求解一类双线性规划问题的数值算法

答辩人：胡雨宽
指导老师：殷俊锋

同济大学数学科学学院

2019.6.4

提纲

提纲

问题背景

最优运输问题 (Villani '08):

- 建立有效比较概率分布的几何工具.
- 极小化将一概率分布" 运输" 到另一概率分布的" 花费".

Monge 问题

令 $P, Q \subset \mathbb{R}^d$. f 为 P 上的概率密度函数, g 为 Q 上的概率密度函数. $c : P \times Q \to [0, \infty)$ 为连续函数. Monge 问题

$$\inf_T M(T) := \int_P c(p, T(p)) f(p) \,\mathrm{d}p, \quad \text{s.t.}\, T\#f = g.$$

其中 $T\#f = g$ 定义为

$$\int_B g(q) \,\mathrm{d}q = \int_{T^{-1}(B)} f(p) \,\mathrm{d}p, \quad \forall B \subset Q,$$

c 可以看做是成本泛函.

问题背景 (续)

当 f, g 为**离散**概率分布函数:

- $P = \{p_1, \dots, p_m\}$, $Q = \{q_1, \dots, q_n\}$.
- $\{f_1, \dots, f_m\}, \{g_1, \dots, g_n\}$.

$$
(\mathrm{LP}) \quad \begin{array}{rl}
\displaystyle\min_{a_{ij}} & \displaystyle\sum_{i,j} c_{ij} a_{ij} \\
\text{s.t.} & \displaystyle\sum_{j} a_{ij} = f_i, \quad i = 1, \dots, m, \\
& \displaystyle\sum_{i} a_{ij} = g_j, \quad j = 1, \dots, n, \\
& a_{ij} \geq 0, \quad i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n,
\end{array}
$$

这里 $c_{ij} := c(p_i, q_j)$.

问题陈述

$$
\begin{aligned}
\min_{X,Y} \quad & \sum_{i\neq j} \frac{x_{ij}}{|r_i-r_j|} + \sum_{i\neq k} \frac{y_{ik}}{|r_i-r_k|} + \sum_{i,j,k:j\neq k} \frac{x_{ij}y_{ik}}{|r_j-r_k|} \\
\text{s.t.} \quad & \sum_j x_{ij} = \rho_i, \quad i=1,\dots,n, \\
& \sum_i x_{ij} = \rho_j, \quad j=1,\dots,n, \\
& \sum_k y_{ik} = \rho_i, \quad i=1,\dots,n, \\
& \sum_i y_{ik} = \rho_k, \quad i=1,\dots,n, \\
& x_{ij}, y_{ik} \geq 0, \quad i,j,k=1,\dots,n, \\
& x_{ii}, y_{ii} = 0, \quad i=1,\dots,n,
\end{aligned}
\tag{1}
$$

其中 $X, Y \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $r=(r_1,\dots,r_n)^T, \rho=(\rho_1,\dots,\rho_n)^T \in \mathbb{R}^n_+$. 将 $\{|r_i-r_j|\}$ 储存于 $R=(r_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 其中

$$
r_{ij} = \begin{cases} 1/|r_i-r_j|, & i\neq j, \\ 0, & i=j. \end{cases}
$$

研究现状

角度 1 **可分离约束的双线性规划.** 广泛的应用 (Konno '71等).

已有方法:

- 割平面法 (Ritter '66等).
- 分支定界法 (Falk '73等).

角度 2 **非凸二次规划.**

已有方法 (Nocedal/Wright '06):

- 逐步二次规划 (SQP).
- 积极集法 (Active-set Methods).
- 内点法 (Interior-point Methods).
- ...

研究现状

角度 1 **可分离约束的双线性规划.** 广泛的应用 (Konno '71等).

已有方法:

- 割平面法 (Ritter '66等).
- 分支定界法 (Falk '73等).

角度 2 **非凸二次规划.**

已有方法 (Nocedal/Wright '06):

- 逐步二次规划 (SQP).
- 积极集法 (Active-set Methods).
- 内点法 (Interior-point Methods).
- ...

以上方法均以列向量为求解对象 $\Rightarrow$ **计算量问题**.

预备知识

标准矩阵内积

对 $\forall A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 定义

$$\langle A, B\rangle := \mathrm{tr}(A^T B) = \sum_{i,j} a_{ij} b_{ij}.$$

求导规则:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}A}\langle A, B\rangle = B, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}B}\langle A, B\rangle = A.$$

预备知识

标准矩阵内积

对 $\forall A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 定义

$$\langle A, B\rangle := \mathrm{tr}(A^T B) = \sum_{i,j} a_{ij} b_{ij}.$$

求导规则:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}A}\langle A, B\rangle = B, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}B}\langle A, B\rangle = A.$$

问题(1)即可化为矩阵形式:

$$\begin{aligned}
\min_{X,Y} \quad & \langle R, X\rangle + \langle R, Y\rangle + \langle Y, XR\rangle \\
\text{s.t.} \quad & X\mathbf{1} = \rho, X^T\mathbf{1} = \rho, \mathrm{tr}(X) = 0, X \geq 0, \\
& Y\mathbf{1} = \rho, Y^T\mathbf{1} = \rho, \mathrm{tr}(Y) = 0, Y \geq 0,
\end{aligned} \tag{2}$$

其中 $\mathbf{1}$ 为全 1 向量.

预备知识 (续)

实验表明 ...

