最优化基础与入门

Shuhua Xiao

更新：*2020 Spring*

摘　要

本文档根据中山大学朱书尚教授讲授的《最优化理论与方法及其在金融中的应用》课程及上海财经大学崔雪婷副教授讲授的《最优化理论基础》整理而成，意在为需要在学术研究或实践中使用最优化方法的读者提供一份易读的基础参照。若本文档有需要勘误之处，请联系 shxiao3-c@my.cityu.edu.hk

目录

0 最优化问题概述

0.1 最优化问题的定义

什么是最优化问题？最优化问题本质上是一个决策问题。

一个最优化问题包括：

- 决策变量 x
- 一个或多个目标函数 $f(x)$
- 一个由可行策略组成的集合，可由等式或不等式刻画

0.2 最优化问题的基本形式

$$
\begin{aligned}
\min \text{ or } \max f\left(x_1, \cdots x_n\right) \\
s.t. g_i\left(x_1, \cdots, x_n\right) \leq 0 \quad i=1, \cdots m, \\
h_i\left(x_1, \cdots, x_n\right)=0 \quad i=1, \cdots l, \\
x=\left(x_1, \ldots x_n\right) \in X
\end{aligned}
$$

其中 $f\left(x_1, \cdots x_n\right)$ 为目标函数，$g_i\left(x_1, \cdots, x_n\right) \leq 0$ 为不等式约束，$h_i\left(x_1, \cdots, x_n\right)=0$ 为不等式约束，X 为给定的集合，如 R_+^n 与 Z^n。

0.2.1 最优化问题的可行集

定义 1. 集合：

$$
S=\left\{x \in X \mid g_i(x) \leq 0, i=1, \cdots m, h_i(x)=0, i=1, \cdots l\right\}
$$

为最优化问题的可行集或可行域。所以如果 $x \in S$，那么 x 是一个可行的策略。

0.3 最优化问题的分类

0.3.1 无约束/约束优化

求解无约束优化问题，可以使用最速下降法、牛顿法求解约束优化问题，可以将约束优化转化为无约束优化如：（罚函数思想）将

$$
\begin{aligned}
\min f(x) \\
s.t. g(x)=0
\end{aligned}
$$

转化为:

$$\min\left\{f(x)+Mg^2(x)\right\}$$

当 M 为很大的正实数时，上述转换成立。

0.3.2 线性/非线性优化

线性规划常见于运筹学领域，其常见形式如下:

$$\begin{aligned} \min C^T x \\ s.t. Ax = b \\ x \geq 0 \end{aligned}$$

随后用单纯形法求解。

理解非线性优化：考虑均值方差模型（Mean-Varience）。

此时风险资产为 x_i，收益为 R_i，设 $x=(x_1,\cdot,x_n)^T$

$$R(x)=R_1x_1+R_2x_2+\cdots+R_nx_n$$

$$E\left(R_i\right)=r_i$$

$$E(R(x))=r_1x_1+\cdots+r_nx_n$$

$$\operatorname{Var}(R(x))=\sum_{i=1}^{\prime}\sum_{j=1}^{n}\operatorname{cov}\left(R_i,R_j\right)x_ix_j=\sum_{i=1}^{\prime}\sum_{j=1}^{n}\sigma_{ij}x_ix_j$$

为了最小化投资组合的方差，有下式，这就是一个非线性优化问题:

$$\begin{aligned} \min\sum_{i=1}^{\prime}\sum_{j=1}^{n}\sigma_{ij}x_ix_j \\ s.t. r_1x_1+\cdots+r_nx_n \geqslant r_0 \\ x_1+\cdots+x_n = 1 \\ x_i \geq 0 \end{aligned}$$

0.3.3 连续/离散优化

离散优化，如生产车辆、路径选择等。若结合上述的 $M-V$ 模型，则可以增加条件。

若要求 x_i 中等于 0 的分量不超过 30 个，则，

$$\min \sum_{i=1}^{\prime} \sum_{j=1}^{n} \sigma_{ij} x_i x_j$$

$$\{y_i \leq b_0 \; s.t. r_1 x_1 + \cdots + r_n x_n \geqslant r_0$$

$$x_1 + \cdots + x_n = 1$$

$$x_i \geq 0$$

$$0 \leq x_i \leq y_i$$

$$\sum y_i \leq 30$$

$$y_i \in \{0, 1\}$$

连续优化，可以用 $M - V$ 模型来进一步理解

0.3.4 单目标/多目标优化

同样使用 $M - V$ 模型辅助理解。

单目标优化可为：

$$\max r_1 x_1 + \cdots + r_n x_n$$

$$s.t. \sum_{i=1}^{\prime} \sum_{j=1}^{n} \sigma_{ij} x_i x_j \leq \tau_0$$

或者：

$$\min \left\{ \tau \sum_{i=1}^{\prime} \sum_{j=1}^{n} \sigma_{ij} x_i x_j \leq (r_1 x_1 + \cdots + r_n x_n) \right\}$$

多目标优化则为：

$$\max r_1 x_1 + \cdots + r_n x_n$$

$$\min \sum_{i=1}^{\prime} \sum_{j=1}^{n} \sigma_{ij} x_i x_j$$

0.3.5 动态规划/确定性优化/随机规划/鲁棒优化

此类最优化的问题共性在于目标函数或约束条件中具有（不确定的）参数。

1　凸集

1.1　基本概念

定义 2. 凸集：对 $\forall x, y \in C, \forall \lambda \in [0,1]$，有 $\lambda x + (1-\lambda x)y \in C$，即集合中两点的连线依旧属于该集合。

相应地，可以衍生出凸组合和凸包的定义。

定义 3. 凸组合：若对 $\forall x_1, \ldots, x_k \in C, \forall \lambda_i \geq 0, \sum_{i=1}^{k} \lambda_i = 1$ 有 $\lambda_1 x_1 + \cdots + \lambda_k x_k \in C$，则称 $\lambda_1 x_1 + \cdots + \lambda_k x_k$ 为凸组合。

凸包由凸集 C 所包含的点的凸组合组成。

一般而言，有如下常见凸集：

- 超平面（hyperplane）

$$H = \left\{x | a^T x = b\right\}, a \neq 0$$

- 半空间（halfspace)

$$H^{+} = \left\{x | a^T x \geq b\right\}, a \neq 0$$

$$H^{-} = \left\{x | a^T x \leq b\right\} a \neq 0$$

- 多面体（polyhedra）

$$H = \left\{x | a_i^T x \leq b_i\right\}, a \neq 0, i = 1, \ldots, n$$

- 球

  设球心为 x_c，半径为 r。

$$B(x_c, r) = \{x | \|x - x_c\|_2 \leq r\} = \{x_c + r_u | \|u\|_2 \leq 1\}$$

- 椭球

$$\left\{x | (x - x_c)^T P^{-1} (x - x_c) \leq 1\right\}$$

  其中 P 为正定矩阵，椭球的轴长为 $(\lambda_i)^{\frac{1}{2}}$，$\lambda$ 为 P 的特征值。

  锥不一定为凸集。锥的定义为：若 $x \in K$ 与 $\lambda > 0$ 时有 $\lambda x \in K$，则称为锥。

- 凸锥 $\mathbb{R}_{+}^{n} = \{x : x_1 \geq 0, \ldots, x_n \geq 0\}$ 为凸锥。
- 半正定锥 $S_{+}^{n} = \left\{A \in \mathbb{R}^n | A^T = A, x^T A x \geq 0, \forall x \geq \mathbb{R}^n\right\}$ 为半正定锥（凸锥）。

1.2 基本性质

若 D_1 和 D_2 为凸集，则：

(1) 二者之交为凸集。$D_1 \bigcap D_2 = \{x|x \in D_1, x \in D_2\}$ 为凸集。

(2) 二者之和为凸集。$D_1 + D_2 = \{x + y|x \in D_1, y \in D_2\}$ 为凸集。

(3) 二者之差为凸集。$D_1 - D_2 = \{x - y|x \in D_1, y \in D_2\}$ 为凸集。

(4) 对任意非零实数 α，$\alpha D_1 = \{\alpha x, x \in D_1\}$ 为凸集。

证明. (3) 设 $(x_1-y_1) \in D_1$, $(x_2-y_2) \in D_2$, 则对 $\forall \lambda \in [0,1]$, 有 $\lambda(x_1-y_1)+(1-\lambda)(x_2-y_2) = [\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2] - [\lambda y_1 + (1-\lambda)y_2]$ 证毕。

保持凸性的变换：仿射变换

设 $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 为仿射函数，$f(x) = Ax + b$，C 为凸集，则 $f(c) = \{f(x)|x \in C\}$ 为凸集，$f^{-1}(c) = \{x|f(x) \in C\}$ 为凸集。

证明. $\forall y_1 \in f(c), \forall y_2 \in f(c)$，有 $y_1 = Ax_1 + b$，$y_2 = Ax_2 + b$，$x_1 \in C$，$x_1 \in C$。则 $\lambda y_1 + (1-\lambda)y_2 = \lambda(Ax_1 + b) + (1-\lambda)(Ax_2 + b) = A\left[\lambda(x_1) + (1-\lambda)(x_2)\right] + b \in f(c)$

特殊的仿射变换有：

- 放缩 (scaling) $\alpha C = \{\alpha x|x \in C\}$
- 平移 (translation) $x_0 + C = \{x_0 + x|x \in C\}$
- 投影 (projection) $\left\{x'|\binom{x_1}{x_2} \in C\right\}$

1.3 相关引理与定理

1.3.1 投影定理

定理 1. 设 $C \subset \mathbb{R}^n$ 是非空闭凸集, 则

(1) 存在唯一的点 $\bar{x} \in C$ 使得 $\bar{x}$ 是 y 到 C 距离最小的点，即 $\|\bar{x} - y\| = \inf\limits_{x \in C} \|x - y\|$

(2) $\bar{x}$ 是 y 到 C 的最小距离点（投影点）的充要条件：$(x - \bar{x})^T(\bar{x} - y) \geq 0, \forall x \in C$

1.3.2 点与凸集的分离定理

定理 2. 设 D 为非空闭凸集，$y \in \mathbb{R}^n$，$y \notin D$，则必存在非零向量 $a \in \mathbb{R}^n$ 以及实数 β，使得

$$a^T x \leq \beta < a^T y, \forall x \in D$$

，即存在超平面 $H = \left\{x|a^T x = \beta\right\}$ 严格分离 y 与 D。

证明. $\because D \in \mathbb{R}^n$ 为非空闭凸集，$y \in \mathbb{R}^n$，$y \notin D$，由投影定理知，在 D 中存在唯一点 $\bar{x} \in D$，使得 y 到 D 之距离最短。此时有 $\forall x \in D, (x-\bar{x})^T(y-\bar{x}) \le 0$，则

$$\forall x \in D, \|y-\bar{x}\|^2 = (y-\bar{x})^T(y-\bar{x}) = y^T(y-\bar{x}) - \bar{x}^T(y-\bar{x}) \le y^T(y-\bar{x}) - x^T(y-\bar{x})$$

，令 $a = y - \bar{x}$, 则有 $a \neq 0$ 且 $\forall x \in D, \|a\|^2 \le a^T y - a^T x$，也即 $\forall x \in D, a^T x < a^T y$ 成立。令 $\beta = \sup\left\{a^T x | x \in D\right\}$*，则有 $a^T x \le \beta < a^T y$.

1.3.3 支撑超平面定理

定理 3. 设 $D \in \mathbb{R}^n$ 为非空闭凸集，$\bar{x} \in aD$，aD 为 D 的边界点的集合，则存在非零向量 $a \in \mathbb{R}^n$，使得对 $\forall x \in aD, a^T x \le a^T \bar{x}$。也称超平面 $H = \left\{x \in \mathbb{R}^n | a^T x = a^T \bar{x}\right\}$ 是集合 D 在 $\bar{x}$ 的支撑超平面。

1.3.4 Farkas 引理

引理 1.1. 设 $A \in \mathbf{R}^{m\times n}$(矩阵)，$b \in \mathbb{R}^n$（n 维向量），则下述两组不等式系统有且仅有一组有解。

(*) $Ax \le 0$，$b^T x > 0$

(**) $A^T y = b$，$y \ge 0$ 其中 $x \in \mathbb{R}^n$，$y \in \mathbb{R}^m$

证明. 设式 (**) 有解，即存在 $y \ge 0$ 使得 $A^T y = b$。若式 (*) 也成立，有 x 使得 $Ax \le 0$，则由 $y \ge 0$ 可得 $b^T x = (A^T y)^T x = y^T A x \le 0$，也即式 (*) 不成立。

设式 (**) 无解，记 $D = \left\{z | z = A^T y, y \le 0\right\}$，则显然 $D \in \mathbb{R}^n$ 为非空闭凸集，且 $z \neq b$。根据点与凸集的分离定理可知，存在非零向量 $a \in \mathbb{R}^n$ 与实数 β 使得 $\forall z \in D, a^T z \le \beta < a^T b$。$\because 0 \in D$，$\therefore 0 \le \beta < a^T b$，$a^T b > 0$。

由于要使 $\forall y \ge 0, a^T b > \beta \ge a^T z = a^T A^T y = y^T A a$，由 y 的任意性可知，$Aa \le 0$。由 $a^T b > 0$ 和 $Aa \le 0$ 可知式 (*) 成立。

Farkas 引理的变形：

引理 1.2. 设 p、q 为两个非空整数，c，a_i，b_j 为 $\mathbb{R}^n$ 中向量，下述线性不等式系统

$$a_i^T d = 0 \quad i = 1, \ldots, p$$

$$b_j^T d = 0 \quad j = 1, \ldots, q$$

$$c^T d < 0$$

*因为 $a^T x$ 有上界，则其必有上确界 β。

无解，当且仅当存在非负实数 $\lambda_i, i = 1, \ldots, p$ 和实数 $\mu_j, j = 1, \ldots, q$ 使得 $c + \sum_{i=1}^{p} \lambda_i a_i + \sum_{j=1}^{q} \mu_j b_j = 0$

利用 Farkas 引理的变形可以得到优化问题的最优性条件。对于问题

$$
\begin{aligned}
&\min f(x) \\
&s.t. g_i(x) \leq 0, i = 1, \ldots, p \\
&\quad h_j(x) = 0, j = 1, \ldots, q
\end{aligned}
$$

,在 x^* 处求梯度,则下降方向为 $f(x^*)^T d < 0$。可行方向要满足 $\nabla g_i(x^*)^T d \leq 0, \nabla h_j(x^*)^T d = 0$。当无可行方向时，无解，此时达到（局部）最优解。无解的条件也即：

$$
\begin{cases}
\nabla f(x^*) + \sum\limits_{i=1}^{p} \lambda_i \nabla g_i(x^*) + \sum\limits_{j=1}^{q} \mu_j \nabla h_j(x^*) = 0 \\
\lambda_i \geq 0
\end{cases}
$$

