Foundation of Optimization 最优化原理

李晓鹏

Li Xiao-Peng

电子与信息工程学院 School of Electronic and Information Engineering

Semester-I 2024/25

第四章

1 约束最优性条件

2 惩罚函数法

引言

考虑约束非线性规划问题

min
$$f(\mathbf{x})$$

s.t. $g_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1, \dots, m$
 $h_j(\mathbf{x}) = 0, j = 1, \dots, p$
 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \cdot \dots \cdot (I)$

其中 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$.

引言

本章我们将学习求解约束非线性规划问题的方法, 即约束最优化方法.

三类方法: 惩罚函数法、可行方向法和二次逼近法.

在学习这些方法之前, 先介绍一下约束非线性规划的最优解满足的条件, 简称约束最优化条件.

目录

❶ 约束最优性条件

2 惩罚函数法

一、等式约束情形的求解方法及最优性条件

考虑如下模型:

min
$$f(\boldsymbol{x})$$

s.t. $h_j(\boldsymbol{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, p$
 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

其中 $f(\mathbf{x})$, $h_i(\mathbf{x})(j=1,2,\cdots,p)$ 具有一阶连续偏导数

一、等式约束情形的求解方法及最优性条件

考虑如下模型:

min
$$f(\boldsymbol{x})$$

s.t. $h_j(\boldsymbol{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, p$
 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

其中 $f(\mathbf{x})$, $h_i(\mathbf{x})(j=1,2,\cdots,p)$ 具有一阶连续偏导数

高数中求解此类问题的方法: 引入 Lagrange 函数, 将上述问题转化为求解 Lagrange 函数的无约束极值问题.

针对上述问题,建立 Lagrange 函数:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{v}) = f(\boldsymbol{x}) + v_1 h_1(\boldsymbol{x}) + \dots + v_p h_p(\boldsymbol{x}),$$

其中 v_1, \dots, v_p 为待定参数 Lagrange 乘子.

令 $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = 0$ 得:

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{p} v_j \nabla h_j(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0},$$

再加上约束条件: $h_j(\mathbf{x}) = 0$, $j = 1, 2, \dots, p$ 求解它们组成的方程组:

$$\begin{cases} \nabla f(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{p} v_j \nabla h_j(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0} \\ h_j(\boldsymbol{x}) = 0, \quad j = 1, 2, \cdots, p \end{cases}$$

得最优解 x^* 及最优乘子 v^* .

Lagrange 乘子法 (解析法) 步骤

S1 作 Lagrange 函数:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{p} v_j h_j(\boldsymbol{x}),$$

其中 $oldsymbol{v} = (v_1, v_2, \cdots, v_p)^T$ 称为 Lagrange 乘子向量

S2 令 $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0$, 得

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{p} v_j \nabla h_j(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$$

- S3 添加上原问题中约束条件: $h_j(\mathbf{x}) = 0, j = 1, 2, \dots, p$
- S4 求解由上述 n+p 个方程构成的方程组, 得极值点 \boldsymbol{x}^* 及最优的 Lagrange 乘子 $\boldsymbol{v}^* = (v_1^*, v_2^*, \cdots, v_p^*)^T$

考虑如下等式约束优化问题

min
$$f(\boldsymbol{x})$$
, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$
s.t. $h_j(\boldsymbol{x}) = 0$, $j = 1, \dots, p$

定理 1: 求解等式约束问题最优性条件

设 \mathbf{x}^* 是等式约束问题的局部最优解; $f(\mathbf{x})$, $h_j(\mathbf{x})(j=1,2,\cdots p)$ 在 \mathbf{x}^* 的某邻域内一阶连续可微, 且 $\nabla h_j(\mathbf{x}^*)$ $(j=1,2,\cdots p)$ 线性无关,则存在一组实数 $v_1^*,v_2^*,\cdots v_n^*$ 使得

$$abla f\left({{oldsymbol{x}}^*}
ight) + \sum\limits_{j = 1}^p {v_j^*
abla h_j \left({{oldsymbol{x}}^*}
ight)} = {oldsymbol{0}}$$

一阶必要条件

例 4.1: 用 Lagrange 乘子法求解下列问题:

min
$$f(\mathbf{x}) = x_1 - 2x_2 + 3x_3$$

s.t. $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$

例 4.1: 用 Lagrange 乘子法求解下列问题:

min
$$f(\mathbf{x}) = x_1 - 2x_2 + 3x_3$$

s.t. $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$

解: 作 Lagrange 函数

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x},v) = x_1 - 2x_2 + 3x_3 + v(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1)$$
, 其中 v 为待定 Lagrange 乘子.

