最佳化方法與應用二
MA5038-*

Chapter 17. Penalty and Augmented Lagrangian Methods

Introduction

一種重要的受限優化方法是將原問題替換為一系列子問題，其中每條限制式都被轉換成加入目標函數中的一項。在本章中，我們描述了三個這種類型的方法。

1. 二次懲罰 (quadratic penalty) 法將每個限制違反度量的平方的某倍數添加到目標函數中。由於其簡單性和直觀吸引力，儘管有一些重要的缺點二次懲罰法在實踐中經常被使用。
2. 在非光滑的 exact 懲罰 (non-smooth exact penalty) 法中，單一個無受限問題（而不是一系列問題）取代了原始的受限優化問題。通過使用這些懲罰函數，我們通常可以通過執行一個無受限優化演算法來找到解，但非光滑性可能會帶來複雜性。這種類型中一個廣為使用的函數是 ℓ_1 懲罰函數。

Introduction

一種重要的受限優化方法是將原問題替換為一系列子問題，其中每條限制式都被轉換成加入目標函數中的一項。在本章中，我們描述了三個這種類型的方法。

1. 二次懲罰 (quadratic penalty) 法將每個限制違反度量的平方的某倍數添加到目標函數中。由於其簡單性和直觀吸引力，儘管有一些重要的缺點二次懲罰法在實踐中經常被使用。
2. 在非光滑的 exact 懲罰 (non-smooth exact penalty) 法中，單一個無受限問題（而不是一系列問題）取代了原始的受限優化問題。通過使用這些懲罰函數，我們通常可以通過執行一個無受限優化演算法來找到解，但非光滑性可能會帶來複雜性。這種類型中一個廣為使用的函數是 ℓ_1 懲罰函數。

Introduction

一種重要的受限優化方法是將原問題替換為一系列子問題，其中每條限制式都被轉換成加入目標函數中的一項。在本章中，我們描述了三個這種類型的方法。

1. 二次懲罰 (quadratic penalty) 法將每個限制違反度量的平方的某倍數添加到目標函數中。由於其簡單性和直觀吸引力，儘管有一些重要的缺點二次懲罰法在實踐中經常被使用。
2. 在非光滑的 exact 懲罰 (non-smooth exact penalty) 法中，單一個無受限問題（而不是一系列問題）取代了原始的受限優化問題。通過使用這些懲罰函數，我們通常可以通過執行一個無受限優化演算法來找到解，但非光滑性可能會帶來複雜性。這種類型中一個廣為使用的函數是 ℓ_1 懲罰函數。

Introduction

3. 另一種不同類型的 exact 懲罰方法是乘子法 (method of multipliers) 或增廣 Lagrangian 方法 (augmented Lagrangian method)，在這種方法中，使用明確的 Lagrange 乘子估計值來避免二次懲罰函數固有的 ill-conditioning 情況。

此外還有對數障礙 (log-barrier) 法，在其中對數項用以防止可行的迭代過於接近可行區域的邊界。這種方法是內點法用於非線性規劃的基礎之一，我們將在第 19 章中進一步討論它。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

- **Motivation**

讓我們考慮通過一個單一函數來替換一個受限優化問題，該函數由以下幾個要件所組成：

- 原受限優化問題的原始目標函數，加上
- 每個限制式所對應到的額外的一項，在當前點 x 違反該限制時為正，否則為零。

大多數方法定義了一系列此類的懲罰函數 (penalty function)，在這些函數中，限制違反的懲罰項被一個正係數相乘。加大這個係數可以更嚴厲地「懲罰」限制式的違反程度，從而將懲罰函數的 minimizer 強制拉近到受限問題的可行區域。

這種類型中最簡單的懲罰函數是二次懲罰函數 (quadratic penalty function)，其中懲罰項是限制違反度量的平方。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

- **Motivation**

讓我們考慮通過一個單一函數來替換一個受限優化問題，該函數由以下幾個要件所組成：

- 原受限優化問題的原始目標函數，加上
- 每個限制式所對應到的額外的一項，在當前點 x 違反該限制時為正，否則為零。

大多數方法定義了一系列此類的懲罰函數 (penalty function)，在這些函數中，限制違反的懲罰項被一個正係數相乘。加大這個係數可以更嚴厲地「懲罰」限制式的違反程度，從而將懲罰函數的 minimizer 強制拉近到受限問題的可行區域。

這種類型中最簡單的懲罰函數是二次懲罰函數 (quadratic penalty function)，其中懲罰項是限制違反度量的平方。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

我們首先在只有等式限制的問題

$$\min_x f(x) \quad \text{subject to} \quad c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}, \tag{1}$$

中描述這種方法。這個問題的二次懲罰函數 $Q(x;\mu)$ 被定義為

$$Q(x;\mu) \equiv f(x) + \frac{\mu}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x), \tag{2}$$

其中 $\mu > 0$ 被稱為懲罰參數 (penalty parameter)，而違反限制的程度可通過將 μ 趨於無窮大進行愈來愈重的懲罰。直觀上，可以考慮一個隨著 k 趨向無窮大的數列 $\{\mu_k\}$ 並尋找每個 $Q(x;\mu_k)$ 的近似 minimizer x_k。由於 (2) 中的懲罰項是光滑的，我們可以使用無受限優化技術來找 x_k。在尋找 x_k 時，我們可以使用較小的 μ 所對應的 $Q(\cdot;\mu)$ 的 minimizer x_{k-1}、x_{k-2} 等來構建初始猜測。對於合適的 $\{\mu_k\}$ 數列和初始猜測的選擇，對於每個 μ_k，可能只需要進行幾步無受限最佳化就能找到近似 minimizer x_k。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

我們首先在只有等式限制的問題

$$\min_x f(x) \quad \text{subject to} \quad c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}, \tag{1}$$

中描述這種方法。這個問題的二次懲罰函數 $Q(x;\mu)$ 被定義為

$$Q(x;\mu) \equiv f(x) + \frac{\mu}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x), \tag{2}$$

其中 $\mu > 0$ 被稱為懲罰參數 (penalty parameter)，而違反限制的程度可通過將 μ 趨於無窮大進行愈來愈重的懲罰。直觀上，可以考慮一個隨著 k 趨向無窮大的數列 $\{\mu_k\}$ 並尋找每個 $Q(x;\mu_k)$ 的近似 minimizer x_k。由於 (2) 中的懲罰項是光滑的，我們可以使用無受限優化技術來找 x_k。在尋找 x_k 時，我們可以使用較小的 μ 所對應的 $Q(\cdot;\mu)$ 的 minimizer x_{k-1}、x_{k-2} 等來構建初始猜測。對於合適的 $\{\mu_k\}$ 數列和初始猜測的選擇，對於每個 μ_k，可能只需要進行幾步無受限最佳化就能找到近似 minimizer x_k。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

我們首先在只有等式限制的問題

$$\min_x f(x) \quad \text{subject to} \quad c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}, \tag{1}$$

中描述這種方法。這個問題的二次懲罰函數 $Q(x;\mu)$ 被定義為

$$Q(x;\mu) \equiv f(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x), \tag{2}$$

其中 $\mu > 0$ 被稱為懲罰參數 (penalty parameter)，而違反限制的程度可通過將 μ 趨於無窮大進行愈來愈重的懲罰。直觀上，可以考慮一個隨著 k 趨向無窮大的數列 $\{\mu_k\}$ 並尋找每個 $Q(x;\mu_k)$ 的近似 minimizer x_k。由於 (2) 中的懲罰項是光滑的，我們可以使用無受限優化技術來找 x_k。在尋找 x_k 時，我們可以使用較小的 μ 所對應的 $Q(\cdot;\mu)$ 的 minimizer x_{k-1}、x_{k-2} 等來構建初始猜測。對於合適的 $\{\mu_k\}$ 數列和初始猜測的選擇，對於每個 μ_k，可能只需要進行幾步無受限最佳化就能找到近似 minimizer x_k。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Example

Consider the problem

$$\min(x_1 + x_2) \quad \text{subject to} \quad x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0, \tag{3}$$

for which the solution is $(-1,-1)^{\mathrm{T}}$ and the quadratic penalty function is

$$Q(x;\mu) = x_1 + x_2 + \frac{\mu}{2}\left(x_1^2 + x_2^2 - 2\right)^2. \tag{4}$$

We plot the contours of this function in Figures 1 and 2.

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Example (cont'd)

In Figure 1 we have $\mu = 1$, and we observe a minimizer of Q near the point $(-1.1, -1.1)^{\mathrm{T}}$. Note that there is also a local maximizer near $x = (0.3, 0.3)^{\mathrm{T}}$.

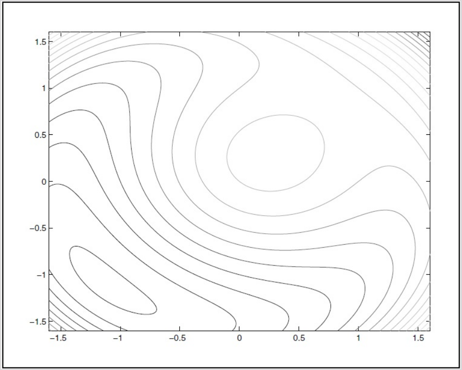

Figure 1: Contours of $Q(x;\mu)$ from (4) for $\mu = 1$, contour spacing 0.5.

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Example (cont'd)

In Figure 2 we have $\mu = 10$, so points that do not lie on the feasible circle defined by $x_1^2 + x_2^2 = 2$ suffer a much greater penalty than in the first figure – the "trough" of low values of Q is clearly evident.

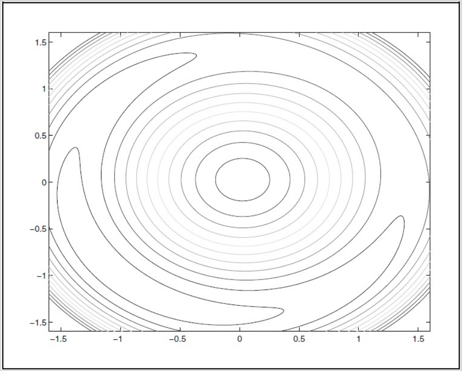

Figure 2: Contours of $Q(x;\mu)$ from (4) for $\mu = 10$, contour spacing 2.

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Example (cont'd)

The minimizer in this figure is much closer to the solution of the problem (3). A local maximum lies near $(0,0)^{\mathrm{T}}$, and Q goes rapidly to ∞ outside the circle $x_1^2 + x_2^2 = 2$.

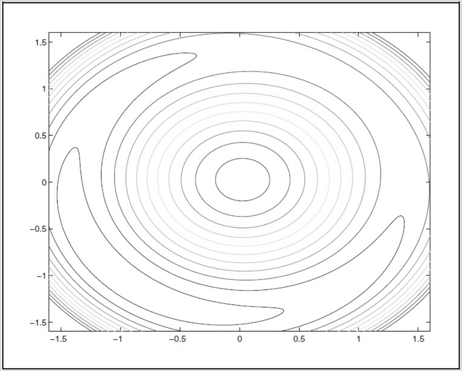

Figure 2: Contours of $Q(x;\mu)$ from (4) for $\mu = 10$, contour spacing 2.

§17.1 The Quadratic Penalty Method

然而情況並非始終如同前例那樣良好。對於給定的懲罰參數 μ，即使原始的受限問題具有唯一解，懲罰函數也可能無下界。例如考慮下面的問題

$$\min -5x_1^2 + x_2^2 \quad \text{subject to} \quad x_1 = 1,$$

其解為 $(1,0)^{\mathrm{T}}$。對於任何小於等於 10 的 μ 值，懲罰函數都是無下界的。對於這樣的 μ 值，由無受限最小化方法生成的迭代通常會發散。不幸的是，這個缺陷是本章中討論的所有懲罰函數的共同問題。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

對於一般包含不等式限制和等式限制的受限制最佳化問題

$$\min_x f(x) \quad \text{subject to} \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}, \\ c_i(x) \geqslant 0, i \in \mathcal{I}, \end{cases} \tag{5}$$

我們可以定義二次懲罰函數為

$$Q(x;\mu) \equiv f(x) + \frac{\mu}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x) + \frac{\mu}{2}\sum_{i\in\mathcal{I}} \left([c_i(x)]^-\right)^2, \tag{6}$$

其中 $[y]^- \equiv \max\{-y, 0\}$ 為 y 的負部 (negative part)。在這種情況下，Q 可能比目標函數和限制函數更不平滑。例如，如果其中一個不等式限制是 $x_1 \geqslant 0$，則函數 $\min\{0, x_1\}^2$ 具有不連續的二次導數，因此 Q 不再是兩次連續可微的。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

- **Algorithmic framework**

基於二次懲罰函數 (2) 的算法的一般框架如下所述。

Framework 17.1 (Quadratic Penalty Method).

Given $\mu_0 > 0$, a non-negative sequence $\{\tau_k\}$ with $\tau_k \to 0$, and a starting point x_0^s;

for $k = 0, 1, 2, \cdots$

Find an approximate minimizer x_k of $Q(\cdot; \mu_k)$, starting at x_k^s, and terminating when $\|\nabla_x Q(x; \mu_k)\| \leqslant \tau_k$;

if final convergence test satisfied

stop with approximate solution x_k;

end (if)

Choose new penalty parameter $\mu_{k+1} > \mu_k$;

Choose new starting point x_{k+1}^s;

end (for)

§17.1 The Quadratic Penalty Method

在 Framework 17.1 中，可以根據每次迭代中優化懲罰函數的困難程度自適應地 (adaptively) 選擇懲罰參數數列 $\{\mu_k\}$：當對某些 k 找 $Q(x;\mu_k)$ 最小值的計算量大時，我們選擇只比 μ_k 稍微大一些的 μ_{k+1}；例如 $\mu_{k+1} = 1.5\mu_k$。如果我們可以較低計算量找到 $Q(x;\mu_k)$ 的近似 minimizer，我們便可以嘗試更大幅度增加的 μ_{k+1}，例如 $\mu_{k+1} = 10\mu_k$。Framework 17.1 的收斂理論在選擇非負容許誤差 (tolerance) τ_k 上允許廣泛的自由度；它只要求 τ_k 趨近於 0 以確保隨著迭代的進行，找 Q 最小值的準確度越來越高。

要特別說明的一點是，我們並無法保證停止條件 $\|\nabla_x Q(x;\mu_k)\| \leq \tau_k$ 會被滿足，因為如上所討論，當懲罰參數不夠大時，迭代可能會遠離可行區域。在實際實施中，必須包括保障措施，當限制違規未能迅速減少時（或者當迭代似乎出現發散時），增加懲罰參數（並可能恢復初始點）。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

在 Framework 17.1 中，可以根據每次迭代中優化懲罰函數的困難程度自適應地 (adaptively) 選擇懲罰參數數列 $\{\mu_k\}$：當對某些 k 找 $Q(x;\mu_k)$ 最小值的計算量大時，我們選擇只比 μ_k 稍微大一些的 μ_{k+1}；例如 $\mu_{k+1} = 1.5\mu_k$。如果我們可以較低計算量找到 $Q(x;\mu_k)$ 的近似 minimizer，我們便可以嘗試更大幅度增加的 μ_{k+1}，例如 $\mu_{k+1} = 10\mu_k$。Framework 17.1 的收斂理論在選擇非負容許誤差 (tolerance) τ_k 上允許廣泛的自由度；它只要求 τ_k 趨近於 0 以確保隨著迭代的進行，找 Q 最小值的準確度越來越高。

要特別說明的一點是，我們並無法保證停止條件 $\|\nabla_x Q(x;\mu_k)\| \leq \tau_k$ 會被滿足，因為如上所討論，當懲罰參數不夠大時，迭代可能會遠離可行區域。在實際實施中，必須包括保障措施，當限制違規未能迅速減少時（或者當迭代似乎出現發散時），增加懲罰參數（並可能恢復初始點）。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

當只有等式限制存在時，$Q(x;\mu_k)$ 是光滑的，因此在前幾章描述的無受限優化算法可以用來找出近似解 x_k。然而，當 μ_k 變大時，對 $Q(x;\mu_k)$ 的最小化變得更難執行，除非我們使用特殊技術來計算搜尋方向。首先，Hessian 矩陣 $\nabla^2_{xx}Q(x;\mu_k)$ 在 minimizer 附近任意地 ill conditioned。這個特性足以使許多無受限優化算法如 quasi-Newton 法和 CG 表現不佳。另一方面，牛頓法對 Hessian 矩陣的 ill conditioning 不敏感，但它也可能因為下頁所列的兩個原因在 μ_k 很大時遇到困難。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

1. 當解線性方程以計算 Newton step 時，$\nabla^2_{xx}Q(x;\mu_k)$ 的 ill conditioning 可能會導致數值問題。我們在稍後會討論這個問題，並顯示這些影響並不嚴重，且牛頓方程的重構是可能的。
2. 即使 x 接近 $Q(\,\cdot\,;\mu_k)$ 的 minimizer，關於 x 的二次泰勒級數對 $Q(x;\mu_k)$ 的真實函數的近似僅在 x 的一個小鄰域內是合理的近似。這個特性可以在圖 2 中看到，在 minimizer 附近的 Q 的等高線具有"香蕉"形狀，而不是二次函數的橢圓形狀。由於牛頓法基於二次模型，它生成的步驟可能不會快速朝向 $Q(x;\mu_k)$ 的 minimizer 取得進展。這個困難可以通過明智地選擇起始點 x^s_{k+1} 或者設置 $x^s_{k+1} = x_k$ 以及選擇 μ_{k+1} 比 μ_k 稍微大一些來減輕。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

以下我們討論受限優化問題

$$\min_{x} f(x) \quad \text{subject to} \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}, \\ c_i(x) \geqslant 0, i \in \mathcal{I}, \end{cases} \tag{5}$$

在使用懲罰法時的一般收斂性質。首先我們證明以下

Lemma

Consider the penalty function for Problem (5) taking the form

$$P(x;\mu) \equiv f(x) + \mu h(x),$$

*where $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^+ \cup \{0\}$ satisfies $h(x) = 0$ if and only if x is feasible. Let $\{\mu_k\} \subseteq \mathbb{R}^+$ be **strictly** increasing, and for each $k \in \mathbb{N}$ there exists an **exact** minimizer x_k of $P(\cdot;\mu_k)$. Then for all $k \in \mathbb{N}$,*

1. $P(x_k;\mu_k) \leqslant P(x_{k+1};\mu_{k+1})$;
2. $h(x_k) \geqslant h(x_{k+1})$ *and* $f(x_k) \leqslant f(x_{k+1})$;
3. $f(x_*) \geqslant P(x_k;\mu_k) \geqslant f(x_k)$, *where x_* is a global solution of Problem (5).*

§17.1 The Quadratic Penalty Method

以下我們討論受限優化問題

$$\min_{x} f(x) \quad \text{subject to} \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}, \\ c_i(x) \geqslant 0, i \in \mathcal{I}, \end{cases} \tag{5}$$

在使用懲罰法時的一般收斂性質。首先我們證明以下

Lemma

Consider the penalty function for Problem (5) taking the form

$$P(x;\mu) \equiv f(x) + \mu h(x),$$

*where $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^+ \cup \{0\}$ satisfies $h(x) = 0$ if and only if x is feasible. Let $\{\mu_k\} \subseteq \mathbb{R}^+$ be **strictly** increasing, and for each $k \in \mathbb{N}$ there exists an **exact** minimizer x_k of $P(\cdot;\mu_k)$. Then for all $k \in \mathbb{N}$,*

1. $P(x_k;\mu_k) \leqslant P(x_{k+1};\mu_{k+1})$;
2. $h(x_k) \geqslant h(x_{k+1})$ *and* $f(x_k) \leqslant f(x_{k+1})$;
3. $f(x_*) \geqslant P(x_k;\mu_k) \geqslant f(x_k)$, *where x_* is a global solution of Problem (5).*

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof.

By the fact that x_k is an exact minimizer of $P(\cdot\,;\mu_k)$, we have

$$\begin{aligned} P(x_k;\mu_k) &\leqslant P(x_{k+1};\mu_k) = f(x_{k+1}) + \mu_k h(x_{k+1}) \\ &\leqslant f(x_{k+1}) + \mu_{k+1} h(x_{k+1}) = P(x_{k+1};\mu_{k+1}). \end{aligned}$$

Moreover,

$$P(x_k,\mu_k) \leqslant P(x_{k+1},\mu_k) \quad \text{and} \quad P(x_{k+1},\mu_{k+1}) \leqslant P(x_k,\mu_{k+1});$$

thus

$$\begin{aligned} f(x_k) + \mu_k h(x_k) &\leqslant f(x_{k+1}) + \mu_k h(x_{k+1}), \\ f(x_{k+1}) + \mu_{k+1} h(x_{k+1}) &\leqslant f(x_k) + \mu_{k+1} h(x_k). \end{aligned}$$

Summing the inequalities above and rearranging terms, we have

$$(\mu_{k+1} - \mu_k) h(x_{k+1}) \leqslant (\mu_{k+1} - \mu_k) h(x_k).$$

Since $\{\mu_k\}$ is strictly increasing, we have $\mu_{k+1} - \mu_k > 0$ so we conclude that $h(x_{k+1}) \leqslant h(x_k)$. □

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof.

By the fact that x_k is an exact minimizer of $P(\cdot\,;\mu_k)$, we have

$$\begin{aligned} P(x_k;\mu_k) &\leqslant P(x_{k+1};\mu_k) = f(x_{k+1}) + \mu_k h(x_{k+1}) \\ &\leqslant f(x_{k+1}) + \mu_{k+1} h(x_{k+1}) = P(x_{k+1};\mu_{k+1}) . \end{aligned}$$

Moreover,

$$P(x_k,\mu_k) \leqslant P(x_{k+1},\mu_k) \quad \text{and} \quad P(x_{k+1},\mu_{k+1}) \leqslant P(x_k,\mu_{k+1}) ;$$

thus

$$\begin{aligned} f(x_k) + \mu_k h(x_k) &\leqslant f(x_{k+1}) + \mu_k h(x_{k+1}) , \\ f(x_{k+1}) + \mu_{k+1} h(x_{k+1}) &\leqslant f(x_k) + \mu_{k+1} h(x_k) . \end{aligned}$$

Summing the inequalities above and rearranging terms, we have

$$(\mu_{k+1} - \mu_k) h(x_{k+1}) \leqslant (\mu_{k+1} - \mu_k) h(x_k) .$$

Since $\{\mu_k\}$ is strictly increasing, we have $\mu_{k+1} - \mu_k > 0$ so we conclude that $h(x_{k+1}) \leqslant h(x_k)$. □

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof (cont'd).

Having established $h(x_{k+1}) \leqslant h(x_k)$ for all $k \in \mathbb{N}$, we have

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) + \mu_k h(x_{k+1}) &= P(x_{k+1}; \mu_k) \geqslant P(x_k; \mu_k) \\ &= f(x_k) + \mu_k h(x_k) \geqslant f(x_k) + \mu_k h(x_{k+1}) \,. \end{aligned}$$

This implies that $f(x_{k+1}) \geqslant f(x_k)$ for all $k \in \mathbb{N}$.

Finally, if x_* is the minimizer of Problem (5), $h(x_*) = 0$; thus

$$f(x_*) = f(x_*) + \mu_k h(x_*) = P(x_*; \mu_k) \geqslant P(x_k; \mu_k) \geqslant f(x_k) \,. \quad \square$$

Theorem

Let $\mu_k \nearrow \infty$, and for each $k \in \mathbb{N}$ there exists an **exact** *global minimizer x_k of $P(\cdot; \mu_k)$, where P is defined in the previous lemma in which f and h are continuous. Then every limit point $\bar{x}$ of the sequence $\{x_k\}$ is a global solution of the Problem (5).*

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof (cont'd).

Having established $h(x_{k+1}) \leqslant h(x_k)$ for all $k \in \mathbb{N}$, we have

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) + \mu_k h(x_{k+1}) &= P(x_{k+1}; \mu_k) \geqslant P(x_k; \mu_k) \\ &= f(x_k) + \mu_k h(x_k) \geqslant f(x_k) + \mu_k h(x_{k+1}) . \end{aligned}$$

This implies that $f(x_{k+1}) \geqslant f(x_k)$ for all $k \in \mathbb{N}$.

