最优化计算方法

黄正海 苗新河 编著

科学出版社

最优化计算方法

黄正海　苗新河　编著

科学出版社
北京

内 容 简 介

最优化是运筹学的一个重要分支，在很多领域具有广泛的应用. 本书系统地介绍了线性规划、无约束优化及约束优化的基础理论和求解方法，主要内容包括：线性规划的对偶理论与最优性条件、无约束优化的最优性条件、约束优化的最优性条件与鞍点定理；求解线性规划的单纯形算法、内点算法、非内部连续化算法；求解无约束优化的最速下降法、牛顿法、共轭梯度法、拟牛顿法、非单调线搜索法、信赖域法；求解约束优化的序列无约束优化法、可行方向法、序列二次规划法等，也简单介绍了多目标规划的基本理论与求解方法. 本书内容丰富，力求深入浅出、通俗易懂，每章后都附有大量的习题，便于教学.

本书可作为高等院校数学专业高年级本科生和工科硕士研究生学习最优化理论的教材或教学参考书，也可作为从事应用数学、运筹学、系统工程、经济管理和工程设计等领域相关专业科研人员的参考书.

图书在版编目(CIP)数据

最优化计算方法/黄正海，苗新河编著. —北京：科学出版社，2015. 2
ISBN 978-7-03-043305-3

Ⅰ. ①最…　Ⅱ. ①黄…　②苗…　Ⅲ. ①最优化算法　Ⅳ. ①O242. 23

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2015）第 021038 号

责任编辑：王　静／责任校对：钟　洋
责任印制：霍　兵／封面设计：陈　敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

大厂书文印刷有限公司印刷
科学出版社发行　各地新华书店经销
*
2015 年 2 月第　一　版　开本：720 × 1000 1/16
2015 年 2 月第一次印刷　印张：14 3/4
字数：295 000

定价：39. 00 元
（如有印装质量问题，我社负责调换）

前　　言

最优化计算方法就是从众多的可行方案中选择最佳方案, 以达到最佳目标的一门学科. 20 世纪中期, 最优化计算方法发展成为运筹学的一个重要组成部分，广泛应用于各个部门和各个领域中. 例如, 在工程设计、经济、管理、交通运输、金融、计算机以及国防等领域中都有着重要的使用价值. 随着计算机科学的发展和应用, 应用最优化的计算方法所解决问题的领域不断扩大, 解决问题的深度不断深化，从而促进了最优化计算方法的迅速发展，并成为相关工程技术人员和管理人员所必备的基础知识. 目前最优化计算方法已经是各个高等院校普遍开设的一门课程.

为了给高等院校的数学专业高年级本科生和工科硕士研究生提供一本合适的、实用的“最优化”教材，作者结合多年来对“最优化理论与方法”这门课程的教学实践与体会，撰写了本书. 在介绍最基本、最重要的最优化理论和方法的同时，也介绍了一些新的有效的计算方法, 包括内点法、非内部连续化算法、非单调线搜索法等. 通过本课程的学习，学生在掌握基本的最优化理论和方法的同时，也能了解一些新的优化计算方法, 为进一步从事优化领域的研究以及应用优化计算方法从事相关研究打下良好的基础.

作为最优化理论与方法的入门书，本书系统地介绍了线性规划、无约束优化和约束优化的基本理论和数值求解方法，也简单介绍了多目标规划的基本理论和求解方法. 为了便于教学，在每章后面都附有大量的练习题. 本书力求深入浅出, 通俗易懂，在内容深度上力求能为具有微积分和线性代数知识基础的广大读者顺利接受，适合于教学和自学.

在本书的撰写过程中，天津大学数学系担任“最优化理论与方法”这门课程的各位教师对本书的撰写提出了宝贵的修改意见；同时，作者的研究生对本书的出版给予了很大的支持和帮助. 借此机会，作者对他们表示衷心的感谢！此外, 要特别感谢天津大学研究生院领导和培养处对本书的撰写给予的关心和帮助！感谢天津大学研究生院“研究生创新人才培养”项目对本书出版的资助.

限于作者水平，书中难免存在不妥之处，恳请同行专家和广大读者批评指正.

作　者

2014 年 11 月

目　　录

第1章　引　　论

本章首先介绍最优化问题的数学模型、基本概念及其分类, 然后介绍凸集和凸函数的概念及相关性质, 最后介绍线搜索迭代算法的一般框架、线搜索准则及其算法收敛性判别.

1.1　最优化问题概述

在现实社会中, 人们经常遇到这样一类问题: 判别在一个问题的众多解决方案中什么样的方案最佳, 以及如何找出最佳方案. 例如, 在资源分配中, 如何分配有限资源, 使得分配方案既能满足各方面的需求, 又能获得好的经济效益; 在工程设计中, 如何选择设计参数, 使得设计方案既能满足设计要求, 又能降低成本等. 这类问题就是在一定的限制条件下使得所关心的指标达到最优. 最优化就是为解决这类问题提供理论基础和求解方法的一门数学学科.

