第四章 最优性理论

修贤超

https://xianchaoxiu.github.io

目录

- 4.1 最优化问题解的存在性
- 4.2 无约束可微问题的最优性理论
- 4.3 无约束不可微问题的最优性理论
- 4.4 对偶理论
- 4.5 一般约束优化问题的最优性理论
- 4.6 带约束凸优化问题的最优性理论
- 4.7 约束优化最优性理论应用实例

最优化问题解的存在性

- 考虑优化问题

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & x \in \mathcal{X} \end{aligned}$$

- 首先分析最优解的存在性, 然后考虑如何求出其最优解
- 回顾 Weierstrass 定理, 即定义在紧集上的连续函数一定存在最大 (最小) 值点
- 而在许多实际问题中, 定义域可能不是紧的, 目标函数也不一定连续

推广的 Weierstrass 定理

- 若函数 $f : \mathcal{X} \to (-\infty, +\infty]$ 适当且闭, 且以下条件中任意一个成立
  - $\mathrm{dom}\ f = \{x \in \mathcal{X} : f(x) < +\infty\}$ 是有界的
  - 存在一个常数 $\bar{\gamma}$ 使得下水平集

    $$C_{\bar{\gamma}} = \{x \in \mathcal{X} : f(x) \leq \bar{\gamma}\}$$

    是非空且有界的
  - f 是强制的, 即对于任一满足 $\|x^k\| \to +\infty$ 的点列 $\{x^k\} \subset \mathcal{X}$, 都有

    $$\lim_{k\to\infty} f(x^k) = +\infty,$$

  则函数 f 的最小值点集 $\{x \in \mathcal{X} \mid f(x) \leq f(y), \forall y \in \mathcal{X}\}$ 非空且紧

注记

- 三个条件在本质上都是保证 $f(x)$ 的最小值不能在无穷远处取到
- 定理仅要求 $f(x)$ 为适当且闭的函数, 并不需要 $f(x)$ 的连续性
- 例子 当定义域不是有界闭集时, 对于强制函数 $f(x) = x^2$, $x \in \mathcal{X} = \mathbb{R}$, 其全局最优解一定存在
- 例子 对于适当且闭的函数 $f(x) = e^{-x}$, $x \in \mathcal{X} = \mathbb{R}$, 不满足三个条件中任意一个, 因此不能断言其全局极小值点存在

目录

- 4.1 最优化问题解的存在性
- 4.2 无约束可微问题的最优性理论
- 4.3 无约束不可微问题的最优性理论
- 4.4 对偶理论
- 4.5 一般约束优化问题的最优性理论
- 4.6 带约束凸优化问题的最优性理论
- 4.7 约束优化最优性理论应用实例

无约束可微问题的最优性理论

- 无约束可微优化问题通常表示为

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad f(x)$$

- 验证一个点是否为极小值点，称其为最优性条件
  - 一阶最优性条件
  - 二阶最优性条件

下降方向

- 对于可微函数 f 和点 $x \in \mathbb{R}^n$, 如果存在向量 d 满足

$$\nabla f(x)^\top d < 0$$

  那么称 d 为 f 在点 x 处的一个下降方向

- 一阶最优性条件是利用梯度 (一阶) 信息来判断给定点的最优性
- 如果 f 在点 x 处存在一个下降方向 d, 那么对于任意的 $T > 0$, 存在 $t \in (0, T]$, 使得

$$f(x + td) < f(x)$$

  因此, 在局部最优点处不能有下降方向

一阶必要条件

- 假设 f 在全空间 $\mathbb{R}^n$ 可微. 如果 x^* 是一个局部极小点, 那么

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

证明 任取 $v \in \mathbb{R}^n$, 考虑 f 在点 $x = x^*$ 处的泰勒展开

$$f(x^* + tv) = f(x^*) + tv^\top \nabla f(x^*) + o(t)$$

整理得

$$\frac{f(x^* + tv) - f(x^*)}{t} = v^\top \nabla f(x^*) + o(1)$$

根据 x^* 的最优性, 在上式中分别对 t 取点 0 处的左、右极限可知

$$\lim_{t \to 0^+} \frac{f(x^* + tv) - f(x^*)}{t} = v^\top \nabla f(x^*) \geq 0$$
$$\lim_{t \to 0^-} \frac{f(x^* + tv) - f(x^*)}{t} = v^\top \nabla f(x^*) \leq 0$$

即对任意的 v 有 $v^\top \nabla f(x^*) = 0$, 由 v 的任意性知 $\nabla f(x^*) = 0$

二阶最优性条件

- 称满足 $\nabla f(x)=0$ 的点 x 为 f 的稳定点 (或驻点、临界点)
- 对于 $f(x)=x^3$, 满足 $f'(x)=0$ 的点为 $x^*=0$, 但其不是局部最优解, 因此仅仅是必要条件，还需要加一些额外的限制条件, 才能保证最优解的充分性
- 假设 f 在点 x 的一个开邻域内是二阶连续可微的, 考虑

