AnyProg C++ 数学优化包

pangpang@hi-nginx.com

2019年12月22日

目录

1	起源		5
2	功能		7
3	技巧		9
	3.1	线性优化	9
	3.2	二次优化	10
	3.3	非线性优化	11
	3.4	整数优化	13
	3.5	TSP 问题	15
	3.6	Assignment 问题	15
	3.7	数据拟合问题	15
		3.7.1 多项式拟合	15
		3.7.2 类多项式拟合	16
		3.7.3 非多项式拟合	18
	3.8	方程组求解	
4	展望		21

4 目录

起源

应该有一个 C++ 版的 LINGO。

它必须免费、高效而且易用。

它必须以 C++ 的方式解决 LINGO 需要面对的问题。

它的名字是: AnyProg¹。

 $^{^1\}mathrm{Any}$ Programming $_\circ$

6 CHAPTER 1. 起源

功能

AnyProg 可用于求解以下模型定义的所有问题:

$$\min_{x \in \mathbf{R}^{n}} \quad f(x)
\text{s.t.} \quad g_{i}(x) \leq 0, \qquad i = 0, \dots, m_{s} - 1
\qquad h_{j}(x) = 0, \qquad j = 0, \dots, m_{t} - 1
\qquad x_{k} \in [L_{k}, U_{k}], \qquad k = 0, \dots, n - 1$$
(2.1)

其中,f 是目标函数, g_i 和 h_j 分别是不等式约束函数 $(m_s$ 个)和等式约束函数 $(m_t$ 个),x 是一个 n 维实变量,其分量 x_k 位于闭区间 $[L_k,U_k]$ 。模型 (2.1) 不仅适合于连续优化问题,也适合于离散优化问题,还适合于混合优化问题。对 AnyProg 来说,更重要的概念是解的全局性,而不是变量的连续性。同时,目标函数和约束函数是否线性并不重要,AnyProg 并不区别看待它们。

AnyProg 能处理的问题的类型十分广泛: $\mathbf{LP}^1 \setminus \mathbf{QP}^2 \setminus \mathbf{NLP}^3 \setminus \mathbf{MILP}^4 \setminus \mathbf{MIQP}^5 \setminus \mathbf{MINLP}^6$ 。此外,它也能进行数据的非线性最小二乘拟合,以及非线性方程组的求解。

¹线性优化

²二次优化

³非线性优化

⁴混合整数线性优化

⁵混合整数二次优化

⁶混合整数非线性优化

8 CHAPTER 2. 功能

技巧

3.1 线性优化

线性优化的模型定义最好采用矩阵方式,类似于 MATLAB。如例 (3.1):

$$\min_{x \in \mathbf{R}^2} \quad f(x) = 8x_0 + x_1$$
s.t. $g_0(x) = x_0 + 2x_1 \ge -14$

$$g_1(x) = -4x_0 - x_1 \le -33$$

$$g_2(x) = 2x_0 + x_0 \le 20$$

$$x_i \ge 0, \quad i = 0, 1$$
(3.1)

对于不等于约束,如果采用的是 ≥ 方式,则两边乘以 -1 使之反转。如此,原问题可用矩阵表示如下:

$$obj = \begin{pmatrix} 8 \\ 1 \end{pmatrix}, A = \begin{pmatrix} -1 & -2 \\ -4 & -1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 14 \\ -33 \\ 20 \end{pmatrix}.$$

在 AnyProg 中, 类 real_block 用来表示矩阵。因此, 例 (3.1) 模型定义如下:

```
opt.set_inequation_condition(A, b);
auto ret = opt.solve();
anyprog::optimization::print(opt.is_ok(), ret, obj);
return 0;
}
```

编译、运行后可知,解是 f(6.5,7)=59。本例不包含等式约束。若有,则可效法 A、b,炮制 Aeq 和 beq,然后使用方法 $set_equation_condition(Aeq,beq)$ 添加等式约束,继而求解。本例中的 range 是范围,表示 $\forall i, x_i \in [0,100]$ 。若变量的不同分量有不同的范围限制,可用容器 std:vector 包装范围类 range_t 列表,并按顺序定义各分量范围。若有较好初值,则可替换范围参数。使用范围参数意味着初值是随机的,有可能不能求解。此时可多次运行程序。随机初值引起解的不确定性问题。解决该问题的最佳方法是用 search 方法取代 solve 方法;前者对应于全局解,后者对应于局部解。使用该方法时,对于局部解较少的模型,务必减少前两个参数 1 的数值。