令 $\nabla_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x},v) = \mathbf{0}$ 得:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_1} = 1 + 2vx_1 = 0 \quad \cdots \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_2} = -2 + 2vx_2 = 0 \quad \cdots \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_3} = 3 + 2vx_3 = 0 \quad \cdots \quad (3)$$

再加上约束条件:

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1 \quad \cdots \quad (4)$$

解 (1)–(4) 组成的方程组得:
$$x_1 = \left(\frac{1}{\sqrt{14}}, -\frac{2}{\sqrt{14}}, \frac{3}{\sqrt{14}}\right)^T$$
, $v_1 = -\frac{\sqrt{14}}{2}$, 对应的目标函数值为: $\sqrt{14}$ 或应的目标函数值为: $v_2 = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{2}{2}, -\frac{3}{2}\right)^T$ $v_3 = \sqrt{\frac{14}{2}}$ 对应的目标函数值为:

或
$$x_2 = \left(-\frac{1}{\sqrt{14}}, \frac{2}{\sqrt{14}}, -\frac{3}{\sqrt{14}}\right)^T, v_2 = \frac{\sqrt{14}}{2},$$
 对应的目标函数值为:

 $-\sqrt{14}$

故原问题的最优解为:

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^2 = \left(-\frac{1}{\sqrt{14}}, \frac{2}{\sqrt{14}}, -\frac{3}{\sqrt{14}}\right)^T$$

二、一般约束情形的最优性条件

考虑约束非线性规划问题

min
$$f(\boldsymbol{x})$$

s.t. $g_i(\boldsymbol{x}) \leq 0, i = 1, \dots, m$
 $h_j(\boldsymbol{x}) = 0, j = 1, \dots, p \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot (I)$
 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

其中 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, 用 Ω 表示可行域, 则

$$\mathbf{\Omega} = \{ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n | g_i(\boldsymbol{x}) \le 0, h_j(\boldsymbol{x}) = 0, i = 1, \cdots, m, j = 1, \cdots, p \}$$

定义相应的 Lagrange 函数:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) + \sum_{i=1}^{m} u_i g_i(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{p} v_j h_j(\boldsymbol{x})$$

有效约束:

若 (I) 中的一个可行点 \mathbf{x}^0 使得某个不等式约束 $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ 变成等式, 即 $g_i(\mathbf{x}^0) = 0$, 则 $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$ 称为 \mathbf{x}^0 的有效约束, 也称紧约束.

有效约束指标集:

$$I = I(\mathbf{x}^0) = \{i \mid g_i(\mathbf{x}^0) = 0, i = 1, 2, \cdots, m\}$$

无效约束:

若有 $g_k(\mathbf{x}^0) < 0$, 则 $g_k(\mathbf{x}) \le 0$ 称为点 \mathbf{x}^0 处的无效约束, 也称松约束条件.

例 4.2: 考察问题

min
$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 2)^2 + x_2^2$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_2 \le 0$
 $g_3(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 1 \le 0$

设 $x^0 = (1,0)^T$, 判断上述哪些条件是有效约束?

例 4.2: 考察问题

min
$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 2)^2 + x_2^2$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_2 \le 0$
 $g_3(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 1 \le 0$

设 $x^0 = (1,0)^T$,判断上述哪些条件是有效约束?

解:将 x^0 代入上述约束条件,有 $g_1(x^0) < 0$, $g_2(x^0) = 0$, $g_3(x^0) = 0$

所以 $g_2(\mathbf{x}) \leq 0$, $g_3(\mathbf{x}) \leq 0$ 为该点的有效约束条件.

有效约束指标集为: $I = \{2,3\}$.

定理 2:(Kuhn-Tucker 一阶必要条件)

设 \mathbf{x}^* 为问题 (I) 的局部最优解, $\mathbf{I}^* = \{i | g_i(\mathbf{x}^*) = 0, 1 \leq i \leq m\}$; $f(\mathbf{x}), g_i(\mathbf{x}), h_j(\mathbf{x})$ 在 \mathbf{x}^* 点可微, 且 $\nabla h_j(\mathbf{x}^*) (j = 1, \cdots, p)$, $\nabla g_i(\mathbf{x}^*), i \in \mathbf{I}^*$ 线性无关, 则存在最优乘子 u_i^*, v_j^* 使得:

- 1) $\nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla g_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{j=1}^p v_j^* \nabla h_j(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$
- 2) $u_i^* g_i(\mathbf{x}^*) = 0, i = 1, 2, \dots, m$
- 3) $u_i^* \ge 0$, $i = 1, 2, \dots, m$

这三个条件称为 K-T 条件

一阶必要条件的说明:

- 1) 满足 K-T 条件的可行点称为 K-T 点;
- 2) 无效约束条件对应的 Lagrange 乘子为 0; 这样一来, K-T 条件 便简化为: 存在 Lagrange 乘子 $u_i^* \geq 0 \, (i \in I^*)$ 和 $v_i^* \, (j=1,\cdots,p)$ 使得

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i \in \mathbf{I}^*} u_i^* \nabla g_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{j=1}^p v_j^* \nabla h_j(\mathbf{x}^*) = 0$$

3) 整体有效约束函数的梯度线性无关称为 Kuhn-Tucker 约束规范.

该定理说明, 若最优点处对应的约束规范成立, 则它一定是 K-T 点; 若约束规范不满足, 则最优点不一定是 K-T 点.

