二次规划问题的解法

原创 郑家明 LOA算法学习笔记 2021-01-27 15:40

01 二次规划问题

规划问题一般有目标函数 f 和参数向量 x ，目标函数表达我们的目标或衡量标准，参数向量则是用于优化目标函数的自变量。根据目标函数和参数向量是否有约束，可以将优化问题分为无约束的优化问题和有约束的优化问题，约束可以是等式约束（ $h(x)=0$ ）或者不等式约束（ $g(x)\leq 0$ ）。

二次规划问题，是目标函数为二次函数且约束为线性约束的优化问题，其标准形式为

$$\begin{aligned} min\ &\frac{1}{2}x^THx+c^Tx \\ s.t.\ \ &Ax=b \\ &x\geq 0 \end{aligned}$$

其中 H 是半正定矩阵， x 为参数向量，要求为非负， c 为目标函数线性部分的参数系数， A,b 分别是等式线性约束中系数矩阵和常数约束。

针对二次规划问题，由于目标函数不再是线性的，所以无法直接使用线性规划问题中的单纯形法进行求解，不过我们可以通过KTT条件将二次规划问题转化为线性规划问题，进而使用改进的单纯形法解得到的线性规划问题；或者，我们可以用外点法或内点法将约束项与目标函数整合为辅助函数，转换为无约束问题求解。

02 改进的单纯形法解二次规划问题

2.1 KKT条件

KKT条件由 William Karush, Harold W. Kuhn和 Albert W. Tucker提出。对于优化问题

$$\begin{aligned} min\ &f(x) \\ s.t.\ \ &h(x)=0 \\ &g(x)\geq 0 \end{aligned}$$

为了满足约束条件和目标函数 $f(x)$ 的最优性，假设存在向量 λ,μ ，可以构造拉格朗日函数

$$L(x)=f(x)+\lambda h(x)+\mu g(x)$$

在最优情况下，拉格朗日函数应该在导数为0处取得极值，另外还需要 $\mu^Tg(x)=0,\mu\geq 0$ ，才能使得拉格朗日函数的最优解与目标函数的最优解等价，所以有下述KKT条件成立

$$
\begin{aligned}
\bigtriangledown f(x) + \lambda \bigtriangledown h(x) + \mu \bigtriangledown g(x) = 0 \\
\mu^T g(x) = 0 \\
h(x) = 0 \\
g(x) \le 0 \\
\mu \ge 0
\end{aligned}
$$

2.2 根据KKT条件解二次规划问题

对标准形式的二次规划问题，其达到最优化的必要条件可以是KKT条件，也就是将二次规划问题的各项参数代入到KKT条件中，可以得到

$$
\begin{aligned}
Hx + \lambda A^T - \mu - c = 0 \\
Ax = b \\
x^T \mu = 0 \\
x, \mu \ge 0
\end{aligned}
$$

可以看到，KKT条件已经具备了线性规划问题中的线性约束和非线性约束部分，只缺少一个目标函数，就能得到一个标准的线性规划问题。添加松弛变量 μ_1, μ_2 和线性目标函数 $\sum_i (\mu_1)_i + \sum_j (\mu_2)_j$ ，我们可以得到一个最小化的规划问题

$$
\begin{aligned}
& min \ \sum_i (\mu_1)_i + \sum_j (\mu_2)_j \\
& s.t. \ \ Hx + \lambda A^T - \mu + \mu_2 = -c \\
& \qquad Ax + \mu_1 = b \\
& \qquad x^T \mu = 0 \\
& \qquad x, \mu, \mu_1, \mu_2 \ge 0
\end{aligned}
$$

那么，可以构建新的参数矩阵

$$
A_0 = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 & I & 0 \\ H & A^T & -I & 0 & I \end{bmatrix}, b_0 = \begin{bmatrix} b \\ -c \end{bmatrix}, c_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, x_0 = \begin{bmatrix} x \\ \lambda \\ \mu \\ \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix},
$$

新的问题可以表述为

$$\begin{aligned} &min\ c_0^T x_0 \\ &s.t.\ \ A_0 x_0 = b_0 \\ &\qquad\ \ x^T \mu = 0 \\ &\qquad\ \ x_0 \geq 0 \end{aligned}$$

其中，还有一个非线性约束 $x^T \mu = 0$ 需要进行改进。由拉格朗日函数和松弛变量的关系，易得只有当 μ_1, μ_2 均为0时，才能取到原目标函数的最优，那么非线性约束 $x^T \mu = 0$ 可以改写为

$$x_i, \mu_i \geq 0, i = 1, 2, \ldots, n$$

最终，通过以上的变换，得到了一个新的线性规划问题

$$\begin{aligned} &min\ c_0^T x_0 \\ &s.t.\ \ A_0 x_0 = b_0 \\ &\qquad\ \ x_0 \geq 0 \\ &\qquad\ \ x_i, \mu_i \geq 0, i = 1, 2, \ldots, n \end{aligned}$$

可以使用单纯形法解该问题，并且该线性规划问题的最优解就是二次规划问题的最优解。

03 用外点法、内点法解二次规划问题

3.1 罚函数与外点法

对于约束问题

$$\begin{aligned} &min\ f(x) \\ &s.t.\ \ g_i(x) \geq 0, i = 1, 2, \ldots, m \\ &\qquad\ \ h_j(x) = 0, j = 1, 2, \ldots, l \end{aligned}$$

将优化问题的目标函数和约束函数组成辅助函数，可以将原来的约束问题转化为极小化辅助函数的无约束问题。具体做法是，对于标准形式的优化问题的不等式约束，可以引入下述定义的可行性函数

$$f_{pen} = \sum_{i=1}^{m} f_{pen\_i},$$

$$\text{其中，} f_{pen\_i} = \begin{cases} 0 & \text{如果} max_i\ g_i(x) \leq 0, \\ g_i(x)^t & \text{如果} max_i\ g_i(x) \geq 0.(t \geq 1) \end{cases}$$