假设

问题(2)的所有稳定点 (X, Y) 均满足 $X = Y$.

预备知识 (续)

实验表明 ...

假设

问题(2)的所有稳定点 (X, Y) 均满足 $X = Y$.

$\Rightarrow$ 简化问题:

$$\begin{aligned} \min_{X} \quad & 2\langle X, R\rangle + \langle X, XR\rangle \\ \text{s.t.} \quad & X\mathbf{1} = \rho, X^T\mathbf{1} = \rho, \mathrm{tr}(X) = 0, X \geq 0. \end{aligned} \tag{3}$$

预备知识 (续)

实验表明 ...

假设

问题(2)的所有稳定点 (X, Y) 均满足 $X = Y$.

$\Rightarrow$ 简化问题:

$$\begin{aligned} \min_{X} \quad & 2\langle X, R\rangle + \langle X, XR\rangle \\ \text{s.t.} \quad & X\mathbf{1} = \rho, X^T\mathbf{1} = \rho, \operatorname{tr}(X) = 0, X \geq 0. \end{aligned} \tag{3}$$

引入**分裂变量**$Z \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 进一步得到等价的

$$\begin{aligned} \min_{X,Z} \quad & f(X, Z) \triangleq 2\langle X, R\rangle + \langle Z, XR\rangle \\ \text{s.t.} \quad & X\mathbf{1} = \rho, \operatorname{tr}(X) = 0, \\ & Z^T\mathbf{1} = \rho, Z \geq 0, \\ & X = Z. \end{aligned} \tag{4}$$

之后**重点求解**问题(4).

提纲

最优性条件

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L}_0(X, Z, \lambda_1, \lambda_2, \mu, \Phi, \Omega) = & f(X, Z) - \langle \lambda_1, X\mathbf{1} - \rho \rangle - \langle \lambda_2, Z^T\mathbf{1} - \rho \rangle \\
& - \mu \mathrm{tr}(X) - \langle \Omega, Z \rangle - \langle \Phi, X - Z \rangle.
\end{aligned}
$$

最优性条件

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_0(X, Z, \lambda_1, \lambda_2, \mu, \Phi, \Omega) =& f(X, Z) - \langle \lambda_1, X\mathbf{1} - \rho \rangle - \langle \lambda_2, Z^T\mathbf{1} - \rho \rangle \\ & - \mu \mathrm{tr}(X) - \langle \Omega, Z \rangle - \langle \Phi, X - Z \rangle.\end{aligned}$$

问题(4)的 KKT 条件

若 (X^*, Z^*) 为问题(4)的解, 则存在拉格朗日乘子 $\mu^* \in \mathbb{R}, \lambda_1^*, \lambda_2^* \in \mathbb{R}^n$, $\Phi^*, 0 \le \Omega^* \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 使得

$$\begin{cases} \left.\begin{array}{l} \nabla_X \mathcal{L}_0 = 2R + Z^* R - \lambda_1^* \mathbf{1}^T - \Phi^* - \mu^* I = 0, \\ \nabla_Z \mathcal{L}_0 = X^* R - \mathbf{1}(\lambda_2^*)^T + \Phi^* - \Omega^* = 0, \end{array}\right\} & \text{稳定性条件或对偶可行性条件} \\ \left.\begin{array}{l} X^*\mathbf{1} = \rho, \mathrm{tr}(X^*) = 0, \\ (Z^*)^T \mathbf{1} = \rho, Z^* \ge 0, \\ \Omega^* \ge 0, \end{array}\right\} & \text{原始可行性条件,} \\ \Omega^* \circ Z^* = 0. & \text{互补松弛条件.} \end{cases} \tag{5}$$

这里 “$\circ$” 表示 Hadamard 积.

提纲

ADMM 算法简介

ADMM 算法 (介绍可见Boyd, et al. '10) 求解问题**一般形式**:

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbb{R}^d} \quad & \theta(x) := \sum_{i=1}^{n} \theta_i(x_i) + \ell(x_1,\ldots,x_n) \\
\text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{n} A_i x_i = b,
\end{aligned}
\tag{6}
$$

这里 $\theta_i : \mathbb{R}^{d_i} \mapsto (-\infty, +\infty]$, $\ell : \mathbb{R}^d \mapsto (-\infty, +\infty]$; $x_i \in \mathbb{R}^{d_i}$; $A_i \in \mathbb{R}^{m\times d_i}$, $b \in \mathbb{R}^m$. 问题(6)的增广拉格朗日函数为

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L}_A(x_1,\ldots,x_n,\bar{\mu}) = & \sum_{i=1}^{n} \theta_i(x_i) + \ell(x_1,\ldots,x_n) \\
& - \bar{\mu}^T \left(\sum_{i=1}^{n} A_i x_i - b \right) + \frac{\bar{\beta}}{2} \left\| \sum_{i=1}^{n} A_i x_i - b \right\|^2,
\end{aligned}
\tag{7}
$$

其中 $\bar{\mu} \in \mathbb{R}^m$ 为拉格朗日乘子, $\bar{\beta} > 0$ 为惩罚因子.

