Olinjär optimering med bivillkor

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{då} & g_i(x) \leq 0 \text{ för alla } i \end{array}$$

Specialfall:

- Konvext problem.
- Linjära bivillkor: $Ax \leq b$.
- Linjära likhetsbivillkor: $Ax = b$.
- Inga bivillkor: Hanterat tidigare.

Metodprinciper:

- KKT-villkoren (på vissa problem)
- Aktiva mängder
- Sökmetoder
- Straffunktioner
- Lagrangerelaxation

Olinjär optimering med bivillkor: KKT

$$\min f(x) \;\; \text{då } g_i(x) \leq 0 \text{ för alla } i$$

Vilka problem kan man **lösa** med KKT-villkoren?

Antag att både x och u är okända.

KKT1: $g_i(x) \leq 0$ för alla i.

KKT2: $u_i g_i(x) = 0$ för alla i.

KKT3: $\nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} u_i \nabla g_i(x) = 0$.

KKT4: $u_i \geq 0$ för alla i.

KKT1 kan vara krångliga.

KKT2 är säkert olinjära.

KKT3 är troligen olinjära, och kan ofta inte lösas.

KKT4 är lätt, om vi kommer dit.

Olinjär optimering med linjära likhetsbivillkor: KKT

$$\min f(x) \;\; \text{då } Ax = b$$

Antag att både x och u är okända.

KKT1: $Ax = b$. Linjärt.

KKT2: Behövs ej.

KKT3: $\nabla f(x) + A^T u = 0$. $\nabla f(x)$ kanske olinjär.

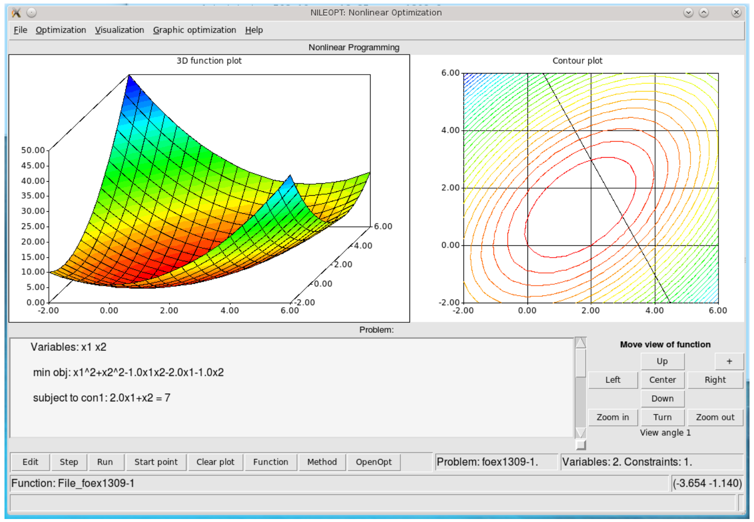
KKT4: Behövs ej.

När blir KKT3 linjär? Då $f(x)$ är kvadratisk.

När KKT fungerar som metod: Exempel

Linjära likhetsbivillkor och konvex kvadratisk målfunktion:

$$\begin{array}{lll} \min & f(x) = & x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2 - 2x_1 - x_2 \\ \text{då} & & 2x_1 + x_2 = 7 \end{array}$$



När KKT fungerar som metod: Exempel

Linjära likhetsbivillkor och konvex kvadratisk målfunktion:

$$\begin{array}{lrcrcl} \min & f(x) = & x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2 - 2x_1 - x_2 & & & \\ \text{då} & & 2x_1 & + & x_2 & = 7 \end{array}$$

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 - x_2 - 2 \\ -x_1 + 2x_2 - 1 \end{pmatrix} \quad \nabla g(x) = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

KKT3: $\begin{pmatrix} 2x_1 - x_2 - 2 \\ -x_1 + 2x_2 - 1 \end{pmatrix} + u \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

Linjärt ekvationssystem (KKT3 + bivillkoren):

$$\begin{array}{rcrcrcl} 2x_1 & - & x_2 & + & 2u & = & 2 \\ -x_1 & + & 2x_2 & + & u & = & 1 \\ 2x_1 & + & x_2 & & & = & 7 \end{array}$$

Lösning: $x_1 = 2.5$, $x_2 = 2$, $u = -0.5$.

(Det gör inget att $u < 0$, ty likhetsbivillkor.)

När KKT fungerar som metod

Linjära likhetsbivillkor och konvex kvadratisk målfunktion:

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = \frac{1}{2}x^TQx + c^Tx \\ \text{då} & Ax = b \end{array}$$

(Q är positivt semidefinit om $f(x)$ är konvex.)

Vi har $\nabla f(x) = Qx + c$. KKT-villkoren (dvs. KKT3 och KKT1) blir

$$\begin{array}{rcrcr} Qx & + & A^Tu & = & -c \\ Ax & & & = & b \end{array}$$

Detta *linjära ekvationssystem* kan lösas även om både x och u är okända.

Konvexiteten ger att KKT-punkten är globalt optimum.

Tecknet på u spelar ingen roll.

KKT som metod?

Linjära olikhetsbivillkor och konvex kvadratisk målfunktion:

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = \frac{1}{2}x^TQx + c^Tx \\ \text{då} & Ax \le b \end{array}$$

KKT-villkoren:

KKT1: $Ax \le b$
KKT2: $u^T(Ax - b) = 0$
KKT3: $Qx + c + A^Tu = 0$
KKT4: $u \ge 0$

KKT3 ger ett linjärt ekvationssystem. Men KKT2 är olinjärt.

Vi har alltså linjära ekvationer, linjära olikheter och komplementaritet.

Om vi visste vilka bivillkor som ska vara aktiva: Sätt dem som likhetsbivillkor och strunta i de andra, och lös som föregående fall.

Men hur kan man få reda på det?

Inte effektivt att räkna upp alla kombinationer av aktiva bivillkor!

Aktiva mängder

Vilka linjära olikhetsbivillkor är *aktiva*?

Man arbetar med/uppdaterar en aktiv mängd av bivillkor.