Finally, if x_* is the minimizer of Problem (5), $h(x_*) = 0$; thus

$$f(x_*) = f(x_*) + \mu_k h(x_*) = P(x_*; \mu_k) \geqslant P(x_k; \mu_k) \geqslant f(x_k) . \qquad \square$$

Theorem

Let $\mu_k \nearrow \infty$, and for each $k \in \mathbb{N}$ there exists an **exact** *global minimizer x_k of $P(\cdot; \mu_k)$, where P is defined in the previous lemma in which f and h are continuous. Then every limit point $\bar{x}$ of the sequence $\{x_k\}$ is a global solution of the Problem (5).*

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof (cont'd).

Having established $h(x_{k+1}) \leqslant h(x_k)$ for all $k \in \mathbb{N}$, we have

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) + \mu_k h(x_{k+1}) &= P(x_{k+1}; \mu_k) \geqslant P(x_k; \mu_k) \\ &= f(x_k) + \mu_k h(x_k) \geqslant f(x_k) + \mu_k h(x_{k+1}) . \end{aligned}$$

This implies that $f(x_{k+1}) \geqslant f(x_k)$ for all $k \in \mathbb{N}$.

Finally, if x_* is the minimizer of Problem (5), $h(x_*) = 0$; thus

$$f(x_*) = f(x_*) + \mu_k h(x_*) = P(x_*; \mu_k) \geqslant P(x_k; \mu_k) \geqslant f(x_k) . \qquad \square$$

Theorem

Let $\mu_k \nearrow \infty$, and for each $k \in \mathbb{N}$ there exists an **exact** *global minimizer x_k of $P(\cdot; \mu_k)$, where P is defined in the previous lemma in which f and h are continuous. Then every limit point $\bar{x}$ of the sequence $\{x_k\}$ is a global solution of the Problem* (5).

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof.

Let x_* be a global solution of (5) and $\bar{x}$ be a limit point of $\{x_k\}$.

1. $f(x_*) \leqslant f(x)$ for all x with $h(x) = 0$.
2. there exists a subsequence $\{k_j\}$ of $\{k\}$ such that

$$\mu_{k_j} < \mu_{k_{j+1}} \quad \forall\, j \in \mathbb{N} \qquad \text{and} \qquad \lim_{j\to\infty} x_{k_j} = \bar{x}\,.$$

By the previous lemma,

$$f(x_*) \geqslant f(x_{k_j}) + \mu_{k_j} h(x_{k_j}) = P(x_{k_j}; \mu_{k_j}) \geqslant f(x_{k_j})\,.$$

Passing to the limit as $j \to \infty$, by the continuity of f we obtain that

$$f(x_*) \geqslant f(\bar{x}) + \limsup_{j\to\infty} \mu_{k_j} h(x_{k_j}) \geqslant f(\bar{x})\,.$$

This shows that $\limsup_{j\to\infty} \mu_{k_j} h(x_{k_j})$ exists. The continuity of h and the fact that $\mu_k \nearrow \infty$ show that $h(\bar{x}) = 0$; thus $\bar{x}$ is feasible. Since $f(x_*) \geqslant f(\bar{x})$, $\bar{x}$ is a global solution of Problem (5) □

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof.

Let x_* be a global solution of (5) and $\bar{x}$ be a limit point of $\{x_k\}$.

1. $f(x_*) \leqslant f(x)$ for all x with $h(x) = 0$.
2. there exists a subsequence $\{k_j\}$ of $\{k\}$ such that

$$\mu_{k_j} < \mu_{k_{j+1}} \quad \forall\, j \in \mathbb{N} \qquad \text{and} \qquad \lim_{j\to\infty} x_{k_j} = \bar{x}\,.$$

By the previous lemma,

$$f(x_*) \geqslant f(x_{k_j}) + \mu_{k_j} h(x_{k_j}) = P(x_{k_j}\,; \mu_{k_j}) \geqslant f(x_{k_j})\,.$$

Passing to the limit as $j \to \infty$, by the continuity of f we obtain that

$$f(x_*) \geqslant f(\bar{x}) + \limsup_{j\to\infty} \mu_{k_j} h(x_{k_j}) \geqslant f(\bar{x})\,.$$

This shows that $\limsup_{j\to\infty} \mu_{k_j} h(x_{k_j})$ exists. The continuity of h and the fact that $\mu_k \nearrow \infty$ show that $h(\bar{x}) = 0$; thus $\bar{x}$ is feasible. Since $f(x_*) \geqslant f(\bar{x})$, $\bar{x}$ is a global solution of Problem (5) □

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof.

Let x_* be a global solution of (5) and $\bar{x}$ be a limit point of $\{x_k\}$.

1. $f(x_*) \leqslant f(x)$ for all x with $h(x) = 0$.
2. there exists a subsequence $\{k_j\}$ of $\{k\}$ such that

$$\mu_{k_j} < \mu_{k_{j+1}} \quad \forall\, j \in \mathbb{N} \qquad \text{and} \qquad \lim_{j\to\infty} x_{k_j} = \bar{x}.$$

By the previous lemma,

$$f(x_*) \geqslant f(x_{k_j}) + \mu_{k_j} h(x_{k_j}) = P(x_{k_j}; \mu_{k_j}) \geqslant f(x_{k_j}).$$

Passing to the limit as $j \to \infty$, by the continuity of f we obtain that

$$f(x_*) \geqslant f(\bar{x}) + \limsup_{j\to\infty} \mu_{k_j} h(x_{k_j}) \geqslant f(\bar{x}).$$

This shows that $\limsup_{j\to\infty} \mu_{k_j} h(x_{k_j})$ exists. The continuity of h and the fact that $\mu_k \nearrow \infty$ show that $h(\bar{x}) = 0$; thus $\bar{x}$ is feasible. Since $f(x_*) \geqslant f(\bar{x})$, $\bar{x}$ is a global solution of Problem (5) □

§17.1 The Quadratic Penalty Method

由於上述結果需要我們為每個子問題找到全域 minimizer，因此一般而言無法實現對 (5) 的全域解的收斂性這種理想性質。下一個結果針對只具等式限制的受限優化問題，它涉及當我們允許對二次懲罰函數

$$Q(x;\mu) \equiv f(x) + \frac{\mu}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x), \tag{2}$$

進行不精確（但越來越準確）的最小化時，數列 $\{x_k\}$ 的收斂特性。與前述定理相比，它表明迭代數列可能被吸引到不可行的點，或者到任何 KKT 點（即滿足一階必要條件的點；參見 $(32)_{12}$），而不是到一個 minimizer。它還表明，在某些情況下，$\mu_k c_i(x_k)$ 這些量可以用作 Lagrange 乘子 λ_i^* 的估計值。這一觀察對於在 §17.3 中分析增廣 Lagrangian 法至關重要。

為了得出下頁的結果，我們將做出（樂觀的）假設，即對所有 k 我們都能找到 x_k 滿足停止條件 $\|\nabla_x Q(x_k;\mu_k)\| \le \tau_k$。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

由於上述結果需要我們為每個子問題找到全域 minimizer，因此一般而言無法實現對 (5) 的全域解的收斂性這種理想性質。下一個結果針對只具等式限制的受限優化問題，它涉及當我們允許對二次懲罰函數

$$Q(x;\mu) \equiv f(x) + \frac{\mu}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x), \tag{2}$$

進行不精確（但越來越準確）的最小化時，數列 $\{x_k\}$ 的收斂特性。與前述定理相比，它表明迭代數列可能被吸引到不可行的點，或者到任何 KKT 點（即滿足一階必要條件的點；參見 $(32)_{12}$），而不是到一個 minimizer。它還表明，在某些情況下，$\mu_k c_i(x_k)$ 這些量可以用作 Lagrange 乘子 λ_i^* 的估計值。這一觀察對於在 §17.3 中分析增廣 Lagrangian 法至關重要。

為了得出下頁的結果，我們將做出（樂觀的）假設，即對所有 k 我們都能找到 x_k 滿足停止條件 $\|\nabla_x Q(x_k;\mu_k)\| \leqslant \tau_k$。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Theorem

Consider the constrained optimization problem

$$\min_x f(x) \quad \textit{subject to} \quad c_i(x) = 0\,, i \in \mathcal{E}\,. \tag{1}$$

Suppose that the tolerances and penalty parameters in Framework 17.1 satisfy $\tau_k \to 0$ and $\mu_k \nearrow \infty$. Then if a limit point x_* of the sequence $\{x_k\}$ is infeasible, it is a stationary point of the function $\|c(x)\|^2$. On the other hand, if a limit point x_* is feasible and the constraint gradients $\nabla c_i(x_*)$ are linearly independent, then x_* is a KKT point for the problem (1). For such points, we have for any subsequence $\{x_{k_j}\}$ of $\{x_k\}$ satisfying $\lim\limits_{j\to\infty} x_{k_j} = x_*$ that

$$\lim_{j\to\infty} -\mu_{k_j} c_i(x_{k_j}) = \lambda_i^* \quad \forall\, i \in \mathcal{E}\,, \tag{7}$$

where λ_* is the multiplier vector that satisfies the KKT conditions $(32)_{12}$ (see the next page) for the equality constrained problem (1).

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Theorem

Consider the constrained optimization problem

$$\min_x f(x) \quad \textit{subject to} \quad c_i(x) = 0\,, i \in \mathcal{E}\,. \tag{1}$$

Suppose that the tolerances and penalty parameters in Framework 17.1 satisfy $\tau_k \to 0$ and $\mu_k \nearrow \infty$. Then if a limit point x_* of the sequence $\{x_k\}$ is infeasible, it is a stationary point of the function $\|c(x)\|^2$. On the other hand, if a limit point x_* is feasible and the constraint gradients $\nabla c_i(x_*)$ are linearly independent, then x_* is a KKT point for the problem (1). For such points, we have for any subsequence $\{x_{k_j}\}$ of $\{x_k\}$ satisfying $\lim\limits_{j\to\infty} x_{k_j} = x_*$ that

$$\lim_{j\to\infty} -\mu_{k_j} c_i(x_{k_j}) = \lambda_i^* \quad \forall\, i \in \mathcal{E}\,, \tag{7}$$

where λ_* is the multiplier vector that satisfies the KKT conditions $(32)_{12}$ (see the next page) for the equality constrained problem (1).

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Theorem

Consider the constrained optimization problem

$$\min_{x} f(x) \quad \textit{subject to} \quad c_i(x) = 0\,, i \in \mathcal{E}\,. \tag{1}$$

Suppose that the tolerances and penalty parameters in Framework 17.1 satisfy $\tau_k \to 0$ and $\mu_k \nearrow \infty$. Then if a limit point x_* of the sequence $\{x_k\}$ is infeasible, it is a stationary point of the function $\|c(x)\|^2$. On the other hand, if a limit point x_* is feasible and the constraint gradients $\nabla c_i(x_*)$ are linearly independent, then x_* is a KKT point for the problem (1). For such points, we have for any subsequence $\{x_{k_j}\}$ of $\{x_k\}$ satisfying $\lim\limits_{j\to\infty} x_{k_j} = x_*$ that

$$\lim_{j\to\infty} -\mu_{k_j} c_i(x_{k_j}) = \lambda_i^* \quad \forall\, i \in \mathcal{E}\,, \tag{7}$$

where λ_* is the multiplier vector that satisfies the KKT conditions $(32)_{12}$ (see the next page) for the equality constrained problem (1).

Theorem 12.1 – KKT conditions

Theorem (First-Order Necessary Conditions)

Suppose that x_* is a local solution of problem

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x) \quad \textit{subject to} \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}\,, \\ c_i(x) \geqslant 0, i \in \mathcal{I}\,, \end{cases} \tag{$(1)_{12}$}$$

that the functions f and c_i in $(1)_{12}$ are continuously differentiable, and that the LICQ holds at x_*. Then there is a Lagrange multiplier vector λ_*, with components λ_i^*, $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$, such that the following conditions are satisfied.

$$\nabla_x \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) = 0\,, \tag{$(32a)_{12}$}$$
$$c_i(x_*) = 0 \quad \textit{for all } i \in \mathcal{E}, \tag{$(32b)_{12}$}$$
$$c_i(x_*) \geqslant 0 \quad \textit{for all } i \in \mathcal{I}, \tag{$(32c)_{12}$}$$
$$\lambda_i^* \geqslant 0 \quad \textit{for all } i \in \mathcal{I}, \tag{$(32d)_{12}$}$$
$$\lambda_i^* c_i(x_*) = 0 \quad \textit{for all } i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}. \tag{$(32e)_{12}$}$$

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof.

Let x_* be a limit point of the sequence of iterates $\{x_k\}$. Then there is a subsequence $\{x_{k_j}\}$ of $\{x_k\}$ such that $\lim\limits_{j\to\infty} x_{k_j} = x_*$. By differentiating $Q(x;\mu_{k_j})$ in (2), we obtain

$$\nabla_x Q(x_{k_j};\mu_{k_j}) = \nabla f(x_{k_j}) + \mu_{k_j} \sum_{i\in\mathcal{E}} c_i(x_{k_j}) \nabla c_i(x_{k_j}),$$

so from the termination criterion for Framework 17.1,

$$\Big\| \nabla f(x_{k_j}) + \mu_{k_j} \sum_{i\in\mathcal{E}} c_i(x_{k_j}) \nabla c_i(x_{k_j}) \Big\| \leqslant \tau_{k_j}. \tag{8}$$

Applying the triangle inequality and rearranging terms in the expression above, we obtain

$$\Big\| \sum_{i\in\mathcal{E}} c_i(x_{k_j}) \nabla c_i(x_{k_j}) \Big\| \leqslant \frac{1}{\mu_{k_j}} \big[\tau_{k_j} + \|\nabla f(x_{k_j})\| \big]. \tag{9}$$

□

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof (cont'd).

When we take limits as $j \to \infty$, by the fact that the right-hand side of (9) approaches zero, we obtain

$$\sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x_*) \nabla c_i(x_*) = 0 . \tag{10}$$

If $c_i(x_*) \neq 0$ for some $i \in \mathcal{E}$ (this happens only if the constraint gradients $\nabla c_i(x_*)$ are linearly dependent), then (10) implies that x_* is a stationary point of the function $\|c(x)\|^2$.

If, on the other hand, the constraint gradients $\nabla c_i(x_*)$ are linearly independent at a limit point x_*, we have from (10) that $c_i(x_*) = 0$ for all $i \in \mathcal{E}$, so x_* is feasible. Hence, the second KKT condition $(32b)_{12}$ is satisfied. We need to check the first KKT condition $(32a)_{12}$ as well, and to show that the limit (7) holds. □

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof (cont'd).

When we take limits as $j \to \infty$, by the fact that the right-hand side of (9) approaches zero, we obtain

$$\sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x_*) \nabla c_i(x_*) = 0. \tag{10}$$

If $c_i(x_*) \neq 0$ for some $i \in \mathcal{E}$ (this happens only if the constraint gradients $\nabla c_i(x_*)$ are linearly dependent), then (10) implies that x_* is a stationary point of the function $\|c(x)\|^2$.

If, on the other hand, the constraint gradients $\nabla c_i(x_*)$ are linearly independent at a limit point x_*, we have from (10) that $c_i(x_*) = 0$ for all $i \in \mathcal{E}$, so x_* is feasible. Hence, the second KKT condition $(32b)_{12}$ is satisfied. We need to check the first KKT condition $(32a)_{12}$ as well, and to show that the limit (7) holds. □

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof (cont'd).

Using $A(x)$ to denote the matrix of constraint gradients; that is,

$$A(x)^{\mathrm{T}} = [\nabla c_i(x)]_{i\in\mathcal{E}}\,, \tag{11}$$

and λ_{k_j} to denote the vector $-\mu_{k_j} c(x_{k_j})$, we have as in (8) that

$$A(x_{k_j})^{\mathrm{T}}\lambda_{k_j} = \nabla f(x_{k_j}) - \nabla_x Q(x_{k_j};\mu_{k_j}), \quad \|\nabla_x Q(x_{k_j};\mu_{k_j})\| \leqslant \tau_{k_j}\,. \tag{12}$$

For all j sufficiently large, the matrix $A(x_{k_j})$ has full row rank, so that $A(x_{k_j})A(x_{k_j})^{\mathrm{T}}$ is non-singular. By multiplying (12) by $A(x_{k_j})$ and rearranging, we have that

$$\lambda_{k_j} = \big[A(x_{k_j})A(x_{k_j})^{\mathrm{T}}\big]^{-1} A(x_{k_j})[\nabla f(x_{k_j}) - \nabla_x Q(x_{k_j};\mu_{k_j})].$$

Hence by taking the limit as $j\to\infty$, we find that

$$\lim_{j\to\infty}\lambda_{k_j} = \lambda_* = \big[A(x_*)A(x_*)^{\mathrm{T}}\big]^{-1} A(x_*)\nabla f(x_*).$$

□

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof (cont'd).

Using $A(x)$ to denote the matrix of constraint gradients; that is,

$$A(x)^{\mathrm{T}} = [\nabla c_i(x)]_{i\in\mathcal{E}}\,, \tag{11}$$

and λ_{k_j} to denote the vector $-\mu_{k_j}c(x_{k_j})$, we have as in (8) that

$$A(x_{k_j})^{\mathrm{T}}\lambda_{k_j} = \nabla f(x_{k_j}) - \nabla_x Q(x_{k_j};\mu_{k_j}), \quad \|\nabla_x Q(x_{k_j};\mu_{k_j})\| \leqslant \tau_{k_j}\,. \tag{12}$$

For all j sufficiently large, the matrix $A(x_{k_j})$ has full row rank, so that $A(x_{k_j})A(x_{k_j})^{\mathrm{T}}$ is non-singular. By multiplying (12) by $A(x_{k_j})$ and rearranging, we have that

$$\lambda_{k_j} = \big[A(x_{k_j})A(x_{k_j})^{\mathrm{T}}\big]^{-1}A(x_{k_j})[\nabla f(x_{k_j}) - \nabla_x Q(x_{k_j};\mu_{k_j})].$$

Hence by taking the limit as $j\to\infty$, we find that

$$\lim_{j\to\infty}\lambda_{k_j} = \lambda_* = \big[A(x_*)A(x_*)^{\mathrm{T}}\big]^{-1}A(x_*)\nabla f(x_*).$$

□

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof (cont'd).

Using $A(x)$ to denote the matrix of constraint gradients; that is,

$$A(x)^{\mathrm{T}} = [\nabla c_i(x)]_{i\in\mathcal{E}}\,, \tag{11}$$

and λ_{k_j} to denote the vector $-\mu_{k_j} c(x_{k_j})$, we have as in (8) that

$$A(x_{k_j})^{\mathrm{T}}\lambda_{k_j} = \nabla f(x_{k_j}) - \nabla_x Q(x_{k_j};\mu_{k_j}), \quad \|\nabla_x Q(x_{k_j};\mu_{k_j})\| \leqslant \tau_{k_j}\,. \tag{12}$$

For all j sufficiently large, the matrix $A(x_{k_j})$ has full row rank, so that $A(x_{k_j})A(x_{k_j})^{\mathrm{T}}$ is non-singular. By multiplying (12) by $A(x_{k_j})$ and rearranging, we have that

$$\lambda_{k_j} = \left[A(x_{k_j})A(x_{k_j})^{\mathrm{T}}\right]^{-1} A(x_{k_j})[\nabla f(x_{k_j}) - \nabla_x Q(x_{k_j};\mu_{k_j})].$$

Hence by taking the limit as $j\to\infty$, we find that

$$\lim_{j\to\infty}\lambda_{k_j} = \lambda_* = \left[A(x_*)A(x_*)^{\mathrm{T}}\right]^{-1} A(x_*)\nabla f(x_*).$$

□

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof (cont'd).

Passing to the limit as $j \to \infty$ in (8) or (12), we conclude that

$$\nabla f(x_*) - A(x_*)^{\mathrm{T}} \lambda_* = 0, \tag{13}$$

so that λ_* satisfies the first KKT condition $(32a)_{12}$ for (1). Hence, x_* is a KKT point for (1), with unique Lagrange multiplier vector λ_*. □

- **Ill conditioning and reformulations**

我們接下來研究 Hessian 矩陣 $\nabla^2_{xx} Q(x; \mu_k)$ 中的 ill conditioning 性質。對於這個矩陣的性質以及在其它懲罰法和 barrier 方法中出現的類似的 Hessian 矩陣的理解，在選擇有效的優化演算法以及在每次迭代中進行反解線性系統的計算方面是至關重要的。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

Proof (cont'd).

Passing to the limit as $j \to \infty$ in (8) or (12), we conclude that

$$\nabla f(x_*) - A(x_*)^{\mathrm{T}} \lambda_* = 0, \tag{13}$$

so that λ_* satisfies the first KKT condition $(32a)_{12}$ for (1). Hence, x_* is a KKT point for (1), with unique Lagrange multiplier vector λ_*. □

- **Ill conditioning and reformulations**

我們接下來研究 Hessian 矩陣 $\nabla^2_{xx} Q(x;\mu_k)$ 中的 ill conditioning 性質。對於這個矩陣的性質以及在其它懲罰法和 barrier 方法中出現的類似的 Hessian 矩陣的理解，在選擇有效的優化演算法以及在每次迭代中進行反解線性系統的計算方面是至關重要的。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

$Q(\cdot;\mu_k)$ 的 Hessian 由以下公式給出：

$$\nabla^2_{xx} Q(x;\mu_k) = \nabla^2 f(x) + \mu_k \sum_{i\in\mathcal{E}} c_i(x)\nabla^2 c_i(x) + \mu_k A(x)^{\mathrm{T}} A(x), \quad (14)$$

在此 $A(x)^{\mathrm{T}} = [\nabla c_i(x)]_{i\in\mathcal{E}}$。當 x 接近 $Q(\cdot;\mu_k)$ 的 minimizer 並滿足前述定理的條件（因而

$$\lim_{j\to\infty} -\mu_{k_j} c_i(x_{k_j}) = \lambda_i^* \quad \forall\, i \in \mathcal{E}, \qquad (7)$$

成立）時，我們可以得出 (14) 右側的前兩項之和大致等於由

$$\mathcal{L}(x,\lambda) = f(x) - \sum_{i\in\mathcal{E}} \lambda_i c_i(x)$$

定義的 Lagrangian 的 Hessian 矩陣。具體地說，當 x 接近 $Q(\cdot;\mu_k)$ 的 minimizer 時我們有

$$\nabla^2_{xx} Q(x;\mu_k) \approx \nabla^2_{xx}\mathcal{L}(x,\lambda_*) + \mu_k A(x)^{\mathrm{T}} A(x). \qquad (15)$$

§17.1 The Quadratic Penalty Method

$Q(\cdot;\mu_k)$ 的 Hessian 由以下公式給出：

$$\nabla^2_{xx} Q(x;\mu_k) = \nabla^2 f(x) + \mu_k \sum_{i\in\mathcal{E}} c_i(x)\nabla^2 c_i(x) + \mu_k A(x)^{\mathrm{T}} A(x), \quad (14)$$

在此 $A(x)^{\mathrm{T}} = [\nabla c_i(x)]_{i\in\mathcal{E}}$。當 x 接近 $Q(\cdot;\mu_k)$ 的 minimizer 並滿足前述定理的條件（因而

$$\lim_{j\to\infty} -\mu_{k_j} c_i(x_{k_j}) = \lambda_i^* \quad \forall\, i \in \mathcal{E}, \quad (7)$$

成立）時，我們可以得出 (14) 右側的前兩項之和大致等於由

$$\mathcal{L}(x,\lambda) = f(x) - \sum_{i\in\mathcal{E}} \lambda_i c_i(x)$$

定義的 Lagrangian 的 Hessian 矩陣。具體地說，當 x 接近 $Q(\cdot;\mu_k)$ 的 minimizer 時我們有

$$\nabla^2_{xx} Q(x;\mu_k) \approx \nabla^2_{xx}\mathcal{L}(x,\lambda_*) + \mu_k A(x)^{\mathrm{T}} A(x). \quad (15)$$

§17.1 The Quadratic Penalty Method

$Q(\cdot;\mu_k)$ 的 Hessian 由以下公式給出：

$$\nabla^2_{xx} Q(x;\mu_k) = \nabla^2 f(x) + \mu_k \sum_{i\in\mathcal{E}} c_i(x)\nabla^2 c_i(x) + \mu_k A(x)^{\mathrm{T}} A(x), \quad (14)$$

在此 $A(x)^{\mathrm{T}} = [\nabla c_i(x)]_{i\in\mathcal{E}}$。當 x 接近 $Q(\cdot;\mu_k)$ 的 minimizer 並滿足前述定理的條件（因而

$$\lim_{j\to\infty} -\mu_{k_j} c_i(x_{k_j}) = \lambda_i^* \quad \forall\, i \in \mathcal{E}, \quad (7)$$

