求解一类双线性规划问题的数值算法

答辩人: 胡雨宽
导　师: 般俊锋　教授

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”.

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

这里 $c_{ij}, f_i, g_j \geq 0, \forall i, j$.

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);
- ....

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

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

问题(1)即可化为矩阵形式:

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

其中 $\mathbf{1}$ 为全 1 向量.

预备知识 (续)

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

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

注

问题(4)的约束非常特殊, 但在最优运输问题中十分普遍.

提纲

最优性条件

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 $\mu^* \in \mathbb{R}, \lambda_1^*, \lambda_2^* \in \mathbb{R}^n$, $\Phi^*, 0 \leq \Omega^* \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 使得

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

这里 “$\circ$” 表示两矩阵的 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**:

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

现有工作简介:

- 凸可分问题 (Boyd, et al. '10, He/Yuan '12等): $n \geq 2, \ell = 0, \theta_1, \theta_2$ 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), 非凸问题. 理论缺乏, 应用广泛.

特点: 交替求解子问题, 子问题需要易于求解; 适合于分布式计算.
$\Rightarrow$ 引入 Z 的理由之一.

ADMM 算法简介 (续)

$$\mathcal{L}_A(X, Z, \Phi) = f(X, Z) - \langle \Phi, X - Z \rangle + \frac{\beta}{2}\|X - Z\|_F^2, \tag{7}$$

其中 $\beta > 0$ 为惩罚因子.

框架 1 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: $X^{k+1} = \arg\min_{X: X\mathbf{1}=\rho, \mathrm{tr}(X)=0} \mathcal{L}_A(X, Z^k, \Phi^k)$; %X 子问题
3: $Z^{k+1} = \arg\min_{Z: Z^T\mathbf{1}=\rho, Z\geq 0} \mathcal{L}_A(X^{k+1}, Z, \Phi^k)$; %Z 子问题
4: 更新 Φ^k 得到 Φ^{k+1}; % 拉格朗日乘子更新
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.

$$\begin{aligned}\min_{X}\quad & 2\langle X, R\rangle + \langle Z, XR\rangle - \langle \Phi, X - Z\rangle + \frac{\beta}{2}\|X - Z\|_F^2 \\ \text{s.t.}\quad & X\mathbf{1} = \rho, \quad \operatorname{tr}(X) = 0.\end{aligned} \tag{8}$$

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

$$\mu = \frac{1}{n-1}\left(-\frac{1}{n}\mathbf{1}^T M_1 + m_1\right), \quad \lambda_1 = \frac{1}{n}(M_1 - \mathbf{1}\mu). \tag{9}$$

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

(9)和(10)给出 X 子问题(8)的解 X^{+}.

子问题的求解 –Z 子问题

$$\begin{aligned} \min_{Z} \quad & \langle Z, X^+R\rangle - \langle \Phi, X^+ - Z\rangle + \frac{\beta}{2}\|X^+ - Z\|_F^2 \\ \text{s.t.} \quad & Z^T\mathbf{1} = \rho, \quad Z \geq 0. \end{aligned} \tag{11}$$

忽略非负约束, 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(11)的等价形式:

$$\begin{aligned} \min_{Z} \quad & \|Z-\widetilde{Z}\|_F^2 \\ \text{s.t.} \quad & Z^T\mathbf{1}=\rho, \quad Z\geq 0. \end{aligned} \tag{12}$$

分块

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

$$\Leftrightarrow \begin{aligned} \min_{z_1,\dots,z_n} \quad & \sum_{j=1}^{n}\|z_j-\tilde{z}_j\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{1}^T z_j=\rho_j, \quad z_j\geq 0, \quad j=1,\dots,n. \end{aligned} \tag{13}$$

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

注 (引入 Z 的理由之二)

若未恰当引入分裂变量 Z, X 子问题的求解难度非常之大.

拉格朗日乘子的更新

受 ALM 算法启发, 更新策略可选为

$$\Phi^{+} = \Phi - \beta(X^{+} - Z^{+}); \tag{14}$$

若带松弛因子 $\alpha > 0$, 则

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

停机准则与 KKT 违反度

对 X 子问题:

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

- 使用更新策略(14):

$$\boxed{(Z^{k+1} - Z^k)(\beta I - R)};$$

- 使用更新策略(15):

$$\boxed{(Z^{k+1} - Z^k)(\beta I - R)}, \quad \boxed{(1-\alpha)\beta(X^{k+1} - Z^{k+1})}.$$

停机准则与 KKT 违反度 (续)

对 Z 子问题:

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

- 使用更新策略(14):

$$\text{恰好此部分 KKT 违反度为 } 0;$$

- 使用更新策略(15):

$$\boxed{(1-\alpha)\beta(X^{k+1} - Z^{k+1})}.$$

停机准则与 KKT 违反度 (续)

KKT 违反度:

$$\begin{aligned} t^{k+1} &\triangleq \|X^{k+1} - Z^{k+1}\|_\infty && \text{原始残差}, \\ s^{k+1} &\triangleq \|(Z^{k+1} - Z^k)(\beta I - R)\|_\infty && \text{对偶残差}. \end{aligned} \tag{16}$$

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.

我们使用

$$E^{k+1} = (1 - p^{k+1})t^{k+1} + p^{k+1}s^{k+1} \tag{17}$$

作为 **KKT 违反度**.

