Practical Optimization Algorithms

徐 翔

数学科学学院
浙江大学

May 8, 2023

第十讲: 线性规划 - 单纯形法 (Linear Programming - The Simplex Method)

简介(Introduction)

简介

- 一般形式：

$$\min_x \; c^T x \tag{10.1}$$
$$s.t. \; Ax = b, \tag{10.2}$$
$$x \geq 0. \tag{10.3}$$

其中$c, x \in R^n$, $b \in R^m$, $A \in R^{m\times n}$。

- 例如 $\min c^T x$, subject to $Ax \leq b$ 可以转化为

$$\min c^T x, \quad \text{subject to } Ax + z = b, z \geq 0.$$

- 把上面的x分裂成正部和负部:$x = x^+ - x^-$, 其中$x^+ = \max(x, 0)$, $x^- = \max(-x, 0)$.

$$\min \begin{bmatrix} c \\ -c \\ 0 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x^+ \\ x^- \\ z \end{bmatrix}, \text{subject to } [A \;\; -A \;\; I] \begin{bmatrix} x^+ \\ x^- \\ z \end{bmatrix} = b; \begin{bmatrix} x^+ \\ x^- \\ z \end{bmatrix} \geq 0$$

- 如果是$Ax \geq b$, 则可以使用 $Ax - y = b$, $y \geq 0$

最优性条件和对偶

- 构造拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(x;\lambda,s)=c^Tx-\lambda^T(Ax-b)-s^Tx$$

- 由KKT条件可以得到

$$\begin{aligned}&A^T\lambda+s=c,\ Ax=b,\\&x\geq 0,\ s\geq 0,\\&x_is_i=0,i=1,2,\cdots,n.\end{aligned}$$

- 最后一个条件通常写成$x^Ts=0$(由于$s_i>0,\ x_i>0$).
- 设$(x^*;\lambda^*,s^*)$代表解,则

$$c^Tx^*=(A^T\lambda^*+s^*)^Tx^*=(Ax^*)^T\lambda^*=b^T\lambda^*$$

即所有满足KKT条件的$(x;\lambda,s)$使得主问题和对偶问题的目标函数值相等.

- 可以证明x^*是全局最优解. 设$\bar{x}$是可行点$A\bar{x}=b,\ \bar{x}\geq 0$ 则

$$c^T\bar{x}=(A\lambda^*+s^*)^T\bar{x}=b^T\lambda^*+\bar{x}^Ts^*\geq b^T\lambda^*=c^Tx^*$$

最优性条件和对偶

- 对偶问题为：

$$\max\ b^T\lambda,\ \text{subject to}\ A^T\lambda \le c.$$

- 引入"松弛"变量s

$$\max b^T\lambda,\ \text{subject to}\ A^T\lambda + s = c, s \ge 0$$

- 主问题-对偶问题之间的关系：
  $\min\ -b^T\lambda,\ \text{subject to}\ c - A^T\lambda \ge 0.$
- 记x是上述问题的拉格朗日乘子，
  $\bar{\mathcal{L}}(\lambda; x) = -b^T\lambda - x^T(c - A^T\lambda)$
- KKT条件为：
  $\nabla_\lambda \bar{\mathcal{L}}(\lambda; x) = Ax - b = 0\ , A\lambda \le c,$
  $x \ge 0, \qquad x_i(c - A\lambda)_i = 0.$

记 $s = c - A\lambda$, 上述KKT条件与主问题KKT条件完全一致.

该KKT条件是对偶问题的充分条件
假设x^*, λ^*满足KKT条件，$\bar\lambda$满足对偶问题约束条件，则

$$\begin{aligned} b^T\bar\lambda &= (Ax^*)^T\bar\lambda \\ &= (x^*)^T(A\bar\lambda - c) + c^Tx^* \\ &\le c^Tx^* = b^T\lambda^* \end{aligned}$$

因此, λ^*是对偶问题的解.

最优性条件和对偶

定理：强对偶

以下两种情况只有一种出现：

1. 如果主问题(或对偶问题)有一个有限解, 那么对偶问题(或主问题)也有一个有限解，且两个问题的目标函数值相等。
2. 如果主问题(或对偶问题)的目标函数值无界，则对偶问题(或主问题)的可行域是空集。

Proof.

1. 略
2. 如果主问题无界, 则存在一列x_k, 满足$c^Tx_k \to -\infty$, $Ax_k = b$, $x_k \geq 0$.
如果对偶问题是可行的, 即至少存在一个$\bar{\lambda}$, 满足$A\bar{\lambda} \leq c$.
再根据$x_k \geq 0$, 可以得到$\bar{\lambda}^T Ax_k \leq c^T x_k$.
可以推出$\bar{\lambda}^T b = \bar{\lambda}^T Ax_k \leq c^T x_k \to -\infty$. 这产生了矛盾.

$\square$

可行域的几何性质

假设A是行满秩的，并且$A \in R^{m\times n}$.