3.2 二次优化

二次优化的模型定义如下:

$$\min_{x \in \mathbf{R}^n} \quad f(x) = \frac{1}{2} x^T H x + c^T x$$

$$\text{s.t.} \quad A \cdot x \le b$$

$$Aeq \cdot x = beq$$

$$x_k \in [L_k, U_k], \quad k = 0, \dots, n-1$$

$$(3.2)$$

该模型用矩阵形式表示。在求解该类模型时,最好的方式就是顺其自然。比如下例:

$$\min_{x \in \mathbf{R}^2} \quad f(x) = \frac{1}{2} x_0^2 + x_1^2 - x_0 x_1 - 2x_0 - 6x_1$$

$$\text{s.t.} \quad g_0(x) = \quad x_0 + x_1 \qquad \leq 2$$

$$g_1(x) = \quad -x_0 + 2x_1 \qquad \leq 2$$

$$g_2(x) = \quad 2x_0 + x_1 \qquad \leq 3$$

$$x_i \geq 0, \quad i = 0, 1$$

$$(3.3)$$

其矩阵表示如下:

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}, A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}, c = \begin{pmatrix} -2 \\ -6 \end{pmatrix}$$

因此,它的模型定义为:

```
#include <anyprog/anyprog.hpp>
int main(int argc, char** argv)

4
```

¹search 方法的前两个参数的默认值分别是 100 和 30, 这是专门应对变态测试模型的基本配置。对于局部解较少的普通模型,两个数值都可以大幅度降低;一般设置 10 和 3 即可。

3.3. 非线性优化 11

```
size_t dim = 2;
       anyprog::real_block H(dim, dim), c(dim, 1);
       H << 1, -1,
          -1, 2;
       c << -2, -6;
10
       anyprog::optimization::function_t obj = [&](const anyprog::real_block& x) {
11
          anyprog::real_block ret = 0.5 * (x.transpose() * H * x) + c.transpose() * x;
12
          return ret(0, 0);
13
       };
14
       anyprog::real_block A(3, dim), b(3, 1);
16
       A << 1, 1,
17
          -1, 2,
18
          2, 1;
19
       b << 2, 2, 3;
21
       anyprog::optimization::range_t range = { 0, 100 };
22
23
       anyprog::optimization opt(obj, range, dim);
24
       opt.set_inequation_condition(A, b);
       auto ret = opt.solve();
26
       anyprog::optimization::print(opt.is_ok(), ret, obj);
27
       return 0;
   }
29
```

编译、运行, 其解为 f(0.666667, 1.33333) = -8.22222

3.3 非线性优化

非线性优化是最直观地匹配模型 (2.1) 的优化类型。如下例 (3.4):

$$\max_{x \in \mathbf{R}^2} \quad f(x) = \log x_0 + \log x_1$$
s.t. $g_0(x) = x_0 - x_1 \leq 0$

$$h_0(x) = x_0 + 2x_1 = 5$$

$$x_i \geq 0, \quad i = 0, 1$$
(3.4)

这个例子即有不等式约束,也有等式约束。同时,该模型是求最大值而非最小值,可通过目标函数乘以 –1 来转换为标准形式。如此,该模型可定义如下:

```
#include <anyprog/anyprog.hpp>

int main(int argc, char** argv)

{
    size_t dim = 2;
    anyprog::optimization::function_t obj = [](const anyprog::real_block& x) {
        return -log(x(0)) - log(x(1));
    };
}
```

```
std::vector<anyprog::optimization::inequation_condition_function_t> ineq = {
           [&](const anyprog::real_block& x) {
              return x(0) - x(1);
       };
       std::vector<anyprog::optimization::equation_condition_function_t> eq = {
16
           [&](const anyprog::real_block& x) {
17
              return x(0) + 2 * x(1) - 5;
18
          7
       };
21
       anyprog::optimization::range_t range = { 0, 10 };
23
       anyprog::optimization opt(obj, range, dim);
24
       opt.set_inequation_condition(ineq);
       opt.set_equation_condition(eq);
26
       auto ret = opt.solve();
27
       anyprog::optimization::print(opt.is_ok(), ret, obj);
28
       return 0;
29
30
   }
```