(Likhetsvillkor är alltid aktiva.)

(Jämför simplexmetoden - baslösningar.)

För olinjär optimering vet man inte hur många bivillkor som är aktiva.
Det kan vara 0, 1, 2, ...

I en iterationspunkt $x^{(k)}$ delar vi upp bivillkoren i aktiva och inaktiva:
$A_1x^{(k)} = b_1$ och $A_2x^{(k)} < b_2$.

För att hitta en tillåten riktning i $x^{(k)}$ räcker det med att ta hänsyn till de aktiva bivillkoren $A_1x \le b_1$.

Likaså för att bevisa optimalitet (för konvext problem).

Men man måste ha en metod för att uppdatera aktiva mängden.

Sökmetoder

De flesta (bästa) metoderna letar sig fram.

(Antag linjära bivillkor $x \in X$.)

- **Generell sökmetod:**
  1. Finn en tillåten startpunkt, $x^{(k)} \in X$. Sätt $k = 1$.
  2. Beräkna en tillåten sökriktning, $d^{(k)}$.
  3. Beräkna en tillåten steglängd, $t^{(k)}$, med linjesökning. $x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)} \in X$ ger en övre gräns på t.
  4. Sätt $x^{(k+1)} = x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}$. Sätt $k = k + 1$ och gå till 2.
- **Zoutendijks metod:** Finn bästa riktningen med avseende på de aktiva bivillkoren genom att lösa ett LP.
- **Frank-Wolfemetoden:** Finn sökriktning genom att linjärisera målfunktionen och lösa ett LP med alla bivillkor.
- **Gradientprojektionsmetoden:** Projicera gradienten på de aktiva bivillkoren. Lös ej LP.

Repetition och grundidé

Leta efter en tillåten förbättringsriktning.

Gärna den mest lovande.

Alltså: Från punkten $\hat{x}$, finn en riktning d som gör att $x = \hat{x} + td$ är tillåten och bättre när t blir större än noll.

$-\nabla f(x)$ pekar i den riktning där funktionen $f(x)$ minskar snabbast.

Alla riktningar d med $\nabla f(x)^T d < 0$ är avtaganderiktningar.

$\nabla g_i(x)$ är den mest förbjudna riktningen (utåtriktade normalen) till bivillkoret $g_i(x) \leq 0$.

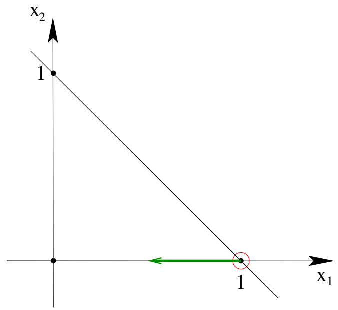
Alla riktningar d med $\nabla g_i(x)^T d > 0$ är förbjudna.

Finn en riktning d med $\nabla f(x)^T d < 0$ och $\nabla g_i(x)^T d \leq 0$ för alla aktiva bivillkor.

Olinjär optimering med bivillkor: Exempel

$$\begin{array}{llcl} \min & f(x) = x_1^2 + 2x_2^2 & & \\ \text{då} & x_1 + x_2 & \geq & 1 \\ & x_1 & \geq & 0 \\ & x_2 & \geq & 0 \end{array}$$

Starta i punkten $\hat{x}_1 = 1$, $\hat{x}_2 = 0$. Den är tillåten.



$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 4x_2 \end{pmatrix}$, $\nabla f(\hat{x}) = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$. Bästa riktningen $d = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Men den är inte tillåten.

Olinjär optimering med bivillkor: Exempel

Finns det *någon* tillåten förbättringsriktning? Leta metodiskt.

För det första måste riktningen vara tillåten.

Vilka bivillkor är aktiva? (Strunta temporärt i icke aktiva bivillkor.)

I punkten $\hat{x}_1 = 1$, $\hat{x}_2 = 0$ är bivillkoret $x_1 + x_2 \geq 1$ aktivt, $x_1 \geq 0$ inte aktivt och $x_2 \geq 0$ aktivt.

Om vi skriver bivillkoren som $g_i(x) \leq 0$, så är riktningen d tillåten om $\nabla g_i(x)^T d \leq 0$.

Skriv $g_1(x) = -x_1 - x_2 + 1 \leq 0$, $g_2(x) = -x_1 \leq 0$, $g_3(x) = -x_2 \leq 0$.

Gradienter: $\nabla g_1(x) = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$, $\nabla g_2(x) = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\nabla g_3(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$.

$\nabla g_1(x)^T d \leq 0$ ger $-d_1 - d_2 \leq 0$ (dvs. $d_1 + d_2 \geq 0$).

$\nabla g_3(x)^T d \leq 0$ ger $-d_2 \leq 0$ (dvs. $d_2 \geq 0$).

Olinjär optimering med bivillkor: Exempel

Ett annat sätt att komma fram till samma sak:

Nya punkten blir $x_1 = 1 + td_1$ och $x_2 = td_2$.

Sätt in i de aktiva bivillkoren: $x_1 + x_2 = 1 + td_1 + td_2 = 1 + t(d_1 + d_2) \geq 1$, vilket ger $t(d_1 + d_2) \geq 0$, så t kan bli positivt bara om $d_1 + d_2 \geq 0$.

På samma sätt: $x_2 = td_2 \geq 0$ ger $d_2 \geq 0$.

Alltså: $x_1 + x_2 \geq 1$ ger $d_1 + d_2 \geq 0$ och $x_2 \geq 0$ ger $d_2 \geq 0$.

Mönster: Sätt in d istället för x i bivillkoret, och ändra högerledet till noll.

Olinjär optimering med bivillkor: Exempel

Riktningen d ger förbättring om $\nabla f(\hat{x})^T d < 0$.

Vi har $\nabla f(\hat{x}) = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$, så $\nabla f(\hat{x})^T d < 0$ ger $2d_1 < 0$.

För att få bästa riktningen kan vi finna d som minimerar $\nabla f(\hat{x})^T d$, dvs. minimerar $2d_1$.

