



约束优化问题

翟卫欣 副教授

zhaiweixin@cau.edu.cn

中国农业大学信息与电气工程学院



目录

约束优化的最优性理论

约束规范条件

Farkas引理及推论

约束最优化问题解的一阶条件

约束最优化问题的二阶条件





目录

约束优化的最优性理论

约束规范条件

Farkas引理及推论

约束最优化问题解的一阶条件

约束最优化问题的二阶条件





约束优化的最优性理论

- 一般约束最优化问题
- 约束规范条件
- 约束最优化问题的一阶最优性条件
- 约束最优化问题的二阶最优性条件



一般约束最优化问题

- 与无约束最优化问题相比，约束最优化问题的最优性理论要更为复杂。
- 因为在最优解处，除了要考虑目标函数之外，还需考虑约束函数，最优解是两者决定的。



一般约束最优化问题

原问题(P)

$$\min f(\mathbf{x})$$

$$\text{s.t. } c_i(\mathbf{x}) = 0, i \in E = \{1, 2, \dots, m_e\}$$

$$c_i(\mathbf{x}) \geq 0, i \in I = \{m_e + 1, m_e + 2, \dots, m\}$$

- 满足约束条件的点成为可行点，所有可行点的集合为可行集

$$D = \{c_i(\mathbf{x}) = 0, i \in E; c_i(\mathbf{x}) \geq 0, i \in I\}$$

E 是等式约束集合， I 是不等式约束集合。

一般约束最优化问题举例

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= \frac{x_1^2}{2} + x_2^2 \\ \text{s.t. } c_1(\mathbf{x}) &= 1 - (x_1 - 1)^2 - x_2^2 \geq 0 \\ c_2(\mathbf{x}) &= -1 + x_1 - x_2^2 \geq 0 \end{aligned}$$

图中深灰色区域 D 是可行域，实线代表 $c_1(\mathbf{x})$ 、 $c_2(\mathbf{x})$ ， \mathbf{x}^* 是极小值点。

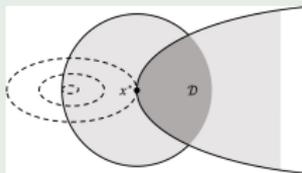


图 1: 可行域与最优解示例



局部最优解与全局最优解

- 对于 $x^* \in D$, 若存在 $\varepsilon > 0$, 当 $x \in D$ 且 $\|x - x^*\| < \varepsilon$ 时, 有 $f(x) \geq f(x^*)$, 则称 x^* 为局部最优解。
- 对于 $x^* \in D$, 若存在 $\varepsilon > 0$, 当 $x \in D$ 且 $\|x - x^*\| < \varepsilon$ 时, 有 $f(x) > f(x^*)$, 则称 x^* 为严格局部最优解。
- 对于 $x^* \in D$, 若 $f(x) \geq f(x^*), \forall x \in D$, 则称 x^* 为全局最优解。
- 对于 $x^* \in D$, 若 $f(x) > f(x^*), \forall x \in D$, 则称 x^* 为严格全局最优解。



局部最优解与全局最优解举例

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= x_1^2 + x_2^2 \\ \text{s.t. } c_1(\mathbf{x}) &= 1 - (x_2 - 1)^2/4 + x_1^2 = 0 \end{aligned}$$

图中虚线为目标函数的等高线，实线为约束函数，空心点为局部最优解 $(0, 3)^T$ ，实心点为全局最优解 $(0, -1)^T$ 。

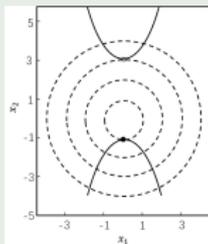


图 2: 局部最优解与全局最优解举例



起作用约束

- 在点 $x \in D$ 处, 若 $c_i(x) = 0$, 则称该约束为在点 x 处的起作用约束; 若 $c_i(x) > 0$, 则称该约束为在点 x 处的不起作用约束。
- 等式约束都是起作用约束, 不等式约束中是否是起作用约束要依点 x 而定, 我们用 $I(x)$ 表示 x 处起作用的不等式约束集合, 即 $I(x) = \{i | c_i(x) = 0, i \in I\}$ 。
- 在点 x 处的起作用约束下标集合 (简称起作用约束集合) 记为 $A(x) = \{i | c_i(x) = 0, i \in E \cup I\}$ 。或者写 $A(x) = E \cup I(x)$ 。特别地, 记 $A^* = A(x^*), I^* = I(x^*)$ 。
- 起作用约束是一个很重要的问题, 因为在局部最优解 x^* 处, 若 A^* 已知, 则不起作用约束都可忽略, 原问题可优化为:

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } c_i(x) = 0, i \in A^* \end{aligned}$$

