多项式优化入门

王杰

中国科学院数学与系统科学研究院

中国科学院大学, 2025 年春季

课程内容

1. 半定规划
2. 平方和理论
3. 测度和矩
4. 矩-平方和松弛分层
5. 项稀疏（TS）
6. 变量稀疏（CS）
7. 扩展与应用
8. 软件与实验

多项式优化问题

- 问题形式：

$$f_{\min} := \begin{cases} \inf\limits_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} & g_j(\mathbf{x}) \geq 0, \quad j = 1, \ldots, m \\ & h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \ldots, \ell \end{cases}$$

- 应用：最优电力流，计算机视觉，组合优化，神经网络，信号处理，图像处理，量子信息……

多项式优化问题

- 问题形式：

$$f_{\min} := \begin{cases} \inf\limits_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} & g_j(\mathbf{x}) \geq 0, \quad j = 1, \ldots, m \\ & h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \ldots, \ell \end{cases}$$

- 应用：最优电力流，计算机视觉，组合优化，神经网络，信号处理，图像处理，量子信息……

连续优化

- 二次约束二次规划（QCQP）：

$$\begin{cases} \inf\limits_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} & \mathbf{x}^\intercal A_0\mathbf{x} + b_0^\intercal\mathbf{x} \\ \text{s.t.} & \mathbf{x}^\intercal A_i\mathbf{x} + b_i^\intercal\mathbf{x} - c_i \geq (=) 0, \quad i = 1, \ldots, m \end{cases}$$

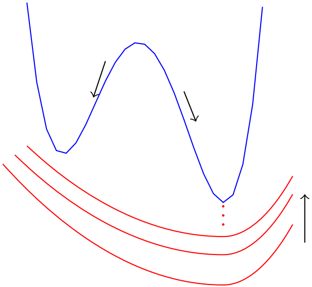
- 逼近：任何连续函数可用多项式函数进行逼近

离散优化

- **±1 二元变量**：$x \in \{-1, +1\} \iff x^2 - 1 = 0$
- **0/1 二元变量**：$x \in \{0, 1\} \iff x(x-1) = 0$
- **整数变量**：$x \in \{1, 2, \ldots, t\} \iff (x-1)(x-2)\cdots(x-t) = 0$

多项式优化的非凸性

- 非凸：鞍点、局部最优解



- NP-难：全局最优解

为什么研究多项式优化？

- **强大的建模能力**：二次约束二次规划、组合优化、混合整数（非）线性规划等
- 与基础数学紧密的内在联系：实（凸）代数几何、测度论
- 与理论计算机科学的联系：近似算法、计算复杂度理论
- 可求得全局最优值（解）：矩-平方和半定松弛分层

为什么研究多项式优化？

- 强大的建模能力：二次约束二次规划、组合优化、混合整数（非）线性规划等
- 与基础数学紧密的内在联系：实（凸）代数几何、测度论
- 与理论计算机科学的联系：近似算法、计算复杂度理论
- 可求得全局最优值（解）：矩-平方和半定松弛分层

为什么研究多项式优化？

- 强大的建模能力：二次约束二次规划、组合优化、混合整数（非）线性规划等
- 与基础数学紧密的内在联系：实（凸）代数几何、测度论
- 与理论计算机科学的联系：近似算法、计算复杂度理论
- 可求得全局最优值（解）：矩-平方和半定松弛分层

为什么研究多项式优化？

- **强大的建模能力**：二次约束二次规划、组合优化、混合整数（非）线性规划等
- **与基础数学紧密的内在联系**：实（凸）代数几何、测度论
- **与理论计算机科学的联系**：近似算法、计算复杂度理论
- **可求得全局最优值（解）**：矩-平方和半定松弛分层

