最优化理论与方法

第一章　最优化基础

上海财经大学应用数学系

December 26, 2008

最优化问题数学模型的一般形式为

$$\begin{cases} \min f(x) \\ s.t. \quad c_i(x) = 0, i \in E = \{1, 2, \cdots, l\} \\ \qquad\quad c_i(x) \leq 0, i \in I = \{l+1, l+2, \cdots, l+m\} \\ \qquad\quad x \in R^n. \end{cases} \tag{1.1.1}$$

这里min表示求极小值，s.t.=subject to意思是受限制于$\cdots$，x是n维向量，其分量是$x_1, \cdots, x_n$. 在问题(1.1.1)中称$f(x)$ 为目标函数(objective function), 称$c_i(x)(i \in E \cup I)$为约束函数(constraint functions). 若求极大值,可以将目标函数写成 $min(-f(x))$ ，不等式约束 $c_i(x) \geq 0$ 可以写成$-c_i(x) \leq 0$.

最优化问题数学模型的一般形式

最优化问题数学模型的一般形式为

$$
\begin{cases}
\min f(x) & \\
s.t.\quad c_i(x)=0, i\in E=\{1,2,\cdots,l\} & \\
\qquad\ \ c_i(x)\le 0, i\in I=\{l+1,l+2,\cdots,l+m\} & \\
\qquad\ \ x\in R^n. &
\end{cases}
\tag{1.1.1}
$$

这里min表示求极小值，s.t.=subject to意思是受限制于$\cdots$，x是n维向量，其分量是$x_1,\cdots,x_n$. 在问题(1.1.1)中称$f(x)$ 为目标函数(objective function), 称$c_i(x)(i\in E\cup I)$为约束函数(constraint functions). 若求极大值,可以将目标函数写成 $min(-f(x))$ ，不等式约束 $c_i(x)\ge 0$ 可以写成$-c_i(x)\le 0$.

可行域,可行点

定义1.1.1

若记集合

$$D = \{x | c_i(x) = 0, i \in E; c_i(x) \leq 0, i \in I, x \in R^n\},$$

则称D为问题(1.1.1)的可行域,若$x \in D$,则称x为可行点.

最优化问题(1.1.1)的简单分类

1、 根据可行域D划分: 若$D = R^n$,即x是自由变量,则称问题(1.1.1)为无约束优化问题;否则,$D \subset R^n$,称问题(1.1.1)为约束优化问题.

2、 根据函数的性质划分: 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;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.进一步,若目标函数是二次函数, $c_i(x)(i = 1, \cdots, l + m)$ 是线性函数, 则称问题(1.1.1)为二次规划.

3、 根据可行域的性质划分: 若可行域内的点是有限的,则称(1.1.1)为离散最优化问题; 若可行域内含有无穷多个不可数的点,且可行域内的点可以连续变化,则称(1.1.1)为连续最优化问题. 对于离散优化问题, 若变量均为整数, 则称其为整数规划问题; 若部分变量为整数, 而另一部分变量连续变化,则称其为混合整数规划问题.

最优化问题(1.1.1)的简单分类

1、 根据可行域D划分: 若$D = R^n$,即x是自由变量,则称问题(1.1.1)为无约束优化问题;否则,$D \subset R^n$,称问题(1.1.1)为约束优化问题.

2、 根据函数的性质划分: 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;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.进一步,若目标函数是二次函数, $c_i(x)(i = 1, \cdots, l + m)$ 是线性函数, 则称问题(1.1.1)为二次规划.

3、 根据可行域的性质划分: 若可行域内的点是有限的,则称(1.1.1)为离散最优化问题; 若可行域内含有无穷多个不可数的点,且可行域内的点可以连续变化,则称(1.1.1)为连续最优化问题. 对于离散优化问题, 若变量均为整数, 则称其为整数规划问题; 若部分变量为整数, 而另一部分变量连续变化,则称其为混合整数规划问题.

最优化问题(1.1.1)的简单分类

1、 根据可行域D划分: 若$D=R^n$,即x是自由变量,则称问题(1.1.1)为无约束优化问题;否则,$D\subset R^n$,称问题(1.1.1)为约束优化问题.

2、 根据函数的性质划分: 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;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.进一步,若目标函数是二次函数, $c_i(x)(i=1,\cdots,l+m)$ 是线性函数, 则称问题(1.1.1)为二次规划.

3、 根据可行域的性质划分: 若可行域内的点是有限的,则称(1.1.1)为离散最优化问题; 若可行域内含有无穷多个不可数的点,且可行域内的点可以连续变化,则称(1.1.1)为连续最优化问题. 对于离散优化问题, 若变量均为整数, 则称其为整数规划问题; 若部分变量为整数, 而另一部分变量连续变化,则称其为混合整数规划问题.

最优化问题(1.1.1)的简单分类

4、 根据函数的向量性质划分: 若目标函数为向量函数时, 则称(1.1.1)为多目标规划问题; 若目标函数为数量函数时, 则称(1.1.1)为单目标规划问题.

5、 根据规划问题有关信息的确定性划分: 若目标函数或约束函数具有随机性,也就是问题的表述形式随时间的变化而变化,具有不确定性,这样的优化问题称为随机规划;相应地,另外一类就是目标函数和可行域都是确定的,这样的规划问题称为确定性规划问题.

- 本书主要讨论确定性规划问题.

最优化问题(1.1.1)的简单分类

4、 根据函数的向量性质划分: 若目标函数为向量函数时, 则称(1.1.1)为多目标规划问题; 若目标函数为数量函数时, 则称(1.1.1)为单目标规划问题.

5、 根据规划问题有关信息的确定性划分: 若目标函数或约束函数具有随机性,也就是问题的表述形式随时间的变化而变化,具有不确定性,这样的优化问题称为随机规划;相应地,另外一类就是目标函数和可行域都是确定的,这样的规划问题称为确定性规划问题.

- 本书主要讨论确定性规划问题.

最优化问题(1.1.1)的简单分类

4、 根据函数的向量性质划分: 若目标函数为向量函数时, 则称(1.1.1)为多目标规划问题; 若目标函数为数量函数时, 则称(1.1.1)为单目标规划问题.

5、 根据规划问题有关信息的确定性划分: 若目标函数或约束函数具有随机性,也就是问题的表述形式随时间的变化而变化,具有不确定性,这样的优化问题称为随机规划;相应地,另外一类就是目标函数和可行域都是确定的,这样的规划问题称为确定性规划问题.

- 本书主要讨论确定性规划问题.

实例

例题1.1.1 投资问题

假定国家的下一个五年计划内用于发展某种工业的总投资为b亿元，可供选择兴建的项目共有n个.已知第j个项目的投资为a_j亿元，可得收益为c_j亿元，问应如何进行投资，才能使盈利率（即单位投资可得到的收益）为最高?