成立）時，我們可以得出 (14) 右側的前兩項之和大致等於由

$$\mathcal{L}(x,\lambda) = f(x) - \sum_{i\in\mathcal{E}} \lambda_i c_i(x)$$

定義的 Lagrangian 的 Hessian 矩陣。具體地說，當 x 接近 $Q(\cdot;\mu_k)$ 的 minimizer 時我們有

$$\nabla^2_{xx} Q(x;\mu_k) \approx \nabla^2_{xx}\mathcal{L}(x,\lambda_*) + \mu_k A(x)^{\mathrm{T}} A(x). \quad (15)$$

§17.1 The Quadratic Penalty Method

由 (15) 式可以看出 $\nabla^2_{xx} Q(x;\mu_k)$ 大致等於以下兩部分之和：

1. 一個元素與 μ_k 無關的矩陣（Lagrangian 項）;
2. 一個 rank 為 $|\mathcal{E}|$ 的矩陣，其非零特徵值的大小為 $\mathcal{O}(\mu_k)$（(15) 式右側的第二項）。

限制條件的個數 $|\mathcal{E}|$ 通常小於 n，在這種情況下，(15) 式的最後一項 $A(x)^{\mathrm{T}}A(x)$ 為 singular。由於 μ_k 趨近 ∞，$\nabla^2_{xx} Q(x;\mu_k)$ 的條件數無限制地隨 k 增加。

Ill conditioning 的一個後果可能是在計算 $Q(x;\mu_k)$ 的 Newton step 時可能會出現不準確，該步長通過解決以下系統獲得：

$$\nabla^2_{xx} Q(x;\mu_k) p = -\nabla_x Q(x;\mu_k). \tag{16}$$

一般來說無論用什麼計算技術來解決 (16)，這個系統的 ill conditioning 將導致計算出的 p 值存在顯著誤差。迭代方法也同樣表現不佳，除非伴隨著一種去除 ill conditioning 的預處理策略。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

由 (15) 式可以看出 $\nabla^2_{xx}Q(x;\mu_k)$ 大致等於以下兩部分之和：

1. 一個元素與 μ_k 無關的矩陣（Lagrangian 項）；
2. 一個 rank 為 $|\mathcal{E}|$ 的矩陣，其非零特徵值的大小為 $\mathcal{O}(\mu_k)$（(15) 式右側的第二項）。

限制條件的個數 $|\mathcal{E}|$ 通常小於 n，在這種情況下，(15) 式的最後一項 $A(x)^{\mathrm{T}}A(x)$ 為 singular。由於 μ_k 趨近 ∞，$\nabla^2_{xx}Q(x;\mu_k)$ 的條件數無限制地隨 k 增加。

Ill conditioning 的一個後果可能是在計算 $Q(x;\mu_k)$ 的 Newton step 時可能會出現不準確，該步長通過解決以下系統獲得：

$$\nabla^2_{xx}Q(x;\mu_k)p = -\nabla_x Q(x;\mu_k). \qquad (16)$$

一般來說無論用什麼計算技術來解決 (16)，這個系統的 ill conditioning 將導致計算出的 p 值存在顯著誤差。迭代方法也同樣表現不佳，除非伴隨著一種去除 ill conditioning 的預處理策略。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

由 (15) 式可以看出 $\nabla^2_{xx}Q(x;\mu_k)$ 大致等於以下兩部分之和：

1. 一個元素與 μ_k 無關的矩陣（Lagrangian 項）;
2. 一個 rank 為 $|\mathcal{E}|$ 的矩陣，其非零特徵值的大小為 $\mathcal{O}(\mu_k)$（(15) 式右側的第二項）。

限制條件的個數 $|\mathcal{E}|$ 通常小於 n，在這種情況下，(15) 式的最後一項 $A(x)^{\mathrm{T}}A(x)$ 為 singular。由於 μ_k 趨近 ∞，$\nabla^2_{xx}Q(x;\mu_k)$ 的條件數無限制地隨 k 增加。

Ill conditioning 的一個後果可能是在計算 $Q(x;\mu_k)$ 的 Newton step 時可能會出現不準確，該步長通過解決以下系統獲得：

$$\nabla^2_{xx}Q(x;\mu_k)p = -\nabla_x Q(x;\mu_k). \tag{16}$$

一般來說無論用什麼計算技術來解決 (16)，這個系統的 ill conditioning 將導致計算出的 p 值存在顯著誤差。迭代方法也同樣表現不佳，除非伴隨著一種去除 ill conditioning 的預處理策略。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

有一種避免以 ill conditioned 的 (16) 式求 Newton step 的替代方案。此方案引入一個新向量變量 $\zeta (\equiv \mu_k A(x) p)$，我們可以看出滿足 (16) 的向量 p 也滿足以下系統：

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) + \mu_k \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x) \nabla^2 c_i(x) & A(x)^{\mathrm{T}} \\ A(x) & -\frac{1}{\mu_k} \mathrm{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p \\ \zeta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla_x Q(x; \mu_k) \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (17)$$

當 x 離解 x_* 不太遠時，這個系統中的係數矩陣不具有 $\mathcal{O}(\mu_k)$ 的大奇異值，因此系統 (17) 可以被視為對 (16) 的一種 well conditioned 重新表述。然而要注意的是，無論是 (16) 或 (17) 都可能不會產生好的搜索方向 p，因為在 (17) 的左上角 block 中的 $\mu_k c_i(x)$ 可能對 $-\lambda_i^*$ 的近似不佳 (poor approximation) – 即使在 x 非常接近 $Q(x; \mu_k)$ 的 minimizer x_k 時亦是如此，因此 Newton step 可能本質上是一個不適合的搜索方向。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

有一種避免以 ill conditioned 的 (16) 式求 Newton step 的替代方案。此方案引入一個新向量變量 $\zeta (\equiv \mu_k A(x)p)$，我們可以看出滿足 (16) 的向量 p 也滿足以下系統：

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) + \mu_k \sum_{i\in\mathcal{E}} c_i(x)\nabla^2 c_i(x) & A(x)^{\mathrm{T}} \\ A(x) & -\frac{1}{\mu_k}\mathrm{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p \\ \zeta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla_x Q(x;\mu_k) \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (17)$$

當 x 離解 x_* 不太遠時，這個系統中的係數矩陣不具有 $\mathcal{O}(\mu_k)$ 的大奇異值，因此系統 (17) 可以被視為對 (16) 的一種 well conditioned 重新表述。然而要注意的是，無論是 (16) 或 (17) 都可能不會產生好的搜索方向 p，因為在 (17) 的左上角 block 中的 $\mu_k c_i(x)$ 可能對 $-\lambda_i^*$ 的近似不佳 (poor approximation) – 即使在 x 非常接近 $Q(x;\mu_k)$ 的 minimizer x_k 時亦是如此，因此 Newton step 可能本質上是一個不適合的搜索方向。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

通過 (17) 計算 Newton step 牽涉到解一個 $n+|\mathcal{E}|$ 維的線性系統，並非如 (16) 式中小一點的 n 維系統。在第 18 章中推導出的序列二次規劃（SQP）步驟

$$\begin{bmatrix} \nabla^2_{xx}\mathcal{L}_k & -A_k^{\mathrm{T}} \\ A_k & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_k \\ p_\lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla f_k + A_k^{\mathrm{T}}\lambda_k \\ -c_k \end{bmatrix} \tag{6$_{18}$}$$

也有類似的擴張系統必須要解。實際上，當 μ_k 很大時，(17) 可以被視為是 SQP 步驟 $(6)_{18}$ 的正則化 (regularization)，其中 $-(1/\mu_k)\mathrm{I}$ 這一項有助於確保迭代矩陣也是可逆的 – 即使 Jacobian $A(x)$ 為 rank deficient。另一方面，當 μ_k 較小時，(17) 表明通過二次懲罰方法計算的步進量並不滿足限制的線性化方程而可能使迭代不會朝著可行區域取得顯著進展，導致計算效率低下。此外，如果 $\{\mu_k\}$ 不能足夠快地趨近於 ∞，我們就會失去當線性化是 exact 時發生的超線性速率的可能性；請參見第 18 章。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

通過 (17) 計算 Newton step 牽涉到解一個 $n+|\mathcal{E}|$ 維的線性系統，並非如 (16) 式中小一點的 n 維系統。在第 18 章中推導出的序列二次規劃（SQP）步驟

$$\begin{bmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k & -A_k^{\mathrm{T}} \\ A_k & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_k \\ p_\lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla f_k + A_k^{\mathrm{T}} \lambda_k \\ -c_k \end{bmatrix} \tag{(6)$_{18}$}$$

也有類似的擴張系統必須要解。實際上，當 μ_k 很大時，(17) 可以被視為是 SQP 步驟 $(6)_{18}$ 的正則化 (regularization)，其中 $-(1/\mu_k)\mathrm{I}$ 這一項有助於確保迭代矩陣也是可逆的 – 即使 Jacobian $A(x)$ 為 rank deficient。另一方面，當 μ_k 較小時，(17) 表明通過二次懲罰方法計算的步進量並不滿足限制的線性化方程而可能使迭代不會朝著可行區域取得顯著進展，導致計算效率低下。此外，如果 $\{\mu_k\}$ 不能足夠快地趨近於 ∞，我們就會失去當線性化是 exact 時發生的超線性速率的可能性；請參見第 18 章。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

通過 (17) 計算 Newton step 牽涉到解一個 $n+|\mathcal{E}|$ 維的線性系統，並非如 (16) 式中小一點的 n 維系統。在第 18 章中推導出的序列二次規劃（SQP）步驟

$$\begin{bmatrix} \nabla^2_{xx}\mathcal{L}_k & -A_k^{\mathrm{T}} \\ A_k & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} p_k \\ p_\lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla f_k + A_k^{\mathrm{T}}\lambda_k \\ -c_k \end{bmatrix} \tag{6$_{18}$}$$

也有類似的擴張系統必須要解。實際上，當 μ_k 很大時，(17) 可以被視為是 SQP 步驟 $(6)_{18}$ 的正則化 (regularization)，其中 $-(1/\mu_k)\mathrm{I}$ 這一項有助於確保迭代矩陣也是可逆的 – 即使 Jacobian $A(x)$ 為 rank deficient。另一方面，當 μ_k 較小時，(17) 表明通過二次懲罰方法計算的步進量並不滿足限制的線性化方程而可能使迭代不會朝著可行區域取得顯著進展，導致計算效率低下。此外，如果 $\{\mu_k\}$ 不能足夠快地趨近於 ∞，我們就會失去當線性化是 exact 時發生的超線性速率的可能性；請參見第 18 章。

§17.1 The Quadratic Penalty Method

總結來說，(17) 式使我們可以將二次懲罰方法視為對懲罰函數 $Q(\cdot;\mu_k)$ 的無限制優化應用，也可以視為第 18 章中討論的 SQP 方法的變形。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

有些懲罰函數是 exact，意思是對於某些（夠大的）懲罰參數的選擇，找 x 將其之最小化可以得到原非線性規劃問題的 exact solution。Exact 懲罰法的性能不太依賴於更新懲罰參數的策略。§17.1 中的二次懲罰函數並非 exact，因為給定任意正值 μ 其 minimizer 通常不會是非線性規劃的解。在這一節中我們討論在許多實際情況下已被證明是有用的非光滑的 exact 懲罰函數。

一個常見的用於一般非線性規劃問題 (5) 的非光滑懲罰函數是由 ℓ_1 懲罰函數定義的，表示為

$$\phi_1(x;\mu) = f(x) + \mu \sum_{i\in\mathcal{E}} |c_i(x)| + \mu \sum_{i\in\mathcal{I}} [c_i(x)]^-, \tag{18}$$

其中我們再次使用符號 $[y]^-$ 來表示 $\max\{-y,0\}$。它的名稱源於懲罰項是限制違反度量的 ℓ_1 範數的 μ 倍。請注意，由於絕對值和 $[\cdot]^-$ 函數的存在，$\phi_1(x;\mu)$ 在某些 x 上是不可微的。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

有些懲罰函數是 exact，意思是對於某些（夠大的）懲罰參數的選擇，找 x 將其之最小化可以得到原非線性規劃問題的 exact solution。Exact 懲罰法的性能不太依賴於更新懲罰參數的策略。§17.1 中的二次懲罰函數並非 exact，因為給定任意正值 μ 其 minimizer 通常不會是非線性規劃的解。在這一節中我們討論在許多實際情況下已被證明是有用的非光滑的 exact 懲罰函數。

一個常見的用於一般非線性規劃問題 (5) 的非光滑懲罰函數是由 ℓ_1 懲罰函數定義的，表示為

$$\phi_1(x;\mu) = f(x) + \mu \sum_{i\in\mathcal{E}} |c_i(x)| + \mu \sum_{i\in\mathcal{I}} [c_i(x)]^-, \tag{18}$$

其中我們再次使用符號 $[y]^-$ 來表示 $\max\{-y, 0\}$。它的名稱源於懲罰項是限制違反度量的 ℓ_1 範數的 μ 倍。請注意，由於絕對值和 $[\cdot]^-$ 函數的存在，$\phi_1(x;\mu)$ 在某些 x 上是不可微的。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

下面的結果確定了 ℓ_1 懲罰函數的 exactness。

Theorem

*Suppose that x_* is a **strict** local solution of the nonlinear programming Problem (5) at which the first-order necessary conditions (KKT conditions) are satisfied, with Lagrange multipliers λ_i^*, $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$. Then x_* is a local minimizer of $\phi_1(\cdot;\mu)$ for all $\mu > \mu_*$, where*

$$\mu_* = \|\lambda_*\|_\infty = \max_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \left|\lambda_i^*\right|. \tag{19}$$

If, in addition, the second-order sufficient conditions of Theorem 12.6 hold and $\mu > \mu_*$, then x_* is a strict local minimizer of $\phi_1(\cdot;\mu)$.

粗略地說，由解 x_* 處移動到不可行區域的行為都會受到足夠嚴厲的處罰，以至於導致懲罰函數增加到大於 $\phi_1(x_*;\mu) = f(x_*)$ 的值，從而強迫 $\phi_1(\cdot;\mu)$ 的 minimizer 位於 x_* 處。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

下面的結果確定了 ℓ_1 懲罰函數的 exactness。

Theorem

*Suppose that x_* is a **strict** local solution of the nonlinear programming Problem (5) at which the first-order necessary conditions (KKT conditions) are satisfied, with Lagrange multipliers λ_i^*, $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$. Then x_* is a local minimizer of $\phi_1(\cdot;\mu)$ for all $\mu > \mu_*$, where*

$$\mu_* = \|\lambda_*\|_\infty = \max_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \left|\lambda_i^*\right|. \tag{19}$$

If, in addition, the second-order sufficient conditions of Theorem 12.6 hold and $\mu > \mu_*$, then x_* is a strict local minimizer of $\phi_1(\cdot;\mu)$.

粗略地說，由解 x_* 處移動到不可行區域的行為都會受到足夠嚴厲的處罰，以至於導致懲罰函數增加到大於 $\phi_1(x_*;\mu) = f(x_*)$ 的值，從而強迫 $\phi_1(\cdot;\mu)$ 的 minimizer 位於 x_* 處。

Theorem 12.6 – Second-Order Conditions

Theorem (Second-Order Sufficient Conditions)

Suppose that for some feasible point $x_* \in \mathbb{R}^n$ there is a Lagrange multiplier vector λ_* such that the KKT conditions

$$
\begin{aligned}
\nabla_x \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) &= 0\,, && && (32a)_{12}\\
c_i(x_*) &= 0 && \text{for all } i \in \mathcal{E}, && (32b)_{12}\\
c_i(x_*) &\geqslant 0 && \text{for all } i \in \mathcal{I}, && (32c)_{12}\\
\lambda_i^* &\geqslant 0 && \text{for all } i \in \mathcal{I}, && (32d)_{12}\\
\lambda_i^* c_i(x_*) &= 0 && \text{for all } i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}. && (32e)_{12}
\end{aligned}
$$

are satisfied. Suppose also that

$$w^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w > 0 \quad \text{for all } w \in \mathcal{C}(x_*, \lambda_*) \backslash \{0\}\,. \qquad (60)_{12}$$

Then x_* is a strict local solution for

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{subject to} \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}\,, \\ c_i(x) \geqslant 0, i \in \mathcal{I}\,. \end{cases} \qquad (1)_{12}$$

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

接下來我們證明一個關於 ℓ_1 懲罰函數是 exact 的較弱的版本：我們僅證明 μ_* 的存在性但不證明其為 Lagrange 乘子向量的 ℓ_∞ 範數。

首先我們回顧 MFCQ 條件並證明其一個等價表述。

Definition (MFCQ)

We say that the Mangasarian-Fromovitz constraint qualification (MFCQ) holds at x_* if there exists a vector $w \in \mathbb{R}^n$ such that

$$\begin{aligned} \nabla c_i(x_*)^{\mathrm{T}} w > 0 \quad & \text{for all } i \in \mathcal{A}(x_*) \cap \mathcal{I}, \\ \nabla c_i(x_*)^{\mathrm{T}} w = 0 \quad & \text{for all } i \in \mathcal{E}, \end{aligned}$$

and the set of **equality** constraint gradients $\{\nabla c_i(x_*) \,|\, i \in \mathcal{E}\}$ is linearly independent.

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

接下來我們證明一個關於 ℓ_1 懲罰函數是 exact 的較弱的版本：我們僅證明 μ_* 的存在性但不證明其為 Lagrange 乘子向量的 ℓ_∞ 範數。

首先我們回顧 MFCQ 條件並證明其一個等價表述。

Definition (MFCQ)

We say that the Mangasarian-Fromovitz constraint qualification (MFCQ) holds at x_* if there exists a vector $w \in \mathbb{R}^n$ such that

$$\begin{aligned} \nabla c_i(x_*)^{\mathrm{T}} w > 0 \quad &\text{for all } i \in \mathcal{A}(x_*) \cap \mathcal{I}, \\ \nabla c_i(x_*)^{\mathrm{T}} w = 0 \quad &\text{for all } i \in \mathcal{E}, \end{aligned}$$

and the set of **equality** constraint gradients $\{\nabla c_i(x_*) \,|\, i \in \mathcal{E}\}$ is linearly independent.

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Lemma (Equivalence of MFCQ)

The MFCQ holds at $\bar{x}$ if and only if there exists an open neighborhood $\mathcal{N} \equiv B(\bar{x}, \delta)$ such that for all bounded function $b : \mathcal{N} \to \mathbb{R}^{|\mathcal{E}|}$ there exists bounded function $d : \mathcal{N} \to \mathbb{R}^n$ such that for all $x \in \mathcal{N}$,

$$\begin{aligned} \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x) &\geqslant 1 && \text{for all } i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I}, \\ \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x) &= b_i(x) && \text{for all } i \in \mathcal{E}. \end{aligned}$$

Proof.

It suffices to show the direction " $\Rightarrow$ ".

Choose $u_1, \cdots, u_{n-|\mathcal{E}|} \in \mathbb{R}^n$ (if necessary) such that the $n \times n$ matrix

$$A(x) \equiv \Big[\big[\nabla c_i(x) \big]_{i \in \mathcal{E}} \vdots u_1 \vdots \cdots \vdots u_{n-|\mathcal{E}|} \Big]^{\mathrm{T}}$$

is non-singular at $x = \bar{x}$. Then there exists $\delta > 0$ such that $A(x)$ is non-singular and $\|A(x)^{-1}\| \leqslant M < \infty$ for all $x \in \mathcal{N} \equiv B(\bar{x}, \delta)$. □

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Lemma (Equivalence of MFCQ)

The MFCQ holds at $\bar{x}$ if and only if there exists an open neighborhood $\mathcal{N} \equiv B(\bar{x}, \delta)$ such that for all bounded function $b : \mathcal{N} \to \mathbb{R}^{|\mathcal{E}|}$ there exists bounded function $d : \mathcal{N} \to \mathbb{R}^n$ such that for all $x \in \mathcal{N}$,

$$\begin{aligned} \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x) &\geqslant 1 && \text{for all } i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I}, \\ \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x) &= b_i(x) && \text{for all } i \in \mathcal{E}. \end{aligned}$$

Proof.

It suffices to show the direction " $\Rightarrow$ ".

Choose $u_1, \cdots, u_{n-|\mathcal{E}|} \in \mathbb{R}^n$ (if necessary) such that the $n \times n$ matrix

$$A(x) \equiv \Big[\big[\nabla c_i(x)\big]_{i\in\mathcal{E}} \vdots u_1 \vdots \cdots \vdots u_{n-|\mathcal{E}|} \Big]^{\mathrm{T}}$$

is non-singular at $x = \bar{x}$. Then there exists $\delta > 0$ such that $A(x)$ is non-singular and $\|A(x)^{-1}\| \leqslant M < \infty$ for all $x \in \mathcal{N} \equiv B(\bar{x}, \delta)$. $\square$

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Since the MFCQ holds at $\bar{x}$, there exists $w \in \mathbb{R}^n$ satisfying

$$\begin{aligned} \nabla c_i(\bar{x})^{\mathrm{T}} w > 0 & \quad \text{for all } i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I}, \\ \nabla c_i(\bar{x})^{\mathrm{T}} w = 0 & \quad \text{for all } i \in \mathcal{E}, \end{aligned}$$

Let $c = \left[0, \cdots, 0, u_1^{\mathrm{T}} w, \cdots, u_{n-|\mathcal{E}|}^{\mathrm{T}} w\right]^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^n$ and $w(x) = A(x)^{-1} c$. Then $w(\bar{x}) = w$ and w is bounded, continuous on $\mathcal{N}$. Define

$$\gamma = \min \left\{ \nabla c_i(\bar{x})^{\mathrm{T}} w \,\middle|\, i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I} \right\}.$$

Then $\gamma > 0$. By the continuity of ∇c_i and w, W.L.O.G. we can assume that

$$\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} w(x) \geq \frac{\gamma}{2} \qquad \forall\, x \in \mathcal{N} \text{ and } i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I}.$$

Moreover, we have $\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} w(x) = 0$ for $i \in \mathcal{E}$. □

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Since the MFCQ holds at $\bar{x}$, there exists $w \in \mathbb{R}^n$ satisfying

$$\begin{aligned} \nabla c_i(\bar{x})^{\mathrm{T}} w > 0 \quad & \text{for all } i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I}, \\ \nabla c_i(\bar{x})^{\mathrm{T}} w = 0 \quad & \text{for all } i \in \mathcal{E}, \end{aligned}$$

Let $c = \left[0, \cdots, 0, u_1^{\mathrm{T}} w, \cdots, u_{n-|\mathcal{E}|}^{\mathrm{T}} w\right]^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^n$ and $w(x) = A(x)^{-1} c$. Then $w(\bar{x}) = w$ and w is bounded, continuous on $\mathcal{N}$. Define

$$\gamma = \min \left\{ \nabla c_i(\bar{x})^{\mathrm{T}} w \,\middle|\, i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I} \right\}.$$

Then $\gamma > 0$. By the continuity of ∇c_i and w, W.L.O.G. we can assume that

$$\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} w(x) \geqslant \frac{\gamma}{2} \qquad \forall\, x \in \mathcal{N} \text{ and } i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I}.$$

Moreover, we have $\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} w(x) = 0$ for $i \in \mathcal{E}$. $\square$

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Let $b : \mathcal{N} \to \mathbb{R}^{|\mathcal{E}|}$ be a bounded function. Define

$$\bar{b}(x) = \begin{bmatrix} b(x) \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

and $y(x) = A(x)^{-1}\bar{b}(x)$. Then y is bounded on $\mathcal{N}$, and

$$\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} y(x) = b_i(x) \quad \forall\, i \in \mathcal{E}.$$

Let

$$d(x) = \frac{2(1+\lambda)}{\gamma} w(x) + y(x),$$

where $\lambda = \max\limits_{i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I}} \sup\limits_{x \in \mathcal{N}} \big|\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} y(x)\big|$. Then d is bounded on $\mathcal{N}$ and satisfies the desired properties. □

Remark: 注意到我們可將此定理中的 δ 挑得更小一點使得性質 "$c_i(x) > 0$ for all $x \in \mathcal{N}$ and $i \in \mathcal{I} \backslash \mathcal{A}(\bar{x})$" 同時被滿足。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Let $b : \mathcal{N} \to \mathbb{R}^{|\mathcal{E}|}$ be a bounded function. Define

$$\bar{b}(x) = \begin{bmatrix} b(x) \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

and $y(x) = A(x)^{-1}\bar{b}(x)$. Then y is bounded on $\mathcal{N}$, and

$$\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} y(x) = b_i(x) \quad \forall\, i \in \mathcal{E}.$$

Let

$$d(x) = \frac{2(1+\lambda)}{\gamma} w(x) + y(x),$$

where $\lambda = \max\limits_{i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I}} \sup\limits_{x \in \mathcal{N}} \left|\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} y(x)\right|$. Then d is bounded on $\mathcal{N}$ and satisfies the desired properties. □

Remark: 注意到我們可將此定理中的 δ 挑得更小一點使得性質 "$c_i(x) > 0$ for all $x \in \mathcal{N}$ and $i \in \mathcal{I} \backslash \mathcal{A}(\bar{x})$" 同時被滿足。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

在以下討論中，數個定理中的懲罰函數具備以下形式：

$$P(x;\mu) = f(x) + \mu\psi(\|c(x)\|)\,, \tag{20}$$

其中 c 是定義為

$$c(x) = \Big[[c_i(x)]_{i\in\mathcal{E}}, \big[[c_i(x)]^-\big]_{i\in\mathcal{I}}\Big]^{\mathrm{T}}$$

的向量值函數，且 $\|\cdot\|$ 是某個選定的範數。函數 ψ 被假設滿足以下性質：

1. $\psi(0) = 0$;
2. $\psi(t) > 0$ if $t > 0$;
3. $0 < \psi'(0^+) \equiv \lim\limits_{t\to 0^+} \dfrac{\psi(t)-\psi(0)}{t} < \infty$.

