第三章 典型优化问题

修贤超

https://xianchaoxiu.github.io

目录

半定规划

- 半定规划（SDP）是线性规划在矩阵空间中的一种推广
- 半定规划问题的标准形式

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

- 对偶形式

$$
\begin{aligned}
\min \quad & -b^\top y \\
\text{s.t.} \quad & y_1 A_1 + y_2 A_2 + \cdots + y_n A_n \preceq C
\end{aligned}
$$

LP, SOCP 与 SDP 的比较

- LP 与 SDP

LP
$$\begin{array}{rl} \min & c^\top x \\ \text{s.t.} & Ax \le b \end{array}$$

SDP
$$\begin{array}{rl} \min & c^\top x \\ \text{s.t.} & \operatorname{diag}(Ax-b) \preceq 0 \end{array}$$

- SOCP 与 SDP

SOCP
$$\begin{array}{rl} \min & f^\top x \\ \text{s.t.} & \|A_i x + b_i\|_2 \le c^\top x + d_i, \quad i = 1, \cdots, m \end{array}$$

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

应用举例：二次约束二次规划问题的半定规划松弛

- 设A_i 为 $n \times n$ 对称矩阵，考虑二次约束二次规划问题

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & x^\top A_0 x + 2b_0^\top x + c_0 \\ \text{s.t.} \quad & x^\top A_i x + 2b_i^\top x + c_i \le 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m \end{aligned}$$

- 对任意 $x \in \mathbb{R}^n$ 以及 $A \in \mathcal{S}^n$，有恒等式

$$x^\top A x = \mathrm{Tr}(x^\top A x) = \mathrm{Tr}(A x x^\top) = \langle A, x x^\top \rangle$$

- 原始问题等价于

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

应用举例: 二次约束二次规划问题的半定规划松弛

- 进一步地

$$
\begin{aligned}
x^\top A_i x + 2b_i^\top x + c_i &= \left\langle \begin{pmatrix} A_i & b_i \\ b_i^\top & c_i \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} X & x \\ x^\top & 1 \end{pmatrix} \right\rangle \\
&= \langle \overline{A_i}, \overline{X} \rangle, \quad i = 0, 1, \cdots, m
\end{aligned}
$$

- 半定规划松弛可以写成

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \langle \overline{A_0}, \overline{X} \rangle \\
\text{s.t.} \quad & \langle \overline{A_i}, \overline{X} \rangle \le 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m \\
& \overline{X} \succeq 0 \\
& \overline{X}_{n+1,n+1} = 1
\end{aligned}
$$

- 约束 $X = xx^\top$ 松弛成半正定约束 $X \succeq xx^\top$（等价于 $\overline{X} \succeq 0$）

应用举例: 最大割问题的半定规划松弛

- 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 $\overline{S}$ 之间相连边的权重之和最大化
- 令 $x_j = 1,\ j \in S$ 和 $x_j = -1,\ j \in \overline{S}$，则

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

- 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最优解

应用举例：最大割问题的半定规划松弛

- 令 $W=(w_{ij})\in\mathcal{S}^n$，并定义 $C=-\frac{1}{4}(\mathrm{diag}(W\mathbf{1})-W)$，得到

$$\begin{array}{ll}\min & x^\top Cx\\ \text{s.t.} & x_i^2=1,\ i=1,2,\cdots,n\end{array}$$

- 令 $X=xx^\top$，则最大割问题可以转化为

$$\begin{array}{ll}\min & \langle C,X\rangle\\ \text{s.t.} & X_{ii}=1,\ i=1,2,\cdots,n\\ & X\succeq 0,\ \mathrm{rank}(X)=1\end{array}$$

  - $x_i^2=1$ 意味着矩阵 X 对角线元素 $X_{ii}=1$
  - $X=xx^\top$ 可以用约束 $X\succeq 0$ 和 $\mathrm{rank}(X)=1$ 等价刻画

应用举例: 极小化最大特征值

- 极小化最大特征值问题可表示为

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

- 由于 $\lambda_{\max}(A) \le t \Leftrightarrow A \preceq tI$，则极小化最大特征值可以转化为

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

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

应用举例: 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

$$\min_{x} \quad \|A(x)\|_2$$

- 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

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

目录

矩阵优化的基本形式

- 矩阵优化问题的形式

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

  - $\mathcal{X}$ 为特定的矩阵空间
  - $\psi(X) : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ 为给定的函数，可能是非光滑的
- 和向量相比，矩阵有许多新的性质，如秩、特征值等
- 广泛地出现在组合数学、材料科学、机器学习和统计学等

矩阵优化的基本形式

- **低秩矩阵恢复问题**

$$\min_{X\in\mathbb{R}^{m\times n}} \quad \frac{1}{2}\|X-M\|_F^2+\mu\|X\|_*$$

考虑函数 $h(X)=\|X\|_*$ **的次微分**

$$\partial h(X)=\{UV^\top+W \ \mid\ \|W\|_2\le 1,\ U^\top W=0,\ WV=0\}$$

- **主成分分析问题**

$$\min_{X\in\mathbb{R}^{p\times d}} \quad \psi(X)=-\mathrm{Tr}(X^\top AA^\top X) \qquad \text{s.t.} \quad X^\top X=I_d$$