解：令决策变量为x_j，则x_j应满足条件

$$x_j(x_j-1)=0.$$

同时x_j应满足约束条件$\sum_{j=1}^{n} a_j x_j \le b$. 目标函数是要求盈利率

$$f(x_1,x_2,\cdots,x_n)=\frac{\sum_{j=1}^{n} c_j x_j}{\sum_{j=1}^{n} a_j x_j}$$

达到最大. 这是一个整数规划问题.

实例

例题1.1.2 厂址选择问题

设有n个市场，第j个市场位置为(p_j, q_j)，它对某种货物的需要量为$b_j, j = 1, \cdots, n$.现计划建立m个仓库，第i个仓库的存储容量为$a_i, i = 1, \cdots, m$.试确定仓库的位置，使各仓库对各市场的运输量与路程乘积之和为最小.

解：设第i个仓库的位置为$(x_i, y_i), i = 1, \cdots, m$，第i个仓库到第j个市场的货物供应量为$z_{ij}, i = 1, \cdots, m, j = 1, \cdots, n$，则第i个仓库到第j个市场的距离为

$$d_{ij} = \sqrt{(x_i - p_j)^2 + (y_i - q_j)^2}.$$

例题1.1.2 厂址选择问题

目标函数为

$$\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} z_{ij}d_{ij} = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} z_{ij}\sqrt{(x_i - p_j)^2 + (y_i - q_j)^2}$$

约束条件为:
（1）每个仓库向各市场提供的货物量之和不能超过它的存储容量;
（2）每个市场从各仓库得到的货物量之和应等于它的需要量;
（3）运输量不能为负数.

实例

例题1.1.2　厂址选择问题

因此，问题的数学模型为：

$$
\begin{cases}
\min & f(x)=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} z_{ij}d_{ij} \\
 & =\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} z_{ij}\sqrt{(x_i-p_j)^2+(y_i-q_j)^2} \\
s.t. & \sum_{j=1}^{n} z_{ij}\le a_i, i=1,\cdots,m, \\
 & \sum_{i=1}^{m} z_{ij}=b_j, j=1,\cdots,n, \\
 & z_{ij}\ge 0, i=1,\cdots,m, j=1,\cdots,n,
\end{cases}
$$

实例

例题1.1.3　曲线拟合问题

在科学实验、工程设计和管理工作中，经常会遇到下述问题：通过实验或实测得到n组数据(t_i, y_i) ，它们可视为平面上的n个点，期望确定一组参数$x = (x_1, \cdots, x_m)^T$, 使曲线$y = \phi(x; t)$最佳逼近这n个点。通常把这一问题归结为如下的优化问题：

$$\min f(x) = \sum_{i=1}^{m} [\phi(x, t_i) - y_i]^2$$

设$x^\star$ 为问题的最优解，则$y = \phi(x^\star, t)$即为通过最小二乘法对n组数据(t_i, y_i)的拟合曲线.

实例

例题1.1.4 砂石运输问题

设有$V(m^3)$ 的砂、石要由甲地运输到乙地，运输前需要先装入一个有底无盖并在底部有滑行器的木箱中，砂、石运到乙地后，从箱中倒出，再继续用空箱装运，不论箱子大小，每装运一箱，需0.1元，箱底和两端的材料费为20元/m^2，箱子两侧材料费为5元/m^2，箱底的两个滑行器与箱子同长，材料费为2.5元/m，问木箱的长、宽、高应各为多少米，才能使运费与箱子的成本费的总和为最小.

解：设木箱的长、宽、高分别为x_1, x_2, x_3, 运费与成本费的总和为w，则上述问题可归结为如下的优化模型：

$$\begin{cases} \min w(x) = 0.1 * V/(x_1x_2x_3) + 20x_1x_2 + 10x_1x_3 + 40x_2x_3 + 5x_1 \\ s.t. \quad x_i > 0, i = 1, 2, 3. \end{cases}$$

例题1.1.4　砂石运输问题

在上述问题中，若要求箱子底与两侧使用废料来做，而废料只有4平方米，其他与上述问题相同，这时问题归结为：

$$\begin{cases} \min w(x) = 0.1 * V/(x_1x_2x_3) + 40x_2x_3 + 5x_1 \\ s.t. \quad \frac{1}{2}x_1x_3 + \frac{1}{4}x_1x_2 \le 1, \\ \qquad\quad x_i > 0, i = 1, 2, 3. \end{cases}$$

一. 线性空间

线性空间定义

设E是一个集合,在此集合上定义加法和数乘运算, 并且运算是封闭的,这样形式的E称为线性空间,其中E中的元素x称为向量.

在n维线性空间中,记n维列向量为

$$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$$

其中T表示转置.

线性空间定义

设E是一个集合,在此集合上定义加法和数乘运算, 并且运算是封闭的,这样形式的E称为线性空间,其中E中的元素x称为向量.

在n维线性空间中,记n维列向量为

$$x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$$

其中T表示转置.

一. 线性空间

向量加法,数乘定义

若x,y 是线性空间E中的两个向量, 通常的加法定义为

$$x + y = (x_1 + y_1, x_2 + y_2, \cdots, x_n + y_n)^T,$$

若λ是一个标量, 通常的数乘定义为:

$$\lambda x = (\lambda x_1, \lambda x_2, \cdots, \lambda x_n)^T$$

一. 线性空间

数乘的性质

$$\lambda(\mu x) = (\lambda\mu)x,$$
$$(\lambda+\mu)x = \lambda x + \mu x,$$
$$\lambda(x+y) = \lambda x + \lambda y.$$

线性组合

设$a_1, a_2, \cdots, a_m$为E中m个向量,称

$$x = \lambda_1 a_1 + \cdots, \lambda_m a_m$$

为$a_1, \cdots, a_m$的线性组合.

线性相关,线性无关

如果存在$\lambda_i \neq 0$(即λ_i不全为零), 使得

$$\lambda_1 a_1 + \cdots, \lambda_m a_m = 0,$$

则称$a_1, a_2, \cdots, a_m$线性相关, 反之则称$a_1, a_2, \cdots, a_m$线性无关.

也就是说, 若

$$\lambda_1 a_1 + \cdots, \lambda_m a_m = 0,$$

则仅有$\lambda_i = 0, i = 1, \cdots, m$.

二. *Euclid*空间（欧氏空间）

所谓欧氏空间，就是在线性空间上定义一个度量。对于n维欧氏空间（记为R^n），向量x与y的内积定义为

$$< x, y >= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = x^T y.$$

内积的性质

1, $<x, x> \geq 0$, 且 $<x, x> = 0$的充分必要条件是$x = 0$.
2, $<x, y> = <y, x>$.
3, $<\lambda x + \mu y, z> = \lambda <x, z> + \mu <y, z>$.

