Practical Optimization Algorithms

徐 翔

数学科学学院
浙江大学

Apri 17, 2022

Chapter 第八章: 约束优化理论

简介(Introduction)

简介

- 一般形式：

$$\min_{x\in R^n} f(x), \tag{8.1}$$

$$s.t. \begin{cases} c_i(x) = 0, & i \in \mathcal{E} \\ c_i(x) \geq 0, & i \in \mathcal{I}. \end{cases} \tag{8.2}$$

- 可行集(feasible set)

$$\Omega = \left\{x | c_i(x) = 0, x \in \mathcal{E}; c_i(x) \geq 0, x \in \mathcal{I}\right\} \tag{8.3}$$

- 写成紧凑形式

$$\min_{x\in\Omega} f(x) \tag{8.4}$$

局部解和全局解

- 例1

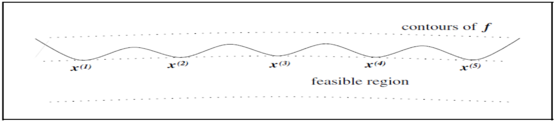
$$\min_{x\in R^n} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + 2, \quad s.t. \quad \|x\|_2^2 \geq 1$$

如果不考虑约束，显然该问题有全局最优解$x=0$。当考虑了约束之后，所有 $\|x\|_2^2=1$上的点都是全局最优解。当$n\geq 2$时，这样的解有无穷多个。

- 例2

$$\min \, (x_2+100)^2 + 0.01x_1^2, \quad s.t. \quad x_2 - \cos x_1 \geq 0.$$

如果不考虑约束，显然该问题有全局最优解$x=(0,-100)^T$。当考虑了约束之后，在$x^{(k)}=(k\pi,-1)^T$, $k=\pm1,\pm3,\cdots$附近都是局部最小值点。



局部解和全局解

定义

1. 向量x^*被称为是(8.4)的一个局部最优解：若 $x \in \Omega$，且存在x^*的邻域$\mathcal{N}$，满足$x \in \mathcal{N} \cap \Omega$时，有$f(x) \geq f(x^*)$。
2. 向量x^*被称为是(8.4)的一个严格局部最优解: 若 $x \in \Omega$，且存在x^*的邻域$\mathcal{N}$，满足$x \in \mathcal{N} \cap \Omega$且$x \neq x^*$时，有$f(x) > f(x^*)$。
3. 向量x^*被称为是(8.4)的一个孤立局部最优解: 若 $x \in \Omega$，且存在x^*的邻域$\mathcal{N}$，满足x^*是$\mathcal{N} \cap \Omega$中唯一的局部最优解。

光滑性

- 光滑性可以保证目标函数和约束条件具有合理的可预测性，可以在算法中选取好的搜索方向。
- 即便全部约束函数都是光滑的，也不表示可行域一定有光滑的 边界。

$$\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| \leq 1.$$

$$x_1 + x_2 \leq 1, x_1 - x_2 \leq 1, -x_1 + x_2 \leq 1, -x1 - x2 \leq 1.$$

显然，以上约束函数每一个都是光滑的，但是它们构成的可行域实际是一个菱形。

- 不光滑的无约束优化问题，有时可以转为等价的光滑约束问题。

$$\min f(x) = \max(x^2, x).$$

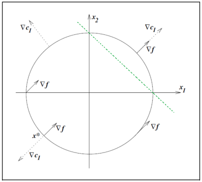
它的目标函数有两个尖点，位置在$x=0$和$x=1$，而$x^*=0$是全局最优解。 等价地，可以将其转为光滑的约束优化问题:

$$\begin{aligned} \min \quad & t, \\ s.t. \quad & t \geq x, t \geq x^2. \end{aligned}$$

第一个例子

例1：一个等值约束

$$\begin{array}{ll} \min & x_1 + x_2 \\ s.t. & x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0. \end{array}$$



- 全局最优解$(-1,-1)^T$
- x^*的一个性质是∇f和∇c_1平行，但方向相反，这一点是必要条件吗?
- 我们在c_1上取任何非x^*的点，让x保持在可行域内部的线性方向都有两个，一个 顺时针，一个逆时针。这两个方向中，总有一个是和$-\nabla f$ 成锐角的，也即是f的下降方向。直到x^*点，∇c_1和f平行，这时沿c_1的任何移动方向，都和∇f成直角，即f不会下降。
- x^*真正满足的条件是：

$$\left\{x^*\text{处的可行方向}\right\} \cap \left\{f\text{在}x^*\text{处的下降方向}\right\} = \emptyset$$

第一个例子

严格化分析

- $\forall x \in \Omega$，保持x停留在Ω内部的可行方向d，满足 $c_1(x+d)=0.$
- 由泰勒展开知道，有$0=c_1(x+d)\approx c_1(x)+\nabla c_1(x)^T d=\nabla c_1(x)^T d$
- 若x不是f的局部最小值点，则从x出发，在可行域内部必有f的下降方向，同样在Taylor展开下，有

$$0>f(x+d)-f(x)\approx \nabla f(x)^T d \rightarrow \nabla f(x)^T d<0.$$

- 于是，如果以上两个同时成立，我们就可以找到一个从x出发的方向d，沿此方向：(1) $x+d$停留在Ω内部；(2) $f(x)$继续下降。
- 如果x是问题的解，那么上述两点一定不能同时成立。这其实已经给了我们一阶必要性条件：唯有∇c_1和 ∇f 平行，才不会出现既可行又下降的方向，即

$$\nabla f(x)=\lambda \nabla c_1(x), \lambda \in R.$$

。

第一个例子

严格化分析

- 引入Lagrange乘子函数

$$L(x,\lambda_1) := f(x) - \lambda_1 c_1(x)$$

- 则平行条件等价于

$$\nabla_x L(x,\lambda_1) = \nabla f(x) - \lambda_1 \nabla c_1(x) = 0$$

- 于是，非约束优化问题的解的必要条件可以表述为：

$$\text{存在}\lambda_1^* \in R,\ \text{使得}\nabla_x L(x^*,\lambda_1^*) = 0$$

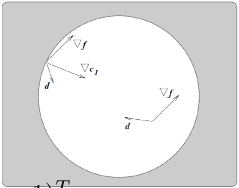
这里λ_1称为约束条件$c_1(x)=0$对应的Lagrange乘子(Lagrange Multiplier)。