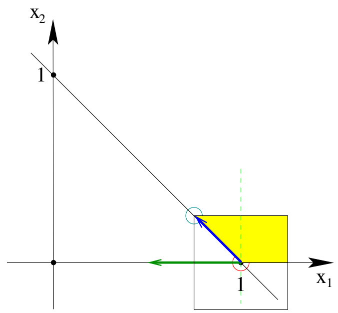
En bra riktningsvektor ger dubbelt så bra målfunktionsvärde om vektorn görs dubbelt så lång.
Poänglöst, ty det är ju samma riktning.

Längden på riktningsvektorn är ointressant. Begränsa längden av d:
$-1 \leq d_1 \leq 1$ och $-1 \leq d_2 \leq 1$.

Olinjär optimering med bivillkor: Exempel

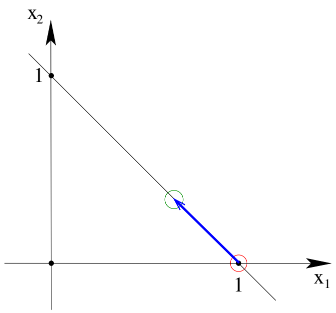
Sätt samman till ett LP-problem:

$$\begin{array}{llrl} \min & z = & 2d_1 & \text{(bästa förbättringsriktningen)} \\ \text{då} & & d_1 + d_2 \geq 0 & \text{(ty bivillkor 1 var aktivt)} \\ & & d_2 \geq 0 & \text{(ty bivillkor 3 var aktivt)} \\ & & -1 \leq d_1 \leq 1 & \\ & & -1 \leq d_2 \leq 1 & \end{array}$$



Lös LP-problemet. LP-optimum: $d_1 = -1$, $d_2 = 1$.
Om $z < 0$ så är detta en avtaganderiktning. Här $z = -2$. OK.

Olinjär optimering med bivillkor: Exempel



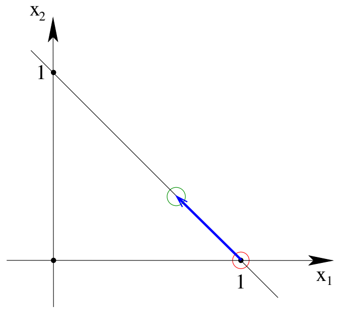
En bättre punkt fås av $x_1 = 1 - t$, $x_2 = t$.

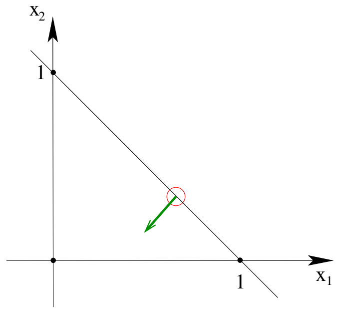
Icke aktiva bivillkor ger begränsning på steglängden.
$x_1 \geq 0$ ger $1 - t \geq 0$ dvs. $t \leq t_{max} = 1$.

Linjesökning: Insättning i $f(x)$ ger $\phi(t) = (1-t)^2 + 2t^2 = 3t^2 - 2t + 1$.
Denna funktion har minimum för $t = 1/3$ (som är $\leq t_{max}$),
så vi får $x_1 = 2/3$, $x_2 = 1/3$.

Olinjär optimering med bivillkor: Exempel

Nu står vi i punkten $\hat{x}_1 = 2/3$, $\hat{x}_2 = 1/3$.



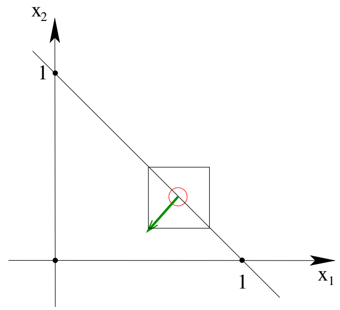


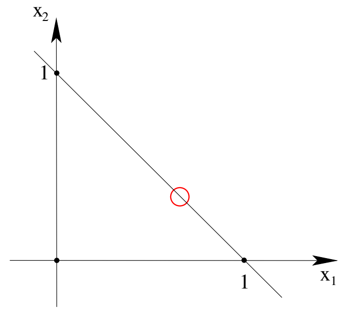
$\nabla f(\hat{x}) = \begin{pmatrix} 4/3 \\ 4/3 \end{pmatrix}$ så $\nabla f(\hat{x})^T d = 4/3 d_1 + 4/3 d_2$.

Bara bivillkoret $x_1 + x_2 \geq 1$ är aktivt: $d_1 + d_2 \geq 0$.

Olinjär optimering med bivillkor: Exempel

$$\begin{array}{lrl} \min & z = & 4/3\, d_1 + 4/3\, d_2 \\ \text{då} & & d_1 + d_2 \geq 0 \\ & & -1 \leq d_1 \leq 1 \\ & & -1 \leq d_2 \leq 1 \end{array}$$





Lös LP-problemet. LP-optimum: $d_1 = 0$, $d_2 = 0$ (eller $d_1 = 1$, $d_2 = -1$ eller $d_1 = -1$, $d_2 = 1$).

$z = 0$ (för alla optlösningar) så vi fick ingen avtaganderiktning.

Alltså är nuvarande punkt, $x_1 = 2/3$, $x_2 = 1/3$, optimal.

Sökmetod: Zoutendijks metod, summering

I *Zoutendijks metod för tillåtna riktningar* beräknas sökriktningen, d, med hänsyn tagen till enbart *de aktiva bivillkoren*.

Vänsterleden för de aktiva bivillkoren får inte ökas alls, $A_1 d \leq 0$.

Som målfunktion används gradienten, $\nabla f(x^{(k)})$.

Genom att minimera $\nabla f(x^{(k)})^T d$ fås en avtaganderiktning.

Vi begränsar längden av d genom att kräva $-1 \leq d_j \leq 1$ för alla j.

Den aktuella iterationspunkten är en KKT-punkt om och endast om $z = 0$ (t.ex. $d = 0$) är optimalt.

Man beräknar en största steglängd, t_{max}, så att inget av de inaktiva bivillkoren överskrids, $A_2(x^{(k)} + td) \leq b_2$.

