DCS440 最优化理论

第二章: 对偶理论

杨磊 yanglei39@mail.sysu.edu.cn

计算机学院,2023 秋

致谢: 本课件由谷曜东、朱嘉懿、郑嘉祺协助准备

- § Lagrange 对偶
- § Lagrange 对偶问题
- § Lagrange 对偶的几种解释
- 最优性条件
- § 敏感性分析
- § 利用对偶理解"启发式"方法

拉格朗日(Lagrange)函数



考虑一般优化问题(可能非凸)

min
$$f_0(x)$$

s.t. $f_i(x) \le 0$, $i = 1, \dots, m$,
 $h_j(x) = 0$, $j = 1, \dots, p$.

对于上面这个一般形式的优化问题, 假设:

- 问题的定义域 $\mathcal{D} := \bigcap_{i=0}^m \operatorname{dom} f_i \cap \bigcap_{i=1}^p \operatorname{dom} h_i$ 非空;
- 问题的最优解 x* 和 最优值 p* 存在。

不严谨地说,**拉格朗日(Lagrange)对偶的基本思想**: 将原约束优化问题的目标和约束放在同一个函数(即拉格朗日函数)中来研究。

Lagrange 对偶 2/69

拉格朗日(Lagrange)函数



以一般优化问题为例,它的 Lagrange 函数 $L: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$ 定义为

$$L(x, \lambda, \nu) := f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{j=1}^p \nu_j h_j(x),$$

其中:

- $L(x, \lambda, \nu)$ 的定义域为 $\operatorname{dom} L = \mathcal{D} \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p$;
- λ_i 称为第 i 个不等式约束 $f_i(x) \leq 0$ 对应的 Lagrange 乘子;
- ν_j 称为第 j 个等式约束 $h_j(x) = 0$ 对应的 Lagrange 乘子;
- 向量 λ 和 ν 是分别由 λ_i 和 ν_j 组成的向量,称作优化问题的对偶变量 (dual variable) 或者 Lagrange 乘子;
- 此时,将目标变量 x 称作原变量 (primal variable)。

Lagrange 对偶 3 / 69

拉格朗日对偶函数



定义 Lagrange 对偶函数(简称对偶函数,dual function)如下:

$$g(\lambda, \nu) := \inf_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda, \nu)$$
$$= \inf_{x \in \mathcal{D}} \left\{ f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{j=1}^p \nu_j h_j(x) \right\}.$$

性质一: $g(\lambda, \nu)$ 是关于 λ 和 ν 的凹函数! (思考: 为什么?)

答: $g(\lambda, \nu)$ 是一族关于 (λ, ν) 的仿射函数的逐点下确界,因此即使优化问题非凸,其对偶函数 $g(\lambda, \nu)$ 也是凹函数。

性质二: 对 $\forall \lambda \geq 0$ 和 $\forall \nu$,可以推出 $g(\lambda, \nu) \leq p^*$ (见下一页),即 $g(\lambda, \nu)$ 给出了原问题最优值的下界。

启发:可通过计算以下优化问题(称作对偶问题)得到原约束优化问题最优值 p^* 的最紧下界:

$$\sup_{\lambda, \nu} g(\lambda, \nu) \quad \text{s.t.} \quad \lambda \ge 0.$$

弱对偶定理



定理1(弱对偶定理)

对 $\forall \lambda \geq 0$ 和 $\forall \nu$,有 $g(\lambda, \nu) \leq p^*$ 。

证明: 设 $x^* \in \mathcal{D}$ 是<mark>原问题的最优解</mark>,则有 $f_i(x^*) \leq 0$, $h_j(x^*) = 0$ 。于是,对 $\forall \lambda \geq 0$ 和 $\forall \nu$,有

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(x^*)}_{\leq 0} + \underbrace{\sum_{j=1}^{p} \nu_j h_j(x^*)}_{=0} \leqslant 0.$$

因此

$$L(x^*, \lambda, \nu) = f_0(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x^*) + \sum_{j=1}^p \nu_j h_j(x^*) \leqslant f_0(x^*) = p^*.$$

进一步,有

$$g(\lambda, \nu) = \inf_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda, \nu) \leqslant L(x^*, \lambda, \nu) \leqslant f_0(x^*) = p^*.$$

Lagrange 对偶 5/69

例:线性规划



线性规划问题 (标准型)

$$\min_{x} \quad c^{\top} x$$

s.t. $Ax = b$ $\Rightarrow Ax - b = 0$
 $x \ge 0$ $\Rightarrow -x \le 0$

假设可行域非空。对不等式约束 $-x \le 0$ 和等式约束 Ax - b = 0 分别引入 Lagrange 乘子 λ 和 ν ,得到 Lagrange 函数:

$$L(x,\lambda,\nu) = c^{\top}x + \nu^{\top}(Ax - b) + \lambda^{\top}(-x) = -b^{\top}\nu + (A^{\top}\nu - \lambda + c)^{\top}x.$$

于是,对偶函数为

$$g(\lambda,\nu) = \inf_{x} \ L(x,\lambda,\nu) = -b^{\top}\nu + \inf_{x} \left\{ (A^{\top}\nu - \lambda + c)^{\top}x \right\}$$

Lagrange 对偶 6 / 69

例:线性规划



容易分析得到

$$g(\lambda, \nu) = \inf_{x} L(x, \lambda, \nu) = -b^{\top} \nu + \inf_{x} \left\{ (A^{\top} \nu - \lambda + c)^{\top} x \right\}$$
$$= \begin{cases} -b^{\top} \nu, & A^{\top} \nu - \lambda + c = 0, \\ -\infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

于是,由弱对偶定理可知

$$p^*$$
 的下界是:
$$\begin{cases} -b^\top \nu, & A^\top \nu - \lambda + c = 0, \ \lambda \ge 0, \\ -\infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$
 (显然,该下界无意义)

相应的对偶问题如下:

$$\max_{\lambda,\nu} \quad -b^{\top}\nu \quad \text{s.t.} \quad A^{\top}\nu - \lambda + c = 0, \ \lambda \ge 0.$$

上述问题进一步等价于

$$\max_{\nu} \quad -b^{\top}\nu \quad \text{s.t.} \quad A^{\top}\nu + c \ge 0.$$

例:线性约束的最小二乘问题



线性约束的最小二乘解问题

$$\begin{aligned} & \text{min} \quad x^\top x \\ & \text{s.t.} \quad Ax = b & \Rightarrow \quad Ax - b = 0 \end{aligned}$$

为等式约束 Ax - b = 0 引入 Lagrange 乘子 ν ,得到 Lagrange 函数

$$L(x,\nu) = x^{\top}x + \nu^{\top}(Ax - b).$$

因为 $L(x,\nu)$ 是关于 x 的二次可微凸函数,因此关于 x 的最优解可通过一阶最优性条件得到

$$\nabla_x L(x, \nu) = 2x + A^\top \nu = 0 \quad \Rightarrow \quad x_{\nu}^* = -\frac{1}{2} A^\top \nu.$$

因此,对偶函数为

$$g(\nu) = \inf_x \ L(x, \, \nu) = L(x_{\nu}^*, \, \nu) = L(-\frac{1}{2} \, A^\top \nu, \, \nu) = -\frac{1}{4} \, \nu^\top A A^\top \nu - b^\top \nu.$$

Lagrange 对偶

例:线性约束的最小二乘问题



该对偶函数显然是凹函数

$$g(\nu) = -\frac{1}{4} \nu^{\top} A A^{\top} \nu - b^{\top} \nu.$$

进一步,由弱对偶定理可知:

1.
$$\inf_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ x^\top x \mid Ax = b \right\} \geqslant -\frac{1}{4} \nu^\top A A^\top \nu - b^\top \nu, \quad \forall \nu$$

2.
$$\inf_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ x^\top x \mid Ax = b \right\} \geqslant \underbrace{\sup_{\nu} \left\{ -\frac{1}{4} \nu^\top A A^\top \nu - b^\top \nu \right\}}_{\text{对偶问题}}$$

关于第 2 点,我们将在以后说明,当 Ax = b 解集非空时不等式会取等号(此时,强对偶性成立)。

例:双向划分问题



双向划分问题

$$\begin{aligned} & \min_{x} & x^{\top} W x \\ & \text{s.t.} & x_i^2 = 1, & i = 1, 2, \cdots, n, \end{aligned}$$

其中 $W \in S^n$, $x \in \mathbb{R}^n$, 且其分量 x_i 取值为 1 或 -1。

为等式约束 $x_i^2 - 1 = 0$ 引入拉格朗日乘子 ν_i ,得到 Lagrange 函数:

$$L(x, \nu) = x^{\top} W x + \sum_{i=1}^{n} \nu_i (x_i^2 - 1) = x^{\top} (W + \operatorname{diag}(\nu)) x - \mathbf{1}^{\top} \nu,$$

其中 $\mathbf{1} := (1, 1, \dots, 1)^{\top}$.

