第五章 最优化方法（4）
KKT点问题，二阶充分条件

带约束规划问题的最优性条件（求 KKT 点问题）

标准问题形式 & Lagrange 函数

该类型优化问题的标准形：

$$
\begin{array}{ll}
\min & f(x) \\
\text{s.t.} & h_i(x)=0,\ i\in\mathcal{E} \\
 & g_j(x)\geq 0,\ j\in\mathcal{I}.
\end{array}
$$

其中 $h_i(x)=0,\ i\in E;\ g_j(x)\geq 0,\ j\in I.$ 是约束的可行域。通常考试只考带有 $g_j(x)\geq 0,\ j\in I$ 的情形。

定义 Lagrange 函数：

$$
L(x,w,v)=f(x)-\sum_{i\in E}w_ih_i(x)-\sum_{j\in I}v_jg_j(x)
$$

其中 w_i 是等式约束的拉格朗日乘子，v_j 是不等式约束的拉格朗日乘子。

KKT 一阶必要条件

在满足一定约束资格条件（线性独立性条件）的前提下，若 x^* 是局部极小点，则存在乘子向量 w^*,v^*，使得：

1. **梯度条件**

   $$
   \nabla_x L(x^*,w^*,v^*)=0
   $$

   即： Lagrange 函数对所有变量求偏导并令其为 0。

2. **可行性条件**

   $$
   h_i(x^*)=0,\ i\in\mathcal{E}
   $$
   $$
   g_j(x^*)\geq 0,\ j\in\mathcal{I}.
   $$

   也就是问题本身自带的可行域约束

3. **互补松弛条件**

   $$
   v_j^*\geq 0,\ j\in\mathcal{I}.
   $$
   $$
   v_j^*g_j(x^*)=0,\ j\in\mathcal{I}
   $$

   包括拉格朗日乘子 v_j 非负，并且和对应约束 $g_j(x)$ 互补松弛。

- 若约束 $g_j(x)$ 不活跃（$g_j(x) > 0$，严格大于 0），则对应乘子 v_j 必须为 0；
- 若约束 $g_j(x)$ 活跃（$g_j(x) = 0$，即在边界），则乘子 v_j 可非零。

总结可得 KKT 条件如下（适用于本校考试）：

$$\begin{cases} \nabla_x L(x, w, v) = 0, \\ h_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E}, \\ g_j(x) \geq 0,\ j \in \mathcal{I}, \\ v_j \geq 0,\ j \in \mathcal{I}, \\ v_j g_j(x) = 0,\ j \in \mathcal{I} \end{cases}$$

二阶充分条件

二阶充分条件:

设 x^* 是问题 的 KKT 点，对应乘子 w^*, v^*，且 $v_j^* \geq 0$。
若对所有 **非零** 方向 $d \in G(x^*, w^*, v^*)$，都有

$$d^T \nabla_{xx}^2 L(x^*, w^*, v^*) d > 0$$

则 x^* 是问题的 **严格局部极小点。**

其中的方向集合 $G(x^*, w^*, v^*)$ 定义为:

$$G(x^*, w^*, v^*) = \left\{ d \left| \begin{array}{ll} \nabla h_i(x^*)^T d = 0, & i \in \mathcal{E}, \\ \nabla g_j(x^*)^T d = 0, & j \in \mathcal{I}(x^*),\ v_j^* > 0, \\ \nabla g_j(x^*)^T d \geq 0, & j \in \mathcal{I}(x^*),\ v_j^* = 0 \end{array} \right. \right\}$$

- $\mathcal{I}(x^*) = j \in \mathcal{I} \mid g_j(x^*) = 0$: **活跃的不等式约束集合**;
- 第一行：沿等式约束切面移动;
- 第二、三行：对活跃不等式约束，根据乘子是否 >0 再细分。

结合 KKT 点的求解和上述二阶充分条件，完整的解题步骤如下:
Step 0：写成标准形式

把原题整理成:

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & h_i(x) = 0, \\ & g_j(x) \geq 0. \end{array}$$

Step 1：引入乘子，写 Lagrange 函数

$$L(x, w, v) = f(x) - \sum w_i h_i(x) - \sum v_j g_j(x)$$

Step 2：列 KKT 条件并求解

$$\begin{cases} \nabla_x L(x, w, v) = 0, & (\text{梯度条件}) \\ h_i(x) = 0, & (\text{等式可行}) \\ g_j(x) \geq 0, & (\text{不等式可行}) \\ v_j g_j(x) = 0,\ v_j \geq 0, & (\text{互补松弛}) \end{cases}$$