上述式为该优化问题的最优性条件。

Farkas 引理的几何解释：

A 的行向量与向量 b 之间的位置关系。对矩阵 $A_{m\times n}$ 做行分块，则有 $A_{m\times n} \Longrightarrow \begin{pmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ \ldots \\ a_m^T \end{pmatrix}$,

a_i 是 n 维列向量，$a_i \in \mathbb{R}^n$,$b \in \mathbb{R}^n$。则可将式 (*) 与式 (**) 转化为

$$
\begin{cases}
a_i^T x \leq 0, i = 1, \ldots, m, b^T x > 0 \\
A^T y = \left(a_1^T, a_2^T, \ldots, a_m^T\right)^T (y_1, y_2, \ldots, y_m) = y_1 a_1 + y_2 a_2 + \cdots + y_m a_m = b, y_i \geq 0
\end{cases}
$$

利用线性规划对偶理论证明 1Farkas 引理:

$$
\begin{aligned}
&(1) x : Ax \leq 0, b^T x > 0 \\
&(2) y : A^T y = b, y \geq 0
\end{aligned}
$$

有且仅有一个解。

则 (LP) 问题为：

$$
\begin{aligned}
&\min c^T y \\
&s.t. A^T y = b \\
&\quad y \geq 0
\end{aligned}
$$

其对偶 (D) 问题为：

$$\max b^T x$$
$$s.t. Ax = c$$

则若 LP 问题不可行，D 可能不可行，也可能无界。令 $c = 0$，则 (LP) 问题为：

$$\begin{aligned} \min 0^T y \\ s.t. A^T y = b \\ y \geq 0 \end{aligned}$$

其对偶 (D) 问题为：

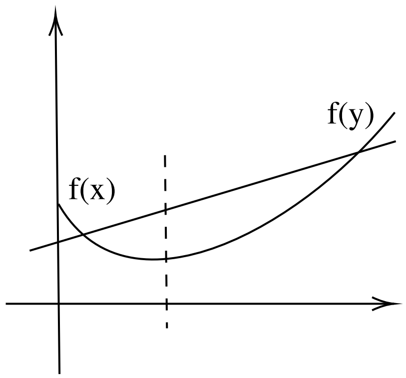
$$\max b^T x$$
$$s.t. Ax = \leq 0$$

若 (2) 有解，则 (LP) 有可行解，有最优值 0，则 (D) 也有最优值 0。(1) 没有大于 0 的，无解。若 (2) 无解，则 (LP) 无可行解，则 (D) 有解 $x = 0$，但解集无界，即 $\exists x$ 使得 $Ax \leq 0$，$b^T x > 0$，(1) 有解。

2 凸函数与凸优化问题

2.1 凸函数的定义

定义 4. 设函数 $f(x)$ 在凸集 D 上有定义，若对任意的 $x, y \in D$ 和任意的 $\lambda \in [0,1]$，有：$f[\lambda x + (1-\lambda)y \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y)]$，则称 $f(x)$ 为凸函数。若对 $x \neq y$ 和 $\lambda \in (0,1)$ 有不等式严格成立，则称 $f(x)$ 为严格凸函数



例 2.1. 证明 $f(x) = c^T x = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n$ 为凸函数。

证明. 任取 $x, y \in \mathbb{R}^n, x \in [0,1]$，有 $f[\lambda x + (1-\lambda x)y] = c^T[\lambda x + (1-\lambda)y] = \lambda c^T x + (1-\lambda)c^T y = \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y)$，证毕。

注 2.1. 线性函数是既凸又凹的函数

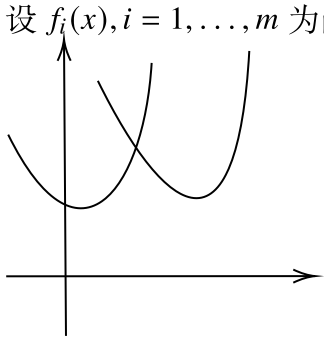
2.2 凸函数的基本性质

设 $f(x)$ 为凸函数，则

(1) $f(x)$ 必为连续函数。

(2) 对于实数 $\alpha > 0$，$\alpha f(x)$ 也是凸函数。

(3) 设 $f_i(x), i = 1, \ldots, m$ 为凸函数，则 $f(x) = \max_{1\leq i\leq m} f_i(x)$ 也为凸函数。



(4) 设 $f_i(x), i = 1, \ldots, m$ 为凸函数，则 $f(x) = \sum_{i=1}^m f_i(x)$ 也为凸函数。

(5) 若 $g(x)$ 为单调函数，则 $g(f(x))$ 也为凸函数。

定理 4. 函数 $f(x)$ 为 $\mathbb{R}^n$ 上的凸函数的充要条件为：对任意的 $x, y \in \mathbb{R}^n$，单变量函数 $\phi(\alpha) = f(x + \alpha y)$ 是关于 α 的凸函数。

2.3 可微凸函数的基本性质

定理 5. 设 $f(x)$ 为定义在非空开凸集 D 上的可微函数，则：

(1) $f(x)$ 是 D 上的凸函数的充要条件为：$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x), \forall x, y \in D$

(2) $f(x)$ 是 D 上的严格凸函数的充要条件为：$f(y) > f(x) + \nabla f(x)^T (y - x), \forall x, y \in D, x \neq y$

证明. 先证必要性（凸函数则切线在函数图像下方）。$f(x)$ 为凸函数，则对 $\forall x, y \in D, \lambda \in (0, 1)$ 有：

$$f[\lambda y + (1 - \lambda)x] \leq \lambda f(y) + (1 - \lambda) f(x) = \lambda f(y) + f(x) - \lambda f(x)$$

$$f[\lambda y + (1 - \lambda)x] - f(x) \leq \lambda [f(y) - f(x)]$$

$$\frac{f[x + \lambda(y - x)] - f(x)}{\lambda} \leq f(y) - f(x)$$

对 $f(x)$ 做泰勒展开，则

$$\frac{f(x) + \lambda \nabla f(x)^T (y - x) + o(x) - f(x)}{\lambda} = \nabla f(x)^T (y - x) \leq f(y) - f(x)$$

则

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x)$$

再证充分性。假设对 $\forall x, y \in D$，有：$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x)$。令 $z = \lambda x + (1 - \lambda) y, \lambda \in (0, 1)$。则易得 $z \in D$。由假设，有

$$(1)\ f(y) \geq f(z) + \nabla f(z)^T (y - z)$$

$$(2)\ f(x) \geq f(z) + \nabla f(z)^T (z - x)$$

则 $\lambda(1) + (1 - \lambda)(2)$ 有：

$$\lambda f(y) + (1 - \lambda) f(x) \geq f(z) + \nabla f(z)^T [\lambda y + (1 - \lambda)x - z] = f[\lambda y + (1 - \lambda)x]$$

故 $f(x)$ 为凸函数。

定理 6. 设 $f(x)$ 为定义在非空开凸集 D 上的二阶可微函数，则：

(1) $f(x)$ 是 D 上的凸函数的充要条件为：$f(x)$ 的 Hesse 矩阵在 D 上半正定。即对每一个 $x \in D$，有 $\forall y \geq \mathbb{R}^n, y^T \nabla^2 f(x) \geq 0$。

(2) 若 $f(x)$ 的 Hesse 矩阵在 D 上正定，则 $f(x)$ 为严格凸函数。反之，若 $f(x)$ 为严格凸函数，则 $f(x)$ 的 Hesse 矩阵在 D 上半正定。

证明. 先证必要性（若为凸函数，则 Hesse 矩阵半正定，$\forall y \in \mathbb{R}^n, y^T\nabla^2 f(\bar{x})y \geq 0$）。

设 $f(x)$ 为定义在非空开凸集 D 上的二阶可微函数。任取 $\bar{x} \in D$，由于 D 是开凸集，对 $\forall y \in \mathbb{R}^n$，存在充分小的 $\alpha > 0$，使得 $\bar{x} + \alpha y \in D$。由定理5，有：$\forall y \in \mathbb{R}^n, f(\bar{x} + \alpha y) \geq f(\bar{x}) + \alpha\nabla f(\bar{x})^T y$。有由于 $f(x)$ 为二阶可微函数，则展开有：$f(\bar{x}+\alpha y) = f(\bar{x}) + \alpha\nabla f(\bar{x})^T y + \frac{1}{2}\alpha^2 y^T\nabla^2 f(\bar{x}y + o(\|\alpha y\|^2))$ 故 $\frac{1}{2}\alpha^2 y^T\nabla^2 f(\bar{x})y + o(\|\alpha y\|^2) \geq 0$。同除 α^2 并令 $\alpha \to 0^+$，则有 $\frac{1}{2}y^T\nabla^2 f(\bar{x})y + 0 \geq 0$，故 $\forall y \in \mathbb{R}^n, y^T\nabla^2 f(\bar{x})y \geq 0$ 得证。

再证充分性（若 Hesse 矩阵半正定，则为凸函数）。

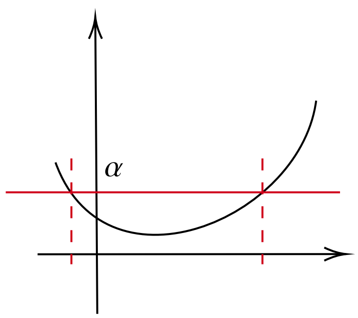
设 $\nabla^2 f(\bar{x})$ 在 D 上半正定，任取 $x, \bar{x} \in D$，将 $f(x)$ 在 $\bar{x}$ 处展开可得：

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T(x - \bar{x}) + \frac{1}{2}(x - \bar{x})^T\nabla^2 f(\xi)(x - \bar{x})$$

其中 $\xi = \theta x + (1-\theta)\bar{x}, 0 < \theta < 1$。因为 $x, \bar{x} \in D$，则 $\xi \in D$。因为 $\nabla^2 f(\bar{x})$ 在 D 上半正定，则 $\nabla^2 f(\xi) \geq 0$，所以 $f(x) \geq f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T(x - \bar{x})$。由定理5，$f(x)$ 为定义在非空开凸集 D 上的二阶可微函数。

2.4 凸函数与水平集

定理 7. 设 D 是非空凸集，$f(x)$ 是 D 上的凸函数，α 是唯一给定的实数，则水平集 $\mathcal{L}_\alpha = \{x \in D | f(x) \leq \alpha\}$ 是凸集（假设非空）。



证明. 设 $x, y \in \mathcal{L}$，则有 $x, y \in D$，$f(x) \leq \alpha$，$f(y) \leq \alpha$，$z = \lambda x + (1-\lambda)y, \lambda \in [0, 1]$，则 $z \in D$。由此有 $f(z) = f[\lambda x + (1-\lambda)y] \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y) \leq \lambda\alpha + (1-\lambda)\alpha = \alpha$。所以水平集 $\mathcal{L}_\alpha = \{z \in D | f(z) \leq \alpha\}$ 是凸集。

2.5 凸规划

凸规划指凸函数在凸集上求极小，或凹函数求极大。（对应：凹规划——凹函数求极小，难处理）

定理 8. (数学规划问题) 最优化问题

$$\begin{aligned} &\min\ f(x) \\ &s.t\ g_i(x) \leq 0,\ \ i = 1, \ldots, p \\ &\quad h_j(x) = 0,\ \ j = 1, \ldots, q \end{aligned}$$

若 $f(x)$，$g_i(x)$ 为凸函数，$h_j(x) = a_j x + b_j$，则 (P) 为凸规划问题。

证明. 由 $g_i(x)$ 和 $h_j(x)$ 定义的可行域 $S = \left\{x \in |g_i(x) \leq 0,\ \ i = 1, \ldots, p, h_j(x) = 0,\ \ j = 1, \ldots, q\right\}$ 是凸集。

定义 5.

局部最优解 $\bar{x}$：$f(\bar{x}) \leq f(x), \forall x \in S \bigcap N_\epsilon(\bar{x})$

全局最优解 x^*：$f(x^*) \leq f(x), \forall x \in S$

定理 9. 设 x^* 是凸规划的一个局部最优解，则

(1) x^* 也是全局最优解。

(2) 若目标函数是严格凸的，则 x^* 是唯一的全局最优解。

证明. (1) (反证法)

设 x^* 是凸规划的局部最优解，但不是全局最优解。则一定存在一个可行点 y 使得 $f(y) < f(x^*)$。由可行集的凸性可知，对于 $\forall \lambda \in (0, 1), \lambda x^* + (1 - \lambda) f(y)$ 为凸集，也是可行集。

由目标函数的凸性可知，有 $f[\lambda x^* + (1 - \lambda) y^*] \leq \lambda f(x^*) + (1 - \lambda) f(y) < \lambda f(x^*) + (1 - \lambda) f(x^*) = f(x^*)$。取 $\lambda \to 1^-$，则 $\lambda x^* + (1 - \lambda) y$ 靠近 x^*。在 x^* 的邻域中，有 $f[\lambda x^* + (1 - \lambda) y^*] < f(x^*)$。则 x^* 不是局部最优，与假设矛盾。则 x^* 是全局最优解。

(2) (反证法)

设目标函数 $f(x)$ 是严格凸的，设 $x^* \neq y^*$ 均为全局最优解，$f(x^*) = f(y^*)$。由于 $f(x)$ 是严格凸的，则对 $\lambda \in (0, 1)$，有 $f[\lambda x^* + (1 - \lambda) y^*] < \lambda f(x^*) + (1 - \lambda) f(y^*)$，此时 x^* 不是全局最优解。与假设矛盾，假设不成立。证毕。

3 无约束问题的最优性条件和算法

3.1 最优性条件

对一个优化问题 $(P)\ \min_{x\in} f(x)$ 有如下概念。

3.1.1 下降方向

定义 6. 设 $f(x):\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 是一连续函数，给定点 $\bar{x}\in\mathbb{R}^n$，若对方向 $d\in\mathbb{R}^n$ 存在数 $\delta>0$，使得：

$$\forall d\in(0,\delta), f(\bar{x}+\alpha d)<f(\bar{x})$$

，则称 d 为 $f(x)$ 在 $\bar{x}$ 处的下降方向。

定理 10. 设函数 $f(x)$ 在 $\bar{x}$ 处连续可微，若存在非零向量 $\boldsymbol{d}\in\mathbb{R}^n$，使得

$$\nabla f(x)^T\boldsymbol{d}<0$$

成立，则 $\boldsymbol{d}$ 为 $f(x)$ 在 $\bar{x}$ 处的一个下降方向。

证明. 对一个充分小的 $a>0$，将在 $\bar{x}$ 处用泰勒公式展开，则有

$$f(\bar{x}+a\boldsymbol{d})=f(\bar{x})+a\nabla f(x)^T\boldsymbol{d}+o\left(a\|\boldsymbol{d}\|\right)$$

