

# 典型优化问题

文再文

北京大学北京国际数学研究中心

教材《最优化：建模、算法与理论》配套电子教案

<http://bicmr.pku.edu.cn/~wenzw/optbook.html>

致谢：本教案由邓展望协助准备

# 典型优化问题简介

先回顾一下最优化问题的一般形式:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & c_i(x) = 0, \quad i = m + 1, \dots, m + l. \end{aligned}$$

- 按照目标和约束函数的简易程度分, 可以分为线性规划和非线性规划. 线性规划是指所有的目标函数和约束函数都是线性的, 非线性规划是指目标函数和约束函数中至少有一个是非线性的
- 另外也可按照问题最优解的性质, 分为凸优化问题与非凸优化问题. 凸优化问题的任何稳定点都是全局极小点, 非凸优化问题的稳定点则可能是局部极小点, 全局极小点甚至是鞍点.

# 典型优化问题简介

- 在实际中优化问题的形式多种多样. 对于不同种类的优化问题, 需要根据问题的具体形式, 来分析其理论性质以及设计最有效的算法.
- 本节将会列举一些重要的优化问题并根据优化建模进一步给出相关的应用背景和应用举例.
- 对于同一个实际问题, 使用不同的建模手段可能获得形式不同的优化问题. 这些问题的求解难度以及解的性质可能有非常大的差别, 因此将实际问题转化为何种优化问题是优化建模中需要重点考虑的.

# 提纲

- 1 凸优化
- 2 线性规划
- 3 二次锥规划
- 4 半定规划
- 5 最小二乘问题
- 6 复合优化问题
- 7 随机优化问题
- 8 矩阵优化
- 9 整数规划
- 10 典型优化算法软件与优化模型语言

# Convex optimization problem

## standard form convex optimization problem

$$\begin{array}{ll}\min & f_0(x) \\ \text{s.t.} & f_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & a_i^T x = b_i, \quad i = 1, \dots, p\end{array}$$

- $f_0, f_1, \dots, f_m$  are convex; equality constraints are affine
- problem is *quasiconvex* if  $f_0$  is quasiconvex (and  $f_1, \dots, f_m$  convex)

often written as

$$\begin{array}{ll}\min & f_0(x) \\ \text{s.t.} & f_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & Ax = b\end{array}$$

important property: feasible set of a convex optimization problem is convex

## example

$$\begin{array}{ll}\min & f_0(x) = x_1^2 + x_2^2 \\ \text{s.t.} & f_1(x) = x_1/(1 + x_2^2) \leq 0 \\ & h_1(x) = (x_1 + x_2)^2 = 0\end{array}$$

- $f_0$  is convex; feasible set  $\{(x_1, x_2) | x_1 = -x_2 \leq 0\}$  is convex
- not a convex problem (according to our definition):  $f_1$  is not convex,  $h_1$  is not affine
- equivalent (but not identical) to the convex problem

$$\begin{array}{ll}\min & x_1^2 + x_2^2 \\ \text{s.t.} & x_1 \leq 0 \\ & x_1 + x_2 = 0\end{array}$$

# Local and global optima

any locally optimal point of a convex problem is (globally) optimal

**proof** : suppose  $x$  is locally optimal and  $y$  is optimal with  $f_0(y) < f_0(x)$   
 $x$  locally optimal means there is an  $R > 0$  such that

$$z \text{ feasible, } \|z - x\|_2 \leq R \implies f_0(z) \geq f_0(x)$$

consider  $z = \theta y + (1 - \theta)x$  with  $\theta = R/(2\|y - x\|_2)$

- $\|y - x\|_2 > R$ , so  $0 < \theta < 1/2$
- $z$  is a convex combination of two feasible points, hence also feasible
- $\|z - x\|_2 = R/2$  and

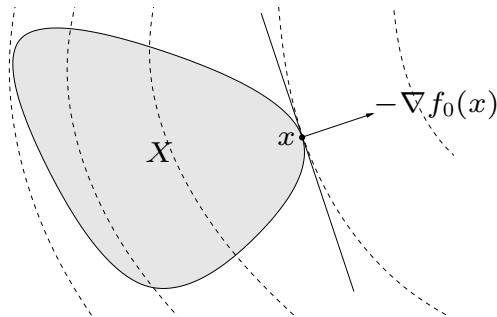
$$f_0(z) \leq \theta f_0(x) + (1 - \theta)f_0(y) < f_0(x)$$

which contradicts our assumption that  $x$  is locally optimal

# Optimality criterion for differentiable $f_0$

$x$  is optimal if and only if it is feasible and

$$\nabla f_0(x)^T (y - x) \geq 0 \quad \text{for all feasible } y$$



if nonzero,  $\nabla f_0(x)$  defines a supporting hyperplane to feasible set  $X$  at  $x$



- **unconstrained problem:**  $x$  is optimal if and only if

$$x \in \text{dom } f_0, \quad \nabla f_0(x) = 0$$

- **equality constrained problem**

$$\min f_0(x) \quad \text{s.t.} \quad Ax = b$$

$x$  is optimal if and only if there exists a  $v$  such that

$$x \in \text{dom } f_0, \quad Ax = b, \quad \nabla f_0(x) + A^T v = 0$$

- **minimization over nonnegative orthant**

$$\min f_0(x) \quad \text{s.t.} \quad x \succeq 0$$

$x$  is optimal if and only if

$$x \in \text{dom } f_0, \quad x \succeq 0, \quad \begin{cases} \nabla f_0(x)_i \geq 0 & x_i = 0 \\ \nabla f_0(x)_i = 0 & x_i > 0 \end{cases}$$

# 提纲

- 1 凸优化
- 2 线性规划
- 3 二次锥规划
- 4 半定规划
- 5 最小二乘问题
- 6 复合优化问题
- 7 随机优化问题
- 8 矩阵优化
- 9 整数规划
- 10 典型优化算法软件与优化模型语言

# 线性规划基本形式

线性规划问题的一般形式如下：

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & c^T x, \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b, \\ & Gx \leq e, \end{aligned} \tag{1}$$

其中  $c \in \mathbb{R}^n$ ,  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$ ,  $G \in \mathbb{R}^{p \times n}$  和  $e \in \mathbb{R}^p$  是给定的矩阵和向量,  $x \in \mathbb{R}^n$  是决策变量. 在实际中, 由于其他形式都可进行转化, 故考虑问题(1)的两种特殊形式: 标准形式

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & c^T x, \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b, \\ & x \geq 0, \end{aligned} \tag{2}$$

以及不等式形式

$$\begin{aligned} \max_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & b^T y, \\ \text{s.t.} \quad & A^T y \leq c. \end{aligned} \tag{3}$$

# 线性规划的应用：运输问题

- 线性规划最先在第二次世界大战时被提出，用于最大化资源的利用效率。
- 在1947年，著名的单纯形方法被提出，使得线性规划问题可以被有效地求解。之后，线性规划用到了更多其他领域当中，如农业、石油、钢铁、运输、通信和运筹学等。线性规划的有效应用节省了大量的人力、物力和财力。随着计算机以及求解算法的快速发展，我们可以求解更大规模的线性规划问题，保证了线性规划问题的应用前景。
- 运输问题的假设如下：假设有 $I$ 个港口 $P_1, P_2, \dots, P_I$ ，提供某种商品。有 $J$ 个市场 $M_1, M_2, \dots, M_J$ 需要这种商品。假设港口 $P_i$ 有 $s_i$ 单位的这种商品( $i = 1, \dots, I$ )，市场 $M_j$ 需要 $r_j$ 单位的这种商品，且总供应与总需求相等，即 $\sum_{i=1}^I s_i = \sum_{j=1}^J r_j$ 。令 $b_{ij}$ 为从港口 $P_i$ 运输单位数量商品到市场 $M_j$ 的成本。运输问题是在满足市场需求下使得运输成本最低。

## 线性规划的应用：运输问题

- 令 $x_{ij}$  为从港口 $P_i$  运输到市场 $M_j$  的商品数量，总的运输代价为

$$\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J x_{ij} b_{ij}. \quad (4)$$

- 港口 $P_i$  总输出量为 $\sum_{j=1}^J x_{ij}$ ，因为港口 $P_i$  存有的商量总量为 $s_i$ ，所以

$$\sum_{j=1}^J x_{ij} = s_i, \quad i = 1, 2, \dots, I. \quad (5)$$

- 市场 $M_j$  总输入量为 $\sum_{i=1}^I x_{ij}$ ，因为市场 $M_j$  的需求量为 $r_j$ ，所以

$$\sum_{i=1}^I x_{ij} = r_j, \quad j = 1, 2, \dots, J. \quad (6)$$

- 因为运输量是非负的，所以

$$x_{ij} \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, I, \quad j = 1, 2, \dots, J. \quad (7)$$

## 线性规划的应用：运输问题

因此，想要在约束(5)—(7) 成立的情况下极小化(4)式。针对决策变量的 $I \times J$  矩阵 $(x_{ij})$ ，可以得到如下线性规划问题：

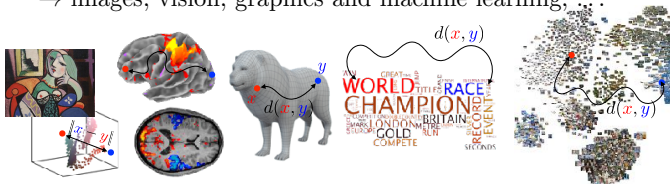
$$\begin{aligned} \min_x \quad & \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J x_{ij} b_{ij}, \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{j=1}^J x_{ij} = s_i, \quad i = 1, 2, \dots, I, \\ & \sum_{i=1}^I x_{ij} = r_j, \quad j = 1, 2, \dots, J, \\ & x_{ij} \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, I, \quad j = 1, 2, \dots, J. \end{aligned}$$

# 线性规划的应用：最运输问题

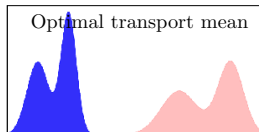
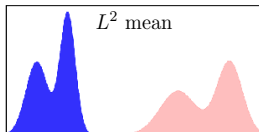
- 运输问题还有更一般的情形，即最优运输问题。它关心两个（离散、连续）测度的对应关系。具体地，若测度是离散的，我们想要确定的是离散点之间的对应关系。

## Comparing Measures

→ images, vision, graphics and machine learning, ...

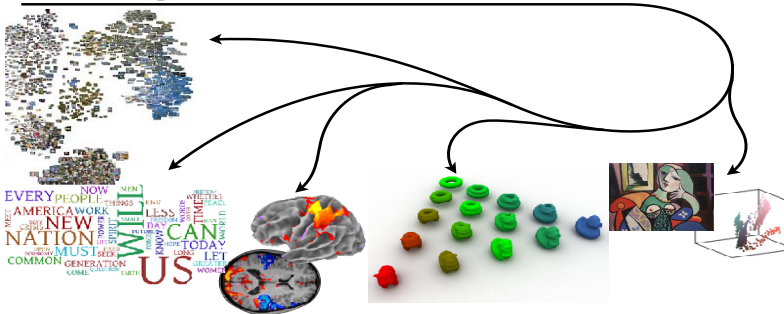


- *Optimal transport*  
→ takes into account a metric  $d$ .



