

## 第三章 典型优化问题

修贤超

<https://xianchaoxiu.github.io>

- 3.1 线性规划
- 3.2 最小二乘问题
- 3.3 复合优化问题
- 3.4 随机优化问题
- 3.5 半定规划
- 3.6 矩阵优化
- 3.7 优化模型语言

# 凸优化问题

## ■ 标准形式的凸优化问题

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

□  $f_0, f_1, \dots, f_m$  为凸函数

□  $a_i^\top x = b_i$  为线性等式约束

## ■ 经常写成

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

## ■ 凸问题的可行集为凸集

## ■ 考虑

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

- $f_0$  为凸函数, 可行集  $\{(x_1, x_2) \mid x_1 = -x_2 \leq 0\}$  为凸集
- $f_1$  非凸,  $h_1$  不是线性函数  $\Rightarrow$  不是凸问题
- 等价于 (但不完全相等) 凸优化问题

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

# 局部和全局极小

## ■ 凸优化问题的任意局部极小点都是全局最优

**证明** 假设  $x$  是局部极小,  $y$  全局最优且  $f_0(y) < f_0(x)$ .  $x$  局部最优意味着存在  $R > 0$  使得

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

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

- $\|y - x\|_2 > R$ , 因此  $0 < \theta < 1/2$
- $z$  是两个可行点的凸组合, 因此也可行
- $\|z - x\|_2 = R/2$ , 并且

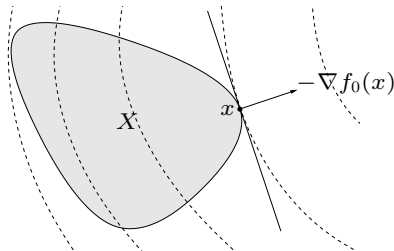
$$f_0(z) \leq \theta f_0(x) + (1 - \theta)f_0(y) < f_0(x)$$

这与  $x$  是局部极小的假设矛盾

# 可微凸优化问题的最优性条件

- 设  $x$  是凸优化问题  $\min_{x \in X} f_0(x)$  最优解当且仅当  $x$  可行且满足

$$\nabla f_0(x)^\top (y - x) \geq 0, \quad \forall y \in X$$



- 如果  $\nabla f_0(x)$  非零, 它定义了可行集  $X$  在  $x$  处的支撑超平面

# 具体含义

- 无约束优化  $x$  是最优解当且仅当

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

- 等式约束优化问题

$$\min f_0(x) \quad Ax = b$$

$x$  是最优解当且仅当存在  $v$  使得

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

- 非负约束优化问题

$$\min f_0(x) \quad x \succeq 0$$

$x$  是最优解当且仅当

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

# 线性规划基本形式

## ■ 线性规划问题的一般形式

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

## ■ 线性规划问题的标准形式

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

## ■ 线性规划问题的不等式形式

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



## 应用举例：运输问题

- 假设有  $I$  个港口  $P_1, \dots, P_I$ , 提供某种商品. 有  $J$  个市场  $M_1, \dots, M_J$  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. 试求运输问题是在满足市场需求下使得运输成本最低

- 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

$$\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J x_{ij} b_{ij}$$

- 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

$$\sum_{j=1}^J x_{ij} = s_i, \quad i = 1, \dots, I$$

## 应用举例：运输问题

- 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

$$\sum_{i=1}^I x_{ij} = r_j, \quad j = 1, \dots, J$$

- 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

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

## 应用举例：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

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

- 对每个  $|x_i|$  引入一个新的变量  $z_i$ ，可以转化为

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

- 最小  $\ell_\infty$  范数模型

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_\infty$$

- 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  $\ell_\infty$  范数的定义, 可以进一步写为

