



等式约束最小化

Equality Constrained Minimization · Chapter 10

梁经纬 Jingwei Liang

Institute of Natural Sciences
School of Mathematical Sciences

Lecture 05: 等式约束最小化

2026 年秋季学期

饮水思源 · 爱国荣校

本讲内容

回顾与问题结构 前序知识
线性等式、KKT 条件、原始变量与对偶变量



三种求解视角 §10.1
KKT 系统、消元以及求解对偶问题



可行初始点 Newton 法 §10.2
可行方向、Newton decrement 与收敛分析

不可行初始点 Newton 法 §10.3
原始-对偶残差、残差线搜索与凸-凹博弈

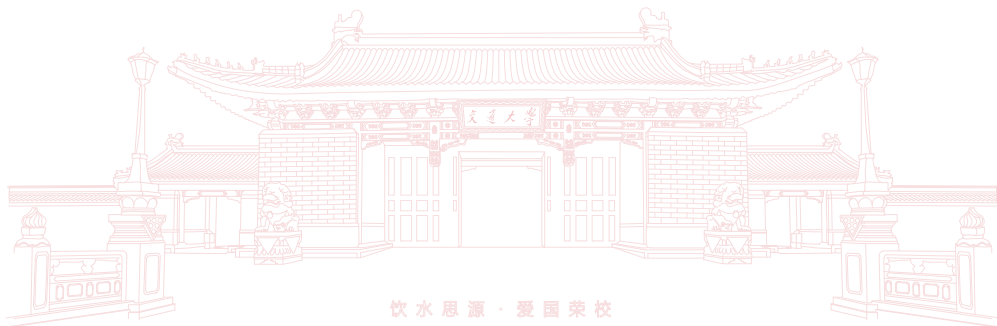


计算实现 §10.4
 LDL^T 、Schur 补、稀疏性与块结构

理论: 把 KKT 方程作为非线性方程组;
算法: 用 Newton 步同时修正最优性与可行性;
实现: 利用问题结构降低每步计算量。

01

前序知识与问题结构



饮水思源 · 爱国荣校

与前面课程的连接

Lecture 04

对偶、共轭函数、KKT 条件与
Slater 条件

Lecture 02

最小二乘、正则化、残差与矩阵结构

与前面课程的连接

Lecture 04

对偶、共轭函数、KKT 条件与 Slater 条件

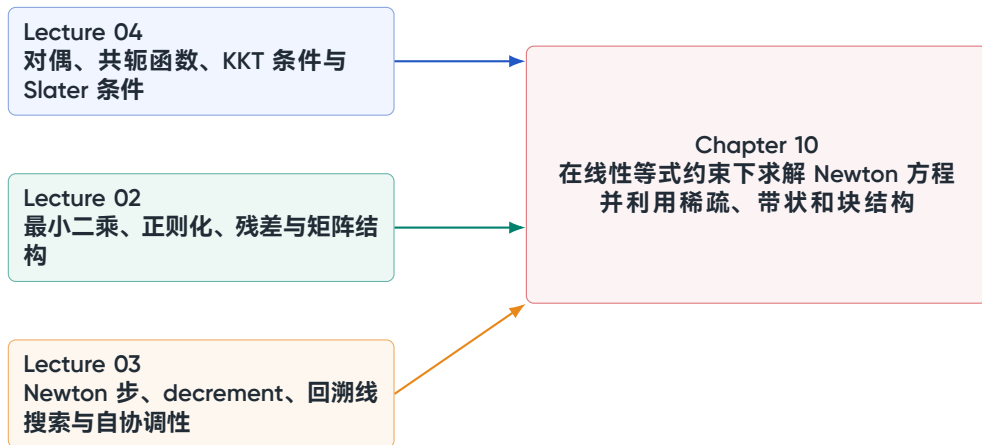
Lecture 02

最小二乘、正则化、残差与矩阵结构

Lecture 03

Newton 步、decrement、回溯线搜索与自协调性

与前面课程的连接



本讲不重新证明凸性与无约束 Newton 法，而是把这些结论扩展到仿射可行集。

课程内部回顾; Boyd & Vandenberghe, Chapters 5, 6, 9, and 10

线性等式约束的角色

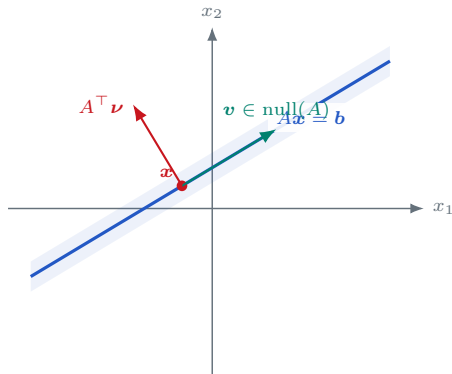
等式约束通常表达必须精确成立的守恒关系或动态关系：

- ▣ 质量、能量与资金平衡；
- ▣ 网络节点的流量守恒；
- ▣ 状态空间模型中的动态方程；
- ▣ 矩阵变量的迹、矩等精确条件。

统一写成

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{p \times n}, \quad \text{rank } A = p < n.$$

满行秩表示约束独立； $p < n$ 表示可行集仍有 $n - p$ 个自由方向。



可行方向沿直线； $A^T \nu$ 垂直于可行集。

维度与两个残差

设 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $A \in \mathbb{R}^{p \times n}$, $p < n$ 。本讲反复使用

$$\nabla f(x) \in \mathbb{R}^n, \quad \nabla^2 f(x) \in \mathbb{S}^n, \quad \nu \in \mathbb{R}^p.$$

原始残差 (primal residual)

$$r_{\text{pri}} = Ax - b \in \mathbb{R}^p.$$

它衡量线性等式没有满足多少。

对偶残差 (dual residual)

$$r_{\text{dual}} = \nabla f(x) + A^\top \nu \in \mathbb{R}^n.$$

它衡量梯度是否落在约束法向空间中。



课程内部维度回顾; Boyd & Vandenberghe, §10.1 and §10.3.1

应用例 1: 微电网功率平衡

三个设备的功率设定为 x_i ，必须满足总需求 b :

$$\underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3}{\text{minimize}} \quad \sum_{i=1}^3 \frac{c_i}{2} (x_i - d_i)^2, \quad \text{subject to} \quad x_1 + x_2 + x_3 = b.$$

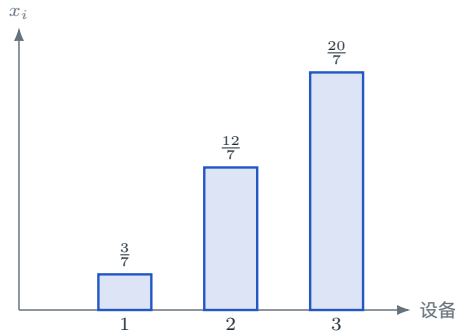
取 $c = (1, 2, 4)$ 、 $d = (1, 2, 3)$ 、 $b = 5$ 。KKT 条件为

$$c_i(x_i - d_i) + \nu = 0, \quad \sum_i x_i = 5.$$

从而

$$\nu^* = \frac{4}{7}, \quad \mathbf{x}^* = \left(\frac{3}{7}, \frac{12}{7}, \frac{20}{7} \right).$$

边际代价 $c_i(x_i - d_i)$ 在最优点全部等于 $-\nu^*$ 。



$\sum_i x_i^* = 5$; $-\nu^*$ 是系统平衡的边际代价。

自编数值例；模型参见 Boyd & Vandenberghe, Example 10.1

从无约束 Newton 法到 KKT 方程

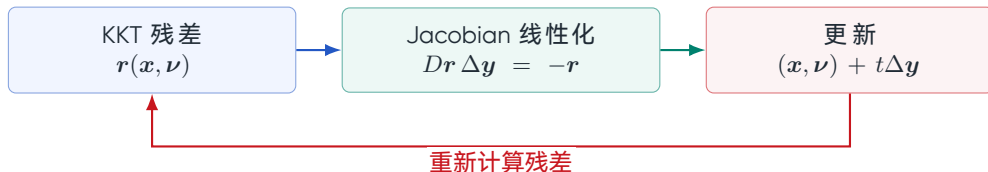
Lecture 03: 无约束问题

$\nabla f(x^*) = 0, \quad \nabla^2 f(x) \Delta x = -\nabla f(x).$
Newton 法线性化一个 n 维驻点方程。

本讲：等式约束问题

$$\begin{cases} Ax^* = b, \\ \nabla f(x^*) + A^\top \nu^* = 0. \end{cases}$$

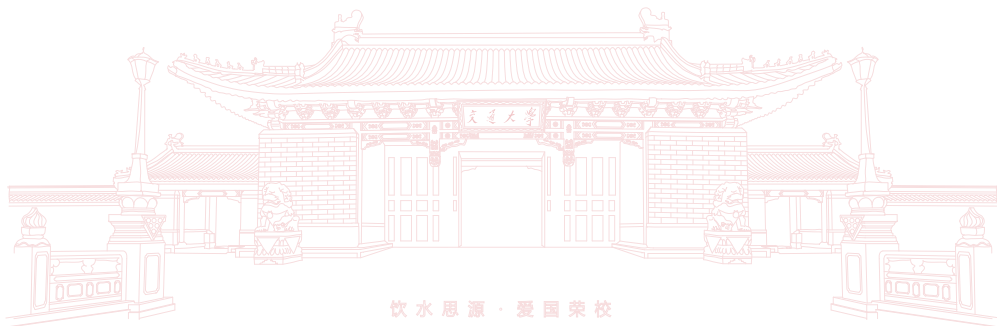
Newton 法线性化 $n + p$ 维 KKT 方程。



课程内部回顾; Boyd & Vandenberghe, §§10.2–10.3

02

基本问题与三种求解视角



等式约束凸优化

基本问题

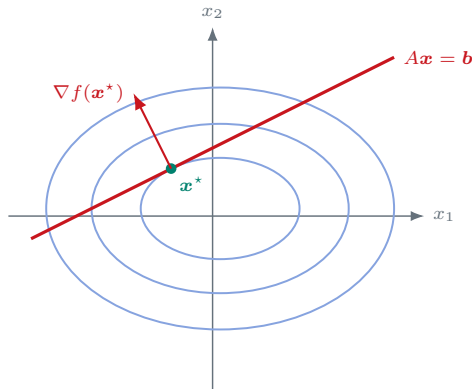
$$\underset{x \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} \quad f(x)$$

$$\text{subject to} \quad Ax = b,$$

其中 f 凸且二阶连续可微, $\text{dom } f$ 为开集, $A \in \mathbb{R}^{p \times n}$ 且 $\text{rank } A = p < n$ 。

假设最优解存在, 并记

$$p^* = f(x^*) = \inf\{f(x) \mid Ax = b\}.$$



最小等值线与仿射可行集相切。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.1, equations (10.1)–(10.2)

KKT 最优性条件

对于凸可微目标和仿射等式, $\mathbf{x}^* \in \text{dom } f$ 最优当且仅当存在 $\boldsymbol{\nu}^* \in \mathbb{R}^p$ 使

$$\begin{array}{ll} A\mathbf{x}^* - \mathbf{b} = 0 & \text{原始可行性,} \\ \nabla f(\mathbf{x}^*) + A^\top \boldsymbol{\nu}^* = 0 & \text{对偶可行性.} \end{array}$$

几何解释

$\nabla f(\mathbf{x}^*) \in \text{range}(A^\top)$, 因此梯度与所有可行方向 $\mathbf{v} \in \text{null}(A)$ 正交。

方程解释

这是 $n + p$ 个方程, 未知量为 $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ 与 $\boldsymbol{\nu}^* \in \mathbb{R}^p$ 。非线性只来自 ∇f 。

问题 若删除一条与其他行线性相关的等式, 可行集是否改变? 乘子是否仍唯一?