范数定义

n维欧氏空间R^n上的范数定义为:

$$|x| = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{\frac{1}{2}} = (<x, x>)^{\frac{1}{2}},$$

即通常意义下的距离,或称为l_2范数.

二. Euclid空间（欧氏空间）

范数的性质

1, $\|x\| \geq 0$, 且$\|x\| = 0$的充分必要条件是$x = 0$.
2, $\|x\| \geq 0$, 且$\|x\| = 0$的充分必要条件是$x = 0$.
3, $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$(三角不等式). 以及Cauchy-Schwarz不等式

$$| < x, y > | \leq \|x\| \|y\|,$$

且等号成立的充分必要条件是：x与 y 共线，即存在λ，使得

$$x = \lambda y.$$

将该不等式写成分量形式为:

$$|\sum_{i=1}^{n} x_i y_i| \leq (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)^{\frac{1}{2}} (\sum_{i=1}^{n} y_i^2)^{\frac{1}{2}}$$

矩阵定义

称

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

为$m \times n$阶矩阵，记为$A = A_{m \times n}$.

分块矩阵

对于矩阵A，可以进行分块，即

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix},$$

其中A_{11}为$m_1 \times n_1$, A_{12}为$m_1 \times n_2$, A_{21}为$m_2 \times n_1$, A_{22}为$m_2 \times n_2$阶矩阵，且$m_1 + m_2 = m, n_1 + n_2 = n$.这里特别提到两种特殊的分块矩阵，按列分块

$$A = [P_1, P_2, \cdots, P_n], P_j = \begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{pmatrix}$$

分块矩阵

和按行分块

$$A=\begin{pmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ \vdots \\ a_m^T \end{pmatrix}, a_i^T=(a_{i1},a_{i2},\cdots,a_{in}).$$

矩阵A的秩记为$rank(A)$.若

$$rank(A)=\min\{m,n\}$$

时，则称矩阵A是满秩的.若$m<n$,则称为行满秩，若$m>n$,则称为列满秩.当若$m=n$时，则矩阵为n阶非奇异方阵.

矩阵非奇异的充分必要条件是：$\det(A)\neq 0$.

三. 矩阵

对称矩阵,正定矩阵

若A为$n \times n$阶矩阵，若A满足

$$A^T = A,$$

则称A为对称矩阵.若对于一切$x \neq 0$,均有

$$x^T A x > 0,$$

则称A为正定对称矩阵.若对一切x,均有

$$x^T A x \geq 0,$$

则称A为半正定矩阵.

多元函数分析

定义1.3.1

设 n 元函数$f(x)$对自变量$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$的各分量x_i的偏导数$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i}, i=1,\cdots,n$ 都存在，则称函数$f(x)$在 x 处一阶可导，并称向量：

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

为函数$f(x)$在 x 处的一阶倒数或梯度，记$g(x)=\nabla f(x)$（$g(x)$为列向量）。

定义1.3.2

设 n 元函数$f(x)$自变量$x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$的各分量x_i的二阶偏导数$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j}, i=1,\cdots,n, j=1,\cdots,n$都存在，则称函数$f(x)$在点 x 处二阶可导，并称矩阵

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

为$f(x)$在x处的二阶导数或Hessian矩阵.

多元函数分析

记为$\nabla^2 f(x)$, 即

$$\nabla^2 f(x) = \left(\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{n\times n}.$$

有时记为$G(x)$.

若$f(x)$对x各变元的所有二阶偏导数都连续，则

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_j \partial x_i},$$

此时$\nabla^2 f(x)$为对称矩阵。

例1.3.1

设$A\in R^{n\times n}$为对称矩阵，$b\in R^n, c\in R^1$,求
(1)线性函数$f(x)=b^Tx$的梯度和Hessian 矩阵,
(2)二次函数$f(x)=x^TAx+b^Tx+c$的梯度和Hessian 矩阵.

解:(1) $f(x)=b^Tx=b_1x_1+b_2x_2+\cdots+b_nx_n,$
所以
$$\frac{\partial f}{\partial x_k}=b_k,\quad k=1,2,\cdots,n, \qquad (*)$$
因此
$$\bigtriangledown f(x)=(b_1,b_2,\cdots,b_n)^T=b.$$
对$(*)$式再求导数,得到
$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_k\partial x_l}=0,\quad k,l=1,2,\cdots,n,$$

因此得到$\bigtriangledown^2 f(x)=0$.
(2)令$f^{'}(x)=x^TAx$,于是

$$f^{'}(x)=x^TAx=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_ix_j,$$

因此

$$\begin{aligned}\frac{\partial f^{'}}{\partial x_k} &= (\textstyle\sum_{i=1,i\neq k}^{n}(\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_ix_j)+\sum_{j=1,j\neq k}^{n}a_{kj}x_kx_j+a_{kk}x_k^2)' \\ &= \textstyle\sum_{i=1,i\neq k}^{n}a_{ik}x_i+\sum_{j=1,j\neq k}^{n}a_{kj}x_j+2a_{kk}x_k \\ &= \textstyle\sum_{i=1}^{n}a_{ik}x_i+\sum_{j=1}^{n}a_{kj}x_j, \quad k=1,2,\cdots,n,\end{aligned}$$

和

$$\frac{\partial^2 f^{'}}{\partial x_k \partial x_l}=a_{lk}+a_{kl}, \quad k,l=1,2,\cdots,n,$$

所以梯度为

$$\begin{aligned}\nabla f'(x) &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} + \\ & \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \qquad (**) \\ &= A^T x + Ax\end{aligned}$$

所以梯度为其Hesse矩阵为

$$
\begin{aligned}
\nabla^2 f'(x) &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \\
&= A^T + A.
\end{aligned} \tag{$***$}
$$

因为A为对称矩阵，即$A^T=A$,则$(**)$式和$(***)$式可以写成

$$\bigtriangledown f^{'}(x)=2Ax,$$

$$\bigtriangledown^2 f^{'}(x)=2A.$$

因此

$$\bigtriangledown f(x)=2Ax+b,$$

$$\bigtriangledown^2 f(x)=2A.$$

多元函数分析

定义1.3.3

设向量函数$F(x)=(f_1(x),f_2(x),\cdots,f_m(x))^T$的各分量函数$f_i(x)(i=1,\cdots,m)$对自变量$x=(x_1,\cdots,x_n)^T$各分量的偏导数

$$\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j},\quad i=1,\cdots,m,\quad j=1,\cdots,n$$

都存在，则称$F(x)$在点x处一阶可导，并称矩阵

$$F'(x)=\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

为向量函数$F(x)$在x处的雅可比(Jacobi)矩阵.

