科学版

研究生教学丛书

最优化方法与程序设计

倪 勤 编著

科学出版社
www.sciencep.com

科学版研究生教学丛书

最优化方法与程序设计

倪　勤　编著

科　学　出　版　社

北　京

内 容 简 介

本书系统地介绍了非线性优化基本理论、方法与程序设计. 主要内容有: 线搜索与信赖域法, 最速下降法与牛顿法, 共轭梯度法, 拟牛顿法, 非线性最小二乘问题的解法, 罚函数法, 可行方向法, 二次规划问题的解法, 序列二次规划法等. 设计的 Matlab 程序有简单线搜索, 解信赖域子问题, FR 共轭梯度法, BFGS 拟牛顿法, 乘子法, 解二次规划的有效集法. 此外本书还介绍 Matlab 工具箱中程序 fmincon 和 linprog 的功能和使用, 在附录中简介线性规划、非线性优化软件、程序的调试和数值试验, 还给出了非线性优化的中英文术语对照表.

本书的主要阅读对象是数学专业的本科生与研究生, 非数学专业的研究生, 对优化方法感兴趣的教师与科学技术人员. 读者需要具备微积分、线性代数和 Matlab 语言方面的初步知识.

图书在版编目(CIP)数据

最优化方法与程序设计/倪勤编著. —北京: 科学出版社, 2009
(科学版研究生教学丛书)
ISBN 978-7-03-024663-9
Ⅰ. 最… Ⅱ. 倪… Ⅲ. 程序设计-最佳化-研究生-教材 Ⅳ. TP311.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 085657 号

责任编辑: 赵 靖 / 责任校对: 郑金红
责任印制: 张克忠 / 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

北京市文林印务有限公司印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2009 年 6 月第 一 版 开本: B5(720×1000)
2009 年 6 月第一次印刷 印张: 12 1/4
印数: 1—3 000 字数: 236 000

定价: 24.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换〈文林〉)

前　言

最优化方法又称数学规划, 它是运筹学中一个重要分支, 也是计算数学的一个重要组成部分. 它在航空航天、地质、工程、物理学、生物学、水文学等自然科学领域和经济学等社会科学领域有着广泛和重要的应用.

本书系统地介绍了最优化理论、方法与程序设计. 在学习与研究了许多非线性优化著作与教材基础上, 我们编写本书的基本思想有以下几个方面:

(1) 我们期望为教学和研究型学校的理工科专业的本科生和研究生提供一本系统地介绍最优化理论、方法与程序设计的教材. 我们希望这本教材既是一本非线性优化理论、方法与程序设计的入门书, 又是一本包含了非线性优化的发展信息和引导文献阅读的简明手册. 本书的主要阅读对象是数学专业的本科生与研究生, 非数学专业的研究生, 对优化方法感兴趣的教师与科技人员. 读者需要具备微积分、线性代数和 Matlab 语言方面的初步知识.

(2) 本书的一个主要特色是优化方法与程序设计技术相结合. 最优化计算方法的研究和应用越来越广泛, 优化方法的理论研究通常需要编程来验证理论结果的可行性和算法的有效性. 一个优化方法的完整学习过程应该是先学优化理论与方法, 再利用计算机某种语言编程算出结果. 由于没有合适的教材与编程的繁杂性, 这个过程通常被浓缩为优化理论与方法的学习. 这样理工科研究生与许多读者在对优化方法进行编程计算时, 基本上是靠自己摸索来学习的. 这样就使得优化方法学习过程常常是不完整的. 本书尝试把优化理论与编程技术相结合, 除了系统介绍一般优化理论和方法外, 给出了有代表性算法的 Matlab 程序. 便于读者既能学习优化理论和算法, 又能掌握基本优化程序设计技巧.