解析法求解 K-T 点的步骤 (了解)

(2) 写出定理 2 结论中其它关系式, 即

$$u_i g_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

 $u_i \ge 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$

(3) 添加上原问题中约束条件

$$g_i(\mathbf{x}) \le 0, i = 1, 2, \cdots, m, h_j(\mathbf{x}) = 0, j = 1, 2, \cdots, p$$

(4) 分别对 $g_i(x) \leq 0$ 是否取不等号进行讨论, 并结合其它关系式 求出满足以上所有关系式的 K-T 点.

例 4.3: 求以下非线性规划的 K-T 点

min
$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = -x_1^2 - x_2^2 + 9 \ge 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_1 - x_2 + 1 \ge 0$

例 4.3: 求以下非线性规划的 K-T 点

min
$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = -x_1^2 - x_2^2 + 9 \ge 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_1 - x_2 + 1 \ge 0$

解: 作 Lagrange 函数:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) = x_1^2 + x_2 - u_1(-x_1^2 - x_2^2 + 9) - u_2(-x_1 - x_2 + 1)$$

其中 $\mathbf{u} = (u_1, u_2)^T$ 为待定参数. 令 $\nabla_{\mathbf{x}} \mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \mathbf{0}$ 得:

$$\begin{pmatrix} 2x_1 \\ 1 \end{pmatrix} - u_1 \begin{pmatrix} -2x_1 \\ -2x_2 \end{pmatrix} - u_2 \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} = 0$$

刨

$$2(1 + u_1)x_1 + u_2 = 0 \quad \cdots \quad (1)$$

1 + 2u_1x_2 + u_2 = 0 \quad \cdot \cdot \cdot (2)

另外要求

$$u_1(x_1^2 + x_2^2 - 9) = 0$$
 \cdots (3)
 $u_2(x_1 + x_2 - 1) = 0$ \cdots (4)
 $u_1, u_2 \ge 0$ \cdots (5)

再加上约束条件

$$x_1^2 + x_2^2 - 9 \le 0$$
 $\cdots (6)$
 $x_1 + x_2 - 1 \le 0$ $\cdots (7)$

为了求出满足上述条件的解, 分以下三种情况讨论:

- 1. 若 (6) 式不等号成立, 则由 (3) 知得: $u_1=0$. 代入 (2) 式得: $u_2=-1$. 这与 $u_2\geq 0$ 即 (5) 式矛盾. 因此, (6) 式中等号必成立. 2. 若 (7) 式中不等号成立, 则由 (4) 知得: $u_2=0$. 代入 (1)(2) 式得并注意到 $u_1\geq 0$ 得: $x_1=0$, $x_2\leq 0$. 这再结合 (6) 式 (必须取等号), 解得: $x_1=0$, $x_2=-3$, $x_1=\frac{1}{6}$ 因此, 已得一个 K-T 点: $\mathbf{x}=(0,-3)^T$
- 3. 若 (7) 式等号成立, 这时 (6) 式也成立, 解它们组成的方程组

$$\begin{cases} -x_1^2 - x_2^2 + 9 = 0\\ -x_1 - x_2 + 1 = 0 \end{cases}$$
 得: $x = \left(\frac{1+\sqrt{17}}{2}, \frac{1-\sqrt{17}}{2}\right)^T$ 或

又由 (1)(2)(5) 式得: $x_1 \le 0$, $x_2 \le 0$. 可见, 上面求得的两个解都不满足, 因此都不是 K-T 点. 综上可得, 所求非线性规划有唯一的 K-T 点: $\boldsymbol{x} = (0, -3)^T$.

判断某可行点是否是 K-T 点的步骤

- 1. 找出不等式约束中的有效约束条件:
- 2. 求出 K-T 条件中相关梯度向量:

$$abla f(\boldsymbol{x}^k),$$

$$abla g_i(\boldsymbol{x}^k), i \in \boldsymbol{I}(\boldsymbol{x}^k)$$

$$abla h_j(\boldsymbol{x}^k), j = 1, 2, \dots, l$$

- 3. 代入 K-T 条件的简化形式, 求出 Lagrange 乘子;
- 4. 若不等式约束中的有效约束条件对应的 Lagrange 乘子均非负, 那么该点是 K-T 点; 否则不是 K-T 点。

例 4.4: 考察问题

min
$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 5 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$
 $g_3(\mathbf{x}) = -x_2 \le 0$
 $h_1(\mathbf{x}) = x_1 + 2x_2 - 4 = 0$

判断可行点 $\mathbf{x}^0 = (2,1)^T \in \mathbf{S}$ 是否是该问题的 K-T 点。

例 4.4: 考察问题

min
$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 5 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$
 $g_3(\mathbf{x}) = -x_2 \le 0$
 $h_1(\mathbf{x}) = x_1 + 2x_2 - 4 = 0$

判断可行点 $\mathbf{x}^0 = (2,1)^T \in \mathbf{S}$ 是否是该问题的 K-T 点。

解: (1) 计算 x^0 点的有效约束: 易验证对 x^0 而言, 只有 $g_1(x) \le 0$ 是有效约束.

