



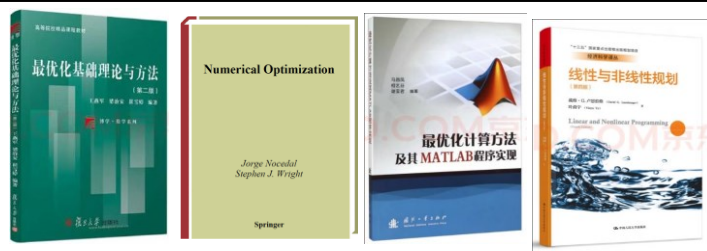
M05M11084 最优化理论、算法与应用

6-3 约束优化问题的罚函数法

讲义和程序下载
(随课程进度更新)



链接: <https://pan.baidu.com/s/1NynYva56GiPsj2gLI59k0Q?pwd=yuan>
提取码: yuan



罚函数法

参考：

1. 最优化基础理论与方法，第八章，王燕军，梁治安，崔雪婷等
2. Numerical Optimization, Chapter 17, Jorge Nocedal Stephen J. Wright
3. 最优化计算方法及其MATLAB程序实现，第12章，马昌凤，柯艺芬，谢亚君
4. 线性与非线性规划，第13章，David G. Luenberger, Yinyu Ye著，韩松，韩二玲，张春华译

1. 引言
2. 外罚函数法
3. 障碍函数法
4. 混合罚函数法
5. 乘子法

1. 引言

$$\begin{array}{ll}
 \text{约束优化问题} & \min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n \\
 & \text{s.t. } c_i(x) = 0, i = 1, 2, \dots, m \quad m \leq n \quad (P) \\
 & \quad c_j(x) \leq 0, j = m + 1, m + 2, \dots, m + p
 \end{array}$$

$$\text{可行域} \quad S = \{x \in \mathcal{R}^n | c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}; c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{J}\}$$

$$\text{指标集} \quad \mathcal{E} = \{1, 2, \dots, m\}$$

$$\mathcal{J} = \{m + 1, m + 2, \dots, m + p\}$$

$$\mathcal{J}(x^*) = \{j \in \mathcal{J} | c_j(x^*) = 0, j \in \mathcal{J}\}$$

罚函数法是通过求解系列（序列）无约束优化问题来解决约束优化问题，即SUMT（Sequential Unconstrained Minimization Technique）

且无约束问题的极小解收敛于约束问题的极小解

罚函数法通常分类两大类：

① 对违反约束施予惩罚

① 外罚函数法

② 对临近不等式约束边界施予惩罚

② 障碍函数法

“理想的” 等价的无约束优化问题

假设约束优化问题

$$\begin{array}{ll} \min f(x) \\ \text{s. t. } x \in S \end{array}$$

定义

$$\sigma(x) = \begin{cases} 0 & x \in \mathcal{D} \\ +\infty & x \notin \mathcal{D} \end{cases}$$

约束优化问题转化为等价的无约束优化问题

$$\min f(x) + \sigma(x)$$

如果求解出这个无约束优化问题也就解决了约束优化问题

采用逐渐接近 σ 的连续函数

但是，实际中这是不可能的

因为无约束优化问题的目标函数在可行区域之外没有定义

障碍/外罚函数法是解决一系列更加“可控”的无约束子问题



用一个逐渐接近 σ 的连续函数代替“理想”惩罚 σ

障碍函数法



障碍项

从可行域内部逼近于 σ

外罚函数法



惩罚项

从可行域外部逼近于 σ

障碍函数法与外罚函数法

障碍函数法

- 生成严格可行的迭代点序列，且从可行区域的内部收敛于约束优化问题的极小点
- 也称为内点法（interior-point methods）
- 这些方法要求可行区域的内部非空，因此，适用于不等式约束优化问题

外罚函数法

- 生成非可行的迭代点序列，且从可行区域的外部收敛于约束优化问题极小点
- 通常适用于等式约束优化问题
- Exterior-point methods

障碍函数法和外罚函数法的共同之处

- 收敛理论相似，且，无约束优化问题的底层结构相似
- 许多有关障碍函数法的理论可用于外罚函数法，反之亦然
- 通用名称“惩罚方法”来描述这两种方法

障碍函数法



内点法函数法

不等式约束

外罚函数法



外点罚函数法

等式约束
不等式约束

基本思想

1. 设辅助函数: $F(x, \rho) = f(x) + \rho \mathcal{P}(x)$

其中, 惩罚因子 $\rho > 0$

惩罚函数 $\mathcal{P}(x)$ 定义在 \mathcal{R}^n 上, 满足:

① $\mathcal{P}(x)$ 是连续的

② 对任意的 $x \in \mathcal{R}^n$, 有 $\mathcal{P}(x) \geq 0$

③ (i) 外罚函数法: 当且仅当 x 是可行点时, $\mathcal{P}(x) = 0$

(ii) 障碍函数法: 当可行点 x 趋于 S 的边界时, $\mathcal{P}(x) \rightarrow +\infty$

2. 求解 $\min F(x, \rho)$. 随着 ρ 的改变, 求相应的极小点 $x(\rho)$

(i) 外罚函数法: ρ 递增趋于 $+\infty$ $\{\rho_k\} \rightarrow +\infty$

(ii) 障碍函数法: ρ 递减趋于 $+0$ $\{\rho_k\} \rightarrow +0$

3. $x(\rho_k) \rightarrow x^*$, $k \rightarrow \infty$

1. 引言

2. 外罚函数法

① 增广目标函数与无约束优化子问题 (P_σ)

② 问题 (P) 的极小值不小于问题 (P_σ) 的极小值

③ 收敛于 KKT 乘子的近似计算

④ 外罚函数算法

⑤ 问题 (P_{σ_k}) 的极小点收敛于问题 (P) 的全局极小点

⑥ 外罚函数的病态性质

3. 障碍函数法

4. 混合罚函数法

5. 乘子法

2. 外罚函数法

$$\begin{array}{ll}
 \text{约束优化问题} & \begin{array}{l} \min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} \\ c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{I} \end{array}
 \end{array} \quad (P)$$

$$\begin{array}{ll}
 \text{构造罚函数} & P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{I}} [\max\{0, c_j(x)\}]^2
 \end{array}$$

$$\begin{array}{ll}
 \text{增广目标函数} & F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x) \quad \sigma > 0
 \end{array}$$

$$\begin{array}{ll}
 \text{无约束优化问题} & \min F(x, \sigma), \quad x \in \mathcal{R}^n, \quad \sigma > 0 \quad (P_\sigma)
 \end{array}$$

$$\begin{array}{ll}
 \text{无约束优化问题} & \min F(x, \sigma_k), \quad x \in \mathcal{R}^n, \quad \sigma_k > 0 \quad (P_{\sigma_k}) \\
 & \{\sigma_k\} \text{正实数增序列, } \sigma_k \rightarrow +\infty
 \end{array}$$

增广目标函数

$$F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x) \quad \sigma > 0$$

$$P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{I}} [\max\{0, c_j(x)\}]^2 = \begin{cases} 0 & x \text{ 可行点} \\ \xi > 0 & x \text{ 非可行点} \end{cases}$$

解释：

1. 当 $x \in S$ 时, x 为可行点, $F(x, \sigma) = f(x)$, 目标函数没有受到额外惩罚
2. 当 $x \notin S$ 时, x 为不可行点, $F(x, \sigma) > f(x)$, 目标函数受到了额外的惩罚

$$\left. \begin{array}{l} \text{1. 当 } x \in S \text{ 时, } x \text{ 为可行点, } F(x, \sigma) = f(x), \text{ 目标函数没有受到额外惩罚} \\ \text{2. 当 } x \notin S \text{ 时, } x \text{ 为不可行点, } F(x, \sigma) > f(x), \text{ 目标函数受到了额外的惩罚} \end{array} \right\} F(x, \sigma) \geq f(x)$$

$\sigma > 0$ 越大, 受到的惩罚越重

$\sigma > 0$ 充分大时, 要使 $F(x, \sigma)$ 达到极小, $P(x)$ 应充分小

从而, $F(x, \sigma)$ 的极小点充分逼近可行域 S

其极小解 $x(\sigma)$ 自然充分逼近 $f(x)$ 在 S 上的极小值

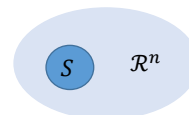
性质: $\min_{x \in S} f(x) \geq \max_{\sigma > 0} \min_{x \in \mathcal{R}^n} F(x, \sigma)$ $\min_{x \in S} f(x) = \lim_{\sigma \rightarrow \infty_+} \left[\min_{\sigma > 0} F(x, \sigma) \right]$

$$(P) \quad \begin{array}{ll} \min f(x) \\ \text{s.t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} \\ c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{J} \end{array} \quad (P_\sigma) \quad \begin{array}{ll} \min F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x) \\ P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} [\max\{0, c_j(x)\}]^2 \end{array}$$

分析: $\min_{x \in S} f(x) \Leftrightarrow \min_{\substack{x \in S \\ \sigma > 0}} F(x, \sigma) \Leftrightarrow \min_{\substack{x \in \mathcal{R}^n \\ \sigma > 0}} F(x, \sigma)$

$$f^* \triangleq \min_{x \in S} f(x) = \min_{x \in S} F(x, \sigma) \geq \min_{x \in S} F(x, \sigma) \triangleq y(\sigma)$$

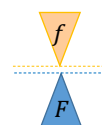
$\uparrow S \subset \mathcal{R}^n$



$$y(\sigma) \leq f^* \quad y(\sigma) \text{ 有上界 且可达 } \Leftrightarrow F(x, \sigma) \text{ 连续}$$

$y(\sigma)$ 为 (P) 问题的最优值 $f(x)$ 提供下界

$$\max_{\sigma > 0} y(\sigma) = f^*$$



性质: $\min_{x \in S} f(x) \geq \max_{\sigma > 0} \min_{x \in \mathcal{R}^n} F(x, \sigma)$ $\min_{x \in S} f(x) = \lim_{\sigma \rightarrow \infty_+} \left[\min_{\sigma > 0} F(x, \sigma) \right]$

$$(P) \quad \begin{array}{ll} \min f(x) \\ \text{s.t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} \\ c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{J} \end{array} \quad (P_\sigma) \quad \begin{array}{ll} \min F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x) \\ P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} [\max\{0, c_j(x)\}]^2 \end{array}$$

分析: $\max_{\sigma > 0} y(\sigma) = f^*$ $y(\sigma)$ 有上界且可达, 关于 σ 单调增 \Rightarrow 极限存在

$$0 < \sigma_1 < \sigma_2$$

$$f(x) + \sigma_1 P(x) \leq f(x) + \sigma_2 P(x)$$

$$F(x, \sigma_1) \leq F(x, \sigma_2)$$

$$\min F(x, \sigma_1) \leq \min F(x, \sigma_2)$$

$$y(\sigma_1) \leq y(\sigma_2)$$

$$\lim_{\sigma \rightarrow \infty_+} y(\sigma) = \max_{\sigma > 0} y(\sigma) = f^*$$

$$\text{即 } \lim_{\sigma \rightarrow \infty_+} \left[\min_{\sigma > 0} F(x, \sigma) \right] = \min_{x \in S} f(x)$$

KKT乘子的近似值

$$\lambda_i^k = \begin{cases} \sigma_k c_i(x^k) & i \in \mathcal{E} \\ \sigma_k \max\{0, c_i(x^k)\} & i \in \mathcal{J} \end{cases}$$

$$\min F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x)$$

$$P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} [\max\{0, c_j(x)\}]^2 \quad (P_\sigma)$$

Lagrange 函数

$$l(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{J}} \lambda_i c_i(x)$$

思路：通过比较 $D_x F(x^k, \sigma_k) = 0$ 与 $D_x l(x^k, \lambda^k) = 0$ ，得到 λ^k

$$\text{记 } c_j^+(x) = \max\{0, c_j(x)\}, j \in \mathcal{J}$$

$$D_x F(x, \sigma) = Df(x) + \sigma \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x) Dc_i(x) + \sigma \sum_{j \in \mathcal{J}} c_j^+(x) Dc_j(x)$$

$$D_x F(x^k, \sigma_k) = Df(x^k) + \underbrace{\sigma_k \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x^k) Dc_i(x^k)}_{\text{blue}} + \underbrace{\sigma_k \sum_{j \in \mathcal{J}} c_j^+(x^k) Dc_j(x^k)}_{\text{pink}} = 0 \quad \text{在 } (x^k, \sigma_k) \text{ 处满足 FONC}$$

$$D_x L(x^k, \lambda^k) = Df(x^k) + \underbrace{\sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^k Dc_i(x^k)}_{\text{blue}} + \underbrace{\sum_{i \in \mathcal{J}} \lambda_i^k Dc_i(x^k)}_{\text{pink}} = 0 \quad \text{在 } (x^k, \lambda^k) \text{ 处满足 FONC}$$

