

分类号 _____

密级 _____

UDC _____

编号 _____

中国科学院研究生院

博士学位论文

基于多项式平方和与极簇的多项式优化方法

郭峰

指导教师 _____ 支丽红 研究员

中国科学院数学与系统科学研究院

申请学位级别 博士 学科专业名称 应用数学

论文提交日期 2011 年 10 月 论文答辩日期 2011 年 11 月

培养单位 _____ 中国科学院数学与系统科学研究院

学位授予单位 _____ 中国科学院研究生院

答辩委员会主席 _____

Polynomial Optimization Based on Sums of Squares of Polynomials and Polar Variety

Feng Guo

Supervisor:

Professor Lihong Zhi

Key Laboratory of Mathematics Mechanization
Institute of Systems Science
Academy of Mathematics and Systems Science
Chinese Academy of Sciences

December, 2011

摘要

给定有理数域上的 n 元多项式 f , 假定其具有有限下界, 考虑计算其在实数域上的全局下确界 f^* . 更一般的, 考虑计算 f 在由一组多项式等式限制条件定义的可行域上的下确界 f^* . 假设可行域是光滑等维的, 并且由等式限制条件中的多项式定义的理想是根理想. 我们构造了一组多项式集合及其相应的截断代数簇. 其中每一组多项式集合都与某一线性子空间上投射函数的关键点轨迹相关. 我们证明在一般坐标系下, f 在可行域上正定当且仅当在构造的每一个截断代数簇上, f 等价于多项式平方和. 因此对于 f^* 的下界我们有基于半定规划 (SDP) 的代数验证. 为降低问题的规模, 我们还研究如何减少添加的多项式限制条件的个数. 通过引入新的变量, 本方法可以用于带不等式约束条件的多项式优化问题. 与同类方法相比较, 本方法对可行域的假设条件更弱且不要求下确界可以达到. 另外, 本方法添加的多项式限制条件更少且其次数更低, 因此相应的 SDP 问题规模更小. 我们尝试利用问题稀疏性解决多项式全局优化问题中下确界为渐近值时发生的数值问题.

为了利用 Hilbert-Artin 表达式验证给定多项式为非负多项式, 我们需要固定分母多项式次数或者其支撑单项式集. 对于给定的次数或支撑单项式集, 我们利用半定规划的 Farkas 引理给出不存在这样的表达式的可信验证方法. 作为特殊情形, 本方法可用于多项式没有平方和分解的可信验证. 我们给出了求解有理验证元的算法并从多项式环上线性型的角度诠释了上述验证方法. 利用本方法, 我们发现了第一组不能写成分母次数 ≤ 2 的两个多项式平方和比值的非负多项式的例子.

如上所述, 为计算或验证多项式在可行域上的下确界, 我们将其松弛为一系列的半定规划问题. 为了克服有限精度计算的 Matlab 软件包带来的的数值误差, 我们在符号计算软件 Maple 中开发了可以高精度求解 SDP 问题的软件包 SDPTools. 作为应用, SDPTools 提供了用于求解和验证有理函数的全局下界的功能. 对于 Rump's Model 问题, 我们得到迄今为止最好的计算结果. 为了考虑多项式优化问题的稀疏结构, SDPTools 可以用来求解任意维度上给定有限点集的凸包.

关键词: 多项式优化, 平方和, 极簇, Hilbert-Artin 表达式, 高精度

Abstract

Given a polynomial f with rational coefficients and n variables, we consider the problem of computing its global infimum over the reals. More general, we consider the problem of computing its infimum over a feasible set defined by several polynomial equality constraints. We assume that the feasible set is smooth and equidimensional, as well as the ideal generated by the polynomials in the constraints is radical. We construct families of polynomials and associated truncated varieties, each of which is related to the section of linear subspace with the critical locus of linear projection. Up to a generic linear transformation of coordinates, we prove that f is positive over the feasible set if and only if it can be expressed as a sum of squares of polynomials (SOS) on each truncated variety that we construct. Hence, we can obtain algebraic certificates for lower bounds on the infimum using semidefinite programs (SDP). We also study how to decrease the number of the extra constraints we add. By importing new variables, our method can be applied to deal with polynomial optimization with inequality constraints. Comparing with other approaches, we need weaker assumption on the feasible set and do not require that the infimum is attainable. In addition, our method adds fewer polynomial constraints of lower degree. For global optimization problem, we discuss how to exploit the sparsity of the problem to overcome the ill-conditionedness of associated SDP when the infimum is not attainable .

In order to certify that a given polynomial is nonnegative by its Hilbert-Artin representation, we need to fix the degree or the support set of its denominator. For a given degree or support set, if there does not exist such a representation, we give a rational certificate using Farkas Lemma for SDP. As a special case, we can certify that a given polynomial is not SOS with our method. We investigate an interpretation of our certification in view of linear forms on the ring of real polynomials. An algorithm to compute the certificate is given. In numerical experiments, we find the first set of polynomials which are nonnegative but can not be written as a ratio of sums of squares with the degree of denominator less

than or equal to 2.

To compute or certify the infimum of a given polynomial over a feasible set, we formulate it as a serial of SDPs. In order to reduce the numerical error that occurs when we are running fixed precision SDP solvers in Matlab, we develop a Maple package SDPTTools for solving SDP in high precision. For more applications, SDPTTools contains functions to certify the global optimum of rational functions. For Rump's Model Problem, we obtain the best numerical results so far. In order to explore the sparsity of polynomial optimization, SDPTTools provides functions to compute the convex hull of given finite points in a real vector space of any dimension.

Keywords: Polynomial optimization, sums of squares, polar variety, Hilbert-Artin representation, high precision

目 录

| | |
|------------------------------|-----|
| 摘要 | i |
| Abstract | iii |
| 目录 | v |
| 第一章 引言 | 1 |
| 1.1 问题和研究概述 | 1 |
| 1.2 本论文的贡献及结构 | 6 |
| 第二章 预备知识 | 9 |
| 2.1 半定规划 | 9 |
| 2.2 平方和及矩量方法 | 10 |
| 2.3 代数几何基本知识 | 12 |
| 第三章 多项式全局优化问题 | 15 |
| 3.1 前言 | 15 |
| 3.2 基于平方和的代数验证 | 19 |
| 3.3 数值试验 | 22 |
| 3.4 下确界为渐近值的情形 | 23 |
| 第四章 多项式等式约束优化问题 | 33 |
| 4.1 前言 | 33 |
| 4.2 一般性引理与正定性的代数验证 | 35 |
| 4.2.1 一般性命题及其证明 | 35 |
| 4.2.2 基于平方和的代数验证 | 39 |
| 4.3 行列式环与等式约束个数 | 43 |
| 4.4 数值实验 | 46 |

| | |
|---|-----------|
| 第五章 非负多项式的 Hilbert-Artin 表达式 | 51 |
| 5.1 前言 | 51 |
| 5.2 非负多项式的 Hilbert-Artin 表达式 | 53 |
| 5.2.1 有理函数平方和与半定规划 | 53 |
| 5.2.2 对偶问题与可信验证 | 54 |
| 5.2.3 Moment 矩阵和多项式环上的线性型 | 57 |
| 5.3 验证元的实际计算 | 58 |
| 5.3.1 利用 Big- \mathcal{M} 方法求解验证元 | 58 |
| 5.3.2 考虑问题稀疏性 | 60 |
| 5.4 非负有理函数的 Hilbert-Artin 表达式 | 61 |
| 5.5 数值试验 | 62 |
| 第六章 基于Maple的高精度求解SDP软件包 | 65 |
| 6.1 前言 | 65 |
| 6.2 原始对偶势函数下降算法 | 66 |
| 6.3 在有理函数全局最优值可信验证中的应用 | 70 |
| 6.3.1 有理函数全局最优值的可信验证 | 70 |
| 6.3.2 例子: Rump's Model 问题 | 75 |
| 第七章 结论与展望 | 77 |
| 参考文献 | 79 |
| 发表文章目录 | 87 |
| 简历 | 89 |
| 致谢 | 91 |

表 格

| | | |
|-----|---|----|
| 3.1 | $m_e(\bar{X}) = [1, X_1, X_2, X_1^2, X_1X_2, X_2^2]^T$ 时得到的下界 | 25 |
| 3.2 | $m_e(\bar{X}) = [1, X_2, X_1X_2]^T$ 时的计算结果 | 27 |
| 3.3 | 利用 Matlab 中 <code>solvesos</code> 取得的结果 | 27 |
| 6.1 | Rump's Model 问题可验证的下界 | 76 |

插 图

| | |
|---|----|
| 3.1 多项式 f 的牛顿多面体(左), 及其 SOS 表达式中可能出现的单项式(右) | 27 |
| 4.1 所有由 2 阶子式构成的链的集合. | 45 |
| 4.2 所有由 2 阶和 3 阶子式构成的链的集合. | 45 |
| 6.1 面搜索的目标函数 | 68 |
| 6.2 不同权重 v 对应的面搜索目标函数 | 70 |
| 6.3 SOS 问题有理化 | 72 |

第一章 引言

1.1 问题和研究概述

考虑多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}] := \mathbb{R}[X_1, \dots, X_n]$ 在实数域上的全局最优问题

$$f^* := \inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x). \quad (1.1)$$

更一般的, 考虑下列带约束条件的多项式优化问题:

$$\begin{aligned} f^* &:= \inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ s.t. \quad f_1(x) &\geq 0, \dots, f_p(x) \geq 0, \end{aligned} \quad (1.2)$$

其中多项式 $f_1, \dots, f_p \in \mathbb{R}[\bar{X}]$. 首先看上述问题的几个实例.

偕正矩阵判定问题 (Testing Matrix Copositivity): 给定矩阵 $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 当且仅当对于任何 $x \in \mathbb{R}_+^n$, 满足 $x^T M x \geq 0$ 时, 称 M 为偕正的 (Copositive); 等价的, 当且仅当多项式 $f := \sum_{i,j=1}^n X_i^2 X_j^2 M_{i,j}$ 的全局最优值 $f^* = 0$ 时, 称 M 为偕正的. 偕正矩阵判定问题为 NP 完备问题, 参见 [43].

分割问题 (Partition Problem): 给定正整数序列 (a_1, \dots, a_n) , 当且仅当存在 $x \in \{\pm 1\}^n$ 使得 $x^T a = 0$ 时, 称 (a_1, \dots, a_n) 可分; 等价的, 当且仅当多项式 $f := (\sum_{i=1}^n a_i X_i)^2 + \sum_{i=1}^n (X_i^2 - 1)^2$ 的全局最优值 $f^* = 0$ 时, 称序列 (a_1, \dots, a_n) 可分. 分割问题为 NP 完备问题, 参见 [18].

(0/1) 线性规划问题: 给定矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 和向量 $b \in \mathbb{R}^m$, $c \in \mathbb{R}^n$, (0/1) 线性规划问题为:

$$\min c^T x \quad s.t. \quad Ax \leq b, x_i^2 = x_i, \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

此问题是已知的 NP 难问题.

其他实例还有稳定集问题 (Stable Set Problem), 最大割问题 (Max-Cut Problem), 等等. 上述实例说明 (1.1) 和 (1.2) 为非凸的, NP 难的问题.

近年来, 关于问题 (1.1) 和 (1.2) 的凸松弛方法的研究成为热门课题. 例如 Lasserre [33, 34], Nesterov [44], Parrilo [49, 50], Parrilo 和 Sturm [51] 以及

Shor [65, 66, 67]. 这些松弛方法都是基于多项式平方和分解 (Sums of Squares, 简称 SOS) 和其对偶的矩量 (Moment) 理论所构建. 判定给定多项式是否具有平方和分解可以转化为半定规划 (Semidefinite Programming, 简称 SDP) 问题.

半定规划是一类凸规划问题. 由于在多项式时间内可以判定一个给定有理数域上的矩阵是否为半正定矩阵 (例如, 应用 Gaussian 消去法), 应用 Ellipsoid 方法, 我们可以在多项式时间内将半定规划问题求解到任意给定精度 (参见 [19]). 然而由于其运行时间过长, 基于 Ellipsoid 方法的算法在实际计算时并不实用. 内点法的出现使得半定规划在实际运用中更为广泛. 如下关于内点法的描述, 参见文献 [70].

- 实际高效性: 诸多系统和控制中的应用表明对于小规模问题, 内点法可以和其他方法相媲美; 而对于中大型问题, 内点法则明显优于其他方法. 粗略地讲, 应用内点法, 给定的半定规划总可以在 5 – 50 个迭代次数内得到求解; 而每一迭代过程主要求解一个与原问题同规模的最小二乘问题.
- 理论高效性: 应用内点法, 理论上求解半定规划到任意给定精度所需的计算量由以问题规模为变量的多项式所控制.
- 易于利用问题结构: 如上所述, 内点法在每一迭代过程中主要求解一个最小二乘问题. 而最小二乘问题可以通过利用其特殊结构的方法高效求解, 例如共轭梯度法.

另外, Matlab 中有许多高效的 SDP 软件包, 比如 SeDuMi [68], SDPT3 [69], DSDP [7] 等等.

下面我们简要介绍一些已有的利用平方和与半定规划求解多项式优化问题的工作. 首先, 我们考虑全局优化问题 $f^* := \inf\{f(x) \mid x \in \mathbb{R}^n\}$. 如下的介绍可以参考文献 [62].

平方和与非负多项式 我们可以通过多项式平方和分解得到 f^* 的下界:

$$\begin{aligned} f^{\text{sos}} &:= \sup\{a \in \mathbb{R} \mid f - a \text{ 为 } \mathbb{R}[\bar{X}] \text{ 中的多项式平方和}\} \\ &\in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}. \end{aligned}$$

上述问题可以转化为 SDP 问题. 然而并非所有的非负多项式都具有平方和分解, 例如 Motzkin 多项式 $f(X_1, X_2) = X_1^4 X_2^2 + X_1^2 X_2^4 + 1 - 3X_1^2 X_2^2$, 其证明参见 [55].

文献 [8] 中指出, 对于固定次数 $e \geq 4$, 在所有 e 次多项式集合中, 多项式平方和与非负多项式的比例随着多项式变量的增加而趋向于 0.

正零点定理 在 1900 年法国巴黎的国际数学家大会上, Hilbert 提出下面问题: 对于任何非负多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 是否存在有理函数 $g_1, \dots, g_s \in \mathbb{R}(\bar{X})$ 使得 $f = \sum_{i=1}^s g_i^2$? 1927 年, 奥地利数学家 Emil Artin 对这一问题给出了肯定的证明并以此为实代数理论的发展奠定了基础. 后来 Artin 的证明得到不断地改进和发展, 其中之一即为正零点定理. 以下定理是正零点定理的特殊情形.

定理 1.1 (Krivine). 对于多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 下面结论等价:

1. 在 \mathbb{R}^n 上, $f > 0$;
2. 存在多项式平方和 $s, t \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 使得 $sf = 1 + t$.