ICM 报告

- 2010, P. A. Parrilo (MIT): Semidefinite programming and complex algebraic geometry
- 2014, Monique Laurent (CWI): Optimization over polynomials: selected topics
- 2014, Boaz Barak (Harvard): Sum-of-squares proofs and the quest toward optimal algorithms
- 2018, J. B. Lasserre (CNRS): The moment-SOS hierarchy
- 2018, R. R. Thomas (UW): Spectrahedral lifts of convex sets
- 2018, P. Raghavendra (UC Berkeley) 和 D. Steurer (ETH Zürich): High dimensional estimation via sum-of-squares proofs

多项式优化的松弛分层（hierarchy of relaxations）

矩-平方和分层

Moment-SOS 分层

Lasserre 分层

例子（矩松弛）

$$
\begin{cases}
\inf\limits_{\mathbf{x}} & x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2 \\
\text{s.t.} & 1 - x_1^2 \geq 0, 1 - x_2^2 \geq 0
\end{cases}
\Longleftrightarrow
\begin{cases}
\inf\limits_{\mathbf{x}} & x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2 \\
\text{s.t.} & \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_2 \\ x_1 & x_1^2 & x_1x_2 \\ x_2 & x_1x_2 & x_2^2 \end{bmatrix} = [1, x_1, x_2] \cdot [1, x_1, x_2]^{\intercal} \succeq 0, \\
& 1 - x_1^2 \geq 0, 1 - x_2^2 \geq 0
\end{cases}
$$

$$
\Longleftrightarrow
\begin{cases}
\inf\limits_{\mathbf{y}} & y_{2,0} + y_{1,1} + y_{0,2} \\
\text{s.t.} & \begin{bmatrix} 1 & y_{1,0} & y_{0,1} \\ y_{1,0} & y_{2,0} & y_{1,1} \\ y_{0,1} & y_{1,1} & y_{0,2} \end{bmatrix} \succeq 0, \\
& 1 - y_{2,0} \geq 0, 1 - y_{0,2} \geq 0, \\
& \exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \ \text{s.t.}\ \mathbf{y} = (\mathrm{x}_1, \mathrm{x}_2, \mathrm{x}_1^2, \mathrm{x}_1\mathrm{x}_2, \mathrm{x}_2^2)
\end{cases}
\xRightarrow{\textit{relax}}
\begin{cases}
\inf\limits_{\mathbf{y}} & y_{2,0} + y_{1,1} + y_{0,2} \\
\text{s.t.} & \begin{bmatrix} 1 & y_{1,0} & y_{0,1} \\ y_{1,0} & y_{2,0} & y_{1,1} \\ y_{0,1} & y_{1,1} & y_{0,2} \end{bmatrix} \succeq 0, \\
& 1 - y_{2,0} \geq 0, 1 - y_{0,2} \geq 0
\end{cases}
$$

测度与优化

- $S = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g_1(\mathbf{x}) \geq 0, \ldots, g_m(\mathbf{x}) \geq 0, h_1(\mathbf{x}) = 0, \ldots, h_\ell(\mathbf{x}) = 0\}$
- 原多项式优化问题等价于

$$\inf_{\mu \in \mathcal{M}(S)_+} \left\{ \int_S f(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mu : \mu(S) = 1 \right\}$$

$$\Updownarrow$$

$$\inf_{\mathbf{y}} \left\{ L_{\mathbf{y}}(f) = \sum_{\alpha \in \mathrm{supp}(f)} f_\alpha y_\alpha : \exists \mu \in \mathcal{M}(S)_+ \text{ s.t. } \mathbf{y} \sim \mu \text{ 和} y_0 = 1 \right\}$$

- 问题：什么样的序列 $\mathbf{y} = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n}$ 存在支撑在 S 上的 Borel 表示测度？

测度与优化

- $S = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g_1(\mathbf{x}) \geq 0, \ldots, g_m(\mathbf{x}) \geq 0, h_1(\mathbf{x}) = 0, \ldots, h_\ell(\mathbf{x}) = 0\}$
- **原多项式优化问题等价于**

$$\inf_{\mu \in \mathcal{M}(S)_+} \left\{ \int_S f(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mu : \mu(S) = 1 \right\}$$

$$\Updownarrow$$

$$\inf_{\mathbf{y}} \left\{ L_{\mathbf{y}}(f) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathrm{supp}(f)} f_{\boldsymbol{\alpha}} y_{\boldsymbol{\alpha}} : \exists \mu \in \mathcal{M}(S)_+ \text{ s.t. } \mathbf{y} \sim \mu \text{ 和} y_{\mathbf{0}} = 1 \right\}$$

