理解KKT条件

本笔记是对（凸）优化理论中拉格朗日乘子法和KKT条件的理解和总结，大量参考了如下资料：

Convex Optimization, Stephen Boyd and Lieven Vandenberghe, Cambridge University

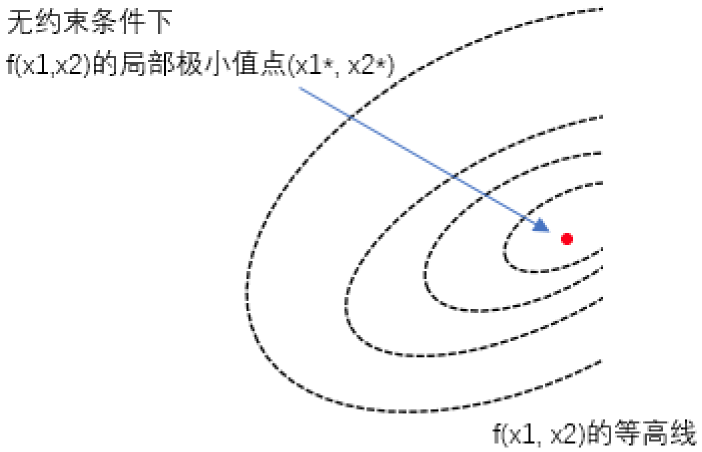
拉格朗日乘子法和KKT条件

如何通俗地讲解对偶问题？尤其是拉格朗日对偶lagrangian duality？

一句话总结：KKT条件就是无约束优化问题中最优值点的必要条件（导数为0）在包含等式约束和不等式约束的优化问题中的推广，它是基于拉格朗日乘子法得来的。

1. 无约束优化

无约束优化问题的求解很简单，直接求解目标函数的梯度即可。对于凸优化问题来说，梯度为0的点也就是全局最优值点。另外需要注意的是，梯度为0是全局最优解的必要条件，即梯度为0的点不一定是全局最优点，而全局最优点处的梯度必定为0。