(2) 计算 x^0 点的相关函数的梯度:

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^0) = \begin{pmatrix} -2 \\ -2 \end{pmatrix}, \nabla g_1(\boldsymbol{x}^0) = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}, \nabla h_1(\boldsymbol{x}^0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

(3) 求 Lagrange 乘子: 按照 K-T 条件应有

$$\begin{pmatrix} -2 \\ -2 \end{pmatrix} + u_1 \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} + v_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

解之得: $u_1 = \frac{1}{3}$, $v_1 = \frac{2}{3}$

又因 $u_1 = \frac{1}{3} > 0$, 所以, K-T 条件成立;

综上可知, $\mathbf{x}^0 = (2,1)^T$ 是一个 K-T 点.

例 4.5: 考察问题

min
$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 5 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$
 $g_3(\mathbf{x}) = -x_2 \le 0$
 $h_1(\mathbf{x}) = x_1 + 2x_2 - 4 = 0$

判断可行点 $\mathbf{x}^1 = (0,2)^T \in \mathbf{S}$ 是否是该问题的 K-T 点。

例 4.5: 考察问题

min
$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 5 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$
 $g_3(\mathbf{x}) = -x_2 \le 0$
 $h_1(\mathbf{x}) = x_1 + 2x_2 - 4 = 0$

判断可行点 $\mathbf{x}^1 = (0,2)^T \in \mathbf{S}$ 是否是该问题的 K-T 点。

解: (1) 计算 x^1 点的有效约束: 易验证对 x^1 而言, 只有 $g_2(x) \leq 0$ 是有效约束

(2) 计算 x^1 点的相关函数的梯度:

$$abla f(\boldsymbol{x}^1) = \begin{pmatrix} -6 \\ 0 \end{pmatrix},
abla g_2(\boldsymbol{x}^1) = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix},
abla h_1(\boldsymbol{x}^1) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

(3) 求 Lagrange 乘子: 按照 K-T 条件应有

$$\begin{pmatrix} -6\\0 \end{pmatrix} + u_2 \begin{pmatrix} -1\\0 \end{pmatrix} + v_1 \begin{pmatrix} 1\\2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\0 \end{pmatrix}$$

解之得: $u_2 = -6$, $v_1 = 0$ 但因 $u_2 = -6 < 0$, 所以 K-T 条件不成立:

综上可知, $\boldsymbol{x}^1 = (0,2)^T$ 不是 K-T 点

例 4.6: 考察问题

min
$$f(\mathbf{x}) = -x_1$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = x_1^3 - x_2 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = x_2 \le 0$

判断 $x^* = (0,0)^T$ 处 K-T 条件是否成立?

例 4.6: 考察问题

min
$$f(\mathbf{x}) = -x_1$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = x_1^3 - x_2 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = x_2 \le 0$

判断 $x^* = (0,0)^T$ 处 K-T 条件是否成立?

解:易验证对 x^* 而言, $g_1(x) \le 0$, $g_2(x) \le 0$ 是紧约束.

又因
$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \nabla g_1(\boldsymbol{x}^*) = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \nabla g_2(\boldsymbol{x}^*) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
 可见对

任意 u_1, u_2 :

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) + u_1 \nabla g_1(\mathbf{x}^*) + u_2 \nabla g_2(\mathbf{x}^*) = \begin{pmatrix} -1 \\ -u_1 + u_2 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

所以 x^* 处 K-T 条件不成立, 即该点不是 K-T 点.

定理 3: 凸规划问题的全局最优解判定条件

对于凸规划

min
$$f(\boldsymbol{x})$$

s.t. $g_i(\boldsymbol{x}) \leq 0, i = 1, \dots, m$
 $h_j(\boldsymbol{x}) = 0, j = 1, \dots, p$
 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

设 $f(\boldsymbol{x})$, $g_i(\boldsymbol{x})(i=1,2,\cdots,m)$ 是可微的凸函数, $h_j(\boldsymbol{x})(j=1,2,\cdots,p)$ 为线性函数, 且 $\boldsymbol{x}^* \in \boldsymbol{S}$ 如果 \boldsymbol{x}^* 是 K-T 点,则 \boldsymbol{x}^* 也是全局最优点.

例 4.7: 考察问题

min
$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 5 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$
 $g_3(\mathbf{x}) = -x_2 \le 0$
 $h_1(\mathbf{x}) = x_1 + 2x_2 - 4 = 0$

判断 $x^0 = (2,1)^T$ 是否全局最优解。

例 4.7: 考察问题

min
$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2$$

s.t. $g_1(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 5 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$
 $g_3(\mathbf{x}) = -x_2 \le 0$
 $h_1(\mathbf{x}) = x_1 + 2x_2 - 4 = 0$

判断 $x^0 = (2,1)^T$ 是否全局最优解。

解: 由例 4 知点 $x^0 = (2,1)^T$ 是 K-T 点

又因函数 f(x), $g_i(x)$, $h_1(x)$ 都满足定理 3 中的条件. 故该问题是 凸规划问题, 故 K-T 点也是最优解, 所以 $x^0=(2,1)^T$ 是全局最优解。

目录

● 约束最优性条件

❷ 惩罚函数法

基本思想: 通过引入惩罚函数,将所求解的<mark>约束</mark>非线性规划问题 转化为一系列<mark>无约束</mark>非线性规划问题.