编译、运行获得解: f(1.66667, 1.66667) = 1.02165。例子(3.4)或许过于简单了。然而,无论目标函数和约束函数取何种形式,从AnyProg的角度来说,它们并无差异——重要的是描述模型的结构,而非模型的具体构造。

有时,人们希望在求解时使用函数梯度信息。其实,这并非必须。实际上,这常常费力不讨好。 对于无约束的情况,也可以通过 AnyProg 提供两个静态方法 fminbnd 和 fminunc 进行求解。假设需要求

解 Rosenbrock²函数 $f(x) = 100 (x_1 - x_0^2)^2 + (1 - x_0)^2$ 的最小值,变量范围限制为 $\forall i, x_i \in [-10, 10]$ 。那么,求解程序会很简单:

```
#include <anyprog/anyprog.hpp>
   int main(int argc, char** argv)
3
   }
       size t dim = 2;
       anyprog::optimization::function_t obj = [](const anyprog::real_block& x) {
          return 100 * pow(x(1) - pow(x(0), 2), 2) + pow(1 - x(0), 2);
       }:
       anyprog::optimization::range_t range = { -10, 10 };
       bool ok = false;
       auto ret = anyprog::optimization::fminbnd(obj, range, dim, ok, 1e-10);
       anyprog::optimization::print(ok, ret, obj);
14
15
       return 0;
   }
16
```

当然,若有较理想初值,也可使用 fminunc 求解:

#include <anyprog/anyprog.hpp>

 $^{^2}$ 该函数的全局解 $x=(1,1)^T$,对应的函数值是 0。请参考: http://mathworld.wolfram.com/RosenbrockFunction.html。

3.4. 整数优化 13

```
int main(int argc, char** argv)
{
    size_t dim = 2;
    anyprog::optimization::function_t obj = [](const anyprog::real_block& x) {
        return 100 * pow(x(1, 0) - pow(x(0, 0), 2), 2) + pow(1 - x(0, 0), 2);
    };

anyprog::real_block param(dim, 1);
param.fill(0);
bool ok = false;
auto ret = anyprog::optimization::fminunc(obj, param, ok, 1e-10);
anyprog::optimization::print(ok, ret, obj);

return 0;
}
```

3.4 整数优化

整数优化不仅包括纯整数优化: $\forall i, x_i \in \mathbf{Z}$,也包括混合整数优化: $\exists i, x_i \in \mathbf{Z}$ 。所谓整数,既指一般整数的情况: $\exists i, x_i \in \mathbf{Z}$,也指 $0 \mid 1$ 值的情况: $\exists i, x_i \in \{0, 1\}$ 。

整数优化通过两个途径达到: 第一、调用 set_enable_integer_filter 或者 set_enable_binary_filter 方法,第二、调用 set_filter_function 方法。前者适合于纯整数优化,后者则适合混合整数优化。此二途径 对所有符合模型 (2.1) 的优化问题均有效。set_enable_integer_filter 方法保证解的每一分量皆为限制范围内的整数,set_enable_binary_filter 方法则保证解的每一分量不是 0 便是 1。

来看例子 (3.5):

$$\min_{x \in \mathbf{R}^2} \quad f(x) = 0.5x_0^2 + 0.5x_1^2 - 2x_0 - 2x_1$$
s.t. $g_0(x) = -x_0 + x_1 \leq 2$

$$g_1(x) = x_0 + 3x_1 \leq 5$$

$$g_2(x) = x_0^2 + x_1^2 - 2x_1 \leq 1$$

$$x_i \geq 0, \quad i = 0, 1$$

$$x_0 \in \mathbf{Z}$$

$$(3.5)$$

该例子 3 仅要求 x_0 为整数。此时,需要通过 set_enable_integer_filter 方法来进行必要的配置:

```
#include <anyprog/anyprog.hpp>

int main(int argc, char** argv)

{
    size_t dim = 2;
    anyprog::optimization::function_t obj = [&](const anyprog::real_block& x) {
        return 0.5 * x(0) * x(0) + 0.5 * x(1) * x(1) - 2 * x(0) - 2 * x(1);
    };
}
```

