章节 7.2 增广拉格朗日算法 Augmented Lagrangian method 致谢:感谢北京大学文再文老师提供的《最优化方法》参考讲义

464 / 503

SXC (USTC) OPENATIONS RESIDENCE 2023-09

回顾: 二次罚函数法的数值困难

对于等式约束问题:

$$\min_{x} f(x)
s.t. ci(x) = 0, i \in \mathcal{E}$$
(149)

二次罚函数法需要求解最小化罚函数的子问题:

$$\min_{x} P_{E}(x,\sigma) = f(x) + \frac{1}{2}\sigma \sum_{i \in \mathcal{E}} c_{i}^{2}(x).$$

由 $c_i(x^{k+1})\approx -\frac{\lambda_i^*}{\sigma_k}$,为了满足可行性条件,必须使 σ_k 趋于 ∞ ,这造成了子问题求解的数值困难.

我们接下来介绍的增广拉格朗日函数法可以利用有限的罚因子逼近最优解,从而避免了上述困难.

SXC (USTC) 0(247201(0)) S18(25248(0)) 2023-09 465 /503

等式约束问题的增广拉格朗日函数法

增广拉格朗日函数法的每步都需要构造增广拉格朗日函数. 根据不同的约束, 增广拉格朗日函数的形式也不同, 因此我们分别论述.

我们首先考虑等式约束问题的增广拉格朗日函数。

定义 2

对于等式约束问题(149), 定义增广拉格朗日函数为:

$$L_{\sigma}(x,\lambda) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i c_i(x) + \frac{\sigma}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x).$$

即在拉格朗日函数的基础上添加等式约束的二次罚函数.

由定义可得, 在第 k 步迭代, 给定罚因子 σ_k 和乘子 λ^k , $L_{\sigma_k}\left(x,\lambda^k\right)$ 的最小值点 x^{k+1} 应满足梯度条件

$$\nabla_{x} \mathcal{L}_{\sigma_{k}} \left(x^{k+1}, \lambda^{k} \right) = \nabla f \left(x^{k+1} \right) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \left(\lambda_{i}^{k} + \sigma_{k} c_{i} \left(x^{k+1} \right) \right) \nabla c_{i} \left(x^{k+1} \right) = 0.$$
 (150)

SXC (USTC) 0(2472) (0(0) 5 (1) 2472) (0(0) 5 (1)

等式约束问题的增广拉格朗日函数法

我们将(150)式对比优化问题(149)满足的 KKT 条件 $(对最优解(x^*, \lambda^*)$ 的梯度条件)

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(\mathbf{x}^*) = 0, \tag{151}$$

为保证(150)和(151)式在最优解处的一致性,对充分大的 k,应满足:

$$\lambda_i^* \approx \lambda_i^k + \sigma_k c_i \left(x^{k+1} \right), \quad \forall i \in \mathcal{E},$$
 (152)

即等价于

$$c_i\left(x^{k+1}\right) \approx \frac{1}{\sigma_k}\left(\lambda_i^* - \lambda_i^k\right).$$

SXC (USTC) 2023-09 467 / 503 由此得出我们希望设计的增广拉格朗日算法具有如下的特性.

性质:

- 增广拉格朗日函数法通过合理更新乘子,即通过控制 λ^{*}_i λ^k_i 降低约束违反度. 因为根据约束违反度满足的公式,当 λ_i^k 足够接近 λ_i^* 时, $c_i(x^{k+1})$ 将远小于 $1/\sigma_k$. 如 此,避免了 σ_k 趋向无穷大,从而避免了数值困难。
- (152)启发我们这样更新 λ^k:

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k + \sigma_k c_i \left(x^{k+1} \right), \quad \forall i \in \mathcal{E},$$

根据如上讨论, 并对 c(x), $\nabla c(x)$ 沿用罚函数法的定义, 我们将在下文写出等式约束问题 增广拉格朗日函数法的具体算法.

在这之前我们先看一个数值例子,与二次罚函数对比,说明增广拉格朗日函数的优势。

SXC (USTC) 2023-09 468 / 503

使用增广拉格朗日函数法的实例

我们考虑优化问题

min
$$x + \sqrt{3}y$$
,
s.t. $x^2 + y^2 = 1$.