from https://www.zhihu.com/question/58584814

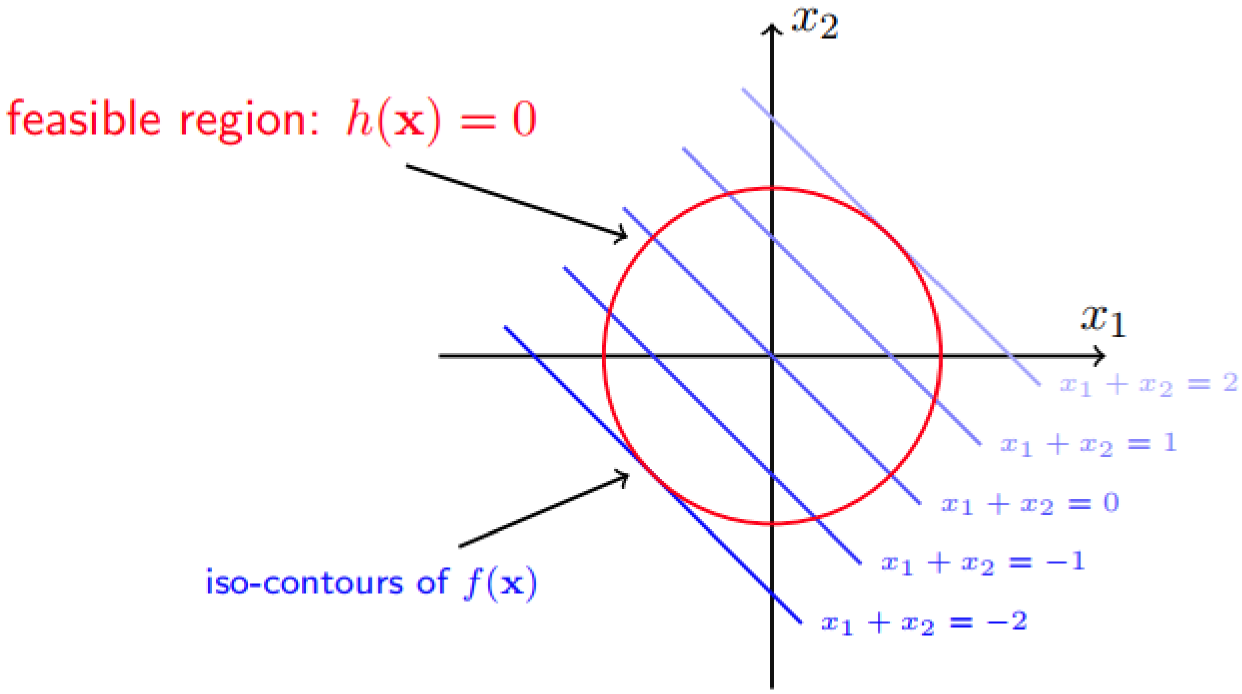
2. 等式约束

2.1 简单例子

我们先来考虑一种简单的情况，有如下优化问题

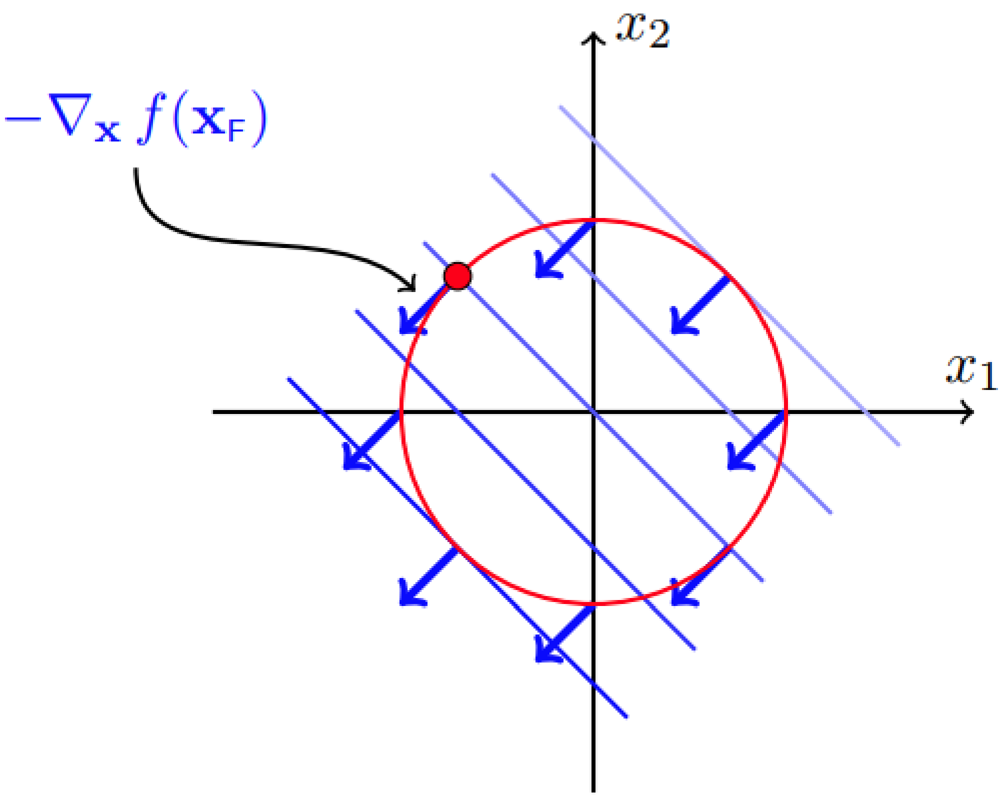
$$\begin{aligned} \min_{x} \quad & f(x) = x_1 + x_2 \\ s.t. \quad & h(x) = x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0 \end{aligned}$$