KKT 条件的几何分解

在任意可行点，空间分解为

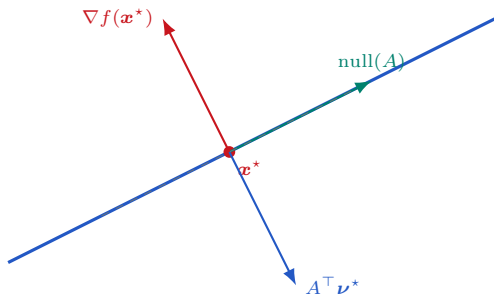
$$\mathbb{R}^n = \text{null}(A) \oplus \text{range}(A^\top).$$

最优点处，梯度的切向分量必须为零：

$$F^\top \nabla f(\mathbf{x}^*) = 0, \quad \text{range}(F) = \text{null}(A).$$

法向分量由乘子表示：

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = -A^\top \boldsymbol{\nu}^*.$$



$$\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{v} = 0 \text{ 对所有 } A\mathbf{v} = 0 \text{ 成立。}$$

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.1; nullspace and range interpretation of equation (10.2)

等式约束凸二次问题

问题

$$\begin{array}{ll}\underset{x}{\text{minimize}} & \frac{1}{2}x^\top Px + q^\top x + r \\ \text{subject to} & Ax = b,\end{array}$$

其中 $P \succeq 0$ 。

KKT 条件是线性的：

$$Px^* + q + A^\top \nu^* = 0, \quad Ax^* = b.$$

KKT 系统

$$\begin{bmatrix} P & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^* \\ \nu^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -q \\ b \end{bmatrix}$$

系数矩阵对称但通常不正定；后续 Newton 步每次都要解同一类鞍点线性系统。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.1.1, equations (10.3)–(10.4)

应用例 2: 二维二次问题

考虑

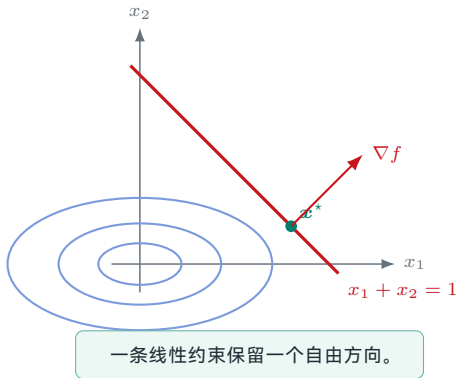
$$\underset{x_1, x_2}{\text{minimize}} \quad \frac{1}{2}(x_1^2 + 4x_2^2), \quad \text{subject to} \quad x_1 + x_2 = 1.$$

KKT 系统为

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 4 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

解得

$$x^* = (4/5, 1/5), \quad \nu^* = -4/5, \quad p^* = 2/5.$$



自编数值例; KKT 系统参见 Boyd & Vandenberghe, §10.1.1

KKT 矩阵何时可逆

假设 $P \succeq 0$ 且 A 满行秩。下列条件等价：

1. $\begin{bmatrix} P & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix}$ 非奇异；
2. $\text{null}(P) \cap \text{null}(A) = \{0\}$ ；
3. $Ax = 0$ 且 $x \neq 0$ 时， $x^\top Px > 0$ ；
4. 若 $\text{range}(F) = \text{null}(A)$ ，则 $F^\top PF \succ 0$ 。

含义

目标函数可以在法向方向没有曲率，但不能在任何非零可行方向上同时没有曲率。

重要特例

若 $P \succ 0$ ，KKT 矩阵必然非奇异；若 P 奇异，则必须检查它在 $\text{null}(A)$ 上是否正定。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.1.1, “Nonsingularity of the KKT matrix”

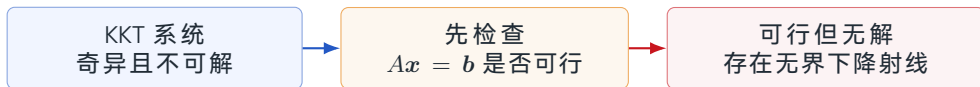
KKT 系统不可解意味着什么

若 KKT 系统奇异且不可解，则一般可能是原问题不可行，或目标在可行方向上无界。在 $Ax = b$ 可行时，可找到 v, w 使

$$Pv + A^\top w = 0, \quad Av = 0, \quad -q^\top v + b^\top w > 0.$$

取任意可行点 $\hat{x}$ ，沿可行射线 $\hat{x} + tv$ ：

$$\begin{aligned} f(\hat{x} + tv) &= f(\hat{x}) + t(v^\top P\hat{x} + q^\top v) + \frac{t^2}{2}v^\top Pv \\ &= f(\hat{x}) + t(-b^\top w + q^\top v) \rightarrow -\infty. \end{aligned}$$



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.1.1, discussion following equation (10.4)

消去等式约束

先找一个特解 $\hat{x}$ 与零空间基 $F \in \mathbb{R}^{n \times (n-p)}$:

$$A\hat{x} = b, \quad \text{range}(F) = \text{null}(A), \quad \text{rank } F = n - p.$$

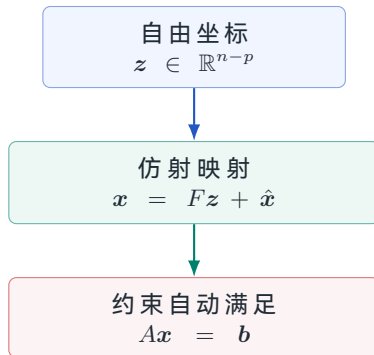
则

$$\{x \mid Ax = b\} = \{Fz + \hat{x} \mid z \in \mathbb{R}^{n-p}\}.$$

原问题等价于无约束问题

$$\underset{z \in \mathbb{R}^{n-p}}{\text{minimize}} \quad \tilde{f}(z) = f(Fz + \hat{x}).$$

求得 z^* 后恢复 $x^* = Fz^* + \hat{x}$ 。



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.1.2, equation (10.5)

由消元解恢复乘子

若 z^* 解约化问题，则

$$F^\top \nabla f(x^*) = \nabla \tilde{f}(z^*) = 0, \quad x^* = Fz^* + \hat{x}.$$

因为 A 满行秩，可定义

$$\nu^* = -(AA^\top)^{-1}A\nabla f(x^*).$$

令

$$s = \nabla f(x^*) + A^\top \nu^*.$$

则 $F^\top s = 0$ 且 $As = 0$ 。由于 $\begin{bmatrix} F^\top \\ A \end{bmatrix}$ 非奇异，故 $s = 0$ ，即满足对偶可行性。

计算上的提醒

消元减少变量数，但显式构造 F 可能破坏稀疏性；第 10.4 节将直接解 KKT 系统。

教材例 10.1: 资源分配

$$\begin{aligned} & \underset{x_1, \dots, x_n}{\text{minimize}} && \sum_{i=1}^n f_i(x_i) \\ & \text{subject to} && \sum_{i=1}^n x_i = b, \end{aligned}$$

其中 f_i 凸且二阶可微。消去 x_n :

$$x_n = b - x_1 - \dots - x_{n-1}, \quad \hat{x} = b e_n, \quad F = \begin{bmatrix} I_{n-1} \\ -\mathbf{1}^\top \end{bmatrix}.$$

约化目标为

$$\tilde{f}(x_1, \dots, x_{n-1}) = f_n\left(b - \sum_{i=1}^{n-1} x_i\right) + \sum_{i=1}^{n-1} f_i(x_i).$$

最优性解释

$f'_i(x_i^*) = -\nu^*$: 所有活动的边际代价相同, 否则可在保持总量不变的方向上继续下降。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.1.2, Example 10.1

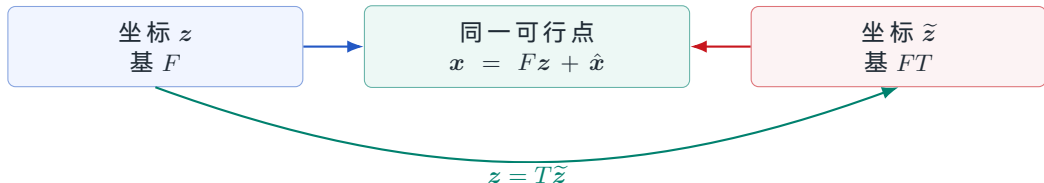
消元矩阵并不唯一

若 F 是零空间基, 任取非奇异 $T \in \mathbb{R}^{(n-p) \times (n-p)}$, 则

$$\tilde{F} = FT, \quad \text{range}(\tilde{F}) = \text{range}(F) = \text{null}(A).$$

两种约化问题为

$$\min_z f(Fz + \hat{x}), \quad \min_{\tilde{z}} f(FT\tilde{z} + \hat{x}), \quad z = T\tilde{z}.$$



选择 F 等价于选择约化空间的坐标系, 因此会影响数值条件数和稀疏性。

通过对偶问题求解

等式约束问题的对偶函数为

$$\begin{aligned} g(\boldsymbol{\nu}) &= -\boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{\nu} + \inf_{\boldsymbol{x}} (f(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\nu}^\top A\boldsymbol{x}) \\ &= -\boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{\nu} - f^*(-A^\top \boldsymbol{\nu}). \end{aligned}$$

因此对偶问题是

$$\underset{\boldsymbol{\nu} \in \mathbb{R}^p}{\text{maximize}} \quad -\boldsymbol{b}^\top \boldsymbol{\nu} - f^*(-A^\top \boldsymbol{\nu}).$$