容易求得最优解为 $x^* = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^{\mathrm{T}}$, 相应的拉格朗日乘子 $\lambda^* = 1$.

根据增广拉格朗日函数的形式,写出本问题的增广拉格朗日函数:

$$L_{\sigma}(x, y, \lambda) = x + \sqrt{3}y + \lambda (x^2 + y^2 - 1) + \frac{\sigma}{2} (x^2 + y^2 - 1)^2,$$

并在下图中绘制 $L_2(x, y, 0.9)$ 的等高线.

SXC (USTC) OPERATIONS RESEARCH 2023-09 469/503

二次罚函数法与增广拉格朗日函数法求解的等高线

图中标 "*" 的点为原问题的最优解 x* 标 "o" 的点为罚函数或增广拉格朗日函数的最优解

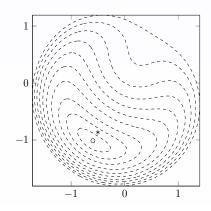


Figure: (a) 二次罚函数等高线

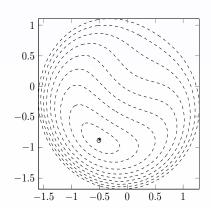


Figure: (b) 增广拉格朗日函数等高线

SXC (USTC) 0 (1937AT10145 (1939ARG)) 2023-09 470 / 503

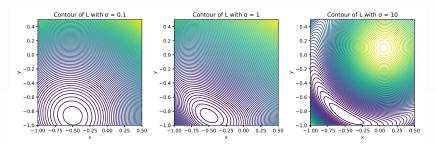


Figure: 增广拉格朗日函数 $L_{\sigma}(x,y,0.95)$ 等高线。紫色表示小的函数值,绿色表示大的函数值。三种情况的局部最优: $\sigma=0.1:[-0.54924849-0.95132628]$; Critical point for $\sigma=1:[-0.52528898-0.9098272]$; Critical point for $\sigma=10:[-0.50453049-0.87387245]$.

 SXC (USTC)
 9725741018 H2524031
 2023-09
 471/503

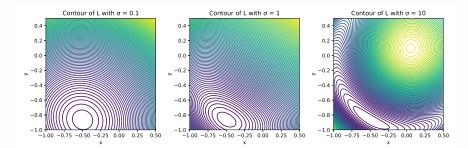


Figure: 增广拉格朗日函数 $L_{\sigma}(x,y,1)$ 等高线。紫色表示小的函数值,绿色表示大的函数值。此时, $x=-1/2,y=-\sqrt{3}/2$ 是局部最小值点。

 ✓ □ ▷ ✓ ⓓ ▷ ✓ ඕ ▷ ✓ ඕ ▷ ☑
 ♦ ♀ ♀ ♀ ♀ ♀

 SXC (USTC)
 ØPERATIONS/RESSANDE
 2023-09
 472/503

比较与结论

我们比较二次罚函数和增广拉格朗日函数在最优解探寻方面的有效性.

- 二次罚函数法求出的最优解为 (-0.5957, -1.0319), 与最优解的欧氏距离约 0.1915, 约束违反度为 0.4197.
- • 增广拉格朗日罚函数法求出的最优解为 (-0.5100, -0.8833), 与最优解的欧氏距离约 0.02, 约束违反度为 0.0403.
- 对偶乘子 λ 更接近 KKT 对处的 λ^* 时,增广拉格朗日函数的局部极小则更接近原问题的局部极小。

由此可见,成立如下的经验性结论,

结论:增广拉格朗日函数法可具有比二次罚函数法更精确的寻优能力,且约束违反度一般更低。

SXC (USTC) 09237/1005 H3538/01 2023-09 473/503

等式约束问题的增广拉格朗日函数法

算法 等式约束的增广拉格朗日函数法 (ALM: Augmented Lagrangian Method)

Require: 初始坐标 $x^0 \in \mathbb{R}^n$, 乘子 λ^0 , 罚因子 $\sigma_0 > 0$, 约束违反度常数 $\varepsilon > 0$, 精度 $\eta > 0$, 迭代步 k = 0.

Ensure: x^{k+1}, λ^k .