- 显然，这个条件是非充分的。比如该例子还有一个可行点$(1,1)^T$也满足这个条件，但是它是极大值点。而且λ_1^*的符号并不能说明x^*的极值性质，因为$c_1(x)=x_1^2+x_2^2-2=0$ 或者 $c_1(x)=2-x_1^2-x_2^2=0$。从而$x^*=(-1,-1)^T$处的λ_1^*值从$-\frac{1}{2}$变为$\frac{1}{2}$。

第二个例子

例2：一个不等值约束的优化

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1 + x_2 \\ s.t. \quad & 2 - x_1^2 - x_2^2 \geq 0 \end{aligned}$$



- 可行域变为圆的内部和边界，最优解还是$(-1,-1)^T$。
- $\forall x \in \Omega$，现在确保$x+d$留在Ω内的搜索方向在泰勒展开中：

$$0 \leq c_1(x+d) \approx c_1(x) + \nabla c_1(x)^T d$$

- 现在无法消去第一项$c_1(x)$，完整的一阶可行方向条件是

$$c_1(x) + \nabla c_1(x)^T d \geq 0$$

- 使得f下降的方向仍然是

$$\nabla f(x)^T d < 0.$$

第二个例子

例2： 分两种情况讨论

- x在Ω内部，即$c_1(x) > 0$。此时任何d都是可行方向，如果从x^*出发的方向都不能同时满足两个条件（即交集是空集）），那么只剩下唯一的可能

$$\nabla f(x^*) = 0$$

这是无约束问题下对应的必要条件。

- x在Ω边界，也就是$c_1(x) = 0$。此时又回到第一例子的情形，如果x出发还存在优化的可能方向d，必须满足

$$\nabla f(x)^T d < 0, \nabla c_1(x)^T d \geq 0.$$

此时第一不等式限定了半个平面，第二个不等式限定了另外半个平面（包含边界）。要使得两个半平面相交为空集，唯有∇f和 $\nabla c_1(x)$是同一个方向(比平行更严格)，即

$$\nabla f(x) = \lambda_1 \nabla c_1(x), \ \lambda_1 \geq 0$$

第二个例子

总结以上两种情况，可以统一地表示为：

- 当x^*没有可行的下降方向时，存在λ_1^*，使得

$$\nabla_x L(x^*, \lambda_1^*) = 0,\ \lambda_1^* \geq 0$$

并且

$$\lambda_1^* c_1(x) = 0$$

- 这个条件被称为互补性条件(complementarity condition)。它要求λ_1^*和$c_1(x^*)$至少有一个为零。前者对应情况x^*落在Ω内，后者对应情况x^*落在Ω边界上。
- 如果对于一个可行点x, 其对应的不等值约束$c_i(x) \neq 0$，那么实际上这个约束对x是无效的。只有正好处在边界的约束，对一个点是否是最优值点的判定才会有意义。

活跃集

定义: 活跃集(active set，也称为有效集、积极集)

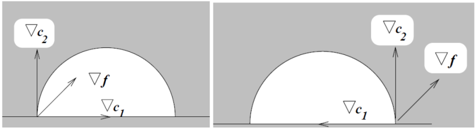
下标集合$\mathcal{A}(x)$称为点x的活跃集(也被称为积极集)，是有全部等值约束的下标、在x点满足$c_i(x)=0$的不等值约束的下标组成。即

$$\mathcal{A}(x)=\mathcal{E}\cup\{i\in\mathcal{I}|c_i(x)=0\}.$$

第三个例子

例3：两个不等式约束

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1 + x_2 \\ s.t. \quad & 2 - x_1^2 - x_2^2 \geq 0 \\ & x_2 \geq 0. \end{aligned}$$



- 显然最优解$x^* = (-\sqrt{2}, 0)^T$。
- 两个约束都是活跃的。
- 如果它不是一个最优值点（意味着从它出发还有进一步可以下降的方向），那么必然有d方向满足

$$\nabla c_i(x)^T d \geq 0, \quad \nabla f(x)^T d < 0.$$

- 显然最优解$x^* = (-\sqrt{2}, 0)^T$ 是不存在这个方向的。 因为满足条件的方向必须在 $\nabla c_1(x^*)$和 的$\nabla c_2(x^*)$的夹角内，但是在此范围内的所有方向满足$\nabla f(x^*)^T d > 0$，都是严格上升方向。

第三个例子

- 定义Lagrange乘子函数

$$L(x,\lambda) = f(x) - \lambda_1 c_1(x) - \lambda_2 c_2(x)$$

这里$\lambda = (\lambda_1, \lambda_2)^T$是Lagrange乘子。

- $\nabla f(x)$和$c_i(x)$的关系可以表示为：存在$\lambda^* \geq 0$，使得

$$\nabla_x L(x^*, \lambda^*) = 0$$

并且满足互补性条件

$$\lambda_1 c_1(x^*) = 0, \quad \lambda_2^* c_2(x^*) = 0.$$

- 互补性条件:
一个约束要么是活跃的($c_i(x) = 0$)，因此会在$\nabla_x L(x,\lambda) = 0$中参与；要么是不活跃的，此时它在$\nabla_x L(x,\lambda) = 0$中实际上是不存在的。

约束条件“资格”(Constration Qualification)

约束条件“资格”(Constration Qualification)

- 在前面的分析中，我们在考虑是否存在可行的下降方向时，是用一阶泰勒展开分析的。
- 这需要假设一阶线性展开能够捕捉可行域的几何性质。如果在x附近，一阶泰勒展开式与可行域相差巨大，那么我们不可能期望一阶线性逼近能够很好地近似原问题。
- 因此我们需要对活跃的约束条件c_i在x处的性质，保证线性逼近能够很好地近似真实的可行域。
- 约束条件"资格"：是一些假设条件，使得可行集Ω和一阶线性逼近在x^*的领域内很接近。

切锥(Tangent Cone)