进一步,对x求极小,得到对偶函数:

$$g(\nu) = \inf_{x} \left\{ x^{\top} (W + \operatorname{diag}(\nu)) x \right\} - \mathbf{1}^{\top} \nu = \begin{cases} -\mathbf{1}^{\top} \nu, & W + \operatorname{diag}(\nu) \succeq 0, \\ -\infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Lagrange 对偶 10 / 69

Lagrange 对偶与共轭函数



仿射约束的优化问题

min
$$f_0(x)$$

s.t. $Ax \le b$
 $Cx = d$

回顾凸函数
$$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$$
 的共轭函数: $f^*(y) = \sup_{x \in \text{dom } f} \left\{ y^\top x - f(x) \right\}$

下面,利用函数 f_0 的共轭函数 f_0^* 表述问题的对偶函数:

$$g(\lambda, \nu) = \inf_{x \in \text{dom } f_0} L(x, \lambda, \nu) = \inf_{x \in \text{dom } f_0} \left\{ f_0(x) + \lambda^\top (Ax - b) + \nu^\top (Cx - d) \right\}$$
$$= \inf_{x \in \text{dom } f_0} \left\{ f_0(x) + \left(A^\top \lambda + C^\top \nu \right)^\top x \right\} - \lambda^\top b - \nu^\top d$$
$$= -f_0^* \left(-A^\top \lambda - C^\top \nu \right) - \lambda^\top b - \nu^\top d$$

Lagrange 对偶

例:最大熵问题



最大熵问题

min
$$f_0(x) = \sum_{i=1}^n x_i \log x_i$$

s.t. $Ax \le b$
 $\mathbf{1}^\top x = 1$

对于 f_0 , 其定义域为 $\operatorname{dom} f_0 = \mathbb{R}^n_+$;

$$f_0$$
 的共轭函数为 $f_0^*(y) = \sum_{i=1}^n e^{y_i-1}$,其定义域为 $\text{dom } f_0^* = \mathbb{R}^n$ 。

于是,最大熵问题的对偶函数为

$$\begin{split} g(\lambda,\nu) &= -f_0^* \left(-A^\top \lambda - \nu \mathbf{1} \right) - \lambda^\top b - \nu \\ &= -\lambda^\top b - \nu - \sum_{i=1}^n e^{-a_i^\top \lambda - \nu - 1} = -\lambda^\top b - \nu - e^{-\nu - 1} \sum_{i=1}^n e^{-a_i^\top \lambda}, \end{split}$$

其中 a_i 表示矩阵A的第i列向量。

- § Lagrange 对偶
- § Lagrange 对偶问题
- § Lagrange 对偶的几种解释
- § 最优性条件
- § 敏感性分析
- § 利用对偶理解"启发式"方法

Lagrange 对偶问题



回顾弱对偶定理:对于 Lagrange 对偶函数 $g(\lambda, \nu)$,对任意 $\forall \lambda \geq 0$ 和 $\forall \nu$, $g(\lambda, \nu)$ 给出了原优化问题最优值 p^* 的一个下界。

显然,该下界和乘子 λ 和 ν 的选取相关。而当我们极大化对偶函数 $g(\lambda,\nu)$,试图计算 p^* 的最紧下界时,就引出了原问题的 **Lagrange** 对偶问题:

Lagrange 对偶问题

$$\begin{aligned} & \underset{x}{\min} & f_0\left(x\right) \\ & \text{s.t.} & f_i(x) \leq 0, & \text{(Primal)} \\ & & h_i(x) = 0. & \end{aligned} \qquad \begin{aligned} & \sup/\max & g(\lambda, \nu) \\ & \text{s.t.} & \lambda \geq 0 \end{aligned}$$

- 左侧即为原问题(Primal),右侧即为 Lagrange 对偶问题(Dual)
- 原问题(Primal)的最优值为 $p^* \geq$ 对偶问题(Dual)的最优值为 d^*
- 对偶问题(Dual)的最优解 (λ^* , ν^*) 称为对偶最优解或最优 Lagrange 乘子
- 无论原问题(Primal)是否为凸,对偶问题(Dual) 总是一个凹优化问题
- 为方便,后面出现的对偶问题无论解是否存在,我们都用符号 max

Lagrange 对偶问题 13 / 69

例:线性规划的对偶问题



考虑线性规划问题

$$\begin{aligned} & \min_{x} & c^{\top}x\\ & \text{s.t.} & Ax = b\\ & & x \geq 0 \end{aligned} \tag{Primal}$$

已推导其 Lagrange 对偶函数为

$$g(\lambda, \nu) = \begin{cases} -b^{\top} \nu, & A^{\top} \nu - \lambda + c = 0, \\ -\infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

进一步,写出 Lagrange 对偶问题:

$$\max_{\lambda,\nu} \quad g(\lambda,\nu) = -b^{\top}\nu$$
 s.t. $A^{\top}\nu - \lambda + c = 0$ (Dual) $\lambda > 0$

Lagrange 对偶问题 114/69

例:线性规划的对偶问题(续)



解析: 已推导其 Lagrange 对偶函数为

$$g(\lambda, \nu) = \begin{cases} -b^{\top} \nu, & A^{\top} \nu - \lambda + c = 0, \\ -\infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

- $g(\lambda, \nu) = -\infty$ 时,极大化它是没有意义的;
- 因此对偶问题事实上具有隐含的约束条件 $A^{\mathsf{T}}\nu \lambda + c = 0$;

$$\max_{\lambda, \nu} \quad g(\lambda, \nu) = -b^{\top} \nu$$
s.t. $A^{\top} \nu - \lambda + c = 0$ (Dual)
$$\lambda \ge 0$$

进一步地,乘子λ可以被隐去:

$$\max_{\nu} \quad g(\lambda, \nu) = -b^{\top} \nu$$

s.t. $A^{\top} \nu + c \ge 0 \quad (A^{\top} \nu + c = \lambda \ge 0)$

(Dual)

Lagrange 对偶问题 15 / 69

例:线性约束的最小二乘



回顾线性约束的最小二乘问题

$$\begin{array}{ll}
\min & x^{\top} x \\
\text{s.t.} & Ax = b
\end{array}$$

(Primal)

己推导其 Lagrange 对偶函数为

$$g(\nu) = L(-\frac{1}{2}\boldsymbol{A}^{\intercal}\boldsymbol{\nu},\,\boldsymbol{\nu}) = -\frac{1}{4}\boldsymbol{\nu}^{\intercal}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\intercal}\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{b}^{\intercal}\boldsymbol{\nu}.$$

进一步,写出 Lagrange 对偶问题:

$$\max_{\nu} \quad g(\nu) = -\frac{1}{4}\nu^{\top} A A^{\top} \nu - b^{\top} \nu$$

$$\iff \quad \min_{\nu} \quad \frac{1}{4}\nu^{\top} A A^{\top} \nu + b^{\top} \nu$$
(Dual)

对偶性的强弱



设原问题(Primal)的最优值为 $p^* = f_0(x^*)$, 对偶问题(Dual)的最优值为 $d^* = g(\lambda^*, \nu^*)$ 。 ¹ 于是,

- 不等式 $d^* \le p^*$ 总是成立的,称为弱对偶性 (weak duality)
- 等式 $d^* = p^*$ 不必然成立! 当等式成立时,称为强对偶性 (strong duality)
- 差值 $p^* d^*$ 称为对偶间隙 (duality gap),根据弱对偶性可知对偶间隙总是非负的

思考: 什么情况下强对偶性成立,即对偶间隙为0?

Lagrange 对偶问题 17 / 69

¹注意: 这里的 p^* 可以为 $-\infty$,此时由弱对偶性可知 $d^* = -\infty$,因此强对偶性成立。为方便,我们后面都假设 p^* 为有限数。

Slater's condition



显然,<mark>强对偶性</mark>是很好的性质。如果成立,则可以通过求解<mark>对偶问题</mark>来求解原问题的最优值。遗憾的是,一般情况下强对偶性并不成立。

但是,对于凸优化问题,在一定(不是特别强)的条件下,<mark>强对偶性</mark>是成立的,这也说明了凸优化问题的优势。

考虑一般形式的凸优化问题

min
$$f_0(x)$$

s.t. $f_i(x) \leq 0$, $i = 1, \dots, m$ $(f_0, \dots, f_m \stackrel{\sqcap}{\sqcup})$
 $Ax = b$.

针对上述问题,文献中已经给出了很多<mark>强对偶性</mark>成立的条件,其中一个相对简单且被广泛应用的条件是 Slater's condition。

Lagrange 对偶问题 18 / 69

Slater's condition



介绍 Slater's condition 之前,首先介绍集 \mathcal{D} 的相对内点集合 relint \mathcal{D} 。

给定集合 \mathcal{D} ,回顾其<mark>仿射包</mark>的定义如下:

aff
$$\mathcal{D} := \left\{ x \mid x = \sum_{i=1}^{k} \theta_i x_i, \ \forall x_1, x_2, \cdots, x_k \in \mathcal{D}, \ \sum_{i=1}^{k} \theta_i = 1 \right\}.$$

回顾其<mark>内点集</mark>的定义如下: (B(x,r)) 为以 x 为中心,半径为 r 的范数球)

int
$$\mathcal{D} = \{ x \in \mathcal{D} \mid \exists r > 0, \text{ s.t. } B(x, r) \subseteq \mathcal{D} \}.$$

定义 1 (相对内点 (relative interior))

集合 D 的相对内点集定义为

relint
$$\mathcal{D} := \{ x \in \mathcal{D} \mid \exists r > 0, \text{ s.t. } B(x, r) \cap \text{aff } \mathcal{D} \subseteq \mathcal{D} \}.$$

解析:不严谨地说,相对内点可以看作内点的推广!