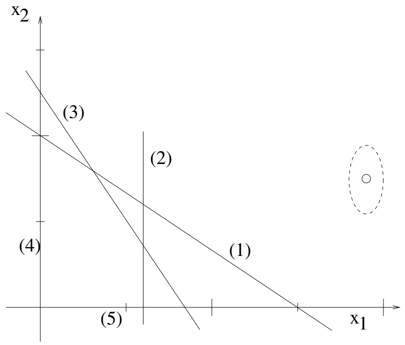
Sökmetod: Zoutendijks metod

Zoutendijks metod:

1. Finn en tillåten startpunkt, $x^{(1)}$. Sätt $k = 1$.
2. Beräkna $c = \nabla f(x^{(k)})$, bestäm de aktiva bivillkoren $A_1 x \leq b_1$, och finn optimum $\hat{d}$ till LP-problemet
$$\min z = c^T d \text{ då } A_1 d \leq 0, -1 \leq d \leq 1.$$
3. Om $z = 0$ stopp: $x^{(k)}$ är en KKT-punkt.
4. Beräkna maximal steglängd, t_{max}, i de inaktiva bivillkoren.
5. Finn $t^{(k)}$ ur $\min\limits_{0 \leq t \leq t_{max}} \phi(t) = f(x^{(k)} + t\hat{d})$ med hjälp av linjesökning.
6. Sätt $x^{(k+1)} = x^{(k)} + t^{(k)}\hat{d}$.
7. Sätt $k = k + 1$ och gå till 2.

Zoutendijks metod: Exempel

$$
\begin{array}{llrcrcrl}
\min & f(x) = & -4x_1 + 0.1x_1^2 - 3x_2 + 0.2x_2^2 & & & & & \\
\text{då} & & 2x_1 & + & 3x_2 & \leq & 30 & (1) \\
 & & x_1 & & & \leq & 6 & (2) \\
 & & 6x_1 & + & 4x_2 & \leq & 50 & (3) \\
 & & x_1 & & & \geq & 0 & (4) \\
 & & & & x_2 & \geq & 0 & (5)
\end{array}
$$



Zoutendijks metod: Exempel

Vi har $\nabla f(x) = \begin{pmatrix} -4 + 0.2x_1 \\ -3 + 0.4x_2 \end{pmatrix}$.

Starta i $x^{(1)} = (0,0)$, vilket ger $c = \nabla f(x^{(1)}) = \begin{pmatrix} -4 \\ -3 \end{pmatrix}$.

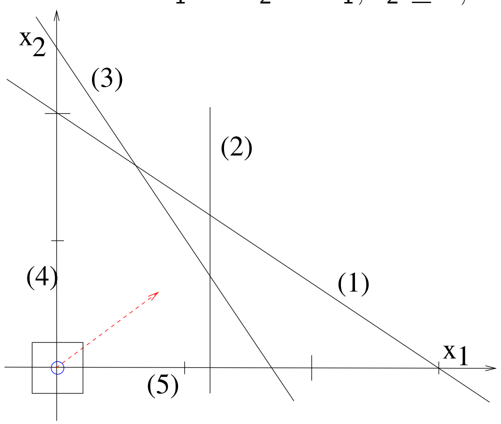
Aktiva bivillkor är bara $x_1 \geq 0$ och $x_2 \geq 0$.

Det riktningsfinnande LP-problemet blir

$$
\begin{array}{llr}
\min & z = & -4d_1 - 3d_2 \\
\text{då} & & d_1, d_2 \geq \; 0 \\
 & & -1 \leq d_1, d_2 \leq \; 1
\end{array}
$$

Zoutendijks metod: Exempel

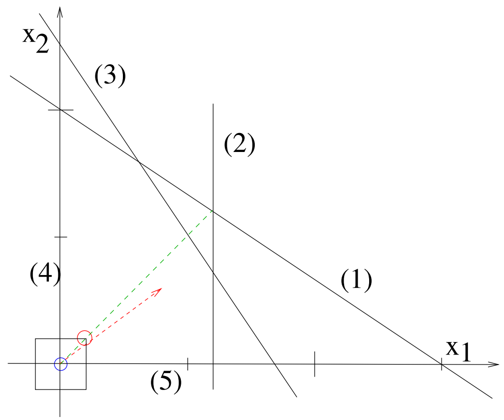
$\min z = -4d_1 - 3d_2$ då $d_1, d_2 \geq 0, -1 \leq d_1, d_2 \leq 1$



Lösning $d_1 = 1, d_2 = 1$. $z = -7$, så vi har en bra avtaganderiktning.
Detta ger $x^{(2)} = (t, t)$.

Kontroll av inaktiva bivillkor ger $t_{max} = 5$.

Zoutendijks metod: Exempel



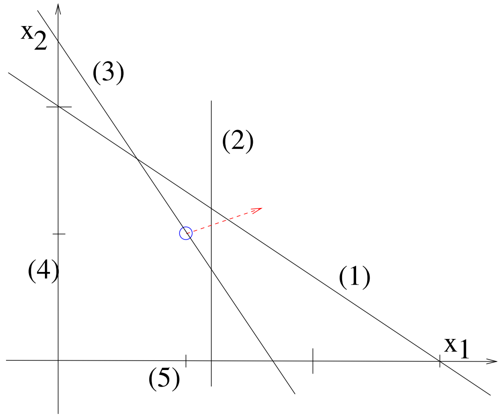
Insättning i $f(x)$ ger $\phi(t) = -7t + 0.3t^2$.

Denna funktion har minimum för $t \approx 11$, så vi får $t^{(1)} = t_{max} = 5$.

Detta ger $x^{(2)} = (5, 5)$.

Zoutendijks metod: Exempel

$x^{(2)} = (5,5)$ ger $c = \nabla f(x^{(2)}) = \begin{pmatrix} -3 \\ -1 \end{pmatrix}$.

