第四章 最优性理论

修贤超

https://xianchaoxiu.github.io

目录

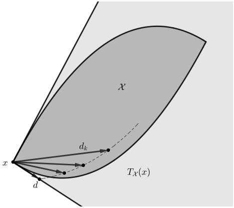
切锥

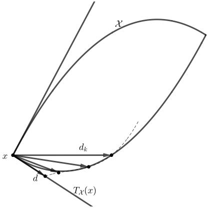
- 给定可行域 $\mathcal{X}$ 及 $x \in \mathcal{X}$, 若存在序列 $\{z_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \mathcal{X}, \lim_{k\to\infty} z_k = x$ 以及正标量序列 $\{t_k\}_{k=1}^{\infty}$, $t_k \to 0$ 满足

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

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**

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

- **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

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

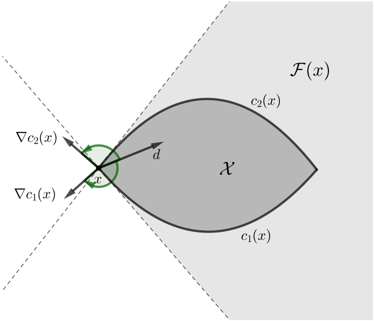
等价于

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

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

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



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**

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

- **上式依然难以验证, 但可使用 Farkas 引理进行化简**

Farkas 引理

- 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

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

- 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

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

  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**

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

- **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

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

  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 为一个严格局部最优点

目录

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 $x \in \operatorname{relint}\mathcal{D}$ 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

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

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

- 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