

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

测度

给定集合 $A \subseteq \mathbb{R}^n$:

- $\mathcal{M}(A)$: 支撑在 A 上的有限符号 Borel 测度
- 测度 $\mu \in \mathcal{M}(A)$ 的支撑集:

$$\text{supp}(\mu) := \text{cl}(\{x \in A \mid \mu(B) \neq 0, \forall B \text{ 是 } x \text{ 的开邻域}\})$$

- $\mathcal{M}_+(A)$: 支撑在 A 上的有限 Borel 测度

原子测度 (atomic measure)

- Dirac 测度 $\delta_{\mathbf{x}}$: $\delta_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = 1$, $\delta_{\mathbf{x}}(\mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{x}\}) = 0$

- s -原子测度:

$$\mu = \sum_{i=1}^s \lambda_i \delta_{\mathbf{x}_i}, \quad \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s \in \mathbb{R}^n, \lambda_1, \dots, \lambda_s > 0, \sum_{i=1}^s \lambda_i = 1$$

- 矩 (moment): $y_{\alpha} = \int \mathbf{x}^{\alpha} d\mu$, $\alpha \in \mathbb{N}^n$

矩问题

- 基础半代数集 $K := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g_1(\mathbf{x}) \geq 0, \dots, g_m(\mathbf{x}) \geq 0\}$

全矩问题

给定伪矩序列 $y = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \subseteq \mathbb{R}$, 是否存在支撑在 K 上的有限 Borel 测度 μ (表示测度) 使得 $y_\alpha = \int \mathbf{x}^\alpha d\mu, \forall \alpha \in \mathbb{N}^n$?

截断矩问题

给定伪矩序列 $y = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathcal{A}} \subseteq \mathbb{R}$, 是否存在支撑在 K 上的有限 Borel 测度 μ (表示测度) 使得 $y_\alpha = \int \mathbf{x}^\alpha d\mu, \forall \alpha \in \mathcal{A}$?

Riesz 线性泛函

- 给定伪矩序列 $y = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \subseteq \mathbb{R}$, 定义 Riesz 线性泛函 $L_y : \mathbb{R}[\mathbf{x}] \rightarrow \mathbb{R}$:

$$f \left(= \sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{x}^{\alpha} \right) \mapsto L_y(f) = \sum_{\alpha} f_{\alpha} y_{\alpha}, \quad \forall f \in \mathbb{R}[\mathbf{x}]$$

定理 (Riesz–Haviland)

给定 $y = (y_{\alpha})_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \subseteq \mathbb{R}$, 假设 $K \subseteq \mathbb{R}^n$ 是闭的. 则 y 存在支撑在 K 上的 Borel 表示测度当且仅当 $L_y(f) \geq 0, \forall f \in \mathcal{P}(K)$ (K 上的非负多项式) .

矩方阵和局部化矩阵

- $\mathbf{y} = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \subseteq \mathbb{R}$
- $\mathbb{N}_r^n := \{\alpha \in \mathbb{N}^n \mid |\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i \leq r\}$
- r 阶矩方阵 (moment matrix) $\mathbf{M}_r(\mathbf{y})$:

$$[\mathbf{M}_r(\mathbf{y})]_{\beta\gamma} := L_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}^{\beta+\gamma}) = y_{\beta+\gamma}, \quad \forall \beta, \gamma \in \mathbb{N}_r^n$$

- 给定 $g = \sum_{\alpha} g_{\alpha} \mathbf{x}^{\alpha}$, r 阶局部化矩阵 (localizing matrix) $\mathbf{M}_r(g\mathbf{y})$:

$$[\mathbf{M}_r(g\mathbf{y})]_{\beta\gamma} := L_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}^{\beta+\gamma} g) = \sum_{\alpha} g_{\alpha} y_{\alpha+\beta+\gamma}, \quad \forall \beta, \gamma \in \mathbb{N}_r^n$$

矩方阵和局部化矩阵

- $\mathbf{y} = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \subseteq \mathbb{R}$
- $\mathbb{N}_r^n := \{\alpha \in \mathbb{N}^n \mid |\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i \leq r\}$
- r 阶矩方阵 (moment matrix) $\mathbf{M}_r(\mathbf{y})$:

$$[\mathbf{M}_r(\mathbf{y})]_{\beta\gamma} := L_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}^{\beta+\gamma}) = y_{\beta+\gamma}, \quad \forall \beta, \gamma \in \mathbb{N}_r^n$$