## 线性规划的应用：最运输问题

## Toward High-dimensional OT





# 线性规划的应用：马尔可夫决策过程

- 在马尔可夫决策过程中，考虑终止时间 $T = \infty$ 的情形。因为折现因子 $0 < \gamma < 1$ ，所以如果单步奖励是有界的，则策略对应的奖励和是有界的。否则，如果奖励和无界，任意一个策略的奖励和都是无限的，失去了研究价值。
- 在有界的假设下，Bellman 方程可以转化为如下线性规划问题：

$$\begin{aligned} \max_{V \in \mathbb{R}^{|S|}} \quad & \sum_i V(i) \\ \text{s.t.} \quad & V(i) \geq \sum_j P_a(i,j) (r(i,a) + \gamma V(j)), \forall i \in S, \forall a \in \mathcal{A}, \end{aligned}$$

其中 $V(i)$ 是向量 $V$ 的第 $i$ 个分量，表示从状态 $i$ 出发得到的累积奖励， $P_a(i,j)$ 是转移概率， $r(i,a)$ 是单步奖励以及 $\gamma$ 为折现因子。通过求解上述优化问题，可以求出最优动作 $a(i)$ 以及最优期望奖励。

# 线性规划的应用

- 节食问题：选择 $n$ 种食品的数量： $x_1, \dots, x_n$ 
  - 每种食品含有热量 $c_j$ ，并且 $a_{ij}$ 表示第 $j$ 种食物含有的第 $i$ 种营养.
  - 每天摄入的营养含量不低于 $b \in \mathbb{R}^m$ .

故良好的饮食条件需满足：

$$\begin{array}{ll} \min & c^T x \\ \text{s.t.} & Ax \geq b, x \geq 0 \end{array} \quad (8)$$

- 分段线性最小化问题

$$\min \max_{i=1, \dots, m} (a_i^T x + b_i) \quad (9)$$

也即求一个线性规划问题：

$$\begin{array}{ll} \min & t \\ \text{s.t.} & a_i^T x + b_i \leq t, \quad i = 1, \dots, m \end{array} \quad (10)$$

# 基追踪问题

基追踪问题是压缩感知中的一个基本问题，可以写为

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & \|x\|_1, \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b. \end{aligned} \tag{11}$$

对每个 $|x_i|$  引入一个新的变量 $z_i$ ，可以将问题(11) 转化为

$$\begin{aligned} \min_{z \in \mathbb{R}^n} \quad & \sum_{i=1}^n z_i, \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b, \\ & -z_i \leq x_i \leq z_i, \quad i = 1, 2, \dots, n, \end{aligned} \tag{12}$$

这是一个线性规划问题.

# 基追踪问题

- 除此之外, 也可以引入 $x_i$ 的正部和负部, 其中 $x_i^+ = \max\{x_i, 0\}$ ,  $x_i^- = \max\{-x_i, 0\}$ ..
- 利用 $x_i = x_i^+ - x_i^-$ ,  $|x_i| = x_i^+ + x_i^-$ , 则问题(11) 转化为的另外一种等价的线性规划形式可以写成

$$\begin{aligned} \min_{x^+, x^- \in \mathbb{R}^n} \quad & \sum_{i=1}^n (x_i^+ + x_i^-), \\ \text{s.t.} \quad & Ax^+ - Ax^- = b, \\ & x^+, x^- \geq 0. \end{aligned}$$

可以看出这这也是一个线性规划问题, 且与原问题等价.

# 数据拟合

在数据拟合中，除了常用的最小二乘模型外，还有最小 $\ell_1$ 范数模型

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_1, \quad (13)$$

和最小 $\ell_\infty$ 范数模型

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_\infty. \quad (14)$$

这两个问题都可以转化成线性规划的形式。

- 对于问题(13)，通过引入变量 $y = Ax - b$ ，可以得到如下等价问题：

$$\begin{aligned} \min_{x, y \in \mathbb{R}^n} \quad & \|y\|_1, \\ \text{s.t.} \quad & y = Ax - b. \end{aligned}$$

- 利用基追踪问题中类似的技巧，可以将上述绝对值优化问题转化成线性规划问题。

- 对于问题(14)，令  $t = \|Ax - b\|_\infty$ ，则得到等价问题

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}} \quad & t, \\ \text{s.t.} \quad & \|Ax - b\|_\infty \leq t. \end{aligned}$$

- 利用  $l_\infty$  范数的定义，可以进一步写为

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}} \quad & t, \\ \text{s.t.} \quad & -t\mathbf{1} \leq Ax - b \leq t\mathbf{1}, \end{aligned}$$

这是一个线性规划问题。

# 多面体的切比雪夫中心

多面体的

$$\mathcal{P} = \{x | a_i^T x \leq b_i, i = 1, \dots, m\}$$

的切比雪夫中心即为其最大半径内接球的球心

$$\mathcal{B} = \{x_c + u | \|u\|_2 \leq r\}$$

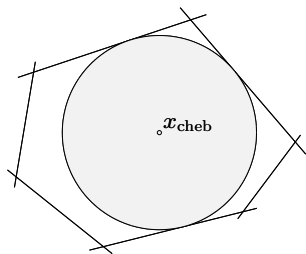
- $a_i^T x \leq b_i$  对  $\forall x \in \mathcal{B}$  当且仅当

$$\sup\{a_i^T(x_c + u) | \|u\|_2 \leq r\} = a_i^T x_c + r\|a_i\|_2 \leq b_i$$

- 因此,  $x_c, r$  可以用LP方式求解

$$\max \quad r$$

$$\text{s.t.} \quad a_i^T x_c + r\|a_i\|_2 \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m$$



## 分式线性问题

$$\begin{array}{ll}\min & f_0(x) \\ \text{s.t.} & Gx \leq h, Ax = b\end{array}\quad (15)$$

分式线性函数：

$$f_0 = \frac{c^T x + d}{e^T x + f}, \quad \text{dom} f_0(x) = \{x | e^T x + f > 0\} \quad (16)$$

则该问题等价于一个线性问题：

$$\begin{array}{ll}\min & c^T y + dz \\ \text{s.t.} & Gy \leq hz \\ & Ay = bz \\ & e^T y + fz = 1 \\ & z \geq 0\end{array}\quad (17)$$



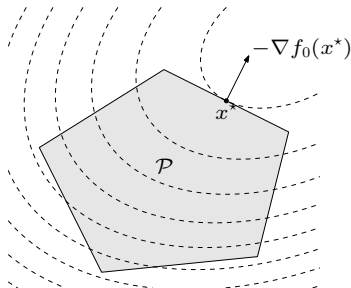
# 提纲

- 1 凸优化
- 2 线性规划
- 3 二次锥规划
- 4 半定规划
- 5 最小二乘问题
- 6 复合优化问题
- 7 随机优化问题
- 8 矩阵优化
- 9 整数规划
- 10 典型优化算法软件与优化模型语言

## 二次规划问题

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2}x^T Px + q^T x + r \\ \text{s.t.} \quad & Gx \leq h \\ & Ax = b \end{aligned} \tag{18}$$

- $P \in \mathcal{S}_+^n$ , 故目标函数是二次的
- 在一个多面体内最小化一个二次凸问题



## 二次规划的应用

- 最小二乘问题：

$$\min \|Ax - b\|_2^2 \quad (19)$$

- 该问题的解析解为  $x^* = A^\dagger b$  (其中  $A^\dagger$  为广义逆)
- 随机线性规划

$$\begin{aligned} \min \quad & \bar{c}^T x + \gamma x^T \Sigma x = \mathbf{E} c^T x + \gamma \text{var}(c^T x) \\ \text{s.t.} \quad & Gx \leq h, \quad Ax = b \end{aligned}$$

- $c$  是随机向量并且均值为  $\bar{c}$ , 方差为  $\Sigma$
- $c^T x$  均值为  $\bar{c}^T x$ , 方差为  $x^T \Sigma x$
- $\gamma > 0$  为风险参数, 控制预期成本与风险.

# 带有二次约束的二次规划问题(QCQP)

考虑带有二次约束的二次规划问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & (1/2)x^T P_0 x + q_0^T x + r_0 \\ \text{s.t.} \quad & (1/2)x^T P_i x + q_i^T x + r_i \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & Ax = b \end{aligned}$$

- $P_i \in \mathbb{S}_+^n$ ; 即目标函数与约束均为二次凸的
- 如果  $P_1, \dots, P_m \in \mathbb{S}_{++}^n$ , 则可行域为  $m$  个椭球与一个仿射集的交集.

# 广义不等式约束

- 凸问题的广义不等式约束

$$\begin{array}{ll}\min & f_0(x) \\ \text{s.t.} & f_i(x) \preceq_{K_i} 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & Ax = b\end{array}$$

- $f_0 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  为凸函数;  $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{k_i}$  关于适当锥  $K_i$  为  $K_i$ -凸的.
- 与标准凸问题有相同的性质

- 锥形式问题(具有仿射目标函数与约束的特殊情况)

$$\begin{array}{ll}\min & c^T x \\ \text{s.t.} & Fx + g \preceq_K 0 \\ & Ax = b\end{array}$$

将线性规划问题延伸到了非多面体锥上( $K = \mathbb{R}_+^m$ )

## 二次锥

- 二次锥(SOC):

$$Q = \left\{ x \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \|\bar{x}\|_2 \leq x_1, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \bar{x} \end{bmatrix} \right\}$$

- 旋转二次锥

$$Q = \left\{ x \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \|\bar{x}\|_2^2 \leq x_1 x_2, x_1, x_2 \geq 0, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \bar{x} \end{bmatrix} \right\}$$

- 旋转二次锥  $\|\bar{x}\|^2 \leq x_1 x_2$ , 其中  $x_1, x_2 \geq 0$ , 等价于

$$\left\| \begin{pmatrix} x_1 - x_2 \\ 2\bar{x} \end{pmatrix} \right\| \leq x_1 + x_2$$

## 二次锥规划

$$\begin{array}{ll}\min & f^T x \\ \text{s.t.} & \|A_i x + b_i\|_2 \leq c_i^T x + d_i, \quad i = 1, \dots, m \\ & Fx = g\end{array}$$

$$(A_i \in \mathbb{R}^{n_i \times n}, F \in \mathbb{R}^{p \times n})$$

- 优化问题中的不等式:

$$(c_i^T x + d_i, A_i x + b_i) \in \text{二次锥}$$

- 对于  $n_i = 0$ , 问题退化为LP; 若  $c_i = 0$ , 问题退化为QCQP
- 问题形式比LP与QCQP更常规

## 二次规划(QP)

$$\begin{array}{ll}\min & q(x) = x^\top Qx + a^\top x + \beta \quad \text{假设 } Q \succ 0, Q = Q^\top \\ \text{s.t.} & Ax = b \\ & x \geq 0\end{array}$$

- $q(x) = \|\bar{u}\|^2 + \beta - \frac{1}{4}a^\top Q^{-1}a$ , 其中  $\bar{u} = Q^{1/2}x + \frac{1}{2}Q^{-1/2}a$ .
- 等价的SOCP问题形式:

$$\begin{array}{ll}\min & u_0 \\ \text{s.t.} & \bar{u} = Q^{1/2}x + \frac{1}{2}Q^{-1/2}a \\ & Ax = b \\ & x \geq 0, \quad (u_0, \bar{u}) \succeq_Q 0\end{array}$$



# Quadratic constraints

$$q(x) = x^\top B^\top Bx + a^\top x + \beta \leq 0$$

is equivalent to

$$(u_0, \bar{u}) \succeq_{\mathcal{Q}} 0,$$

where

$$\bar{u} = \begin{pmatrix} Bx \\ \frac{a^\top x + \beta + 1}{2} \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad u_0 = \frac{1 - a^\top x - \beta}{2}$$

# 最小范数问题

令  $\bar{v}_i = A_i x + b_i \in \mathbb{R}^{n_i}$ .