例1

求解约束优化问题： $\min f(x) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 1)^2$
s. t. $x_1 + x_2 = 1$

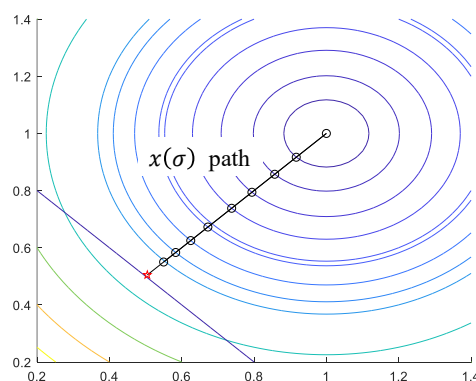
$$F(x, \sigma) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 1)^2 + \frac{1}{2} \sigma (x_1 + x_2 - 1)^2$$

$$\frac{\partial F(x, \sigma)}{\partial x_1} = 2(x_1 - 1) + \sigma(x_1 + x_2 - 1) = 0$$

$$\frac{\partial F(x, \sigma)}{\partial x_2} = 2(x_2 - 1) + \sigma(x_1 + x_2 - 1) = 0$$

$$x_1(\sigma) = x_2(\sigma) = \frac{\sigma + 2}{2(\sigma + 1)} \rightarrow \frac{1}{2}$$

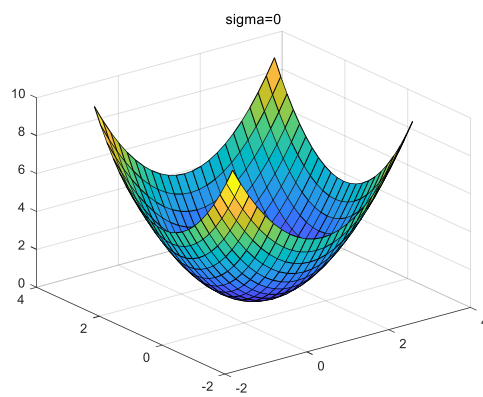
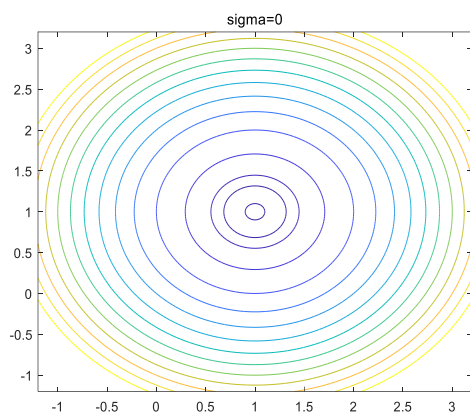
$$\sigma \rightarrow +\infty \quad x^* = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)^T$$



$$x_1(\sigma) + x_2(\sigma) = 1 + \frac{1}{\sigma + 1} > 1$$

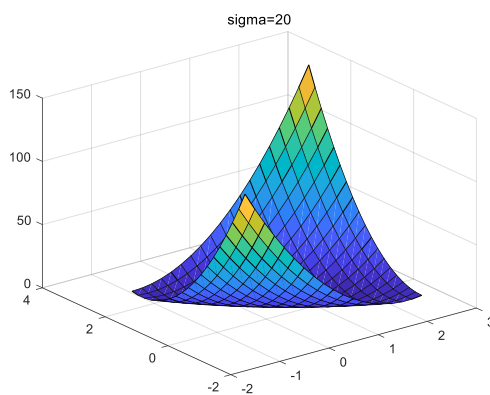
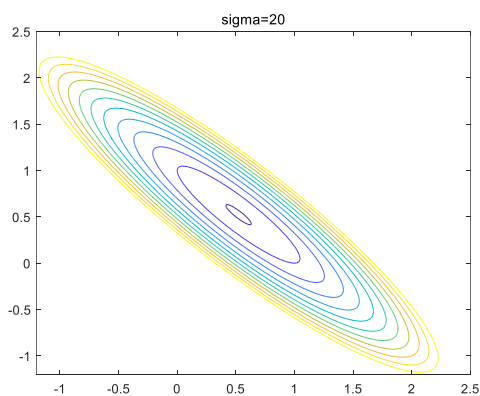
$$(x_1(\sigma), x_2(\sigma)) \notin S$$

$$\sigma = 0 \quad F(x, \sigma)$$



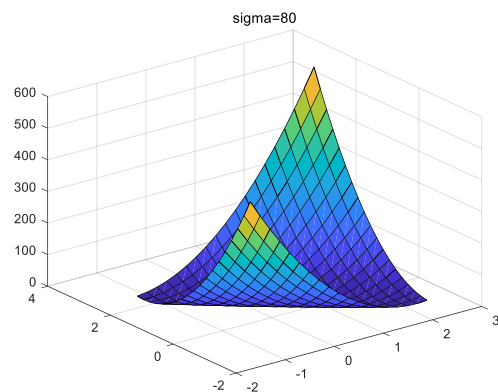
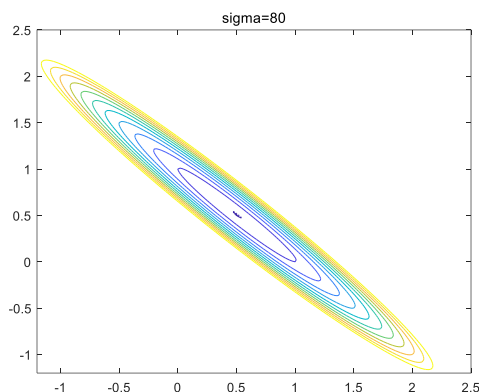
f=[0.01, 0.1, 0.2, 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4, 4.5, 5, 5.5, 6]

$$\sigma = 20 \quad F(x, \sigma)$$



f=[0.01, 0.1, 0.2, 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4, 4.5, 5, 5.5, 6]

$$\sigma = 80 \quad F(x, \sigma)$$



$$\mathbf{f} = [0.01, 0.1, 0.2, 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4, 4.5, 5, 5.5, 6]$$

$$\nabla^2 F(x, \sigma) = \begin{bmatrix} 2 + \sigma & \sigma \\ \sigma & 2 + \sigma \end{bmatrix} \text{病态}$$

$$\text{cond } \nabla^2 F(x, \sigma) = \frac{2 + 2\sigma}{2} = 1 + \sigma \rightarrow \infty$$

问题 (P_{σ_k}) 收敛很慢

$\min F(x, \sigma_k)$ 求解效率低

例2 求解约束优化问题: $\min f(x) = x^2$
s.t. $1 - x \leq 0$

$$S = [1, +\infty)$$

$$F(x, \sigma) = x^2 + \frac{1}{2}\sigma(1 - x)^2$$

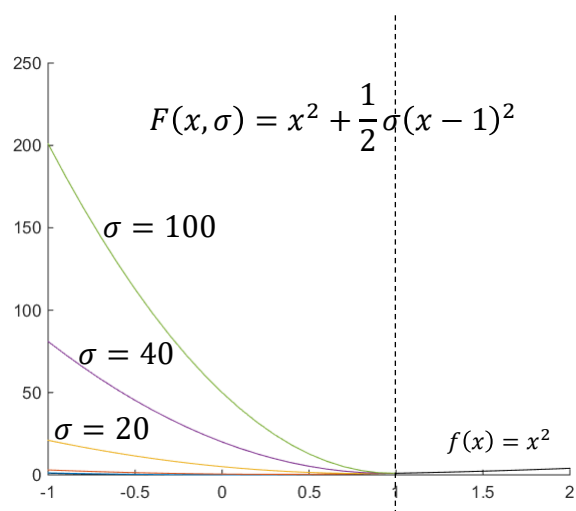
$$\sigma \rightarrow +\infty \quad x(\sigma) = \frac{\sigma}{\sigma + 2} \rightarrow 1$$

$$F(x, \sigma) = x^2 + \frac{1}{2}\sigma[\max\{0, 1 - x\}]^2$$

$$= \begin{cases} x^2 & 1 - x \leq 0 \\ x^2 + \frac{1}{2}\sigma(1 - x)^2 & 1 - x > 0 \end{cases}$$

$$x(\sigma) = \frac{\sigma}{\sigma + 2} < 1 \notin S \rightarrow 1$$

$$\sigma \rightarrow +\infty$$



约束优化问题转化为序列无约束的优化问题

约束优化问题

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} \\ c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{J} \end{aligned} \quad (P)$$

无约束优化问题

$$\begin{aligned} \min F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x) \\ P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} [\max\{0, c_j(x)\}]^2 \quad (P_\sigma) \\ x \in \mathcal{R}^n, \quad \sigma > 0 \end{aligned}$$

一般约束优化问题(P) 转化为 序列(一系列)无约束的优化问题(P_{σ_k})

$$\begin{aligned} \min F(x, \sigma_k), \quad x \in \mathcal{R}^n \\ \{\sigma_k\} \text{ 是正数递增序列, 且 } \sigma_k \rightarrow +\infty \end{aligned} \quad (P_{\sigma_k})$$

$x(\sigma_k)$ 是从可行域S的外部趋于 x^*

外点法

外罚函数算法

步0 给定初始点 x^0 , 终止误差 $0 \leq \varepsilon \ll 1$. $\sigma_1 > 0$, $\gamma > 1$. 令 $k := 1$

步1 以 x^{k-1} 为初始点求解子问题 无约束优化问题

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

令其极小点为 x^k

步2 若 $\sigma_k P(x^k) \leq \varepsilon$, 停算, 输出 $x^* \approx x^k$ 作为近似极小点

步3 令 $\sigma_{k+1} := \gamma \sigma_k$, $k := k + 1$, 转步1

任意选取初始点 x^0 : 可行点或者不可行点

$$\begin{aligned} \text{终止条件: } \sigma_k P(x^k) \leq \varepsilon \\ \because \lim_{k \rightarrow \infty} \sigma_k P(x^k) = \lim_{k \rightarrow \infty} [F(x^k, \sigma_k) - f(x^k)] = \bar{F} - \bar{f} = 0 \end{aligned}$$

优势与问题

- 优点
1. 外罚函数法结构简单
 2. 直接用无约束优化算法，容易编程

缺点 1. x^k 往往不是可行点，对某些实际问题难以接受

2. σ_k 的选取比较困难

σ_k 过小，可能起不到“惩罚”的作用

σ_k 过大，可能造成 $F(x, \sigma_k)$ 的Hesse阵的条件数很大，数值计算困难. 具体见后

3. $P(x)$ 一般是不可微的，难以直接使用利用导数的优化算法，收敛速度缓慢
次梯度法

序列无约束的优化问题(P_{σ_k})的性质

引理 设 x^k 是问题(P_{σ_k}): $\min F(x, \sigma_k) = f(x) + \sigma_k P(x)$ 的全局极小点，且 $\sigma_{k+1} \geq \sigma_k > 0$,

则有：

- | | |
|---|----------------------------------|
| 1. $F(x^{k+1}, \sigma_{k+1}) \geq F(x^k, \sigma_k)$ | 1. $\{F(x^k, \sigma_k)\}$ 是单调递增的 |
| 2. $P(x^{k+1}) \leq P(x^k)$ | 2. $\{P(x^k)\}$ 是单调递减的 |
| 3. $f(x^{k+1}) \geq f(x^k)$ | 3. $\{f(x^k)\}$ 是单调递增的 |

证明 $F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x)$ $\sigma > 0$

$$P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} [\max\{0, c_j(x)\}]^2 \geq 0$$

$$\sigma_{k+1} \geq \sigma_k > 0$$

$$\begin{aligned}
 F(x^{k+1}, \sigma_{k+1}) &= f(x^{k+1}) + \sigma_{k+1} P(x^{k+1}) \\
 &\geq f(x^{k+1}) + \sigma_k P(x^{k+1}) && \sigma_{k+1} \geq \sigma_k > 0 \\
 &= F(x^{k+1}, \sigma_k) \\
 &\geq F(x^k, \sigma_k) && x^k = \operatorname{argmin} F(x, \sigma_k)
 \end{aligned}$$

序列无约束的优化问题(P_{σ_k})的性质

引理 设 x^k 是问题(P_{σ_k}): $\min F(x, \sigma_k) = f(x) + \sigma_k P(x)$ 的全局极小点, 且 $\sigma_{k+1} \geq \sigma_k > 0$, 则有:

- | | |
|---|----------------------------------|
| 1. $F(x^{k+1}, \sigma_{k+1}) \geq F(x^k, \sigma_k)$ | 1. $\{F(x^k, \sigma_k)\}$ 是单调递增的 |
| 2. $P(x^{k+1}) \leq P(x^k)$ | 2. $\{P(x^k)\}$ 是单调递减的 |
| 3. $f(x^{k+1}) \geq f(x^k)$ | 3. $\{f(x^k)\}$ 是单调递增的 |

证明 $F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x)$ $\sigma > 0$

$$P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} [\max\{0, c_j(x)\}]^2 \geq 0$$

$$\sigma_{k+1} \geq \sigma_k > 0$$

$f(x^{k+1}) + \sigma_k P(x^{k+1}) \geq f(x^k) + \sigma_k P(x^k)$	$x^k = \operatorname{argmin} F(x, \sigma_k)$
$f(x^k) + \sigma_{k+1} P(x^k) \geq f(x^{k+1}) + \sigma_{k+1} P(x^{k+1})$	$x^{k+1} = \operatorname{argmin} F(x, \sigma_{k+1})$

相加, 整理, 得 $(\sigma_{k+1} - \sigma_k)(P(x^k) - P(x^{k+1})) \geq 0 \Rightarrow P(x^k) - P(x^{k+1}) \geq 0$

序列无约束的优化问题(P_{σ_k})的性质

引理 设 x^k 是问题(P_{σ_k}): $\min F(x, \sigma_k) = f(x) + \sigma_k P(x)$ 的全局极小点, 且 $\sigma_{k+1} \geq \sigma_k > 0$, 则有:

- | | |
|---|----------------------------------|
| 1. $F(x^{k+1}, \sigma_{k+1}) \geq F(x^k, \sigma_k)$ | 1. $\{F(x^k, \sigma_k)\}$ 是单调递增的 |
| 2. $P(x^{k+1}) \leq P(x^k)$ | 2. $\{P(x^k)\}$ 是单调递减的 |
| 3. $f(x^{k+1}) \geq f(x^k)$ | 3. $\{f(x^k)\}$ 是单调递增的 |

证明 $F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x)$ $\sigma > 0$

$$P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} [\max\{0, c_j(x)\}]^2 \geq 0$$

$$\sigma_{k+1} \geq \sigma_k > 0$$

$f(x^{k+1}) + \sigma_k P(x^{k+1}) \geq f(x^k) + \sigma_k P(x^k)$	$x^k = \operatorname{argmin} F(x, \sigma_k)$
--	--

\Downarrow

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) \geq \sigma_k (P(x^k) - P(x^{k+1})) \geq 0$$

问题 (P_{σ_k}) 的全局极小点列 $\{x^k\}$ 的聚点是问题 (P) 的全局极小点

定理 设 x^* 是问题 (P) 的全局极小点. 令 $\{\sigma_k\}$ 为一正数序列, 满足罚参数 $\sigma_{k+1} \geq \sigma_k, k = 1, 2, \dots$, 且 $\sigma_k \rightarrow +\infty$. 若 x^k 为问题 (P_{σ_k}) 的全局极小点, 则 $\{x^k\}$ 的任一聚点 \bar{x} 必为问题 (P) 的全局极小点.

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} \quad (P) \\ c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{J} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \min F(x, \sigma_k) \\ \{\sigma_k\} \text{ 正数增序列, } \sigma_k \rightarrow +\infty \quad (P_{\sigma_k}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \min F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x) \\ P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} [\max\{0, c_j(x)\}]^2 \quad (P_\sigma) \end{aligned}$$

证明

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

$$\text{设 } x^* = \operatorname{argmin}_{x \in S} f(x) \Rightarrow P(x^*) = 0 \quad f^* = f(x^*)$$

$$f(x^k) \leq F(x^k, \sigma_k) = f(x^k) + \sigma_k P(x^k) \leq f(x^*) + \sigma_k \overset{=0}{P(x^*)} = f^* \quad x^k = \operatorname{argmin} F(x, \sigma_k)$$

$$\begin{aligned} F(x^k, \sigma_k) &\leq f^* &\Rightarrow F(x^k, \sigma_k) \text{ 有上界} \\ f(x^k) &\leq f^* &\Rightarrow f(x^k) \text{ 有上界} \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} F(x^k, \sigma_k) &\leq f^* \\ f(x^k) &\leq f^* \end{aligned}} \right\} [F(x^k, \sigma_k) - f(x^k)] \text{ 有界}$$

$$F(x^k, \sigma_k) = f(x^k) + \sigma_k P(x^k) \Rightarrow P(x^k) = \frac{1}{\sigma_k} [F(x^k, \sigma_k) - f(x^k)]$$

$$\Rightarrow P(x^k) \rightarrow 0 \quad \sigma_k \rightarrow +\infty$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = \bar{x} \quad P(\bar{x}) = \lim_{k \rightarrow \infty} P(x^k) = 0 \quad \Rightarrow \bar{x} \in S$$

$$\begin{aligned} \text{由引理 } f(x^k) \text{ 递增, 有上界} \rightarrow \text{极限存在} \quad f(\bar{x}) = \lim_{k \rightarrow \infty} f(x^k) \leq f(x^*) \\ x^* = \operatorname{argmin}_{x \in S} f(x) \quad \forall \bar{x} \in S \quad f(\bar{x}) \geq f(x^*) \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} f(\bar{x}) = \lim_{k \rightarrow \infty} f(x^k) \leq f(x^*) \\ f(\bar{x}) \geq f(x^*) \end{aligned}} \right\} f(\bar{x}) = f(x^*)$$

问题 (P_{σ_k}) 的全局极小点列 $\{x^k\}$ 收敛于问题 (P) 的全局极小点 x^*

设 $f, c_i \in C^1, i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{J}$, 问题 (P) 的全局极小点存在; 正罚参数 $\{\sigma_k\}$ 递增趋于 $+\infty$, 若 x^k 是问题 (P_{σ_k}) 的全局极小点, 且 $x^k \rightarrow x^*$, x^* 是正则点. 则(1) x^* 是问题 (P) 的全局极小点, 且 (2)

$$\lambda_i^* = \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_i^k$$

$$\lambda^* \text{ 是 } x^* \text{ 处的 KKT 乘子}$$

$$\lambda_i^k = \begin{cases} \sigma_k c_i(x^k) & i \in \mathcal{E} \\ \sigma_k c_i^+(x^k) & i \in \mathcal{J} \end{cases} \quad c_j^+(x) = \max\{0, c_j(x)\}, j \in \mathcal{J}$$

$$\lambda_i^k = \begin{cases} \sigma_k c_i(x^k) & i \in \mathcal{E} \\ \sigma_k \max\{0, c_i(x^k)\} & i \in \mathcal{J} \end{cases}$$

证明 (1) 上一个定理已证

(2) $x^k = \operatorname{argmin} F(x, \sigma_k)$ (x^*, λ^*) 是 KKT 点对

当 $j \in \mathcal{J} \setminus \mathcal{J}(x^*)$ 时, 有 $c_j(x^*) < 0$, $c_j \in C^1$, 则 $\exists K$, 当 $k > K$ 时, 有 $c_j(x^k) < 0$ 即 x^k 充分接近 x^*
因此 $\lambda_i^k = \sigma_k c_i(x^k) = 0$, $\lim_{k \rightarrow \infty} \sigma_k c_j^+(x^k) = 0 = \lambda_j^*$, $j \in \mathcal{J} \setminus \mathcal{J}(x^*)$

$$c_j^+(x) = \max\{0, c_j(x)\}, j \in \mathcal{J}$$

证明 (2) $x^k = \operatorname{argmin} F(x, \sigma_k) \xrightarrow{\text{FONC}} Df(x^k) + \sigma_k \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x^k) Dc_i(x^k) + \sigma_k \sum_{j \in \mathcal{J}} c_j^+(x^k) Dc_j(x^k) = 0$

于是, 上式改为 $Df(x^k) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \sigma_k c_i(x^k) Dc_i(x^k) + \sum_{j \in \mathcal{J}(x^*)} \sigma_k c_j^+(x^k) Dc_j(x^k) = 0$ (1)

问题 (P) 的 KKT 条件 $D_x L(x^*, \lambda^*) = Df(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* Dc_i(x^*) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \lambda_j^* Dc_j(x^*) = 0$

对 $j \in \mathcal{J} \setminus \mathcal{J}(x^*), c_j(x^*) < 0, \lambda_j^* = 0$ $D_x L(x^*, \lambda^*) = Df(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* Dc_i(x^*) + \sum_{j \in \mathcal{J}(x^*)} \lambda_j^* Dc_j(x^*) = 0$ (2)

因为 x^* 是正则点, $\nabla c_i(x^*), i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{J}(x^*)$ 线性无关, 式(1)减式(2), 系数为零

$$\lambda_i^k = \sigma_k c_i(x^k), \quad i \in \mathcal{E}$$

$$\lambda_j^k = \sigma_k c_j^+(x^k), \quad j \in \mathcal{J}(x^*)$$

$$\lambda_i^k \rightarrow \lambda_i^*, \quad i \in \mathcal{E}$$

$$\lambda_j^k \rightarrow \lambda_j^*, \quad j \in \mathcal{J}$$

外罚函数的病态性质 $\nabla_x^2 F(x^k, \sigma_k) \rightarrow \text{病态}$

$$\begin{array}{lll} \min f(x) & (P) & \min F(x, \sigma_k) \quad (P_{\sigma_k}) \\ \text{s.t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} & & \min F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x) \\ & & P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) \quad (P_\sigma) \end{array}$$

假定当 $\sigma_k \rightarrow +\infty$ 时, 有 $x^k \rightarrow x^*$

在 x^k 处 $F(x, \sigma_k)$ 的 Hesse 阵为

$$\nabla_x^2 F(x^k, \sigma_k) = L(x^k, \lambda^k) + \sigma_k \sum_{i \in \mathcal{E}} \nabla c_i(x^k) \nabla c_i(x^k)^T \quad L(x^k, \lambda^k) \text{ 为 Lagrange 函数的 Hesse 阵}$$

\uparrow

$$\nabla F(x, \sigma_k) = \nabla f(x) + \sigma_k \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x) \nabla c_i(x)$$

$$\begin{aligned} \nabla_x^2 F(x, \sigma_k) &= \nabla^2 f(x) + \sigma_k \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x) \nabla^2 c_i(x) + \sigma_k \sum_{i \in \mathcal{E}} \nabla c_i(x) \nabla c_i(x)^T \\ &= L(x, \lambda^k) + \sigma_k \sum_{i \in \mathcal{E}} \nabla c_i(x) \nabla c_i(x)^T \quad \lambda_i^k = \sigma_k c_i(x^k), i \in \mathcal{E} \end{aligned}$$

外罚函数的病态性质 $\nabla_x^2 F(x^k, \sigma_k) \rightarrow \text{病态}$

$$\begin{array}{lll} \min f(x) & (P) & \min F(x, \sigma_k) \quad (P_{\sigma_k}) \\ \text{s.t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} & & \min F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x) \\ & & P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) \quad (P_\sigma) \end{array}$$

假定当 $\sigma_k \rightarrow +\infty$ 时, 有 $x^k \rightarrow x^*$

在 x^k 处 $F(x, \sigma_k)$ 的 Hesse 阵为

$$\nabla_x^2 F(x^k, \sigma_k) = L(x^k, \lambda^k) + \sigma_k \sum_{i \in \mathcal{E}} \nabla c_i(x^k) \nabla c_i(x^k)^T \quad L(x^k, \lambda^k) \text{ 为 Lagrange 函数的 Hesse 阵}$$

$$\text{rank} \sum_{i \in \mathcal{E}} \nabla c_i(x^k) \nabla c_i(x^k)^T = m \quad \text{当 } \sigma_k \rightarrow +\infty \text{ 时, } \nabla_x^2 F(x^k, \sigma_k) \in S^n \text{ 有 } m \leq n \text{ 个特征值趋于 } \infty, \text{ 而其余特征值为有界}$$

$$\text{cond}_2 = \text{最大特征值} / \text{最小特征值} \rightarrow +\infty$$

说明: $\nabla_x^2 F(x^k, \sigma_k) \rightarrow \text{病态}$, 即, 接近奇异

外罚函数的病态性质 $\nabla_x^2 F(x^k, \sigma_k) \rightarrow \text{病态}$

$$\begin{array}{ll} \min f(x) & \\ \text{s.t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} & (P) \end{array} \quad \min F(x, \sigma_k) \quad (P_{\sigma_k}) \quad \begin{array}{ll} \min F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x) & \\ P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) & (P_{\sigma}) \end{array}$$