$$f(x+d)=f(x)+\nabla f(x)^\top d+\frac{1}{2}d^\top\nabla^2 f(x)d+o(\|d\|^2)$$

- 当一阶必要条件满足时, 简化为

$$f(x+d)=f(x)+\frac{1}{2}d^\top\nabla^2 f(x)d+o(\|d\|^2)$$

二阶最优性条件

- 假设 f 在点 x 的一个开邻域内是二阶连续可微的，则以下最优性条件成立
  - **二阶必要条件** 若x^* 是 f 的一个局部极小点, 则

$$\nabla f(x^*) = 0, \nabla^2 f(x^*) \succeq 0$$

  - **二阶充分条件** 若满足

$$\nabla f(x^*) = 0, \nabla^2 f(x^*) \succ 0$$

  则 x^* 是 f 的一个局部极小点
- 对于给定点的全局最优性判断还需要借助实际问题的性质

二阶最优性条件

- **必要性** 若 $\nabla^2 f(x^*)$ 有负的特征值 $\lambda_- < 0$, 设 $\nabla^2 f(x^*)d = \lambda_- d$, 则

$$\frac{f(x^*+d) - f(x^*)}{\|d\|^2} = \frac{1}{2}\frac{d^\top}{\|d\|}\nabla^2 f(x^*)\frac{d}{\|d\|} + o(1) = \frac{1}{2}\lambda_- + o(1)$$

当 $\|d\|$ 充分小时, $f(x^*+d) < f(x^*)$, 这和点 x^* 的最优性矛盾

- **充分性** 由 $\nabla f(x^*) = 0$ 时的二阶展开,

$$\frac{f(x^*+d) - f(x^*)}{\|d\|^2} = \frac{d^\top \nabla^2 f(x^*)d + o(\|d\|^2)}{\|d\|^2} \geq \frac{1}{2}\lambda_{\min} + o(1).$$

当 $\|d\|$ 充分小时有 $f(x^*+d) \geq f(x^*)$, 即二阶充分条件成立

实例：实数情形的相位恢复

- 考虑

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad f(x)=\sum_{i=1}^m r_i^2(x)$$

其中 $r_i(x)=(a_i^\top x)^2-b_i^2, i=1,2,\cdots,m$

- 计算梯度和的海瑟矩阵

$$\nabla f(x)=2\sum_{i=1}^m r_i(x)\nabla r_i(x)=4\sum_{i=1}^m((a_i^\top x)^2-b_i^2)(a_i^\top x)a_i$$

$$\nabla^2 f(x)=\sum_{i=1}^m(12(a_i^\top x)^2-4b_i^2)a_ia_i^\top$$

目录

- 4.1 最优化问题解的存在性
- 4.2 无约束可微问题的最优性理论
- 4.3 无约束不可微问题的最优性理论
- 4.4 对偶理论
- 4.5 一般约束优化问题的最优性理论
- 4.6 带约束凸优化问题的最优性理论
- 4.7 约束优化最优性理论应用实例

无约束不可微问题的最优性理论

- 仍考虑问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad f(x)$$

- $f(x)$ 是不可微函数，例如 $\|x\|_1$
- 目标函数可能不存在梯度和海瑟矩阵

凸优化问题一阶充要条件

- 假设 f 是适当且凸的函数, 则 x^* 为全局极小点当且仅当 $0 \in \partial f(x^*)$
  - **必要性** 因为 x^* 为全局极小点, 所以

$$f(y) \geq f(x^*) = f(x^*) + 0^\top (y - x^*), \quad \forall y \in \mathbb{R}^n$$

    因此 $0 \in \partial f(x^*)$
  - **充分性** 如果 $0 \in \partial f(x^*)$, 那么根据次梯度的定义

$$f(y) \geq f(x^*) + 0^\top (y - x^*) = f(x^*), \quad \forall y \in \mathbb{R}^n$$

    因而 x^* 为一个全局极小点

复合优化问题的一阶必要条件

- 考虑一般复合优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = f(x) + h(x)$$

其中 f 为光滑函数 (可能非凸), h 为凸函数 (可能非光滑)

- 定理 4.5　令 x^* 为复合优化问题的一个局部极小点, 那么

$$-\nabla f(x^*) \in \partial h(x^*)$$

其中 $\partial h(x^*)$ 为凸函数 h 在点 x^* 处的次梯度集合

- 由于目标函数可能是整体非凸的，因此一般没有一阶充分条件

实例: ℓ_1 范数优化问题

- 考虑

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = f(x) + \mu\|x\|_1$$

- $\|x\|_1$ 不是可微的, 但可以计算其次微分

$$\partial_i\|x\|_1 = \begin{cases} \{1\}, & x_i > 0 \\ [-1, 1], & x_i = 0 \\ \{-1\}, & x_i < 0 \end{cases}$$

- 若 x^* 是局部最优解, 则 $-\nabla f(x^*) \in \mu\partial\|x^*\|_1$, 即

$$\nabla_i f(x^*) = \begin{cases} -\mu, & x_i^* > 0 \\ a \in [-\mu, \mu], & x_i^* = 0 \\ \mu, & x_i^* < 0 \end{cases}$$

目录

- 4.1 最优化问题解的存在性
- 4.2 无约束可微问题的最优性理论
- 4.3 无约束不可微问题的最优性理论
- 4.4 对偶理论
- 4.5 一般约束优化问题的最优性理论
- 4.6 带约束凸优化问题的最优性理论
- 4.7 约束优化最优性理论应用实例

