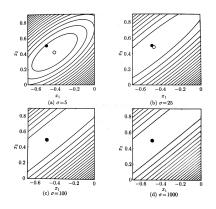


### 罚函数病态条件

罚函数中参数 $\sigma$ 增大将使得罚函数子问题最优解与原约束优化问题最优解趋于一致,同时也带来了对应二阶Hesse矩阵病态的问题特征,不利于算法的稳定性。



# 建立增广拉格朗日方法思想

外点罚函数方法的主要问题:

- $\sigma_k \to \infty$ 所引起的无约束最优化问题的病态性。若可以构造出来某种函数, 不要求 $\sigma_k \to \infty$ ;
- 或者只要 $\sigma_k$ 足够大, 此函数的极小点为原问题的最优解, 则可以避免病态问题出现.

如何构造这种函数?假定这种函数形式为 $\Phi(x,\sigma)$ ,其中 $\sigma>0$ 为给定参数.希望优化如下问题:

$$\min_{\boldsymbol{x}} \varPhi(\boldsymbol{x}, \sigma)$$

得到原问题的最优解 $x^*$ 。

## 增广拉格朗日方法

根据无约束最优化问题目标函数在最优解处应满足条件来构造。具体地,在 $x^*$ 处, $\Phi(x,\sigma)$ 应满足一阶最优性条件:

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} \Phi(\boldsymbol{x}^*, \sigma) = 0$$

和二阶最优性条件(基于方向导数)

$$\frac{\partial^2 \Phi(\boldsymbol{x}^*, \sigma)}{\partial \boldsymbol{d}^2} > 0, \boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$$

其中d为x\*处任意非零方向.

## 检验罚函数是否满足条件

考虑罚函数

$$P_{\mathrm{E}}(\boldsymbol{x}, \sigma) = f(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}\sigma \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(\boldsymbol{x})$$

计算其在可行点x\*处的梯度:

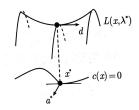
$$\nabla P_{\mathrm{E}}(\boldsymbol{x}^*, \sigma) = \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sigma \sum_{i \in \mathcal{E}} \nabla c_i(\boldsymbol{x}^*) c_i(\boldsymbol{x}^*) = \nabla f(\boldsymbol{x}^*)$$

在罚因子固定的情况下,  $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) \neq 0$ , 故 $\boldsymbol{x}^*$ 不是无约束最优化问题的最优解, 一般不能够通过求罚函数极小点得到原问题最优解.

### 检验拉格朗日函数

### 再看拉格朗日函数 $L(x, \lambda)$ :

- 存在KKT点 $x^*$ 与对应的Lagrange乘子 $\lambda^*$ , 必然满足一阶最优性条件.
- 对含有一个等式约束的问题为例, 二阶条件不成立, 如下图



 $L(x, \lambda^*)$ 在 $x^*$ 处仅沿着:

$$\boldsymbol{c}(\boldsymbol{x}) = 0$$

的切线方向d的二阶方向导数为正, 其他方向均为负.

## 增广拉格朗日函数

#### 构造思想:

在 $x^*$ 附近, $L(x, \lambda^*)$ 沿着方向d的函数曲面保持不变,其余部分的函数曲面向上拉起,使得函数在 $x^*$ 处沿着任意方向的二阶方向导数均为正。这相当于当变量离开约束时,就加大 $L(x, \lambda^*)$ 的函数值. 这正是构造罚函数的思想.

### 增广形式:

$$\Phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \sigma) = f(\boldsymbol{x}) - \lambda^T \boldsymbol{c}(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2} \sigma \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(\boldsymbol{x}).$$
 (6.4.1)

该函数也可以理解为在罚函数基础上增加了乘子项得到的,故又称为乘子罚函数法.