为什么可以这样做

若原问题最优解存在，仿射等式问题满足 Slater 条件，强对偶成立且对偶最优值可达到。

何时有吸引力

若 $p \ll n$ 且 g 二阶可微，可在 p 维空间对 $-g$ 使用 Chapter 9 的无约束 Newton 法。

教材例 10.2: 等式约束解析中心

原问题为

$$\min_{\mathbf{x}} -\sum_{i=1}^n \log x_i, \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{x} \succ 0.$$

利用

$$f^*(\mathbf{y}) = -n - \sum_{i=1}^n \log(-y_i), \quad \mathbf{y} \prec 0,$$

得到对偶

$$\max_{\boldsymbol{\nu}} -\mathbf{b}^\top \boldsymbol{\nu} + n + \sum_{i=1}^n \log(A^\top \boldsymbol{\nu})_i, \quad A^\top \boldsymbol{\nu} \succ 0.$$

恢复原始解

对偶可行性给出

$$-\begin{bmatrix} 1/x_1 \\ \vdots \\ 1/x_n \end{bmatrix} + A^\top \boldsymbol{\nu} = 0, \quad \boxed{x_i(\boldsymbol{\nu}) = \frac{1}{(A^\top \boldsymbol{\nu})_i}}.$$

求解低维对偶后，可逐分量恢复 $\mathbf{x}^*$ 。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.1.3, Example 10.2, equations (10.7)–(10.9)

应用例 3：两变量解析中心

取 $A = [1 \ 1]$ 、 $b = 1$ ：

$$\min_{x_1, x_2 > 0} -\log x_1 - \log x_2, \quad x_1 + x_2 = 1.$$

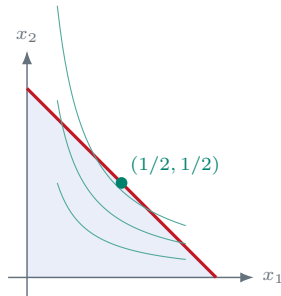
对偶函数为

$$g(\nu) = -\nu + 2 + 2 \log \nu, \quad \nu > 0.$$

由 $g'(\nu) = -1 + 2/\nu = 0$ 得

$$\nu^* = 2, \quad x_1^* = x_2^* = \frac{1}{2}.$$

该点也使乘积 $x_1 x_2$ 最大。



解析中心远离两个坐标边界。

自编数值例；模型与恢复公式来自 Boyd & Vandenberghe, Example 10.2

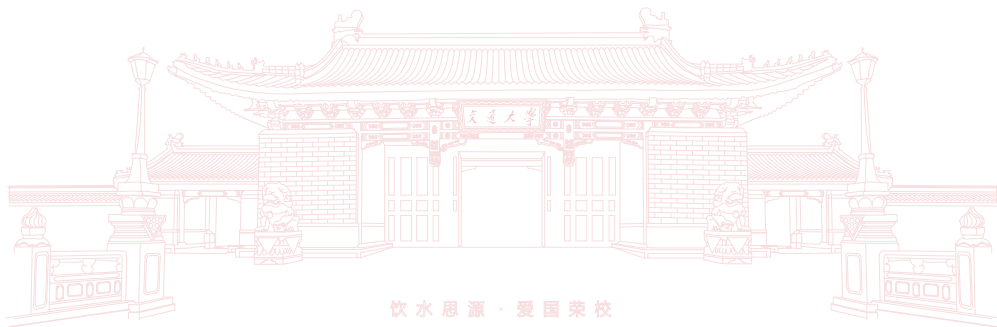
三种求解视角

	直接 KKT / Newton	消去等式	求解对偶
变量规模	$n + p$	$n - p$	p
核心对象	对称不定 KKT 矩阵	$F^\top \nabla^2 f F$	$\nabla^2(-g)$
结构保持	通常最好	可能产生稠密 F	可能形成稠密对偶 Hessian
初始化	可行或不可行版本均可	需要 $\hat{x}, F$	需要对偶定义域内点
适用情形	稀疏、块状大问题	小规模或易构造零空间基	$p \ll n$ 且原始解易恢复

选择方法时同时比较变量维度、初始化难度和线性代数结构，而不只比较公式长度。

03

可行初始点 Newton 法



约束 Newton 步的定义

设当前点 x 已满足 $Ax = b$ 。用二阶模型代替 f :

$$\begin{aligned} & \underset{v}{\text{minimize}} && \hat{f}(x+v) = f(x) + \nabla f(x)^\top v + \frac{1}{2} v^\top \nabla^2 f(x) v \\ & \text{subject to} && A(x+v) = b. \end{aligned}$$

Newton 步 Δx_{nt} 定义为该等式约束二次问题的解。

曲率

$\nabla^2 f(x)$ 决定局部二次模型以及不同方向的尺度。

可行方向

因为 $Ax = b$, 约束化为 $Av = 0$; Newton 步只能位于 $\text{null}(A)$ 。

Newton 步的 KKT 系统

记 $H = \nabla^2 f(x)$ 、 $g = \nabla f(x)$ 。二次模型的 KKT 条件给出

$$\begin{bmatrix} H & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_{\text{nt}} \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -g \\ 0 \end{bmatrix}.$$

第一行

$$H\Delta x_{\text{nt}} + A^\top w = -g.$$

局部曲率修正梯度； $A^\top w$ 提供法向反力。

KKT 矩阵必须非奇异，Newton 步才唯一。

第二行

$$A\Delta x_{\text{nt}} = 0.$$

更新方向位于可行集切空间，因此任意步长都保持线性等式。

线性化最优性条件

KKT 条件为

$$Ax^* = b, \quad \nabla f(x^*) + A^\top \nu^* = 0.$$

以 $x + \Delta x$ 和 w 近似 x^*, ν^* , 并线性化梯度:

$$\nabla f(x + \Delta x) \approx \nabla f(x) + \nabla^2 f(x) \Delta x.$$

非线性 KKT 方程
 $r(x^*, \nu^*) = 0$

在 x 处一阶展开
 $r + Dr \Delta y \approx 0$

解线性 KKT 系统
得到 $\Delta x_{\text{nt}}, w$

使用 $Ax = b$ 后, 线性化方程正好就是上一页的 Newton KKT 系统。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.2.1, “Solution of linearized optimality conditions”

Newton decrement

定义

$$\lambda(\mathbf{x}) = \sqrt{\Delta \mathbf{x}_{\text{nt}}^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}_{\text{nt}}}.$$

它保留了无约束 Newton decrement 的三个解释:

局部步长

$$\lambda(\mathbf{x}) = \|\Delta \mathbf{x}_{\text{nt}}\|_{\nabla^2 f(\mathbf{x})}.$$

模型最优性差距

$$f(\mathbf{x}) - \inf_{A(\mathbf{x}+\mathbf{v})=\mathbf{b}} \hat{f}(\mathbf{x}+\mathbf{v}) = \frac{\lambda(\mathbf{x})^2}{2}.$$

一阶预测下降

$$\nabla f(\mathbf{x})^\top \Delta \mathbf{x}_{\text{nt}} = -\lambda(\mathbf{x})^2.$$

因此 $\lambda^2/2$ 同时用于停止准则和局部模型的误差估计。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.2.1, equations (10.12)–(10.14)

可行下降方向

若 $Ax = b$, 方向 v 可行当且仅当 $Av = 0$ 。Newton 步满足

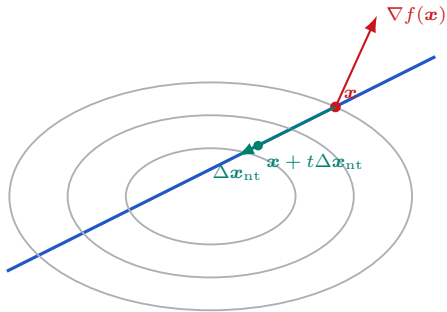
$$A\Delta x_{\text{nt}} = 0, \quad \nabla f(x)^\top \Delta x_{\text{nt}} = -\lambda(x)^2 < 0$$

(除非已经最优)。

于是对所有 t :

$$A(x + t\Delta x_{\text{nt}}) = b.$$

回溯线搜索只需检查定义域和 Armijo 下降, 不再检查线性等式。



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.2.1, “Feasible descent direction”

仿射不变性

令 $x = Ty$, 其中 T 非奇异, 并定义 $\bar{f}(y) = f(Ty)$ 。则

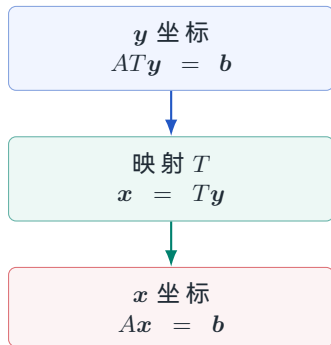
$$\nabla \bar{f}(y) = T^\top \nabla f(Ty), \quad \nabla^2 \bar{f}(y) = T^\top \nabla^2 f(Ty) T,$$

约束变为 $ATy = b$ 。

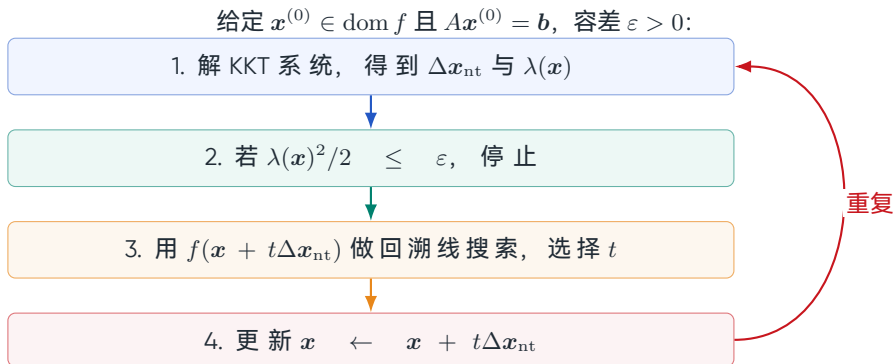
比较两个坐标系中的 KKT 系统可得

$$T\Delta y_{\text{nt}} = \Delta x_{\text{nt}}, \quad \bar{\lambda}(y) = \lambda(x).$$

因此线性缩放不会改变 Newton 迭代的本质轨迹。



Algorithm 10.1: 可行初始点 Newton 法



所有迭代点保持可行, 并且在未停止时目标值下降。

应用例 4: 二次问题一步到达最优解

回到

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 4x_2^2), \quad x_1 + x_2 = 1.$$