只有等式约束的优化问题举例

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

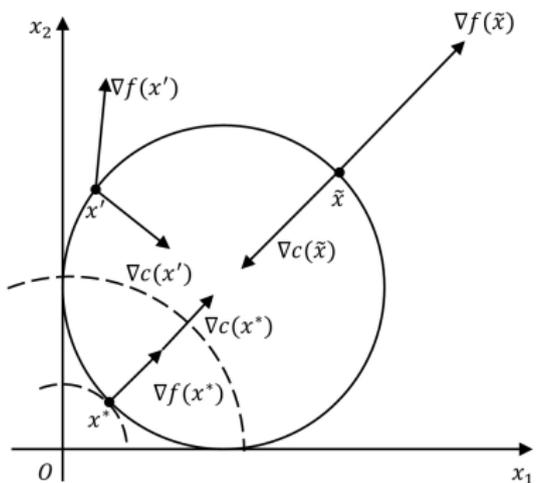


图 3: 在不同可行点处的 $\nabla f(\mathbf{x}^*)$ 和 $\nabla c(\mathbf{x}^*)$



只有等式约束的优化问题举例

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

- 在最优点 $\mathbf{x}^* = (1 - \frac{\sqrt{2}}{2}, 1 - \frac{\sqrt{2}}{2})^T$ 处, 有 $\nabla f(\mathbf{x}) = (2 - \sqrt{2}, 2 - \sqrt{2})^T$, $\nabla c(\mathbf{x}^*) = (\sqrt{2}, \sqrt{2})^T$, 其中 $\nabla f(\mathbf{x}^*)$ 与 $\nabla c(\mathbf{x}^*)$ 共线, 有 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \lambda \nabla c(\mathbf{x}^*)$, $\lambda = \sqrt{2} - 1$ 。
- 在极大点 $\tilde{\mathbf{x}} = (1 + \frac{\sqrt{2}}{2}, 1 + \frac{\sqrt{2}}{2})^T$ 处, $\nabla f(\tilde{\mathbf{x}})$ 与 $\nabla c(\tilde{\mathbf{x}})$ 也共线。而在其他点处 $\Delta f(\mathbf{x})$ 与 $\nabla c(\mathbf{x})$ 不共线。
- 这说明 $\nabla f(\mathbf{x})$ 与 $\nabla c(\mathbf{x})$ 共线只是最优解的一个必要条件, 是否为最优解还需进一步判断。

含不等式约束的优化问题举例

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

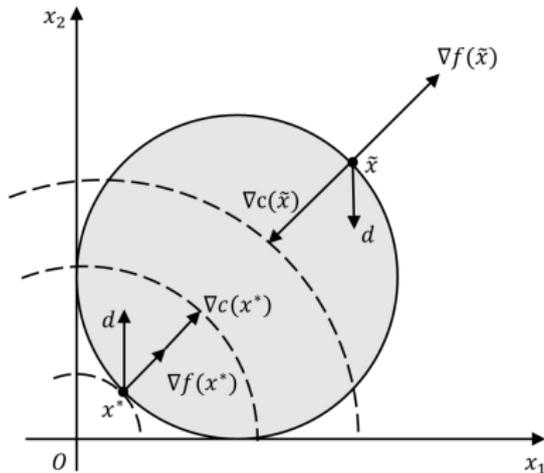


图 4: 在不同可行点处的 $\nabla f(x^*)$ 和 $\nabla c(x^*)$



含不等式约束的优化问题举例

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

- 要求 $\nabla f(\mathbf{x}) = \lambda \nabla c(\mathbf{x})$, 其中 $\lambda \geq 0$, 也就是对 λ 的正负值有了要求, 即约束条件的梯度方向需要指向可行域内部, 该方向同样是目标函数的是梯度方向。
- 本例中只有一个约束, 而对于一般的约束优化问题, 一阶最优性条件为 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \sum_{i \in E \cup I} \lambda_i^* \nabla c_i(\mathbf{x}^*)$, 其中当 $i \in I^*$ 时, $\lambda_i^* \geq 0$, 也就是说要求 \mathbf{x}^* 处的起作用的不等式约束对应的 λ_i 非负。
- 该条件称为一阶最优性条件。



一阶最优性条件不满足举例

- 在最优解 x^* 处, 并非对任意约束函数, 一阶最优性条件都会满足。

$$\min f(x) = x_2,$$

$$s.t. c_1 = -x_1 - (x_2)^2 \geq 0,$$

$$c_2 = x_1 = 0$$

- 该问题的最优解为 $x^* = (0, 0)^T$, 另外
 $\nabla f(x^*) = (0, 1)^T, \nabla c_1(x^*) = (-1, 0)^T, \nabla c_2(x^*) = (1, 0)^T$ 显然在该处, 无法找到一组 $\{\lambda_i\}$ 使得 $\nabla f(x^*) = \sum_{i \in E \cup I} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*)$ (其中当 $i \in I^*$ 时, $\lambda_i^* \geq 0$)。



一阶最优性条件不满足举例

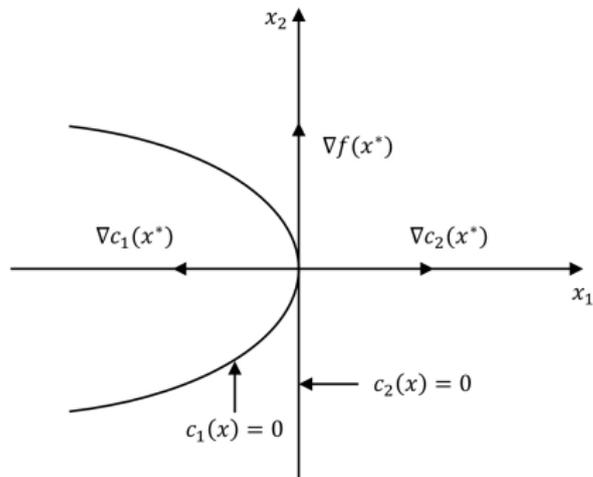


图 5: 在最优选处，一阶最优性条件不满足举例

本例说明，在最优选处，若要最优性条件满足，约束函数需满足某些条件。我们称这些条件为约束规范条件。



目录

约束优化的最优性理论

约束规范条件

Farkas引理及推论

约束最优化问题解的一阶条件

约束最优化问题的二阶条件





约束规范条件-可行方向

- 设 x 是约束最优化问题的可行点, 存在可行点序列 x_k , 有 $x_k \rightarrow x, x_k \neq x$, 记 $x_k = x + \alpha_k d_k$
- 其中 $\|d_k\| = 1, \alpha_k > 0$ 。因为 $x_k \rightarrow x$, 所以 $\alpha_k \rightarrow 0$ 。
- 如果 $d \rightarrow d$, 则称 d_k 为可行方向点列, d 是 x 处的可行方向(或称序列可行方向)。记 $\mathcal{F} = \mathcal{F}(x)$ 为 x 处全体可行方向组成的集合。



