=\sqrt{\langle x,Ax\rangle}$. 设$A=U^TU$, 则$h(x)=\|Ux\|$, 由前一引理, 有

$$\partial h(0)=\{U^Tg:\|g\|\le 1\}=\{v:\langle v,A^{-1}\rangle\le 1\}.$$

事实上, 在这个例子中, $h(x)=\|x\|_A$是范数, 对偶范数为$\|v\|_{A^{-1}}$. 上述用链式法则的计算过程是例9.3.1的推广结论.

定理 9.3.8 (加法性质) 设$f=f_1+f_2$, 其中f_1,f_2都是适定的凸函数. 如果存在$x_0\in\operatorname{dom}f$, 使得$f_1$在$x_0$处连续, 则

$$\partial f(x)=\partial f_1(x)+\partial f_2(x),\forall x\in\operatorname{dom}f.$$

证明: 看Rockafeller书的P223的定理23.8.

定理 9.3.9 设$F(x)=\sup\limits_{y\in Y}f(x,y)$, 在一定条件下有

$$\partial F(x)=\operatorname{conv}\left(\bigcup_{y\in\hat{Y}(x)}\partial_x f(x,y)\right)$$

例 9.3.6 设A是对称矩阵, $\lambda_{\max}(A)=\max\limits_{\|y\|=1}\langle y,Ay\rangle$. 则

$$\partial\lambda_{\max}(A)=\operatorname{conv}\{yy^T:Ay=\lambda_{\max}(A)y,\|y\|=1\}.$$

§ 9.4 (*)共轭函数

对所有适定凸函数f与$x_0\in\operatorname{ri}\operatorname{dom}f$, f在x_0处是次可微的. 因此对任意的$s_0\in\partial f(x_0)$, 有

$$f(x)\ge f(x_0)+\langle s_0,x-x_0\rangle,\forall x\in\mathbb{R}^n.$$

给定$s\in\mathbb{R}^n$, 定义$\Omega(s)$为

$$\Omega(s)=\{\alpha\in\mathbb{R}:l_{s,\alpha}(x):=\langle s,x\rangle-\alpha\le f(x),\forall x\in\mathbb{R}^n\}.$$

注意$l_{s,\alpha}$是f的一个仿射弱函数(affine minorant), 斜率为s, 截距为$-\alpha$. 集合$\Omega(s_0)$非空是因为

$$\overline{\alpha}:=\langle s_0,x_0\rangle-f(x_0)\in\Omega(s_0).$$

此外, $\overline{\alpha}=\inf\Omega(s_0)$, 所以$l_{s_0,\overline{\alpha}}$就是$f$的斜率为$s_0$的仿射弱函数中的最大值.

f的仿射弱函数$\langle s,x\rangle-\alpha$的存在性等价于$\Omega(s)\ne\varnothing$, 或者$\inf\Omega(s)<+\infty$, 可以推出$f^*(s)<+\infty$, 其中$f^*(s)$定义为

$$f^*(s):=\inf\Omega(s)=\sup_x\langle s,x\rangle-f(x).$$

从而引出如下定义.

定义 9.4.1 (共轭函数, conjugate function) 设$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$是适定的凸函数. 则共轭函数$f^*:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$定义为

$$f^*(s):=\sup_x\langle s,x\rangle-f(x).$$

注: 直接可以推出如下结论.

定理 9.4.1 (Fenchel-Young) 对任意的$x\in\mathbb{R}^n,s\in\mathbb{R}^n$, 有

$$f(x)+f^*(s)\ge\langle s,x\rangle.$$

引理 9.4.2 如果函数$f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$是适定函数且有仿射弱函数, 则它的共轭函数$f^*$是适定、凸且$lsc$.

例 9.4.1 **(δ_K^*，K是凸锥)** $\delta_K^*=\delta_{K^\circ}$. 因此$\delta_{K^\circ}$的共轭函数是$\delta_{K^{\circ\circ}}$（如果$K$闭，它就是$\delta_K$）

例 9.4.2 **($\delta_B^*, B=\{x:\|x\|_\circ\le 1\}$)** . $\delta_B^*=\|\cdot\|_*$，是$\|\cdot\|_\circ$的对偶范数.

例 9.4.3 **$/\|\cdot\|_\circ^*/$** $\|\cdot\|_\circ^*=\delta_{B_*}$，其中$B_*=\{s:\|s\|_*\le 1\}$. 与前面例子相比较，$\|\cdot\|_\circ$是$\|\cdot\|_*$的对偶范数，因此$\|\cdot\|_\circ$和$\delta_{B_*}$互为共轭.

定义 9.4.2 **(双共轭函数)** f的双共轭函数定义为

$$f^{**}(x)=\sup_s\langle s,x\rangle-f^*(s).$$

注: 根据双共轭函数的定义，$\langle s,x\rangle-f^*(s)$是$f$的斜率为$s$的仿射弱函数的逐点sup值，从而$f^{**}$是$f$的斜率为$s$的仿射弱函数的逐点sup值.

定理 9.4.3 **(Fenchel-Moreau)** 如果函数$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$至少有一个仿射弱函数，则

$$\operatorname{epi} f^{**}=\overline{\operatorname{conv}(\operatorname{epi} f)}.$$

特别地，如果f是适定凸函数且lsc，则$f^{**}=f$.

注: 如果f没有仿射弱函数，则$\Omega(s)=\varnothing, f^*(s)=+\infty$对任意的$s\in\mathbb{R}^n$，因此$f^{**}(x)=-\infty$对任意的$x$成立.

例 9.4.4 **(支撑函数, support function)** 设$Z\subset\mathbb{R}^n$. 则Z的支撑函数

$$\sigma_Z(s)=\sup_{x\in Z}\langle s,x\rangle=\sup_x\{\langle s,x\rangle-\delta_Z(x)\}=\delta_Z^*.$$

因此$\delta_Z^*=\delta_Z^{**}$且

$$\operatorname{epi}\sigma_Z^*=\operatorname{epi}\delta_Z^{**}=\overline{\operatorname{conv}(\operatorname{epi}\delta_Z)}=\operatorname{epi}\delta_{\overline{\operatorname{conv}(Z)}}.$$

所以$\sigma_Z^*=\delta_{\overline{\operatorname{conv}(Z)}}$.

注: 如果Z闭凸，则σ_Z和δ_Z互为共轭. 如果Z不是闭凸，则双共轭函数δ_Z^{**}是Z的闭凸包的指示函数(indicator function).

注: $\|\cdot\|_\circ=\delta_{B_*}$，所以$\delta_{B_*}^*=\delta_{\overline{\operatorname{conv}(B_*)}}=\delta_{B_*}=\|\cdot\|_\circ^*$，其中最后一个等号就是例9.4.3.

下面看共轭函数的次梯度.

设$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$且$x_0\in\operatorname{ri}\operatorname{dom} f$. 则$\partial f(x_0)$非空. 取$s_0\in\partial f(x_0)$，则

$$\overline{\alpha}:=\langle s_0,x_0\rangle-f(x_0)=\inf\Omega(s_0)=f^*(s_0).$$

即$f^*(s_0)+f(x_0)=\langle s_0,x_0\rangle$. 事实上，这个等式可以用来刻画$f,f^*$的次梯度.

定理 9.4.4 设$f:\mathbb{R}^n\to\overline{\mathbb{R}}$是适定的凸函数. 则下面两个式子等价: (1)$s\in\partial f(x)$; (2)$f(x)+f^*(s)=\langle s,x\rangle$. 如果$f$也是$lsc$的，则上述两个式子也等价于: (3)$x\in\partial f^*(s)$.

例 9.4.5 **(指示函数, indicator)** 设C非空闭凸. 设$x\in C$并计算$\partial\delta_C(x)$.

由δ_C^*和前一定理可知$s\in\partial\delta_C(x)$当且仅当

$$\sigma_C(s)+\delta_C(x)=\langle s,x\rangle.$$

这等价于$\sup\limits_{y\in C}\langle s,y\rangle=\langle s,x\rangle$或者

$$\langle s,y-x\rangle\le 0,\forall y\in C.$$

这也等价于$s\in N_C(x)$. 因此$\partial\delta_C(x)=N_C(x)$，在前面例子已经证明过了. □

例 9.4.6 设a_i是$\mathbb{R}^n$中向量，$i=1,2,\cdots,m$. 考虑

$$f(x)=\max_{1\le i\le m}\langle a_i,x\rangle.$$

记$A = \{a_i : i = 1, 2, \cdots, m\}$, 则$f(x) = \sigma_A(x)$, 则

$$f^* = \sigma_A^* = \delta_A^{**} = \delta_{\mathrm{conv}(A)}.$$

另外, $s \in \partial f(0)$当且仅当$f(0) + \delta_{\mathrm{conv}(A)}(s) = \langle s, 0\rangle$, 这等价于$s \in \mathrm{conv}(A)$, 因此

$$\partial f(0) = \mathrm{conv}(a_1, \cdots, a_m).$$

例 9.4.7 (范数) 设$\|\cdot\|_\circ$是任意范数. 则

$$\|x\|_\circ = \sup_{s \in B_*} \langle s, x\rangle = \sigma_{B_*}(x).$$

因此

$$\partial\|x\|_\circ = \{s : \langle s, x\rangle = \|x\|_\circ + \delta_{B_*}(s)\} = \{s \in B_* : \langle s, x\rangle = \|x\|_\circ\}.$$

例 9.4.8 设Z是闭凸集, $f(x) = \inf_{z \in Z} \|x - z\|_\circ$.

我们有

$$\begin{aligned} f^*(s) &= \sup_x\{\langle s, x\rangle - \inf_{z \in Z} \|x - z\|_\circ\} \\ &= \sup_{z \in Z} \sup_x \langle s, x\rangle - \|x - z\|_\circ \\ &= \sup_{z \in Z} \sup_y \langle s, z + y\rangle - \|y\|_\circ \\ &= \sigma_Z(s) + \delta_{B^*}(s). \end{aligned}$$

让$\hat{z} \in Z$满足$f(x) = \|x - \hat{z}\|_\circ$, 则$s \in \partial f(x)$当且仅当

$$\begin{aligned} \|x - \hat{z}\|_\circ &= \langle s, x\rangle - \sigma_Z(s) - \delta_{B^*}(s) \\ &= \langle s, x\rangle - \sup_{z \in Z}\langle s, z\rangle - \delta_{B^*}(s) \\ &= \langle s, x - \hat{z}\rangle - \sup_{z \in Z}\langle s, z - \hat{z}\rangle - \delta_{B^*}(s). \end{aligned}$$

由于$\sup_{z \in Z}\langle s, z - \hat{z}\rangle \geq 0$且$\delta_{B^*}(s) = 0$或$+\infty$, 则上述等式成立当且仅当s

$$\|s\|_* \leq 1, \sup_{z \in Z}\langle s, z - \hat{z}\rangle = 0 \text{且} \langle s, x - \hat{z}\rangle = \|x - \hat{z}\|_\circ.$$

这等价于$s \in N_z(\hat{z}) \cap \partial\|x - \hat{z}\|_\circ$.