对偶理论

- 一般的约束优化问题

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) \le 0,\ i\in\mathcal{I} \\ & c_i(x) = 0,\ i\in\mathcal{E} \end{aligned}$$

- 可行域定义为

$$\mathcal{X} = \{x\in\mathbb{R}^n \mid c_i(x)\le 0,\ i\in\mathcal{I} \text{ 且 } c_i(x)=0,\ i\in\mathcal{E}\}$$

- 通过将 $\mathcal{X}$ 的示性函数加到目标函数中可以得到无约束优化问题，但是转化后问题的目标函数是不连续的、不可微的以及不是有限的

拉格朗日函数

- 拉格朗日函数 $L:\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m_+\times\mathbb{R}^p \ \rightarrow\ \mathbb{R}$

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

  - λ_i 为第 i 个不等式约束对应的拉格朗日乘子
  - ν_i 为第 i 个等式约束对应的拉格朗日乘子

- 拉格朗日对偶函数 $g:\mathbb{R}^m_+\times\mathbb{R}^p \ \rightarrow\ [-\infty,+\infty)$

$$\begin{aligned} g(\lambda,\nu) &= \inf_{x\in\mathbb{R}^n} \ L(x,\lambda,\nu) \\ &= \inf_{x\in\mathbb{R}^n} \left(f(x)+\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i c_i(x)+\sum_{i\in\mathcal{E}}\nu_i c_i(x)\right) \end{aligned}$$

拉格朗日对偶函数

- **引理 4.1** 若 $\lambda \geq 0$, 则 $g(\lambda, \nu) \leq p^*$

  证明 若 $\tilde{x} \in \mathcal{X}$, 则

$$g(\lambda, \nu) = \inf_x L(x, \lambda, \nu) \leq L(\tilde{x}, \lambda, \nu) \leq f(\tilde{x})$$

  对 $\tilde{x}$ 取下界得

$$g(\lambda, \nu) \leq \inf_{\tilde{x} \in \mathcal{X}} f(\tilde{x}) = p^*$$

拉格朗日对偶问题

- 拉格朗日对偶问题

$$\max_{\lambda\geq 0,\nu} g(\lambda,\nu) = \max_{\lambda\geq 0,\nu} \inf_{x\in\mathbb{R}^n} L(x,\lambda,\nu)$$

  - 称 λ 和 ν 为对偶变量，设最优值为 q^*
  - q^* 为 p^* 的最优下界，称 $p^* - q^*$ 为对偶间隙
  - 拉格朗日对偶问题是一个凸优化问题
  - $g = \{(\lambda,\nu) \mid \lambda \geq 0, g(\lambda,\nu) > -\infty\}$，称其元素为对偶可行解

例子　标准形式线性规划及其对偶

$$\begin{aligned} \min \quad & c^\top x \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{aligned} \qquad\qquad \begin{aligned} \max \quad & -b^\top \nu \\ \text{s.t.} \quad & A^\top \nu + c \geq 0 \end{aligned}$$

弱对偶性与强对偶性

- **弱对偶性** $d^* \le p^*$
  - 对凸问题与非凸问题都成立
  - 可导出复杂问题的非平凡下界, 例如, SDP 问题

$$\begin{aligned} \max \quad & -\mathbf{1}^\top \nu \\ \text{s.t.} \quad & W + \mathrm{diag}(\nu) \succeq 0 \end{aligned}$$

    给出了二路划分问题的一个下界

$$\min \quad x^\top W x \quad \text{s.t.} \quad x_i^2 = 1, \quad i = 1, \cdots, n$$

- **强对偶性** $d^* = p^*$
  - 对一般问题而言通常不成立
  - (通常) 对凸问题成立
  - 称保证凸问题强对偶性成立的条件为约束品性

适当锥与广义不等式

- 称满足如下条件的锥 K 为适当锥
  - K 是凸锥
  - K 是闭集
  - K 是实心的 (*solid*), 即 $\mathrm{int}\ K \neq \emptyset$
  - K 是尖的 (*pointed*), 即对任意非零向量 x, 若 $x \in K$, 则 $-x \notin K$
- 适当锥 K 可以诱导出广义不等式, 它定义了全空间上的偏序关系：

$$x \preceq_K y \ \Leftrightarrow \ y - x \in K$$

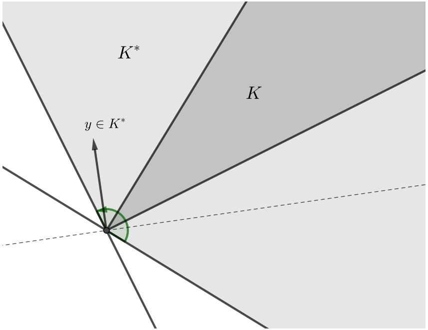
- 当 $K = \mathbb{R}^n_+$ 时, $x \preceq_K y$ 是我们之前经常使用的记号 $x \leq y$
- 当 $K = \mathcal{S}^n_+$ 时, $X \preceq_K Y$ 表示 $Y - X \succeq 0$, 即 $Y - X$ 是半正定矩阵