由以上定理知

$$f^* = \sup \{a \in \mathbb{R} \mid \text{存在多项式平方和 } s, t \in \mathbb{R}[\bar{X}] \text{ 使得 } sf = 1 + t\}. \quad (1.3)$$

然而, 因为在等式左边存在两个未知量 s 和 a 的乘积, 我们不能将其转化为 SDP 问题. 如果我们固定 $a \in \mathbb{R}$, 利用 SDP 求解上式中的多项式 s 和 t 等价于验证 a 为多项式 f 的严格下界. 在这一过程中, 我们必须不断增加多项式平方和 s, t 的次数并求解相应的 SDP.

“Big Ball” 方法 Lasserre 在 [33] 中基于下面定理提出了“Big Ball” 方法. 而此结果正是特殊情形下的 Schmüdgen 定理并最早由 Cassier 证明.

定理 1.2 (Cassier). 对多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 及 $R \in \mathbb{R}$, 下面结论等价:

- 在以原点为中心以 R 为半径的球上, $f \geq 0$;
- 任给 $\epsilon > 0$, 存在多项式平方和 $s, t \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 使得

$$f + \epsilon = s + t(R^2 - ||\bar{X}||^2).$$

其中 $||\bar{X}||^2 := X_1^2 + \dots + X_n^2 \in \mathbb{R}[\bar{X}]$.

如果我们事先知道 f 的下确界在以原点为中心以某一实数 R 为半径的球上达到, 则可以通过固定 s 和 t 的次数来得到并求解一系列的 SDP, 其最优值趋向于 f 的下确界; 如果 R 事先未知, 我们可以通过不断增加 R 来求解, 但是对每一个 R , 都需要求解一系列的 SDP, 这样无疑增大了计算量且方法收敛性未知.

高阶扰动方法 为了避免上述方法中半径 R 的选择, Lasserre 在 [35] 中提出了如下高阶扰动方法.

定理 1.3. 对于多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 下面结论等价:

1. 在 \mathbb{R}^n 上, $f > 0$;
2. 任给 $\epsilon > 0$, 存在 $r \in \mathbb{N}$ 使得

$$f + \epsilon \sum_{i=1}^n \sum_{k=0}^r \frac{X_i^{2k}}{k!} \text{ 为多项式平方和.}$$

然而在实际计算中, 对系数的微小扰动可能会引起数值问题从而使得相应的 SDP 问题难以求解.

梯度簇 (Gradient Variety) 方法 文献 [48] 中提出的梯度簇方法避免了对系数的扰动. 对多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 定义其梯度簇为

$$V(\nabla f) := \{x \in \mathbb{C}^n \mid \nabla f(x) = 0\}.$$

定义其梯度理想 (Gradient Ideal) 为由 f 所有的偏导数生成的理想:

$$\langle \nabla f \rangle := \left\langle \frac{\partial f}{\partial X_1}, \frac{\partial f}{\partial X_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial X_n} \right\rangle \subseteq \mathbb{R}[\bar{X}].$$

文献 [48] 证明了以下结论: 如果 f 在 $V\left(\frac{\partial f}{\partial X_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial X_n}\right) \cap \mathbb{R}^n$ 保持正定, 或者 f 在 $V\left(\frac{\partial f}{\partial X_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial X_n}\right) \cap \mathbb{R}^n$ 非负且 $\langle \nabla f \rangle$ 为根理想, 则模去理想 $\langle \nabla f \rangle$ 后 f 具有平方和分解. 然而当 f 的下确界为渐进值时, 梯度簇方法不能保证得到正确的结果. 例如, 考虑多项式 $f := (1 - X_1 X_2)^2 + X_2^2$. f 的下确界为 $f^* = 0$, 但是 $V(\nabla f) = \{(0, 0)\}$. 由梯度簇方法得到的结果为 $f(0, 0) = 1 \neq f^*$.

梯度触 (Principal Gradient Tentacle) 方法 为能够处理下确界为渐近值的情形, 文献 [62] 提出了梯度触的概念, 即如下集合

$$S(\nabla f) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid 1 - \|\nabla f(x)\|^2 \|x\|^2 \geq 0\}.$$

其方法的思想为考虑一个包含梯度簇的半代数集, 在这一集合上

- 非负多项式具有基于平方和的相关判定准则.
- f 的下确界与 f^* 相等.

利用其推广的 Schmüdgen 定理 (定理 3.1), [62] 中证明如果在其梯度触上保持正定的多项式具有有限个正的渐近值, 则此多项式包含在由定义其梯度触的多项式生成的亚序中. 如果假设 f 在无穷远处只有孤立的奇异点或其梯度触为紧致的, 则 f 在其梯度触上具有有限个渐近值, 从而可应用梯度触方法求解其下确界. 为了避免上述假设条件, [62] 提出了高次梯度触 (Higher Gradient Tentacle) 的概念 ([62, 定义 41]). 但相应的 SDP 问题的规模会很大, 运算量增加.

截断切簇 (Truncated Tangency Variety) 方法 为克服 [62] 中缺点, 文献 [20] 给出了截断切簇 (Truncated Tangency Variety) 方法. 对于 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 定义

$$g_{ij}(\bar{X}) := X_j \frac{\partial f}{\partial X_i} - X_i \frac{\partial f}{\partial X_j}, \quad 1 \leq i < j \leq n.$$

固定实数 $B \in f(\mathbb{R}^n)$, 定义 f 的截断切簇为

$$\Gamma_B(f) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid B - f(x) \geq 0, g_{i,j}(x) = 0, 1 \leq i, j \leq n\}.$$

利用 [62] 中推广的 Schmüdgen 定理, 以截断切簇代替梯度触, [20] 给出了截断切簇方法. 然而 $\Gamma_B(f)$ 中的等式约束个数 $\frac{n(n-1)}{2}$ 随着 n 的增加会变得很大, 从而相应 SDP 问题的规模也会变得很大.

现在考虑不等式约束优化问题 (1.2).

基于 KKT 系统的方法 文献 [16, 46] 中作者将梯度簇方法在推广到带不等式约束的多项式优化问题. 假定下确界 f^* 在问题的某个 KKT 点上达到, [16] 中证明了如果 f 在可行域上保持正定, 或者 f 在可行域上非负且其 KKT 理想为根理想, 则模去 KKT 理想后 f 具有平方和分解. 文献 [46] 再将这一方法推广, 提出了基于 Jacobian 矩阵的 SDP 松弛方法并证明此方法是有限收敛的. 然而上述方法需要假设目标多项式的下确界在某个 KKT 点处达到, 否则不能保证得到正确结果.

截断切簇方法的推广 文献 [21] 将截断切簇方法推广到带不等式约束的多项式优化问题, 定义并考虑了推广的截断切簇: 可行域的一个低维子集, 目标函数 f 其上具有有限个渐近值. 在等式约束优化问题中, 此集合与到一个给

定点, 比如 (a_1, \dots, a_n) , 的距离平方函数的关键点轨迹相关, 它由多项式集合 $f_1, \dots, f_p, f, \sum_{i=1}^n (X_i - a_i)^2$ 的 Jacobian 矩阵的所有 $n-d+2$ 阶子式所定义. 其中 d 为代数簇 $V(f_1, \dots, f_p)$ 的维数. 因此定义此集合的多项式个数较多, 方法结构较为复杂.

上述各种方法的基本思想都是将问题松弛转化为一系列的 SDP 问题, 在实际计算中, 通过有限步求解, 得到 f^* 数值上的下界. 然而在很多实际问题中, 我们往往需要得到 f^* 的准确下界或者说可信下界, 因此如何给出非负多项式的可信验证成为一个重要的问题. 此处的可信验证指的是通过某种准确的数据结构和验证算法来准确地检验给定的数学条件. 我们可以通过得到非负多项式的 Hilbert-Artin 表达式来解决这一问题. 为得到可信的平方和下界, 文献 [29, 52] 利用有理化投影, Newton 迭代等工具, 将多项式近似平方和分解转化为准确有理系数平方和分解. 文献 [30] 将 [29] 中方法推广到如何求解非负多项式的准确有理函数平方和分解, 即将给定有理系数非负多项式写为两个准确有理系数多项式平方和的比值. 首先固定分母多项式的次数或者其支撑单项式集合, 将问题转化为 SDP 问题, 然后再次利用有理化投影, Newton 迭代等工具, 得到准确表达式. 在此情形下产生的一个问题为如何事先确定分母的次数或者其支撑单项式集合. 如果对于给定次数或者其支撑单项式集合, 我们得不到准确的有理函数平方和分解, 如何可信验证目标多项式没有这样的分解?

如上文所述, 求解和验证给定多项式的下界最终需要求解相应的 SDP 问题. Matlab 中有许多高效的 SDP 软件包. 然而由于 Matlab 只能进行有限精度的计算, 所得结果往往带有很大的数值误差, 所求解只是近似地满足问题的等式或不等式限制. 在某些问题的应用中, 比如 Rump's Model 问题 ([57]), 由于数值误差的原因, 计算得到的下界比问题的上界还要大. 由于符号计算软件 Maple 可以进行任意精度的计算, 上述问题促使我们考虑如何在 Maple 中设计高精度求解 SDP 问题的软件包.

1.2 本论文的贡献及结构

相应于上节讨论, 本论文的主要结果及结构为:

1. 在第三章和第四章中, 我们给出了求解多项式全局优化和等式约束优化问

题的方法. 理论上, 我们利用推广的 Schmüdgen 定理和极簇的相关理论, 将问题松弛为一系列的半定规划问题. 本方法可用于全局或等式约束多项式优化问题中最优值为渐近值的情形, 即不要求目标多项式的下确界在可行域的有限点处达到. 通过添加新的变量, 本方法还可用于不等式约束优化问题. 和同类方法相比较, 本方法对可行域的假设条件相对更弱且易验证, 其添加的多项式限制条件更少且其次数更低, 因此相应的 SDP 问题规模更小. 在等式约束优化问题中, 我们还利用行列式环的相关理论来减少方法中添加的多项式约束条件的个数, 从而降低了问题的规模, 扩大了本方法适用的范围. 在实际应用中, 相应的数值试验显示本方法具有较好的数值稳定性, 可以得到与同类方法相当或者更好的数值结果. 在全局最优问题中, 对于同类方法实际应用到最优值为渐近值情形时产生的严重数值问题, 我们通过分析相应半定规划问题中 Moment 矩阵的结构, 找到该类数值问题的原因, 并尝试通过考虑问题的稀疏结构给出解决这一问题的方法.

2. 在第五章中, 我们考虑非负多项式在给定分母次数或者分母支撑单项式集的情形下, 其有理函数平方和分解的存在性. 在利用 Hilbert-Artin 表达式验证非负多项式的工作中, 我们必须事先固定分母多项式的次数或者其支撑单项式集, 从而得到相应半定规划问题, 然后利用有理化投影相关技术将不准确的数值解转化为有理系数的准确表达式. 如果对于给定分母次数或支撑单项式集, 非负目标多项式没有相应表达式, 我们利用半定规划情形下的 Farkas 引理, 给出其有理的验证元. 利用此方法, 我们发现了第一组不能写成分母次数 ≤ 2 的两个多项式平方和比值的非负多项式的例子. 我们同时发现, 这种对于给定次数验证表达式是否存在方法可以应用到很多其他问题. 例如, 我们可以利用正零点定理验证一组给定多项式是否具有公共实零点. 此处同样面临对于给定次数是否存在准确表达式的问题. 因此, 我们相信本文中的验证方法可以得到更广泛的应用.
3. 如前文所述, 求解和验证给定多项式的下界最终需要求解相应的 SDP 问题. Matlab 中有许多高效的 SDP 软件包. 然而由于 Matlab 只能进行有限精度的计算, 所得结果往往带有很大的数值误差, 所求解只是近似地满足问题的等式或不等式限制. 在第六章中, 我们介绍基于 Maple 可以高精度求解 SDP 问题的软件包 SDPTTools. 作为应用, SDPTTools 提供了求解和验

证有理函数的全局下界的功能. 对于 Rump's Model 问题, 我们得到迄今为止最好的计算结果. 在用于求解和验证有理函数下界的问题中, 为了考虑其稀疏结构, SDPTTools 还提供了求解任意维度上给定有限点集凸包的函数.

第二章 预备知识

在本章中, 我们简要介绍半定规划, 多项式平方和和矩量方法以及代数几何的一些基本定义和结论.

2.1 半定规划

以下关于半定规划的介绍, 可以参见文献 [45, 70, 72]. 标准的半定规划问题具有下面形式:

$$\begin{aligned} p^* := \min_{x \in \mathbb{R}^m} \quad & c^T x \\ \text{s.t.} \quad & F(x) \succeq 0, \end{aligned} \tag{2.1}$$

其中向量 $c \in \mathbb{R}^m$, 矩阵 $F(x) := F_0 + \sum_{i=1}^m x_i F_i$ 为实对称矩阵 F_0, F_1, \dots, F_m 的线性组合. 限制条件 $F(x) \succeq 0$ 叫做线性矩阵不等式 (Linear Matrix Inequality), 表示矩阵 $F(x)$ 是半正定矩阵 (即 $z^T F(x) z \geq 0$ 对于任意实向量 z 成立). 半定规划的目标函数和限制条件都满足凸性质, 所以它的可行解集为凸集, 它是凸最优化问题并且可以使用对偶内点法等方法快速求解. 半定规划包含线性规划并且很多问题也可以转化为半定规划求解.

半定规划 (2.1) 的对偶问题为

$$\begin{aligned} d^* := \max_Z \quad & -\text{Tr}(F_0 Z) \\ \text{s.t.} \quad & \text{Tr}(F_i Z) = c_i, \quad i = 1, \dots, m, \\ & Z \succeq 0, \end{aligned} \tag{2.2}$$

其中变量 $Z = Z^T$ 为实对称矩阵, c_i 为向量 c 中的相应元素. 记号 $\text{Tr}(\cdot)$ 表示矩阵的迹, 即矩阵主对角线上所有元素的和. 对于任意半正定矩阵 A, B , 可以设 $B = VV^T$, 则 $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(V^T AV) \geq 0$, 等号成立当且仅当 $AB = 0$. 半定规划 (2.1) 和 (2.2) 任意可行解 x, Z 成立

$$c^T x + \text{Tr}(F_0 Z) = \sum_{i=1}^m \text{Tr}(x_i F_i Z) + \text{Tr}(F_0 Z) = \text{Tr}(F(x) Z) \geq 0,$$

由此可知弱对偶 $p^* \geq d^*$ 成立, 并且 $p^* = d^*$ 时它们的任意最优解 x^*, Z^* 满足 $F(x^*)Z^* = 0$. 如下强对偶定理的证明可参见 [45].

定理 2.1. 如果以下条件之一成立, 那么 $p^* = d^*$.

1. 原始问题 (2.1) 存在严格可行解, 即存在 x 满足 $F(x) \succ 0$.
2. 对偶问题 (2.2) 存在严格可行解, 即存在 $Z = Z^T \succ 0$ 满足 $\text{Tr}(F_i Z) = c_i$, $i = 1, \dots, m$.