(3) 本书选定的章节涉及了非线性规划的所有基本内容. 为了节省篇幅并给程序设计留下页面, 有些不影响理解本书内容的收敛性定理证明省略了. 省略的证明均给出了参考文献, 为需要深入学习的读者提供了方便. 有些比较简单的定理或定理中部分结论作为习题, 这样既节省了篇幅, 又让读者得到了适当的练习. 我们给出了简单线搜索、解信赖域子问题、FR 共轭梯度法、BFGS 拟牛顿法、乘子法、解二次规划的有效集法的 Matlab 程序. 这些程序简洁易读, 并自成系统. 这些程序可作为模块, 供读者学习与修改. 此外还介绍了 Matlab 优化工具箱中解一般约束优化问题的程序 fmincon 的功能和使用, 这些程序的原代码是公开的, 因此有兴趣的读者可进行深入的研究. 非线性优化算法中的有些子问题是线性规划, 考虑到完整性, 附录中简单介绍了线性规划及解线性规划问题的程序 linprog 的功能和使用.

(4) 约束优化问题的理论与算法相对无约束要困难得多. 因此, 我们想尽量通过一些有特色的算例来给出方法的思想或解释算法的步骤与细节. 限于篇幅, 有些算例的求解过程并未全部给出, 但中间的结果全部列出, 以便读者验证.

(5) 本书每章最后附加的相关文献评注, 给出了与本章内容相关的发展概况, 重要或有特色的研究成果评注和文献阅读引导, 为读者进一步学习和研究提供了有价值的信息. 每章的习题对读者巩固所学的知识是有帮助的. 有些习题是经过精心设计或挑选的, 能帮助读者加深对优化知识的理解, 或增加优化知识面. 部分习题的含义在附注中给出了说明. 左边加 "*" 的习题有一点难度, 多数是定理的证明, 是为学有余力的读者准备的练习. 习题中给出的编程题是按由浅入深来设计的. 简单的要求是会使用本书中的程序, 进一步的要求是修改书中程序和参数, 并参考附录 3 的内容进行初步数值比较试验, 以及逐步能自编有一定质量的程序. 所选的算例是标准的试验函数及修正.

(6) 本书在提高优化方法的学习兴趣上做了一个尝试. 书中每一章题目的下方都给出了一句能概括该章的本质或与之相关又令人深思或描述一个特殊事件的语句. 期望这个语句给读者带来快乐与思考. 在有些评注部分, 将优化发展史上的著名事件或传说一一道来. 有些事件令人惊奇, 有些事件令人感叹. 此外, 本书遵循简洁的原则, 列入的参考文献尽量少, 不希望给出太多的参考文献而使刚入门的读者望而生畏.

本书在编写出版过程中得到了南京航空航天大学 "十一五" 研究生人才培养规划项目 (KCJS0817) 的资助; 南京大学何炳生教授认真审阅了书稿，并提出了宝贵的建议; 淮阴工学院胡平副教授认真阅读了书稿, 提出了很好的建议; 作者的硕士生张丽炜和吴晓丽仔细校对了书稿, 在此一并表示感谢. 作者还要感谢南京航空航天大学理学院及数学系给予的支持和帮助, 感谢夫人藩蓉华给予的理解和支持.

由于作者水平有限, 加上时间仓促, 书中难免出现不妥及疏漏之处, 敬请读者批评指正.

作　者

2008 年 12 月

目　录

第 1 章　最优化基础

— 人类是贪婪的，最优化是贪婪的一件漂亮外衣 —

最优化是一个非常漂亮的名词, 字面上可解释为最佳的和谐状态. 自然界应是和谐与平衡的. 人们逐渐发现, 物理系统往往趋向于极小能量的状态; 化学系统的分子反应中的电子总势能在反应结束时趋于极小; 光线总是按照极短到达时间的路径移动 ······ 随着科学技术的发展, 人们将会发现更多的自然界的和谐状态.

人类一直在追求最佳和谐的生活状态. 人们渴望用最佳方式获得最优惠的报酬, 过上最优、最舒心的生活. 航空公司希望优化人员和班机的组合以达到极小化成本; 投资者期望创建一个最佳投资组合, 使得其既能避免过度的风险, 又能得到较高的利润回报; 产业部门在生产过程中总是追求最大的经济效益. 最优化就是用数学理论与方法及计算机技术来寻找这样一种最佳和谐状态的学科. 它在自然科学、社会科学、工程设计和现代管理等领域有着广泛和重要的应用, 它的研究和发展一直得到广泛的关注.