对偶锥与拉格朗日乘子

- 令 K 为全空间 Ω 的子集, 称集合

$$K^* = \{y \in \Omega \mid \langle x, y \rangle \geq 0,\ \forall x \in K\}$$

为其**对偶锥**



注记

- 假设非负锥 $K=\mathbb{R}^n_+, \Omega=\mathbb{R}^n$, 定义 $\langle x,y\rangle = x^\top y$, 那么 $K^*=\mathbb{R}^n_+$
- 假设半正定锥 $K=\mathcal{S}^n_+, \Omega=\mathcal{S}^n$, 定义

$$\langle X,Y\rangle = \mathrm{Tr}(XY^\top)$$

  可以证明

$$\langle X,Y\rangle \geq 0,\ \forall X\in\mathcal{S}^n_+ \quad \Leftrightarrow \quad Y\in\mathcal{S}^n_+$$

  即半正定锥的对偶锥仍为半正定锥
- 称满足 $K=K^*$ 的锥 K 为自对偶锥

广义不等式约束优化问题拉格朗日函数的构造

- **广义不等式约束优化问题**

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & f(x) \\
\text{s.t.} \quad & c_i(x) \preceq_{K_i} 0, \; i \in \mathcal{I} \\
& c_i(x) = 0, \; i \in \mathcal{E}
\end{aligned}
$$

- **拉格朗日函数**

$$
L(x,\lambda,\nu) = f(x) + \sum_{i\in\mathcal{I}} c_i(x)\lambda_i + \sum_{i\in\mathcal{E}} \nu_i c_i(x), \qquad \lambda_i \in K_i^*, \; \nu_i \in \mathbb{R}
$$

- **容易验证** $L(x,\lambda,\nu) \le f(x), \; \forall\, x \in \mathcal{X}, \; \lambda_i \in K_i^*, \; \nu_i \in \mathbb{R}$

- **对偶函数** $g(\lambda,\nu) = \inf_{x\in\mathbb{R}^n} \; L(x,\lambda,\nu)$, **对偶问题为**

$$
\max_{\lambda_i\in K_i^*,\; \nu_i\in\mathbb{R}} \quad g(\lambda,\nu)
$$

实例：线性规划问题的对偶

- **考虑线性规划问题**

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

- **拉格朗日函数**

$$L(x, s, \nu) = c^\top x + \nu^\top (Ax - b) - s^\top x = -b^\top \nu + (A^\top \nu - s + c)^\top x$$

- **对偶函数**

$$g(s, \nu) = \inf_{x} \; L(x, s, \nu) = \begin{cases} -b^\top \nu, & A^\top \nu - s + c = 0 \\ -\infty, & \text{其他} \end{cases}$$

实例：线性规划问题的对偶

- **对偶问题**

$$\begin{aligned} \max_{s,\nu} \quad & -b^\top \nu \\ \text{s.t.} \quad & A^\top \nu - s + c = 0 \\ & s \geq 0 \end{aligned} \quad \overset{y=-\nu}{\Longleftrightarrow} \quad \begin{aligned} \max_{s,y} \quad & b^\top y \\ \text{s.t.} \quad & A^\top y + s = c \\ & s \geq 0 \end{aligned}$$

- **若保留约束 $x \geq 0$, 则拉格朗日函数为**

$$L(x,y) = c^\top x - y^\top (Ax - b) = b^\top y + (c - A^\top y)^\top x$$

- **对偶问题需要将 $x \geq 0$ 添加到约束里**

$$\max_y \left\{ \inf_x \; b^\top y + (c - A^\top y)^\top x \quad \text{s.t.} \quad x \geq 0 \right\} \Rightarrow \begin{aligned} \max_y \quad & b^\top y \\ \text{s.t.} \quad & A^\top y \leq c \end{aligned}$$

实例：线性规划问题的对偶

- 将$\max\ b^\top y$ 改写为 $\min\ -b^\top y$，对偶问题的拉格朗日函数为

$$L(y,x) = -b^\top y + x^\top(A^\top y - c) = -c^\top x + (Ax-b)^\top y$$

- 得到对偶函数

$$g(x) = \inf_y\ L(y,x) = \begin{cases} -c^\top x, & Ax = b \\ -\infty, & \text{其他} \end{cases}$$

- 相应的对偶问题是

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

- 该问题与原始问题完全等价，表明线性规划问题与其对偶问题互为对偶

实例: ℓ_1 正则化问题的对偶

- 考虑

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2+\mu\|x\|_1$$

- 令 $r=Ax-b$, 问题等价于

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & \frac{1}{2}\|r\|^2+\mu\|x\|_1 \\ \text{s.t.} \quad & r=Ax-b\end{aligned}$$

- 拉格朗日函数

$$\begin{aligned}L(x,r,\lambda) &= \frac{1}{2}\|r\|^2+\mu\|x\|_1-\langle\lambda, Ax-b-r\rangle \\ &= \frac{1}{2}\|r\|^2+\lambda^\top r+\mu\|x\|_1-(A^\top\lambda)^\top x+b^\top\lambda\end{aligned}$$

实例: ℓ_1 正则化问题的对偶

- **对偶函数**

$$g(\lambda) = \inf_{x,r} L(x,r,\lambda) = \begin{cases} b^\top \lambda - \frac{1}{2}\|\lambda\|^2, & \|A^\top \lambda\|_\infty \le \mu \\ -\infty, & \text{其他} \end{cases}$$