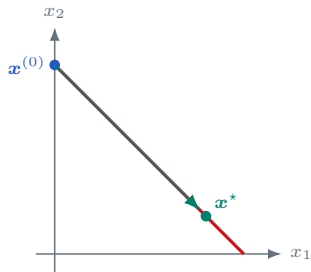
从可行点 $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 1)$ 出发:

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{bmatrix} 0 \\ 4 \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

解

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 4 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -4 \\ 0 \end{bmatrix}$$

得到 $\Delta \mathbf{x} = (4/5, -4/5)$, 故 $\mathbf{x}^{(1)} = (4/5, 1/5) = \mathbf{x}^*$ 。



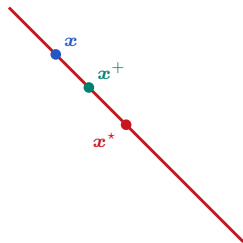
二次模型等于原目标; 整步精确

自编数值例; Boyd & Vandenberghe, §10.2.1

应用例 5: 解析中心的一次 Newton 更新

对 $f = -\log x_1 - \log x_2$ 、 $x_1 + x_2 = 1$, 从 $x = (1/5, 4/5)$ 出发:

$$g = (-5, -5/4), \quad H = \text{diag}(25, 25/16).$$



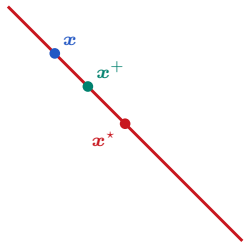
应用例 5: 解析中心的一次 Newton 更新

对 $f = -\log x_1 - \log x_2$ 、 $x_1 + x_2 = 1$, 从 $x = (1/5, 4/5)$ 出发:

$$g = (-5, -5/4), \quad H = \text{diag}(25, 25/16).$$

解约束 Newton 系统得

$$\Delta x_{\text{nt}} = \left(\frac{12}{85}, -\frac{12}{85} \right), \quad \lambda^2 = \frac{153}{289} \approx 0.5294.$$



应用例 5: 解析中心的一次 Newton 更新

对 $f = -\log x_1 - \log x_2$ 、 $x_1 + x_2 = 1$, 从 $x = (1/5, 4/5)$ 出发:

$$g = (-5, -5/4), \quad H = \text{diag}(25, 25/16).$$

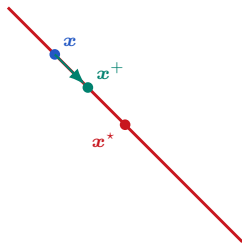
解约束 Newton 系统得

$$\Delta x_{\text{nt}} = \left(\frac{12}{85}, -\frac{12}{85} \right), \quad \lambda^2 = \frac{153}{289} \approx 0.5294.$$

取整步后

$$x^+ = \left(\frac{29}{85}, \frac{56}{85} \right) \approx (0.3412, 0.6588),$$

仍满足 $x_1 + x_2 = 1$, 并向 $(1/2, 1/2)$ 移动。



自编数值例; 模型来自 Boyd & Vandenberghe, Example 10.2

Newton 法与消元完全一致

设 $x = Fz + \hat{x}$, $\tilde{f}(z) = f(Fz + \hat{x})$ 。则

$$\nabla \tilde{f}(z) = F^\top \nabla f(x), \quad \nabla^2 \tilde{f}(z) = F^\top \nabla^2 f(x) F.$$

约化问题的 Newton 步为

$$\Delta z_{\text{nt}} = -(F^\top H F)^{-1} F^\top g.$$

映射回原变量:

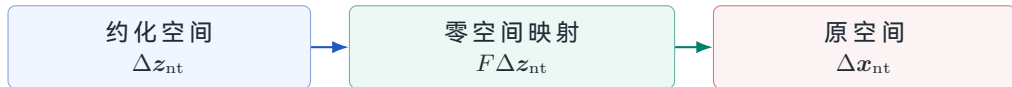
$$\Delta x_{\text{nt}} = F \Delta z_{\text{nt}} = -F(F^\top H F)^{-1} F^\top g.$$

这个方向满足 $A \Delta x_{\text{nt}} = 0$, 并且与直接解 KKT 系统所得方向相同。

两个坐标系中的 decrement 相同

由 $\Delta \mathbf{x}_{\text{nt}} = F \Delta \mathbf{z}_{\text{nt}}$:

$$\begin{aligned}\tilde{\lambda}(\mathbf{z})^2 &= \Delta \mathbf{z}_{\text{nt}}^\top \nabla^2 \tilde{f}(\mathbf{z}) \Delta \mathbf{z}_{\text{nt}} \\ &= \Delta \mathbf{z}_{\text{nt}}^\top F^\top H F \Delta \mathbf{z}_{\text{nt}} \\ &= \Delta \mathbf{x}_{\text{nt}}^\top H \Delta \mathbf{x}_{\text{nt}} = \lambda(\mathbf{x})^2.\end{aligned}$$



两种实现产生相同迭代点、相同步长判据和相同局部模型下降。

收敛分析的假设

令

$$S = \{\mathbf{x} \in \text{dom } f \mid f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}^{(0)}), A\mathbf{x} = \mathbf{b}\}.$$

在 S 上假设:

1. S 闭;
2. $\nabla^2 f(\mathbf{x}) \preceq MI$, 并且

$$\left\| \begin{bmatrix} \nabla^2 f(\mathbf{x}) & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix}^{-1} \right\|_2 \leq K;$$

3. Hessian 满足 Lipschitz 条件 $\|\nabla^2 f(\mathbf{x}) - \nabla^2 f(\mathbf{y})\|_2 \leq L\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$ 。

这些条件把 Chapter 9 的强凸性、Hessian 上界与 Lipschitz 曲率推广到 KKT 系统。

有约束时的“强凸性”

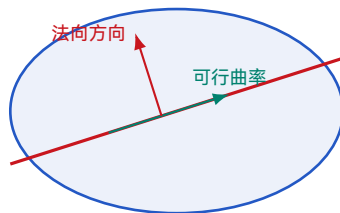
KKT 矩阵是对称不定矩阵。其逆有界意味着所有正、负特征值都远离零。这替代无约束分析中的 $\nabla^2 f \succeq mI$ 。

若 F 是满列秩零空间基，约化 Hessian 为

$$\nabla^2 \tilde{f}(z) = F^\top \nabla^2 f(x) F.$$

教材证明上述假设推出

$$F^\top \nabla^2 f(x) F \succeq \tilde{m} I, \quad \tilde{m} = \frac{\sigma_{\min}(F)^2}{K^2 M} > 0.$$



只要求目标在可行方向上保持正曲率。

收敛结论

Newton 法在等式约束问题上的迭代，与在约化问题 $\min_z \tilde{f}(z)$ 上的迭代完全一致。因此 Chapter 9 的结论直接转移：

阻尼阶段

回溯线搜索保证函数值持续下降，并在有限步后进入整步区域。

二次阶段

靠近 x^* 后接受 $t = 1$ ，Newton decrement 与误差呈二次下降。

自协调目标

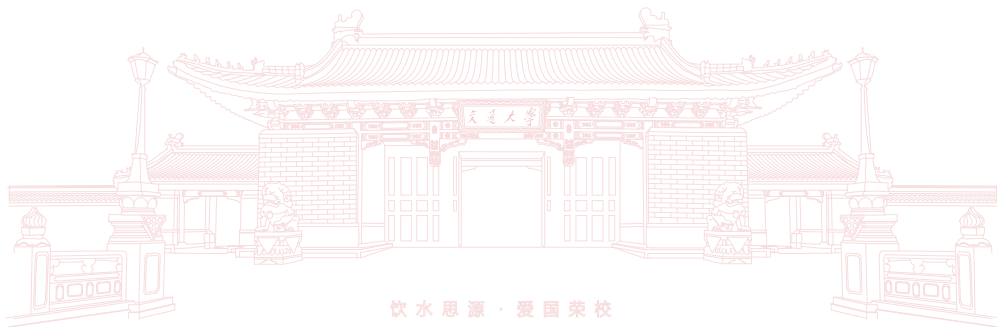
若 f 自协调，则 $f(Fz + \hat{x})$ 仍自协调；迭代复杂度与无约束情形相同：

$$O\left(f(x^{(0)}) - p^* + \log \log \frac{1}{\varepsilon}\right).$$

结论依赖可行初始点；下一节把“寻找可行点”也纳入 Newton 迭代。

04

不可行初始点 Newton 法



为什么允许不可行初始点

可行初始点 Newton 法要求

$$x^{(0)} \in \text{dom } f, \quad Ax^{(0)} = b.$$

当 $\text{dom } f \neq \mathbb{R}^n$ 时, 同时满足这两个条件本身就可能是困难的可行性问题。

可行初始点方法

先寻找交集

$$\text{dom } f \cap \{x \mid Ax = b\},$$

再沿零空间方向降低目标。

该方法直接把 KKT 条件视为一个非线性方程组。

不可行初始点方法

只要求 $x^{(0)} \in \text{dom } f$, 同时降低

$$\|Ax - b\|_2 \quad \text{与} \quad \|\nabla f(x) + A^\top \nu\|_2.$$

不可行点处的 Newton 步

当前 $x \in \text{dom } f$ 不必满足 $Ax = b$ 。线性化 KKT 条件得到

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_{\text{nt}} \\ w \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f(x) \\ Ax - b \end{bmatrix}.$$

与可行版本相同

左侧 KKT 矩阵完全相同，因此可以复用分解方法和稀疏结构。

新增修正

右侧第二块为原始残差。当 $Ax = b$ 时，它变为零，并恢复 §10.2 的 Newton 步。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.1, equation (10.19)

原始-对偶残差映射

把 $y = (x, \nu)$ 作为联合变量, 定义

$$r(x, \nu) = \begin{bmatrix} r_{\text{dual}}(x, \nu) \\ r_{\text{pri}}(x, \nu) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla f(x) + A^\top \nu \\ Ax - b \end{bmatrix}.$$

其 Jacobian 正是 KKT 矩阵:

$$Dr(x, \nu) = \begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix}.$$

原始-对偶 Newton 步满足

$$Dr(y)\Delta y_{\text{pd}} = -r(y), \quad \Delta y_{\text{pd}} = (\Delta x_{\text{pd}}, \Delta \nu_{\text{pd}}).$$

Newton 步中的两个对偶量

原始-对偶形式为

$$\begin{bmatrix} H & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_{\text{pd}} \\ \Delta \nu_{\text{pd}} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} g + A^\top \nu \\ Ax - b \end{bmatrix}.$$

将第二个未知量改写为更新后的乘子 $\nu^+ = \nu + \Delta \nu_{\text{pd}}$:

$$\begin{bmatrix} H & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_{\text{nt}} \\ \nu^+ \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} g \\ Ax - b \end{bmatrix}.$$