注意到 ℓ_1 懲罰函數 ϕ_1 以及在第 15 章中提到的 ℓ_2 exact merit function ϕ_2 即是在 $\psi(t) = t$ 且範數 $\|\cdot\|$ 分別被取為 $\|\cdot\|_1$ 及 $\|\cdot\|_2$ 而得。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Theorem

Let $\|\cdot\|_\alpha$ and $\|\cdot\|_\beta$ denote two vector norms in $\mathbb{R}^{|\mathcal{E}|+|\mathcal{I}|}$ and let the corresponding exact penalty functions defined by (20) be denoted by P_α and P_β with ψ satisfying the assumptions given below (20). If there exist $\bar{x}$ in $\mathbb{R}^n$, $\mu_\alpha^* > 0$ and a neighborhood $\mathcal{N}_\alpha$ of $\bar{x}$ containing some feasible point of Problem (5) such that $\{c_i\}_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}$ are continuous on $\mathcal{N}_\alpha$ and

$$P_\alpha(\bar{x};\mu) \leqslant P_\alpha(x;\mu) \quad \forall\, x \in \mathcal{N}_\alpha \text{ and } \mu \geqslant \mu_\alpha^*,$$

then there exist $\mu_\beta^* > 0$ and a neighborhood $\mathcal{N}_\beta$ of $\bar{x}$ containing some feasible point of Problem (5) such that

$$P_\beta(\bar{x};\mu) \leqslant P_\beta(x;\mu) \quad \forall\, x \in \mathcal{N}_\beta \text{ and } \mu \geqslant \mu_\beta^*,$$

where

$$\mu_\beta^* = \frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon}\,\frac{P_\alpha'(0^+)\mu_\alpha^*}{P_\beta'(0^+)\nu_{\alpha\beta}} \quad \forall\, \varepsilon(0,1)$$

in which $\nu_{\alpha\beta} \in \mathbb{R}^+$ satisfies $\nu_{\alpha\beta}\|y\|_\alpha \leqslant \|y\|_\beta$ for all $y \in \mathbb{R}^{|\mathcal{E}|+|\mathcal{I}|}$.

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Theorem

Let $\|\cdot\|_\alpha$ *and* $\|\cdot\|_\beta$ *denote two vector norms in* $\mathbb{R}^{|\mathcal{E}|+|\mathcal{I}|}$ *and let the corresponding exact penalty functions defined by* (20) *be denoted by* P_α *and* P_β *with* ψ *satisfying the assumptions given below* (20). *If there exist* $\bar{x}$ *in* $\mathbb{R}^n$, $\mu_\alpha^* > 0$ *and a neighborhood* $\mathcal{N}_\alpha$ *of* $\bar{x}$ *containing some feasible point of Problem* (5) *such that* $\{c_i\}_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}$ *are continuous on* $\mathcal{N}_\alpha$ *and*

$$P_\alpha(\bar{x};\mu) \leqslant P_\alpha(x;\mu) \quad \forall\, x \in \mathcal{N}_\alpha \text{ and } \mu \geqslant \mu_\alpha^*,$$

then there exist $\mu_\beta^* > 0$ *and a neighborhood* $\mathcal{N}_\beta$ *of* $\bar{x}$ *containing some feasible point of Problem* (5) *such that*

$$P_\beta(\bar{x};\mu) \leqslant P_\beta(x;\mu) \quad \forall\, x \in \mathcal{N}_\beta \text{ and } \mu \geqslant \mu_\beta^*,$$

where

$$\mu_\beta^* = \frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon}\,\frac{P_\alpha'(0^+)\mu_\alpha^*}{P_\beta'(0^+)\nu_{\alpha\beta}} \quad \forall\, \varepsilon(0,1)$$

in which $\nu_{\alpha\beta} \in \mathbb{R}^+$ *satisfies* $\nu_{\alpha\beta}\|y\|_\alpha \leqslant \|y\|_\beta$ *for all* $y \in \mathbb{R}^{|\mathcal{E}|+|\mathcal{I}|}$.

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

上述定理用於建立一般滿足前述性質的懲罰函數的 exactness：一旦有辦法一個該類型的懲罰函數為 exact，則所有該類型的懲罰函數也都是 exact。因此，我們接下來聚焦於證明 ℓ_1 懲罰函數為 exact 即可：一旦我們證明了 ϕ_1 是 exact，則 ϕ_2 等很多懲罰函數也亦為 exact。

此定理的證明請參見 [165]。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Lemma

*Let f and $\{c_i\}_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}$ be continuous functions, and $\bar{x}$ be a **strict** local solution $\bar{x}$ of Problem (5). Then there exist $\mu_* \geqslant 0$ and functions $\epsilon : [\mu_*, \infty) \to \mathbb{R}^+$ and $x : [\mu_*, \infty) \to \mathbb{R}^n$ such that*

1. $x(\mu) \in B(\bar{x}, \epsilon(\mu))$ *for any* $\mu \geqslant \mu_*$.
2. $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$.
3. $P(x(\mu); \mu) \leqslant P(x; \mu)$ *for all* $x \in B(\bar{x}, \epsilon(\mu))$ *and* $\mu \geqslant \mu_*$.

Proof.

Let Ω denote the feasible set of Problem (5). By the continuity of c_i, Ω is closed.

Since $\bar{x}$ is a strict local solution of Problem (5), there exists $\bar{\delta} > 0$ such that $f(x) > f(\bar{x})$ for all $x \in B(\bar{x}, \bar{\delta}) \cap \Omega \backslash \{\bar{x}\}$. Then

$$\min_{\partial B(\bar{x},\delta)\cap\Omega} f(x) > f(\bar{x}) \quad \forall\, 0 < \delta < \bar{\delta}.$$

□

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Lemma

*Let f and $\{c_i\}_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}$ be continuous functions, and $\bar{x}$ be a **strict** local solution $\bar{x}$ of Problem (5). Then there exist $\mu_* \geqslant 0$ and functions $\epsilon : [\mu_*, \infty) \to \mathbb{R}^+$ and $x : [\mu_*, \infty) \to \mathbb{R}^n$ such that*

1. $x(\mu) \in B(\bar{x}, \epsilon(\mu))$ *for any* $\mu \geqslant \mu_*$.
2. $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$.
3. $P(x(\mu); \mu) \leqslant P(x; \mu)$ *for all* $x \in B(\bar{x}, \epsilon(\mu))$ *and* $\mu \geqslant \mu_*$.

Proof.

Let Ω denote the feasible set of Problem (5). By the continuity of c_i, Ω is closed.

Since $\bar{x}$ is a strict local solution of Problem (5), there exists $\bar{\delta} > 0$ such that $f(x) > f(\bar{x})$ for all $x \in B(\bar{x}, \bar{\delta}) \cap \Omega\backslash\{\bar{x}\}$. Then

$$\min_{\partial B(\bar{x},\delta)\cap\Omega} f(x) > f(\bar{x}) \quad \forall\, 0 < \delta < \bar{\delta}.$$

□

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Lemma

*Let f and $\{c_i\}_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}$ be continuous functions, and $\bar{x}$ be a **strict** local solution $\bar{x}$ of Problem (5). Then there exist $\mu_* \geqslant 0$ and functions $\epsilon : [\mu_*, \infty) \to \mathbb{R}^+$ and $x : [\mu_*, \infty) \to \mathbb{R}^n$ such that*

1. $x(\mu) \in B(\bar{x}, \epsilon(\mu))$ *for any* $\mu \geqslant \mu_*$.
2. $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$.
3. $P(x(\mu); \mu) \leqslant P(x; \mu)$ *for all* $x \in B(\bar{x}, \epsilon(\mu))$ *and* $\mu \geqslant \mu_*$.

Proof.

Let Ω denote the feasible set of Problem (5). By the continuity of c_i, Ω is closed.

Since $\bar{x}$ is a strict local solution of Problem (5), there exists $\bar{\delta} > 0$ such that $f(x) > f(\bar{x})$ for all $x \in B(\bar{x}, \bar{\delta}) \cap \Omega \backslash \{\bar{x}\}$. Then

$$\min_{\partial B(\bar{x},\delta)\cap\Omega} f(x) > f(\bar{x}) \quad \forall\, 0 < \delta < \bar{\delta}.$$

□

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

For $\nu > 0$, define two sets

$$\mathcal{H}(\nu) = \{x \in \partial B(\bar{x}, \delta) \,|\, h(x) \geqslant 1/\nu\},$$
$$\mathcal{F}(\nu) = \{x \in \partial B(\bar{x}, \delta) \,|\, f(x) - f(\bar{x}) \geqslant 1/\nu\}.$$

where $h(x) \equiv \psi(\|c(x)\|)$ (so that $P(x;\mu) = f(x) + \mu h(x)$).

Claim 1: For each $0 < \delta < \bar{\delta}$ there exists $\nu(\delta) > 0$ such that $\mathcal{H}(\nu) \cup \mathcal{F}(\nu) = \partial B(\bar{x}, \delta)$ for all $\nu \geqslant \nu(\delta)$.

Suppose the contrary that there exist $\nu_k \nearrow \infty$ and $x_k \in \partial B(\bar{x}, \delta)$ such that $h(x_k) < 1/\nu_k$ and $f(x) - f(\bar{x}) < 1/\nu_k$. The compactness of $\partial B(\bar{x}, \delta)$ provides a convergent subsequence $\{x_{k_j}\}$ of $\{x_k\}$ with limit $\tilde{x} \in \partial B(\bar{x}, \delta)$. By the continuity of f and h, we find that $h(\tilde{x}) \leqslant 0$ and $f(\tilde{x}) - f(\bar{x}) \leqslant 0$. The fact that $h(\tilde{x}) \leqslant 0$ implies that $\tilde{x} \in \Omega$, a contradiction to that $\displaystyle\min_{\partial B(\bar{x},\delta)\cap\Omega} f(x) > f(\bar{x})$ for all $0 < \delta < \bar{\delta}$. □

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

For $\nu > 0$, define two sets

$$\mathcal{H}(\nu) = \{x \in \partial B(\bar{x}, \delta) \,|\, h(x) \geqslant 1/\nu\},$$
$$\mathcal{F}(\nu) = \{x \in \partial B(\bar{x}, \delta) \,|\, f(x) - f(\bar{x}) \geqslant 1/\nu\}.$$

where $h(x) \equiv \psi(\|c(x)\|)$ (so that $P(x;\mu) = f(x) + \mu h(x)$).

Claim 1: For each $0 < \delta < \bar{\delta}$ there exists $\nu(\delta) > 0$ such that $\mathcal{H}(\nu) \cup \mathcal{F}(\nu) = \partial B(\bar{x}, \delta)$ for all $\nu \geqslant \nu(\delta)$.

Suppose the contrary that there exist $\nu_k \nearrow \infty$ and $x_k \in \partial B(\bar{x}, \delta)$ such that $h(x_k) < 1/\nu_k$ and $f(x) - f(\bar{x}) < 1/\nu_k$. The compactness of $\partial B(\bar{x}, \delta)$ provides a convergent subsequence $\{x_{k_j}\}$ of $\{x_k\}$ with limit $\tilde{x} \in \partial B(\bar{x}, \delta)$. By the continuity of f and h, we find that $h(\tilde{x}) \leqslant 0$ and $f(\tilde{x}) - f(\bar{x}) \leqslant 0$. The fact that $h(\tilde{x}) \leqslant 0$ implies that $\tilde{x} \in \Omega$, a contradiction to that $\min\limits_{\partial B(\bar{x},\delta)\cap\Omega} f(x) > f(\bar{x})$ for all $0 < \delta < \bar{\delta}$. $\square$

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Define $\mu(\delta) = \nu(\delta)\Big[1 + |f(\bar{x})| + \max\limits_{x\in\partial B(\bar{x},\delta)} |f(x)|\Big]$. Then $\mu(\delta) > 0$.

Claim 2: For each $0 < \delta < \bar{\delta}$, $P(\bar{x};\mu) < P(x;\mu)$ for all $\mu \geqslant \mu(\delta)$ and $x \in \partial B(\bar{x},\delta)$.

Let $\mu \geqslant \mu(\delta)$ and $x \in \partial B(\bar{x},\delta) \overset{\text{"by claim 1"}}{=} \mathcal{H}(\nu(\delta)) \cup \mathcal{F}(\nu(\delta))$.

1. The case $x \in \mathcal{H}(\nu(\delta))$: Then $h(x) \geqslant 1/\nu(\delta)$; thus
$$\begin{aligned} P(x;\mu) - P(\bar{x};\mu) &= f(x) - f(\bar{x}) + \mu\big[h(x) - h(\bar{x})\big] \\ &\geqslant \frac{1}{\nu(\delta)}\Big[\mu - \nu(\delta)\Big(|f(\bar{x})| + \max_{x\in\partial B(\bar{x},\delta)} |f(x)|\Big)\Big] \end{aligned}$$
which is positive since $\mu \geqslant \mu(\delta)$.
2. The case $x \in \mathcal{F}(\nu(\delta))$: Then $f(x) - f(\bar{x}) \geqslant 1/\nu(\delta)$; thus
$$\begin{aligned} P(x;\mu) - P(\bar{x};\mu) &= f(x) - f(\bar{x}) + \mu\big[h(x) - h(\bar{x})\big] \\ &\geqslant 1/\nu(\delta) + \mu h(x) > 0. \end{aligned}$$
□

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Define $\mu(\delta) = \nu(\delta)\Big[1 + |f(\bar{x})| + \max\limits_{x\in\partial B(\bar{x},\delta)} |f(x)|\Big]$. Then $\mu(\delta) > 0$.

Claim 2: For each $0 < \delta < \bar{\delta}$, $P(\bar{x};\mu) < P(x;\mu)$ for all $\mu \geqslant \mu(\delta)$ and $x \in \partial B(\bar{x},\delta)$.

Let $\mu \geqslant \mu(\delta)$ and $x \in \partial B(\bar{x},\delta) \overset{\text{"by claim 1"}}{=} \mathcal{H}(\nu(\delta)) \cup \mathcal{F}(\nu(\delta))$.

1. The case $x \in \mathcal{H}(\nu(\delta))$: Then $h(x) \geqslant 1/\nu(\delta)$; thus
$$\begin{aligned} P(x;\mu) - P(\bar{x};\mu) &= f(x) - f(\bar{x}) + \mu\big[h(x) - h(\bar{x})\big] \\ &\geqslant \frac{1}{\nu(\delta)}\Big[\mu - \nu(\delta)\Big(|f(\bar{x})| + \max_{x\in\partial B(\bar{x},\delta)} |f(x)|\Big)\Big] \end{aligned}$$
which is positive since $\mu \geqslant \mu(\delta)$.

2. The case $x \in \mathcal{F}(\nu(\delta))$: Then $f(x) - f(\bar{x}) \geqslant 1/\nu(\delta)$; thus
$$\begin{aligned} P(x;\mu) - P(\bar{x};\mu) &= f(x) - f(\bar{x}) + \mu\big[h(x) - h(\bar{x})\big] \\ &\geqslant 1/\nu(\delta) + \mu h(x) > 0. \end{aligned}$$

□

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Define $\mu(\delta) = \nu(\delta)\Big[1 + |f(\bar{x})| + \max\limits_{x\in\partial B(\bar{x},\delta)} |f(x)|\Big]$. Then $\mu(\delta) > 0$.

Claim 2: For each $0 < \delta < \bar{\delta}$, $P(\bar{x};\mu) < P(x;\mu)$ for all $\mu \geqslant \mu(\delta)$ and $x \in \partial B(\bar{x},\delta)$.

Let $\mu \geqslant \mu(\delta)$ and $x \in \partial B(\bar{x},\delta) \overset{\text{“by claim 1”}}{=} \mathcal{H}(\nu(\delta)) \cup \mathcal{F}(\nu(\delta))$.

1. The case $x \in \mathcal{H}(\nu(\delta))$: Then $h(x) \geqslant 1/\nu(\delta)$; thus
$$\begin{aligned} P(x;\mu) - P(\bar{x};\mu) &= f(x) - f(\bar{x}) + \mu\big[h(x) - h(\bar{x})\big] \\ &\geqslant \frac{1}{\nu(\delta)}\Big[\mu - \nu(\delta)\Big(|f(\bar{x})| + \max_{x\in\partial B(\bar{x},\delta)} |f(x)|\Big)\Big] \end{aligned}$$
which is positive since $\mu \geqslant \mu(\delta)$.
2. The case $x \in \mathcal{F}(\nu(\delta))$: Then $f(x) - f(\bar{x}) \geqslant 1/\nu(\delta)$; thus
$$\begin{aligned} P(x;\mu) - P(\bar{x};\mu) &= f(x) - f(\bar{x}) + \mu\big[h(x) - h(\bar{x})\big] \\ &\geqslant 1/\nu(\delta) + \mu h(x) > 0. \end{aligned}$$

□

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Let $\mu_* = \inf_{0<\delta<\bar{\delta}} \mu(\delta)$. Define $\epsilon : (\mu_*, \infty) \to \mathbb{R}$ by $\epsilon(\mu) = \inf_{\mu(\delta)\leqslant\mu} \delta$.

Claim 3: $\epsilon(\mu) > 0$ for all $\mu > \mu_*$, and $\lim_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$.

Suppose that $\epsilon(\bar{\mu}) = 0$ for some $\bar{\mu} > \mu_*$. Then there exists $\delta_k \searrow 0$ such that $\mu(\delta_k) \leqslant \bar{\mu}$. By the definition of μ, $\nu(\delta_k) \leqslant \bar{\mu}$. By claim 1, there exists $x_k \in \partial B(\bar{x}, \delta_k)$ such that

$$h(x_k) \geqslant 1/\bar{\mu} \quad \text{or} \quad f(x_k) - f(\bar{x}) \geqslant 1/\bar{\mu}.$$

Since $\lim_{k\to\infty} \delta_k = 0$, we have $\lim_{k\to\infty} x_k = \bar{x}$; thus the continuity of h and f implies either $h(\bar{x}) \geqslant 1/\bar{\mu}$ or $0 \geqslant 1/\bar{\mu}$ that are both contradictions. Therefore, $\epsilon(\mu) > 0$ for all $\mu > \mu_*$.

Next we show that $\lim_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$. By the definition of ϵ the function ϵ is decreasing on $(0, \infty)$. Therefore, $\lim_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = \alpha \geqslant 0$ exists. □

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Let $\mu_* = \inf\limits_{0<\delta<\bar{\delta}} \mu(\delta)$. Define $\epsilon : (\mu_*, \infty) \to \mathbb{R}$ by $\epsilon(\mu) = \inf\limits_{\mu(\delta)\leqslant\mu} \delta$.

Claim 3: $\epsilon(\mu) > 0$ for all $\mu > \mu_*$, and $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$.

Suppose that $\epsilon(\bar{\mu}) = 0$ for some $\bar{\mu} > \mu_*$. Then there exists $\delta_k \searrow 0$ such that $\mu(\delta_k) \leqslant \bar{\mu}$. By the definition of μ, $\nu(\delta_k) \leqslant \bar{\mu}$. By claim 1, there exists $x_k \in \partial B(\bar{x}, \delta_k)$ such that

$$h(x_k) \geqslant 1/\bar{\mu} \quad \text{or} \quad f(x_k) - f(\bar{x}) \geqslant 1/\bar{\mu}.$$

Since $\lim\limits_{k\to\infty} \delta_k = 0$, we have $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = \bar{x}$; thus the continuity of h and f implies either $h(\bar{x}) \geqslant 1/\bar{\mu}$ or $0 \geqslant 1/\bar{\mu}$ that are both contradictions. Therefore, $\epsilon(\mu) > 0$ for all $\mu > \mu_*$.

Next we show that $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$. By the definition of ϵ the function ϵ is decreasing on $(0, \infty)$. Therefore, $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = \alpha \geqslant 0$ exists. □

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Let $\mu_* = \inf\limits_{0<\delta<\bar{\delta}} \mu(\delta)$. Define $\epsilon : (\mu_*, \infty) \to \mathbb{R}$ by $\epsilon(\mu) = \inf\limits_{\mu(\delta)\leqslant\mu} \delta$.

Claim 3: $\epsilon(\mu) > 0$ for all $\mu > \mu_*$, and $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$.

Suppose that $\epsilon(\bar{\mu}) = 0$ for some $\bar{\mu} > \mu_*$. Then there exists $\delta_k \searrow 0$ such that $\mu(\delta_k) \leqslant \bar{\mu}$. By the definition of μ, $\nu(\delta_k) \leqslant \bar{\mu}$. By claim 1, there exists $x_k \in \partial B(\bar{x}, \delta_k)$ such that

$$h(x_k) \geqslant 1/\bar{\mu} \quad \text{or} \quad f(x_k) - f(\bar{x}) \geqslant 1/\bar{\mu}.$$

Since $\lim\limits_{k\to\infty} \delta_k = 0$, we have $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = \bar{x}$; thus the continuity of h and f implies either $h(\bar{x}) \geqslant 1/\bar{\mu}$ or $0 \geqslant 1/\bar{\mu}$ that are both contradictions. Therefore, $\epsilon(\mu) > 0$ for all $\mu > \mu_*$.

Next we show that $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$. By the definition of ϵ the function ϵ is decreasing on $(0, \infty)$. Therefore, $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = \alpha \geqslant 0$ exists. □

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Note that the monotonicity of ϵ also shows that

$$\lim_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = \inf_{\mu>0} \epsilon(\mu) = \alpha\,.$$

Suppose that $\alpha > 0$. By the definition of ϵ we have

$$\epsilon\Big(\mu\big(\frac{\alpha}{2}\big)\Big) = \inf_{\mu(\delta)\leqslant\mu(\frac{\alpha}{2})} \delta \leqslant \frac{\alpha}{2}\,;$$

thus $\inf\limits_{\mu>0} \epsilon(\mu) \leqslant \dfrac{\alpha}{2}$, a contradiction. Therefore, $\alpha = 0$.

Suppose that in $B[\bar{x}, \epsilon(\mu)]$ the function P attains its minimum at $x(\mu)$. Since $\mu(\epsilon(\mu)) = \mu\Big(\inf\limits_{\mu(\delta)\leqslant\mu} \delta\Big) \leqslant \mu$, claim 2 implies that

$$P(\bar{x};\mu) < P(x;\mu) \quad \forall\, x \in \partial B(\bar{x},\epsilon(\mu))\,;$$

hence $x(\mu) \in B(\bar{x},\epsilon(\mu))$. Such $x(\mu)$ satisfies that

$$P(x(\mu);\mu) \leqslant P(x;\mu) \quad \forall\, x \in B(\bar{x},\epsilon(\mu))\,.$$

□

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Note that the monotonicity of ϵ also shows that

$$\lim_{\mu\to\infty}\epsilon(\mu) = \inf_{\mu>0}\epsilon(\mu) = \alpha .$$

Suppose that $\alpha > 0$. By the definition of ϵ we have

$$\epsilon\Big(\mu\big(\frac{\alpha}{2}\big)\Big) = \inf_{\mu(\delta)\leqslant\mu(\frac{\alpha}{2})}\delta \leqslant \frac{\alpha}{2};$$

thus $\displaystyle\inf_{\mu>0}\epsilon(\mu) \leqslant \frac{\alpha}{2}$, a contradiction. Therefore, $\alpha = 0$.