最优化包含理论、方法和应用等方面. 最优化理论主要讨论所研究问题解的最优性条件、灵敏度分析、解的存在性和一般复杂性等. 而最优化方法包括解所研究问题的各类算法及收敛性等. 最优化的应用则包括算法的实现、算法的程序编制和在实际问题中的应用等. 本书主要讨论连续的非线性最优化问题的基本理论, 解这些问题的各类算法及其性质, 并给出代表性算法的 Matlab 程序设计.

在第 1 章我们首先介绍最优化问题的基本模型和分类, 然后讨论多元函数分析和凸函数分析, 接着给出无约束优化问题的最优性条件和最优化问题的算法结构, 最后简介非线性优化的发展概况和一些重要的参考文献.

1.1　最优化模型及分类

按数学语言来说, 最优化就是求一个给定集合上函数的极值. 几乎所有类型的优化问题都可以形成如下的数学模型: 给定一个集合 X(称为可行集) 和该集合上定义的实值函数 $f(x)$, 求函数在可行集上的最小值

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x), \\ \text{s.t.} \quad & x \in X, \end{aligned}$$

其中 x 称为决策变量. 一般人们按照可行集的性质对优化问题进行一个大概分类. 如果可行集中元素是有限的, 则问题称为组合优化或网络规划; 如果可行集是有限维空间中的一个子集, 则问题称为线性和非线性规划; 如果可行集是依赖于时间的决策序列, 则问题称为动态规划; 如果可行集是无穷维空间中的连续子集 (如集合中的元素是有限维空间中的一条曲线, 由一组常微分方程描述, 而目标函数为一定积分), 则称为最优控制问题.

本书主要讨论较多应用于工程设计中的非线性规划, 它是在一组等式和不等式约束条件下求一个函数的极值问题, 其数学模型为

$$\min \quad f(x), \tag{1.1.1}$$

$$\text{s.t.} \quad c_i(x) = 0, \quad i = 1, \cdots, m_e, \tag{1.1.2}$$

$$c_i(x) \geqslant 0, \quad i = m_e + 1, \cdots, m, \tag{1.1.3}$$

其中 $f(x)$ 及 $c_i(x)(i = 1, \cdots, m)$ 都是定义在 $\mathbf{R}^n$ 上的实值连续函数, 且至少有一个是非线性的. 如果 $m = 0$, 则问题被称为**无约束优化**问题. 如果 m 是一正整数, 则问题被称为**约束优化**问题, 其中 m_e 是介于 0 和 m 之间的整数. 通常 $f(x)$ 被称为**目标函数**, $c_i(x)(i = 1, \cdots, m)$ 被称为**约束函数**. 数学模型中 s.t. 是英文 subject to(满足于) 的缩写. 如果 $m_e = m$, 则问题 (1.1.1)~(1.1.3) 被称为等式约束优化问题. 如果 $c_i(x)(i = 1, \cdots, m)$ 都是线性函数, $f(x)$ 是二次函数, 我们称问题 (1.1.1)~(1.1.3) 为**二次规划**. 在问题 (1.1.1)~(1.1.3) 中, 如果 $f(x), c_i(x)(i = 1, \cdots, m)$ 都是线性函数, 那么问题称为**线性规划**. 本书在附录中简介这一问题.

1.2 多元函数分析

求解非线性规划问题 (1.1.1)~(1.1.3) 的大多数方法都假定目标函数和约束函数连续可微. 本节主要介绍 n 元函数的一阶、二阶导数和 Taylor 展开式, 从而为后面的学习奠定基础.

定义 1.2.1 设 n 元函数 $f(x)$ 对自变量 $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$ 各分量 x_i 的一阶和二阶偏导数为

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i}, \ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j}, \quad i = 1, 2, \cdots, n; j = 1, 2, \cdots, n,$$

那么称向量

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

为函数 $f(x)$ 在 x 处的一阶导数或梯度, 称矩阵

$$\nabla^2 f(x)=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1\partial x_n}\\ \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2\partial x_n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2}\end{bmatrix}$$

为函数 f 在 x 处的二阶导数矩阵或 Hesse 矩阵. 如果 $f(x)$ 梯度的所有分量函数在 x 都连续, 则称 f 在 x 连续可微; 如果 $f(x)$ 的 Hesse 矩阵的各分量函数都连续, 则称 f 在 x 二阶连续可微.