- 1: 检查初始元素.
- 2: **for** $k = 0, 1, 2, \cdots$ do **do**
- 3: 以 x^k 为初始点,求解 $\min_x L_{\sigma_k}(x,\lambda^k)$,得到满足需求的精度条件 $\|\nabla_x L_{\sigma_k}(x,\lambda^k)\| \le \eta_k$ 的解 x^{k+1} .
- 4: if $||c(x^{k+1})|| \le \varepsilon \coprod \eta_k \le \eta$ then
- 5: 返回近似解 (x^{k+1}, λ_k) , 终止迭代.
- 6: end if
- 7: 更新对偶乘子: $\lambda^{k+1} = \lambda^k + \sigma_k c(x^{k+1})$.
- 8: 更新罚因子: $\sigma_{k+1} = \rho \sigma_k$. 减小子问题精度 η_k .
- 9: end for

SXC (USTC) 5HSRATIONS HSRARGH 2023-09 474/503

算法说明

- 算法中第 3 行意思为, 我们可以求解关于 x 的子问题一个非精确解。
- 算法第 4 行为终止条件。若找到一个可行点且为子问题的解,则终止迭代。
- σ_k 不应增长过快:
 - (1) 随着罚因子 σ_k 的增大, 可见 $L_{\sigma_k}(x,\lambda^k)$ 关于 x 的海瑟矩阵的条件数也将增大, 这将导致数值困难:
 - $(2)\sigma_k$ 与 σ_{k+1} 接近时, x^k 可以作为求解 x^{k+1} 的初始点, 以加快收敛.
- σk 不应增长过慢: 算法整体的收敛速度将变慢 (惩罚不足).

因此在实际中,我们应该控制 σ_k 的增长维持在一个合理的速度区间内. 一个简单的方法 是维持 $\rho \in [2,10]$, 不过近年来也有学者设计了更合理的自适应方法.

SXC (USTC) 0(2450)(1016510(2450)(0)1 2023-09 475 /503

收敛性结论

我们阐述由增广拉格朗日函数法导出的极小值点和原问题的极小值点有什么关系. 实际上,增广拉格朗日函数在一定条件下将成为精确罚函数.

定理8

严格局部极小解定理

设 x^* , λ^* 分别为问题 (149)的局部极小解和相应的乘子, 且点 x^* 处满足 LICQ, 若 x^* 处的二阶充分条件成立. 则: 存在有限的常数 σ , 对任意的 $\sigma \geqslant \bar{\sigma}$, x^* 都是 $L_{\sigma}(x,\lambda^*)$ 的严格局部极小解.

反之,若 x^* 为 $L_\sigma(x,\lambda^*)$ 的局部极小解且满足 $c_i(x^*)=0, i\in\mathcal{E}$,则 x^* 为问题 (149)的局部极小解.

SXC (USTC) 02984110184124801 2023-09 476/503

因为 x* 为问题 (1) 的局部极小解且二阶充分条件成立, 所以

$$\nabla_{\mathbf{x}} L\left(\mathbf{x}^{*}, \lambda^{*}\right) = \nabla f(\mathbf{x}^{*}) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_{i}^{*} \nabla c_{i}\left(\mathbf{x}^{*}\right) = 0,$$
(153)

 $\mathbf{u}^{\mathrm{T}} \nabla_{\mathbf{x}}^{2} \mathbf{L}(\mathbf{x}^{*}, \lambda^{*}) \mathbf{u} > 0, \forall \mathbf{u} \in \{\mathbf{u} \mid \nabla \mathbf{c}(\mathbf{x}^{*})^{\mathrm{T}} \mathbf{u} = 0\}.$

对比 $L_{\sigma}(x^*, \lambda^*)$ 和 $L(x^*, \lambda^*)$ 的表达式, 由 $c_i(x^*) = 0, i \in \mathcal{E}$, 得

$$\nabla_{x}L_{\sigma}\left(x^{*},\lambda^{*}\right) = \nabla_{x}L\left(x^{*},\lambda^{*}\right) = 0,$$

$$\nabla_{xx}^{2}L_{\sigma}\left(x^{*},\lambda^{*}\right) = \nabla_{xx}^{2}L\left(x^{*},\lambda^{*}\right) + \sigma\nabla_{\sigma}\left(x^{*}\right)\nabla_{\sigma}\left(x^{*}\right)^{T}.$$
(154)