对于等式约束，可以引入可行性函数

$$\phi(x)=\sum_{j=1}^{l}h_j^2(x)$$

在原来的最小化的目标函数基础上添加可行的罚函数，就得到了新的最小化问题

$$min\ f(x)+\beta f_{pen}(x)+\phi(x)$$

显然，新的最小化问题的最优解接近原问题的最优解时，将要求 $\beta f_{pen}(x)+\phi(x)$ 这一部分趋近于0，也就是 $\beta f_{pen}(x),\phi(x)$ 均趋近于0。

其中罚因子 β 是很大的正数，就需要新的最小化问题的最优解使得罚函数部分无限趋近于0，否则现行最小化问题的最优解将不一定以原最小化问题的最优解，那么 x 应该是在可行域外部进行迭代，进而迭代靠近可行域；并且 β 越大，新的最小化问题对原最小化问题最优解的近似度就越好。

常用的罚函数还有：

$$\begin{aligned}
&f_{pen}=\beta\sum_{i=1}^{m}max(0,g_i(x)),\beta\gg 1,\\
&f_{pen}=\beta\sum_{i=1}^{m}max(0,g_i(x))^2,\beta\gg 1\\
&f_{pen}=max_i\ max(0,e^{\beta g_i(x)}-1)^2,\beta\gg 1
\end{aligned}$$

当 $g_i(x)$ 是光滑的时候，第二与第三种罚函数对变量 x 的导数是连续的，可以使用基于梯度的优化方法来最小化新的目标函数。

例题：考虑问题

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

解：构造障碍函数

$$F(x,\beta)=(x_1-1)^2+x_2^2+\beta[max\{0,x_2-1\}]^2$$

用解析法解 $F(x,\beta)$ 的最小值：

$$\frac{\partial F}{\partial x_1}=2(x_1-1)$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_2}=\begin{cases}2x_2 & x_2\leq 1\\ 2x_2+2\beta(x_2-1) & x_2>1\end{cases}$$

令 $\frac{\partial F}{\partial x_1}=\frac{\partial F}{\partial x_2}=0$ ，解得 $x^*=(1,\frac{\beta}{\beta+1})^T$ ；
当 $\beta\rightarrow+\infty$ 时，有 $x^*=(1,1)^T$ 。

3.2 内点法解二次规划问题

内点法的思想是在迭代中总是从内点出发，并保持在可行域内部进行搜索。适用于只有不等式约束的问题

$$\begin{aligned}&min\ f(x)\\ &s.t.\ g_i(x)\geq 0, i=1,2,\ldots,m\end{aligned}$$

其可行域为 $S=x|g_i(x)\geq 0, i=1,2,\ldots,m$ 。
可以通过定义障碍函数 $G(x,r)=f(x)+rB(x)$ 来保持解该问题时迭代点在可行域内部。 $B(x)$ 是连续函数，当 x 趋近于可行域的边界时，有 $B(x)\rightarrow+\infty$ ，所以可以限制在可行域内部寻找解； r 是很小的正数，当 x 趋近于边界时，有 $G(x,r)\rightarrow+\infty$ 。所以，可以通过求解下列问题得到原问题的近似解

$$\begin{aligned}&min\ G(x,r)\\ &s.t.\ x\in S\end{aligned}$$

由于已经将不等式约束通过 $B(x)$ 加入到目标函数中了，在求解迭代时，会自动实现将迭代点限制在可行域内部的功能，也就是这个新目标函数 $G(x,r)$ 可以当作无约束问题来求解。
r 取值越小，新的优化问题的最优解会越接近原问题最优解，但是 r 太小也会问题的求解计算带来很大困难。常用的 $B(x)$ 形式有

$$B(x)=\sum_{i=1}^{m}\frac{1}{g_i(x)}$$
$$B(x)=-\sum_{i=1}^{m}logg_i(x)$$

例题：考虑问题

$$\begin{aligned}&min\ f(x)=-x_1x_2\\ &s.t.\ 1-x_1^2-x_2^2\leq 0\end{aligned}$$

解：构造障碍函数
$g(x,r)=-x_1x_2-rln(x_1^2+x_2^2-1)$
用解析法求解 $g(x,r)$ 的最小值：

$$\frac{\partial p}{\partial x_1} = -x_2 - \frac{2rx_1}{x_1^2 + x_2^2 - 1}$$
$$\frac{\partial p}{\partial x_2} = -x_1 - \frac{2rx_2}{x_1^2 + x_2^2 - 1}$$

令 $\frac{\partial p}{\partial x_1} = \frac{\partial p}{\partial x_2} = 0$，解得 $x_1 = \pm\sqrt{r + \frac{1}{2}}, x_2 = \pm\sqrt{r + \frac{1}{2}}$。
当 $r \to 0$ 时，有 x 趋向于原问题的最优解为 $x^* = (\pm\frac{\sqrt{2}}{2}, \pm\frac{\sqrt{2}}{2})^T$

04 总结

二次规划问题不同于简单点线性规划问题，没有办法直接用单纯形法求解。但就正如算法课中所讲的，我们可以尝试找一个decompose的方法，将一个暂时没有解决思路的问题转化为已经知道求解方法的问题，KKT条件正好是这么一个突破口，可以通过KKT条件将二次规划问题转换为线性规划问题，进而使用单纯形法解线性规划问题。外点法和内点法也是使用的简化问题的思想，将有约束问题转换为无约束问题，求解较为简单的无约束问题。