该问题只含有一个等式约束，其目标函数和约束函数可以用二维平面来表示：



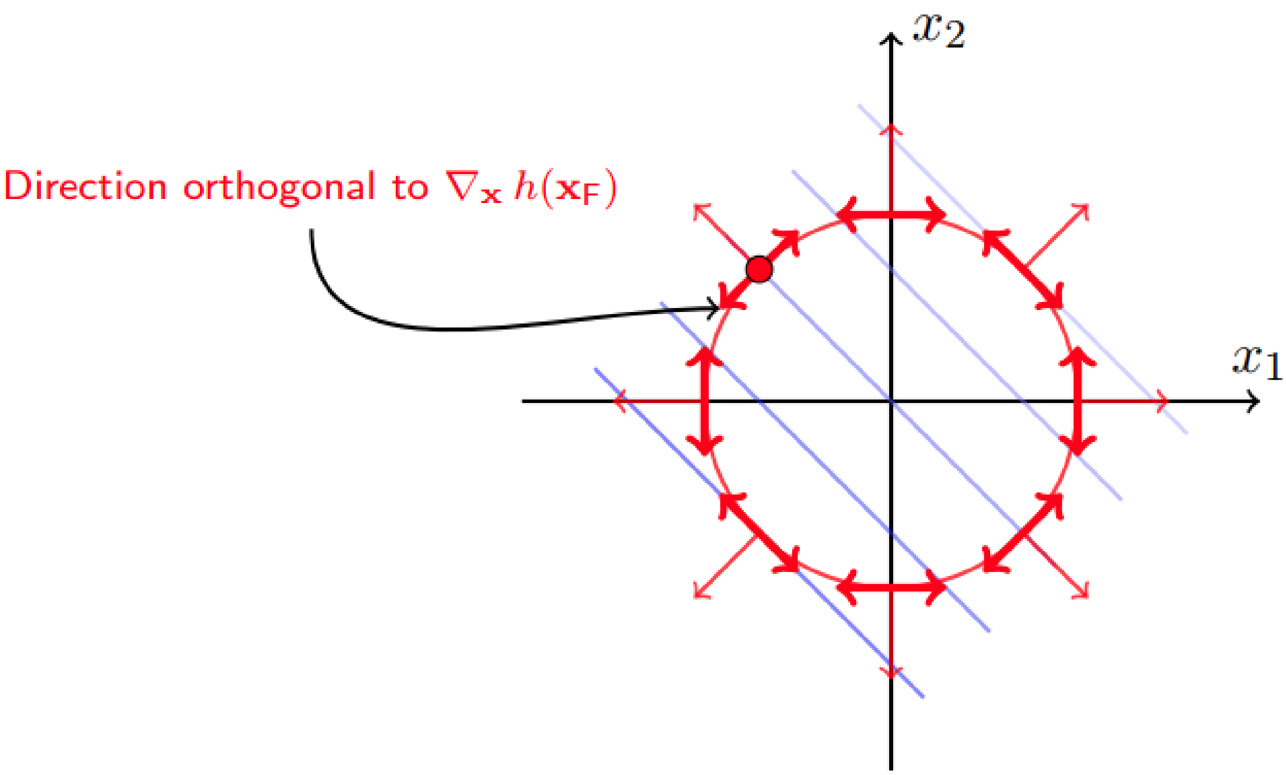
from https://www.cnblogs.com/liaohuiqiang/p/7805954.html