Suppose that in $B[\bar{x},\epsilon(\mu)]$ the function P attains its minimum at $x(\mu)$. Since $\mu(\epsilon(\mu)) = \mu\Big(\displaystyle\inf_{\mu(\delta)\leqslant\mu}\delta\Big) \leqslant \mu$, claim 2 implies that

$$P(\bar{x};\mu) < P(x;\mu) \quad \forall\, x \in \partial B(\bar{x},\epsilon(\mu));$$

hence $x(\mu) \in B(\bar{x},\epsilon(\mu))$. Such $x(\mu)$ satisfies that

$$P(x(\mu);\mu) \leqslant P(x;\mu) \quad \forall\, x \in B(\bar{x},\epsilon(\mu)).$$

□

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Theorem

*Let f and c_i be continuously differentiable on a neighborhood of a **strict** local solution $\bar{x}$ of Problem (5) at which the MFCQ holds. Then for each norm $\|\cdot\|$ in $\mathbb{R}^{|\mathcal{E}|+|\mathcal{I}|}$ there exists $\mu_* \geqslant 0$ such that $\bar{x}$ is a local solution of $P(\cdot;\mu)$ for all $\mu \geqslant \mu_*$, where P is defined by (20) with ψ satisfying the assumptions given below (20).*

Proof.

We only prove the case $P = \phi_1$. W.L.O.G. we can assume that $\mathcal{A}(\bar{x})$ is non-empty for otherwise the theorem holds trivially. Let $\bar{x}$ be a strict local solution of Problem (5) in the neighborhood $\bar{\mathcal{N}} \equiv B(\bar{x}, \bar{\epsilon})$. By the previous lemma for all sufficiently large μ there exist $\epsilon(\mu)$ and $x(\mu)$ such that $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$ and $x(\mu)$ is a local minimum of $\phi_1(\cdot;\mu)$ in $B(\bar{x}, \epsilon(\mu))$. □

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Theorem

Let f and c_i be continuously differentiable on a neighborhood of a ***strict*** *local solution $\bar{x}$ of Problem (5) at which the MFCQ holds. Then for each norm $\|\cdot\|$ in $\mathbb{R}^{|\mathcal{E}|+|\mathcal{I}|}$ there exists $\mu_* \geqslant 0$ such that $\bar{x}$ is a local solution of $P(\cdot;\mu)$ for all $\mu \geqslant \mu_*$, where P is defined by (20) with ψ satisfying the assumptions given below (20).*

Proof.

We only prove the case $P = \phi_1$. W.L.O.G. we can assume that $\mathcal{A}(\bar{x})$ is non-empty for otherwise the theorem holds trivially. Let $\bar{x}$ be a strict local solution of Problem (5) in the neighborhood $\bar{\mathcal{N}} \equiv B(\bar{x}, \bar{\epsilon})$. By the previous lemma for all sufficiently large μ there exist $\epsilon(\mu)$ and $x(\mu)$ such that $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$ and $x(\mu)$ is a local minimum of $\phi_1(\cdot;\mu)$ in $B(\bar{x}, \epsilon(\mu))$. □

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Theorem

Let f and c_i be continuously differentiable on a neighborhood of a ***strict*** *local solution $\bar{x}$ of Problem (5) at which the MFCQ holds. Then for each norm $\|\cdot\|$ in $\mathbb{R}^{|\mathcal{E}|+|\mathcal{I}|}$ there exists $\mu_* \geqslant 0$ such that $\bar{x}$ is a local solution of $P(\cdot;\mu)$ for all $\mu \geqslant \mu_*$, where P is defined by (20) with ψ satisfying the assumptions given below (20).*

Proof.

We only prove the case $P = \phi_1$. W.L.O.G. we can assume that $\mathcal{A}(\bar{x})$ is non-empty for otherwise the theorem holds trivially. Let $\bar{x}$ be a strict local solution of Problem (5) in the neighborhood $\bar{\mathcal{N}} \equiv B(\bar{x}, \bar{\epsilon})$. By the previous lemma for all sufficiently large μ there exist $\epsilon(\mu)$ and $x(\mu)$ such that $\lim\limits_{\mu\to\infty} \epsilon(\mu) = 0$ and $x(\mu)$ is a local minimum of $\phi_1(\cdot;\mu)$ in $B(\bar{x}, \epsilon(\mu))$. □

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Next we show that for any large enough μ, the corresponding $x(\mu)$ is feasible for Problem (5). Suppose the contrary that there exists $\{\mu_i\}$ with $\mu_i \nearrow \infty$ such that $x(\mu_i)$ is infeasible for Problem (5) for all $i \in \mathbb{N}$.

Let $0 < \delta < \bar{\epsilon}$ be a number given in the MFCQ equivalence theorem and the remark afterward. Consider $b : B(\bar{x}, \delta) \to \mathbb{R}^{|\mathcal{E}|}$ defined by

$$b_i(x) = \begin{cases} -\dfrac{c_i(x)}{|c_i(x)|} & \text{if } c_i(x) \neq 0,\ i \in \mathcal{E}, \\ 0 & \text{if } c_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E}. \end{cases}$$

Then there exists $d : B(\bar{x}, \delta) \to \mathbb{R}^n$ such that for all $x \in B(\bar{x}, \delta)$,

$$\begin{aligned} \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x) &\geqslant 1 && \text{for all } i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I}, \\ \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x) &= b_i(x) && \text{for all } i \in \mathcal{E}. \end{aligned}$$

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Next we show that for any large enough μ, the corresponding $x(\mu)$ is feasible for Problem (5). Suppose the contrary that there exists $\{\mu_i\}$ with $\mu_i \nearrow \infty$ such that $x(\mu_i)$ is infeasible for Problem (5) for all $i \in \mathbb{N}$.

Let $0 < \delta < \bar{\epsilon}$ be a number given in the MFCQ equivalence theorem and the remark afterward. Consider $b : B(\bar{x}, \delta) \to \mathbb{R}^{|\mathcal{E}|}$ defined by

$$b_i(x) = \begin{cases} -\dfrac{c_i(x)}{|c_i(x)|} & \text{if } c_i(x) \neq 0,\ i \in \mathcal{E}, \\ 0 & \text{if } c_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E}. \end{cases}$$

Then there exists $d : B(\bar{x}, \delta) \to \mathbb{R}^n$ such that for all $x \in B(\bar{x}, \delta)$,

$$\begin{aligned} \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x) &\geqslant 1 && \text{for all } i \in \mathcal{A}(\bar{x}) \cap \mathcal{I}, \\ \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x) &= b_i(x) && \text{for all } i \in \mathcal{E}. \end{aligned}$$

□

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Since $\lim\limits_{i\to\infty} \epsilon(\mu_i) = 0$, $x(\mu_i) \in B(\bar{x}, \epsilon(\mu_i)) \subseteq B(\bar{x}, \delta)$ for $i \gg 1$. If $x \in B(\bar{x}, \delta)$ be such an **infeasible** point for Problem (5), then the directional derivative of ϕ_1 at x in direction $d(x)$ is

$$
\begin{aligned}
D(\phi_1(x;\mu), d(x)) &= \nabla f(x)^{\mathrm{T}} d(x) + \mu \sum_{\substack{i\in\mathcal{E}\\ c_i(x)>0}} \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x) \\
&\quad + \mu \sum_{\substack{i\in\mathcal{E}\\ c_i(x)=0}} \left|\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x)\right| + \mu \sum_{\substack{i\in\mathcal{E}\\ c_i(x)<0}} -\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x) \\
&\quad + \mu \sum_{\substack{i\in\mathcal{A}(\bar{x})\cap\mathcal{I}\\ c_i(x)<0}} -\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x) + \mu \sum_{\substack{i\in\mathcal{A}(\bar{x})\cap\mathcal{I}\\ c_i(x)=0}} \left[\nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} d(x)\right]^{-} \\
&\leqslant \nabla f(x)^{\mathrm{T}} d(x) - \mu\,.
\end{aligned}
$$

Therefore, $D\big(\phi_1(x(\mu_i);\mu_i), d(x(\mu_i))\big) < 0$ for μ_i large enough, a contradiction to that $x(\mu_i)$ is a local minimum of $\phi_1(\cdot;\mu_i)$. $\square$

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Therefore, $x(\mu)$ is feasible for Problem (5); thus

$$f(\bar{x}) = \phi_1(\bar{x};\mu) \geqslant \phi_1(x(\mu);\mu) = f(x(\mu))\,.$$

Since $\bar{x}$ is a strict local solution of Problem (5), $\bar{x} = x(\mu)$ and hence $\bar{x}$ is a strict local solution of $\phi_1(\cdot;\mu)$. □

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Example

Consider the following problem in one variable:

$$\min x \quad \text{subject to} \quad x \geqslant 1, \tag{21}$$

whose solution is $x_* = 1$. We have that

$$\phi_1(x;\mu) = x + \mu[x-1]^- = \begin{cases} (1-\mu)x + \mu & \text{if } x \leqslant 1, \\ x & \text{if } x > 1. \end{cases} \tag{22}$$

As can be seen in Figure 3 (in the next page), the penalty function has a minimizer at $x_* = 1$ when $\mu > 1$, but is a monotone increasing function when $\mu < 1$.

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Example (cont'd)

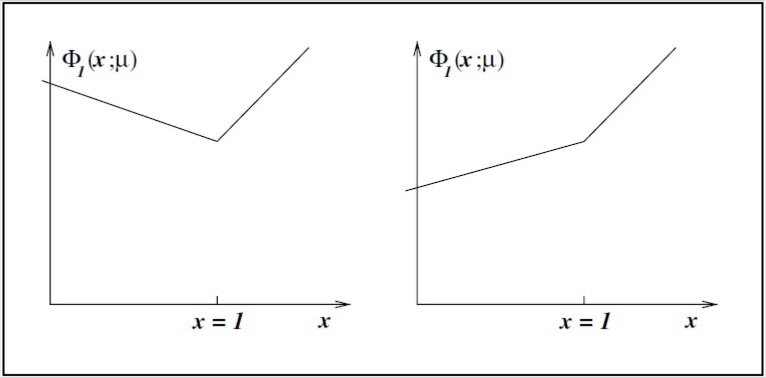

Figure 3: Penalty function for problem (21) with $\mu > 1$ (left) and $\mu < 1$ (right).

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

由於懲罰方法通過直接最小化懲罰函數來工作，我們需要刻劃 ϕ_1 的 stationary point。儘管 ϕ_1 不可微，但它沿著任何方向 p 都有一個方向導數 $D(\phi_1(x;\mu);p)$；參見 (A.51) 和下頁的例子。

Definition

Let $\mu > 0$ be given. A point $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$ is a ***stationary point*** for the penalty function $\phi_1(\cdot;\mu)$ if

$$D(\phi_1(\hat{x};\mu);p) \geqslant 0$$

for all $p \in \mathbb{R}^n$. Similarly, $\hat{x}$ is a stationary point of the measure of infeasibility

$$h(x) = \sum_{i\in\mathcal{E}} |c_i(x)| + \sum_{i\in\mathcal{I}} [c_i(x)]^-$$

if $D(h(\hat{x});p) \geqslant 0$ for all $p \in \mathbb{R}^n$. If a point is infeasible for (5) but stationary with respect to the infeasibility measure h, we say that it is an infeasible stationary point.

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Example

對於前例的受限優化問題

$$\min x \quad \text{subject to} \quad x \geqslant 1, \tag{21}$$

中的 ℓ_1 懲罰函數

$$\phi_1(x;\mu) = x + \mu[x-1]^- = \begin{cases} (1-\mu)x+\mu & \text{if } x \leqslant 1, \\ x & \text{if } x > 1. \end{cases} \tag{22}$$

在解 $x_* = 1$ 我們有

$$D(\phi_1(x_*;\mu);p) = \begin{cases} p & \text{if } p \geqslant 0, \\ (1-\mu)p & \text{if } p < 0; \end{cases}$$

因此當 $\mu > 1$ 時，對於所有實數 p 我們有 $D(\phi_1(x_*;\mu);p) \geqslant 0$。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

以下結果補充了前述定理，它顯示了 $\phi_1(x;\mu)$ 的 stationary point 在某些假設下對應於受限優化問題 (5) 的 KKT 點。

Theorem

Suppose that $\widehat{x}$ is a stationary point of the penalty function $\phi_1(x;\mu)$ for all μ greater than a certain threshold $\widehat{\mu} > 0$. Then, if $\widehat{x}$ is feasible for the nonlinear program (5), it satisfies the KKT conditions $(32)_{12}$ for (5). If $\widehat{x}$ is not feasible for (5), it is an infeasible stationary point.

Proof.

We only prove the first part, and the second part of the proof is left as an exercise.

Suppose first that $\widehat{x}$ is feasible. By the definition (18) of ϕ_1,

$$D(\phi_1(\widehat{x};\mu);p) = \nabla f(\widehat{x})^{\mathrm{T}}p + \mu\sum_{i\in\mathcal{E}}\big|\nabla c_i(\widehat{x})^{\mathrm{T}}p\big| + \mu\sum_{i\in\mathcal{I}\cap\mathcal{A}(\widehat{x})}\big[\nabla c_i(\widehat{x})^{\mathrm{T}}p\big]^{-}.$$

□

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

以下結果補充了前述定理，它顯示了 $\phi_1(x;\mu)$ 的 stationary point 在某些假設下對應於受限優化問題 (5) 的 KKT 點。

Theorem

Suppose that $\hat{x}$ is a stationary point of the penalty function $\phi_1(x;\mu)$ for all μ greater than a certain threshold $\hat{\mu} > 0$. Then, if $\hat{x}$ is feasible for the nonlinear program (5), it satisfies the KKT conditions $(32)_{12}$ for (5). If $\hat{x}$ is not feasible for (5), it is an infeasible stationary point.

Proof.

We only prove the first part, and the second part of the proof is left as an exercise.

Suppose first that $\hat{x}$ is feasible. By the definition (18) of ϕ_1,

$$D(\phi_1(\hat{x};\mu);p) = \nabla f(\hat{x})^{\mathrm{T}} p + \mu \sum_{i\in\mathcal{E}} \left|\nabla c_i(\hat{x})^{\mathrm{T}} p\right| + \mu \sum_{i\in\mathcal{I}\cap\mathcal{A}(\hat{x})} \left[\nabla c_i(\hat{x})^{\mathrm{T}} p\right]^{-}.$$

□

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Proof (cont'd).

Consider any direction p in the linearized feasible direction set $\mathcal{F}(\widehat{x})$. By the properties of $\mathcal{F}(\widehat{x})$, we have

$$\sum_{i\in\mathcal{E}} \left|\nabla c_i(\widehat{x})^{\mathrm{T}} p\right| + \sum_{i\in\mathcal{I}\cap\mathcal{A}(\widehat{x})} \left[\nabla c_i(\widehat{x})^{\mathrm{T}} p\right]^{-} = 0,$$

so that by the stationarity assumption on $\phi_1(\widehat{x};\mu)$, we have

$$0 \leqslant D(\phi_1(\widehat{x};\mu);p) = \nabla f(\widehat{x})^{\mathrm{T}} p \quad \forall\, p \in \mathcal{F}(\widehat{x}).$$

We can now apply Farkas' Lemma (review in the next silde) to deduce that for some coefficients $\widehat{\lambda}_i$ with $\widehat{\lambda}_i \geqslant 0$ for all $i \in \mathcal{I}\cap\mathcal{A}(\widehat{x})$,

$$\nabla f(\widehat{x}) = \sum_{i\in\mathcal{A}(\widehat{x})} \widehat{\lambda}_i \nabla c_i(\widehat{x}).$$

As we noted earlier (see Theorem 12.1), this expression implies that the KKT conditions $(32)_{12}$ hold, as claimed. □

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Lemma (Farkas)

Let $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $C \in \mathbb{R}^{n \times p}$ be given, and K be a set defined by

$$K = \left\{ By + Cw \,\middle|\, y \geqslant 0\,, w \in \mathbb{R}^p \right\}. \qquad (44)_{12}$$

For a given vector $g \in \mathbb{R}^n$, we have either that $g \in K$ or that there exists $d \in \mathbb{R}^n$ satisfying

$$g^{\mathrm{T}} d < 0, \quad B^{\mathrm{T}} d \geqslant 0, \quad C^{\mathrm{T}} d = 0\,, \qquad (45)_{12}$$

*but **not** both.*

Example

Consider again problem (3), for which the ℓ_1 penalty function is

$$\phi_1(x; \mu) = x_1 + x_2 + \mu \left| x_1^2 + x_2^2 - 2 \right|.$$

The minimizer of Problem (3) is $x_* = (-1, -1)^{\mathrm{T}}$ of (3). Following previous theorem, we find that for all $\mu > |\lambda_*| = 0.5$, the minimizer of $\phi_1(x; \mu)$ coincides with x_*.

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Lemma (Farkas)

Let $B \in \mathbb{R}^{n\times m}$, $C \in \mathbb{R}^{n\times p}$ be given, and K be a set defined by

$$K = \left\{ By + Cw \,\middle|\, y \geqslant 0\,, w \in \mathbb{R}^p \right\}. \tag{44}$$

For a given vector $g \in \mathbb{R}^n$, we have either that $g \in K$ or that there exists $d \in \mathbb{R}^n$ satisfying

$$g^{\mathrm{T}}d < 0, \quad B^{\mathrm{T}}d \geqslant 0, \quad C^{\mathrm{T}}d = 0\,, \tag{45}$$

*but **not** both.*

Example

Consider again problem (3), for which the ℓ_1 penalty function is

$$\phi_1(x;\mu) = x_1 + x_2 + \mu\left|x_1^2 + x_2^2 - 2\right|.$$

The minimizer of Problem (3) is $x_* = (-1,-1)^{\mathrm{T}}$ of (3). Following previous theorem, we find that for all $\mu > |\lambda_*| = 0.5$, the minimizer of $\phi_1(x;\mu)$ coincides with x_*.

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

Example (cont'd)

Figure 4 plots the contours of function $\phi_1(\cdot;2)$. The sharp corners on the contours indicate non-smoothness along the boundary of the circle defined by $x_1^2 + x_2^2 = 2$.

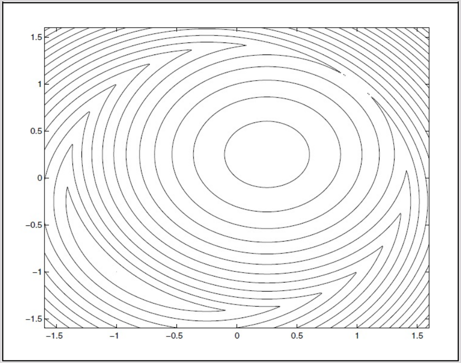

Figure 4: Contours of $\phi_1(x;\mu)$ from (3) for $\mu = 2$, contour spacing 0.5.

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

以上結果為基於 ℓ_1 懲罰函數的算法框架提供了動機，接下來我們介紹該演算法。

Framework 17.2 (Classical ℓ_1 Penalty Method).

Given $\mu_0 > 0$, tolerance $\tau > 0$, starting point x_0^s;
for $k = 0, 1, 2, \cdots$
  Find an approximate minimizer x_k of $\phi_1(x; \mu_k)$, starting at x_k^s;
  if $h(x_k) \leqslant \tau$
    stop with approximate solution x_k;
  end (if)
  Choose new penalty parameter $\mu_{k+1} > \mu_k$;
  Choose new starting point x_{k+1}^s;
end (for)

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

由於函數的非光滑性，對 $\phi_1(\cdot;\mu_k)$ 進行最小化變得困難。然而，我們已經很清楚如何使用 $\phi_1(\cdot;\mu_k)$ 的光滑模型來計算最小化步驟，這與 SQP 方法相似。我們將在下一小節討論這個部份，

更新懲罰參數 μ_k 的最簡單方案是「如果當前值產生的 minimizer 在容忍度 τ 內是可行的，那麼就以一個常數倍數（例如 5 或 10）來增加它」。這種方案在實踐中有時效果很好，但也可能效率低下。如果初始懲罰參數 μ_0 太小，可能需要多個週期的 Framework 17.2 才能確定一個合適的值。此外，在這些初始週期中，迭代可能會遠離解 x_*，在這種情況下，懲罰函數 $\phi_1(x;\mu_k)$ 的最小化應該提前終止，並且 x_k^s 可能應該重置為之前的迭代。另一方面，如果 μ_k 過大，則懲罰函數將很難最小化，可能需要大量的迭代。我們將在下文討論選擇懲罰參數的問題。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

由於函數的非光滑性，對 $\phi_1(\cdot;\mu_k)$ 進行最小化變得困難。然而，我們已經很清楚如何使用 $\phi_1(\cdot;\mu_k)$ 的光滑模型來計算最小化步驟，這與 SQP 方法相似。我們將在下一小節討論這個部份，

更新懲罰參數 μ_k 的最簡單方案是「如果當前值產生的 minimizer 在容忍度 τ 內是可行的，那麼就以一個常數倍數（例如 5 或 10）來增加它」。這種方案在實踐中有時效果很好，但也可能效率低下。如果初始懲罰參數 μ_0 太小，可能需要多個週期的 Framework 17.2 才能確定一個合適的值。此外，在這些初始週期中，迭代可能會遠離解 x_*，在這種情況下，懲罰函數 $\phi_1(x;\mu_k)$ 的最小化應該提前終止，並且 x_k^s 可能應該重置為之前的迭代。另一方面，如果 μ_k 過大，則懲罰函數將很難最小化，可能需要大量的迭代。我們將在下文討論選擇懲罰參數的問題。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

由於函數的非光滑性，對 $\phi_1(\cdot;\mu_k)$ 進行最小化變得困難。然而，我們已經很清楚如何使用 $\phi_1(\cdot;\mu_k)$ 的光滑模型來計算最小化步驟，這與 SQP 方法相似。我們將在下一小節討論這個部份，

更新懲罰參數 μ_k 的最簡單方案是「如果當前值產生的 minimizer 在容忍度 τ 內是可行的，那麼就以一個常數倍數（例如 5 或 10）來增加它」。這種方案在實踐中有時效果很好，但也可能效率低下。如果初始懲罰參數 μ_0 太小，可能需要多個週期的 Framework 17.2 才能確定一個合適的值。此外，在這些初始週期中，迭代可能會遠離解 x_*，在這種情況下，懲罰函數 $\phi_1(x;\mu_k)$ 的最小化應該提前終止，並且 x_k^s 可能應該重置為之前的迭代。另一方面，如果 μ_k 過大，則懲罰函數將很難最小化，可能需要大量的迭代。我們將在下文討論選擇懲罰參數的問題。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

- **A practical ℓ_1 penalty method**

如前所述，$\phi_1(\cdot;\mu)$ 是非光滑的 – 其梯度在任何滿足對某個 $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ 有 $c_i(x) = 0$ 的 x 上是未定義的。相較於使用如 bundle 法 [170] 的非可微優化技術，我們更喜歡考慮到此函數中非可微性質的技術。與無受限優化算法一樣，我們可以通過形成此函數的簡化模型並尋找該模型的 minimizer 來獲得朝向 $\phi_1(\cdot;\mu)$ 的 minimizer 前進的步進量。在此，簡化模型可以通過線性化限制函數 c_i 並將目標函數 f 替換為二次函數來定義，如下所示：

$$
\begin{aligned}
q(p;\mu) = f(x) + \nabla f(x)^{\mathrm{T}} p + \frac{1}{2} p^{\mathrm{T}} W p + \mu \sum_{i\in\mathcal{E}} \left| c_i(x) + \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} p \right| \\
+ \mu \sum_{i\in\mathcal{I}} \left[c_i(x) + \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} p \right]^{-},
\end{aligned}
$$

其中 W 是一個對稱矩陣，通常包含有關 f 和 c_i（$i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$）的二階導數訊息。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