如果 f 在开集 D 的每一点上连续可微, 则称 f 在 D 上一阶连续可微; 如果 $f(x)$ 在开集 D 的每一点上二阶连续可微, 则称 f 在 D 上二阶连续可微.

说明 如果 f 在 x 二阶连续可微, 则

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i\partial x_j}=\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_j\partial x_i},\quad i=1,2,\cdots,n;j=1,2,\cdots,n.$$

这时 $\nabla^2 f(x)$ 是一个对称矩阵.

例 1.2.1 设 $A\in\mathbf{R}^{n\times n}$ 是对称矩阵, $b\in\mathbf{R}^n$, 求二次函数

$$f(x)=\frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax+b^{\mathrm{T}}x$$

在 x 的梯度和 Hesse 矩阵.

解 容易计算出

$$\nabla f(x)=Ax+b,\quad \nabla^2 f(x)=A.$$

定理 1.2.1 设 $f(x)$ 在 $\mathbf{R}^n$ 上二阶连续可微, 则对任意的 n 维向量 x,d 和任意实数 α 有

$$\begin{aligned}&f(x+\alpha d)\\ =&f(x)+\alpha\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d+\alpha^2\int_0^1(1-t)[d^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x+t\alpha d)d]\mathrm{d}t\\ =&f(x)+\alpha\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d+\frac{\alpha^2}{2}d^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x+\xi\alpha d)d,\end{aligned}$$

其中 $\xi\in[0,1]$.

证明 利用一元函数的 Taylor 展开式证明. 令 $\phi(t)=f(x+t\alpha d)$, 则 $\phi'(t)=\alpha\nabla f(x+t\alpha d)^{\mathrm{T}}d,\phi''(t)=\alpha^2 d^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x+t\alpha d)^{\mathrm{T}}d$. 由 $\phi(1)-\phi(0)=\int_0^1\phi'(t)\mathrm{d}t$ 知

$$
\begin{aligned}
&f(x+\alpha d)-f(x)\\
=&\alpha\int_0^1[\nabla f(x+t\alpha d)^{\mathrm{T}}d]\mathrm{d}t=-\alpha\int_0^1[\nabla f(x+t\alpha d)^{\mathrm{T}}d]\mathrm{d}(1-t)\\
=&-\alpha[(1-t)\nabla f(x+t\alpha d)^{\mathrm{T}}d]|_0^1+\alpha\int_0^1(1-t)\mathrm{d}[\nabla f(x+t\alpha d)^{\mathrm{T}}d]\\
=&\alpha\nabla f(x)^{\mathrm{T}}d+\alpha^2\int_0^1(1-t)[d^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x+t\alpha d)d]\mathrm{d}t.
\end{aligned}
$$

由积分第一中值定理得, 存在 $\xi\in[0,1]$ 使得 $\phi(1)-\phi(0)=\phi'(0)+\dfrac{1}{2}\phi''(\xi)$, 得第二个等式. □

1.3 凸集与凸函数

凸集与凸函数在优化方法的理论分析中有重要的作用, 因此在这一节我们将给出凸集和凸函数的定义和基本性质.

定义 1.3.1 设集合 $D\subset\mathbf{R}^n$, 若对于任意 $x,y\in D$, 及任意实数 $\alpha\in[0,1]$, 都有 $\alpha x+(1-\alpha)y\in D$, 则称 D 为**凸集**.

由凸集的定义不难知道凸集的几何意义. 对非空集合 $D\subset\mathbf{R}^n$, 连接 D 中任意 x,y 的线段仍属于该集合, 则该集合 D 是凸集.

下面的引理给出凸集的基本性质.

引理 1.3.1 设 D,D_1,D_2 是凸集, β 是一实数, 那么

(1) D_1,D_2 的交 $D_1\cap D_2$ 是凸集.

(2) 集合 $\beta D=\{y|y=\beta x,x\in D\}$ 是凸集.

(3) D_1 与 D_2 的和集

$$D_1+D_2\equiv\{y|y=x+z,x\in D_1,\ z\in D_2\}$$

也是凸集.

证明 (1) 设 $x,y\in D_1\cap D_2,\alpha\in[0,1]$, 则 $x,y\in D_i(i=1,2)$. 因为 $D_i(i=1,2)$ 是凸集, 所以 $\alpha x+(1-\alpha)y\in D_i(i=1,2)$. 于是 $\alpha x+(1-\alpha)y\in D_1\cap D_2$, 所以 $D_1\cap D_2$ 是凸集.