与导数相关的另一个概念是方向导数, n元函数的方向导数在非线性规划问题的研究中具有非常重要的作用,下面,我们借助于一元函数的一阶和二阶导数,导出n 元函数的一阶和二阶方向导数. 首先，根据多元复合函数的求导法则，导出一元函数

$$\phi(a) = f(x + ad), \quad a \in R^1, x, d \in R^n$$

的一阶、二阶导数.
令

$$u = x + ad = (x_1 + ad_1, x_2 + ad_2 + \cdots, x_n + ad_n)^T = (u_1, \cdots, u_n)^T,$$

则

$$
\begin{aligned}
\phi'(a) &= \frac{\partial f(u)}{\partial u_1}\frac{du_1}{da} + \cdots + \frac{\partial f(u)}{\partial u_n}\frac{du_n}{da} \\
&= \frac{\partial f(u)}{\partial u_1} d_1 + \cdots + \frac{\partial f(u)}{\partial u_n} d_n \\
&= \nabla f(u)^T d \\
&= \nabla f(x+ad)^T d,
\end{aligned}
\tag{1.3.1}
$$

多元函数分析

$$
\begin{aligned}
\phi''(a) &= (\frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_1^2}d_1 + \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_1 \partial u_2}d_2 + \cdots + \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_1 \partial u_n}d_n)d_1 \\
&\quad (\frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_2 \partial u_1}d_1 + \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_2^2}d_2 + \cdots + \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_2 \partial u_n}d_n)d_2 \\
&\quad + \cdots \\
&\quad (\frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_n \partial u_1}d_1 + \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_n \partial u_2}d_2 + \cdots + \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_n^2}d_n)d_n \\
&= (d_1, d_2, \cdots d_n) \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_1^2} & \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_1 \partial u_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_1 \partial u_n} \\ \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_2 \partial u_1} & \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_2 \partial u_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_2 \partial u_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_n \partial u_1} & \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_n \partial u_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(u)}{\partial u_n^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix} \\
&= d^T \nabla^2 f(x+ad)d.
\end{aligned} \tag{1.3.2}
$$

定义1.3.4

对于任意给定的$d \neq 0$,若极限

$$\lim_{a\to 0^+} \frac{f(\bar{x}+ad)-f(\bar{x})}{a\|d\|}$$

存在，则称该极限值为函数$f(x)$在$\bar{x}$处沿方向d的一阶方向导数，简称为方向导数，记为$\frac{\partial}{\partial d}f(\bar{x})$,即

$$\frac{\partial}{\partial d}f(\bar{x}) = \lim_{a\to 0^+} \frac{f(\bar{x}+ad)-f(\bar{x})}{a\|d\|} \tag{1.3.3}$$

如果按上述定义求方向导数的话相当繁琐，下面给出方向导数的另一种表达式。

定理1.3.1

若函数$f(x)$具有连续的一阶偏导数，则它在$\bar{x}$处沿方向d的一阶方向导数为

$$\frac{\partial}{\partial d}f(\bar{x}) =< \nabla f(\bar{x}), \frac{d}{\|d\|} >= \frac{1}{\|d\|}d^T\nabla f(\bar{x}). \tag{1.3.4}$$

证明：记$\bar{x}=(\bar{x}_1,\bar{x}_2,\cdots,\bar{x}_n)^T, d=(d_1,\cdots,d_n)^T$,考虑单变量函数

$$\phi(a)=f(\bar{x}+ad),$$

由定理条件知$\phi(a)$可微，由式(1.3.1)可得

$$\phi'(a)=d^T\nabla f(\bar{x}+ad),$$

当$a=0$时，有

$$\phi'(0)=d^T\nabla f(\bar{x}). \tag{1.3.5}$$

另一方面，由式(1.3.3)(1.3.5)可得:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x}) &= \lim_{a\to 0^+} \frac{f(\bar{x}+ad)-f(\bar{x})}{a\|d\|} \\
&= \frac{1}{\|d\|} \lim_{a\to 0^+} \frac{\phi(a)-\phi(0)}{a} \\
&= \frac{1}{\|d\|} \phi'(0) \\
&= \frac{1}{\|d\|} d^T \nabla f(\bar{x})
\end{aligned}
$$

方向导数的几何意义

函数$f(x)$ 在$\bar{x}$处沿d方向的变化率.若$\frac{\partial f}{\partial d} > 0$,则沿着方向d增加时,函数值上升,此时,也称d为上升方向. 若$\frac{\partial f}{\partial d} < 0$, 则称d是下降方向.

由式(1.3.4)和Cauchy-Schwarz不等式得到

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial d}f(\bar{x}) &= <\nabla f(\bar{x}), \frac{d}{\|d\|}> \\ &\leq \|\nabla f(\bar{x})\|\|\frac{d}{\|d\|}\| \\ &= \|\nabla f(\bar{x})\|.\end{aligned}$$

特别当$d=\nabla f(\bar{x})$时,有

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial d}f(\bar{x}) &= <\nabla f(\bar{x}), \frac{d}{\|d\|}> \\ &= <\nabla f(\bar{x}), \frac{\nabla f(\bar{x})}{\|\nabla f(\bar{x})\|}> \\ &= \|\nabla f(\bar{x})\|.\end{aligned}$$

结合上面两式,$d=\nabla f(\bar{x})$是在$\bar{x}$处使得方向导数达到最大的方向,称其为最速上升方向.

同理可得$\frac{\partial}{\partial d}f(\bar{x}) \geq -\|\nabla f(\bar{x})\|$,当$d = -\nabla f(\bar{x})$时,有

$$\frac{\partial}{\partial d}f(\bar{x}) = -\|\nabla f(\bar{x})\|,$$

因此称$d = -\nabla f(\bar{x})$ 为$\bar{x}$处的最速下降方向(direction of steepest descent).

下面介绍二阶方向导数.

定义1.3.5

对于任意给定的$d \neq 0$,若极限

$$\lim_{a \to 0^+} \frac{\frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x} + ad) - \frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x})}{a\|d\|}$$

存在，则称该极限值为函数$f(x)$在$\bar{x}$处沿方向d的二阶方向导数,记为$\frac{\partial^2}{\partial d^2} f(\bar{x})$,即

$$\frac{\partial^2}{\partial d^2} f(\bar{x}) = \lim_{a \to 0^+} \frac{\frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x} + ad) - \frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x})}{a\|d\|}.$$

定理1.3.2

若函数$f(x)$具有连续的二阶偏导数，则它在$\bar{x}$处沿方向d的二阶方向导数为

$$\frac{\partial^2}{\partial d^2} f(\bar{x}) = \frac{1}{\|d\|^2} d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d.$$

证明:考虑单变量函数

$$\phi(a) = f(\bar{x} + ad),$$

由定理条件及式(1.3.2)可得:

$$\phi''(a) = d^T \nabla^2 f(\bar{x} + ad) d.$$

当$a = 0$时，有

$$\phi''(0) = d^T \nabla^2 f(\bar{x}) d.$$

另一方面，由定理(1.3.1)的证明过程有:

$$\frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x}) = \frac{1}{\|d\|} \phi'(0),$$

$$\frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x} + ad) = \frac{1}{\|d\|} \phi'(a),$$

因此有:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial d^2} f(\bar{x}) &= \lim_{a \to 0^+} \frac{\frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x}+ad) - \frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x})}{a\|d\|} \\
&= \frac{1}{\|d\|^2} \lim_{a \to 0^+} \frac{\phi'(a) - \phi'(0)}{a} \\
&= \frac{1}{\|d\|^2} \phi''(0)
\end{aligned}$$

二阶方向导数的几何意义: 描述函数$f(x)$在$\bar{x}$处沿方向d的凹凸性和弯曲的程度.

n元函数的泰勒展开式在非线性规划的理论分析中起着重要的作用，关于n元函数的泰勒展开式，成立如下定理.