- **A practical ℓ_1 penalty method**

如前所述，$\phi_1(\cdot;\mu)$ 是非光滑的 – 其梯度在任何滿足對某個 $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ 有 $c_i(x) = 0$ 的 x 上是未定義的。相較於使用如 bundle 法 [170] 的非可微優化技術，我們更喜歡考慮到此函數中非可微性質的技術。與無受限優化算法一樣，我們可以通過形成此函數的簡化模型並尋找該模型的 minimizer 來獲得朝向 $\phi_1(\cdot;\mu)$ 的 minimizer 前進的步進量。在此，簡化模型可以通過線性化限制函數 c_i 並將目標函數 f 替換為二次函數來定義，如下所示：

$$q(p;\mu) = f(x) + \nabla f(x)^{\mathrm{T}} p + \frac{1}{2} p^{\mathrm{T}} W p + \mu \sum_{i\in\mathcal{E}} \left| c_i(x) + \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} p \right| + \mu \sum_{i\in\mathcal{I}} \left[c_i(x) + \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} p \right]^{-},$$

其中 W 是一個對稱矩陣，通常包含有關 f 和 c_i（$i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$）的二階導數訊息。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

- **A practical ℓ_1 penalty method**

如前所述，$\phi_1(\cdot;\mu)$ 是非光滑的 – 其梯度在任何滿足對某個 $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ 有 $c_i(x) = 0$ 的 x 上是未定義的。相較於使用如 bundle 法 [170] 的非可微優化技術，我們更喜歡考慮到此函數中非可微性質的技術。與無受限優化算法一樣，我們可以通過形成此函數的簡化模型並尋找該模型的 minimizer 來獲得朝向 $\phi_1(\cdot;\mu)$ 的 minimizer 前進的步進量。在此，簡化模型可以通過線性化限制函數 c_i 並將目標函數 f 替換為二次函數來定義，如下所示：

$$q(p;\mu) = f(x) + \nabla f(x)^{\mathrm{T}} p + \frac{1}{2} p^{\mathrm{T}} W p + \mu \sum_{i\in\mathcal{E}} \left| c_i(x) + \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} p \right| + \mu \sum_{i\in\mathcal{I}} \left[c_i(x) + \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} p \right]^{-},$$

其中 W 是一個對稱矩陣，通常包含有關 f 和 c_i（$i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$）的二階導數訊息。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

模型 $q(p;\mu)$ 是不光滑的，但我們可以通過引入人工變量 r_i、s_i 和 t_i，將優化 q 的問題轉化為如下所示的光滑二次規劃問題：

$$\min_{p,r,s,t} f(x) + \nabla f(x)^{\mathrm{T}} p + \frac{1}{2} p^{\mathrm{T}} W p + \mu \sum_{i\in\mathcal{E}} (r_i + s_i) + \mu \sum_{i\in\mathcal{I}} t_i$$

subject to

$$\begin{aligned} \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} p + c_i(x) &= r_i - s_i, \quad i \in \mathcal{E} \\ \nabla c_i(x)^{\mathrm{T}} p + c_i(x) &\geqslant -t_i, \quad i \in \mathcal{I} \\ r \geqslant 0, s &\geqslant 0, t \geqslant 0. \end{aligned} \tag{23}$$

這個子問題可以用標準的二次規劃 solver 來解決。即使在添加了形式為 $\|p\|_\infty \leqslant \Delta$ 的“盒狀”信任區域限制之後，它仍然是一個二次規劃問題。這種最小化方法與連續二次規劃（SQP）密切相關，將在第 18 章進一步討論。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

選擇和更新懲罰參數 μ_k 的策略對於迭代的實際成功至關重要。我們之前提到過一種簡單（但不總是有效）的方法是選擇一個初始值，並重複增加它直到達到可行性。在該方法的某些變體中，懲罰參數在每次迭代中被選擇為滿足 $\mu_k > \|\lambda_k\|_\infty$ 的一個 μ_k，其中 λ_k 是在 x_k 處估計的 Lagrange 乘子。我們基於前述定理提出了這個策略，該定理表明在解 x_* 的鄰域內，一個好的選擇是將 μ_k 設置為略大於 $\|\lambda_*\|_\infty$。這個策略並不總會成功，因為對乘子的估計可能不準確，而且無論如何都可能不會提供遠離解的 μ_k 的好的適當值。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

在 1990 年代，選擇適當的 μ_k 值的困難導致了非光滑懲罰方法的不受青睞，並促進了 filter 方法的發展，後者不需要選擇懲罰參數（請參見 §15.4）。然而，近年來，由於懲罰方法能夠處理退化問題的能力，對懲罰方法的興趣再次興起。新的懲罰參數更新方法似乎在很大程度上克服了選擇 μ_k 所帶來的困難，至少對於某些特定演算法的實現（參見 Algorithm 18.5）是如此。

對於開始最小化 $\phi_1(\cdot;\mu_{k+1})$ 的起始點 x_{k+1}^s 的選擇也需要仔細考慮。如果對於當前週期的懲罰參數 μ_k 是適當的，即算法朝著可行性取得進展，那麼我們可以將 x_{k+1}^s 設置為在此週期上獲得的 $\phi_1(\cdot;\mu_k)$ 的 minimizer x_k。否則，我們可能希望恢復從較早週期的初始點。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

在 1990 年代，選擇適當的 μ_k 值的困難導致了非光滑懲罰方法的不受青睞，並促進了 filter 方法的發展，後者不需要選擇懲罰參數（請參見 §15.4）。然而，近年來，由於懲罰方法能夠處理退化問題的能力，對懲罰方法的興趣再次興起。新的懲罰參數更新方法似乎在很大程度上克服了選擇 μ_k 所帶來的困難，至少對於某些特定演算法的實現（參見 Algorithm 18.5）是如此。

對於開始最小化 $\phi_1(\cdot;\mu_{k+1})$ 的起始點 x^s_{k+1} 的選擇也需要仔細考慮。如果對於當前週期的懲罰參數 μ_k 是適當的，即算法朝著可行性取得進展，那麼我們可以將 x^s_{k+1} 設置為在此週期上獲得的 $\phi_1(\cdot;\mu_k)$ 的 minimizer x_k。否則，我們可能希望恢復從較早週期的初始點。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

- **A general class of non-smooth penalty methods**

除了可以根據 ℓ_1 範數來定義 exact 非光滑懲罰函數外，也可以根據其它的範數來定義。一般而言，exact 非光滑懲罰函數可以寫成

$$\phi(x;\mu) = f(x) + \mu\psi(\|c(x)\|), \tag{24}$$

其中如前所述 $c(x) = \Big[[c_i(x)]_{i\in\mathcal{E}}, \big[[c_i(x)]^-\big]_{i\in\mathcal{I}}\Big]^{\mathrm{T}}$，而 $\|\cdot\|$ 是 $\mathbb{R}^{|\mathcal{E}|+|\mathcal{I}|}$ 上的一個範數，然後 ψ 滿足

1. $\psi(0) = 0$;
2. $\psi(t) > 0$ if $t > 0$;
3. $0 < \psi'(0^+) \equiv \lim\limits_{t\to 0^+} \dfrac{\psi(t) - \psi(0)}{t} < \infty$.

Framework 17.2 適用於這些懲罰函數中的任何一個。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

在實踐中使用最多的 ψ 是 $\psi(t) = t$ 然後範數是 ℓ_1 範數、ℓ_∞ 範數和 ℓ_2 範數（未平方），亦即

$$\phi(x;\mu) = f(x) + \mu\|c_{\mathcal{E}}(x)\| + \mu\|[c_{\mathcal{I}}(x)]^-\|. \tag{25}$$

對於 ℓ_∞ 範數，可以很容易地找到類似於 (23) 的表述方式。

在本節中針對由 ℓ_1 範數所描述的懲罰函數 ϕ_1 之兩個前述定理，可以推廣到由 (25) 所描述的一般懲罰函數上：

1. 在前述關於 exactness 的定理中只需將不等式 (19) 替換為
$$\mu_* = \|\lambda_*\|_D,$$
其中 $\|\cdot\|_D$ 是 $\|\cdot\|$ 的對偶範數，其定義為
$$\|x\|_D = \sup_{\|y\|=1} x^{\mathrm{T}} y.$$
2. 第二個與 stationary point 和 KKT point 相關的定理則無需修改即可應用。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

在實踐中使用最多的 ψ 是 $\psi(t) = t$ 然後範數是 ℓ_1 範數、ℓ_∞ 範數和 ℓ_2 範數（未平方），亦即

$$\phi(x;\mu) = f(x) + \mu\|c_{\mathcal{E}}(x)\| + \mu\|[c_{\mathcal{I}}(x)]^-\|. \tag{25}$$

對於 ℓ_∞ 範數，可以很容易地找到類似於 (23) 的表述方式。

在本節中針對由 ℓ_1 範數所描述的懲罰函數 ϕ_1 之兩個前述定理，可以推廣到由 (25) 所描述的一般懲罰函數上：

1. 在前述關於 exactness 的定理中只需將不等式 (19) 替換為
$$\mu_* = \|\lambda_*\|_D,$$
其中 $\|\cdot\|_D$ 是 $\|\cdot\|$ 的對偶範數，其定義為
$$\|x\|_D = \sup_{\|y\|=1} x^{\mathrm{T}} y.$$
2. 第二個與 stationary point 和 KKT point 相關的定理則無需修改即可應用。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

以下我們證明到目前為止所考慮的懲罰函數「必須是非光滑的才會是 exact」這個命題。為了簡單起見，我們將注意力限制在僅有一個等式限制 $c_1(x) = 0$ 的情況下，在此情況下懲罰函數形為

$$\phi(x;\mu) = f(x) + \mu g(c_1(x)),$$

其中 $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 是一個滿足 $g(0) = 0$ 的非負函數。

假設 ϕ 是 exact 且 g 是連續可微的。由於 g 在零處有一個 minimizer，我們有 $\nabla g(0) = 0$。如果 x_* 是問題 (5) 的一個可行點，則我們有 $c_1(x_*) = 0$，因此 $\nabla g(c_1(x_*)) = 0$。如果 x_* 是 $\phi(\cdot;\mu)$ 的一個局部 minimizer，則我們有

$$0 = \nabla\phi(x_*;\mu) = \nabla f(x_*) + \mu\nabla c_1(x_*)\nabla g(c_1(x_*)) = \nabla f(x_*).$$

然而，在一般情況下函數 f 的梯度在受限優化問題的解處不為零，因此我們最初假設的 g 是連續可微的假設必然是不正確的，因此 $\phi(\cdot;\mu)$ 不是光滑的。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

以下我們證明到目前為止所考慮的懲罰函數「必須是非光滑的才會是 exact」這個命題。為了簡單起見，我們將注意力限制在僅有一個等式限制 $c_1(x) = 0$ 的情況下，在此情況下懲罰函數形為

$$\phi(x; \mu) = f(x) + \mu g(c_1(x)),$$

其中 $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 是一個滿足 $g(0) = 0$ 的非負函數。

假設 ϕ 是 exact 且 g 是連續可微的。由於 g 在零處有一個 minimizer，我們有 $\nabla g(0) = 0$。如果 x_* 是問題 (5) 的一個可行點，則我們有 $c_1(x_*) = 0$，因此 $\nabla g(c_1(x_*)) = 0$。如果 x_* 是 $\phi(\cdot; \mu)$ 的一個局部 minimizer，則我們有

$$0 = \nabla \phi(x_*; \mu) = \nabla f(x_*) + \mu \nabla c_1(x_*) \nabla g(c_1(x_*)) = \nabla f(x_*).$$

然而，在一般情況下函數 f 的梯度在受限優化問題的解處不為零，因此我們最初假設的 g 是連續可微的假設必然是不正確的，因此 $\phi(\cdot; \mu)$ 不是光滑的。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

以下我們證明到目前為止所考慮的懲罰函數「必須是非光滑的才會是 exact」這個命題。為了簡單起見，我們將注意力限制在僅有一個等式限制 $c_1(x)=0$ 的情況下，在此情況下懲罰函數形為

$$\phi(x;\mu)=f(x)+\mu g(c_1(x)),$$

其中 $g:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ 是一個滿足 $g(0)=0$ 的非負函數。

假設 ϕ 是 exact 且 g 是連續可微的。由於 g 在零處有一個 minimizer，我們有 $\nabla g(0)=0$。如果 x_* 是問題 (5) 的一個可行點，則我們有 $c_1(x_*)=0$，因此 $\nabla g(c_1(x_*))=0$。如果 x_* 是 $\phi(\cdot;\mu)$ 的一個局部 minimizer，則我們有

$$0=\nabla\phi(x_*;\mu)=\nabla f(x_*)+\mu\nabla c_1(x_*)\nabla g(c_1(x_*))=\nabla f(x_*).$$

然而，在一般情況下函數 f 的梯度在受限優化問題的解處不為零，因此我們最初假設的 g 是連續可微的假設必然是不正確的，因此 $\phi(\cdot;\mu)$ 不是光滑的。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

以下我們證明到目前為止所考慮的懲罰函數「必須是非光滑的才會是 exact」這個命題。為了簡單起見，我們將注意力限制在僅有一個等式限制 $c_1(x) = 0$ 的情況下，在此情況下懲罰函數形為

$$\phi(x;\mu) = f(x) + \mu g(c_1(x)),$$

其中 $g\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 是一個滿足 $g(0) = 0$ 的非負函數。

假設 ϕ 是 exact 且 g 是連續可微的。由於 g 在零處有一個 minimizer，我們有 $\nabla g(0) = 0$。如果 x_* 是問題 (5) 的一個可行點，則我們有 $c_1(x_*) = 0$，因此 $\nabla g(c_1(x_*)) = 0$。如果 x_* 是 $\phi(\cdot;\mu)$ 的一個局部 minimizer，則我們有

$$0 = \nabla\phi(x_*;\mu) = \nabla f(x_*) + \mu\nabla c_1(x_*)\nabla g(c_1(x_*)) = \nabla f(x_*).$$

然而，在一般情況下函數 f 的梯度在受限優化問題的解處不為零，因此我們最初假設的 g 是連續可微的假設必然是不正確的，因此 $\phi(\cdot;\mu)$ 不是光滑的。

§17.2 Non-smooth Penalty Functions

非光滑懲罰函數也被用作計算步進量的方法中的 merit 函數，這些方法通常由其他機制計算步進量。有關更多詳細信息，請參閱 §15.4 的一般討論以及第 18 章和第 19 章中給出的具體實現。

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

我們接下來討論一種稱為乘子法 (the method of multipliers) 或增廣 Lagrangian 法 (the augmented Lagrangian method) 的方法。這個演算法與 §17.1 中的二次懲罰算法相關，但通過將 Lagrange 乘子引入到要最小化的函數（即所謂的增廣 Lagrangian）中以減少 ill conditioning 的可能性。與 §17.2 討論的懲罰函數相比，增廣 Lagrangian 在很大程度上保持了平滑性，並且可以從標準的無限制或界限受限 (bound-constrained) 優化套件中構建實現。

在本節中，我們使用上標（通常是 k 和 $k+1$）來表示 Lagrange 乘子估計的迭代 index，並使用下標（通常是 i）來表示向量 λ 的分量 index。對於所有其他變量，我們像往常一樣使用下標表示迭代 index。

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

- **Motivation and algorithmic framework**

首先考慮只有等式限制的受限優化問題 (1)。由 (2) 定義的二次懲罰函數 $Q(\cdot;\mu)$ 通過將不可行性度量平方並乘以 $\mu/2$ 來懲罰限制的違反。然而，從前述定理我們可以看到 $Q(x;\mu_k)$ 的近似 minimizer x_k 並不完全滿足可行性條件 $(\forall\, i \in \mathcal{E})(c_i(x) = 0)$。相反地它們被擾動（參見 (7)）以滿足以下條件：

$$c_i(x_k) \approx -\lambda_i^*/\mu_k \quad \forall\, i \in \mathcal{E}. \tag{26}$$

確實，當 μ_k 趨近於 ∞ 時我們有 $c_i(x_k)$ 趨近於 0，但是我們更希望知道的是「是否可以修改函數 $Q(x;\mu_k)$ 來降低這種系統性的擾動，使其即使對於中等大小的 μ_k，也使近似 minimizer 更接近滿足等式限制 $(\forall\, i \in \mathcal{E})(c_i(x) = 0)$」。

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

- **Motivation and algorithmic framework**

首先考慮只有等式限制的受限優化問題 (1)。由 (2) 定義的二次懲罰函數 $Q(\cdot;\mu)$ 通過將不可行性度量平方並乘以 $\mu/2$ 來懲罰限制的違反。然而，從前述定理我們可以看到 $Q(x;\mu_k)$ 的近似 minimizer x_k 並不完全滿足可行性條件 $(\forall\, i \in \mathcal{E})(c_i(x) = 0)$。相反地它們被擾動（參見 (7)）以滿足以下條件：

$$c_i(x_k) \approx -\lambda_i^*/\mu_k \quad \forall\, i \in \mathcal{E}. \tag{26}$$

確實，當 μ_k 趨近於 ∞ 時我們有 $c_i(x_k)$ 趨近於 0，但是我們更希望知道的是「是否可以修改函數 $Q(x;\mu_k)$ 來降低這種系統性的擾動，使其即使對於中等大小的 μ_k，也使近似 minimizer 更接近滿足等式限制 $(\forall\, i \in \mathcal{E})(c_i(x) = 0)$」。

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

增廣 Lagrangian $\mathcal{L}_A(x,\lambda;\mu)$ 通過在目標函數中包含 Lagrange 乘子 λ 的明確估計（基於估計 (26)）來實現這一目標。根據增廣 Lagrangian 的定義

$$\mathcal{L}_A(x,\lambda;\mu) \equiv f(x) - \sum_{i\in\mathcal{E}} \lambda_i c_i(x) + \frac{\mu}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x) \tag{27}$$

我們可以看出，增廣 Lagrangian 與標準的（針對問題 (1) 的）Lagrangian

$$\mathcal{L}(x,\lambda) = f(x) - \sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}} \lambda_i c_i(x) \tag{31$_{12}$}$$

的不同之處在於存在平方（懲罰）項，而與二次懲罰函數

$$Q(x;\mu) \equiv f(x) + \frac{\mu}{2}\sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x), \tag{2}$$

的不同之處在於包含涉及 λ 的求和項。在這個意義上，它是 Lagrangian 和二次懲罰函數的結合。

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

接下來我們設計一個（與 §17.1 和 §17.2 的框架相同的）演算法，在其第 k 次迭代中將懲罰參數 μ 固定為某個正值 μ_k，將 λ 固定為當前估計值 λ^k，並將增廣 Lagrangian $\mathcal{L}_A(x, \lambda^k; \mu_k)$ 對 x 進行最小化。使用 x_k 表示增廣 Lagrangian $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda^k; \mu_k)$ 的近似 minimizer，根據無受限優化的最優條件，我們有

$$\begin{aligned} 0 &\approx \nabla_x \mathcal{L}_A(x_k, \lambda^k; \mu_k) \\ &= \nabla f(x_k) - \sum_{i \in \mathcal{E}} \left[\lambda_i^k - \mu_k c_i(x_k)\right] \nabla c_i(x_k). \end{aligned}$$

通過與問題 (1) 的最優條件 (13) 進行比較，我們可以推論得到

$$\lambda_i^* \approx \lambda_i^k - \mu_k c_i(x_k) \quad \forall\, i \in \mathcal{E}. \tag{28}$$

重新排列上式，我們得到

$$c_i(x_k) \approx -\frac{1}{\mu_k}(\lambda_i^* - \lambda_i^k) \quad \forall\, i \in \mathcal{E}.$$

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

接下來我們設計一個（與 §17.1 和 §17.2 的框架相同的）演算法，在其第 k 次迭代中將懲罰參數 μ 固定為某個正值 μ_k，將 λ 固定為當前估計值 λ^k，並將增廣 Lagrangian $\mathcal{L}_A(x, \lambda^k; \mu_k)$ 對 x 進行最小化。使用 x_k 表示增廣 Lagrangian $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda^k; \mu_k)$ 的近似 minimizer，根據無受限優化的最優條件，我們有

$$\begin{aligned} 0 &\approx \nabla_x \mathcal{L}_A(x_k, \lambda^k; \mu_k) \\ &= \nabla f(x_k) - \sum_{i \in \mathcal{E}} \big[\lambda_i^k - \mu_k c_i(x_k)\big] \nabla c_i(x_k) . \end{aligned}$$

通過與問題 (1) 的最優條件 (13) 進行比較，我們可以推論得到

$$\lambda_i^* \approx \lambda_i^k - \mu_k c_i(x_k) \quad \forall\, i \in \mathcal{E} . \tag{28}$$

重新排列上式，我們得到

$$c_i(x_k) \approx -\frac{1}{\mu_k}(\lambda_i^* - \lambda_i^k) \quad \forall\, i \in \mathcal{E} .$$

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

通過上頁重新排列 (28) 所得之式

$$c_i(x_k) \approx -\frac{1}{\mu_k}(\lambda_i^* - \lambda_i^k) \quad \forall\, i \in \mathcal{E},$$

我們得出以下結論：如果 λ^k 接近最優的乘子向量 λ_*，那麼 x_k 中的不可行性將遠小於 $(1/\mu_k)$，而不像在 (26) 中不可行性是與 $(1/\mu_k)$ 成正比。關係式 (28) 同時建議了一個改進我們當前對 Lagrange 乘子向量 λ^k 的估計的公式，使用剛剛計算的近似 minimizer x_k：我們可以設置

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k - \mu_k c_i(x_k) \quad \forall\, i \in \mathcal{E}. \tag{29}$$

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

通過上頁重新排列 (28) 所得之式

$$c_i(x_k) \approx -\frac{1}{\mu_k}(\lambda_i^* - \lambda_i^k) \quad \forall\, i \in \mathcal{E},$$

我們得出以下結論：如果 λ^k 接近最優的乘子向量 λ_*，那麼 x_k 中的不可行性將遠小於 $(1/\mu_k)$，而不像在 (26) 中不可行性是與 $(1/\mu_k)$ 成正比。關係式 (28) 同時建議了一個改進我們當前對 Lagrange 乘子向量 λ^k 的估計的公式，使用剛剛計算的近似 minimizer x_k：我們可以設置

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k - \mu_k c_i(x_k) \quad \forall\, i \in \mathcal{E}. \tag{29}$$

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

以上討論啟發了以下的演算法框架。

Framework 17.3 (Augmented Lagrangian Method – Equality Constraints).

Given $\mu_0 > 0$, tolerance $\tau_0 > 0$, starting points x_0^s and λ^0;
for $k = 0, 1, 2, \cdots$
  Find an approximate minimizer x_k of $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda^k; \mu_k)$, starting at x_k^s, and terminating when $\|\nabla_x \mathcal{L}_A(x_k, \lambda^k; \mu_k)\| \leqslant \tau_k$;
  if a convergence test for (1) is satisfied
    stop with approximate solution x_k;
  end (if)
  Update Lagrange multipliers using (29) to obtain λ^{k+1};
  Choose new penalty parameter $\mu_{k+1} \geqslant \mu_k$;
  Set starting point for the next iteration to $x_{k+1}^s = x_k$;
  Select tolerance τ_{k+1};
end (for)

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

在下面我們證明這個方法的收斂可以在不無限增加 μ 的情況下得到保證。因此，ill conditioning 的情況比在 Framework 17.1 中較不成為問題，因此 Framework 17.3 中的起始點 x_{k+1}^s 的選擇就不那麼關鍵了（在 Framework 17.3 中，我們只是從前一個近似 minimizer x_k 開始搜索）。容忍度 τ_k 可以根據不可行性 $\sum_{i\in\mathcal{E}} |c(x_k)|$ 來選擇，如果在當前迭代中不可行性的減少量不夠大，則可以增加懲罰參數 μ。

Example

Consider again problem (3), for which the augmented Lagrangian is

$$\mathcal{L}_A(x,\lambda;\mu) = x_1 + x_2 - \lambda(x_1^2 + x_2^2 - 2) + \frac{\mu}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 2)^2. \quad (30)$$

The solution of (3) is $x_* = (-1,-1)^T$ and the optimal Lagrange multiplier is $\lambda_* = -0.5$.

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

在下面我們證明這個方法的收斂可以在不無限增加 μ 的情況下得到保證。因此，ill conditioning 的情況比在 Framework 17.1 中較不成為問題，因此 Framework 17.3 中的起始點 x^s_{k+1} 的選擇就不那麼關鍵了（在 Framework 17.3 中，我們只是從前一個近似 minimizer x_k 開始搜索）。容忍度 τ_k 可以根據不可行性 $\sum_{i\in\mathcal{E}} |c(x_k)|$ 來選擇，如果在當前迭代中不可行性的減少量不夠大，則可以增加懲罰參數 μ。

Example

Consider again problem (3), for which the augmented Lagrangian is

$$\mathcal{L}_A(x,\lambda;\mu) = x_1 + x_2 - \lambda(x_1^2 + x_2^2 - 2) + \frac{\mu}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 2)^2. \quad (30)$$

The solution of (3) is $x_* = (-1,-1)^{\mathrm{T}}$ and the optimal Lagrange multiplier is $\lambda_* = -0.5$.