如果两个条件都成立, 那么两个对偶问题的最优解集都非空.

2.2 平方和及矩量方法

给定多项式 $f(\bar{X}) \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 当且仅当对任给 $\xi \in \mathbb{R}^n$, $f(\xi) \geq 0$ 时我们称 $f(\bar{X})$ 在 \mathbb{R}^n 上非负; 当且仅当存在多项式 $u_i(\bar{X}) \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 使得

$$f(\bar{X}) = \sum_i u_i(\bar{X})^2 \in \mathbb{R}[\bar{X}]^2$$

成立时, 我们称 $f(\bar{X})$ 具有平方和分解. 如果多项式 $f(\bar{X})$ 具有平方和分解, 显然 $f(\bar{X})$ 非负; 反之如果非负多项式 $f(\bar{X})$

- 只有一个变元, 或者
- 为二次多项式, 或者
- 只有两个变元且次数最高为 4,

则 $f(\bar{X})$ 具有平方和分解. 然而一般情形下反之不成立, 例如 Motzkin 多项式 $f(X_1, X_2) = X_1^4 X_2^2 + X_1^2 X_2^4 + 1 - 3X_1^2 X_2^2$. 令 $e = \lceil \deg f / 2 \rceil$, 由 Cholesky 分解, $f(\bar{X})$ 具有平方和分解当且仅当存在实对称半正定矩阵 W , 使得 $f(\bar{X}) = m_e(\bar{X})^T \cdot W \cdot m_e(\bar{X})$, 其中 $m_e(\bar{X})$ 为所有次数 $\leq e$ 的单项式构成的列向量. 我们称 W 为 Gram 矩阵.

关于非负多项式与多项式平方和的关系, 在 1900 年法国巴黎的国际数学家大会上, Hilbert 提出下面问题:

问题 2.1 (Hilbert 第十七问题).

对于任何非负多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 是否存在有理函数 $g_1, \dots, g_s \in \mathbb{R}(\bar{X})$ 使得 $f = \sum_{i=1}^s g_i^2$?

1927 年, 奥地利数学家 Emil Artin 对这一问题给出了肯定的证明并以此为实代数理论的发展奠定了基础.

给定 \mathbb{R}^n 上测度 μ , 称 $y_\alpha := \int x^\alpha \mu(dx)$ 为对应于 μ 的阶为 α 的矩量, 称序列 $(y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n}$ 为对应于 μ 的矩量序列. 给定 $t \in \mathbb{N}$, 称截断序列 $(y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}_t^n}$ 为对应于 μ 的阶为 t 的矩量序列. 给定序列 $y = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}^n}$, 其相应的(无穷维的)矩量矩阵 $M(y)$ 的行列由 \mathbb{N}^n 中元素标示. 对于 $\alpha, \beta \in \mathbb{N}^n$, $M(y)$ 中位于 (α, β) 处的元素为 $y_{\alpha+\beta}$. 给定整数 $t \geq 1$ 和截断的序列 $y = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}_{2t}^n} \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}_{2t}^n}$, 对于 $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_t^n$, 其相应的 t 阶 Moment 矩阵 $M_t(y)$ 中 (α, β) 处的元素为 $y_{\alpha+\beta}$. 给定多项式 $q \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 如果 $M_t(y)$ 中位于 (i, j) 处的元素为 y_β , 那么关于 q 的 t 阶局部化 Moment 矩阵定义为

$$M_t(qy)(i, j) := \sum_{\alpha} q_\alpha y_{\alpha+\beta}.$$

考虑计算

$$\sup \left\{ a \in \mathbb{R} \mid f - a = m_e(\bar{X})^T \cdot W \cdot m_e(\bar{X}), W \succeq 0, W^T = W \right\},$$

即

$$\mathbb{P} \mapsto \begin{cases} \sup_{r \in \mathbb{R}} r \\ s.t. \quad f(\bar{X}) - r = m_e(\bar{X})^T \cdot W \cdot m_e(\bar{X}), \\ \quad W \succeq 0, \quad W^T = W. \end{cases} \quad (2.3)$$

则其对偶问题为

$$\mathbb{P}^* \mapsto \begin{cases} \inf_{y_\alpha \in \mathbb{R}} \sum_{\alpha} f_\alpha y_\alpha \\ s.t. \quad M_e(y) \succeq 0. \end{cases} \quad (2.4)$$

Shor [65, 66, 67] 首先将平方和方法引入到多项式全局最优化问题求解中, 后来 Parrilo [49, 50] 和 Lasserre [33, 34] 分别从平方和和 Moment 的角度对此方法作了进一步发展.

对于多项式的平方和分解, 我们可以考虑其稀疏性结构. 记 \mathbb{N} 为非负整数的集合. 给定一个多项式 $p(\bar{X}) = \sum_{\alpha} p_\alpha \bar{X}^\alpha$, 记 $C(p)$ 为点集 $\text{sup}(p) = \{\alpha \in \mathbb{N}^n \mid p_\alpha \neq 0\}$ 的凸包, 也称 $C(p)$ 为 $p(\bar{X})$ 的牛顿多面体 (Newton Polytope).

定理 2.2. [54] 给定多项式 p , $C(p^2) = 2C(p)$; 对于任意半正定多项式 f 和 g , $C(f) \subseteq C(f+g)$; 如果 $f = \sum_j g_j^2$ 那么 $C(g_j) \subseteq \frac{1}{2}C(f)$.

令 $m_{\mathcal{G}}(\bar{X}) = \{\bar{X}^\alpha \in \mathbb{N}^n \mid 2\alpha \in \mathbb{C}(f)\} \subseteq m_e(\bar{X})$, 则由上述定理得到 $f(\bar{X})$ 具有平方和分解当且仅当存在实对称半正定矩阵 $W_{\mathcal{G}}$, 使得 $f(\bar{X}) = m_{\mathcal{G}}(\bar{X})^T \cdot W_{\mathcal{G}} \cdot m_{\mathcal{G}}(\bar{X})$ 成立. 因此我们可以减小 SDP 问题 (2.3) 和 (2.4) 的规模.

2.3 代数几何基本知识

以下关于代数几何的一些基本概念可以参见文献 [14, 17, 42, 63, 73].

定义 2.2. 令 $f_1, \dots, f_p \in \mathbb{C}[\bar{X}]$, 称集合

$$V(f_1, \dots, f_p) = \{\xi \in \mathbb{C}^n \mid \text{对所有的 } 1 \leq i \leq p, f_i(\xi) = 0\}$$

为由 $f_1, \dots, f_p \in \mathbb{C}[\bar{X}]$ 定义的代数簇, 并简记为 V .

定义 2.3. 给定子集 $S \subset \mathbb{C}^n$, 如果存在 $f_1, \dots, f_s \in \mathbb{C}[\bar{X}]$ 使得 $S = V(f_1, \dots, f_s)$, 则称 S 是 Zariski 闭集; 其余集称为 Zariski 开集.

定义 2.4. 对给定理想 $I \subset \mathbb{C}[\bar{X}]$, 定义

$$\sqrt{I} = \{f \mid \text{存在整数 } m \geq 1, \text{ 使得 } f^m \in I\}.$$

称 \sqrt{I} 为 I 的根. 如果 $I = \sqrt{I}$, 则称 I 为根理想.

定义 2.5. 令 $V \subset \mathbb{C}^n$ 为代数簇, 则集合

$$I(V) = \{f \in \mathbb{C}[\bar{X}] \mid \text{任给点 } \xi \in V, f(\xi) = 0\}$$

为 $\mathbb{C}[\bar{X}]$ 中的理想, 称其为代数簇 V 的理想.

定义 2.6. 令 $V \subset \mathbb{C}^n$ 为代数簇且点 $x = (x_1, \dots, x_n) \in V$,

1. 对多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 记 $d_x(f)$ 为线性多项式

$$d_x(f) = \frac{\partial f}{\partial X_1}(x)(X_1 - x_1) + \cdots + \frac{\partial f}{\partial X_n}(x)(X_n - x_n).$$

2. 代数簇 V 在点 x 处的切空间为集合

$$T_x V = V(d_x(f)) : f \in I(V)$$

定义 2.7. 给定代数簇 $V \subset \mathbb{C}^n$ 及点 $x \in V$, 如果 $\dim(T_x V) = \dim(V)$, 则称 x 为 V 的正则点; 否则, 称 x 为 V 的奇异点. 如果代数簇 V 没有奇异点, 称其为光滑的.

假设等维代数簇 V 的维数为 d , $\phi : V \rightarrow \mathbb{C}^k$ 为连续半代数函数. 则 V 在点 x 处光滑当且仅当存在 $(f_1, \dots, f_{n-d}) \subset I(V)$ 使得 Jacobian 矩阵 $\text{jac}_x(f_1, \dots, f_{n-d})$ 的秩为 $n - d$. 记 ϕ 在点 x 处的微分算子: $d_x \phi : T_x V \rightarrow \mathbb{C}^k$.

定义 2.8. 如果在点 x 处, 微分算子 $d_x \phi$ 不是满射, 则称 x 为 ϕ 的关键点 (Critical Point) 并称 $\phi(x)$ 为 ϕ 的关键值 (Critical Value).

我们有以下经典的 Sard 定理:

定理 2.3. 映射 ϕ 的关键值在 \mathbb{C}^k 中的 Lebesgue 测度为零. 因此, 其维数小于 k .

定义 2.9. [32] 给定映射 ϕ , 对于复数 $c \in \mathbb{C}$, 如果存在序列 $(z_l)_{l \in \mathbb{N}} \subset \mathbb{C}^n$, 使得当 $l \rightarrow \infty$ 时:

1. $\phi(z_l) \rightarrow c$;
2. $\|z_l\| \rightarrow +\infty$;
3. 任给 $(i, j) \in \{1, \dots, n\}^2$, $\|X_i(z_l)\| \cdot \|\frac{\partial \phi}{\partial X_j}(z_l)\| \rightarrow 0$,

则称 $c \in \mathbb{C}$ 为映射 ϕ 的渐近关键值 (Asymptotic Critical Value).

记 $K_0(\phi)$ 为 ϕ 关键值的集合, $K_\infty(\phi)$ 为 ϕ 渐近关键值的集合. 称集合 $K(\phi) = K_0(\phi) \cup K_\infty(\phi)$ 中元素为 ϕ 的广义关键值.

我们有如下的广义的 Sard 定理:

定理 2.4. [32] 令多项式 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 次数为 D , 则多项式映射 $f : x \in \mathbb{C}^n \rightarrow f(x) \in \mathbb{C}$ 的广义关键值在 \mathbb{C} 中是 Zariski 闭的. 进一步的, $D \# K_\infty(f) + \# K_0(f) \leq D^n - 1$.

以下定理说明多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 在实数域上的有限下确界为实的广义关键值.

定理 2.5. [59, 定理 5] 令 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, $\varepsilon = \{e_1, \dots, e_l\}$ (令 $e_1 < \dots < e_l$) 为映射 $x \in \mathbb{R}^n \rightarrow f(x)$ 的实的广义关键值集合. 则 $\inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) > -\infty$ 当且仅当存在 $1 \leq i_0 \leq l$ 使得 $\inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = e_{i_0}$.

定义 2.10. 给定多项式映射 $\phi: V \rightarrow \mathbb{C}^k$ 及点 $y \in \mathbb{C}^k$, 当且仅当存在一个包含 y 的闭球 B 使得 $\phi^{-1}(B)$ 是闭集且有界时, 称 ϕ 在 y 处是常态的 (Proper); 当且仅当多项式映射 ϕ 在其像集闭包的每一点处都是常态的时, 称 ϕ 是常态映射.

定义 2.11. 任给多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 及子集 $S \subseteq \mathbb{R}^n$, 记 $R_\infty(f, S)$ 为 f 在 S 上实的渐近值集合, 其中包括所有的 $y \in \mathbb{R}$ 使得存在 S 中的序列 $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$ 满足 $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_k\| = \infty$ 且 $\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k) = y$.

定义 2.12. 记 $T(g_1, \dots, g_m)$ 为由多项式 $g_1, \dots, g_m \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 生成的亚序, 其定义为:

$$T(g_1, \dots, g_m) := \left\{ \sum_{\delta \in \{0,1\}^m} s_\delta g_1^{\delta_1} \dots g_m^{\delta_m} \mid s_\delta \text{ 为 } \mathbb{R}[\bar{X}] \text{ 中的多项式平方和} \right\},$$

其中 $\delta = (\delta_1, \dots, \delta_m)$.

注 1. 给定多项式 $h_1, \dots, h_t \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 根据定义 2.12, 由多项式 $g_1, \dots, g_m, h_1, -h_1, \dots, h_t, -h_t$ 生成的亚序为

$$T(g_1, \dots, g_m, h_1, -h_1, \dots, h_t, -h_t) = T(g_1, \dots, g_m) + \langle h_1, \dots, h_t \rangle,$$

其中 $\langle h_1, \dots, h_t \rangle$ 为由多项式 h_1, \dots, h_t 生成的理想. 其证明参见 [40, 第 24 页, 第 2 章, 注 2.1.8].

给定多项式 $g_1, \dots, g_m \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 记半代数集合

$$S(g_1, \dots, g_m) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_1(x) \geq 0, \dots, g_m(x) \geq 0\}.$$

我们有如下 Schmüdgen 定理:

定理 2.6. [61] 给定多项式 $g_1, \dots, g_m \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 假设半代数集合 $S(g_1, \dots, g_m)$ 是紧致的, 则对任给多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$,

$$\text{在 } S(g_1, \dots, g_m) \text{ 上, } f > 0 \implies f \in T(g_1, \dots, g_m).$$

第三章 多项式全局优化问题

3.1 前言

令多项式 $f(\bar{X}) \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$, 以下简记为 f . 考虑下列多项式全局最优问题

$$f^* := \inf\{f(x) \mid x \in \mathbb{R}^n\} \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}. \quad (3.1)$$

此问题等价于求解

$$f^* = \sup\{a \in \mathbb{R} \mid f - a \geq 0 \text{ on } \mathbb{R}^n\} \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}.$$

文献 [44] 中证明当 $\deg(f)$ 为大于等于 4 的偶数时, (3.1) 是 NP 难问题. 我们可以通过多项式平方和分解得到 f^* 的下界:

$$\begin{aligned} f^{\text{sos}} &:= \sup\{a \in \mathbb{R} \mid f - a \text{ 为 } \mathbb{R}[\bar{X}] \text{ 中的多项式平方和}\} \\ &\in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}. \end{aligned}$$

上述问题可以转化为半定规划 (SDP) 问题, 而 SDP 问题可以通过 Matlab 中软件包高效求解, 例如 GloptiPoly [23], SOSTOOLS [53], YALMIP [39], SeDuMi [68] 及 SparsePOP [71]. 更多关于多项式平方和与非负多项式的介绍可以参见文献 [55]. 然而文献 [8] 中指出, 对于固定次数 $e \geq 4$, 在所有 e 次多项式集合中, 多项式平方和与非负多项式比例随着多项式变量的增加而趋向于 0.

