数值优化（Numerical Optimization）学习系列-二次规划（Quadratic Programming）

下一步　于 2015-12-27 18:56:13 发布

概述

> 二次规划问题是目标函数是二次的，并且约束是线性的问题。在非线性约束最优化问题中非常重要，通常作为其他问题的子步骤存在。
> 1.二次规划问题
> 2.二次规划求解算法
> 3. 总结

二次规划问题

标准形式

二次规划问题的标识形式如下

$$
\begin{aligned}
min q(x) &= \frac{1}{2}x^TGx + x^Tc \\
s.t.\, a_i^Tx &= b_i,\ i \in \mathcal{E} \\
a_i^Tx &\ge b_i,\ i \in \mathcal{I}
\end{aligned}
$$

如果矩阵G为半正定，则该问题为凸二次规划，否则为非凸二次规划。本节讨论重点凸二次规划问题。

二次规划求解算法

等式约束二次规划

在标准形式下，去掉不等式约束，可以得到等式约束二次规划问题的标准形式。

$$
\begin{aligned}
minq(x) &= \frac{1}{2}x^TGx + x^Tc \\
s.t. Ax &= b
\end{aligned}
$$

其中矩阵A一般为行满秩矩阵。

KKT条件

根据KKT条件可以得到，最优解应该满足的一阶条件为

$$
\begin{bmatrix} G & -A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^* \\ \lambda^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c \\ b \end{bmatrix}
$$

当某搜索步骤x时，根据 $x^* = x + p$代入上式公式，可以得到搜索步长。

$$
\begin{bmatrix} G & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -p \\ \lambda^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g \\ h \end{bmatrix}
$$

其中 $h = Ax - b, g = c + Gx, p = x^* - x$，上面矩阵就是KKT矩阵。

> 1.当是半正定时，KKT矩阵非奇异，等式约束最优化问题有唯一的解，其中Z是矩阵A的零空间，即AZ=0
> 2. 并且该解是全局最优解

求解算法

因此等式约束最优化问题转换为求解上述KKT矩阵对应的等式，常用的方法包括
1. 直接求解方程，高斯消元法等
2. Schur-Complement方法
3. 零空间方法
以上方法都是利用代数方法直接求解方程。对于问题规模比较大的问题可以采用迭代方法，例如CG或者Krylov方法，相对后者比较有效。

不等式约束问题

对于不等式约束问题，常见的思路包括有效集方法、内点法和梯度映射等方法。

KKT条件

根据二次规划的标准形式可以得到，对应的拉格朗日方程为

$$\mathcal{L}(x,\lambda)=\frac{1}{2}x^TGx+x^Tc-\sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}\lambda_i(a_i^Tx-b_i)$$

根据有效集的定义 $\mathcal{A}(x^*)=$ （$i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}|a_i^Tx^*=b_i$）
KKT条件为

$$Gx^*+c-\sum_{i\in\mathcal{A}(\lambda_i^*a_i)}=0$$
$$a_i^Tx=b_i,\ i\in\mathcal{E}$$
$$a_i^Tx\geq b_i,\ i\in\mathcal{I}$$
$$\lambda_i^*\geq 0$$

> 满足上述KKT条件的解是全局最优解

有效集算法

该算法和线性规划的单纯形算法类似，每次固定一个工作集合，然后求解等式约束的QP问题。对于得到的解进行约束判断是否满足以及存在其他最优解，否则进行换入和换出操作。

1. 对于每次迭代过程，需要寻找一个最优搜索方向p，使得由于，因此问题转换为
2. 问题转换等式约束最优化问题，根据求解算法得到搜索方向
3. 由于不等式约束还要满足其他不等式，因此下一个搜索点，由于对于每个不等式都应该满足，当时肯定满足，否则
4. 综合所有的不等式约束，可以得到

$$\alpha_k=min(1,\min_{a_i^Tp_k\leq 0}(\frac{b_i-a_i^Tx_k}{a_i^Tp_k}))$$

5. 当某个 $\alpha_k<1$时，说明被第K个不等式阻塞，说明 $a_i^Tp_k\leq 0$，此时可以将该不等式约束放入到工作集合中。
6. 当搜索方向p=0时，说明当前点为最优点，从而计算对应的拉格朗日因子，如果全部大于0，则满足所有的KKT条件，否则去掉该约束能够继续减小目标函数值。

综上该算法伪代码如下

Algorithm 16.3 (Active-Set Method for Convex QP).