§ 9.5 优化算法的结构

许多优化算法都是迭代算法, 从某个初始点x_0开始, 得到一个序列$\{x_k : k = 1, 2, \cdots\}$. 这个序列可能是有限或无限的, 如果是有限, 最后一个点就是问题的解; 如果是无限的, 通常序列的极限就是问题的解.

一个不错的优化算法可能满足: (1)当当前点离真解很远时, 仍可以稳定的得到这个解. (2)在离真解很近时, 收敛速度很快. 这两个分别对应**全局收敛性**和**局部收敛性**.

对于无约束优化问题, 通常算法的结构如下.

- 初始化: 初始点x_0或者算法的参数等等.
- 决定下降方向: 找d_k满足$\nabla f(x_k)^T d_k < 0$.
- 决定步长: 找α_k使得$f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)$.
- 终止: 如果满足终止准则, 停止迭代; 否则继续迭代.

这是**线搜索方法**(line search)的基本结构(先找射线, 再搜索). **信赖域方法(trust region type methods)**是不同的. 用一个简单的模型来代替复杂模型. (甩掉的高阶无穷小项要比较小)

下面用下标k来表示迭代次数, 即算法生成的点列记为$\{x_k : k = 1, 2, \cdots\}$. 为了简单起见, 把$f$在$x$的梯度记为$g(x)$, 即$g(x) = \nabla f(x)$. 也就是说$g_k := \nabla f(x_k)$, 同时记$f_k := f(x_k)$.

下面我们来研究线搜索方法的步长怎么选取. 设d_k代表在x_k点处的下降方向, 即$g_k^T d_k < 0$且迭代公式为

$$x_{k+1} = x_k + h_k d_k.$$

决定步长h_k的方法规则如下.

- **预定**h_k: 比如说可以设$h_k = h > 0$(常数步长); 或者$h_k = \dfrac{h}{\sqrt{k+1}}$等等. 好处是简单, 主要用于凸函数和Lipschitz函数问题的梯度方法.
- **精确线搜索**: 找$h_k > 0$使得
$$h_k = \arg\min_{h\geq 0} f(x_k + hd_k).$$
(注意$g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1}) = \nabla f(x_k + h_k d_k)$.) 产生的序列满足$g_{k+1}^T d_k = 0$, 即$g_{k+1}$与$d_k$正交. 在梯度下降法中, $d_k = -g_k$, 所以也有$g_{k+1}^T g_k = 0$. (每次拐弯都是一个直角, zig-zagging) 精确线搜索方法主要用于理论推导, 很少在实际应用.
- **Goldstein-Armijo线搜索规则**: 设α, β是给定参数, 满足$0 < \alpha < \beta < 1$. 确定步长h_k满足
$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \alpha h_k g_k^T d_k,$$
$$f(x_{k+1}) \geq f(x_k) + \beta h_k g_k^T d_k.$$
令$\phi(h) = f(x_k + hd_k)$, 则上述等价于
$$\phi(h_k) \leq \phi(0) + \alpha\phi'(0)h_k.(h_k\text{够大, 下降够充分})$$
$$\phi(h_k) \geq \phi(0) + \beta\phi'(0)h_k.(h_k\text{不太小})$$
- **Wolfe-Powell线搜索规则**. 设$\gamma \in (\alpha, 1)$, 确定h_k满足
$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \alpha h_k g_k^T d_k,$$
$$g_{k+1}^T d_k \geq \gamma g_k^T d_k.$$
第二个条件等价于$\phi'(h_k) \geq \gamma\phi'(0)$. 设$\hat{h}_k > 0$满足$f(x_k + \hat{h}_k d_k) = f(x_k) + \alpha\hat{h}_k g_k^T d_k$, 则
$$\hat{h}_k \nabla f(x_k + \theta_k \hat{h}_k d_k)^T d_k = f(x_k + \hat{h}_k d_k) - f(x_k) = \alpha\hat{h}_k g_k^T d_k.$$
由于$\gamma > \alpha$, 上述可以推出$h_k := \theta_k\hat{h}_k$满足第二个条件.
- **强Wolfe-Powell线搜索规则**. 设$\gamma \in (\alpha, 1)$, 确定h_k满足
$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \alpha h_k g_k^T d_k,$$
$$|g_{k+1}^T d_k| \geq \gamma |g_k^T d_k|.$$
理论上, 当$\gamma \to 0$就是精确线搜索方法.
- **回溯线搜索**. 设$0 < \delta < 1$, 初始化$h_k = \hat{h} > 0$(比如令$\hat{h} = 1$), 不断设$h_k = \delta\hat{h}$直到
$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \frac{h_k}{2} g_k^T d_k.$$
这个方法很容易实现, 经常使用.
- **曲线搜索**. 定义曲线$\{x_k(h) : h \geq 0\}$经过x_k, 满足
$$\left.\frac{df(x_k(h))}{dh}\right|_{h=0} < 0.$$
在第k次迭代, 沿着曲线$\{x_k(h) : h \geq 0\}$搜索, 确定$h_k > 0$使得某种下降条件成立.
- **不单调线搜索**. 设$0 < \delta < 1$, 初始化$h_k = \hat{h} > 0$(比如令$\hat{h} = 1$), 不断设$h_k = \delta\hat{h}$直到
$$f(x_{k+1}) \leq C_k + \frac{h_k}{2} g_k^T d_k.$$
其中$C_k = \max\{f_k, f_{k-1}, \cdots, f_{k-m+1}\}$, 且$m$是预先定义的正整数.

定理 9.5.1 *对任意的迭代格式$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$, 其中$p_k$是下降方向, α_k满足前面所述线搜索方法确定的数. 设f定义在$\mathbb{R}^n$中有下界, 且在集合$N \supset L = \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$连续可微, 其中$x_0$是迭代的初始点. 又设$f$的梯度$\nabla f$在$N$中是Lipschitz连续的, 即存在$L > 0$使得*
$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\|, \forall x, y \in N,$$
则
$$\sum_{k\geq 0} \cos^2\theta_k \|\nabla f_k\|^2 < +\infty,$$
其中$\cos\theta_k = -\dfrac{\nabla f_k^T p_k}{\|\nabla f_k\|\|p_k\|}$.

§ 9.6 梯度法

9.6.1 二次型问题的梯度法

设$A \in S^n, b \in \mathbb{R}^n$, 考虑如下二次型问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ f(x) := \frac{1}{2} x^T A x - b^T x \right\}$$

- 如果$\lambda_{\min}(A) < 0$, 则f无下界.
- 如果$\lambda_{\min}(A) = 0$, 且b在A的range space中, 则有无限多个解. (b不在range space不关心)
- 如果$\lambda_{\min}(A) > 0$, 则$x^* = A^{-1} b$.

下面设A正定, λ_1, λ_n分别是最大、最小特征值.

- 最优条件: $\nabla f(x^*) = Ax^* - b = 0$即唯一最优解是$x^* = A^{-1} b$.
- 最速下降法: $g_k = Ax_k - b$, 则

$$h_k^* = \frac{g_k^T g_k}{g_k^T A g_k} = \arg\min_{h \geq 0} f(x_k - h g_k),$$

$$x_{k+1} = x_k - h_k^* g_k.$$

- 每次迭代$g_{k+1}^T g_k = 0$会导致锯齿现象(zigzagging).
- 收敛性: $f_{k+1} - f^* \leq \dfrac{(\kappa(A) - 1)^2}{(\kappa(A) + 1)^2} (f_k - f^*)$, 其中$\kappa(A) = \dfrac{\lambda_1}{\lambda_n}$是矩阵$A$的条件数.

Barzilai-Borwein梯度法: BB步长取如下.

$$h_k^* = \frac{g_k^T g_k}{g_k^T A g_k} \text{(与前面一样)}$$

$$x_{k+1} = \begin{cases} x_k - h_k^* g_k, & k = 0, \\ x_k - h_{k-1}^* g_k, & k \geq 1, \end{cases} \text{(与前面不一样)}$$

这个方法比前面的梯度法非常好. 动机: 这个方法效仿了二阶方法! 但是它不需要求二阶导数.

注: BB步长与拟牛顿方法很像. 每次迭代只需要算一次矩阵×向量, 得到的序列$\{f(x_k)\}$是非单调的.

注: 收敛性: 存在正整数$m > 0$使得

$$\|g_k\| \leq 2(\kappa(A) - 1)^{m-1} 2^{-k/m} \|g_0\|, \forall k \geq 1.$$

BB步长的设置有很多变种, 还可以推广到非二次型问题的最小值(结合非单调线搜索).

梯度法的推导方法(两种): 考虑问题$\min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), f \in C^1(\mathbb{R}^n)$, 当前点是$x_k$.

- 方向$d_k = -\nabla f(x_k)$是下降最快的. 沿着这个方向取特定步长$h_k > 0$, 就能得到:

$$x_{k+1} = x_k - h_k \nabla f(x_k),$$

  其中如果$\nabla f(x_k) \neq 0$且h_k充分小, 则$f_{k+1} < f_k$.

- 为了得到x_{k+1}, 求f在x_k处的逼近函数的最小值.

$$f(x) \approx f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (x - x_k) + \frac{1}{2h_k} \|x - x_k\|^2.$$

  其中$h_k > 0$. 我们再次得到了$x_{k+1} = x_k - h_k \nabla f(x_k)$.

梯度法的大致步骤:

1. 取初值$x_0 \in \mathbb{R}^n, k = 0$.
2. 计算$d_k = -\nabla f(x_k) = -(Ax_k - b)$.
3. $h_k^* = \arg\min\limits_{h \geq 0} f(x_k - h \nabla f(x_k)) = \dfrac{g_k^T g_k}{g_k^T A g_k}$.
4. 计算$x_{k+1} = x_k - h_k^* \nabla f(x_k) = x_k - h_k^* (Ax_k - b)$.
5. 验证是否有$f_{k+1} - f^* \leq \dfrac{(\kappa(A) - 1)^2}{(\kappa(A) + 1)^2} (f_k - f^*)$, 其中$\kappa(A) = \dfrac{\lambda_1}{\lambda_n}$是矩阵$A$的条件数.

注: 通常把终止条件设为$\|\nabla f(x_k)\| \leq \varepsilon$, 对某个$\varepsilon > 0$. 其他终止准则也很有用.

注: 梯度方法的优点是简单且不贵(不需要算2阶导数即Hessian矩阵.)

