最优性理论

文再文

北京大学北京国际数学研究中心

教材《最优化：建模、算法与理论》配套电子教案

http://bicmr.pku.edu.cn/~wenzw/optbook.html

致谢：本教案由谢中林协助准备

提纲

对偶理论: 一般的约束优化问题

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

其中c_i 为定义在$\mathbb{R}^n$ 或其子集上的实值函数, $\mathcal{I}$ 和$\mathcal{E}$ 分别表示不等式约束和等式约束对应的下标集合且各下标互不相同.

- 这个问题的可行域定义为

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

- 通过将$\mathcal{X}$ 的示性函数加到目标函数中可以得到无约束优化问题.但是转化后问题的目标函数是不连续的、不可微的以及不是有限的, 这导致我们难以分析其理论性质以及设计有效的算法.

拉格朗日函数

一般的约束优化问题:

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & c_i(x) \le 0,\ i \in \mathcal{I},\ |\mathcal{I}| = m \\ & c_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E},\ |\mathcal{E}| = p \end{array}$$

变量$x \in \mathbb{R}^n$, 最优值为p^*, 定义域为

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

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

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

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

拉格朗日对偶函数

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

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

定理 (弱对偶原理)

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

证明:若$\tilde{x} \in \mathcal{X}$, 则

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

对$\tilde{x}$取下界得

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

拉格朗日对偶问题

拉格朗日对偶问题:

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

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

例: 标准形式线性规划及其对偶(参考后面具体推导)

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

实例:线性方程组具有最小模的解

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

对偶函数

- 拉格朗日函数为$L(x,\nu) = x^T x + \nu^T(Ax - b)$
- 求L 关于x 的最小值，由一阶条件:

$$\nabla_x L(x,\nu) = 2x + A^T\nu = 0 \quad \Longrightarrow \quad x = -(1/2)A^T\nu$$

- 将上式代入L 得到对偶函数g，它是关于ν 的凹函数

$$g(\nu) = L((-1/2)A^T\nu, \nu) = -\frac{1}{4}\nu^T AA^T\nu - b^T\nu$$

- 对偶问题：$\min_\nu \ \frac{1}{4}\nu^T AA^T\nu + b^T\nu$

弱对偶性: $p^* \geq -(1/4)\nu^T AA^T\nu - b^T\nu, \ \forall\nu$

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

- 拉格朗日函数:

$$L(x, s, \nu) = c^{\mathrm{T}}x + \nu^{\mathrm{T}}(Ax - b) - s^{\mathrm{T}}x = -b^{\mathrm{T}}\nu + (A^{\mathrm{T}}\nu - s + c)^{\mathrm{T}}x$$

- 对偶函数:

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

- 对偶问题:

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

线性规划的对偶：保留简单约束推导

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

- 若保留约束$x \geq 0$, 则拉格朗日函数为

$$L(x,y) = c^\mathrm{T} x - y^\mathrm{T}(Ax - b) = b^\mathrm{T} y + (c - A^\mathrm{T} y)^\mathrm{T} x.$$

- 对偶问题需要将$x \geq 0$ 添加到约束里：

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

此对偶问题可以通过将上页最后一个问题中的变量s 消去得到.

考虑对偶问题: $\max_y\ b^\mathrm{T}y,\ \text{s.t. } A^\mathrm{T}y \le c$

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

$$L(y,x) = -b^\mathrm{T}y + x^\mathrm{T}(A^\mathrm{T}y - c) = -c^\mathrm{T}x + (Ax-b)^\mathrm{T}y.$$

- 因此得到对偶函数

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

- 相应的对偶问题是

$$\begin{aligned} \max_x \quad & -c^\mathrm{T}x, \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b, \\ & x \ge 0. \end{aligned}$$

与原始问题完全等价, 表明线性规划与其对偶问题互为对偶.

