AnyProg

C++ 数学优化包

pangpang@hi-nginx.com

2019 年 12 月 21 日

目录

Chapter 1

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：AnyProg[1]。

[1] Any Programming。

Chapter 2

功能

AnyProg 可用于求解以下模型定义的所有问题:

$$
\begin{aligned}
\min_{x \in \mathbf{R}^n} \quad & f(x) \\
\texttt{s.t.} \quad & g_i(x) \leq 0, \qquad i = 0, \cdots, m_s - 1 \\
& h_j(x) = 0, \qquad j = 0, \cdots, m_t - 1 \\
& x_k \in [L_k, U_k], \quad k = 0, \cdots, n - 1
\end{aligned}
\tag{2.1}
$$

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：**LP**[1]、**QP**[2]、**NLP**[3]、**MILP**[4]、**MIQP**[5]、**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

Chapter 3

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)：

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbf{R}^2} \quad & f(x) = 8x_0 + x_1 \\
\texttt{s.t.} \quad & g_0(x) = \quad x_0 + 2x_1 \quad \geq -14 \\
& g_1(x) = \quad -4x_0 - x_1 \quad \leq -33 \\
& g_2(x) = \quad 2x_0 + x_0 \quad \leq 20 \\
& x_i \geq 0, \quad i = 0, 1
\end{aligned}
\tag{3.1}
$$

对于不等于约束，如果采用的是 $\geq$ 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：

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

int main(int argc, char** argv)
{
    size_t dim = 2;
    anyprog::real_block obj(dim, 1), A(3, dim), b(3, 1);
    obj << 8, 1;
    A << -1, -2,
        -4, -1,
        2, 1;
    b << 14, -33, 20;

    anyprog::optimization::range_t range = { 0, 100 };

    anyprog::optimization opt(obj, range);
```

```
    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：

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbf{R}^n} \quad & f(x)=\frac{1}{2}x^THx+c^Tx \\
\texttt{s.t.} \quad & A\boldsymbol{.}x \le b \\
& Aeq\boldsymbol{.}x = beq \\
& x_k \in [L_k,U_k], \quad k=0,\cdots,n-1
\end{aligned}
\tag{3.2}
$$

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:

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbf{R}^2} \quad & f(x)=\frac{1}{2}x_0^2+x_1^2-x_0x_1-2x_0-6x_1 \\
\texttt{s.t.} \quad & g_0(x)= \quad x_0+x_1 \quad \le 2 \\
& g_1(x)= \quad -x_0+2x_1 \quad \le 2 \\
& g_2(x)= \quad 2x_0+x_1 \quad \le 3 \\
& x_i \ge 0, \quad i=0,1
\end{aligned}
\tag{3.3}
$$

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)
{
```

[1] `search` 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。

```
    size_t dim = 2;
    anyprog::real_block H(dim, dim), c(dim, 1);
    H << 1, -1,
        -1, 2;
    c << -2, -6;

    anyprog::optimization::function_t obj = [&](const anyprog::real_block& x) {
        anyprog::real_block ret = 0.5 * (x.transpose() * H * x) + c.transpose() * x;
        return ret(0, 0);
    };

    anyprog::real_block A(3, dim), b(3, 1);
    A << 1, 1,
        -1, 2,
        2, 1;
    b << 2, 2, 3;

    anyprog::optimization::range_t range = { 0, 100 };

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

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)：

$$\begin{aligned} \max_{x\in\mathbf{R}^2} \quad & f(x) = \log x_0 + \log x_1 \\ \text{s.t.} \quad & g_0(x) = \quad x_0 - x_1 \quad \le 0 \\ & h_0(x) = \quad x_0 + 2x_1 \quad = 5 \\ & x_i \ge 0, \quad i = 0, 1 \end{aligned} \tag{3.4}$$

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 = {
        [&](const anyprog::real_block& x) {
            return x(0) + 2 * x(1) - 5;
        }
    };

    anyprog::optimization::range_t range = { 0, 10 };

    anyprog::optimization opt(obj, range, dim);
    opt.set_inequation_condition(ineq);
    opt.set_equation_condition(eq);
    auto ret = opt.solve();
    anyprog::optimization::print(opt.is_ok(), ret, obj);
    return 0;
}
```

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 `Rosenbrock`[2]函数 $f(x) = 100\left(x_1 - x_0^2\right)^2 + (1 - x_0)^2$ 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)
{
    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);

    return 0;
}
```