因此

$$\Delta x_{\text{nt}} = \Delta x_{\text{pd}}, \quad w = \nu^+ = \nu + \Delta \nu_{\text{pd}}.$$

实际含义

计算原始 Newton 步与新的乘子并不需要旧乘子；旧乘子只在写成“对偶增量”时出现。

目标值不一定下降

在不可行点，Newton 方向一般不是 f 的下降方向：

$$\nabla f(x)^\top \Delta x_{\text{nt}} = -\Delta x_{\text{nt}}^\top H \Delta x_{\text{nt}} + (Ax - b)^\top w.$$

最后一项可能为正。

不能使用的指标

仅监控 $f(x)$ 可能拒绝一个显著改善可行性的方向。

正确的进度指标

监控联合残差

$$\|r(x, \nu)\|_2.$$

它同时衡量原始可行性与对偶驻点条件。

算法目标已经从“每步降低 f ”变为“每步逼近 KKT 方程的零点”。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.1, “Residual norm reduction property”

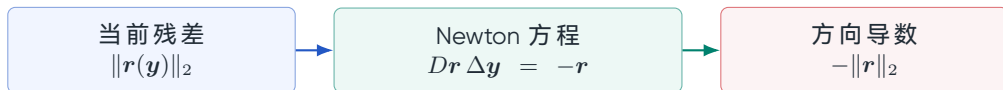
残差范数沿 Newton 方向下降

由 $D\mathbf{r}(\mathbf{y})\Delta\mathbf{y}_{\text{pd}} = -\mathbf{r}(\mathbf{y})$:

$$\left. \frac{d}{dt} \frac{1}{2} \|\mathbf{r}(\mathbf{y} + t\Delta\mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2^2 \right|_{t=0} = \mathbf{r}(\mathbf{y})^\top D\mathbf{r}(\mathbf{y})\Delta\mathbf{y}_{\text{pd}} = -\|\mathbf{r}(\mathbf{y})\|_2^2.$$

当 $\mathbf{r}(\mathbf{y}) \neq 0$ 时, 等价地,

$$\left. \frac{d}{dt} \|\mathbf{r}(\mathbf{y} + t\Delta\mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2 \right|_{t=0} = -\|\mathbf{r}(\mathbf{y})\|_2.$$



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.1, equation (10.23)

整步立即恢复可行性

由 Newton 方程第二行,

$$A\Delta x_{\text{nt}} = -(Ax - b).$$

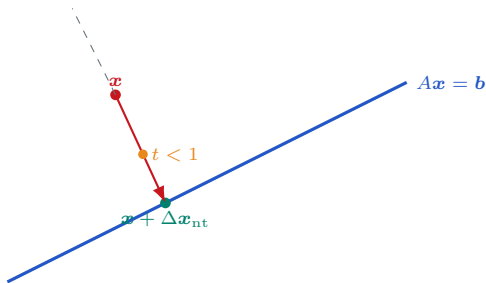
若取 $t = 1$, 则

$$A(x + \Delta x_{\text{nt}}) = b.$$

对阻尼步 $t \in [0, 1]$:

$$r_{\text{pri}}^+ = A(x + t\Delta x_{\text{nt}}) - b = (1 - t)r_{\text{pri}}.$$

原始残差方向不变, 长度乘以 $1 - t$ 。

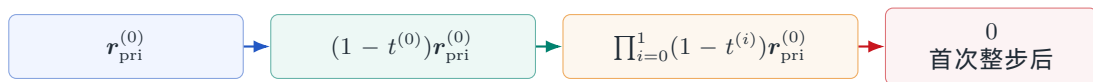


Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.1, equation (10.24)

多步后的原始残差

若第 i 次迭代使用步长 $t^{(i)} \in [0, 1]$, 则

$$\mathbf{r}_{\text{pri}}^{(k)} = \left(\prod_{i=0}^{k-1} (1 - t^{(i)}) \right) \mathbf{r}_{\text{pri}}^{(0)}.$$



一旦某次 $t^{(i)} = 1$, 原始残差变为零; 随后 Newton 方向满足 $A\Delta\mathbf{x} = 0$, 所有后继点保持可行。

Algorithm 10.2: 不可行初始点 Newton 法

给定 $x^{(0)} \in \text{dom } f$ 、 $\nu^{(0)}$ 、 $0 < \alpha < 1/2$ 、 $0 < \beta < 1$:

1. 解 $D\mathbf{r}(x, \nu)\Delta\mathbf{y} = -\mathbf{r}(x, \nu)$

2. 令 $t = 1$; 检查定义域与残差充分下降

$\|\mathbf{r}(\mathbf{y} + t\Delta\mathbf{y})\|_2 \leq (1 - \alpha t)\|\mathbf{r}(\mathbf{y})\|_2$; 否则 $t \leftarrow \beta t$

3. 更新 $x \leftarrow x + t\Delta x$, $\nu \leftarrow \nu + t\Delta\nu$

重复

终止条件要求原始可行且联合残差足够小。

应用例 6: 从不可行点一步修正

仍考虑

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 4x_2^2), \quad x_1 + x_2 = 1,$$

但取 $\boldsymbol{x}^{(0)} = (0, 0)$ 、 $\nu^{(0)} = 0$ 。此时 $r_{\text{pri}} = -1$ 。

应用例 6: 从不可行点一步修正

仍考虑

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 4x_2^2), \quad x_1 + x_2 = 1,$$

但取 $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0)$ 、 $\nu^{(0)} = 0$ 。此时 $r_{\text{pri}} = -1$ 。

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 4 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \Delta \nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \implies \Delta \mathbf{x} = (4/5, 1/5), \quad \Delta \nu = -4/5.$$

应用例 6: 从不可行点一步修正

仍考虑

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 4x_2^2), \quad x_1 + x_2 = 1,$$

但取 $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0)$ 、 $\nu^{(0)} = 0$ 。此时 $r_{\text{pri}} = -1$ 。

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 4 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \Delta \nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \implies \Delta \mathbf{x} = (4/5, 1/5), \quad \Delta \nu = -4/5.$$

由于目标是二次函数，整步同时得到

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^* = (4/5, 1/5), \quad \nu^{(1)} = \nu^* = -4/5.$$

一次完成两件事

原始残差从 -1 变为 0 ；对偶残差也从 0 变为 0 。非二次问题一般仍需继续迭代。

自编数值例；Boyd & Vandenberghe, §§10.3.1–10.3.2

解析中心的初始化

对

$$\min_{x \succ 0} - \sum_i \log x_i, \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b},$$

可行初始点方法需要先找 $\mathbf{x}^{(0)} \succ 0$ 且 $A\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{b}$ ，这本身是标准型 LP 的严格可行性问题。

不可行初始点方案

直接取任意正向量，例如

$$\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{1}, \quad \boldsymbol{\nu}^{(0)} = \mathbf{0},$$

再由残差 Newton 法同时寻找可行性与最优性。

对偶初始化也可同样处理

把 $\mathbf{y} = A^\top \boldsymbol{\nu}$ 显式作为变量并加等式约束，从任意 $\mathbf{y}^{(0)} \succ 0$ 出发。

这种方法简化初始化，但不能可靠地证明严格可行点不存在。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.2, “Using infeasible start Newton method to simplify initialization”

不可行初始点与 Phase I

	不可行初始点 Newton 法	Phase I 可行性方法
初始要求	$x^{(0)} \in \text{dom } f$	一个容易构造的辅助问题起点
主要输出	KKT 点或残差停在正值	严格可行点，或明确的不可行判定
优势	与主求解器共享 KKT 系统	对不存在严格可行点可给出判定
局限	不可行时可能缓慢停滞	需要额外的辅助优化问题
适合	定义域简单且已知交集非空	定义域复杂或可行性未知

Chapter 11 的内点法将系统讨论 Phase I; 本讲只说明两种初始化策略的区别。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.2; see also §11.4 for phase I methods

收敛分析的假设

定义残差次水平集

$$S = \{(\mathbf{x}, \boldsymbol{\nu}) \mid \mathbf{x} \in \text{dom } f, \|\mathbf{r}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\nu})\|_2 \leq \|\mathbf{r}(\mathbf{x}^{(0)}, \boldsymbol{\nu}^{(0)})\|_2\}.$$

假设:

1. S 为闭集;
2. $\|D\mathbf{r}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\nu})^{-1}\|_2 \leq K$;
3. $D\mathbf{r}$ 在 S 上满足 Lipschitz 条件, 常数为 L 。

与可行版本的差别

第二、三项仍是 KKT 矩阵逆有界与 Hessian Lipschitz; 第一项改为残差次水平集闭, 不要求目标函数次水平集闭。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.3, equations (10.26)–(10.27)

残差的基本上界

记 $\mathbf{y} = (\mathbf{x}, \nu)$, Newton 步满足 $D\mathbf{r}(\mathbf{y})\Delta\mathbf{y} = -\mathbf{r}(\mathbf{y})$ 。在适用范围内:

$$\|\mathbf{r}(\mathbf{y} + t\Delta\mathbf{y})\|_2 \leq (1 - t)\|\mathbf{r}(\mathbf{y})\|_2 + \frac{K^2 L}{2} t^2 \|\mathbf{r}(\mathbf{y})\|_2^2.$$

线性项

$(1 - t)\|\mathbf{r}\|$ 来自 Newton 方程对残差一阶项的精确抵消。

该不等式同时解释阻尼阶段的固定下降与整步阶段的二次收敛。

二次余项

$\frac{1}{2}K^2 L t^2 \|\mathbf{r}\|^2$ 来自 Jacobian 的 Lipschitz 变化和逆矩阵范数界。

两个收敛阶段

阻尼阶段

若

$$\|r(y)\|_2 > \frac{1}{K^2 L},$$

回溯线搜索保证每步至少减少

$$\frac{\alpha\beta}{K^2 L}.$$

因此有限步后进入小残差区域。

整步与二次阶段

若

$$\|r(y)\|_2 \leq \frac{1}{K^2 L},$$

则接受 $t = 1$ ，并满足

$$\|r(y^+)\|_2 \leq \frac{K^2 L}{2} \|r(y)\|_2^2.$$

首次整步同时使原始点可行；此后进入可行 Newton 法的快速收敛区域。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.3, equations (10.29) and the damped/full-step analysis

最大熵问题为何更适合残差分析

考虑

$$\min_{x \succ 0} \sum_{i=1}^n x_i \log x_i, \quad Ax = b.$$

当 $x_i \downarrow 0$ 时, $x_i \log x_i \rightarrow 0$, 所以目标函数的次水平集不一定远离定义域边界; 可行 Newton 法的经典闭集假设可能不成立。