ADMM 算法简介 (续)

算法 1 n 块 ADMM 算法

输入: $x_2^0, \ldots, x_n^0, \bar{\mu}^0, k := 0.$

输出: $x_1^k, x_2^k, \ldots, x_n^k, \bar{\mu}^k.$

while 收敛性测试未通过 **do**

$$x_1^{k+1} := \arg \min_{x_1 \in \mathbb{R}^{d_1}} \mathcal{L}_A(x_1, \ldots, x_n^k, \bar{\mu}^k);$$

$\cdots\cdots$

$$x_n^{k+1} := \arg \min_{x_n \in \mathbb{R}^{d_n}} \mathcal{L}_A(x_1^{k+1}, \ldots, x_n, \bar{\mu}^k);$$

$$\bar{\mu}^{k+1} := \bar{\mu}^k - \bar{\beta} \left(\sum_{i=1}^{n} A_i x_i^{k+1} - b \right);$$

$k := k + 1;$

end while

ADMM 算法简介 (续)

现有工作简介:

- 两块凸可分问题 (Boyd, et al. '10, He/Yuan '12等): $n = 2, \ell = 0$, θ_1, θ_2 是凸函数.
- 多块凸可分问题 (He/Tao/Yuan '12, Cai/Han/Yuan '17等): $n \geq 3, \ell = 0$, $\theta_1, \ldots, \theta_n$ 是凸函数. 可能发散 (Chen, et al. '16). $\Rightarrow$ 无假设的困境.

ADMM 算法简介 (续)

现有工作简介:

- 两块凸可分问题 (Boyd, et al. '10, He/Yuan '12等): $n=2, \ell=0$, θ_1, θ_2 是凸函数.
- 多块凸可分问题 (He/Tao/Yuan '12, Cai/Han/Yuan '17等): $n \geq 3, \ell=0$, $\theta_1, \ldots, \theta_n$ 是凸函数. 可能发散 (Chen, et al. '16).
  $\Rightarrow$ **无假设的困境**.
- 凸不可分问题 (Hong, et al. '14, Chen, et al. '19). 即使 $n=2, \theta(\cdot)$ 凸, 仍然开放 (Hong/Luo/Razaviyayn '16).

ADMM 算法简介 (续)

现有工作简介:

- 两块凸可分问题 (Boyd, et al. '10, He/Yuan '12等): $n = 2, \ell = 0$, θ_1, θ_2 是凸函数.
- 多块凸可分问题 (He/Tao/Yuan '12, Cai/Han/Yuan '17等): $n \geq 3, \ell = 0$, $\theta_1, \ldots, \theta_n$ 是凸函数. 可能发散 (Chen, et al. '16).
  $\Rightarrow$ **无假设的困境**.
- 凸不可分问题 (Hong, et al. '14, Chen, et al. '19). 即使 $n = 2, \theta(\cdot)$ 凸, 仍然开放 (Hong/Luo/Razaviyayn '16).
- 非凸问题. 理论缺乏, 应用广泛.
  - Wen, et al. '13等: 需要强加无法验证的条件.
  - Hong/Luo/Razaviyayn '16: 只需要 θ_i's 和 ℓ 满足合理的正则条件, 且 $\bar{\beta}$ 充分大.

ADMM 算法简介 (续)

$$\mathcal{L}_A(X, Z, \Phi) = f(X, Z) - \langle \Phi, X - Z \rangle + \frac{\beta}{2} \|X - Z\|_F^2. \tag{8}$$

框架 2 求解问题 (4) 的 ADMM 算法框架

输入: $X^0, Z^0, \Phi^0, \beta^0, k := 0.$

输出: $X^k, Z^k, \Phi^k.$

1: **while** 收敛性测试未通过 **do**

2: $X^{k+1} = \arg\min_{X: X\mathbf{1}=\rho, \mathrm{tr}(X)=0} \mathcal{L}_A(X, Z^k, \Phi^k);$

3: $Z^{k+1} = \arg\min_{Z: Z^T\mathbf{1}=\rho, Z\geq 0} \mathcal{L}_A(X^{k+1}, Z, \Phi^k);$

4: 更新 Φ^k 得到 Φ^{k+1};

5: 如有需要, 更新 β^k 得到 β^{k+1};

6: $k := k + 1;$

7: **end while**

子问题的求解 $-X$ 子问题

省去上标 k, 改用 '+' 标记更新值.

$$\begin{aligned} \min_{X} \quad & 2\langle X, R\rangle + \langle Z, XR\rangle - \langle \Phi, X - Z\rangle + \frac{\beta}{2}\|X - Z\|_F^2 \\ \text{s.t.} \quad & X\mathbf{1} = \rho, \quad \operatorname{tr}(X) = 0. \end{aligned} \tag{9}$$

带等式约束的凸二次规划

子问题的求解 $-X$ 子问题

省去上标 k, 改用 '+' 标记更新值.

$$\begin{aligned} \min_X \quad & 2\langle X, R\rangle + \langle Z, XR\rangle - \langle \Phi, X - Z\rangle + \frac{\beta}{2}\|X - Z\|_F^2 \\ \text{s.t.} \quad & X\mathbf{1} = \rho, \quad \operatorname{tr}(X) = 0. \end{aligned} \tag{9}$$

带等式约束的凸二次规划$\Rightarrow$ **拉格朗日乘数法**.

$$\beta X + (2R + ZR - \lambda_1 \mathbf{1}^T - \mu I - \Phi - \beta Z) = 0, \tag{10a}$$

$$-\operatorname{tr}(X) = 0, \tag{10b}$$

$$-(X\mathbf{1} - \rho) = 0. \tag{10c}$$

子问题的求解 –X 子问题 (续)