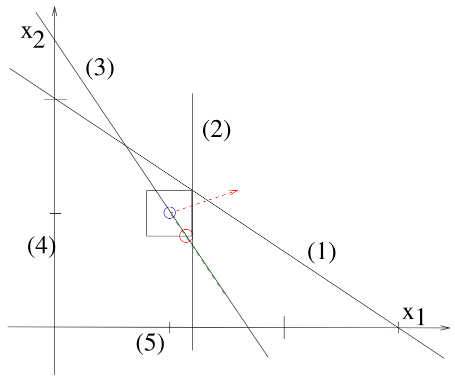


Nu är $6x_1 + 4x_2 \leq 50$ det enda aktiva bivillkoret.

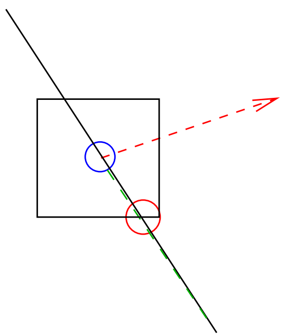
Zoutendijks metod: Exempel

Det riktningsfinnande LP-problemet blir nu

$$\begin{array}{llrcl} \min & z = & -3d_1 - d_2 & & \\ \text{då} & & 6d_1 + 4d_2 & \leq & 0 \\ & & -1 \leq d_1, d_2 & \leq & 1 \end{array}$$



Zoutendijks metod: Exempel



Lösningen blir $d_1 = 2/3, d_2 = -1$. $z = -1$, så vi har en avtaganderiktning.

Detta ger $x^{(3)} = (5 + 2/3t, 5 - t)$.

Kontroll av inaktiva bivillkor ger $t_{max} = 3/2$.

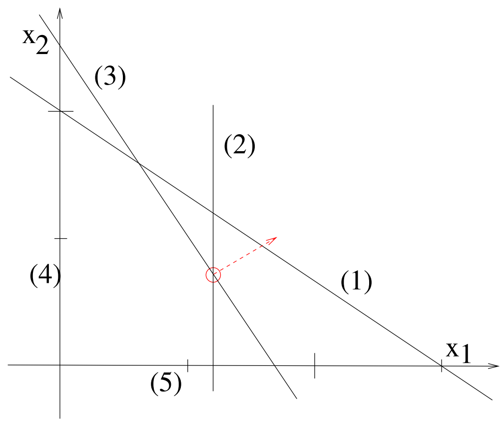
Insättning i $f(x)$ ger $\phi(t) = -27.5 - t + 0.2444t^2$.

Denna funktion har minimum för $t \approx 2$, så vi får $t^{(3)} = t_{max} = 3/2$.

Detta ger $x^{(3)} = (6, 3.5)$.

Zoutendijks metod: Exempel

$x^{(3)} = (6, 3.5)$ ger $c = \nabla f(x^{(3)}) = \begin{pmatrix} -2.8 \\ -1.6 \end{pmatrix}$.

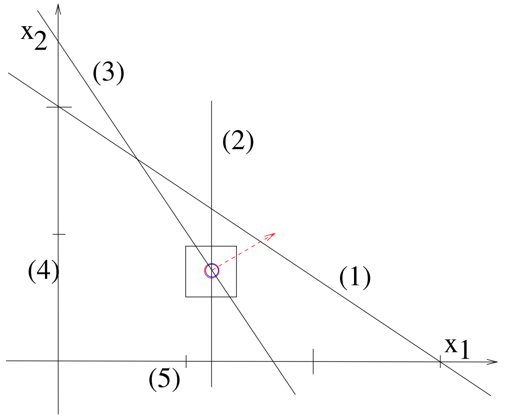


Nu är bivillkoren $x_1 \leq 6$ och $6x_1 + 4x_2 \leq 50$ aktiva.

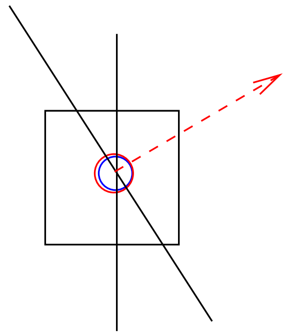
Zoutendijks metod: Exempel

Det riktningsfinnande LP-problemet blir nu

$$\begin{array}{lrl} \min & z = & -2.8d_1 - 1.6d_2 \\ \text{då} & d_1 & \leq 0 \\ & 6d_1 + 4d_2 & \leq 0 \\ & -1 \leq d_1, d_2 & \leq 1 \end{array}$$



Zoutendijks metod: Exempel



Nu blir lösningen $d_1 = 0, d_2 = 0$, med $z = 0$.

Vi har alltså optimum i punkten $x = (6, 3.5)$.

Zoutendijks metod: Sammanfattning

Man löser ett LP-problem i varje iteration. (grafiskt)

Man gör en linjesökning i varje iteration. (enkelt studium av funktionen)

Punktsekvensen följer inte kanten (som simplexmetoden)
utan går in i området om det verkar bäst.

Det blir konstigt om inga bivillkor är aktiva i optimum. $(-1 \leq d \leq 1)$
(Välj då en metod utan bivillkor att avsluta med.)

Metoden ger en KKT-punkt till slut.

Straff- och barriärmetoder

Gör om optimeringsproblem med bivillkor
till optimeringsproblem utan bivillkor
genom att ersätta bivillkoren med fiktiva kostnader, *straff*.

Otillåtna punkter får då dåliga målfunktionsvärden, och undvikes.

Ursprungligt problem:

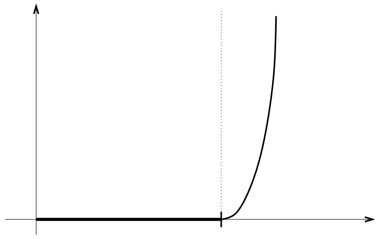
$$\min f(x) \quad \text{då } g_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m$$

Lös istället:

$$\min \tilde{f}(x) = f(x) + \mu \sum_i \rho(g_i(x))$$

Straffunktionen $\rho(y)$ ska aldrig vara negativ, ska vara noll om $y < 0$ och ska öka snabbt då y blir större än noll.
Man kan välja $\rho(y) = (\max(0, y))^p$ med $p = 2$ eller 4 eller större.
Vi måste också välja värde på μ.