考虑目标函数的微分

$$\nabla\psi(X)=-2AA^\top X$$

应用举例：非负矩阵分解

- 给定矩阵 $A = [a_1, a_2, \cdots, a_n] \in \mathbb{R}^{d\times n}$，将其分解成非负基矩阵 $X \in \mathbb{R}^{d\times p}$ 和非负系数矩阵 $Y \in \mathbb{R}^{p\times n}$ 的乘积，即

$$A = XY$$

- 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，应考虑

$$\begin{aligned} \min_{X\in\mathbb{R}^{d\times p},\, Y\in\mathbb{R}^{p\times n}} \quad & \frac{1}{2}\|A - XY\|_F^2 \\ \text{s.t.} \quad & X \geq 0,\ Y \geq 0 \end{aligned}$$

- 本质上是将高维空间中的数据在一个低维空间中表示
- 和主成分分析模型类似，但会得到比主成分分析模型更有实际意义的解

应用举例：非负矩阵分解

- 根据具体应用的不同，还可以考虑带正则项的非负矩阵分解模型

$$\begin{aligned} \min_{X\in\mathbb{R}^{d\times p},\, Y\in\mathbb{R}^{p\times n}} \quad & \frac{1}{2}\|A - XY\|_F^2 + \alpha r_1(X) + \beta r_2(Y) \\ \text{s.t.} \quad & X \geq 0, \quad Y \geq 0 \end{aligned}$$

  - $r_1(X)$ 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
- 如果基向量的线性无关性，取 $r_1(X) = \|X^\top X - I\|_F^2$
- 如果每一个观测值都可以用少数几个基向量来表示，取 $r_2(Y) = \|Y\|_1$

应用举例：非负矩阵分解

Algorithms for non-negative matrix factorization

D Lee, HS Seung - Advances in neural information …, 2000 - proceedings

… nonnegativity is a useful constraint for matrix factorization that can lear
data [4, 5]. The nonnegative … for learning the optimal nonnegative factor

☆ 保存 99 引用 被引用次数：12260 相关文章 所有 36 个版本 »

Learning the parts of objects by non-negative matrix fact

DD Lee, HS Seung - nature, 1999 - nature.com

… an algorithm for non-negative matrix factorization that is able to … Non
distinguished from the … When non-negative matrix factorization is impler

☆ 保存 99 引用 被引用次数：16498 相关文章 所有 17 个版本

应用举例：相关系数矩阵估计

- 给定对称矩阵 $C \in \mathcal{S}^n$ 和非负对称权重矩阵 $H \in \mathcal{S}^n$，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

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

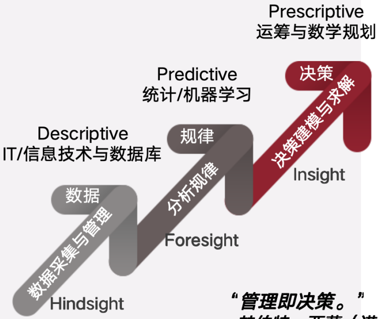
- 将 $\operatorname{rank}(X) \leq p$ 表示为 $X = V^\top V$, 其中 $V = [V_1, V_2, \cdots, V_n] \in \mathbb{R}^{p\times n}$，得到

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

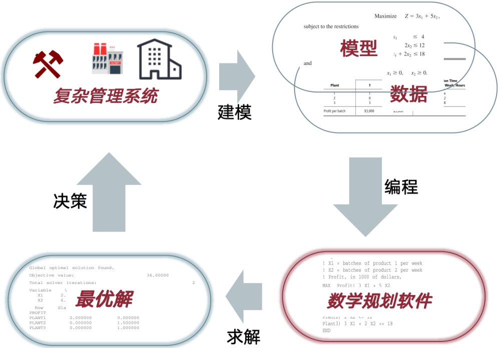
目录

优化软件发展

- 现代复杂管理系统决策的主要特点：数据驱动，规模超大，多因素制约，多目标优化
- 数据驱动的决策流程：**数据-->规律-->决策**
- **数学规划：基于数据驱动的决策，问题建模与求解的核心环节**