假定当 $\sigma_k \rightarrow +\infty$ 时, 有 $x^k \rightarrow x^*$

$$\nabla_x^2 F(x^k, \sigma_k) \rightarrow \text{病态}$$

矛盾:

- ① 取大的 σ_1 或 σ_k 增加很快, 可使算法收敛很快, 但很难精确地求解相应的 (P_{σ_k}) 问题
- ② 取小的 σ_1 且 σ_k 增加缓慢, 可保持 x^k 与 $F(x, \sigma_k)$ 的极小点接近, 容易求解 (P_{σ_k}) 问题, 但收敛太慢, 效果差

因此, 如何选取序列 $\{\sigma_k\}$ 是一个值得深入讨论的问题

根据经验, 通常取 $\sigma_k = 0.1 \times 2^{k-1}$

外罚函数的病态性质

$$\begin{array}{ll} \min f(x) & \\ (P) \text{ s.t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} & \end{array} \quad \begin{array}{ll} \min F(x, \sigma) = f(x) + \sigma P(x) & \\ (P_{\sigma}) \quad P(x) = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) & \end{array} \quad (P_{\sigma_k}) \quad \min F(x, \sigma_k)$$

假定当 $\sigma_k \rightarrow +\infty$ 时, 有 $x^k \rightarrow x^*$

$$\nabla_x^2 F(x^k, \sigma_k) \rightarrow \text{病态}$$

矛盾:

- ① 取大的 σ_1 或 σ_k 增加很快, 可使算法收敛很快, 但很难精确地求解相应的 (P_{σ_k}) 问题
- ② 取小的 σ_1 且 σ_k 增加缓慢, 可保持 x^k 与 $F(x, \sigma_k)$ 的极小点接近, 容易求解 (P_{σ_k}) 问题, 但收敛太慢, 效果差

因此, 如何选取序列 $\{\sigma_k\}$ 是一个值得深入讨论的问题

根据经验, 通常取 $\sigma_k = 0.1 \times 2^{k-1}$



M05M11084 最优化理论、算法与应用

6-3 约束优化问题的罚函数法

1. 引言
2. 外罚函数法
3. 障碍函数法
 - ① 不等式约束问题的障碍函数法
 - ② 不等式约束问题的障碍函数算法
 - ③ 障碍函数法的收敛性质
 - ④ 几点注意
4. 混合罚函数法
5. 乘子法

① 不等式约束问题的障碍函数法

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

$$\text{s.t. } c_i(x) \leq 0, i \in \mathcal{I}$$

(P)

一般只适用于不等式约束的优化问题

可行域 $S = \{x \in \mathcal{R}^n | c_i(x) \leq 0, i \in \mathcal{I}\}$ 可行域的内部 $S_0 = \{x \in \mathcal{R}^n | c_i(x) < 0, i \in \mathcal{I}\}$ 指标集 $\mathcal{I} = \{1, 2, \dots, p\}$ $S_0 = \text{int } S$

基本思想

- ✓ 保持迭代点 $x^k \in S_0$ 是可行域 S 的内点
- ✓ 可行域的边界被筑起一道很高的“围墙”作为障碍，当迭代点靠近边界时，增广目标函数值骤然增大，以示“惩罚”，阻止迭代点穿出边界

① 不等式约束问题的障碍函数法 一般只适用于不等式约束的优化问题

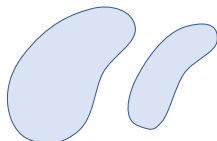
$$\min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n$$

$$\text{s.t. } c_i(x) \leq 0, i \in \mathcal{I}$$

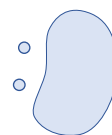
(P)

可行域 $S = \{x \in \mathcal{R}^n | c_i(x) \leq 0, i \in \mathcal{I}\}$ 可行域的内部 $S_0 = \{x \in \mathcal{R}^n | c_i(x) < 0, i \in \mathcal{I}\}$ 指标集 $\mathcal{I} = \{1, 2, \dots, p\}$ $S_0 = \text{int } S$ 假设集合 S 是鲁棒的

设可行域 S 的内部 $S_0 \neq \emptyset$ ，并且，可以逼近 S 中的任意点
 即， S 有非空内部，且，可以从内部逼近任意边界点
 这样的集合 S 称为鲁棒的 (robust)



robust



not robust



not robust

序列无约束优化问题(P_{τ_k})

$$\begin{aligned} \min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_i(x) \leq 0, i \in \mathcal{I} \end{aligned} \quad (P)$$

$$\begin{aligned} \min F(x, \tau_k) = f(x) + \tau_k B(x) \\ \text{递减序列 } \{\tau_k\}, \tau_k > 0, \tau_k \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (P_{\tau_k})$$

增广目标函数 $F(x, \tau) = f(x) + \tau B(x)$ $\tau > 0$ 罚因子或罚参数

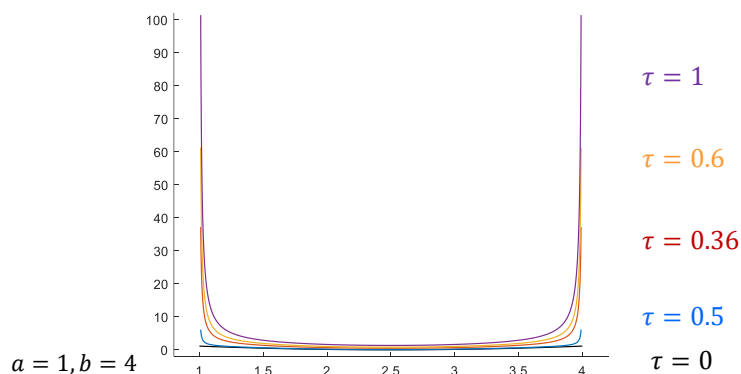
障碍函数 $B(x) = -\sum_{i=1}^m \frac{1}{c_i(x)}$ 倒数障碍函数

$B(x) = -\sum_{i=1}^m \ln[-c_i(x)]$ 对数障碍函数 收敛速度较快

例

$$\begin{aligned} \min f(x) = \frac{1}{2} \left(x - \frac{a+b}{2} \right)^2 \\ \text{s.t. } a \leq x \leq b \end{aligned}$$

$$F(x, \tau) = \frac{1}{2} \left(x - \frac{a+b}{2} \right)^2 - \tau \left(\frac{1}{a-x} + \frac{1}{x-b} \right), \tau > 0$$



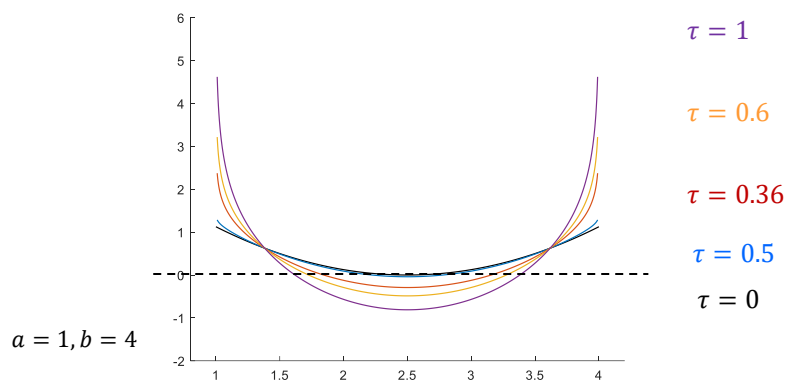
例

$$\min f(x) = \frac{1}{2} \left(x - \frac{a+b}{2} \right)^2$$

s. t. $a \leq x \leq b$

$$\tilde{F}(x, \tau) = \frac{1}{2\tau} \left(x - \frac{a+b}{2} \right)^2 - (\ln(-(a-x)) + \ln(-(x-b))), \tau > 0$$

$$F(x, \tau) = \frac{1}{2} \left(x - \frac{a+b}{2} \right)^2 - \tau (\ln(-(a-x)) + \ln(-(x-b))), \tau > 0$$

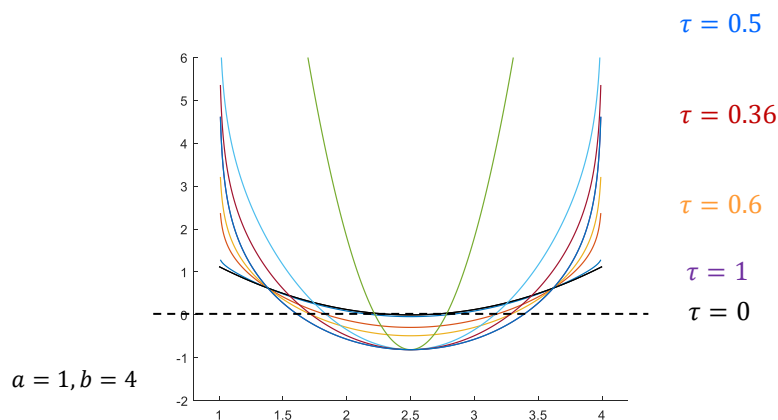


为图示：转为等价问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2} \left(x - \frac{a+b}{2} \right)^2$$

s. t. $a \leq x \leq b$

$$\tilde{F}(x, \tau) = \frac{1}{2\tau} \left(x - \frac{a+b}{2} \right)^2 - (\ln(-(a-x)) + \ln(-(x-b))), \tau > 0$$



例1 用内点法求解下面的优化问题:

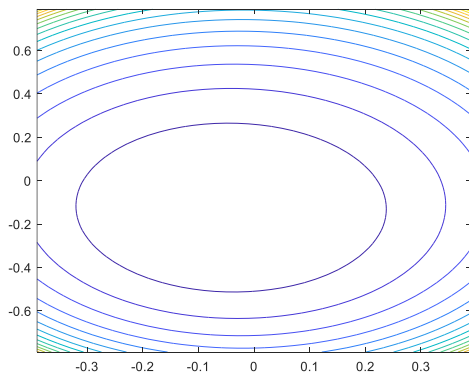
$$\begin{cases} \min 2x_1 + 3x_2 \\ \text{s.t. } 1 - 2x_1^2 - x_2^2 \geq 0 \end{cases}$$

$$F(x, \tau) = 2x_1 + 3x_2 - \tau \ln[1 - 2x_1^2 - x_2^2]$$

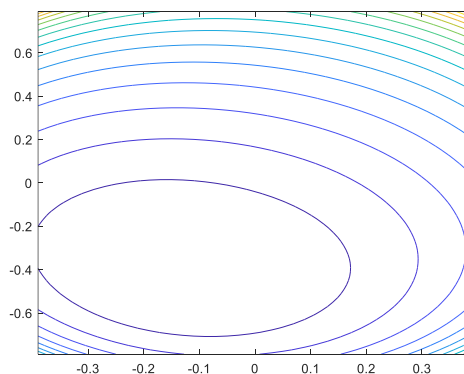
$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x_1} &= 2 + \frac{4\tau x_1}{1 - 2x_1^2 - x_2^2} = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial x_2} &= 3 + \frac{2\tau x_2}{1 - 2x_1^2 - x_2^2} = 0 \end{aligned} \quad \xrightarrow[\text{两式相减}]{x_2 = 3x_1} \quad \begin{aligned} x_1(\tau) &= \frac{\tau \pm \sqrt{\tau^2 + 11}}{11} \rightarrow \pm \frac{1}{\sqrt{11}} \quad (\tau \rightarrow 0) \\ x_2(\tau) &= 3x_1(\tau) \rightarrow \pm \frac{3}{\sqrt{11}} \quad (\tau \rightarrow 0) \end{aligned}$$

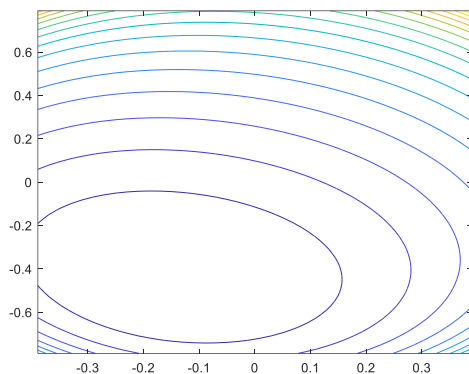
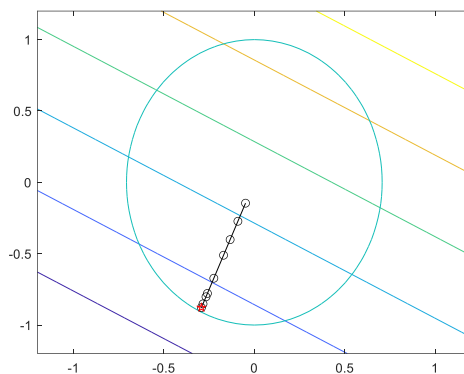
$$x^* = \left(-\frac{1}{\sqrt{11}}, -\frac{3}{\sqrt{11}} \right)^T$$