# 增广拉格朗日函数变化情况

例6.4.1 考虑等式约束优化问题:

min 
$$f(x) = 2x_1^2 - x_2^2 + x_1 - x_2$$
  
s.t.  $x_1 - x_2 = 0$ 

分析: 以上问题的Lagrange函数形式为:

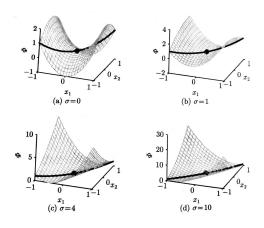
$$L(\mathbf{x}, \lambda) = 2x_1^2 - x_2^2 + x_1 - x_2 - \lambda(x_1 - x_2)$$

KKT对为 $\mathbf{x}^* = (0,0)^T$ ,  $\lambda^* = 1$ . 在 $\lambda^*$ 处,  $L(\mathbf{x},\lambda^*) = 2x_1^2 - x_2^2$ 为非正定函数. 在 $\lambda^*$ 处的增广Lagrange函数形式:

$$\Phi(\mathbf{x}, \lambda^*, \sigma) = 2x_1^2 - x_2^2 + \frac{1}{2}\sigma(x_1 - x_2)^2 
= \left(2 + \frac{\sigma}{2}\right)x_1^2 - \sigma x_1 x_2 + \left(\frac{\sigma}{2} - 1\right)x_2^2$$

# 增广拉格朗日函数变化情况

对应不同 $\sigma$ 的增广Lagrange函数 $\Phi(x, \lambda^*, \sigma)$ 



## 增广拉格朗日方法迭代格式

在之前例题中,  $\lambda^*$ 是已知的, 实际上 $\lambda^*$ 需要通过迭代求出. 下面具体确定 迭代格式, 在第k步迭代, 当 $\sigma_k$ ,  $\lambda_k$ 给定时, 由

$$\min_{\boldsymbol{x}} \Phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}_k, \sigma_k)$$

可以得到 $x_k$ , 并满足 $\nabla_x \Phi(x_k, \lambda_k, \sigma_k) = 0$ , 即有

$$\nabla f(\boldsymbol{x}_k) + A(\boldsymbol{x}_k)[-\boldsymbol{\lambda}_k + \sigma_k c(\boldsymbol{x}_k)] = 0.$$
 (6.4.2)

这里:

$$A(\boldsymbol{x}_k) = [\nabla c_1(\boldsymbol{x}_k), \cdots, \nabla c_m(\boldsymbol{x}_k)]$$

### 增广拉格朗日方法

当 $\sigma_k$ 足够大时,有

$$\nabla f(\boldsymbol{x}_k) \approx \nabla f(\boldsymbol{x}^*), \quad A(\boldsymbol{x}_k) \approx A(\boldsymbol{x}^*)$$

结合(6.4.2)与KKT条件 $\nabla f(\mathbf{x}^*) - \nabla c(\mathbf{x}^*) \boldsymbol{\lambda}^* = 0$ , 可得到:

$$\boldsymbol{\lambda}^* \approx \boldsymbol{\lambda}_k - \sigma_k \boldsymbol{c}(\boldsymbol{x}_k)$$

于是得到求 $\lambda$ \*的迭代格式:

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - \sigma_k c(x_k) \tag{6.4.3}$$

### 增广拉格朗日方法

比较罚函数与增广Lagrange函数的乘子关系,可以分析二者的差别, 当k充分大时

• 罚函数

$$c_i(\boldsymbol{x}_k) pprox -rac{1}{\sigma_k}\lambda_i^*, \quad i \in \mathcal{E}$$
 (6.4.4)

• 增广Lagrange函数

$$c_i(\boldsymbol{x}_k) pprox \frac{1}{\sigma_k} (\lambda_i^* - \lambda_i^{(k)}), \quad i \in \mathcal{E}$$
 (6.4.5)

比较这两个式子可以发现,只要 $\sigma_k$ 充分大, $\lambda_k$ 充分接近 $\lambda^*$ ,乘子罚函数方法得到的 $x_k$ 比罚函数方法得到的 $x_k$ 更接近于可行点。

## 增广拉格朗日函数方法步骤

### 算法6.4.1 增广拉格朗日函数方法

步1 给定初始点 $x_0$ ,  $\lambda_1$ ,  $\sigma_1 > 0$ ,  $\rho > 1$ ,  $\varepsilon > 0$ ,  $\varepsilon_1 > 0$ , k = 1.