Straffunktion



Figur: Straffunktion.

Det resulterande problemet saknar helt bivillkor och kan lösas med brantaste lutningsmetoden, konjugerande gradientmetoder eller kvasi-Newtonmetoder.

Ofta dock inte med Newtons metod.

Straffmetod: Exempel

Problem: $\min f(x) = (x_1 - 3)^2$ då $x_1 \leq 2$

Straffunktion: $\tilde{f}(x) = (x_1 - 3)^2 + \mu(\max(0, x_1 - 2))^p$

Välj t.ex. $p = 2$.

För $\mu = 0$ fås min i $x_1 = 3$.
För $\mu = 1$ fås min i $x_1 = 2\frac{1}{2}$.
För $\mu = 2$ fås min i $x_1 = 2\frac{1}{3}$.
För $\mu = 3$ fås min i $x_1 = 2\frac{1}{4}$.
För $\mu = 4$ fås min i $x_1 = 2\frac{1}{5}$.
Närmar sig det tillåtna området, men kommer aldrig riktigt fram.
Funktionen kan deriveras en gång, men inte två gånger.
Vi har ingen andraderivata/Hessian.

Straff- och barriärmetoder

Metoden undviker mycket otillåtna punkter,
men kan ge en otillåten punkt som ligger nära det tillåtna området.

Om man ökar μ och p så minskar risken för otillåtenhet, men funktionen blir svårare att optimera.
μ och p måste väljas noga.

Man kan börja med ett lågt värde på μ, och öka värdet när man börjar närma sig optimum.

Straff- och barriärmetoder

Man kan även använda en *barriärfunktion*.

Den ökar när man närmar sig gränsen till det tillåtna området inifrån.
(Man måste börja med en tillåten punkt.)
Man kommer aldrig riktigt fram till gränsen, och kan t.ex. inte få extrempunkter som resultat.

Ett exempel på barriärfunktion är

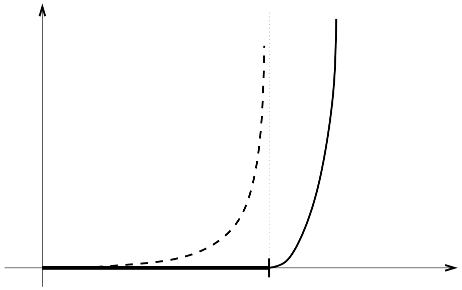
$$\psi(y) = -1/y$$

och vi löser problemet

$$\min f(x) + \mu \sum_i \psi(g_i(x))$$

Exempel: $\tilde{f}(x) = (x_1 - 3)^2 - \frac{\mu}{x_1 - 2}$

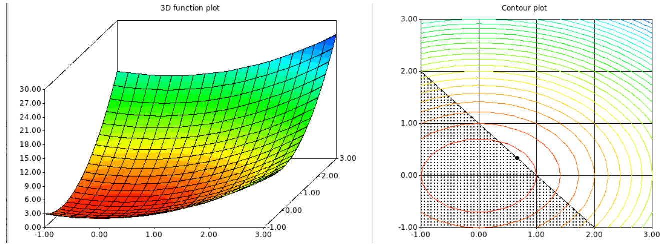
Straff- och barriärmetoder



Figur: Straffunktion (heldragen) och barriärfunktion (streckad) kring randen till det tillåtna området.

Straffunktioner: Exempel

$$\begin{array}{llcccl} \min & f(x) = & x_1^2 & + & 2x_2^2 & \\ \text{då} & & x_1 & + & x_2 \geq 1 & \quad (\text{eller } -x_1 - x_2 + 1 \leq 0) \end{array}$$

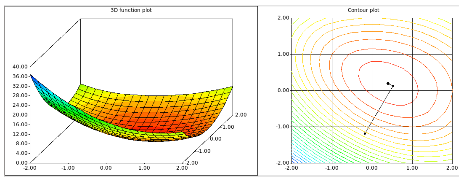


Opt: $x_1 = 0.667$, $x_2 = 0.333$

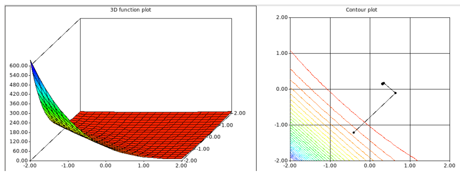
Straffunktion:
$\tilde{f}(x) = x_1^2 + 2x_2^2 + \mu(\max(0, -x_1 - x_2 + 1))^p$

Testa $p = 2, 4, 6$ samt $\mu = 1, 2, 5, \dots$

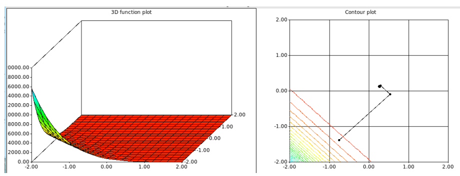
Straffunktioner: Exempel med $x_1 + x_2 \geq 1$



$\mu = 1,\ p = 2$: $x_1 = 0.400,\ x_2 = 0.200$

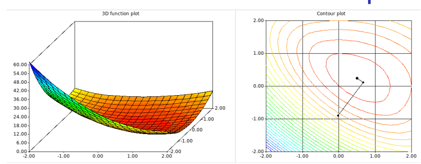


$\mu = 1,\ p = 4$: $x_1 = 0.309,\ x_2 = 0.154$

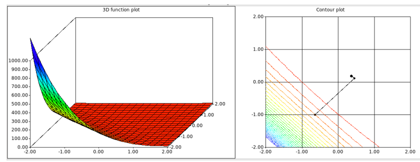


$\mu = 1,\ p = 6$: $x_1 = 0.258,\ x_2 = 0.129$

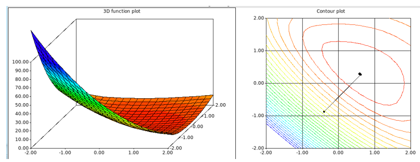
Straffunktioner: Exempel med $x_1 + x_2 \geq 1$



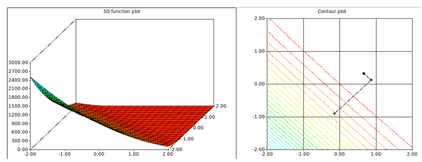
$\mu = 2,\ p = 2$: $x_1 = 0.500,\ x_2 = 0.250$



$\mu = 2,\ p = 4$: $x_1 = 0.366,\ x_2 = 0.183$



$\mu = 5,\ p = 2$: $x_1 = 0.588,\ x_2 = 0.294$



$\mu = 100,\ p = 2$: $x_1 = 0.662,\ x_2 = 0.331$

Lagrangerelaxation

Ersätt vissa bivillkor med en straffterm i målfunktionen.