定义：基本可行点(Basic feasible point)

x是基本可行点，当且仅当

- 存在某个指标子集$\mathcal{B} \subset \{1, \cdots, n\}$, $|\mathcal{B}| = m$.
- 如果$i \notin \mathcal{B}$, $x_i = 0$. (即$i \in \mathcal{B}$, x_i不活跃).
- 如果B是非奇异的.
  这里B是由$\mathcal{B}$构成的$m \times m$矩阵, $B = [A_i]_{i\in\mathcal{B}}$, 其中$A_i$是$A$的第$i$列.

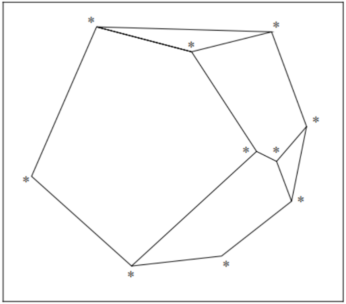
这里B通常被称为基矩阵(basis matrix), $\mathcal{B}$被称为基(basis)

单纯形方法的基本策略：只需要检查基本可行点就可以收敛到最优解.

可行域的几何性质

定理：

1. 如果主问题可行域非空, 则至少存在一个基本可行点.
2. 如果主问题存在解, 则至少存在一个解是基本可行点.
3. 如果主问题是可行并且有界, 则至少存在一个最优解.



- 对于线性约束条件，可行域是多面体
- 多面体的顶点就是基本可行点.(几何形式与代数表达式的对应关系)

定理

所有的基本可行点都是可行域 $\mathcal{F}=\{x|Ax=b,x\geq 0\}$的顶点，反之亦然.

可行域的几何性质

Proof.

- "$\rightarrow$". 设x是基本可行点, 即存在$\mathcal{B}$, s.t. $B = [A_i]_{i \in \mathcal{B}}$ 非奇异. 不妨设$\mathcal{B} = 1, 2, \cdots, m$, 则$x_{m+1}, \cdots, x_n = 0$. 记 $x_B = (x_1, \cdots, x_m)$.
  假设x不是可行域的顶点，即x可以由另外两个可行点线性组合, 即存在$y, z \in \mathcal{F}$且$y \neq x, z \neq x$, s.t., $x = \alpha y + (1-\alpha) z, \alpha > 0$.
  可以定义$y_B = (y_1, \cdots, y_m)$, $z_B = (z_1, \cdots, z_m)$. 显然由于$Ax = Ay = Az = b$能推出$Bx_B = By_B = Bz_B = b$.
  由于B可逆, $x_B = y_B = z_B$，进而可以得到 $x = y = z$. 产生矛盾.
- "$\leftarrow$". 设x是顶点, 其中的非零分量是$x_1, \cdots, x_p$. 假设对应的列向量$A_1, \cdots, A_p$是线性相关的, 即$A_p = \sum_{j=1}^{p-1} z_j A_j$, 可以构造一个扰动的向量 $x(\varepsilon) = x + \varepsilon z = x + \varepsilon(z_1, z_2, \cdots, z_{p-1}, -1, 0, \cdots, 0)$, 当$\varepsilon$很小时，可以得出$Ax(\varepsilon) = b, x \geq 0$, i.e., $x(\varepsilon) \in \mathcal{F}$.
  这样我们可以取某个$\hat{\varepsilon}$使得$x(\hat{\varepsilon})$和$x(-\hat{\varepsilon})$都是可行的. 显然$x(0)$是落在这两点的连线上的, 即x不是顶点
  所以, 如果x是顶点, $A_1, \cdots, A_p$一定线性无关. 如果$p = m$, 那么就已经证明了结果. 如果$p < m$, 由于A是行满秩的, 我们可以继续从剩下的$n-p$个中挑选$m-p$个A_i加入到$A_1, \cdots, A_p$组成$\mathcal{B}$. 证毕

单纯形方法简介

- 单纯形方法是迭代法，从一个顶点到另一个顶点.
- 绝大多数迭代步，目标函数值都在降低（除非是无界问题）
- 迭代步中，最主要是确定如何更新$\mathcal{B}$，每一步迭代都需要加入一个新的指标q, 去除一个指标p.
- 可以从KKT条件中得到一些启发.

单纯形方法简介

KKT条件:

$A^T\lambda + s = c,\ Ax = b,$

$x \geq 0,\ s \geq 0,$

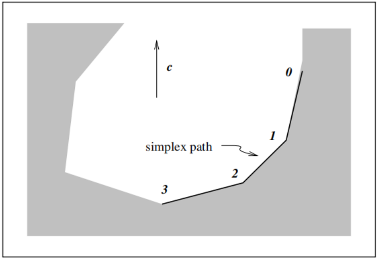
$x_i s_i = 0, i = 1, 2, \cdots, n.$

- 定义非基本指标集合 $\mathcal{N} = \{1, \cdots, n\} \setminus \mathcal{B}$
- 定义相应的$x_B = [x_i]_{i\in\mathcal{B}}$, $x_N = [x_i]_{i\in\mathcal{N}}$, s_B, s_N, λ_B, λ_N, c_B, c_N.
- 根据$Ax = Bx_B + Nx_N = b$,而$x_N = 0$, 所以$x_B = B^{-1}b \geq 0$