定理 9.6.1 (确定步长的全局收敛性) 设$f \in C^1$, $\{x_k\}$是用了精确线搜索的梯度法生成的点列. 则$\{x_k\}$的极限点$\bar{x}$是f的稳定点, 即$\nabla f(\bar{x}) = 0$.

证明: page 109, theorem 3.1.2a in Yuan-Sun book.

例 9.6.1 考虑下面的二元函数

$$f(x) = f(x^{(1)}, x^{(2)}) = \frac{1}{2}(x^{(1)})^2 + \frac{1}{4}(x^{(2)})^4 - \frac{1}{2}(x^{(2)})^2.$$

确定哪些稳定点是极小值点.

解: 显然f无穷次可微, 且

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} x^{(1)} \\ (x^{(2)})^3 - x^{(2)} \end{pmatrix}, \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3(x^{(2)})^2 - 1 \end{pmatrix},$$

有三个稳定点$x_1^* = (0,0), x_2^* = (0,-1), x_3^* = (0,1)$. 而$f(x_1^*) = 0$且$f(x_1^* + \varepsilon e_2) = \dfrac{\varepsilon}{4} - \dfrac{\varepsilon^2}{2} < 0, 0 < \varepsilon << 1$, 则$x_1^*$不是局部极小值点(只是个鞍点). x_2^*, x_3^*是局部极小值点.

设用梯度法求f的极小值, 初始值是$x_0 = (1,0)$, 由于第二个分量是0, 则$\nabla f(x_0) = 0$, 从而x_1的第二个分量也是0, $\cdots$. 因此序列$\{x_k\}$的第二个分量永远是0, 则$\{x_k\}$收敛到x_1^*. 注意无论用什么步长规则, 这都是正确的.

9.6.2 Lipschitz连续函数的梯度法

考虑问题$\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$, 其中$f \in C_L^{1,1}(\mathbb{R}^n)$ (这个函数类指f的梯度为Lipschitz连续, 即$\forall x, y, \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \le L\|x-y\|$.) 且$f$有下界, f的最小值为$f(x^*)$, 即

$$f^* = f(x^*) = \min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x).$$

若$y = x - h\nabla f(x)$（下面把$\nabla f(x)$记为$g(x)$）, 则由

$$\begin{aligned} & f(y) - f(x) = \int_0^1 \nabla f(x + \tau(y-x))^T (y-x) d\tau \\ \implies\quad & f(y) - f(x) - \nabla f(x)^T(y-x) = \int_0^1 \nabla f(x+\tau(y-x))^T(y-x) - \nabla f(x)^T(y-x) d\tau \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} \|f(y) - f(x) - \nabla f(x)^T(y-x)\| &\le \int_0^1 \|\nabla f(x+\tau(y-x)) - \nabla f(x)\|\|y-x\| d\tau \\ &\le \int_0^1 L\tau\|y-x\|^2 d\tau \\ &= \frac{L}{2}\|y-x\|^2. \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} f(y) &\le f(x) + g(x)^T(y-x) + \frac{L}{2}\|y-x\|^2 \\ &= f(x) - h\|g(x)\|^2 + \frac{L}{2}h^2\|g(x)\|^2 \\ &= f(x) - h\left(1 - \frac{Lh}{2}\right)\|g(x)\|^2 \end{aligned}$$

取$h = 1/L$(让不等号右边取最小值, 则

$$f(y) = f\left(x - \frac{1}{L}\nabla f(x)\right) \le f(x) - \frac{1}{2L}\|g(x)\|^2.$$

于是有推论

推论 9.6.2 设$f \in C_L^{1,1}(\mathbb{R}^n), f(x^*) = \min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$, 则

$$\frac{1}{2L}\|\nabla(x)\|^2 \le f(x) - f(x^*) \le \frac{L}{2}\|x - x^*\|^2.$$

下面我们让$x_{k+1} = x_k - h_k g_k$, 其中$h_k > 0$满足某种线搜索条件. 可以取如下之一.

- 常数步长: $h_k \equiv h = \dfrac{2\eta}{L}, \eta \in (0,1)$:
$$f_k - f_{k+1} \geq h\left(1 - \frac{Lh}{2}\right)\|g_k\|^2 = \frac{2}{L}\eta(1-\eta)\|g_k\|^2.$$
最优选择就是$h_k \equiv h = \dfrac{1}{L}$, 即$\eta = 1/2$.
- 精确线搜索: $f_k - f_{k+1} > \dfrac{1}{2L}\|g_k\|^2$.
- Goldstein-Armijo: 第一个条件推出
$$\beta h_k\|g_k\|^2 \geq f_k - f_{k+1} \geq h_k\left(1 - \frac{Lh_k}{2}\right)\|g_k\|^2,$$
则$h_k \geq \dfrac{2(1-\beta)}{L}$(步长不会太小). 再考虑第一个条件, 可得
$$f_k - f_{k+1} \geq \alpha h_k\|g_k\|^2 \geq \frac{2}{L}\alpha(1-\beta)\|g_k\|^2.$$
- 回溯线搜索: 设第一步长为$\hat{h}$, 则$h_k \geq \min\{\hat{h}, \delta/L\}$, 这是因为
$$f(y) \leq f(x) - \frac{h}{2}\|g(x)\|^2, \forall 0 < h < \frac{1}{L}$$
可以推出$h_k \leq 1/L$, 满足回溯线搜索. 因此
$$f_k - f_{k+1} \geq \min\{\hat{h}, \delta/L\}\|g_k\|^2.$$

在上面几种线搜索情况, 存在$\omega > 0$使得
$$f_k - f_{k+1} \geq \frac{\omega}{L}\|g_k\|^2.$$
对$k = 0, 1, 2, \cdots, N$相加可得
$$\frac{\Omega}{L}\sum_{k=0}^{N}\|g_k\|^2 \leq f_0 - f_{N+1} \leq f_0 - f^*.$$
其中$f^* = f(x^*) = \min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$. 所以
$$\lim_{k\to\infty}\|g_k\| = 0.$$
此外可以推出($\|g_k\| \geq \min\limits_{0\leq k\leq N}\|g_k\|$)
$$\min_{0\leq k\leq N}\|g_k\| \leq \frac{1}{\sqrt{N+1}}\sqrt{\frac{L}{\omega}(f_0 - f^*)}.$$
不等号的右边描述了序列$\left\{\min\limits_{0\leq k\leq N}\|g_k\| : N = 0, 1, \cdots\right\}$的收敛速率.

为了得到一个点满足$\|g_k\| \leq \varepsilon$, 需要的迭代次数的上界是
$$\frac{L}{\omega\varepsilon^2}(f_0 - f^*).$$
如果没有更强的条件假设, 就不可以得到任何有关序列$\{f(x_k)\}$和$\{x_k\}$的收敛速率.

定理 9.6.3 *设f满足如下条件.*

- $f \in C_M^{2,2}(\mathbb{R}^n)$.
- *f存在局部最小值点x^*使得$\nabla^2 f(x^*) \in S_{++}^n$.*
- $\varepsilon I_n \preccurlyeq \nabla^2 f(x^*) \preccurlyeq LI_n$, *其中$0 < l \leq L < \infty$. (有必要设$f$强凸且在$x^*$附近的梯度是Lipschitz的)*
- *x_0的初始点离x^*很近, $r_0 := \|x_0 - x^*\| \leq \bar{r} := \dfrac{2l}{M}$,*

则步长为$h_k \equiv \dfrac{2}{L+l}$的梯度法收敛:
$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{\bar{r}r_0}{\bar{r} - r_0}\left(1 - \frac{2}{L/l + 3}\right)^k.$$

(定理不作要求)

9.6.3 凸的Lipschitz连续函数的梯度法

下面求解$\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$, 其中$f\in\mathcal{F}_L^{1,1}(\mathbb{R}^n)$ (代表是凸的Lipschitz函数). 设$f^* := f(x^*) = \min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x) > -\infty$. 线搜索条件取$h_k$满足

$$f(x_k - h_k g_k) \le f(x_k) - \frac{h_k}{2}\|g(x_k)\|^2.$$

令$y = x - hg(x)$, 由于

$$f(y) \le f(x) - \frac{h}{2}\|g(x)\|^2, 0 < h \le \frac{1}{L},$$

则当h充分小时, 线搜索条件可以满足.

让$x_{k+1} = x_k - h_k g_k$. 对常数步长规则$\left(0 < h_k \equiv h \le \frac{1}{L}\right)$、精确线搜索、Goldstein-Armijo搜索、回溯线搜索, 存在$h' > 0$使得$h_k > h' = 0$且$f_{k+1} \le f_k - \frac{h'}{2}\|g_k\|^2$. 由$f$的凸性,

$$f(x_k) \le f(x^*) + \nabla f(x_k)^T(x_k - x^*).$$

因此

$$f_{k+1} \le f_k - \frac{h_k}{2}\|g_k\|^2 \le f^* + g_k^T(x_k - x^*) - \frac{h_k}{2}\|g_k\|^2.$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow 0 \le f_{k+1} - f^* &\le g_k^T(x_k - x^*) - \frac{h_k}{2}\|g_k\|^2 \\
&= \frac{1}{2h_k}\left(\|x_k - x^*\|^2 - \|x_k - x^* - h_k g_k\|^2\right) \\
&= \frac{1}{2h_k}\left(\|x_k - x^*\|^2 - \|x_{k+1} - x^*\|^2\right).
\end{aligned}$$

(所以$\|x_{k+1} - x^*\| \le \|x_k - x^*\|$)

由前面假设, $h_k \ge h' > 0$, 故

$$\sum_{i=0}^{k-1}(f_{i+1} - f^*) \le \sum_{i=0}^{k-1}\frac{1}{2h_i}\left(\|x_i - x^*\|^2 - \|x_{i+1} - x^*\|^2\right) \le \frac{1}{2h'}\|x_0 - x^*\|^2.$$

进一步考虑$f_{k+1} \le f_k - \frac{h_k}{2}\|g_k\|^2 \le f_k$, 故

$$k(f_k - f^*) \le \sum_{i=0}^{k-1}(f_{i+1} - f^*) \le \frac{1}{2h'}\|x_0 - x^*\|^2$$

$$\Leftrightarrow 0 \le f_k - f^* \le \frac{\|x_0 - x^*\|^2}{2h'k}, \forall k \ge 1.$$

把上述推导写成一个结论如下:

定理 9.6.4 *用梯度法求解$\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$, 其中$f\in\mathcal{F}_L^{1,1}(\mathbb{R}^n)$有下界, $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x) \triangleq f(x^*)$. 用前面所述四种线搜索方法, 存在$h' > 0$使得*

$$f_{k+1} \le f_k - \frac{h'}{2}\|g_k\|^2, \forall k \ge 1.$$

则序列$\{x_k\}$满足

$$0 \le f_k - f^* \le \frac{\|x_0 - x^*\|^2}{2h'k}, \forall k \ge 1.$$

且

$$\|\nabla f(x_k)\| \le \sqrt{\frac{L}{h'k}}\|x_0 - x^*\|, \forall k \ge 1.$$

注: 最后一个不等式可以根据$\frac{1}{2L}\|\nabla f(x)\|^2 \le f(x) - f^*, \forall x \in \mathbb{R}^n$. 这个结果和$f \in C_L^{1,1}(\mathbb{R}^n)$的结果一样.