线性规划问题的对偶性

强对偶性: 若一个线性规划问题有最优解, 则其对偶问题有最优解, 且最优值相等.

dual \ primal	finite	unbounded	infeasible
finite	$\surd$	$\times$	$\times$
unbounded	$\times$	$\times$	$\surd$
infeasible	$\times$	$\surd$	$\surd$

- 若$p^* = -\infty$, 则$d^* \leq p^* = -\infty$, 因此对偶问题不适定
- 若$d^* = +\infty$, 则$+\infty = d^* \leq p^*$, 因此原问题不适定

$$\begin{array}{lll} \min & x_1 + 2x_2 \\ \text{s.t.} & x_1 + x_2 = 1 \\ & 2x_1 + 2x_2 = 3 \end{array} \qquad \begin{array}{lll} \max & p_1 + 3p_2 \\ \text{s.t.} & p_1 + 2p_2 = 1 \\ & p_1 + 2p_2 = 2 \end{array}$$

实例:等式约束下的范数最小化

$$\min_x \quad \|x\| \quad \text{s.t.} \quad Ax = b$$

对偶函数

$$g(\nu) = \inf_x(\|x\| - \nu^T Ax + b^T\nu) = \begin{cases} b^T\nu & \|A^T\nu\|_* \le 1 \\ -\infty & \text{其他} \end{cases}$$

其中 $\|v\|_* = \sup_{\|u\|\le 1} u^T v$ 是$\|\cdot\|$ 的对偶范数证明: 利用$\inf_x(\|x\| - y^T x)$ 在$\|y\|_* \le 1$ 时等于0 否则等于$-\infty$

- 若$\|y\|_* \le 1$, 则$x - y^T x \ge 0$ 对任意x 都成立, 当$x = 0$ 时取等
- 若$\|y\|_* > 1$, 取$x = tu$, 其中$\|u\| \le 1$, $u^T y = \|y\|_* > 1$:

$$\|x\| - y^T x = t(\|u\| - \|y\|_*) \to -\infty \text{ 当} t \to \infty$$

对偶问题: $\max_\nu b^T\nu$, s.t. $\|A^T\nu\|_* \le 1$
弱对偶性: $p^* \ge b^T\nu$ 若$\|A^T\nu\|_* \le 1$

实例：最大割问题

$$\begin{aligned} \max_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & x^{\mathrm{T}}Wx \\ \text{s.t.} \quad & x_i^2 = 1,\ i = 1,2,\cdots,n \end{aligned}$$

- 拉格朗日函数：

$$L(x,y) = -x^{\mathrm{T}}Wx + \sum_{i=1}^{n} y_i(x_i^2 - 1) = x^{\mathrm{T}}(\mathrm{Diag}(y) - W)x - \mathbf{1}^{\mathrm{T}}y$$

- 对偶函数：

$$g(y) = \inf_x L(x,y) = \begin{cases} -\mathbf{1}^{\mathrm{T}}y, & \mathrm{Diag}(y) - W \succeq 0 \\ -\infty, & \text{其他} \end{cases}$$

- 对偶问题：

$$\begin{aligned} \min_{y\in\mathbb{R}^n} \quad & \mathbf{1}^{\mathrm{T}}y \\ \text{s.t.} \quad & \mathrm{Diag}(y) - W \succeq 0 \end{aligned}$$

拉格朗日对偶与共轭函数

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s.t.} \quad & Ax \le b, \quad Cx = d \end{aligned}$$

对偶函数

$$\begin{aligned} g(\lambda, \nu) &= \inf_{x \in \text{dom } f_0} \left(f_0(x) + (A^T\lambda + C^T\nu)^T x - b^T\lambda - d^T\nu \right) \\ &= -f_0^*(-A^T\lambda - C^T\nu) - b^T\lambda - d^T\nu \end{aligned}$$

- 回顾共轭函数的定义$f^*(y) = \sup_{x \in \text{dom } f}(y^T x - f(x))$
- 在f_0 的共轭函数已知时可以简化对偶函数的推导

例：最大化熵

$$f_0(x) = \sum_{i=1}^{n} x_i \log x_i, \qquad f_0^*(y) = \sum_{i=1}^{n} e^{y_i - 1}$$

弱对偶性与强对偶性

弱对偶性: $d^* \leq p^*$

- 对凸问题与非凸问题都成立
- 可导出复杂问题的非平凡下界, 例如, SDP问题

$$\begin{array}{ll} \max & -\mathbf{1}^T\nu \\ \text{s.t.} & \mathrm{diag}(\nu) - W \succeq 0 \end{array}$$