Linjär straffunktion.

Ger enklare problem att lösa (subproblem).

Man måste hitta rätt straff (lutning).

Måste lösa subproblemet många gånger, och uppdatera straffkoefficienterna.

Subproblemet är en relaxation, ger en optimistisk (undre) gräns för det optimala målfunktionsvärdet.

En tillåten lösning ger en pessimistisk (övre) gräns.

Jämför gränserna.

Lagrangedualitet

$$\begin{array}{lll} v^* = & \min & f(x) \\ & \text{då} & g_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \ldots, m \qquad (1) \\ & & x \in X \qquad (2) \end{array}$$

Relaxera bivillkorsgrupp 1 med u som Lagrangemultiplikatorer.

Lagrangefunktionen:

$$L(x, u) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} u_i g_i(x).$$

Lagrangerelaxationen (subproblemet): För fixerat $\bar{u}$: Lös ett problem i x:

$$\varphi(\bar{u}) = \min_{x \in X} L(x, \bar{u}) = \min_{x \in X} f(x) + \sum_{i=1}^{m} \bar{u}_i g_i(x)$$

Jämförelse: KKT-villkoren:

KKT3: $\nabla_x L(x, u) = 0$

eftersom $\nabla_x L(x, u) = \nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} u_i \nabla g_i(x).$

Lagrangedualitet: Numeriskt exempel

$\min f(x) = x_1^2 + 2x_2^2$ då $x_1 + x_2 \geq 1, x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$

Relaxera det första bivillkoret, skrivet som $-x_1 - x_2 + 1 \leq 0$, med multiplikator u, där $u \geq 0$. Detta ger subproblemet

$$\varphi(\bar{u}) = \min_{x \geq 0} \ x_1^2 + 2x_2^2 + \bar{u}(-x_1 - x_2 + 1)$$

Vilket värde ska $\bar{u}$ ha? Olika möjligheter:

1. Sätt in olika värden.

2. Lös ut x som funktion av u. (Går inte alltid.)

$$\nabla_x L(x, u) = \begin{pmatrix} 2x_1 - u \\ 4x_2 - u \end{pmatrix}$$

Konvext: min ges av $\nabla_x L(x, u) = 0$.

Här $2x_1 - u = 0$ och $4x_2 - u = 0$, vilket ger $x_1 = u/2$ och $x_2 = u/4$.

Kolla icke-relaxerade bivillkor.

Här $x_1 \geq 0$ och $x_2 \geq 0$. OK, ty $u \geq 0$.

Lagrangedualitet: Numeriskt exempel

Vi har $\varphi(\bar{u}) = \min_{x \geq 0} \ x_1^2 + 2x_2^2 + \bar{u}(-x_1 - x_2 + 1)$ och $x_1 = u/2$, $x_2 = u/4$.

Stoppa in för att få $\varphi(u)$ explicit.

$\varphi(u) = (u/2)^2 + 2(u/4)^2 + u(-u/2 - u/4 + 1) = \ -3u^2/8 + u$

$\varphi(u)$ blev konkav (alltid) och differentierbar (inte alltid).

$\varphi(u)$ ger en undre gräns. Vi vill ha den bästa undre gränsen.

Vi söker därför $\max_{u \geq 0} \varphi(u)$.

$\varphi(u)' = 0$ ger $-3u/4 + 1 = 0$, dvs. $u = 4/3$. (Detta går inte alltid.)

Den undre gränsen blir $\varphi(4/3) = 2/3$.

$u = 4/3$ ger $x_1 = 2/3$ och $x_2 = 1/3$.

Är lösningen tillåten? Kolla det relaxerade bivillkoret, $x_1 + x_2 \geq 1$. OK.

Då får vi en övre gräns: $f(x) = (2/3)^2 + 2(1/3)^2 = 2/3$

Vi har funnit optimum.

Lagrangedualitet: Duala funktionen/problemet

$$\varphi(u) = \min_{x \in X} L(x, u) = \min_{x \in X} f(x) + \sum_{i=1}^{m} u_i g_i(x)$$

$\varphi(u)$ kallas *den duala funktionen*, beror bara på u (x är bortoptimerat).
$\varphi(u)$ är konkav.

Svag dualitet: $\varphi(u) \leq v^*$ för alla $u \geq 0$.

Relaxation: Det blir för bra.

Vi vill maximera den undre gränsen, dvs. lösa följande problem i u.

$$v_L = \max \varphi(u) \quad \text{då} \quad u \geq 0$$

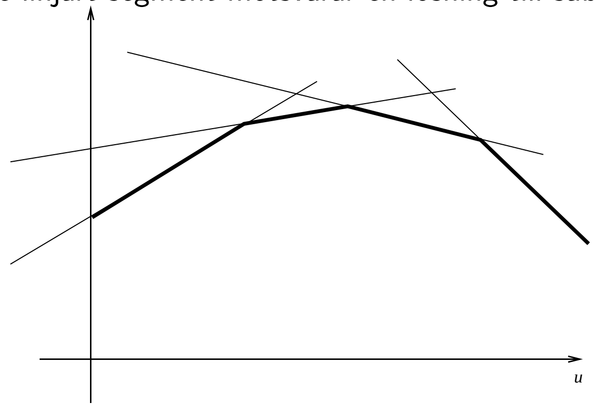
Detta kallas *det duala problemet*. Vi vet att $v_L \leq v^*$.