•  $\min_x \sum_i \|\bar{v}_i\|$  等价于

$$\begin{array}{ll} \min & \sum_i v_{i0} \\ \text{s.t.} & \bar{v}_i = A_i x + b_i \\ & (v_{i0}, \bar{v}_i) \succeq_Q 0 \end{array}$$

•  $\min_x \max_{1 \leq i \leq r} \|\bar{v}_i\|$  等价于

$$\begin{array}{ll} \min & t \\ \text{s.t.} & \bar{v}_i = A_i x + b_i \\ & (t, \bar{v}_i) \succeq_Q 0 \end{array}$$

# 最小范数问题

令  $\bar{v}_i = A_i x + b_i \in \mathbb{R}^{n_i}$ .

- $\|\bar{v}_{[1]}\|, \dots, \|\bar{v}_{[r]}\|$  是范数  $\|\bar{v}_1\|, \dots, \|\bar{v}_r\|$  按照非递增方式的排列
- $\min_x \sum_{i=1}^k \|\bar{v}_{[i]}\|$  等价于

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i=1}^m u_i + kt \\ \text{s.t.} \quad & \bar{v}_i = A_i x + b_i, \quad i = 1, \dots, m \\ & \|\bar{v}_i\| \leq u_i + t, \quad i = 1, \dots, m \\ & u_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

# 旋转二次锥

- 极小化仿射函数的调和平均值

$$\min \quad \sum_i 1/(a_i^\top x + \beta_i), \text{ s.t. } a_i^\top x + \beta_i > 0$$

该问题等价于

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_i u_i \\ \text{s.t.} \quad & \bar{v}_i = a_i^\top x + \beta_i \\ & 1 \leq u_i v_i \\ & u_i \geq 0 \end{aligned}$$

# 对数切比雪夫逼近

- 对数切比雪夫逼近

$$\min_x \max_{1 \leq i \leq r} |\ln(a_i^\top x) - \ln b_i|$$

- 由于  $|\ln(a_i^\top x) - \ln b_i| = \ln \max(a_i^\top x/b_i, b_i/a_i^\top x)$ , 该问题等价于:

$$\begin{aligned} \min \quad & t \\ \text{s.t.} \quad & 1 \leq (a_i^\top x/b_i)t \\ & a_i^\top x/b_i \leq t \\ & t \geq 0 \end{aligned}$$

## 二次锥规划的应用

- 含有几何平均的不等式：

$$\left( \prod_{i=1}^n (a_i^\top x + b_i) \right)^{1/n} \geq t$$

对于 $n=4$ 情形：

$$\begin{aligned} \max \quad & w_3 \\ \text{s.t.} \quad & a_i^\top x - b_i \geq 0 \\ & (a_1^\top x - b_1)(a_2^\top x - b_2) \geq w_1^2 \\ & (a_3^\top x - b_3)(a_4^\top x - b_4) \geq w_2^2 \\ & w_1 w_2 \geq w_3^2 \\ & w_i \geq 0 \end{aligned}$$
$$\max \prod_{i=1}^4 (a_i^\top x - b_i) \iff$$

- 目标函数可延伸为仿射函数有理幂次的乘积

# Power cone

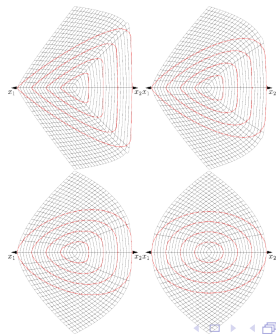
<https://docs.mosek.com/modeling-cookbook/powo.html>

- For  $m < n$  and  $\alpha_1 + \dots + \alpha_m = 1$ , the power cone is

$$P_n^{\alpha_1, \dots, \alpha_m} = \left\{ x \in \mathbb{R}^n \mid \prod_{i=1}^m x_i^{\alpha_i} \geq \sqrt{\sum_{i=m+1}^n x_i^2}, \quad x_1, \dots, x_m \geq 0 \right\}$$

The left-hand side is the weighted geometric mean of the  $x_i$

- The boundary of  $P_3^{\alpha, 1-\alpha}$  for  $\alpha = 0.1, 0.2, 0.35, 0.5$



# Examples of power cone: $x^p$

powers:  $x^p$

- for  $p > 1$ ,  $t \geq |x|^p$  is equivalent to  $t^{1/p} \geq |x|$ :

$$t \geq |x|^p \iff (t, 1, x) \in P_3^{1/p, 1-1/p}$$

- for  $0 < p < 1$ ,  $x^p$  is concave for  $x \geq 0$ :

$$t \leq |x|^p, x \geq 0 \iff (x, 1, t) \in P_3^{p, 1-p}$$

- for  $p < 0$ ,  $x^p$  is convex for  $x > 0$

$$t \geq |x|^p \iff t^{1/(1-p)} x^{-p/(1-p)} \iff (t, x, 1) \in P_3^{1/(1-p), -p/(1-p)}$$



# Examples of power cone: $p$ -norm

$p$ -norm:  $\|x\|^p = \sum_i \|x_i\|^p$

- $p$ -norm cones for  $p \geq 1$ :

$$\{(t, x) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid t \geq \|x\|_p\}$$

Since  $t \geq \|x\|_p$  can be written as  $t \geq \sum_i |x_i|^p / t^{p-1}$ , we obtain:

$$r_i t^{p-1} \geq |x_i|^p \quad (\text{i.e., } (r_i, t, x_i) \in P_3^{1/p, 1-1/p})$$

$$\sum_i r_i = t$$

- For  $0 \neq p < 1$ , we can consider:

$$\{(t, x) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid 0 \leq t \leq (\sum_i x_i^p)^{1/p}, x_i \geq 0\}$$

# Splitting of general power cone

- Consider the general power cone:  $\sum_i \alpha_i = 1$ ,

$$P_{m+1}^{\alpha_1, \dots, \alpha_m} = \{x \mid x_1^{\alpha_1} \cdots x_m^{\alpha_m} \geq |z|, x_1, \dots, x_m \geq 0\}.$$

Let  $s = \alpha_1 + \cdots + \alpha_{m-1}$ . we can split  $P_{m+1}^{\alpha_1, \dots, \alpha_m}$  as

$$\begin{aligned} x_1^{\alpha_1/s} \cdots x_m^{\alpha_m/s} &\geq |t|, x_1, \dots, x_{m-1} \geq 0 \\ t^s x_m^{\alpha_m} &\geq |z|, x_m \geq 0. \end{aligned}$$

Hence,  $P_{m+1}^{\alpha_1, \dots, \alpha_m}$  can be expressed using two power cones  $P_m^{\alpha_1/s, \dots, \alpha_{m-1}/s}$  and  $P_3^{s, \alpha_m}$ .

- Proceeding by induction shows that it can be expressed the basic three-dimensional cones  $P_3^{\alpha, 1-\alpha}$ .

# Non-homogenous constraints

- Consider  $\sum_i \alpha_i < \beta$  and  $\alpha_i > 0$  and

$$x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \cdots x_m^{\alpha_m} \geq |z|^\beta, x_i \geq 0$$

- equivalent to

$$(x_1, x_2, \dots, x_m, 1, z) \in P_{m+1}^{\alpha_1/\beta, \dots, \alpha_m/\beta, s},$$

where  $s = 1 - \sum_i \alpha_i/\beta$

# Exponential cone

<https://docs.mosek.com/modeling-cookbook/expo.html>

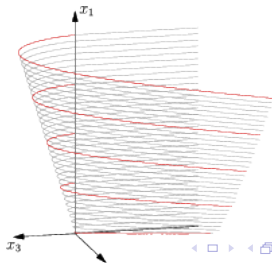
- The exponential cone is a convex subset of  $\mathbb{R}^3$  defined as

$$K_{\text{exp}} = \left\{ (x_1, x_2, x_3) \mid x_1 \geq x_2 e^{x_3/x_2}, x_2 > 0 \right\} \\ \cup \left\{ (x_1, 0, x_3) \mid x_1 \geq 0, x_3 \leq 0 \right\}.$$

It is the closure of the set of points which satisfy

$$x_1 \geq x_2, x_2 e^{x_3/x_2}, x_1, x_2 > 0$$

- The boundary of the exponential cone. The red isolines are graphs of  $x_2 \rightarrow x_2 \log(x_1/x_2)$  for fixed  $x_1$



# Examples of exponential cone

- Exponential:  $t \geq e^x \iff (t, 1, x) \in K_{\text{exp}}$
- Logarithm:  $t \leq \log x \iff (x, 1, t) \in K_{\text{exp}}$
- Entropy

$$t \leq -x \log x \iff t \leq x \log(1/x) \iff (1, x, t) \in K_{\text{exp}}$$

- Relative entropy  $D(x, y) = x \log(x/y)$

$$t \geq D(x, y) \iff -t \leq x \log(y/x) \iff (y, x, -t) \in K_{\text{exp}}$$

- Softplus function

$$t \geq \log(1 + e^x) \iff e^{x-t} + e^{-t} \leq 1,$$

can be written as

$$u + v \leq 1, (u, 1, x - t) \in K_{\text{exp}}, (v, 1, -t) \in K_{\text{exp}}$$

# Examples of exponential cone

- Log-sum-exp

$$t \geq \log(e^{x_1} + \cdots + e^{x_n}) \iff e^{x_1-t} + \cdots + e^{x_n-t} \leq 1$$

can be written as

$$\sum_i u_i \leq 1, \quad (u_i, 1, x_i - t) \in K_{\text{exp}}, i = 1, \cdots, n$$

- Log-sum-inv

$$t \geq \log(1/x_1 + \cdots + 1/x_n), \quad x_i > 0$$

can be written as

$$t \geq \log(e^{y_1} + \cdots + e^{y_n}) \quad x_i \geq e^{-y_i}, \quad i = 1, \cdots, n.$$

# Examples of exponential cone

- Arbitrary exponential: let  $a_i$  be arbitrary positive constants

$$t \geq \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \cdots \alpha_n^{x_n}$$

which can be written as

$$t \geq \exp \sum_i x_i \log \alpha_i \iff (t, 1, \sum_i x_i \log \alpha_i) \in K_{\text{exp}}$$

- Lambert W-function is the unique function satisfying

$$W(x)e^{W(x)} = x.$$

We have:

$$\{(x, t) \mid 0 \leq x, 0 \leq t \leq W(x)\} = \{(x, t) \mid x \geq te^t = te^{t^2/t}\}$$

can be written as

$$\begin{aligned} (x, t, u) &\in K_{\text{exp}} \quad (\text{i.e., } x \geq t \exp(u/t)) \\ (1/2, u, t) &\in Q \quad (\text{i.e., } u \geq t^2) \end{aligned}$$