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Example (cont'd)

Suppose that at iterate k we have $\mu_k = 1$ (as in Figure 1), while the current multiplier estimate is $\lambda^k = -0.4$. Figure 5 plots the contour of the function $\mathcal{L}_A(\cdot, -0.4; 1)$. Note that the spacing of the contours indicates that the conditioning of this problem is similar to that of the quadratic penalty function $Q(\cdot; 1)$ illustrated in Figure 1. However, the minimizer $x_k \approx (-1.02, -1.02)^{\mathrm{T}}$ of $\mathcal{L}_A(\cdot, -0.4; 1)$ is much closer to the solution $x_* = (-1, -1)^{\mathrm{T}}$ than the minimizer of $Q(x; 1)$, which is approximately $(-1.11, -1.11)^{\mathrm{T}}$. This example shows that the inclusion of the Lagrange multiplier term in the function $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda; \mu)$ can result in a significant improvement over the quadratic penalty method, as a way to reformulate the constrained optimization problem (1).

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Example (cont'd)

Suppose that at iterate k we have $\mu_k = 1$ (as in Figure 1), while the current multiplier estimate is $\lambda^k = -0.4$. Figure 5 plots the contour of the function $\mathcal{L}_A(\cdot, -0.4; 1)$. Note that the spacing of the contours indicates that the conditioning of this problem is similar to that of the quadratic penalty function $Q(\cdot; 1)$ illustrated in Figure 1. However, the minimizer $x_k \approx (-1.02, -1.02)^{\mathrm{T}}$ of $\mathcal{L}_A(\cdot, -0.4; 1)$ is much closer to the solution $x_* = (-1, -1)^{\mathrm{T}}$ than the minimizer of $Q(x; 1)$, which is approximately $(-1.11, -1.11)^{\mathrm{T}}$. This example shows that the inclusion of the Lagrange multiplier term in the function $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda; \mu)$ can result in a significant improvement over the quadratic penalty method, as a way to reformulate the constrained optimization problem (1).

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Example (cont'd)

Suppose that at iterate k we have $\mu_k = 1$ (as in Figure 1), while the current multiplier estimate is $\lambda^k = -0.4$. Figure 5 plots the contour of the function $\mathcal{L}_A(\cdot, -0.4; 1)$. Note that the spacing of the contours indicates that the conditioning of this problem is similar to that of the quadratic penalty function $Q(\cdot; 1)$ illustrated in Figure 1. However, the minimizer $x_k \approx (-1.02, -1.02)^{\mathrm{T}}$ of $\mathcal{L}_A(\cdot, -0.4; 1)$ is much closer to the solution $x_* = (-1, -1)^{\mathrm{T}}$ than the minimizer of $Q(x; 1)$, which is approximately $(-1.11, -1.11)^{\mathrm{T}}$. This example shows that the inclusion of the Lagrange multiplier term in the function $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda; \mu)$ can result in a significant improvement over the quadratic penalty method, as a way to reformulate the constrained optimization problem (1).

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Example (cont'd)

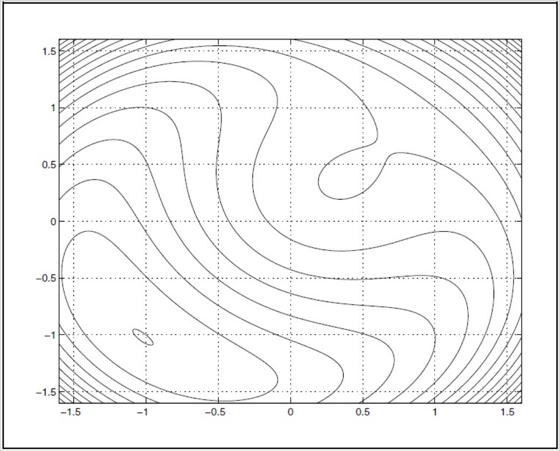

Figure 5: Contours of $\mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu)$ from (30) for $\lambda = -0.4$ and $\mu = 1$, contour spacing 0.5.

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

- **Properties of the augmented Lagrangian**

我們接下來證明兩個結果，這兩個結果證明了對於只具等式限制的受限優化問題，使用增廣 Lagrangian 和乘子法的正當性。

第一個結果通過展示，當我們知道 Lagrange 乘子向量 λ_* 的精確值時，對於所有足夠大的 μ，(1) 的解 x_* 是 $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda_*; \mu)$ 的嚴格 minimizer，從而證實了 Framework 17.3 的方法是有效的。儘管在實踐中我們不能精確地知道 λ_*，但該結果及其證明表明，即使 μ 不是特別大，只要 λ 是 λ_* 的合理估計，我們也可以通過最小化 $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda; \mu)$ 獲得對 x_* 的良好估計。

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Theorem

Let x_* be a local solution of (1) at which the LICQ is satisfied (that is, the gradients $\nabla c_i(x_*)$, $i \in \mathcal{E}$, are linearly independent vectors), and the second-order sufficient conditions specified in Theorem 12.6 are satisfied for $\lambda = \lambda_*$. Then there is a threshold value $\bar{\mu}$ such that for all $\mu \geqslant \bar{\mu}$, x_* is a strict local minimizer of $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda_*; \mu)$.

Proof.

We prove the result by showing that x_* satisfies the second-order sufficient conditions

$$\nabla_x \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; \mu) = 0, \ \ \nabla^2_{xx} \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; \mu) \text{ positive definite} \tag{31}$$

for all μ sufficiently large. Because x_* is a local solution for (1) at which LICQ is satisfied, we can apply Theorem 12.1 to deduce that $\nabla_x \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) = 0$ and $c_i(x_*) = 0$ for all $i \in \mathcal{E}$. □

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Theorem

Let x_* be a local solution of (1) at which the LICQ is satisfied (that is, the gradients $\nabla c_i(x_*)$, $i \in \mathcal{E}$, are linearly independent vectors), and the second-order sufficient conditions specified in Theorem 12.6 are satisfied for $\lambda = \lambda_*$. Then there is a threshold value $\bar{\mu}$ such that for all $\mu \geqslant \bar{\mu}$, x_* is a strict local minimizer of $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda_*; \mu)$.

Proof.

We prove the result by showing that x_* satisfies the second-order sufficient conditions

$$\nabla_x \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; \mu) = 0, \ \nabla^2_{xx} \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; \mu) \text{ positive definite} \tag{31}$$

for all μ sufficiently large. Because x_* is a local solution for (1) at which LICQ is satisfied, we can apply Theorem 12.1 to deduce that $\nabla_x \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) = 0$ and $c_i(x_*) = 0$ for all $i \in \mathcal{E}$. □

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Theorem

Let x_* be a local solution of (1) at which the LICQ is satisfied (that is, the gradients $\nabla c_i(x_*)$, $i \in \mathcal{E}$, are linearly independent vectors), and the second-order sufficient conditions specified in Theorem 12.6 are satisfied for $\lambda = \lambda_*$. Then there is a threshold value $\bar{\mu}$ such that for all $\mu \geqslant \bar{\mu}$, x_* is a strict local minimizer of $\mathcal{L}_A(\cdot, \lambda_*; \mu)$.

Proof.

We prove the result by showing that x_* satisfies the second-order sufficient conditions

$$\nabla_x \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; \mu) = 0, \ \nabla^2_{xx} \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; \mu) \text{ positive definite} \tag{31}$$

for all μ sufficiently large. Because x_* is a local solution for (1) at which LICQ is satisfied, we can apply Theorem 12.1 to deduce that $\nabla_x \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) = 0$ and $c_i(x_*) = 0$ for all $i \in \mathcal{E}$. □

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Proof (cont'd).

Therefore,

$$\begin{aligned}\nabla_x \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; \mu) &= \nabla f(x_*) - \sum_{i\in\mathcal{E}} [\lambda_i^* - \mu c_i(x_*)] \nabla c_i(x_*) \\ &= \nabla f(x_*) - \sum_{i\in\mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(x_*) = \nabla_x \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) = 0,\end{aligned}$$

verifying the first part of (31), independently of μ. For the second part of (31), we define A to be the constraint gradient matrix in (11) evaluated at x_*, and write

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; \mu) = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) + \mu A^{\mathrm{T}} A.$$

If the claim in (31) were not true, then for each integer $k \geqslant 1$, we could choose a vector w_k with $\|w_k\| = 1$ such that

$$0 \geqslant w_k^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; k) w_k = w_k^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w_k + k\|Aw_k\|^2. \quad (32)$$

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Proof (cont'd).

Therefore,

$$
\begin{aligned}
\nabla_x \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; \mu) &= \nabla f(x_*) - \sum_{i \in \mathcal{E}} [\lambda_i^* - \mu c_i(x_*)] \nabla c_i(x_*) \\
&= \nabla f(x_*) - \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(x_*) = \nabla_x \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) = 0,
\end{aligned}
$$

verifying the first part of (31), independently of μ. For the second part of (31), we define A to be the constraint gradient matrix in (11) evaluated at x_*, and write

$$
\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; \mu) = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) + \mu A^{\mathrm{T}} A.
$$

If the claim in (31) were not true, then for each integer $k \geqslant 1$, we could choose a vector w_k with $\|w_k\| = 1$ such that

$$
0 \geqslant w_k^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_A(x_*, \lambda_*; k) w_k = w_k^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w_k + k \|A w_k\|^2. \quad (32)
$$

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Proof (cont'd).

Since the vectors $\{w_k\}$ lie in a compact set (the unit sphere), there exists a convergence subsequence $\{w_{k_j}\}$ with limit w. Inequality (32) shows that

$$\|Aw_{k_j}\|^2 \leqslant -\frac{1}{k_j} w_{k_j}^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w_{k_j} \tag{33}$$

and the right-hand side converges to 0 as $j \to \infty$. The limit (33) implies that $Aw = 0$. Moreover, by rearranging (32), we have that

$$w_{k_j}^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w_{k_j} \leqslant -k_j \|Aw_{k_j}\|^2 \leqslant 0,$$

so by passing to the limit as $j \to \infty$ we have $w^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w \leqslant 0$. However, this inequality contradicts the second-order conditions in Theorem 12.6 which, when applied to (1), state that we must have $w^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w > 0$ for all nonzero vectors w with $Aw = 0$. Hence, the second part of (31) holds for all μ sufficiently large. □

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Proof (cont'd).

Since the vectors $\{w_k\}$ lie in a compact set (the unit sphere), there exists a convergence subsequence $\{w_{k_j}\}$ with limit w. Inequality (32) shows that

$$\|Aw_{k_j}\|^2 \leqslant -\frac{1}{k_j} w_{k_j}^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w_{k_j} \tag{33}$$

and the right-hand side converges to 0 as $j \to \infty$. The limit (33) implies that $Aw = 0$. Moreover, by rearranging (32), we have that

$$w_{k_j}^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w_{k_j} \leqslant -k_j \|Aw_{k_j}\|^2 \leqslant 0,$$

so by passing to the limit as $j \to \infty$ we have $w^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w \leqslant 0$. However, this inequality contradicts the second-order conditions in Theorem 12.6 which, when applied to (1), state that we must have $w^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w > 0$ for all nonzero vectors w with $Aw = 0$. Hence, the second part of (31) holds for all μ sufficiently large. □

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Proof (cont'd).

Since the vectors $\{w_k\}$ lie in a compact set (the unit sphere), there exists a convergence subsequence $\{w_{k_j}\}$ with limit w. Inequality (32) shows that

$$\|Aw_{k_j}\|^2 \leqslant -\frac{1}{k_j} w_{k_j}^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w_{k_j} \tag{33}$$

and the right-hand side converges to 0 as $j \to \infty$. The limit (33) implies that $Aw = 0$. Moreover, by rearranging (32), we have that

$$w_{k_j}^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w_{k_j} \leqslant -k_j \|Aw_{k_j}\|^2 \leqslant 0,$$

so by passing to the limit as $j \to \infty$ we have $w^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w \leqslant 0$. However, this inequality contradicts the second-order conditions in Theorem 12.6 which, when applied to (1), state that we must have $w^{\mathrm{T}} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) w > 0$ for all nonzero vectors w with $Aw = 0$. Hence, the second part of (31) holds for all μ sufficiently large. $\square$

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

第二個結果由 Bertsekas [19, Proposition 4.2.3] 給出，描述了 λ 不等於 λ_* 的更現實的情況。它給出了存在一個接近 x_* 的 $\mathcal{L}_A(\cdot,\lambda;\mu)$ 的 minimizer 的條件，並給出了關於 x_k 和通過在第 k 次迭代中解決子問題獲得的更新乘子估計 λ^{k+1} 的誤差上界。

Theorem

Suppose that

1. x_* *is a local solution of* (1) *at which the LICQ is satisfied (that is, the gradients* $\nabla c_i(x_*)$, $i \in \mathcal{E}$, *are linearly independent vectors);*
2. *the second-order sufficient conditions specified in Theorem 12.6 are satisfied for* $\lambda = \lambda_*$, *and*
3. *the number* $\bar{\mu}$ *is chosen such that for all* $\mu \geqslant \bar{\mu}$, x_* *is a* ***strict*** *local minimizer of* $\mathcal{L}_A(\cdot,\lambda_*;\mu)$.

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Theorem (cont'd)

Then there exist positive scalars δ, ε, and M such that the following claims hold:

(a) *For all λ^k and μ_k satisfying*

$$\|\lambda^k - \lambda_*\| \leqslant \mu_k \delta, \quad \mu_k \geqslant \bar{\mu}, \tag{34}$$

the problem

$$\min_x \mathcal{L}_A(x, \lambda^k; \mu_k) \quad \textit{subject to} \quad \|x - x_*\| \leqslant \varepsilon$$

has a unique solution x_k. Moreover, we have

$$\|x_k - x_*\| \leqslant M\|\lambda^k - \lambda_*\|/\mu_k. \tag{35}$$

(b) *For all λ^k and μ_k that satisfy (34), we have*

$$\|\lambda^{k+1} - \lambda_*\| \leqslant M\|\lambda^k - \lambda_*\|/\mu_k, \tag{36}$$

where λ^{k+1} is given by the formula (29).

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Theorem (cont'd)

(c) *For all* λ^k *and* μ_k *that satisfy* (34), *the matrix* $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}_A(x_k, \lambda^k; \mu_k)$ *is positive definite and the constraint gradients* $\nabla c_i(x_k)$, $i \in \mathcal{E}$, *are linearly independent.*

上述定理說明了增廣 Lagrangian 法的一些突出特性。不等式 (35) 表明，如果 λ^k 足夠準確或者懲罰參數 μ_k 足夠大，則 x_k 將接近 x_*。因此，增廣 Lagrangian 法給我們提供了兩種改進 x_k 精度的方式，而二次懲罰法只給了我們一個選項：增加 μ_k。不等式 (36) 表明，局部來說，我們可以通過選擇足夠大的 μ_k 來確保 Lagrange 乘子準確性的改善。定理的最後一個觀察表明，在特定條件下，無受限優化的二階充分條件也對第 k 次子問題滿足，因此可以預期通過應用標準的無受限優化技術獲得良好的收斂行為。

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Theorem (cont'd)

(c) *For all λ^k and μ_k that satisfy* (34), *the matrix* $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}_A(x_k,\lambda^k;\mu_k)$ *is positive definite and the constraint gradients* $\nabla c_i(x_k)$, $i\in\mathcal{E}$, *are linearly independent.*

上述定理說明了增廣 Lagrangian 法的一些突出特性。不等式 (35) 表明，如果 λ^k 足夠準確或者懲罰參數 μ_k 足夠大，則 x_k 將接近 x_*。因此，增廣 Lagrangian 法給我們提供了兩種改進 x_k 精度的方式，而二次懲罰法只給了我們一個選項：增加 μ_k。不等式 (36) 表明，局部來說，我們可以通過選擇足夠大的 μ_k 來確保 Lagrange 乘子準確性的改善。定理的最後一個觀察表明，在特定條件下，無受限優化的二階充分條件也對第 k 次子問題滿足，因此可以預期通過應用標準的無受限優化技術獲得良好的收斂行為。

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Theorem (cont'd)

(c) *For all λ^k and μ_k that satisfy* (34), *the matrix* $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}_A(x_k, \lambda^k; \mu_k)$ *is positive definite and the constraint gradients* $\nabla c_i(x_k)$, $i \in \mathcal{E}$, *are linearly independent.*

上述定理說明了增廣 Lagrangian 法的一些突出特性。不等式 (35) 表明，如果 λ^k 足夠準確或者懲罰參數 μ_k 足夠大，則 x_k 將接近 x_*。因此，增廣 Lagrangian 法給我們提供了兩種改進 x_k 精度的方式，而二次懲罰法只給了我們一個選項：增加 μ_k。不等式 (36) 表明，局部來說，我們可以通過選擇足夠大的 μ_k 來確保 Lagrange 乘子準確性的改善。定理的最後一個觀察表明，在特定條件下，無受限優化的二階充分條件也對第 k 次子問題滿足，因此可以預期通過應用標準的無受限優化技術獲得良好的收斂行為。

§17.3 Augmented Lagrangian Method: Equality Constraints

Theorem (cont'd)

(c) *For all λ^k and μ_k that satisfy (34), the matrix $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}_A(x_k, \lambda^k; \mu_k)$ is positive definite and the constraint gradients $\nabla c_i(x_k)$, $i \in \mathcal{E}$, are linearly independent.*

上述定理說明了增廣 Lagrangian 法的一些突出特性。不等式 (35) 表明，如果 λ^k 足夠準確或者懲罰參數 μ_k 足夠大，則 x_k 將接近 x_*。因此，增廣 Lagrangian 法給我們提供了兩種改進 x_k 精度的方式，而二次懲罰法只給了我們一個選項：增加 μ_k。不等式 (36) 表明，局部來說，我們可以通過選擇足夠大的 μ_k 來確保 Lagrange 乘子準確性的改善。定理的最後一個觀察表明，在特定條件下，無受限優化的二階充分條件也對第 k 次子問題滿足，因此可以預期通過應用標準的無受限優化技術獲得良好的收斂行為。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

在本節中，我們討論實際的增廣 Lagrangian 程序，特別是處理不等式限制的程序。我們討論了三種方法，分別基於界限限制 (bound-constrained)、線性限制 (linearly constrained) 和無限制的 formulations。前兩種方法是成功的非線性規劃代碼 LANCELOT [72] 和 MINOS [218] 的基礎。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

- **Bound-constrained formulation**

對於一般的非線性規劃問題 (5)，我們可以通過引入鬆弛變量 s_i，將一般不等式限制 $(\forall\, i \in \mathcal{I})(c_i(x) \geqslant 0)$ 替換為以下形式來轉換為具有等式限制和界限限制的問題：

$$c_i(x) - s_i = 0 \quad \text{and} \quad s_i \geqslant 0 \qquad \forall\, i \in \mathcal{I}.$$

形如 $\ell \leqslant x \leqslant u$ 的界限限制則無需轉換。通過這種方式重新構建，我們可以將非線性規劃問題表述如下：

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{subject to} \quad c_i(x) = 0,\ i = 1, 2, \cdots, m,\ \ell \leqslant x \leqslant u. \tag{37}$$

在上述的表述中鬆弛變量 s_i 已經被納入向量 x 中，並相應地重新定義了限制函數 c_i。在下面的討論中，我們將等式限制式收集到向量函數 $c : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 中。下界向量 ℓ 的一些分量可以設置為 $-\infty$，表示該分量的 x 沒有下界；上界向量 u 也有類似設定。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

- **Bound-constrained formulation**

對於一般的非線性規劃問題 (5)，我們可以通過引入鬆弛變量 s_i，將一般不等式限制 $(\forall\, i \in \mathcal{I})(c_i(x) \geqslant 0)$ 替換為以下形式來轉換為具有等式限制和界限限制的問題：

$$c_i(x) - s_i = 0 \quad \text{and} \quad s_i \geqslant 0 \qquad \forall\, i \in \mathcal{I}.$$

形如 $\ell \leqslant x \leqslant u$ 的界限限制則無需轉換。通過這種方式重新構建，我們可以將非線性規劃問題表述如下：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{subject to} \quad c_i(x) = 0,\ i = 1, 2, \cdots, m,\ \ell \leqslant x \leqslant u. \tag{37}$$

在上述的表述中鬆弛變量 s_i 已經被納入向量 x 中，並相應地重新定義了限制函數 c_i。在下面的討論中，我們將等式限制式收集到向量函數 $c : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 中。下界向量 ℓ 的一些分量可以設置為 $-\infty$，表示該分量的 x 沒有下界；上界向量 u 也有類似設定。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

- **Bound-constrained formulation**

對於一般的非線性規劃問題 (5)，我們可以通過引入鬆弛變量 s_i，將一般不等式限制 $(\forall\, i \in \mathcal{I})(c_i(x) \geqslant 0)$ 替換為以下形式來轉換為具有等式限制和界限限制的問題：

$$c_i(x) - s_i = 0 \quad \text{and} \quad s_i \geqslant 0 \qquad \forall\, i \in \mathcal{I}.$$

形如 $\ell \leqslant x \leqslant u$ 的界限限制則無需轉換。通過這種方式重新構建，我們可以將非線性規劃問題表述如下：

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{subject to} \quad c_i(x) = 0,\ i = 1, 2, \cdots, m,\ \ell \leqslant x \leqslant u. \tag{37}$$

在上述的表述中鬆弛變量 s_i 已經被納入向量 x 中，並相應地重新定義了限制函數 c_i。在下面的討論中，我們將等式限制式收集到向量函數 $c : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 中。下界向量 ℓ 的一些分量可以設置為 $-\infty$，表示該分量的 x 沒有下界；上界向量 u 也有類似設定。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

界限限制 Lagrangian (BCL) 法僅將 (37) 中的等式限制納入增廣 Lagrangian 中，即

$$\mathcal{L}_A(x,\lambda;\mu) = f(x) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i c_i(x) + \frac{\mu}{2}\sum_{i=1}^{m} c_i^2(x). \tag{38}$$

界限限制在子問題中明確執行，其形式為

$$\min_x \mathcal{L}_A(x,\lambda;\mu) \quad \text{subject to} \quad \ell \leqslant x \leqslant u. \tag{39}$$

解決了此問題後，更新 Lagrange 乘子 λ 和懲罰參數 μ，然後重複此過程。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

解決帶界限限制 (39) 的非線性規劃問題的一種高效技術是在固定 μ 和 λ 的情況下使用梯度投影方法，該方法在 §18.6 中討論。通過將 KKT 條件 $(32)_{12}$ 特化為問題 (39)，我們發現 x 為 (39) 的解的一階必要條件是

$$x - P(x - \nabla_x \mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu), \ell, u) = 0,$$

其中 $P(g, \ell, u)$ 是將向量 g 投影到定義如下的矩形框 $[\ell, u]$ 上：

$$P(g, \ell, u)_i = \begin{cases} \ell_i & \text{if } g_i \leqslant \ell_i, \\ g_i & \text{if } g_i \in (\ell_i, u_i), \\ u_i & \text{if } g_i \geqslant u_i, \end{cases} \qquad \text{for all } i = 1, 2, \cdots, n.$$

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

現在我們描述 LANCELOT 套件中實現的演算法。

Algorithm 17.4 (Bound-Constrained Lagrangian Method).