- **对偶问题**

$$\begin{aligned} \max_{\lambda} \quad & b^\top \lambda - \frac{1}{2}\|\lambda\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & \|A^\top \lambda\|_\infty \le \mu \end{aligned}$$

实例: 半定规划问题的对偶问题

- 考虑

$$
\begin{aligned}
\min_{X\in\mathcal{S}^n} \quad & \langle C, X\rangle \\
\text{s.t.} \quad & \langle A_i, X\rangle = b_i,\ i=1,2,\cdots,m \\
& X \succeq 0
\end{aligned}
$$

- 拉格朗日函数

$$
L(X,y,S) = \langle C, X\rangle - \sum_{i=1}^{m} y_i(\langle A_i, X\rangle - b_i) - \langle S, X\rangle, \quad S\succeq 0
$$

半定规划对偶问题的对偶问题

- **对偶函数**

$$g(y,S)=\inf_X L(X,y,S)=\begin{cases} b^\top y, & \sum_{i=1}^m y_iA_i - C + S = 0 \\ -\infty, & \text{其他} \end{cases}$$

- **对偶问题**

$$\begin{aligned} \min_{y\in\mathbb{R}^m} \quad & -b^\top y \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^m y_iA_i - C + S = 0 \\ & S \succeq 0 \end{aligned}$$

目录

- 4.1 最优化问题解的存在性
- 4.2 无约束可微问题的最优性理论
- 4.3 无约束不可微问题的最优性理论
- 4.4 对偶理论
- 4.5 一般约束优化问题的最优性理论
- 4.6 带约束凸优化问题的最优性理论
- 4.7 约束优化最优性理论应用实例

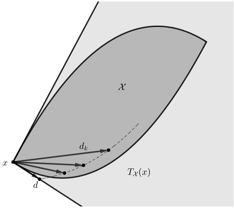
切锥

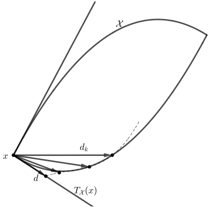
- 给定可行域 $\mathcal{X}$ 及 $x \in \mathcal{X}$, 若存在序列 $\{z_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \mathcal{X}, \lim_{k\to\infty} z_k = x$ 以及正标量序列 $\{t_k\}_{k=1}^{\infty}$, $t_k \to 0$ 满足

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

  则称向量 d 为 $\mathcal{X}$ 在点 x 处的一个**切向量**

- 所有点 x 处的切向量构成的集合称为**切锥**, 用 $T_{\mathcal{X}}(x)$ 表示





- **一般优化问题**

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & f(x) \\
\text{s.t.} \quad & c_i(x) \le 0,\ i \in \mathcal{I} \\
& c_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E}
\end{aligned}
$$

- **定理 4.6** 假设可行点 x^* 是上述问题的一个局部极小点. 如果 $f(x)$ 和 $c_i(x)$, $i \in \mathcal{I} \cup \mathcal{E}$ 在点 x^* 处是可微的, 那么

$$
d^\top \nabla f(x^*) \ge 0, \quad \forall d \in T_{\mathcal{X}}(x^*)
$$

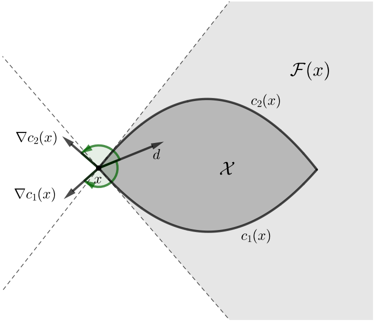
等价于

$$
T_{\mathcal{X}}(x^*) \cap \{d \mid \nabla f(x^*)^\top d < 0\} = \emptyset
$$

线性化可行锥

- 定义 4.6 对于可行点$x \in \mathcal{X}$, 定义积极集 $\mathcal{A}(x) = \mathcal{E} \cup \{i \in \mathcal{I} \mid c_i(x) = 0\}$, 点 x 处的线性化可行方向锥定义为

$$\mathcal{F}(x) = \left\{ d \;\middle|\; \begin{array}{l} d^\top \nabla c_i(x) = 0,\ \forall\ i \in \mathcal{E} \\ d^\top \nabla c_i(x) \le 0,\ \forall\ i \in \mathcal{A}(x) \cap \mathcal{I} \end{array} \right\}$$



线性化可行锥包含切锥

- 命题 4.1 设$c_i(x), i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ 一阶连续可微, 则对任意可行点 x 有

$$T_{\mathcal{X}}(x) \subseteq \mathcal{F}(x)$$

- 反之，切锥未必包含线性化可行锥

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}} \quad & f(x) = x \\ \text{s.t.} \quad & c(x) = -x + 3 \leq 0 \end{aligned}$$

- 则 $T_{\mathcal{X}}(3) = \{d \mid d \geq 0\}, \mathcal{F}(3) = \{d \mid d \geq 0\}$, 于是 $T_{\mathcal{X}}(3) = \mathcal{F}(3)$

- 将问题的约束变形为

$$c(x) = (-x+3)^3 \leq 0$$

  因为可行域不变, 故点 $x^* = 3$ 处, 切锥 $T_{\mathcal{X}}(x^*) = \{d \mid d \geq 0\}$ 不变. 由 $c'(x^*) = -3(x^* - 3)^2 = 0$ 知线性化可行锥 $\mathcal{F}(x^*) = \{d \mid d \in \mathbb{R}\}$