不考虑圆$h(x)$的限制时，$f(x)$要得到极小值，需要往$f(x)$的负梯度（下降最快的方向）方向走，如下图蓝色箭头。



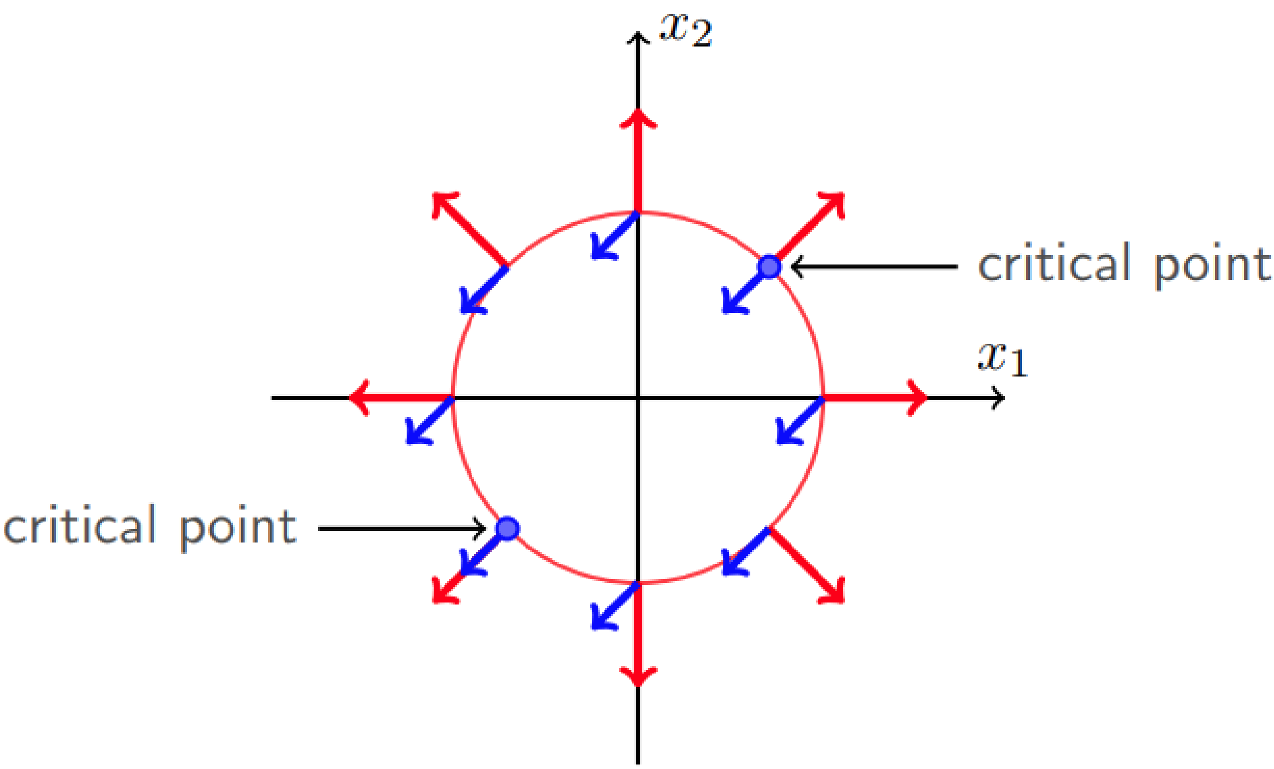
from https://www.cnblogs.com/liaohuiqiang/p/7805954.html

如果考虑圆$h(x)$的限制，要得到极小值，需要沿着圆的切线方向走，如下图红色粗箭头。注意这里的方向不是$h(x)$的梯度，而是正交于$h(x)$的梯度，$h(x)$梯度如下图的红色细箭头。



from https://www.cnblogs.com/liaohuiqiang/p/7805954.html

在极小值点，$f(x)$和$h(x)$的等高线是相切的。并且可以发现，在极小值点处，$f(x)$的负梯度和$h(x)$的梯度在**同一直线**上，如下图critical point的蓝色和红色箭头所示。



from https://www.cnblogs.com/liaohuiqiang/p/7805954.html

于是我们可以得到

$$\nabla_x f(x^*) = \nu \nabla_x h(x^*) \tag{2.1}$$

可知，在极小值点处，式(2.1)必定满足，我们可以将式(2.1)成为拉格朗日条件。

要使式(2.1)成立，我们只要构造拉格朗日函数

$$L(x, \nu)=f(x)+\nu h(x)$$

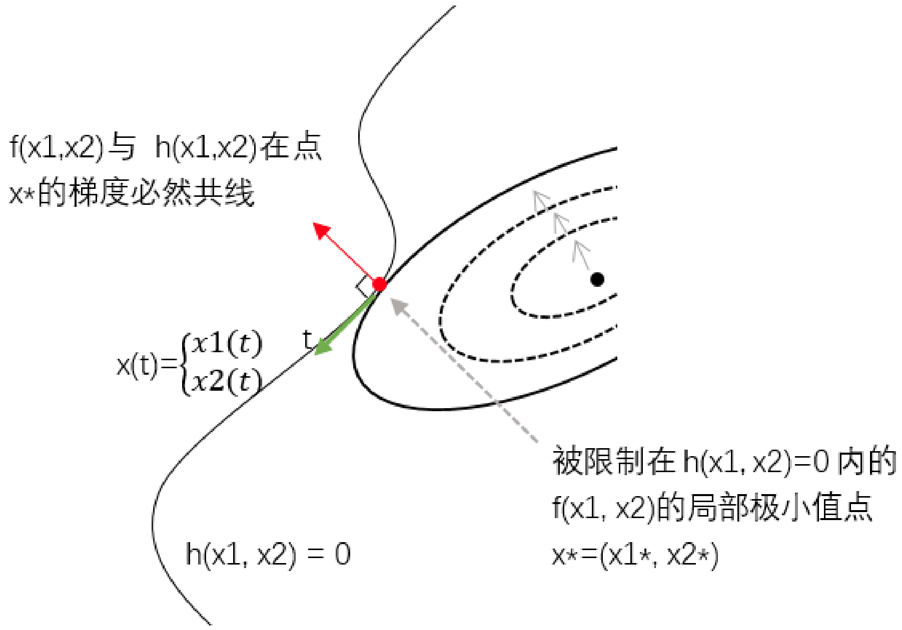
并令其对x求偏导的结果为零，就可以得到拉格朗日条件，这也就是拉格朗日乘子法的由来。