根据约束的特点,构造某种惩罚函数,然后把它<mark>加到</mark>目标函数中去,将约束问题的求解化为一系列无约束问题的求解 (准确地说,是将这些无约束问题的极小点依次作为迭代点).

辅助函数:

 $F(\boldsymbol{x},\sigma) = f(\boldsymbol{x}) + \sigma P(\boldsymbol{x})$

根据惩罚函数表达式 (构造方法的不同), 形成不同的罚函数法。

我们重点介绍:外点罚函数法,内点罚函数法,以及混合罚函数法。

一、外点惩罚函数法一外点法

考虑如下问题:

min
$$f(\mathbf{x})$$
, $\mathbf{x} \in \mathbf{X} \subseteq \mathbb{R}^n$
s.t. $g_i(\mathbf{x}) \le 0, i = 1, \dots, m$
 $h_j(\mathbf{x}) = 0, j = 1, \dots, p$

做法: 作辅助函数: $F(\mathbf{x}, \sigma) = f(\mathbf{x}) + \sigma P(x)$, 其中 $\sigma > 0$ 是常数, 称为惩罚因子。

- P(x) 是定义在 R^n 上的一个函数, 称为惩罚项, 它满足:
 - 1. P(x) 是连续的;
 - 2. 对任意的 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, 都有 $P(\boldsymbol{x}) \geq 0$
 - 3. 当且仅当 x 是可行点时, P(x)=0

$$P\left(\boldsymbol{x}\right) = \sum_{i=1}^{m} \left[\max \left\{ 0, g_i\left(\boldsymbol{x}\right) \right\} \right]^2 + \sum_{j=1}^{p} \left| h_j\left(\boldsymbol{x}\right) \right|^2$$

分析:

当 x 是可行点时, P(x) = 0, $F(x, \sigma) = f(x)$.

当 x 不是可行点时, P(x) > 0, 又因 σ 是极大的正数. 故此 x 很难成为 $F(x,\sigma)$ 的极小点.

因此, 按上策略迫使 $F(x,\sigma)$ 的极小点逐渐靠近可行域, 一旦成为可行点, 即是最优解.

解析法

min
$$f(\boldsymbol{x})$$
, $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X} \subseteq \mathbb{R}^n$
s.t. $g_i(\boldsymbol{x}) \le 0$, $i = 1, \dots, m$
 $h_j(\boldsymbol{x}) = 0$, $j = 1, \dots, p$

- (1) 构造: $F(\mathbf{x}, \sigma) = f(\mathbf{x}) + \sigma P(\mathbf{x})$ 其中 $P(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m} \left[\max\{0, g_i(\mathbf{x})\} \right]^2 + \sum_{j=1}^{p} \left| h_j(\mathbf{x}) \right|^2$, $\sigma > 0$ 是很大的正数.
- (2) 求解: $\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} F(\boldsymbol{x}, \sigma) = f(\boldsymbol{x}) + \sigma P(\boldsymbol{x})$ 得最优解 $\boldsymbol{x}(\sigma)^*$
- (3) 令 $\sigma \to +\infty$, 有 $\boldsymbol{x}(\sigma)^* \to \boldsymbol{x}^*$, 即得原问题的最优解.

例 4.8: 求解等式约束问题:

min
$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2$$

s.t. $x_1 + x_2 - 2 = 0$

例 4.8: 求解等式约束问题:

min
$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2$$

s.t. $x_1 + x_2 - 2 = 0$

解: 构造罚函数和辅助函数:

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

其中 σ 是很大的正数.

令:

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = \frac{\partial F}{\partial x_2} = 0$$

得: $x_1(\sigma) = x_2(\sigma) = \frac{2\sigma}{2\sigma+1}$.

又因该点处
$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} = 2 (\sigma + 1), \ \frac{\partial^2 F}{\partial x_2^2} = 2 (\sigma + 1), \ \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_2} = 2 \sigma$$
 并且 $\sigma > 0$, 可见 $\nabla^2 F = \begin{pmatrix} 2(\sigma + 1) & 2\sigma \\ 2\sigma & 2(\sigma + 1) \end{pmatrix}$ 正定. 因此 $F(\boldsymbol{x},\sigma)$ 极小值点为 $x(\sigma) = \begin{pmatrix} \frac{2\sigma}{2\sigma+1}, \frac{2\sigma}{2\sigma+1} \end{pmatrix}^T$ 令 $\sigma \to +\infty$ 时,有:

$$(x_1(\sigma), x_2(\sigma))^T \to (x_1^*, x_2^*)^T = (1, 1)^T$$

即: 无约束问题的最优解的极限为原问题的最优解.