- 因此 $\mathcal{F}(x^*) \supset T_{\mathcal{X}}(x^*)$ (严格包含)

约束品性的引入

- 线性化可行方向锥$\mathcal{F}(x)$ 受可行域 $\mathcal{X}$ 代数表示方式的影响
- 切锥 $T_{\mathcal{X}}(x)$ 仅由可行域 $\mathcal{X}$ 决定
- 线性可行化方向锥容易计算, 但不能反映可行域 $\mathcal{X}$ 的本质特征
- 切锥能反映可行域 $\mathcal{X}$ 的本质特征, 但不容易计算
- 引入约束品性来沟通两者, 确保最优点 x^* 处 $T_{\mathcal{X}}(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$, 从而可以用 $\mathcal{F}(x)$ 取代 $T_{\mathcal{X}}(x)$

约束品性

- 定义 4.7 给定可行点x 及相应的积极集 $\mathcal{A}(x)$. 如果积极集对应的约束函数的梯度, 即 $\nabla c_i(x)$, $i \in \mathcal{A}(x)$ 是线性无关的, 则称线性无关约束品性 (LICQ) 在点 x 处成立
- 定义 4.8 给定可行点 x 及积极集 $\mathcal{A}(x)$. 如果存在一个向量 $w \in \mathbb{R}^n$, 使得

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

  并且等式约束对应的梯度集 $\{\nabla c_i(x), \ i \in \mathcal{E}\}$ 是线性无关的, 则称点 x 处 Mangasarian–Fromovitz 约束品性 (MFCQ) 成立
- 定义 4.9 若所有的约束函数 $c_i(x)$, $i \in \mathcal{I} \cup \mathcal{E}$ 都是线性的, 则称线性约束品性成立

Karush-Kuhn-Tucker(KKT) 条件: 引入

- **回顾几何最优性条件**

$$x^* \text{局部极小} \Leftrightarrow T_{\mathcal{X}}(x^*) \cap \{d \mid \nabla f(x^*)^\top d < 0\} = \varnothing$$

- $T_{\mathcal{X}}(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$ **时 (约束品性成立), 上述条件变为**

$$\left\{ d \;\middle|\; \begin{array}{l} d^\top \nabla f(x^*) < 0, \\ d^\top \nabla c_i(x^*) = 0, \ i \in \mathcal{E}, \\ d^\top \nabla c_i(x^*) \leq 0, \ i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \end{array} \right\} = \varnothing$$

- **上式依然难以验证, 但可使用 Farkas 引理进行化简**

- **引理 4.3** 设p 和 q 为两个非负整数, 给定 $\mathbb{R}^n$ 中的向量 $\{a_i\}_{i=1}^p, \{b_i\}_{i=1}^q$ 和 c, 则满足

$$\begin{aligned} d^\top a_i &= 0,\ i = 1, 2, \cdots, p \\ d^\top b_i &\geq 0,\ i = 1, 2, \cdots, q \\ d^\top c &< 0 \end{aligned}$$

的 d 不存在当且仅当存在 $\{\lambda_i\}_{i=1}^p$ 和 $\mu_i \geq 0,\ i = 1, 2, \cdots, q$, 使得

$$c = \sum_{i=1}^p \lambda_i a_i + \sum_{i=1}^q \mu_i b_i$$

从 Farkas 引理到 KKT 条件

- **由 Farkas 引理, 取** $a_i = \nabla c_i(x^*), i \in \mathcal{E}, b_i = \nabla c_i(x^*), i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$ **以及** $c = -\nabla f(x^*)$, **则** $T_{\mathcal{X}}(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$ **时几何最优性条件等价于**

$$-\nabla f(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*)$$

- **如果补充定义** $\lambda_i^* = 0, \ i \in \mathcal{I} \backslash \mathcal{A}(x^*)$, **那么**

$$-\nabla f(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{I} \cup \mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) \quad \Rightarrow \quad \text{一阶最优性条件}$$

- **对于任意的** $i \in \mathcal{I}$, **有**

$$\lambda_i^* c_i(x^*) = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{互补松弛条件}$$

- x^* **称为 KKT 点**, (x^*, λ^*) **称为 KKT 对**

- **定理 4.7** 假设x^* 是一般优化问题

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) \le 0,\ i \in \mathcal{I} \\ & c_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E} \end{aligned}$$

的一个局部最优点. 如果 $T_{\mathcal{X}}(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$ 成立, 那么存在拉格朗日乘子 λ_i^* 使得如下条件成立

$$\begin{aligned} \text{稳定性条件} \quad & \nabla_x L(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) + \sum_{i\in\mathcal{I}\cup\mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) = 0 \\ \text{原始可行性条件} \quad & c_i(x^*) = 0,\ \forall i \in \mathcal{E} \\ \text{原始可行性条件} \quad & c_i(x^*) \le 0,\ \forall i \in \mathcal{I} \\ \text{对偶可行性条件} \quad & \lambda_i^* \ge 0,\ \forall i \in \mathcal{I} \\ \text{互补松弛条件} \quad & \lambda_i^* c_i(x^*) = 0,\ \forall i \in \mathcal{I} \end{aligned}$$