由(10a),

$$X^+ = -\frac{1}{\beta}(2R + ZR - \lambda_1 \mathbf{1}^T - \mu I - \Phi - \beta Z). \tag{11}$$

由(11)和(10b),(10c), 令

$$\begin{aligned} M_1 &= 2R\mathbf{1} + ZR\mathbf{1} - \Phi\mathbf{1} - \beta Z\mathbf{1} + \beta\rho, \\ m_1 &= 2\mathrm{tr}(R) + \mathrm{tr}(ZR) - \mathrm{tr}(\Phi) - \beta\mathrm{tr}(Z). \end{aligned}$$

乘子为

$$\mu = \frac{1}{n-1}\left(-\frac{1}{n}\mathbf{1}^T M_1 + m_1\right), \quad \lambda_1 = \frac{1}{n}(M_1 - \mathbf{1}\mu). \tag{12}$$

(12)和(11)给出 X 子问题(9)的解 X^+.

子问题的求解 $-Z$ 子问题

$$
\begin{aligned}
\min_{Z} \quad & \langle Z, X^+R\rangle - \langle \Phi, X^+ - Z\rangle + \frac{\beta}{2}\|X^+ - Z\|_F^2 \\
\text{s.t.} \quad & Z^T\mathbf{1} = \rho, \quad Z \geq 0.
\end{aligned}
\tag{13}
$$

同样是凸二次规划, 但是有不等式约束.

子问题的求解 –Z 子问题

$$
\begin{aligned}
\min_{Z} \quad & \langle Z, X^{+}R\rangle - \langle \Phi, X^{+} - Z\rangle + \frac{\beta}{2}\|X^{+} - Z\|_F^2 \\
\text{s.t.} \quad & Z^T\mathbf{1} = \rho, \quad Z \geq 0.
\end{aligned} \tag{13}
$$

同样是凸二次规划, 但是**有不等式约束**. quadprog()?

子问题的求解 –Z 子问题

$$
\begin{aligned}
\min_{Z} \quad & \langle Z, X^{+}R\rangle - \langle \Phi, X^{+} - Z\rangle + \frac{\beta}{2}\|X^{+} - Z\|_F^2 \\
\text{s.t.} \quad & Z^T\mathbf{1} = \rho, \quad Z \geq 0.
\end{aligned} \tag{13}
$$

同样是凸二次规划，但是**有不等式约束**. quadprog()?

忽略非负约束，类似 X 子问题求超平面 $Z^T\mathbf{1} = \rho$ 上的一点 $\widetilde{Z}$:

$$
\lambda_2 = \frac{1}{n}\left[R\left(X^{+}\right)^T\mathbf{1} + \Phi^T\mathbf{1} - \beta\left(X^{+}\right)^T\mathbf{1} + \beta\rho\right],
$$

$$
\widetilde{Z} = \frac{1}{\beta}(X^{+}R + \Phi - \beta X^{+} - \mathbf{1}\lambda_2^T).
$$

子问题的求解 –Z 子问题 (续)

问题(13)的等价形式:

$$
\begin{aligned}
\min_{Z} \quad & \|Z - \widetilde{Z}\|_F^2 \\
\text{s.t.} \quad & Z^T \mathbf{1} = \rho, \quad Z \geq 0.
\end{aligned}
$$

子问题的求解 –Z 子问题 (续)

问题(13)的等价形式:

$$\begin{array}{ll} \min\limits_{Z} & \|Z - \widetilde{Z}\|_F^2 \\ \text{s.t.} & Z^T\mathbf{1} = \rho, \quad Z \geq 0. \end{array}$$

分块

$$Z = [z_1, \ldots, z_n], \quad \widetilde{Z} = [\tilde{z}_1, \ldots, \tilde{z}_n].$$

$$\Leftrightarrow \begin{array}{ll} \min\limits_{z_1,\ldots,z_n} & \sum\limits_{j=1}^{n} \|z_j - \tilde{z}_j\|^2 \\ \text{s.t.} & \mathbf{1}^T z_j = \rho_j, \quad z_j \geq 0, \quad j = 1, \ldots, n. \end{array} \tag{14}$$

quadprog() $\Rightarrow Z^+$.

子问题的求解 –Z 子问题 (续)

问题(13)的等价形式:

$$\begin{aligned} \min_{Z} \quad & \|Z - \widetilde{Z}\|_F^2 \\ \text{s.t.} \quad & Z^T\mathbf{1} = \rho, \quad Z \geq 0. \end{aligned}$$

分块

$$Z = [z_1, \ldots, z_n], \quad \widetilde{Z} = [\tilde{z}_1, \ldots, \tilde{z}_n].$$

$$\Leftrightarrow \begin{aligned} \min_{z_1,\ldots,z_n} \quad & \sum_{j=1}^{n} \|z_j - \tilde{z}_j\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{1}^T z_j = \rho_j, \quad z_j \geq 0, \quad j = 1, \ldots, n. \end{aligned} \tag{14}$$

`quadprog()`$\Rightarrow Z^+$.

注

若未恰当引入分裂变量 Z, 子问题求解难度不言而喻.