(2) 设 $y_1,y_2\in\beta D$, 则存在 $x_1,x_2\in D$ 使得 $y_1=\beta x_1,y_2=\beta x_2$. 由 D 是凸集知, 对于任意的 $\alpha\in[0,1]$ 有 $\alpha x_1+(1-\alpha)x_2\in D$, 于是

$$\alpha y_1+(1-\alpha)y_2=\beta(\alpha x_1+(1-\alpha)x_2)\in\beta D,$$

所以 βD 是凸集.

(3) 设 $x,y\in D_1+D_2,\alpha\in[0,1]$, 则存在 $x_i,y_i\in D_i,i=1,2$ 使得 $x=x_1+x_2,y=y_1+y_2$. 因为 D_i 是凸集, 所以 $\alpha x_i+(1-\alpha)y_i\in D_i,i=1,2$. 于是 $\alpha x+(1-\alpha)y=(\alpha x_1+(1-\alpha)y_1)+(\alpha x_2+(1-\alpha)y_2)\in D_1+D_2$, 所以 D_1+D_2 是凸集. □

下面的定义表明由 $\mathbf{R}^n$ 中若干个已知向量可构成一个凸集.

定义 1.3.2 设 $x_i \in \mathbf{R}^n, i = 1, 2, \cdots, k$, 实数 $\lambda_i \geqslant 0$, $\sum_{i=1}^{k} \lambda_i = 1$, 则 $x = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i x_i$ 称为 $x_1, x_2, \cdots, x_k$ 的凸组合.

容易看出, 凸组合也是一个凸集. 有了凸集的概念后, 可以定义凸集上的凸函数.

定义 1.3.3 设函数 $f(x)$ 定义在凸集 $D \subset \mathbf{R}^n$ 上. 若对于任意 $x, y \in D$, 及任意实数 $\alpha \in [0, 1]$, 都有

$$f(\alpha x + (1 - \alpha) y) \leqslant \alpha f(x) + (1 - \alpha) f(y),$$

则称 f 为凸集 D 上的**凸函数**. 若对于任意 $x, y \in D, x \neq y$, 及任意实数 $\alpha \in (0, 1)$, 都有

$$f(\alpha x + (1 - \alpha) y) < \alpha f(x) + (1 - \alpha) f(y),$$

则称 f 为凸集 D 上的严格凸函数. 若 $-f$ 是凸集 D 上的 (严格) 凸函数, 则 f 称为凸集 D 上的 (严格) 凹函数.

将上述条件加强就得到一致凸函数的定义.

定义 1.3.4 设函数 $f(x)$ 定义在凸集 $D \subset \mathbf{R}^n$ 上. 若存在常数 $\eta > 0$, 对任意 $x, y \in \mathbf{R}^n$ 和 $\alpha \in [0, 1]$, 都有

$$f(\alpha x + (1 - \alpha) y) \leqslant \alpha f(x) + (1 - \alpha) f(y) - \frac{1}{2} \alpha (1 - \alpha) \eta \|x - y\|^2,$$

则称 f 为凸集 D 上的一致凸函数.

凸函数有下列性质.

定理 1.3.1 设 $f(x), f_1(x), f_2(x)$ 是凸集 D 上的凸函数, k_1, k_2 是非负实数, β 是任意实数, 则

(1) $k_1 f_1(x) + k_2 f_2(x)$ 也是 D 上的凸函数.

(2) 水平集

$$S(f, \beta) = \{x | x \in D, f(x) \leqslant \beta\}$$

是凸集.

证明 (1) 任取 $x, y \in D, \alpha \in [0, 1]$, 则有

$$f_1(\alpha x + (1 - \alpha) y) \leqslant \alpha f_1(x) + (1 - \alpha) f_1(y), f_2(\alpha x + (1 - \alpha) y) \leqslant \alpha f_2(x) + (1 - \alpha) f_2(y).$$

因此, 由 $k_1 \geqslant 0, k_2 \geqslant 0$ 得

$$k_1 f_1(\alpha x + (1 - \alpha) y) + k_2 f_2(\alpha x + (1 - \alpha) y) \leqslant \alpha (k_1 f_1(x) + k_2 f_2(x)) + (1 - \alpha)(k_1 f_1(y) + k_2 f_2(y)).$$

这表明 $k_1f_1(x)+k_2f_2(x)$ 是 D 上的凸函数.