最优化问题的基本数学模型为

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) \geqslant 0,\ \forall i \in I := \{1, 2, \cdots, p\}, \\ & c_i(x) = 0,\ \forall i \in E := \{p+1, p+2, \cdots, m\}, \end{aligned} \tag{1.1.1}$$

其中, min 是 minimize 的缩写, s.t. 是 subject to 的缩写, $x \in \mathbb{R}^n$ 称为决策向量, 函数 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 称为目标函数, 函数 $c_i(\cdot)$ $(i \in I)$ 称为不等式约束函数, 函数 $c_i(\cdot)$ $(i \in E)$ 称为等式约束函数, 不等式 $c_i(x) \geqslant 0$ $(i \in I)$ 称为不等式约束, 方程 $c_i(x) = 0$ $(i \in E)$ 称为等式约束, I 称为不等式约束的指标集, E 称为等式约束的指标集. 记

$$\mathscr{F} := \left\{ x \in \mathbb{R}^n \;\middle|\; \begin{array}{ll} c_i(x) \geqslant 0, & \forall i \in I = \{1, 2, \cdots, p\}; \\ c_i(x) = 0, & \forall i \in E = \{p+1, p+2, \cdots, m\} \end{array} \right\}. \tag{1.1.2}$$

那么, 称集合 $\mathscr{F}$ 为最优化问题 (1.1.1) 的可行域, $\mathscr{F}$ 中的每个点 x 称为最优化问题 (1.1.1) 的一个可行点. 若 $\mathscr{F} = \varnothing$, 则称问题 (1.1.1) 是不可行的; 否则称问题 (1.1.1) 是可行的. 因此, 最优化问题 (1.1.1) 就是在可行域 $\mathscr{F}$ 中寻找一点 x 使得它对应的目标函数值 $f(x)$ 不大于 $\mathscr{F}$ 中其他任何点所对应的目标函数值.

定义 1.1.1 假设可行域 $\mathscr{F}$ 由 (1.1.2) 式给出.

(i) 若 $x^* \in \mathscr{F}$, 且对所有的 $x \in \mathscr{F}$ 恒有 $f(x^*) \leqslant f(x)$, 则称 x^* 为最优化问题 (1.1.1) 的一个全局最优解.

(ii) 若 $x^* \in \mathscr{F}$, 且对所有的 $x \in \mathscr{F} \setminus \{x^*\}$ 恒有 $f(x^*) < f(x)$, 则称 x^* 为最优化问题 (1.1.1) 的严格全局最优解.

(iii) 若 $x^* \in \mathscr{F}$, 且存在 x^* 的某个邻域

$$\mathscr{N}_\varepsilon(x^*) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^*\| < \varepsilon\}, \quad \varepsilon\text{为正实数且}\|\cdot\|\text{表示某种范数},$$

使得对所有的 $x \in \mathscr{F} \cap \mathscr{N}_\varepsilon(x^*)$ 恒有 $f(x^*) \leqslant f(x)$, 那么称 x^* 为最优化问题 (1.1.1) 的一个局部最优解.

(iv) 若 $x^* \in \mathscr{F}$, 且存在 x^* 的某个邻域 $\mathscr{N}_\varepsilon(x^*)$, 使得对所有的 $x \in \mathscr{F} \cap \mathscr{N}_\varepsilon(x^*) \setminus \{x^*\}$ 恒有 $f(x^*) < f(x)$, 那么称 x^* 为最优化问题 (1.1.1) 的一个严格局部最优解.

显然, 全局最优解一定是局部最优解; 而局部最优解不一定是全局最优解. 求解最优化问题 (1.1.1) 就是在可行域 $\mathscr{F}$ 上寻找问题 (1.1.1) 的全局最优解. 但是, 在一般情况下, 不容易求得全局最优解, 往往只能求出局部最优解. 以下若不做特别声明, 全局最优解简称最优解.

定义 1.1.2 对于最优化问题 (1.1.1), 称其最优解 x^* 对应的目标函数值 $f(x^*)$ 为此优化问题的最优值.

对于最优化问题 (1.1.1), 最优解不一定存在, 即使存在也不一定唯一; 但是, 若最优解存在, 则最优值必唯一. 以下用 $\mathcal{S}$ 表示最优化问题 (1.1.1) 的最优解集. 如果 $\mathcal{S} = \varnothing$, 那么最优化问题 (1.1.1) 无最优解; 否则最优化问题 (1.1.1) 有最优解. 显然, 若最优化问题 (1.1.1) 不可行; 或者该问题可行但它的目标函数值在可行域上无下界, 则最优化问题 (1.1.1) 都无最优解. 另外需要提到的一点是: 在实际中, 若需要极大化目标函数, 那么通过将目标函数前加负号可转化为极小化问题求解. 因此, 不失一般性, 本书中只考虑极小化问题.