定理1.3.3

(1)设函数$f(x): R^n \to R^1$, 若$f(x)$在点$\bar{x}$的某个邻域$N(\bar{x})$内一阶连续可微, 则存在$\theta \in (0,1)$使得

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x} + \theta(x - \bar{x}))^T (x - \bar{x}), \ x \in N(\bar{x}).$$

(2)设函数$f(x): R^n \to R^1$, 若$f(x)$在点$\bar{x}$的某个邻域$N(\bar{x})$内一阶连续可微, 则

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) + o(\|x - \bar{x}\|), \ x \in N(\bar{x}).$$

多元函数分析

定理1.3.3

(3)函数$f(x): R^n \to R^1$, 若$f(x)$在点$\bar{x}$的某个邻域$N(\bar{x})$内二阶连续可微, 则存在$\theta \in (0,1)$使得

$$\begin{aligned} f(x) &= f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T(x-\bar{x}) \\ &+ \tfrac{1}{2}(x-\bar{x})^T \nabla^2 f(\bar{x}+\theta(x-\bar{x}))(x-\bar{x}),\ \ x \in N(\bar{x}). \end{aligned} \tag{1.3.6}$$

(4)数$f(x): R^n \to R^1$, 若$f(x)$在点$\bar{x}$的某个邻域$N(\bar{x})$内二阶连续可微, 则

$$\begin{aligned} f(x) &= f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T(x-\bar{x}) \\ &+ \tfrac{1}{2}(x-\bar{x})^T \nabla^2 f(\bar{x})(x-\bar{x}) + o(\|x-\bar{x}\|^2),\ \ x \in N(\bar{x}). \end{aligned} \tag{1.3.7}$$

证明:结论(1)(2)留给读者自证，下面证明结论(3)和(4).
(3). 当$x=\bar{x}$时，(1.3.6)显然成立，因此我们仅考虑$x\neq\bar{x}$的情况.
设

$$\phi(a)=f(\bar{x}+ad),$$

其中$d=x-\bar{x}$,由一元函数的泰勒公式有:

$$\phi(a)=\phi(0)+\phi'(0)a+\frac{1}{2}\phi''(\theta)a^2,$$

其中$0<\theta<a$.取$a=1$，得

$$\phi(1)=\phi(0)+\phi'(0)+\frac{1}{2}\phi''(\theta), \tag{1.3.8}$$

证明:结论(1)(2)留给读者自证，下面证明结论(3)和(4).
(3). 当$x=\bar{x}$时，(1.3.6)显然成立，因此我们仅考虑$x\neq\bar{x}$的情况.
设

$$\phi(a)=f(\bar{x}+ad),$$

其中$d=x-\bar{x}$,由一元函数的泰勒公式有:

$$\phi(a)=\phi(0)+\phi'(0)a+\frac{1}{2}\phi''(\theta)a^2,$$

其中$0<\theta<a$.取$a=1$，得

$$\phi(1)=\phi(0)+\phi'(0)+\frac{1}{2}\phi''(\theta), \tag{1.3.8}$$

显然$\phi(1) = f(x), \phi(0) = f(\bar{x})$, 由式(1.3.5)(1.3.2)知

$$\phi'(0) = d^T \nabla f(\bar{x}).$$

$$\phi''(\theta) = d^T \nabla^2 f(\bar{x} + \theta d) d.$$

将以上各式代入(1.3.8)式，便得(1.3.6).

(4) 设

$$\phi(a) = f(\bar{x} + ad)$$

其中$a=\|x-\bar{x}\|$, $d=\frac{x-\bar{x}}{\|x-\bar{x}\|}$, 由一元函数的泰勒公式有:

$$\phi(a)=\phi(0)+\phi'(0)a+\frac{1}{2}\phi''(0)a^2+o(a^2), \qquad (1.3.9)$$

又有:

$$\phi(a)=f(x),\phi(0)=f(\bar{x})$$

$$\phi'(0)a=\nabla f(\bar{x})^T(x-\bar{x}),$$

$$\phi''(0)a^2=(x-\bar{x})^T\nabla^2 f(\bar{x})^T(x-\bar{x}),$$

将以上各式代进(1.3.9)式，即得(1.3.7)式.

在(2)(4)中,若略去高阶无穷小量,则有近似关系式

$$f(x) \approx f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}), \tag{1.3.10}$$

$$f(x) \approx f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T (x - \bar{x}) + \frac{1}{2}(x - \bar{x})^T \nabla^2 f(\bar{x})(x - \bar{x}), \ x \in N(\bar{x}). \tag{1.3.11}$$

通常把(1.3.10)(1.3.11) 的右边分别称为函数$f(x)$在$\bar{x}$处的线性近似(函数)和二次近似(函数).

凸集与凸函数

凸集与凸函数是最优化方法理论分析中较为重要的一部分内容,在本节我们扼要地介绍凸集和凸函数的定义和基本性质.

定义1.4.1

设集合$D \subset R^n$,如果对于任意的$x, y \in D$ 与任意的$a \in [0,1]$有

$$ax + (1-a)y \in D,$$

则称集合D是凸集.(convex set)

凸集与凸函数

凸集的几何意义是:若两个点属于此集合,则这两点连线上的任意一点均属于此集合(见图1.4.1)

凸集与凸函数

定理1.4.1

设$D_1, D_2 \subset R^n$是凸集,$\alpha \in R^1$,则
(1) $D_1 \cap D_2 = \{x|x \in D_1, x \in D_2\}$是凸集.
(2) $\alpha D_1 = \{\alpha x|x \in D_1\}$是凸集.
(3) $D_1 + D_2 = \{x + y|x \in D_1, x \in D_2\}$是凸集.
(4) $D_1 - D_2 = \{x - y|x \in D_1, x \in D_2\}$是凸集.