步2 以 $x_{k-1}$ 为初始点, 求解:

$$\min_{\boldsymbol{x}} \Phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}_k, \sigma_k)$$

得 $x_k$ , 且满足:

$$\|\nabla_{\boldsymbol{x}}\Phi(\boldsymbol{x}_k,\boldsymbol{\lambda}_k,\sigma_k)\|<\varepsilon_1.$$

- 步3  $\lambda_{k+1} = \lambda_k \sigma_k c(x_k)$ ;
- 步4 若 $\|c(x_k)\| \le \varepsilon$ , 则停止迭代,得近似解 $x_k, \lambda_{k+1}$ ; 否则, k := k+1, 取 $\sigma_{k+1} = \rho \sigma_k$ , 转步2.

## 等式约束最优化问题最优解充分条件与必要条件

### 定理 6.4.1 等式约束最优解充分条件与必要条件.

设 $x^*$ 是等式约束优化问题(6.3.1)的严格局部最优解,  $\lambda^*$ 为对应的最优拉格朗日乘子, 在 $x^*$ ,  $\lambda^*$ 处最优性的二阶充分条件满足, 则存在 $\sigma^* \geq 0$ , 对给任何 $\sigma \geq \sigma^*$ ,  $x^*$ 是增广拉格朗日函数 $\Phi(x,\lambda^*,\sigma)$ 的严格局部极小点; 反之, 若 $c_i(x^*) = 0$ ( $i=1,\ldots,m$ ),  $x^*$ 是 $\Phi(x,\lambda^*,\sigma)$ 的局部极小点,则 $x^*$ 是等式约束优化问题(6.3.1)的局部极小点。

证明: 由 $\Phi(x, \lambda, \sigma)$ 的定义知:

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} \Phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \sigma) = \nabla_{\boldsymbol{x}} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) + \sigma A(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{c}(\boldsymbol{x})$$

$$\nabla^{2}_{\boldsymbol{x} \boldsymbol{x}} \Phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \sigma) = \nabla^{2}_{\boldsymbol{x} \boldsymbol{x}} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) + \sigma A(\boldsymbol{x}) A(\boldsymbol{x})^{T} + \sigma \sum_{i} c_{i}(\boldsymbol{x}) \nabla^{2} c_{i}(\boldsymbol{x}).$$
(a1)

(a2)

### 定理6.4.1证明

证明续:因为 $x^*$ 为严格局部最优解,由KKT条件与 $x^*$ 的可行性有:

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} \Phi(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \sigma) = \nabla_{\boldsymbol{x}} L(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = 0$$
$$\nabla_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}}^2 \Phi(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \sigma) = \nabla_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}}^2 L(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) + \sigma A(\boldsymbol{x}^*) A(\boldsymbol{x}^*)^T.$$

由约束优化二阶最优性充分条件有:

$$\boldsymbol{d}^T \nabla_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}}^2 L(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) \boldsymbol{d} > 0, A(\boldsymbol{x}^*)^T \boldsymbol{d} = 0, \boldsymbol{d} \neq 0.$$

由教材引理7.3(202页)知,存在 $\sigma^* \geq 0$ ,对任意 $\sigma \geq \sigma^*$ ,有 $\nabla^2_{xx}L(x^*, \lambda^*) + \sigma A(x^*)A(x^*)^T$ 正定,从而 $x^*$ 是 $\min \Phi(x^*, \lambda^*, \sigma)$ 的严格局部最优解。

反之,已知 $x^*$ 是可行点,设x与 $x^*$ 充分接近, $x \in \mathcal{D}$ ,则有:

$$\Phi(x^*, \lambda^*, \sigma) \le \Phi(x, \lambda^*, \sigma)$$

### 定理6.4.1证明

证明续: 由 $x^*$ 与x的可行性知:

$$\Phi(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \sigma) = f(\mathbf{x}^*), \quad \Phi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^*, \sigma) = f(\mathbf{x}).$$