拉格朗日乘子的更新

对一般的等式约束非线性优化问题

$$\begin{aligned} \min_{x} \quad & \bar{f}(x) \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E}, \end{aligned}$$

增广拉格朗日函数法 (γ^k 是惩罚因子):

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k - \gamma^k c_i(x^k), \quad \forall i \in \mathcal{E}.$$

拉格朗日乘子的更新

对一般的等式约束非线性优化问题

$$\begin{aligned} \min_{x} \quad & \bar{f}(x) \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E}, \end{aligned}$$

增广拉格朗日函数法 (γ^k 是惩罚因子):

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k - \gamma^k c_i(x^k), \quad \forall i \in \mathcal{E}.$$

因此我们的拉格朗日乘子更新策略可选为

$$\Phi^+ = \Phi - \beta(X^+ - Z^+). \tag{15}$$

若带松弛因子 $\alpha > 0$, 则

$$\Phi^+ = \Phi - \alpha\beta(X^+ - Z^+). \tag{16}$$

停机准则与 KKT 违反度

对 X 子问题:

$$X^{k+1} = \arg \min_{X: X\mathbf{1}=\rho, \mathrm{tr}(X)=0} \mathcal{L}_A(X, Z^k, \Phi^k)$$

$\Rightarrow \exists \lambda_1^{k+1}, \mu^{k+1}$ 使得

$$2R + Z^k R - \Phi^k + \beta(X^{k+1} - Z^k) - \lambda_1^{k+1}\mathbf{1}^T - \mu^{k+1} I = 0, \tag{17a}$$

$$X^{k+1}\mathbf{1} = \rho, \mathrm{tr}(X^{k+1}) = 0. \tag{17b}$$

停机准则与 KKT 违反度

对 X 子问题:

$$X^{k+1} = \arg \min_{X:X\mathbf{1}=\rho,\mathrm{tr}(X)=0} \mathcal{L}_A(X, Z^k, \Phi^k)$$

$\Rightarrow \exists \lambda_1^{k+1}, \mu^{k+1}$ 使得

$$2R + Z^k R - \Phi^k + \beta(X^{k+1} - Z^k) - \lambda_1^{k+1}\mathbf{1}^T - \mu^{k+1} I = 0, \tag{17a}$$

$$X^{k+1}\mathbf{1} = \rho, \mathrm{tr}(X^{k+1}) = 0. \tag{17b}$$

等式(17a),(17b)分别对应于问题(4)KKT 条件(5)中的

$$2R + Z^* R - \lambda_1^* \mathbf{1}^T - \mu^* I - \Phi^* = 0, \tag{18a}$$

$$X^*\mathbf{1} = \rho, \mathrm{tr}(X^*) = 0. \tag{18b}$$

停机准则与 KKT 违反度 (续)

- 使用更新策略(15):

$$
\begin{aligned}
&2R + Z^k R - \Phi^k + \beta(X^{k+1} - Z^k) - \lambda_1^{k+1}\mathbf{1}^T - \mu^{k+1} I \\
&= 2R + Z^{k+1} R - \Phi^{k+1} - \lambda_1^{k+1}\mathbf{1}^T - \mu^{k+1} I + (Z^{k+1} - Z^k)(\beta I - R),
\end{aligned}
$$

- 使用更新策略(16):

$$
\begin{aligned}
&2R + Z^k R - \Phi^k + \beta(X^{k+1} - Z^k) - \lambda_1^{k+1}\mathbf{1}^T - \mu^{k+1} I \\
&= 2R + Z^{k+1} R - \Phi^{k+1} - \lambda_1^{k+1}\mathbf{1}^T - \mu^{k+1} I \\
&\quad + (Z^{k+1} - Z^k)(\beta I - R) + (1-\alpha)\beta(X^{k+1} - Z^{k+1}).
\end{aligned}
$$

停机准则与 KKT 违反度 (续)

对 Z 子问题:

$$Z^{k+1} = \arg \min_{Z: Z^T \mathbf{1} = \rho, Z \geq 0} \mathcal{L}_A(X^{k+1}, Z, \Phi^k)$$

$\Rightarrow \exists \lambda_2^{k+1}, \Omega^{k+1} \geq 0$ 使得

$$X^{k+1} R - \Phi^k - \beta(X^{k+1} - Z^{k+1}) - \mathbf{1}\left(\lambda_1^{k+1}\right)^T - \Omega^{k+1} = 0, \tag{19a}$$

$$\left(Z^{k+1}\right)^T \mathbf{1} = \rho, Z^{k+1} \geq 0, \tag{19b}$$

$$\Omega^{k+1} \geq 0, \tag{19c}$$

$$\Omega^{k+1} \circ Z^{k+1} = 0. \tag{19d}$$

停机准则与 KKT 违反度 (续)

$$X^{k+1}R-\Phi^k-\beta(X^{k+1}-Z^{k+1})-\mathbf{1}\left(\lambda_1^{k+1}\right)^T-\Omega^{k+1}=0, \tag{19a}$$

$$\left(Z^{k+1}\right)^T\mathbf{1}=\rho,\ Z^{k+1}\geq 0, \tag{19b}$$

$$\Omega^{k+1}\geq 0, \tag{19c}$$

$$\Omega^{k+1}\circ Z^{k+1}=0. \tag{19d}$$

等式(19a)-(19d)分别对应于问题(4)KKT 条件(5)中的

$$X^*R-\mathbf{1}\left(\lambda_2^*\right)^T+\Phi^*-\Omega^*=0, \tag{20a}$$

$$\left(Z^*\right)^T\mathbf{1}=\rho,\ Z^*\geq 0, \tag{20b}$$

$$\Omega^*\geq 0, \tag{20c}$$

$$\Omega^*\circ Z^*=0. \tag{20d}$$

停机准则与 KKT 违反度 (续)