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`。

```cpp

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)：

$$
\begin{aligned}
\min_{x\in\mathbf{R}^2} \quad & f(x) = 0.5x_0^2 + 0.5x_1^2 - 2x_0 - 2x_1 \\
\text{s.t.} \quad & g_0(x) = -x_0 + x_1 \le 2 \\
& g_1(x) = x_0 + 3x_1 \le 5 \\
& g_2(x) = x_0^2 + x_1^2 - 2x_1 \le 1 \\
& x_i \ge 0, \quad i = 0, 1 \\
& x_0 \in \mathbf{Z}
\end{aligned}
\tag{3.5}
$$

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：

```cpp
#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);
    };

```

[3]https://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;
        },
        [](const anyprog::real_block& x) {
            return x(0) * x(0) + x(1) * x(1) - 2 * x(1) - 1;
        }

    };

    anyprog::optimization::range_t range = { 0, 100 };

    anyprog::optimization opt(obj, range, dim);
    opt.set_inequation_condition(ineq);
    opt.set_filter_function([](anyprog::real_block& x) {
        x(0) = round(x(0));
    });
    auto ret = opt.search(10,3);
    anyprog::optimization::print(opt.is_ok(), ret, obj);
    return 0;
}
```

其全局解为：$f(1, 1.33333) = -3.27778$。

再看例子 (3.6):

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbf{R}^2} \quad & f(x) = -x_1 + 2x_0 - \ln\frac{x_0}{2} \\ \text{s.t.} \quad & g_0(x) = \quad -x_0 - \ln\frac{x_0}{2} + x_1 \quad \leq 0 \\ & x_0 \in [0.5, 1.4], x_1 \in \{0, 1\} \end{aligned} \tag{3.6}$$

```
#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);
```

```
    opt.set_filter_function([](anyprog::real_block& x) {
        x(1) = round(x(1));
    });
    auto ret = opt.search(5,3);
    anyprog::optimization::print(opt.is_ok(), ret, obj);
    return 0;
}
```

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);
    auto ret = fit.solve(ydat), fitting = fit.fitting(ret);
    std::cout << ret << "\n";
    std::cout << "xdat\tydat\tfit\t\n";
    for (size_t i = 0; i < xdat.rows(); ++i) {
        std::cout << xdat(i) << "\t" << ydat(i) << "\t" << fitting(i) << "\t\n";
    }

```

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

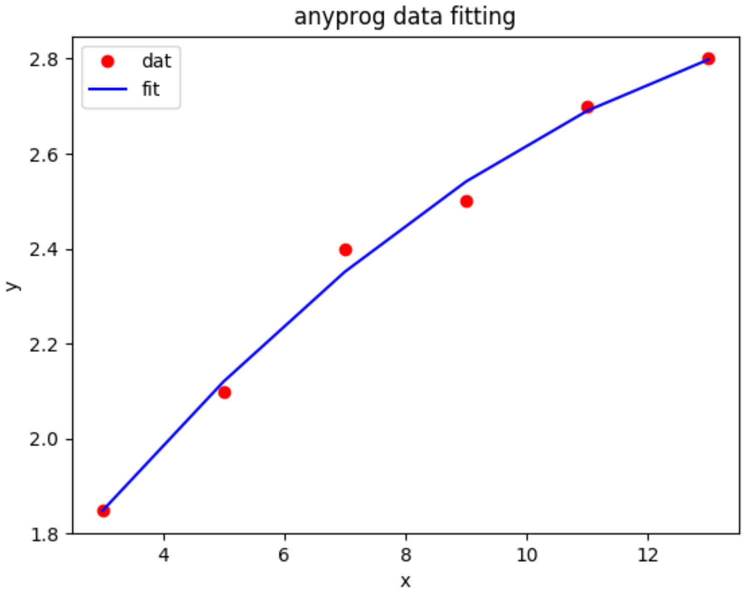

图 3.1: 多项式拟合

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);
        },
```