约束规范条件-可行方向举例

- 对于 $\mathbf{x} = (1 - \cos\theta, 1 - \sin\theta)^T$, 假设 $\mathbf{x}_k = (1 - \cos\theta_k, 1 - \sin\theta_k)^T$ 是可行方向点列, 其中 $\theta_k = \frac{\pi}{4} + \frac{1}{k}$, $\theta = \frac{\pi}{4}$, 求可行方向 \mathbf{d}
- $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}\|^2 = (\cos\theta - \cos\theta_k)^2 + (\sin\theta - \sin\theta_k)^2 = 4\sin^2 \frac{\cos\theta - \cos\theta_k}{2}$
 $\mathbf{d}_k = \frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}\|} = (\sin \frac{\theta + \theta_k}{2}, -\cos \frac{\theta + \theta_k}{2})^T$
- 当 $k \rightarrow \infty$ 时, 有 $\mathbf{d}_k \rightarrow \mathbf{d} = (\sin\theta, -\cos\theta)^T$, 知 $\mathbf{d} \in \mathcal{F}(\mathbf{x})$, 此处不再一一计算 \mathbf{x} 处其余可行方向



约束规范条件-线性化可行方向

- 设 x 是约束最优化问题的可行点, 定义 $F = F(x)$
 $= \{d \mid \|d\| = 1, \nabla c_i(x)^T d = 0, i \in E; \nabla c_i(x)^T d \geq 0, i \in I(x)\}$ 为 x 处的
 线性化可行方向集合, d 是 x 处的线性化可行方向。

例如, 考虑 $x \in D = \{x \mid c_1(x) \geq 0, c_2(x) = 0\}$ 处的线性化可行方向
 集合: $F(x) = \{d \mid \nabla c_1(x)^T d \geq 0, \nabla c_2(x)^T d = 0\}$ 。灰色区域表示满
 足 $\nabla c_1(x)^T d \geq 0$ 的 d 集合, 粗黑线表示 F 。

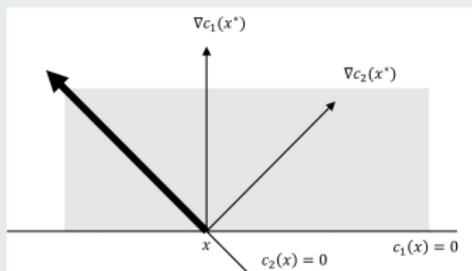


图 6: x 处的线性化可行方向



约束规范条件-线性化可行方向

线性化可行方向由泰勒公式得,对等式约束

$$c_i(\mathbf{x} + \mathbf{d}) \approx c_i(\mathbf{x}) + \nabla c_i(\mathbf{x})^T \mathbf{d}, i \in E,$$

由于 $c_i(\mathbf{x} + \mathbf{d}) = c_i(\mathbf{x}) = 0$, 所以 $\nabla c_i(\mathbf{x})^T \mathbf{d} = 0, i \in E$ 。

对不等式约束

$$c_i(\mathbf{x} + \mathbf{d}) \approx c_i(\mathbf{x}) + \nabla c_i(\mathbf{x})^T \mathbf{d}, i \in I(\mathbf{x}),$$

由于 $c_i(\mathbf{x} + \mathbf{d}) \geq 0, c_i(\mathbf{x}) = 0$, 所以 $\nabla c_i(\mathbf{x})^T \mathbf{d} \geq 0, i \in I(\mathbf{x})$ 。



两类约束规范条件的关系

- $\mathbf{x} \in D$ 处的可行方向集合 $\mathcal{F}(\mathbf{x}) \subset F(\mathbf{x})$ 。
- 证明:
 设 $\mathbf{d} \in \mathcal{F}(\mathbf{x})$, 则由可行点列 $\{\mathbf{x}_k\}$, 满足 $\mathbf{x}_k = \mathbf{x} + \alpha_k \mathbf{d}_k \rightarrow \mathbf{x}$, 且有 $\alpha_k \rightarrow 0, \mathbf{d}_k \rightarrow \mathbf{d}$ 。下面我们证明 $\mathbf{d} \in F(\mathbf{x})$ 。
- 由泰勒公式, 有:

$$c_i(\mathbf{x}_k) = c_i(\mathbf{x}) + \alpha_k \nabla c_i(\mathbf{x})^T \mathbf{d}_k + o(\alpha_k)$$
 因为 $c_i(\mathbf{x}_k) = c_i(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in E$, 且有 $c_i(\mathbf{x}_k) \geq c_i(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in I(\mathbf{x})$
- 于是可得 $\nabla c_i(\mathbf{x})^T \mathbf{d}_k + o(1) = 0, i \in E$
 且有 $\nabla c_i(\mathbf{x})^T \mathbf{d}_k + o(1) \geq 0, i \in I(\mathbf{x})$
- 令 $k \rightarrow \infty$, 则 $\mathbf{d}_k \rightarrow \mathbf{d}, o(1) \rightarrow 0$, 得 $\nabla c_i(\mathbf{x})^T \mathbf{d} = 0, i \in E$
 且有 $\nabla c_i(\mathbf{x})^T \mathbf{d} \geq 0, i \in I(\mathbf{x})$
- 即 $\mathbf{d} \in F(\mathbf{x})$