二阶最优性条件: 引入

- 若x^* 是满足 KKT 条件的点, 假设 $T_{\mathcal{X}}(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$, 则 $\forall d \in \mathcal{F}(x^*)$,

$$d^\top \nabla f(x^*) = -\sum_{i\in\mathcal{E}} \underbrace{\lambda_i^* d^\top \nabla c_i(x^*)}_{=0} - \sum_{i\in\mathcal{A}(x^*)\cap\mathcal{I}} \underbrace{\lambda_i^* d^\top \nabla c_i(x^*)}_{\leq 0} \geq 0,$$

- 一阶条件无法判断 x^* 是否是最优值点
- 若 $d^\top \nabla f(x^*) = 0$, 则需用二阶信息来进一步判断可行域内的目标函数值

临界锥

- 定义 4.10　设(x^*, λ^*) 是满足 KKT 条件的 KKT 对, 定义临界锥为

$$\mathcal{C}(x^*, \lambda^*) = \{d \in \mathcal{F}(x^*) \mid \nabla c_i(x^*)^\top d = 0,\ \forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \text{ 且 } \lambda_i^* > 0\}$$

  其中 $\mathcal{F}(x^*)$ 为点 x^* 处的线性化可行方向锥

- 临界锥是线性化可行方向锥 $\mathcal{F}(x^*)$ 的子集
- 当 $d \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$ 时, $\forall i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ 有 $\lambda_i^* \nabla c_i(x^*)^\top d = 0$, 故

$$d^\top \nabla f(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* d^\top \nabla c_i(x^*) = 0$$

二阶最优性条件

- **定理 4.8** 假设x^* 是问题的一个局部最优解, 并且 $T_{\mathcal{X}}(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$ 成立. 令 λ^* 为相应的拉格朗日乘子, 即 (x^*, λ^*) 满足 KKT 条件, 那么

$$d^\top \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d \geq 0, \quad \forall d \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*)$$

- **定理 4.9** 假设在可行点 x^* 处, 存在一个拉格朗日乘子 λ^*, 使得 (x^*, λ^*) 满足 KKT 条件. 如果

$$d^\top \nabla_{xx}^2 L(x^*, \lambda^*) d > 0, \quad \forall d \in \mathcal{C}(x^*, \lambda^*), \ d \neq 0$$

  那么 x^* 为问题的一个严格局部极小解

- 回顾无约束优化问题的二阶最优性条件

例子

- 考虑

$$\min \quad x_1^2 + x_2^2 \quad \text{s.t.} \quad \frac{x_1^2}{4} + x_2^2 - 1 = 0$$

- 拉格朗日函数为

$$L(x, \lambda) = x_1^2 + x_2^2 + \lambda(\frac{x_1^2}{4} + x_2^2 - 1)$$

- 该问题可行域在任意一点 $x = (x_1, x_2)^\top$ 处的线性化可行方向锥为

$$\mathcal{F}(x) = \{(d_1, d_2) \mid \frac{x_1}{4}d_1 + x_2 d_2 = 0\}$$

因为只有一个等式约束且其对应函数的梯度非零, 故有 LICQ 成立, 于是 $\mathcal{F}(x) = T_{\mathcal{X}}(x)$. 若 (x, λ) 为 KKT 对, 由于无不等式约束, 故 $\mathcal{C}(x, \lambda) = (x)$

例子

- **可以计算出其 4 个 KKT 对**

$$(x^\top, \lambda) = (2, 0, -4), \quad (-2, 0, -4), \quad (0, 1, -1) \quad 和 \quad (0, -1, -1)$$

- **第一个 KKT 对 $y = (2, 0, -4)$, 计算可得**

$$\nabla^2_{xx} L(y) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -6 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{C}(y) = \{(d_1, d_2) \mid d_1 = 0\}$$

取 $d = (0, 1)$, 则

$$d^\top \nabla^2_{xx} L(y) d = -6 < 0$$

因此 y 不是局部最优点

例子

- 类似地对第三个 KKT 对 $z=(0,1,-1)$, 计算可得

$$\nabla^2_{xx}L(z)=\begin{bmatrix}\frac{3}{2} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix},\quad \mathcal{C}(z)=\{(d_1,d_2)\mid d_2=0\}$$

对于任意的 $d=(d_1,0)$ 且 $d_1\neq 0$, 有

$$d^\top\nabla^2_{xx}L(z)d=\frac{3}{2}d_1^2>0$$

因此 z 为一个严格局部最优点

目录

- 4.1 最优化问题解的存在性
- 4.2 无约束可微问题的最优性理论
- 4.3 无约束不可微问题的最优性理论
- 4.4 对偶理论
- 4.5 一般约束优化问题的最优性理论
- 4.6 带约束凸优化问题的最优性理论
- 4.7 约束优化最优性理论应用实例

带约束凸优化问题

- 前述问题都可以写为

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathcal{D}} \quad & f(x) \\
\text{s.t.} \quad & c_i(x) \leqslant 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m \\
& Ax = b
\end{aligned}
$$