给出了二路划分问题的一个下界:

$$\min\ -x^T W x, \qquad \text{s.t. } x_i^2 = 1, \quad i = 1, \ldots, n$$

强对偶性: $d^* = p^*$

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

问题形式与对偶性

- 一个问题不同等价形式的对偶可能差异巨大
- 当对偶问题难以推导或没有价值时，可以尝试改写原问题的形式

常用的改写技巧

- 引入新变量与等式约束
- 将显式约束隐式化或将隐式约束显式化
- 改变目标函数或者约束函数的形式
  例如，用 $\phi(f_0(x))$ 取代 $f_0(x)$，其中 ϕ 是凸的增函数

$$\min \quad f_0(Ax+b)$$

- 对偶函数为常数
- 强对偶性成立，但对偶问题无意义

改写原问题及其对偶

$$\begin{array}{ll} \min & f_0(y) \\ \text{s.t.} & Ax+b-y=0 \end{array} \qquad\qquad \begin{array}{ll} \max & b^T\nu - f_0^*(\nu) \\ \text{s.t.} & A^T\nu = 0 \end{array}$$

对偶函数为

$$\begin{aligned} g(\nu) &= \inf_{x,y}(f_0(y) - \nu^T y + \nu^T Ax + b^T\nu) \\ &= \begin{cases} -f_0^*(\nu) + b^T\nu & A^T\nu = 0 \\ -\infty & \text{其他} \end{cases} \end{aligned}$$

范数逼近问题: $\min \|Ax - b\|$

等价形式：

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \|y\| \\
\text{s.t.} \quad & y = Ax - b
\end{aligned}
$$

由$\|\cdot\|$的共轭函数知其对偶函数为:

$$
\begin{aligned}
g(\nu) &= \inf_{x,y}(\|y\| + \nu^T y - \nu^T Ax + b^T \nu) \\
&= \begin{cases} b^T\nu + \inf_y(\|y\| + \nu^T y) & A^T\nu = 0 \\ -\infty & \text{其他} \end{cases} \\
&= \begin{cases} b^T\nu & A^T\nu = 0, \quad \|\nu\|_* \le 1 \\ -\infty & \text{其他} \end{cases}
\end{aligned}
$$

范数逼近问题的对偶

$$
\begin{aligned}
\max \quad & b^T\nu \\
\text{s.t.} \quad & A^T\nu = 0, \quad \|\nu\|_* \le 1
\end{aligned}
$$

ℓ_1 正则化问题的对偶

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

令$r=Ax-b$, 问题等价于$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|r\|^2+\mu\|x\|_1$, s.t. $r=Ax-b$

- 拉格朗日函数:

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

- 对偶函数:

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

- 对偶问题:

$$\max \quad b^T\lambda-\frac{1}{2}\|\lambda\|^2, \quad \text{s.t.} \quad \|A^T\lambda\|_\infty\le\mu$$

隐式约束

带边界约束的线性规划: 原问题与对偶问题

$$\begin{array}{ll} \min & c^T x \\ \text{s.t.} & Ax = b \\ & -\mathbf{1} \leq x \leq \mathbf{1} \end{array} \qquad \begin{array}{ll} \max & -b^T\nu - \mathbf{1}^T\lambda_1 - \mathbf{1}^T\lambda_2 \\ \text{s.t.} & c + A^T\nu + \lambda_1 - \lambda_2 = 0 \\ & \lambda_1 \geq 0, \quad \lambda_2 \geq 0 \end{array}$$

通过隐式化边界约束改写原问题

$$\begin{array}{ll} \min & f_0(x) = \begin{cases} c^T x & -\mathbf{1} \leq x \leq \mathbf{1} \\ -\infty & \text{其他} \end{cases} \\ \text{s.t.} & Ax = b \end{array}$$

对偶函数为

$$\begin{aligned} g(\nu) &= \inf_{-\mathbf{1} \leq x \leq \mathbf{1}} (c^T x + \nu^T(Ax - b)) \\ &= -b^T\nu - \|A^T\nu + c\|_1 \end{aligned}$$

对偶问题: $\max \ -b^T\nu - \|A^T\nu + c\|_1$

适当锥与广义不等式

定义 (适当锥)

称满足如下条件的锥K 为**适当锥**(*proper cone*)：

1. K 是凸锥；
2. K 是闭集；
3. K 是实心的(*solid*), 即$\mathbf{int}\, K \neq \emptyset$ ；
4. K 是尖的(*pointed*), 即对任意非零向量x, 若$x \in K$, 则$-x \notin K$, 也即K 中无法容纳直线.

- 适当锥K 可以诱导出广义不等式, 它定义了全空间上的偏序关系：

$$x \preceq_K y \iff y - x \in K.$$

- 类似地, 可以定义严格广义不等式：

$$x \prec_K y \iff y - x \in \mathbf{int}\, K.$$

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

对偶锥与拉格朗日乘子

- 对广义不等式，该如何构造广义不等式约束所对应的乘子?