# Geometric programming

- monomial function:  $f(x) = cx_1^{\alpha_1}x_2^{\alpha_2}\cdots x_n^{\alpha_n}$  with  $c > 0$  and  $\alpha_i$  are arbitrary real numbers. Let  $x_j = e^{y_j}$ , then

$$ce^{\alpha_1 y_1} \cdots e^{\alpha_n y_n} = \exp(a^\top y + \log c)$$

- A posynomial (positive polynomial) is a sum of monomials.
- A geometric program (GP):  $f_0, \dots, f_m$  are posynomials:

$$\begin{array}{ll} \min & f_0(x) \\ \text{s.t.} & f_i(x) \leq 1, \quad i = 1, \dots, m, \\ & x_j > 0, \quad j = 1, \dots, n. \end{array} \iff \begin{array}{ll} \min & t \\ \text{s.t.} & \log\left(\sum_k \exp(a_{0,k}^T y + \log c_{0,k})\right) \leq t, \\ & \log\left(\sum_k \exp(a_{i,k}^T y + \log c_{i,k})\right) \leq 0 \\ & i = 1, \dots, m, \end{array}$$



# 提纲

- 1 凸优化
- 2 线性规划
- 3 二次锥规划
- 4 半定规划**
- 5 最小二乘问题
- 6 复合优化问题
- 7 随机优化问题
- 8 矩阵优化
- 9 整数规划
- 10 典型优化算法软件与优化模型语言

# 半定规划

半定规划问题的一般形式如下：

$$\begin{aligned} \min \quad & c^T x, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 A_1 + x_2 A_2 + \cdots + x_n A_n + B \preceq 0, \\ & Gx = h, \end{aligned} \tag{20}$$

其中  $c \in \mathbb{R}^n$ ,  $A_i \in \mathcal{S}^m$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ ,  $B \in \mathcal{S}^m$ ,  $G \in \mathbb{R}^{p \times n}$ ,  $h \in \mathbb{R}^p$  为已知的向量和矩阵,  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$  是自变量。

- 半定规划 (SDP) 是线性规划在矩阵空间中的一种推广。它的目标函数和等式约束均为关于矩阵的线性函数, 而它与线性规划不同的地方是其自变量取值于半正定矩阵空间。
- 作为一种特殊的矩阵优化问题, 半定规划在某些结构上和线性规划非常相似, 很多研究线性规划的方法都可以作为研究半定规划的基础。由于半定规划地位的特殊性, 我们将在本节中单独讨论半定规划的形式和应用。

# 半定规划

类似于线性规划问题，我们考虑半定规划的标准形式

$$\begin{aligned} \min \quad & \langle C, X \rangle, \\ \text{s.t.} \quad & \langle A_1, X \rangle = b_1, \\ & \dots \\ & \langle A_m, X \rangle = b_m, \\ & X \succeq 0, \end{aligned} \tag{21}$$

和对偶形式：

$$\begin{aligned} \min \quad & -b^T y, \\ \text{s.t.} \quad & y_1 A_1 + y_2 A_2 + \dots + y_n A_n \preceq C. \end{aligned} \tag{22}$$

形如(20) 式的优化问题都可以转化成(21) 式或者(22) 式的形式.

# LP, SOCP 与 SDP 的比较

## LP 与 SDP

$$\begin{array}{ll} \text{LP:} & \min \quad c^T x \\ & \text{s.t.} \quad Ax \leq b \end{array} \qquad \begin{array}{ll} \text{SDP:} & \min \quad c^T x \\ & \text{s.t.} \quad \text{diag}(Ax - b) \preceq 0 \end{array}$$

## SOCP 与 SDP

$$\begin{array}{ll} \text{SOCP:} & \min \quad f^T x \\ & \text{s.t.} \quad \|A_i x + b_i\|_2 \leq c_i^T x + d_i, \quad i = 1, \dots, m \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{SDP:} & \min \quad f^T x \\ & \text{s.t.} \quad \begin{bmatrix} (c_i^T x + d_i)I & A_i x + b_i \\ (A_i x + b_i)^T & c_i^T x + d_i \end{bmatrix} \succeq 0, \quad i = 1, \dots, m \end{array}$$

## 二次约束二次规划问题的半定规划松弛

- 考虑二次约束二次规划问题

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & x^T A_0 x + 2b_0^T x + c_0, \\ \text{s.t.} \quad & x^T A_i x + 2b_i^T x + c_i \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \end{aligned} \quad (23)$$

其中 $A_i$ 为 $n \times n$ 对称矩阵. 当部分 $A_i$ 为对称不定矩阵时, 问题(23)是NP 难的非凸优化问题.

- 写出问题(23)的半定规划松弛问题. 对任意 $x \in \mathbb{R}^n$ 以及 $A \in \mathcal{S}^n$ , 有恒等式

$$x^T A x = \text{tr} x^T A x = \text{tr} A x x^T = \langle A, x x^T \rangle,$$

因此问题(23)中所有的二次项均可用下面的方式进行等价刻画:

$$x^T A_i x + 2b_i^T x + c_i = \langle A_i, x x^T \rangle + 2b_i^T x + c_i.$$

## 二次约束二次规划问题的半定规划松弛

由上述分析，原始问题等价于

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & \langle A_0, X \rangle + 2b_0^T x + c_0 \\ \text{s.t.} \quad & \langle A_i, X \rangle + 2b_i^T x + c_i \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \\ & X = xx^T. \end{aligned} \tag{24}$$

进一步地，

$$\begin{aligned} x^T A_i x + 2b_i^T x + c_i &= \left\langle \begin{pmatrix} A_i & b_i \\ b_i^T & c_i \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} X & x \\ x^T & 1 \end{pmatrix} \right\rangle, \\ &\stackrel{\text{def}}{=} \langle \overline{A}_i, \overline{X} \rangle, \quad i = 0, 1, \dots, m. \end{aligned}$$

## 二次约束二次规划问题的半定规划松弛

接下来将等价问题(24) 松弛为半定规划问题.

- 在问题(24) 中, 唯一的非线性部分是约束 $X = xx^T$ , 我们将其松弛成半正定约束 $X \succeq xx^T$ . 可以证明,  $\bar{X} \succeq 0$  与  $X \succeq xx^T$  是等价的.
- 因此这个问题的半定规划松弛可以写成

$$\begin{aligned} \min \quad & \langle \bar{A}_0, \bar{X} \rangle \\ \text{s.t.} \quad & \langle \bar{A}_i, \bar{X} \rangle \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \\ & \bar{X} \succeq 0, \\ & \bar{X}_{n+1, n+1} = 1. \end{aligned}$$

其中“松弛”来源于我们将 $X = xx^T$  替换成了 $X \succeq xx^T$ .

# 最大割问题的半定规划松弛

- 令 $G$ 为一个无向图，其节点集合为 $V = \{1, 2, \dots, n\}$ 和边的集合为 $E$ 。令 $w_{ij} = w_{ji}$ 为边 $(i, j) \in E$ 上的权重，并假设 $w_{ij} \geq 0, (i, j) \in E$ 。最大割问题是找到节点集合 $V$ 的一个子集 $S$ 使得 $S$ 与它的补集 $\bar{S}$ 之间相连边的权重之和最大化。
- 可以将最大割问题写成如下整数规划的形式：令 $x_j = 1, j \in S$ 和 $x_j = -1, j \in \bar{S}$ ，则

$$\begin{aligned} \max \quad & \frac{1}{2} \sum_{i < j} (1 - x_i x_j) w_{ij} \\ \text{s.t.} \quad & x_j \in \{-1, 1\}, j = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \tag{25}$$

- 在问题(25)中，只有当 $x_i$ 与 $x_j$ 不同时，目标函数中 $w_{ij}$ 的系数非零。最大割问题是一个离散优化问题，很难在多项式时间内找到它的最优解。



## 二次约束二次规划问题的半定规划松弛

接下来介绍如何将问题(25) 松弛成一个半定规划问题.

- 令  $W = (w_{ij}) \in \mathcal{S}^n$ , 并定义  $C = -\frac{1}{4}(\text{Diag}(W\mathbf{1}) - W)$  为图  $G$  的拉普拉斯矩阵的  $-\frac{1}{4}$  倍, 则问题(25) 可以等价地写为

$$\begin{aligned} \min \quad & x^T C x, \\ \text{s.t.} \quad & x_i^2 = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned}$$

由于目标函数是关于  $x$  的二次函数, 可将其等价替换为  $\langle C, xx^T \rangle$ .

- 接下来令  $X = xx^T$ , 注意到约束  $x_i^2 = 1$ , 这意味着矩阵  $X$  对角线元素  $X_{ii} = 1$ . 因此利用矩阵形式我们将最大割问题转化为

$$\begin{aligned} \min \quad & \langle C, X \rangle, \\ \text{s.t.} \quad & X_{ii} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ & X \succeq 0, \quad \text{rank}(X) = 1. \end{aligned} \tag{26}$$

- 问题(26) 和(25) 是等价的, 这是因为  $X = xx^T$  可以用约束  $X \succeq 0$  和  $\text{rank}(X) = 1$  等价刻画.

# 极小化最大特征值

- 问题的形式可表示为： $\lambda_{\max}(A_0 + \sum_i x_i A_i)$ :

$$\min \quad \lambda_{\max}(A_0 + \sum_i x_i A_i)$$

SDP形式：

$$\begin{aligned} \min \quad & z \\ \text{s.t.} \quad & zI - \sum_i x_i A_i \succeq A_0 \end{aligned}$$

对偶问题形式：

$$\begin{aligned} \max \quad & \langle A_0, Y \rangle \\ \text{s.t.} \quad & \langle A_i, Y \rangle = 0 \\ & \langle I, Y \rangle = 1 \\ & Y \succeq 0 \end{aligned}$$

- 等价形式来源于：

$$\lambda_{\max}(A) \leq t \iff A \preceq tI$$

# 极小化二范数问题

- 令  $A_i \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . 极小化  $A(x) = A_0 + \sum_i x_i A_i$  的二范数:

$$\min_x \|A(x)\|_2$$

该问题的SDP形式:

$$\begin{aligned} \min_{x,t} \quad & t \\ \text{s.t.} \quad & \begin{pmatrix} tI & A(x) \\ A(x)^\top & tI \end{pmatrix} \succeq 0 \end{aligned}$$

- 约束形式来源于:

$$\begin{aligned} \|A\|_2 \leq t & \iff A^\top A \preceq t^2 I, \quad t \geq 0 \\ & \iff \begin{pmatrix} tI & A(x) \\ A(x)^\top & tI \end{pmatrix} \succeq 0 \end{aligned}$$

# 特征值优化问题

- 令  $\Lambda_k(A)$  表示  $A$  的前  $k$  个最大特征值. 并且最小化  $\Lambda_k(A_0 + \sum_i x_i A_i)$ :

$$\min \quad \Lambda_k(A_0 + \sum_i x_i A_i)$$

该问题的SDP形式:

$$\begin{aligned} \min \quad & kz + \text{Tr}(X) \\ \text{s.t.} \quad & zI + X - \sum_i x_i A_i \succeq A_0 \\ & X \succeq 0 \end{aligned}$$

- 约束来源于:

$$\Lambda_k(A) \leq t \iff t - kz - \text{Tr}(X) \geq 0, zI + X \succeq A, X \succeq 0$$

# 提纲

- 1 凸优化
- 2 线性规划
- 3 二次锥规划
- 4 半定规划
- 5 最小二乘问题**
- 6 复合优化问题
- 7 随机优化问题
- 8 矩阵优化
- 9 整数规划
- 10 典型优化算法软件与优化模型语言

# 最小二乘问题

- 最小二乘问题的一般形式如下：

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^m r_i^2(x), \quad (27)$$

其中  $r_i: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  为实值函数. 如果所有的  $r_i$  都是线性函数, 则称问题(27) 为线性最小二乘问题, 否则称其为非线性最小二乘问题. 最小二乘问题是线性回归和非线性回归的基础.