但

$$\frac{d}{dx_i}(x_i \log x_i) = 1 + \log x_i \rightarrow -\infty,$$

故接近边界时对偶残差发散, 残差次水平集会远离边界。

结论的范围

这说明不可行初始点法满足教材给出的收敛假设; 并不意味着可行 Newton 法一定失败, 只是相应证明不再直接适用。

凸-凹博弈

玩家 1 选择 $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^q$ 并希望最小化支付；玩家 2 选择 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^s$ 并希望最大化支付 $\phi(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ 。

$$\inf_{\mathbf{u}} \sup_{\mathbf{v}} \phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \geq \sup_{\mathbf{v}} \inf_{\mathbf{u}} \phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}).$$

若存在鞍点 $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)$ ，则

$$\phi(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}) \leq \phi(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) \leq \phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}^*) \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v}.$$

若 ϕ 对 $\mathbf{u}$ 凸、对 $\mathbf{v}$ 凹且可微，鞍点满足

$$\nabla_{\mathbf{u}} \phi = 0, \quad \nabla_{\mathbf{v}} \phi = 0.$$

与 KKT 的联系

这仍是求非线性残差 $\mathbf{r}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \nabla \phi(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ 的零点，可使用同一套残差 Newton 分析。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.4, equations (10.30)–(10.31)

凸-凹博弈的 Newton 法

定义

$$\mathbf{r}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \begin{bmatrix} \nabla_{\mathbf{u}} \phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \nabla_{\mathbf{v}} \phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \end{bmatrix}, \quad D\mathbf{r} = \nabla^2 \phi.$$

Newton 步解

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{v} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla_{\mathbf{u}} \phi \\ \nabla_{\mathbf{v}} \phi \end{bmatrix},$$

并以 $\|\mathbf{r}\|_2$ 做回溯线搜索。

强凸-强凹

若在残差次水平集上存在 $m > 0$ 使

$$\nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2 \phi \succeq mI, \quad \nabla_{\mathbf{v}\mathbf{v}}^2 \phi \preceq -mI,$$

则可推出 Jacobian 逆有界。

应用例 7: 一维凸-凹博弈

考虑

$$\phi(u, v) = \frac{1}{2}u^2 + uv - \frac{1}{2}v^2 - 2u + v.$$

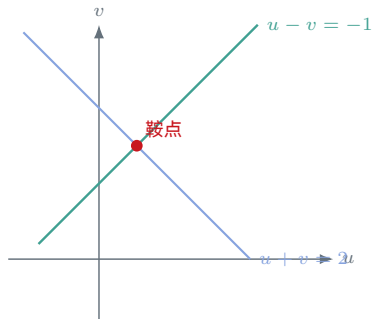
它对 u 强凸、对 v 强凹。驻点方程为

$$\nabla \phi(u, v) = \begin{bmatrix} u + v - 2 \\ u - v + 1 \end{bmatrix} = 0, \quad \nabla^2 \phi = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}.$$

解得

$$(u^*, v^*) = \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right).$$

由于残差为仿射函数，Newton 法从任意初始点整步一次到达鞍点。



自编数值例；方法参见 Boyd & Vandenberghe, §10.3.4

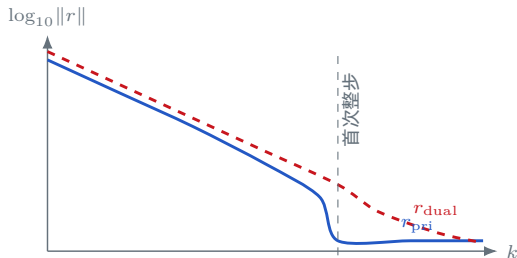
教材数值例：可行实例

教材对 $n = 100$ 、 $p = 50$ 的解析中心问题使用

$$x^{(0)} = \mathbf{1}, \quad \nu^{(0)} = 0, \quad \alpha = 0.01, \quad \beta = 0.5.$$

观察到的阶段

- 第 8 次迭代接受整步；
- 原始残差此后接近零并保持；
- 约第 9 次迭代后，对偶残差显示二次收敛。

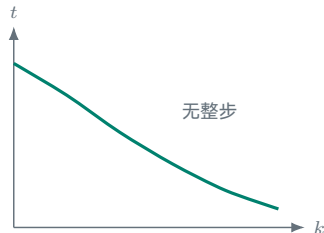
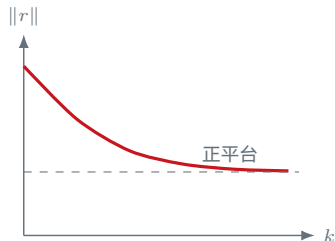


Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.5, Figures 10.1–10.2 (重绘)

教材数值例：不可行实例

若 $\text{dom } f$ 与 $\{x \mid Ax = b\}$ 不相交，教材实验出现：

- ▣ 残差下降后停在正值；
- ▣ 步长始终小于 1，并逐渐趋近于 0；
- ▣ 算法本身不能给出可靠的不可行证书。



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.5, Figures 10.3–10.4 (定性重绘)

教材数值例：高维凸-凹博弈

教材考虑 $\mathbb{R}^{100} \times \mathbb{R}^{100}$ 上的

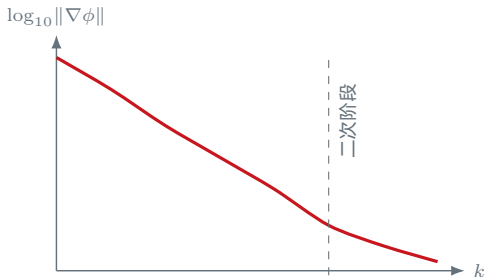
$$\phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{u}^\top B \mathbf{v} + \mathbf{c}^\top \mathbf{u} + \mathbf{d}^\top \mathbf{v} - \log(1 - \mathbf{u}^\top \mathbf{u}) + \log(1 - \mathbf{v}^\top \mathbf{v}),$$

定义域为 $\|\mathbf{u}\|_2 < 1$ 、 $\|\mathbf{v}\|_2 < 1$ 。

从 $\mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{v}^{(0)} = 0$ 出发，使用 $\alpha = 0.01$ 、 $\beta = 0.5$ 。
教材图中约第 5 次迭代后出现明显二次收敛。

建模意义

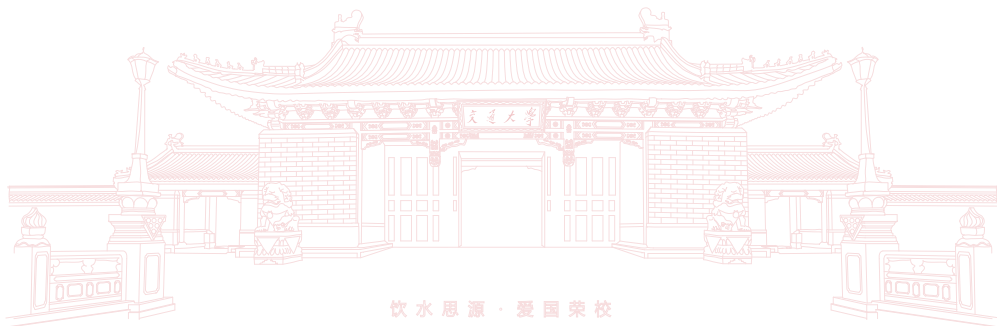
障碍项保证两个玩家的选择留在单位球内部；双线性项产生双方耦合。



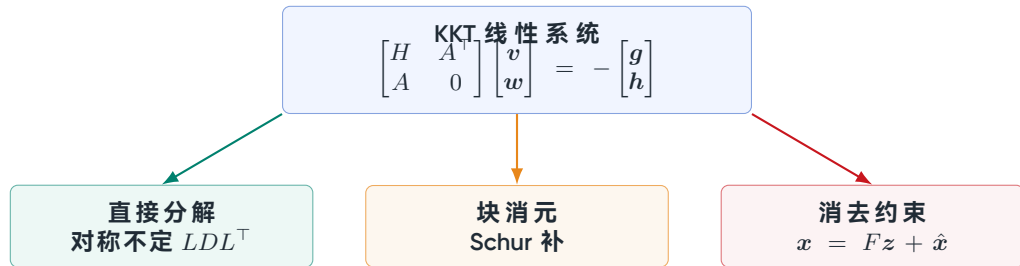
Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.3.5, equation (10.32), Figure 10.5 (重绘)

05

KKT 系统与计算实现



计算 Newton 步的三条路线



矩阵结构

H 是否易于分解? A, H 是否稀疏? Schur 补是否保留稀疏性?

问题维度

比较 p 与 $n - p$; 三条路线只改变线性代数, Newton 外层迭代相同。

标准 KKT 线性系统

本节统一讨论

$$\begin{bmatrix} H & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v} \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \boldsymbol{g} \\ \boldsymbol{h} \end{bmatrix}, \quad H \in \mathbb{S}_+^n, \quad A \in \mathbb{R}^{p \times n}, \quad \text{rank } A = p < n. \quad (10.33)$$

可行初始点 Newton 法

$$\begin{aligned} H &= \nabla^2 f(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{g} = \nabla f(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{h} = 0, \\ \boldsymbol{v} &= \Delta \boldsymbol{x}_{\text{nt}}, \quad \boldsymbol{w} = \boldsymbol{w}_{\text{nt}}. \end{aligned}$$

不可行初始点 Newton 法

$$\begin{aligned} H &= \nabla^2 f(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{g} = \nabla f(\boldsymbol{x}) + A^\top \boldsymbol{\nu}, \\ \boldsymbol{h} &= A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}, \quad (\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) = (\Delta \boldsymbol{x}_{\text{nt}}, \Delta \boldsymbol{\nu}_{\text{nt}}). \end{aligned}$$

凸-凹博弈也产生同类鞍点系统，其中右下对角块可为负半定。

问题 为什么不能直接用 Cholesky？左上块半正定，但整个 KKT 矩阵是不定矩阵。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.4.2, equation (10.33)

路线一：直接分解完整 KKT 系统

KKT 矩阵对称但通常不正定，可用带主元选取的

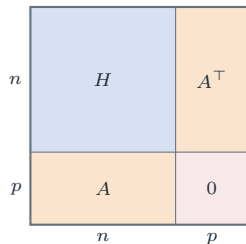
$$P^\top K P = L D L^\top, \quad K = \begin{bmatrix} H & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix}.$$