算法:

1. 初始化, 选$x_0 \in \mathbb{R}^n, y_0 = x_0$.
2. 对$k = 1, 2, \cdots$, 重复如下步骤. (其中步长$0 < h_k \equiv h_k \le 1/L$, 或者用其他方法确定)
   (1) $x_k = y_{k-1} - h_k\nabla f(y_{k-1})$,
   (2) $y_k = x_k + \frac{k-1}{k+2}(x_k - x_{k-1})$.

注: 这个方法不是永远下降的, 可能有$f(x_k) > f(x_{k-1})$. 但是这个方法会收敛:

$$f(x_k) - f(x^*) \leq \frac{2\|x_0 - x^*\|^2}{h'(k+1)^2}.$$

其中h'可取常数步长$h \in (0, 1/L]$或者回溯线搜索$h' = \min\{\tilde{h}, \delta/L\}$.

收敛次数的阶: $O(1/\sqrt{\varepsilon})$次迭代就能达到$f_k - f^* \leq \varepsilon$.

9.6.4 强凸Lipschitz连续函数的梯度法

$S^{1,1}_{\mu,L}(\mathbb{R}^n)$代表Lipschitz系数是$L$的强凸Lipschitz连续函数空间.

线搜索条件: 步长h_k满足$f(x_k - h_k g(x_k)) \leq f(x_k) - \frac{h_k}{2}\|g(x_k)\|^2$. 设存在$h' > 0$使得$f_{k+1} \leq f_k - \frac{h'}{2}\|g_k\|^2$. 根据$f$是强凸函数, $f(x) - f^* \leq \frac{1}{2\mu}\|g(x)\|^2, \forall x$. 因此

$$f_{k+1} - f^* \leq (1 - \mu h')(f_k - f^*).$$

注意四种线搜索方法都可以得到$\mu h' < 1$(假设$\mu < L$). 由$f_k - f^* \leq (1-\mu h')^k (f_0 - f^*)$可知$f_k \to f^*$.

结论: 对$\varepsilon > 0$, 达到$f_k - f^* \leq \varepsilon$的迭代次数满足

$$\frac{\log((f_0 - f^*)/\varepsilon)}{\log(1-\mu h')^{-1}} \approx \frac{1}{\mu h_{\min}} \times \log((f_0 - f^*)/\varepsilon).$$

注意 $\lim\limits_{x \to 0^+} \frac{\log(1-x)^{-1}}{x} = 1$.

对于$h_k \equiv 1/L = h'$, 有

$$f_k - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k (f_0 - f^*).$$

达到$f_k - f^* \leq \varepsilon$所需的迭代次数大约是$\frac{L}{\mu} \times \log((f_0 - f^*)/\varepsilon)$. 这就是为什么$Q_f = L/\mu$与$f$的条件数有关.

定理 9.6.5 (优化了界) 设$f \in S^{1,1}_{\mu,L}(\mathbb{R}^n), 0 < h_k \equiv h \leq \frac{2}{\mu + L}$. 则梯度法得到的序列$\{x_k\}$满足

$$\|x_k - x^*\|^2 \leq \left(1 - \frac{2h\mu L}{\mu + L}\right)^k \|x_0 - x^*\|^2.$$

若$h = \frac{1}{\mu + L}$, 则

$$\|x_k - x^*\| \leq \left(\frac{Q_f - 1}{Q_f + 1}\right)^k \|x_0 - x^*\|.$$

$$\|f_k - f^*\| \leq \frac{L}{2}\left(\frac{Q_f - 1}{Q_f + 1}\right)^{2k} \|x_0 - x^*\|^2.$$

这里$Q_f = L/\mu$. 上述收敛是线性收敛.

下面考虑问题$\min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), f \in S^{\infty,1}_{\mu,L}(\mathbb{R}^n), \mu > 0$, 且$Q_f = L/\mu > 1$. 如果用满足下面条件的迭代法$\mathcal{M}$来求解这个问题:

- 给定$x \in \mathbb{R}^n$, $\mathcal{M}$仅涉及到$f(x), \nabla f(x)$.
- $\mathcal{M}$生成一系列点$\{x_k\}$满足

$$x_k \in x_0 + \operatorname{span}\{\nabla f(x_0), \nabla f(x_1), \cdots, \nabla f(x_{k-1})\}, k \geq 1.$$

定理 9.6.6 对任意$x_0 \in \mathbb{R}^n$与常数$L, \mu (L > \mu > 0)$, 存在函数$f \in S^{\infty,1}_{\mu,L}(\mathbb{R}^n)$使得前面所述的任意一阶方法$\mathcal{M}$都有

$$\|x_k - x^*\| \geq \left(\frac{\sqrt{Q_t} - 1}{\sqrt{Q_t} + 1}\right)^k \|x_0 - x^*\|.$$

$$f(x_k) - f(x^{)} \geq \frac{\mu}{2}\left(\frac{\sqrt{Q_t} - 1}{\sqrt{Q_t} + 1}\right)^{2k} \|x_0 - x^*\|^2.$$

其中$f(x^*) = \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$.

§ 9.7 Newton法

Newton法是个迭代法, 用来解非线性方程: 求x^*使得$F(x^*)=0$, 其中$F:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$是非线性映射.

设当前点是x_k, Newton法用来决定下一个点x_{k+1}, 通过解下面的近似方程:

$$F(x)\approx F(x_k)+F'(x_k)(x-x_k)=0.$$

可以推出

$$x_{k+1}=x_k-(F'(x_k))^{-1}F(x_k).$$

其中$F'(x)$代表F在x处的Jacobi矩阵.

例 9.7.1 *求$\sqrt{3}$, 等价于求$f(x)=x^2-3$的根. 设$x_0\in\mathbb{R}$, 则Newton法可以得到一系列的点, 满足*

$$x_{k+1}=x_k-\frac{x_k^2-3}{2x_k},k=0,1,2,\cdots$$

若$x_0=2$, 则$x_1=1.75,x_2=1.7321428,x_3=1.7320508,\cdots$很快就收敛到$\sqrt{3}$.

若$x_0>0$, 则$\lim\limits_{k\to\infty}x_k=\sqrt{3}$; 若$x_0<0$, 则$\lim\limits_{k\to\infty}x_k=-\sqrt{3}$. 但是若$x_0=0$, Newton法会死掉!

例 9.7.2 *用Newton法求$f(x)=\dfrac{x}{\sqrt{1+x^2}},x\in\mathbb{R}$的根, 显然$x^*=0$. Newton法公式是*

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}=-x_k^3,k=0,1,2,\cdots.$$

显然$k\geq 1$时都有$x_k=(-1)^kx_0^{3k}$. 若$|x_0|<1$, 则$\lim\limits_{k\to\infty}x_k=0$; 若$|x_0|=1$, 则会振荡; 若$|x_0|>1$, 则方法发散.

定理 9.7.1 (局部收敛性) *设$f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$是非线性函数, 满足:*

- *f连续可微, f'是Lipschitz连续, 即存在$L>0$使得*

$$|f'(x)-f'(y)|\leq L|x-y|,\forall x,y\in\mathbb{R}.$$

- *存在$\rho>0$使得$|f'(x)|\geq\rho,\forall x\in\mathbb{R}$.*
- *存在$x^*\in\mathbb{R}$使得$f(x^*)=0$.*

若初始点x_0与x^*充分接近, 则由

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)},k=0,1,2,\cdots.$$

生成的序列$\{x_k\}$定义良好且收敛到x^*. 此外, 对$k=0,1,2,\cdots$有

$$|x_{k+1}-x^*|\leq\frac{L}{2\rho}|x_k-x^*|^2.\text{(2阶收敛)}$$

证明: 由于$|f'(x)|\geq\rho>0,\forall x\in\mathbb{R}$, 则序列定义良好. 对$k=0,1,2,\cdots$,有

$$\begin{aligned}|x_{k+1}-x^*|&=\left|x_k-x^*-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}\right|\\&=\left|\frac{1}{f'(x_k)}[f(x^*)-f(x_k)-f'(x_k)(x^*-x_k)]\right|\\&\leq\frac{L|x_k-x^*|^2}{2\rho}.\end{aligned}$$

设$r_0:=|x_0-x^*|<\dfrac{2\rho}{L},\theta=\dfrac{Lr_0}{2\rho}<1$. 则

$$|x_{k+1}-x^*|\leq\frac{L|x_k-x^*|^2}{2\rho}\leq\theta|x_k-x^*|<\frac{2\rho}{L},k=0,1,2,\cdots.$$

根据$|x_k-x^*|\leq\theta^k|x_0-x^*|$可知$x_k$收敛到$x^*$. □

下面设$F:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$连续可微, 我们要找$F$的根$x^*$满足$F(x^*)=0$. Newton方法的算法如下:

1. 初始化: 选$x_0\in\mathbb{R}^n$,
2. 对$k=0,1,2,\cdots$循环执行如下步骤.
   (1) 计算$F'(x_k)$（$n\times n$矩阵）
   (2) 求解关于d_k的线性方程组$F'(x_k)d_k=-F(x_k)$,
   (3) 更新$x_{k+1}=x_k+d_k$.
   (4) 若达到迭代终止准则, 则x_{k+1}就是所求的解.

注: 例子参考林成森《数值计算方法》(下册).

引理 9.7.2 (Banach引理) *设$\|\cdot\|$是$\mathbb{R}^{n\times n}$的矩阵范数, $\|I\|=1$且*

$$\|AB\|\leq\|A\|\|B\|,\forall A,B\in\mathbb{R}^{n\times n}.$$

令$E\in\mathbb{R}^{n\times n}$. 若$\|E\|<1$, 则$(I-E)^{-1}$存在且

$$\|(I-E)^{-1}\|\leq\frac{1}{1-\|E\|}.$$

另外, 若A是非奇异的, $\|A^{-1}\Delta A\|<1$, 则$A+\Delta A$非奇异, 且

$$\|(A+\Delta A)^{-1}\|\leq\frac{\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}\Delta A\|}.$$

证明: 定义$S_k=\sum_{j=0}^{k}E^j$, 先证明这是$(\mathbb{R}^{n\times n},\|\cdot\|)$空间里的Cauchy序列, 根据$(\mathbb{R}^{n\times n},\|\cdot\|)$是Banach空间, 它也收敛. 显然$(I-E)S_k=I-E^{k+1}$, 两边取极限得

$$(I-E)^{-1}=\lim_{k\to\infty}S_k=\sum_{j=0}^{\infty}E^j.$$

当然$I-E$是非奇异的, 另外$\|(I-E)^{-1}\|\leq\sum_{j=0}^{\infty}\|E\|^j=\frac{1}{1-\|E\|}$.