定义：切锥

- 给定一个可行点$x \in \Omega$， 我们称$\{z_k\}$是一列逼近x的可行序列，如果对任意的充分大的k, 满足$z_k \in \Omega$ 且 $z_k \to x$。
- “切向”是可行序列的极限方向。
- 严格的数学定义： 设$x^* \in \Omega$, $d \neq 0$且$d \in R^n$, 如果存在$\delta > 0$使得

$$x^* + t\ d \in \Omega,\ \forall\ t \in [0, \delta]$$

  则称d是Ω在x^*处的线性化方向。
- 在x^*处所有的切向组成的集合称为切锥(Tangent Cone)， 记为$T_\Omega(x^*)$。
- 从切锥的定义可以看出，这个定义跟Ω的代数形式无关，只能Ω的几何性质有关。

线性化可行方向

定义：线性化可行方向

给定一个可行点$x \in \Omega$以及活跃集$\mathcal{A}$，线性可行方向集

$$\mathcal{F}(x) = \left\{ d \mid d^T \nabla c_i(x) = 0, \forall i \in \mathcal{E};\ d^T \nabla c_i(x) \geq 0, \forall i \in \mathcal{A}(x) \cap \mathcal{I} \right\}.$$

显然，线性化可行方向集仅依赖于约束条件c_i，$i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$。

约束条件限制

- 约束条件限制是一些假设，能够保证“切锥”$T_\Omega(x)$和“线性可行方向集”$\mathcal{F}(x)$是相似的。
- 这些限制条件，可以保证$\mathcal{F}(x)$(由$c_i(x)$一阶线性化构造)能够很好地捕捉到Ω在x处的本质几何性质(essential geometric features)。
- 绝大多数约束条件限制都可以保证 $\mathcal{F}(x) = T_\Omega(x)$。

约束条件限制

两种限制

- 线性无关约束限制(LICQ): 给定一个可行点$x \in \Omega$以及活跃集$\mathcal{A}(x)$，如果活跃的约束条件的梯度$\nabla c_i(x)$, $i \in \mathcal{A}(x)$是线性无关的。
- Mangasarian-Fromovitz约束限制(MFCQ): 存在一个向量 $w \in \mathcal{R}^n$使得

$$
\begin{aligned}
\nabla c_i(x^*)^T w &= 0, \quad \forall i \in \mathcal{E}, \\
\nabla c_i(x^*)^T w &> 0, \quad \forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I},
\end{aligned}
$$

  并且所有的等值约束条件的梯度$\{\nabla c_i(x^*), \ i \in \mathcal{E}\}$是线性无关的。
- 特殊情况：如果所有的活跃约束$c_i(\cdot)$, $i \in \mathcal{A}(x^*)$都是线性函数，那么显然有$\mathcal{F}(x^*) = T_\Omega(x^*)$。

一阶最优性条件(First-Order Necessary Conditions)

拉格朗日函数

定义 Lagrangian Function

拉格朗日函数

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

这里λ_i称为$c_i(x)$的拉格朗日乘子(Lagrange Multiplier)。

一阶最优性条件(First-Order Necessary Conditions)

定理（KKT条件, Karush-Kuhn-Tucker）

假设x^*是一个局部最优解并且在x^*处满足LICQ条件。则存在一个拉格朗日乘子向量λ^*，每个分量是λ_i, $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$，使得如下条件满足

$$
\begin{aligned}
\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) &= 0, & \\
c_i(x^*) &= 0, & \forall\ i \in \mathcal{E}, \\
c_i(x^*) &\geq 0, & \forall\ i \in \mathcal{I}, \\
\lambda_i^* &\geq 0, & \forall\ i \in \mathcal{I}, \\
\lambda_i^* c_i(x^*) &= 0, & \forall\ i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}.
\end{aligned}
$$

Remark: 通常来说，对于给定的优化问题及局部最优解x^*，可能存在很多个λ^*满足上述KKT条件。但是当LICQ满足时，最优的λ^*是唯一的。

互补性条件(Complementary Condition)

- KKT条件中最后一个条件$\lambda_i^* c_i(x^*) = 0$称为互补性条件。这表明要么约束条件是活跃的，要么$\lambda_i^* = 0$，或者两者同时成立。
- 如果约束条件不是活跃的，那么对应的Lagrange乘子为0，也就是对应的Lagrangian函数可以简化为：

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*).$$

- 严格互补条件 给定一个局部最优解x^*和相应的λ^*满足KKT条件，如果对所有的不等式约束里λ_i^*和$c_i(x^*)$中只有一个为0，即对于$i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)$有$\lambda_i^* > 0$， 这样的情况，我们称为满足严格互补条件。
- 显然，如果满足严格互补条件，可以使得算法比较容易确定活跃集$\mathcal{A}(x^*)$，而且算法收敛比较快。

拉格朗日乘子λ_i的意义

$$\text{KKT条件中第一个条件: } \nabla f(x^*) = \sum \lambda_i^* \nabla c_i(x^*),\ i \in \mathcal{A}(x^*)$$

可以看出λ_i^*的实际意义是$\nabla c_i(x^*)$在$\nabla f(x^*)$中的权重。

- λ_i^*越大，说明第i个约束在f无法下降中起的作用也越大，对算法也越敏感。极端情况$\lambda_i^* = 0$，说明约束没起作用。
- 如果对$c_i(x) \geq 0$施加小扰动，变为$c_i(x) \geq -\varepsilon\|\nabla c_i(x^*)\|$，那么活跃的约束变为

  $$-\varepsilon\|\nabla c_i(x^*)\| = c_i(x^*(\varepsilon)) - c_i(x^*) \approx (x^*(\varepsilon) - x^*)^T \nabla c_i(x^*)$$

  这里$x^*(\varepsilon)$对应扰动后的新解。
- 对于$j \neq i$，扰动后c_j不变，有

  $$0 = c_j(x^*(\varepsilon)) - c_j(x^*) \approx (x^*(\varepsilon) - x^*)^T \nabla c_j(x^*).$$

  于是对$f(x^*(\varepsilon))$，有

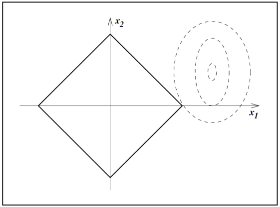
  $$f(x^*(\varepsilon)) - f(x^*) \approx (x^*(\varepsilon) - x^*)^T \nabla f(x^*) = \sum \lambda_j^* (x^*(\varepsilon) - x^*)^T \nabla c_j(x^*) \approx -\varepsilon \lambda_i^* \|\nabla c_i($$