$\tau = 10$



$\tau = 3$



$\tau = 2.5$

 $x^k = \operatorname{argmin} F(x, \tau_k)$
Central path

 $\tau_k = 10, 5, 3, 2, 1, 0.5, 0.4, 0.2, 0.1$

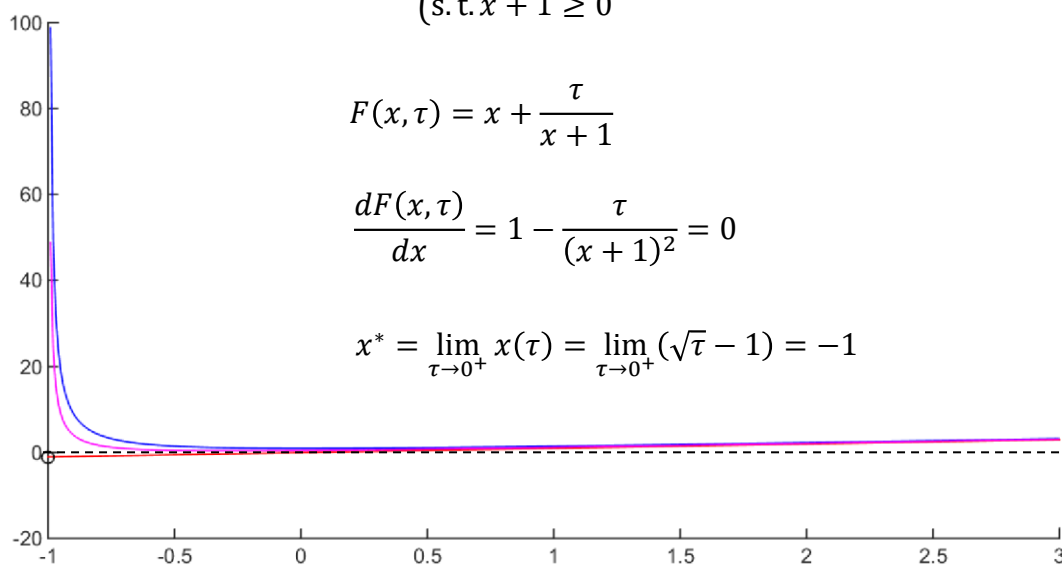
例2 用内点法求解下面的优化问题:

$$\begin{cases} \min f(x) = x \\ \text{s.t. } x + 1 \geq 0 \end{cases}$$

$$F(x, \tau) = x + \frac{\tau}{x + 1}$$

$$\frac{dF(x, \tau)}{dx} = 1 - \frac{\tau}{(x + 1)^2} = 0$$

$$x^* = \lim_{\tau \rightarrow 0^+} x(\tau) = \lim_{\tau \rightarrow 0^+} (\sqrt{\tau} - 1) = -1$$

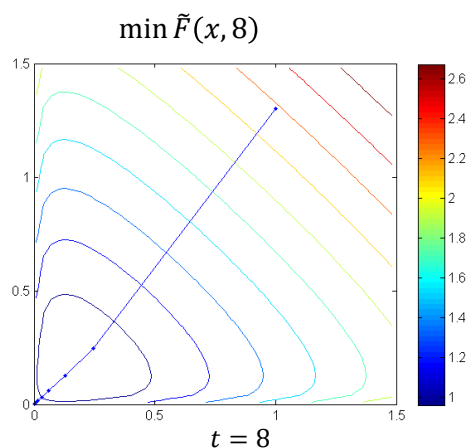
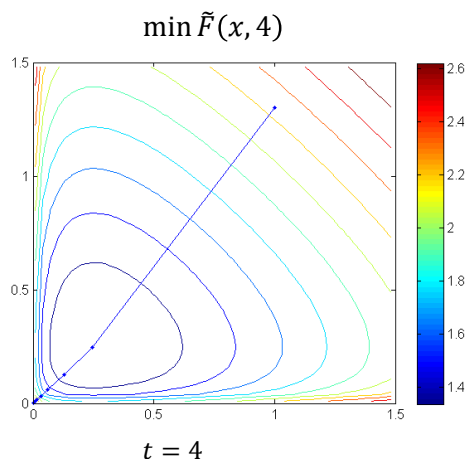


例 $\min x_1 + x_2 \quad x^0 = (1.3, 1)$
s.t. $x \geq 0$

$$t = 1/\tau$$

$$F(x, \tau) = x_1 + x_2 - \tau[\ln x_1 + \ln x_2] \quad \Leftrightarrow \quad \tilde{F}(x, \tau) = t[x_1 + x_2] - [\ln x_1 + \ln x_2]$$

计算技巧



②障碍函数算法

步0 给定初始点 $x^0 \in S_0$, 终止误差 $0 \leq \varepsilon \ll 1$. $\tau_1 > 0$, $\sigma \in (0, 1)$. 令 $k := 1$

步1 以 x^{k-1} 为初始点求解子问题

$$\min F(x, \tau_k) = f(x) + \tau_k B(x) \quad (P_{\tau_k})$$

令其极小点为 x^k .

步2 若 $\tau_k B(x^k) \leq \varepsilon$, 停算, 输出 $x^* \approx x^k$ 作为近似极小点.

步3 令 $\tau_{k+1} := \sigma \tau_k$, $k := k + 1$, 转步1.

$$\min F(x, \tau_k) = f(x) + \tau_k B(x) \quad \text{一些文献, 采用此问题}$$

s.t. $x \in S_0$

优势与问题

优点

结构简单, 适应性强

缺点

- ✓ 迭代次数增加, τ_k 将变得越来越小, 趋向于零,
使增广目标函数的病态性加重, 求解无约束子问题数值计算困难
可能导致迭代失败
- ✓ 初始点 x^0 是一个严格的可行点, 一般来说, 比较难确定

③障碍函数法的收敛性

分析

$$\begin{aligned} \min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_i(x) \leq 0, i \in \mathcal{E} \end{aligned} \quad (P)$$

$$x^* = \operatorname{argmin}_{x \in S} f(x) \quad \xleftarrow{k \rightarrow \infty}$$

$$\begin{aligned} \min F(x, \tau_k) \quad (P_{\tau_k}) \\ \tau_k > 0, \tau_k \rightarrow 0, k \rightarrow \infty \end{aligned}$$

$$x^k = \operatorname{argmin} F(x, \tau_k)$$

$$F(x, \tau) = f(x) + \tau B(x)$$

$$B(x) = - \sum_{i=1}^m \frac{1}{c_i(x)} > 0 \quad x \in S_0$$

$$B(x) = - \sum_{i=1}^m \ln[-c_i(x)] > 0$$

$$S = \{x \in \mathcal{R}^n | c_i(x) \leq 0, i \in \mathcal{I}\}$$

$$S_0 = \{x \in \mathcal{R}^n | c_i(x) < 0, i \in \mathcal{I}\}$$

③障碍函数法的收敛性质 $\{F(x^k, \tau_k)\}$ 是单调下降且有下界

引理 设 x^k 是问题 (P_{τ_k}) 在 $S_0 \neq \emptyset$ 中的极小点, $0 < \tau_{k+1} \leq \tau_k$, $\tau_k \rightarrow 0_+$.

那么, $\{F(x^k, \tau_k)\}$ 是单调下降且有下界的.

$$\begin{aligned}
 F(x^k, \tau_k) &= f(x^k) + \tau_k B(x^k) \\
 &\geq f(x^k) + \tau_{k+1} B(x^k) & B(x) > 0, \quad \forall x \in S_0 \\
 &\geq f(x^{k+1}) + \tau_{k+1} B(x^{k+1}) & \tau_k \geq \tau_{k+1} > 0 \\
 &= F(x^{k+1}, \tau_{k+1}) & x^{k+1} = \operatorname{argmin} F(x, \tau_{k+1})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 F(x^k, \tau_k) &\geq F(x^{k+1}, \tau_{k+1}) & \text{单调下降 有下界} & \text{设 } x^* \text{ 是问题 } (P) \text{ 的极小点} \\
 & & & \text{因为 } S_0 \subset S \\
 F(x^k, \tau_k) &= f(x^k) + \tau_k B(x^k) \geq f(x^k) \geq f(x^*) & \text{所以, } f(x^k) \geq f^*
 \end{aligned}$$

③障碍函数法的收敛性质 $\{x^k\}$ 的聚点 $\bar{x} = x^*$

设 x^* 是问题 (P) 的全局极小点, $S_0 \neq \emptyset$. 令 $\{\tau_k\}$ 为正递减序列, 且 $\tau_k \rightarrow 0_+$.

若 x^k 是问题 (P_{τ_k}) 在 S_0 中的极小点, 则 $\{x^k\}$ 的任一聚点 \bar{x} 必为问题 (P) 的极小点.

由引理知, $\{F(x^k, \tau_k)\}$ 是单调下降且有下界的序列 $F(x^k, \tau_k) \geq f^*$

所以, $\{F(x^k, \tau_k)\}$ 有极限, 不妨设 $\lim_{k \rightarrow \infty} F(x^k, \tau_k) = \bar{F} \geq f^*$

下面证明 $f^* = \bar{F}$

假设 $\bar{F} > f^*$ $N_\delta(x^*) = \{x \mid \|x - x^*\| < \delta, \delta > 0\}$

$\because f(x)$ 是连续的, $\exists \delta > 0$, 使 $\|x - x^*\| < \delta$, $x \in S_0$ 时,

有

$$f(x) - f^* \leq \frac{1}{2}(\bar{F} - f^*)$$

$$f(x) \leq f^* + \frac{1}{2}(\bar{F} - f^*) = \bar{F} - \frac{1}{2}(\bar{F} - f^*)$$

由引理知, $\{F(x^k, \tau_k)\}$ 是单调下降且有下界的序列 $F(x^k, \tau_k) \geq f^*$

所以, $\{F(x^k, \tau_k)\}$ 有极限, 不妨设 $\lim_{k \rightarrow \infty} F(x^k, \tau_k) = \bar{F} \geq f^*$

下面证明 $f^* = \bar{F}$ $\lim_{k \rightarrow \infty} F(x^k, \tau_k) = \bar{F} = f(x^*)$

假设 $\bar{F} > f^*$ $N_\delta(x^*) = \{x \mid \|x - x^*\| < \delta, \delta > 0\}$

$\because f(x)$ 是连续的, $\exists \delta > 0$, 使 $\|x - x^*\| < \delta$, $x \in S_0$ 时, 有

$$f(x) \leq \bar{F} - \frac{1}{2}(\bar{F} - f^*)$$

取 $\tilde{x} \in N_\delta(x^*) \cap S_0$ 则由 $\tau_k \rightarrow 0_+$, 存在 K , 当 $k \geq K$ 时, 有

$$\tau_k B(\tilde{x}) < \frac{1}{4}(\bar{F} - f^*)$$

$$F(x^k, \tau_k) \leq F(\tilde{x}, \tau_k) = f(\tilde{x}) + \tau_k B(\tilde{x}) < \bar{F} - \frac{1}{4}(\bar{F} - f^*)$$

最后证明 $f(\bar{x}) = f^*$

矛盾

$$\lim_{k \rightarrow \infty} F(x^k, \tau_k) = \bar{F} = f(x^*)$$

最后证明 $f(\bar{x}) = f(x^*)$

\bar{x} 是 $\{x^k\}$ 的聚点, 由 $c_i(x) \leq 0, i \in \mathcal{I}$, 且 $c_i(x)$ 是连续函数, 得

$$c_i(\bar{x}) \leq 0, i \in \mathcal{I} \Rightarrow \bar{x} \text{ 为可行点} \Rightarrow f(x^*) \leq f(\bar{x})$$

假设 $f(x^*) < f(\bar{x})$, 则

$$\lim_{k \rightarrow \infty} [f(x^k) - f(x^*)] = f(\bar{x}) - f(x^*) > 0$$

$$F(x^k, \tau_k) - f(x^*) = f(x^k) + \tau_k B(x^k) - f(x^*)$$

$$\geq f(x^k) - f(x^*)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} [F(x^k, \tau_k) - f(x^*)] \geq \lim_{k \rightarrow \infty} [f(x^k) - f(x^*)] = f(\bar{x}) - f(x^*) > 0$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} F(x^k, \tau_k) = \bar{F} > f(x^*)$$