- $\mathbf{aff} \mathcal{D} = \mathbb{R}^n \mathbf{m}$,相对内点等价于内点;
- 当 \mathcal{D} 本身的"维度"较低(例如, \mathcal{D} 为 \mathbb{R}^n 中的某个超平面)时, \mathbb{D} 中不存在内点,因此需引入"相对"的概念,以适应更复杂的情况。

Slater's condition



Slater's condition

若存在一点 $x \in \text{relint } \mathcal{D}$,使得凸优化问题的约束满足:

$$f_i(x) < 0, i = 1, \dots, m, Ax = b.$$

则称:此问题满足 Slater's condition,进一步,此问题的强对偶性成立。

- 满足上述条件的点也称为严格可行点,因为不等式约束严格成立
- Slater's condition 要求 relint D 中存在使得不等式约束严格成立的点

当不等式约束函数中有部分是仿射的时, Slater's condition 可弱化如下:

弱化的 Slater's condition

不失一般性,设前 k 个不等式约束函数 f_1, \dots, f_k 是仿射的,若存在一点 $x \in \text{relint } \mathcal{D}$,使得凸优化问题的约束满足:

$$f_i(x) \le 0$$
, $i = 1, \dots, k$, $f_i(x) < 0$, $i = k + 1, \dots, m$, $Ax = b$.

则此问题的强对偶性成立。由此可看出,仿射不等式不需要严格成立。

Lagrange 对偶问题 20 / 69

例:线性约束的最小二乘问题



线性约束的最小二乘问题

(Primal)

已推导其 Lagrange 对偶问题为:

$$\max_{\nu} \quad g(\nu) = -\frac{1}{4}\nu^{\top} A A^{\top} \nu - b^{\top} \nu$$

$$\iff \quad \min_{\nu} \quad \frac{1}{4}\nu^{\top} A A^{\top} \nu + b^{\top} \nu$$
(Dual)

于是,对于该问题,只要原问题可行,即 $\exists x, s.t. Ax = b$,则必有强对偶性成立。

Lagrange 对偶问题 21 / 69

例:线性规划



考虑线性规划问题(假设目标函数值在可行域上有下界)

$$\begin{aligned} & \underset{x}{\min} & c^{\top}x\\ & \text{s.t.} & Ax = b\\ & & x \geq 0 \end{aligned} \tag{Primal}$$

已推导其 Lagrange 对偶问题:

$$\max_{\lambda, \nu} \quad -b^{\top} \nu \quad \text{s.t.} \quad A^{\top} \nu - \lambda + c = 0, \quad \lambda \ge 0.$$
 (Dual)

根据弱化的 Slater's condition,对于线性规划问题:

- 只要原问题(Primal)可行,则强对偶性成立;
- 由于对偶也是线性规划,因此如果对偶(Dual)可行,则强对偶性成立;
- 只有一种情况下强对偶性不成立: (Primal)和(Dual)均不可行。

★特別强调★: 针对线性规划问题,这里的强对偶性(对偶间隙为零,包含 $p^* = d^* = -\infty$ 的情况)与其他教材中的强对偶定理有所不同!

例: QCQP 问题



二次约束二次规划问题(QCQP)

$$\min_{x} \quad \frac{1}{2} x^{\top} P_{0} x + q_{0}^{\top} x + r_{0}, \qquad P_{0} \in S_{++}^{n},
\text{s.t.} \quad \frac{1}{2} x^{\top} P_{i} x + q_{i}^{\top} x + r_{i} \leq 0, \quad P_{i} \in S_{+}^{n}, \quad i = 1, 2, \dots, m,$$
(Primal)

引入 Lagrange 乘子向量 λ ,写出其 Lagrange 函数为

$$\begin{split} L(x,\lambda) &= \frac{1}{2} x^\top P_0 x + q_0^\top x + r_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i \left(\frac{1}{2} x^\top P_i x + q_i^\top x + r_i \right) \\ &= \frac{1}{2} x^\top \underbrace{\left(P_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i P_i \right)}_{\triangleq P(\lambda)} x + \underbrace{\left(q_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i q_i \right)^\top}_{\triangleq q(\lambda)} x + \underbrace{\left(r_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i r_i \right)}_{\triangleq r(\lambda)} \\ &= \frac{1}{2} x^\top P(\lambda) x + q(\lambda)^\top x + r(\lambda) \end{split}$$

Lagrange 对偶问题 23 / 69

QCQP 问题(续)



不难分析,其 Lagrange 对偶函数只在 $P(\lambda) \succeq 0$ 时才可能有意义,但具体形式不易推得(不严谨地说,因为解的形式不易由对偶变量显示表达)。

不过注意到,为得到原问题最优值的下界,对偶变量 λ 最终要求为非负,因此我们可以只考虑 $\lambda \geq 0$ 情况下的对偶函数,此时有 $P(\lambda) \succ 0$ 。于是,有

$$g(\lambda) = \inf_x \ L(x,\lambda) = \left\{ \begin{array}{ll} -(1/2) \, q(\lambda)^\top P(\lambda)^{-1} q(\lambda) + r(\lambda), & \lambda \geq 0, \\ \hline {\color{blue} \textstyle \textstyle \textstyle \textstyle \mathsf{TS}} \, \underline{\hspace{0.5mm}} \underline{\hspace{0.5mm}} \underline{\hspace{0.5mm}} \\ \end{array} \right. \text{otherwise}.$$

进一步, 可写出对偶问题

$$\max_{\lambda \ge 0} \quad -(1/2) \, q(\lambda)^{\top} P(\lambda)^{-1} q(\lambda) + r(\lambda). \tag{Dual}$$

最后,由 Slater's condition,若 $\exists x$ 使得所有二次不等式约束严格成立,即

$$(1/2) x^{\mathsf{T}} P_i x + q_i^{\mathsf{T}} x + r_i < 0, \quad i = 1, 2, \dots, m,$$

则 QCQP 的强对偶性成立。

Lagrange 对偶问题 24 / 69

例:最大熵问题



最大熵问题

min
$$f_0(x) = \sum_{i=1}^n x_i \log x_i$$
 $(\operatorname{dom} f_0 = \mathbb{R}^n_{++})$
s.t. $Ax \le b$
 $\mathbf{1}^\top x = 1$

根据之前推导的 Lagrange 对偶函数,直接写出对偶问题:

$$\max \quad -b^{\top} \lambda - \nu - e^{-\nu - 1} \sum_{i=1}^{n} e^{-a_i^{\top} \lambda}$$

s.t. $\lambda > 0$

于是,由弱化的 Slater's condition,若 $\exists x > 0$ 使得 $Ax \leq b$, $\mathbf{1}^{\top}x = 1$, 则强对偶性成立。

Slater's condition 与强对偶性



Slater's condition 是凸问题强对偶性成立的充分条件,但不是必要条件!

- (i). 由于(Primal)的可行点只有 x = 0,故可行域不存在相对内部,因此原问题显然不满足 Slater's condition。易知,(Primal)的最优值 $p^* = 0$ 。
- (ii). 进一步,考察它的 Lagrange 对偶函数:

$$\Rightarrow L(x, \lambda_1, \lambda_2) = x + \lambda_1 x - \lambda_2 x$$

$$\Rightarrow g(\lambda_1, \lambda_2) = \inf_x L(x, \lambda_1, \lambda_2) = \begin{cases} 0, & 1 + \lambda_1 - \lambda_2 = 0, \\ -\infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

得到对偶问题: $\max 0$ s.t. $1 + \lambda_1 - \lambda_2 = 0$, $\lambda_1, \lambda_2 > 0$. (Dual)

显然,(Dual)的最优值 $d^* = p^* = 0$,此时强对偶性成立。

Slater's condition 与强对偶性



扩展知识: 非凸问题仍然可能有强对偶性。

例: 置信域问题 (trust region problem). 在单位球内极小化一个二次函数

min
$$x^{\top}Ax + 2b^{\top}x$$
 $(A \in S^n, b \in \mathbb{R}^n)$
s.t. $x^{\top}x \le 1$.

若 $A \succeq 0$,则目标函数 $f_0 = x^{\mathsf{T}} A x$ 是非凸的。但是,该问题对偶间隙为 $\mathbf{0}$ 。

Lagrange 对偶问题 27 / 69

 $^{^{1}}$ 参见 **Section 5**, Ronald J. Stern and Henry Wolkowicz. Indefinite trust region subproblems and nonsymmetric eigenvalue perturbations. *SIAM Journal on Optimization*, 5(2): 286–313, 1995.