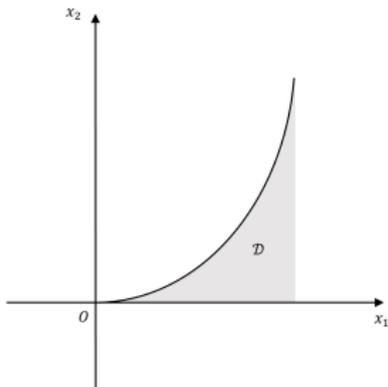


两类约束规范条件的关系

- $F(x) \subset \mathcal{F}(x)$ 不一定成立。
- 例如对如下约束：

$$x_1^3 \geq x_2$$

$$x_2 \geq 0$$





两类约束规范条件的关系

- 设 $\mathbf{x} = (0, 0)^T$, $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ 为 $x_1^3 = x_2$ 上满足 $x_2 > 0$ 的点列, $\mathbf{x}^{(k)} \rightarrow \mathbf{x}$, 则 $\mathbf{d}_k = \frac{\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}}{\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}\|} \rightarrow (1, 0)^T = \mathbf{d}$, 即 $\mathcal{F} = (1, 0)^T$
- 在 $\mathbf{x} = (0, 0)^T$ 处, 有 $\nabla c_1(\mathbf{x}) = (0, -1)^T$, $\nabla c_2(\mathbf{x}) = (0, 1)^T$, 则 $F = \{\mathbf{d} \mid \nabla c_1(\mathbf{x})^T \mathbf{d} \geq 0, \nabla c_2(\mathbf{x})^T \mathbf{d} \geq 0, \|\mathbf{d}\| = 1\} = \{(1, 0)^T, (-1, 0)^T\}$ 。
- 因为 $\nabla c_1(\mathbf{x}) = (0, -1)^T$, $\nabla c_2(\mathbf{x}) = (0, 1)^T$, 所以 $\mathbf{d} = (-1, 0)^T \in F$ 又由于任意可行点 $\mathbf{x}^{(k)} \geq 0$, 所以不存在可行点列 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$, $\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x} + \alpha_k \mathbf{d}_k$ 使得 $\mathbf{d}_k \rightarrow \mathbf{d}$, 所以 $\mathbf{d} = (-1, 0)^T \notin \mathcal{F}$ 。



约束规范条件

- 引入可行方向和线性化可行方向的目的是建立约束规范条件，从而建立最优性条件。
- 约束规范条件有多种，常用的一种为KT(Kuhn-Tucker)约束规范条件：

$$F = \mathcal{F}$$

- 下列两条件之一成立时，KT约束规范条件成立：

A 中的所有约束为线性约束

$\{\nabla c_i(\mathbf{x}), i \in A\}$ 线性无关



约束规范条件

- 另一种约束规范条件是正则性假设，它是建立在可行方向和下降方向的基础之上的。
- 定义 $\mathcal{D} = \mathcal{D}(x) = \{d \mid d^T \nabla f(x) < 0, d \in \mathbb{R}^n\}$ 为 $f(x)$ 在 x 处的下降方向集合，其中元素 d 称为 x 处的下降方向。
- 正则性假设为： $F \cap \mathcal{D} = \mathcal{F} \cap \mathcal{D}$
- 正则性假设只考虑可行方向集合中下降方向的部分，显然这个条件比KT约束规范条件弱，即若KT约束规范条件成立，则正则性假设成立，反之不一定。



约束规范条件举例

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1^2 + x_2 \\ \text{s.t.} \quad & x_1^3 \geq x_2, \\ & x_2 \geq 0 \end{aligned}$$

- 最优解为 $\mathbf{x}^* = (0, 0)^T$ 。 $F = \{(\mathbf{d}_1)^T \mid \|\mathbf{d}_1\| = 1\}$, $\mathcal{F} = \{(\mathbf{d}_1)^T \mid \|\mathbf{d}_1\| = 1\}$ 。
- 另外, 由 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T = (0, 1)$, $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} < 0$ 可知 $\mathcal{D} = \{\mathbf{d} \mid \mathbf{d} = (d_1, d_2)^T, d_2 < 0\}$
- 此时 $F \cap \mathcal{D} = \emptyset, F \neq \mathcal{F}$, 正则假设成立而KT约束规范条件不成立。



局部最优解的一阶必要条件

- 若 \mathbf{x}^* 是问题 (P) 的局部最优解, 则 $\mathcal{F}^* \cap \mathcal{D}^* = \emptyset$
- 证明: 只需证明任取 $\mathbf{d} \in \mathcal{F}$, 都有 $\mathbf{d}^T \nabla f(\mathbf{x}^*) \geq 0$ 即可。

- 由泰勒公式, 有:

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) = f(\mathbf{x}^*) + \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d}_k + o(\alpha_k)$$

- 由于 \mathbf{x}^* 是局部最优解, 所以当 k 充分大时, 有 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d}_k + o(1) \geq 0$
- 令 $k \rightarrow \infty$, 得 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} \geq 0$, 所以 $\mathbf{d} \notin \mathcal{D}^*$
- 该定理说明在最优解 \mathbf{x}^* 处, 不存在可行的下降方向。



目录

约束优化的最优性理论

约束规范条件

Farkas引理及推论

约束最优化问题解的一阶条件

约束最优化问题的二阶条件





分离定理

- 设 C 是 m 个 n 维向量 a_1, a_2, \dots, a_m 生成的集合: $C = \{v | v = \sum_{i=1}^m \lambda_i a_i, \lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, m\}$
- 如果 n 维向量 $g \notin C$, 则存在一个法向量为 d 的超平面 Π 分离 g 与 C , 使得
 $g^T d < 0$ 且 $a_i^T d \geq 0, i = 1, 2, \dots, m$

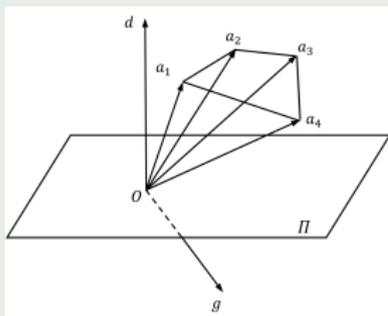


图 8: 分离定理的几何意义



Farkas定理

- 给定 m 个 n 维向量 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_m$ 以及另一个 n 维向量 \mathbf{g} , 则集合 $\mathcal{D}_1 = \{\mathbf{d} | \mathbf{g}^T \mathbf{d} < 0, \mathbf{a}_i^T \mathbf{d} \geq 0, i = 1, 2, \dots, m\}$ 为空集的充分必要条件是:

存在 $\lambda_i \geq 0, (i = 1, 2, \dots, m)$ 使得 $\mathbf{g} = \sum_{i=1}^m \lambda_i \mathbf{a}_i$

- 证明: 充分性

设 $\lambda_i \geq 0 (i = 1, 2, \dots, m)$, 对满足 $\mathbf{a}_i^T \mathbf{d} \geq 0 (i = 1, 2, \dots, m)$ 的 \mathbf{d} , 有 $\mathbf{g}^T \mathbf{d} = \sum_{i=1}^m \lambda_i \mathbf{a}_i^T \mathbf{d} \geq 0$, 所以 \mathcal{D}_1 为空集。