2.2 一般情况

我们可以考虑更一般的情况，有

$$\begin{array}{ll}
\min\limits_{x} & f(x) \\
s.t. & h(x)=0
\end{array}$$

同样以二维平面为例，如下图所示



from https://www.zhihu.com/question/58584814

我们将$h(x)=0$沿着曲线方向参数化为$x(t)$，$x^{*}=x(t^{*})$。必有$f(x)$在上图红点x^{*}处的梯度方向与$x(t)$的切线方向垂直，即

$$\nabla f\left(x^{*}\right) \cdot \dot{x}\left(t^{*}\right)=0$$

另外，由$h(x)=0$可知，复合函数$h(x(t))=0$，两边求导，并且根据链式法则，有

$$\nabla h(x) \cdot \dot{x}(t)=0$$

代入x^{*}和t^{*}，即可得

$$\nabla h\left(x^{*}\right) \cdot \dot{x}\left(t^{*}\right)=0$$

我们可以得到，$\nabla f\left(x^{*}\right)$垂直于$\dot{x}\left(t^{*}\right)$，$\nabla h\left(x^{*}\right)$也垂直于$\dot{x}\left(t^{*}\right)$，所以$\nabla f\left(x^{*}\right)$和$\nabla h\left(x^{*}\right)$共线，有

$$\nabla_{x} f\left(x^{*}\right)=\mu \nabla_{x} h\left(x^{*}\right) \tag{2.1}$$

即式(2.1)成立。于是接下来只要和之前一样构造拉格朗日函数，并且求偏导等于0即可。

3. 不等式约束

不等式约束的情况稍微复杂一些，这里需要引入互补松弛性(complementary slackness)的概念，我们依然从一个简单的例子开始

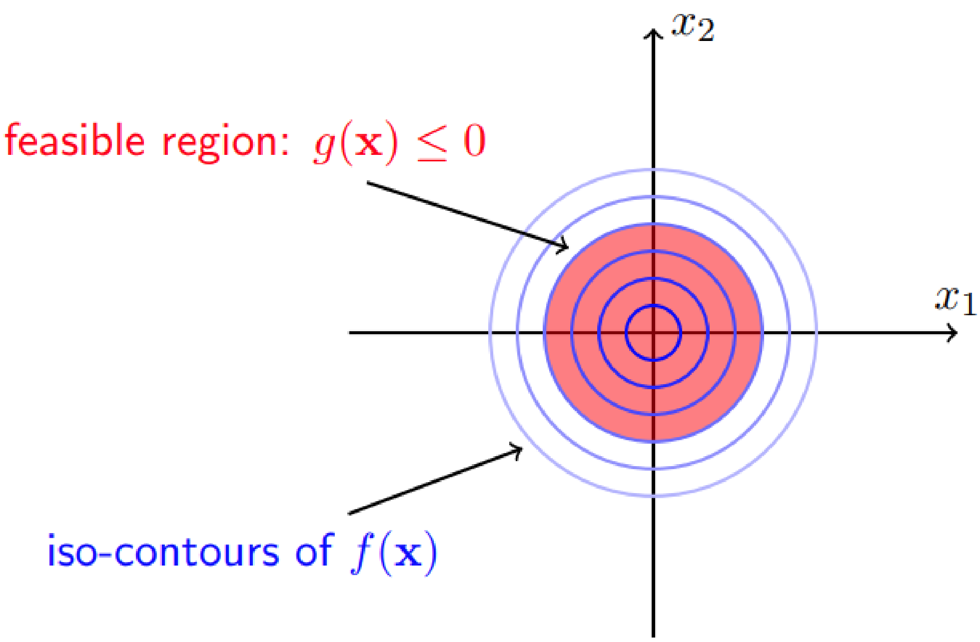
3.1 简单例子

我们分两种情况来考虑不等式约束，第一种情况是目标函数（在不考虑可行域限制时）的极小值点落在可行域内（不包含其边界），第二种是极小值点落在可行域外（包含边界）。

首先是极小值点落在可行域内的情况，我们考虑

$$\begin{aligned} \min_{x} \quad & f(x) = x_1^2 + x_2^2 \\ s.t. \quad & g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1 \leq 0 \end{aligned}$$