为了证明 x^* 是 $L_{\sigma}(x^*, \lambda^*)$ 的严格局部极小解, 只需证对于充分大的 σ 成立

$$\nabla_{xx}^2 L_{\sigma}\left(x^*, \lambda^*\right) \succ 0.$$

SXC (USTC) 2023-09 477 / 503



定理证明

假设该结论不成立,则对任意 k 以及 $\sigma_k > 0$,存在 u_k 满足 $||u_k|| = 1$,且满足:

$$u_{k}^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^{2} L_{\sigma_{k}}\left(x^{*}, \lambda^{*}\right) u_{k} = u_{k}^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^{2} L\left(x^{*}, \lambda^{*}\right) u_{k} + \sigma_{k} \left\|\nabla c\left(x^{*}\right)^{\mathrm{T}} u_{k}\right\|^{2} \leqslant 0,$$

则

$$\left\|\nabla c\left(\mathbf{x}^{*}\right)^{\mathrm{T}} u_{k}\right\|^{2} \leqslant -\frac{1}{\sigma_{k}} u_{k}^{\mathrm{T}} \nabla_{\mathbf{x}\mathbf{x}}^{2} L\left(\mathbf{x}^{*}, \lambda^{*}\right) u_{k} \to 0, \quad \sigma_{k} \to \infty.$$

因为 $\{u_k\}$ 为有界序列, 必存在聚点, 设为 u. 那么

$$\nabla c(\mathbf{x}^*)^{\mathrm{T}} \mathbf{u} = 0, \quad \mathbf{u}^{\mathrm{T}} \nabla_{\mathbf{x}\mathbf{x}}^2 L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) \mathbf{u} \leqslant 0.$$

这与(153)式矛盾, 故结论成立.

反之,若 x^* 满足 $c_i(x^*)=0$ 且为 $L_\sigma(x,\lambda^*)$ 的局部极小解,那么对于任意与 x^* 充分接近的可行点 x. 我们有

$$f(x^*) = L_{\sigma}(x^*, \lambda^*) \leqslant L_{\sigma}(x, \lambda^*) = f(x),$$

因此, x* 为原问题(149)的一个局部极小解, 证毕.

 SXC (USTC)
 00/25/241(018) (425/2476)1
 2023-09
 478 /503

收敛性分析

关于算法的收敛性结果,我们这里只给出基于较强假设下的结论,并不讨论一般的收敛 结果。

对于增广拉格朗日方法,通过进一步假设乘子点列的有界性和收敛点处的约束正则条件,算法迭代生成的序列 {x^k} 会有子列收敛至问题(149)的一阶稳定点.

定理 9

增广拉格朗日函数法的收敛性

假设乘子列 $\{\lambda^k\}$ 是有界的, 罚因子 $\sigma_k \to +\infty$, $k \to \infty$, 上述增广拉格朗日方法中精度 $\eta_k \to 0$, 迭代点列 $\{x^k\}$ 的一个子序列 $\{x^{k_j+1}\}$ 收敛到 x^* , 并且在点 x^* 处 LICQ 成立. 那么存在 λ^* , 满足:

$$\lambda^{k_j+1} \to \lambda^*, \quad j \to \infty,$$

$$\nabla f(x^*) + \nabla c(x^*) \lambda^* = 0, \quad c(x^*) = 0.$$

该定理中的关于乘子列 $\left\{\lambda^k\right\}$ 是有界假设比较强,需要对具体问题具体证明。我们不过多赘述。

 4 □ ▷ 4 ⓓ ▷ 4 ඕ ▷ 4 ඕ ▷ ඕ ♥ 9 0 ℃

 SXC (USTC)
 2023-09
 479/503

收敛性分析

上述收敛性定理的条件还可以进一步放宽, 但证明将会更复杂, 我们就不多述了.