例 4.9: 用外点罚函数法求解

min
$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2$$

s.t. $g(\mathbf{x}) = x_1 + x_2 - 4 \le 0$

例 4.9: 用外点罚函数法求解

min
$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2$$

s.t. $g(\mathbf{x}) = x_1 + x_2 - 4 \le 0$

解: 作辅助函数

$$F(\mathbf{x},\sigma) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2 + \sigma \left[\max \{0, x_1 + x_2 - 4\} \right]^2$$

$$F(\mathbf{x},\sigma) = \begin{cases} (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2, & x_1 + x_2 - 4 \le 0 \\ (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2 + \sigma (x_1 + x_2 - 4)^2, & x_1 + x_2 - 4 > 0 \end{cases}$$

因此:

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = \begin{cases} 2(x_1 - 3), & x_1 + x_2 \le 4\\ 2(x_1 - 3) + 2\sigma(x_1 + x_2 - 4), & x_1 + x_2 > 4 \end{cases}$$

同理:

$$\frac{\partial F}{\partial x_2} = \begin{cases} 2(x_2 - 2), & x_1 + x_2 \le 4\\ 2(x_2 - 2) + 2\sigma(x_1 + x_2 - 4), & x_1 + x_2 > 4 \end{cases}$$

令:
$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = \frac{\partial F}{\partial x_2} = 0$$

得: $x_1(\sigma) = \frac{5\sigma + 3}{2\sigma + 1}, \quad x_2(\sigma) = \frac{3\sigma + 2}{2\sigma + 1}$

又因该点处

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} = 2(\sigma + 1), \quad \frac{\partial^2 F}{\partial x_2^2} = 2(\sigma + 1), \quad \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_2} = 2\sigma$$

并且
$$\sigma > 0$$
,可见 $\nabla^2 F = \begin{pmatrix} 2(\sigma+1) & 2\sigma \\ 2\sigma & 2(\sigma+1) \end{pmatrix}$ 正定.

因此 $F(x,\sigma)$ 在点

$$\boldsymbol{x}\left(\sigma\right) = \left(\frac{5\sigma+3}{2\sigma+1}, \frac{3\sigma+2}{2\sigma+1}\right)^{T}$$

处取得极小值. 令 $\sigma \to +\infty$ 得:

$$oldsymbol{x}^* = \lim_{\sigma o \infty} oldsymbol{x}\left(\sigma\right) = \left(\frac{5}{2}, \frac{3}{2}\right)^T.$$

所以原问题的最优解及最优值分别为:

$$\boldsymbol{x}^* = \left(\frac{5}{2}, \frac{3}{2}\right)^T, \quad f\left(\boldsymbol{x}^*\right) = \frac{1}{2}.$$

数值解法

对于上述解法, σ 的选取对问题的求解十分重要, 因此通常取一个趋于无穷大的严格递增正数列 $\{\sigma_k\}$, 然后求解

$$\min F(\boldsymbol{x}, \sigma_k) = f(\boldsymbol{x}) + \sigma_k P(\boldsymbol{x})$$

得极小点序列 $\{x_k^*\}$.

随着迭代次数 k 的增加, 该点列渐渐收敛于原问题的极小点. 由此产生如下 SUMT 外点法 (数值解法), SUMT(Sequential Unconstrained Minimization Technique).

SUMT 外点法 (数值解法)

- 1) 给定初始点 x^0 , 初始惩罚因子 $\sigma_1 > 0$, 放大因子 C > 1, 允许 误差 $\varepsilon > 0$, 令 k = 1.
- 2) 以 x^{k-1} 为初始点, 求解

$$\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} F(\boldsymbol{x}, \sigma_k) = f(\boldsymbol{x}) + \sigma_k P(\boldsymbol{x})$$

得极小点, 记作 x^k .

3) 若 $\sigma_k P(\mathbf{x}^k) < \varepsilon$, 停止运算, 取 $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^k$ 作为近似解. 否则, 令 $\sigma_{k+1} = C\sigma_k$, k = k+1, 返回 2.

注: 根据经验, 常常取 $\sigma_1 = 1$, $C \in [4, 10]$.

定理: 收敛性定理

设 $\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} F(\boldsymbol{x}, \sigma_k)$ 的极小点为 $\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{x}(\sigma_k)$, 则会出现以下两种情况:

- 1) 如果存在某个 $k_0 \ge 1$ 满足 $x^{k_0} \in \mathbb{S}$ (可行域) 则 $x^* = x^{k_0}$.
- 2) 如果上述情况不发生, 这时就得到一个无穷点列 $\{x^k\}_{k=1}^{\infty}$, 若 f(x), $g_i(x)$, $h_j(x) \in C$, 则 $x^* = \lim_{k \to \infty} x^k$.

注意事项

- 1) 用上述方法得到的 x^k 往往不满足约束条件, 即从可行域外部 趋向于 x^* 的, 故叫外点罚函数法.
- 2) 该方法是通过求解一系列无约束最优化问题来求解约束最优化问题的方法, 这又被称为序列无约束极小化技术 SUMT. 因此, 上述数值解法又称 SUMT 外点法.

优缺点

- 1) 若有了求解无约束问题的好算法,则利用外罚函数法求解约束问题很方便.
- 2) 每个近似解 x^k 可能不是可行解, 这是某些实际问题所无法接受的. 内点罚函数法可以解决.
- 3) 理论上已证明 σ_k 取越大越好, 而 σ_k 越大将导致目标函数的 $F(\boldsymbol{x},\sigma)$ Hessian 阵条件数越大、趋于病态, 给无约束问题求解 增加很大困难, 甚至无法求解.