- 给定 $g = \sum_{\alpha} g_{\alpha} \mathbf{x}^{\alpha}$, r 阶局部化矩阵 (localizing matrix) $\mathbf{M}_r(g\mathbf{y})$:

$$[\mathbf{M}_r(g\mathbf{y})]_{\beta\gamma} := L_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}^{\beta+\gamma} g) = \sum_{\alpha} g_{\alpha} y_{\alpha+\beta+\gamma}, \quad \forall \beta, \gamma \in \mathbb{N}_r^n$$

矩方阵和局部化矩阵

- $\mathbf{y} = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \subseteq \mathbb{R}$
- $\mathbb{N}_r^n := \{\alpha \in \mathbb{N}^n \mid |\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i \leq r\}$
- r 阶矩方阵 (moment matrix) $\mathbf{M}_r(\mathbf{y})$:

$$[\mathbf{M}_r(\mathbf{y})]_{\beta\gamma} := L_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}^{\beta+\gamma}) = y_{\beta+\gamma}, \quad \forall \beta, \gamma \in \mathbb{N}_r^n$$

- 给定 $g = \sum_{\alpha} g_{\alpha} \mathbf{x}^{\alpha}$, r 阶局部化矩阵 (localizing matrix) $\mathbf{M}_r(g\mathbf{y})$:

$$[\mathbf{M}_r(g\mathbf{y})]_{\beta\gamma} := L_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}^{\beta+\gamma} g) = \sum_{\alpha} g_{\alpha} y_{\alpha+\beta+\gamma}, \quad \forall \beta, \gamma \in \mathbb{N}_r^n$$

矩方阵和局部化矩阵：例子

- $\mathbf{x} = x, g = 1 - x^2$:

$$\mathbf{M}_2(\mathbf{y}) = \begin{array}{c} 1 \\ x \\ x^2 \end{array} \begin{array}{ccc} & 1 & x & x^2 \\ \begin{array}{c} 1 \\ x \\ x^2 \end{array} & \begin{bmatrix} y_0 & y_1 & y_2 \\ y_1 & y_2 & y_3 \\ y_2 & y_3 & y_4 \end{bmatrix} \end{array}, \quad \mathbf{M}_1(g\mathbf{y}) = \begin{array}{c} 1 \\ x \end{array} \begin{array}{cc} & 1 & x \\ \begin{array}{c} 1 \\ x \end{array} & \begin{bmatrix} y_0 - y_2 & y_1 - y_3 \\ y_1 - y_3 & y_2 - y_4 \end{bmatrix} \end{array}$$

矩方阵和局部化矩阵：例子

- $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$, $g = x_1 - x_1^2$:

$$M_2(\mathbf{y}) = \begin{array}{c} \\ 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1 x_2 \\ x_2^2 \end{array} \begin{array}{c} 1 \quad x_1 \quad x_2 \quad x_1^2 \quad x_1 x_2 \quad x_2^2 \\ \left[\begin{array}{cc|cc|cc} y_{0,0} & & y_{1,0} & y_{0,1} & y_{2,0} & y_{1,1} & y_{0,2} \\ - & - & - & - & - & - & \\ y_{1,0} & & y_{2,0} & y_{1,1} & y_{3,0} & y_{2,1} & y_{1,2} \\ y_{0,1} & & y_{1,1} & y_{0,2} & y_{2,1} & y_{1,2} & y_{0,3} \\ - & - & - & - & - & - & \\ y_{2,0} & & y_{3,0} & y_{2,1} & y_{4,0} & y_{3,1} & y_{2,2} \\ y_{1,1} & & y_{2,1} & y_{1,2} & y_{3,1} & y_{2,2} & y_{1,3} \\ y_{0,2} & & y_{1,2} & y_{0,3} & y_{2,2} & y_{1,3} & y_{0,4} \end{array} \right] \end{array}$$

$$M_1(g\mathbf{y}) = \begin{array}{c} \\ 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{array} \begin{array}{c} 1 \quad x_1 \quad x_2 \\ \left[\begin{array}{cc|cc} y_{1,0} - y_{2,0} & y_{2,0} - y_{3,0} & y_{1,1} - y_{2,1} & \\ y_{2,0} - y_{3,0} & y_{3,0} - y_{4,0} & y_{2,1} - y_{3,1} & \\ y_{1,1} - y_{2,1} & y_{2,1} - y_{3,1} & y_{1,2} - y_{2,2} & \end{array} \right] \end{array}$$