- 使用更新策略(15):

$$
\begin{aligned}
& X^{k+1}R - \Phi^k - \beta(X^{k+1} - Z^{k+1}) - \mathbf{1}\left(\lambda_2^{k+1}\right)^T - \Omega^{k+1} \\
= & X^{k+1}R - \Phi^{k+1} - \mathbf{1}\left(\lambda_2^{k+1}\right)^T - \Omega^{k+1}.
\end{aligned}
$$

- 使用更新策略(16):

$$
\begin{aligned}
& X^{k+1}R - \Phi^k - \beta(X^{k+1} - Z^{k+1}) - \mathbf{1}\left(\lambda_2^{k+1}\right)^T - \Omega^{k+1} \\
= & X^{k+1}R - \Phi^{k+1} - \mathbf{1}\left(\lambda_2^{k+1}\right)^T - \Omega^{k+1} - {\color{red}(1-\alpha)\beta(X^{k+1} - Z^{k+1})}.
\end{aligned}
$$

停机准则与 KKT 违反度 (续)

KKT 违反度:

$$
\begin{aligned}
t^{k+1} &\triangleq \|X^{k+1} - Z^{k+1}\|_\infty && \text{原始残差,} \\
s^{k+1} &\triangleq \|(Z^{k+1} - Z^k)(\beta I - R)\|_\infty && \text{对偶残差.}
\end{aligned} \tag{21}
$$

停机准则与 KKT 违反度 (续)

KKT 违反度:

$$\begin{aligned} t^{k+1} &\triangleq \|X^{k+1} - Z^{k+1}\|_\infty && \text{原始残差,} \\ s^{k+1} &\triangleq \|(Z^{k+1} - Z^k)(\beta I - R)\|_\infty && \text{对偶残差.} \end{aligned} \tag{21}$$

停机准则:

情形 1 t^{k+1}, s^{k+1} 都足够小;

情形 2 对某个 $p^{k+1} \in (0,1)$, $p^{k+1}s^{k+1} + \left(1 - p^{k+1}\right) t^{k+1}$ 足够小. 其中 p^{k+1} 反映了我们主观上对两类残差所赋的权值.

停机准则与 KKT 违反度 (续)

KKT 违反度:

$$\begin{aligned} t^{k+1} &\triangleq \|X^{k+1} - Z^{k+1}\|_\infty && \text{原始残差}, \\ s^{k+1} &\triangleq \|(Z^{k+1} - Z^k)(\beta I - R)\|_\infty && \text{对偶残差}. \end{aligned} \tag{21}$$

停机准则:

情形 1 t^{k+1}, s^{k+1} 都足够小;

情形 2 对某个 $p^{k+1} \in (0,1)$, $p^{k+1} s^{k+1} + \left(1 - p^{k+1}\right) t^{k+1}$ 足够小. 其中 p^{k+1} 反映了我们主观上对两类残差所赋的权值.

我们使用

$$E^{k+1} = (1 - p^{k+1}) t^{k+1} + p^{k+1} s^{k+1} \tag{22}$$

作为 **KKT 违反度**.

完整算法

算法 3 求解问题 (4) 的 ADMM 算法

输入: $X^0, Z^0, \Phi^0,\ \beta^0,\ \epsilon,\ k := 0,\ s^0 := 1, t^0 := 1,\ \alpha > 0$(默认值为1), $p^0 \in (0,1)$.

输出: X^k, Z^k, Φ^k

$E^k = (1-p^k)t^k + p^k s^k$;
while $E^k > \epsilon$ **do**
    由公式(12),(11)计算 X^{k+1};
    使用 MATLAB 内置函数 quadprog()求解列子问题(14)得到 Z^{k+1};
    $\Phi^{k+1} = \Phi^k - \alpha\beta^k(X^{k+1} - Z^{k+1})$;
    由公式(21)计算 t^{k+1}, s^{k+1};
    更新 β^k 得到 β^{k+1};
    更新 p^k 得到 p^{k+1};
    由公式(22)得到 E^{k+1};
    $k := k+1$;
end while

提纲

收敛性分析

定理 (算法3的收敛性定理)

假设算法3每一步，Z 子问题均精确求解，且产生的迭代序列 $\{X^k\},\{Z^k\},\{\Phi^k\}$ 分别收敛到 X^*, Z^*, Φ^*，满足 $X^* = Z^*$. 则 (X^*, Z^*, Φ^*) 为问题(4)的稳定点.

收敛性分析

定理 (算法3的收敛性定理)

假设算法3每一步 ,Z 子问题均精确求解, 且产生的迭代序列 $\{X^k\},\{Z^k\},\{\Phi^k\}$ 分别收敛到 X^*,Z^*,Φ^*, 满足 $X^*=Z^*$. 则 (X^*,Z^*,Φ^*) 为问题(4)的稳定点.

关键点:

1. $X^* \in \arg\min_{X\mathbf{1}=\rho,\mathrm{tr}(X)=0} f(X,Z^*) - \langle \Phi^*, X-Z^*\rangle.$
2. $Z^* \in \arg\min_{Z^T\mathbf{1}=\rho,Z\geq 0} f(X^*,Z) - \langle \Phi^*, X^*-Z\rangle.$

提纲

数值实验

使用 MATLAB 内置函数 `randn()`和 `abs()`生成随机问题. 小型问题以 $n = 3, 4, 5$ 各一问题为代表, 大型问题以 $n = 20, 30, 40$ 各一问题为代表.