稠密计算量

若不利用结构，因矩阵阶数为 $n + p$ ，分解约需

$$\frac{1}{3}(n + p)^3 \text{ flops.}$$

- ▣ 小规模问题：实现直接、数值稳健；
- ▣ 稀疏问题：稀疏 $LDL^\top$ 可避免大量零元计算；
- ▣ 多个右端项：一次分解可以重复回代。



结构稀疏时，重排可显著
减少分解中的 fill-in

路线二：块消元与 Schur 补

先假设 $H \succ 0$ 。由第一行

$$Hv + A^\top w = -g \implies v = -H^{-1}(g + A^\top w).$$

代入 $Av = -h$ ，得到

$$\underbrace{-AH^{-1}A^\top}_S w = AH^{-1}g - h, \quad S \prec 0. \quad (\text{Schur})$$

关键变化

原来的 $(n+p)$ 阶不定系统变成：

1. 对 H 做正定分解；
2. 求解 p 阶正定系统 $(-S)w = \cdots$ ；
3. 回代得到 v 。

几何含义

H^{-1} 给出目标函数的局部度量； $AH^{-1}A^\top$ 把这种度量投影到约束残差空间。

问题 若 $p \ll n$ 且 H 易解，为什么消元通常更便宜？

Algorithm 10.3: 用块消元解 KKT 系统

输入

$H \succ 0$, 满行秩 A , 以及右端项 g, h 。

1. 求 $H^{-1}A^\top$ 与 $H^{-1}g$;
2. 构造 $S = -AH^{-1}A^\top$;

3. 解

$$Sw = AH^{-1}g - h;$$

4. 解

$$Hv = -A^\top w - g.$$

分解 H
解 $p+1$ 个右端项

形成并分解
 $-S = AH^{-1}A^\top$

解 w , 再回代 v

若分

解 H 与一次回代分别耗费 f, s , 总量约为

$$f + ps + p^2n + \frac{1}{3}p^3.$$

结构决定每一步的代价

H 的结构	分解与回代	块消元的主导计算量
稠密正定	$f \approx n^3/3, s \approx 2n^2$	$n^3/3 + 2pn^2 + p^2n + p^3/3$
对角	无需分解, $s \approx n$	$p^2n + p^3/3$
带宽 $k \ll n$	$f \approx nk^2, s \approx 4nk$	$nk^2 + 4nkp + p^2n + p^3/3$
块对角、稀疏、对角 + 低秩	对各块或稀疏图分解	取决于块大小、秩与 fill-in

适合 Schur 补

p 较小, 且 $H^{-1}z$ 可以快速计算。

适合完整 KKT 分解

K 整体稀疏, 而 Schur 补会显著变稠密。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.4.2, computational costs after Algorithm 10.3

当 Hessian 奇异时

块消元公式需要 H^{-1} ，但原 KKT 矩阵可能在 $H \succeq 0$ 、 H 奇异时仍可逆。

等价判据

KKT 矩阵非奇异，当且仅当存在 $Q \succeq 0$ 使

$$H + A^{\top}QA \succ 0.$$

若成立，则对任意 $Q \succ 0$ 都成立。

原系统等价于

$$\begin{bmatrix} H + A^{\top}QA & A^{\top} \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} g + A^{\top}Qh \\ h \end{bmatrix},$$

因为把原系统第二行左乘 $A^{\top}Q$ 后加到第一行，并未改变解。

H 在某些方向上没有曲率

$A^{\top}QA$ 补充约束法向方向的曲率

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.4.2, “Elimination with singular H ”

教材例 10.3: 解析中心的对角 Hessian

$$\min_{\mathbf{x} \succ 0} - \sum_{i=1}^n \log x_i \quad \text{s.t.} \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad H = \text{diag}(x_1^{-2}, \dots, x_n^{-2}).$$

完整 KKT 分解

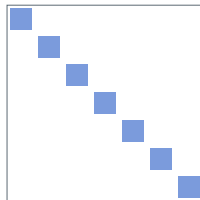
忽略结构时约为

$$\frac{1}{3}(n+p)^3 \text{ flops.}$$

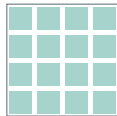
块消元

$H^{-1} = \text{diag}(x_1^2, \dots, x_n^2)$, 无需矩阵分解; 主要代价为

$$np^2 + \frac{1}{3}p^3.$$



H : 仅 n 个非零元



$AH^{-1}A^T$
一般为稠密 $p \times p$

教材比较：解析中心的三种 Newton 法

教材取 $p = 100, n = 500$ ，比较原始可行、对偶与不可行初始点方法。

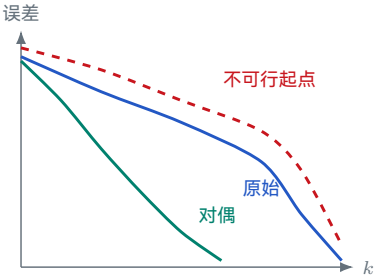
方法	初始化	进入二次阶段
原始可行	$Ax^{(0)} = b, x^{(0)} \succ 0$	约 12-15 次
对偶	$A^T \nu^{(0)} \succ 0$	约 6 次
不可行初始点	仅 $x^{(0)} \succ 0$	约 10-20 次

三

者每一步最终都需解与

$$ADA^T$$

同型的 $p \times p$ 系统，计算量量级相同。

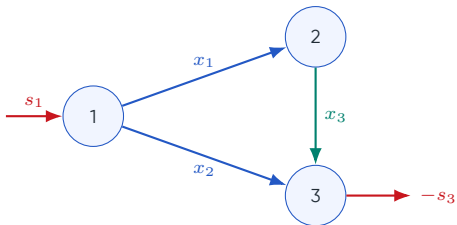


Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.4.3, Figures 10.6–10.8 (定性重绘)

应用例 8：最优网络流

连通有向图上，弧流量 x_j 与外部注入 s_i 满足流量守恒。删除一条冗余节点方程后：

$$Ax = b, \quad \min_x \sum_{j=1}^n \phi_j(x_j). \quad (10.36)$$



- ▣ 关联矩阵每列至多有两个非零元 ± 1 ;
- ▣ 目标可分，故 $H = \text{diag}(\phi_j''(x_j))$;
- ▣ $S = -AH^{-1}A^\top$ 的非零模式就是节点邻接图。

后果

若网络稀疏，Schur 补也稀疏；Newton 步的代价可随弧数近似线性增长。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.4.3, “Optimal network flow”, equation (10.36)

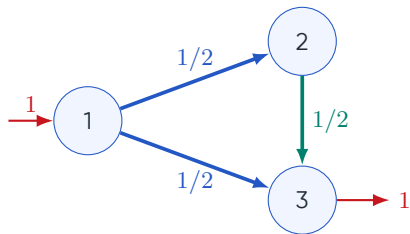
数值例 9：三条弧上的最优流

使用上一页的三节点网络，节点 3 的方程由守恒自动确定：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad f(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 2x_2^2 + x_3^2).$$

约束给出 $x_1 + x_2 = 1$ 、 $x_3 = x_1$ ，于是

$$f = x_1^2 + (1 - x_1)^2.$$



解释

较拥挤的第 2 条弧成本系数更大；最优解在守恒约束下平衡边际成本。

数值例 9：三条弧上的最优流

使用上一页的三节点网络，节点 3 的方程由守恒自动确定：

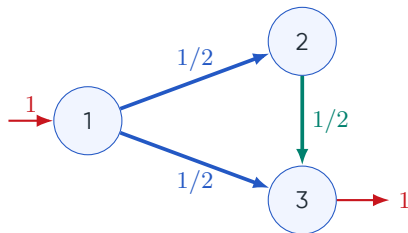
$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad f(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 2x_2^2 + x_3^2).$$

约束给出 $x_1 + x_2 = 1$ 、 $x_3 = x_1$ ，于是

$$f = x_1^2 + (1 - x_1)^2.$$

一阶条件 $4x_1 - 2 = 0$ ，因此

$$x^* = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad f^* = \frac{1}{2}.$$



解释

较拥挤的第 2 条弧成本系数更大；最优解在守恒约束下平衡边际成本。

自编数值例；模型参见 Boyd & Vandenberghe, §10.4.3

应用例 10: 有限时域最优控制

$$\begin{aligned} & \underset{\{z(t), u(t)\}}{\text{minimize}} && \sum_{t=1}^N \phi_t(z(t)) + \sum_{t=0}^{N-1} \psi_t(u(t)) \\ & \text{subject to} && z(t+1) = A_t z(t) + B_t u(t), \quad t = 0, \dots, N-1. \end{aligned}$$

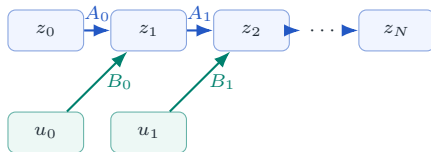
把变量按时间排列:

$$x = (u(0), z(1), u(1), \dots, u(N-1), z(N)).$$

目标分块可分, 所以

$$H = \text{diag}(R_0, Q_1, \dots, R_{N-1}, Q_N).$$

动力学约束矩阵只连接相邻时刻。



最优控制：Schur 补为何是块三对角

动力学只把 $(t-1)$ 与 t 相邻的变量联系起来，因此

$$S = -AH^{-1}A^T = \begin{bmatrix} S_{11} & Q_1^{-1}A_1^T & & & \\ A_1Q_1^{-1} & S_{22} & Q_2^{-1}A_2^T & & \\ & A_2Q_2^{-1} & S_{33} & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & Q_{N-1}^{-1}A_{N-1}^T \\ & & & A_{N-1}Q_{N-1}^{-1} & S_{NN} \end{bmatrix}.$$

稠密通用分解

$$\frac{1}{3}N^3(2k + \ell)^3$$

量级，随时间长度 N 立方增长。

块三对角分解

$$O(k^3N)$$

量级，随 N 线性增长；进一步整理就是 Riccati 递推。

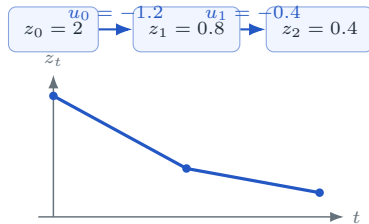
数值例 11: 两步标量控制

系统与代价为

$$z_{t+1} = z_t + u_t, \quad z_0 = 2, \quad N = 2, \quad J = \frac{1}{2}(z_1^2 + z_2^2 + u_0^2 + u_1^2).$$