³https://inverseproblem.co.nz/OPTI/index.php/Probs/MIQCQP

```
std::vector<anyprog::optimization::inequation_condition_function_t> ineq = {
           [](const anyprog::real_block& x) {
               return -x(0) + x(1) - 2;
           },
           [](const anyprog::real_block& x) {
               return x(0) + 3 * x(1) - 5;
           },
16
17
           [](const anyprog::real_block& x) {
               return x(0) * x(0) + x(1) * x(1) - 2 * x(1) - 1;
18
           }
       };
21
22
       anyprog::optimization::range_t range = { 0, 100 };
23
24
       anyprog::optimization opt(obj, range, dim);
       opt.set_inequation_condition(ineq);
26
       opt.set_filter_function([](anyprog::real_block& x) {
27
           x(0) = round(x(0));
28
       });
29
       auto ret = opt.search(10,3);
       anyprog::optimization::print(opt.is_ok(), ret, obj);
31
32
       return 0;
   }
    其全局解为: f(1, 1.33333) = -3.27778。
         再看例子 (3.6):
                                          \min_{x \in \mathbf{R}^2} \quad f(x) = -x_1 + 2x_0 - \ln \frac{x_0}{2}
                                           s.t. g_0(x) = -x_0 - \ln \frac{x_0}{2} + x_1 \le 0
                                                                                                                         (3.6)
                                                  x_0 \in [0.5, 1.4], x_1 \in \{0, 1\}
    #include <anyprog/anyprog.hpp>
    int main(int argc, char** argv)
       anyprog::optimization::function_t obj = [&](const anyprog::real_block& x) {
```

```
#include <anyprog/anyprog.hpp>

int main(int argc, char** argv)

{
    anyprog::optimization::function_t obj = [&](const anyprog::real_block& x) {
        return -x(1) + 2 * x(0) - log(x(0) / 2.0);

    };

    std::vector<anyprog::optimization::inequation_condition_function_t> ineq = {
        [](const anyprog::real_block& x) {
            return -x(0) - log(x(0) / 2.0) + x(1);
        }

    };

    std::vector<anyprog::optimization::range_t> range = { { 0.5, 1.4 }, { 0, 1 } };

    anyprog::optimization opt(obj, range);
    opt.set_inequation_condition(ineq);
}
```

3.5. TSP 问题 15

其解为: f(1.37482,1) = 2.12447。

set_enable_integer_filter 有一个重载:通过 std::vector<size_t> 容器提供需要整数化的变量分量索引号列表参数,即可完成整数优化配置。此法不仅更胜一筹,而且对 set_enable_binary_filter 方法同样有效。

3.5 TSP 问题

3.6 Assignment 问题

3.7 数据拟合问题

数据拟合按照最小二乘法进行。我把一般拟合问题分为三类模型:多项式拟合,类多项式拟合和非多项式 拟合。

3.7.1 多项式拟合

其数学模型为

$$y = \sum_{i=0}^{m} p_i x^i$$

调用 anyprog::fit::solve 方法即可轻松求解,解为降幂系数形式。比如给定变量数据为 [3,5,7,9,11,13], 待 拟合数据为 [1.85,2.1,2.4,2.5,2.7,2.8],以二次多项式拟合之。那么,

```
#include <anyprog/anyprog.hpp>
    #include <iostream>
    int main(int argc, char** argv)
       anyprog::real_block xdat(6, 1), ydat(6, 1);
       xdat << 3, 5, 7, 9, 11, 13;
       ydat << 1.85, 2.1, 2.4, 2.5, 2.7, 2.8;
       anyprog::fit fit(xdat, 2);
10
       auto ret = fit.solve(ydat), fitting = fit.fitting(ret);
       std::cout << ret << "\n";
       std::cout << "xdat\tydat\tfit\t\n";</pre>
13
       for (size_t i = 0; i < xdat.rows(); ++i) {</pre>
           std::cout << xdat(i) << "\t" << ydat(i) << "\t" << fitting(i) << "\t\n";
15
16
```

```
std::cout <<fit.r_squared(ydat,fitting) <<"\n";
return 0;
}</pre>
```

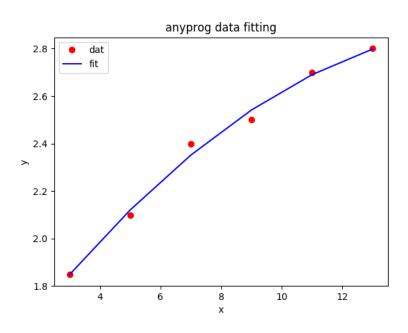


图 3.1: 多项式拟合

其解为: $y = -0.00513393x^2 + 0.177143x + 1.36299$, 决定系数为 0.992962, 待拟合数据和拟合数据比较如上图。