- 最小二乘问题也常用于线性（非线性）方程组问题当中. 当线性（非线性）观测带有噪声时, 我们一般会基于该线性（非线性）系统建立最小二乘模型. 特别地, 如果噪声服从高斯分布, 最小二乘问题的解对应于原问题的最大似然解.

# 线性最小二乘问题

- 线性最小二乘问题是回归分析中的一个基本模型，它可以表示为

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^m (a_i^T x - b_i)^2,$$

即  $r_i(x) = a_i^T x - b_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$ .

- 记  $A = [a_1, a_2, \dots, a_m]^T$ , 那么线性最小二乘问题可以等价地写成如下形式:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2,$$

这是一个无约束二次目标函数的优化问题.

# 线性最小二乘问题

- 因为二次函数 $f$ 是凸的，故 $x \in \mathbb{R}^n$ 为其全局极小解当且仅当 $x$ 满足方程

$$\nabla f(x) = A^T(Ax - b) = 0.$$

- 事实上，因为 $f$ 是二次的，则有

$$\begin{aligned} f(y) &= f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^T \nabla^2 f(x)(y - x) \\ &= f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^T A^T A(y - x). \end{aligned}$$

- 因此，如果 $\nabla f(x) = 0$ ，根据 $A^T A$ 的半正定性，

$$f(y) \geq f(x), \quad \forall y \in \mathbb{R}^n,$$

即 $x$ 为 $f(x)$ 的全局极小解。



# 线性最小二乘问题

- 反之，如果  $\nabla f(x) \neq 0$ ，此时说明沿着负梯度方向目标函数将减小。
- 具体地，取  $y = x - t\nabla f(x)$  且  $t = \frac{1}{\lambda_{\max}(A^T A)}$ ，其中  $\lambda_{\max}(A^T A)$  表示  $A^T A$  的最大特征值，那么

$$\begin{aligned} f(x - t\nabla f(x)) &\leq f(x) - t\|\nabla f(x)\|_2^2 + \frac{1}{2}t^2\lambda_{\max}(A^T A)\|\nabla f(x)\|_2^2 \\ &= f(x) + (-t + \frac{1}{2}t^2\lambda_{\max}(A^T A))\|\nabla f(x)\|_2^2 \\ &= f(x) - \frac{1}{2\lambda_{\max}(A^T A)}\|\nabla f(x)\|_2^2 < f(x). \end{aligned}$$

因而在全局极小解  $x$  处必有  $\nabla f(x) = 0$ 。

# 数据插值

- 给定数据集  $\{a_i \in \mathbb{R}^p, b_i \in \mathbb{R}^q, i = 1, 2, \dots, m\}$ , 插值是求一个映射  $f$ , 使得

$$b_i = f(a_i), \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

- 在实际中, 出于计算上的可行性, 我们一般会限制在一个特定函数空间上来求  $f$  的一个逼近解. 如果利用线性函数逼近, 即  $f(a) = Xa + y$ , 其中  $X \in \mathbb{R}^{q \times p}$ ,  $y \in \mathbb{R}^q$ , 则为了求解  $X, y$ , 可以建立如下最小二乘问题:

$$\min_{X \in \mathbb{R}^{q \times p}} \sum_{i=1}^m \|Xa_i + y - b_i\|^2.$$

- 一般地, 假设  $\{\phi_i(a)\}_{i=1}^n$  ( $n \leq m$ ) 为插值空间的一组基, 数据插值问题可以写成

$$b_j = f(a_j) = \sum_{i=1}^n x_i \phi_i(a_j), \quad j = 1, 2, \dots, m,$$

其中  $x_i$  为待定系数. 这是关于  $x$  的线性方程组.

# 数据插值

除了这种基函数的和的方式，深度学习也通过一些简单函数的复合来逼近原未知函数。

- 具体地，假设有一些简单的非线性向量函数  $\phi_i(\theta) : \mathbb{R}^q \rightarrow \mathbb{R}^q$ ，并构造如下复合函数：

$$f(\theta) = \phi_n(X_n \phi_{n-1}(X_{n-1} \cdots \phi_1(X_1 \theta + y_1) \cdots + y_{n-1}) + y_n).$$

- 在实际中常用的简单非线性函数有ReLU，即

$$\phi_i(\theta) = (\text{ReLU}(\theta_1), \text{ReLU}(\theta_2), \cdots, \text{ReLU}(\theta_q))^T, \quad i = 1, 2, \cdots, n,$$

且

$$\text{ReLU}(t) = \begin{cases} t, & t \geq 0, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases}$$

# 数据插值

- 这样的做法往往会带来更多未知的非线性，因而可能在更大的函数空间中得到未知函数的一个更好的逼近。将点 $a_i$ 处的取值代入，则得到如下非线性方程组：

$$\begin{aligned} f(a_i) - b_i &= \phi_n(X_n \phi_{n-1}(X_{n-1} \cdots \phi_1(X_1 a_i + y_1) \cdots + y_{n-1}) + y_n) - b_i \\ &= 0, \quad i = 1, 2, \cdots, n. \end{aligned}$$

- 需要求解的是关于 $X_1 \in \mathbb{R}^{q \times p}, X_i \in \mathbb{R}^{q \times q}, y_i \in \mathbb{R}^q, i = 1, 2, \cdots, n$ 的非线性方程组。我们一般考虑替代的最小二乘问题

$$\min_{\{X_i, y_i\}} \sum_{i=1}^m \|f(a_i) - b_i\|^2.$$

# 深度Q学习

- 在强化学习中，为了求解出最优策略及相应的期望奖励，往往需要考虑动作价值函数（**action-value function**）  $Q: \mathcal{S} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ （注意，我们一般称  $V$  为价值函数，即 **value function**），其表示从状态  $s$  出发，采取动作  $a$  可以获得的最大期望奖励。
- 根据最优性，其 **Bellman** 方程为

$$Q(s, a) = r(s, a) + \gamma \sum_{s'} P_a(s, s') \max_{a'} Q(s', a'). \quad (28)$$

对于求解方程(28)，一个常用的迭代算法的格式为：

$$Q_{k+1}(s, a) = r(s, a) + \gamma \sum_{s'} P_a(s, s') \max_{a'} Q_k(s', a'). \quad (29)$$

同样地，每一轮更新都需要对所有状态动作对  $(s, a)$  做一次迭代。

# 深度Q学习

- 然而在实际问题中，我们通常没有模型信息，也就是说，上式涉及的奖励和状态转移概率都是未知的。为此，我们必须与环境进行交互，获取经验来估计这些项的大小。
- 在环境交互获得的经验中，可以得到很多形如 $(s_t, a_t, r_t, s_{t+1})$ 的四元组，它记录了智能体在时刻 $t$ 处于状态 $s_t$ 时选择某个动作 $a_t$ ，转移至状态 $s_{t+1}$ ，同时获得奖励 $r_t = r(s_t, a_t)$ ，算法可以根据这样的小段进行迭代更新：

$$Q_{k+1}(s_t, a_t) = (1 - \alpha)Q_k(s_t, a_t) + \alpha(r_t + \gamma \max_{a'} Q_k(s_{t+1}, a')),$$

其中 $\alpha \in (0, 1)$ 。观察上式右端第二项， $r_t + \gamma \max_{a'} Q_k(s_{t+1}, a')$ 是对(29)式右端期望值的一个采样，为无偏估计。为了计算方便，我们不会等到所有数据生成后再计算平均值，而是利用凸组合的方式持续不断地将新的计算结果按一定权重加到原有数据上，这是强化学习中一种常用的均值计算技巧。

# 深度Q学习

- 由于实际应用比较复杂，故利用 $Q_\theta(s, a)$ 近似动作价值函数，它带有参数 $\theta \in \mathbb{R}^d$ 。当参数 $\theta$ 固定后，它就是一个关于状态 $s$ 和动作 $a$ 的二元函数。 $Q_\theta(s, a)$ 有很多不同的形式，它可以是最简单的线性函数，也可以是复杂的神经网络（深度Q学习），其权重矩阵和偏差项作为这里的参数 $\theta$ 。但 $Q_\theta(s, a)$ 通常不会和真实动作价值函数完全相等。
- 严格来讲，我们希望最小化平方损失，即

$$\min_{\theta} L(\theta) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{E}_{(s,a) \sim \rho(s,a)} [(y_\theta(s, a) - Q_\theta(s, a))^2], \quad (30)$$

其中 $\rho(s, a)$ 是状态动作对 $(s, a)$ 出现的概率分布，

$$y_\theta(s, a) = r(s, a) + \gamma \sum_{s'} P_a(s, s') \max_{a'} Q_\theta(s', a')$$

是近似函数希望逼近的目标。

# 深度Q学习

- 问题(30) 实际上就是在极小化方程(28)的残差. 但在实际应用中, 由于(30) 比较复杂, 深度Q 学习采用迭代方式求解.
- 在迭代的第*i*步近似求解如下优化问题:

$$\min_{\theta} L_i(\theta) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{E}_{(s,a) \sim \rho(s,a)} [(y_i - Q_{\theta}(s,a))^2], \quad (31)$$

其中

$$y_i = r(s,a) + \gamma \sum_{s'} P_a(s,s') \max_{a'} \{Q_{\theta_{i-1}}(s',a')\},$$

参数 $\theta_{i-1}$ 来自上一步迭代的估计. 和问题(30) 不同,  $y_i$ 与待优化的变量 $\theta$ 无关, 因此可以认为问题(31) 是随机版本的最小二乘问题. 具体算法实现时还需进一步对它进行抽样处理.



## 带微分方程约束优化问题

- 当约束中含微分方程时，称相应的优化问题为带微分方程约束的优化问题。其在最优控制、形状优化等各种领域中有着广泛应用。求解瓦斯油催化裂解生成气体和其他副产物的反应系数的问题反应过程可以由如下非线性常微分方程组表示：

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = -(\theta_1 + \theta_3)y_1^2, \\ \dot{y}_2 = \theta_1 y_1^2 - \theta_2 y_2, \end{cases} \quad (32)$$

其中系数 $\theta_i \geq 0$ ,  $i = 1, 2, 3$ , 且 $y_1, y_2$ 的初值条件是已知的。

- 我们考虑的问题是

$$\begin{aligned} \min_{\theta \in \mathbb{R}^3} \quad & \sum_{j=1}^n \|y(\tau_j; \theta) - z_j\|^2, \\ \text{s.t.} \quad & y(\tau; \theta) \text{ 满足方程组(32)} \end{aligned}$$

这里 $z_j$ 是在时刻 $\tau_j$ 的 $y$ 的测量值， $n$ 为测量的时刻数量。

# 提纲

- 1 凸优化
- 2 线性规划
- 3 二次锥规划
- 4 半定规划
- 5 最小二乘问题
- 6 复合优化问题**
- 7 随机优化问题
- 8 矩阵优化
- 9 整数规划
- 10 典型优化算法软件与优化模型语言

# 复合优化问题

- 复合优化问题一般可以表示为如下形式：

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = f(x) + h(x),$$

其中 $f(x)$  是光滑函数（比如数据拟合项）， $h(x)$  可能是非光滑的（比如 $\ell_1$ 范数正则项，约束集合的示性函数，或它们的线性组合）。

- 从已经介绍的各种各样的应用问题不难发现，复合优化问题在实际中有着重要的应用，并且其中的函数 $h(x)$ 一般都是凸的。
- 由于应用问题的驱动，复合优化问题的算法近年来得到了大量的研究，比如次梯度法，近似点梯度法，Nesterov加速算法和交替方向乘子法，等等。

## 复合优化问题：应用举例

考虑带有 $\ell_1$ 范数正则项的优化问题：

$$\min_x f(x) + \mu \|x\|_1, \quad (33)$$

这里 $\mu > 0$ 为给定的参数。这个问题广泛存在于各种各样的应用中：

●  $\ell_1$  范数正则化回归分析问题：

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \mu \|x\|_1 + \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2, \quad (34)$$

其中 $\mu > 0$ 是给定的正则化参数。该问题可以看成是问题(33)的特殊形式,问题(34) 又称为LASSO (least absolute shrinkage and selection operator) .其中 $f(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2, h(x) = \mu \|x\|_1$  .