消去状态: $z_1 = 2 + u_0$, $z_2 = 2 + u_0 + u_1$, 故

$$\nabla J = \begin{bmatrix} 4 + 3u_0 + u_1 \\ 2 + u_0 + 2u_1 \end{bmatrix}.$$



数值例 11: 两步标量控制

系统与代价为

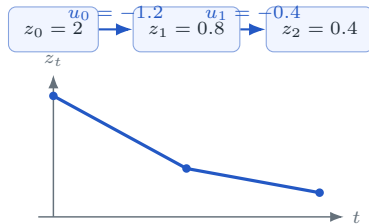
$$z_{t+1} = z_t + u_t, \quad z_0 = 2, \quad N = 2, \quad J = \frac{1}{2}(z_1^2 + z_2^2 + u_0^2 + u_1^2).$$

消去状态: $z_1 = 2 + u_0$, $z_2 = 2 + u_0 + u_1$, 故

$$\nabla J = \begin{bmatrix} 4 + 3u_0 + u_1 \\ 2 + u_0 + 2u_1 \end{bmatrix}.$$

解 $\nabla J = 0$ 得

$$u_0^* = -\frac{6}{5}, \quad u_1^* = -\frac{2}{5}, \quad z_1^* = \frac{4}{5}, \quad z_2^* = \frac{2}{5}.$$



自编数值例; 模型参见 Boyd & Vandenberghe, §10.4.3

应用例 12: 线性矩阵不等式的解析中心

$$\begin{array}{ll} \text{minimize}_X & -\log \det X \\ \text{subject to} & \text{tr}(A_i X) = b_i, \quad i = 1, \dots, p, \quad X \in \mathbb{S}_{++}^n. \end{array} \quad (10.37)$$

KKT 条件为

$$-X^{-1} + \sum_{i=1}^p \nu_i A_i = 0, \quad \text{tr}(A_i X) = b_i. \quad (10.38)$$

直接向量化

X 有 $n(n+1)/2$ 个自由变量; 通用 KKT 分解的复杂度至少为 $O(n^6)$ 。

利用矩阵结构

当 p 固定或相对较小时, 对偶法与矩阵形式的块消元都可将关于 n 的复杂度降到 $O(n^3)$ 量级。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.4.3, equations (10.37)–(10.38)

LMI 解析中心：从对偶变量求 Newton 步

对偶问题可写成

$$\text{maximize } \nu \quad -\mathbf{b}^\top \boldsymbol{\nu} + \log \det \left(\sum_{i=1}^p \nu_i A_i \right) + n, \quad \sum_{i=1}^p \nu_i A_i \succ 0. \quad (10.39)$$

令 $\mathcal{A} = \sum_i \nu_i A_i$, 则

$$[\nabla g(\boldsymbol{\nu})]_i = \text{tr}(\mathcal{A}^{-1} A_i) - b_i, \quad [\nabla^2 g(\boldsymbol{\nu})]_{ij} = -\text{tr}(\mathcal{A}^{-1} A_i \mathcal{A}^{-1} A_j).$$

构造梯度/Hessian 并解 p 维 Newton 系统的主要代价:

$$2pn^3 + \frac{1}{2}p^2n^2 + \frac{1}{3}p^3.$$

达到最优后恢复原始变量:

$$X^\star = \left(\sum_{i=1}^p \nu_i^\star A_i \right)^{-1}.$$

意义

避免把对称矩阵粗暴地当成 $O(n^2)$ 维普通向量。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.4.3, equation (10.39)

LMI 解析中心：原始矩阵形式的块消元

在线性化 KKT 条件中消去 ΔX ：

$$\Delta X = X - \sum_{i=1}^p w_i X A_i X. \quad (10.41)$$

再代回 $\text{tr}(A_j \Delta X) = 0$ ，得到 $p \times p$ 系统

$$Cw = d, \quad C_{ij} = \text{tr}(A_i X A_j X), \quad d_i = \text{tr}(A_i X).$$

正定性

约束独立时， C 对称正定，可用 Cholesky 分解。

计算量

主要代价同样为

$$2pn^3 + p^2 n^2 + \frac{1}{3} p^3.$$

问题 原始法与对偶法计算量相近时，应比较哪一侧更容易找到严格可行初始点。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.4.3, equations (10.40)–(10.41)

数值例 13: 一个 2×2 LMI 解析中心

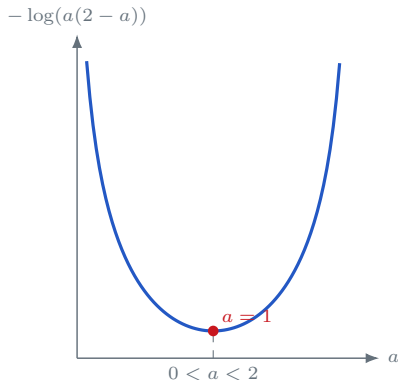
$$\min_{X \succ 0} -\log \det X \quad \text{s.t.} \quad \text{tr } X = 2, \quad X_{12} = 0.$$

取

$$A_1 = I, \quad A_2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad b_1 = 2, \quad b_2 = 0.$$

约束使 $X = \text{diag}(a, 2 - a)$, 所以

$$-\log \det X = -\log(a(2 - a)).$$



数值例 13: 一个 2×2 LMI 解析中心

$$\min_{X \succ 0} -\log \det X \quad \text{s.t.} \quad \text{tr } X = 2, \quad X_{12} = 0.$$

取

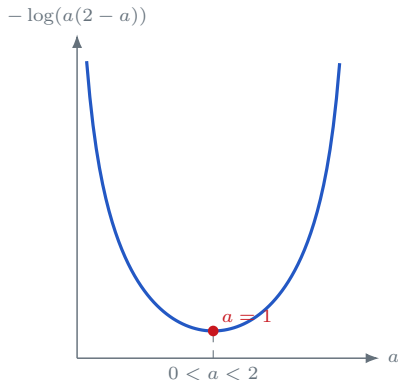
$$A_1 = I, \quad A_2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad b_1 = 2, \quad b_2 = 0.$$

约束使 $X = \text{diag}(a, 2 - a)$, 所以

$$-\log \det X = -\log(a(2 - a)).$$

乘积在 $a = 1$ 处最大, 因此

$$X^* = I, \quad \nu_1^* = 1, \quad \nu_2^* = 0.$$



自编数值例; 模型参见 Boyd & Vandenberghe, §10.4.3

教材例 10.4: 等式约束下的最短折线

折线节点为 $(0, 0), (1, x_1), \dots, (n, x_n)$, 求

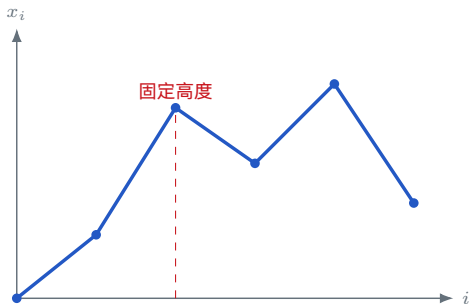
$$\begin{aligned} \text{minimize } & \mathbf{x} \quad \sqrt{1 + x_1^2} + \sum_{i=1}^{n-1} \sqrt{1 + (x_{i+1} - x_i)^2} \\ \text{subject to } & A\mathbf{x} = \mathbf{b}. \end{aligned}$$

每一项只依赖相邻两个高度, 故 Hessian 为三对角矩阵。

块消元代价

$$p^2 n + \frac{1}{3} p^3$$

量级, 随节点数 n 线性增长 (p 固定时)。



Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §10.4.2, Example 10.4

数值例 14：一处自由节点的最短折线

固定端点与中间节点：

$$(0, 0), \quad (1, x_1), \quad (2, 1), \quad (3, 0).$$

总长度为

$$L(x_1) = \sqrt{1 + x_1^2} + \sqrt{1 + (1 - x_1)^2} + \sqrt{2}.$$

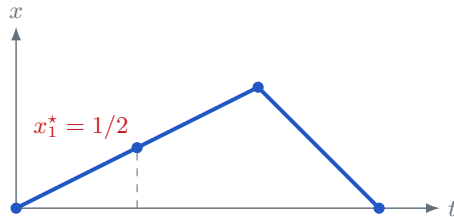
由对称性或 $L'(x_1) = 0$:

$$\frac{x_1}{\sqrt{1 + x_1^2}} - \frac{1 - x_1}{\sqrt{1 + (1 - x_1)^2}} = 0,$$

所以

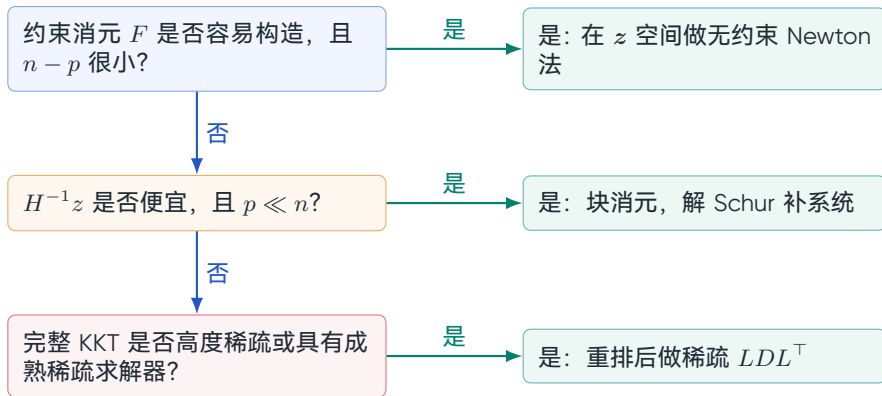
$$x_1^* = \frac{1}{2}, \quad L^* = \sqrt{5} + \sqrt{2}.$$

该小例展示了“局部相邻耦合”如何产生三对角 Hessian。



自编数值例；模型参见 Boyd & Vandenberghe, Example 10.4

如何选择求解路线



实践中还要看数值条件

显式形成 H^{-1} 并非必要; 应通过分解与线性求解实现 H^{-1} 的作用, 并监控正规方程可能造成的条件数放大。

Boyd & Vandenberghe, *Convex Optimization*, §§10.4.1–10.4.3; Appendix C

本章的统一视角

建模层

$$\min f(x) \quad \text{s.t.} \quad Ax = b$$

把可行性和最优性写成 KKT 条件。

算法层

- ▣ 可行起点：只在线性流形内移动；
- ▣ 不可行起点：同时压低原始与对偶残差；
- ▣ 两者局部都具有二次收敛。

计算层

每一步都归结为同一个鞍点线性系统：

$$\begin{bmatrix} H & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta \nu \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} r_{\text{dual}} \\ r_{\text{pri}} \end{bmatrix}.$$

Lecture 06: 内点法

内点法在每一次中心化迭代中仍要求解此类 KKT 系统；本章的残差、线搜索与结构化求解会直接复用。

等式约束最小化

KKT 条件给出方程，Newton 法求解方程，结构化线性代数决定效率。