Compute a feasible starting point x_0;
Set $\mathcal{W}_0$ to be a subset of the active constraints at x_0;
for $k = 0, 1, 2, \ldots$
  Solve (16.39) to find p_k;
  if $p_k = 0$
    Compute Lagrange multipliers $\hat{\lambda}_i$ that satisfy (16.42), with $\hat{\mathcal{W}} = \mathcal{W}_k$;
    if $\hat{\lambda}_i \geq 0$ for all $i \in \mathcal{W}_k \cap \mathcal{I}$
      stop with solution $x^* = x_k$;
    else
      $j \leftarrow \arg\min_{j \in \mathcal{W}_k \cap \mathcal{I}} \hat{\lambda}_j$;
      $x_{k+1} \leftarrow x_k$; $\mathcal{W}_{k+1} \leftarrow \mathcal{W}_k \backslash \{j\}$;
  else (* $p_k \neq 0$ *)
    Compute α_k from (16.41);
    $x_{k+1} \leftarrow x_k + \alpha_k p_k$;
    if there are blocking constraints
      Obtain $\mathcal{W}_{k+1}$ by adding one of the blocking constraints to $\mathcal{W}_k$;
    else
      $\mathcal{W}_{k+1} \leftarrow \mathcal{W}_k$;
end (for)

实际考虑点
1.和单纯性算法类似，在算法开始，需要找到一个可行解，寻找方法类似，可以构造PhraseI或者PhraseII问题。
2.往工作集 $\mathcal{W}$中添加不等式约束时，一般要求在W中的约束线性独立。
3. 当找到最优点时，但是不满足拉格朗日因子非负约束时，去掉约束时一般选择绝对值较大的。

内点法

类似于线性规划的内点法方法，计算问题的中心路径，直到趋近于最优解。
该内点法主要针对凸二次规划问题，形式如下

$$
\begin{gathered}
min q(x) = \frac{1}{2} x^T G x + x^T c \\
s.t.\, Ax \geq b
\end{gathered}
$$

KKT条件为

$$
\begin{gathered}
Gx - AT\lambda + c = 0 \\
Ax - b \geq 0 \\
(Ax - b)^T \lambda = 0 \\
\lambda \geq 0
\end{gathered}
$$

添加松弛变量Y则有

$$minq(x)=\frac{1}{2}x^TGx+x^Tc$$
$$s.t.\,Ax\geq b$$

KKT条件为

$$Gx-AT\lambda+c=0$$
$$Ax-y-b=0$$
$$y^T\lambda=0$$
$$(y,\lambda)\geq 0$$

定义度量参数为 $\mu=\frac{y^T\lambda}{m}$，则问题转换为求解中心路径，

$$F(x,y,\lambda;\sigma\mu)=\begin{bmatrix}Gx-A^T\lambda+c\\Ax-y-b\\Y\Lambda e-\sigma\mu e\end{bmatrix}=0$$

此时可以根据牛顿法进行求解得到步长，下下一个搜索点为 $(x,y,\lambda)+\alpha(\nabla x,\nabla y,\nabla\lambda)$
在实际问题中会在此基础上改进，牛顿方程如何求解，参数λ如何选取

梯度映射

梯度映射方法是对有效集算法的改进，不同于有效集算法，梯度映射方法每次都会选在多个参数变量加入到有效集中。但是该方法只限于求解如下问题

$$minq(x)=\frac{1}{2}x^TGx+x^Tc$$
$$s.t.\,l\leq x\leq\mu$$

对于G是否正定都能求解，思路如下
1. 在某步骤x，按照最速下降法求解下一个搜索点， $x_k+\alpha p$，由于约束限制，会被阻塞住，此时计算有效集。
2. 在上述有效集合的基础上，计算一个子问题，使得 $q(x^+)\leq q(x_k)$
3. 重复上述两个步骤。

总结

本节简要介绍了如下内容
1. 二次规划问题的形式
2. 二次规划常用算法的求解思路。

详细算法的实现，可以参考各个数值工具。