近年来, 在多项式优化领域出现了许多关于利用平方和理论验证多项式非负性的工作. 例如, [33] 中提出的“Big Ball”方法和 [28] 中提出的 Gradient Perturbation 方法. 这些方法通过将原多项式的系数作微小的扰动来利用平方和理论求解问题最优值. 然而, 对系数的微小扰动可能引起数值问题从而使得相应的 SDP 问题难以求解. [48] 中提出的梯度簇 (Gradient Variety) 方法避免了对系数的扰动. 对多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 定义其梯度簇为

$$V(\nabla f) := \{x \in \mathbb{C}^n \mid \nabla f(x) = 0\}.$$

定义其梯度理想 (Gradient Ideal) 为由 f 所有的偏导数生成的理想:

$$\langle \nabla f \rangle := \left\langle \frac{\partial f}{\partial X_1}, \frac{\partial f}{\partial X_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial X_n} \right\rangle \subseteq \mathbb{R}[\bar{X}].$$

文献 [48] 证明了以下结论: 如果 f 在 $V\left(\frac{\partial f}{\partial X_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial X_n}\right) \cap \mathbb{R}^n$ 保持正定, 或者 f 在 $V\left(\frac{\partial f}{\partial X_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial X_n}\right) \cap \mathbb{R}^n$ 非负且 $\langle \nabla f \rangle$ 为根理想, 则模去理想 $\langle \nabla f \rangle$ 后 f 具有平方和分解. 然而当 f 达不到其下确界时, 梯度簇方法不能保证得出正确的结果. 例如, 考虑多项式 $f := (1 - X_1 X_2)^2 + X_2^2$. f 的下确界为 $f^* = 0$, 但是 $V(\nabla f) = \{(0, 0)\}$. 梯度簇方法得到的结果为 $f(0, 0) = 1 \neq f^*$. 这是因为所有使得当 $n \rightarrow \infty$ 且 $f(x_1^{(n)}, x_2^{(n)}) \rightarrow 0$ 的序列 $(x_1^{(n)}, x_2^{(n)})$ 均有 $\|(x_1^{(n)}, x_2^{(n)})\| \rightarrow \infty$ (本章中出现的范数为 l^2 范数) 成立. 粗略地说, f 的下确界只能在“无穷远处”达到. 这一现象与渐近关键值 (Asymptotic Critical Value) 理论密切相关, 参见文献 [32].

最近, 在处理下确界为渐近值情形的优化问题中出现了许多进展性工作. 以下我们简要介绍文献 [62] 提出的方法. 回顾定义 2.12, 我们有下面重要定理:

定理 3.1. ([62, 定理 9]). 令 $f, g_1, \dots, g_m \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 及半代数集合

$$S := \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_1(x) \geq 0, \dots, g_m(x) \geq 0\}. \quad (3.2)$$

假设

1. f 在 S 上有界;
2. $R_\infty(f, S)$ 为 $(0, +\infty)$ 中的有限集合;
3. f 在 S 正定;

则 $f \in T(g_1, \dots, g_m)$.

文献 [62] 中方法的思想为考虑一个包含梯度簇的半代数集, 在这一集合上

- 非负多项式具有基于平方和的相关判定准则.
- f 这一集合上的下确界与 f^* 相等.

定义 3.1. 对于多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 我们称

$$S(\nabla f) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid 1 - \|\nabla f(x)\|^2 \|x\|^2 \geq 0\}$$

为 f 的主梯度触 (Principal Gradient Tentacle).

定理 3.2. [62, 定理 25] 假设 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 具有有限下界且在无穷远处只有孤立奇异点 (当 $n = 2$ 总是成立) 或其主梯度触 $S(\nabla f)$ 是紧致的, 则下列条件等价:

1. 在 \mathbb{R}^n 上, $f \geq 0$;
2. 在 $S(\nabla f)$ 上, $f \geq 0$;
3. 对任意 $\epsilon > 0$, 存在 $\mathbb{R}[\bar{X}]$ 中的多项式平方和 s 及 t , 使得下式成立

$$f + \epsilon = s + t \left(1 - \|\nabla f(\bar{X})\|^2 \|\bar{X}\|^2 \right).$$

固定 $k \in \mathbb{N}$, 定义

$$f_k^* := \sup \left\{ a \in \mathbb{R} \mid f - a = s + t \left(1 - \|\nabla f(x)\|^2 \|x\|^2 \right) \right\}.$$

其中 s, t 为多项式平方和且 t 的次数 $\leq 2k$. 如果上述定理中假设条件满足, 则 $\{f_k^*\}_{k \in \mathbb{N}}$ 单调收敛到 f^* (参见 [62, 定理 30]). 为了避免上述定理中假设条件, [62] 提出了高次梯度触 (Higher Gradient Tentacle) 的概念 ([62, 定义 41]). 每一个高次梯度触由下面多项式不等式所定义

$$1 - \|\nabla f(x)\|^{2N} (1 + \|x\|^2)^{N+1} \geq 0, \quad N \in \mathbb{N}.$$

[62, 定理 46] 证明对于任给具有有限下界的正定多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 存在足够大的 N , 使得 f 具有关于 N 次梯度触的平方和表达式. 然而随着 N 的增大, 相应 SDP 问题的规模会很大且对每一个 N 都需要求解一系列的 SDP 问题. 为克服此缺点, 文献 [20] 给出了截断切簇 (Truncated Tangency Variety) 方法. 其结果主要基于定理 3.1. 对于 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 定义

$$g_{ij}(\bar{X}) := X_j \frac{\partial f}{\partial X_i} - X_i \frac{\partial f}{\partial X_j}, \quad 1 \leq i < j \leq n.$$

固定实数 $B \in f(\mathbb{R}^n)$, f 的截断切簇定义为

$$\Gamma_B(f) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid B - f(x) \geq 0, g_{i,j}(x) = 0, 1 \leq i, j \leq n\}.$$

基于定理 3.1, 下面结论成立.

定理 3.3. [20, 定理 3.1] 令 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 且 B 为固定实数, 则下列条件等价:

1. 在 \mathbb{R}^n 上, $f \geq 0$;
2. 在 $\Gamma_B(f)$ 上, $f \geq 0$;
3. 对任意的 $\epsilon > 0$, 存在 $\mathbb{R}[\bar{X}]$ 中多项式 s, t 及 $\phi_{ij}, 1 \leq i < j \leq n$, 其中 s, t 为多项式平方和, 使得下式成立

$$f + \epsilon = s + t(B - f) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} \phi_{ij} g_{ij}.$$

固定 $k \in \mathbb{N}$ 并令

$$f_k^* := \sup \left\{ a \in \mathbb{R} \mid f - a = s + t(B - f) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} \phi_{ij} g_{ij} \right\},$$

其中多项式 s, t, ϕ_{ij} 的次数 $\leq 2k$ 且 s, t 为多项式平方和, 则序列 $\{f_k^*\}_{k \in \mathbb{N}}$ 单增地收敛到 f^* ([20, 定理 3.2]). 此方法不要求 [62, 定理 25] 中的假设条件. 然而 $\Gamma_B(f)$ 中的等式约束个数 $\frac{n(n-1)}{2}$ 随着 n 的增加会变得很大, 从而相应 SDP 问题的规模也会变得很大.

在本章中我们给出基于定理 3.1 和极簇 (Polar Variety) 理论的多项式全局优化方法. 关于极簇理论, 我们将在第四章给出其详细介绍. 与同类方法相比, 本方法只要求 f 具有有限下界且不要求其下确界可以达到. 另外, 本方法添加的多项式限制条件更少且其次数更低, 因此相应的 SDP 问题规模更小.

尽管文献 [62] 及 [20] 中的方法在理论上都可以处理下确界为渐近值的情形, 然而在实际计算过程中相应的 SDP 问题会出现严重的数值误差, 参见 [20, 28, 62]. 此类数值误差与问题相应的 Moment 矩阵在最优点处趋向于无界密切相关. 在多项式下确界为渐近值时, 如果我们不考虑平方和松弛的稀疏结构, 此类数值误差就会经常发生. 在本章最后我们给出一些处理病态 Moment 矩阵的方法.

一些基本记号 记 $\mathrm{GL}_n(\mathbb{C})$ ($\mathrm{GL}_n(\mathbb{Q})$) 为复 (有理) 数域上的 $n \times n$ 可逆矩阵. 给定矩阵 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q})$ 和多项式 $g \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$, 记 $g^\mathbf{A}$ 为多项式 $g(\mathbf{A}\bar{X})$, 即对其变量作线性变换. 给定 \mathbb{R}^n 中的集合, 如果其中只有有限个元素, 则称其为零维集合. 下面给出一组重要的多项式集合:

记号 3.4.

当 $i = n$ 时, 令 $\mathbf{M}_n^{\mathbf{A}} = \{X_1, \dots, X_{n-1}\}$; 当 $0 \leq i \leq n-1$ 时, 令 $\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}} = \left\{X_1, \dots, X_{i-1}, \frac{\partial f^{\mathbf{A}}}{\partial X_{i+1}}, \dots, \frac{\partial f^{\mathbf{A}}}{\partial X_n}\right\}$. 记 $W^{\mathbf{A}}$ 为代数集 $\bigcup_{i=0}^n V(\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}})$.

本章的主要结论及其证明过程中将要经常使用上述记号.

3.2 基于平方和的代数验证

由于任意矩阵 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q})$ 可逆, 我们有

引理 3.5. 任给矩阵 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q})$, $f^* = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} f^{\mathbf{A}}(x)$.

因为本章给出的多项式全局最优方法可以看作是第四章中等式约束优化方法的特例, 而下面定理是定理 4.7 的直接推论, 故此处略去其证明.

定理 3.6. 假设 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 具有有限下界, 则存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O} \subset \mathrm{GL}_n(\mathbb{C})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}$, 我们有

1. 存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{T}_{\mathbf{A}} \subset \mathbb{C}$ 使得对于所有的 $t \in \mathbb{R} \cap \mathcal{T}_{\mathbf{A}}$, 任给 $1 \leq i \leq n$, $V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap V(M_i^{\mathbf{A}})$ 为空集或零维集合. 集合 $V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap \mathbb{R}^n$ 为空集, 当且仅当任给 $1 \leq i \leq n$, $V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap V(M_i^{\mathbf{A}}) \cap \mathbb{R}^n$ 为空集;
2. 记 $W^{\mathbf{A}}$ 为代数集 $\bigcup_{i=0}^n V(\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}})$, 则 $f^* = \inf_{x \in W^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n} f(x)$;
3. 对于任意 $0 \leq i \leq n$, $f^{\mathbf{A}}$ 在 $V(M_i^{\mathbf{A}})$ 上只有有限个实的渐近值.

证明. 参见第四章定理 4.7 的证明. ■

定义 3.2. 给定两个实数 $B, a \in \mathbb{R}$, 当且仅当存在多项式平方和 $S_i^{\mathbf{A}}, T_i^{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 使得

$$f^{\mathbf{A}} - a = S_i^{\mathbf{A}} + T_i^{\mathbf{A}}(B - f^{\mathbf{A}}) \pmod{\langle \mathbf{M}_i^{\mathbf{A}} \rangle}$$

成立时, 我们称性质 $\text{SOS}(f^{\mathbf{A}} - a, \mathbf{M}_i^{\mathbf{A}}, B)$ 成立. 如果对所有的 $0 \leq i \leq n$, 性质 $\text{SOS}(f^{\mathbf{A}} - a, \mathbf{M}_i^{\mathbf{A}}, B)$ 成立, 我们称性质 $\text{SOS}(f^{\mathbf{A}} - a, \mathbf{M}^{\mathbf{A}}, B)$ 成立.

定义 3.3. 定义半代数集

$$E_B^{\mathbf{A}} := \{x \in \mathbb{R}^n \mid f^{\mathbf{A}}(x) \leq B\} \text{ 及 } E_{B,i}^{\mathbf{A}} := E_B^{\mathbf{A}} \cap V(\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}}) \quad (0 \leq i \leq n).$$

利用记号 3.4, 我们有以下主要结果.

定理 3.7. 令 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 及 $f^* = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$. 固定实数 $B \in f(\mathbb{R}^n)$, 则存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O} \subset \mathrm{GL}_n(\mathbb{C})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}$:

(a) 如果性质 $\mathrm{SOS}(f^\mathbf{A} - a, \mathbf{M}^\mathbf{A}, B)$ 成立, 则 $a \leq f^*$.

(b) 如果 $a < f^*$, 则性质 $\mathrm{SOS}(f^\mathbf{A} - a, \mathbf{M}^\mathbf{A}, B)$ 成立.

证明. 令 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q})$ 使得定理 3.6 中性质 1, 2 及 3 成立. 由 $B \in f(\mathbb{R}^n)$ 及 $E_B^\mathbf{A}$ 的定义得 $f^* = \inf_{x \in E_B^\mathbf{A}} f^\mathbf{A}(x)$. 另外, 由 $E_{B,i}^\mathbf{A}$ 的定义及定理 3.6 (性质 1) 可以推出 $\cup_{i=0}^n E_{B,i}^\mathbf{A} \neq \emptyset$ 及 $\inf_{x \in W^\mathbf{A}} f(x) = \inf_{x \in \cup_{i=0}^n E_{B,i}^\mathbf{A}} f^\mathbf{A}(x)$. 再由定理 3.6 (性质 2) 得到 $f^* = \inf_{x \in \cup_{i=0}^n E_{B,i}^\mathbf{A}} f^\mathbf{A}(x)$.

如果存在多项式平方和 $S_i^\mathbf{A}, T_i^\mathbf{A} \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 使得对所有的 $0 \leq i \leq n$

$$f^\mathbf{A} - a = S_i^\mathbf{A} + T_i^\mathbf{A}(B - f^\mathbf{A}) \mod \langle \mathbf{M}_i^\mathbf{A} \rangle,$$

则对所有的 $x \in E_{B,i}^\mathbf{A}$, $f^\mathbf{A}(x) - a \geq 0$ 成立. 由 $f^* = \inf_{x \in \cup_{i=0}^n E_{B,i}^\mathbf{A}} f^\mathbf{A}(x)$ 推出 $a \leq f^*$, 从而证明了性质 (a).

假定 $a < f^*$. 由 $E_B^\mathbf{A}$ 的定义及定理 3.6 (性质 3), 有

1. 对所有的 $0 \leq i \leq n$, $f^\mathbf{A}$ 在 $E_B^\mathbf{A}$ 及 $E_{B,i}^\mathbf{A}$ 上有界.
2. 对所有的 $x \in E_{B,i}^\mathbf{A}$, $f^\mathbf{A}(x) - a > 0$.
3. $f^\mathbf{A}$ 在 $E_{B,i}^\mathbf{A}$ 上只有有限个实的渐近值.