矛盾

④几点注意

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
若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 τ_1 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

✓ τ_1 太大，将增加迭代次数；

✓ τ_1 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，要经过多次试算，才能决定一个适当 τ_1

3) 惩罚因子的缩减系数 c 的选取

惩罚因子 τ 是一个逐次递减到0的数列， $\tau_{k+1} = c\tau_k$, $k = 1, 2, \dots$; c 缩减系数: $0 < c < 1$
一般地， 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 0.1~0.7

4) 求解复杂的约束优化问题时，一般采用内点罚函数法. 此方法简单、易懂 无约束优化问题的解法已经有许多很有效的算法，如DFP、BFGS法等

- 尽管外点法和内点法已被广泛应用，但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）使得问题的求解变得很困难，甚至会使增广目标函数趋于病态

针对罚函数法这些固有的弱点，提出了混合罚函数法、乘子法

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

$$\psi(x, \lambda, \sigma) = L(x, \lambda) + \frac{\sigma}{2} \|h(x)\|^2$$

1. 引言
2. 外罚函数法
3. 障碍函数法
4. 一般约束问题的混合罚函数法
5. 乘子法

混合罚函数法：方法一

$$\begin{array}{ll} \min f(x), & x \in \mathcal{R}^n \\ \text{约束优化问题} & \text{s.t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} \\ & c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{I} \end{array} \quad (P)$$

可行域 $\mathcal{D} = \{x \in \mathcal{R}^n | c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}; c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{I}\}$

指标集 $\mathcal{E} = \{1, 2, \dots, l\}; \mathcal{I} = \{l+1, l+2, \dots, l+m\}$

方法一

$$\begin{array}{ll} \text{混合增广目标函数} & F(x, \mu) = f(x) + \frac{1}{\mu} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) - \mu \sum_{j \in \mathcal{I}} \frac{1}{c_j(x)} \\ & \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad (P_\mu) \\ \mu \rightarrow 0^+ & F(x, \mu) = f(x) + \frac{1}{\mu} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) - \mu \sum_{j \in \mathcal{I}} \ln[-c_j(x)] \end{array}$$

混合罚函数法：方法二

方法二 引入松弛变量 $y_j, j \in \mathcal{J}$, 将问题等价地转化为

$$\begin{aligned} \min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s. t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} \quad (\bar{P}) \\ c_j(x) + y_j = 0, j \in \mathcal{J} \\ y_j \geq 0, j \in \mathcal{J} \end{aligned}$$

任意的 $(x, y), y > 0$ 均可作为一个合适的初始点

混合增广目标函数 $\mu \rightarrow 0^+$

$$\begin{aligned} F(x, y, \mu) &= f(x) + \frac{1}{2\mu} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2\mu} \sum_{j \in \mathcal{J}} [c_j(x) + y_j]^2 + \mu \sum_{j \in \mathcal{J}} \frac{1}{y_j} \\ F(x, y, \mu) &= f(x) + \frac{1}{2\mu} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2\mu} \sum_{j \in \mathcal{J}} [c_j(x) + y_j]^2 - \mu \sum_{j \in \mathcal{J}} \ln y_j \end{aligned} \quad (\bar{P}_\mu)$$



M05M11084 最优化理论、算法与应用

6-3 约束优化问题的罚函数法

1. 引言
2. 外罚函数法
3. 障碍函数法
4. 一般约束问题的混合函数法
5. 乘子法
 - ① 等式约束问题的乘子法
 - ② 一般约束问题的乘子法
 - ③ 乘子法的程序实现

对等式约束优化问题的外罚函数法的讨论

$$\begin{array}{ll} \min f(x) & (P) \\ \text{s.t. } c(x) = 0 \end{array}$$

$$x^* = \operatorname{argmin}_{x \in S} f(x)$$

$$\begin{array}{ll} \min F(x, \sigma_k) & (P_{\sigma_k}) \\ \{\sigma_k\} \text{正实数增序列, } \sigma_k \rightarrow +\infty \end{array}$$

$$x^k = \operatorname{argmin} F(x, \sigma_k)$$

特点 $\left\{ \begin{array}{l} x^k \text{从可行域 } S \text{外部逼近 } x^* \in S \\ \nabla_x^2 F(x^k, \sigma_k) \rightarrow \text{病态, } \sigma_k \rightarrow +\infty \end{array} \right.$ 希望：找到 $\sigma_k \rightarrow \sigma^*$ 适中，使 $x^k \rightarrow x^*$

考虑：能否找到某个 σ^* ，使 x^* 恰好是 $F(x, \sigma^*)$ 的无约束极小点呢？

如果 x^* 是 $F(x, \sigma^*)$ 的极小点，则 $D_x F(x^*, \sigma^*) = Df(x^*) + \sigma^* c(x^*)^T Dc(x^*) = 0$

$$c = [c_1, c_2, \dots, c_m]^T$$

$$F(x, \sigma) = f(x) + \frac{\sigma}{2} \|c(x)\|^2$$

希望构造函数 $\psi(x, \sigma)$, 保证 $\sigma_k \rightarrow \sigma^*$ 适中, 使 $x^k \rightarrow x^*$

$$\begin{array}{ll} \min f(x) & \min F(x, \sigma_k) \\ \text{s.t. } c(x) = 0 & \{ \sigma_k \} \text{ 正实数增序列, } \sigma_k \rightarrow +\infty \\ x^* = \operatorname{argmin}_{x \in S} f(x) & x^k = \operatorname{argmin} F(x, \sigma_k) \end{array} \quad (P) \quad (P_{\sigma_k})$$

特点 $\left\{ \begin{array}{l} x^k \text{ 从可行域 } S \text{ 外部逼近 } x^* \in S \\ \nabla_x^2 F(x^k, \sigma_k) \rightarrow \text{病态, } \sigma_k \rightarrow +\infty \end{array} \right.$

考虑: 能否找到某个 σ^* , 使 x^* 恰好是 $F(x, \sigma^*)$ 的无约束极小点呢? 否

如果 x^* 是 $F(x, \sigma^*)$ 的极小点, 则 $D_x F(x^*, \sigma^*) = Df(x^*) + \sigma^* c(x^*)^T Dc(x^*) = 0$

x^* 是可行点, $c(x^*) = 0 \Rightarrow Df(x^*) = 0$ 即, x^* 恰好是 $f(x)$ 在无约束下的稳定点

$Df(x^*) \neq 0$, 对于一般约束优化问题

因此, 一般不能找到有限的 σ^* , 使 x^* 是 $F(x, \sigma^*)$ 的无约束极小点

那么, 能不能构造一个函数 $\psi(x, \sigma)$, 使 $x^* = \operatorname{argmin} \psi(x, \sigma)$?

同时, 保证 σ_k 适中, 避免 Hesse 阵病态而引起的极小点求解困难

构造函数 $\psi(x, \sigma)$, 保证 $\sigma_k \rightarrow \sigma^*$ 适中, 使 $x^k \rightarrow x^*$

$$\begin{array}{ll} \min f(x) & \text{构造函数} \\ \text{s.t. } c(x) = 0 & \min \psi(x, \sigma) \\ x^* = \operatorname{argmin}_{x \in S} f(x) & \text{使 } x^* = \operatorname{argmin} \psi(x, \sigma) \end{array} \quad (P) \quad (P_\psi)$$

设 x^* 为正则点, 据 SOSC 有

$$l(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T c(x)$$

$$D_x l(x^*, \lambda^*) = Df(x^*) + \lambda^{*T} Dc(x^*) = 0 \quad x^* \text{ 是 } (P_\psi) \text{ 的局部解} \Leftarrow D_x \psi(x^*, \sigma) = 0 \quad ?$$

$$y^T L(x^*, \lambda^*) y > 0, \forall y \in T(x^*) \quad \nabla_x^2 \psi(x^*, \sigma) > 0 \quad ?$$

$$T(x^*) = \{y | Dc(x^*)y = 0\}$$

$L(x^*, \lambda^*)$ 在切空间 $T(x^*)$ 上是正定的, 但, 在 \mathcal{R}^n 上, 不一定是正定的

因此, 构造增广拉格朗日函数 $\psi(x, \lambda, \sigma) = l(x, \lambda) + \frac{\sigma}{2} \|c(x)\|^2$ σ 充分大, $\nabla_x^2 \psi > 0$

① 等式约束问题的乘子法

$$\begin{array}{ll} \min f(x) & (P) \\ \text{s.t. } c(x) = 0 \end{array} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{array}{ll} \min l(x, \lambda^*) & (P_l) \\ \text{s.t. } c(x) = 0 \end{array}$$

$$x^* = \operatorname{argmin}_{x \in S} f(x)$$

拉格朗日函数 $l(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T c(x)$

设 KKT 点 (x^*, λ^*) , 最优条件 $D_x l(x^*, \lambda^*) = 0$

$$D_\lambda l(x^*, \lambda^*) = c(x^*) = 0$$

$$\forall x \in S, \quad l(x^*, \lambda^*) = f(x^*) \leq f(x) = f(x) + \lambda^{*T} c(x) = l(x, \lambda^*)$$

$$\begin{array}{ll} \min l(x, \lambda^*) & (P_l) \\ \text{s.t. } c(x) = 0 \end{array} \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{ll} \min \psi(x, \lambda, \sigma) & (P_\sigma) \end{array}$$

增广目标函数 $\psi(x, \lambda^*, \sigma) = l(x, \lambda^*) + \frac{\sigma}{2} \|c(x)\|^2$

一般地, $\lambda^* \Leftarrow \lambda$
$$\psi(x, \lambda, \sigma) = l(x, \lambda) + \frac{\sigma}{2} \|c(x)\|^2 = f(x) + \lambda^T c(x) + \frac{\sigma}{2} \|c(x)\|^2$$

$$D_x \psi(x^k, \lambda^k, \sigma) = Df(x^k) + [\lambda^k + \sigma c(x^k)]^T Dc(x^k) = 0$$

比较
$$D_x l(x^*, \lambda^*) = Df(x^*) + \lambda^{*T} Dc(x^*) = 0, \quad c(x^*) = 0$$

希望
$$x^k \rightarrow x^*, \quad [\lambda^k + \sigma c(x^k)] \rightarrow \lambda^*$$

所以, 取
$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \sigma c(x^k) \quad \Rightarrow \quad \{\lambda^k\} \rightarrow \lambda^* \Leftrightarrow \{c(x^k)\} \rightarrow 0$$

定理

设无约束优化问题

$$\min \psi(x, \lambda^k, \sigma) = L(x, \lambda^k) + \frac{\sigma}{2} \|c(x)\|^2 \quad (P_\sigma)$$

的极小点为 x^k . 则 (x^k, λ^k) 是问题 (P) 的KKT乘子的充要条件是 $c(x^k) = 0$.

证明 必要性显然

只证充分性

$$\psi(x, \lambda^k, \sigma) = L(x, \lambda^k) + \frac{\sigma}{2} \|c(x)\|^2$$

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } c(x) = 0 \end{aligned} \quad (P)$$

$$\text{设 } x^k = \operatorname{argmin} \psi(x, \lambda^k, \sigma) \text{ 且 } c(x^k) = 0$$

$\forall x \in S$, 有 $f(x) = \psi(x, \lambda^k, \sigma) \geq \psi(x^k, \lambda^k, \sigma) = f(x^k)$, 即 x^k 是 (P) 的极小点

注意到 x^k 也是 (P_σ) 的稳定点, 故有

$$D_x \psi(x^k, \lambda^k, \sigma) = Df(x^k) + [\lambda^k + \sigma c(x^k)]^T Dc(x^k) = Df(x^k) + \lambda^k{}^T Dc(x^k) = 0$$

表明, λ^k 是相应于 x^k 的Lagrange乘子, 即 (x^k, λ^k) 是问题 (P) 的KTT点对

见上页

由Powell 和Hestenes 首先独立提出来, 称为PH算法

算法 PH算法

步0 给定初始点 $x^0 \in \mathcal{R}^n$, $\lambda^1 \in \mathcal{R}^m$, 终止误差 $0 \leq \varepsilon \ll 1$.