- § Lagrange 对偶
- § Lagrange 对偶问题
- § Lagrange 对偶的几种解释
- § 最优性条件
- § 敏感性分析
- § 利用对偶理解"启发式"方法

几何解释



我们从函数值集合的角度去理解 Lagrange 对偶。

考虑仅有一个不等式约束的优化问题(假设目标函数值在可行域上有下界)

$$\inf_{x} \quad f_0(x)$$
s.t.
$$f_1(x) \le 0.$$

记问题的定义域为 $\mathcal{D} := \text{dom } f_0 \cap \text{dom } f_1$.

首先, 定义如下符号:

- 最优值 $p^* := \inf_t \left\{ t \mid (u,t) \in \mathcal{G}, \ u \leq 0 \right\} \iff \inf_{x \in \mathcal{D}} \left\{ f_0 \mid f_1 \leq 0 \right\}$
- 对偶函数

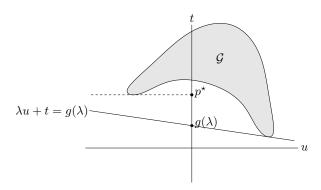
$$\underline{g(\lambda)} := \inf_{t,u} \left\{ t + \lambda u \mid (u,t) \in \mathcal{G} \right\} \iff \inf_{x \in \mathcal{D}} \underbrace{\left\{ f_0(x) + \lambda f_1(x) \right\}}_{L(x,\lambda)}$$

几何解释(续)



然后,作出变量 $(u,t) \in \mathcal{G}$ 的图像:

- 集合 G 对应图中的**阴影部分**;
- 最优值 p^* 对应在集合 \mathcal{G} 中, 当 $u \leq 0$ 时, t 能取到的最小值;
- 对偶函数 $g(\lambda)$ 对应一条以 u 为自变量,t 为因变量,斜率为 $-\lambda$,必过集 合 \mathcal{G} 中一点,且在 t 方向上的"截距"最小的直线。



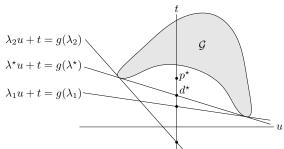
Lagrange 对偶的几种解释 29 / 69

几何解释(续)



下图展示了 λ 分别取值 λ_1 , λ_2 和 λ^* 时, 对偶函数 $g(\lambda)$ 对应的直线:

- 对任意 λ , $g(\lambda)$ 对应的直线都与集合 \mathcal{G} 相切(保证至少经过集合 \mathcal{G} 中一点),且使得 t 方向截距最小;
- 对偶问题 $\sup \{g(\lambda) \mid \lambda \geq 0\}$: 在斜率 $-\lambda \leq 0$ 的情况下找到上述"最小截距"中的"最大值,即原问题最优值的最大下界"。易分析,在图中,对偶最优解为 λ^* ,则 $g(\lambda^*)$ 在 t 轴上的截距为 d^* ;
- 在本例中,易观察到 $d^* < p^*$,即弱对偶性成立,但强对偶性不成立。



经济学解释



Lagrange 对偶也有着有趣的经济学解释。考虑这样一个场景:给定若干原材料,制定生产方案,卖产品,希望获得最大利润。

数学上,可以考虑如下含有多个不等式约束的优化问题:

min
$$-f_0(x)$$

s.t. $x_i \le u_i, \quad i = 1, \dots, m,$

其中

- x表示产量;
- $f_0(x)$ 表示利润; (注: 最小化负利润 \Leftrightarrow 最大化利润)
- $x_i \le u_i$ 表示对第 i 种原材料用量的限制。

记求解该问题得到的(只卖产品的)最优生产方案为 x^* ,最优值为 p^* 。

经济学解释(续)



现假设原材料能够自由买卖,设第i种原材料的价格为 $\lambda_i \geq 0$ 。此时,我们可考虑更灵活的生产方案,既可以<mark>卖产品</mark>,也可以<mark>买卖原材料</mark>。

于是,对于一个生产方案 x:

• 若 $x_i \le u_i$,表示第 i 种原材料库存有剩余,可以出售,以便增加利润 $\lambda_i(u_i-x_i)$ 。此时,总共的负利润可以表示为

$$-(f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i (u_i - x_i))$$

• 若 $x_i > u_i$,表示第 i 种原材料要额外购入,以满足生产需求,但会产生额外原材料花销 $\lambda_i(x_i - u_i)$ 。此时,总共的负利润可以表示为

$$-(f_0(x) - \sum_{i=1}^m \lambda_i (x_i - u_i))$$

综上,在原材料能够自由买卖市场下,总共的负利润为 (Lagrange 函数)

$$L(x,\lambda) := -f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i (x_i - u_i)$$

Lagrange 对偶的几种解释 32 / 69

经济学解释(续)



于是,对偶函数表示给定原材料价格时,最优生产方案的最小负利润:

$$g(\lambda) \triangleq \inf_{x \in \mathcal{D}} \left\{ -f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i (x_i - u_i) \right\}.$$

注意:无论原材料价格 λ 如何变化,由于可以自由买卖,生产方案更多样化,因此获利只可能更多,负利润只可能更小,即 $g(\lambda) \leq p^*$ 。

进一步,若强对偶性成立,即 $d^* = g(\lambda^*) = p^*$,则表明:

当<u>原材料</u>定价为 λ^* ,<u>生产方案</u>设定为 x^* 时,通过自由买卖购入额外的原材料扩大生产,或卖出原材料获得利润,<mark>都不能获得更高的收益</mark>,此时资源已调配至最优。

在经济学领域, λ^* 也被称为影子价格。

多目标优化解释



Lagrange 对偶也能从多目标规划的角度来理解:

考虑带有多个不等式约束的优化问题

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

写出 Lagrange 对偶函数:
$$L(x,\lambda) = f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x)$$
.

当
$$\lambda \geq 0$$
 时, $\inf_{x} L(x,\lambda) = \inf_{x} \left\{ f_{0}(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_{i} f_{i}(x) \right\}$ 对应于求解多目标优

化问题

$$\min_{x} \left[f_0(x), f_1(x), \cdots, f_m(x) \right]$$

的一个帕累托最优解(对应权重 λ)。

鞍点解释



Lagrange 对偶也能从鞍点的角度来理解。首先,我们引入如下不等式。

命题 1 (max-min 不等式)

对于任意函数 $f(w,z): S_w \times S_z \to \mathbb{R}$,以下 max-min 不等式必成立:

$$\sup_{z \in S_z} \inf_{w \in S_w} f(w, z) \le \inf_{w \in S_w} \sup_{z \in S_z} f(w, z).$$

思考: max-min 不等式中的等式何时成立?

定义 2 (鞍点 (saddle point))

对于函数 $f(w,z): S_w \times S_z \to \mathbb{R}$, 若存在 $\exists (\tilde{w}, \tilde{z}) \in S_w \times S_z$ 使得

$$f(\tilde{w}, z) \le f(\tilde{w}, \tilde{z}) \le f(w, \tilde{z}), \quad \forall w \in S_w, \forall z \in S_z,$$

则称 (\tilde{w}, \tilde{z}) 为函数 f(w, z) 的鞍点 (saddle point)。



由<mark>鞍点</mark>的定义,不难看出,若 (\tilde{w}, \tilde{z}) 是一个鞍点,则

- \tilde{w} 在 S_w 上极小化 $f(w, \tilde{z})$,即 $f(\tilde{w}, \tilde{z}) = \inf_{w \in S_w} f(w, \tilde{z})$
- $\tilde{z} \approx S_z \perp \frac{\mathsf{W}}{\mathsf{W}} + f(\tilde{w}, z)$, $\mathbb{P} f(\tilde{w}, \tilde{z}) = \sup_{z \in S_z} f(\tilde{w}, z)$

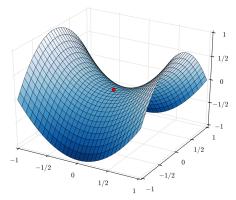


Fig. 鞍点示意图



命题2

若 (\tilde{w}, \tilde{z}) 是 f(w, z) 的一个鞍点,则 max-min 不等式在该鞍点处等式成立,且等于 $f(\tilde{w}, \tilde{z})$ 。

证明: 因为 (\tilde{w}, \tilde{z}) 是 f(w, z) 的一个鞍点,有

$$f(\tilde{w}, z) \le f(\tilde{w}, \tilde{z}) \le f(w, \tilde{z}), \quad \forall w \in S_w, \forall z \in S_z.$$

于是,

1.
$$\sup_{z \in S_z} \inf_{w \in S_w} f(w, z) \ge \inf_{w \in S_w} f(w, \tilde{z}) \ge f(\tilde{w}, \tilde{z})$$

$$2. \quad \inf_{w \in S_w} \sup_{z \in S_z} f(w, z) \le \sup_{z \in S_z} f(\tilde{w}, z) \le f(\tilde{w}, \tilde{z})$$

综合 1 和 2,有
$$\sup_{z \in S_z} \inf_{w \in S_w} f(w, z) \ge \inf_{w \in S_w} \sup_{z \in S_z} f(w, z)$$
.