由于 $a>0$，$\nabla f(x)^T\boldsymbol{d}<0$，故存在 $\delta>0$，使得对 $a\in(0,\delta)$ 有：

$$a\nabla f(x)^T\boldsymbol{d}+o\left(a\|\boldsymbol{d}\|\right)<0$$

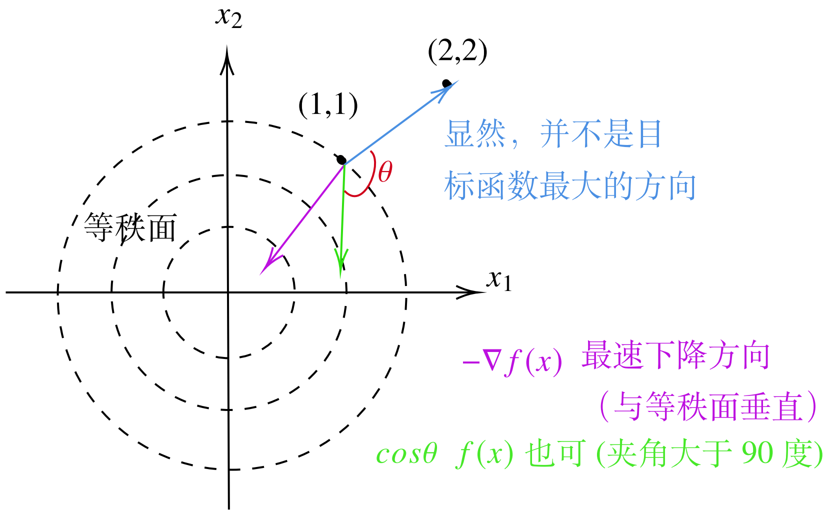
当 a 充分小时，本式的符号由 $a\nabla^T f(x)d$ 决定。

因此，有 $f(\bar{x}+a\boldsymbol{d})<f(\bar{x})$ 对 $\forall a\in(0,\delta)$ 均成立，即 $\boldsymbol{d}$ 为 $f(x)$ 在 $\bar{x}$ 处的一个下降方向。

例 3.1.

$$f(x)=x_1^2+x_2^2,\bar{x}=(1,1)^T$$

$$\nabla^T f(\bar{x})=(2\bar{x_1},2\bar{x_2})^T=(2,2)^T$$



3.1.2 最优性条件

定理 11. (一阶条件)：设 $f(x):\mathbb{R}^n \longrightarrow R$ 为连续可微，若 x^* 为 (P) 的局部极小点，则必有 $\nabla f(x^*)=0$。

证明. 反证法。设 x^* 为 $f(x)$ 的局部极小点，但 $\nabla f(x^*)\neq 0$。取 $d=-\nabla f(x^*)^T$，则有 $\nabla f(x^*)^T d<0$，$-\nabla f(x^*)^T$ 为 (P) 的下降方向，则 x^* 不为局部极小点，矛盾。

定理 12. (二阶必要条件) 设 $f(x):\mathbb{R}^n \longrightarrow R$ 为连续可微，若 x^* 是 (P) 的局部极小解，则有：$\nabla f(x^*)=0, \nabla^2 f(x^*)\geq 0$。

证明. 考虑序列 $x_k=x^*+\alpha_k d$，d 是任意的给定数，a_k 趋向于 0。由 Taylor 展开，当 k 充分大时，

$0\leq f(x_k)-f(x^*)=\alpha_k\nabla f(x^*)^T d+\frac{1}{2}\alpha^2 d^2\nabla^2 f(\bar{x_k})d$。令 $\bar{x_k}$ 为 x_k 与 x^* 的凸组合，$\bar{x_k}=\theta x^*+(1-\theta)x_k, \theta\in(0,1)$。因为 $\nabla f(x^*)^T=0$，所以 $0\leq f(x_k)-f(x^*)=\frac{1}{2}\alpha^2 d^T\nabla^2 f(\bar{x_k})d$，$0\leq\frac{f(x_k)-f(x^*)}{2\alpha^2}=d^T\nabla^2 f(\bar{x_k})d$。取极限 $\alpha_k\to 0$，则 $x^k\to x^*$，$\bar{x_k}\to x^*$。所以 $d^T\nabla^2 f(x^*)d>0$ 对 $\forall d\in\mathbb{R}^n$ 成立，即 $\nabla^2 f(x^*)\geq 0$，Hesse 矩阵半正定。

定理 13. (二阶充分条件) 设 $f(x):\mathbb{R}^n \longrightarrow R$ 为连续可微，若在点 x^* 处 $\nabla f(x^*)=0,,\nabla^2 f(x^*)>0$，则 x^* 必为 (P) 的局部极小解。

证明. 取充分小的 $\alpha>0$，由 Taylor 展开，对任意的向量 d，有

$$f(x^*+\alpha d)=f(x^*)+\alpha\nabla f(x^*)^T d+\frac{1}{2}d^T\nabla^2 f(x^*+\theta\alpha d)d, \theta\in(0,1) \quad (*)$$

由 $f(x)$ 的二阶连续可微可知，当 d 充分小时，有 $d^T\nabla^2 f(x^*+\theta\alpha d)d>0$。由于 α 充分小，$\nabla^2 f(x^*)$ 正定，其领域的 $\nabla^2 f(x^*+\theta\alpha d)$ 也是正定的。由 $(*)$ 可知，存在 x^* 的某个邻域 $N_\xi(x^*)$ 时，总有 $f(x^*+\alpha d)>f(x^*)$。则 x^* 必为 (P) 的局部极小解。

定理 14. (凸全局最优性定理) 设 $f(x) : \mathbb{R}^n \longrightarrow R$ 为连续可微凸函数，则 x^* 为全局最优解的充要条件为

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

证明. 证充分性。因 $f(x)$ 为可微凸函数及 $\nabla f(x^*) = 0$ 可知，$f(x) \geq f(x^*) + \nabla f(x^*)^T(x - x^*) = f(x^*), \forall x \in R$

必要性证明见11。证毕。

故，若能证明需要优化的问题是凸优化问题，难度就会减小很多。解决优化问题的步骤一般为：(1) 找下降方向 (2) 确定步长。此外，对于凸函数而言，若其满足一阶条件，则有全局最优解。

3.2 一维优化

3.2.1 基于搜索区间的直接搜索法

考虑优化问题 $\min_{[a,b]} = \varphi(t)$。假设 $\varphi(t)$ 在 $[a, b]$ 上为单谷函数。

设目标函数的定义域为 $[a_0, b_0]$。选取 $\lambda, \mu \in [a_0, b_0]$ 且 $\lambda < \mu$。

若 $\phi(\lambda) < \phi(\mu)$，则 $[a_1, b_1] = [a_0, \mu]$。

若 $\phi(\lambda) \geq \phi(\mu)$，则 $[a_1, b_1] = [\lambda, b_0]$。

新的搜索区间为 $[a_1, b_1]$。

均匀搜索法

令 $\delta = \frac{b_0 - a_0}{N}$，$a_i = a_0 + i\delta, i = 1, \ldots, N-1$。若对某个 i，有 $\phi(a_{i-1}) > \phi(a_i) < \phi(a_{i+1})$，则 $a^* \in [a_{i-1}, a_{i+1}]$。则新搜索区间 $[a_1, b_1] = [a_{i-1}, b_{i+1}]$。区间缩小程度为 $\frac{2}{N}$。

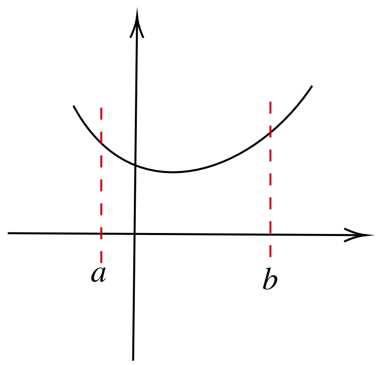
3.2.2 二分法（利用导数）

用二分法找 $\phi'(t)$ 在 (a, b) 上的零点。

$\phi'(t) = 0, \phi'(a) < 0, \phi'(b) > 0$ 二分法可以使得每次搜索区间减半（这个搜索速度快了，是因为用了更多信息）

$$b_n - a_n = \left(\frac{1}{2}\right)(b_n - a_n) < \xi$$

$$\Longrightarrow n \geq \frac{\log \frac{\xi}{b_n - a_n}}{\log \frac{1}{2}}$$



0.618 法 (直接法)(黄金区间法)

为什么是 0.618?

均匀搜索法一次更新两个点。如果我们减少计算量，一次更新一个点呢?

设 $[a_k, b_k]$ 是经过第 k 次搜索确定的区间。在期间试探两点 λ_k 和 μ_k，$\mu_k > \lambda_k$ 且满足以下条件:

- λ_k 和 μ_k 在 $[a_k, b_k]$ 中位置对称
- 每次迭代区间缩小比率相同。

上述条件对应:

$$(*)\begin{cases} b_k - \lambda_k = \mu_k - a_k \\ b_{k+1} - a_{k+1} = \tau(a_k - b_k) \end{cases}$$

假设 $\phi(\mu_k) > \phi(\lambda_k)$，由 $(*)$ 可得，

$$(**)\begin{cases} b_k - \lambda_k = \mu_k - a_k \\ \mu_k - a_k = \tau(a_k - b_k) \end{cases}$$

最终迭代的一般结果为:

$$\begin{cases} \lambda_k = a_k + (1-\tau)(b_k - a_k) \\ \mu_k = a_k + \tau(a_k - b_k) \end{cases}$$

令 λ_k 替代为 μ_{k+1}，每次只更新一个点，则有

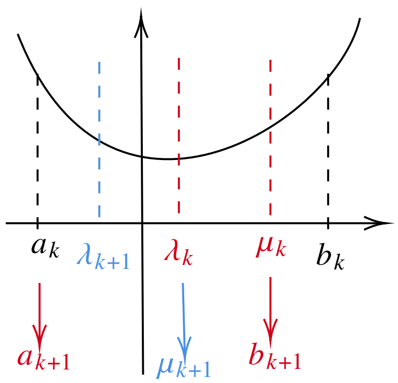
$$\mu_{k+1} = a_{k+1} + \tau(b_{k+1} - a_{k+1}) = a_k + \tau(\mu_k - a_k) = a_k + \tau\left[\tau(\mu_k - a_k)\right] = a_k + \tau^2(\mu_k - a_k)$$

$$\lambda_k = a_k + (1-\tau)(b_k - a_k)$$

所以

$$a_k + (1-\tau)(b_k - a_k) = a_k + \tau^2(b_k - a_k)$$

由于 $\tau > 0$，解得 $\tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \approx 0.618$。



例 3.2. 令 $\tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \approx 0.618$。

$\lambda = a_k + (1-\tau)(b_k - a_k)$

$\mu = a_k + \tau(b_k - a_k)$

若 $\phi(\lambda) < \phi(\mu)$, 则 $a^* \in [a_k, \mu]$, 产生新的搜索区间。此时 $\frac{\mu - a_k}{b_k - a_k} = \frac{b_k - \lambda}{b_k - a_k} = \frac{\lambda - a_k}{\mu - a_k} = 0.618$。

若 $\phi(\lambda) > \phi(\mu)$，则 $a^* \in [\lambda, b_k]$，产生新的搜索区间。

基于导数信息的二分法

$\lambda = \frac{a_0 + b_0}{2}$，计算 $\phi'(\lambda)$。

若 $\phi'(\lambda) = 0$，则 $a^* = \lambda$。

若 $\phi'(\lambda) < 0$，则 $a^* \in [\lambda, b_0]$。

若 $\phi'(\lambda) > 0$，则 $a^* \in [a_0, \lambda]$。

3.3 多维优化

对于 $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$，$d = -H^{-1}\nabla f(x_0)$ 是下降方向，$d < 0$。

当 H 为单位阵时 $\leftrightarrow$ 最速下降法。

当 H 为 Hesse 矩阵时 $\leftrightarrow$ 牛顿法。

定义 7. 设序列 x^k 收敛到 x^*，若存在极限

$$\lim_{k \to \infty} \frac{\left\|x^{k+1} - x^*\right\|}{\left\|x^k - x^*\right\|} = \beta$$

当 $0 < \beta < 1 \to$ 算法线性收敛。

当 $\beta = 0 \to$ 超线性收敛。

若存在某个 $p \geq 1$，有：

$$\lim_{k \to \infty} \frac{\left\|x^{k+1} - x^*\right\|}{\left\|x^k - x^*\right\|} = \beta < +\infty$$

称 $\{x^k\}$ 为 p 阶收敛。

当 $p > 1$，p 阶收敛必为超线性收敛 $(\beta > 0)$，反之则不一定。

3.3.1 坐标轴交替下降法

给定初始点 x^0。依次沿着坐标轴 $e_1, \ldots, e_n$ 进行搜索。

优点:

- 不用成本即得搜索方向
- 变量之间交叉程度较小时很有效

缺点:

- 所得到的点未必收敛

框架

(1) 初始点 x^0，$k := 0, \epsilon > 0$

(2) 是否满足? 是，终止搜索。

(3) 否。记 $y_0 = x^k$。令 $y_i = y_{i-1} + \alpha_i e_i$，其中 $a_i := argmin\ f(y_{i-1} + \alpha e_i)\ i = 1, \ldots, m$

(4) 令 $x^{k+1} := y_n$，$k := k + 1$ 转步 1

3.3.2 梯度下降法 (最速下降法)

选择 x^k 处负梯度为搜索方向

即 $d^k = -\nabla f(x^k)$

若 $\nabla f(x^k)^T d < 0$，则 d 为下降方向。

优点:

- 简单直观
- 容易收敛
- 方向只需要计算 $\nabla f(x^k)$

缺点:

- 收敛速度慢（线性收敛）
  原因：没用利用 $\nabla^2 f(x^k)$ 的信息
- zigzag 现象（曲折前进）
  若迭代中补偿是的精确最小点，则 $\phi'(\alpha_k) = 0$，也即 $\phi'(\alpha_k) = \nabla f(x^k + \alpha_k d^k)^T d^k = \nabla f(x^{k+1})^T \left[-\nabla f(x^k)\right] = -\nabla f(x^{k+1})^T \nabla f(x^k) = 0$。两方向垂直。
- 不具备二次终止性

算法

- Step1(初始化)
  给出 (初始点)$x_0 \in \mathbb{R}^n, 0 \leq \varepsilon << 1$，$K := 0$。
- Step2(终止条件) 计算 $\nabla f(x_k)$。若（此时梯度接近 0）若不满足上述条件，则:

- Step3(计算下降方向) $d_k = -H_k^{-1}\nabla f(x_k), H_k > 0$
- Step4 计算步长因子，使得：
- Step5 令：$x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k, k := k+1$，转至 Step2。