- 问题：什么样的序列 $\mathbf{y} = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n}$ 存在支撑在 S 上的 Borel 表示测度？

测度与优化

- $S = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g_1(\mathbf{x}) \geq 0, \ldots, g_m(\mathbf{x}) \geq 0, h_1(\mathbf{x}) = 0, \ldots, h_\ell(\mathbf{x}) = 0\}$
- 原多项式优化问题等价于

$$\inf_{\mu \in \mathcal{M}(S)_+} \left\{ \int_S f(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mu : \mu(S) = 1 \right\}$$

$$\Updownarrow$$

$$\inf_{\mathbf{y}} \left\{ L_{\mathbf{y}}(f) = \sum_{\alpha \in \mathrm{supp}(f)} f_\alpha y_\alpha : \exists \mu \in \mathcal{M}(S)_+ \text{ s.t. } \mathbf{y} \sim \mu \text{ 和} y_{\mathbf{0}} = 1 \right\}$$

- **问题**: 什么样的序列 $\mathbf{y} = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n}$ 存在支撑在 S 上的 Borel 表示测度？

表示测度

定理

假设 $\mathcal{Q}(\mathbf{g})+\mathcal{I}(\mathbf{h})$ 满足*Archimedean* 条件. 序列 $\mathbf{y}=(y_\alpha)_{\alpha\in\mathbb{N}^n}$ 存在支撑在 S 上的 *Borel* 表示测度当且仅当对所有的 i,j,r 和 $\alpha\in\mathbb{N}^n$, $\mathbf{M}_r(\mathbf{y})\succeq 0$ 和 $\mathbf{M}_{r-d_j^g}(g_j\mathbf{y})\succeq 0, L_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}^\alpha h_i)=0.$

- $d_j^g := \lceil \deg(g_j)/2 \rceil, j=1,\ldots,m$

矩松弛分层

- r 阶矩松弛: (Lasserre 2001)

$$\lambda_r := \begin{cases} \inf\limits_{\mathbf{y}} & L_{\mathbf{y}}(f) \\ \text{s.t.} & \mathbf{M}_r(\mathbf{y}) \succeq 0 \\ & \mathbf{M}_{r-d_j^g}(g_j\mathbf{y}) \succeq 0, \quad j = 1, \ldots, m \\ & L_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}^{\boldsymbol{\alpha}} h_i) = 0, \quad \forall |\boldsymbol{\alpha}| \le 2r - \deg(h_i), i = 1, \ldots, \ell \\ & y_{\mathbf{0}} = 1 \end{cases}$$

➤ 等价于一个 SDP

➤ $\lambda_r \nearrow f_{\min}$, $r \to \infty$

例子（对偶 SOS 松弛）

$$\begin{cases} \inf\limits_{\mathbf{x}} & x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2 \\ \text{s.t.} & 1 - x_1^2 \geq 0, 1 - x_2^2 \geq 0 \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} \sup\limits_{\lambda} & \lambda \\ \text{s.t.} & x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2 - \lambda \geq 0, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \text{ s.t. } (1 - x_1^2 \geq 0, 1 - x_2^2 \geq 0) \end{cases}$$

$$\xRightarrow{\text{strengthen}} \begin{cases} \sup\limits_{\lambda, \sigma_i} & \lambda \\ \text{s.t.} & x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2 - \lambda = \sigma_0 + \sigma_1 (1 - x_1^2) + \sigma_2 (1 - x_2^2), \\ & \sigma_0, \sigma_1, \sigma_2 \in \text{SOS} \end{cases}$$