参数 $\sigma_1 > 0$, $\vartheta \in (0,1)$, $\eta > 1$. 令 $k := 1$

步1 以 x^{k-1} 为初始点求解子问题

$$\min \psi(x, \lambda^k, \sigma_k) = f(x) + \lambda^k{}^T c(x) + \frac{\sigma_k}{2} \|c(x)\|^2$$

令其极小点为 x^k

步2 检验终止条件. 若 $\|c(x^k)\| \leq \varepsilon$, 停算, 输出 $x^* \approx x^k$ 作为近似极小点

步3 更新乘子向量. 令 $\lambda^{k+1} = \lambda^k + \sigma_k c(x^k)$

步4 更新罚参数. 若 $\|c(x^k)\| \geq \vartheta \|c(x^{k-1})\|$, 令 $\sigma_{k+1} := \eta \sigma_k$; 否则, $\sigma_{k+1} := \sigma_k$

步5 $k := k + 1$, 转步1

例

用乘子法求解约束优化问题

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= 2x_1^2 + x_1 - 3x_2^2 \\ \text{s.t. } x_2 &= 1 \end{aligned}$$

解 乘子法的增广目标函数

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, \lambda, \sigma) &= 2x_1^2 + x_1 - 3x_2^2 - \lambda(x_2 - 1) + \frac{\sigma}{2}(x_2 - 1)^2 \\ &= 2x_1^2 + \left(\frac{\sigma}{2} - 3\right)x_2^2 + x_1 - (\lambda + \sigma)x_2 + \lambda + \frac{\sigma}{2} \end{aligned}$$

$$\nabla_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, \lambda, \sigma) = \begin{pmatrix} 4x_1 + 1 \\ (\sigma - 6)x_2 - (\lambda + \sigma) \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad \text{取 } \sigma > 6 \quad \bar{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} \\ \frac{\lambda + \sigma}{\sigma - 6} \end{pmatrix}$$

$$\text{约束条件 } x_2 = 1 \quad \frac{\lambda + \sigma}{\sigma - 6} = 1, \quad \lambda = -6 \quad \bar{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} \\ 1 \end{pmatrix} = \mathbf{x}^*$$

乘子法不要求罚参数 σ 趋于无穷大, 只要求它大于某个正数 $\nabla_{\mathbf{x}}^2 \psi(\mathbf{x}, \lambda, \sigma)$ 的条件数适中

$$\psi(\mathbf{x}, \lambda, \sigma) = l(\mathbf{x}, \lambda) + \frac{\sigma}{2} \|c(\mathbf{x})\|^2$$

$$D_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, \lambda, \sigma) = D_{\mathbf{x}} l(\mathbf{x}, \lambda) + \sigma c(\mathbf{x})^T Dc(\mathbf{x})$$

$$\nabla_{\mathbf{x}}^2 \psi(\mathbf{x}, \lambda, \sigma) = L(\mathbf{x}, \lambda) + \sigma \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(\mathbf{x}) \nabla^2 c_i(\mathbf{x}) + \sigma \sum_{i \in \mathcal{E}} \nabla c_i(\mathbf{x}) \nabla c_i(\mathbf{x})^T$$

$$= L(\mathbf{x}, \lambda) + \sigma \sum_{i \in \mathcal{E}} \underbrace{c_i(\mathbf{x}) \nabla^2 c_i(\mathbf{x})}_{0} + \sigma \nabla c(\mathbf{x}) \nabla c(\mathbf{x})^T$$

$$\forall \mathbf{x} \in S, c_i(\mathbf{x}) = 0$$

$$y^T L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) y > 0, \forall y \in T(\mathbf{x}^*) \quad \Leftrightarrow \quad \exists \sigma > \sigma^*, \text{ 使 } y^T \nabla_{\mathbf{x}}^2 \psi(\mathbf{x}^*, \lambda^*, \sigma) y > 0 \quad \text{TRUE}$$

$$\begin{aligned} T(\mathbf{x}^*) &= \{y | Dc(\mathbf{x}^*) y = 0\} \\ &= \{y | \nabla c(\mathbf{x})^T y = 0\} \end{aligned}$$

下面的引理

引理

已知矩阵 $U \in \mathcal{R}^{n \times n}$, $D \in \mathcal{R}^{n \times m}$. 则对任意满足 $D^T x = 0$ 的非零向量 x 都有 $x^T U x > 0$ 的充要条件是存在常数 $\sigma^* > 0$, 使得对任意的 $\sigma \geq \sigma^*$ 有,

$$x^T (U + \sigma D D^T) x > 0, \quad \forall x \in \mathcal{R}^n, x \neq 0$$

证 充分性.

$$D^T x = 0 \Rightarrow x^T U x = x^T U x + \sigma x^T D D^T x = x^T (U + \sigma D D^T) x > 0$$

必要性

若存在常数 $\sigma^* > 0$, 使

$$x^T (U + \sigma^* D D^T) x > 0, \quad \forall x \in \mathcal{R}^n, x \neq 0$$

则任取 $\sigma \geq \sigma^*$, 恒有

$$x^T (U + \sigma D D^T) x \geq x^T (U + \sigma^* D D^T) x > 0, \quad \forall x \in \mathcal{R}^n, x \neq 0$$

$$x^T D D^T x = (D^T x)^T (D^T x) = \|D^T x\|^2 \geq 0$$

以下只需证明上述 σ^* 的存在性

以下只需证明上述 σ^* 的存在性

若这样的 σ^* 不存在, 则对任意的正整数 k , 必存在向量 x^k 且 $\|x^k\| = 1$, 使得

$$x^{kT} (U + k S S^T) x^k \leq 0$$

因 $\{x^k\}$ 是有界序列, 故必有收敛的子序列 (不妨仍记为它本身), 其极限为 \hat{x} , 且 $\|\hat{x}\| = 1$

那么, 对上式取极限, $k \rightarrow \infty$, 得

$$\hat{x}^T U \hat{x} + \lim_{k \rightarrow \infty} k \|S^T x^k\|^2 \leq 0$$

由此, 必有 $\|S^T x^k\| \rightarrow \|S^T \hat{x}\| = 0$ (否则, $k \|S^T x^k\|^2 \rightarrow +\infty$), 同时 $\hat{x}^T U \hat{x} \leq 0$

这与必要性的条件矛盾

定理

设问题 (P) 的 KKT 点 (x^*, λ^*) 满足二阶充分性条件, 则 $\exists \sigma^* > 0$, 对所有的 $\sigma \geq \sigma^*$, x^* 是增广目标函数 $\psi(x, \lambda^*, \sigma)$ 的严格局部极小点. 进一步, 若 $c(\bar{x}) = 0$, 且 \bar{x} 对某个 $\bar{\lambda}$ 是 $\psi(x, \bar{\lambda}, \sigma)$ 的局部极小点, 则 \bar{x} 也是问题 (P) 的局部极小点.

$$\begin{aligned} \text{证} \quad \psi(x, \lambda^*, \sigma) &= l(x, \lambda^*) + \frac{\sigma}{2} \|c(x)\|^2 & \nabla_x \psi(x, \lambda^*, \sigma) &= \nabla_x l(x, \lambda^*) + \sigma \nabla c(x) c(x) \\ & & \nabla_x^2 \psi(x^*, \lambda^*, \sigma) &= L(x^*, \lambda^*) + \sigma \nabla c(x^*) \nabla c(x^*)^T \end{aligned}$$

由二阶充分性条件知,

$$\forall y \in T(x^*), \quad y \neq 0, \quad T(x^*) = \{y | \nabla c(x^*)^T y = 0\}$$

$$\text{有} \quad y^T L(x^*, \lambda^*) y > 0$$

$$\nabla_x l(x^*, \lambda^*) = 0, \quad c(x^*) = 0$$

由引理知, $\exists \sigma^* > 0$ 使当 $\sigma \geq \sigma^*$ 且 $y \neq 0$ 时, 有

$$y^T \nabla_x^2 \psi(x^*, \lambda^*, \sigma) y = y^T [L(x^*, \lambda^*) + \underbrace{\sigma \nabla c(x^*) \nabla c(x^*)^T}_{=0}] y > 0 \quad \nabla_x \psi(x^*, \lambda^*, \sigma) = \nabla_x l(x^*, \lambda^*) = 0$$

增广目标函数 $\psi(x, \lambda^*, \sigma) (\sigma \geq \sigma^*)$ 在 x^* 处满足二阶充分性条件

故, x^* 是 $\psi(x, \lambda^*, \sigma)$ 的严格局部极小点 \Rightarrow 定理的第一个结论

定理 (续)

设问题 (P) 的 KKT 点 (x^*, λ^*) 满足二阶充分性条件, 则 $\exists \sigma^* > 0$, 对所有的 $\sigma \geq \sigma^*$, x^* 是增广目标函数 $\psi(x, \lambda^*, \sigma)$ 的严格局部极小点. 进一步, 若 $c(\bar{x}) = 0$, 且 \bar{x} 对某个 $\bar{\lambda}$ 是 $\psi(x, \bar{\lambda}, \sigma)$ 的局部极小点, 则 \bar{x} 也是问题 (P) 的局部极小点.

$$\psi(x, \lambda, \sigma) = f(x) + \lambda^T c(x) + \frac{\sigma}{2} \|c(x)\|^2$$

下面证明第二个结论.

若 $c(\bar{x}) = 0$, 且 \bar{x} 对某个 $\bar{\lambda}$ 是 $\psi(x, \bar{\lambda}, \sigma)$ 的局部极小点, $\bar{x} = \operatorname{argmin} \psi(x, \bar{\lambda}, \sigma)$

则对任意与 \bar{x} 充分靠近的 \hat{x} (即 $c(\hat{x}) = 0$), 有

$$\psi(\bar{x}, \bar{\lambda}, \sigma) \leq \psi(\hat{x}, \bar{\lambda}, \sigma)$$

因 $c(\bar{x}) = c(\hat{x}) = 0$, 故有

$$\psi(\bar{x}, \bar{\lambda}, \sigma) = \underbrace{f(\bar{x})}_{=f(\hat{x})} \leq f(\hat{x}) = \psi(\hat{x}, \bar{\lambda}, \sigma)$$

表明, \bar{x} 是问题 (P) 的局部极小点

②一般约束问题的乘子法

不等式约束问题的乘子法

$$\begin{aligned} \text{分析: } \min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{J} = \{1, 2, \dots, p\} \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} \min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_j(x) + z_j^2 = 0, j \in \mathcal{J} \end{aligned}$$

$$\text{增广拉格朗日函数 } \bar{\psi}(x, z, \lambda, \sigma) = f(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \lambda_j (c_j(x) + z_j^2) + \frac{\sigma}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} (c_j(x) + z_j^2)^2 \quad n + 2p \text{ 维}$$

$$\text{思路: 首先 } \bar{z} = z(x, \lambda, \sigma) = \underset{z}{\operatorname{argmin}} \bar{\psi}(x, z, \lambda, \sigma) \quad \text{类似分块坐标轮换法}$$

$$\text{代入 } \bar{\psi}(x, z, \lambda, \sigma) = \bar{\psi}(x, z(x, \lambda, \sigma), \lambda, \sigma)$$

$$\text{降维 } \bar{x} = x(\lambda, \sigma) = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \bar{\psi}(x, z(x, \lambda, \sigma), \lambda, \sigma) \quad n + p \text{ 维}$$

展开

$$\bar{\psi}(x, z, \lambda, \sigma) = f(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \lambda_j c_j(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \lambda_j z_j^2 + \frac{\sigma}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} c_j^2(x) + \frac{\sigma}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} z_j^4 + \sigma \sum_{j \in \mathcal{J}} c_j(x) z_j^2$$

$$\begin{aligned} \min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{J} = \{1, 2, \dots, p\} \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} \min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_j(x) + z_j^2 = 0, j \in \mathcal{J} \end{aligned}$$

分析:

$$\text{增广拉格朗日函数 } \bar{\psi}(x, z, \lambda, \sigma) = f(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \lambda_j (c_j(x) + z_j^2) + \frac{\sigma}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} (c_j(x) + z_j^2)^2$$

$$\bar{\psi}(x, z, \lambda, \sigma) = f(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \lambda_j c_j(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \lambda_j z_j^2 + \frac{\sigma}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} c_j^2(x) + \frac{\sigma}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} z_j^4 + \sigma \sum_{j \in \mathcal{J}} c_j(x) z_j^2$$

$$= f(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \lambda_j c_j(x) + \frac{\sigma}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} c_j^2(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} g_j(x, \lambda_j, z_j)$$

$$g_j(x, \lambda_j, z_j) = \lambda_j z_j^2 + \frac{\sigma}{2} z_j^4 + \sigma c_j(x) z_j^2 \geq 0$$

$$\text{令 } \nabla_z \bar{\psi}(x, z, \lambda, \sigma) = 0 \quad \nabla_z \sum_{j \in \mathcal{J}} g_j(x, \lambda_j, z_j) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial g_j}{\partial z_j} = 2z_j[\lambda_j + \sigma(c_j(x) + z_j^2)] = 0$$

$$\Rightarrow \quad \begin{aligned} z_j^2 &= -\frac{\lambda_j}{\sigma} - c_j(x), \lambda_j + \sigma c_j(x) < 0 \\ z_j &= 0, \quad \lambda_j + \sigma c_j(x) \geq 0 \end{aligned}$$

$$\begin{array}{ll} \min f(x), & x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{J} = \{1, 2, \dots, p\} \end{array} \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{ll} \min f(x), & x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_j(x) + z_j^2 = 0, j \in \mathcal{J} \end{array}$$

分析:

增广拉格朗日函数 $\bar{\psi}(x, z, \lambda, \sigma) = f(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \lambda_j (c_j(x) + z_j^2) + \frac{\sigma}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} (c_j(x) + z_j^2)^2$

$$= f(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \lambda_j c_j(x) + \frac{\sigma}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} c_j^2(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} g_j(x, \lambda_j, z_j)$$

$$g_j(x, \lambda_j, z_j) = \lambda_j z_j^2 + \frac{\sigma}{2} z_j^4 + \sigma c_j(x) z_j^2$$

哪一个是最小解?