定理 10

增广拉格朗日函数法的收敛性 (基于更弱的假设)

假设 x^* , λ^* 是问题 (149) 的满足严格局部二阶最优条件的 KKT 对,且 LICQ 成立。给定 $\{\sigma_k\}$ 是递增序列,那么,存在充分大的常数 $\sigma>0$ 和充分小的常数 $\delta>0$,如果初始点满足

$$\frac{1}{\sigma_0} \|\lambda^0 - \lambda^*\| < \delta, \quad \sigma_0 \geqslant \bar{\sigma},$$

则

$$\lambda^k \to \lambda^*, \quad x^k \to x^*.$$

同时,如果

- (1) $\limsup \sigma_k < +\infty$ 且 $\lambda^k \neq \lambda^*, \forall k,$ 则 $\{\lambda^k\}$ 收敛的速度是 Q-线性;
- (2) $\limsup \sigma_k = +\infty$ 且 $\lambda^k \neq \lambda^*, \forall k,$ 则 $\{\lambda^k\}$ 收敛的速度是 Q-超线性.

 SXC (USTC)
 0FEST/NOIS NESEARCH
 2023-09
 480 / 503

一般约束问题的增广拉格朗日函数法

一般的约束优化问题可以写成

$$\begin{aligned} & \min \quad f(x), \\ & \text{s.t.} \quad c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}, \\ & c_i(x) \leqslant 0, i \in \mathcal{I}. \end{aligned} \tag{155}$$

对于问题(155), 我们一般引入松弛变量 $s \in \mathbb{R}^{|\mathcal{I}|}$, 得到如下等价形式:

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

$$c_i(x) + s_i = 0, i \in \mathcal{I},$$

$$s_i \ge 0, i \in \mathcal{I}.$$

$$(156)$$

这样的做法我们已经用过多次了, 应熟练掌握.

SXC (USTC) 0P36/A1101/5 R656/ARGH 2023-09 481/503

构造增广拉格朗日函数

保留关于 s 的非负约束, 可以构造拉格朗日函数

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{s}, \lambda, \mu) = \mathit{f}(\mathbf{x}) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i \mathit{c}_i(\mathbf{x}) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \mu_i \left(\mathit{c}_i(\mathbf{x}) + \mathit{s}_i \right), \mathit{s}_i \geqslant 0, i \in \mathcal{I}.$$

记问题(156)中等式约束的二次罚函数为 p(x, s), 即

$$p(x,s) = \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(c_i(x) + s_i \right)^2,$$

那么可以同样构造增广拉格朗日函数如下:

$$L_{\sigma}(x, s, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_{i} c_{i}(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \mu_{i} (c_{i}(x) + s_{i}) + \frac{\sigma}{2} p(x, s),$$

$$s_{i} \geqslant 0, i \in \mathcal{I}.$$

下面我们将看到,添加这种非负约束变量,子问题同样可以求解。

SXC (USTC) 0/92/3/10/0/5/3/2/3/603 2023-09 482 /503

消元法求解子问题

在第 k 步迭代中, 给定乘子 λ^k, μ^k 和罚因子 σ_k , 需要求解如下问题:

$$\min_{\mathbf{x},\mathbf{s}} \quad L_{\sigma_k}\left(\mathbf{x},\mathbf{s},\lambda^k,\mu^k\right), \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{s} \geqslant 0, \tag{157}$$

可以得到 x^{k+1} , s^{k+1} .

我们现在介绍一种基于消元的方法, 即考虑消去 s, 求解只关于 x 的优化问题.

• 首先固定 x, 关于 s 的子问题化为

$$\min_{s\geqslant 0} \quad \sum_{i\in\mathcal{I}} \mu_i \left(c_i(x)+s_i\right) + \frac{\sigma_k}{2} \sum_{i\in\mathcal{I}} \left(c_i(x)+s_i\right)^2.$$

容易直接解得使子问题最优且满足非负约束的 s; 为

$$s_{i} = \max \left\{ -\frac{\mu_{i}}{\sigma_{k}} - c_{i}(x), 0 \right\}, \quad i \in \mathcal{I}.$$
 (158)

SXC (USTC) 002404TIONS RESEARCH 2023-09 483 / 503

消元法求解子问题

• 将 si 的表达式代入 Lau 我们有

$$L_{\sigma_k}\left(x, \lambda^k, \mu^k\right) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i c_i(x) + \frac{\sigma_k}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{\sigma_k}{2} \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(\max\left\{\frac{\mu_i}{\sigma_k} + c_i(x), 0\right\}^2 - \frac{\mu_i^2}{\sigma_k^2} \right).$$

其为关于 x 的连续可微函数 (假设 $f(x), c_i(x), i \in \mathcal{I} \cup \mathcal{E}$ 连续可微). 因此,问题(157)等价于

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad L_{\sigma_k}\left(x, \lambda^k, \mu^k\right).$$

并可以利用梯度法进行求解.