  进而$\frac{df(x^*(\varepsilon))}{d\varepsilon} = -\lambda_i^*\|\nabla c_i(x^*)\|$。因此，$\lambda_i^*\|\nabla c_i(x^*)\|$是第$i$个约束对解目标值的敏感影响因子。

一个例子

例4：考虑如下的优化问题

$$
\begin{aligned}
\min \quad & (x_1-\frac{3}{2})^2+(x_2-\frac{1}{2})^4 \\
s.t. \quad & 1-x_1-x_2\geq 0 \\
& 1-x_1+x_2\geq 0 \\
& 1+x_1-x_2\geq 0 \\
& 1+x_1+x_2\geq 0.
\end{aligned}
$$



- 最优解是$(1,0)^T$。第一个和第二个约束条件是活跃的，记为c_1，c_2。
- $$\nabla f(x^*)=\begin{bmatrix}-1\\-\frac{1}{2}\end{bmatrix},\ \nabla c_1(x^*)=\begin{bmatrix}-1\\-1\end{bmatrix},\nabla c_2(x^*)=\begin{bmatrix}-1\\1\end{bmatrix}$$
  $$\lambda^*=(\frac{3}{4},\frac{1}{4},0,0)^T$$

证明一阶最优性条件(KKT)

证明主要分为三步。第一步是“切锥”和“一阶可行方向集”之间的关系，第二步是基本必要条件，第三步是Farkas引理，如何判断一个方向落在一个锥里。

引理1

假定x^*是一个可行点，则有

1. $T_\Omega(x^*) \subset \mathcal{F}(x^*)$;
2. 若在x^*点有LICQ成立，则$T_\Omega(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$

引理2

假定x^*是一个局部最优解，则有

$$\nabla f(x^*)^T d \geq 0, \text{ 对于任意的} d \in T_\Omega(x^*)$$

即：切锥里所有的方向都不是下降方向。

引理1的证明

先证明第一个结论$T_\Omega(x^*) \subset \mathcal{F}(x^*)$

- 假设c_i是活跃的约束条件，$i = 1, \cdots, m$。对于任意的$d \in T_\Omega(x^*)$，令序列$\{z_k\}$和$\{t_k > 0\}$满足

$$\lim_{k\to\infty} \frac{z_k - x^*}{t_k} = d, \text{ 即 } z_k = x^* + t_k d + o(t_k).$$

- 对于等式约束$i \in \mathcal{E}$，有

$$0 = \frac{c_i(z_k)}{t_k} = \frac{c_i(x^*) + t_k \nabla c_i(x^*)^T d + o(t_k)}{t_k} = \nabla c_i(x^*)^T d + \frac{o(t_k)}{t_k}$$

两边同取极限可以得到 $\nabla c_i(x^*)^T d = 0$.

- 对于不等式约束$i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)$，有

$$0 \le \frac{c_i(z_k)}{t_k} = \frac{c_i(x^*) + t_k \nabla c_i(x^*)^T d + (t_k)}{t_k} = \nabla c_i(x)^T d + \frac{o(t_k)}{t_k}$$

两边同取极限可以得到 $\nabla c_i(x^*)^T d \ge 0$.

综上所述，$d \in \mathcal{F}(x^*)$ 即： $T_\Omega(x^*) \subset \mathcal{F}(x^*)$。

引理1的证明

再证明引理1的第二个结论：如果满足LICQ，则$T_\Omega(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$

- 所有的活跃约束的梯度向量$\nabla c_i(x^*)$可以组成一个矩阵，记为$A(x^*) := [\nabla c_i(x^*)]^T,\ i \in \mathcal{A}(x^*)$。这最多是一个$m \times n$的矩阵。
- 由于满足LICQ，则$A(x^*)$行满秩。可以找到$A(x^*)$的核空间的一组基函数$Z \in \mathbb{R}^{n\times(n-m)}$， 即 $A(x^*)Z = 0$。
- 对于$\mathcal{F}(x^*)$中的任意方向d，定义如下的映射$R : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$

$$R(z,t) = \begin{bmatrix} c(z) - tA(x^*)d \\ Z^T(z - x^* - td) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- 这里断言，当$t_k > 0$趋于0，上述方程解存在记为z_k，则z_k和t_k满足渐进可行序列的要求，即$\lim\limits_{k\to\infty} \frac{z_k - x^*}{t_k} = d$。(下面分两小步说明)

引理1的证明

- 第一小步，即z_k是可行的。当$t=0$，$z=x^*$时,R对z的Jacobi矩阵为$[A(x^*)^T; Z]^T$是非奇异的，所以根据隐函数存在定理，对于充分小的t_k，方程组存在唯一的解z_k。这些解z_k满足$c_i(z_k)=t_kA(x^*)d$。
当$i\in\mathcal{E}$时， 即 $c_i(z_k)=t_k\nabla c_i(x^*)^Td=0$。
当$i\in\mathcal{A}(x^*)\cap\mathcal{I}$时，$c_i(z_k)=t_k\nabla c_i(x^*)^Td\geq 0$。
- 第二小步：对于可行的z_k，满足$\lim\limits_{k\to\infty}\frac{z_k-x^*}{t_k}=d$。对于$R(z_k,t_k)$应用泰勒展开可以得到：

$$
\begin{aligned}
0=R(z_k,t_k) &= \begin{bmatrix} c(z_k)-t_kA(x^*)d \\ z^T(z_k-x^*-t_kd) \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} c(x^*)+\nabla c(x^*)^T(z_k-x^*)+o(\|z_k-x^*\|)-t_kA(x^*)d \\ z^T(z_k-x^*-t_kd) \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} A(x^*) \\ Z^T \end{bmatrix}(z_k-x^*-t_kd)+o(\|z_k-x^*\|)
\end{aligned}
$$

两边同除以t_k，并求极限可得：

$$\lim_{k\to\infty}\frac{z_k-x^*}{t_k}=d$$

引理2的证明

引理2

假定x^*是一个局部最优解，则有

$$\nabla f(x^*)^T d \geq 0,\ \text{对于任意的} d \in T_\Omega(x^*)$$

证明：（使用反证法）。

- 假设存在$d \in T_\Omega(x^*)$满足$\nabla f(x^*)^T d < 0$，则可以构造序列$t_k \to 0^+$，$z_k - x^* = t_k d + o(t_k)$，满足

  $$f(z_k) - f(x^*) = \nabla f(x^*)^T (z_k - x^*) + o(\|z_k - x^*\|) = t_k \nabla f(x^*)^T d + o(t_k)$$