最优化问题 (1.1.1) 也常被写成

$$\min \left\{ f(x) \;\middle|\; \begin{array}{ll} c_i(x) \geqslant 0, & \forall i \in I := \{1, 2, \cdots, p\}; \\ c_i(x) = 0, & \forall i \in E := \{p+1, p+2, \cdots, m\} \end{array} \right\},$$

或者 $\min\{f(x) \mid x \in \mathscr{F}\}$; 或者 $\min_{x \in \mathscr{F}} f(x)$; 或者 $x^* = \arg\min_{x \in \mathscr{F}} f(x)$ 等, 其中 $\arg\min$ 为 the argument of the minimum 的缩写.

最优化问题形形色色, 对应的最优化模型多种多样, 不同的优化模型, 其求解方法有很大的差异. 因此, 为了有效地求解最优化问题, 人们首先应能区分优化问题的类型. 下面从不同的角度对优化问题进行分类.

(1) **根据有无约束条件分为无约束优化和约束优化** 若 $\mathscr{F}=\mathbb{R}^n$, 则称问题 (1.1.1) 为无约束优化问题; 若 $\mathscr{F}\subseteq\mathbb{R}^n$ 且 $\mathscr{F}\neq\mathbb{R}^n$, 则称问题 (1.1.1) 为约束优化问题.

(2) **根据所涉及的函数是否线性分为线性规划和非线性规划** 若目标函数和约束函数都是线性的, 则称问题 (1.1.1) 为线性规划问题; 若目标函数和约束函数中至少有一个是非线性的, 则称问题 (1.1.1) 为非线性规划问题. 若目标函数是二次函数且所有约束函数都是线性函数, 则称问题 (1.1.1) 为二次规划问题. 二次规划是一类简单、特殊的非线性规划问题.

(3) **根据目标函数分为单目标规划和多目标规划** 若目标函数 f 是一个实值函数, 则称问题 (1.1.1) 为单目标规划问题; 若目标函数 f 是一个向量值函数, 则称问题 (1.1.1) 为多目标规划问题.

(4) **根据涉及函数的可微性质分为光滑优化和非光滑优化** 若目标函数和约束函数都是连续可微的, 则称问题 (1.1.1) 为光滑优化问题; 否则称为非光滑优化问题.

(5) **根据涉及函数的凸性分为凸规划和非凸规划** 若可行域 $\mathscr{F}$ 是凸集且目标函数 f 是凸函数, 则称问题 (1.1.1) 为凸规划问题; 否则称为非凸规划问题. 1.3 节将详细介绍凸规划.

(6) **根据可行点的个数情况分为连续优化和离散优化** 若可行域 $\mathscr{F}$ 中含有无穷多个点且可行域中的点连续变化, 则称问题 (1.1.1) 为连续优化问题. 若可行域 $\mathscr{F}$ 中含有有限个点或可数个点, 则称问题 (1.1.1) 为离散优化问题. 若所有决策变量取整数, 则称问题 (1.1.1) 为整数规划问题; 若部分决策变量取整数且其他决策变量连续变化, 则称问题 (1.1.1) 为混合整数规划问题. 在整数规划中, 如果决策变量只能取 0 和 1, 那么对应的优化问题称为 0-1 整数规划问题.

需要指出两点：第一, 部分不同优化问题在某些情况下可以相互转化; 第二, 这里只是给出一些基本的分类, 最优化问题还有其他的一些分类.

本书主要讨论光滑的单目标无约束优化和约束优化问题的理论与求解算法, 对多目标规划只做简单的介绍.

1.2 预 备 知 识

本节介绍在最优化理论与方法中经常使用的数学基础知识, 包括向量范数、矩阵范数、函数的梯度与 Hesse 阵、Taylor 展开式等.

1.2.1 向量范数与矩阵范数

本小节介绍向量范数与矩阵范数的定义以及几个重要不等式.

在本书中, 约定向量取列向量形式, 即 $x \in \mathbb{R}^n$ 是指 x 具有如下形式:

$$x := (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix},$$

其中, $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 分别是向量 x 的分量, 记号 “:=” 表示 “定义”. 此外, 对任意的 $x, y \in \mathbb{R}^n$, 常用的内积 $\langle x, y\rangle$ 定义为

$$\langle x, y\rangle := \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = x^{\mathrm{T}} y.$$

定义 1.2.1 称映射 $\|\cdot\| \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 为 $\mathbb{R}^n$ 上的范数, 当且仅当它具有下列性质:

(i) 对任意的 $x \in \mathbb{R}^n$, 有 $\|x\| \geqslant 0$, 且 $\|x\| = 0$ 当且仅当 $x = 0$;

(ii) 对任意的 $x \in \mathbb{R}^n$ 和任意的 $\alpha \in \mathbb{R}$, 有 $\|\alpha x\| = |\alpha|\|x\|$;

(iii) 对任意的 $x, y \in \mathbb{R}^n$, 有 $\|x+y\| \leqslant \|x\| + \|y\|$.