另一方面,由 max-min 不等式,可知

$$\sup_{z \in S_z} \inf_{w \in S_w} f(w, z) \le \inf_{w \in S_w} \sup_{z \in S_z} f(w, z).$$

综上,可得
$$\sup_{z \in S_z} \inf_{w \in S_w} f(w, z) = \inf_{w \in S_w} \sup_{z \in S_z} f(w, z) = f(\tilde{w}, \tilde{z})$$
,证毕。



考虑带有多个不等式约束的优化问题(假设目标函数值在可行域上有下界)

$$\begin{aligned} & \min_{x} \quad f_0(x) \\ & \text{s.t.} \quad f_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \cdots, m \end{aligned}$$
 (Primal)

写出其 Lagrange 函数。然后, 关于 λ 极大化 $L(x,\lambda)$, 可得:

$$\sup_{\lambda \geq 0} L(x,\lambda) = \sup_{\lambda \geq 0} \left\{ f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) \right\}$$

$$= \begin{cases} f_0(x), & f_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ +\infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$
(*)

Lagrange 对偶的几种解释 38 / 69



于是, (Primal) 的最优值可表述为:

$$p^* = \inf_{x \in \mathcal{D}} \left\{ f_0(x) \mid f_i(x) \le 0, \ i = 1, \cdots, m \right\} \stackrel{(\bigstar)}{=} \inf_{x \in \mathcal{D}} \sup_{\lambda > 0} L(x, \lambda).$$

回忆对偶问题(Dual)及对偶最优值:

$$d^* = \sup_{\lambda \ge 0} \inf_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda).$$

于是,根据 max-min 不等式,有

$$d^* = \sup_{\lambda \geq 0} \inf_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda) \leq \inf_{x \in \mathcal{D}} \sup_{\lambda \geq 0} L(x, \lambda) = p^*.$$

重要结论:

- 1. 由 max-min 不等式直接可得 $d^* \leq p^*$ (弱对偶性);
- 2. 当 $L(x,\lambda)$ 有鞍点时,强对偶性成立,且鞍点是原对偶最优解。



命题3

$$(\tilde{x}, \tilde{\lambda})$$
 是 Lagrange 函数 \longrightarrow 强对偶性成立
$$L(x, \lambda)$$
 的鞍点 \to 且 $(\tilde{x}, \tilde{\lambda})$ 为原对偶最优解

证明: 先证"⇒"。

若 $(\tilde{x}, \tilde{\lambda})$ 为 $L(x, \lambda)$ 的鞍点,则<mark>强对偶性成立</mark>。(**命题2**的结论) 根据上述结论和鞍点性质,有

(a)
$$L(\tilde{x}, \lambda) \le L(\tilde{x}, \tilde{\lambda}) \le L(x, \tilde{\lambda}), \quad \forall \lambda \ge 0, \ \forall x \in \mathcal{D},$$

(b)
$$\sup_{\lambda \geq 0} \inf_{x \in \mathcal{D}} \ L(x,\lambda) = L(\tilde{x},\tilde{\lambda}) = \inf_{x \in \mathcal{D}} \sup_{\lambda \geq 0} \ L(x,\lambda).$$



于是,有

$$g(\tilde{\lambda}) = \inf_{x \in \mathcal{D}} L(x, \tilde{\lambda}) \overset{\text{(a)}}{=} L(\tilde{x}, \tilde{\lambda}) \overset{\text{(b)}}{=} \sup_{\lambda \geq 0} \inf_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda) = \sup_{\lambda \geq 0} g(\lambda),$$

表明 $\tilde{\lambda}$ 是对偶问题的最优解。

另一方面,由

$$f_0(\tilde{x}) \le \sup_{\lambda \ge 0} \underbrace{\left\{ f_0(\tilde{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(\tilde{x}) \right\}}_{L(\tilde{x}, \lambda)} \stackrel{\text{(a)}}{=} L(\tilde{x}, \tilde{\lambda})$$

可知 $\sup_{\lambda \geq 0} L(\tilde{x}, \lambda)$ 有意义,因此 \tilde{x} 是原问题的可行解,即 $f_i(\tilde{x}) \leq 0$, $i = 1, \dots, m$ 。进一步,由

$$f_0(\tilde{x}) \le L(\tilde{x}, \tilde{\lambda}) \stackrel{\text{(b)}}{=} \inf_{x \in \mathcal{D}} \sup_{\lambda > 0} L(x, \lambda) \stackrel{\text{(*)}}{=} \inf_{x \in \mathcal{D}} \{ f_0(x) \mid f_i(x) \le 0, \ i = 1, \dots, m \},$$

可知 \tilde{x} 是原问题的最优解。综上,"⇒"得证。



下面证明: "⇐"

1. 若已知 $(\tilde{x}, \tilde{\lambda})$ 为原对偶最优解,则原对偶必可行,即

$$f_i(\tilde{x}) \le 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad \tilde{\lambda} \ge 0.$$

2. 又因为强对偶性成立,因此

$$f_0(\tilde{x}) = g(\tilde{\lambda}) = \underbrace{\inf_{x \in \mathcal{D}} \left\{ f_0(x) + \sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i f_i(x) \right\}}_{\text{Lagrange } \forall \text{||Rightharpoonup}} \leq f_0(\tilde{x}) + \underbrace{\sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{x})}_{\leq 0} \leq f_0(\tilde{x}),$$

故上式中的等号均成立。



43 / 69

由上式等号都成立,有

$$f_0(\tilde{x}) + \sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{x}) = \inf_{x \in \mathcal{D}} \left\{ f_0(x) + \sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i f_i(x) \right\} \Leftrightarrow L(\tilde{x}, \tilde{\lambda}) = \inf_{x \in \mathcal{D}} L(x, \tilde{\lambda}),$$

即 $L(\tilde{x}, \tilde{\lambda}) \leq L(x, \tilde{\lambda}), \ \forall x \in \mathcal{D}$ 。

另一方面,有

$$f_0(\tilde{x}) + \sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{x}) = f_0(\tilde{x}) = \sup_{\lambda \ge 0} \left\{ f_0(\tilde{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(\tilde{x}) \right\}$$

$$\Leftrightarrow L(\tilde{x}, \tilde{\lambda}) = \sup_{\lambda \ge 0} L(\tilde{x}, \lambda),$$

 $\mathbb{P} L(\tilde{x}, \tilde{\lambda}) \ge L(\tilde{x}, \lambda), \ \forall \lambda \ge 0.$

综上可知, $(\tilde{x}, \tilde{\lambda})$ 是 Lagrange 函数 $L(x, \lambda)$ 的一个鞍点,证毕。

- § Lagrange 对偶
- § Lagrange 对偶问题
- § Lagrange 对偶的几种解释
- 最优性条件
- § 敏感性分析
- § 利用对偶理解"启发式"方法

最优性条件



最优性条件:研究最优解所要满足的条件。

考虑一般优化问题(可能非凸)

min
$$f_0(x)$$

s.t. $f_i(x) \le 0$, $i = 1, \dots, m$, (Primal)
 $h_j(x) = 0$, $j = 1, \dots, p$.

假设: (考虑简单情形)

- 问题的定义域为 \mathbb{R}^n ,即 $\left(\bigcap_{i=0}^m \operatorname{dom} f_i\right) \cap \left(\bigcap_{j=1}^p \operatorname{dom} h_j\right) = \mathbb{R}^n$;
- 函数 f_i , $i = 0, 1, \dots, m$ 和 h_j , $j = 1, 2, \dots, p$ 均可微;
- 问题的最优解 x^* 和 最优值 p^* 存在,且强对偶成立。

写出其对偶函数
$$g(\lambda, \nu) = \inf_{x} \left\{ f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \sum_{j=1}^p \nu_j h_j(x) \right\}$$
 和对偶问题

$$\max_{\lambda, \nu} g(\lambda, \nu), \quad \text{s.t.} \quad \lambda \ge 0.$$
 (**Dual**)

最优性条件 44 / 68

最优性条件: 互补松弛



假设对偶问题的解也存在,记为 (λ^*, ν^*) 。于是,有

$$\underbrace{f_0(x^*)}_{\text{根据强对偶假设}} = \inf_{x} \left\{ f_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(x) + \sum_{j=1}^p \nu_j^* h_j(x) \right\} \\
\leq f_0(x^*) + \sum_{i=1}^m \underbrace{\lambda_i^* f_i(x^*)}_{\leq 0} + \sum_{j=1}^p \underbrace{\nu_j^* h_j(x^*)}_{=0} \\
\leq f_0(x^*), \tag{1}$$

其中

- 根据 $f_i(x^*) \leq 0$ 和 $\lambda_i^* \geq 0$, $\forall i = 1, 2, \dots, m$, 有 $\lambda_i^* f_i(x^*) \leq 0$;
- 根据 $h_j(x^*) = 0$, $\forall j = 1, 2, \dots, p$, $\forall j = 1, 2, \dots, p$, $\forall j = 1, 2, \dots, p$

显然,上述式中等式成立,即

$$f_0(x^*) = f_0(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(x^*) + \sum_{j=1}^p \nu_j^* h_j(x^*).$$