Stark dualitet: $v_L = v^*$ om X är konvex.

Om problemet är konvext och $f(x)$ är strikt konvex så har Lagrangerelaxationen en unik lösning och $\varphi(u)$ är differentierbar.

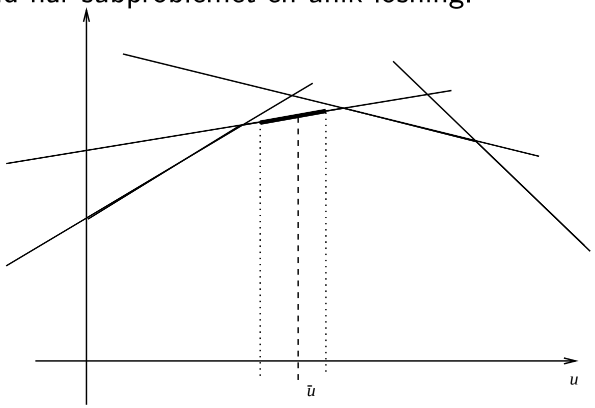
Lagrangedualitet: Dual funktion

Varje linjärt segment motsvarar en lösning till subproblemet.



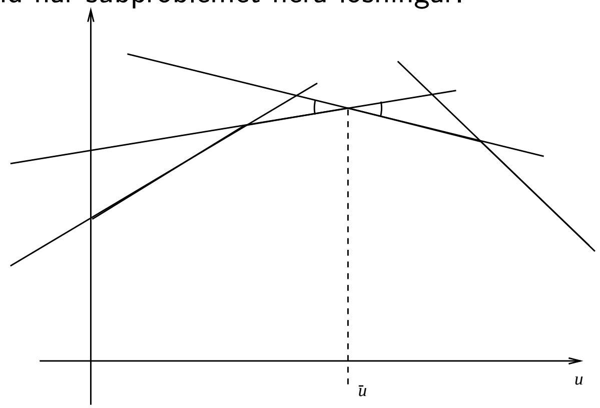
Lagrangedualitet: Unik subproblemlösning

Ibland har subproblemet en unik lösning.



Lagrangedualitet: Ej unik subproblemlösning

Ibland har subproblemet flera lösningar.



Lagrangedualitet: Subgradienter

En subgradient är "lutningen" av den duala funktionen.

En generalisering av vanliga gradienter.

En subgradient fås genom att stoppa en optimallösning till subproblemet i de relaxerade bivillkoren: $\xi_i = g_i(\bar{x})$ för alla i.

Varje subgradient, ξ, pekar in in det halvrum som innehåller alla optimala duala lösningar.

Om vi tar ett litet steg i en subgradients riktning kommer vi närmare optimum.

Därför kan subgradienter användas som sökriktningar för att maximera den duala funktionen.

Om en subgradient är noll, har vi duala maximum.

Lagrangedualitet: Subgradienter

När $u_i = 0$ så ignoreras bivillkoret $g_i(x) \leq 0$ helt.

Om u_i ökas, så kostar det att sätta $g_i(x) > 0$.

En subgradient fås som $\xi_i = g_i(\bar{x})$.

$\xi_i > 0$: bivillkoret inte är uppfyllt, dvs. att straffet är för lågt. Öka u_i.

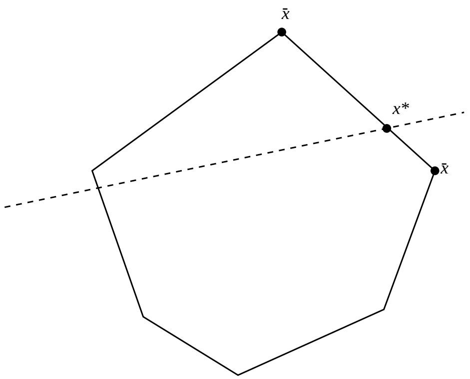
$\xi_i < 0$: bivillkoret är uppfyllt, dvs. att straffet är för högt. Minska u_i.

Lagrangedualitet med linjära funktioner: Styrbarhet

x^* kanske aldrig kan erhållas som optimal lösning till subproblemet.

Vi kallar detta *brist på styrbarhet*.

I konvexa fallet: x^* är en av optimallösningarna till subproblemet i u^*, men är ej extrem.



Praktisk lösningsmetodik baserad på Lagrangedualitet

Lagrangeheuristik:

1. Skaffa ett startvärde på $\bar{u}$ (t.ex. $\bar{u} = 0$).
2. Lös Lagrangerelaxationen, vilket ger $\bar{x}$ och $\varphi(\bar{u})$ (samt ξ).
3. Om $\varphi(\bar{u})$ ger en förbättrad undre gräns, uppdatera den.
4. Om $\bar{x}$ inte är tillåten, försök ändra den lite så att den blir tillåten.
5. Om $\bar{x}$ är tillåten och $f(\bar{x})$ ger en förbättrad övre gräns, uppdatera den.
6. Uppdatera $\bar{u}$ med passande metod. Gå till 2.

Maximera $\varphi(u)$ med en sökmetod (sökriktning och steglängd).

Obs: $\varphi(u)$ inte är differentierbar.

Använd subgradienter som sökriktningar, men gör ej linjesökning.

(Subgradienten är inte alltid en ökanderiktning.)

Använd istället en approximativ steglängdsformel, som kan ge en försämring av målfunktionsvärdet.

Lagrangerelaxation

Lagrangerelaxation kan användas på alla typer av problem: linjära problem, olinjära problem, heltalsproblem, mm.

Möjligheten att välja vilka bivillkor man ska relaxera kan vara användbar.

Exempel: Flera problem som sitter ihop med få bivillkor:

Relaxera bivillkoren som kopplar ihop problemen, ger flera enklare problem som subproblem.

Exempel: Billigaste väg-problem plus några extrabivillkor:

Relaxera extrabivillkoren, ger ren billigaste väg som subproblem.

Exempel: Billigaste uppspännande träd-problem plus några extrabivillkor:

Relaxera extrabivillkoren, ger rent billigaste uppspännande träd som subproblem.