- 必要性

假定 $\mathbf{g} \notin C, C = \{\mathbf{v} | \mathbf{v} = \sum_{i=1}^m \lambda_i \mathbf{a}_i, \lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, m\}$ 。由分离定理知存在以 \mathbf{d} 为法向量的超平面, 使得 $\mathbf{g}^T \mathbf{d} < 0, \mathbf{a}_i^T \mathbf{d} \geq 0, i = 1, 2, \dots, m$

所以 $\mathbf{d} \in \mathcal{D}_1$, 即 \mathcal{D}_1 非空, 与已知条件矛盾, 所以 $\mathbf{g} \in C$ 。



Farkas引理

- 设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 和 $\omega \in \mathbb{R}^n$

系统I: $Ad \leq 0, g^T d > 0, d \in \mathbb{R}^n$

系统II: $g = A^T \lambda, \lambda \geq 0$

则两系统有且仅有一个有解。
- 分两种情况讨论:

假设系统II有解, 则存在 $\lambda \geq 0$ 使得 $g = A^T \lambda$, 若系统I有解, 则 $0 < g^T d = \lambda^T Ad \leq 0$, 矛盾, 因此系统I无解。

假设系统II无解, 构造集合 $C = \{v | v = A^T \lambda, \lambda \geq 0\}$, C 是非空闭凸集。系统II无解表明 $g \notin C$, 由点与凸集的分离定理可知存在 d, β 满足 $d^T v \leq \beta < d^T g, \forall v \in C$
- 注意到 $0 \in C$, 则可知 $0 \leq \beta < d^T g$

同时 $\beta \geq d^T v = d^T A^T \lambda = (\lambda Ad)^T, \forall \lambda \geq 0$
- 由于 λ 可以无限大, 所以必须有 $Ad \leq 0$, 所以 d 是系统I的解。



Farkas引理的推论

- $\mathcal{D}_2 = \{d | g^T d < 0; a_i^T d = 0, i \in E; a_i^T d \geq 0, i \in I(x)\}$ 为空集的充分必要条件是存在 $\lambda_i, i \in A = E \cup I(x)$, 使得 $g = \sum_{i \in A} \lambda_i a_i, \lambda_i \geq 0, i \in I(x)$, 此处 g 即为 $\nabla f(x)$, a_i 即为 $\nabla c_i(x)$ 。
- 证明: 由于 $a_i^T d = 0, i \in E$ 可以写成 $a_i^T d \geq 0, -a_i^T d \geq 0, i \in E$, 由Farkas引理知, 存在 $\lambda_i^+ \geq 0, i \in E; \lambda_i^- \geq 0, i \in E; \lambda_i^+ \geq 0, i \in I(x)$ 使得

$$\begin{aligned} g_i &= \sum_{i \in E} \lambda_i^+ a_i - \sum_{i \in E} \lambda_i^- a_i + \sum_{i \in I(x)} \lambda_i a_i \\ &= \sum_{i \in E} (\lambda_i^+ - \lambda_i^-) a_i + \sum_{i \in I(x)} \lambda_i a_i \\ &= \sum_{i \in A(x)} \lambda_i a_i \end{aligned}$$

其中, 当 $i \in E$ 时, $\lambda_i = \lambda_i^+ - \lambda_i^-$ 。



目录

约束优化的最优性理论

约束规范条件

Farkas引理及推论

约束最优化问题解的一阶条件

约束最优化问题的二阶条件





约束最优化问题解的一阶必要条件

- 如果 \mathbf{x}^* 是问题(P)的局部最优解, 且在 \mathbf{x}^* 处正则性假设成立, 则存在Lagrange乘子 $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$, 使得 \mathbf{x}^* 、 λ^* 满足KKT条件:

$$a) \nabla_x L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = 0 \rightarrow \nabla f(\mathbf{x}^*) = \sum_{i \in A(\mathbf{x}^*)}^m \lambda_i^* \nabla c_i(\mathbf{x}^*)$$

$$b) c_i(\mathbf{x}^*) = 0, i \in E$$

$$c) c_i(\mathbf{x}^*) \geq 0, i \in I$$

$$d) \lambda_i^* \geq 0, i \in I$$

$$e) \lambda_i^* c_i(\mathbf{x}^*) = 0, i \in E \cup I$$

- 其中, $L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^m \lambda_i c_i(\mathbf{x})$ 为Lagrange函数。



约束最优化问题解的一阶必要条件

- 证明:

局部最优解的一阶必要条件要求 $\mathcal{F}^* \cap \mathcal{D}^* = \emptyset$, 正则性假设要求 $\mathcal{F} \cap \mathcal{D} = F \cap \mathcal{D}$, 即在 \mathbf{x}^* 处, 无线性化的可行下降方向。由Farkas引理的推论可知, 在 \mathbf{x}^* 处, 有 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \sum_{i \in A^*} \lambda_i^* \nabla c_i(\mathbf{x}^*)$, $\lambda_i^* \geq 0, i \in I^*$

令 $\lambda_i^* = 0, i \in I - I^*$

得到 $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \sum_{i \in E \cup I} \lambda_i^* \nabla c_i(\mathbf{x}^*)$, 同时得到

$\lambda_i^* c_i(\mathbf{x}^*) = 0, i \in E \cup I$

所以(a)、(d)、(e)成立。又由于最优解的原因, 所以(b)、(c)成立

- 其中, A 是起作用约束, I^* 是 \mathbf{x}^* 处起作用的不等式约束, E 是等式约束, A^* 是 \mathbf{x}^* 处起作用的所有约束, $A^* = E \cup I^*$ 。



约束最优化问题解的一阶必要条件

- KKT条件全称为Karush-Kuhn-Tucker条件。满足KKT条件的 x^* 点称为KKT点，相应的 λ^* 称为Lagrange乘子， x^* 和 λ^* 统称为KKT对。
- (e)成立的原因是
当 $i \in A^* = E \cup I^*$ 时， $c_i(x) = 0$
当 $i \in I - I^*$ 时， $\lambda_i^* = 0$
- (e)条件称为互补条件，当 $\lambda_i^* > 0, i \in I^*$ 时称为严格互补条件。
- 互补条件说明 λ_i^* 和 c_i 不可能同时非0。