最优性条件: 互补松弛



于是,可以得到如下重要结论:

$$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* f_i(x^*) = 0.$$

由原对偶可行性可知, 求和项每项都非正, 因此

$$\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, \quad \forall i = 1, \dots, m,$$

$$\implies \begin{cases} \lambda_i^* > 0, & \Longrightarrow f_i(x^*) = 0, \\ f_i(x^*) < 0, & \Longrightarrow \lambda_i^* = 0. \end{cases}$$

上述性质称为互补松弛条件 (complementary slackness)。

该条件表明:在最优点处,如果第 i 个约束没起作用(即 $f_i(x^*)<0$),则相应的最优 Lagrange 乘子 $\lambda_i^*=0$ 。

最优性条件 46 / 69

最优性条件:稳定性



进一步,由式(1)可知:

$$\inf_{x} L(x, \lambda^*, \nu^*) = \inf_{x} \left\{ f_0(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* f_i(x) + \sum_{j=1}^{p} \nu_j^* h_j(x) \right\}$$
$$= f_0(x^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* f_i(x^*) + \sum_{j=1}^{p} \nu_j^* h_j(x^*) = L(x^*, \lambda^*, \nu^*).$$

上式表明 $L(x, \lambda^*, \nu^*)$ 关于 x 在 x^* 处取得极小值。 根据无约束优化问题的 最优性条件可知:(非凸时仅为必要条件)

$$\frac{\partial L(x, \lambda^*, \nu^*)}{\partial x} \bigg|_{x=x^*} = 0,$$

$$\Rightarrow \nabla f_0(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla f_i(x^*) + \sum_{j=1}^p \nu_j^* \nabla h_j(x^*) = 0.$$

上述等式称为稳定性条件 (stationarity)。

KKT 条件



KKT 条件(最优解的必要条件)

对于**可微**且**对偶间隙为 0** 的优化问题,原对偶最优解 (x^*, λ^*, ν^*) 必须满足条件:

$$f_i(x^*) \leq 0, \quad i=1,\cdots,m, \qquad ext{(primal feasibility)}$$
 $h_j(x^*) = 0, \quad j=1,\cdots,p, \qquad ext{(primal feasibility)}$ $\lambda_i^* \geq 0, \quad i=1,\cdots,m, \qquad ext{(dual feasibility)}$ $\lambda_i^* f_i(x^*) = 0, \quad i=1,\cdots,m, \qquad ext{(complementary slackness)}$

$$\nabla f_0(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla f_i(x^*) + \sum_{j=1}^p \nu_j^* \nabla h_j(x^*) = 0,$$
 (stationarity)

以上条件合称为 Karush-Kuhn-Tucker (KKT) 条件。

思考: KKT 条件一般只是必要条件,那么对于凸优化问题如何,即如果 $(\tilde{x}, \tilde{\lambda}, \tilde{\nu})$ 满足 KKT 条件,是否能推导它是 (Primal) 和 (Dual) 的最优解?

最优性条件 48 / 69

KKT 条件与凸优化问题



定理 2 (KKT 条件是原对偶最优解的充要条件)

对于目标函数和约束函数均可微, 且强对偶性成立的凸优化问题, 有:

 $(\tilde{x}, \tilde{\lambda}, \tilde{\nu})$ 为原对偶最优解 \iff $(\tilde{x}, \tilde{\lambda}, \tilde{\nu})$ 满足 **KKT** 条件.

证明:

- 对于 "⇒" (必要性),我们已经证明了最优解必满足KKT条件;
- 对于 " \Leftarrow " (**充分性**),由 \tilde{x} 和 ($\tilde{\lambda}, \tilde{\nu}$) 可行,只需证明 $g(\tilde{\lambda}, \tilde{\nu}) = f_0(\tilde{x})$,即可进一步推出 \tilde{x} 和 ($\tilde{\lambda}, \tilde{\nu}$) 分别是(Primal)和(Dual)的最优解。具体分析如下:
- 1. 由于目标函数和约束函数均是可微凸函数,因此 $L(x, \tilde{\lambda}, \tilde{\nu})$ 是关于 x 的可 微凸函数。于是,可知

$$\underbrace{\frac{\partial L(x,\tilde{\lambda},\tilde{\nu})}{\partial x}\bigg|_{x=\tilde{x}}}_{\text{stationarity}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{x} = \arg\min_{x} \ L(x,\tilde{\lambda},\tilde{\nu})$$

KKT 条件与凸优化问题



2. 根据 Lagrange 对偶函数的定义:

$$\begin{split} g(\tilde{\lambda},\tilde{\nu}) &= \inf_x \ L(x,\tilde{\lambda},\tilde{\nu}) = L(\tilde{x},\tilde{\lambda},\tilde{\nu}) \\ &= f_0(\tilde{x}) + \underbrace{\sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i f_i(\tilde{x})}_{=0, \text{ 由互补松弛}} + \underbrace{\sum_{j=1}^p \tilde{\nu}_j h_j(\tilde{x})}_{=0, \text{ 由原问题可行性}} = f_0(\tilde{x}) \end{split}$$

3. 根据弱对偶定理,有 $d^* \leq p^*$ 。另一方面,根据原对偶最优解的定义,有

$$d^* = \sup_{\lambda \ge 0, \nu} g(\lambda, \nu) \ge g(\tilde{\lambda}, \tilde{\nu}) = f_0(\tilde{x}) \ge p^*.$$

故上式中等式成立,于是

$$\begin{split} d^* &= \sup_{\lambda \geq 0, \, \nu} \, g(\lambda, \, \nu) = g(\tilde{\lambda}, \, \tilde{\nu}), \\ p^* &= f_0(\tilde{x}). \end{split}$$

因此, $(\tilde{x}, \tilde{\lambda}, \tilde{\nu})$ 为**原对偶最优解**,证毕。

KKT 条件



总结:

- 对于一般的**可微凸优化问题**,如果强对偶性成立,则 KKT 条件为原对 偶最优解需要满足的**充要条件**
- 对于一般的**可微(非凸)优化问题**,如果强**对偶成立**,则 KKT 条件为 原对偶最优解需要满足的**必要条件**
- 绝大部分优化算法都是在寻找满足 KKT 条件及其推广条件的点

KKT (Karush-Kuhn-Tucker) 条件的相关历史(非正式叙述):

- Lagrange 最早研究了带有等式约束的优化问题的最优性条件
- Kuhn 和 Turker 在1951年给出了带有不等式约束的优化问题的最优性 条件
- 之后,人们发现 Karush 早在他1939年未发表的硕士论文中已提出了同样的最优性条件

最优性条件 51/69

例:一阶可微凸优化问题



考虑非负约束的可微凸优化问题:

$$\min_{x} f_0(x), \quad \text{s.t.} \quad x \ge 0.$$

写出它的 KKT 条件:

$$\begin{cases} x^* \geq 0, \\ \lambda^* \geq 0, \\ \lambda^*_i(-x^*_i) = 0, \ i = 1, \dots, n, \\ \nabla f_0(x^*) + (-\lambda^*) = 0. \end{cases} \iff \begin{cases} x^* \geq 0, \\ \nabla f_0(x^*) \geq 0, \\ x^*_i \left[\nabla f_0(x^*) \right]_i = 0, \ i = 1, \dots, n. \end{cases}$$

显然,对了该问题,Slater's condition 成立,因此<mark>强对偶性成立</mark>,进而满足 KKT 条件的点即为问题的最优解。

请同学们同时回顾第一章课件P91例2.

例: 注水算法



注水(water filling)算法与问题背景

将总和为1的总功率的信号分配到n个信道传输,以获得最大通信速率:

$$\min_{x} - \sum_{i=1}^{n} \log(\alpha_{i} + x_{i}) \leftarrow$$
等价于最小化负通信率
s.t. $x \ge 0 \leftarrow$ 功率非负
 $\mathbf{1}^{T}x = 1 \leftarrow$ 功率总和为1

其中 $\alpha_i > 0$ 是已知的量,它代表第i个信道的状况。

该问题的 KKT 条件为

$$x^* \ge 0$$
 $\mathbf{1}^{\top} x^* = 1$
 $\lambda^* \ge 0$
 $\lambda_i^* x_i^* = 0, \quad i = 1, \dots, n$
 $-\frac{1}{\alpha_i + x_i^*} - \lambda_i^* + \nu^* = 0, \quad i = 1, \dots, n$

例: 注水算法(续)



根据
$$-\frac{1}{\alpha_i + x_i^*} - \lambda_i^* + \nu^* = 0, \ \lambda^* \ge 0 \ \text{和} \ \lambda_i^* x_i^* = 0 \ \text{有}$$
:

$$u^* \ge \frac{1}{\alpha_i + x_i^*}, \quad x_i^* \left(\nu^* - \frac{1}{\alpha_i + x_i^*} \right) = 0, \quad i = 1, \cdots, n$$

1. 若
$$\nu^* < \frac{1}{\alpha_i}$$
,根据 $\nu^* \ge \frac{1}{\alpha_i + x_i^*}$,可得 $\frac{1}{\alpha_i} > \nu^* \ge \frac{1}{\alpha_i + x_i^*} \Rightarrow x_i^* > 0$;于是,由互补条件可知 $\lambda_i^* = 0$,此时 $x_i^* = \frac{1}{\nu^*} - \alpha_i$;

2. 若
$$\nu^* > \frac{1}{\alpha_i}$$
,则由 $x_i^* \ge 0$ 可知 $\nu^* > \frac{1}{\alpha_i + x_i^*}$ 。再由 $x_i^* (\nu^* - 1/(\alpha_i + x_i^*)) = 0$,可知 $x_i^* = 0$;

3. 若
$$\nu^* = \frac{1}{\alpha_i}$$
,也可根据 $x_i^* (\nu^* - 1/(\alpha_i + x_i^*)) = 0$ 推出 $x_i^* = 0$.