二、内点罚函数法 (碰壁函数法)-内点法

罚函数及其性质

基本思想: 从一个可行点 $x^0 \in S$ 出发, 通过求辅助函数极小点得新的可行点, 即在可行点之间进行迭代, 最终使迭代点逐渐靠近或收敛于最优点.

注意: 该方法只适合于不等式约束问题, 并且要求可行域的内点集S 非空, 而且 S 中的点可以任意接近于 S 的任一点. 直观看来, S 不能包含孤立点或孤立线段.

惩罚策略:

在可行域的边界筑起一道很高的"围墙", 当迭代点靠近可行域的边界时, 目标函数值陡然增大, 这相当于对它进行惩罚, 从而阻止迭代点穿越边界, 这样就可以把最优解"挡"在可行域内了.

作辅助函数 $F(\mathbf{x},r) = f(\mathbf{x}) + rB(\mathbf{x}), \quad r > 0$ 为碰壁因子。其中, 定义惩罚项 (碰壁项) 函数 $B(\mathbf{x})$, 满足:

- 1) B(x) 是连续的;
- 2) 对集合内部的 x, B(x) 为幅值很小的数;
- 3) 当 x 趋于 S 的边界时, B(x) 迅速趋于无穷

min
$$f(\mathbf{x})$$
 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ $\cdots (2)$
s.t. $g_i(\mathbf{x}) \le 0$ $i = 1, 2, \cdots m$

构造:

$$F(\boldsymbol{x},r) = f(\boldsymbol{x}) + rB(\boldsymbol{x}), r > 0$$

其中:
$$B(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m} -\frac{1}{g_i(\mathbf{x})}$$
 或 $B(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^{m} \ln(-g_i(\mathbf{x}))$

分析: x 为可行域的内点时, B(x) 为幅值较小的数, 几乎不受惩罚; x 接近边界时, B(x) 趋于无穷大, 施以很重的惩罚; 这样迫使极小点落在可行域内, 逐渐逼近极小点.

解析法

- 1) 构造: $F(\mathbf{x},r) = f(x) + rB(\mathbf{x}), r > 0$ 为很小的正数。其中: $B(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m} -\frac{1}{g_i(\mathbf{x})}$ 或 $B(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^{m} \ln{(-g_i(\mathbf{x}))}$
- 2) 求解:

$$\min_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{S}} F\left(\boldsymbol{x}, r\right) = f\left(\boldsymbol{x}\right) + rB\left(\boldsymbol{x}\right)$$

得最优解 $\boldsymbol{x}(r)^*$.

3) 令 $r \to 0$, 有 $\boldsymbol{x}(r)^* \to \boldsymbol{x}^*$, 即得原问题的 (近似) 最优解.

例 4.10: 用内点罚函数法求解:

min
$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{3}(x_1 + 1)^3 + x_2$$

s.t. $1 - x_1 \le 0$,
 $x_2 \ge 0$

例 4.10: 用内点罚函数法求解:

min
$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{3}(x_1 + 1)^3 + x_2$$

s.t. $1 - x_1 \le 0$,
 $x_2 \ge 0$

解: 作辅助函数

$$F(\mathbf{x},r) = \frac{1}{3}(x_1+1)^3 + x_2 + r\left(\frac{1}{x_1-1} + \frac{1}{x_2}\right)$$

其中 r > 0 为很小的正数.

再注意到 $x \in S$, 则 $x_1 > 1$.

所以
$$\boldsymbol{x}(r) = \begin{pmatrix} \sqrt{1+\sqrt{r}} \\ \sqrt{r} \end{pmatrix}$$

可验证该点处的 Hessian 矩阵

$$\nabla^2 F = \begin{pmatrix} 2\left(\sqrt{1+\sqrt{r}}+1\right) + \frac{2r}{\left(\sqrt{1+\sqrt{r}}-1\right)^3} & 0\\ 0 & \frac{2}{\sqrt{r}} \end{pmatrix}$$

正定, 所以 $\boldsymbol{x}(r)$ 是 $F(\boldsymbol{x},r)$ 的极小点. 令 $r \to 0$ 有: $\boldsymbol{x}(r) \to \boldsymbol{x}^* = (1,0)^T, f(\boldsymbol{x}^*) = \frac{8}{3}$

例 4.11: 用内点罚函数法求解:

$$\min f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2$$
$$s.t \ x_1 \ge 1$$

解: 用 $B(x) = -\sum_{i=1}^{m} \ln(-g_i(x))$ 进行求解。

算法实现

对于上述解法, r 的选取对问题的求解十分重要, 一般做法是取一个收敛于零的严格递减正数列 $\{r_k\}$, 然后求解

$$\min F(\boldsymbol{x}, r_k) = f(\boldsymbol{x}) + r_k P(\boldsymbol{x})$$

得极小点序列 $\{x_k^*\}$. 随着迭代次数 k 的增加, 该点列渐渐收敛于原问题的极小点. 由此产生如下 SUMT 内点法 (数值解法).