  如果$f(x^*)^T d < 0$，那么$f(z_k) - f(x^*) < 0$，这与x^*是局部最小值点是矛盾的。

第三个引理：Farkas引理

我们先定义一般意义下的几何锥

$$K = \{By + Cw \mid y \geq 0\}$$

其中B和C分别是$n \times m$和$n \times p$阶矩阵，$y \in \mathbb{R}^m$和$w \in \mathbb{R}^p$是对应维数的向量。(如何判断一个向量不在锥K里？)

Farkas引理

如上定义锥K。对于任意的一个向量$g \in \mathbb{R}^n$，要么$g \in K$，否则必定可以存在一个向量$d \in \mathbb{R}^n$满足

$$g^T d < 0, \;\; B^T d \geq 0, \;\; C^T d = 0.$$

我们首先说明两种情况不能同时成立(反证法)。
如果能同时成立，那么$g \in K$，即存在$y \geq 0$和w满足 $g = By + Cw$。同时又存在$d \in \mathbb{R}^n$，满足$g^T d < 0, \; B^T d \geq 0, \; C^T d = 0$，则容易计算$d^T g$得到如下的矛盾：

$$0 > d^T g = d^T(By + Cw) = (B^T d)^T y + (C^T d) w \geq 0$$

下面接着构造性地证明如果$g \notin K$，必须要存在d满足$g^T d < 0, \; B^T d \geq 0, \; C^T d = 0$。

第三个引理：Farkas引理

下面接着构造性地证明如果$g \notin K$，必须要存在d满足$g^T d < 0,\ B^T d \geq 0,\ C^T d = 0$。

- 令 $\hat{s} = \arg\min_{s \in K} \|s - g\|_2^2$ 是g在 K中的最佳逼近元，则$\hat{s}$和$\hat{s} - g$是垂直的，即$\hat{s}^T(\hat{s} - g) = 0$。
- 构造$d = \hat{s} - g$，验证引理中的结论。
  (1) $g^T d = (\hat{s} - d)^T d = \hat{s}^T d - d^T d = \hat{s}(\hat{s} - g) - d^T d = -\|d\|^2 < 0$
  (2) 由于K是一个凸集，假定$s \in K,\ \theta \in [0, 1]$，则$\hat{s} + \theta(s - \hat{s})$是凸组合也属于$K$，因此$g$与该向量的距离肯定比$g$与$\hat{s}$的距离要大。即

$$\|(\hat{s} + \theta(s - \hat{s})) - g\|_2^2 \geq \|\hat{s} - g\|_2^2$$

  由此可以推出$s^T(\hat{s} - g) \geq 0$，即 $s^T d \geq 0$ 于是
  $d^T(By + Cw) \geq 0,\ \forall\ y \geq 0,\ w \in \mathbb{R}^n$. 取$y = 0$，有$(C^T d)^T w \geq 0$，由$w$的任意性，只有$C^T d = 0$。
  (3) 再令$w = 0$，则可以得到$(B^T d)^T y \geq 0,\ \forall y \geq 0$，可以推出$B^T d \geq 0$。

证明KKT条件

我们定义如下的锥N,

$$K=\left\{\sum_{i\in\mathcal{A}(x^*)\cap\mathcal{I},\lambda_i\geq 0}\lambda_i\nabla c_i(x^*)+\sum_{i\in\mathcal{E}}\lambda_i\nabla c_i(x^*)\right\}$$
$$g=\nabla f(x^*)$$

显然，对于g，要么$g\in K$，即

$$\nabla f(x^*)=\sum_{i\in\mathcal{A}(x^*)}\lambda_i\nabla c_i(x^*)=A(x^*)^T\lambda^*,\ \text{其中}\lambda_i\geq 0,\ \forall i\in\mathcal{A}(x^*)\cap\mathcal{I}$$

要么$g\notin K$，即存在某个方向满足

$$\nabla f(x^*)^Td<0,\quad \nabla c_i^Td\geq 0, i\in\mathcal{A}(x^*)\cap\mathcal{I},\quad \nabla c_i^Td=0, i\in\mathcal{E}.$$

也就是$d\in\mathcal{F}(x^*)$，而且d是f的下降方向。
最后，根据引理2，我们知道当x^*是局部最优解时，第二种情况是不能出现的，所以只能出现第一种情况，即证明了KKT条件。

二阶最优性条件(Second Oder Optimality Conditions)

二阶条件

- KKT条件中仅考虑了∇c_i和∇f的性质。
- 如果在x^*处的切锥里存在这样的一个方向$w \in \mathcal{F}(x^*)$，满足$w^T\nabla f(x^*) = 0$，如何判断x^*是不是一个局部最优解？此时要判断$f(x)$沿着w到底是不是可以继续下降，要看f的二阶导数(tiebreaking)!
- 定义一个关键锥(critical cone)

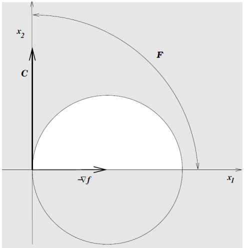
$$\mathcal{C}(x^*, \lambda^*) = \left\{ w \in \mathcal{F}(x^*) \mid \nabla c_i^T w = 0, \ \forall\, i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}, \ \lambda_i > 0 \right\}.$$

- 注：为什么$\mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$中只需要考虑$\lambda_i > 0$的部分？这是因为当考虑$w^T\nabla f(x^*) = \sum_{i\in\mathcal{A}(x^*)} w^T\lambda_i\nabla c_i(x)$等于0时，有很多部分已经自动为0，比如
  (1) 当$\forall i \in \mathcal{E}$时，$\nabla c_i(x^*)^T w = 0.$
  (2) 当$\forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$而且$\lambda_i = 0$时，$\nabla c_i(x^*)^T w$**可以** $\geq 0.$
  (3) 当$\forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$而且$\lambda_i > 0$时，$\nabla c_i(x^*)^T w$**必须** $= 0.$
  也就是说 $w^T\nabla f(x^*) = 0$，不确定的方向就是关键锥里的方向。