(2) 设 $x,y\in S(f,\beta),\alpha\in[0,1]$, 于是 $x,y\in D$ 且 $f(x)\leqslant\beta$, $f(y)\leqslant\beta$. 由 D 是凸集得 $\alpha x+(1-\alpha)y\in D$. 这样从 $f(x)$ 是 D 上的凸函数我们推得

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

即 $\alpha x+(1-\alpha)y\in S(f,\beta)$. 由此知 $S(f,\beta)$ 是凸集. □

下面定理给出多元凸函数与一元凸函数之间的一个等价关系.

定理 1.3.2 设 $f(x)$ 定义在凸集 D 上, 对于任意 $x,y\in D$, 令

$$\Phi(t)=f(tx+(1-t)y),\quad t\in[0,1],$$

则

(1) $f(x)$ 为 D 上的凸函数的充要条件是对于任意的 $x,y\in D$, 一元函数 $\Phi(t)$ 为 $[0,1]$ 上的凸函数.

(2) 设 $x\neq y$, 若 $\Phi(t)$ 为 $[0,1]$ 上的严格凸函数, 则 f 为凸集 D 上的严格凸函数.

证明 (1) 必要性. 设 $f(x)$ 是凸集 D 上的凸函数, $x,y\in D,t_1,t_2,\alpha\in[0,1]$, 于是 $0\leqslant\alpha t_1+(1-\alpha)t_2\leqslant1$,

$$\begin{aligned}\Phi(\alpha t_1+(1-\alpha)t_2)&=f[(\alpha t_1+(1-\alpha)t_2)x+(1-(\alpha t_1+(1-\alpha)t_2))y]\\&=f[\alpha(t_1x+(1-t_1)y)+(1-\alpha)(t_2x+(1-t_2)y)]\\&\leqslant\alpha f(t_1x+(1-t_1)y)+(1-\alpha)f(t_2x+(1-t_2)y)\\&=\alpha\Phi(t_1)+(1-\alpha)\Phi(t_2),\end{aligned}$$

所以 $\Phi(t)$ 是 $[0,1]$ 上的凸函数.

充分性. 设 $\Phi(t)$ 是 $[0,1]$ 上的凸函数, 对任意的 $x,y\in D,\alpha\in[0,1]$, 则有

$$\begin{aligned}f(\alpha x+(1-\alpha)y)&=\Phi(\alpha)=\Phi(\alpha\cdot1+(1-\alpha)0)\\&\leqslant\alpha\Phi(1)+(1-\alpha)\Phi(0)=\alpha f(x)+(1-\alpha)f(y),\end{aligned}$$

故 $f(x)$ 是 D 上的凸函数.

对于 (2), 只要把 (1) 的充分性证明中小于等于号换成小于号即可. □

在一般情况下, 判别函数的凸性要通过定义来进行, 这不是一件容易的事情. 如果函数的梯度或 Hesse 矩阵连续, 则判别或验证函数的凸性要相对容易一些. 下面几个定理给出在一阶或二阶连续可微情况下凸函数的等价或充分判别条件.

定理 1.3.3 设在凸集 $D\subset\mathbf{R}^n$ 上 $f(x)$ 一阶连续可微, 则 f 在 D 上为凸函数的充要条件是, 对于任意的 $x,y\in D$ 都有

$$f(y)\geqslant f(x)+\nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x).$$

证明 必要性. 设 $f(x)$ 是 D 上的凸函数, 任取 $x, y \in D, \alpha \in [0,1]$ 有

$$f(\alpha y + (1-\alpha)x) \leqslant \alpha f(y) + (1-\alpha)f(x),$$

即

$$f(x + \alpha(y-x)) \leqslant f(x) + \alpha(f(y) - f(x)).$$

由 Taylor 公式有

$$f(x + \alpha(y-x)) = f(x) + \alpha \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x) + o(\|\alpha(y-x)\|),$$