互补条件的几何意义

图中实心点是最优解，虚线是目标函数 $f(x)$ 的等高线，灰色区域是可行区域。

(a) 是约束强有效的情形；(b) 是约束弱有效的情形；(c) 是约束无效的情形。

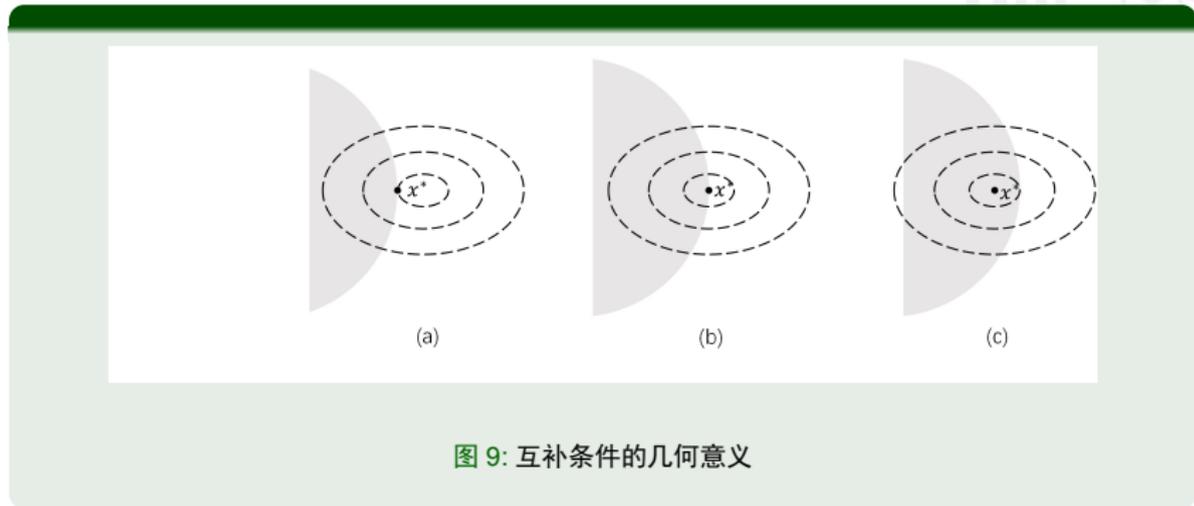


图 9: 互补条件的几何意义



互补条件的几何意义举例

$$\begin{aligned} \min \quad & \left(x_1 - \frac{9}{4}\right)^2 + (x_2 - 2)^2 \\ \text{s.t.} \quad & -x_1^2 + x_2 \geq 0 \\ & x_1 + x_2 \leq 6 \end{aligned}$$

请判断如下 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3$ 三个点是否满足 KKT 条件, 写明必要计算过程,
 $\mathbf{x}_1 = \left[\frac{3}{2}, \frac{9}{4}\right]^T, \mathbf{x}_2 = \left[\frac{9}{4}, 2\right]^T, \mathbf{x}_3 = [0, 2]^T$ 。



互补条件的几何意义举例

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = (x_1 - 9/4)^2 - (x_2 - 2)^2 - \lambda_1(-x_1^2 + x_2) - \lambda_2(-x_1 - x_2 + 6)$$

KKT条件为

$$a) \frac{\partial L}{\partial x_1} = 2x_1 - 9/2 + 2\lambda_1 x_1 + \lambda_2 = 0,$$

$$b) \frac{\partial L}{\partial x_2} = 2x_2 - 4 - \lambda_1 + \lambda_2 = 0,$$

$$c) -x_1^2 + x_2 \geq 0,$$

$$d) x_1 + x_2 - 6 \leq 0,$$

$$e) \lambda_1(-x_1^2 + x_2) = \lambda_2(x_1 + x_2 - 6) = 0$$

$$f) \lambda_i \geq 0, i = 1, 2.$$



互补条件的几何意义举例

分别验证三个点是否满足KKT条件：

- ① 对于 $x_1 = \left[\frac{3}{2}, \frac{9}{4}\right]^T$ ，代入e)得 $\lambda_2 = 0$ ，再代入b)得 $\lambda_1 = 1/2$ ，再代入其余各式均成立，故 $x_1 = \left[\frac{3}{2}, \frac{9}{4}\right]^T$ 是KKT点；
- ② 对于 $x_2 = \left[\frac{9}{4}, 2\right]^T$ ，因其不满足c)，故 $x_2 = \left[\frac{9}{4}, 2\right]^T$ 不是KKT点；
- ③ 对于 $x_3 = [0, 2]^T$ ，代入e)得 $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ ，但该结果不满足a)，故 $x_3 = [0, 2]^T$ 不是KKT点；



约束最优化问题的一阶充分条件

- 设 $\mathbf{x}^* \in D$, 如果 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} > 0, \mathbf{d} \in \mathcal{F}$, 则 \mathbf{x}^* 是问题(P)的严格局部最优解。
- 证明: 如果 \mathbf{x}^* 不是严格局部最优解, 则存在一个序列 $\{\mathbf{x}_k\}$, 其中 $\mathbf{x}_k \in D$, 使得 $f(\mathbf{x}_k) \leq f(\mathbf{x}^*)$, 其中 $\mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x}^*, \mathbf{x}_k \neq \mathbf{x}^*$
- 定义 $\mathbf{d}_k = \frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|}$, $\mathbf{d}_k \rightarrow \mathbf{d}, \mathbf{d} \in \mathcal{F}^*$
 $f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) = \nabla f(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) + o(\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|) \leq 0$
 从而 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d}_k + o(1) \leq 0$
- 令 $k \rightarrow \infty$, 得 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} \leq 0$, 与原假设矛盾。
- 所以, 设 $\mathbf{x}^* \in D$, 如果 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} > 0, \mathbf{d} \in \mathcal{F}$, 则 \mathbf{x}^* 是问题(P)的严格局部最优解。