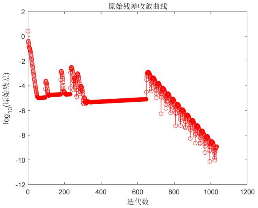
小型问题中的常量取法:

$$\alpha = 1, \quad \beta^k \equiv 10^3, \quad \epsilon = 10^{-8}, \quad p^k \equiv 0.5.$$

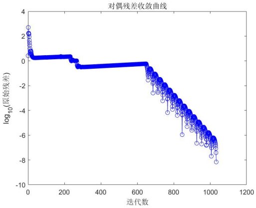
大型问题中的常量取法:

$$\alpha = 1, \quad \beta^k \equiv 10^4, \quad \epsilon = 10^{-6}, \quad p^k \equiv 0.5.$$

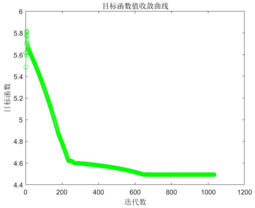
数值实验 –收敛曲线



(a) 原始残差



(b) 对偶残差



(c) 目标函数值

图 1: $n = 4$ 收敛曲线

数值实验 –松弛因子 α

$\alpha = 0.1, 0.2, \ldots, 1.0.$

表 1: $n = 3$, 不同的松弛因子

α	$n = 3$			
	迭代数	所耗时间 (s)	KKT 违反度	目标值
0.1	**452**	**0.0072**	3.40×10^{-9}	**1.1722**
0.2	491	0.0079	8.45×10^{-9}	**1.1722**
0.3	510	0.0088	7.07×10^{-9}	**1.1722**
0.4	517	0.0098	$\mathbf{2.86\times10^{-9}}$	**1.1722**
0.5	503	0.0080	7.45×10^{-9}	**1.1722**
0.6	534	0.0103	7.79×10^{-9}	**1.1722**
0.7	538	0.0093	5.69×10^{-9}	**1.1722**
0.8	525	0.0082	3.24×10^{-9}	**1.1722**
0.9	548	0.0105	8.97×10^{-9}	**1.1722**
1.0	560	0.0097	8.02×10^{-9}	**1.1722**

数值实验 –松弛因子 α

$\alpha = 0.1, 0.2, \ldots, 1.0.$

表 2: $n = 30$, 不同的松弛因子

α	$n=30$			
	迭代数	所耗时间 (s)	KKT 违反度	目标值
0.1	117886	74.7150	9.74×10^{-7}	26.2298
0.2	69365	42.6729	8.60×10^{-7}	25.8871
0.3	70989	43.2812	8.88×10^{-7}	25.8828
0.4	**65533**	**40.0219**	6.46×10^{-7}	25.8757
0.5	122029	76.4424	9.28×10^{-7}	25.6165
0.6	112336	82.8559	9.63×10^{-7}	25.6165
0.7	112002	70.1342	8.81×10^{-7}	25.6165
0.8	109121	67.5131	7.99×10^{-7}	25.6165
0.9	113655	70.1853	8.83×10^{-7}	25.6165
1.0	207788	129.1006	$\mathbf{6.00\times10^{-7}}$	**24.9461**

数值实验 –惩罚因子 β

$$\begin{cases} \beta = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, & n = 3, 4, 5, \\ \beta = 10^3, 10^4, 10^5, & n = 20, \\ \beta = 10^4, 10^5, & n = 30. \end{cases} \tag{23}$$

表 3: $n = 3$, 不同的惩罚因子

β	$n = 3$			
	迭代数	所耗时间 (s)	KKT 违反度	目标值
100	**224**	**0.0043**	5.46×10^{-9}	**1.1722**
1000	560	0.0095	8.02×10^{-9}	**1.1722**
10000	3998	0.0647	$\mathbf{4.92\times10^{-9}}$	**1.1722**
100000	38377	0.5818	7.68×10^{-9}	**1.1722**

数值实验 –惩罚因子 β

$$\begin{cases} \beta = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, & n = 3, 4, 5, \\ \beta = 10^3, 10^4, 10^5, & n = 20, \\ \beta = 10^4, 10^5, & n = 30. \end{cases} \tag{23}$$

表 4: $n = 5$, 不同的惩罚因子

β	$n = 5$			
	迭代数	所耗时间 (s)	KKT 违反度	目标值
100	969	0.0465	5.00×10^{-9}	**2.7741**
1000	**860**	**0.0384**	9.54×10^{-9}	**2.7741**
10000	3857	0.1698	$\mathbf{4.64\times10^{-9}}$	**2.7741**
100000	33470	1.4344	9.47×10^{-9}	**2.7741**

数值实验 –惩罚因子 β

$$\begin{cases} \beta = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, & n = 3, 4, 5, \\ \beta = 10^3, 10^4, 10^5, & n = 20, \\ \beta = 10^4, 10^5, & n = 30. \end{cases} \tag{23}$$

表 5: $n = 20$, 不同的惩罚因子

β	$n = 20$			
	迭代数	所耗时间 (s)	KKT 违反度	目标值
1000	**12122**	**4.1522**	9.95×10^{-7}	**9.8692**
10000	79052	26.7695	$\mathbf{5.02\times10^{-7}}$	**9.8692**
100000	753429	255.0805	9.98×10^{-7}	**9.8692**