3.3.3 牛顿法

基本思想：当前点在 x^k 处，选择 $d^k = -\left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1}\nabla f(x^k)$。可理解为：对 x^k 处的二次逼近函数进行最小化，也即 $min\left\{f(x^k) + \nabla f(x^k)^T(x-x^k) + \frac{1}{2}(x-x^k)^T\nabla^2 f(x^k)(x-x^k)\right\}$。则该函数要达到最小，梯度必为 0。

$$0 + \nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)(x-x^k) = 0$$

$$-\nabla f(x^k) = \nabla^2 f(x^k)(x-x^k)$$

$$-\left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1}\nabla f(x^k) = x - x^k$$

$$x = x^k - \left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1}\nabla f(x^k)$$

$$x^{k+1} = x^k - \left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1}\nabla f(x^k) = x^k + d^k$$

因此，对于牛顿法而言，有

$$\begin{cases} d^k = -\left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1}\nabla f(x^k) \\ \alpha^k = 1 \end{cases}$$

牛顿法的步骤为：

- Step1 (初始化) x^0，ϵ，$k := 0$
- Step2 若 $\|\nabla f(x^k)\| \leq \xi$
- Step3 计算 $d^k := -\left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1}\nabla f(x^k)$
- Step4 更新 $x^{k+1} := x^k + d^k$，$k := k+1$，回到 Step2

存在的问题是：$d^k = -\left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1}\nabla f(x^k)$ 一定是下降方向吗？

若 $\nabla^2 f(x^k)$ 的特征值为 0，则 d^k 所需的 $\left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1}$ 没有逆。则 d^k 未必是下降方向。

优点：

- 当 x^0 取得接近 x^k，且 $\nabla^2 f(x)$ 有较好的性质时，二阶收敛
- 有二阶终止性（求解凸二次问题）

缺点：

- 计算量大（Hesse 矩阵）
- 适用范围较窄

3.3.4 修正牛顿法

(1) 修正 α^k:

$\alpha^k=1$ 是否让目标函数充分下降？ $\to$ 否。$\to$ 采用线搜索方法重新确定 α^k

(2) 修正方向 Hesse 矩阵:

选取 $d^k=-B_k^{-1}\nabla f(x^k)$。若 $\nabla^2 f(x^k)>0$，Hesse 矩阵是正定的，则 $B_k:=\nabla^2 f(x^k)$。否则，采用修正方法。

第一种修正方法:

$B_k:=\nabla^2 f(x^k)+\lambda I, \lambda>0$ 且 λ 使得 B_k 正定。

那么，如何选择 λ？ $\nabla^2 f(x^k)$ 的所有特征值为 $\lambda_1,\ldots,\lambda_n$。本质上要求：$\lambda+\lambda_i>0$，也即 $\lambda>\max\{-\lambda_i\}$

第二种修正方法:

考虑特征值分解: $\nabla^2 f(x^k)=Q^T\Lambda Q$, 其中 $\Lambda=diag(\lambda_1,\ldots,\lambda_n)$。令 $B_k=Q^T diag(T_i)Q$,

$$T_i=\begin{cases}\lambda_i, if \lambda_i \geq \delta\\ \delta, otherwise\end{cases}$$

其中 δ 为适当的正数。

3.3.5 拟牛顿法

考虑 $f(x)$ 在当前点 x^k 处的二次近似函数:

$$m_k(x):=f(x^k)+\nabla f(x^k)^T(x-x^k)+\frac{1}{2}(x-x^k)^T B_k(x-x^k)$$

其中 $B_k>0$，也就是用正定矩阵 B_k 替代了原先的 Hesse 矩阵 $\nabla^2 f(x^k)$。

那么我们自然希望 B_k，能够体现一些二阶信息，并且获得这一矩阵的代价小一点。

根据 $m_k(x)$，我们要 $\min m_k(x)$，则有搜索方向：$d^k=-B_k^{-1}\nabla f(x^k)$。为什么这个是下降方向呢?

$$\nabla m_k(x)=0$$

$$\nabla m_k(x)=\nabla f(x^k)+B_k(x-x^k)=0$$

$$\therefore x=x^k-B_k^{-1}\nabla f(x^k)$$

因此，从 x^k 出发沿着 $B_k^{-1}\nabla f(x^k)$ 可以走到最小点 x，则这个是下降方向。

拟牛顿法的步骤为:

- Step1 (初始化) x^0，ϵ，$k := 0$
- Step2 若 $\|\nabla f(x^k)\| \le \xi$
- Step3 计算 $d^k := -B_k^{-1}\nabla f(x^k)$
- Step4 确定步长 α_k
- Step5 令 $x^{k+1} := x^k + \alpha_k d^k$，确定 B_{k+1}，$k := k+1$，回到 Step2

如何简单地获得 B_{k+1}？我们在 Step5 里已经获得了 x^{k+1}，那么可以计算梯度 $\nabla f(x^{k+1})$。此外，先前我们已经获得了 x^k 和 $\nabla f(x^k)$。因此由拉格朗日中值定理，

$$\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k) = \nabla^2 f(\xi)(x^{k+1} - x^k)$$

其中 $\xi = \lambda x^k + (1-\lambda)x^{k+1}, \lambda \in (0,1)$

对照拟牛顿方程，有

$$(*)\ \ \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k) = B_{k+1}(x^{k+1} - x^k)$$

为了便于记叙，则记：

$$y_k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$$

$$S_k := x^{k+1} - x^k$$

则 $(*)$ 可简写为 $y_k = B_{k+1}S_k$

若记 $H_k = B_k^{-1}$，也即有 $H_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$。则拟牛顿方程可以表示为：$B_{k+1}^{-1}y_k = S_k$，也即 $S_k = H_{k+1}y_k$

注意：能够满足拟牛顿方程的矩阵有很多。

获得拟牛顿方程的方法

大致思路：基于已有信息 (y_k, S_k, B_k) 得 B_{k+1}，或基于已有信息 (y_k, S_k, H_k) 得 H_{k+1}。

方法一：选择满足拟牛顿方程且与 B_k 近似的矩阵

$\min \|B - B_k\|, s.t. BS_k = y_k, B = B^T$。该式子的解为 B_{k+1}。

也可用这一方法找 H_{k+1}。$\min \|H - H_k\|, s.t. HS_k = y_k, H = H^T$。该式子的解为 H_{k+1}。

方法二：对 B_k（或 H_k）进行校正

如，令 $B_{k+1} = B_k + \Delta B$

校正方法：

(1)rank-2 校正 (ΔB 的秩为 2)，DFP 方法，BFGS 方法

(2)rank-1 校正 (ΔB 的秩为 1)，SR-1 方法

DFP 方法：对 H_k 进行 rank-2 校正

$H_{k+1} = H_k +$ 一个秩 2 矩阵（秩 2 矩阵就是两个秩 1 矩阵相加）

$$H_{k+1} = H_k + auu^T + bvv^T$$

要使得 $H_{k+1}y_k = S_k$，则

$$H_k y_k + au(u^T y_k) + bv(v^T y_k) - S_k = 0$$

考虑令：$H_k y_k + au(u^T y_k) = 0$，$bv(v^T y_k) - S_k = 0$。令 $u = H_k y_k$，则 $1 + a(u^T y_k) = 0$。因此 $a = \frac{-1}{u^T y_k} = \frac{-1}{(H_k y_k)^T y_k} = \frac{-1}{y_k^T H_k y_k}$。

令 $v = S_k$，则 $bv^T y_k - 1 = 0$。因此 $b = \frac{1}{v^T y_k} = \frac{1}{S_k^T y_k}$

则可以使用 DFP 公式进行秩 2 校正。这种校正不是唯一的。

BFGS 方法：对 B_k 进行 rank-2 校正

这种方法可以达到超线性收敛，被认为是最有效的拟牛顿法，是超线性收敛。

$$B_{k+1} = B_k + auu^T + bvv^T$$

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k S_k S_k^T B_k}{S_k^T B_k S_k} + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T S_k}$$

拟牛顿方向需要计算 B_{k+1}^{-1}，可利用 Sherman-Morrison 公式显式写出：

$$d^{k+1} = -B_{k+1}^{-1}\nabla f(x^{k+1})$$

Broyden 族：DFP 与 BFGS 的线性组合

即：$\lambda B_{k+1} + (1-\lambda)B_{k+1}, \lambda \in [0,1]$

SR-1 方法：对 B_k 进行 rank-1 校正

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k S_k)(y_k - B_k S_k)^T}{(y_k - B_k S_k)^T S_k}$$

$$B_{k+1} = B_k + auu^T$$

上式要满足 $B_{k+1}S_k = y_k$，$B_k S_k + au(u^T S_k) = y_k$，$au(u^T S_k) = y_k - B_k S_k$。

令 $u = y_k - B_k S_k$，则 $au^T S_k = 1$，也即 $a = \frac{1}{u^T S_k} = \frac{1}{(y_k - B_k S_k)^T S_k}$，则得 SR-1。

SR-1 方法的迭代公式更简单，但不能保证正定性。适当条件下，能达到 n 步超线性收敛。

3.3.6 共轭方向法

线性共轭梯度法

考虑问题：$\min f(x) = \frac{1}{2}x^T Q_x + C^T x, Q > 0$

(1) 当 Q 为对角阵时

$$f(x)=\frac{1}{2}x^T\begin{pmatrix}b_1 & & & \\ & b_2 & & \\ & & \dots & \\ & & & b_n\end{pmatrix}x+C^Tx$$

(2) 当 Q 不是对角阵时

$f(x)=\frac{1}{2}x^TQ_x+C^Tx$

对 Q 做分解，$Q=P^TDP$，其中 $D=\begin{pmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \dots & \\ & & & \lambda_n\end{pmatrix}$，$P$ 为正交矩阵。

则，$f(x)=\frac{1}{2}x^TP^TDPx+C^Tx$。令 $\hat{x}=px$，则 $f(\hat{x^*})=\frac{1}{2}\hat{x^*}D^T\hat{x^*}^T+(PC)^T\hat{x^*}$。找到 x^* 后，$x^*=P^T\hat{x^*}$。

上述方法原理上可行，但对 Q 分解需要求其特征值。若矩阵的维数很大，则计算时比较困难。

因此选择用共轭梯度法，找到 $(d^0,d^1,\dots,d^{n-1})S$，且希望 S 能像 P 一样，对 Q 做一个对角化。

共轭方向法

定义 8. 考虑正定矩阵 Q 及非零向量 d^i,d^j。若 $(d^i)^TQd^j=0$，则 d^i,d^j 关于矩阵 Q 共轭。

向量组 $d^0,d^1,\dots,d^k$ 关于矩阵 Q 共轭。

注 3.1. 共轭与正交的区别

(1) 若 $d^0,d^1,\dots,d^k$ 关于 I 共轭，则 $d^0,d^1,\dots,d^k$ 正交

(2) 若 $d^0,d^1,\dots,d^k$ 关于 Q(正定矩阵)共轭,则 $(d^i)^TQd^j=(d^i)^TP^TPd^j=(Pd^i)^T(Pd^j)=0$

(3) 共轭向量组必然是线性无关的。

定义 9. 共轭方向法：$\min f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+C^Tx,Q>0$

给定初始点 x^0 及一组关于 Q 的共轭方向 $d^0,d^1,\dots,d^{n-1}$

令 $x^{k+1}:=x^k+\alpha_kd^k,k=0,\dots,n-1$

即 $x^0\xrightarrow{d^0\alpha_0}x^1\xrightarrow{d^1\alpha_1}x^2\xrightarrow{\cdots}x^{n-1}\xrightarrow{d^{n-1}\alpha_{n-1}}x^n$,

其中 $\alpha_k=argmin\phi(\alpha):=f(x^k+\alpha d^k)$

此时 $\phi'(\alpha_k)=0=\nabla f(x^k+\alpha_kd^k)^Td^k=(Q(x^k+\alpha_kd^k)+C)^Td^k=(Qx^k+C)^Td^k+\alpha_k(d^k)^TQd^k$

所以 $\alpha_k=-\frac{(Qx^k+b)^Td^k}{(d^k)^TQd^k}=\frac{-\nabla f(x^k)^Td^k}{(d^k)^TQd^k}$

几何解释

$$x^0+\alpha_0 d^0+\alpha_1 d^1+\cdots+\alpha_{n-1}d^{n-1}$$

构造 $S=(d^0,d^1,\ldots,d^{n-1})$，其中 $d^0,d^1,\ldots,d^{n-1}$ 线性无关，S 可逆。

则

$$S^TQS=\begin{pmatrix}\left(\alpha^0\right)^T\\ \vdots\\ \left(\alpha^{n-1}\right)^T\end{pmatrix}Q\left(d^0\ldots d^{n-1}\right)=((d^i)^TQd^j)_{n\times n}$$

是个对角阵。且

$$I=S^{-1}(d^0,d^1,\ldots,d^{n-1})=(S^{-1}d^0,\ldots,S^{-1}d^{n-1}),S^{-1}d^i=e^{i+1},i=0,\ldots,n-1$$

则 $f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+C^Tx\xrightarrow{\hat{x}=S^{-1}x}f(\hat{x})=\frac{1}{2}\hat{x}^TS^TQS\hat{x}+(S^TC)^T\hat{x}$

则

$$x^0+\alpha_0 d^0+\alpha_1 d^1+\cdots+\alpha_{n-1}d^{n-1}=\quad S^{-1}x^0+\alpha_0S^{-1}d^0+\alpha_iS^{-1}d^1+\ldots+\alpha_{n-1}S^{-1}d^{n-1}$$

$$=S^{-1}x^0+\alpha_0e_1+\alpha_1e_2+\cdots+\alpha_{n-1}e_n$$

共轭方向法的重要特征

考虑问题 $\min f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+C^Tx,Q>0$

给定初始点 x^0 及一组关于 Q 的共轭方向 $d^0,d^1,\ldots,d^{n-1}$，令

$$x^{k+1}:=x^k+\alpha_kd^k$$

$$\alpha_k==\frac{-\nabla f(x^k)^Td^k}{(d^k)^TQd^k},k=0,\ldots,n-1$$

则点列 $\left\{x^k\right\}$ 有如下特征：

(1) $-\nabla f(x^k)^Td^i0,i=0,\ldots,k-1$，与之前使用的搜索方向垂直

证明.

$$\nabla f\left(x^k\right)^Td^{k-1}=0,k=1,\ldots,n$$

$$\alpha_{k-1}=argminf(x^{k+1}+\alpha d^{k-1})=\phi(\alpha)$$

$$\phi'(\alpha_{k-1})=0=\nabla f\left(x^{k-1}+\alpha_{k-1}d^{k-1}\right)^Td^{k-1}=\nabla f\left(x^k\right)^Td^{k-1}$$

$$\nabla f\left(x^k\right)^Td^i,i=0,1,\ldots,k-2$$

$$=\left(Qx^k+c\right)^Td^i=(Q(x^{i+1}+\alpha_{i+1}d^{i+1}+\cdots+\alpha_{k-1}d^{k-1})+C)^Td^i=\left(Qx^{i+1}+c\right)^Td^i=\nabla f(x^{i+1})^Td^i=0$$