这个优化问题只包含一个不等式约束。



from https://www.cnblogs.com/liaohuiqiang/p/7805954.html

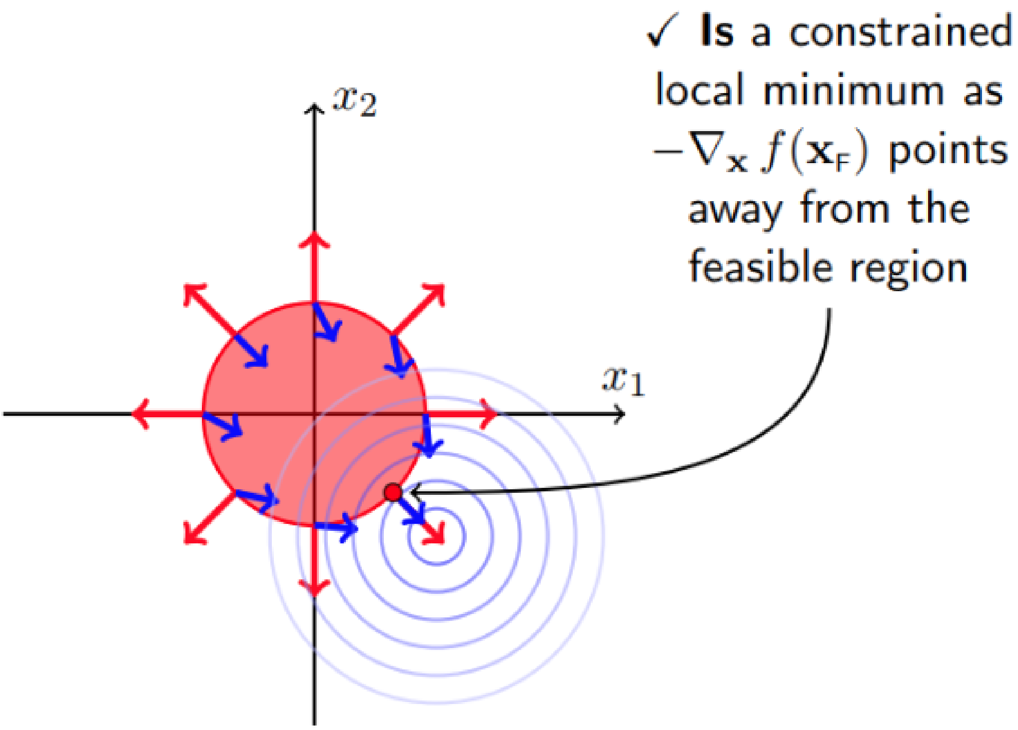
显然$f(x)$的极小值为原点(0,0)，落在可行域内。可行域以原点为圆心，半径为1。在极小值点x^*处，有$g(x^*) < 0$，$\nabla f(x^*) = 0$，我们可以认为，此时不等式约束不起作用。

对于极小值点落在可行域外的情况，我们考虑

$$\begin{aligned} \min_{x} \quad & f(x) = (x_1 - 1.1)^2 + (x_2 + 1.1)^2 \\ s.t. \quad & g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1 \leq 0 \end{aligned}$$

显然$f(x)$的极小值为原点(1.1, -1.1)，落在可行域外。可行域以原点为圆心，半径为1。这种情况约束起作用，要考虑求解$f(x)$在可行域内的极小值点。

对于$f(x)$而言要沿着$f(x)$的负梯度方向走，才能走到极小值点，如下图的蓝色箭头。而$g(x)$的梯度往区域外发散，如下图红色箭头。



from https://www.cnblogs.com/liaohuiqiang/p/7805954.html

显然，走到可行域内极小值点的时候，$g(x)$**的梯度和**$f(x)$**的负梯度同向**（下面式(3.1)中$\lambda > 0$的原因）。因为极小值点在边界上，此时$g(x)$等于0。我们有

$$-\nabla_x f\left(x^*\right)=\lambda \nabla_x g\left(x^*\right) \quad \text{and} \quad \lambda>0 \tag{3.1}$$