3.7.2 类多项式拟合

其数学模型为

$$y = \sum_{i=0}^{m} p_i f_i(x_0, \cdots, x_n)$$

其中, f_i 的函数形式不限于多项式。比如给定变量数据为 [3.6,7.7,9.3,4.1,8.6,2.8,1.3,7.9,10.0,5.4],待拟合数据为 [16.5,150.6,263.1,24.7,208.5,9.9,2.7,163.9,325.0,54.3],以函数 $y=p_0x^2+p_1\sin(x)+p_2x^3$ 拟合之:

```
#include <anyprog/anyprog.hpp>
#include <fstream>
#include <iostream>

int main(int argc, char** argv)

{
    anyprog::real_block xdat(10, 1), ydat(10, 1);
    xdat << 3.6, 7.7, 9.3, 4.1, 8.6, 2.8, 1.3, 7.9, 10.0, 5.4;
    ydat << 16.5, 150.6, 263.1, 24.7, 208.5, 9.9, 2.7, 163.9, 325.0, 54.3;

std::vector<anyprog::fit::function_t> fun = {
    [] (const anyprog::real_block& x, const anyprog::real_block& p) {
        return pow(x(0, 0), 2);
    }
}
```

3.7. 数据拟合问题 17

```
[](const anyprog::real_block& x, const anyprog::real_block& p) {
14
              return sin(x(0, 0));
           [](const anyprog::real_block& x, const anyprog::real_block& p) {
              return pow(x(0, 0), 3);
19
       };
20
21
       anyprog::real_block param(3, 1);
       param.fill(0);
22
       anyprog::fit fit(xdat, fun, param);
       auto ret = fit.solve(ydat), fitting = fit.fitting(ret);
       std::cout << ret << "\n";
25
       std::cout << "xdat\tydat\tfit\t\n";</pre>
       for (size_t i = 0; i < xdat.rows(); ++i) {</pre>
           std::cout << xdat(i) << "\t" << ydat(i) << "\t" << fitting(i) << "\t";
       std::cout <<fit.r_squared(ydat,fitting) <<"\n";</pre>
30
       return 0;
31
   }
32
```

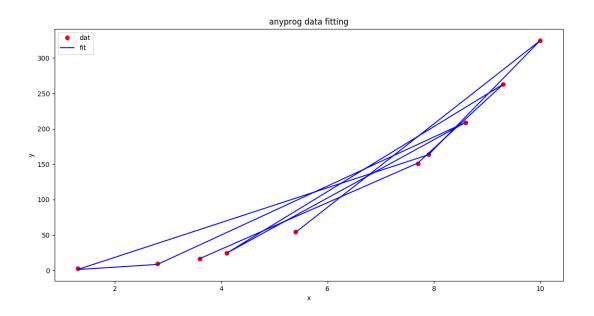


图 3.2: 类多项式拟合

其解为 $y = 0.2269x^2 + 0.338518\sin(x) + 0.302151x^3$,决定系数为 0.999949。待拟合数据和拟合数据比较如上图。

3.7.3 非多项式拟合

其数学模型为

$$y = \sum_{i=0}^{m} p_i f_i(x_0, \cdots, x_n, p_0, \cdots, p_m)$$

其中, f_i 包含参数 $p_j(j=0,\cdots,m)$ 变量。拟合此类模型需要调用 lssolve 或者 lssearch 方法。 比如给定数据为:

```
( 0.683333333, 1.552133333 ),
( 1.066666667, 1.610833333 ),
( 2.166666667, 1.702533333 ),
( 3.3333333333, 1.757483333 ),
( 6.3666666667, 1.825533333 ),
( 12.46666667, 1.890833333 ),
( 43.88333333, 1.99507451 ),
( 58.533333333, 2.016733333 ),
( 118.7, 2.066433333 ),
( 138.75, 2.077583333 ),
( 479.6166667, 2.160233333 ),
( 499.66666667, 2.160233333 )
```