目录

约束优化的最优性理论

约束规范条件

Farkas引理及推论

约束最优化问题解的一阶条件

约束最优化问题的二阶条件





约束最优化问题的二阶条件

- 在 $x^* \in D$ 处，由一阶充分条件知，对 $\forall d \in \mathcal{F}^*$ ，若 $\nabla f(x^*)^T d > 0$ 成立，则 x^* 是一个严格局部最优解；由一阶必要条件知，若 $\exists d \in \mathcal{F}^*$ 满足 $\nabla f(x^*)^T d < 0$ ，即在 x^* 处存在可行下降方向，则 x^* 不是局部最优解。
- 这就是说，我们根据 x^* 处可行方向均是上升方向还是有下降方向，我们可以判断 x^* 是否是最优解。然而对于满足 $\nabla f(x^*)^T d = 0$ 的可行方向，我们无法判断 x^* 是否是最优解。
- 注意到在KKT点 x^* 处有 $\nabla f(x^*)^T d = \sum_{i \in EU} \lambda_i^* c_i(x^*)^T d \geq 0, d \in F^*$ ，又因已知 $\mathcal{F}^* \subset F^*$ ，我们知道只需在KKT处，对满足 $\nabla f(x^*)^T d = 0$ 的 d ，利用Lagrange函数的二阶信息进一步讨论 x^* 的最优性问题。



约束最优化问题的二阶条件

- 我们要确定集合 $\{d | \nabla f(\mathbf{x}^*)^T d = 0, d \in F^*\}$, 它是 F^* 的子集。
- 定义线性化可行方向子集 F_1^* 为

$$F_1^* = \{d | d \neq \mathbf{0}, \nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T d = 0, \lambda_i^* = 0, i \in I^*; \\ \nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T d = 0, \lambda_i^* > 0, i \in I^*; \nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T d = 0, i \in E\}$$

- 注意到对于不起作用的约束, 有 $\lambda_i^* = 0, i \in I - I^*$,
由KKT条件得 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T d = \sum_{i \in E \cup I} \lambda_i^* \nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T d = 0, d \in F_1^*$



约束最优化问题的二阶条件

- 类似的，定义可行方向子集 \mathcal{F}_1^* 。
- 设 \mathbf{x}^* 为最优化问题的可行点，存在可行点序列 $\{\mathbf{x}_k\}$ ， $\mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x}^*$ ， $\mathbf{x}_k \neq \mathbf{x}^*$ ； $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}^* + \alpha_k \mathbf{d}_k$ 为满足

$$c_i(\mathbf{x}_k) \geq 0, \lambda_i^* = 0, i \in I^*,$$

$$c_i(\mathbf{x}_k) = 0, \lambda_i^* > 0, i \in I^*,$$

$$c_i(\mathbf{x}_k) = 0, i \in E$$

的可行点列，且 $\|\mathbf{d}_k\| = 1, \alpha_k \rightarrow 0, \mathbf{d}_k \rightarrow \mathbf{d}$ ，称 \mathbf{d} 为 \mathbf{x}^* 处的可行方向，由这样的 \mathbf{d} 构成的集合 \mathcal{F}_1^* 为 \mathbf{x}^* 处的可行方向集合。

- 同理可证明 $\mathcal{F}_1^* \subset F_1^*$ 。进一步，我们可以定义下面的二阶约束规范条件。
- $\mathcal{F}_1^* = F_1^*$



约束最优化问题的二阶必要条件

- 设 \mathbf{x}^* 是P问题的局部最优解，在 \mathbf{x}^* 处正则性假设成立，从而存在 λ^* ，使得KKT条件满足。若对该乘子 λ^* ，满足二阶约束规范条件 $\mathcal{F}_1^* = F_1^*$ ，则有：

$$\mathbf{d}^T \mathbf{W}^* \mathbf{d} \geq 0, \mathbf{d} \in F_1^*$$

$$\text{其中 } \mathbf{W}^* = \nabla_x^2 L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = \nabla^2 f(\mathbf{x}^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla^2 c_i(\mathbf{x}^*)$$

- 证明：设 $\mathbf{d} \in F_1^*$ ，则 $\mathbf{d} \in \mathcal{F}_1^*$ ，存在可行点列 $\{\mathbf{x}_k\}$ ，其中 $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}^* + \alpha_k \mathbf{d}_k$ ， $\alpha_k \rightarrow 0$ ， $\mathbf{d}_k \rightarrow \mathbf{d}$ 。

$$\text{一方面，由 } \mathcal{F}_1^* \text{ 的定义知， } L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* c_i(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$$

另一方面，

$$\begin{aligned} L(\mathbf{x}_k, \lambda) &= L(\mathbf{x}^*, \lambda) + \alpha_k \nabla_x L(\mathbf{x}^*, \lambda)^T \mathbf{d}_k + \frac{1}{2} \alpha_k^2 \mathbf{d}_k^T \mathbf{W}^* \mathbf{d}_k + o(\alpha_k^2) \\ &= f(\mathbf{x}^*) + \frac{1}{2} \alpha_k^2 \mathbf{d}_k^T \mathbf{W}^* \mathbf{d}_k + o(\alpha_k^2) \end{aligned}$$



约束最优化问题的二阶必要条件

- 因为 x^* 是P问题的局部最优解, 当 k 充分大时, 有 $f(x^*) \leq f(x_k)$, 由前述 $L(x_k, \lambda^*)$ 的两个表达式得: $d_k^T W^* d_k + o(1) \geq 0$
- 令 $k \rightarrow \infty$, 得 $d_k^T W^* d_k \geq 0, d \in F_1^*$ 。



约束最优化问题的二阶充分条件

- 设 \mathbf{x}^* , λ^* 是问题(P)的KKT对, 若有 $\mathbf{d}^T \mathbf{W}^* \mathbf{d} > 0, \mathbf{d} \in F_1^*$, 则 \mathbf{x}^* 是问题的严格局部最优解。
- 证明: 假设 \mathbf{x}^* 不是严格局部最优解, 则存在可行点列 $\{\mathbf{x}_k\}, \mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x}^*$, 使得 $f(\mathbf{x}_k) \leq f(\mathbf{x}^*)$ 。
记 $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}^* + \alpha_k \mathbf{d}_k$, 其中 $\|\mathbf{d}_k\| = 1$, 当 $k \rightarrow \infty$ 时, $\alpha_k \rightarrow 0, \mathbf{d}_k \rightarrow \mathbf{d}, \mathbf{d} \in \mathcal{F}^*$
由泰勒展开得 $f(\mathbf{x}_k) = f(\mathbf{x}^*) + \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d}_k + o(\alpha_k)$
由于 $f(\mathbf{x}_k) \leq f(\mathbf{x}^*)$, 则 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d}_k + o(1) \leq 0$,
- 令 $k \rightarrow \infty$, 得 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d}_k \leq 0$