- 根据互补性条件$s_B = 0$, 再根据$[B\ N]^T\lambda + [s_B;\ s_N] = [c_B;\ c_N]$, 得到$\lambda = B^{-T}c_B$, $N^T\lambda + s_N = c_N$. 即可以得到$s_N = c_N - (B^{-1}N)^T c_B$
- 到目前为止, KKT条件中仅有$s \geq 0$没有强制满足. 如果上式计算中$s_q < 0$, 说明可以把相应的x_q从0变为正的并保持x仍是可行的，对应的目标函数值$c^T x$可以降低.
- 假设更新x_q后的x记为x^+, 由于在$\mathcal{N} \setminus \{q\}$中的分量都没发生变化, 这些$x_i^+ = 0$, 那么$\mathcal{B}$中$x_B^+$应该满足$Ax^+ = Bx_B^+ + A_q x_q^+ = b = Bx_B$, 即$x_B^+ = x_B - B^{-1}A_q x_q^+$
- 我们来计算新的目标函数值 $c^T x^+ = c_B^T x_B^+ + c_q x_q^+ = c_B^T x_B - c_B^T B^{-1} A_q x_q^+ + c_q x_q^+$, $c_B^T B^{-1} A_q x_q^+ = (c_q - s_q) x_q^+$
- 最终得到$c^T x^+ = c_B^T x_B - (c_q - s_q)x_q^+ + c_q x_q^+ = c^T x + s_q x_q^+$.

单纯形法简介

- 原则上可以一直增大x_q直到碰到下一个顶点，即某个$x_p^+ = 0$, $p \in \mathcal{B}$. 将p移入$\mathcal{N}$中.
- 或者如果可以一直增大x_q到无穷大而不碰到下一个顶点，那说明原问题无界.



定理

对于非退化的有界线性规划问题，使用单纯形方法可以在有限步之内终止.

单纯形方法

单步单纯形方法

给定$\mathcal{B}$, $\mathcal{N}$, $x_B = B^{-1}b \geq 0$, $x_N = 0$;
求解$B^T\lambda = c_B$,
计算$s_N = c_N - N^T\lambda$;
if $s_N \geq 0$
  stop;(找到了最优点)
else
  选择$q \in \mathcal{N}$ with $s_q < 0$,
  计算$Bd = A_q$;
  if $d \leq 0$
    stop; (问题无界)
  else
  计算$x_q^+ = \min_{i|d_i>0} \frac{(x_B)_i}{d_i}$, 记录最小的指标为$p$;
  更新$x_B^+ = x_B - dx_q^+$, $x_N^+ = (0, \cdots, 0, x_q^+, 0, \cdots, 0)^T$;
  把q加入$\mathcal{B}$, p移除$\mathcal{B}$.
  end(if)
end(if)

一个例子

考虑如下问题

$$\begin{aligned} \min \quad & -4x_1 - 2x_2 \\ s.t. \quad & x_1 + x_2 + x_3 = 5; \\ & 2x_1 + \frac{1}{2}x_2 + x_4 = 8, \\ & x \geq 0. \end{aligned}$$

- 选取初始的$\mathcal{B} = \{3, 4\}$，可以得到$B = I$,,

$$x_B = \begin{bmatrix} 5 \\ 8 \end{bmatrix}, \lambda = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, s_N = \begin{bmatrix} -3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

- 计算目标函数值$c^T x = 0$. 选取$q = 1$, $A_q = [1, 2]^T$, 计算$Bd = A_q$得到$d = [1, 2]^T$.
- 计算$x_4^+ = \min_{i|d_i>0} \frac{(x_B)_i}{d_i} = 4$, 对应的指标是4. 即可以更新$\mathcal{B} = \{3, 1\}$, $\mathcal{N} = \{4, 2\}$

- 经计算得到

$$x_B = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix}, \lambda = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{3}{2} \end{bmatrix}, s_N = \begin{bmatrix} \frac{3}{2} \\ -\frac{5}{4} \end{bmatrix}$$

- 计算目标函数值$c^T x = -12$. 选取$q = 2$, $A_2 = [1, \frac{1}{2}]^T$, 计算$Bd = A_q$得到$d = [\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}]^T$.
- 计算$x_2^+ = \min_{i|d_i>0} \frac{(x_B)_i}{d_i} = \frac{4}{3}$, 对应的指标是2. 即可以更新$\mathcal{B} = \{2, 1\}$, $\mathcal{N} = \{4, 3\}$

- 第三次迭代计算得到 $x_B = (x_2, x_1)^T = (\frac{4}{3}, \frac{11}{3})^T$, $\lambda = (-\frac{5}{3}, -\frac{2}{3})^T$, $s_N = (\frac{7}{3}, \frac{5}{3})^T$.
- 此时目标函数值 $c^T x = -\frac{41}{3}$.

THANKS FOR YOUR ATTENTION