# 复合优化问题：应用举例

- 矩阵分离问题：

$$\begin{aligned} \min_{X, S \in \mathbb{R}^{m \times n}} \quad & \mu \|S\|_1 + \|X\|_*, \\ \text{s.t.} \quad & X + S = M \end{aligned}$$

其中  $f(x) = \|X\|_*$ ,  $h(x) = \mu \|S\|_1$ .

- 字典学习问题：

$$\begin{aligned} \min_{X, D \in \mathbb{R}^{m \times n}} \quad & \lambda \|X\|_1 + \frac{1}{2n} \|DX - A\|_F^2, \\ \text{s.t.} \quad & \|D\|_F \leq 1 \end{aligned}$$

其中  $f(D, X) = \frac{1}{2n} \|DX - A\|_F^2$ .

# 复合优化问题：图像去噪

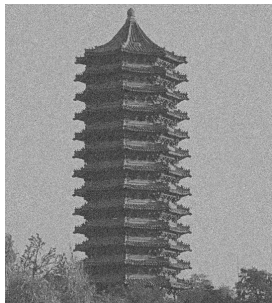
- 图像去噪问题是指从一个带噪声的图像中恢复出不带噪声的原文。记带噪声的图像为 $y$ ，噪声为 $\varepsilon$ ，那么

$$y = x + \varepsilon,$$

其中 $x$ 为要恢复的真实图像。



(a) 原始图像 $u$



(b) 添加噪声后的图像



(c) 恢复后的图像

Figure: 图像去噪的例子

# 复合优化问题：图像去噪

- 由全变差模型，去噪问题可表示为

$$\min_{x \in \mathbb{R}^{n \times n}} \|x - y\|_F^2 + \lambda \|x\|_{TV}.$$

这里，离散的线性算子为单位矩阵。

- 也可以利用小波框架。小波变换可以很好地保护信号尖峰和突变信号，并且噪声对应的小波系数往往很小。因此，去噪问题的小波分解模型可以写为

$$\min_x \|\lambda \odot (Wx)\|_1 + \frac{1}{2} \|x - y\|_F^2,$$

其中  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)^T$  是给定的。

## 复合优化问题：盲反卷积

盲反卷积是图像处理中的一个基本问题，其目的是从一个模糊的图像恢复出原来清晰的图像。

- 为了简化问题，假设模糊是线性的以及空间不变的。线性且空间不变的模糊可以表示成一个卷积。令 $x$ 为原始的清晰图像， $a$ 为未知的卷积核对应的矩阵， $y$ 为观测到的模糊图像以及 $\varepsilon$ 为观测噪声。盲反卷积问题可以表示成

$$y = a * x + \varepsilon,$$

其中 $*$ 为卷积算子。假设噪声为高斯噪声，则转化为求解优化问题

$$\min_{a, x} \|y - a * x\|_2^2.$$

- 再假设原始图像信号在小波变换下是稀疏的，进一步得到如下复合优化问题：

$$\min_{a, x} \|y - a * x\|_2^2 + \|\lambda \odot (Wx)\|_1,$$

其中 $W$ 是小波框架， $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)^T$ 用来控制稀疏度。



# 提纲

- 1 凸优化
- 2 线性规划
- 3 二次锥规划
- 4 半定规划
- 5 最小二乘问题
- 6 复合优化问题
- 7 随机优化问题
- 8 矩阵优化
- 9 整数规划
- 10 典型优化算法软件与优化模型语言

# 随机优化问题

- 随机优化问题可以表示成以下形式：

$$\min_{x \in \mathcal{X}} \mathbb{E}_{\xi}[F(x, \xi)] + h(x),$$

其中  $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$  表示决策变量  $x$  的可行域， $\xi$  是一个随机变量。对于每个固定的  $\xi$ ， $F(x, \xi)$  表示样本  $\xi$  上的损失或者奖励。正则项  $h(x)$  用来保证解的某种性质。

- 变量  $\xi$  的数学期望  $\mathbb{E}_{\xi}[F(x, \xi)]$  一般是不可计算的。为了得到目标函数值的一个比较好的估计，在实际问题中往往利用  $\xi$  的经验分布来代替其真实分布。具体地，假设有  $N$  个样本  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ ，令  $f_i(x) = F(x, \xi_i)$ ，得到优化问题

$$\min_{x \in \mathcal{X}} f(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i(x) + h(x), \quad (35)$$

并称其为经验风险极小化问题或者采样平均极小化问题。

- 该问题通常是难以求解的，一方面是因为样本数  $N$  比较多，另一方面是因为优化问题的可行域所在空间维数  $n$  比较大。

# 随机主成分分析

- 在主成分分析中，如果样本点 $\xi$ 服从某个零均值分布 $\mathcal{D}$ ，那么找方差最大的 $d$ 维子空间的优化问题可以写成

$$\max_{X \in \mathbb{R}^{p \times d}} \text{tr} X^T \mathbb{E}_{\xi \sim \mathcal{D}} [\xi \xi^T] X \quad \text{s.t.} \quad X^T X = I, \quad (36)$$

其中 $\mathbb{E}_{\xi \sim \mathcal{D}} [\xi \xi^T]$ 为 $\xi$ 的协方差矩阵.

- 在实际中，分布 $\mathcal{D}$ 是未知的，已知的只是关于分布 $\mathcal{D}$ 的采样. 比如在线主成分分析中，样本 $\xi_t$ 是随着时间流逝依次获得的. 这些已有的样本可以看作训练集.
- 随机主成分分析关心的问题是在求得问题(36)的高逼近解过程中需要的样本数量以及所消耗的时间. 受制于计算机内存的限制，我们还需要考虑在有限内存情况下的逼近解的计算与分析.

# 分布式鲁棒优化

深度学习是机器学习的一个分支，通过利用神经网络来对数据进行表征学习。深度学习的目的是从已有的未知分布的数据中学出一个好的预测器，其对应优化问题

$$\min_h \mathbb{E}_z[F(h, z)],$$

其中预测器 $h$ 是优化变量，并对应于神经网络的参数。

- 因为数据 $z$ 的真实分布的未知性，我们只有有限的样本点 $z_1, z_2, \dots, z_n$ 。在实际中的一种做法是将这些样本点对应的离散经验分布作为 $z$ 的真实分布，对应的目标函数写成相应的有限和的形式，这种方式往往保证了在已有样本点上的高预测准确率。
- 但当我们拿到一个新的样本点时，该预测器的准确率可能会下降很多，甚至给出不合理的预测结果。即预测器的泛化能力较差。

# 分布式鲁棒优化

- 为了提高预测器的泛化能力，另外一种常用的方法是考虑分布式鲁棒优化问题

$$\min_h \max_{\hat{z} \in \Gamma} \mathbb{E}_{\hat{z}}[F(h, \hat{z})],$$

这里集合 $\Gamma$ 中的随机变量的分布与真实数据的分布在一定意义下非常接近.

- 具体地，在选取 $\Gamma$ 时，我们需要考虑其对应的实际意义、可解性和数值表现. 给定数据的经验分布，一种方式是通过分布之间的熵来定义分布间的距离，从而定义 $\Gamma$ 为与经验分布的距离小于给定数的分布的集合. 目前常用的另外一种方式是利用分布间的Wasserstein距离，这种距离的好处是其可以改变原来经验分布的支撑集.

# 提纲

- 1 凸优化
- 2 线性规划
- 3 二次锥规划
- 4 半定规划
- 5 最小二乘问题
- 6 复合优化问题
- 7 随机优化问题
- 8 矩阵优化**
- 9 整数规划
- 10 典型优化算法软件与优化模型语言

# 矩阵优化的基本形式

矩阵优化问题具有如下形式：

$$\min_{X \in \mathcal{X}} \psi(X),$$

其中  $\mathcal{X}$  为特定的矩阵空间， $\psi(X) : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$  为给定的函数，可能是非光滑的。对于矩阵优化问题，如果决策变量为一个  $n \times n$  矩阵，那么我們可能需要确定  $n^2$  个元素。因此，决策变量的维数过大往往是矩阵优化问题难以快速求解的一个重要原因。

- 矩阵优化是在近几十年发展起来的一类变量含有矩阵的优化问题。它广泛地出现在组合数学、材料科学、机器学习和统计学等各种各样的应用当中。
- 和向量相比，矩阵有许多新的性质：例如秩、特征值等。所以矩阵优化问题的求解通常要困难一些。

# 矩阵优化问题

- 半定规划问题(21): 半定规划是一类特殊的矩阵优化问题, 它的目标函数和约束均为线性函数, 自变量 $X$ 取值于半正定矩阵空间中.
- 低秩矩阵恢复问题:

$$\min_{X \in \mathbb{R}^{m \times n}} \mu \|X\|_* + \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in \Omega} (X_{ij} - M_{ij})^2.$$

考虑函数 $h(X) = \|X\|_*$ , 其次微分为

$$\partial h(X) = \{UV^T + W \mid \|W\|_2 \leq 1, U^T W = 0, W V = 0\},$$

其中 $X = U\Sigma V^T$ 为 $X$ 的约化奇异值分解. 对于函数

$$f(X) = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in \Omega} (X_{ij} - M_{ij})^2,$$

令矩阵 $P \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 为

$$P_{ij} = \begin{cases} 1, & (i,j) \in \Omega, \\ 0, & \text{其他}, \end{cases}$$



# 矩阵优化问题

- 主成分分析问题：

$$\min_{X \in \mathbb{R}^{p \times d}} \psi(X) = -\text{tr} X^T A A^T X, \quad \text{s.t.} \quad X^T X = I_d.$$

通过简单计算，我们有

$$\nabla \psi(X) = -2A A^T X.$$

- 矩阵分离问题：

$$\begin{aligned} \min_{X, S \in \mathbb{R}^{m \times n}} \quad & \psi(X, S) = \|X\|_* + \lambda \|S\|_1 \\ \text{s.t.} \quad & X + S = M. \end{aligned}$$

在这里自变量 $X$ 与 $S$ 均为矩阵， $\psi(X, S)$ 关于 $X$ 和 $S$ 均为不可微函数。

# 矩阵优化问题

- 字典学习问题：

$$\begin{aligned} \min_{D, X} \quad & \frac{1}{2n} \|DX - A\|_F^2 + \lambda \|X\|_1, \\ \text{s.t.} \quad & \|D\|_F \leq 1. \end{aligned}$$