完整算法

算法 2 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(9),(10)计算 X^{k+1};
  使用 MATLAB 内置函数 `quadprog()`求解列子问题(13)得到 Z^{k+1};
  $\Phi^{k+1} = \Phi^k - \alpha\beta^k(X^{k+1} - Z^{k+1})$;
  由公式(16)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(17)得到 E^{k+1};
  $k := k+1$;
end while

提纲

收敛性分析

定理 (充分性定理)

假设在算法2的每一步，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.

目的:

- 揭示算法的性质;
- 说明算法的有效性;
- 说明算法的优越性.

数值实验 –松弛因子 α (算法性质)

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

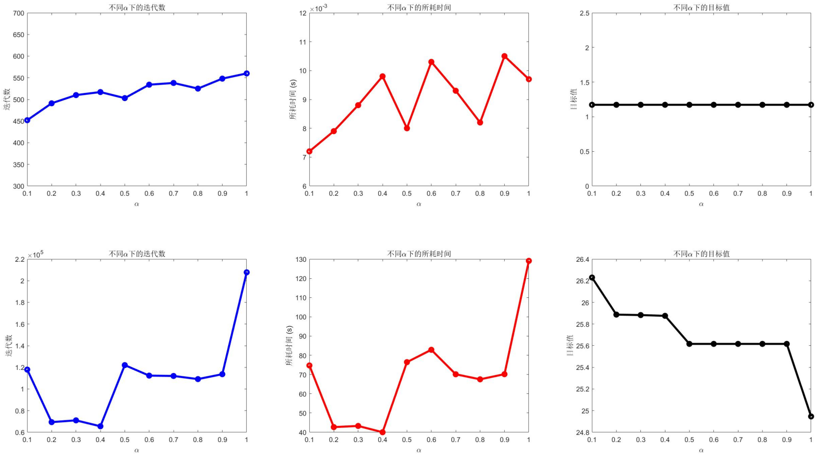


图 1: 上 $n = 3$, 下 $n = 30$, 不同的松弛因子

左: 迭代数; 中: 所耗时间; 右: 目标值.

数值实验 –惩罚因子 β (算法性质)

表 1: 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**
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**
β	$n=30$			
	迭代数	所耗时间 (s)	KKT 违反度	目标值
10000	**207788**	**133.6154**	$\mathbf{6.00\times10^{-7}}$	**24.9461**
100000	2053406	1327.5987	7.08×10^{-7}	24.9542

数值实验 –惩罚因子 β (算法性质)

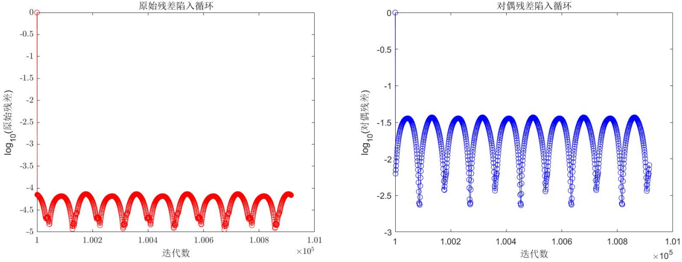


图 2: $n = 30, \beta = 10^3$ 残差陷入循环
左: 原始残差; 右: 对偶残差.

数值实验 –测试问题 (有效性)

给定一数对 $(p, q) : p \neq q, p, q \in \{1, 2, \ldots, n\}$, 定义 R 为

$$r_{ij} = \begin{cases} 1, & i = p, j = q \text{或} i = q, j = p, \\ 0, & \text{其它}, \end{cases} \qquad \rho := \mathbf{1}. \tag{18}$$

$$\begin{aligned} \min_{X} \quad & 2x_{pq} + 2\sum_{i} x_{ip}x_{iq} \\ \text{s.t.} \quad & X\mathbf{1} = \rho, X^T\mathbf{1} = \rho, X \geq 0, \operatorname{tr}(X) = 0. \end{aligned} \tag{19}$$

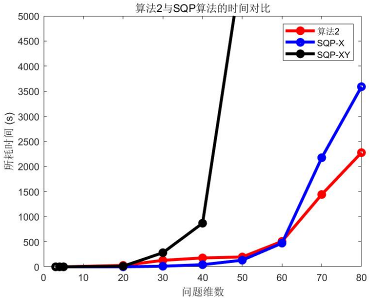
最优值为 0.

表 2: 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 (优越性)

MATLAB 内置函数 fmincon(), 调用算法'sqp'求解问题(3)和(2), 设置停机准则'ConstraintTolerance'为与算法2相同的水平.



(a) 所耗时间 (b) 目标值

图 3: 算法2和 SQP 运行时间对比

结论: 对于大型问题, 算法2更具优势.

提纲

总结

- 引入 ADMM 框架求解问题(4);
- 证明了一定条件下算法2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.

特别地:

- 引入变量分裂约束和目标函数, 使问题构造方便算法设计;
- 使用 ADMM 算法求解带特殊约束的问题;
- 简洁地求解了子问题, 简化了 KKT 违反度的计算;
- 给出了算法收敛到稳定点的充分性定理.

感谢聆听!

Email: huyukuan2015@tongji.edu.cn