二阶条件

例5：考虑如下的优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1 \\ s.t. \quad & x_2 \geq 0 \\ & 1-(x_1-1)^2 - x_2^2 \geq 0 \end{aligned}$$



- 全局最优解是$x^* = (0,0)^T$, $\mathcal{A}(x^*) = \{1,2\}$, $\lambda^* = (0,0.5)^T$。
- 注意到，在x^*点处，活跃集中的梯度分别是$\nabla c_1(x^*) = (0,1)^T$, $\nabla c_2(x^*) = (2,0)^T$，满足LICQ条件。
- $\mathcal{F}(x^*) = \{d | d \geq 0\}$。注意到在$\mathcal{F}$中，都是$f$非减的方向，这与$x^*$是局部最优解并不矛盾。但是要判定$x^*$就是最优解，还不够。
- 因为在关键锥内的方向上，也就是 $\mathcal{C}(x^*, \lambda^*) = \{(0, w_2) | w_2 \geq 0\}$上，$\nabla f(x^*) = 0$，$f$到底是增还是减，不好判断。

二阶必要性条件

定理(二阶必要性条件)

假设x^*是局部最优解，且LICQ成立，λ^*是对应的拉格朗日乘子，则

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

证明：令$z_k = x^* + t_k w + o(t_k^2), w \in \mathcal{C}(x^*,\lambda^*)$，主要使用泰勒展开到第二阶

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(z_k,\lambda^*) &= \mathcal{L}(x^*,\lambda^*) + (z_k - x^*)^T\nabla_x\mathcal{L}(x^*,\lambda^*) \\
&\quad + \frac{1}{2}(z_k - x^*)\nabla^2_{xx}\mathcal{L}(x^*,\lambda^*)(z_k - x^*) + o(\|z_k - x^*\|^2) \\
&= f(x^*) + \frac{1}{2}t_k^2 w^T\nabla^2_{xx}\mathcal{L}(x^*,\lambda^*)w + o(t_k^2)
\end{aligned}$$

如果 $w^T\nabla^2_{xx}\mathcal{L}(x^*,\lambda^*)w < 0$ ，则$f(z_k) < f(x^*)$产生矛盾。

二阶充分性条件

定理(二阶充分性条件)

假设对于可行点x^*处存在λ^*使得KKT条件成立，并且对于

$$w^T\nabla_{xx}^2\mathcal{L}(x^*,\lambda^*)w > 0,\ \ \forall w \in \mathcal{C}(x^*,\lambda^*), w \neq 0.$$

则x^*是严格的局部最优解。证明：略。

二阶充分性条件

$$\begin{aligned} \min f(x) &= x_1 + x_2 \\ s.t. \quad & c_1(x) = 2 - x_1^2 - 2x_2^2 \geq 0, \end{aligned}$$

- Lagrange函数 $\mathcal{L}(x_1, x_2; \lambda_1) = (x_1 + x_2) - \lambda_1(2 - x_1^2 - x_2^2)$
- 由一阶最优性条件得到

$$\nabla_x \mathcal{L} = \begin{bmatrix} 1 + 2\lambda_1 x_1 \\ 1 + 2\lambda_2 x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, x_1^2 + x_2^2 = 2, \lambda_1 > 0$$

  得到 $x^* = (-1, -1)^T$, $\lambda_1^* = \frac{1}{2}$。
- 验证是否满足充分性：

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L} = \begin{bmatrix} 2\lambda_1^* & 0 \\ 0 & 2\lambda_1^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

  于是对于任意的$w \neq 0$都满足$w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L} w = w^T w > 0$.
  即x^*一定是一个局部最优解。

二阶充分性条件

$$\begin{aligned} \min f(x) \quad &= -0.1(x_1-4)^2 + x_2^2 \\ s.t. \quad c_1(x) \quad &= x_1^2 + x_2^2 - 1 \geq 0 \end{aligned}$$

- 首先可行域是单位圆的外部，目标函数值是可以趋于无穷大$(\infty, 0)$，因此没有全局最优解，但是在可行域的边界上还是可以去到局部最小值。
- 定义$\mathcal{L}(x,\lambda_1) = -0.1(x_1-4)^2 + x_2^2 - \lambda_1(x_1^2+x_2^2-1)$使用KKT条件，

$$\nabla f - \lambda_1 \nabla c_1 = \begin{bmatrix} -0.2(x_1-4) - 2\lambda_1 x_1 \\ 2x_2 - 2\lambda_1 x_2 \end{bmatrix} = 0, \quad \lambda_1(x_1^2+x_2^2-1) = 0$$

- 求解得到$x^* = (1,0)^T$，$\lambda_1^* = 0.3$。$\mathcal{A}(x^*) = \{1\}$。
- 检验二阶最优性充分条件

$$\nabla c_1(x^*) = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathcal{C}(x^*,\lambda^*) = \{(0,w_2)^T \mid w_2 \in \mathbb{R}\},$$

$$w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*,\lambda^2) w = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -0.8 & 0 \\ 0 & 1.4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ w_2 \end{bmatrix} = 1.4 w_2^2 > 0.$$

二阶条件和投影Hessians

- 二阶条件(必要性、充分性)的验证通常比较复杂，为此人们提出了一种稍微弱化但比较方便的形式。
- 当满足KKT条件的λ^*是唯一的(比如LICQ)，并且严格互补性条件成立，此时关键锥的定义可以简化为：

$$\mathcal{C}(x^*,\lambda^*) = \mathrm{Null}[\nabla c_i(x^*)^T]_{i\in\mathcal{A}(x^*)} = \mathrm{Null} A(x^*) = \{Zu \mid u \in \mathbb{R}^{|\mathcal{A}(x^*)|}\}$$

  这里Z表示$A(x^*)$的零空间的基组成的矩阵，$|\mathcal{A}(x^*)|$表示活跃约束的个数。
- 可以判定$Z^T\nabla_{xx}^2\mathcal{L}(x^*,\lambda^*)Z$的半正定性或正定性。
- 如何得到Z? 对$A(x^*)$进行QR分解即可：

$$A(x^*)^T = [Q_1, Q_2]\begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = Q_1 R$$

  如果R非奇异，则$Z = Q_2$。如果R奇异(LICQ不成立)时，可以对QR分解做适当的列交换来确定Z。

其他形式的约束限制

约束限制，本质上是对可行区域Ω而言，其线性化代数表示，能否准确地抓住x^*邻域内的几何形状。所以当活跃的约束都是线性函数即$c_i(x) = a_i^T x + b_i$，显然是满足条件的。

引理：假设$x^* \in \Omega$处的活跃约束条件$c_i(x^*), i \in \mathcal{A}(x^*)$都是线性函数，则有$\mathcal{F}(x^*) = T_\Omega(x^*)$.