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

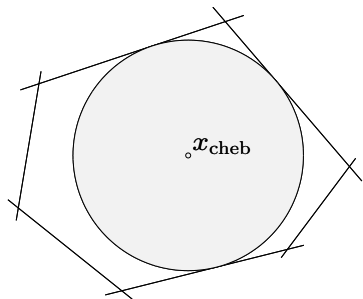
# 应用举例：多面体的切比雪夫中心

## ■ 多面体

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

的切比雪夫中心, 即为其最大半径内接球的球心

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



## ■ 可以转化为

$$\begin{aligned} \max_{x_c, r} \quad & r \\ \text{s.t.} \quad & a_i^\top x_c + r \|a_i\|_2 \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

- 3.1 线性规划
- 3.2 最小二乘问题
- 3.3 复合优化问题
- 3.4 随机优化问题
- 3.5 半定规划
- 3.6 矩阵优化
- 3.7 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

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

- 如果所有的  $r_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  都是线性函数，则称线性最小二乘问题，否则称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
- 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。

## 应用举例：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

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

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

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

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

- $x \in \mathbb{R}^n$  为其全局极小解当且仅当  $x$  满足方程

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



## 应用举例：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

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

- 利用线性函数  $f(a) = Xa + y$  逼近, 可以建立如下最小二乘问题

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

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

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

## 应用举例：数据插值

- 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

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

- 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

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

- 在深度学习中，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

## 应用举例：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
- 考虑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

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

- 转化为最小二乘问题

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

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

- 3.1 线性规划
- 3.2 最小二乘问题
- 3.3 复合优化问题
- 3.4 随机优化问题
- 3.5 半定规划
- 3.6 矩阵优化
- 3.7 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

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

- $f(x)$  是光滑函数, 如数据拟合项
- $h(x)$  可能是非光滑的, 如  $\ell_1$  范数正则项, 约束集合的示性函数
- 常用算法有次梯度法, 近似点梯度法, Nesterov 加速法、交替方向乘子法等

## ■ $\ell_1$ 范数正则化回归分析问题

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

## ■ 矩阵分离问题

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

## ■ 字典学习问题

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

## 应用举例：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图
- 由全变差模型，去噪问题可表示为

$$\min_{x \in \mathbb{R}^{n \times n}} \frac{1}{2} \|x - y\|_F^2 + \lambda \|x\|_{TV}$$



## 应用举例：盲反卷积

- 盲反卷积是从一个模糊的图像恢复出原来清晰的图像, 也称为去模糊
- 盲反卷积问题可以表示成

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

- 假设噪声为高斯噪声, 则转化为

$$\min_{a,x} \quad \frac{1}{2} \|y - a * x\|_2^2$$

- 假设原始图像信号在小波变换下是稀疏的, 进一步得到

$$\min_{a,x} \quad \frac{1}{2} \|y - a * x\|_2^2 + \|\lambda \odot (Wx)\|_1,$$

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



- 3.1 线性规划
- 3.2 最小二乘问题
- 3.3 复合优化问题
- 3.4 随机优化问题
- 3.5 半定规划
- 3.6 矩阵优化
- 3.7 优化模型语言

# 随机优化问题

- 随机优化问题可以表示为

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

- $F(x, \xi)$  表示样本  $\xi$  上的损失或者奖励
  - $h(x)$  用来保证解的某种性质
- 假设有  $N$  个样本  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ , 令  $f_i(x) = F(x, \xi_i)$ , 得到经验风险极小化问题 (采样平均极小化问题)

$$\min_{x \in \mathcal{X}} f(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i(x) + h(x)$$

- 样本数  $N$  比较多, 可行域所在空间维数  $n$  比较大, 导致计算困难

## 应用举例：随机主成分分析

- 如果样本点  $\xi$  服从某个零均值分布  $\mathcal{D}$ ，那么随机主成分分析可以写成

$$\max_{X \in \mathbb{R}^{p \times d}} \text{Tr}(X^\top A A^\top X) \quad \text{s.t.} \quad X^\top X = I$$