把两种情况总结一下：

a) 当目标函数极小值点落在可行域内时，约束不起作用，直接令$f(x)$的梯度等于0求解，此时$g(x) < 0$;

b) 目标函数极小值点落在可行域外时，约束起作用，约束下的极小值点应该落在可行域边界上，即$g(x) = 0$，此时有$g(x)$的梯度和$f(x)$的负梯度同向。

构造拉格朗日函数

$$L(x, \lambda)=f(x)+\lambda g(x)$$

对于情况a)，因为约束不起作用，意味着$\lambda = 0$，即约束被省略。

综合两种情况，不难发现，在极小值点处，总有

$$\lambda^* g\left(x^*\right)=0 \tag{3.2}$$

这个性质就是**互补松弛性。**

总结一下，不等式约束下的极小值点需满足以下条件：

$$\begin{aligned}
&\nabla_{\mathbf{x}} L\left(\mathbf{x}^*, \lambda^*\right)=\mathbf{0} \\
&\lambda^* \geq 0 \\
&\lambda^* g\left(\mathbf{x}^*\right)=0 \\
&g\left(\mathbf{x}^*\right) \leq 0
\end{aligned}$$

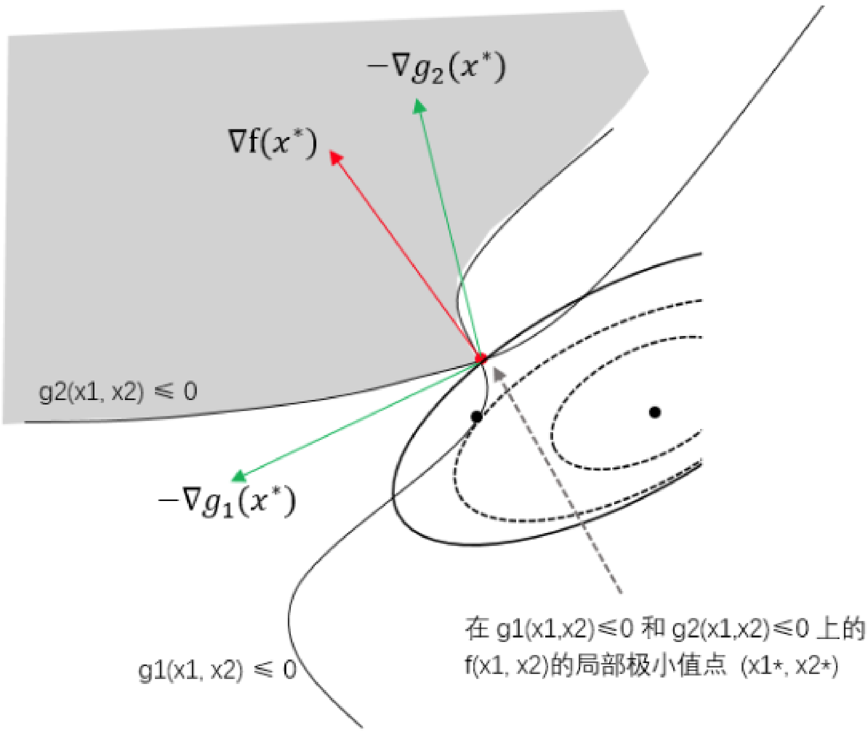
这就是著名的KKT条件。

3.2 一般情况

我们来考虑两个不等式约束起作用的情况：

$$
\begin{aligned}
\min_{x} \quad & f(x) \\
s.t. \quad & g_1(x) \leq 0 \\
& g_2(x) \leq 0
\end{aligned}
$$