证明：首先$T_\Omega \subset \mathcal{F}(x^*)$。我们只需要证明$\mathcal{F}(x^*) \subset T_\Omega(x^*)$。即要证明$\forall d \in \mathcal{F}(x^*)$，$d \in T_\Omega(x^*)$，也就是要证明对于$d$，存在一个序列$z_k \in \Omega$，满足$\lim\limits_{t_k \to 0^+} \frac{z_k - x^*}{t_k} = d$。

$$\mathcal{F}(x^*) = \left\{ d \middle| \begin{array}{ll} a_i^T d = 0, & \forall i \in \mathcal{E}, \\ a_i^T d \geq 0, & \forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \end{array} \right\}.$$

- 首先$i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(x^*)$(即不活跃)，则存在$\bar{t}$，使得$x^* + td$也不活跃，即$c_i(x^* + tw) > 0,\ t \in [0, \bar{t}]$.
- 构造序列$z_k = x^* + (\bar{t}/k)d$，可以分三种约束分别验证$z_k \in \Omega$。满足$d \in T_\Omega(x^*)$

其他形式的约束限制

定义Mangasarian-Fromovitz约束限制(MFCQ)：

如果存在w使得

$$\begin{aligned} \nabla c_i(x^*)w = 0, \qquad & \forall i \in \mathcal{E} \\ \nabla c_i(x^*)^T w > 0, \quad & \forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}. \end{aligned}$$

并且等式约束的梯度$\nabla c_i(x^*)$, $i \in \mathcal{E}$都是线性无关的。

- 上面的不等式限制是严格的。
- MFCQ比LICQ条件弱。
- 不管是MFCQ还是LICQ，都只是$\mathcal{F}(x^*) = T_\Omega(x^*)$的充分条件，而不是必要条件。反例

  $$x_1^2 + x_2 \geq 0, \quad x_1^2 - x_2 \geq 0$$

  在$x^* = (0,0)^T$处，约束限制都不成立，但是其线性化方向集

  $$\mathcal{F}(x^*) = \{(w_1, 0) | w_1 \in \mathbb{R}\}$$

  确实准确地反映了x^*附近可行域的几何性质。

其他形式的一阶必要性条件

定义法向锥(Normal Cone)

$$\text{如果} x \in \Omega\text{，称} N_\Omega(x) = \{v | v^T w \leq 0 \text{ 对于任意的 } w \in T_\Omega(x)\}\text{为法向锥}$$

定理

假设x^*是f在Ω内的一个局部最优解，则

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

主问题和对偶问题(Primal and Dual Problem)

主问题

$$\min_{x\in\mathcal{R}^n} f(x), \quad s.t. \quad c(x) \geq 0$$

其中$c(x) = (c_1(x), \cdots, c_m(x))^T$，$f(x)$和$-c_i(x)$都是凸函数。

定义其拉格朗日函数为

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \lambda^T c(x)$$

再定义对偶问题的目标函数：

$$q(\lambda) \equiv \inf_x \mathcal{L}(x, \lambda)$$

通常情况下，对于某些λ该最小值可能是$-\infty$。我们定义λ的可行区域为

$$\mathcal{D} \equiv \{\lambda \mid q(\lambda) > -\infty\}$$

对偶问题

$$\max_{\lambda\in\mathcal{R}^m} q(\lambda), \quad s.t. \quad \lambda \geq 0$$

弱对偶性

定理：对偶问题的目标函数$q(\lambda)$以及它的区域$\mathcal{D}$都是凸的。

证明：

$$\mathcal{L}\big(x,(1-\alpha)\lambda^0+\alpha\lambda^1\big)=(1-\alpha)\mathcal{L}(x,\lambda^0)+\alpha\mathcal{L}(x,\lambda^1),\ \forall\lambda^0,\lambda^1\in\mathcal{R}^m,\alpha\in[0,1]$$
$$q(x,(1-\alpha)\lambda^0+\alpha\lambda^1)\geq(1-\alpha)q(x,\lambda^0)+\alpha q(x,\lambda^1).$$

定理：对于任意的$\bar{x}$，如果是满足主问题的解，和任意的$\bar{\lambda}\geq 0$，都有$q(\bar{\lambda})\leq f(\bar{x})$

证明：

$$q(\bar{\lambda})=\inf_x f(x)-\bar{\lambda}^T c(x)\leq f(\bar{x})-\bar{\lambda}^T c(\bar{x})\leq f(\bar{x}).$$

主问题和对偶问题的关联性

定理：如果$\bar{x}$是主问题的一个解，而且f和$-c_i(x)$都是凸可微函数, 那么对于任意满足KKT条件的$\bar{\lambda}$都是其对偶问题的解

证明：假设$(\bar{x}, \bar{\lambda})$满足KKT条件, 则有

$$\nabla_x \mathcal{L}(\bar{x}, \bar{\lambda}) = 0, \ c(\bar{x}) \geq 0, \ \bar{\lambda} \geq 0, \ \bar{\lambda}^T c(\bar{x}) = 0.$$

根据$\mathcal{L}(\cdot, \bar{\lambda})$是凸可微函数，即对任意的$x$，

$$\mathcal{L}(x, \bar{\lambda}) \geq \mathcal{L}(\bar{x}, \bar{\lambda}) + \nabla_x \mathcal{L}(\bar{x}, \bar{\lambda})^T (x - \bar{x}) = \mathcal{L}(\bar{x}, \bar{\lambda}).$$

因此

$$q(\bar{\lambda}) = \inf_x \mathcal{L}(x, \bar{\lambda}) = \mathcal{L}(\bar{x}, \bar{\lambda}) = f(\bar{x}) - \bar{\lambda}^T c(\bar{x}) = f(\bar{x})$$