代入上式得

$$f(y) - f(x) \geqslant \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x) + \frac{o(\|\alpha(y-x)\|)}{\alpha}.$$

上式两端取极限, 并令 $\alpha \to 0$ 有

$$f(y) - f(x) \geqslant \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x).$$

充分性. 任取 $x, y \in D, \alpha \in [0,1]$, 则 $\alpha x + (1-\alpha)y \in D$. 令 $\alpha x + (1-\alpha)y = z$ 有

$$f(x) - f(z) \geqslant \nabla f(z)^{\mathrm{T}}(x-z), \quad f(y) - f(z) \geqslant \nabla f(z)^{\mathrm{T}}(y-z).$$

用 $\alpha, 1-\alpha$ 分别乘上面两式再相加得

$$\alpha f(x) + (1-\alpha)f(y) - f(z) \geqslant 0,$$

即为

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leqslant \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y),$$

故 $f(x)$ 是 D 上的凸函数. □

下面的定理给出函数二阶连续可微时凸函数的等价和充分判别条件.

定理 1.3.4 设在非空开凸集 $D \subset \mathbf{R}^n$ 上 $f(x)$ 二阶连续可微, 则

(1) f 在 D 上为凸函数的充要条件是, 在 D 内任一点 x 处, $f(x)$ 的二阶导数矩阵 $\nabla^2 f(x)$ 半正定.

(2) 若 $f(x)$ 的二阶导数矩阵 $\nabla^2 f(x)$ 正定, 则 f 是 D 内严格凸函数.

证明 (1) 必要性. 任取 $x \in D$ 及 $y \in \mathbf{R}^n (y \neq 0)$, 因为 D 为开集, 所以存在 $\varepsilon > 0$, 当 $\alpha \in [-\varepsilon, \varepsilon]$ 时 $x + \alpha y \in D$. 由定理 1.3.3 有

$$f(x + \alpha y) \geqslant f(x) + \alpha \nabla f(x)^{\mathrm{T}} y,$$

再应用 Taylor 展开式得

$$f(x + \alpha y) = f(x) + \alpha \nabla f(x)^{\mathrm{T}} y + \frac{1}{2}\alpha^2 y^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(x) y + o(\alpha^2),$$

合并上面两式可知

$$y^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x)y + \frac{o(\alpha^2)}{\alpha^2} \geqslant 0.$$

令 $\alpha \to 0$ 取极限得 $y^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x)y \geqslant 0$, 即 $\nabla^2 f(x)$ 是半正定的.

充分性. 任取 $x, y \in D$, 因为 $\nabla^2 f(x)$ 半正定, 所以由 Taylor 展开式得

$$\begin{aligned} f(y) &= f(x) + \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x) + \frac{1}{2}(y-x)^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\xi)(y-x) \\ &\geqslant f(x) + \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x), \end{aligned}$$

其中 $\xi = x + \gamma(y-x), \gamma \in (0,1)$. 由凸集知, ξ 是 D 的内点, 从而上式中不等号成立. 由定理 1.3.3 得 $f(x)$ 是 D 上的凸函数.

(2) 由 (1) 的充分性证明过程知, 当 $\nabla^2 f(\xi)$ 正定, $x \neq y$ 时有

$$f(y) > f(x) + \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x),$$

所以 $f(x)$ 是 D 上的严格凸函数. □

对于一致凸函数有相类似的性质.

定理 1.3.5　(1) 设在凸集 $D \subset \mathbf{R}^n$ 上 $f(x)$ 一阶连续可微, 则 f 为凸集 D 上一致凸函数的充要条件是对任意的 x, $y \in D$ 有

$$(y-x)^{\mathrm{T}}(\nabla f(y) - \nabla f(x)) \geqslant \eta\|y-x\|^2.$$

(2) 设在凸集 $D \subset \mathbf{R}^n$ 上 $f(x)$ 二阶连续可微, 则 f 为凸集 D 上一致凸函数的充要条件是对任意 D 的内点 x, $h \in \mathbf{R}^n$ 有

$$h^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(x)h \geqslant \eta\|h\|^2.$$