对偶等价问题

- 原多项式优化问题的对偶：

$$f_{\min} = \sup_{\lambda} \{\lambda : f(\mathbf{x}) - \lambda \geq 0, \ \forall \mathbf{x} \in S\}$$

- $P_S(\mathbf{x}) := \{g(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}[\mathbf{x}] \mid g(\mathbf{x}) \geq 0, \ \forall \mathbf{x} \in S\}$

  $\rightsquigarrow$ SOS 多项式 (Parrilo 2000 & Lasserre 2001)

  $\rightsquigarrow$ SONC/SAGE 多项式 (Iliman & de Wolf 2016, Murray et al. 2021)

对偶等价问题

- 原多项式优化问题的对偶：

$$f_{\min} = \sup_{\lambda} \{\lambda : f(\mathbf{x}) - \lambda \geq 0, \ \forall \mathbf{x} \in S\}$$

- $P_S(\mathbf{x}) := \{g(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}[\mathbf{x}] \mid g(\mathbf{x}) \geq 0, \ \forall \mathbf{x} \in S\}$

  $\rightsquigarrow$ SOS 多项式 (Parrilo 2000 & Lasserre 2001)

  $\rightsquigarrow$ SONC/SAGE 多项式 (Iliman & de Wolf 2016, Murray et al. 2021)

对偶等价问题

- 原多项式优化问题的对偶：

$$f_{\min} = \sup_{\lambda} \{\lambda : f(\mathbf{x}) - \lambda \geq 0, \forall \mathbf{x} \in S\}$$

- $P_S(\mathbf{x}) := \{g(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}[\mathbf{x}] \mid g(\mathbf{x}) \geq 0, \forall \mathbf{x} \in S\}$

  $\rightsquigarrow$ SOS 多项式 (Parrilo 2000 & Lasserre 2001)

  $\rightsquigarrow$ SONC/SAGE 多项式 (Iliman & de Wolf 2016, Murray et al. 2021)

Putinar's Positivstellensatz

定理 (Putinar's Positivstellensatz, 1993)

假设 $\mathcal{Q}(\mathbf{g}) + \mathcal{I}(\mathbf{h})$ 满足*Archimedean* 条件. 如果 f 在 S 上是严格正的, 那么

$$f \in \mathcal{Q}(\mathbf{g}) + \mathcal{I}(\mathbf{h}).$$

对偶 SOS 松弛

- *r* 阶对偶 SOS 松弛： (Parrilo 2000 & Lasserre 2001)

$$\lambda_r^* := \begin{cases} \sup\limits_{\lambda} & \lambda \\ \text{s.t.} & f - \lambda \in \mathcal{Q}(\mathbf{g})_{2r} + \mathcal{I}(\mathbf{h})_{2r} \end{cases}$$

$$\Updownarrow$$

$$\lambda_r^* = \begin{cases} \sup\limits_{\lambda, \sigma_j, \tau_i} & \lambda \\ \text{s.t.} & f - \lambda = \sigma_0 + \sum_{j=1}^m \sigma_j g_j + \sum_{i=1}^{\ell} \tau_i h_i \\ & \sigma_0, \sigma_1, \ldots, \sigma_m \in \Sigma[\mathbf{x}], \tau_1, \ldots, \tau_\ell \in \mathbb{R}[\mathbf{x}] \\ & \deg(\sigma_0) \leq 2r, \deg(\sigma_j g_j) \leq 2r, \deg(\tau_i h_i) \leq 2r \end{cases}$$