令  $f(X, D) = \frac{1}{2n} \|DX - A\|_F^2$ ，我们有

$$\begin{aligned} \nabla_X f &= \frac{1}{n} D^T (DX - A), \\ \nabla_D f &= \frac{1}{n} (DX - A) X^T. \end{aligned}$$

在这里需要注意  $f(X, D)$  关于两个变量分别求梯度的形式的区别。

## 应用举例：非负矩阵分解

假设 $a$ 为 $d$ 维空间中的非负随机向量，它的 $n$ 个观测值为 $\{a_i\}_{i=1}^n$ 。并记矩阵 $A = [a_1, a_2, \dots, a_n] \in \mathbb{R}^{d \times n}$ ，非负矩阵分解问题是指将高维矩阵 $A$ 分解成非负 $d \times p$ 基矩阵 $X = [x_1, x_2, \dots, x_p]$ 和非负 $p \times n$ 系数矩阵 $Y = [y_1, y_2, \dots, y_n]$ 的乘积，即

$$A = XY.$$

- 从上面的表达式可以看出， $y_j$ 为观测点 $a_j$ 在基矩阵 $X$ 上的权重系数。也就是说，非负矩阵分解把数据分成基向量的线性组合。
- 通常选取 $p \ll d$ ，那么得到的基矩阵 $X$ 的列张成了原数据空间的一个子空间。这本质上是将高维空间中的数据在一个低维空间中表示。当数据点的内蕴结构完全被基矩阵 $X$ 包含时，我们就得到了一个很好的低维表示。

## 应用举例：非负矩阵分解

- 一般情况下，由于观测含有噪声，原始数据矩阵 $A$ 和分解 $XY$ 不会完全吻合。在这种情况下我们应当寻找误差最小的解。利用矩阵的 $F$ 范数可以定义相似性度量

$$\|A - XY\|_F^2,$$

我们考虑如下优化问题

$$\min_{X \in \mathbb{R}^{d \times p}, Y \in \mathbb{R}^{p \times n}} \|A - XY\|_F^2, \quad \text{s.t.} \quad X \geq 0, Y \geq 0, \quad (37)$$

其中“ $\geq 0$ ”表示矩阵的每个元素是非负的。

- 从低维空间逼近的角度来看，非负矩阵分解模型和主成分分析模型类似。但在实际问题中，非负矩阵分解模型会得到比主成分分析模型更有实际意义的解。
- 比如，给定很多幅人脸图片（都可以用元素值为 $0 \sim 255$ 的矩阵来表示其灰度图），我们想要提取脸部的特征。利用主成分分析得到的主成分可能包含负数像素值，这是不合理的。但是如果使用非负矩阵分解，则可以有效避免这类情形的发生。

## 应用举例：非负矩阵分解

- 我们称问题(37)为基本的非负矩阵分解模型。根据具体应用的不同，有时还考虑带正则项的非负矩阵分解模型

$$\begin{aligned} \min_{X \in \mathbb{R}^{d \times p}, Y \in \mathbb{R}^{p \times n}} \quad & \|A - XY\|_F^2 + \alpha_1 r_1(X) + \beta r_2(Y), \\ \text{s.t.} \quad & X \geq 0, \quad Y \geq 0, \end{aligned} \tag{38}$$

- 其中 $r_1(X)$ 和 $r_2(Y)$ 是正则项， $\alpha, \beta > 0$ 是用来权衡拟合项和正则项的正则化参数。比如，如果 $Y$ 的列是稀疏的，那么每一个观测值都可以用少数几个基向量来表示。相应地，我们可以惩罚 $Y$ 的每一列的 $\ell_1$ 范数。为了保证基向量的线性无关性，往往还要求 $X$ 的列之间是相互正交的。
- 如果数据矩阵 $A$ 分布在一个低维的非线性流形上，则考虑流形或者图上的非负矩阵分解模型。

## 相关系数矩阵估计

- 相关系数矩阵是对角元全为1的半正定矩阵，其第 $(i,j)$ 元素表示随机变量 $x_i$ 和 $x_j$ 之间的相关系数。
- 给定对称矩阵 $C \in \mathcal{S}^n$ 和非负对称权重矩阵 $H \in \mathcal{S}^n$ ，低秩相关系数矩阵估计问题是从给定的矩阵 $C$ 出发，求解一个秩小于等于 $p$ 的相关系数矩阵 $X$ ，使得在结合了权重矩阵的某种度量下最小化：

$$\begin{aligned} \min_{X \succeq 0} \quad & \frac{1}{2} \|H \odot (X - C)\|_F^2, \\ \text{s.t.} \quad & X_{ii} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ & \text{rank}(X) \leq p. \end{aligned} \tag{39}$$

- 将 $X$ 上的秩约束 $\text{rank}(X) \leq p$ 表示为 $X = V^T V$ ，其中 $V = [V_1, V_2, \dots, V_n] \in \mathbb{R}^{p \times n}$ ，问题(39)可以转化为多球约束的四次多项式优化问题

$$\begin{aligned} \min_{V \in \mathbb{R}^{p \times n}} \quad & \frac{1}{2} \|H \odot (V^T V - C)\|_F^2, \\ \text{s.t.} \quad & \|V_i\|_2 = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \tag{40}$$

# 电子结构计算

分子、纳米级材料的性质在很大程度上是通过其原子中电子之间的相互作用来确定的. 这些相互作用可以通过电子密度定量表征.

- 令电子的个数是 $n_e$ , 位置是 $r_i \in \mathbb{R}^3, i = 1, 2, \dots, n_e$ , 原子核的个数是 $n_u$ , 位置是 $\hat{r}_j \in \mathbb{R}^3, j = 1, 2, \dots, n_u$ , 令 $z_j$ 是第 $j$ 个原子核的电荷,  $\Delta_{r_i}$ 为第 $i$ 个电子对应的拉普拉斯算子,  $\mathcal{I}$ 为恒等算子, 则多电子哈密顿算子可以表示为

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_e} \Delta_{r_i} - \left( \sum_{j=1}^{n_u} \sum_{i=1}^{n_e} \frac{z_j}{\|r_i - \hat{r}_j\|} - \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq n_e} \frac{1}{\|r_i - r_j\|} \right) \mathcal{I}.$$

- 多原子系统的电子密度可以由多体薛定谔方程得到:

$$\mathcal{H}\Psi(r_1, r_2, \dots, r_{n_e}) = \lambda\Psi(r_1, r_2, \dots, r_{n_e}), \quad (41)$$

其中 $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_{n_e})$ 是多体波函数.

- 对于 $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2 \times \dots \times \Omega_{n_e}$ 和 $\Omega_i \subseteq \mathbb{R}^3, i \in 1, 2, \dots, n_e$ , 它满足

$$\int_{\Omega} \bar{\Psi}^T \Psi d\Omega = 1. \quad (42)$$

# 电子结构计算

- 可以看出问题(41) 是一个特征值问题，只能对于规模很小的系统才能直接求解。假设 $r_i$ 在 $m \times m \times m$ 网格上离散，则离散后 $\mathcal{H}$  对应的矩阵的维数是 $n = m^{3n_e}$ 。对于 $m = 32$ 和 $n_e = 5$ 的系统， $n$ 大于 $3.5 \times 10^{22}$ 。因此这是一个维数灾难问题，无法直接处理。
- Kohn-Sham (KS) 方法利用单电子波函数来近似能量函数，把整个系统简化成没有相互作用的电子在有效势场中运动的问题，进而极大减小了问题的维数。
- 通过合适的离散化，KS 能量泛函可以表示成

$$E_{\text{KS}}(X) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \text{tr} \bar{X}^T L X + \text{tr} \bar{X}^T V_{\text{ion}} X + \frac{1}{2} \rho^T L^\dagger \rho + \rho^T \varepsilon_{\text{xc}}(\rho),$$

其中 $X \in \mathbb{C}^{n \times n_e}$ 是离散的波函数， $L$ 是拉普拉斯算子的有限维表示， $L^\dagger$ 为其广义逆， $\rho = \text{diag}(X \bar{X}^T)$ 为电荷密度， $V_{\text{ion}}$ 是离子势， $\varepsilon_{\text{xc}}$ 表征交换相关能量。



# 电子结构计算

- 由于归一化条件(42)，我们要求离散波函数正交，即 $\bar{X}^T X = I_{n_e}$ 。因此离散形式下的KS能量极小化问题可以表示成

$$\min_{X \in \mathbb{C}^{n \times n_e}} E_{\text{KS}}(X), \quad \text{s.t.} \quad \bar{X}^T X = I_{n_e}.$$

这是一个正交约束优化问题。

- 所有满足正交约束的矩阵称为**Stiefel**流形，所以该问题是流形约束优化的特例。KS极小化问题对应的最优性条件是一个非线性特征值问题，称为KS方程。基于KS方程，可以将问题化成一个非线性最小二乘问题。
- 电子结构计算还有很多其他变形，如Hartree-Fock近似也是正交约束问题，而简化密度矩阵优化问题则可以是半定规划问题。

# 提纲

- 1 凸优化
- 2 线性规划
- 3 二次锥规划
- 4 半定规划
- 5 最小二乘问题
- 6 复合优化问题
- 7 随机优化问题
- 8 矩阵优化
- 9 整数规划**
- 10 典型优化算法软件与优化模型语言

# 整数规划

不同于线性规划，整数规划要求优化变量必须取整数值，而不能是分数值。一般形式如下：

$$\begin{array}{ll}\min & c^T x \\ \text{s.t.} & Ax \leq b, \\ & x_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ & x_i \in \mathbb{Z}, \quad i = 1, 2, \dots, n,\end{array}$$

- 其中  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $c \in \mathbb{R}^n$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$  是给定的矩阵和向量， $\mathbb{Z}$  是整数集合。
- 如果只要求部分  $x_i$  是整数，该问题被称为混合整数规划问题。整数规划问题广泛存在于资本预算（决策变量的取值于  $\{0, 1\}$ ）、仓库位置选取、调度问题等不同的应用中。

# 资本预算

- 在经典的资本预算问题中，我们需要对一些潜在的投资进行选择。选择合适的工厂位置或者对现有资本进行分配，放弃一些没有意义的项目，也就是决策变量 $x_j = 0$ 或者1，意味着第 $j$ 个投资被拒绝或者接受。
- 假设 $c_j$ 为投资 $j$ 项目的回报， $a_{ij}$ 为将资源 $i$ 用在项目 $j$ 上的数量。那么资本预算问题可以表示为

$$\begin{aligned} \max \quad & \sum_{j=1}^n c_j x_j \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m \\ & x_j = 0 \text{ 或者 } 1, \end{aligned}$$

即在有限的资源 $b_i$ 下找到一个投资项目使得回报在所有投资中最大化。

# 仓库位置选取

- 仓库位置选取问题是指，管理者根据消费者的需求以及仓库到消费者之间的运输成本，来确定所要修建的仓库的位置，以及如何以最低成本将物资从仓库运输到消费者。

- 令：

$$y_i = \begin{cases} 1, & \text{如果仓库 } i \text{ 被修建,} \\ 0, & \text{如果仓库 } i \text{ 未被修建,} \end{cases}$$

以及  $x_{ij}$  为从仓库  $i$  运输到消费者  $j$  的物资数量。

- 相关的成本如下：

$f_i$  = 仓库  $i$  的固定运营成本, 比如租赁费,

$c_{ij}$  = 从仓库  $i$  运输物资到消费者  $j$  的运输成本。

该问题有三个条件：(1) 消费者的需求  $d_j$  必须被满足；(2) 只有已修建的仓库才能提供物资运输，如果仓库  $i$  未被修建，那么  $x_{ij} = 0$ ；(3) 每个仓库  $i$  的容量是有限的，即  $\sum_{j=1}^n x_{ij} \leq u_i$ ，其中  $u_i > 0$  为仓库的容量。

## 仓库位置选取

由上述分析可知,仓库位置选取问题可以写为

$$\begin{aligned} \min_{x,y} \quad & \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n c_{ij} x_{ij} + \sum_{i=1}^m f_i y_i, \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^m x_{ij} = d_j, \quad j = 1, 2, \dots, n, \\ & \sum_{j=1}^n x_{ij} - y_i u_i \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \\ & x_{ij} \geq 0, \quad i = 1, \dots, m; \quad j = 1, 2, \dots, n, \\ & y_i = 0 \text{ 或者 } 1, \quad i = 1, \dots, m, \end{aligned}$$

- 第一行约束表示运输的物资数量需要满足消费者的需求.
- 第二行约束表示如果仓库*i*未被修建 ( $y_i = 0$ ), 那么所能运输的物资数量为0; 如果仓库*i*已被修建 ( $y_i = 1$ ), 则从仓库*i*运输的物资总量不能高于该仓库的容量上限.