注意: 这里, 我们消去了变量 s, 因此可以只考虑关于 x 的优化问题.

SXC (USTC) 0/928/3/10/0/S/8/3/20/601 2023-09 484 /503

对于问题(156), 其最优解 x^*, s^* 和乘子 λ^*, μ^* 需满足 KKT 条件:

$$\begin{array}{l} 0 = \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \mu_i^* \nabla c_i(\mathbf{x}^*) \,, \\ \mu_i^* \geqslant 0, \ s_i^* \geqslant 0, i \in \mathcal{I} \end{array}$$

问题(157)的最优解 x^{k+1}, s^{k+1} 满足

$$\begin{split} 0 &= \nabla f \left(\boldsymbol{x}^{k+1} \right) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \left(\lambda_i^k + \sigma_k c_i \left(\boldsymbol{x}^{k+1} \right) \right) \nabla c_i \left(\boldsymbol{x}^{k+1} \right) + \\ &\sum_{i \in \mathcal{I}} \left(\mu_i^k + \sigma_k \left(c_i \left(\boldsymbol{x}^{k+1} \right) + \boldsymbol{s}_i^{k+1} \right) \right) \nabla c_i \left(\boldsymbol{x}^{k+1} \right), \\ \boldsymbol{s}_i^{k+1} &= \max \left\{ -\frac{\mu_i^k}{\sigma_k} - c_i \left(\boldsymbol{x}^{k+1} \right), 0 \right\}, \quad i \in \mathcal{I}. \end{split}$$

对比问题(156)和问题(157)的 KKT 条件, 易知乘子的更新格式为

$$\lambda_{i}^{k+1} = \lambda_{i}^{k} + \sigma_{k} c_{i} \left(x^{k+1} \right), \quad i \in \mathcal{E}, \mu_{i}^{k+1} = \max \left\{ \mu_{i}^{k} + \sigma_{k} c_{i} \left(x^{k+1} \right), 0 \right\}, \quad i \in \mathcal{I}.$$
(159)

约束讳反度与参数更新

对于等式约束, 我们定义约束违反度为

$$v_{k}\left(\boldsymbol{x}^{k+1}\right) = \sqrt{\sum_{i \in \mathcal{E}} c_{i}^{2}\left(\boldsymbol{x}^{k+1}\right) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(c_{i}\left(\boldsymbol{x}^{k+1}\right) + \boldsymbol{s}_{i}^{k+1}\right)^{2}}.$$

根据 (158) 式消去 s, 得

$$v_{k}\left(x^{k+1}\right) = \sqrt{\sum_{i \in \mathcal{E}} c_{i}^{2}\left(x^{k+1}\right) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \max\left\{c_{i}\left(x^{k+1}\right), -\frac{\mu_{i}^{k}}{\sigma_{k}}\right\}^{2}}.$$

在算法中, 需要根据约束违反度的大小判断参数的更新方式:

- 若 $v_k(x^{k+1})$ 满足精度条件,则进行乘子的更新,并提高子问题求解精度,罚因子不
- 若不满足,则不讲行乘子的更新,并适当增大罚因子以便得到约束违反度更小的解。

SXC (USTC)

一般约束增广拉格朗日函数法算法

算法 2 一般约束增广拉格朗日函数法

- 选取初始点 x^0 , 乘子 λ^0 , μ^0 , 罚因子 $\sigma_0 > 0$, 约束违反度常数 $\varepsilon > 0$, 精度常数 $\eta > 0$, 以及常数 $0 < \alpha \leqslant \beta \leqslant 1$ 和 $\rho > 1$. 令 $\eta_0 = \frac{1}{\sigma_0}, \varepsilon_0 = \frac{1}{\sigma_0^{\alpha}}$ 以及 k = 0.
- for k = 0, 1, 2, ... do
- 以 x^k 为初始点, 求解

$$\min_{x} \quad L_{\sigma_k}\left(x, \lambda^k, \mu^k\right),$$

得到满足精度条件

$$\left\| \nabla L_{\sigma_k} \left(x^{k+1}, \lambda^k, \mu^k \right) \right\|_2 \leqslant \eta_k$$

的解 x^{k+1} .