由于$\|A^{-1}\Delta A\|<1$, 则$(I+A^{-1}\Delta A)^{-1}$存在且

$$\begin{aligned}\|(A+\Delta A)^{-1}\|&=\|(I+A^{-1}\Delta A)^{-1}A^{-1}\|\\&\leq\|(I+A^{-1}\Delta A)^{-1}\|\|A^{-1}\|\\&\leq\frac{\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}\Delta A\|}.\end{aligned}$$

□

多变元情况下也有Newton法的局部收敛性:

定理 9.7.3 (多元的局部收敛性) *设$F:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$是非线性函数, 满足:*

- *存在$x^*\in\mathbb{R}^n$使得$F(x^*)=0$.*
- *F连续可微, 且存在$r>0$使得$J=F'$是在$B(x^*,r)$内Lipschitz连续,*

$$\|J(x)-J(y)\|\leq L\|x-y\|,\forall x,y\in B(x^*,r).$$

- *存在$\beta>0$使得$\|J(x^*)^{-1}\|\leq\beta$.*

若初始点x_0与x^*充分接近, 则由

$$x_{k+1}=x_k-J(x_k)^{-1}F(x_k),k=0,1,2,\cdots.$$

生成的序列$\{x_k\}$定义良好且收敛到x^*. 此外, 对$k=0,1,2,\cdots$有

$$\|x_{k+1}-x^*\|\leq\beta L\|x_k-x^*\|^2.(2阶收敛)$$

证明: 设$\delta:=\min\left\{r,\frac{1}{2\beta L}\right\}>0$. 设$x_0\in B(x^*,\delta)$, $J(x_0)$是非奇异的, 这是因为

$$\begin{aligned}&\|J(x^*)^{-1}(J(x_0)-J(x^*))\|\\\leq&\|J(x^*)^{-1}\|\|J(x_0)-J(x^*)\|\\\leq&\beta L\|x_0-x^*\|\\\leq&\beta L\delta\leq\frac{1}{2}.\end{aligned}$$

此外

$$\|J(x^*)^{-1}\| \le \frac{\|J(x^*)^{-1}\|}{1-\|J(x^*)^{-1}(J(x_0)-J(x^*))\|} \le 2\|J(x^*)^{-1}\| \le 2\beta.$$

且

$$\begin{aligned}\|x_1-x^*\| &= \|x_0-x^*-J(x_0)^{-1}F(x_0)\| \\ &= \|J(x_0)^{-1}[F(x^*)-F(x_0)-J(x_0)(x^*-x_0)]\| \\ &\le 2\beta\times\frac{L}{2}\|x_0-x^*\|^2 \\ &= \beta L\|x_0-x^*\|^2.\end{aligned}$$

容易知道$x_1 \in B(x^*,\delta)$. 用归纳法可证明完成. □

下面是无约束优化的Newton法, 求解$\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x), f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$二阶连续可微.

1. 初始化: 选$x_0 \in \mathbb{R}^n$,
2. 对$k=0,1,2,\cdots$循环执行如下步骤.
   (1) 计算$\nabla^2(x_k)$
   (2) 求解关于d_k的线性方程组$\nabla^2(x_k)d_k = -\nabla f(x_k)$,
   (3) 更新$x_{k+1} = x_k + d_k$.
   (4) 若达到迭代终止准则, 则x_{k+1}就是所求的解.

无约束优化的Newton方法是怎么得到的呢? 有两种:

- 问题等价于求解$\nabla f(x)=0$. 套用Newton法可得一个近似的非线性方程:
$$\nabla f(x) \approx \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x-x_k) = 0.$$
移项可得
$$x_{k+1} = x_k - [\nabla^2 f(x_k)]^{-1}\nabla f(x_k).$$
- 作二次函数逼近(Taylor展开)
$$f(x) \approx f(x_k) + \nabla f(x_k)^T(x-x_k) + \frac{1}{2}(x-x_k)^T\nabla^2 f(x_k)(x-x_k).$$

定理 9.7.4 (无约束优化Newton法的局部收敛性) *考虑问题$\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x), f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$. 下面条件满足:*

- *f有局部极小值x^*.*
- *$f \in C_M^{2,2}(B(x^*,r))$.*
- *$\nabla^2 f(x^*) \succeq \mu I_n, \exists \mu > 0$.*

若$r_0 := \|x_0-x^*\| < \frac{2\mu}{3M}$, 则Newton法生成的序列$\{x_k\}$定义良好, x_k收敛到x^*, 且对$k=0,1,2,\cdots$有$\|x_k-x^*\| < \frac{2\mu}{3M}$,

$$\|x_{k+1}-x^*\| \le \frac{3M}{2\mu}\|x_k-x^*\|^2.\text{(2阶收敛)}$$

证明: 参考ppt. □

上述方法的优点：算法是局部二阶收敛的, 当当前的点很好的时候收敛速度很快. 缺点：

- 计算$\nabla^2 f(x_k)$的计算量很大.
- 每次迭代要求解n阶线性方程组.
- 当x_k离解很远的时候，$\nabla^2 f(x_k)$可能会接近奇异.
- Newton迭代方向$-[\nabla^2 f(x_k)]^{-1}\nabla f(x_k)$不一定是下降的方向.
- 不能保证全局收敛性.

注: 很难找到一个“接近真解”的初值, 它数值敏感性很强（作一个小扰动可能会差很多）. 一般来说一开始都用鲁棒或者稳定方法来接近最优解; 然后再采用Newton法得到高精度的解.

注: 三种不同收敛阶:

- **次线性收敛**: $r_k \le \frac{c}{k^t}, c, t > 0$. 为了保证$r_k \le \varepsilon$, 算法复杂度上界(也就是计算次数)有$\frac{c^{1/t}}{\varepsilon^{1/t}}$. 这个收敛通常很慢, 每次要得到下一精度需要的计算量与之前所有计算量相比,
$$\frac{c}{(k+k_0)^t} \approx \frac{c}{10k^t} \Rightarrow k_0 \approx (10^{1/t}-1)k.$$
常数c在复杂度上界的估计起到重要作用.
- **线性收敛**: $r_k \le c(1-q)^k, c > 0, 0 < q < 1$. 为了保证$r_k \le \varepsilon$, 算法复杂度上界(也就是计算次数)有
$$\frac{\ln c + \ln(1/\varepsilon)}{\ln(1-q)^{-1}} \approx \frac{\ln c + \ln(1/\varepsilon)}{q}.$$
线性收敛很快, 每次得到下一精度需要计算量:
$$c(1-q)^{k+k_0} \approx \frac{c}{10}(1-q)^k \Rightarrow k_0 \approx \frac{\ln 10}{\ln(1-q)^{-1}}.$$
常数c在复杂度上界的估计起到的作用不大.
- **二阶收敛**: $r_{k+1} \le cr_k^2, c > 0, r_0 < 1/c$. 容易得到$r_k \le c^{2^k-1}r_0^{2^k}, \forall k \ge 1$. 为了保证$r_k \le \varepsilon$, 算法复杂度上界(也就是计算次数)有
$$\log_2 \log_2(1/\varepsilon).$$
每步迭代都能得到两次精度. 常数c只会影响到算法迭代的开始阶段.

9.7.1 截断的Newton法

下面要改正Newton法, 保持它的优点并克服缺点.

考虑$f \in S_\mu^2(\mathbb{R}^n)$, 或者至少要在下面区域是强凸的:
$$L(x_0) := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \le f(x_0)\}.$$
截断的Newton法如下:

1. 初始化.
2. 对$k = 0, 1, 2, \cdots$循环执行如下步骤.
   (1) 选Newton方向$d_k = -[\nabla^2 f(x_k)]^{-1}\nabla f(x_k)$.
   (2) 计算步长α_k, 公式
   $$f(x_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha \ge 0} f(x_k + \alpha d_k)$$
   或者用公式
   $$f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k) \ge \delta \|g_k\|^2 \cos^2\langle d_k, -g_k\rangle.$$
   (3) 更新$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.
   (4) 若达到迭代终止准则, 则x_{k+1}就是所求的解.

由于f是强凸的, 则Hessian矩阵$\nabla^2 f(x)$总是正定, Newton方向总是下降方向.

定理 9.7.5 (截断Newton法的全局收敛性) *设f二次连续可微, $\forall x_0$, f在$L(x_0)$是强凸的, 对应常数$\mu > 0$. 设$\{x_k\}$是截断Newton法生成的序列, 则x_k收敛到f的唯一局部极小值.*

证明: Check Theorems 3.2.3 and 3.2.4 in Yuan-Sun's book. □

如果$\nabla^2 f(x_k)$不是正定的, 比如Hessian矩阵有负特征值, 从而求最小值的时候没有下界. 此时让$d_k^N = [\nabla^2 f(x_k)]^{-1}\nabla f(x_k)$. 我们有两种修改:

- 修改方式1: 如果Newton方向不满足, 则取负梯度方向.
$$d_k = \begin{cases} d_k^n, & \langle d_k^N, \nabla f(x_k)\rangle \le \frac{\pi}{2} - \mu, \exists \mu > 0, \\ -\nabla f(x_k), & o.w. \end{cases}$$
- 修改方式2: 若$\nabla^2 f(x_k)$不正定, 则轻微修正它. Goldfield提出如下算法:

算法(Goldfield):

1. 记$G_k := \nabla^2 f(x_k)$. 对$1, 2, \cdots, k$执行:
   (1) 计算$\tilde{G}_k = G_k + \nu_k I$, 若$G_k$正定则取$\nu_k = 0$; 否则取$\nu_k > 0$.
   (2) 作Cholesky分解: $\tilde{G}_k = L_k D_k L_k^T$. 其中$L_k$是下三角阵.
   (3) 求解关于d_k的方程组$\tilde{G}_k d_k = -g_k$.
   (4) 更新$x_{k+1} = x_k + d_k$或者$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, 其中$\alpha_k > 0$通过线搜索方法决定.

注意只有当$\alpha_k = 1$的时候才能保持二阶收敛.

注: 除此之外还有许多修正方法.