"管理即决策。"
—赫伯特·西蒙（诺贝尔经济学奖）

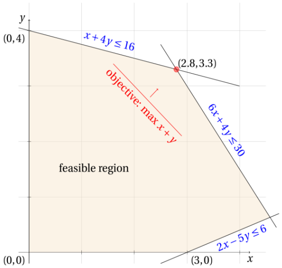


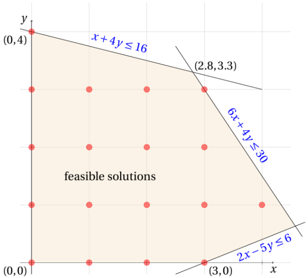
智能决策中两个经典的关键科学问题：

1，如何建模：将复杂决策问题翻译成**简洁**、**有效**的数学表达形式

2，如何求解：快速、**准确**地求解数学模型

优化软件发展





线性规划

- 问题目标：在可行域寻找最优解
- 规模较大：常有数百万变量和约束
- 稀疏性质：大量的稀疏矩阵运算
- 数值问题：受计算机精度影响

整数规划

- 可行域是离散的点
- 是经典的“NP-完全”问题
- 复杂多样的问题结构
- 需要求解多个线性规划问题

二阶锥规划

凸二次规划

凸二次约束规划

……

优化软件发展

数学理论门槛高

- 理论储备不足，基本理论框架由西方发展起来
- 求解计算模块的相关理论在国内基本空白状态
- 国内理论研究主要聚焦在数学规划在各个领域的定制化应用

软件工程难度大

- 数学规划的软件工程工作量巨大
- 线性5万行，整数规划百万行
- 相关的系统开发的理论研究国内极少
- 参照MATLAB

领域知识积累难

- Domain Knowledge欠缺
- 例：热启动的30种备选该如何从数千篇文献选取?
- 欧美积累了40多年
- 论文里不会提及，国外求解器也不会公布的不传之秘
- 只能自己一步步摸索，不断试错

技术创新迭代快

- 例如Gurobi研发组每年需要看3到500篇论文，但是只有5到7个技巧显著有用
- **需要自己观察与发展新的理论研究**
- **更需要与新一代人工智能算法结合，软硬件结合，寻求“弯道超车”可能性**

困难：投入大，周期长，工作很多时候是对欧美的追赶，很难产生论文

优化软件发展

世界著名数学规划求解器研发历程

- 1939年，苏联诺贝尔经济学奖获得者Leonid Kantorovich发明线性规划
- 1979年芝加哥大学的Charge 发布Lingo
- 1983年英国爱丁堡大学Ashford创办了XPRESS
- 1987年莱斯大学Bixby创办了CPLEX公司
- 2000年COIN-OR成立，并发布CLP和CBC
- 2005年德国ZIB发布了开源整数规划SCIP
- 2008年Cplex团队Bixby等离职创办GUROBI
- 2017年，上财发布中国第一个开源数学规划求解器LEAVES，2018年中科院 CMIP
- 2019年，杉数科技发布中国第一个专业数学规化求解器COPT，此后阿里，华为等纷纷入局
- 2021年至今，谷歌，ORACLE，微软纷纷开始组建自己的数学规划求解器团队

世界著名数学规划求解器一览表

GUROBI
CPLEX
XPRESS
美国与英国三大求解器巨头，累计三十年以上研发历史和95%以上市场。线性，整数，非线性各个模块功能齐备

SAS ←世界最大商业统计软件（北卡）

CVX ←世界著名求解器建模平台(斯坦福大学)

IPOPT ←著名非线性规划开源软件(卡耐基梅隆)

Coin-OR ←世界最好开源线性规划（多组织维护）

Baron ←世界最好非线性规划（多组织维护）

SCIP ←世界最好整数规划(ZIB)

美国	德国	丹麦	俄罗斯	中国
GUROBI, CPLEX, XPRESS, SAS, CVX, IPOPT, Coin-OR, Baron, NEOS, CBC	SCIP, SOPLEX	MOSEK	GLPK	OPTV 华为, MDOPT 阿里, COPT 杉数, CMIP 中科院, LEAVES 上财

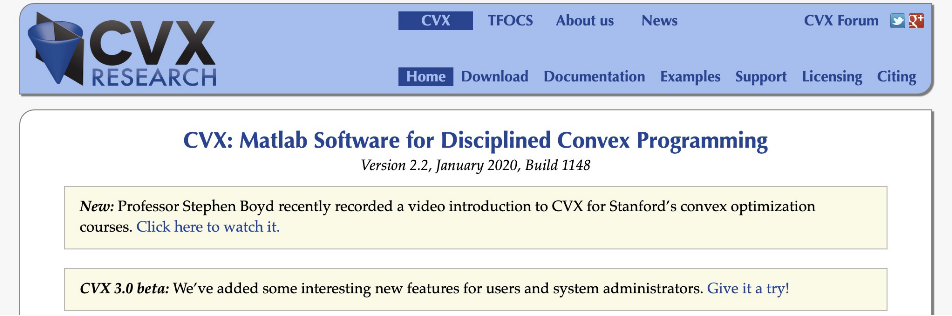
NEOS: 世界最大免费服务平台（威斯康星大学）

CBC: 世界最好开源组织（多组织维护）

MOSEK: 世界最好锥规划（MOSEK）

优化模型语言

- CVX 以 MATLAB 为基础的优化模型语言，求解凸优化问题
  - 快速构造和识别凸性
  - 调用已有软件包求解变形后的凸优化问题
  - 包括免费软件 SDPT3 和 SeDuMi 以及商业软件 Gurobi 和 MOSEK 等



CVX

- **考虑优化问题**

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

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

Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