分类讨论活跃约束，解出所有 (x^*, w^*, v^*)。得到的每个 x^* 都是 **候选最优点**，接下来用二阶条件筛选。

Step 3：对每个候选点构造 $G(x^*, w^*, v^*)$

1. 先确定活跃集合：

$$\mathcal{I}(x^*) = j \mid g_j(x^*) = 0$$

2. 根据乘子 v_j^* 再细分：
   - 如果 $j \in I(x^*)$ 且 $v_j^* > 0$，要求

$$\nabla g_j(x^*)^T d = 0;$$

   - 如果 $j \in I(x^*)$ 且 $v_j^* = 0$，要求

$$\nabla g_j(x^*)^T d \geq 0.$$

3. 再加上所有等式约束的方向条件（不过考试一般没有这个）：

$$\nabla h_i(x^*)^T d = 0,\ i \in E.$$

Step 4：计算二阶导（Hessian）

$$H = \nabla_{xx}^2 L(x^*, w^*, v^*)$$

注意：若 h_i, g_j 是线性的，则它们二阶导为 0，H 就等于 $\nabla^2 f(x^*)$。

Step 5：检查二阶充分条件

在所有非零 $d \in G(x^*, w^*, v^*)$ 上检查：

$$d^T H d > 0, \quad \forall, d \in G(x^*, w^*, v^*),\ d \neq 0.$$

- 若成立，则 x^* 是问题的**严格局部极小点**；
- 若不成立：这个 KKT 点不一定是极小点，可能是鞍点或别的。

例题

> 求下列约束优化问题的局部极小值点
>
> $$\begin{aligned} \min \quad & (x_1-1)^2 + x_2 \\ \text{s.t.} \quad & -x_1 - x_2 + 2 \geq 0, \\ & x_2 \geq 0. \end{aligned}$$

解答：

Step 0：写成标准形式

设：

$$f(x) = (x_1-1)^2 + x_2, \quad g_1(x) = -x_1 - x_2 + 2 \geq 0, \quad g_2(x) = x_2 \geq 0.$$

本题无等式约束。

Step 1：写 Lagrange 函数

$$L(x,v) = f(x) - v_1 g_1(x) - v_2 g_2(x)$$

即：

$$L = (x_1-1)^2 + x_2 - v_1(-x_1-x_2+2) - v_2 x_2$$

Step 2：列 KKT 条件并求解

1. 梯度条件：

$$\nabla_x L = 0 \Rightarrow \begin{cases} 2(x_1-1)+v_1=0 \\ 1+v_1-v_2=0 \end{cases} \tag{A}$$

2. 可行性条件：

$$-x_1-x_2+2 \ge 0, \quad x_2 \ge 0 \tag{B}$$

3. 互补松弛条件：

$$v_1(-x_1-x_2+2)=0, \quad v_2 x_2 = 0, \quad v_1, v_2 \ge 0 \tag{C}$$

（此处省略分类讨论，此处本应需要 4 中情况分类讨论，每个约束为活跃或非活跃）
代入 $x=(1,0)^T$ 发现满足 KKT 条件，且其它情况不满足。
故 KKT 候选点 $x^*=(1,0)^T$，对应乘子 $v_1^*=0,\ v_2^*=1$.

Step 3：构造 $G(x^*,v^*)$

首先确定 **活跃不等式集合**：

$$\mathcal{I}(x^*) = \{j \mid g_j(x^*)=0\} = \{2\}$$

也就是第 2 个条件 $g_2(x)$ 是活跃的。
因为 $v_2^*=1>0$，根据规则：

$$\nabla g_2(x^*)^T d = 0 \Rightarrow (0,1)^T \cdot (d_1,d_2) = d_2 = 0$$

由于 d 是 **非零** 方向向量，因此：

$$G(x^*,v^*) = \{d \mid d=(d_1,0) \ne (0,0)\}$$

Step 4：计算 Hessian

$$H = \nabla_{xx}^2 L = \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

因为 g_1, g_2 是线性函数，其二阶导为 0，因此 Hessian 只由 f 决定。

Step 5：检查二阶充分条件

对所有 $d \in G(x^*,v^*)$，$d=(d_1,0)\ne 0$：

$$d^T H d = (d_1, 0)\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d_1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2d_1^2 > 0$$

符合二阶充分条件。

综上：

$$\boxed{x^*=(1,0)\ \text{是该问题的严格局部极小点（并且是全局最优点）。}}$$