矩-平方和松弛分层

$$
\begin{array}{ccccccc}
 & & & f_{\min} & & & \\
 & & \leq & & \leq & & \\
 & & \vdots & & \vdots & & \\
 & & \rotatebox{90}{$\leq$} & & \rotatebox{90}{$\leq$} & & \\
\color{red}{\text{（矩松弛）}} & & \lambda_r & \text{“} = \text{”} & \lambda_r^* & & \color{red}{\text{（对偶平方和松弛）}} \\
 & & \rotatebox{90}{$\leq$} & & \rotatebox{90}{$\leq$} & & \\
 & & \vdots & & \vdots & & \\
 & & \rotatebox{90}{$\leq$} & & \rotatebox{90}{$\leq$} & & \\
 & & \lambda_{r_{\min}} & \text{“} = \text{”} & \lambda_{r_{\min}}^* & &
\end{array}
$$

$$r_{\min} := \max\{\lceil \deg(f)/2 \rceil, \lceil \deg(g_1)/2 \rceil, \ldots, \lceil \deg(g_m)/2 \rceil, \lceil \deg(h_1)/2 \rceil, \ldots, \lceil \deg(h_\ell)/2 \rceil\}$$

二元优化问题

$$\begin{cases} \inf\limits_{\mathbf{x}} & \mathbf{x} Q \mathbf{x}^\intercal \\ \text{s.t.} & x_i^2 = 1, \quad i = 1, \ldots, n \end{cases} \color{red}{\Longleftrightarrow} \begin{cases} \inf\limits_{X} & \langle Q, X \rangle \\ \text{s.t.} & X = \mathbf{x}^\intercal \mathbf{x} \succeq 0 \\ & X_{ii} = 1, \quad i = 1, \ldots, n \end{cases}$$

$$\color{red}{\Longleftrightarrow} \begin{cases} \inf\limits_{X} & \langle Q, X \rangle \\ \text{s.t.} & X \succeq 0, \quad \operatorname{rank}(X) = 1 \\ & X_{ii} = 1, \quad i = 1, \ldots, n \end{cases} \color{red}{\xRightarrow{\text{relax}}} \begin{cases} \inf\limits_{X} & \langle Q, X \rangle \\ \text{s.t.} & X \succeq 0 \\ & X_{ii} = 1, \quad i = 1, \ldots, n \end{cases}$$

强对偶性

定理

如果下述条件之一成立：

- 可行域 S 有内点；
- 多项式优化问题存在球（面）约束，

则多项式优化问题的矩松弛和对偶平方和松弛满足强对偶性，即有 $\lambda_r = \lambda_r^*$.

渐进收敛性与有限收敛性

- 假设 Archimedean 条件成立：
  - $\lambda_r \nearrow f_{\min}$ 和 $\lambda_r^* \nearrow f_{\min}$ 当 $r \to \infty$（**Putinar's Positivstellensatz，1993**）
  - 如果多项式优化问题有唯一最优解 $\mathbf{x}^*$，则 $\lim_{r\to\infty} L_{\mathbf{y}^r}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^*$
  - 一般地，有限收敛性成立（**Nie 2014**）

渐进收敛性与有限收敛性

- 假设 Archimedean 条件成立：
  - $\lambda_r \nearrow f_{\min}$ 和 $\lambda_r^* \nearrow f_{\min}$ 当 $r \to \infty$（**Putinar's Positivstellensatz, 1993**）
  - 如果多项式优化问题有唯一最优解 $\mathbf{x}^*$，则$\lim_{r\to\infty} L_{\mathbf{y}^r}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^*$
  - 一般地，有限收敛性成立（**Nie 2014**）

渐进收敛性与有限收敛性

- 假设 Archimedean 条件成立:
  - $\lambda_r \nearrow f_{\min}$ 和 $\lambda_r^* \nearrow f_{\min}$ 当 $r \to \infty$（**Putinar's Positivstellensatz, 1993**）
  - 如果多项式优化问题有唯一最优解 $\mathbf{x}^*$, 则$\lim_{r\to\infty} L_{\mathbf{y}^r}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^*$
  - 一般地, 有限收敛性成立（**Nie 2014**）

检测全局最优性和提取全局最优解

定理

设 $\mathbf{y}$ 是 r 阶矩松弛的一个最优解.

- 如果$\operatorname{rank} \mathbf{M}_{r_{\min}}(\mathbf{y}) = 1$，则

  (i) $\lambda_r = f_{\min}$;

  (ii) 可提取 1 个全局最优解.