定义 (对偶锥)

令K 为全空间Ω 的子集，称集合

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

为其对偶锥.

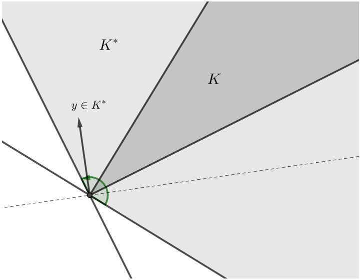


Figure: $\mathbb{R}^2$ 平面上的锥K 及其对偶锥K^*

对偶锥与拉格朗日乘子:注记

- 如果$K=\mathbb{R}^n_+$, $\Omega=\mathbb{R}^n$ 并且定义$\langle x,y\rangle = x^\mathrm{T}y$, 那么易知$K^*=\mathbb{R}^n_+$.
- 假设$K=\mathcal{S}^n_+$, $\Omega=\mathcal{S}^n$ 并且定义

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

  可以证明

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

  即半正定锥的对偶锥仍为半正定锥.
- 称满足$K=K^*$ 的锥K 为**自对偶锥**, 因此非负锥和半正定锥都是自对偶锥.
- 直观来说, 对偶锥K^* 中向量和原锥K 中向量的内积恒非负, 这一性质可以被用来构造拉格朗日对偶函数.

广义不等式约束优化问题拉格朗日函数的构造

- 广义不等式约束优化问题:

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

其中$c_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{k_i}$, $k_i \in \mathbb{N}_+, i \in \mathcal{I}$ 为向量值函数,f 与$c_i, i \in \mathcal{E}$ 为实值函数, $K_i, i \in \mathcal{I}$ 为适当锥.

- 拉格朗日函数L :

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

- 容易验证$L(x, \lambda, \nu) \leq f(x)$, $\forall\, x \in \mathcal{X}$, $\lambda_i \in K_i^*, \nu_i \in \mathbb{R}$.
- 对偶函数$g(\lambda, \nu) = \inf_{x\in\mathbb{R}^n} L(x, \lambda, \nu)$, 对偶问题为

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

半定规划问题的对偶问题

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

其中$A_i \in \mathcal{S}^n,\ i = 1, 2, \cdots, m,\ C \in \mathcal{S}^n, b \in \mathbb{R}^m$

- 拉格朗日函数:

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

- 对偶函数:

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

- 对偶问题:

$$
\min_{y \in \mathbb{R}^m} \quad -b^{\mathrm{T}} y, \quad \text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{m} y_i A_i - C + S = 0,\ S \succeq 0
$$

半定规划对偶问题的对偶问题

$$\min_{y \in \mathbb{R}^m} \quad -b^{\mathrm{T}} y, \quad \text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^m y_i A_i \preceq C$$

- 拉格朗日函数:

$$\begin{aligned} L(y, X) &= -b^{\mathrm{T}} y + \langle X, \sum_{i=1}^m y_i A_i - C \rangle \\ &= \sum_{i=1}^m y_i (-b_i + \langle A_i, X \rangle) - \langle C, X \rangle \end{aligned}$$

- 对偶函数:

$$g(X) = \inf_y \ L(y, X) = \begin{cases} -\langle C, X \rangle, & \langle A_i, X \rangle = b_i, \ i = 1, 2, \cdots, m \\ -\infty, & \text{其他} \end{cases}$$

- 对偶问题:

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

最大割对偶问题的对偶问题

$$\begin{aligned} \min_{y\in\mathbb{R}^n} \quad & \mathbf{1}^{\mathrm{T}} y \\ \text{s.t.} \quad & \mathrm{Diag}(y) - W \succeq 0 \end{aligned}$$

- 拉格朗日函数:

$$L(y,X) = \mathbf{1}^{\mathrm{T}} y - \langle \mathrm{Diag}(y) - W, X \rangle = \sum_{i=1}^{n} (1 - X_{ii}) y_i + \langle W, X \rangle$$

- 对偶函数:

$$g(X) = \inf_{y} L(y,X) = \begin{cases} \langle W, X \rangle, & X_{ii} = 1,\ i = 1,2,\cdots,n \\ -\infty, & \text{其他} \end{cases}$$

- 对偶问题:

$$\begin{aligned} \max \quad & \langle W, X \rangle \\ \text{s.t.} \quad & X_{ii} = 1,\ i = 1,2,\cdots,n \\ & X \succeq 0 \end{aligned}$$