9.7.2 信赖域方法

下面介绍**信赖域方法:** 这个方法在第k次迭代的时候要解决

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} q^{(k)}(s) = f(x_k) + g_k^T s + \frac{1}{2} s^T \nabla^2 f(x_k) s, \text{s.t.} \|s\| \le h_k.$$

其中$s = x - x_k$, 把$h_k > 0$叫信赖域的**半径**. 让s_k是信赖域问题模型之解, 注意$f(x_k + s_k) \le f(x_k)$总满足, 而h_k如下决定:

$$r_k = \frac{\text{True decrease}}{\text{Model decrease}} = \frac{f(x_k) - f(x_k + s_k)}{f(x_k) - q^{(k)}(s_k)}.$$

信赖域的算法如下:

1. 初始化：选择$x_0 \in \mathbb{R}^n, h_0 = \|g_0\|$. 对$k = 0, 1, 2, \cdots$执行
   (1) 计算$g_k, \nabla^2 f(x_k)$.
   (2) 求解关于s_k的信赖域问题.
   (3) 计算$f(x_k + s_k)$与r_k.
   (4) 计算h_{k+1}如下:

$$h_{k+1} = \begin{cases} \|s_k\|/4, & r_k < 0.25. \\ 2h_k, & r_k > 0.75, \|s_k\| = h_k. \\ h_k, & o.w. \end{cases}$$

   (5) 若$r_k \le 0$, 设$x_{k+1} := x_k$; 否则设$x_{k+1} = x_k + s_k$.
   (6) 若达到迭代终止准则, 则x_{k+1}就是所求的解.

注: 在一定条件下, 信赖域方法全局收敛于x^*(非常好), 局部收敛也很快. 若$\nabla^2 f(x^*)$是正定的, 则收敛速率是二阶的. 但是计算代价很大(没约束的问题构造了个有约束的方法, 子问题不好解).

§ 9.8 拟Newton法

约定记号:

$$\begin{aligned} g_k &= \nabla f(x_k), & G_k &:= \nabla^2 f(x_k), \\ B_k &\approx \nabla^2 f(x_k), & H_k &\approx [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \\ s_k &= x_{k+1} - x_k, & y_k &= g_{k+1} - g_k. \end{aligned}$$

这里的$\approx$不一定是每个分量的近似.

原始迭代公式是$x_{k+1} = x_k + s_k$.

- 纯Newton法: $s_k = -G_k^{-1} g_k$.
- 截断Newton法: $s_k = -\alpha_k G_k^{-1} g_k$.
- 梯度法: $s_k = \alpha_k d_k$, 其中$g_k^T d_k < 0$且$\alpha_k > 0$是满足特定条件的步长.

9.8.1 拟Newton法的基本思想

引入拟牛顿法的Motivation: 避免计算G_k, 并且只计算它的近似B_k, 要确定B_k所满足的性质, 且最好有全局收敛性以及快速的局部收敛性.

下面研究问题
$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x), x_0\text{为初始点}.$$
如果已经知道了$x_1,\cdots,x_k$, 如何决定x_{k+1}?

先对$f(x)$在x_k作一个二次型逼近$q_k(x)$:
$$q_k(x) := f_k + g_k^T(x-x_k) + \frac{1}{2}(x-x_k)^T B_k(x-x_k).$$
在Newton法中, $B_k = G_k$, 则$q_k(x)$满足
$$q_k(x_k) = f_k, \nabla q_k(x_k) = g_k, \nabla^2 q_k(x_k) = G_k.$$
而在拟Newton法中, 用B_k按某种方式逼近G_k. (上式前两个都保留, 而二阶导数不要) 选B_k满足
$$\boxed{\nabla q_k(x_{k-1}) = g_{k-1}, \Leftrightarrow B_k s_{k-1} = y_{k-1}.}$$
这个方程也叫**拟Newton方程**. 也可以用H_k来直接逼近G_k^{-1}, 此时H_k满足如下的拟Newton方程
$$H_k y_{k-1} = s_{k-1}.$$
对通常的非线性函数f, 有
$$f(x) \approx f_k + g_k^T(x-x_k) + \frac{1}{2}(x-x_k)^T G_k(x-x_k).$$
两边取导数得
$$\nabla f(x) \approx g_k + G_k(x-x_k).$$
让$x = x_{k-1}$可得
$$G_k s_{k-1} \approx y_{k-1}, \text{或写} G_k^{-1} y_{k-1} \approx s_{k-1}.$$
若f本身是二次型函数, 则
$$G_k s_{k-1} \equiv y_{k-1}, \text{或写} G_k^{-1} y_{k-1} \equiv s_{k-1}.$$
因此拟Newton方程是合理的.

拟Newton法的算法如下:

1. 选$x_0 \in \mathbb{R}^n, B_0 \in \mathbb{R}^{n\times n}$或$H_0 \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 且$\varepsilon > 0$.
2. 对$k = 0, 1, 2, \cdots$循环进行如下步骤.
   (1) 若$\|g_k\| < \varepsilon$, 停止迭代.
   (2) 求关于d_k方程组$B_k d_k = -g_k$, 或计算$d_k = -H_k g_k$.
   (3) 沿着d_k方向作线搜索, 即取特定的$\alpha_k > 0$使得$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$满足某种线搜索条件.
   (4) 更新$B_k(H_k)$得到$B_{k+1}(H_{k+1})$, 使得拟Newton方程$B_{k+1}s_k = y_k$(或$H_{k+1}y_k = s_k$)满足.

拟Newton法的优点:

- 只需要算一阶导数.
- 若$B_k(H_k)$是正定的, 则线搜索方向$d_k = -B_k^{-1}g_k$(或$d_k = -H_k g_k$)是下降方向.
- 若用H_k来逼近G_k^{-1}, 则搜索方向$d_k = -H_k g_k$的计算只需要算矩阵乘向量, 不需要解线性方程组.

B_k有如下性质: (H_k类似)

- 满足拟Newton方程：$B_k s_{k-1} = y_{k-1}$.
- B_k是对称矩阵, 因为Hessian矩阵是对称的.
- B_k是正定的, 从而$q_k(x)$有唯一的最小值, 且搜索方向
$$d_k = -B_k^{-1} g_k$$
是下降的, 这是因为$g_k^T d_k < 0$, 否则就有$g_k = 0$.

注: 上述三个性质不足以唯一确定B_k(与H_k), 因为自由度比约束条件数多很多.

9.8.2 H_k或B_k的确定

下面设G_k^{-1}可以由H_k来近似, 一开始我们有一个正定矩阵H_0, 经过k次迭代后得到如下信息:
$$x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x_k, g_0, g_1, \cdots, g_{k-1}, g_k, H_0, H_1, \cdots, H_{k-1}.$$

根据已知条件, 构造H_k使得$H_k y_{k-1} = s_{k-1}$. 直观上看, 我们希望H_k离H_{k-1}不太远, 因此我们构造用H_{k-1}的**秩二修正(rank-two update)**来构造H_k:

$$H_k = H_{k-1} + auu^T + bvv^T, a, b \in \mathbb{R}, u, v \in \mathbb{R}^n.$$

代入拟Newton方程可得

$$(au^T y_{k-1})u + (bv^T y_{k-1})v = s_{k-1} - H_{k-1} y_{k-1}.$$

显然我们可以选a, b, u, v满足

$$u = s_{k-1}, au^T y_{k-1} = 1; v = H_{k-1} y_{k-1}, bv^T y_{k-1} = -1.$$

于是有下面的公式:

$$\boxed{H_k = H_{k-1} + \frac{s_{k-1} s_{k-1}^T}{s_{k-1}^T y_{k-1}} - \frac{H_{k-1} y_{k-1} y_{k-1}^T H_{k-1}}{y_{k-1}^T H_{k-1} y_{k-1}}.} \qquad \text{(DFP-H)}$$

这个公式由Davidon(1959)提出, Fletcher和Powell(1963)推广. DFP方法第一个拟Newton方法.

注: 总结: DFP方法就是对H_k作秩二修正得到.

定理 9.8.1 *设H_{k-1}正定, 则DFP-H公式得到的H_k是正定矩阵当且仅当$s_{k-1}^T y_{k-1} > 0$.*

证明: "⇒": 设H_k是正定矩阵(则$y_{k-1} \neq 0$, 否则H_k无定义) 则由拟Newton方程$H_k y_{k-1} = s_{k-1}$可知

$$s_{k-1}^T y_{k-1} = y_{k-1}^T H_k y_{k-1} > 0.$$

"⇐": 由于H_{k-1}是正定的, 则存在非奇异矩阵R使得$H_{k-1} = R^T R$. 对任意的$0 \neq z \in \mathbb{R}^n$, 都有

$$z^T H_k z = \|u\|^2 + \frac{(s_{k-1}^T z)^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}} - \frac{(u^T v)^2}{\|v\|^2}.$$

其中$u = Rz, v = Ry_{k-1}$. 显然$\dfrac{(s_{k-1}^T z)^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \geq 0$,

由Cauchy-Schwarz不等式可得$\|u\|^2 - \dfrac{(u^T v)^2}{\|v\|^2} \geq 0$, 等号成立当且仅当$u, v$平行. 由于R是非奇异的, 则等号成立当且仅当$\exists \beta \neq 0, z = \beta y_{k-1}$, 此时容易验证

$$\frac{(s_{k-1}^T z)^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}} = \beta^2 s_{k-1}^T y_{k-1} > 0.$$

综上, $z^T H_k z > 0$, 从而H_k是正定矩阵. □

注: $s_k^T y_k > 0$这个条件很容易就能满足:

- 对于对称正定的二次型函数, $s_k^T y_k = s_k^T G s_k > 0$, (除非$s_k = 0$, 此时$g_k = 0$, 得到了精确的最优解)
- 对通常的非线性函数, 有

  $$s_k^T y_k = g_{k+1}^T s_k - g_k^T s_k,$$

  在精确线搜索中, $g_{k+1}^T s_k = 0$, 从而由s_k是下降方向可知

  $$s_k^T y_k = -g_k^T s_k > 0,$$

  而在其他线搜索, 可以追加条件$|g_{k+1}^T d_k| \leq \sigma |g_k^T d_k|$满足$(0 < \sigma < 1)$. 因此

  $$s_k^T y_k = g_{k+1}^T s_k - g_k^T s_k \geq -(1-\sigma) g_k^T s_k > 0.$$

DFP拟Newton法的性质.

1. 若f是二次型函数, 并用精确线搜索方法.
   - 算法必然会终止: $H_n = G^{-1}$, 且无论x_0是什么, DFP方法总能在n步之内找到精确解.
   - $H_i y_k = s_k, \forall k < i$.
   - 若$H_0 = I$, 则DFP法退化成共轭梯度法.
2. 对一般的非线性函数,
   - H_k保持正定性, 且搜索方向总是下降方向.
   - 在每次迭代, 从H_k计算d_k要花费$O(n^2)$计算量; 从B_k计算d_k要花费$O(n^3)$计算量.
   - 用精确线搜索方法, 若$f(x)$是凸函数, 则DFP法全局收敛.
   - 局部线性收敛速率.