由于$q(\bar{\lambda}) \leq f(\bar{x}), \ \forall \lambda \geq 0$，我们可以立即得到$q(\bar{\lambda}) = f(\bar{x})$，所以$\bar{\lambda}$是对偶问题的一个解。

主问题和对偶问题的关联性

定理：如果f和$-c_i$都是凸可微，而且$\bar{x}$是主问题的一个解，并且满足LICQ。假设$\hat{\lambda}$是对偶问题的一个解，$\mathcal{L}(\cdot,\hat{\lambda})$是严格凸函数，并且在$\hat{x}$处取到$\inf\limits_{x} \mathcal{L}(x,\hat{\lambda})$的极小值。那么$\hat{x}=\bar{x}$

- 如果$\bar{x}\neq\hat{x}$，那么根据$\bar{x}$处满足LICQ，则一定至少存在一个$\bar{\lambda}$，使得$(\bar{x},\bar{\lambda})$是原主问题的解。
- 再根据上面的定理，可以得到$\bar{\lambda}$是对偶问题的解，即$\mathcal{L}(\bar{x},\bar{\lambda})=q(\bar{\lambda})$.
- 由题意，$q(\hat{\lambda})$也取到最小值，所以$q(\bar{\lambda})=q(\hat{\lambda})=\mathcal{L}(\hat{x},\hat{\lambda})$.
- 由于$\hat{x}=\arg\min_x \mathcal{L}(x,\hat{\lambda})$,根据一阶最优性条件可以得到$\nabla_x\mathcal{L}(\hat{x},\hat{\lambda})=0$.
- 再根据$\mathcal{L}(\cdot,\hat{\lambda})$的严格凸性，可以得到

$$\mathcal{L}(\bar{x},\hat{\lambda})-\mathcal{L}(\hat{x},\hat{\lambda})>\nabla_x\mathcal{L}(\hat{x},\hat{\lambda})^T(\bar{x}-\hat{x})=0$$

- 所以，我们得到 $\mathcal{L}(\bar{x},\hat{\lambda})>\mathcal{L}(\hat{x},\hat{\lambda})=\mathcal{L}(\bar{x},\bar{\lambda})$。
- 特别地，我们有 $-\hat{\lambda}^T c(\bar{x})>-\bar{x}c(\bar{x})=0$, 这里最后的不等式显然是矛盾。

Wolfe对偶

为了计算简便，对偶问题有一个更简洁的形式：

Wolfe Dual

$$\begin{aligned} \max_{x,\lambda} \quad & \mathcal{L}(x,\lambda) \\ s.t. \quad & \nabla_x \mathcal{L}(x,\lambda) = 0,\ \lambda \geq 0. \end{aligned}$$

定理：如果f和$-c_i$是凸可微的。$(\bar{x},\bar{\lambda})$是主问题的一组解，并且满足LICQ。那么$(\bar{x},\bar{\lambda})$也是Wolfe对偶问题的一组解。

证明：

- 由于$(\bar{x},\bar{\lambda})$满足KKT条件， 显然也满足Wolfe对偶问题的约束条件，并且$\mathcal{L}(\bar{x},\bar{\lambda}) = f(\bar{x})$.
- 再验证Wolfe对偶问题的第一个条件。对于任意的(x,λ),

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\bar{x},\bar{\lambda}) = f(\bar{x}) \geq f(\bar{x}) - \lambda^T c(\bar{x}) = \ & \mathcal{L}(\bar{x},\lambda) \\ \geq \ & \mathcal{L}(x,\lambda) + \nabla_x \mathcal{L}(x,\lambda)(\bar{x}-x) = \mathcal{L}(x,\lambda) \end{aligned}$$

- 这样$(\bar{x},\bar{\lambda})$就是Wolfe对偶问题的一个极大值解。

对偶问题的例子

线性规划例子

$$\text{min } c^T x \quad \text{subject to } Ax - b \geq 0,$$

对应的对偶目标函数

$$q(\lambda) = \inf_x [c^T x - \lambda^T (Ax - b)] = \inf_x [(c - A^T \lambda)^T x + b^T \lambda]$$

如果$(c - A^T \lambda) \neq 0$, 极小值可以取到$-\infty$。如果$c - A^T \lambda = 0$, 则目标函数就是$b^T \lambda$. 后面要对$q(\lambda)$取极大值，所以我们可以排除掉$c - A^T \lambda \neq 0$的情形。因此，我们可以直接写出对偶问题：

$$\max_\lambda b^T \lambda \;\; \text{subject to } A^T \lambda = c, \;\; \lambda \geq 0.$$

Wolfe对偶问题可以写为：

$$\max_{\lambda, x} c^T x - \lambda^T (Ax - b) \;\; \text{subject to } A^T \lambda = c, \;\; \lambda \geq 0$$

对偶问题的例子

二次凸规划例子

$$\min \frac{1}{2}x^T Gx + c^T x \ \text{ subject to } Ax - b \geq 0,\ G\text{对称正定}.$$

对偶目标函数: $q(\lambda) = \inf_x \mathcal{L}(x,\lambda) = \inf_x \left[\frac{1}{2}x^T Gx + c^T x - \lambda^T(Ax-b)\right].$

因为G是正定的，所以$\mathcal{L}(\cdot,\lambda)$是严格凸函数，取到最小值的条件是$\nabla_x \mathcal{L}(x,\lambda)=0$，即 $Gx + c - A^T\lambda = 0.$ 从上式可以求出$x = G^{-1}(A^T\lambda - c)$, 然后代入$q(\lambda)$中得到对偶问题的目标函数:

$$q(\lambda) = -0.5(A^T\lambda - c)^T G^{-1}(A^T\lambda - c)^T + b^T\lambda$$

或者，我们可以写出相应的Wolfe对偶问题：

$$\max_{(\lambda,x)} 0.5x^T Gx + c^T x - \lambda^T(Ax-b),\ s.t.\ Gx + c - A^T\lambda = 0, \lambda \geq 0.$$

当然如果我们利用约束条件$(c - A^T\lambda)^T x = -x^T Gx$，可以重新写成对偶问题

$$\max_{(\lambda,x)} -0.5x^T Gx + \lambda^T b,\ \ s.t.\ Gx + c - A^T\lambda = 0,\ \lambda \geq 0.$$

Thanks For Your Attention