SOCP/SDP Duality

(P) $\min \quad c^\top x$

s.t. $\quad Ax = b, x_Q \succeq 0$

(D) $\max \quad b^\top y$

s.t. $\quad A^\top y + s = c, s_Q \succeq 0$

(P) $\min \quad \langle C, X\rangle$

s.t. $\quad \langle A_1, X\rangle = b_1$

$\quad \dots$

$\quad \langle A_m, X\rangle = b_m$

$\quad X \succeq 0$

(D) $\max \quad b^\top y$

s.t. $\quad \sum_i y_i A_i + S = C$

$\quad S \succeq 0$

Strong duality

- If $p^* > -\infty$, (P) is **strictly** feasible, then (D) is feasible and $p^* = d^*$
- If $d^* < +\infty$, (D) is **strictly** feasible, then (P) is feasible and $p^* = d^*$
- If (P) and (D) has **strictly** feasible solutions, then both have optimal solutions.

Failure of SOCP Duality

$$
\begin{array}{ll}
\inf & (1,-1,0)x \\
\text{s.t.} & (0,0,1)x = 1 \\
& x_{\mathcal{Q}} \succeq 0
\end{array}
\qquad
\begin{array}{ll}
\sup & y \\
\text{s.t.} & (0,0,1)^\top y + z = (1,-1,0)^\top \\
& z_{\mathcal{Q}} \succeq 0
\end{array}
$$

- primal: $\min \ x_0 - x_1$, s.t. $x_0 \geq \sqrt{x_1^2 + 1}$; It holds $x_0 - x_1 > 0$ and $x_0 - x_1 \to 0$ if $x_0 = \sqrt{x_1^2 + 1} \to \infty$. Hence, $p^* = 0$, no finite solution
- dual: $\sup \ y$ s.t. $1 \geq \sqrt{1 + y^2}$. Hence, $y = 0$

$p^* = d^*$ but primal is not attainable.

Failure of SDP Duality

Consider

$$\begin{aligned} \min \quad & \left\langle \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, X \right\rangle \\ \text{s.t.} \quad & \left\langle \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, X \right\rangle = 0 \\ & \left\langle \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}, X \right\rangle = 2 \\ & X \succeq 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \max \quad & 2y_2 \\ \text{s.t.} \quad & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} y_1 + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix} y_2 \preceq \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

- primal: $X^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $p^* = 1$
- dual: $y^* = (0, 0)$. Hence, $d^* = 0$

Both problems have finite optimal values, but $p^* \neq d^*$

提纲

1 对偶理论

2 带约束凸优化问题的最优性理论

带约束凸优化问题

- 前述问题都可以写为

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

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

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

- 自变量x 还受约束的限制, 定义可行域

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

- 由于凸优化问题的可行域是凸集, 因此等式约束只能是线性约束.

首先给出集合$\mathcal{D}$的相对内点集relint$\mathcal{D}$的定义.给定集合$\mathcal{D}$, 记其仿射包为

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

定义 (相对内点)

集合$\mathcal{D}$的相对内点集定义为

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

相对内点是内点的推广，若$\mathcal{D}$本身的“维数”较低, 则$\mathcal{D}$不可能有内点, 但如果在它的仿射包**affine**$\,\mathcal{D}$中考虑, 则$\mathcal{D}$可能有相对内点.

Slater约束品性

定义 (Slater约束品性)

若对凸优化问题

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

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

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

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

- Slater约束品性实际上是要求自然定义域$\mathcal{D}$ 的相对内点中存在使得不等式约束严格成立的点, **affine** $\mathcal{D} = \mathbb{R}^n$ 时相对内点就是内点.
- 不等式约束是仿射函数时, Slater条件可以放宽.设前k 个不等式约束是仿射的, 此时Slater约束品性变为:存在$x \in \mathrm{relint}\mathcal{D}$, 满足

  $$c_i(x) \leq 0,\ i = 1, 2, \cdots, k; \quad c_i(x) < 0,\ i = k{+}1, k{+}2 \cdots, m; \quad Ax = b,$$

  即对线性不等式约束无需要求其存在严格可行点.