第一分量为变量数据,第二分量为待拟合数据,以函数 $y = \frac{p_0 \log{(x)}}{1 + p_1 \log{(x)}} + p_2$ 拟合之:

```
#include <anyprog/anyprog.hpp>
    #include <fstream>
    #include <iostream>
    int main(int argc, char** argv)
6
       anyprog::real_block dat(12, 2);
       dat << 0.683333333, 1.552133333,
          1.066666667, 1.610833333,
9
          2.166666667, 1.702533333,
          3.33333333, 1.757483333,
          6.366666667, 1.825533333,
          12.4666667, 1.890833333,
          43.88333333, 1.99507451,
14
          58.53333333, 2.016733333,
          118.7, 2.066433333,
16
          138.75, 2.077583333,
17
          479.6166667, 2.160233333,
          499.6666667, 2.163333333;
20
       std::vector<anyprog::fit::function_t> fun = {
21
           [](const anyprog::real_block& x, const anyprog::real_block& p) {
22
23
              return (p(0, 0) * log(x(0, 0)) / (1 + p(1, 0) * log(x(0, 0))) + p(2, 0)) / p(0, 0);
24
       }:
25
       anyprog::real_block param(3, 1);
```

3.7. 数据拟合问题 19

```
param.fill(0.1);
27
       anyprog::fit fit(dat.col(0), fun, param);
28
        auto ret = fit.lssolve(dat.col(1)), fitting = fit.fitting(ret);
       std::cout << ret << "\n";
30
        std::cout << "xdat\tydat\tfit\t\n";</pre>
        for (size_t i = 0; i < dat.rows(); ++i) {</pre>
           std::cout << dat(i, 0) << "\t" << dat(i, 1) << "\t" << fitting(i) << "\t\n";
33
34
       }
35
       std::cout <<fit.r_squared(dat.col(1),fitting) <<"\n";</pre>
36
        return 0;
    }
38
```

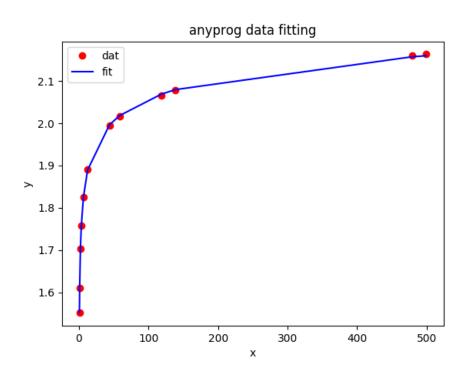


图 3.3: 非多项式拟合

其解为 $y=\frac{0.137182\log{(x)}}{1+0.0864034\log{(x)}}+1.60523$,决定系数为 0.999875。待拟合数据和拟合数据比较如上图。因模型规范会自动在 f_i 前添加参数 p_i ,故而需对待拟合模型作适当调整以矫正模型,如第 23 行代码所示。

应对非多项式拟合的更为通用的方法是 lssearch, 它能进行全局优化拟合, 其解不依赖于初始解, 设置解搜索范围即可。其参数与全局优化方法 search 颇为相似。若 lssolve 所求局部解不理想,可调用该方法。比如:

```
#include <anyprog/anyprog.hpp>
#include <fstream>
#include <iostream>

int main(int argc, char** argv)
```

```
{
6
       anyprog::real_block xdat = anyprog::block::linspace(0, 4, 100);
       anyprog::real_block ydat = xdat.unaryExpr([](double x) {
          return 1.5 * sin(x) + cos(M_PI * x);
9
10
       });
11
       std::vector<anyprog::fit::function_t> fun = {
12
           [](const anyprog::real_block& x, const anyprog::real_block& p) {
13
              return (p(0) * sin(x(0)) + cos(p(1) * x(0))) / p(0);
14
          }
       };
16
17
       anyprog::real_block param(2, 1);
       param << 1.0, 4.2;
19
20
       std::vector<anyprog::optimization::range_t> range = { { 0, 10 }, { 0, 10 } };
22
       anyprog::fit fit(xdat, fun, param);
23
       auto ret = fit.lssearch(ydat, range, 10, 3), fitting = fit.fitting(ret);
24
       std::cout << ret << "\n"
25
                << fit.r_squared(ydat, fitting) << "\n";
27
       return 0;
28
   }
```

此例先通过函数 $y=1.5\sin{(x)}+\cos{(\pi x)}$ 在区间 $x\in[0,4]$ 生成 100 个数据,然后通过 1ssearch 方法在空间 $\forall i,p_i\in[0,10]^2$ 进行全局搜索求解。编译运行该程序,可得决定系数为 1,问题获得完美解决。

3.8 方程组求解

展望