(2) $x_k := argmin\left\{\frac{1}{2}x^TQx + C^Tx | x \in X^k\right\}$,其中 $X^k = \left\{x^0 + \sum_{i=0}^{k-1}\alpha_i d^i | \alpha_i \in R, i = 1, \ldots, k-1\right\}$, $x_k = x^0 + \alpha_1 d^0 + \cdots + \alpha_{k-1}d^{k-1}$

证明. 记函数 $\phi(a_0, a_1, \ldots, a_{k-1}) = \frac{1}{2}\left(x_0 + \sum_{f=0}^{k-1} a_i d^i\right)^T Q\left(x^0 + \sum_{i-0}^{k-1} a_i d^i\right) + C^T\left(x^0 + \sum_{i=0}^{k-1} a_i d^i\right)$。要证 $(a_0, a_1, \ldots, a_{k-1}) = argmin\phi(a_0, a_1, \ldots, a_{k-1})$，只需验证 $\frac{\partial\phi(\alpha_0,\ldots,\alpha_{k-1})}{\partial\alpha_i}|_{(\alpha_0,\ldots,\alpha_{k-1})} = 0$, 也即 $\left(Q\left(x^0 + \alpha_0 d^0 + \cdots + \alpha_{k-1}d^{k-1}\right) + C\right)^T d^i = \left(Qx^k + c\right)^T d^i = \nabla f\left(x^k\right)^T d^i = 0$ 所以得证。

共轭方向法在 n 步内就能找到解。

共轭梯度法（共轭方向法的一种）

借助当前点 x^k 的梯度信息构造共轭方向。

$$x^0 \xrightarrow{d^0} x^1 \xrightarrow{d^1} x^2 \xrightarrow{\cdots} x^{k-1} \xrightarrow{d^{k-1}} x^k$$

此时 d^1 与 d^0 共轭，d^2 与 d^1 与 d^0 都共轭

共轭梯度法的步骤为:

- Step1 (初始化) x^0，记 $d^0 = -\nabla f(x^0)$ 为负梯度方向，$\epsilon > 0$，$k := 0$
- Step2 若 $\|\nabla f(x^k)\| < \epsilon$，终止。否则，
- Step3 计算步长 $\alpha_k = -\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{(d^k)^T Q d^k}$
- Step4 令 $x^{k+1} := x^k + \alpha_k d^k$，并计算方向 d^{k+1}，使之与之前的方向都共轭 $(*)$ $d^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1})$+some term 令 $k := k+1$，回到 Step2

$(*)$ 式具体为:

$$d^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_k d^k, \beta_k = \frac{\nabla f(x^{k+1})^T Q d^k}{(d^k)^T Q d^k}$$

可证，d^{k+1} 与 $d^0, \ldots, d^k$ 均关于 Q 共轭，也即 $(d^{k+1})^T Q d^i = 0$。

不妨有，$d^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_0 d^0 + \beta_1 d^1 + \cdots + \beta_k d^k$，$(d^{k+1})^T Q d^i = 0$，则

$$(-\nabla f(x^{k+1}) + \beta_0 d^0 + \beta_1 d^1 + \cdots + \beta_k d^k)^T Q d^i = 0$$

$$-\nabla f(x^{k+1})^T Q d^i + \beta_i (d^i)^T Q d^i = 0$$

$$\beta_i = \frac{\nabla f(x^{k+1})^T Q d^i}{(d^i)^T Q d^i}, i = 0, \ldots, k$$

。

当 $i = 0, 1, \ldots, k-1$，主要分析 β_i 的分子

$$(*)\ \ \nabla f(x^{k+1})^T Q d^i$$

其中 $\alpha_i d^i = x^{i+1} - x^i$，则有

$$Qd^i = Q\frac{x^{i+1} - x^i}{\alpha_i} = (Qx^{i+1} - Qx^i)\frac{1}{\alpha_i} = (\nabla f(x^{i+1}) - \nabla f(x^i))\frac{1}{\alpha_i}$$

所以

$$(*)\ \ \nabla f(x^{k+1})^T(\nabla f(x^{i+1})-\nabla f(x^i))\frac{1}{\alpha_i}$$

因为 $d^{i+1}=\nabla f(x^{i+1})$ 加上 $d^0+\cdots+d^i$ 的组合，所以 $\nabla f(x^{i+1})=-d^{i+1}$ 加上 $d^0+\cdots+d^i$ 的组合。所以 $\nabla f(x^{i+1})^T\nabla f(x^{i+1})=0$

公式化简

共轭梯度法的步长公式 $\alpha_k=-\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{(d^k)^T Q d^k}$ 可化简为 $\alpha_k=\frac{\nabla f(x^k)^T\nabla f(x^k)}{(d^k)^T Q d^k}$。

过程:因为 $d^k=-\nabla f\left(x^k\right)+\beta_{k-1}d^{k-1}$,所以 $\nabla f\left(x^k\right)^T d^k=-\nabla f\left(x^k\right)^T\nabla f\left(x^k\right)+\beta_{k-1}\nabla f\left(x^k\right)^T d^{k-1}=-\nabla f\left(x^k\right)^T\nabla f\left(x^k\right)$

共轭梯度法步长公式中的系数

$$\beta_k=\frac{\nabla f\left(x^{k+1}\right)Qd^k}{(d^k)^TQd^k}$$

因为 $\nabla f(x^{k+1})^TQd^k=\nabla f(x^{k+1})^T(\nabla f(x^{k+1})-\nabla f(x^k))\frac{1}{\alpha_k}$，所以

$$\beta_k=\frac{\nabla f(x^{k+1})^T(\nabla f(x^{k+1}-\nabla f(x^k))}{\nabla f(x^k)^T\nabla f(x^k)}=\frac{\nabla f(x^{k+1})^T\nabla f(x^{k+1})}{\nabla f(x^k)^T\nabla f(x^k)}$$

推广：非线性共轭梯度法（FR/DRP），用于求解一般性的 $\min f(x)$

- Step1 (初始化) x^0，记 $d^0=-\nabla f(x^0)$ 为负梯度方向，$\epsilon>0$，$k:=0$
- Step2 若 $\|\nabla f(x^k)\|<\epsilon$，终止。否则，
- Step3 利用线性搜索计算步长 α_k
- Step4 令 $x^{k+1}:=x^k+\alpha_k d^k$，并计算方向 d^{k+1}，使之与之前的方向都共轭

$$(*)\quad d^{k+1}=-\nabla f(x^{k+1})+\beta_k d^k$$

$$(PRP)\ \ \beta_k=\frac{\nabla f(x^{k+1})^T(\nabla f(x^{k+1})-\nabla f(x^k))}{\nabla f(x^k)^T\nabla f(x^k)}$$

$$(FR)\ \ \beta_k=\frac{\nabla f(x^{k+1})^T\nabla f(x^{k+1})}{\nabla f(x^k)^T\nabla f(x^k)}$$

令 $k:=k+1$，回到 Step2

4 约束优化问题（一）最优性条件

约束优化问题

$$\min f(x)$$

$$s.t. g_i(x) \le 0$$

$$h_i(x) = 0$$

记可行集为：$S = \{x|g_i(x) \le 0, i = 1, \ldots, m, h_i(x) = 0, i = 1, \ldots, l\}$

讨论的基础为：$f(x), g_i(x), h_i(x)$ 均为连续可微函数。

最优解的一阶必要条件——KKT 条件（Karush-Kuhn-Tucker）假设 x^* 是问题 (P) 的局部最优解，且 x^* 处某个适当的条件满足 constraint qualification（约束规范）成立，则存在 λ(m 维向量) 和 μ(l 维向量) 使得：

$$\nabla f\left(x^*\right) + \sum_{i=1}^{m} \left(\lambda_i\right) \nabla g_i\left(x^*\right) + \sum_{i=1}^{l} \mu_i \nabla h_i\left(x^*\right) = 0$$

$$\lambda_i \ge 0, i = 1, \ldots, m$$

$$g_i(x^*) \le 0, i = 1, \ldots, m$$

$$h_i(x^*) = 0, i = 1, \ldots, l$$

$$\lambda_i g_i(x^*) = 0, i = 1, \ldots, m$$

以上条件称为 KKT 条件。

证明 KKT 条件的思路：

定义 10. 可行点列：对于 $x^* \in S$，若点列 $\{x_k\} \subset S$ 满足所有 $x_k \neq x^*, \lim_{k\to\infty} x_k = x^*$，则其为可行点列

基本思路：若 $x^* \in S$ 是局部最优解，则沿着任意可行点列目标函数不会下降（即当 k 充分大时，有 $f(x_k) \ge f(x^*)$）。

考虑 x^* 处的集合 $D\left(x^*\right) = \left\{d \mid \nabla f\left(x^*\right)^T d < 0\right\}$，均为 $f(x)$ 在 x^* 处的下降方向。

考虑 x^* 处的集合 $T\left(x^*\right) = \left\{\alpha d \mid \alpha > 0, d = \lim_{k\to\infty} \frac{x_k - x^*}{\|x_k - x^*\|}, x^k \to x^*, x_k \neq x^*, x^* \in S\right\}$，该集合称为 x^* 处的切锥。

则最优解的必要条件：若 x^* 是问题 (P) 的局部最优解，则 $D\left(x^*\right) \cap T\left(x^*\right) = \phi$ ，则证：任取 $\alpha d \in T(x^*)$，都有 $\nabla f(x^*)^T d \ge 0$。

证明. 任取 $\alpha d \in T(x^*)$，$d = \lim_{k\to\infty} \frac{x_k - x^*}{\|x_k - x^*\|}, x^k \to x^*, x_k \neq x^*, x^* \in S.$。当 k 充分大，必有 $0 \leq f(x_k) - f(x^*) = \nabla f(x^*)^T(x_k - x^*) + o(\|x_k - x^*\|)$，所以

$$0 \leqslant \frac{f(x_k) - f(x^*)}{\|x_k - x^*\|} = \frac{\nabla f(x^x)^T (x_k - x^*)}{\|x_k - x^*\|} + \frac{o\left(\|x^k - x^*\|\right)}{\|x_k - x^*\|}$$

令 $k \to 0, \nabla f(x^*)^T d \geq 0$

与切锥关系密切的有两个集合：（一）可行方向集

x^* 沿 d 方向走 λ, ξ 是一个小小的正数，

$$F(x^*) = \{d \mid x^* + \lambda d \in S, \forall \lambda \in (0, \xi)\},$$

易知，$F(x^*) \leqslant T(x^*), \forall d \in F(x^*)$，即 $x^* + \lambda d \in S, \forall \lambda \in (0, \xi)$。构造 $x^k = x^* + \lambda_k d, \lambda_k \to 0, \lambda_k \in (0, \xi)$，则

$$\lim \frac{x_k - x^*}{\|x - x^*\|} = \frac{d}{\|d\|} \quad \in T(x^*)$$

。

（二）记 x^* 处的有效指标集 $I = \{i \mid g_i(x^*) = 0\}$，定义集合

$$F_1(x^*) = \left\{d \mid \nabla g_i(x^*)^T d \leqslant 0, i \in I, \nabla h_i(x^*)^T, d = 0, i \in 1, \ldots, l\right\}$$

。易知，$T(x^*) \subseteq F_1(x^*)$。任取 $\alpha d \in T(x^*)$, 只需要：

（1）$\nabla g_i(x^*)^T d \leq 0, i \in I$

（2）$\nabla h_i(x^*)^T d = 0, i = 1, \ldots, I, d = \lim_{k\to\infty} \frac{x_k - x^*}{\|x_k - x^*\|}, x^k \to x^*, x_k \neq x^*, x^* \in S$

对于（1）

$$i \in I, g_i(x_k) - g_i(x^*) = \nabla g_i(x^*)^T(x_k - x^*) + o\|g_i(x_k) - g_i(x^*)\| \leq 0$$

所以 $\frac{\nabla g_i(x^*)^T (x_k - x^*) + o\|g_i(x_k) - g_i(x^*)\|}{\|x_k - x^*\|} \leq 0$，$\nabla g_i(x^*)^T \leq 0$

对于（2）

$$h_i(x_k) - h_i(x^*) = \nabla h_i(x^*)^T(x_k - x^*) + o() = 0$$

$$\nabla h_i(x^*)^T d = 0$$

所以：$F(x^*) \subseteq T(x^*) \subseteq F_1(x^*)$

那么如何运用 $F_1(x^*)$ 呢？

由约束规范，$T(x^*) = F_1(x^*)$。

常用的约束规范有：

(1)$g_i(x), i \in I, h_i(x), i = 1, \ldots, l$ 均为线性函数

(2) 向量组 $\nabla g_i(x), i \in I, \nabla h_i(x^*), i-1, \ldots, l$ 线性无关（LICQ）

(3)Slater condition

若 $x^* \in S$ 是最优解且某种约束规范成立，则

$$D\left(x^*\right) \cap F_1\left(x^*\right) = \phi$$

满足上述时,（由 Farkas 引理）KKT 条件成立。

由 Farkas 引理：$A_{m\times n} \in R^n$，$Ad \leq 0, C^T d > 0$ 与 $A^T y = c, y \geq 0$ 有且仅有一个问题有解。我们要证明 $D\left(x^*\right) \bigcap F_1\left(x^*\right) = \phi$ 当且仅当 KKT 条件成立。

证：$D\left(x^*\right) \bigcap F_1\left(x^*\right) = \phi \Leftrightarrow$

$$\left.\begin{array}{l} \nabla f\left(x^*\right)^T d < 0 \\ \nabla g_i\left(x^*\right)^T d \leqslant 0 \quad i\varepsilon I \\ \nabla h_i\left(x^*\right)^T d = 0, i = 1, \cdots l \end{array}\right\} d \text{ 无解}$$

则

$$\left\{\begin{array}{ll} -\nabla f\left(x^*\right)^T d > 0 & \\ \nabla g_i\left(x^*\right)^T \leqslant 0 & i \in I \\ \nabla h_i\left(x^*\right)^T d\varepsilon 0 & i = 1, \cdots l \\ -\nabla h_i\left(x^*\right)^T d \leqslant 0 & i = 1, \cdots l \end{array}\right.$$

则 $C = -\nabla f(x^*)$，$A = \begin{pmatrix} \nabla g_i\left(x^*\right)^T & , i \in I \\ \nabla h_i\left(x^*\right)^T, & i = 1, \cdots l \\ -\nabla h_i\left(x^*\right)^T, & i = 1, \cdots l \end{pmatrix}$