则对与x\*充分接近的 $x \in \mathcal{D}$ ,有:

$$f(\boldsymbol{x}^*) \le f(\boldsymbol{x}),$$

即x\*是问题(6.3.1)的局部最优解。

# 例题分析

重新考虑例 6.3.1, 其增广拉格朗日函数为:

$$\Phi(\boldsymbol{x}, \lambda, \sigma) = f(\boldsymbol{x}) - \lambda(x_1 - x_2) + \frac{1}{2}\sigma(x_1 - x_2)^2$$

对 $\lambda^* = 1$ ,有:

$$\Phi(\mathbf{x}, \lambda^*, \sigma) = 2x_1^2 - x_2^2 + \frac{1}{2}\sigma(x_1 - x_2)^2, 
\frac{\partial \Phi}{\partial x_1} = (4 + \sigma)x_1 - \sigma x_2, 
\frac{\partial \Phi}{\partial x_2} = (\sigma - 2)x_2 - \sigma x_1$$

当 $\sigma > 4$ 时, $\nabla_x^2 \Phi(x, \lambda^*, \sigma)$ 正定,显然 $x^* = (0, 0)^T$ 是 $\Phi(x, \lambda^*, \sigma)$ 的严格局部极小点。

# 例题分析

反之,  $\Phi(x, \lambda, \sigma)$ 的局部极小点为:

$$x_1 = \frac{1-\lambda}{\sigma - 4}, \quad x_2 = 2\frac{1-\lambda}{\sigma - 4}$$

若要满足约束条件, 只有:

$$\lambda=1, \exists \exists x_1^*=x_2^*=0$$

是约束优化问题的最优解.

### 一般约束优化问题松弛

引入松弛变量 $s_i, i \in \mathcal{I}$ ,化一般约束优化问题(6.1.1)为松弛问题:

$$\min F(x, s) = f(x) \tag{6.4.11a}$$

s.t. 
$$c_i(x) = 0,$$
  $i \in \mathcal{E},$  (6.4.11b)

$$c_i(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{s}_i = 0, \qquad i \in \mathcal{I}$$
 (6.4.11c)

$$s_i \ge 0, (6.4.11d)$$

不考虑松弛变量的非负约束,则增广拉格朗日函数为:

$$\bar{\Phi}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{s}, \boldsymbol{\lambda}, \sigma) = f(\boldsymbol{x}) - \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i c_i(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2} \sigma \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(\boldsymbol{x}) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \bar{\phi}_i \qquad (6.4.12)$$

其中

$$\bar{\phi}_i = -\lambda_i(c_i(\boldsymbol{x}) - s_i) + \frac{1}{2}\sigma(c_i(\boldsymbol{x}) - s_i)^2$$

## 增广拉格朗日函数方法

带松弛变量非负约束的增广拉格朗日函数最优化问题为:

$$\begin{aligned} & \min_{\boldsymbol{x},\boldsymbol{s}} & \bar{\varPhi}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{s},\boldsymbol{\lambda},\sigma), \\ & \text{s.t.} & s_i \geq 0, i \in \mathcal{I}. \end{aligned}$$
 (6.4.13)

以上问题增加了m - m'个变量, 需要将该问题化简, 消去所有松弛变量。考虑等价问题:

$$\min_{\boldsymbol{x}} \min_{\boldsymbol{s}} \quad \bar{\Phi}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{s}, \boldsymbol{\lambda}, \sigma), 
s.t. \qquad s_i \ge 0, i \in \mathcal{I}.$$
(6.4.14)

通过求解以下问题:

$$\min_{\mathbf{s}} \quad \bar{\Phi}(\mathbf{x}, \mathbf{s}, \boldsymbol{\lambda}, \sigma),$$
  
s.t.  $s_i \geq 0, i \in \mathcal{I}.$  (6.4.15)

得到s(x)的解析表达式。

# 增广拉格朗日函数方法

将s(x)代入 $\bar{\Phi}$ , 就可以消去s, 使得:

$$\varPhi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda},\sigma) = \bar{\varPhi}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{s}(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{\lambda},\sigma)$$