这个定理的证明可由凸集的定义直接得出,留给读者作为练习.

凸集与凸函数

定理1.4.2

D是凸集的充分必要条件是:对任意的$m \geq 2$,任给$x^{(1)}, \cdots, x^{(m)} \in D$和实数$\alpha_1, \cdots, \alpha_m$,且$\alpha_i \geq 0, i = 1, \cdots, m, \sum_{i=1}^{m} \alpha_i = 1$,均有

$$\alpha_1 x^{(1)} + \cdots + \alpha_m x^{(m)} \in D$$

证明:当$m = 2$时，由凸集的定义,命题显然成立.
假设当$m = k$时命题成立，即当$x^{(i)} \in D, i = 1, 2, , \cdots, k, \alpha_i \geq 0, i = 1, 2, \cdots, k, \sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 1$,有$\sum_{i=1}^{k} \alpha_i x^{(i)} \in D$.
当$m = k + 1$时，$x^{(i)} \in D, i = 1, 2, \cdots, k, k + 1, \alpha_i \geq 0, i = 1, 2, \cdots, k, k + 1, \sum_{i=1}^{k+1} \alpha_i = 1$,有

凸集与凸函数

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{k+1}\alpha_i x^{(i)} &= \sum_{i=1}^{k}\alpha_i x^{(i)} + \alpha_{k+1}x^{(k+1)} \\ &= (\sum_{j=1}^{k}\alpha_j)[\sum_{i=1}^{k}\frac{\alpha_i}{\sum_{j=1}^{k}\alpha_j}x^{(i)}] + \alpha_{k+1}x^{(k+1)}\end{aligned} \tag{1.4.1}$$

由于$\sum_{i=1}^{k}\frac{\alpha_i}{\sum_{j=1}^{k}\alpha_j}=1$,且$\frac{\alpha_i}{\sum_{j=1}^{k}\alpha_j}\geq 0$,由归纳法假设有

$$\sum_{i=1}^{k}\frac{\alpha_i}{\sum_{j=1}^{k}\alpha_j}x^{(i)}\in D \tag{1.4.2}$$

注意到$\sum_{j=1}^{k}\alpha_i+\alpha_{k+1}=1$,由(1.4.1)式和(1.4.2)式及凸集的定义,得到$\sum_{i=1}^{k+1}\alpha_i x^{(i)}\in D$.

凸集与凸函数

定义1.4.2

设D是非空凸集，f是定义在D上的函数，如果对任意的$x^{(1)}, x^{(2)} \in D, \alpha \in (0,1)$,均有

$$f(\alpha x^{(1)} + (1-\alpha)x^{(2)}) \leq \alpha f(x^{(1)}) + (1-\alpha)f(x^{(2)}),$$

则称f为D上的凸函数(convex function).
若对任意的$x^{(1)}, x^{(2)} \in D, \alpha \in (0,1)$,均有

$$f(\alpha x^{(1)} + (1-\alpha)x^{(2)}) < \alpha f(x^{(1)}) + (1-\alpha)f(x^{(2)}),$$

则称f为D上的严格凸函数.

凸集与凸函数

若$-f$为凸函数，则称f为凹函数(concave function),若$-f$为严格凸函数，则称f为严格凹函数.
凸函数的几何意义为：当x为单变量时，凸函数的任意两点间的曲线段总在弦的下方，凹函数总在弦的上方（见图）.
下列函数均为R^n上的凸函数：$(1) f(x) = c^T x$; $(2) f(x) = \|x\|$; $(3) f(x) = x^T Ax$(其中A是对称正定矩阵).

凸集与凸函数

定义1.4.3

称集合

$$D_\alpha = \{x|f(x) \le \alpha,\ x \in D\}$$

为函数f的水平集(level set).

定理1.4.3

若D是非空凸集，f是定义在D上的凸函数，则对任意的$\alpha \in R$,水平集D_α是凸集.

凸集与凸函数

定义1.4.3

称集合

$$D_\alpha = \{x|f(x) \le \alpha,\ x \in D\}$$

为函数f的水平集(level set).

定理1.4.3

若D是非空凸集，f是定义在D上的凸函数，则对任意的$\alpha \in R$,水平集D_α是凸集.

证明：对于任意的$x^{(1)}, x^{(2)} \in D_\alpha$, 即$f(x^{(1)}) \le a, f(x^{(2)}) \le \alpha$, 则对于任意的$\lambda \in (0,1)$,有

$$
\begin{aligned}
f(\lambda x^{(1)} + (1-\lambda)x^{(2)}) &\le \lambda f(x^{(1)}) + (1-\lambda) f(x^{(2)}) \\
&\le \lambda\alpha + (1-\lambda)\alpha = \alpha
\end{aligned}
$$

所以

$$\lambda x^{(1)} + (1-\lambda)x^{(2)} \in D_\alpha$$

凸集与凸函数

下面给出几个凸函数的判别定理.

定理1.4.4

$f(x)$为凸函数的充要条件是对任意的$x, y \in R^n$,一元函数$\varphi(\alpha) = f(x + \alpha y)$是关于$\alpha$的凸函数.

证明：必要性 设$\lambda_1 \geq 0$，$\lambda_2 \geq 0$，且$\lambda_1 + \lambda_2 = 1$，由$\varphi(\alpha)$的定义和$f(x)$的凸性有

$$\begin{aligned}
\varphi(\lambda_1\alpha_1 + \lambda_2\alpha_2) &= f(x + (\lambda_1\alpha_1 + \lambda_2\alpha_2)y) \\
&= f(\lambda_1 x + \lambda_2 x + (\lambda_1\alpha_1 + \lambda_2\alpha_2)y) \\
&= f(\lambda_1(x + \alpha_1 y) + \lambda_2(x + \alpha_2 y)) \\
&\leq \lambda_1 f(x + \alpha_1 y) + \lambda_2 f(x + \alpha_2 y) \\
&= \lambda_1\varphi(\alpha_1) + \lambda_2\varphi(\alpha_2)
\end{aligned}$$

由函数的定义知$\varphi(\alpha)$是凸函数.

充分性 任取$x, y \in R^n$,设$z^1 = x + \alpha_1 y$,$z^2 = x + \alpha_2 y$,

$$
\begin{aligned}
f(\lambda_1 z^1 + \lambda_2 z^2) &= f(\lambda_1(x + \alpha_1 y) + \lambda_2(x + \alpha_2 y)) \\
&= f(x + (\lambda_1\alpha_1 + \lambda_2\alpha_2)y) \\
&= \varphi(\lambda_1\alpha_1 + \lambda_2\alpha_2) \\
&\leq \lambda_1\varphi(\alpha_1) + \lambda_2\varphi(\alpha_2) \\
&= \lambda_1 f(x + \alpha_1 y) + \lambda_2 f(x + \alpha_2 y) \\
&= \lambda_1 f(z^1) + \lambda_2 f(z^2)
\end{aligned}
$$

故知$f(x)$是凸函数.