由定理 3.1, 注 1 及上述性质 1, 2 和 3 推出 (b) 成立. ■

定理 3.8. 令 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 具有有限下界. 固定实数 $B \in f(\mathbb{R}^n)$, 对于 $0 \leq i \leq n$, 定义

$$f_i^* := \sup \{a \in \mathbb{R} \mid f^\mathbf{A} - a = S_i^\mathbf{A} + T_i^\mathbf{A}(B - f^\mathbf{A}) \mod \langle \mathbf{M}_i^\mathbf{A} \rangle\},$$

其中 $S_i^\mathbf{A}, T_i^\mathbf{A} \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 为多项式平方和. 则存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O} \subset \mathrm{GL}_n(\mathbb{C})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}$, 有 $f^* = \min_{1 \leq i \leq n} f_i^*$.

证明. 由定理 3.1 和定理 3.6 我们得到

$$f_i^* = \inf\{f^{\mathbf{A}}(x) \mid x \in V(\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}}) \cap \mathbb{R}^n\}, \quad 0 \leq i \leq n.$$

由定理 3.7 推出 $f^* = \min_{0 \leq i \leq n} f_i^*$. 根据记号 3.4, 由 $\mathbf{M}_0^{\mathbf{A}} \supset \mathbf{M}_1^{\mathbf{A}}$ 得到 $V(\mathbf{M}_0^{\mathbf{A}}) \subset V(\mathbf{M}_1^{\mathbf{A}})$, 从而有 $f_1^* \leq f_0^*$ 及 $f^* = \min_{1 \leq i \leq n} f_i^*$. \blacksquare

注 2. 注意到 $\mathbf{M}_0^{\mathbf{A}}$ 正是文献 [48] 中梯度簇方法所需构造的多项式集合.

定义 3.4. 给定多项式 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$, 固定实数 $B \in f(\mathbb{R}^n)$, 对于 $k \in \mathbb{N}$ 及 $1 \leq i \leq n$, 定义 $f^{\mathbf{A}}$ 在 $E_{B,i}^{\mathbf{A}}$ 上的 k 阶松弛最优值

$$f_{i,k}^* := \left\{ a \in \mathbb{R} \mid f^{\mathbf{A}} - a = S_i^{\mathbf{A}} + T_i^{\mathbf{A}}(B - f^{\mathbf{A}}) + \sum_{j=1}^{i-1} \phi_{i,j}^{\mathbf{A}} X_j + \sum_{j=i+1}^n \varphi_{i,j}^{\mathbf{A}} \frac{\partial f^{\mathbf{A}}}{\partial X_j} \right\}, \quad (3.3)$$

其中多项式 $S_i^{\mathbf{A}}, T_i^{\mathbf{A}}, \phi_{i,j}^{\mathbf{A}}, \varphi_{i,j}^{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, $T_i^{\mathbf{A}}, \phi_{i,j}^{\mathbf{A}}, \varphi_{i,j}^{\mathbf{A}}$ 次数 $\leq 2k$ 且 $S_i^{\mathbf{A}}, T_i^{\mathbf{A}}$ 为多项式平方和.

我们有

定理 3.9. 假设 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 具有有限下界, 则存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O} \subset \mathrm{GL}_n(\mathbb{C})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}$ 及 $1 \leq i \leq n$, 序列 $\{f_{i,k}^*\}, k \in \mathbb{N}$ 单增地收敛到 f_i^* .

证明. 固定 $i \in \{1, \dots, n\}$. 首先我们证明序列 $(f_{i,k}^*)_{k \in \mathbb{N}}$ 是单增的. 任给 $k \in \mathbb{N}^*$, 令 $\mathcal{P}_{\leq 2k}$ 为 $\mathbb{R}[\bar{X}]$ 中次数 $\leq 2k$ 的多项式的集合. 对于 $k_1 \leq k_2$, 显然有 $\mathcal{P}_{\leq 2k_1} \subset \mathcal{P}_{\leq 2k_2}$. 从而有 $f_{i,k_1}^* \leq f_{i,k_2}^*$, 所以此序列是单增的. 由 $\mathbb{R}[\bar{X}] = \bigcup_k \mathcal{P}_{\leq 2k}$ 得出此序列收敛于 f_i^* . \blacksquare

定义 $\widetilde{f}^{\mathbf{A}} = f^{\mathbf{A}}(0, \dots, 0, X_i, \dots, X_n) \in \mathbb{R}[X_i, \dots, X_n]$ 及

$$\tilde{f}_i^* := \sup \left\{ a \in \mathbb{R} \mid \widetilde{f}^{\mathbf{A}} - a = \widetilde{S}_i^{\mathbf{A}} + \widetilde{T}_i^{\mathbf{A}}(B - \widetilde{f}^{\mathbf{A}}) + \sum_{i+1 \leq j \leq n} \widetilde{\varphi}_{i,j}^{\mathbf{A}} \frac{\partial \widetilde{f}^{\mathbf{A}}}{\partial X_j} \right\},$$

其中多项式 $\widetilde{S}_i^{\mathbf{A}}, \widetilde{T}_i^{\mathbf{A}}, \widetilde{\varphi}_{i,j}^{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}[X_i, \dots, X_n]$, $\widetilde{S}_i^{\mathbf{A}}, \widetilde{T}_i^{\mathbf{A}}$ 为多项式平方和. 在 f_i^* 的定义中令 $X_1 = \dots = X_{i-1} = 0$ 推出 $f_i^* \leq \tilde{f}_i^*$. 由

$$f_i^* = \inf\{f^{\mathbf{A}}(x) \mid x \in V(\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}}) \cap \mathbb{R}^n\}, \quad 0 \leq i \leq n.$$

及 $\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}}$ 的定义, 有 $f_i^* \geq \tilde{f}_i^*$. 从而 $f_i^* = \tilde{f}_i^*$. 故在实际计算中, 我们只需要求解 \tilde{f}_i^* . 因此问题的变量减少, 从而具有更好的数值稳定性.

3.3 数值试验

本节例子来自文献 [20, 28, 33, 48, 62]. 我们利用 Matlab 中软件包 SOSTOOLS [53] 计算 (3.3) 中 $f_{i,k}^*$. 在以下数值试验中, 令 \mathbf{A} 为单位矩阵并简记 $f^\mathbf{A}$ 为 f . 不失一般性, 我们设 $B := f^\mathbf{A}(0) = f(0)$.

由于以下例子中 f^* 总能够在 $E_{B,1}^\mathbf{A}$ 上达到, 即 $f^* = f_1^*$, 为方便起见, 我们记 f_k^* 为 f 在 $E_{B,1}^\mathbf{A}$ 上的 k 阶松弛最优值 $f_{1,k}^*$. 和文献 [20, 28, 33, 48, 62] 中的结果相比, 我们能够得到类似或者更好的数值结果.

例 3.1. 考虑多项式

$$f(X_1, X_2) := (X_1 X_2 - 1)^2 + (X_1 - 1)^2.$$

显然下确界 $f^* = f^{sos} = 0$ 在点 $(1, 1)$ 处得到. 我们的计算结果为 $f_0^* \approx 0.34839 \times 10^{-8}$, $f_1^* \approx 0.16766 \times 10^{-8}$ 及 $f_2^* \approx 0.29125 \times 10^{-8}$.

例 3.2. 考虑 Motzkin 多项式

$$f(X_1, X_2) := X_1^2 X_2^4 + X_1^4 X_2^2 - 3X_1^2 X_2^2 + 1.$$

我们有 $f^* = 0$ 但是 $f^{sos} = -\infty$. 我们得到的结果为 $f_0^* \approx -6138.2$, $f_1^* \approx -52508$, $f_2^* \approx 0.15077 \times 10^{-8}$ 及 $f_3^* \approx 0.36591 \times 10^{-8}$.

例 3.3. 考虑 Berg 多项式

$$f(X_1, X_2) := X_1^2 X_2^2 (X_1^2 + X_2^2 - 1).$$

我们有 $f^* = -1/27 \approx -0.037037037$ 但是 $f^{sos} = -\infty$. 我们的计算结果为 $f_0^* \approx -563.01$, $f_1^* \approx -0.056591$, $f_2^* \approx -0.037037$ 及 $f_3^* \approx -0.037037$.

例 3.4. 考虑 3 元多项式:

$$f(X_1, X_2, X_3) := (X_1 + X_1^2 X_2 + X_1^4 X_2 X_3)^2.$$

文献 [62] 中指出, 此多项式不满足其假设条件. 显然有 $f^* = 0$. 我们得到的结果为: $f_0^* \approx -0.36282 \times 10^{-8}$, $f_1^* \approx -0.31482 \times 10^{-7}$, $f_2^* \approx -0.1043 \times 10^{-7}$ 及 $f_3^* \approx -0.58405 \times 10^{-8}$.

例 3.5. 考虑 3 元齐次 Motzkin 多项式:

$$f(X_1, X_2, X_3) := X_1^2 X_2^2 (X_1^2 + X_2^2 - 3X_3^2) + X_3^6.$$

我们有 $f^* = 0$ 但是 $f^{sos} = -\infty$. 经计算我们得到: $f_0^* \approx -0.27651$, $f_1^* \approx -0.13287 \times 10^{-2}$, $f_2^* \approx -0.19772 \times 10^{-3}$, $f_3^* \approx -0.95431 \times 10^{-4}$, $f_4^* \approx -0.60821 \times 10^{-4}$, $f_5^* \approx -0.32235 \times 10^{-4}$ 及 $f_6^* \approx -0.2625 \times 10^{-4}$.

例 3.6. 考虑 [37] 中多项式

$$f := \sum_{i=1}^5 \prod_{j \neq i} (X_i - X_j) \in \mathbb{R}[X_1, X_2, X_3, X_4, X_5].$$

[37] 中证明 $f^* = 0$ 但是 $f^{sos} = -\infty$. [62] 中指出利用梯度触方法得到的结果为 $f_0^* \approx -0.2367$, $f_1^* \approx -0.0999$ 及 $f_2^* \approx -0.0224$. 利用 [20] 中的截断切簇方法, 我们得到 $f_0^* \approx -1.9213$, $f_1^* \approx -0.077951$ 及 $f_2^* \approx -0.015913$. 由于本章的方法添加的多项式限制条件更少且其次数更低, 我们得到更好的结果: $f_0^* \approx -4.4532$, $f_1^* \approx -0.43708 \times 10^{-7}$, $f_2^* \approx -0.21811 \times 10^{-6}$.

例 3.7. 考虑 [55] 中的 Robinson 多项式

$$R(X_1, X_2, 1) := X_1^6 + X_2^6 + 1 - (X_1^4 X_2^2 + X_1^2 X_2^4 + X_1^4 + X_1^2 + X_2^4 + X_2^2) + 3X_1^2 X_2^2.$$

可以证明 $f^* = 0$ 但是 $f^{sos} = -\infty$. 我们计算所得下界为: $f_0^* \approx -0.9334$, $f_1^* \approx -0.23408$, $f_2^* \approx -0.22162 \times 10^{-2}$ 及 $f_3^* \approx 0.88897 \times 10^{-9}$.

3.4 下确界为渐近值的情形

例 3.8. 考虑多项式

$$f(X_1, X_2) := (1 - X_1 X_2)^2 + X_2^2.$$

可以看出多项式 f 在 \mathbb{R}^2 中有限点处无法达到其下确界 $f^* = 0$. 因为 f 为多项式平方和, 我们有 $f^* = f^{sos} = 0$. 文献 [20, 28, 62] 指出, 虽然理论上其方法均可以求得下确界 f^* , 但实际计算中总是出现严重的数值问题. 例如, [20] 中应用截断切簇方法得到的各阶松弛结果为 $f_0^* \approx -0.12641 \times 10^{-3}$, $f_1^* \approx 0.12732 \times 10^{-1}$, $f_2^* \approx 0.49626 \times 10^{-1}$.

下面我们应用平方和分解求解 f^{sos} , 并从中找出上述数值问题产生的原因, 即考虑计算

$$\sup \left\{ a \in \mathbb{R} \mid f - a = m_e(\bar{X})^T \cdot W \cdot m_e(\bar{X}), W \succeq 0, W^T = W \right\}, \quad (3.4)$$

其中 $m_e(\bar{X})$ 为所有次数 $\leq e = \deg(f)/2$ 的单项式构成的列向量. 注意到 (3.4) 可以转化为半定规划 (SDP) 问题.

在下文中我们要应用到基于 Maple 的高精度求解半定规划问题软件包 SDPTools. 关于其详细介绍, 我们将在第六章给出. SDPTools 中实现了经典的原始对偶势函数下降算法, 参见 [70]. 此算法要求原始对偶问题的严格初始解. 然而对于一般的 (3.4), 其严格初始解难以得到. 因此我们考虑应用 Big- \mathcal{M} 方法. 通过引入两个大的正数 \mathcal{M}_1 和 \mathcal{M}_2 , 我们可以将 (3.4) 转化为以下形式:

$$\left. \begin{array}{l} \sup_{\hat{r} \in \mathbb{R}, \hat{W}} \hat{r} - \mathcal{M}_2 z \\ s.t. \quad f(\bar{X}) - \hat{r} + z(m_e(\bar{X})^T \cdot m_e(\bar{X})) = m_e(\bar{X})^T \cdot \hat{W} \cdot m_e(\bar{X}), \\ \hat{W} \succeq 0, \quad \hat{W}^T = \hat{W}, \quad z \geq 0, \\ \mathbf{Tr}(\hat{W}) \leq \mathcal{M}_1. \end{array} \right\} \quad (3.5)$$

(3.5) 的对偶问题为:

$$\left. \begin{array}{l} \inf_{y_\alpha, t \in \mathbb{R}} \sum_\alpha f_\alpha y_\alpha + \mathcal{M}_1 t \\ s.t. \quad M_e(y) + tI \succeq 0, \quad t \geq 0 \\ \mathbf{Tr}(M_e(y)) \leq \mathcal{M}_2. \end{array} \right\} \quad (3.6)$$

假设原问题在最优解处的 Gram 矩阵和 Moment 矩阵的迹都是有界的, 如果 \mathcal{M}_1 和 \mathcal{M}_2 大于此界, 则 (3.5) 和 (3.6) 具有和原问题相同的最优解. 由于在实际计算时, 此上界往往很难得到, 因此我们根据多项式 f 给出 $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2$ 的大致估计值. 如果得不到正确结果, 我们就尝试增加 $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2$ 的估计值并再次求解.