$\Downarrow$

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

- 高逼近解过程中需要的样本数量以及所消耗的时间
- 在有限内存情况下的逼近计算分析

## 应用举例：分布式鲁棒优化

- 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，为了提高预测器的泛化能力，考虑

$$\begin{aligned} \min_h \quad & \mathbb{E}_z[F(h, z)] \\ & \Downarrow \\ \min_h \quad & \max_{\hat{z} \in \Gamma} \mathbb{E}_{\hat{z}}[F(h, \hat{z})] \end{aligned}$$

- 集合  $\Gamma$  中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
- Wasserstein 距离可以改变原来经验分布的支撑集，常用于选取  $\Gamma$

- 3.1 线性规划
- 3.2 最小二乘问题
- 3.3 复合优化问题
- 3.4 随机优化问题
- 3.5 半定规划
- 3.6 矩阵优化
- 3.7 优化模型语言

# 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

$$\begin{aligned} \min \quad & CX \\ \text{s.t.} \quad & A_1 X = b_1 \\ & \dots \\ & A_m X = b_m \\ & X \succeq 0 \end{aligned}$$

- 对偶形式

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

# LP, SOCP 与 SDP 的比较

## ■ LP 与 SDP

<b>LP</b>	$\min \quad c^\top x$	<b>SDP</b>	$\min \quad c^\top x$
	$\text{s.t.} \quad Ax \leq b$		$\text{s.t.} \quad \text{diag}(Ax - b) \preceq 0$

## ■ SOCP 与 SDP

**SOCP**

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

**SDP**

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

## 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

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

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

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

- 原始问题等价于

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



## 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

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

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

- 因此这个问题的半定规划松弛可以写成

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

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

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

- 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  $C = -\frac{1}{4}(\text{Diag}(W\mathbf{1}) - W)$ , 得到

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

- 令  $X = xx^\top$ , 则最大割问题可以转化为

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

□  $x_i^2 = 1$  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  $\text{rank}(X) = 1$  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  $\lambda_{\max}(A) \leq t \Leftrightarrow A \preceq tI$ ，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

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

- 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

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

- 3.1 线性规划
- 3.2 最小二乘问题
- 3.3 复合优化问题
- 3.4 随机优化问题
- 3.5 半定规划
- 3.6 矩阵优化
- 3.7 优化模型语言

# 矩阵优化的基本形式

- 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, 广泛地出现在组合数学、材料科学、机器学习和统计学等

- 矩阵优化问题的形式

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

- $\mathcal{X}$  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
- 和向量相比, 矩阵有许多新的性质, 如秩、特征值等

# 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

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

## ■ 主成分分析问题

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

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  $A = [a_1, a_2, \dots, a_n] \in \mathbb{R}^{d \times n}$ , 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, 在这种情况下应考虑

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

- 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：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

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

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

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

- 3.1 线性规划
- 3.2 最小二乘问题
- 3.3 复合优化问题
- 3.4 随机优化问题
- 3.5 半定规划
- 3.6 矩阵优化
- 3.7 优化模型语言

# 典型优化算法软件

## ■ 主流的商业软件

- Gurobi (美国) 求解线性规划、二次规划、混合整数线性规划等问题
- CPLEX (美国) 求解整数规划、线性规划、凸和非凸二次规划等问题
- MOSEK (丹麦) 求解二次规划、二阶锥规划和半正定规划等问题
- Knitro (法国) 求解大规模非线性规划问题

## ■ 国产软件

- 杉数 COPT
- 阿里 MindOPT
- 华为天筹 OPTV

# 优化模型语言

- 模型语言的发展开始于 19 世纪 70 年代后期
  - 将容易出错的转化步骤交给计算机完成，降低错误率
  - 在模型和算法之间建立了一个清晰的界限
  - 对于困难的问题，可以尝试不同的求解器，得到更好的结果
- 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

## ■ 考虑如下优化问题

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

```
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
```

*Q&A*

*Thank you!*

感谢您的聆听和反馈