对任意的 $x \in \mathbb{R}^n$, 常用的向量范数如下.

(1) l_1-范数: $\|x\|_1 = \sum\limits_{i=1}^{n} |x_i|$;

(2) l_2-范数: $\|x\|_2 = \sqrt{x^{\mathrm{T}} x} = \sqrt{\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2}$;

(3) l_∞-范数: $\|x\|_\infty = \max\{|x_i| \mid i \in \{1, 2, \cdots, n\}\}$;

一般地, 对于 $p \in [1, \infty)$, l_p-范数定义为

(4) $\|x\|_p = \left(\sum\limits_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{1/p}$.

注 在本书中, 向量范数 $\|\cdot\|_2$ 广为使用, 为了简便, 简写为 $\|\cdot\|$.

由上述各种范数的定义，容易验证: 对任意的 $x \in \mathbb{R}^n$, 有

$$\|x\|_\infty \leqslant \|x\|_2 \leqslant \|x\|_1 \leqslant n\|x\|_\infty.$$

向量范数等价性的定义如下.

命题 1.2.1 假设 $\|\cdot\|_\alpha$ 和 $\|\cdot\|_\beta$ 是定义在 $\mathbb{R}^n$ 上的任意两种范数. 那么总存在两个正数 ξ_1 和 ξ_2, 使得对任意的 $x \in \mathbb{R}^n$, 有 $\xi_1\|x\|_\alpha \leqslant \|x\|_\beta \leqslant \xi_2\|x\|_\alpha$.

因此，以上定义在 $\mathbb{R}^n$ 上的向量范数是等价的. 在最优化方法中, 常需要考察某个点列 $\{x^k\}$ 趋向于 x^* 的速率, 利用命题 1.2.1, 只需要按某种范数 $\|\cdot\|$ 考察 $\|x^k - x^*\|$ 趋向于 0 的速率即可.

另外，假设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称正定矩阵. 那么向量的椭球范数 $\|\cdot\|_A$ 定义如下:

$$\|x\|_A := \sqrt{x^{\mathrm{T}} A x}, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

类似于向量范数, 可以定义矩阵范数.

定义 1.2.2 称映射 $\|\cdot\|$: $\mathbb{R}^{n\times n}\to\mathbb{R}$ 为 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 上的范数, 当且仅当它具有下列性质:

(i) 对任意的 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 有 $\|A\|\geqslant 0$, 且 $\|A\|=0$ 当且仅当 $A=0$;

(ii) 对任意的 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 和任意的 $\alpha\in\mathbb{R}$, 有 $\|\alpha A\|=|\alpha|\|A\|$;

(iii) 对任意的 $A,B\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 有 $\|A+B\|\leqslant\|A\|+\|B\|$.

对任意的 $A=(a_{ij})_{n\times n}\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 最常用的矩阵范数是 Frobenius 范数, 其定义为

$$\|A\|_F:=\sqrt{\sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n a_{ij}^2}=\sqrt{\mathrm{Tr}(A^{\mathrm{T}}A)},$$

其中, $\mathrm{Tr}(A^{\mathrm{T}}A)$ 表示矩阵 $A^{\mathrm{T}}A$ 的迹, 即 $A^{\mathrm{T}}A$ 的所有主对角线元素之和, 也等于 $A^{\mathrm{T}}A$ 的所有特征值之和. 另一个常用的矩阵范数是由向量所诱导的矩阵范数, 也称为算子范数, 其定义为

$$\|A\|:=\max_{x\in\mathbb{R}^n\setminus\{0\}}\frac{\|Ax\|}{\|x\|},\quad \forall A\in\mathbb{R}^{n\times n},$$

其中, $\|\cdot\|$ 是某种向量范数. 特别地, 对任意的 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 有

(1) 由向量 l_1- 范数诱导的矩阵范数 (列范数) 为 $\|A\|_1=\max\left\{\sum_{i=1}^n|a_{ij}|\,\middle|\,j\in\{1,2,\cdots,n\}\right\}$;

(2) 由向量 l_∞- 范数诱导的矩阵范数 (行范数) 为 $\|A\|_\infty=\max\left\{\sum_{j=1}^n|a_{ij}|\,\middle|\,i\in\{1,2,\cdots,n\}\right\}$;

(3) 由向量 l_2- 范数诱导的矩阵范数 (谱范数) 为 $\|A\|_2=\sqrt{\lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}}A)}$, 其中 $\lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}}A)$ 表示矩阵 $A^{\mathrm{T}}A$ 的最大特征值.

假设 $\|\cdot\|$ 表示上述定义四种矩阵范数中的任意一种范数, 那么它满足相容性条件, 即对任意的 $A,B\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 有 $\|AB\|\leqslant\|A\|\|B\|$; 并且它与相应的向量范数是相容的, 即对任意的 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 和 $x\in\mathbb{R}^n$ 有 $\|Ax\|\leqslant\|A\|\|x\|$.