Slater约束品性与强对偶原理

定理

若凸优化问题满足*Slater*条件，则强对偶原理成立。

- 这里假设集合$\mathcal{D}$ 内部非空(即relint$\mathcal{D}$ = **int** $\mathcal{D}$), A 行满秩(否则可以去掉多余的线性等式约束)以及原始问题最优函数值p^* 有限.
- 需证明的结论：当$d^* > -\infty$ 时，对偶问题的最优解可以取到，即存在对偶可行解(λ^*, ν^*)，满足$g(\lambda^*, \nu^*) = d^* = p^*$.
- 定义集合

$$
\begin{aligned}
\mathbb{A} = \{(u, v, t) \mid \exists x \in \mathcal{D},\ c_i(x) \le u_i,\ i = 1, 2, \cdots, m,\\
Ax - b = v, f(x) \le t\}.\\
\mathbb{B} = \{(0, 0, s) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \times \mathbb{R} \mid s < p^*\}.
\end{aligned}
$$

- 可以证明集合$\mathbb{A}$ 和$\mathbb{B}$ 是不相交的.
- 假设$(u, v, t) \in \mathbb{A} \cap \mathbb{B}$.根据$(u, v, t) \in \mathbb{B}$，有$u = 0, v = 0$ 和$t < p^*$.
- 由$(u, v, t) \in \mathbb{A}$，可知$f(x) \le t < p^*$，这与p^* 是原始问题最优值矛盾.

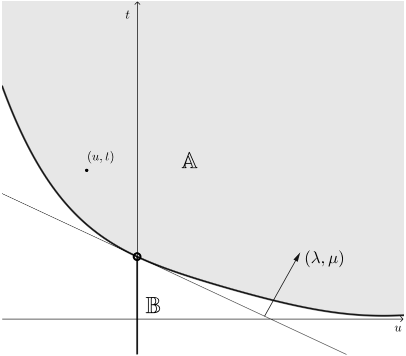


Figure: 集合$\mathbb{A}$和$\mathbb{B}$在u - t方向投影的示意图
($\mathbb{A}$ 一般为有内点的凸集, $\mathbb{B}$ 是一条射线且不含点$(0,0,p^*)$)

因为$\mathbb{A}$和$\mathbb{B}$均为凸集, 由超平面分离定理, 存在$(\lambda,\nu,\mu)\neq 0$和α, 使得

$$\lambda^{\mathrm{T}}u+\nu^{\mathrm{T}}v+\mu t\geq\alpha,\quad\forall\,(u,v,t)\in\mathbb{A},$$
$$\lambda^{\mathrm{T}}u+\nu^{\mathrm{T}}v+\mu t\leq\alpha,\quad\forall\,(u,v,t)\in\mathbb{B}.$$

- 我们断言$\lambda \geq 0$和$\mu \geq 0$ (否则可以取u_i和t为任意大的正实数以及$\nu = 0$, 这会导致$\lambda^{\mathrm{T}} u + \mu t$在集合$\mathbb{A}$上无下界).
- 同时, 由于$\mu t \leq \alpha$对于所有$t < p^*$成立, 可得$\mu p^* \leq \alpha$.
- 对任意$x \in \mathcal{D}$, 取$(u, v, t) = (c_i(x), Ax - b, f(x)) \in \mathbb{A}$, 可知

$$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i c_i(x) + \nu^{\mathrm{T}}(Ax - b) + \mu f(x) \geq \alpha \geq \mu p^*.$$

- 假设$\mu > 0$, 则

$$L(x, \frac{\lambda}{\mu}, \frac{\nu}{\mu}) \geq p^*.$$

进一步地, 我们有$g(\frac{\lambda}{\mu}, \frac{\nu}{\mu}) \geq p^*$, 根据弱对偶性$g(\frac{\lambda}{\mu}, \frac{\nu}{\mu}) \leq p^*$自然成立. 因此, 必有$g(\frac{\lambda}{\mu}, \frac{\nu}{\mu}) = p^*$成立. 说明在此情况下强对偶性满足, 且对偶最优解可以达到.

- 考虑$\mu = 0$ 的情况, 可以从上面得到对于所有的$x \in \mathcal{D}$,

$$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i c_i(x) + \nu^{\mathrm{T}}(Ax - b) \geq 0.$$

- 取满足Slater条件的点x_S, 有$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i c_i(x_S) \geq 0$.
- 又$c_i(x_S) < 0$ 和$\lambda_i \geq 0$, 我们得到$\lambda = 0$, 上式化为

$$\nu^{\mathrm{T}}(Ax - b) \geq 0, \quad \forall\, x \in \mathcal{D}.$$

- 根据$(\lambda, \nu, \mu) \neq 0$可知$\nu \neq 0$，结合$A$行满秩有$A^{\mathrm{T}}\nu \neq 0$. 因为$x_S \in \textbf{int}\, \mathcal{D}$，则存在$e$使得$\tilde{x} = x_S + e \in \mathcal{D}$，且$\nu^{\mathrm{T}}Ae < 0$. 另一方面有$\nu^{\mathrm{T}}Ae = \nu^{\mathrm{T}}A(\tilde{x} - x_S) = \nu^{\mathrm{T}}(A\tilde{x} - b) \geq 0$，矛盾，$\mu = 0$ 不成立.
- 综上所述, Slater条件能保证强对偶性.
- 在定理的证明中, Slater条件保证了$\mu \neq 0$.