由 Farkas 引理，另一问题 $A^T y = C, y \geq 0$，也即

$$\begin{pmatrix} \nabla g_i\left(x^*\right), & \nabla h_i\left(x^*\right), & -\nabla h_i\left(x^*\right) \\ i \in 1 & i = 1, \cdots t & i = 1, \cdots l \end{pmatrix} y = -\nabla f(x^*)$$

其中 $y \geq 0, y = \begin{pmatrix} y_i, i \in I \\ y_i, i = 1, \ldots l \\ \tilde{y}_i, i = 1, \ldots l \end{pmatrix} \leq 0$ 即 $(y_i, \bar{y}_i), \tilde{y}_i) \geq 0$。

则：$\nabla f\left(x^*\right) + \sum_{i=I} y_i \nabla g_i\left(x^*\right) + \sum_{i=1}^{l}\left(\bar{y}_i\right) \nabla h_i\left(x^*\right) - \sum_{i=1}^{l}\left(\tilde{y}_i\right) \nabla h_i\left(x^*\right) = 0, (y_i, \bar{y}_i), \tilde{y}_i) \geq 0$

也即：

$$\nabla f\left(x^*\right) + \sum_{i=I} y_i \nabla g_i\left(x^*\right) + \sum_{i=1}^{l}\left(\bar{y}_i - \tilde{y}_i\right) \nabla h_i\left(x^*\right) = 0$$

将 y_i 看作 λ_i，$\bar{y}_i - \tilde{y}_i$ 看作 μ_i。

则:

$$\begin{cases} \nabla f\left(x^*\right) + \sum_{i \in I} \lambda_i \nabla g_i\left(x^*\right) + \sum_{i=1}^{l} \mu_i \nabla h_i\left(x^*\right) = 0 \\ \lambda_i = y_i \\ \mu_i = \bar{y}_i - \tilde{y}_i \end{cases}$$

所以有:

$$\begin{cases} \nabla f\left(x^*\right) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i\left(x^*\right) + \sum_{i=1}^{l} \mu_i \nabla h_i\left(x^*\right) = 0 \\ \lambda_i g_i\left(x^*\right) = 0, i = 1, \dots m \\ \lambda_i \geqslant 0 \end{cases}$$

KKT 条件

$$\nabla f\left(x^*\right) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i\left(x^*\right) + \sum_{i=1}^{l} \mu_i \nabla h_i\left(x^*\right) = 0 \quad (1)$$

$$\lambda_1 \geq 0, i = 1, \dots, m \quad (2)$$

$$g_i(x^*) \leq 0, i = 1, \dots, m \quad (3)$$

$$h_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, l \quad (4)$$

$$\lambda_i g_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, m \quad (5)$$

(1)+(2): dual feasible(DF，对偶可行条件)

(3)+(4): primol feasible（PF，原则可行/原问题可行条件）

(5): complementary slack （CK，互补松弛条件）

λ_i，μ_i 称为拉格朗日乘子，可反映约束条件右端发生扰动时最优目标函数值的变化情况（影子价格）

在什么条件下，KKT 点就是最优解？

$$\begin{cases} (1) : f(x), g_i(x), i, \dots, m \\ (2) : h_i(x) \quad i = 1, \dots, l \end{cases}$$

(1) 均为凸函数，(2) 为线性函数。

证明. 设 x^* 满足 KKT 条件。要证 x^* 是最优的。

$$\forall x \in S \quad f(x) - f\left(x^*\right) \geqslant \nabla f\left(x^*\right)^T \left(x - x^*\right) = -\sum \lambda_i \nabla g_i(x^*)^T (x - x^*) - \sum \mu \nabla h_i(x^*)^T (x - x^*)$$

而

$$\nabla g_i(x^*)^T (x - x^*) \leq g(x) - g(x^*)$$

$$-\nabla g_i(x^*)^T(x-x^*) \geq -(g(x)-g(x^*))$$

$$\nabla h_i(x) = a_i$$

$$-\nabla h_i(x)(x-x^*) = -a_i^T(x-x^*) = -(h_i(x)-h_i(x^*))$$

因为 $x \in S, x^* \in S$，所以 $h_i(x) - h_i(x^*) = 0$.

所以 $f(x) - f(x^*) \geq \sum \lambda_i(g(x^*) - g(x)) = \sum \lambda_i g(x^* - \sum \lambda_i g_i(x) = -\sum \lambda_i g_i(x) \geq 0$，$\forall x \in S, f(x) - f(x^*) \geq 0$

5 约束优化问题（二）最优性条件

之前，在 (P) 中，若：

$$\begin{cases} (1): f(x), g_i(x), i, \ldots, m \\ (2): h_i(x) \quad i = 1, \ldots, l \end{cases}$$

(1) 均为凸函数，(2) 为线性函数，则 KKT 点为 (P) 最优解。

那么，若 (1) 或 (2) 不满足，在什么条件下，KKT 点依旧是最优解呢？→ 要采用二阶信息。

假设 x^* 满足 KKT 条件，也即：

$$\begin{cases} \nabla f\left(x^*\right) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i\left(x^*\right) + \sum_{i=1}^l \mu_i \nabla h_i\left(x^*\right) = 0 \\ \lambda_1 \geq 0, i = 1, \ldots, m \\ g_i(x^*) \leq 0, i = 1, \ldots, m \\ h_i(x^*) = 0, i = 1, \ldots, l \\ \lambda_i g_i\left(x^*\right) = 0, i = 1, \ldots m \end{cases}$$

定义一个新的函数：$L(x) = f(x) + \sum \lambda_i g_i(x) + \sum \mu_i h_i(x)$ 其中，λ_i 和 μ_i 即 KKT 条件中的系数。

则可知：(1)$\nabla L(x^*) = 0$(由 KKT 知)

(2)$L(x) = f(x) + \sum \lambda_i g_i(x^*) + \sum \mu_i h_i(x^*) = f(x^*)$

(3)$\forall x \in S, L(x) = f(x) + \sum \lambda_i g_i(x) + \sum \mu_i h_i(x) \leq 0$，所以 $L(x) \leq f(x)$

由 (2)(3)，若 x^* 为最优解，则 KKT 点 x^* 为 (P) 最优解。

证明.

$$L(x^*) \leq L(x), \forall x \in S$$

$$L(x^*) \leq f(x^*)$$

$$L(x) \leq f(x)$$

所以 $f(x^*) \leq f(x), \forall x \in S$

（一）假设 x^* 为 KKT 点；λ，μ，$L(x)$。$\nabla L(x^*) = 0$

1）若 $\nabla^2 L(x^*) \geq 0, \forall x \in S$ 则 $L(x)$ 在 S 上是凸的，则 x^* 为 $L(x)$ 的全局最优解，则 x^* 为 (P) 的全局最优解

2）若 $\nabla^2 L(x^*) \geq 0, \forall x \in S \bigcap N_s(x^*)$ 领域，则 x^* 为 (P) 的全局最优解

3）若 $\nabla^2 L(x^*) > 0$，因为 $\nabla L(x^*) = 0$，所以 x^* 为 $L(x), (P)$ 的严格局部最优解

具体地，$\nabla^2 L(x^*) > 0$，则 $d^T \nabla^2 L(x^*) d > 0, \forall d \neq 0$，往任意方向走，函数值都会上升。

因为有约束，所以只需要在可行的方向上满足 $d^T\nabla^2 L(x^*)d>0$ 即可。

那么我们希望去掉 $F_1(x^*)$ 中目标函数值会上升的方向。

$\rightarrow d^T\nabla^2 L(x^*)d>0, \forall d\in F_1(x^*)$，其中 $F_1(x^*)=\left\{d \middle| \begin{array}{c} \nabla g_i(x^*)^T d\leqslant 0, i\in I \\ \nabla h_i(x^*)^T d=0, i=1,\cdots l \end{array}\right\}$

当 $i\in I, g_i(x^*)=0, \lambda_i g_i(x^*)=0$（由 KKT 条件），则 λ_i 可以为 0 或者大于 0。

若 $\lambda_i>0, i\in I$，我们不想要这部分。

$$I^+=\{i\mid\lambda_i>0, i\in I\}$$

$$I^0=\{i\mid\lambda_i=0, i\in I\}$$

所以 $F_2(x^*)=\left\{d \middle| \begin{array}{c} \nabla g_i(x^*)\leqslant 0 \quad i\in I^0 \\ \nabla g_1(x^*)^T d=0 \quad i\in I^+ \\ \nabla h_i(x^*)^T d=0, i\in 1,\cdots l \end{array}\right\}\subseteq F_1(x^*)$

（二）假设 x^* 满足 KKT 条件，$L(x)=f(x)+\sum\lambda_i g_i(x)+\sum\mu_i h_i(x)$

易知 $\nabla L(x^*)=0$。已知 $d^T\nabla^2 L(x^*)d>0, \forall d\in F_2(x^*)$，则 x^* 为 (P) 的严格局部最优解。

证明. 反证法。

设 x^* 不是 (P) 的严格局部最优解。则存在点列 $\{x_k\}$ 收敛到 x^*。$x_k\in S$, 使 $f(x_k)\leq f(x^*)$。

记方向 $d_k=\frac{x_k-x^*}{\|x_k-x^*\|}$ 是有界点列，则其必有收敛子列。设 d_k 收敛到 d，也即 $d_k\rightarrow d$。令 $\alpha_k=\|x_k-x^*\|$。因为 $x_k\rightarrow x^*$，所以 $\alpha_k\rightarrow 0$。则 $x_k=x^*+\alpha_k d_k$（也即从 x^* 出发，沿着 d^k 走 α_k）

1)$f(x_k)-fx^*)=\nabla f(x^*)^T(x_k-x^*)+\frac{1}{2}\nabla^2 f(x^*)(x_k-x^*)+o(\alpha_k^2)\leq 0$，$\longrightarrow \alpha_k\nabla f(x^*)^T d_k+\frac{\alpha_k^2}{2}d_k^T\nabla^2 f(x^*)d_k+o(\alpha_k^2)\leq 0$

2)$g_i(x_k)-g_i(x^*)=\alpha_k\nabla g_i(x^*)^T d_k+\frac{\alpha_k^2}{2}d_k^T\nabla^2 g_i(x^*)d_k+o\left(\alpha_k^2\right)=0, i\in I$

3)$h_i(x_k)-h_i(x^*)=\alpha_k\nabla h_i(x^*)^T d_k+\frac{\alpha_k^2}{2}d_k^T\nabla^2 h_i(x^*)d_k+o\left(\alpha_k^2\right)=0, i=1,\ldots,l$

那么，要找一个方向 d，$d\in F_2(x^*), d^T\nabla^2 f(x)d\leq 0$

对 1)，除以 α_k，令 $k\rightarrow\infty$，则 $\nabla(x^*)^T d\leq 0$

对 2)，除以 α_k，令 $k\rightarrow\infty$，则 $\nabla g_i(x^*)^T d\leq 0, i\in I$

对 3)，除以 α_k，令 $k\rightarrow\infty$，则 $\nabla h_i(x^*)^T d=0, i=1,\ldots,l$

因为 x^* 是 KKT 点，则 $\nabla f(x^*)+\sum\lambda_i\nabla g_i(x^*)+\sum\mu_i\nabla h_i(x^*)=0$，则 $\nabla f(x^*)^T d+\sum\lambda_i\nabla g_i(x^*)^T d+\sum\mu_i\nabla h_i(x^*)^T d=0$

因为 $\nabla f(x^*)^T d\leq 0$，$\sum\lambda_i\nabla g_i(x^*)^T d\leq 0$，$\sum\mu_i\nabla h_i(x^*)^T d=0$，所以 $i:\nabla f(x^*)^T d=0$，

$$\lambda_i\nabla g_i(x^*)^T d=0\longrightarrow i\in I^+, \lambda_i>0, ii:\nabla g_i(x^*)^T d=0$$

$$iv:\nabla h_i(x^*)^T d=0\longrightarrow i\in I^0, \lambda=0, iii:\nabla g_i(x^*)^T d\leq 0$$

由 $ii, iii, iv \longrightarrow F_2(x^*)$，可知 $d \in F_2(x^*)$

接下来，找 $d^T \nabla^2 f(x) d \leq 0$。因为

$$\nabla^2 L(x^*) = \nabla^2 f(x^*) + \sum \lambda_i \nabla^2 g_i(x^*) + \sum \mu_i \nabla^2 h_i(x^*)$$

令 1) + $\sum \lambda_i$2) + $\sum \mu_i$3)k 可得:

$$\begin{aligned}
&\alpha_k \left(\nabla f\left(x^*\right)^T d_k + \sum \lambda i \nabla g_i\left(x^*\right)^T d_k + \sum \mu_i \nabla h_i\left(x^*\right)^T d_k\right) \\
&+\tfrac{\alpha_k}{2}\left(d_k^T \nabla^2 f\left(x^*\right) d_k + \sum \lambda_i d_k^T \nabla^2 g_i\left(x^*\right) d_k + \sum \mu_i d_k^T \nabla^2 h_i\left(x^*\right) d_k\right. \\
&+o\left(\alpha_k^2\right) \leqslant 0
\end{aligned}$$

整理，有

$$\alpha_k(\nabla f(x^*) + \sum \lambda_i \nabla g_i(x^*) + \sum \mu_i h_i(x^*))^T d_k + \frac{\alpha_k^2}{2} d_k^T \nabla^2 L\left(x^*\right) d_k + O\left(\alpha_k^2\right) \leq 0$$

由 KKT 条件，$\nabla f(x^*) + \sum \lambda_i \nabla g_i(x^*) + \sum \mu_i h_i(x^*) = 0$ 所以 $\frac{1}{2} d_k^T \nabla^2 L\left(x^*\right) d_k + \frac{O\left(\alpha_k^2\right)}{\alpha_k^2} \leq 0$。令 $k \to \infty$，则 $d^T \nabla^2 L\left(x^*\right) d \leq 0$，则 $\exists d \in F_2(x^*)$ 使 $d^T \nabla^2 L\left(x^*\right) d \leq 0$，矛盾。

所以 x^* 是 (P) 的严格局部最优解（二阶充分条件）。若 $d^T \nabla^2 L\left(x^*\right) d > 0, \forall d \in F_1(x^*)$，则 x^* 是 (P) 的严格局部最优解。

6　约束优化问题（三）罚函数法

基本思想：通过求解一系列无约束优化问题，最终达到求解约束优化的目的。

6.1　只有等式约束的优化问题

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(x) \\
\text{s.t.} \quad & h_i(x) = 0, i = 1, \cdots, l
\end{aligned}
$$

记问题为 (P)，可行集为 S。

- 惩罚项

  在取走约束之后，需要尽可能保留约束的信息，这里通过构造惩罚项 $p(x)$ 实现。如果 $x \in S$，不进行任何惩罚；如果 $x \notin S \to h_i(x) \neq 0$，需要进行惩罚。常用的惩罚项设置：

$$
p(x) = \sum_{i=1}^{L} h_i^2(x) = \begin{cases} 0, & \Leftrightarrow \ x \in S, \\ > 0, & \Leftrightarrow \ x \notin S. \end{cases}
$$

- 惩罚项的目的是帮助我们构造罚函数，则可以有：

$$
\mathbb{P}(x, \sigma) = f(x) + \sigma p(x).
$$

  其中 σ 为罚参数。

- 进一步，产生无约束优化问题：

$$
\min_x \mathbb{P}(x, \sigma) = f(x) + \sigma \sum_{i=1}^{L} h_i^2(x).
$$

  为了尽快求解，直观地，把 σ 设大就可以。但是通常来说不会这样做。而是一步步来：$(\sigma_1, x_1) \to (\sigma_2, x_2) \to x^*$

分析：

$\min_{x \in S} = \min_{x \in S}\{f(x) + \sigma p(x)\}$ 是成立的，因为此时后面的 $p(x)$ 为 0。进一步，考虑 $\min_{x \in \mathcal{R}^n}\{f(x) + \sigma p(x)\}$，则此时，

$$
\min_{x \in S} \geq \min_{x \in \mathcal{R}^n}\{f(x) + \sigma p(x)\}
$$

换言之，构造出的无约束优化问题是原先问题 (P) 的下界。

记 $\theta(\sigma) = \min_{x \in \mathcal{R}^n}\{f(x) + \sigma p(x)\}$，可知 $\theta(\sigma)$ 为 (P) 的最优值（$v(P)$）提供下界。

我们希望这个下界越大越好，因此，目标是 $\max_\sigma \theta(\sigma)$。

取 $\sigma_1 < \sigma_2$，则：

$$f(x) + \sigma_1 p(x) \le f(x) + \sigma_2 p(x)$$

$$\min_x \{f(x) + \sigma_1 p(x)\} \le \min_x \{\le f(x) + \sigma_2 p(x)\}$$

$$\theta(\sigma_1) \le \theta(\sigma_2)$$

可知这是个单调增的函数。目标是 $\max_\sigma \theta(\sigma)$ 时，等价于 $\lim_{\sigma\to\infty} \theta(\sigma)$。

例 6.1.