定理1.4.5

设$D \subset R^n$是非空开凸集，$f: D \subset R^n \to R^1$, 且$f(x)$在D上一阶连续可微，则

(1) $f(x)$是D上的凸函数的充要条件是

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x), \quad \forall x, y, \in D. \tag{1.4.3}$$

(2)$f(x)$是D上的严格凸函数的充要条件是

$$f(y) > f(x) + \nabla f(x)^T (y - x), \quad \forall x, y, \in D, \text{且} x \neq y. \tag{1.4.4}$$

证明：必要性　设$f(x)$是D上的凸函数，则$\forall \alpha \in (0,1)$有

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

故

$$\frac{f(x+\alpha(y-x)) - f(x)}{\alpha} \leq f(y) - f(x). \tag{1.4.5}$$

由泰勒展开式可知

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

将其代入(1.4.5)式得

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

两边关于$\alpha\to 0$取极限，有$\nabla f(x)^T(y-x)\leq f(y)-f(x)$.
充分性　设$f(y)-f(x)\geq\nabla f(x)^T(y-x),\forall x,y\in D,\forall\alpha\in(0,1)$.
取$\overline{x}=\alpha x+(1-\alpha)y$，由于$D$是凸集，故$\overline{x}\in D$。由(1.4.3)式知，对$x,\overline{x}\in D$和$y,\overline{x}\in D$分别有

$$f(\overline{x})+\nabla f(\overline{x})^T(x-\overline{x})\leq f(x),\quad\forall x\in D,\tag{1.4.6}$$

$$f(\overline{x})+\nabla f(\overline{x})^T(y-\overline{x})\leq f(y),\quad\forall y\in D.\tag{1.4.7}$$

凸集与凸函数

对(1.4.6)式乘以α，(1.4.7)式乘以$(1-\alpha)$相加得

$$f(\overline{x}) + \nabla f(\overline{x})^T(\alpha x + (1-\alpha)y - \overline{x}) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y),$$

注意到$\overline{x} = \alpha x + (1-\alpha)y$，于是得

$$f(\overline{x}) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y),$$

即

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq f(x) + (1-\alpha)f(y).$$

上式对任意的$\alpha \in (0,1)$成立，故由定义1.4.2知$f(x)$是凸集D上的凸函数.
类似可证结论(2).

凸集与凸函数

若函数$f(x)$二阶连续可微，则有下面的判别定理.

定理1.4.6

设$D \subset R^n$是非空开凸集，$f : D \subset R^n \to R^1$，且$f(x)$在D上二阶连续可微，则$f(x)$是D上的凸函数的充要条件是$f(x)$的Hessian矩阵$\nabla^2 f(x)$在D上是半正定的.

证明：必要性　任取$\overline{x} \in D$，由D是开凸集知，$\forall x \in D$，存在$\delta > 0$使当$\alpha \in (0, \delta)$时有$\overline{x} + \alpha x \in D$，由于$f(x)$是$D$上的凸函数，由定理1.4.5的结论(1)有

$$f(\overline{x}) + \alpha \nabla f(\overline{x})^T x \leq f(\overline{x} + \alpha x), \quad \forall x \in D. \tag{1.4.8}$$

又由于$f(x)$二阶连续可微，按二阶泰勒展开式有

$$f(\overline{x}+\alpha x)=f(\overline{x})+\alpha\nabla f(\overline{x})^T x+\frac{1}{2}\alpha^2 x^T\nabla^2 f(\overline{x})^T x+o(\|\alpha x\|^2). \tag{1.4.9}$$

将上式代入(1.4.8)得

$$\frac{1}{2}\alpha^2 x^T\nabla^2 f(\overline{x})^T x+o(\|\alpha x\|^2)\geq 0,\quad \forall x\in D.$$

上式两边除以α^2，并令$\alpha\to 0$，使得

$$x^T\nabla^2 f(\overline{x})^T x\geq 0,\quad \forall x\in D, \tag{1.4.10}$$

即$\nabla^2 f(x)$在D上是半正定的.

充分性 设$\nabla^2 f(x)$在任意一点$x \in D$半正定，将$f(x)$在$\overline{x}(\overline{x} \in D)$处泰勒展开

$$f(x) = f(\overline{x}) + \nabla f(\overline{x})^T(x-\overline{x}) + \frac{1}{2}(x-\overline{x})^T \nabla^2 f(\xi)(x-\overline{x}), \quad (1.4.11)$$

其中$\xi = \overline{x} + \theta(x - \overline{x}) = \theta x + (1-\theta)\overline{x}(0 < \theta < 1)$.由于$\theta \in (0,1)$,及$D$是凸集，因而$\xi \in D$,又由条件知$\nabla^2 f(\xi)$半正定，故有$(x-\overline{x})^T \nabla^2 f(\xi)(x-\overline{x}) \geq 0$.由(1.4.11)式可得

$$f(x) - f(\overline{x}) \geq \nabla f(\overline{x})^T(x-\overline{x}).$$

定理1.4.5的结论(1)知$f(x)$是D上的凸函数.

凸集与凸函数

定理1.4.7

设$D \subset R^n$是非空开凸集，$f: D \subset R^n \to R^1$, 且$f(x)$在D上二阶连续可微，如果$f(x)$ 的Hessian矩阵$\nabla^2 f(x)$在D上是正定的.则$f(x)$是D上的严格凸函数，反之如果$f(x)$是严格凸函数，则$\nabla^2 f(x)$在D上是半正定矩阵.

证明：$\forall x, y \in D, x \neq y$，由$f(x)$在x处的泰勒展开式有

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

其中$\xi = x + \theta(y - x), \theta \in (0, 1)$.因为$D$是凸集，故$\xi \in D$，由此，根据$\nabla^2 f(x)$在$D$上的正定性，可知

$$(y - x)^T \nabla^2 f(\xi)(y - x) > 0.$$

代入泰勒展开式有

$$f(y) - f(x) > \nabla f(x)^T (y - x),$$

根据定理1.4.5的结论(2)知$f(x)$是D上的严格凸函数.
又由$f(x)$在D上是严格凸函数知$f(x)$在D上是必凸函数，根据定理1.4.6知$f(x)$的Hessian矩阵$\nabla^2 f(x)$在D上是半正定矩阵.

凸集与凸函数

注

　　值得注意的是由$f(x)$在D上是严格凸函数不能推出$\nabla^2 f(x)$在D上是正定矩阵.例如，一元函数$f(x)=x^4$ 是严格凸函数，$f''(x)=12x^2$,但$f''(0)=0$,即$f''(x)$在$x=0$处不是正定的.