一阶充要条件: 必要性简化证明

假设Slater条件满足，x^*, λ^* 分别是原始, 对偶最优解。则有：

$$
\begin{aligned}
f(x^*) = g(\lambda^*) &= \inf_x f(x) + \sum_{i\in\mathcal{I}} \lambda_i^* c_i(x) + \sum_{i\in\mathcal{E}} \lambda_i^* (a_i^\mathrm{T} x - b_i) \\
&\le f(x^*) + \sum_{i\in\mathcal{I}} \lambda_i^* c_i(x^*) + \sum_{i\in\mathcal{E}} \lambda_i^* (a_i^\mathrm{T} x^* - b_i) \\
&\le f(x^*)
\end{aligned}
$$

因此，上述两个不等式中的等式成立

- x^* 极小化$L(x, \lambda^*)$
- $\lambda_i^* c_i(x^*) = 0,\ i \in \mathcal{I}$ (互补条件, complementary slackness):

$$
\lambda_i^* > 0 \Longrightarrow c_i(x^*) = 0, \qquad c_i(x^*) < 0 \Longrightarrow \lambda_i^* = 0
$$

- 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.
- 而对于凸优化问题，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 (凸优化问题的一阶充要条件)

对于凸优化问题，用a_i 表示矩阵A^T 的第i 列，$\nabla f, \nabla c_i$ 表示梯度，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

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

一阶充要条件: 充分性

- 设存在$(\bar{x}, \bar{\lambda})$ 满足KKT条件, 我们考虑凸优化问题的拉格朗日函数

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i (a_i^{\mathrm{T}} x - b_i).$$

- 当固定$\lambda = \bar{\lambda}$ 时, 注意到$\bar{\lambda}_i \geq 0, i \in \mathcal{I}$ 以及$\bar{\lambda}_i (a_i^{\mathrm{T}} x), i \in \mathcal{E}$ 是线性函数可知$L(x, \bar{\lambda})$ 是关于x 的凸函数.

- 由凸函数全局最优点的一阶充要性可知, 此时$\bar{x}$ 就是$L(x, \bar{\lambda})$ 的全局极小点.根据拉格朗日对偶函数的定义,

$$L(\bar{x}, \bar{\lambda}) = \inf_{x \in \mathcal{D}} L(x, \bar{\lambda}) = g(\bar{\lambda}).$$

- 根据原始可行性条件$A\bar{x} = b$ 以及互补松弛条件$\bar{\lambda}_i c_i(\bar{x}) = 0, i \in \mathcal{I}$,

$$L(\bar{x}, \bar{\lambda}) = f(\bar{x}) + 0 + 0 = f(\bar{x}).$$

- 根据弱对偶原理,

$$L(\bar{x}, \bar{\lambda}) = f(\bar{x}) \geq p^* \geq d^* \geq g(\bar{\lambda}) = L(\bar{x}, \bar{\lambda}) \Rightarrow p^* = d^*,$$

故$\bar{x}, \bar{\lambda}$ 分别是原始问题和对偶问题的最优解.

关于充分性的评述

- 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.
- 根据KKT条件计算最优化问题显式解：
  - 写出KKT条件
  - 由“稳定性条件”将原问题的解x写成关于乘子λ的函数
  - 将x代入原问题的约束得到关于λ的方程，看是否能求解出λ
  - 检查上述x和λ是否完全满足KKT条件
- 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.
- 当Slater条件不满足时，即使原始问题存在全局极小值点，也可能不存在(x^*, λ^*) 满足KKT条件.