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

求解：

$$\mathbb{P}(x,\sigma) = x_1 + x_2 + \sigma(x_2 - x_1^2)^2$$

$\min_x \mathbb{P}(x,\sigma)$，令 $\nabla_x \mathbb{P}(x,\sigma) = 0$，也即

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbb{P}(x,\sigma)}{\partial x_1} = 1 + 2\sigma(x_2 - x_1^2)\,(-2x_1) = 0, \\ \dfrac{\partial \mathbb{P}(x,\sigma)}{\partial x_2} = 1 + 2\sigma(x_2 - x_1^2) = 0. \end{cases} \quad \text{解得：} \begin{cases} x_1(\sigma) = \frac{-1}{2} \\ x_2(\sigma) = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\sigma} \end{cases}$$

(Remember to check the Hesse matrix $\nabla_x^2 \mathbb{P}(x,\sigma) > 0$.)

令 $\sigma \to \infty, x(\sigma) \to x^* = (\frac{-1}{2}, \frac{1}{4})$。

例 6.2.

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

其中最优解 $x^* = (1,0)$

用罚函数方法，则

$$\min \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) + \frac{\sigma_k}{2}(x_1 - 1)^2 = f_k(x)$$

$$\nabla f_{k(x)} = \begin{bmatrix} (1+\sigma_k)x_1 - \sigma_k \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow x_k = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_k}{1+\sigma_k} \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \sigma_k \longrightarrow \infty \Rightarrow x_k = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

此外，考虑其 Hesse 矩阵，

$$\nabla^2 f_k(x) = \begin{pmatrix} 1+\sigma_k & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} > 0$$

是正定的。那么就是凸优化问题，求解一阶条件即有全局最优。

实现罚函数方法的框架

Step0. 取初始点 $x^0, \sigma_1 > 0, \epsilon > 0, k := 1$

Step1. 以 x^{k-1} 为初始点，求解无约束优化问题 $\min\{f(x) + \sigma_k p(x)\}$，得到解 x^k

Step2. 若 $\sigma_k p(x^k) \leq \epsilon$，则终止

Step3. 更新 $\sigma_{k+1} > \sigma_k$;　$k := k+1$，转到 Step1

一些更新 σ_{k+1} 的策略：

1) $\sigma_{k+1} = \beta\sigma_k$，$\beta > 1$ 为固定常数
2) 增大幅度取决于 $\mathbb{P}(x, \sigma)$ 的求解难度，比如，
   易解时，$\sigma_{k+1} = 10\sigma_k$；难解时，$\sigma_{k+1} = 2\sigma_k$。

定理 15. 设 x^k 是 $\min_x\{f(x) + \sigma_k p(x)\}$ 的全局最优解，则可以有三个点列：

- $\{\mathbb{P}(x^k, \sigma_k)\}$ 是递增的，因为 $\mathbb{P}(x^k, \sigma_k) = \min \mathbb{P}(x, \sigma_k) = \theta(\sigma_k)$
- $\{p(x^k)\}$ 是递减的
- $\{f(x^k)\}$ 是递增的

证明很直观，此处略过。

定理 16. x^k 是外点罚函数最优化问题 (Q_k) 的最优解，当 $\sigma_k \longrightarrow \infty$，则序列 $\left\{x^k\right\}$ 的每一个极限点都是原问题 (Q_0) 的最优解。

隐含条件：(1) 有最优解；(2) 最优值有限

证明. 设 $\bar{x}$ 是 (Q_0) 的（全局）最优解，即 $f(\bar{x}) \leq f(x), \forall x \in \left\{h_j(x) = 0, j = 1, \cdots,\right\}$。因为 x^k 是是 (Q_k) 的（全局）最优解，因此有

$$f\left(x^k\right) + \frac{\sigma_k}{2}\left\|h\left(x^k\right)\right\|^2 \leqslant f(\bar{x}) + \frac{\sigma_k}{2}\|h(\bar{x})\|^2 = f(\bar{x}) \quad (*)$$

整理上式，得：

$$\frac{\sigma_k}{2}\left\|h\left(x^k\right)\right\|^2 \leq f(\bar{x}) - f(x^k)$$

$$\left\|h\left(x^k\right)\right\|^2 \leq \frac{2\left[f(\bar{x} - f(x^k))\right]}{\sigma_k} \quad (**)$$

设 x^k 是 $\left\{x^k\right\}$ 的一个极限，$(**)$ 两边取极限 $(k \longrightarrow \infty)$，则

$$0 \leq \left\|h\left(x^k\right)\right\|^2 \leq \lim_{k\to\infty} \frac{2\left[f(\bar{x} - f(x^*))\right]}{\sigma_k} = 0$$

则 x^* 是可行解。

$(*)$ 两边取极限，

$$f(x^*) \leq f(x^*) + \lim_{k\to\infty} \frac{\sigma_k}{2}\left\|h\left(x^k\right)\right\|^2 \leq f(\bar{x})$$

则 x^* 是 (Q_0) 的最优解。

定理 17. 设 x^k 满足 $\nabla_x \mathbb{P}(x, \sigma_k) = 0$，有 $\{x^k\}$，$\bar{x}$ 是 $\{x^k\}$ 的聚点。设 $\bar{x}$ 处的约束函数梯度 $\nabla h_i(\bar{x}), i = 1, \cdots, l$ 线性无关，则是 (P) 的 KKT 点。

证明.

$$\mathbb{P}(x, \sigma) = f(x) + \sigma p(x) = f(x) + \sigma \sum h_i^2(x)$$

$$\nabla_x \mathbb{P}(x^k, \sigma_k) = \nabla f(x^k) + 2\sigma_k \sum_{i=1}^{L} \nabla h_i(x^k) \nabla h_i(x^k) = 0 \quad (\#)$$

$$\sum_{i=1}^{L} \nabla h_i(x^k) \nabla h_i(\bar{x}) = -\frac{1}{2\sigma} \nabla f(x^k)$$

令 $k \to \infty, \sum_{i=1}^{L} \nabla h_i(x^k) \nabla h_i(\bar{x}) = 0$，则此时 $h_i(\bar{x}) = 0, i = 1, \cdots, l$，故 $\bar{x}$ 是 (P) 的可行点。

记 $\lambda_i^k = 2\sigma_k h_i(x^k)$。则 (#) 变为

$$\nabla f(x^k) + \sum \lambda_i^k \nabla h_i(x^k) = 0$$

由于 $\nabla h_i(\bar{x}), i = 1, \cdots, l$ 线性无关，当 k 充分大时，$\nabla h_i(x^k), i = 1, \cdots, l$ 线性无关。因此，令 $k \to \infty$，$\nabla f(\bar{x}) + \sum \lambda_i \nabla h_i(\bar{x}) = 0$；又因为已知 $\nabla h_i(\bar{x}), i = 1, \cdots, l$，因此 KKT 条件成立。

6.2 一般罚函数方法

考虑优化问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & h_j(x) = 0 \quad j = 1, \cdots q \\ & g_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \cdots p \end{aligned}$$

$$\min f(x) + \frac{\sigma_k}{2} \left\|g^+(x)\right\|^2 + \frac{\sigma_k}{2} \|h(x)\|^2 = f_k(x)$$

其中

$$\left\|g^+(x)\right\|^2 = max\{0, g_i(x)\}$$

$$\nabla f_k(x) = \nabla f(x) + \sigma_k \sum_{i=1}^{p} g_i^+(x) \nabla g_i(x) + \sigma_k \sum_{j=1}^{q} h_j(x) \nabla h_j(x)$$

例 6.3. $g(x) = x \leq 0$

$\|g^+(x)\|^2 = \|\max\{0, x\}\Big\|^2$

$$\nabla \left\|g^+(x)\right\|^2 = \begin{cases} 2x & x \geqslant 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases}$$

$$2g^+(x) \nabla g(x) = \begin{cases} 2x & x \geqslant 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases}$$

7 约束优化问题（四）增广拉格朗日方法（乘子法）

7.1 只有等式约束的优化问题

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(x) \\
\text{s.t.} \quad & h_i(x) = 0, i = 1, \cdots, l
\end{aligned}
$$

记问题为 (P)，可行集为 S。

罚函数法：

$$\min_x \mathbb{P}(x, \sigma) = f(x) + \sigma \sum_{i=1}^{L} h_i^2(x).$$

若对某个 σ_k，求解 $\min_x \mathbb{P}(x, \sigma_k)$ 问题，得到 x_k，算法终止。此时 $\sum_{i=1}^{L} h_i^2(x^k) = 0\ (x^k \in S)$。由

$$\nabla_x \mathbb{P}(x^k, \sigma_k) = \nabla f(x^k) + 2\sigma_k \sum_{i=1}^{L} h_i(x^k) \nabla h_i(x^k) = 0$$

可得 $\nabla f(x^k) = 0$。在这种 case 下，不需要迭代到 $k \to \infty$。

如果构造一个函数：

$$L_A(x, \lambda, \sigma) = f(x) + \sum \lambda_i h_i(x) + \sigma \sum h_i^2(x)$$

其兼备了拉格朗日函数和罚函数的好处。$\sigma \sum h_i^2(x)$ 是增广项，λ_i 是乘子，而我们对其求梯度的时候很容易出现 KKT 条件所需要的东西。现在无约束优化问题就是 $\min_x L_A(x, \lambda, \sigma)$。

实现乘子法的框架

Step0. 取 $x^0, \lambda^1, \sigma_1 > 0, \epsilon > 0, k_i = 1$

Step1. 以 x^{k-1} 为初始点，求解 $\min_x f(x) + \sum \lambda_i h_i(x) + \sigma \sum h_i^2(x)$，得解 x^k

Step2 ：若 $\sum h_i^2(x^k) \le \epsilon$，终止；

Step3 ：更新 $\lambda^{k+1}, \sigma_{k+1} (> \sigma_k), k := k + 1$ 转 Step1

如何更新 λ^{k+1}? 由于 x^k 满足 $\nabla L_A(x^k, \lambda^k, \sigma_k) = 0$，也即

$$
\begin{aligned}
\nabla f(x^k) + \sum \lambda_i^k \nabla h_i(x^k) + 2\sigma_k \sum h_i(x^k) \nabla h_i(x^k) = 0 \\
\nabla f(x^k) + \sum (\lambda_i^k + 2\sigma_k h_i(x^k)) \nabla h_i(x^k) = 0
\end{aligned}
$$

因此，可以根据策略 $\lambda_i^{k+1} := \lambda_i^k + 2\sigma_k h_i(x^k), i = 1, \cdots, l$ 来更新参数。

定理 18. 设 x^* 是 (P) 的 KKT 点，λ^*，且 x^* 处有二阶充分条件，则存在 $\sigma^* > 0$，当 $\sigma \geq \sigma^*$ 时，x^* 是 $\min_x L_A(x, \lambda^*, \sigma)$ 的严格局部最优解。

证明上述定理首先需要一个引理：

引理 7.1. 已知对称矩阵 $A_{n\times n}$ 以及矩阵 $B_{m\times n}$，若对于任意满足 $Bz = 0$ 的非零向量 z，均有 $z^\top Az > 0$，则存在 $\sigma^* > 0$，当 $\sigma \geq \sigma^*$ 时，$A + \sigma B^\top B$ 正定。

证明. 只要证明 $z^\top(A + \sigma B^\top B)z > 0, \forall z \in k = \{z \mid ||z|| = 1\}$

K 是一个有界闭集合。$K = K_1 \cup K_2$。$K_1 = \{z \in K \mid z^\top Az > 0\}, K_2 = \{z \in K \mid z^\top Az \leq 0\}, \forall z \in K_1$。

- $z^\top Az + \sigma z^\top B^\top Bz > 0, \forall \sigma > 0, \forall z \in K_1$
- 任取 $z \in K_2$，则 $Bz \neq 0, z^\top B^\top Bz > 0$

$$\min_{z\in K_2}\{z^\top Az + \sigma z^\top B^\top Bz\} \geq \min_{z\in K_2} z^\top Az + \sigma \min_{z\in K_2} z^\top B^\top Bz$$

因为 K_2 有界闭，则 $\min_{z\in K_2} z^\top Az + \sigma \min_{z\in K_2} z^\top B^\top Bz = a + \sigma b, b > 0$。

要令 $a + \sigma b > 0$，只需要 $\sigma^* > \frac{-a}{b}$。

接下来继续证定理。

证明. 由于 x^* 是 (P) 的 KKT 点，且二阶充分条件成立，则

$$\nabla f(x^*) + \sum \lambda_i^* \nabla h_i(x^*) = 0, h_i(x^*) = 0, i = 1, \cdots, l$$
$$d^\top(\nabla^2 f(x^*) + \sigma\lambda_i^* \nabla^2 h_i(x^*))d > 0, \forall d \in \{d \neq 0 \mid \nabla h_i(x^*)^\top d = 0\}(\#)$$

