

第四章 最优性理论

修贤超

<https://xianchaoxiu.github.io>

- 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

■ 一般的约束优化问题

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

■ 可行域定义为

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

- 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 $g: \mathbb{R}_+^m \times \mathbb{R}^p \rightarrow [-\infty, +\infty)$

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

拉格朗日对偶问题

■ 拉格朗日对偶问题

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

■ 设 p^* 是原始问题的最优解, q^* 是对偶问题的最优解

■ **弱对偶性** $q^* \leq p^*$

- 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

■ **强对偶性** $q^* = p^*$

- (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

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

$$\begin{array}{ll} \max_{s, \nu} & -b^\top \nu \\ \text{s.t.} & A^\top \nu - s + c = 0 \\ & s \geq 0 \end{array} \quad y \stackrel{-\nu}{\Leftrightarrow} \quad \begin{array}{ll} \max_{s, y} & b^\top y \\ \text{s.t.} & A^\top y + s = c \\ & s \geq 0 \end{array}$$

■ 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

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

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

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

■ 对偶问题

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

实例：半定规划问题的对偶问题

■ 考虑

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

■ 拉格朗日函数

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

实例：半定规划对偶问题的对偶问题

■ 对偶函数

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

■ 对偶问题

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

- 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

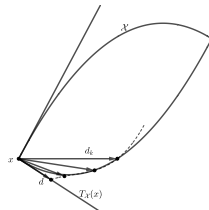
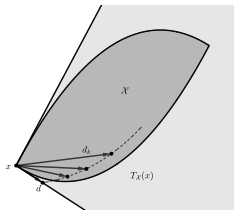
切锥

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

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

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



几何最优性条件

■ 一般优化问题

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) \leq 0, \quad i \in \mathcal{I} \\ & c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E} \end{aligned} \tag{1}$$

■ **定理 4.6** 假设可行点 x^* 是问题 (1) 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

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

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

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

- **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

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

- 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, 确保 $T_{\mathcal{X}}(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$, 从而用 $\mathcal{F}(x)$ 取代 $T_{\mathcal{X}}(x)$

■ **定理 4.7** 假设 x^* 是一般优化问题 (1) 的一个局部最优点

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

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

稳定性条件 $\nabla_x L(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{I} \cup \mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) = 0$

原始可行性条件 $c_i(x^*) = 0, \quad \forall i \in \mathcal{E}$

原始可行性条件 $c_i(x^*) \leq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}$

对偶可行性条件 $\lambda_i^* \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}$

互补松弛条件 $\lambda_i^* c_i(x^*) = 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}$

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

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

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

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

- 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 (二阶必要条件)** 假设 x^* 是一个局部最优解, 且 $T_{\mathcal{X}}(x^*) = \mathcal{F}(x^*)$. 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 (二阶充分条件)** 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

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

那么 x^* 为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

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

- 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

$$\mathcal{F}(x) = \{(d_1, d_2) \mid \frac{x_1}{4}d_1 + x_2d_2 = 0\}$$

- 根据 $\mathcal{C}(x, \lambda) = \mathcal{F}(x)$, 计算出 4 个 KKT 对

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

例子

- 第一个 KKT 对 $y = (2, 0, -4)$, 计算可得

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

取 $d = (0, 1)$, 则 $d^\top \nabla_{xx}^2 L(y) d = -6 < 0$, 因此 y 不是局部最优点

- 第三个 KKT 对 $z = (0, 1, -1)$, 计算可得

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

对于任意的 $d = (d_1, 0)$ 且 $d_1 \neq 0$, 有 $d^\top \nabla_{xx}^2 L(z) d = \frac{3}{2} d_1^2 > 0$, 因此 z 是一个严格局部最优点

- 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

■ 考虑带约束的凸优化问题

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

- $f(x)$ 为适当的凸函数
- $c_i(x)$ 是凸函数且 $\text{dom } c_i = \mathbb{R}^n$
- 集合 \mathcal{D} 表示自变量 x 的定义域, 即 $\mathcal{D} = \{x \mid f(x) < +\infty\}$

- **定义 4.11** 集合 \mathcal{D} 的相对内点集定义为

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

- **定义 4.12** 若对凸优化问题 (2) 存在 $x \in \text{relint } \mathcal{D}$ 满足

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

则称满足 Slater 约束条件

- **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 (2), 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

稳定性条件 $0 \in \partial f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i^* \partial c_i(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* a_i$

原始可行性条件 $Ax^* = b, \forall i \in \mathcal{E}$

原始可行性条件 $c_i(x^*) \leq 0, \forall i \in \mathcal{I}$

对偶可行性条件 $\lambda_i^* \geq 0, \forall i \in \mathcal{I}$

互补松弛条件 $\lambda_i^* c_i(x^*) = 0, \forall i \in \mathcal{I}$

实例：仿射空间的投影问题

■ 考虑

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

■ 拉格朗日函数 $L(x, \lambda) = \frac{1}{2} \|x - y\|^2 + \lambda^\top (Ax - b)$

■ KKT 条件

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

■ 第一式左右两边同时左乘 A 可得

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

■ 将 λ^* 代回第一式可知

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

■ 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