　　凸集分离定理是研究非线性规划最优性条件的理论基础，下面予以介绍.

定义1.4.4

设D_1, D_2是两个非空集合，$\alpha \in R^n, \beta \in R^1$，若有

$$D_1 \subset H^+ = \{x \in R^n | \alpha^T x \geq \beta\},$$

$$D_2 \subset H^- = \{x \in R^n | \alpha^T x \leq \beta\},$$

则称超平面$H = \{x \in R^n | \alpha^T x = \beta\}$分离了集合$D_1$与$D_2$，进而若有$D_1 \cup D_2 \not\subset H$, 则称$H$正常分离了$D_1$与$D_2$.若有

$$D_1 \subset \bar{H}^+ = \{x \in R^n | \alpha^T x > \beta\},$$

$$D_2 \subset \bar{H}^- = \{x \in R^n | \alpha^T x < \beta\},$$

则称H严格分离了D_1与D_2.

定理1.4.8

设$D\subset R^n$是非空闭凸集，$y\in R^n$但$y\notin D$,则
(1)存在唯一的一点$\overline{x}\in D$，使得y到D的距离最小.即有

$$\|\overline{x}-y\|=\inf\{\|x-y\|,x\in D\}>0.$$

(2)$\overline{x}$是y到D的最小距离点的充要条件是

$$(x-\overline{x})^T(\overline{x}-y)\geq 0,\quad \forall x\in D.$$

凸集与凸函数

证明:(1)设有单位球$S=\{s \mid \|s\| \le 1, s \in R^n\}$,取充分大的$\mu > 0$可使

$$D \cap (y + \mu S) \neq \varnothing.$$

注意到D是闭集，$y+\mu S$是有界闭集，故$D \cap (y+\mu S)$是非空有界闭集.因此，连续函数

$$f(x) = \|y - x\|$$

在$D \cap (y+\mu S)$上取到最小值.设这个最小值在点$\overline{x} \in D \cap (y+\mu S)$上达到，则$\overline{x}$是$y$到$D$的距离最小的点。

凸集与凸函数

现证点$\overline{x}$的唯一性.设有$\widetilde{x} \in D, \widetilde{x} \neq \overline{x}$,使

$$\|y-\widetilde{x}\| = \|y-\overline{x}\| = \gamma,$$

则

$$\|y-\frac{\overline{x}+\widetilde{x}}{2}\| \leq \frac{1}{2}\|y-\overline{x}\| + \frac{1}{2}\|y-\widetilde{x}\| = \gamma.$$

由D是凸集知$\frac{\overline{x}+\widetilde{x}}{2} \in D$，及$\gamma$是最小距离，故上式等号成立，从而存在$\lambda \in R^1$，必有

$$y-\overline{x} = \lambda(y-\widetilde{x}).$$

又由于$\|y-\overline{x}\| = \|y-\widetilde{x}\| = \gamma$，所以$|\lambda| = 1$.若$\lambda = -1$，则由$y-\overline{x} = -y+\widetilde{x}$知$y = \frac{\overline{x}+\widetilde{x}}{2} \in D$，这与$y \notin D$ 矛盾.因而$\lambda = 1$，即有$\widetilde{x} = \overline{x}$,$\overline{x}$的唯一性得证.

凸集与凸函数

(2)充分性　对任意的$x \in D$,有

$$\begin{aligned}\|x-y\|^2 &= \|x-\overline{x}+\overline{x}-y\|^2 \\ &= \|x-\overline{x}\|^2+\|\overline{x}-y\|^2+2(x-\overline{x})^T(\overline{x}-y).\end{aligned}$$

由于$\|x-\overline{x}\|^2>0$及$(x-\overline{x})^T(\overline{x}-y)\geq 0$，从上式有

$$\|x-y\|^2>\|\overline{x}-y\|^2,\quad \forall x\in D,$$

即$\overline{x}$为最小距离点.

必要性　由$\overline{x}$是y到D距离最小的点，知

$$\|\overline{x}-y\|\leq\|x-y\|,\quad \forall x\in D,$$

或等价地有

$$\|\overline{x}-y\|^2\leq\|x-y\|^2,\quad \forall x\in D. \tag{1.4.12}$$

由于$\overline{x}\in D$及D是凸集，所以，对任意的$\alpha\in(0,1)$，有

$$\overline{x}+\alpha(x-\overline{x})=\alpha x+(1-\alpha)\overline{x}\in D,\quad \forall x\in D.$$

凸集与凸函数

用上式代替(1.4.12)中的x，则得

$$\begin{aligned}\|\overline{x}-y\|^2 &\leq \|y-\overline{x}-\alpha(x-\overline{x})\|^2\\ &= \|y-\overline{x}\|^2+\alpha^2\|x-\overline{x}\|^2-2\alpha(y-\overline{x})^T(x-\overline{x}).\end{aligned}$$

从上式可得

$$\alpha^2\|x-\overline{x}\|^2-2\alpha(y-\overline{x})^T(x-\overline{x}) \geq 0, \quad \forall\alpha\in(0,1).$$

将上式两端同除以α，并令$\alpha\to 0$，便得

$$(x-\overline{x})^T(\overline{x}-y) \geq 0, \quad \forall x\in D.$$

定理1.4.9(点与凸集的分离定理)

设$D \subset R^n$是非空闭凸集，$y \in R^n$但$y \notin D$.则存在$\alpha \in R^n$但$\alpha \neq 0, \beta \in R^1$，使得

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

即存在超平面$H = \{x | \alpha^T x = \beta, x \in R^n\}$严格分离$y$与$D$.

证明：由D是闭凸集，$y \notin D$及定理1.4.8知，存在唯一的最小距离点$\overline{x} \in D$，使得

$$(x - \overline{x})^T(\overline{x} - y) \geq 0, \quad \forall x \in D$$

成立，上式也即

$$x^T(y - \overline{x}) \leq \overline{x}^T(y - \overline{x}), \quad \forall x \in D, \tag{1.4.13}$$

而

$$\|y - \overline{x}\|^2 = (y - \overline{x})^T(y - \overline{x}) = y^T(y - \overline{x}) - \overline{x}^T(y - \overline{x}).$$

由(1.4.13)式，得

$$\|y-\overline{x}\|^2 \leq y^T(y-\overline{x}) - x^T(y-\overline{x}), \quad \forall x \in D.$$

令$\alpha = y - \overline{x}$，显然，$\alpha \neq 0$，则上式成为

$$0 < \|\alpha\|^2 \leq y^T\alpha - x^T\alpha, \quad \forall x \in D,$$

即$\alpha^T x < \alpha^T y, \forall x \in D$.令$\beta = \sup\{\alpha^T x | x \in D\}$，立即得

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

即超平面$H = \{x|\alpha^T x = \beta, x \in R^n\}$严格分离$y$与$D$.