Choose an initial point x_0 and initial multipliers λ^0;

Choose convergence tolerances η_* and ω_*;

Set $\mu_0 = 10$, $\omega_0 = 1/\mu_0$, and $\eta_0 = 1/\mu_0^{0.1}$;

for $k = 0, 1, 2, \cdots$

Find an approximate solution x_k of the sub-problem (39) such that

$$\left\| x_k - P(x_k - \nabla_x \mathcal{L}_A(x_k, \lambda^k; \mu_k), \ell, u) \right\| \leqslant \omega_k;$$

if $\|c(x_k)\| \leqslant \eta_k$

(* test for convergence *)

if $\|c(x_k)\| \leqslant \eta_*$ and $\left\| x_k - P(x_k - \nabla_x \mathcal{L}_A(x_k, \lambda^k; \mu_k), \ell, u) \right\| \leqslant \omega_*$

stop with approximate solution x_k;

end (if)

(* update multipliers, tighten tolerances *)

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

(* test for convergence *)

if $\|c(x_k)\| \leqslant \eta_*$ and $\left\|x_k - P(x_k - \nabla_x \mathcal{L}_A(x_k, \lambda^k; \mu_k), \ell, u)\right\| \leqslant \omega_*$

stop with approximate solution x_k;

end (if)

(* update multipliers, tighten tolerances *)

$\lambda^{k+1} = \lambda^k - \mu_k c(x_k)$;

$\mu_{k+1} = \mu_k$;

$\eta_{k+1} = \eta_k / \mu_{k+1}^{0.9}$;

$\omega_{k+1} = \omega_k / \mu_{k+1}$;

else

(* increase penalty parameter, tighten tolerances *)

$\lambda^{k+1} = \lambda^k$;

$\mu_{k+1} = 100\mu_k$;

$\eta_{k+1} = 1/\mu_{k+1}^{0.1}$;

$\omega_{k+1} = 1/\mu_{k+1}$;

end (if)

end (for)

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

在演算法的主要分支中，在大致解決了問題

$$\min_x \mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu) \quad \text{subject to} \quad \ell \leqslant x \leqslant u \tag{39}$$

後，演算法會檢查限制違反是否已經減少到足夠程度，這可以通過條件

$$\|c(x_k)\| \leqslant \eta_k \tag{40}$$

來衡量。若這個條件成立，則懲罰參數不會在下一次迭代中改變（因為當前的 μ_k 值產生了可接受水平的限制違反），但會根據

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k - \mu_k c_i(x_k) \quad \forall\, i \in \mathcal{E} \tag{29}$$

更新 Lagrange 乘子估計值，並提前將容忍度 ω_k 和 η_k 加緊，以便進行下一次迭代。另一方面，如果 (40) 不成立，則我們會增加懲罰參數，以確保下一個子問題更加重視減少限制違反。在這種情況下，不會更新 Lagrange 乘子的估計值；重點是改善可行性。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

在演算法的主要分支中，在大致解決了問題

$$\min_{x} \mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu) \quad \text{subject to} \quad \ell \leqslant x \leqslant u \tag{39}$$

後，演算法會檢查限制違反是否已經減少到足夠程度，這可以通過條件

$$\|c(x_k)\| \leqslant \eta_k \tag{40}$$

來衡量。若這個條件成立，則懲罰參數不會在下一次迭代中改變（因為當前的 μ_k 值產生了可接受水平的限制違反），但會根據

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k - \mu_k c_i(x_k) \quad \forall\, i \in \mathcal{E} \tag{29}$$

更新 Lagrange 乘子估計值，並提前將容忍度 ω_k 和 η_k 加緊，以便進行下一次迭代。另一方面，如果 (40) 不成立，則我們會增加懲罰參數，以確保下一個子問題更加重視減少限制違反。在這種情況下，不會更新 Lagrange 乘子的估計值；重點是改善可行性。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

在演算法的主要分支中，在大致解決了問題

$$\min_x \mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu) \quad \text{subject to} \quad \ell \leqslant x \leqslant u \tag{39}$$

後，演算法會檢查限制違反是否已經減少到足夠程度，這可以通過條件

$$\|c(x_k)\| \leqslant \eta_k \tag{40}$$

來衡量。若這個條件成立，則懲罰參數不會在下一次迭代中改變（因為當前的 μ_k 值產生了可接受水平的限制違反），但會根據

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k - \mu_k c_i(x_k) \quad \forall\, i \in \mathcal{E} \tag{29}$$

更新 Lagrange 乘子估計值，並提前將容忍度 ω_k 和 η_k 加緊，以便進行下一次迭代。另一方面，如果 (40) 不成立，則我們會增加懲罰參數，以確保下一個子問題更加重視減少限制違反。在這種情況下，不會更新 Lagrange 乘子的估計值；重點是改善可行性。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

在 Algorithm 17.4 中出現的常數 0.1、0.9 和 100 在某種程度上是任意的；其他值也可以使用，而不會影響理論上的收斂性質。LANCELOT 使用梯度投影法與 trust-region（參見 (18.61)）來解決帶界限限制的非線性子問題 (39)。在使用 trust-region 的情況下，梯度投影法構建了增廣 Lagrangian $\mathcal{L}_A$ 的二次模型，通過近似解決 trust-region 問題來計算步進量 d：

$$\begin{aligned}\min_{d}\ & \frac{1}{2} d^{\mathrm{T}} \left[\nabla^2_{xx}\mathcal{L}(x_k,\lambda^k) + \mu_k A_k^{\mathrm{T}} A_k\right] d + \nabla_x \mathcal{L}_A(x_k,\lambda^k;\mu_k)^{\mathrm{T}} d \\ \text{subject to}\ & \ell \leqslant x_k + d \leqslant u, \|d\|_\infty \leqslant \Delta,\end{aligned} \tag{41}$$

其中 $A_k = A(x_k)$，而 Δ 是信賴區域半徑。我們也可以藉由不等式 $-\Delta e \leqslant d \leqslant \Delta e$ 來表達信賴區域，在此 $e = (1,1,\cdots,1)^{\mathrm{T}}$。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

解決這個子問題的算法的每次迭代分為兩個階段。首先，進行一次投影梯度 line search，以確定 d 的哪些分量應該設置為其界限之一。其次，進行 CG 迭代，對於未達到其界限的自由分量 d 進行 (41) 的最小化。重要的是，該算法不需要 KKT 矩陣或限制的 Jacobian A_k 的分解。CG 迭代僅需要矩陣向量乘積，這使得 LANCELOT 適用於大型問題。

在 (41) 中的 Lagrangian 的 Hessian 矩陣 $\nabla^2_{xx}\mathcal{L}(x_k,\lambda^k)$ 可以被基於 BFGS 或 SR1 更新公式的 quasi-Newton 逼近所取代。LANCELOT 設計用於利用目標函數和限制中的部分可分離結構，無論是在計算 Lagrangian 的 Hessian 矩陣還是在 quasi-Newton 更新中都可以實現這一點（參見 §7.4）。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

- **Linearly constrained formulation**

線性限制 Lagrangian（linearly constrained Lagrangian, abbr. LCL）法背後的主要想法是通過線性化限制式以最小化 Lagrangian 或增廣 Lagrangian 來生成一個步進量。LCL 法中使用的子問題形式為：

$$\min_{x} F_k(x) \tag{42a}$$

subject to

$$c(x_k) + A_k(x - x_k) = 0, \ell \leqslant x \leqslant u. \tag{42b}$$

$F_k(x)$ 有幾種可能的選擇。早期的 LCL 方法定義

$$F_k(x) = f(x) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^k \bar{c}_i^k(x), \tag{43}$$

其中 λ^k 是當前的 Lagrange 乘子估計值，而 $\bar{c}_i^k(x)$ 是 $c_i(x)$ 與其在 x_k 處的線性化之間的差異；亦即

$$\bar{c}_i^k(x) = c_i(x) - c_i(x_k) - \nabla c_i(x_k)^{\mathrm{T}}(x - x_k).$$

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

可以證明當 x_k 收斂到解 x_* 時，與等式限制 (42b) 相關的 Lagrange 乘子收斂到最佳乘子 λ_*。因此，可以將 (43) 中的 λ^k 設置為 (42b) 中等式限制的 Lagrange 乘子，該值來自上一次迭代。

目前的 LCL 方法將 F_k 定義為擴充 Lagrangian ：

$$F_k(x) = f(x) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^k \bar{c}_i^k(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^{m} \left[\bar{c}_i^k(x)\right]^2. \tag{44}$$

在實踐中，與 (43) 相比，這個 F_k 的定義似乎從遠處的起始點更可靠地收斂。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

(44) 與擴充 Lagrangian

$$\mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu) \equiv f(x) - \sum_{i\in\mathcal{E}} \lambda_i c_i(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{i\in\mathcal{E}} c_i^2(x) \tag{27}$$

之間存在顯著的相似性，其差異在於原限制函數 $c_i(x)$ 已被函數 $\bar{c}_i^k(x)$ 所取代，後者僅捕捉 c_i 的 “二階及以上” 項。子問題 (42) 與增廣 Lagrangian 子問題不同之處在於，新的 x 必須完全滿足等式限制的線性化，同時通過使用 $\bar{c}_i^k$ 代替 c_i，每個限制式的線性部分被從目標中分解出來。類似於 Algorithm 17.4 的程序可以用於更新懲罰參數 μ，並調整管理子問題解準確度的容錯誤差。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

由於 $\bar{c}_i^k(x)$ 在 $x = x_k$ 時梯度為零，因此無論是根據

$$F_k(x) = f(x) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^k \bar{c}_i^k(x) \tag{43}$$

還是

$$F_k(x) = f(x) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^k \bar{c}_i^k(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^{m} \left[\bar{c}_i^k(x)\right]^2 \tag{44}$$

定義的 F_k，我們都有 $\nabla F_k(x_k) = \nabla f(x_k)$。我們還可以證明 F_k 的 Hessian 矩陣與 (1) 的 Lagrangian 或擴充 Lagrangian 的 Hessian 矩陣密切相關。由於這些特性，子問題 (42) 類似於第 18 章中描述的 SQP 子問題，其中 SQP 中的二次目標被 LCL 中的非線性目標所取代。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

著名的代碼 MINOS [218] 使用非線性模型函數 (44) 並通過一種減少梯度的方法解決子問題，該方法利用對 F_k 的 reduced Hessian 的 quasi-Newton 逼近。在 MINOS 中，計算子問題的相當精確解以確保 (42b) 中的等式限制的 Lagrange 乘子估計（隨後在 (44) 中使用）具有良好的質量。因此，MINOS 通常需要總共比 SQP 方法或內點法更多地評估目標函數 f 和限制函數 c_i（及其梯度）。在算法過程中解決的子問題 (42) 的總數有時比其他方法少。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

- **Unconstrained formulation**

我們可以通過基於近端點 (proximal point) 方法的推導，獲得不受限制的增廣 Lagrangian 子問題的形式，用於不等式限制問題。為了簡單起見，假設問題沒有等式限制 ($\mathcal{E} = \varnothing$)，我們可以將問題 (5) 等價地表示為一個無受限的優化問題：

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} F(x), \tag{45}$$

其中

$$F(x) = \max_{\lambda \geqslant 0} \left\{ f(x) - \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x) \right\} = \begin{cases} f(x) & \text{if } x \text{ is feasible,} \\ \infty & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{46}$$

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

要驗證這些對 F 的表達式，首先考慮 x 不可行的情況；亦即對於某些 i，$c_i(x) < 0$。然後我們可以任意地選擇 λ_i 為任意大正數，同時將所有不等於 i 的 j 之 λ_j 設為 0，以驗證在這種情況下 $F(x)$ 是無窮大的。如果 x 是可行的，則對所有 $i \in \mathcal{I}$，我們有 $c_i(x) \geqslant 0$，因此在 $\lambda = 0$ 處取得最大值，且此時 $F(x) = f(x)$。通過將 (45) 與 (46) 結合，我們有

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} F(x) = \min_{x \text{ feasible}} f(x).$$

這僅僅是原始的不等式限制問題。然而，直接最小化 F 並不實際，因為這個函數不是光滑的 – 當 x 穿越可行集的邊界時，它會從有限值跳躍到無限值。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

我們可以通過將 F 替換為一個平滑的近似函數 $\widehat{F}(\cdot;\lambda^k,\mu_k)$，該函數取決於懲罰參數 μ_k 和 Lagrange 乘子估計值 λ_k，使這種方法更加實用。該近似可以定義如下：

$$\widehat{F}(x;\lambda^k,\mu_k)=\max_{\lambda\geqslant 0}\left\{f(x)-\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i c_i(x)-\frac{1}{2\mu_k}\sum_{i\in\mathcal{I}}(\lambda_i-\lambda_i^k)^2\right\}. \quad (47)$$

在這個表達式中的最後一項對任何 λ 遠離先前估計值 λ^k 的移動施加了一個懲罰，它鼓勵新的最大化 λ 保持接近先前的估計 λ^k。由於 (47) 為 λ 的界限限制二次問題，且其對固定的 x 與 μ_k 可對每個分量 λ_i 直接求最大值，我們可以明確地進行最大化並獲得以下 λ 的表達式：

$$\lambda_i=\lambda_i(x)\equiv\begin{cases}0 & \text{if } -c_i(x)+\lambda_i^k/\mu_k\leqslant 0;\\ \lambda_i^k-\mu_k c_i(x) & \text{otherwise.}\end{cases} \quad (48)$$

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

我們可以通過將 F 替換為一個平滑的近似函數 $\widehat{F}(\cdot;\lambda^k,\mu_k)$，該函數取決於懲罰參數 μ_k 和 Lagrange 乘子估計值 λ_k，使這種方法更加實用。該近似可以定義如下：

$$\widehat{F}(x;\lambda^k,\mu_k) = \max_{\lambda \geqslant 0}\left\{f(x) - \sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i c_i(x) - \frac{1}{2\mu_k}\sum_{i\in\mathcal{I}}(\lambda_i - \lambda_i^k)^2\right\}. \tag{47}$$

在這個表達式中的最後一項對任何 λ 遠離先前估計值 λ^k 的移動施加了一個懲罰，它鼓勵新的最大化 λ 保持接近先前的估計 λ^k。由於 (47) 為 λ 的界限限制二次問題，且其對固定的 x 與 μ_k 可對每個分量 λ_i 直接求最大值，我們可以明確地進行最大化並獲得以下 λ 的表達式：

$$\lambda_i = \lambda_i(x) \equiv \begin{cases} 0 & \text{if } -c_i(x) + \lambda_i^k/\mu_k \leqslant 0; \\ \lambda_i^k - \mu_k c_i(x) & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{48}$$

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

通過將這些值代入 (47)，我們發現

$$\widehat{F}(x;\lambda^k,\mu_k) = f(x) + \sum_{i\in\mathcal{I}} \Psi(c_i(x),\lambda_i^k;\mu_k),$$

其中，有三個純量參數的函數 Ψ 定義如下：

$$\Psi(t,\sigma;\mu) \equiv \begin{cases} -\sigma t + \dfrac{\mu}{2}t^2 & \text{if } t - \dfrac{\sigma}{\mu} \leqslant 0, \\ -\dfrac{1}{2\mu}\sigma^2 & \text{otherwise,} \end{cases}$$

因此，我們可以通過對 x 最小化 $\widehat{F}(x;\lambda^k,\mu_k)$ 來獲取新的迭代值 x_k，並使用公式 (48) 來獲取更新的 Lagrange 乘子估計值 λ^{k+1}。

通過與 Framework 17.3 進行比較，我們可以看到 F 扮演了 $\mathcal{L}_A$ 的角色，並且所描述的方案將增廣 Lagrangian 法巧妙地擴展到了不等式限制的情況下。然而，與界限限制和線性限制的形式不同，這種無限制的形式並不是任何廣泛使用的套件的基礎，因此其實際性質尚未經過測試。

§17.4 Practical Augmented Lagrangian Methods

通過將這些值代入 (47)，我們發現

$$\widehat{F}(x;\lambda^k,\mu_k) = f(x) + \sum_{i\in\mathcal{I}} \Psi(c_i(x),\lambda_i^k;\mu_k),$$

其中，有三個純量參數的函數 Ψ 定義如下：

$$\Psi(t,\sigma;\mu) \equiv \begin{cases} -\sigma t + \dfrac{\mu}{2}t^2 & \text{if } t - \dfrac{\sigma}{\mu} \leqslant 0, \\ -\dfrac{1}{2\mu}\sigma^2 & \text{otherwise}, \end{cases}$$

因此，我們可以通過對 x 最小化 $\widehat{F}(x;\lambda^k,\mu_k)$ 來獲取新的迭代值 x_k，並使用公式 (48) 來獲取更新的 Lagrange 乘子估計值 λ^{k+1}。通過與 Framework 17.3 進行比較，我們可以看到 F 扮演了 $\mathcal{L}_A$ 的角色，並且所描述的方案將增廣 Lagrangian 法巧妙地擴展到了不等式限制的情況下。然而，與界限限制和線性限制的形式不同，這種無限制的形式並不是任何廣泛使用的套件的基礎，因此其實際性質尚未經過測試。

§17.5 Perspectives and Software

二次懲罰法通常會在限制式的數量較少時使用，而在使用時事實上有時會僅針對一個較大的 μ 值進行 $Q(\cdot;\mu)$ 的最佳化。然而除非很好地挑選 μ，否則這樣做所得的解可能不太準確。由於二次懲罰法在主要的受限優化套件都沒有被使用，因此很少有人關注更新懲罰參數、調整容錯誤差 τ_k 以及為每次迭代選擇起始點 x_k^s 的技術（請參閱 Gould [141] 中的討論）。

儘管 Framework 17.1 中的二次懲罰方法在直觀上具有吸引力且簡單易懂，但一般更喜歡 §17.3 和 §17.4 中的增廣 Lagrangian 法。這類方法所衍生的子問題一般並不使問題提高難度，且引入乘子估計減少了需要大量 μ 以獲得良好可行性和準確性的可能性，從而避免了子問題的 ill conditioning。然而，二次懲罰法仍然是對其他算法（如序列二次規劃（SQP）方法）進行正則化的重要機制，正如我們在 §17.1 末尾提到的那樣。

§17.5 Perspectives and Software

二次懲罰法通常會在限制式的數量較少時使用，而在使用時事實上有時會僅針對一個較大的 μ 值進行 $Q(\cdot;\mu)$ 的最佳化。然而除非很好地挑選 μ，否則這樣做所得的解可能不太準確。由於二次懲罰法在主要的受限優化套件都沒有被使用，因此很少有人關注更新懲罰參數、調整容錯誤差 τ_k 以及為每次迭代選擇起始點 x_k^s 的技術（請參閱 Gould [141] 中的討論）。

儘管 Framework 17.1 中的二次懲罰方法在直觀上具有吸引力且簡單易懂，但一般更喜歡 §17.3 和 §17.4 中的增廣 Lagrangian 法。這類方法所衍生的子問題一般並不使問題提高難度，且引入乘子估計減少了需要大量 μ 以獲得良好可行性和準確性的可能性，從而避免了子問題的 ill conditioning。然而，二次懲罰法仍然是對其他算法（如序列二次規劃（SQP）方法）進行正則化的重要機制，正如我們在 §17.1 末尾提到的那樣。

§17.5 Perspectives and Software

在 1980 年代 Fletcher 開發了一種通用的 ℓ_1 懲罰法。因其與 SQP 方法有一些共同的特點而被稱為 Sℓ_1QP 方法。更近期，一種使用線性規劃子問題的 ℓ_1 懲罰法已經作為 KNITRO [46] 套件的一部分實現。這兩種方法在 §18.5 中進行了討論。

近來 ℓ_1 懲罰函數引起了很大的關注。它已成功地應用於處理困難問題，例如限制不滿足標準的 constraint qualifications 且具有互補限制 (complementarity constraints) 的數學程序（MPCCs）[274]。通過將這些問題限制作為懲罰項包含在內，而不是對其進行精確線性化，並使用其他技術（如 SQP 或內點法）處理其餘限制，可以擴展這些其他方法的應用範圍。參見 [8] 了解 active set 法，參見 [16, 191] 了解 MPCCs 的內點法。SNOPT 套件在 SQP 方法中使用 ℓ_1 懲罰方法作為一種保障策略，以防止二次模型出現不可行或無界，或者具有無界乘子的情況。

§17.5 Perspectives and Software

在 1980 年代 Fletcher 開發了一種通用的 ℓ_1 懲罰法。因其與 SQP 方法有一些共同的特點而被稱為 Sℓ_1QP 方法。更近期，一種使用線性規劃子問題的 ℓ_1 懲罰法已經作為 KNITRO [46] 套件的一部分實現。這兩種方法在 §18.5 中進行了討論。

近來 ℓ_1 懲罰函數引起了很大的關注。它已成功地應用於處理困難問題，例如限制不滿足標準的 constraint qualifications 且具有互補限制 (complementarity constraints) 的數學程序（MPCCs）[274]。通過將這些問題限制作為懲罰項包含在內，而不是對其進行精確線性化，並使用其他技術（如 SQP 或內點法）處理其餘限制，可以擴展這些其他方法的應用範圍。參見 [8] 了解 active set 法，參見 [16, 191] 了解 MPCCs 的內點法。SNOPT 套件在 SQP 方法中使用 ℓ_1 懲罰方法作為一種保障策略，以防止二次模型出現不可行或無界，或者具有無界乘子的情況。

§17.5 Perspectives and Software

多年來，增廣 Lagrangian 法因其簡單性而廣受歡迎。MINOS 和 LANCELOT 套件是增廣 Lagrangian 法的最佳實現之一。它們都適用於大規模非線性規劃問題。MINOS 的線性限制 Lagrangian（LCL）和 LANCELOT 的界限限制 Lagrangian（BCL）法具有重要的共同特徵。然而，在步進量計算子問題的制定和解決這些子問題的技術上，它們有顯著差異。MINOS 採用了縮減空間方法來處理線性化限制，並使用（密集的）quasi-Newton 近似來估算 Lagrangian 的 Hessian 矩陣。因此，MINOS 在自由度相對較少的問題上最為成功。另一方面，當限制式數量相對較少時，LANCELOT 更為有效。正如 §17.4 所示，LANCELOT 不需要 Jacobian 矩陣 A 的分解，這再次提高了它適用於非常大問題的性能，並提供了各種 Hessian 矩陣近似選項和 preconditioner。基於增廣 Lagrangian 法的 PENNON 套件 [184] 則具有允許半定矩陣限制的優點。

§17.5 Perspectives and Software

界限限制和無受限 Lagrangian 方法的一個弱點是它們在

$$\mathcal{L}_A(x, \lambda; \mu) = f(x) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i c_i(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^{m} c_i^2(x) \tag{38}$$

中將限制平方，從而使限制變得複雜；只有通過最佳化增廣 Lagrangian 才能實現可行性的進展。相反，LCL 的形式

$$\min_{x} F_k(x) \tag{42a}$$

subject to

$$c(x_k) + A_k(x - x_k) = 0, \ell \leq x \leq u. \tag{42b}$$

通過在限制上執行類似牛頓步進量的操作，促進了朝著可行性的穩步進展。毫不奇怪，數值經驗表明，對於具有線性限制的問題，MINOS 比 LANCELOT 具有優勢。

§17.5 Perspectives and Software

界限限制和無受限 Lagrangian 方法的一個弱點是它們在

$$\mathcal{L}_A(x,\lambda;\mu) = f(x) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i c_i(x) + \frac{\mu}{2}\sum_{i=1}^{m} c_i^2(x) \tag{38}$$

中將限制平方，從而使限制變得複雜；只有通過最佳化增廣 Lagrangian 才能實現可行性的進展。相反，LCL 的形式

$$\min_x F_k(x) \tag{42a}$$

$$\text{subject to}$$

$$c(x_k) + A_k(x - x_k) = 0, \ell \leqslant x \leqslant u. \tag{42b}$$

通過在限制上執行類似牛頓步進量的操作，促進了朝著可行性的穩步進展。毫不奇怪，數值經驗表明，對於具有線性限制的問題，MINOS 比 LANCELOT 具有優勢。

§17.5 Perspectives and Software

從 §17.3 的增廣 Lagrangian 中可以構建出平滑的 exact 懲罰函數，但這類懲罰函數的構建要複雜得多。例如我們提到 Fletcher 對於等式限制問題定義的函數如下：

$$\phi_{\mathrm{F}}(x;\mu) = f(x) - \lambda(x)^{\mathrm{T}} c(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x)^2,$$

其中 Lagrange 乘子估計值 $\lambda(x)$ 是 x 的函數且通過最小平方有明確定義的，其估計值為：

$$\lambda(x) = \left[A(x)A(x)^{\mathrm{T}}\right]^{-1} A(x) \nabla f(x). \tag{49}$$

函數 ϕ_{F} 可微並 exact，儘管定義 exactness 屬性的 threshold value μ_* 並不像非光滑的 ℓ_1 懲罰函數那樣容易指定。ϕ_{F} 懲罰函數的缺點包括通過 (49) 評估 $\lambda(x)$ 的計算量大，更有甚者當 $A(x)$ 沒有完整秩時 $\lambda(x)$ 並不唯一定義，以及當 $A(x)$ 幾乎奇異時，λ 的估計可能很差。