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

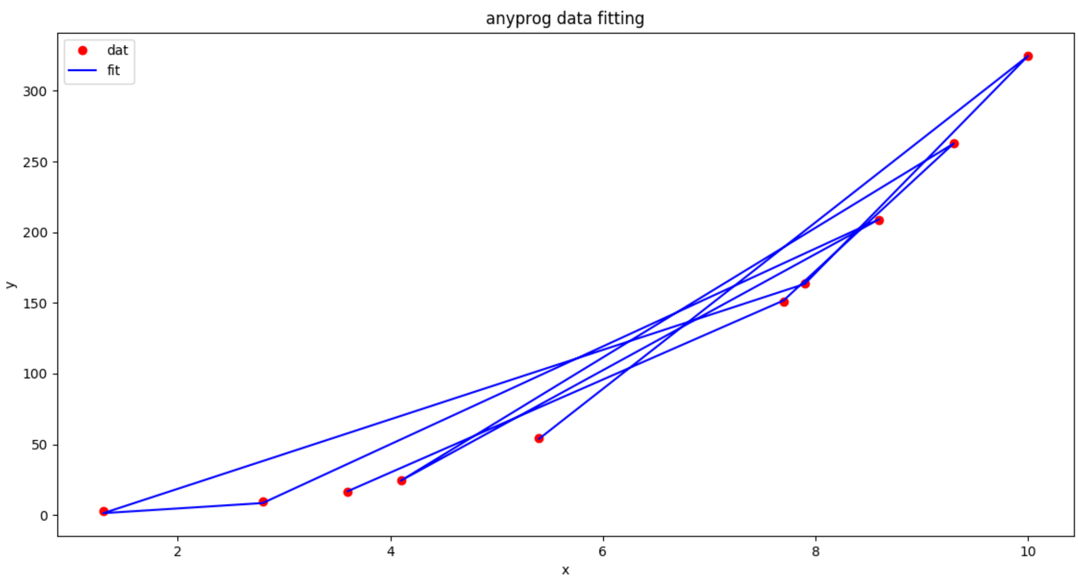

图 3.2: 类多项式拟合

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 ),
( 3.333333333, 1.757483333 ),
( 6.366666667, 1.825533333 ),
( 12.46666667, 1.890833333 ),
( 43.88333333, 1.99507451 ),
( 58.53333333, 2.016733333 ),
( 118.7, 2.066433333 ),
( 138.75, 2.077583333 ),
( 479.6166667, 2.160233333 ),
( 499.6666667, 2.163333333 )
```

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:

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

int main(int argc, char** argv)
{
    anyprog::real_block dat(12, 2);
    dat << 0.683333333, 1.552133333,
        1.066666667, 1.610833333,
        2.166666667, 1.702533333,
        3.333333333, 1.757483333,
        6.366666667, 1.825533333,
        12.46666667, 1.890833333,
        43.88333333, 1.99507451,
        58.53333333, 2.016733333,
        118.7, 2.066433333,
        138.75, 2.077583333,
        479.6166667, 2.160233333,
        499.6666667, 2.163333333;

    std::vector<anyprog::fit::function_t> fun = {
        [](const anyprog::real_block& x, const anyprog::real_block& p) {
            return (p(0, 0) * log(x(0, 0)) / (1 + p(1, 0) * log(x(0, 0))) + p(2, 0)) / p(0, 0);
        }
    };
    anyprog::real_block param(3, 1);
```

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

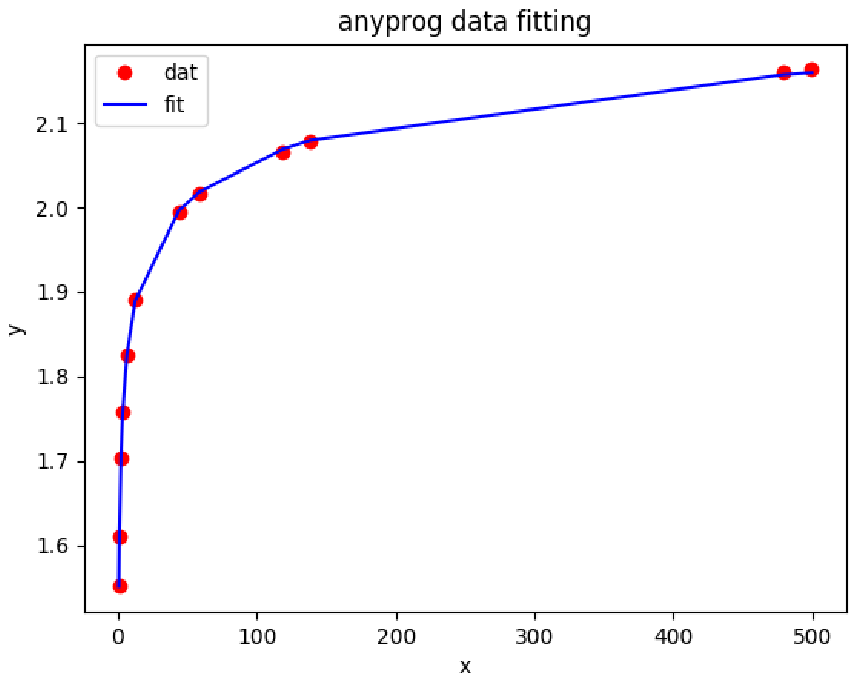

图 3.3: 非多项式拟合

其解为 $y = \dfrac{0.137182\log(x)}{1 + 0.0864034\log(x)} + 1.60523$，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。

3.8 方程组求解

Chapter 4

展望