例: 注水算法(续)



综上,
$$x_i^* = \max\left\{0, \frac{1}{\nu^*} - \alpha_i\right\}$$
,其中 ν^* 满足 $\sum_{i=1}^n \max\left\{0, \frac{1}{\nu^*} - \alpha_i\right\} = 1$;

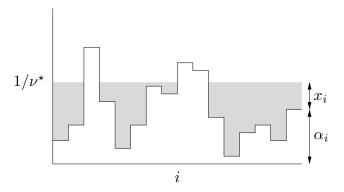


Fig. 求解该问题 KKT 点的算法有个很"形象"的名称: 注水算法。假设我们有一口底部不平整的缸, α_i 是缸底第 i 片区域的高度。逐渐向缸中注水,记水位为 $\frac{1}{\nu}$ 。不断注水直至总水量为 1。此时,第 i 个区域对应的水位深度即为 x_i^* !

- § Lagrange 对偶
- § Lagrange 对偶问题
- § Lagrange 对偶的几种解释
- § 最优性条件

§ 敏感性分析

图 利用对偶理解"启发式"方法

*敏感性分析



在本节,我们希望研究约束条件的变化会如何影响原问题的最优值。

考虑一般优化问题

min
$$f_0(x)$$

s.t. $f_i(x) \le 0$, $i = 1, \dots, m$, $h_j(x) = 0$, $j = 1, \dots, p$.

记该问题定义域 $\mathcal{D} = \bigcap_{i=0}^m \operatorname{dom} f_i \cap \bigcap_{j=0}^p \operatorname{dom} h_j$.

考虑对该优化问题的约束施加扰动:

一般优化问题的扰动问题

min
$$f_0(x)$$

s.t. $f_i(x) \le u_i$, $i = 1, \dots, m$,
 $h_j(x) = w_j$, $j = 1, \dots, p$.

记扰动问题的最优值为 $p^*(u,w)$ 。原问题的最优值自然对应为 $p^*(0,0)$



性质1

若原问题为凸优化问题,则 $p^*(u,w)$ 是关于(u,w)的凸函数。

证明:回顾凸优化问题的定义:

$$\min_{x} f_{0}(x)$$
 $f_{0}: 凸函数;$
s.t. $f_{i}(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad f_{i}: 凸函数;$
 $h_{j}(x) = 0, \quad j = 1, \dots, p, \quad h_{j}(x) = a_{j}^{\top} x - b_{j}: 仿射函数.$

根据带有扰动的一般优化问题的定义,将 $p^*(u,w)$ 记为

$$p^*(u,w) = \left\{ \begin{array}{ll} \inf_{x \in \mathcal{D}} \left\{ f_0(x) \middle| \begin{array}{ll} f_i(x) \leq u_i, & i = 1, \cdots, m \\ h_j(x) = w_i, & j = 1, \cdots, p \end{array} \right\}, \quad \text{如果问题可行;} \\ + \infty, \quad \text{如果问题不可行.} \end{array} \right.$$

敏感性分析 57/69



对于函数 $p^*(u, w)$, 易知它的定义域 $\operatorname{dom} p^* = \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p$ 为凸集。

考虑任意两组 $(u^{(1)},w^{(1)}), (u^{(2)},w^{(2)})\in \mathrm{dom}\, p^*$,其对应扰动问题的可行域,分别记为

$$\mathcal{X}_{1}^{*} = \left\{ x \in \mathcal{D} \middle| \begin{array}{l} f_{i}(x) \leq u_{i}^{(1)}, & i = 1, \dots, m \\ h_{j}(x) = w_{i}^{(1)}, & j = 1, \dots, p \end{array} \right\}$$

和

$$\mathcal{X}_{2}^{*} = \left\{ x \in \mathcal{D} \middle| \begin{array}{l} f_{i}(x) \leq u_{i}^{(2)}, & i = 1, \dots, m \\ h_{j}(x) = w_{i}^{(2)}, & j = 1, \dots, p \end{array} \right\}$$

1. 如果 $\mathcal{X}_1^* = \emptyset$ 或 $\mathcal{X}_2^* = \emptyset$, 则 $p^*(u^{(1)}, w^{(1)}) = +\infty$ 或 $p^*(u^{(2)}, w^{(2)}) = +\infty$.

因此,对 $\forall \theta \in [0,1]$ 有

$$\theta p^*(u^{(1)}, w^{(1)}) + (1 - \theta) p^*(u^{(2)}, w^{(2)})$$

$$\geq p^*(\theta u^{(1)} + (1 - \theta) u^{(2)}, \theta w^{(1)} + (1 - \theta) w^{(2)})$$



2. 如果 $\mathcal{X}_1^* \neq \emptyset$ 且 $\mathcal{X}_2^* \neq \emptyset$,则根据凸优化问题的性质,对 $\forall x_1 \in \mathcal{X}_1^*$, $\forall x_2 \in \mathcal{X}_2^*$ 和 $\forall \theta \in [0,1]$,有以下结论:

- $\theta x_1 + (1 \theta) x_2 \in \mathcal{D}$; (根据 $x_1, x_2 \in \mathcal{D} \ \mathbb{L} \ \mathcal{D}$ 为凸集)
- $f_i(\theta x_1 + (1-\theta)x_2) \le \theta f_i(x_1) + (1-\theta)f_i(x_2) \le \theta u_i^{(1)} + (1-\theta)u_i^{(2)};$ (根据 $f_i, i = 1, \dots, m,$ 为凸函数)
- $h_j(\theta x_1 + (1-\theta)x_2) = \theta h_j(x_1) + (1-\theta)h_j(x_2) = \theta w_j^{(1)} + (1-\theta)w_j^{(2)}$; (根据 $h_j, j = 1, \cdots, p$, 为仿射函数)

上述结论表明: 凸组合 $\theta x_1 + (1-\theta)x_2$ 是扰动问题

min
$$f_0(x)$$

s.t. $f_i(x) \le \theta u_i^{(1)} + (1 - \theta) u_i^{(2)}, \quad i = 1, \dots, m,$
 $h_j(x) = \theta w_i^{(1)} + (1 - \theta) w_i^{(2)}, \quad j = 1, \dots, p,$

的一个**可行解**,因此对 $\forall x_1 \in \mathcal{X}_1^*, \forall x_2 \in \mathcal{X}_2^*$ 和 $\forall \theta \in [0,1]$ 必有

$$f_0(\theta x_1 + (1-\theta)x_2) \ge p^*(\theta u^{(1)} + (1-\theta)u^{(2)}, \, \theta w^{(1)} + (1-\theta)w^{(2)})$$



3. 进一步,根据目标函数 f_0 的凸性和上述不等式,有

$$\theta f_0(x_1) + (1 - \theta) f_0(x_2) \ge f_0(\theta x_1 + (1 - \theta) x_2)$$

$$\ge p^*(\theta u^{(1)} + (1 - \theta) u^{(2)}, \, \theta w^{(1)} + (1 - \theta) w^{(2)}).$$

于是,取不等式左侧 $\theta f_0(x_1) + (1-\theta)f_0(x_2)$ 的下确界,有

$$\inf_{x_1 \in \mathcal{X}_1^*, x_2 \in \mathcal{X}_2^*} \left\{ \theta f_0(x_1) + (1 - \theta) f_0(x_2) \right\}
= \inf_{x_1 \in \mathcal{X}_1^*} \theta f_0(x_1) + \inf_{x_2 \in \mathcal{X}_2^*} (1 - \theta) f_0(x_2) \qquad (\text{根据变量 } x_1, x_2 \text{ 的可分性})
= \theta p^*(u^{(1)}, w^{(1)}) + (1 - \theta) p^*(u^{(2)}, w^{(2)}).$$

结合上述两式可得

$$\theta p^*(u^{(1)}, w^{(1)}) + (1 - \theta) p^*(u^{(2)}, w^{(2)}) \ge p^*(\theta u^{(1)} + (1 - \theta) u^{(2)}, \frac{\theta w^{(1)} + (1 - \theta) w^{(2)}}{\theta u^{(1)}}).$$

函数 $p^*(u, w)$ 的凸性由此得证!