下面介绍五个常用的不等式.

Cauchy-Schwarz 不等式 对任意的 $x,y\in\mathbb{R}^n$, 有

$$|x^{\mathrm{T}}y|\leqslant\|x\|_2\|y\|_2,$$

其中, 等号成立当且仅当 x 和 y 线性相关.

广义 Cauchy-Schwarz 不等式 设 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是正定矩阵. 对任意的 $x,y\in\mathbb{R}^n$, 有

$$|x^{\mathrm{T}}y|\leqslant\|x\|_A\|y\|_{A^{-1}},$$

其中, 等号成立当且仅当 x 和 $A^{-1}y$ 线性相关.

Young 不等式　假设 p 和 q 是大于 1 的实数且满足 $1/p+1/q=1$, 如果 a 和 b 是实数, 那么

$$|ab| \leqslant \frac{|a|^p}{p}+\frac{|b|^q}{q},$$

其中, 等号成立当且仅当 $|a|^p=|b|^q$.

Hölder 不等式　对任意的 $x,y\in\mathbb{R}^n$, 有

$$|x^{\mathrm{T}}y| \leqslant \|x\|_p\|y\|_q=\left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{1/p}\left(\sum_{i=1}^n |y_i|^q\right)^{1/q},$$

其中, p 和 q 是大于 1 的实数且满足 $1/p+1/q=1$.

Minkowski 不等式　对任意的 $x,y\in\mathbb{R}^n$, 有

$$\|x+y\|_p \leqslant \|x\|_p+\|y\|_p=\left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{1/p}+\left(\sum_{i=1}^n |y_i|^p\right)^{1/p},$$

其中, $p\in[1,\infty)$.

1.2.2　函数的可微性

本小节主要介绍与函数可微性相关的基本概念和基本结论, 包括函数的梯度与 Hesse 阵的定义以及 Taylor 展开式等.

给定函数 $f:\ \mathscr{F}\subseteq\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$, 如果 f 在每一点 $x\in\mathscr{F}$ 处连续, 那么称 f 在 $\mathscr{F}$ 上连续; 如果 $\mathscr{F}$ 为开集且在每一点 $x\in\mathscr{F}$ 处, 偏导数 $\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_i}$ $(i\in\{1,2,\cdots,n\})$ 都存在且连续, 那么称 f 在 $\mathscr{F}$ 上连续可微; 如果在每一点 $x\in\mathscr{F}$ 处, 二阶偏导数 $\dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i\partial x_j}$ $(i,j\in\{1,2,\cdots,n\})$ 都存在且连续, 那么称 f 在 $\mathscr{F}$ 上二阶连续可微.

假设函数 $f:\ \mathscr{F}\subseteq\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 一阶连续可微, 那么函数 f 在点 x 处的一阶导数为

$$\nabla f(x)=\left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1},\frac{\partial f(x)}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial f(x)}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}},$$

称为函数 f 在点 x 处的梯度; 如果函数 f 是二阶连续可微, 那么函数 f 在点 x 处的二阶导数为

$$\nabla^2 f(x)=\left(\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i\partial x_j}\right)_{n\times n}=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1\partial x_n}\\ \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2\partial x_n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2}\end{pmatrix},$$

称为函数 f 在点 x 处的 Hesse阵. 例如, 对于给定对称矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 向量 $b \in \mathbb{R}^n$ 和实数 c, 二次函数 $f(x) = \dfrac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax + b^{\mathrm{T}}x + c$ 的梯度为 $\nabla f(x) = Ax + b$; Hesse 阵为 $\nabla^2 f(x) = A$.

给定多变量向量值函数 $F: \mathscr{F} \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, 如果 F 在点 $x \in \mathscr{F}$ 处连续可微, 那么函数 F 在点 x 处的一阶导数为

$$F'(x) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial F_1(x)}{\partial x_1} & \dfrac{\partial F_1(x)}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial F_1(x)}{\partial x_n} \\ \dfrac{\partial F_2(x)}{\partial x_1} & \dfrac{\partial F_2(x)}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial F_2(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial F_m(x)}{\partial x_1} & \dfrac{\partial F_m(x)}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial F_m(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix},$$

称为函数 F 在点 x 处的 Jacobi 矩阵. 例如, 对于给定矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 多变量向量值函数 $F(x) = Ax$ 的 Jacobi 矩阵为 $F'(x) = A$.

下面将一元函数的中值定理和 Taylor 展开式延伸到多变量实值函数.

定理 1.2.1 对于函数 $f: \mathscr{F} \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, 令 $x, x^* \in \mathscr{F}$ 且 $x \neq x^*$.