定理 9.8.2 (Sherman-Morrison) 设$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$是非奇异矩阵，$u, v \in \mathbb{R}^n$. 若$1 + v^T A^{-1} u \neq 0$，则$A + uv^T$非奇异，且

$$(A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^TA^{-1}}{1 + v^TA^{-1}u}.$$

定理 9.8.3 (Sherman-Morrison-Woodburg) 设$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$是非奇异矩阵, $U, V \in \mathbb{R}^{n\times m}$. 若$I+V^TA^{-1}U$是非奇异矩阵，则$A + UV^T$非奇异，且

$$(A + UV^T)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(I + V^TA^{-1}U)^{-1}V^TA^{-1}.$$

根据Sherman-Morrison公式, 可以从H_k推导出$B_k = H_k^{-1}$.

$$\boxed{H_{k+1} = H_k + \frac{s_ks_k^T}{s_k^Ty_k} - \frac{H_ky_ky_k^TH_k}{y_k^TH_ky_k}.} \qquad \text{(DFP-H)}$$

用两次Shermann-Morrison公式可得到关于B的DFP公式.

$$\boxed{B_{k+1} = B_k + \left(1 + \frac{s_k^TB_ks_k}{s_k^Ty_k}\right)\frac{y_ky_k^T}{s_k^Ty_k} - \frac{B_ks_ky_k^T + y_ks_k^TB_k}{s_k^Ty_k}.} \qquad \text{(DFP-B)}$$

注意到拟Newton方程

$$B_{k+1}s_k = y_k, H_{k+1}y_k = s_k,$$

交换$B_{k+1} \leftrightarrow H_{k+1}$或$s_k \leftrightarrow y_k$可以得到另一个. 用这些交换代入(DFP-H)公式可得

$$\boxed{B_{k+1} = B_k + \frac{y_ky_k^T}{s_k^Ty_k} - \frac{B_ks_ks_k^TB_k}{s_k^TB_ks_k}} \qquad \text{(BFGS-B)}$$

用两次Sherman-Morrison公式或者对(DFP-B)公式作交换可得

$$\boxed{H_{k+1} = H_k + \left(1 + \frac{y_k^TH_kY_k}{s_k^Ty_k}\right)\frac{s_ks_k^T}{s_k^Ty_k} - \frac{H_ky_ks_k^T + s_ky_k^TH_k}{s_k^Ty_k}} \qquad \text{(BFGS-H)}$$

这个公式由Broyden, Fletcher, Goldfarb,Shanno四个人在1970年独立发现. 直到目前这个拟Newton方法的数值表现最好.

其他拟Newton公式:

- 对称秩一修正: (SR1)

$$\boxed{\begin{aligned} H_{k+1} &= H_k + \frac{(s_k - H_ky_k)(s_k - H_ky_k)^T}{(s_k - H_ky_k)^Ty_k} \\ B_{k+1} &= B_k + \frac{(y_k - B_ks_k)(y_k - B_ks_k)^T}{(y_k - B_ks_k)^Ts_k} \end{aligned}} \qquad \text{(SR1)}$$

- Powell的对称Broyden公式(PSB):

$$\boxed{B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_ks_k)c_k^T + c_k(y_k - B_ks_k)^T}{c_k^Ts_k} - \frac{(y_k - B_ks_k)^Ts_k}{(c_k^Ts_k)^2}c_kc_k^T} \qquad \text{(PSB)}$$

让$c_k = y_k - B_ks_k, y_k, s_k, \cdots$ 并交换$H \leftrightarrow B, s \leftrightarrow y$, 可得许多公式.

9.8.3 收敛分析

拟Newton法非常难分析. 无法建立一般的非线性目标函数的BFGS与SR1方法的全局收敛结论. 于是要添加一些关于f或者迭代公式的约束条件.

下面都假设目标函数f是二次连续可微函数, 水平集$L = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_0)\}$是凸的, 且存在正整数$m, M$使得

$$m\|z\|^2 \leq z^T G(x) z \leq M\|z\|^2, \forall z \in \mathbb{R}^n, x \in L.$$

也就是说$G(x)$是在L上的正定矩阵, 从而f有唯一的最小值点$x^* \in L$.

Wolfe线搜索条件: 步长$\alpha_k > 0$满足

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + c_1 \alpha_k g_k^T d_k,$$

$$\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq c_2 g_k^T d_k.$$

其中$0 < c_1 < c_2 < 1$.

定理 9.8.4 (BFGS方法的全局收敛性) *设B_0是任意的对称正定初始矩阵, x_0是初始点, 满足一定的条件, 在每次步长α_k满足Wolfe线搜索条件. 则由BFGS方法生成的序列$\{x_k\}$收敛到f的最小值x^*.*

证明: Nocedal and Wright's Numerical Optimization的定理6.5. □

下面假设Hessian矩阵G在x^*点是Lipschitz连续的, 即

$$\|G(x) - G(x^)\| \leq L\|x - x^*\|,$$

对任意的x靠近x^*成立, 其中$L > 0$是常数.

定理 9.8.5 (BFGS方法的局部收敛性) *设$f \in C^2$且由BFGS方法得到的序列收敛到最小值点x^*, 在x^*满足前面所述Lip条件. 又设$\sum_{k=1}^{\infty} \|x_k - x^*\| < \infty$, 则$\{x_k\}$收敛到$x^*$, 且收敛阶超线性, 即*

$$\lim_{k \to \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0.$$

BFGS方法的缺点：要存的东西太多、但收敛速度不需要太快(依然超线性).

有人发明了"有限内存的BFGS方法". 计算的时候不存储B_k, 只需要存基矩阵, 不需要更新. BFGS-H公式可以改写为

$$H_{k+1} = V_k^T H_k V_k + \rho_k s_k s_k^T,$$

其中$\rho_k = \dfrac{1}{s_k^T y_k}, V_k = I - \rho_k y_k s_k^T$. 因此

$$\begin{aligned}
H_k = & (V_{k-1}^T \cdots V_{k-m}^T) H_k^0 (V_{k-m} \cdots V_{k-1}) \\
& + \rho_{k-m} (V_{k-1}^T \cdots V_{k-m+1}^T) s_{k-m} s_{k-m}^T (V_{k-m+1} \cdots V_{k-1}) \\
& + \rho_{k-m+1} (V_{k-1}^T \cdots V_{k-m+2}^T) s_{k-m+1} s_{k-m+1}^T (V_{k-m+2} \cdots V_{k-1}) \\
& + \cdots \\
& + \rho_{k-2} V_{k-1}^T s_{k-2} s_{k-2}^T V_{k-1} \\
& + \rho_{k-1} s_{k-1} s_{k-1}^T.
\end{aligned}$$

显然我们可以不需要存储H_k就可以计算$d_k = -H_k g_k$, 我们只需要存储

$$\{(s_i, y_i) : i = k-1, k-2, \cdots, k-m\}.$$

用户可以决定m是多少. 具体算法如下: (不需要存储H_k)

1. $q \leftarrow g_k$;
2. 对$i = k-1, k-2, \cdots, k-m$, 计算$\alpha_i \leftarrow \rho_i s_k^T q, q \leftarrow q - \alpha_i y_k$.
3. 计算$r = H_k^0 q$.
4. 对$i = k-m, k-m+1, \cdots, k-1$, 计算$\beta \leftarrow \rho_i y_k^T r, r \leftarrow r + s_i(\alpha_i - \beta)$.
5. 停止计算, 得到$r = H_k g_k$.

9.8.4 BB梯度法

考虑下面的二次型函数的最小值

$$f(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx, A\text{正定}.$$

用梯度法

$$x_{k+1}=x_k-\alpha_kg_k=x_k-D_kg_k.$$

其中$D_k=\alpha_kI$. 注意D_k和前面的B_k^{-1}或H_k地位差不多. BB方法的基本想法是选α_k使得D_k差不多满足拟Newton方程. 选择方法有如下两种:

- 选α_k使得$\|D_k^{-1}s_{k-1}-y_{k-1}\|$在所有$\alpha_k\in\mathbb{R}$是最小的, 于是得到第一个BB步长公式:

$$\alpha_k^{BB_1}=\frac{s_{k-1}^Ts_{k-1}}{s_{k-1}^Ty_{k-1}}=\frac{g_{k-1}^Tg_{k-1}}{g_{k-1}^TAg_{k-1}}.$$

- 选α_k使得$\|s_{k-1}-D_ky_{k-1}\|$在所有$\alpha_k\in\mathbb{R}$是最小的, 得到第二个BB步长公式

$$\alpha_k^{BB_2}=\frac{s_{k-1}^Ty_{k-1}}{y_{k-1}^Ty_{k-1}}=\frac{g_{k-1}^TAg_{k-1}}{g_{k-1}^TA^2g_{k-1}}.$$

注意

$$\frac{1}{\lambda_{\max}(A)}\le\alpha_k^*,\alpha_k^{BB1},\alpha_k^{BB2}\le\frac{1}{\lambda_{\min}(A)}$$

其中$\alpha_k^*=\dfrac{g_k^Tg_k}{g_k^TAg_k}$是第$k$次迭代的“最好的步长”.

§ 9.9 约束优化的一阶最优条件

在没有约束的情况下很难找到全局最优解. 如果我们添加约束, 情况会有所改善, 这是因为可行集合排除了许多局部最优解, 它相对来说更容易把全局最优解从其他局部最优解挑出来.

但是, 约束条件有可能会把问题变得复杂, 例如

$$\begin{aligned}\min\quad & 0.01x_1^2+(x_2+100)^2,\\ \text{s.t.}\quad & x_2-\cos x_1\ge 0,\end{aligned}$$

加上约束条件以后, 在

$$(x_1,x_2)=(k\pi,-1),k=\pm1,\pm3,\pm5,\cdots$$

附近都有局部最优解.

与无约束的情况一样, 目标函数的光滑性与约束条件都是刻画一个解的重要因素. 但是我们要光滑性还是约束条件？其实它们要同时都有.

不光滑的函数图象有尖点. 但是这不意味着约束函数都是不光滑的.

例 9.9.1 集合$\Omega=\{x=(x_1,x_2):\|x\|_1\le1\}$是不光滑的, 但可以换成光滑描述$\Omega=\{x=(x_1,x_2): x_1\pm x_2\le1,-x_1\pm x_2\le1$. 光滑性有了.

另一方面, 不光滑的无约束问题有时候可以写成光滑的形式.

例 9.9.2 $\min\limits_{x\in\Omega}\{f(x):=\max(x^2,x)\}$等价于$\min\limits_{x,t}\{t:t\ge x,t\ge x^2,x\in\Omega\}$.

上述转化经常要进行, 看哪个更方便.

