

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，那么我们需要确定 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“ ≥ 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 ℓ_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, Δ_{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 3.5×10^{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_{ion} 是离子势， ε_{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。