如果函数 f 在 $\mathscr{F}$ 上连续可微, 那么

(i) 存在 $\alpha \in (0,1)$ 使得

$$f(x) = f(x^*) + \nabla f(\xi)^{\mathrm{T}}(x - x^*), \tag{1.2.1}$$

其中, $\xi = x^* + \alpha(x - x^*)$;

(ii) 函数 f 在 x^* 处有一阶 Taylor 展开式为

$$f(x) = f(x^*) + \nabla f(x^*)^{\mathrm{T}}(x - x^*) + o(\|x - x^*\|), \tag{1.2.2}$$

其中, $o(\|x - x^*\|)$ 表示: 当 $\|x - x^*\| \to 0$ 时, $o(\|x - x^*\|)$ 是 $\|x - x^*\|$ 的高阶无穷小量.

如果函数 f 在 $\mathscr{F}$ 上二阶连续可微, 那么

(iii) 存在 $\beta \in (0,1)$ 使得

$$f(x) = f(x^*) + \nabla f(x^*)^{\mathrm{T}}(x - x^*) + \frac{1}{2}(x - x^*)^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\xi)(x - x^*), \tag{1.2.3}$$

其中, $\xi = x^* + \beta(x - x^*)$;

(iv) 函数 f 在 x^* 处有二阶 Taylor 展开式为

$$f(x) = f(x^*) + \nabla f(x^*)^{\mathrm{T}}(x - x^*) + \frac{1}{2}(x - x^*)^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x^*)(x - x^*) + o(\|x - x^*\|^2). \tag{1.2.4}$$

证明 构造一元辅助函数 $\varphi(t)=f(x^*+t(x-x^*))$, 那么 $\varphi(0)=f(x^*)$, $\varphi(1)=f(x)$. 由函数 f 连续可微 (或二阶连续可微) 知: 函数 $\varphi(t)$ 关于 t 也连续可微 (或二阶连续可微). 于是有

$$\begin{aligned}
\varphi'(t)&=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial f(x^*+t(x-x^*))}{\partial x_i}(x_i-x_i^*)=\nabla f(x^*+t(x-x^*))^{\mathrm{T}}(x-x^*),\\
\varphi''(t)&=\sum_{i=1}^{n}\left[\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2 f(x^*+t(x-x^*))}{\partial x_i\partial x_j}(x_j-x_j^*)\right](x_i-x_i^*)\\
&=(x-x^*)^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x^*+t(x-x^*))(x-x^*),
\end{aligned}$$

进而, $\varphi'(0)=\nabla f(x^*)^{\mathrm{T}}(x-x^*)$ 且 $\varphi''(0)=(x-x^*)^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x^*)(x-x^*)$. 因此, 由一元函数的 Taylor 展式

$$\varphi(1)=\varphi(0)+\varphi'(\alpha),\quad \varphi(1)=\varphi(0)+\varphi'(0)+\frac{1}{2}\varphi''(\beta),$$

可分别得到 (1.2.1) 和 (1.2.3) 式.

另外, 记 $y:=\dfrac{x-x^*}{\|x-x^*\|}$ 和 $\gamma:=\|x-x^*\|$. 构造函数 $\psi(\gamma):=f(x^*+\gamma y)$, 那么

$$\begin{aligned}
&\psi(\gamma)=f(x),\ \ \psi(0)=f(x^*),\ \ \psi'(0)\gamma=\nabla f(x^*)^{\mathrm{T}}(x-x^*),\\
&\psi''(0)\gamma^2=(x-x^*)^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x^*)(x-x^*).
\end{aligned}$$

因此, 由一元函数的 Taylor 展开式

$$\psi(\gamma)=\psi(0)+\psi'(0)\gamma+o(\gamma),\quad \psi(\gamma)=\psi(0)+\psi'(0)\gamma+\frac{1}{2}\psi''(0)\gamma^2+o(\gamma^2),$$

可分别得到 (1.2.2) 和 (1.2.4) 式. □

1.3 凸集、凸函数、凸规划

本节介绍凸集、凸函数和凸规划的概念及其相关性质.

1.3.1 凸集

本小节介绍凸集的定义、基本性质、凸集分离定理以及 Farkas 引理.

定义 1.3.1 给定非空集合 $\mathscr{F}\subseteq\mathbb{R}^n$. 如果对任意的 $x,y\in\mathscr{F}$ 以及任意的实数 $\alpha\in[0,1]$ 都有

$$\alpha x+(1-\alpha)y\in\mathscr{F},$$

那么, 称 $\mathscr{F}$ 为 $\mathbb{R}^n$ 中的一个凸集. 若凸集 $\mathscr{F}$ 为开集, 则称为开凸集; 若凸集 $\mathscr{F}$ 为闭集, 则称为闭凸集.