# 旅行商问题

- 旅行推销员问题 (Travelling salesman problem, TSP) 是这样一个问题：给定一系列城市和每对城市之间的距离，求解访问每一座城市一次并回到起始城市的最短回路。它是组合优化中的一个NP 难问题，在运筹学和理论计算机科学中非常重要。
- 该问题可表述如下：  
一个旅行商想要从家里开始，以最低代价走遍其他 $(n - 1)$  个城市，最后返回家中。他必须走访每个城市且只走访一次。记从城市 $i$  到城市 $j$  的旅行成本为 $c_{ij}$ ,

$$x_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{如果他从城市 } i \text{ 到城市 } j, \\ 0, & \text{如果他未从城市 } i \text{ 到城市 } j. \end{cases}$$

并令 $u_i, i = 2, 3, \dots, n$ 为辅助变量

# 旅行商问题

旅行商问题可以写成如下整数规划的形式：

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n c_{ij} x_{ij}, \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1, i \neq j}^n x_{ij} = 1, \quad j = 1, 2, \dots, n, \\ & \sum_{j=1, j \neq i}^n x_{ij} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ & x_{ij} \in \{0, 1\}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n, \\ & u_i - u_j + n x_{ij} \leq n - 1, \quad 2 \leq i \neq j \leq n, \\ & u_i \in \{1, 2, \dots, n\}, \quad 2 \leq i \leq n, \end{aligned}$$

其中，第一约束和第二约束要求每个城市在路径中须且只能出现一次，且路径中不能出现自环。最后两行约束保证了此“路径”只有一个连通分支，而不是由多条不相交的路径合成的。



# 旅行商问题

简要证明这样添加约束能够保证所走的路径是一个覆盖所有城市的闭环.

- 假设满足前三行的约束的“路径”有两个以上连通分支, 则必存在一个不经过城市1的连通分支, 记其长度为 $k$ . 对约束中倒数第二行不等式按照该连通分支求和 (注意到在此连通分支上有 $x_{ij} = 1$ ), 则有

$$nk \leq (n-1)k,$$

矛盾.

- 另一方面, 我们也要保证每个覆盖所有城市的回路的可行性. 对任意一条可行的回路, 不妨将城市1作为起点和终点. 如果城市 $i$ 是第 $t$ 个到达的城市, 则令 $u_i = t, i = 2, 3, \dots, n$ . 因为 $1 \leq u_i \leq n$ , 故有 $u_i - u_j \leq n - 1$ . 因此, 当 $x_{ij} = 0$ 时, 倒数第二个不等式是成立的. 对于 $x_{ij} = 1$ , 我们有

$$u_i - u_j + nx_{ij} = t - (t+1) + n = n - 1,$$

也满足约束.

# 提纲

- 1 凸优化
- 2 线性规划
- 3 二次锥规划
- 4 半定规划
- 5 最小二乘问题
- 6 复合优化问题
- 7 随机优化问题
- 8 矩阵优化
- 9 整数规划
- 10 典型优化算法软件与优化模型语言

# 典型优化算法软件

前面介绍了各种各样的优化问题。对于每一类优化问题，我们都有相应的求解算法以及一些流行的算法软件包。

- **SDPT3**: 这个开源软件包的基本代码是用**MATLAB** 来写的，但是关键的子程序是用**FORTRAN** 和**C** 语言通过**MEX** 文件来完成的。它可以求解锥规划问题，其中锥可以是半定矩阵锥、二次锥和非负象限中的一个或者多个的乘积。这个软件主要实现的算法是一种原始-对偶内点法。
- **MOSEK**: 这个商业软件包可以求解线性规划、二次锥规划、半定规划、二次规划等凸优化问题，以及混合整数线性规划和混合整数二次规划等。它的重点是求解大规模稀疏问题，尤其在求解线性规划、二次锥规划和半定规划的内点法设计上做得非常有效。除了内点法之外，**MOSEK** 还实现了线性规划问题的单纯形算法，特殊网络结构问题的网络单纯形算法以及针对混合整数规划问题的算法。它提供**C**, **C#**, **Java**, **Python**, **MATLAB** 和**R** 等接口。

# 典型优化算法软件

- **CPLEX**: 这个商业软件可以求解整数规划问题，非常大规模的线性规划问题（使用单纯形方法或者内点法），凸和非凸二次规划问题，二次锥规划问题。它提供C++, C#, Java, Microsoft Excel 和MATLAB 接口，并且提供一个独立的交互式优化器可执行文件，用于调试和其他目的。
- **Gurobi**: 这个商业软件可以求解线性规划（单纯形法和并行的内点法），二次规划（采用单纯形法和内点法），二次约束规划，混合整数线性规划，混合整数二次规划，混合整数二次约束规划。它提供C, C++, Java, .NET, Python, MATLAB 和R 等接口。

# 典型优化算法软件

- IPOPT: 这个开源软件可以求解大规模非线性规划问题，主要实现了原始-对偶内点法，并使用滤波（filter）方法代替线搜索。IPOPT 主要使用C++ 语言编写，并提供C, C++, FORTRAN, Java, MATLAB 和R 等接口。
- Knitro: 用来求解大规模非线性优化问题的商业软件。这个软件提供了四种不同的优化方法，两种内点型方法和两种积极集（active set）方法，可以用来求解一般非凸非线性规划问题，非线性方程组，线性规划，二次（线性）约束二次规划问题，线性（非线性）最小二乘问题，混合整数规划问题以及无导数优化问题，等等。Knitro 支持的编程语言有C, FORTRAN, C++, C#, Java, MATLAB, R, Python 等，以及模型语言AMPL, AIMMS, GAMS 和MPL 等。因其具有大量的用户友善的选项以及自动调试器，全局优化的并行多重启动策略，导数逼近和检查以及内部预分解器，在实际中被广泛采用。

# 优化模型语言

- 模型语言的发展开始于19世纪70年代后期，其主要动因是计算机的出现。在优化模型语言中，优化模型可以写成和数学表达式很类似的方式，以此给用户带来更便捷的服务。
- 模型的表达式形式是与求解器无关的，不同的求解器需要用优化模型语言将给定的模型和数据转为其求解的标准形式，然后再对其进行求解。这类工具有三个优点：一是将容易出错的转化步骤交给计算机完成，降低错误率；二是在模型和算法之间建立了一个清晰的界限；三是对于困难的问题，可以尝试不用求解器，得到更好的结果。

- CVX是以MATLAB 为基础的优化模型语言，用来求解凸优化问题。它允许将优化问题的目标函数以及约束用MATLAB 语法写出。
- CVX 采用了一种快速构造和识别凸性的准则，服从这个准则的凸问题都可以很快地被识别出来。之后CVX 根据用户的选择调用已有软件包来求解变形后的凸优化问题，这些软件包括免费软件SDPT3 和SeDuMi 以及商业软件Gurobi 和MOSEK 等。除了一些典型问题外，CVX 还可以识别一些更复杂的凸优化问题，例如带 $\ell_1$ 范数的优化问题。目前CVX 还有Julia 语言版本和Python 语言版本CVXPY。
- 除CVX 外，还有很多发展成熟的优化模型语言可供我们使用，如AMPL，YALMIP 等。

考虑如下优化问题：

$$\begin{aligned}
 & \min \quad \|Ax - b\|_2, \\
 & \text{s.t.} \quad Cx = d, \\
 & \quad \quad \|x\|_\infty \leq e,
 \end{aligned} \tag{43}$$

它可以写成：

```

1 m = 20; n = 10; p = 4;
2 A = randn(m,n); b = randn(m,1);
3 C = randn(p,n); d = randn(p,1); e = rand;
4 cvx_begin
5     variable x(n)
6     minimize( norm( A * x - b, 2 ) )
7     subject to
8         C * x == d
9         norm( x, Inf ) <= e
10 cvx_end

```



- 代码中的前三行是关于 $A, b, C, d, e$ 的构造. 在调用CVX求解的时候, 对应的代码需要以`cvx_begin`开始, 并且以`cvx_end`结尾. 在这两行语句之间, 我们需要定义
- 要求解的优化问题. 在上面的例子中, `variable x(n)`表示决策变量 $x$ 为 $n$ 维空间中的向量. 目标函数 $\|Ax - b\|_2$ 则用`norm( A * x - b, 2 )`来表示, `minimize`表示求解目标函数的极小值. 最后以`subject to`开始描述问题的约束, `C * x == d`和`norm( x, Inf ) <= e`分别表示约束 $Cx = d$ 和 $\|x\|_\infty \leq e$ .
- 执行上述代码, CVX会选取默认的凸优化问题算法来返回上面问题的解.

- AMPL (a mathematical programming language) 是用来描述高复杂度的大规模优化问题的模型语言。
- 几十个求解器支持AMPL，包含开源软件和商业软件，例如CBC, CPLEX, FortMP, Gurobi, MINOS, IPOPT, SNOPT, Knitro 和LGO等，因此可以支持一大类问题的求解。它的一个优点是其语法与数学表达式非常类似，因此可对优化问题进行非常简洁并且可读的定义。
- 对于优化模型语言，常用的还有YALMIP。对于半定规划问题，最新的一些软件包有SDPNAL, SDPNAL+ 和SSNSDP。对于流形优化，软件包有OptM, Manopt 和ARNT。

考虑优化问题：

$$\min_{x \in \mathbb{R}^2} f_1^2(x) + f_2^2(x), \quad (44)$$

其中  $f_1(x) = 10(x_2 - x_1^2)$ ,  $f_2(x) = 1 - x_1$ . 利用如下代码描述问题，其求解过程可以由支持**AMPL**和非线性无约束优化的求解器自动完成.

```
1 var x{1..2};
2 var f1 = 10*(x[2] - x[1]^ 2);
3 var f2 = 1 - x[1];
4
5 minimize norm:
6 f1^ 2 + f2^ 2;
7
8 data;
9 var x:=
10 1 -1.2
11 2 1;
```

这里，`var x{1..2}` 表示决策变量是  $\mathbb{R}^2$  中的向量，第2，3行用来定义函数  $f_1$  和  $f_2$ ，第5，6行定义了优化问题(44)，以及第8—11行表示选取的初始点为  $(-1.2, 1)^T$ .