表格 3.1 给出了当取 $m_e(\bar{X}) := [1, X_1, X_2, X_1^2, X_1X_2, X_2^2]^T$ 时, 对不同的 \mathcal{M}_1 和 \mathcal{M}_2 , 应用 SDPTools 计算 (3.5) 和 (3.6) 所得的结果. 其中第一列为迭代次数, 第二列为在 Maple 中设置的精度, 第三列为相应的 SDP 问题在当前解处的对偶差. 由第三列可以看出相应的 SDP 问题都得到了高精度的求解, 但我们未能得

| # iter. | prec. | gap | lower bound r | \mathcal{M}_1 | \mathcal{M}_2 |
|---------|-------|------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 50 | 75 | .74021e-17 | .46519e-1 | 10^3 | 10^3 |
| 50 | 75 | .12299e-11 | .47335e-2 | 10^3 | 10^5 |
| 50 | 75 | .68693e-12 | .47335e-2 | 10^5 | 10^5 |
| 50 | 75 | .38601e-10 | .47424e-3 | 10^3 | 10^7 |
| 70 | 75 | .76145e-18 | .47424e-3 | 10^7 | 10^7 |
| 50 | 75 | .43114e-10 | .47433e-4 | 10^3 | 10^9 |
| 70 | 75 | .33233e-12 | .47433e-4 | 10^9 | 10^9 |
| 75 | 90 | .86189e-10 | .47426e-5 | 10^3 | 10^{11} |

表 3.1: $m_e(\bar{X}) = [1, X_1, X_2, X_1^2, X_1X_2, X_2^2]^T$ 时得到的下界

到理想的结果. 同时可以看出增加 \mathcal{M}_2 值, 可以得到较好的结果. 因此 (3.6) 和表格 3.1 中数据提示我们在最优解处 Moment 矩阵的迹可能是无界的. 考虑由 (3.4) 得到的 SDP 问题:

$$\mathbb{P} \mapsto \begin{cases} \sup_{r \in \mathbb{R}} r \\ s.t. \quad f(\bar{X}) - r = m_e(\bar{X})^T \cdot W \cdot m_e(\bar{X}), \\ \quad W \succeq 0, \quad W^T = W. \end{cases} \quad (3.7)$$

及其对偶问题

$$\mathbb{P}^* \mapsto \begin{cases} \inf_{y_\alpha \in \mathbb{R}} \sum_\alpha f_\alpha y_\alpha \\ s.t. \quad M_e(y) \succeq 0. \end{cases} \quad (3.8)$$

例 3.8 中, f 是多项式平方和, 所以 \mathbb{P} 具有可行解. 由 [33, 命题 3.1] 知, 问题 \mathbb{P} 可解且 $\max \mathbb{P} = \inf \mathbb{P}^* = 0$. 我们证明当 $m_e(\bar{X}) = [1, X_1, X_2, X_1^2, X_1X_2, X_2^2]^T$ 时, \mathbb{P}^* 的最优解无法达到. 相反的, 令 y^* 为问题 \mathbb{P}^* 的最优解, 那么我们有

$$1 - 2y_{1,1} + y_{2,2} + y_{0,2} = 0, \quad (3.9)$$

及

$$M_e(y) = \begin{bmatrix} 1 & y_{1,0} & y_{0,1} & y_{2,0} & y_{1,1} & y_{0,2} \\ y_{1,0} & y_{2,0} & y_{1,1} & y_{3,0} & y_{2,1} & y_{1,2} \\ y_{0,1} & y_{1,1} & y_{0,2} & y_{2,1} & y_{1,2} & y_{0,3} \\ y_{2,0} & y_{3,0} & y_{2,1} & y_{4,0} & y_{3,1} & y_{2,2} \\ y_{1,1} & y_{2,1} & y_{1,2} & y_{3,1} & y_{2,2} & y_{1,3} \\ y_{0,2} & y_{1,2} & y_{0,3} & y_{2,2} & y_{1,3} & y_{0,4} \end{bmatrix} \succeq 0.$$

因为 $M_e(y)$ 为半正定矩阵, 我们有 $y_{0,2} \geq 0$ 及 $|2y_{1,1}| \leq (1 + y_{2,2})$. 结合 (3.9) 有 $y_{0,2} = 0$ 及

$$2y_{1,1} = 1 + y_{2,2}. \quad (3.10)$$

因为 $M_e(y)$ 是半正定的, 由 $y_{0,2} = 0$ 得出 $y_{1,1} = 0$. 因此根据 (3.10), 我们有 $y_{2,2} = -1$, 从而得出矛盾.

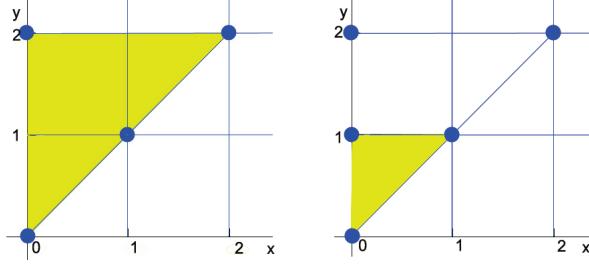
下面我们指出当取 $m_e(\bar{X}) = [1, X_1, X_2, X_1^2, X_1X_2, X_2^2]^T$ 时, 在最优点处 (3.8) 中 Moment 矩阵的迹无界. 注意到 $f(X_1, X_2)$ 的下确界只能在“无穷远处”达到: $p^* = (x_1^*, x_2^*) \in \{\mathbb{R} \cup \pm\infty\}^2$. 向量

$$\begin{aligned} & [x_1^*, x_2^*, (x_1^*)^2, x_1^*x_2^*, (x_2^*)^2, (x_1^*)^3, (x_1^*)^2x_2^*, x_1^*(x_2^*)^2, (x_2^*)^3, (x_1^*)^4, (x_1^*)^3x_2^*, (x_1^*)^2(x_2^*)^2, \\ & x_1^*(x_2^*)^3, (x_2^*)^4] \end{aligned}$$

为 (3.8) 在无穷远处的最优点. 因为 $x_1^*x_2^* \rightarrow 1$ 及 $x_2^* \rightarrow 0$, 当 $\|(x_1^*, x_2^*)\| \rightarrow \infty$ 时, 下标满足 $i > j$ 的任何矩量 $y_{i,j} \rightarrow \infty$. 因此 Moment 矩阵的迹在最优点处趋向于 ∞ .

从表格 3.1 中可以看出增加 \mathcal{M}_2 的值可以得到更好的结果. 例如, 取 $\mathcal{M}_1 = 10^3, \mathcal{M}_2 = 10^{11}$, 我们得到 $f^* = 0.4743306 \times 10^{-5}$. 然而这样的方法需要很大的计算量且收敛速度变慢.

下面我们应用定理 2.2 考虑问题的稀疏结构. 对于例 3.8 中的多项式 f , $C(f)$ 为点 $(0,0), (1,1), (0,2), (2,2)$ 的凸包; 如图 3.1 所示. 根据定理 2.2, f 的平方和分解中可能出现的单项式为 $[1, X_2, X_1X_2]$. 令 $m_e(\bar{X}) = [1, X_2, X_1X_2]^T$, $\mathcal{M}_1 = 1000$ 及 $\mathcal{M}_2 = 1000$, 我们可以得到非常近似下确界的结果, 见表格 3.2. 这是因为当 $x_1^*x_2^* \rightarrow 1$ 且 $x_2^* \rightarrow 0$ 时, 新的 Moment 矩阵在最优解 (x_1^*, x_2^*) 处的迹 $1 + (x_2^*)^2 + (x_1^*)^2(x_2^*)^2$ 是有界的. 因此表格 3.1 和表格 3.2 中得到不同的结果. 我们还可利用 Matlab 软件包 YALMIP [39] 中的命令 `solvesos` 来验证这一结果; 见表格 3.3.

图 3.1: 多项式 f 的牛顿多面体(左), 及其 SOS 表达式中可能出现的单项式(右).

| # iter. | prec. | gap | lower bound r | \mathcal{M}_1 | \mathcal{M}_2 |
|---------|-------|------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 50 | 75 | .97565e-27 | -.38456e-28 | 10^3 | 10^3 |

表 3.2: $m_e(\bar{X}) = [1, X_2, X_1 X_2]^T$ 时的计算结果

回到本章提出的方法. 为了能够去掉产生病态 Moment 矩阵的单项式, 在求解 $E_{B,1}^{\mathbf{A}}$ 上的 k 阶松弛最优值 $f_{i,k}^*$ 时, 我们进行类似的稀疏性分析. 对于例 3.8, f^* 显然在 $E_{B,1}^{\mathbf{A}}$ 上达到, 因此下面我们将只考虑计算 (3.3) 中 $f_{1,k}^*$.

令 $A = I_{2 \times 2}$, $m_{e_1}(\bar{X}) = m_{e_2}(\bar{X}) := [1, X_1, X_2, X_1^2, X_1 X_2, X_2^2]^T$ 及 对称半正定矩阵 W, V 满足

$$f + \epsilon = m_{e_1}(\bar{X})^T \cdot W \cdot m_{e_1}(\bar{X}) + m_{e_2}(\bar{X})^T \cdot V \cdot m_{e_2}(\bar{X}) \cdot (B - f) + \phi \frac{\partial f}{\partial X_1}.$$

因而

$$f + \epsilon \equiv m_{e_1}(\bar{X})^T \cdot W \cdot m_{e_1}(\bar{X}) + m_{e_2}(\bar{X})^T \cdot V \cdot m_{e_2}(\bar{X}) \cdot (B - f) \bmod J,$$

其中 $J = \langle \frac{\partial f}{\partial X} \rangle$.

不失一般性, 令 $B = 5$. 如果我们不考虑问题的稀疏结构, 相应的 Moment

| $m_e(\bar{X})$ | lower bounds r |
|--|------------------|
| $[1, X_2, X_1 X_2]^T$ | .14853e-11 |
| $[1, X_1, X_2, X_1 X_2]^T$ | .414452e-4 |
| $[1, X_1, X_2, X_1^2, X_1 X_2, X_2^2]^T$ | .15952e-2 |

表 3.3: 利用 Matlab 中 `solvesos` 取得的结果

矩阵为对角矩阵 $\begin{bmatrix} P & 0 \\ 0 & Q \end{bmatrix}$, 其中

$$P = \begin{bmatrix} y_{0,0} & y_{1,0} & y_{0,1} & y_{2,0} & y_{1,1} & y_{0,2} \\ y_{1,0} & y_{2,0} & y_{1,1} & y_{3,0} & y_{2,1} & y_{0,1} \\ y_{0,1} & y_{1,1} & y_{0,2} & y_{2,1} & y_{0,1} & y_{0,3} \\ y_{2,0} & y_{3,0} & y_{2,1} & y_{4,0} & y_{3,1} & y_{1,1} \\ y_{1,1} & y_{2,1} & y_{0,1} & y_{3,1} & y_{1,1} & y_{0,2} \\ y_{0,2} & y_{0,1} & y_{0,3} & y_{1,1} & y_{0,2} & y_{0,4} \end{bmatrix},$$

$$Q =$$

$$\begin{bmatrix} 4y_{0,0} + y_{1,1} - y_{0,2} & 4y_{1,0} - y_{0,1} + y_{2,1} & 5y_{0,1} - y_{0,3} & y_{3,1} - y_{1,1} + 4y_{2,0} & 5y_{1,1} - y_{0,2} & 5y_{0,2} - y_{0,4} \\ 4y_{1,0} - y_{0,1} + y_{2,1} & y_{3,1} - y_{1,1} + 4y_{2,0} & 5y_{1,1} - y_{0,2} & -y_{2,1} + 4y_{3,0} + y_{4,1} & 5y_{2,1} - y_{0,1} & 5y_{0,1} - y_{0,3} \\ 5y_{0,1} - y_{0,3} & 5y_{1,1} - y_{0,2} & 5y_{0,2} - y_{0,4} & 5y_{2,1} - y_{0,1} & 5y_{0,1} - y_{0,3} & 5y_{0,3} - y_{0,5} \\ y_{3,1} - y_{1,1} + 4y_{2,0} & -y_{2,1} + 4y_{3,0} + y_{4,1} & 5y_{2,1} - y_{0,1} & -y_{3,1} + 4y_{4,0} + y_{5,1} & 5y_{3,1} - y_{1,1} & 5y_{1,1} - y_{0,2} \\ 5y_{1,1} - y_{0,2} & 5y_{2,1} - y_{0,1} & 5y_{0,1} - y_{0,3} & 5y_{3,1} - y_{1,1} & 5y_{1,1} - y_{0,2} & 5y_{0,2} - y_{0,4} \\ 5y_{0,2} - y_{0,4} & 5y_{0,1} - y_{0,3} & 5y_{0,3} - y_{0,5} & 5y_{1,1} - y_{0,2} & 5y_{0,2} - y_{0,4} & 5y_{0,4} - y_{0,6} \end{bmatrix}$$

可以看出其中有很多下标 $i > j$ 的元素 $y_{i,j}$, 而这些元素在最优点处趋向于无穷.

下面我们尝试去掉这些元素. 首先我们计算 (3.11) 中等式两边模去理想 J 后的范式 (Normal Form), 然后比较等式两边单项式 $X_1^i X_2^j$ 的系数, 从而得到稀疏的单项式向量 $m_{e_1}(\bar{X})$ 和 $m_{e_2}(\bar{X})$.