性质2

若原问题为<mark>凸问题</mark>,对偶间隙为 0,设 (λ^*, ν^*) 为原问题对偶最优解,

$$p^*(u, w) \ge p^*(0, 0) - (\lambda^*)^\top u - (\nu^*)^\top w.$$

证明:设 \tilde{x} 为扰动问题的任意可行解,即

$$\tilde{x} \in \mathcal{X} = \left\{ x \in \mathcal{D} \middle| \begin{array}{ll} f_i(\tilde{x}) \leq u_i & i = 1, \dots, m \\ h_j(\tilde{x}) = w_j & j = 1, \dots, p \end{array} \right\}$$

进一步,根据对偶间隙为0,有

$$p^{*}(0,0) = g(\lambda^{*}, \nu^{*})$$

$$\leq f_{0}(\tilde{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_{i}^{*} f_{i}(\tilde{x}) + \sum_{j=1}^{p} \nu_{j}^{*} h_{j}(\tilde{x}) \quad \text{根据} g(\lambda^{*}, \nu^{*}) = \inf_{x} L(x, \lambda^{*}, \nu^{*})$$

$$\leq f_{0}(\tilde{x}) + (\lambda^{*})^{\top} u + (\nu^{*})^{\top} w \qquad \text{根据} f_{i}(\tilde{x}) \leq u_{i}, h_{j}(\tilde{x}) = w_{j}$$

$$\Rightarrow f_{0}(\tilde{x}) \geq p^{*}(0,0) - (\lambda^{*})^{\top} u - (\nu^{*})^{\top} w$$

$$\Rightarrow f_0(\tilde{x}) \ge p^*(0,0) - (\lambda^*)^{\top} u - (\nu^*)^{\top} w$$

$$\Rightarrow p^*(u,w) \ge p^*(0,0) - (\lambda^*)^\top u - (\nu^*)^\top w. \quad \text{Rff } p^*(u,w) = \inf_{x \in \mathcal{X}} f_0(x)$$

至此性质 2 得证。



根据性质2可以观察到:

- 若 λ_i^* 很大,如果加强不等式约束为 $f_i(x) \le u_i < 0$,则最优值增大。
- 若 ν_i^* 为较大的正值,如果 $w_i < 0$,则最优值增大。
- $\ddot{x} \nu_i^*$ 为较小的负值,如果 $w_i > 0$,则最优值增大。

性质3 (局部敏感性)

若原问题为凸,对偶间隙为 0 且 $p^*(u,w)$ 在 (u,w)=(0,0) 点处可微,则原始问题的最优对偶变量 (λ^*,ν^*) 满足

$$\lambda_i^* = -\nabla_{u_i} p^*(0,0), \qquad \nu_i^* = -\nabla_{w_i} p^*(0,0).$$

性质3表明,在局部区域有

$$p^*(u, w) \approx p^*(0, 0) + \nabla^{\top} p^*(0, 0) \begin{bmatrix} u \\ w \end{bmatrix} = p^*(0, 0) - (\lambda^*)^{\top} u - (\nu^*)^{\top} w.$$

- § Lagrange 对偶
- § Lagrange 对偶问题
- § Lagrange 对偶的几种解释
- § 最优性条件
- § 敏感性分析
- 图 利用对偶理解"启发式"方法



0-1 整数线性规划问题(非凸)

min
$$c^{\top}x$$

s.t. $Ax \leq b$, $x_i \in \{0, 1\}, i = 1, \dots, n$,

其中决策变量x的每一个分量 x_i 只能取值0或1。

思路1: 一种容易想到的思路是对约束 $x_i \in \{0,1\}$ 进行松弛。

0-1 整数线性规划的松弛问题

min
$$c^{\top}x$$

s.t. $Ax \leq b$,
 $0 \leq x_i \leq 1, i = 1, \dots, n$.

- 松弛过后的问题成为线性规划问题(凸);
- 显然,松弛问题的最优值比原来要更小,但最优解不一定取值为0或1。



64 / 69

思路2: 为了避免改变可行域,我们考虑等价地改写约束 $x_i \in \{0,1\}$ 。

0-1 整数线性规划的等价问题

min
$$c^{\top}x$$

s.t. $Ax \leq b$,
 $x_i(x_i - 1) = 0, i = 1, \dots, n$.

显然, 该等价问题的可行域和最优解都与原问题相同。

进一步,写出等价问题的 Lagrange 函数

$$L(x,\lambda,\nu) = c^{\top}x + \lambda^{\top}(Ax - b) + \sum_{i=1}^{n} \nu_i(x_i^2 - x_i)$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \nu_i x_i^2 + \left(c + \lambda^{\top}A - \nu^{\top}\right)^{\top}x - \lambda^{\top}b$$



写出对偶函数:

$$g(\lambda, \nu) = \inf_{x} L(x, \lambda, \nu)$$

$$= \begin{cases}
-\lambda^{\top} b - \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{n} \frac{(c_i + a_i^{\top} \lambda - \nu_i)^2}{\nu_i}, & \nu_i \ge 0, \ \forall i = 1, 2, \cdots, n, \\
-\infty, & \text{otherwise,}
\end{cases}$$

其中 a_i 为矩阵A的第i列。

写出对偶问题:

$$\max \quad -\lambda^{\top} b - \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{n} \frac{(c_i + a_i^{\top} \lambda - \nu_i)^2}{\nu_i}$$

s.t. $\lambda \ge 0$, $\nu \ge 0$.



进一步,可以利用 $\max_{\lambda} g(\lambda, \nu) = \max_{\lambda} \max_{\nu} g(\lambda, \nu)$ 消去 ν 。

事实上,对任意 λ ,考虑关于 ν 的优化问题:

$$\max_{\nu \ge 0} \quad -\lambda^{\top} b - \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{n} \frac{(c_i + a_i^{\top} \lambda - \nu_i)^2}{\nu_i}$$

$$\Leftrightarrow \quad -\lambda^{\top} b + \sum_{i=1}^{n} \max_{\nu_i \ge 0} \left\{ -\frac{1}{4} \frac{(c_i + a_i^{\top} \lambda - \nu_i)^2}{\nu_i} \right\}$$

对于
$$z_i^* := \max_{\nu_i \ge 0} \left\{ -\frac{1}{4} \frac{(c_i + a_i^\top \lambda - \nu_i)^2}{\nu_i} \right\}$$
,可通过分情况讨论:
$$z_i^* := \left\{ \begin{array}{l} c_i + a_i^\top \lambda, & c_i + a_i^\top \lambda \le 0, & (\nu_i^{*,\lambda} = -(c_i + a_i^\top \lambda)) \\ 0, & c_i + a_i^\top \lambda > 0, & (\nu_i^{*,\lambda} = c_i + a_i^\top \lambda) \end{array} \right.$$
$$= \min \left\{ 0, c_i + a_i^\top \lambda \right\}.$$



于是,可以将对偶问题等价地改写为

$$\max_{\lambda} \quad -\lambda^{\top} b + \sum_{i=1}^{n} \min \left\{ 0, c_i + a_i^{\top} \lambda \right\}, \quad \text{s.t.} \quad \lambda \ge 0.$$

引入新变量 ω ,上述问题可进一步等价于

$$\max_{\lambda, \omega} \quad -\lambda^{\top} b + \mathbf{1}^{\top} \omega$$
s.t. $\lambda \ge 0, \quad \omega \le 0,$

$$\omega_{i} \le a_{i}^{\top} \lambda + c_{i}, \quad i = 1, \dots, n,$$

其中1为元素都为1的向量。



回顾 0-1 整数线性规划的松弛问题:

min
$$c^{\top}x$$

s.t. $Ax \le b$
 $0 \le x_i \le 1, i = 1, \dots, n.$

它的拉格朗日函数为

$$L(x, u, v, t) = c^{\mathsf{T}} x + u^{\mathsf{T}} (Ax - b) - v^{\mathsf{T}} x + t^{\mathsf{T}} (x - \mathbf{1})$$
$$= (c + A^{\mathsf{T}} u - v + t)^{\mathsf{T}} x - b^{\mathsf{T}} u - \mathbf{1}^{\mathsf{T}} t.$$

对偶函数为

$$g(u, v, t) = \begin{cases} -b^{\top} u - \mathbf{1}^{\top} t, & c + A^{\top} u - v + t = 0, \\ -\infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

对偶问题为

$$\begin{aligned} \max_{u,v,t} & -b^\top u - \mathbf{1}^\top t & \max_{u,t} & -b^\top u - \mathbf{1}^\top t \\ \text{s.t.} & c + A^\top u - v + t = 0 & \Leftrightarrow & \text{s.t.} & c + A^\top u + t \geq 0 \\ & u \geq 0, \ v \geq 0, \ t \geq 0. & u \geq 0, \ t \geq 0. \end{aligned}$$



对比"松弛问题"的对偶和"等价问题"的对偶:

$$\max_{u,t} \quad -b^{\top}u - \mathbf{1}^{\top}t \qquad \max_{\lambda,\omega} \quad -\lambda^{\top}b + \mathbf{1}^{\top}\omega$$

$$\text{s.t.} \quad c + A^{\top}u + t \ge 0 \iff \text{s.t.} \quad \lambda \ge 0, \quad \omega \le 0,$$

$$u \ge 0, \quad t \ge 0. \qquad \omega_i \le a_i^{\top}\lambda + c_i \quad i = 1, \dots, n.$$