- if $v_k(x^{k+1}) \leqslant \varepsilon_k$ then
- if $v_k(x^{k+1}) \leq \varepsilon \parallel \|\nabla_x L_{\sigma_k}(x^{k+1}, \lambda^k, \mu^k)\|_2 \leq \eta$ then
- 得到逼近解 $x^{k+1}, \lambda^k, \mu^k$, 终止迭代.
- end if

SXC (USTC)

一般约束增广拉格朗日函数法算法 (续)

更新乘子:

$$\begin{split} \lambda_{i}^{k+1} &= \lambda_{i}^{k} + \sigma_{k} c_{i}\left(\boldsymbol{x}^{k+1}\right), \quad i \in \mathcal{E}, \\ \mu_{i}^{k+1} &= \max\left\{\mu_{i}^{k} + \sigma_{k} c_{i}\left(\boldsymbol{x}^{k+1}\right), \boldsymbol{0}\right\}, \quad i \in \mathcal{I}. \end{split}$$

- 罚因子不变: $\sigma_{k+1} = \sigma_k$.
- 减小子问题求解误差和约束违反度:

$$\eta_{k+1} = \frac{\eta_k}{\sigma_{k+1}}, \quad \varepsilon_{k+1} = \frac{\varepsilon_k}{\sigma_{k+1}^{\beta}}.$$

- else (注: 约束违反度不满足精度条件)
- 乘子不变: $\lambda^{k+1} = \lambda^k$.
- 更新罚因子: $\sigma_{k+1} = \rho \sigma_k$.
- 调整子问题求解误差和约束违反度:

$$\eta_{k+1} = \frac{1}{\sigma_{k+1}}, \quad \varepsilon_{k+1} = \frac{1}{\sigma_{k+1}^{\alpha}}.$$

- end if
- end for

应用:基追踪问题(BP)

考虑一类简单的基追踪问题. 设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n} (m \leqslant n), b \in \mathbb{R}^m, x \in \mathbb{R}^n,$ 基追踪问题被描述 为

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \quad \|\mathbf{x}\|_1, \quad \text{ s.t. } \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b}. \tag{160}$$

考虑其对偶问题:

$$\min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m} \quad \mathbf{b}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}, \quad \text{s.t.} \quad \left\| \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{y} \right\|_{\infty} \leqslant 1.$$
 (161)

通过引入变量 5. 对偶问题可以等价地写成

$$\min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m, \ \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n} \mathbf{b}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}, \quad \text{ s.t. } \quad \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{y} - \mathbf{s} = 0, \ \|\mathbf{s}\|_{\infty} \leqslant 1.$$
 (162)

基追踪问题的具体介绍请见《Lecture note 17: 增广拉格朗日函数法》。

SXC (USTC) 2023-09 489 / 503

原始问题的增广拉格朗日函数法

根据问题(160)的形式, 引入罚因子 σ 和乘子 λ , 其增广拉格朗日函数为

$$L_{\sigma}(x,\lambda) = \|x\|_{1} + \lambda^{\mathrm{T}}(Ax - b) + \frac{\sigma}{2}\|Ax - b\|_{2}^{2}.$$
 (163)

固定 σ . 第 k 步迭代更新格式为

$$\begin{cases} x^{k+1} = \operatorname*{arg\,min}_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ \|x\|_1 + \frac{\sigma}{2} \left\| Ax - b + \frac{\lambda^k}{\sigma} \right\|_2^2 \right\}, \\ \lambda^{k+1} = \lambda^k + \sigma \left(Ax^{k+1} - b \right). \end{cases}$$
(164)

这里,关于 x 的子问题是一个类似 LASSO 的问题,我们将会在后面的课程介绍。

定理 11

简单基追踪问题的收敛性定理

假设问题 (160)的可行域非空, 迭代序列 $\{x^k\}$, $\{\lambda^k\}$ 是由迭代格式 (164) 从初始点 $x^0 = \lambda^0 = 0$ 产生的, 则存在正整数 K 使得任意的 x^k , $k \ge K$ 是问题(160)的解.