- $A \in \mathbb{R}^{p\times n}, b \in \mathbb{R}^p$ 是已知的
- $f(x)$ 为适当的凸函数, $c_i(x)$ 是凸函数且 $\mathrm{dom}\ c_i = \mathbb{R}^n$
- 集合 $\mathcal{D}$ 表示自变量 x 的自然定义域, 即

$$\mathcal{D} = f = \{x \mid f(x) < +\infty\}.$$

- 自变量 x 还受约束的限制, 定义可行域

$$\mathcal{X} = \{x \in \mathcal{D} \mid c_i(x) \leq 0,\ i = 1, 2, \cdots, m,\ Ax = b\}$$

Slater 约束品性与强对偶原理: 相对内点

- 给定集合$\mathcal{D}$, 记其仿射包为

$$\mathrm{affine}\mathcal{D} = \{x \mid x = \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \cdots + \theta_k x_k,\ x_1, x_2, \cdots, x_k \in \mathcal{D},\ \sum_{i=1}^{k} \theta_i = 1\}$$

- 定义 4.11 集合 $\mathcal{D}$ 的相对内点集定义为

$$\mathrm{relint}\mathcal{D} = \{x \in \mathcal{D} \mid \exists\ r > 0,\ \text{使得}\ B(x, r) \cap \mathrm{affine}\mathcal{D} \subseteq \mathcal{D}\}.$$

- 相对内点是内点的推广

Slater 约束品性

- **定义 4.12** 若对凸优化问题

$$\min_{x\in\mathcal{D}} \quad f(x) \quad \text{s.t.} \quad c_i(x) \leqslant 0,\ i=1,2,\cdots,m, \quad Ax=b$$

存在 $x \in \mathrm{relint}\mathcal{D}$ 满足

$$c_i(x) < 0, \quad i=1,2,\cdots,m, \quad Ax=b$$

则称对此问题 Slater 约束品性满足. 该约束品性也称为 Slater 条件

- **定理 4.10** 若凸优化问题满足 Slater 条件, 则强对偶原理成立

一阶充要条件

- 定理 4.11 对于凸优化问题，用 a_i 表示矩阵 $A^\top$ 的第 i 列，$\partial f, \partial c_i$ 表示次梯度，如果 Slater 条件成立，那么 x^*, λ^* 分别是原始，对偶全局最优解当且仅当

$$
\begin{aligned}
\text{稳定性条件} \quad & 0 \in \partial f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i^* \partial c_i(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* a_i \\
\text{原始可行性条件} \quad & Ax^* = b, \ \forall i \in \mathcal{E} \\
\text{原始可行性条件} \quad & c_i(x^*) \le 0, \ \forall i \in \mathcal{I} \\
\text{对偶可行性条件} \quad & \lambda_i^* \ge 0, \ \forall i \in \mathcal{I} \\
\text{互补松弛条件} \quad & \lambda_i^* c_i(x^*) = 0, \ \forall i \in \mathcal{I}
\end{aligned}
$$

关于充分性的评述

- 对于一般的约束优化问题, 当问题满足特定约束品性时, 我们知道 KKT 条件是局部最优解处的必要条件
- 对于凸优化问题, 当 Slater 条件满足时, KKT 条件则变为局部最优解的充要条件 (根据凸性, 局部最优解也是全局最优解) 定理的充分性说明, 若能直接求解出凸优化问题的 KKT 对, 则其就是对应问题的最优解.
- Slater 条件的意义在于当问题最优解存在时, 其相应 KKT 条件也会得到满足

目录

- 4.1 最优化问题解的存在性
- 4.2 无约束可微问题的最优性理论
- 4.3 无约束不可微问题的最优性理论
- 4.4 对偶理论
- 4.5 一般约束优化问题的最优性理论
- 4.6 带约束凸优化问题的最优性理论
- 4.7 约束优化最优性理论应用实例

实例: 仿射空间的投影问题

- 考虑

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & \frac{1}{2}\|x-y\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & Ax=b \end{aligned}$$

- 拉格朗日函数 $L(x,\lambda)=\frac{1}{2}\|x-y\|^2+\lambda^\top(Ax-b)$
- Slater 条件成立, x^* 为一个全局最优解当且仅当存在 $\lambda^*\in\mathbb{R}^m$ 使得

$$\begin{cases} x^*-y+A^\top\lambda^*=0 \\ Ax^*=b \end{cases}$$

实例: 仿射空间的投影问题

- 由上述 KKT 条件第一式, 等号左右两边同时左乘 A 可得

$$Ax^* - Ay + AA^\top\lambda = 0 \Rightarrow \lambda^* = (AA^\top)^{-1}(Ay - b)$$

- 将 λ^* 代回 KKT 条件第一式可知

$$x^* = y - A^\top(AA^\top)^{-1}(Ay - b)$$

因此点 y 到集合 $\{x \mid Ax = b\}$ 的投影为 $y - A^\top(AA^\top)^{-1}(Ay - b)$

总结

- 无约束优化问题及其最优性条件

问题	一阶条件	二阶条件
可微问题	$\nabla f(x^*) = 0$ (必要)	必要/充分
凸问题	$0 \in \partial f(x^*)$ (充要)	–
复合优化问题	$-\nabla f(x^*) \in \partial h(x^*)$ (必要)	–
非凸非光滑	$0 \in \partial f(x^*)$ (必要)	–

- 约束优化问题的最优性条件和相应约束品性

问题	一阶条件	二阶条件	约束品性
一般问题	KKT 条件 (必要)	必要/充分	LICQ
凸问题	KKT 条件 (充要)	–	Slater

Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