显然, 单元素的集合和整个空间 $\mathbb{R}^n$ 为凸集. 为了方便, 今后规定空集 $\varnothing$ 为凸集. 称 $\alpha x+(1-\alpha)y$ 为两个点 x 和 y 的一个凸组合. 由凸集的定义不难得到: 一个集合为凸集的充要条件是该集合中任意两点的任意凸组合均属于该集合. 其几何意义为: 对于非空集合 $\mathscr{F}\subseteq\mathbb{R}^n$, 集合 $\mathscr{F}$ 为凸集的充要条件是 $\mathscr{F}$ 中任意两点的连线段属于该集合.

例 1.3.1 假设 $w\in\mathbb{R}^n\setminus\{0\}$ 且 β 为实数. 证明下面的集合为凸集.

(i) 超平面 $\mathscr{H}=\{x\in\mathbb{R}^n\mid w^{\mathrm{T}}x=\beta\}$;

(ii) 闭半空间 $\{x\in\mathbb{R}^n\mid w^{\mathrm{T}}x\geqslant\beta\}$ 和 $\{x\in\mathbb{R}^n\mid w^{\mathrm{T}}x\leqslant\beta\}$;

(iii) 开半空间 $\{x\in\mathbb{R}^n\mid w^{\mathrm{T}}x>\beta\}$ 和 $\{x\in\mathbb{R}^n\mid w^{\mathrm{T}}x<\beta\}$;

(iv) 超球 $\mathscr{B}=\{x\in\mathbb{R}^n\mid \|x\|\leqslant\beta\}$, 其中 $\beta\geqslant 0$.

证明 只证明第四个结论, 其他留为作业. 设 x,y 为 $\mathscr{B}$ 中任意两点及 $\beta\geqslant 0$. 任取 $\alpha\in[0,1]$, 则有

$$\|\alpha x+(1-\alpha)y\|\leqslant\alpha\|x\|+(1-\alpha)\|y\|\leqslant\alpha\beta+(1-\alpha)\beta=\beta,$$

即 $\alpha x+(1-\alpha)y\in\mathscr{B}$. 由定义 1.3.1 知: 超球 $\mathscr{B}=\{x\in\mathbb{R}^n\mid \|x\|\leqslant\beta\}$ 为凸集. □

下面的命题给出了凸集的四个简单性质.

命题 1.3.1 假设 $\mathscr{F}_i\subseteq\mathbb{R}^n$ 为凸集且 β_i 为任意实数, 其中 $i\in\{1,2,\cdots,p\}$. 则

(i) 交集 $\mathscr{F}:=\mathscr{F}_1\cap\mathscr{F}_2\cap\cdots\cap\mathscr{F}_p$ 为凸集;

(ii) 集合 $\beta_1\mathscr{F}_1:=\{\beta_1x\mid x\in\mathscr{F}_1\}$ 为凸集;

(iii) 和集 $\mathscr{F}_1+\mathscr{F}_2:=\{x+y\mid x\in\mathscr{F}_1,y\in\mathscr{F}_2\}$ 为凸集;

(iv) 集合 $\displaystyle\sum_{i=1}^{p}\beta_i\mathscr{F}_i$ 为凸集.

证明 只证明第一个结论. 设 x,y 为 $\mathscr{F}$ 中任意两点, 任取 $\alpha\in[0,1]$, 则由 $x,y\in\mathscr{F}$ 知: 对任意的 $i\in\{1,2,\cdots,p\}$, 有 $x,y\in\mathscr{F}_i$. 由于每个 $\mathscr{F}_i$ 为凸集, 所以对任意的 $i\in\{1,2,\cdots,p\}$, 有 $\alpha x+(1-\alpha)y\in\mathscr{F}_i$. 进而, $\alpha x+(1-\alpha)y\in\mathscr{F}$. 所以 $\mathscr{F}:=\mathscr{F}_1\cap\mathscr{F}_2\cap\cdots\cap\mathscr{F}_p$ 为凸集. □

把凸组合的定义延伸到多个点的情形, 并根据凸集的定义可以得到: 凸集中任意有限个点的凸组合属于该集合.

定理 1.3.1 非空集合 $\mathscr{F}\subseteq\mathbb{R}^n$ 为凸集当且仅当对任意的 $x^i\in\mathscr{F}$ 及任意满足 $\displaystyle\sum_{i=1}^{p}\alpha_i=1$ 的非负实数 α_i ($i\in\{1,\cdots,p\}$ 且 p 为不小于 2 的正整数) 都有 $\displaystyle\sum_{i=1}^{p}\alpha_ix^i\in\mathscr{F}$.