- (3.11) 中等式两边模去理想 J 后的范式:

$$\begin{aligned} & -X_1 X_2 + 1 + X_2^2 + \epsilon = \\ & w_{1,1} - v_{1,1} + v_{1,1}B + (w_{2,1} + w_{1,2} - v_{2,1} + v_{2,1}B - v_{1,2} + v_{1,2}B)X_1 + (w_{3,5} + w_{5,3} - \\ & v_{3,4} - v_{2,1} + v_{2,6}B + w_{6,2} - v_{1,2} + v_{3,5}B + w_{2,6} - v_{2,5} + v_{1,3}B - v_{4,3} - v_{5,2} + w_{3,1} + \\ & w_{1,3} + v_{3,1}B + v_{5,3}B + v_{6,2}B)X_2 + (w_{1,4} + w_{4,1} - v_{4,1} + v_{4,1}B - v_{2,2} + v_{2,2}B - \\ & v_{1,4} + w_{2,2} + v_{1,4}B)X_1^2 + (v_{3,2}B + v_{6,4}B + w_{5,5} + w_{4,6} + v_{2,3}B + v_{5,5}B + w_{2,3} - \\ & v_{2,2} + w_{1,5} + w_{3,2} + v_{4,6}B - v_{1,4} + w_{6,4} + v_{5,1}B - v_{5,4} + v_{1,1} + w_{5,1} + v_{1,5}B - v_{4,5} - \\ & v_{4,1})xy + (v_{3,3}B + v_{6,1}B - v_{2,3} + w_{6,5} - v_{5,5} - v_{4,6} + w_{6,1} + w_{1,6} - v_{1,1} + w_{3,3} - \\ & v_{3,2} - v_{1,5} + v_{1,6}B - v_{5,1} - v_{6,4} + v_{6,5}B + v_{5,6}B + w_{5,6})X_2^2 + (w_{4,2} - v_{2,4} + v_{4,2}B - \\ & v_{4,2} + v_{2,4}B + w_{2,4})X_1^3 + (-v_{2,4} + w_{4,3} + v_{5,2}B + v_{1,2} + v_{3,4}B + w_{3,4} + v_{2,1} + \\ & v_{4,3}B + w_{2,5} - v_{4,2} + v_{2,5}B + w_{5,2})X_1^2 X_2 + (w_{3,6} + w_{6,3} - v_{3,5} - v_{2,6} - v_{3,1} + v_{6,3}B - \end{aligned}$$

$$v_{6,2} - v_{5,3} - v_{1,3} + v_{3,6}B)X_2^3 + (-v_{4,4} + v_{4,4}B + w_{4,4})X_1^4 + (w_{5,4} + v_{2,2} + v_{1,4} + v_{4,1} + v_{4,5}B + v_{5,4}B + w_{4,5} - v_{4,4})X_1^3X_2 + (-v_{6,5} - v_{6,1} - v_{5,6} - v_{3,3} + v_{6,6}B - v_{1,6} + w_{6,6})X_2^4 + (v_{4,2} + v_{2,4})X_1^4X_2 + (-v_{6,3} - v_{3,6})X_2^5 - v_{6,6}X_2^6 + v_{4,4}X_1^5X_2.$$

- 右边单项式 X_2^6 和 $X_1^5X_2$ 的系数分别为 $-v_{6,6}$ 和 $v_{4,4}$. 比较左边得出 $v_{4,4} = v_{6,6} = 0$. 因为矩阵 V 是半正定的, 因此对任意 $1 \leq i \leq 6$, 有 $v_{4,i} = v_{i,4} = v_{6,i} = v_{i,6} = 0$.
- 右边单项式 X_1^4 的系数为 $-v_{4,4} + v_{4,4}B + w_{4,4}$, 从而 $w_{4,4} = 0$. 因为 W 也为半正定矩阵, 因此对任意 $1 \leq i \leq 6$, 有 $w_{i,4} = w_{4,i} = 0$. 由单项式 $X_1^3X_2$ 和 X_1^2 的系数知 $v_{2,2} = w_{2,2} = 0$, 从而对任意 $1 \leq i \leq 6$, 有 $v_{2,i} = v_{i,2} = w_{2,i} = w_{i,2} = 0$.
- 消去等式右边恒为 0 的项后

$$\begin{aligned} & -X_1X_2 + 1 + X_2^2 + \epsilon = \\ & w_{1,1} - v_{1,1} + v_{1,1}B + (w_{3,5} + w_{5,3} + v_{3,5}B + v_{1,3}B + w_{3,1} + w_{1,3} + v_{3,1}B + v_{5,3}B)X_2 + (w_{5,5} + v_{5,5}B + w_{1,5} + v_{5,1}B + v_{1,1} + w_{5,1} + v_{1,5}B)X_1X_2 + (v_{3,3}B + w_{6,5} - v_{5,5} + w_{6,1} + w_{1,6} - v_{1,1} + w_{3,3} - v_{1,5} - v_{5,1} + w_{5,6})X_2^2 + (w_{3,6} + w_{6,3} - v_{3,5} - v_{3,1} - v_{5,3} - v_{1,3})X_2^3 + (-v_{3,3} + w_{6,6})X_2^4. \end{aligned}$$

- 消去元素全为 0 的行列之后, 我们得到简化的 Gram 矩阵

$$W = \begin{bmatrix} w_{1,1} & w_{1,3} & w_{1,5} & w_{1,6} \\ w_{3,1} & w_{3,3} & w_{3,5} & w_{3,6} \\ w_{5,1} & w_{5,3} & w_{5,5} & w_{5,6} \\ w_{6,1} & w_{6,3} & w_{6,5} & w_{6,6} \end{bmatrix},$$

$$V = \begin{bmatrix} v_{1,1} & v_{1,3} & v_{1,5} \\ v_{3,1} & v_{3,3} & v_{3,5} \\ v_{5,1} & v_{5,3} & v_{5,5} \end{bmatrix}$$

他们分别对应 $m_{e_1}(\bar{X}) = [1, X_2, X_1X_2, X_2^2]^T$ 和 $m_{e_2}(\bar{X}) = [1, X_2, X_1X_2]^T$.

- 对于 $B = 5$, 对应于 $m_{e_1}(\bar{X})$ 和 $m_{e_2}(\bar{X})$ 的 Moment 矩阵分别为

$$\begin{bmatrix} y_{0,0} & y_{0,1} & y_{1,1} & y_{0,2} \\ y_{0,1} & y_{0,2} & y_{1,2} & y_{0,3} \\ y_{1,1} & y_{1,2} & y_{2,2} & y_{1,3} \\ y_{0,2} & y_{0,3} & y_{1,3} & y_{0,4} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 4y_{0,0} + y_{1,1} - y_{0,2} & 5y_{0,1} - y_{0,3} & 5y_{1,1} - y_{0,2} \\ 5y_{0,1} - y_{0,3} & 5y_{0,2} - y_{0,4} & 5y_{0,1} - y_{0,3} \\ 5y_{1,1} - y_{0,2} & 5y_{0,1} - y_{0,3} & 5y_{1,1} - y_{0,2} \end{bmatrix}.$$

可以看出其所有元素 $y_{i,j}$ 的下标满足 $i \leq j$. 在最优点处这些元素趋向于 1 ($i = j$) 或 0 ($i < j$). 因此 Moment 矩阵在最优点处不再为病态矩阵.

设 $k = 2, B = 5, A = I_{2 \times 2}, \mathcal{M}_1 = 1000, \mathcal{M}_2 = 1000$, Maple 精度 Digits = 60, 由 SDPTools 计算得到的 Gram 矩阵 W 和 V 为

$$W = \begin{bmatrix} 0.50804 & 0.0 & 0.0 & -0.50804 \\ 0.0 & 0.33126 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.13374 & 0.0 \\ -0.50804 & 0 & 0.0 & 0.50804 \end{bmatrix},$$

$$V = \begin{bmatrix} 0.12298 & 0.0 & -0.12298 \\ 0.0 & 0.13374 & 0.0 \\ -0.12298 & 0.0 & 0.12298 \end{bmatrix}.$$

相应的 Moment 矩阵为

$$\begin{bmatrix} 1 & 0.0 & 0.0 & 1.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 1.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 5.0 & 0.0 & 5.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 5.0 & 0.0 & 5.0 \end{bmatrix}.$$

我们计算所得的下界为 $f_2^* \approx 4.029500408 \times 10^{-24}$. 进一步的, 根据文献 [29, 30] 中的方法, 利用 SDPTools 相应函数, 我们得到可验证的下界

$$f_2^{**} = -4.029341206383157355520229568612510632 \times 10^{-24}.$$

例 3.9. 考虑下面多项式

$$f(X_1, X_2) = 2X_2^4(X_1 + X_2)^4 + X_2^2(X_1 + X_2)^2 + 2X_2(X_1 + X_2) + X_2^2.$$

文献 [20] 指出下确界 $f^* = -\frac{5}{8}$ 且为渐近值, 在应用其方法计算时会产生严重的数值问题: $f_0^* \approx -0.614$, $f_1^* \approx -0.57314$, $f_2^* \approx -0.57259$, 及 $f_3^* \approx -0.54373$.

由于

$$f + \frac{5}{8} = \frac{(2X_2^2 + 2X_1X_2 + 1)^2(2X_2^2 + 2X_1X_2 - 1)^2}{8} + \frac{(2X_2^2 + 2X_1X_2 + 1)^2}{2} + X_2^2.$$

我们有 $f^* = f^{\text{sos}} = -\frac{5}{8}$. 令 $k = 4$, 如果我们不考虑问题的稀疏性, 并取 $m_{e_1}(X_1, \dots, X_n) = m_{e_2}(X_1, \dots, X_n)$ 为下面向量

$$[1, X_1, X_2, X_1^2, X_1X_2, X_2^2, X_1^3, X_1^2X_2, X_1X_2^2, X_2^3, X_1^4, X_1^3X_2, X_1^2X_2^2, X_1X_2^3, X_2^4]^T,$$

在实际计算中就会出现严重的数值问题.

通过类似上例稀疏性分析, 取

$$m_{e_1}(\bar{X}) = m_{e_2}(\bar{X}) = [1, X_2, X_2^2, X_1X_2, X_2^3, X_1X_2^2, X_2^4, X_1X_2^3, X_1^2X_2^2]^T,$$

可以消去产生病态 Moment 矩阵的单项式. 利用 SDPTools 计算可以得到准确下界 $f_4^* = -0.62500000000073993$. 显然其非常接近下确界 -0.625 .

第四章 多项式等式约束优化问题

4.1 前言

考虑下列多项式等式约束优化问题:

$$\begin{aligned} f^* &:= \inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ s.t. \quad f_1(x) &= \cdots = f_p(x) = 0 \end{aligned} \tag{4.1}$$

其中多项式 $f, f_1, \dots, f_p \in \mathbb{Q}[X_1, \dots, X_n]$. 记代数簇 $V = V(f_1, \dots, f_p)$ 并假设多项式 f 在可行域上具有有限下界. 这类问题在工程科学应用中广泛出现 [13, 22, 24, 41], 因此如何求解下确界或者其可信下界成为一个非常重要的问题.

理论上, 此类问题可以通过正零点定理 (Positivstellensatz) [9, 第 4 章] 求解, 然而这种多项式非负性的代数验证方法在实际应用中往往具有很高的计算复杂度. 本章将第三章多项式全局优化的方法推广到等式约束优化问题, 将 (4.1) 转化为一系列半定规划问题, 关于此类方法参见 [33, 51, 49, 64]. 本方法的思路是通过添加新的约束条件定义 $V \cap \mathbb{R}^n$ 的一族低维子集, 使得对于给定实数 a , 这族子集满足下列性质:

- 如果多项式 $f - a$ 在这族子集上非负, 则 $a \leq f^*$;
- 多项式 $f - a$ 在这族子集上的正定性存在基于平方和的验证方法.

如果上述条件满足, 我们可以验证给定实数 a 是否为 f^* 的下界.

记 $\langle \nabla f \rangle$ 为梯度理想 $\left\langle \frac{\partial f}{\partial X_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial X_n} \right\rangle$. 考虑无约束情况, 假定 f 的全局下界可以达到, 文献 [48] 中证明如果 f 在 $V \left(\frac{\partial f}{\partial X_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial X_n} \right) \cap \mathbb{R}^n$ 保持正定, 或者 f 在 $V \left(\frac{\partial f}{\partial X_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial X_n} \right) \cap \mathbb{R}^n$ 非负且 $\langle \nabla f \rangle$ 为根理想, 则模去理想 $\langle \nabla f \rangle$ 后 f 具有平方和分解. 文献 [16, 46] 中作者将这种方法在推广到多项式不等式约束优化问题. 假定下确界 f^* 在问题的某个 KKT 点上达到, [16] 中证明了如果 f 在可行域上保持正定, 或者 f 在可行域上非负且其 KKT 理想为根理想, 则模去 KKT 理想后 f 具有平方和分解. 文献 [46] 再将这一方法推广, 提出了基于 Jacobian

矩阵的 SDP 松弛方法并证明此方法是有限收敛的. 然而如果目标多项式的下确界不能在某个 KKT 点处达到, 上述方法则不能保证得到正确结果.

如果下确界 f^* 无法在有限点处达到, 则 f^* 为 f 在 $V \cap \mathbb{R}^n$ 上的渐近值. 在无约束条件下, 如果 f^* 为 f 在 \mathbb{R}^n 上的渐近值, [62] 中将梯度簇概念推广到梯度触 (参见第三章). 如果在其梯度触上保持正定的多项式具有有限个正的渐近值, 则此多项式包含在由定义其梯度触的多项式生成的亚序中.

文献 [21] 将此思想推广到多项式不等式约束优化问题, 定义并考虑了集合: 截断切簇 (Truncated Tangency Variety). 截断切簇为可行域的一个低维子集, 目标函数 f 其上具有有限个渐近值. 在等式约束优化问题中, 截断切簇与到一个给定点, 比如 (a_1, \dots, a_n) , 的距离平方函数的关键点轨迹相关, 它由多项式集合 $f_1, \dots, f_p, f, \sum_{i=1}^n (X_i - a_i)^2$ 的 Jacobian 矩阵的所有 $n - d + 2$ 阶子式所定义. 其中 d 为代数簇 $V(f_1, \dots, f_p)$ 的维数.

如果考虑线性投射函数的关键点轨迹, 我们只需要考虑多项式集合 f_1, \dots, f_p, f 的 Jacobian 矩阵的所有 $n - d + 1$ 阶子式. 这样我们可以得到更为简洁的代数验证, 最终转化的半定规划问题也会具有更好的数值稳定性. 在第三章中, 我们成功的将这一思想应用到多项式全局优化问题中. 在这一章中, 我们将其推广到求解多项式等式约束优化问题. 线性投射函数的关键点轨迹与极簇 (Polar Variety) 理论密切相关, 而极簇理论已被应用到多项式系统的实根求解问题中, 相关结果参见 [3, 4, 5, 60].

一些基本记号和假设 本章中沿用第三章中的相关记号, 下文中我们将代数簇 $V(f_1^{\mathbf{A}}, \dots, f_p^{\mathbf{A}})$ 简记为 $V^{\mathbf{A}}$. 注意到 $f^* = \inf_{x \in V^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n} f^{\mathbf{A}}(x)$. 给定多项式集合 $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_p) \subset \mathbb{Q}[X_1, \dots, X_n]$ 和非负整数 $k \leq n$, 符号 $\text{jac}(\mathbf{F}, [X_k, \dots, X_n])$ 表示截断的 Jacobian 矩阵 $\left(\frac{\partial f_i}{\partial X_j}\right)_{1 \leq i \leq p, k \leq j \leq n}$. 给定矩阵 \mathbf{M} 和整数 r , 记 $\text{Minors}(\mathbf{M}, r)$ 为 \mathbf{M} 所有的 r 阶子式的集合.

在下文中, 我们假定多项式集合 $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_p) \subset \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 满足下列正则性条件(记为 **R**):

R₁: $\langle f_1, \dots, f_p \rangle$ 为根理想并且是等维的;

R₂: 代数簇 $V = V(f_1, \dots, f_p) \subset \mathbb{C}^n$ 是光滑的.

类似记号 3.4, 我们给出下面给出一组重要的多项式集合:

记号 4.1.

当 $i = d$ 时, 令 $\mathbf{M}_d^{\mathbf{A}} = \{f_1^{\mathbf{A}}, \dots, f_p^{\mathbf{A}}, X_1, \dots, X_{d-1}\}$. 当 $0 \leq i \leq d-1$ 时, 记 $\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}}$ 为下列多项式的集合

- 多项式 $f_1^{\mathbf{A}}, \dots, f_p^{\mathbf{A}}$;
- 集合 $\text{Minors}(\text{jac}([\mathbf{F}^{\mathbf{A}}, f^{\mathbf{A}}], [X_{i+1}, \dots, X_n]), n-d+1)$;
- 变量 X_1, \dots, X_{i-1} .