全矩问题的解：Archimedean 条件

- 基础半代数集 $K := \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_1(x) \geq 0, \dots, g_m(x) \geq 0\}$
- Archimedean 条件: 存在 $N > 0$ 使得 $N - \|x\|_2^2 \in \mathcal{Q}(g) \rightsquigarrow K$ 是紧集

定理 (Putinar's Positivstellensatz 对偶)

给定 $y = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \subseteq \mathbb{R}$, 假设 Archimedean 条件成立. 则 y 存在支撑在 K 上的 Borel 表示测度当且仅当 $M_r(y) \succeq 0, M_r(g_i y) \succeq 0$, 对所有的 $i \in [m]$ 和 $r \in \mathbb{N}$.

全矩问题的解：紧集

- 基础半代数集 $K := \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_1(x) \geq 0, \dots, g_m(x) \geq 0\}$

定理 (Schmüdgen's Positivstellensatz 对偶)

给定 $y = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \subseteq \mathbb{R}$, 假设 K 是紧的. 则 y 存在支撑在 K 上的 Borel 表示测度当且仅当 $M_r(y) \succeq 0, M_r(g_I y) \succeq 0$, 对所有的 $I \subseteq [m]$ 和 $r \in \mathbb{N}$.
($g_I := \prod_{i \in I} g_i$)

平坦扩张

- 给定 $\mathbf{y} = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}_{2r}^n} \subseteq \mathbb{R}$ 满足 $\mathbf{M}_r(\mathbf{y}) \succeq 0$
- 平坦扩张: $\mathbf{M}_{r+1}(\mathbf{y}) \succeq 0$, $\text{rank}(\mathbf{M}_r(\mathbf{y})) = \text{rank}(\mathbf{M}_{r+1}(\mathbf{y}))$

定理 (Curto & Fialkow, 1991)

给定 $\mathbf{y} = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}_{2r}^n} \subseteq \mathbb{R}$. 则 \mathbf{y} 存在 $\text{rank}(\mathbf{M}_r(\mathbf{y}))$ -原子表示测度当且仅当 $\mathbf{M}_r(\mathbf{y}) \succeq 0$ 且 $\mathbf{M}_r(\mathbf{y})$ 存在平坦扩张 $\mathbf{M}_{r+1}(\mathbf{y})$.

截断 K-矩问题的解

- $d_i := \lceil \frac{\deg(g_i)}{2} \rceil, i \in [m]$
- $d_K := \max\{d_1, \dots, d_m\}$

定理 (Curto & Fialkow, 2000)

给定 $y = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}_{2r}^n} \subseteq \mathbb{R}$. 则 y 存在支撑在 K 上的 $\text{rank}(\mathbf{M}_r(y))$ -原子表示测度当且仅当

- ① $\mathbf{M}_r(y) \succeq 0, \mathbf{M}_{r-d_i}(g_i y) \succeq 0, i \in [m];$
- ② $\text{rank}(\mathbf{M}_r(y)) = \text{rank}(\mathbf{M}_{r-d_K}(y)).$

原子测度表示

- $f \in \mathbb{R}[\mathbf{x}]_r$, 令 \mathbf{f} 是 f 的系数向量 ($f = \mathbf{f}^\top [\mathbf{x}]_r$)
- $\ker(\mathbf{M}_r(\mathbf{y})) := \{f \in \mathbb{R}[\mathbf{x}]_r \mid \mathbf{M}_r(\mathbf{y})\mathbf{f} = \mathbf{0}\}$

定理

假设 $\mathbf{M}_r(\mathbf{y}) \succeq 0$ 且 $\text{rank}(\mathbf{M}_r(\mathbf{y})) = \text{rank}(\mathbf{M}_{r-1}(\mathbf{y})) =: s$. 则 \mathbf{y} 存在原子测度表示: $\mu = \sum_{i=1}^s \lambda_i \delta_{\mathbf{x}_i}$, 且 $(\ker(\mathbf{M}_r(\mathbf{y}))) = \mathcal{I}(\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s\})$ 是一个零维实根理想.