以二维平面为例，如下图



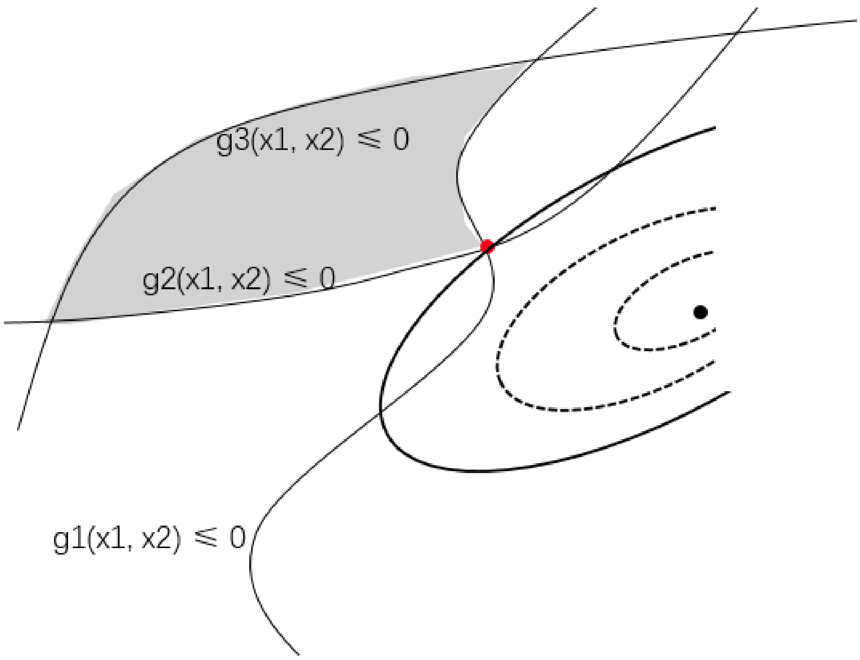
from https://www.zhihu.com/question/58584814

阴影部分是可行域，与$f(x)$的等高线相加的点（红点）是满足约束的最小值点。从图中可以看到，在最小值点处，目标函数梯度$\nabla f(x^*)$（红色箭头）一定在两条约束曲线负梯度方向$-\nabla g_1(x^*)$和$-\nabla g_2(x^*)$（绿色箭头）之间，也就说，$\nabla f(x^*)$能被$-\nabla g_1(x^*)$和$-\nabla g_2(x^*)$线性表出，有

$$
\nabla f(x^*) = -\lambda_1 \nabla g_1(x^*) - \lambda_2 \nabla g_2(x^*) \tag{3.3}
$$

其中$\lambda_1 \geq 0$，$\lambda_2 \geq 0$。

如果我们再加入一个不等式约束$g_3(x) \leq 0$，但它在最小值点处不起作用，如下图



from https://www.zhihu.com/question/58584814

此时根据互补松弛性，我们令$\lambda_3=0$，那么有

$$\nabla f\left(x^*\right)=-\lambda_1 \nabla g_1\left(x^*\right)-\lambda_2 \nabla g_2\left(x^*\right)-\lambda_3 \nabla g_3\left(x^*\right) \tag{3.4}$$

虽然我们多加了一个不等式约束，但实际上最后得到的最小值点梯度是与式(3.3)一致的。

构造拉格朗日函数

$$L(x,\lambda)=f(x)+\lambda_1 g_1(x)+\lambda_2 g_2(x)+\lambda_3 g_3(x)$$

对于更多的不等式，我们可以继续构造下去，有几个不等式，就有几个拉格朗日乘子。

4. KKT条件

对于一个带有等式约束和不等式约束的优化问题

$$\begin{array}{rll} \min_x & f_0(x) & \\ \text{s.t.} & f_i(x) \leq 0, & i=1,\ldots,m \\ & h_i(x)=0, & i=1,\ldots,p \end{array}$$

完整的KKT条件表述如下：

$$\begin{aligned} f_i(x) &\leq 0, \quad i=1,\cdots,m && (4.1)\\ h_i(x) &\leq 0, \quad i=1,\cdots,p && (4.2)\\ \lambda_i &\geq 0, \quad i=1,\cdots,m && (4.3)\\ \lambda_i f_i(x) &= 0, \quad i=1,\cdots,m && (4.4)\\ \nabla f_0(x)+\sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla f_i(x) &+ \sum_{i=1}^p \nu_i \nabla h_i(x)=0 && (4.5) \end{aligned}$$

其中，式（4.1）和（4.2）是原始约束，式（4.3）是对偶可行性的要求，式（4.4）是互补松弛性的要求，式（4.5）即为拉格朗日函数关于x的梯度。

需要注意的是，KKT条件是一个必要条件，也就是说，满足KKT条件的点不一定是最小值点，但最小值点必定满足KKT条件。对于凸优化问题来说，由于不存在局部极小值，因此KKT条件此时变为最小值点的充要条件。