SUMT 内点法 (数值解法)

- S1 给出 $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$, $\varepsilon > 0$, 罚因子 $r_1(r_1 = 10)$, 缩小系数 c(c = 0.1), 令 k = 1.
- S2 以 x^{k-1} 为初始点求无约束问题:

$$\min_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{S}} F\left(\boldsymbol{x}, r\right) = f\left(\boldsymbol{x}\right) + r_k B\left(\boldsymbol{x}\right)$$

得最优解, 记作 x^k .

- S3 若 $\left|r_{k}B\left(\boldsymbol{x}^{k}\right)\right|<arepsilon$,则 $\boldsymbol{x}^{*}=\boldsymbol{x}^{k}$,停止迭代;否则转 Step 4.
- S4 令 $r_{k+1} = cr_k$, k = k+1, 转 Step 2.

定理 2: 收敛性定理

若 $f(\boldsymbol{x}), g_i(\boldsymbol{x}) \in \boldsymbol{C}$, 任给初始可行点, 记由上述 SUMT 内点罚函数法产生的点列为 $\left\{ \boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{x}(r_k) \right\}$, 则

$$oldsymbol{x}^* = \lim_{k o \infty} oldsymbol{x}^k$$

注意事项

- 1) 初始点 x^0 的选取使用内点法时, 初始点应选择一个离约束边界较远的可行点。如太靠近某一约束边界, 构造的惩罚函数可能由于障碍项的值很大而变得畸形, 使求解无约束优化问题发生困难.
- 2) 惩罚因子初值 r^0 的选取惩罚因子的初值应适当, 否则会影响 迭代计算的正常进行。一般而言, 太大将增加迭代次数; 太小会使惩罚函数的性态变坏, 甚至难以收敛到极值点无一般性 的有效方法。对于不同的问题, 都要经过多次试算, 才能决定一个适当 r^0 .

3) 惩罚因子的缩减系数 c 的选取在构造序列惩罚函数时, 惩罚因子 r 逐渐递减到 0, 相邻两次迭代的惩罚因子的关系为:

$$r^k = cr^{k-1}$$
 $(k = 1, 2, ...)$

式中的 c 称为惩罚因子的缩减系数, c 为小于 1 的正数。一般而言, c 值的大小在迭代过程中不起决定性作用, 通常的取值范围为 [0.1,0.7]。

4) 尽管外点法和内点法目前都已被广泛应用, 但算法中惩罚因子的选取对收敛速度的影响比较大。惩罚因子的增大 (外点法) 与缩小 (内点法) 使得问题的求解变得很困难, 有时甚至会使增广目标函数趋于病态.

三、混合惩罚函数法

基本思想:

把外点罚函数与内点罚函数结合起来,构造新的罚函数.设当前迭代点为 x^{k-1} ,对于 x^{k-1} 满足的那些不等式约束,用内点法来构造碰壁项 B(x),对于 x^{k-1} 不满足的不等式约束和等式约束,按外点法构造惩罚项 P(x),即定义混合罚函数及辅助函数为:

$$F(\boldsymbol{x},r) = f(\boldsymbol{x}) + r_k B(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{r_k} P(\boldsymbol{x})$$

构造新的辅助函数

$$F(\boldsymbol{x}, r_k) = f(\boldsymbol{x}) + r_k B(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{r_k} P(\boldsymbol{x})$$

其中: $r_k > 0$ 为递减数列, 且 $\lim_{k \to \infty} r_k = 0$.

$$B\left(\boldsymbol{x}\right) = \sum_{i \in \boldsymbol{I}_{1}} -\frac{1}{g_{i}\left(\boldsymbol{x}\right)}, \boldsymbol{I}_{1} = \left\{i \mid g_{i}(\boldsymbol{x}^{k-1}) < 0\right\}$$

$$P(\boldsymbol{x}) = \sum_{i \in \boldsymbol{I}_2} \left[\max \left\{ 0, g_i(\boldsymbol{x}) \right\} \right]^2 + \sum_{j=1}^p h_j^2(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{I}_2 = \left\{ i \left| g_i(\boldsymbol{x}^{k-1}) \ge 0 \right\} \right\}$$
$$\boldsymbol{I}_1 \bigcup \boldsymbol{I}_2 = \{1, 2, \cdots, m\}.$$

算法实现

- S1 给出 $x^0 \in \mathbb{R}^n$, 参数 $r_0 > 0$, 误差精度 $\varepsilon_1, \varepsilon_2 > 0$, 缩小系数 c(0 < c < 1), 令 k = 1.
- S2 以 x^{k-1} 为初始点求无约束问题:

$$\min F(\boldsymbol{x}, r_k) = f(\boldsymbol{x}) + r_k B(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{r_k} P(\boldsymbol{x})$$

得最优解 x^k .

- S3 若 $\left|r_{k}B\left(\boldsymbol{x}^{k}\right)\right|<\varepsilon_{1},\frac{1}{r_{k}}P\left(\boldsymbol{x}^{k}\right)<\varepsilon_{2}$,则 $\boldsymbol{x}^{*}=\boldsymbol{x}^{k}$,停止迭代; 否则转 Step 4.
- S4 令 $r_{k+1} = c r_k, k = k+1$, 转 Step 2.