- 如果存在 $r_{\min} \le r' \le r$ 使得$\operatorname{rank} \mathbf{M}_{r'}(\mathbf{y}) = \operatorname{rank} \mathbf{M}_{r'-d_S}(\mathbf{y})$, 则

  (i) $\lambda_r = f_{\min}$;

  (ii) 可提取 $\operatorname{rank} \mathbf{M}_{r'}(\mathbf{y})$ 个全局最优解.

➤ $d_S := \max\{d_1^g, \ldots, d_m^g, d_1^h, \ldots, d_\ell^h\}$ $(d_i^h := \lceil \deg(h_i)/2 \rceil)$

有限收敛性

定理

假设 $\mathcal{V}_{\mathbb{R}}(\mathcal{I}(\mathbf{h}))$ 是有限个点. 则存在 $r \in \mathbb{N}$ 使得$\lambda_r = f_{\min}$.

定理

假设 $S = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g_1(\mathbf{x}) \geq 0, \ldots, g_m(\mathbf{x}) \geq 0\}$，且 f 和 $-g_j$ 是凸的. 假定 *Archimedean* 条件和 *Slater* 条件成立，且 $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*) \succ 0$, 对每个全局最优解 $\mathbf{x}^* \in S$. 则存在 $r \in \mathbb{N}$ 使得$\lambda_r = f_{\min}$.

SOS-凸

- SOS 矩阵： $F(\mathbf{x}) = R(\mathbf{x})^\intercal R(\mathbf{x})$
- SOS-凸： $\nabla^2 f$ 是 SOS 矩阵

定理

假设 $S = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g_1(\mathbf{x}) \geq 0, \ldots, g_m(\mathbf{x}) \geq 0\}$，且 f 和 $-g_j$ 是 *SOS-凸*的. 假定 *Slater* 条件成立. 则$\lambda_{r_{\min}} = \lambda^*_{r_{\min}} = f_{\min}$.

矩-平方和分层的理论研究

- **收敛速率**：紧集、球面、单形、超立方体 (Klerk & Laurent)
- **近似比**：一阶 $\rightsquigarrow$ 最大割问题 ≈ 0.878 (Goemans & Williamson, 1995)
- **紧性**：一阶、二阶（秩 1 矩阵补全）、高阶 (Hua & Qu, 2021)
- **加强**：Lagrange 乘子的多项式表达 (Nie, 2019)

矩-平方和分层的计算瓶颈

- r 阶 SOS 松弛对应 SDP 问题的规模：
  - PSD 矩阵阶数： $\binom{n+r}{r}$
  - 等式约束个数： $\binom{n+2r}{2r}$
- $r=2$， $n<30$（MOSEK）
- 利用结构：
  - 商环
  - 对称性
  - 稀疏性

矩-平方和分层的计算瓶颈

- r 阶 SOS 松弛对应 SDP 问题的规模:
  - PSD 矩阵阶数: $\binom{n+r}{r}$
  - 等式约束个数: $\binom{n+2r}{2r}$
- $r = 2$, $n < 30$ (MOSEK)
- 利用结构:
  - 商环
  - 对称性
  - 稀疏性

矩-平方和分层的计算瓶颈

- r 阶 SOS 松弛对应 SDP 问题的规模：
  - PSD 矩阵阶数：$\binom{n+r}{r}$
  - 等式约束个数：$\binom{n+2r}{2r}$
- $r=2$，$n<30$（MOSEK）
- 利用结构：
  - 商环
  - 对称性
  - 稀疏性

下次课

- 项稀疏（TS）

参考文献

- Jean B. Lasserre, **Moments, Positive Polynomials and Their Applications**, Imperial College Press, 2010.
- Jean B. Lasserre, **An Introduction to Polynomial and Semi-Algebraic Optimization**, Cambridge University Press, 2015.
- Jie Wang and Victor Magron, **Sparse Polynomial Optimization: Theory and Practice**, World Scientific Publishing, 2023.

更多信息见个人主页

https://wangjie212.github.io/jiewang