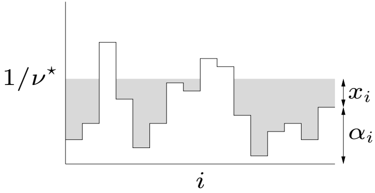
Example: water-filling (assume $\alpha_i > 0$)

$$\begin{array}{ll} \min & -\sum_{i=1}^{n} \log(x_i + \alpha_i) \\ \text{s.t.} & x \succeq 0, \quad \mathbf{1}^T x = 1 \end{array}$$

x is optimal iff $x \succeq 0$, $\mathbf{1}^T x = 1$, and there exist $\lambda \in \mathbb{R}^n$, $\nu \in \mathbb{R}$ such that

$$\lambda \succeq 0, \qquad \lambda_i x_i = 0, \qquad \frac{1}{x_i + \alpha_i} + \lambda_i = \nu$$

- if $\nu < 1/\alpha_i$: $\lambda_i = 0$ and $x_i = 1/\nu - \alpha_i$
- if $\nu \geq 1/\alpha_i$: $\lambda_i = \nu - 1/\alpha_i$ and $x_i = 0$
- determine ν from $\mathbf{1}^T x = \sum_{i=1}^{n} \max\{0, 1/\nu - \alpha_i\} = 1$



interpretation

- n patches; level of patch i is at height α_i
- flood area with unit amount of water
- resulting level is $1/\nu^*$

光滑凸优化实例:仿射空间的投影问题

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

其中$A\in\mathbb{R}^{m\times n}$, $b\in\mathbb{R}^m$ 以及$y\in\mathbb{R}^n$ 为给定的矩阵和向量且A 满秩.

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

$$\begin{cases} x^*-y+A^{\mathrm{T}}\lambda^*=0, \\ Ax^*=b. \end{cases}$$

- 由上述KKT 条件第一式, 等号左右两边同时左乘A 可得

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

- 将λ^* 代回KKT 条件第一式可知

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

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

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad & \|x\|_1, \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b.\end{aligned} \iff \begin{aligned}\min \quad & \sum_i x_i^+ + x_i^-, \\ \text{s.t.} \quad & Ax^+ - Ax^- = b, \\ & x^+, x^- \geq 0.\end{aligned} \iff \begin{aligned}\min_{y\in\mathbb{R}^{2n}} \quad & \mathbf{1}^\mathrm{T} y, \\ \text{s.t.} \quad & [A, -A]y = b, \\ & y \geq 0.\end{aligned}$$

根据一般线性规划问题的最优性条件, 求解基追踪问题等价于求解

$$\begin{cases} \mathbf{1} + [A, -A]^\mathrm{T}\nu^* - s^* = 0, \\ [A, -A]y^* = b, \\ y^* \geq 0, \\ s^* \geq 0, \\ s^* \odot y^* = 0, \end{cases}$$

其中$s^* \in \mathbb{R}^{2n}, \nu^* \in \mathbb{R}^m$.

基追踪问题最优性条件:直接推导

- 拉格朗日函数: $L(x,\nu) = \|x\|_1 + \nu^{\mathrm{T}}(Ax - b)$.
- x^* 为全局最优解当且仅当存在$\nu^* \in \mathbb{R}^m$ 使得

$$\begin{cases} 0 \in \partial\|x^*\|_1 + A^{\mathrm{T}}\nu^*, \\ b = Ax^*. \end{cases}$$

- 令$x_i^* = y_i^* - y_{n+i}^*,\ i = 1, 2, \cdots, n$, 则

$$[A, -A]y^* = b \implies Ax^* = b.$$

- 对于等式$\mathbf{1} + [A, -A]^{\mathrm{T}}\nu^* - s^* = 0$, 我们有

$$(A^{\mathrm{T}}\nu^*)_i = -1 + s_i^* = 1 - s_{n+i}^*, \quad i = 1, 2, \cdots, n.$$

因此, $s_i^* + s_{n+i}^* = 2$.根据互补条件, y_i^*, y_{n+i}^* 至少有一个为0.

基追踪问题最优性条件:直接推导

- 若$x_i^* = 0$, 则有$y_i^* = y_{n+i}^* = 0$. 由s_i^*, $s_{n+i}^* \geq 0$ 知$(A^{\mathrm{T}}\nu^*)_i \in [-1, 1]$.
- 若$x_i^* < 0$, 则有$y_i^* = 0$, $y_{n+i}^* > 0$, 此时有$(A^{\mathrm{T}}\nu^*)_i = 1$.
- 对于$x_i^* > 0$, 我们有$(A^{\mathrm{T}}\nu^*)_i = -1$.
- 以上过程均可逆推, 这就证明了利用非光滑凸优化理论推导的最优性条件和利用线性规划推导的最优性条件是等价的.