结论只需要证明：1) $\nabla L_A(x^*, \lambda^*, \sigma) = 0$, 2) $\nabla^2 L_A(x^*, \lambda^*, \sigma) > 0$

对于 1):

$$\nabla L_A(x^*, \lambda^*, \sigma) = \nabla f(x^*) + \sum \lambda_i^* \nabla h_i(x^*) + 2\sigma_k \sum h_i(x^*)\nabla h_i(x^*) = 0$$

对于 2)

$$\begin{aligned}\nabla^2 L_A(x^*, \lambda^*, \sigma) &= \nabla^2 f(x^*) + \sum \lambda_i^* \nabla^2 h_i(x^*) + 2\sigma \sum h_i(x^*)\nabla^2 h_i(x^*) + 2\sigma \sum \nabla h_i(x^*)\nabla h_i(x^*)^\top \\ &= \nabla^2 f(x^*) + \sum \lambda_i^* \nabla^2 h_i(x^*) + 2\sigma \sum \nabla h_i(x^*)\nabla h_i(x^*)^\top\end{aligned}$$

记 $A = \nabla^2 f(x^*) + \sum \lambda_i^* \nabla^2 h_i(x^*)$，$B^\top = (\nabla h_1(x^*), \cdots, \nabla h_l(x^*))$。

(#) 即 $d^\top Ad > 0, \forall\{d \neq 0 \mid Bd = 0\} \Rightarrow \nabla^2 L_A(x^*, \lambda^*, \sigma) = A + 2\sigma B^\top B$ □

7.2 一般情况

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ s.t. \quad & g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \cdots, m \end{aligned}$$

- $g_i(x) + s^2 = 0$,

$$L_A = f(x) + \sum \lambda_i (g_i(x) + s^2) + \sigma \sum (g_i(x) + s^2)^2$$

- $g_i(x) + s_i = 0, s_i \geq 0$

$$L_A = f(x) + \sum \lambda_i (g_i(x) + s_i) + \sigma \sum (g_i(x) + s_i)^2$$

8 对偶理论

考虑如下一般形式约束优化问题 (P)：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ s.t. \quad & g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \cdots, m \\ & h_i(x) = 0 \quad i = 1, \cdots, l \\ & x \in X = R^n \end{aligned}$$

记可行集为：$S = \{x \in X \mid g_i(x) \leqslant v, i = 1, \ldots, m; h_i(x) = v, i = 1, \cdots, l\}$

有 (P)，为什么要构建对偶问题 (D)?

用处：

(1) 若 (P) 非凸，很难求解 $\Rightarrow$ 寻找一个与 (P) 关系紧密且容易求解的问题（如 (D)）

(2)

$$\begin{aligned} \min c^T x \\ s.t. Ax = b \\ x \geq 0 \end{aligned}$$

对于上述 (P)，求解可用内点法、单纯形法

$$\begin{aligned} \min b^T y \\ s.t. A^T y \leq c \end{aligned}$$

对于上述 (D)，求解可用对偶单纯形法。注意此处 y^* 为影子价格 shadow price。

(3) 鲁棒优化，锥优化

8.1 拉格朗日函数及其对偶

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ s.t. \quad & g_i(x) \leq 0, i = 1, \cdots, m \\ & h_i(x) = 0, i = 1, \cdots, l \\ & x \in X = R^n \end{aligned}$$

引进拉格朗日函数，为：

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x) + \sum_{i=1}^{l} \mu_i h_i(x)$$

其拉格朗日对偶函数（dual function）为：

$$d(\lambda,\mu)=\min\left\{f(x)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i g_i(x)+\sum_{i=1}^{l}\mu_i h_i(x)\mid x\in X\right\}$$

其中 $x\in X$ 代表约束。

对于 $\forall(\lambda,\mu)$，$\lambda\geq 0$，有：

$$\min_{x\in S}\left\{f(x)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i g_i(x)+\sum_{i=1}^{l}\mu_i h_i(x)\mid x\in X\right\}$$

$$S\sqsubseteq X$$

$$\begin{aligned}d(\lambda,\mu)&=\min_{x\in X}\left\{f(x)+\sum\lambda_i g_i(x)+\sum\mu_i h_i(x)\right\}\\&\leq\min_{x\in S}\left\{f(x)+\sum\lambda_i g_i(x)+\sum\mu_i h_i(x)\right\}\\&\xrightarrow[\lambda_i\geq 0,g_i(x)\leq 0,h_i(x)=0]{\text{X contains more content than S, thus it is more likely to be chosen as the minimum.}}\leq\min_{x\in S}\{f(x)\}\end{aligned}$$

则对 $\forall(\lambda,\mu),\lambda>0$, 必有 $d(\lambda,\mu)\leq\min_{x\in S}\{f(x)\}=v(p)$，即 $d(\lambda,\mu)$ 是 $v(p)$ 的下界。下界越大越好（越接近 $v(p)$ 越好）。

拉格朗日对偶问题（也有其他的对偶）

$$\begin{aligned}(D)\quad &\max\ d(\lambda,\mu).\\&\text{s.t.}\quad \lambda_1\geqslant 0,\quad i=1,\dots m\end{aligned}$$

$$L(x,\lambda,\mu)=f(x)+\sum\lambda_i g_i(x)+\sum\mu_i h_i(x)$$

$$\text{(D):}\quad \max_{\lambda\geq v,\mu}\min_{x\in X}L(x,\lambda,\mu)$$

先对 L 中 x 求最小，再对 λ,μ 求最大。$\Rightarrow$ 换一下先后顺序

$$(P)\min_{x\in X}\max_{\lambda\geqslant 0\mu}L(x,\lambda,\mu)$$

$$max_{\lambda\geq 0}\left\{f(x)+\sum\lambda_i g_i(x)+\sum\mu_i h_i(x)\right\}\quad (*)$$

什么时候不会 max 到 $+\infty$?$\Rightarrow$ 当 $g_i(x)\leq 0,h_i(x)=0$

此时 $(*)$ 为：

$$=\begin{cases}f(x) & \text{if } g_i(x)\leq 0\quad h_i(x)=0\\+\infty & \text{other wise.}\end{cases}$$

然后，最小化 $f(x)$：$\min f(x)$ s.t.$g_i(x)\leq 0\ h_i(x)=0\ x\in X$

8.2 线性规划的对偶问题

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

其中 $c \in \mathcal{R}^n, A \in \mathcal{R}^{m\times n}, b \in \mathcal{R}^m$

首先：

$$
\begin{aligned}
L(x, \mu) &= c^T x + \mu^T (b - Ax) \\
d(\mu) &= \min_{x\in X} \left\{c^\top x + \mu^\top b - \mu^\top Ax\right\} \\
&= \min_{x\in X} \left\{\left(c - A^\top \mu\right)^\top x + b^\top \mu\right\} \\
&= \min_{x\geqslant 0} \left\{\left(C - A^\top \mu\right)^T x + b^\top \mu\right\}
\end{aligned}
$$

除非 $c - A^\top \mu \gg 0$, min 才会取到最小。

$$
= \begin{cases} b^\top \mu, & \text{if } c - A^\top \mu \geqslant 0 \\ -\infty, & \text{otherwise} \end{cases}
$$

则 (D) 即 $\max d(\mu)$，也即

$$
\begin{aligned}
& \max b^\top \mu \\
& s.t \cdot A^\top \mu \leq C
\end{aligned}
$$

9 弱对偶定理与强对偶定理

9.1 弱对偶定理

若 $v(P)$ 为原问题 (P) 的最优值，$v(D)$ 为对偶问题 (D) 的最优值，则 $v(D) \le v(P)$，$d(\lambda,\mu) \le v(D) \le v(P) \le f(x)$

9.1.1 弱对偶定理的推论（一）

假设 $\bar{x} \in S$，$\left(\bar{\lambda},\bar{\mu}\right), \bar{\lambda} \ge 0$，且 $d(\bar{\lambda},\bar{\mu}) = f(\bar{x})$

则 $v(P) = v(D)$，且 $\bar{x}$，$(\bar{\lambda},\bar{\mu})$ 是 (P) 与 (D) 的最优解。

9.2 弱对偶定理的推论（二）

若 $v(P) = -\infty$，则对 $\forall(\lambda,\mu), \lambda \ge 0$，有 $d(\lambda,\mu) = -\infty$

若 $v(D) = \infty$，则 (P) 无可行解。（此时 $v(P) = +\infty$）

Duality gap:$v(P) - v(D)$

9.3 强对偶定理

9.3.1 强对偶定理的内容

假设：1）集合 X 为非空凸集，$f(x)$ 及 $g_i(x), i = 1,\cdots,m$ 为凸函数；$h_i(x), i = 1,\cdots,l$ 为线性函数。$\Rightarrow (P)$ 为凸优化问题。

2）假设存在 $\hat{x} \in X$ 使 $g_i(\hat{x}) < 0, i = 1,\cdots,m$，$h_i(\hat{x}) = 0, i = 1,\cdots,l$ （也即 $\hat{x}$ 为严格可行点），且 $0 \in \mathrm{int}\ \ h(x)$（0 是 $h(X)$ 的内点），其中 $h(X) = \left\{h_1(x),\cdots,h_1(x)^T, x \in X\right\}$

则强对偶成立，也即：

$$\min\left\{f(x)|x \in S\right\} = \max\left\{d(\lambda,\mu)|\lambda \ge 0, \mu\right\}$$

9.3.2 强对偶定理的证明

证明. 由于 $\hat{x}$ 的存在，(P) 有可行点。若 $v(p) = -\infty$，则 $d(\lambda,\mu) = -\infty, \forall(\lambda,\mu), \lambda \ge 0$ 若 $v(P) = \gamma$(一个有界值)，则不存在 $x \in X$ 使得

$$\begin{cases} f(x) < \gamma \Rightarrow f(x) - \gamma < 0 \\ g_i(x) \le 0, i = 1,\cdots,m \\ h_i(x) = 0, i = 1,\cdots,l \end{cases}$$

定义 $H = \left\{ \begin{pmatrix} p \\ q \\ r \end{pmatrix} \in R \middle| \begin{array}{l} f(x) - \gamma < p, g_i(x) \le q_i, i = 1, \cdots, m \\ h_i(x) = \gamma_i, i = 1, \cdots, l \\ x \in X \end{array} \right\}$

则：H 凸且 $[0,0,0]^T \notin H$

根据凸集分离定理，则存在法向量 $(\lambda_0, \lambda, \mu 0)^T \neq 0$，使得：

$$\begin{pmatrix} \lambda_0 \\ \lambda \\ \mu \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} p \\ q \\ r \end{pmatrix} \ge \begin{pmatrix} \lambda_0 \\ \lambda \\ \mu \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$\forall (p,q,r)^T \in H, \forall (p,q,r) \in clH$

所以 $\lambda_0 p + \lambda^T q + \mu_T \gamma \ge 0(*)$ 则：$\lambda_0 \ge 0, \lambda_i \ge 0, i = 1, \cdots, m$

由 $(*)$ 可得，$\forall x \in X$

$$\lambda_0(f(x) - \gamma) + \sum \lambda_i g_i(x) + \sum \mu_i h_i(x) \ge 0(***)$$

不妨设 $\lambda_0 = 0$，$(***)$ 即 $\sum \lambda_i g_i(x) + \sum \mu_i h_i(x) \ge 0, \forall x \in X$

将 $\hat{x}$ 代入上式，则 $\sum \lambda_i g_i(\hat{x}) + \sum \mu_i h_i(\hat{x}) \ge 0$ 其中 $g_i(\hat{x} < 0)$,$h_i(\hat{x}) = 0$,$\lambda_i = 0$。

则必有 $\lambda\_i = 0, i = 1, \cdots, m$

$(***)$ 变为 $\sum \mu_i h_i(x) \ge 0, \forall x \in X(**)$

因为 $0 \in \mathrm{int} h(x)$

$$h(x) = \left\{ \left(h_1(x), \cdots, h_l(x)^T \right)^T | x \in X \right\}$$

则 $\exists \tilde{x} \in X$ 使得

$$\begin{pmatrix} h_1(\tilde{x}) \\ \vdots \\ h_i(\tilde{x}) \end{pmatrix} = \sum \begin{pmatrix} -u_1 \\ -u_2 \\ -u_v \end{pmatrix}.$$

将 $\tilde{x}$ 带入 $(**)$，则 $-\sum\sum \mu_i^2 \ge 0, \mu_i = 0$，则 $(\lambda_0, \lambda_1, \mu) = 0$

所以矛盾。所以 $\lambda_0 \neq 0$

则，λ_0 必大于 0，$\lambda_0 > 0$

$(***)$ 同除 λ_0，则 $\forall x \in X$,

$$f(x) - \gamma + \sum \bar{\lambda}_i g_i(x) + \sum \bar{\mu}_i h_i(x) \ge 0$$

其中 $\bar{\lambda}_i = \frac{\lambda_i}{\lambda_0} \ge 0, \bar{\mu}_i = \frac{\mu_i}{\lambda_0}$

所以 $\forall x \in X, f(x) + \sum \bar{\lambda}_i g_i(x) + \sum \bar{\mu}_i h_i(x) \ge \gamma$

所以 $d(\bar{\lambda}, \bar{\mu}) \ge \gamma = v(P)$

故 $v(D) = d(\bar{\lambda}, \bar{\mu}) = v(P)$，强对偶成立

推论 9.1. 对于凸优化问题：

$f(x)$ 及 $g_i(x), i = 1, \cdots, m$ 为凸；$h_i(x), i = 1, \cdots, l$ 均为线性函数，X 凸。若 x^* 满足 KKT 条件，则 x^* 是原问题 (P) 的最优解，且乘子为对偶问题 (D) 的最优解。

证明. 由 KKT 条件，对于 x^*, 存在 $\bar{\lambda}, \bar{\mu}$ 使

$$\begin{cases} \nabla f\left(x^*\right) + \sum \bar{\lambda}_i \nabla g_i\left(x^*\right) + \sum \bar{\mu}_i \nabla h_i\left(x^*\right) = 0 \ (1) \\ \bar{\lambda}_i \geqslant 0 \\ \bar{\lambda}_i g_i\left(x^*\right) = 0 \end{cases}$$

由 (1),x^* 是的最小点（凸函数梯度为 0 的点）

故 $(\bar{\lambda}, \bar{\mu})$ 是 (D) 的最优解，且 $v(P) = v(D)$。

注 9.1. 对于凸优化问题，KKT 点包含了原问题 (P) 的最优解，也包含了对偶问题 (D) 的最优解。若 Slater 条件（约束限制条件）成立，则 (P) 的最优解是 KKT 点，相应乘子为对偶问题 (D) 的最优解。

参考

王燕军, 梁治安, 崔雪婷. 最优化基础理论与方法 [M]. 复旦大学出版社, 2011.

崔雪婷老师课程