对偶问题的增广拉格朗日函数法

现在我们考虑另一重要的问题. 设对偶问题(162):

$$\min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m, \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n} \quad \mathbf{b}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}, \quad \text{ s.t. } \quad \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{y} - \mathbf{s} = 0, \quad \|\mathbf{s}\|_{\infty} \leqslant 1.$$

引入拉格朗日乘子 λ 和罚因子 σ . 作增广拉格朗日函数

$$L_{\sigma}(y,s,\lambda) = b^{\mathrm{T}}y + \lambda^{\mathrm{T}}\left(A^{\mathrm{T}}y - s\right) + \frac{\sigma}{2}\left\|A^{\mathrm{T}}y - s\right\|_{2}^{2}, \quad \|s\|_{\infty} \leqslant 1.$$

增广拉格朗日函数法的迭代格式为 ($\rho > 1$ 和 $\bar{\sigma} < +\infty$ 为算法参数):

$$\begin{cases} \left(y^{k+1}, s^{k+1}\right) = \underset{y, \|s\|_{\infty} \leq 1}{\arg\min} \left\{ b^{\mathrm{T}} y + \frac{\sigma_{k}}{2} \left\| A^{\mathrm{T}} y - s + \frac{\lambda}{\sigma_{k}} \right\|_{2}^{2} \right\}, \\ \lambda^{k+1} = \lambda^{k} + \sigma_{k} \left(A^{\mathrm{T}} y^{k+1} - s^{k+1} \right), \\ \sigma_{k+1} = \min \left\{ \rho \sigma_{k}, \bar{\sigma} \right\}. \end{cases}$$

其中 (y^{k+1}, s^{k+1}) 的显式表达式未知, 需要迭代求解.

SXC (USTC)

消元法求解子问题

除了利用投影梯度法求解关于 (y, s) 的联合最小化问题外, 还可以利用最优性条件将 s 用 y 来表示, 转而求解只关于 y 的最小化问题.

关干 s 的极小化问题为

$$\min_{s} \quad \frac{\sigma}{2} \left\| A^{\mathrm{T}} y - s + \frac{\lambda}{\sigma} \right\|_{2}^{2}, \qquad \text{s.t.} \quad \left\| s \right\|_{\infty} \leqslant 1.$$

这是一个关于 s 的二次型函数, 因此问题的解为

$$s = \mathcal{P}_{\|s\|_{\infty} \leqslant 1}(A^{\mathrm{T}}y + \frac{\lambda}{\sigma}),$$

其中 $\mathcal{P}_{\|s\|_{\infty} \leq 1}(z)$ 为集合 $\{s \mid \|s\|_{\infty} \leq 1\}$ 的**投影算子**, 即

$$\mathcal{P}_{\left\| \boldsymbol{s}\right\|_{\infty}\leqslant1}(\boldsymbol{z})=\max\left\{ \min\left\{ \boldsymbol{z},\ 1\right\} ,\ -1\right\} .$$

SXC (USTC) 2023-09 492 / 503

消元法求解子问题

将上述 s 的表达式代入的增广拉格朗日函数法的迭代格式, 得

$$\begin{cases}
y^{k+1} = \arg\min_{y} \left\{ b^{T} y + \frac{\sigma}{2} \left\| \psi \left(A^{T} y + \frac{\lambda}{\sigma} \right) \right\|_{2}^{2} \right\}, \\
\lambda^{k+1} = \sigma_{k} \psi \left(A^{T} y^{k+1} + \frac{\lambda^{k}}{\sigma_{k}} \right), \\
\sigma_{k+1} = \min \left\{ \rho \sigma_{k}, \bar{\sigma} \right\}.
\end{cases} (165)$$

其中 $\psi(x) = \text{sign}(x) \max\{|x| - 1, 0\}.$

性质:

- 我们不能得到关于 y^{k+1} 的显式表达式. 但是由于 $L_{\sigma_k}(y,\lambda^k)$ 关于 y 连续可微, 故 可以利用梯度法求解.
- 注意 y 的维度是 m,原问题 x 的变量维度是 n. 若 m < n,则求解对偶问题更有优 势。

SXC (USTC) 2023-09