数值实验 –惩罚因子 β

$$\begin{cases} \beta = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, & n = 3, 4, 5, \\ \beta = 10^3, 10^4, 10^5, & n = 20, \\ \beta = 10^4, 10^5, & n = 30. \end{cases} \tag{23}$$

表 6: $n = 30$, 不同的惩罚因子

β	$n = 30$			
	迭代数	所耗时间 (s)	KKT 违反度	目标值
10000	**207788**	**133.6154**	$\mathbf{6.00 \times 10^{-7}}$	**24.9461**
100000	2053406	1327.5987	7.08×10^{-7}	24.9542

数值实验 –惩罚因子 β

$$\begin{cases} \beta = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, & n = 3, 4, 5, \\ \beta = 10^3, 10^4, 10^5, & n = 20, \\ \beta = 10^4, 10^5, & n = 30. \end{cases} \tag{23}$$

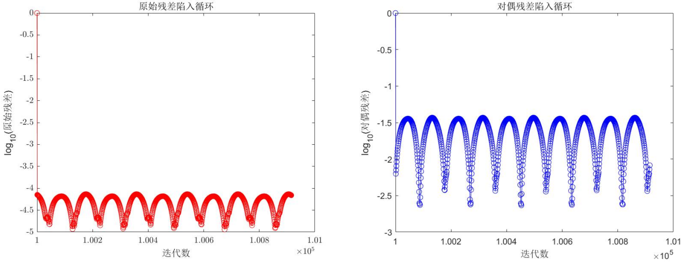


图 2: $n = 30, \beta = 10^3$ 残差陷入循环. 左: 原始残差; 右: 对偶残差

数值实验 –测试问题

- 目的: 表明算法3的确可以达到全局最优解.
- 构造方式: 给定一数对 $(p,q): p \neq q, p, q \in \{1,2,\ldots,n\}$, 定义 R 为

$$r_{ij} = \begin{cases} 1, & i=p, j=q \text{或} i=q, j=p, \\ 0, & \text{其它}. \end{cases} \tag{24}$$

$\rho := \mathbf{1}$.

$$\begin{array}{ll} \min\limits_{X} & 2x_{pq} + 2\sum\limits_{i} x_{ip}x_{iq} \\ \text{s.t.} & X\mathbf{1} = \rho, X^T\mathbf{1} = \rho, X \geq 0, \operatorname{tr}(X) = 0. \end{array} \tag{25}$$

最优值为 0.

数值实验 –测试问题 (续)

$$\begin{aligned} \min_{X} \quad & 2x_{pq} + 2\sum_i x_{ip}x_{iq} \\ \text{s.t.} \quad & X\mathbf{1} = \rho, X^T\mathbf{1} = \rho, X \geq 0, \mathrm{tr}(X) = 0. \end{aligned}$$

$n = 5, 10, 15, 20$, $(p, q) = (3, 4)$, $\alpha = 1, \beta = 10^3, \epsilon = 10^{-8}$.

表 7: 测试问题, $n = 5, 10, 15, 20$

n	迭代数	所耗时间 (s)	KKT 违反度	目标值
5	3187	0.1536	3.00×10^{-9}	-1.44×10^{-11}
10	1447	0.1766	1.65×10^{-9}	-4.94×10^{-15}
15	2243	0.3284	2.30×10^{-9}	6.54×10^{-13}
20	2030	0.3299	4.53×10^{-9}	-8.07×10^{-13}

数值实验 –与求解非凸二次规划的算法比较

- MATLAB 内置函数 `fmincon()`, 调用算法`'sqp'`,`'active-set'`求解问题(3)和(2), 设置停机准则 `ConstraintTolerance`为上文默认值. 在使用算法3求解 $n = 50, 60, 70, 80$ 的问题, 设置惩罚因子

$$\begin{cases} \beta = 10^4, & n = 50, 60, \\ \beta = 2 \times 10^4, & n = 70, 80. \end{cases}$$

数值实验 –与求解非凸二次规划的算法比较 (续)

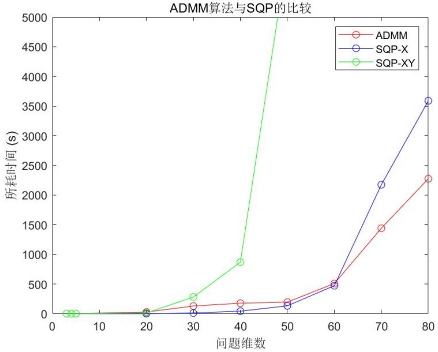


图 3: 算法3和 SQP 运行时间对比

结论: 对于小型问题, 积极集法和 SQP 最为便捷; 对于大型问题, 算法3更具优势. 算法3的缺点在于, 我们需要根据问题的维度不断重新设置惩罚因子 β.

提纲

总结

- 针对问题(4)特殊结构设计了 ADMM 算法.
- 证明了一定条件下 ADMM 算法3收敛到问题(4)的稳定点.
- 在随机生成的问题上进行数值实验; 讨论了多个人工给定因子对算法效果的影响; 与求解非凸二次规划的算法做了比较, 得出算法3在大型问题上更具优势的结论.

感谢聆听!

huyukuan2015@tongji.edu.cn