9.9.1 凸可行集合问题

下面设$f \in C^1(\mathbb{R}^n)$, 且$\Omega \subset \mathbb{R}^n$是图集. 考虑如下形式的约束问题

$$\min\{f(x) : x \in \Omega\}$$

定义$x \in \Omega$的**下降方向**为

$$\mathcal{D}_{descent}(x) := \{d \in \mathbb{R}^n : \nabla f(x)^T d < 0\},$$

$x \in \Omega$的**可行方向**为

$$\mathcal{D}_{feasible}(x) := \{d \in \mathbb{R}^n : \exists \delta > 0, \text{s.t.} x + \alpha d \in \Omega, \forall \alpha \in [0, \delta)\},$$

可以证明

$$\mathcal{D}_{feasible}(x) = \{\beta(y - x) : y \in \Omega, \beta > 0\}.$$

注: 上述目标函数$f(x)$不一定是凸的.

x^*是最优解当且仅当

$$x^* \in \Omega, \mathcal{D}_{feasible}(x^*) \cap \mathcal{D}_{descent}(x^*) = \varnothing.$$

可以证明, x^*满足

$$x^* = \text{Proj}_\Omega(x^* - \nabla f(x^*)).$$

因此, 求解前面的约束优化问题等价于解决下面的非线性方程组

$$F(x) := x - \text{Proj}_\Omega(x - \nabla f(x)) = 0.$$

我们得到了**变分不等式(variational inequality):** 对$F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, \Omega \subset \mathbb{R}^n$, 寻找$x^* \in \Omega$使得

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

注: 若$x^* \in \Omega$是$\{f(x) : x \in \Omega\}$是局部最小值点, 那么

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

下面设$f \in C^1(\mathbb{R}^n)$且$X \subset \mathbb{R}^n$非凸. 我们要求解问题

$$\min\{f(x) : x \in X\}$$

由于X是非凸的, 因此可行方向的记号没那么容易推广.

定义 9.9.1 (可行集合) *把可行集合定义为*

$$\mathcal{F} := \{x \in \mathbb{R}^n : c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}; c_i(x) \geq 0, i \in \mathcal{I}\}.$$

定义 9.9.2 (活动集, active set) *设$x \in \mathcal{F}$是可行点, 不等式约束$c_i(x) \geq 0$称作"活动的", 若在x处$c_i(x) = 0$; 称作"不活动的", 若在x处$c_i(x) > 0$. 所有等式约束都在x处是活动的. 把$x \in \mathcal{F}$处的活动集记为*

$$\mathcal{A}(x) := \mathcal{E} \cup \{i \in \mathcal{I} : c_i(x) = 0\}.$$

9.9.2 三种可行方向

定义 9.9.3 (可行方向, feasible direction) *设$x \in \mathcal{F}$. 方向$d \in \mathbb{R}^n$称作x处的可行方向, 若存在$\delta > 0$使得*

$$x + \alpha d \in \mathcal{F}, \forall \alpha \in [0, \delta).$$

把所有$x \in \mathcal{F}$处的可行方向构成的集合记为$FD(x, \mathcal{F})$

注: 可行方向主要用于凸集.

定义 9.9.4 (线性可行方向, linearized feasible direction) *设$x \in \mathcal{F}$. 设所有函数$c_i, i \in \mathcal{I}$都是可微的. 把方向$d \in \mathbb{R}^n$称为$x \in \mathcal{F}$处的线性可行方向, 若它满足*

$$\nabla c_i(x)^T d = 0, i \in \mathcal{E}; \nabla c_i(x)^T d \geq 0, i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x).$$

把所有$x \in \mathcal{F}$处的线性可行方向构成的集合记为$LFD(x, \mathcal{F})$.

定义 9.9.5 (序列可行方向, sequential feasible direction) *设$x \in \mathcal{F}$. 把方向$d \in \mathbb{R}^n$称为$x \in \mathcal{F}$处的序列可行方向, 若存在$\{d_k \in \mathbb{R}^n : k = 1, 2, \cdots\}$与$\{\delta_k > 0, k = 1, 2, \cdots\}$, 使得*

$$d_k \to d, \delta_k \to 0, x + \delta_k d_k \in \mathcal{F}, \forall k.$$

把所有$x \in \mathcal{F}$处的序列可行方向构成的集合记为$SFD(x, \mathcal{F})$.

注: 上面三个定义都是锥. $x \in \mathcal{F}$也叫$x \in \mathcal{F}$处的切锥(tangent cone).

注: $SFD(x, \mathcal{F})$不好用, 但是也是最需要的. $LFD(x, \mathcal{F})$最好用, 但依赖于$\mathcal{F}$的刻画方式.

定理 9.9.1 *设$x \in \mathcal{F}$, 设所有c_i都在x处可微, 则*

$$FD(x, \mathcal{F}) \subseteq SFD(x, \mathcal{F}) \subseteq LFD(x, \mathcal{F}).$$

注意有可能$SFD(x, \mathcal{F}) \subsetneq LFD(x, \mathcal{F})$, 比如单点集$\mathcal{F} = \{x^* = (0, 0)^T\}$可以表示为

$$\mathcal{F} = \{x \in \mathbb{R}^2 : c_i(x) \geq 0, c_2(x) \geq 0\},$$

其中$c_1(x) = 1 - x_1^2 - (x_2 - 1)^2, c_2(x) = -x_2$. 容易验证

$$SFD(x^*, \mathcal{F}) = \{(0, 0)^T\}, LFD(x^*, \mathcal{F}) = \{(d_1, 0)^T : d_1 \in \mathbb{R}\}.$$

可以加一些限制条件满足$SFD(x, \mathcal{F}) = LFD(x, \mathcal{F})$, 这个条件就叫**约束规范条件(constraint qualifications)**, 这个很难理解, 略去.

定理 9.9.2 (KKT最优条件) *设优化问题的所有函数都是C^1的, 且x^*是局部最优解, 若$SFD(x^*, \mathcal{F}) = LFD(x^*, \mathcal{F})$, 且存在$\lambda_i^* \in \mathbb{R}$, $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$, 使得下面的条件也满足.*

$$\begin{aligned}
\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) = 0,\\
c_i(x^*) = 0, i \in \mathcal{E},\\
c_i(x^*) \geq 0, i \in \mathcal{I},\\
\lambda_i^* \geq 0, i \in \mathcal{I},\\
\lambda_i^* c_i(x^*) = 0, i \in \mathcal{I}.
\end{aligned}$$

*其中$\mathcal{L}(x, \lambda)$叫**Lagrange函数**, 定义为*

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

*向量λ也叫**Lagrange乘子(multiplier)**.*

注: 定理由Kuhn和Tucker在1951年给出, 而相似的条件被Karush于1939年提出, 于是叫做KKT条件. 满足上述条件的点叫**KKT点**, 如果在没有凸性的假设下, KKT点是大多数情况下我们希望达到的点.

以线性规划问题与它的对偶问题为例:

$$\min\{c^T x : Ax = b, x \geq 0\}, \qquad 与 \qquad \max\{b^T y : A^T y \leq c\}.$$

对应的Lagrange函数为

$$\mathcal{L}(x, y, s) = c^T x - y^T(Ax - b) - s^T x.$$

KKT条件为

$$\begin{aligned}
\nabla_x \mathcal{L}(x, y, s) = c - A^T y - s = 0,\\
Ax = b, x \geq 0,\\
s_i \geq 0, s_i x_i = 0, \forall i.
\end{aligned}$$

等价于

$$\begin{aligned}
A^T y + s = c,\\
Ax = b, x \geq 0,\\
s \geq 0, s^T x = 0.
\end{aligned}$$

如果约束规范条件不成立, 那么局部最小值有可能不是KKT点(也有可能是).

定理 9.9.3 (2018期末) 考虑如下的凸优化问题

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & f(x), \\ s.t. \quad & Ax = b, \\ & c_i(x) \leq 0, \\ & i = 1, 2, \cdots, q. \end{aligned}$$

其中$f \in C^1(\mathbb{R}^n), c_i \in C^1(\mathbb{R}^n), i = 1, 2, \cdots, q$都是凸函数. $A \in \mathbb{R}^{p\times n}, b \in \mathbb{R}^p$. 若$x^*$是$KKT$点, 则它是全局最优解.

证明: 定义Lagrange函数$\mathcal{L} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^q \to \mathbb{R}$ 如下:

$$\mathcal{L}(x, \lambda, \eta) = f(x) - y^T(Ax - b) - \sum_{i=1}^{q} \eta_i c_i(x).$$

显然, 对任意固定的λ, η, $\mathcal{L}$关于x都是凸函数. 若x^*是个KKT点, 即存在$\lambda^* \in \mathbb{R}^p$与$\eta^* \in \mathbb{R}^q$, 使得

$$\begin{aligned} \nabla f(x^*) - A^T\lambda^* + \sum_{i=1}^{q} \eta_i^* \nabla c_i(x^*) = 0, \\ Ax^* = b, \\ c_i(x^*) \leq 0, \forall i = 1, 2, \cdots, q, \\ \eta^* \geq 0, \\ \eta_i^* c_i(x^*) = 0, \forall i = 1, 2, \cdots, q. \end{aligned}$$

由于$\mathcal{L}$是凸函数, 且关于x可微, 则

$$\mathcal{L}(x, \lambda^*, \eta^*) \geq \mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \eta^*) + \langle \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \eta^*), x - x^* \rangle.$$

或者写

$$\begin{aligned} & f(x) + \sum_{i=1}^{q} \eta_i^* c_i(x) \\ \geq & f(x^*) + \sum_{i=1}^{q} \eta_i^* c_i(x^*) + \langle \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \eta^*), x - x^* \rangle \\ = & f(x^*). \end{aligned}$$

因此对任意的可行点x, 都有

$$f(x) \geq f(x^*) - \sum_{i=1}^{q} \eta_i^* c_i(x) \geq f(x^*). \qquad \square$$

习题 13

1. **(2018期末)**设$\Omega \subset \mathbb{R}^n$是凸集, $f : \Omega \to \mathbb{R}$是$\Omega$上的凸函数. 证明: 凸优化问题$\min\{f(x) : \text{s.t.} x \in \Omega\}$的任意局部最优解都是全局最优解.
2. **(2018期末)**设$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$是一阶连续可微的凸函数, 且满足下面条件:
   - ∇f在$\mathbb{R}^n$上Lipschitz连续, 即存在$L > 0$使得
   $$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\|, \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$$
   - f在$x^* \in \mathbb{R}^n$处达到最小值, 即$f(x^*) = \min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x) > -\infty$.

   考虑求解$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$的梯度法: 给定初始点$x_0 \in \mathbb{R}^n$,
   $$x_{k+1} = x_k - \frac{1}{L}\nabla f(x_k), k = 0, 1, 2, \cdots.$$
   证明：存在常数$C > 0$使得$f(x_k) - f(x^*) \leq \dfrac{C}{k}, \forall k \geq 1$.