易验证,在问题(6.4.15)中, $\bar{\Phi}(x,s,\pmb{\lambda},\sigma)$ 是关于s的凸函数.  $\bar{\Phi}$ 关于s的稳 定点即为极小点,所以由 $\nabla_s\bar{\Phi}(x,s,\pmb{\lambda},\sigma)=0$ ,即:

$$\frac{\partial \bar{\phi}_i}{\partial s_i} = \lambda_i - \sigma c_i(\boldsymbol{x}) + \sigma s_i = 0, \quad i \in \mathcal{I}$$

由此解出s, 即:

$$s_i = c_i(x) - \eta_i, i \in \mathcal{I}$$

其中 $\eta_i = \lambda_i/\sigma$ 。

# 增广拉格朗日函数方法

考虑 $s_i$ 的非负约束,问题(6.4.15)的解析表达式为:

$$s_i = \max\{c_i(x) - \eta_i, 0\}, i \in \mathcal{I}$$
 (6.4.16)

令 $\phi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \sigma) = \bar{\phi}_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{s}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{\lambda}, \sigma)$ ,则有:

$$\phi_i = \begin{cases} -\frac{1}{2}\sigma\eta_i^2 & c_i(\boldsymbol{x}) - \eta_i \ge 0\\ \frac{1}{2}\sigma\left[(c_i(\boldsymbol{x}) - \eta_i)^2 - \eta_i^2\right] & c_i(\boldsymbol{x}) - \eta_i < 0 \end{cases}$$
(6.4.17)

由此得到化简后的增广拉格朗日函数:

$$\Phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \sigma) = f(\boldsymbol{x}) - \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i c_i(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2} \sigma \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(\boldsymbol{x}) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \phi_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \sigma)$$
(6.4.18)

# 增广拉格朗日函数方法乘子迭代格式

假定第k步迭代已知 $x_k, \lambda_k, \sigma_k$ , 求 $\lambda_{k+1}$ 的迭代格式如下:

$$\begin{split} \lambda_i^{(k+1)} &= \lambda_i^{(k)} - \sigma_k c_i(\boldsymbol{x}_k), & i \in \mathcal{E} \\ \lambda_i^{(k+1)} &= \lambda_i^{(k)} - \sigma_k [c_i(\boldsymbol{x}_k) - s_i^{(k)}], & i \in \mathcal{I} \end{split}$$

进一步化简后,有:

$$\lambda_i^{(k+1)} = -\sigma_k \min \left\{ (c_i(\boldsymbol{x}_k) - \eta_i^{(k)}, 0) \right\}$$
 (6.4.19)

这里
$$\eta_i^{(k)} = \frac{\lambda_i^{(k)}}{\sigma_k}$$
.

## 增广拉格朗日函数方法乘子终止准则

由等式约束最优化终止准则:

$$\left[\sum_{i\in\mathcal{E}}c_i^2(\boldsymbol{x}_k) + \sum_{i\in\mathcal{I}}\left(c_i(\boldsymbol{x}_k) - s_i^{(k)}\right)^2\right]^{1/2} \le \epsilon$$
(6.4.20)

简化后有:

$$\left[\sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(\boldsymbol{x}_k) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \min \left\{ c_i(\boldsymbol{x}_k), \eta_i^{(k)} \right\}^2 \right]^{1/2} \le \epsilon$$
 (6.4.21)

## 数值实验

### 考虑以下三个约束优化问题:

无约束优化算法: BFGS方法与非精确强Wolfe线性搜索,终止准则 $|f_{k-1}-f_k| \leq 10^{-8}$ 

# 数值实验

问题	方法	ite	feva	$\mu_k$	$  x^{(k)} - x^*  _{\infty}$
问题 1	外点罚函数方法	4	76	1.0e - 03	2.7076e - 01
	增广 Lagrange 函数方法	5	68	1.0e - 04	2.7076e - 01
问题 2	外点罚函数方法	10	137	1.0e - 10	1.1502e - 08
	增广 Lagrange 函数方法	6	93	1.0e - 06	4.8881e - 12
问题 3	障碍函数方法	9	178	1.0e - 09	3.9048e - 06
	增广 Lagrange 函数方法	4	274	1.0e - 04	9.4892e - 06

总体来讲,增广拉格朗日方法需要较少的外层迭代次数,与罚函数法相比,需要更少的函数值计算次数。