证明　(1) 必要性. 由 f 为 D 上一致凸函数知, 对于任意 $x, y \in \mathbf{R}^n$ 和 $\lambda \in (0,1)$,

$$\frac{f(\lambda x + (1-\lambda)y) - f(x)}{1-\lambda} + \frac{f(\lambda x + (1-\lambda)y) - f(y)}{\lambda} + \frac{1}{2}\eta\|x-y\|^2 \leqslant 0.$$

分别令 $\lambda \uparrow 1$ 和 $\lambda \downarrow 0$ 得

$$\begin{aligned} -\nabla f(x)^{\mathrm{T}}(x-y) + f(x) - f(y) + \frac{1}{2}\eta\|x-y\|^2 \leqslant 0, \\ \nabla f(y)^{\mathrm{T}}(x-y) + f(y) - f(x) + \frac{1}{2}\eta\|x-y\|^2 \leqslant 0. \end{aligned}$$

两式相加得

$$(y-x)^{\mathrm{T}}(\nabla f(y) - \nabla f(x)) \geqslant \eta\|y-x\|^2.$$

充分性. 任取 $x, y \in D$, 及整数 $m > 0$, $\lambda_k = \dfrac{k}{m+1}(k = 0, 1, \cdots, m+1)$. 由中值定理知

$$
\begin{aligned}
& f(x+\lambda_{k+1}(y-x))-f(x+\lambda_k(y-x)) \\
=& (\lambda_{k+1}-\lambda_k)\nabla f(x+\lambda_k(y-x)+\theta(\lambda_{k+1}-\lambda_k)(y-x))^{\mathrm{T}}(y-x) \\
=& (\lambda_{k+1}-\lambda_k)\nabla f(x+\xi_k(y-x))^{\mathrm{T}}(y-x) \\
=& \frac{1}{m+1}\nabla f(x+\xi_k(y-x))^{\mathrm{T}}(y-x),
\end{aligned}
$$

其中 $\theta\in(0,1),\xi_k$ 满足 $\lambda_k<\xi_k=\lambda_k+\theta(\lambda_{k+1}-\lambda_k)<\lambda_{k+1}$. 对上式累加得

$$
\begin{aligned}
& f(y)-f(x) \\
=& \sum_{k=0}^{m}[f(x+\lambda_{k+1}(y-x))-f(x+\lambda_k(y-x))] \\
=& \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x)+\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m}[\nabla f(x+\xi_k(y-x))^{\mathrm{T}}(y-x)-\nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x)] \\
=& \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x)+\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m}[\nabla f(x+\xi_k(y-x))-\nabla f(x)]^{\mathrm{T}}(y-x) \\
\geqslant& \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x)+\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m}\frac{1}{\xi_k}\eta\|\xi_k(y-x)\|^2 \\
=& \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x)+\frac{\eta}{m+1}\|y-x\|^2\sum_{k=0}^{m}\xi_k.
\end{aligned}
$$

又因 $m\to\infty$ 时,

$$
\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m}\xi_k>\frac{1}{m+1}\sum_{k=0}^{m}\lambda_k=\frac{1}{(m+1)^2}\sum_{k=0}^{m}k=\frac{m(m+1)}{2(m+1)^2}\to\frac{1}{2},
$$

所以有

$$
f(y)-f(x)\geqslant\nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x)+\frac{1}{2}\eta\|y-x\|^2. \tag{1.3.1}
$$

令 $\alpha\in(0,1),\ \bar{x}=\alpha x+(1-\alpha)y$, 显然 $\bar{x}\in D$. 由 (1.3.1) 知

$$
f(x)-f(\bar{x})\geqslant\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(x-\bar{x})+\frac{1}{2}\eta\|x-\bar{x}\|^2, \tag{1.3.2}
$$

$$
f(y)-f(\bar{x})\geqslant\nabla f(\bar{x})^{\mathrm{T}}(y-\bar{x})+\frac{1}{2}\eta\|y-\bar{x}\|^2. \tag{1.3.3}
$$

对 (1.3.2) 与 (1.3.3) 两端分别乘 α 和 $1-\alpha$, 然后两式相加, 化简得

$$
\alpha f(x)+(1-\alpha)f(y)-f(\alpha x+(1-\alpha)y)\geqslant\frac{1}{2}(1-\alpha)\alpha\eta\|x-y\|^2.
$$

故 $f(x)$ 为凸集 D 上的一致凸函数.