第五章 最优化方法（3）
无约束规划的最优条件

无约束优化的最优条件

考虑无约束优化问题：

$$\min f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n.$$

要判断某点 x^* 是否为局部极小点，通常需要用到 **一阶必要条件** 与 **二阶条件**。

一阶必要条件

若 $f(x)$ 在 x^* 可微且 x^* 为局部极小点，则：

$$\nabla f(x^*) = 0$$

这个条件表示：在最优点处，函数的梯度为零，没有下降方向，该点称为 **驻点（Critical point）**。
注意：$\nabla f(x^*) = 0$ 只是**必要条件**，并不能保证是极小点，也可能是极大点或鞍点。

二阶条件

- **二阶必要条件**
  如果 x^* 是局部极小点，并且 f 二阶可微，则 Hessian 必须为 **半正定**：

$$\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$$

- **二阶充分条件**
  如果在驻点 x^* 有：

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad \text{并且} \quad \nabla^2 f(x^*) \succ 0,$$

  即 Hessian 在该点 **正定**，则：

$$x^* \text{ 是严格局部极小点。}$$

例题

> 求下列无约束规划问题的局部极值点
>
> $$\min f(x) = \frac{1}{3}x_1^3 + \frac{1}{2}x_2^2 - x_2^2 - x_1$$

解答：

Step 1：计算梯度（求一阶偏导）

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^2 - 1 \\ x_2 - 2x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 - 1 \\ x_2^2 - 2x_2 \end{pmatrix}$$

Step 2：令梯度为 0，求驻点

求解：

$$\begin{cases} x_1 - 1 = 0 \\ x_2^2 - 2x_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2(x_2 - 2) = 0 \end{cases}$$

得到两个驻点：

$$(1,0) \quad \text{和} \quad (1,2)$$

Step 3：计算 Hessian（求二阶偏导矩阵）

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2x_2 - 2 \end{pmatrix}$$

- 驻点 $(1,0)$：

  $$\nabla^2 f(1,0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$$

  对角元分别为 $1 > 0$，$-2 < 0$。 此时 Hessian **不定矩阵** → **鞍点。**

- 驻点 $(1,2)$：

  $$\nabla^2 f(1,2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

  该矩阵特征值均为正 → **正定矩阵。** 由二阶充分条件可知：

  $$(1,2)\text{为严格局部极小点。}$$

综上：

- $(1,2)$ 是该函数的 **严格局部极小点**；
- $(1,0)$ 不是极小点，而是 **鞍点。**