一阶条件 $\frac{\partial g_j}{\partial z_j^2} = 2z_j[\lambda_j + \sigma(c_j(x) + z_j^2)] = 0 \quad \begin{array}{l} z_j^2 = -\frac{\lambda_j}{\sigma} - c_j(x), \lambda_j + \sigma c_j(x) < 0 \\ z_j = 0, \lambda_j + \sigma c_j(x) \geq 0 \end{array}$

二阶条件 $\frac{\partial^2 g_j}{\partial z_j^2} = 2[3\sigma z_j^2 + (\sigma c_j(x) + \lambda_j)] = \begin{cases} -4(\sigma c_j(x) + \lambda_j) \geq 0 & \lambda_j + \sigma c_j(x) < 0 \\ 2(\sigma c_j(x) + \lambda_j) \geq 0 & \lambda_j + \sigma c_j(x) \geq 0 \end{cases}$

所以, 极小解 $z_j^2 = \begin{cases} -\frac{\lambda_j}{\sigma} - c_j(x) & \lambda_j + \sigma c_j(x) < 0 \\ 0 & \lambda_j + \sigma c_j(x) \geq 0 \end{cases}$

$$\begin{array}{ll} \min f(x), & x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{J} = \{1, 2, \dots, p\} \end{array} \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{ll} \min f(x), & x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_j(x) + z_j^2 = 0, j \in \mathcal{J} \end{array}$$

分析:

增广拉格朗日函数 $\bar{\psi}(x, z, \lambda, \sigma) = f(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \lambda_j (c_j(x) + z_j^2) + \frac{\sigma}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}} (c_j(x) + z_j^2)^2$

$$\bar{\psi}(x, z(x, \lambda, \sigma), \lambda, \sigma) = f(x) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{j \in \mathcal{J}} \left[\left(\max(0, \lambda_j + \sigma c_j(x)) \right)^2 - \lambda_j^2 \right] \triangleq \bar{\psi}(x, \lambda, \sigma)$$

$$g_j(x, \lambda_j, z_j) = \lambda_j z_j^2 + \frac{\sigma}{2} z_j^4 + \sigma c_j(x) z_j^2$$

$$c_j(x) + z_j^2 = \begin{cases} -\frac{\lambda_j}{\sigma} & \lambda_j + \sigma c_j(x) < 0 \\ c_j(x) & \lambda_j + \sigma c_j(x) \geq 0 \end{cases} = \max\left(c_j(x), -\frac{\lambda_j}{\sigma}\right)$$

所以, 极小解 $z_j^2 = \begin{cases} -\frac{\lambda_j}{\sigma} - c_j(x) & \lambda_j + \sigma c_j(x) < 0 \\ 0 & \lambda_j + \sigma c_j(x) \geq 0 \end{cases}$

$$\begin{aligned} \min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{J} = \{1, 2, \dots, p\} \end{aligned} \Rightarrow \min_x \bar{\psi}(x, \lambda, \sigma)$$

增广拉格朗日函数 $\bar{\psi}(x, \lambda, \sigma) = f(x) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{j \in \mathcal{J}} \left[\left(\max(0, \lambda_j + \sigma c_j(x)) \right)^2 - \lambda_j^2 \right]$

$$c_j(x) + z_j^2 = \begin{cases} -\frac{\lambda_j}{\sigma} & \lambda_j + \sigma c_j(x) < 0 \\ c_j(x) & \lambda_j + \sigma c_j(x) \geq 0 \end{cases} = \max\left(c_j(x), -\frac{\lambda_j}{\sigma}\right)$$

乘子迭代公式 $\lambda_j^{k+1} = \lambda_j^k + \sigma_k [c_j(x^k) + (z_j^k)^2]$ ← 由等式约束问题的乘子法

$$\lambda_j^{k+1} = \max(0, \lambda_j^k + \sigma_k c_j(x^k))$$

终止准则 $\left[\sum_{j \in \mathcal{J}} (c_j(x^k) + (z_j^k)^2) \right]^{\frac{1}{2}} = \left[\sum_{j \in \mathcal{J}} \left(\max\left(c_j(x^k), -\frac{\lambda_j^k}{\sigma_k}\right) \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \leq \varepsilon$ ← 由等式约束问题的乘子法
终止准则

②一般约束问题的乘子法

$$\begin{aligned} \min f(x), \quad x \in \mathcal{R}^n \\ \text{s.t. } c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E} \\ c_j(x) \leq 0, j \in \mathcal{J} \end{aligned} \quad \min_x \psi(x, \mu, \lambda, \sigma)$$

增广拉格朗日函数

$$\psi(x, \mu, \lambda, \sigma) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \mu_i c_i(x) + \frac{\sigma}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{j \in \mathcal{J}} \left([\max\{0, \lambda_j + \sigma c_j(x)\}]^2 - \lambda_j^2 \right)$$

Rockfellar 在PH 算法的基础上提出的，因此，简称为PHR 算法

$$\psi(x, \mu^k, \lambda^k, \sigma_k) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \mu_i^k c_i(x) + \frac{\sigma_k}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2\sigma_k} \sum_{j \in \mathcal{J}} \left([\max\{0, \lambda_j^k + \sigma_k c_j(x)\}]^2 - (\lambda_j^k)^2 \right)$$

乘子迭代的公式为 $\mu_i^{k+1} = \mu_i^k + \sigma_k c_i(x^k), i \in \mathcal{E}$

$$\lambda_j^{k+1} = \max\{0, \lambda_j^k + \sigma_k c_j(x^k)\}, j \in \mathcal{J}$$

终止准则为
$$\beta_k = \left(\sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x^k) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \left[\max\left\{c_j(x^k), -\frac{\lambda_j^k}{\sigma_k}\right\} \right]^2 \right)^{1/2}$$

$$\beta_k \leq \varepsilon$$

算法 PHR算法

步0 给定初始点 $x^0 \in \mathcal{R}^n, \mu^1 \in \mathcal{R}^m, \lambda^1 \in \mathcal{R}^p$, 终止误差 $0 \leq \varepsilon \ll 1$.

参数 $\sigma_1 > 0, \vartheta \in (0,1), \eta > 1$. 令 $k := 1$

步1 以 x^{k-1} 为初始点求解子问题

$$\psi(x, \mu^k, \lambda^k, \sigma_k) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \mu_i^k c_i(x) + \frac{\sigma_k}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{1}{2\sigma_k} \sum_{j \in \mathcal{J}} \left([\max\{0, \lambda_j^k + \sigma_k c_j(x)\}]^2 - (\lambda_j^k)^2 \right)$$

令其极小点为 x^k

步2 检验终止条件. 若 $\beta_k \leq \varepsilon$, 停算, 输出 $x^* \approx x^k$ 作为近似极小点

步3 更新乘子向量. 令 $\mu_i^{k+1} = \mu_i^k + \sigma_k c_i(x^k), i \in \mathcal{E}$;

$$\lambda_j^{k+1} = \max\{0, \lambda_j^k + \sigma_k c_j(x^k)\}, j \in \mathcal{J}$$

步4 更新罚参数. 若 $\beta_k \geq \vartheta \beta_{k-1}$, 令 $\sigma_{k+1} := \eta \sigma_k$; 否则, $\sigma_{k+1} := \sigma_k$

步5 $k := k + 1$, 转步1

③ 乘子法的程序实现

例 求解约束优化问题

$$\min f(x) = -3x_1^2 - x_2^2 - 2x_3^2$$

$$\text{s. t. } x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 3$$

$$x_2 \geq x_1$$

$$x_1 \geq 0$$

bfgs_phr.m
dmpsi.m
mpsi.m
multphr.m

MainExample_12_5_figure.m

取初始点为 $x^0 = (3, 3)^T$, 该问题有精确解

$$x^* = \left(\frac{1}{2}(\sqrt{7} - 1), \frac{1}{4}(\sqrt{7} + 1) \right)^T \approx (0.82288, 0.91144)^T$$

$$f(x^*) = \frac{1}{4}(\sqrt{7} - 5)^2 + \frac{1}{16}(\sqrt{7} - 3)^2 \approx 1.39346$$

df1.m
dg1.m
dh1.m
f1.m
g1.m
h1.m

```
x0=[3;3];
[x,mu,lambda,output]=multphr('f1','h1','g1','df1','dh1','dg1',x0)
```

bfgs_phr.m
df1.m
dg1.m
dh1.m
dmpsi.m
f1.m
g1.m
h1.m
mpsi.m
multphr.m

```
x =
    0.8229
    0.9114

mu =
   -1.5945

lambda =
    1.8465

output =

    fval: 1.3934
    iter: 23
  inner_iter: 82
      bta: 9.5419e-06
```

```
x0 =
     1
     2

x =
    0.8229
    0.9114

mu =
   -1.5945

lambda =
    1.8465

output =

    fval: 1.3934
    iter: 23
  inner_iter: 78
      bta: 9.5419e-06
```

```
x0 =
     1
     5

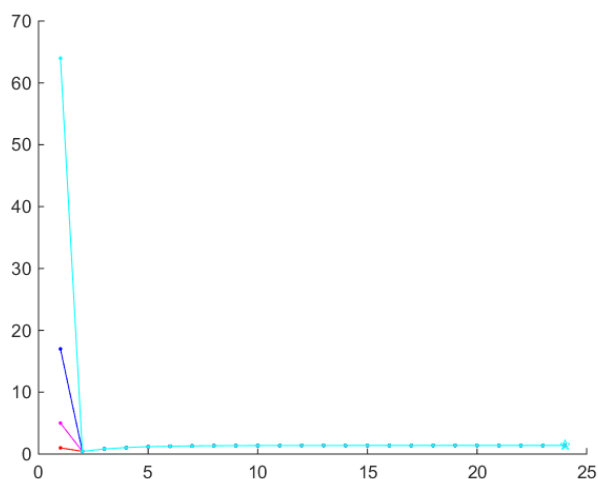
x =
    0.8229
    0.9114

mu =
   -1.5945

lambda =
    1.8465

output =

    fval: 1.3934
    iter: 23
  inner_iter: 83
      bta: 9.5419e-06
```



起始点不同，最优解一致

习题

1. 用外罚函数法求解下列约束优化问题

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

2. 用内点法求解下列约束优化问题

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

5. 考虑下列非线性约束优化问题：

$$\begin{aligned} \min x_1^3 + x_2^3 \\ \text{s.t. } x_1 + x_2 &= 1 \end{aligned}$$

a) 求问题的最优解

b) 定义罚函数 $P(x, \sigma) = x_1^3 + x_2^3 + \sigma(x_1 + x_2 - 1)^2$ ，试讨论能否通过求解无约束问题 $\min P(x, \sigma)$ 来获得原问题的最优解？说明理由

6. 利用乘子法的 Matlab 程序求解下列约束优化问题:

$$(1) \quad \min f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2$$

$$\text{s. t. } x_1 - 2x_2 + 1 = 0$$

$$-0.25x_1^2 - x_2^2 + 1 \geq 0$$

初始点取为(2,2), 极小点为 $(0.5(\sqrt{7} - 1), 0.25(\sqrt{7} + 1))$

$$(2) \quad \min f(x) = 1000 - x_1^2 - 2x_2^2 - x_3^2 - x_1x_2 - x_1x_3$$

$$\text{s. t. } 8x_1 + 14x_2 + 7x_3 - 56 = 0$$

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 25 = 0$$

$$x_1, x_2, x_3 \geq 0$$

初始点取为(2,2,2), 极小点为(3.512118, 0.216988, 3.552174)