证明 取 $p=2$, 由定义 1.3.1 可得定理的充分性结论成立. 下面用数学归纳法证明定理的必要性. 由定义 1.3.1, 可得定理的必要性结论在 $p=2$ 时显然成立. 假设定理的必要性结论在 $p=k$ 时成立, 下面证明它在 $p=k+1$ 时也成立. 设

$x^i \in \mathscr{F}$ 且任取满足 $\sum_{i=1}^{k+1} \alpha_i = 1$ 的非负实数 α_i $(i \in \{1, \cdots, p\})$, 则

$$\sum_{i=1}^{k+1} \alpha_i x^i = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i x^i + \alpha_{k+1} x^{k+1} = (1 - \alpha_{k+1}) \sum_{i=1}^{k} \frac{\alpha_i}{1 - \alpha_{k+1}} x^i + \alpha_{k+1} x^{k+1}.$$

由 $\sum_{i=1}^{k+1} \alpha_i = 1$ 知 $1 - \alpha_{k+1} = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i$, 所以

$$\sum_{i=1}^{k} \frac{\alpha_i}{1 - \alpha_{k+1}} = 1 \quad 且 \quad \frac{\alpha_i}{1 - \alpha_{k+1}} \geqslant 0, \quad \forall i \in \{1, \cdots, k\}.$$

因此, 由归纳假设可得

$$y := \sum_{i=1}^{k} \frac{\alpha_i}{1 - \alpha_{k+1}} x^i \in \mathscr{F}.$$

进而, 由凸集的定义 (定义 1.3.1), 可得

$$\sum_{i=1}^{k+1} \alpha_i x^i = (1 - \alpha_{k+1}) \sum_{i=1}^{k} \frac{\alpha_i}{1 - \alpha_{k+1}} x^i + \alpha_{k+1} x^{k+1} = (1 - \alpha_{k+1}) y + \alpha_{k+1} x^{k+1} \in \mathscr{F}.$$

再由归纳法原理, 定理的必要性结论得证. □

下面介绍凸集分离定理.

定义 1.3.2 假设 $\mathscr{F}_1, \mathscr{F}_2 \subseteq \mathbb{R}^n$ 为两个非空凸集. 如果存在非零向量 $w \in \mathbb{R}^n$ 和实数 t, 使得

(i) 对任意的 $x \in \mathscr{F}_1$ 和 $y \in \mathscr{F}_2$, 都有 $w^{\mathrm{T}} x \geqslant t$ 且 $w^{\mathrm{T}} y \leqslant t$, 则称超平面 $\pi := \{x \in \mathbb{R}^n \mid w^{\mathrm{T}} x = t\}$ 分离集合 $\mathscr{F}_1$ 和 $\mathscr{F}_2$;

(ii) 对任意的 $x \in \mathscr{F}_1$ 和 $y \in \mathscr{F}_2$, 都有 $w^{\mathrm{T}} x > t$ 且 $w^{\mathrm{T}} y < t$, 则称超平面 $\pi := \{x \in \mathbb{R}^n \mid w^{\mathrm{T}} x = t\}$ 严格分离集合 $\mathscr{F}_1$ 和 $\mathscr{F}_2$.

定理 1.3.2 设 $\mathscr{F}$ 为 $\mathbb{R}^n$ 中的非空闭凸集, $x^0 \in \mathbb{R}^n$ 且 $x^0 \notin \mathscr{F}$, 则存在 $\mathbb{R}^n$ 中的超平面严格分离集合 $\mathscr{F}$ 和点 x^0.

证明 记 $\Omega := \{y \mid y = x - x^0, x \in \mathscr{F}\}$. 显然, Ω 为非空闭集且 $0 \notin \Omega$. 对任意的 $y^1, y^2 \in \Omega$, 存在 $x^1, x^2 \in \mathscr{F}$ 使得 $y^1 = x^1 - x^0$ 且 $y^2 = x^2 - x^0$, 从而对任意的 $\alpha \in [0, 1]$, 有

$$\alpha y^1 + (1 - \alpha) y^2 = \alpha x^1 + (1 - \alpha) x^2 - x^0.$$

因为 $\mathscr{F}$ 为凸集, 所以 $\alpha x^1 + (1 - \alpha) x^2 \in \mathscr{F}$. 进而, $\alpha y^1 + (1 - \alpha) y^2 \in \Omega$. 因此, Ω 为凸集. 给定任意的 $\delta > 0$, 记 $\mathscr{N}_\delta(0) := \{y \mid y \in \mathbb{R}^n, \|y\|_2 \leqslant \delta\}$. 选取适当的 δ, 使得 $\mathscr{N}_\delta(0) \cap \Omega \neq \varnothing$. 由于 $\mathscr{N}_\delta(0) \cap \Omega$ 为有界闭集，所以连续函数 $\|y\|_2$ 在其上可达到最小值. 设其最小值点为 $\hat{y}$, 则 $\hat{y} \in \Omega$ 并且对任意的 $y \in \Omega$ 都有 $\|\hat{y}\|_2 \leqslant \|y\|_2$. 因此，对任意的 $\varepsilon \in [0, 1]$ 和 $y \in \Omega$ 都有 $\|\hat{y}\|_2 \leqslant \|\varepsilon y + (1 - \varepsilon) \hat{y}\|_2$. 由此进一步可得

$$\varepsilon^2 \|y - \hat{y}\|_2^2 + 2\varepsilon (y - \hat{y})^{\mathrm{T}} \hat{y} \geqslant 0.$$