乘法算子与乘法矩阵

- $\mathbf{M}_r(\mathbf{y}) \succeq 0$ 且 $\text{rank}(\mathbf{M}_r(\mathbf{y})) = \text{rank}(\mathbf{M}_{r-1}(\mathbf{y}))$
- 定义乘法算子 $\mathcal{M}_i, i \in [n]$:

$$\mathcal{M}_i: \mathbb{R}[\mathbf{x}]/(\ker(\mathbf{M}_r(\mathbf{y}))) \longrightarrow \mathbb{R}[\mathbf{x}]/(\ker(\mathbf{M}_r(\mathbf{y})))$$

$$f \longmapsto x_i \cdot f$$

- 乘法矩阵 M_1, \dots, M_n : 乘法算子 $\mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_n$ 在某个基下的表示矩阵

Stickelberger's Theorem

定理 (Stickelberger's Theorem)

设 $I \subseteq \mathbb{R}[\mathbf{x}]$ 是一个零维理想. 则 I 的零点集是由乘法矩阵 $\{M_i\}_{i=1}^n$ 所有公共特征值形成的点集, 即,

$$\mathcal{V}(I) = \{(\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{C}^n \mid \exists \mathbf{v} \in \mathbb{C}^n \text{ s.t. } \forall i \in [n], M_i \mathbf{v} = \xi_i \mathbf{v}\}.$$

提取支撑点集 (Klep, Povh, & Volčič, 2018)

假设 $\mathbf{M}_r(\mathbf{y}) \succeq 0$ 且 $\text{rank}(\mathbf{M}_r(\mathbf{y})) = \text{rank}(\mathbf{M}_{r-1}(\mathbf{y})) = s$

- Step 1: 计算奇异值分解 $\mathbf{M}_{r-1}(\mathbf{y}) = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}^\top$, 其中 \mathbf{D} 是正定对角阵, $\mathbf{U}^\top \mathbf{U} = \mathbf{I}$
- Step 2: 令 $M_i = \sqrt{\mathbf{D}}^{-1} \mathbf{U}^\top \mathbf{M}_{r-1}(\mathbf{x}_i \mathbf{y}) \mathbf{U} \sqrt{\mathbf{D}}^{-1}$, $i = 1, \dots, n$
- Step 3: 令 $M = \sum_{i=1}^n c_i M_i$, 其中 c_i 是随机生成的系数
- Step 4: 计算谱分解 $M = \mathbf{Q}\mathbf{T}\mathbf{Q}^\top$
- Step 5: 令 $\mathbf{x}_j := (\mathbf{q}_j^\top M_i \mathbf{q}_j)_{i=1}^n$, $j \in [s]$, 其中 $\{\mathbf{q}_j\}_{1 \leq j \leq s}$ 是 \mathbf{Q} 的列向量

例子

- $n = 2$:

$$\mathbf{M}_2(\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 2 & 0 & 3 \\ 1 & 2 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 3 & 0 & 0 & 9 \\ 2 & 4 & 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 9 & 0 & 0 & 27 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_1(\mathbf{x}_1\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 0 \\ 4 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{M}_1(\mathbf{x}_2\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 9 \\ 0 & 0 & 0 \\ 9 & 0 & 27 \end{bmatrix}$$

例子

- 提取三个支撑点：

$$\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

截断 K-矩问题的解

- $d_i := \lceil \frac{\deg(g_i)}{2} \rceil, i \in [m]$
- $d_K := \max\{d_1, \dots, d_m\}$

定理 (Curto & Fialkow, 2000)

给定 $y = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}_{2r}^n} \subseteq \mathbb{R}$. 若

- ① $M_r(y) \succeq 0, M_{r-d_i}(g_i y) \succeq 0, i \in [m];$
- ② $\text{rank}(M_r(y)) = \text{rank}(M_{r-d_K}(y)),$

则 y 存在原子测度表示: $\mu = \sum_{i=1}^s \lambda_i \delta_{x_i}$, 且 $\{x_1, \dots, x_s\} \subseteq K$.

下次课

- 矩-平方和松弛分层

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.
- Igor Klep, Janez Povh, and Volčič, **Minimizer Extraction in Polynomial Optimization Is Robust**, SIAM Journal on Optimization, 2018.

更多信息见个人主页

<https://wangjie212.github.io/jiewang>