约束最优化问题的二阶充分条件

- 由于 $\mathbf{d} \in \mathcal{F}^*$, 所以

$$c_i(\mathbf{x}_k) = c_i(\mathbf{x}^*) + \alpha_k \nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d}_k + o(\alpha_k) = 0, i \in E$$

$$c_i(\mathbf{x}_k) = c_i(\mathbf{x}^*) + \alpha_k \nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d}_k + o(\alpha_k) \geq 0, i \in I^*$$

- 令 $k \rightarrow \infty$, 得条件

$$\nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} = 0, i \in E$$

$$\nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} \geq 0, i \in I^*$$



约束最优化问题的二阶充分条件

- 下面就 d 的两种情形进行讨论:
 - 1) 如果 $d \notin F_1^*$, 则存在 $i \in I^*$, 使得 $\lambda_i^* > 0, \nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T d > 0$, 从而由条件*得到 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T d = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T d > 0$, 与 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T d \leq 0$ 相矛盾。
 - 2) 如果 $d \in F_1^*$, 由 $\mathbf{x}_k \in D$ 可知, $c_i(\mathbf{x}_k) \geq 0, i = 1, 2, \dots, m$, 再考虑到 $\lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, m$
 所以 $L(\mathbf{x}_k, \lambda^*) = f(\mathbf{x}_k) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* c_i(\mathbf{x}_k) \leq f(\mathbf{x}_k)$
 由KKT条件, 有 $L(\mathbf{x}_k, \lambda^*) = f(\mathbf{x}^*) + \frac{1}{2} \alpha_k^2 d_k^T W^* d_k + o(\alpha_k^2)$
 因为 $f(\mathbf{x}_k) \leq f(\mathbf{x}^*)$, 令 $k \rightarrow \infty$, 得 $d^T W^* d \leq 0$, 与定理假设矛盾。
 另外, 如果 $F_1^* = \emptyset$, \mathbf{x}^* 是最优解。



约束最优化问题举例

求解如下问题的最优解

$$\min f(\mathbf{x}) = 4x_1 - 3x_2$$

$$s.t. \quad 4 - x_1 - x_2 \geq 0,$$

$$x_2 + 7 \geq 0,$$

$$-(x_1 - 3)^2 + x_2 + 1 \geq 0$$

思路：

- 1 找到KKT点；
- 2 判断KKT点是否是最优解。



约束最优化问题举例

$$L(x, \lambda) = 4x_1 - 3x_2 - \lambda_1(4 - x_1 - x_2) - \lambda_2(x_2 + 7) - \lambda_3(-(x_1 - 3)^2 + x_2 + 1)$$

KKT条件为

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = 4 + \lambda_1 + 2\lambda_3(x_1 - 3) = 0,$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_2} = -3 + \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 = 0,$$

$$4 - x_1 - x_2 \geq 0,$$

$$x_2 + 7 \geq 0,$$

$$-(x_1 - 3)^2 + x_2 + 1 \geq 0,$$

$$\lambda_1(4 - x_1 - x_2) = \lambda_2(x_2 + 7) = \lambda_3(-(x_1 - 3)^2 + x_2 + 1) = 0,$$

$$\lambda_i \geq 0, i = 1, 2, 3.$$

约束最优化问题举例

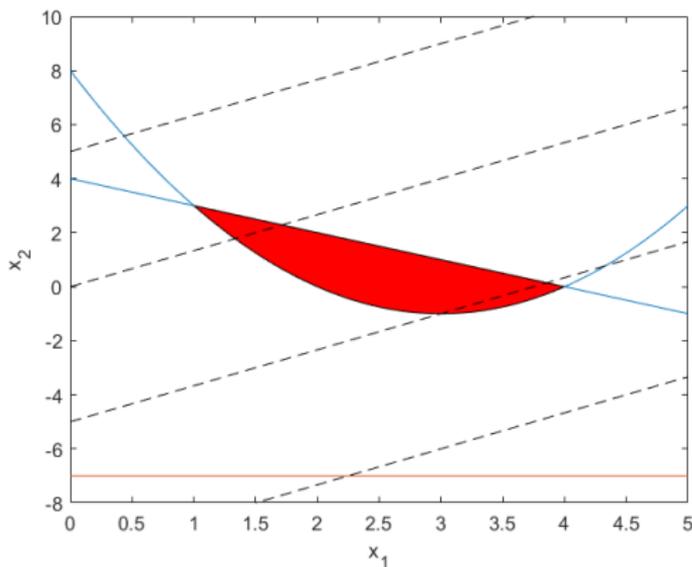


图 10: 目标函数的等高线和可行域



约束最优化问题举例

举例：

- 解方程组，得到KKT点 $\mathbf{x}^* = (1, 3)^T$, $\boldsymbol{\lambda}^* = (\frac{16}{3}, 0, \frac{7}{3})^T$
- 下面我们根据二阶条件，判断 \mathbf{x}^* 是否是最优解。在 \mathbf{x}^* 处，有 $I^* = \{1, 3\}$, $\nabla c_1(\mathbf{x}^*) = (-1, -1)^T$, $\nabla c_3(\mathbf{x}^*) = (4, 1)^T$
- 由 $F_1^* = \{\mathbf{d} | \mathbf{d} \neq \mathbf{0}, \nabla c_i(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} = 0, i = 1, 3\}$ 得 $F_1 = \emptyset$ ，所以 \mathbf{x}^* 是严格局部最优解。



Thank you for your
attention!

翟卫欣 副教授

zhaiweixin@cau.edu.cn

中国农业大学信息与电气工程学院