记 $W^{\mathbf{A}}$ 为代数集 $\bigcup_{i=0}^d V(\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}})$.

4.2 一般性引理与正定性的代数验证

4.2.1 一般性命题及其证明

本小节中将要得到的两个命题指出了由多项式集合 $\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}}$ 所定义的代数集的几何一般性质, 此性质在本章主要结论的证明中起着重要的作用. 首先我们回顾一下文献 [60] 中关于极簇方面的相关结果.

考虑投射函数 $\Pi_i : (x_1, \dots, x_n) \rightarrow (x_1, \dots, x_i)$ 及满足正则性条件的多项式集合 $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_p) \subset \mathbb{Q}[\bar{X}]$, 记 d 为 $V^{\mathbf{A}}$ 的维数.

对所有的 $0 \leq i \leq d-1$, 记 $W_i^{\mathbf{A}}$ 为下列代数簇

$$V\left(F^{\mathbf{A}}, \text{Minors}(\text{jac}(\mathbf{F}^{\mathbf{A}}, [X_{i+2}, \dots, X_n]), n-d)\right).$$

对于 $i = d$, 令 $W_d^{\mathbf{A}}$ 为代数簇 $V^{\mathbf{A}} = V(\mathbf{F}^{\mathbf{A}})$. 由 [60] 知, $W_i^{\mathbf{A}}$ 为投射函数 Π_{i+1} 限制到代数簇 $V^{\mathbf{A}}$ 上的关键点集合, 我们称其为极簇.

[60, 定理 1]: 在上述假设条件下, 存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O}' \subset \text{GL}_n(\mathbb{C})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \text{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}'$, 任给 $0 \leq i \leq d$, 投射函数 Π_i 限制到集合 $W_i^{\mathbf{A}}$ 上是常态的(Proper).

[60, 定理 2]: 假定多项式集合 \mathbf{F} 满足正则性条件 \mathbf{R} 及对于所有的 $0 \leq i \leq d$, 投射函数 Π_i 限制到 $W_i^{\mathbf{A}}$ 上是常态的, 则对于所有的 $0 \leq i \leq d$, 代数集 $W_i^{\mathbf{A}}$ (或者 $W_i^{\mathbf{A}} \cap V(X_1, \dots, X_i)$) 的维数最多为 i (或者 0) 并且集合 $\bigcup_{i=0}^d W_i^{\mathbf{A}} \cap V(X_1, \dots, X_i)$ 与 $V^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n$ 每一个连通分支具有非空的交集.

命题 4.2. 假设多项式集合 $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_p) \subset \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 满足正则性条件 \mathbf{R} , 则对于多项式 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$, 下列性质成立:

P₁: 对所有的 $t \in \mathbb{R} \setminus \{f(x) \mid x \in V(\mathbf{M}_0)\}$, 由 $\mathbf{F}, f - t$ 生成的理想为等维的根理想, 其相应的代数簇是空集, 或者维数为 $d - 1$ 且是光滑的.

另外, $\{f(x) \mid x \in V(\mathbf{M}_0)\}$ 为空集或者零维集合.

证明. 首先证明 $\{f(x) \mid x \in V(\mathbf{M}_0)\}$ 是有限集合. 令 $X \subset V$ 为 V 中所有使得 $x \in V \rightarrow f(x)$ 的微分映射为满射的点的集合. 注意到 $V \setminus X$ 为 Jacobian 行列式 $\text{jac}([\mathbf{F}, f], [\bar{X}])$ 中所有 $n - d + 1$ 子式的公共零点, 从而有 $V \setminus X = V(\mathbf{M}_0)$.

假设 $f(V(\mathbf{M}_0))$ 在 \mathbb{C} 中稠密, 则由 [63, 第 141 页, 引理 2] 推出存在非空的 Zariski 开集 $Z \subset V(\mathbf{M}_0)$ 使得 $x \in V \rightarrow f(x)$ 的微分映射在所有的 $x \in Z$ 处为满射, 从而得出矛盾, 因而 $\{f(x) \mid x \in V(\mathbf{M}_0)\}$ 是有限的.

注意到对所有 $t \in \mathbb{C} \setminus \{f(x) \mid x \in V(\mathbf{M}_0)\}$ 和所有点 $x \in V \cap V(f - t)$, 矩阵 $\text{jac}([\mathbf{F}, f - t], [X_1, \dots, X_n])$ 的秩为 $n - d + 1$. 由 [17, 第 404 页, 第 16 章, 定理 16.19] 得出对于所有的 $t \in \mathbb{C} \setminus \{f(x) \mid x \in V(\mathbf{M}_0)\}$, $V(\mathbf{F}) \cap V(f - t)$ 的余维数 $\geq n - d + 1$. 任给 $t \in \mathbb{C} \setminus \{f(x) \mid x \in V(\mathbf{M}_0)\}$, 令 Z 为 $V(\mathbf{F}) \cap V(f - t)$ 的任一不可约分支, 则存在 $V(\mathbf{F})$ 的不可约分支 Z' 使得 Z 为 $Z' \cap V(f - t)$ 的不可约分支. 由假设条件知 Z' 的余维数为 $n - d$; 由 Krull 主理想定理 (Krull's Principal Ideal Theorem) 知 Z 为空集或者余维数为 $n - d + 1$. 因为 $V(\mathbf{F}) \cap V(f - t)$ 具有有限个不可约分支, 从而对于所有的 $t \in \mathbb{C} \setminus \{f(x) \mid x \in V(\mathbf{M}_0)\}$ 满足下列性质

- $V(\mathbf{F}) \cap V(f - t)$ 为空集, 或者是等维的且维数为 $d - 1$;
- 在任意点 $x \in V \cap V(f - t)$ 处, $\text{jac}([\mathbf{F}, f - t], [X_1, \dots, X_n])$ 的秩为 $n - d + 1$.

由以上性质得出 $V(\mathbf{F}) \cap V(f - t)$ 是光滑的.

以下我们证明对于所有的 $t \in \mathbb{C} \setminus \{f(x) \mid x \in V(\mathbf{M}_0)\}$, $I_t = \langle \mathbf{F}, f - t \rangle$ 为根理想.

假设 $I_t \neq \langle 1 \rangle$ (否则结论是显然的). 令 $I_t = Q_1 \cap \dots \cap Q_r$ 为 I_t 的极小准素分解. 以下证明对所有的 $1 \leq i \leq r$, Q_i 都是素理想.

对于固定的 $i \in \{1, \dots, r\}$ 存在 $x \in V(Q_i)$ 使得 $x \notin V(\bigcap_{j \neq i} Q_j)$. 令 \mathfrak{m} 为点 x 处的极大理想. 对于一个理想 I (或者一个环 R), 记 $I_{\mathfrak{m}}$ (或者 $R_{\mathfrak{m}}$) 为其在

\mathfrak{m} 处的极大化. 因为 $\text{jac}([\mathbf{F}, f - t], [X_1, \dots, X_n])$ 在 $V(\mathbf{F}) \cap V(f - t)$ 所有点处的秩为 $n - d + 1$, 根据 [17, 第 404 页, 第 16 章, 定理 16.19], $\frac{\mathbb{Q}[\bar{X}]_{\mathfrak{m}}}{(I_t)_{\mathfrak{m}}}$ 为正则的. 因此由 [2, 第 123 页, 引理 11.23] 知其为整环, 从而推出 $(I_t)_{\mathfrak{m}}$ 为素理想. 因为 Q_i 是包含在 \mathfrak{m} 中唯一的准素分支, 所以下列等式成立

$$(I_t)_{\mathfrak{m}} = (Q_i)_{\mathfrak{m}} \cap \bigcap_{Q_j \subset \mathfrak{m}, j \geq r+1} (Q_j)_{\mathfrak{m}} = (Q_i)_{\mathfrak{m}}.$$

因此 $(Q_i)_{\mathfrak{m}} = (I_t)_{\mathfrak{m}}$ 是素理想. 利用 [2, 第 41 页, 命题 3.11] 得出 Q_i 也为素理想. 从而 I_t 为有限个素理想的交集, 即为根理想. \blacksquare

命题 4.3. 假设多项式集合 $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_p) \subset \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 满足正则性条件 \mathbf{R} , 则对于多项式 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$, 存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O}_1 \subset \text{GL}_n(\mathbb{C})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \text{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}_1$, 存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{U}_{\mathbf{A}} \subset \mathbb{C}$ 满足:

P₂: 对于所有的 $t \in \mathbb{R} \cap \mathcal{U}_{\mathbf{A}}$, 任给 $1 \leq i \leq d$, 投射函数 Π_{i-1} 限制到 $V^{\mathbf{A}} \cap V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap V(\text{Minors}(\text{jac}([\mathbf{F}^{\mathbf{A}}, f^{\mathbf{A}}], [X_{i+1}, \dots, X_n]), n - d + 1))$ 是常态的.

证明. 本证明主要基于 [60, 定理 1] 及其证明中的相关结果. 记 $\mathfrak{A} = (\mathfrak{A}_{i,j})_{1 \leq i,j \leq n}$ 为任一矩阵, 其元素为未定元. \mathfrak{t} 为另一未定元. 对于给定多项式 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$, 定义 $f^{\mathfrak{A}} = f(\mathfrak{A}X_1, \dots, \mathfrak{A}X_n) \in \mathbb{Q}(\mathfrak{A}_{i,j})[\bar{X}]$. 对于 $i = d$, 记 $\Delta_d^{\mathfrak{A}}(\mathfrak{t})$ 为理想 $\langle f_1^{\mathfrak{A}}, \dots, f_p^{\mathfrak{A}}, f^{\mathfrak{A}} - \mathfrak{t} \rangle$. 任给 $i \in \{1, \dots, d-1\}$, 令 $\Delta_i^{\mathfrak{A}}(\mathfrak{t})$ 为由多项式 $f_1^{\mathfrak{A}}, \dots, f_p^{\mathfrak{A}}, f^{\mathfrak{A}} - \mathfrak{t}$ 及 $\text{Minors}(\text{jac}([\mathbf{F}^{\mathfrak{A}}, f^{\mathfrak{A}}], [X_{i+1}, \dots, X_n]), n - d + 1)$ 生成的理想.

下面引理说明对于数域 $\mathbb{Q}(\mathfrak{t})$, [60, 第 2.3 节, 命题 1] 依然成立. 实际上, 其证明中用到的工具, 如 Noether 正规化, Krull 主理想定理, Quillen-Suslin 定理及代数 Bertini 定理在任何特征为 0 的域中成立.

引理 4.4. 令 $i \in \{1, \dots, d\}$, $P_{i,\mathfrak{t}}^{\mathfrak{A}}$ 为根理想 $\sqrt{\Delta_i^{\mathfrak{A}}(\mathfrak{t})}$ 的任一素分支, r 为其维数, 则 $r \leq i-1$ 且 $\mathbb{Q}(\mathfrak{t})(\mathfrak{A}_{i,j})[X_1, \dots, X_r] \rightarrow \mathbb{Q}(\mathfrak{t})(\mathfrak{A}_{i,j})[X]/P_{i,\mathfrak{t}}^{\mathfrak{A}}$ 为整扩张.

下面引理指出当将未定元 $\mathfrak{A}_{i,j}$ 及 \mathfrak{t} 限定到一个适当的非空 Zariski 开集上时上述结果依然成立. 这一命题与 [60, 命题 2] 类似, 唯一不同之处是我们需要考虑参量 \mathfrak{t} .

引理 4.5. 存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O}_1 \subset \mathrm{GL}_n(\mathbb{C})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}_1$, 存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{U}_{\mathbf{A}} \subset \mathbb{C}$ 使得对于所有的 $t \in \mathcal{U}_{\mathbf{A}}$, 下列结论成立:

给定 $i \in \{1, \dots, d\}$, 令 P 为根理想 $\sqrt{\Delta_i^{\mathbf{A}}(t)}$ 的任一素分支, 则其维数 $r \leq i - 1$ 且 $\mathbb{C}[X_1, \dots, X_r] \rightarrow \mathbb{C}[X_1, \dots, X_n]/P$ 为整扩张.

证明. 给定矩阵 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{C})$ 及 $1 \leq i \leq d$, 记 $\Delta_i^{\mathbf{A}}(\mathbf{t})$ 为将 $\Delta_i^{\mathfrak{A}}(\mathbf{t})$ 中的 \mathfrak{A} 限定为 A 后得到的理想. 在域 $\mathbb{C}(\mathbf{t})$ 上应用 [60, 命题 2] 推出存在非空的 Zariski 开集 \mathcal{O}_1 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}_1$, 以及根理想 $\sqrt{\Delta_i^{\mathbf{A}}(\mathbf{t})}$ 的所有素分支 $P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}$ 满足:

- $P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}$ 的维数 $r \leq i - 1$;
- $\mathbb{C}(\mathbf{t})[X_1, \dots, X_r] \rightarrow \mathbb{C}(\mathbf{t})[\bar{X}]/P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}$ 为整扩张.

令 $P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}$ 的生成元为 $p_{1,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}, \dots, p_{s,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}$. 记 $Q_{i,t}^{\mathbf{A}}$ 为将这些生成元中的未定元 \mathbf{t} 限定为 t 后的多项式生成的理想. 根据 [60, 命题 2] 的证明, 因为 $Q_{i,t}^{\mathbf{A}}$ 不一定为素理想, 所以用此记号. 因为 $\mathbb{C}(\mathbf{t})[X_1, \dots, X_r] \rightarrow \mathbb{C}(\mathbf{t})[\bar{X}]/P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}$ 是整扩张, 作为 $\mathbb{Q}(\mathbf{t})[\bar{X}]$ 中理想, $P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}$ 包含一个 $\mathbb{Q}(\mathbf{t})[X_1, \dots, X_{r-1}][X_r]$ 中非零的首一多项式, 将其记为 $m_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$. 令 $\alpha(\mathbf{t}) \in \mathbb{Q}[\mathbf{t}]$ 为多项式 $m_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$ 的所有系数中分母的最小公倍式.

记 $\mathcal{S}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$ 为这样一个多项式的集合, 它包含了理想 $P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}$ 的生成元, $P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}$ 的 Gröbner 基及多项式 $m_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$. 令 $\mathcal{T}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$ 为使得 $\mathcal{S}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$ 中多项式所有系数的分母不为零的点的集合. 根据 [60, 命题 2] 的证明, 对于所有的 $t \in \mathcal{T}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$, $Q_{i,t}^{\mathbf{A}}$ 为和 $P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}$ 同维数的等维理想且包含了多项式 $m_{Q_{i,t}^{\mathbf{A}}}$, 其中 $m_{Q_{i,t}^{\mathbf{A}}}$ 为将 $m_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$ 中未定元 \mathbf{t} 限定到 t 后得到的多项式.

令 $\mathcal{V}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}} = \{t \in \mathbb{C} \mid \alpha(t) \neq 0\}$, 则 $\mathcal{V}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$ 为非空的 Zariski 开集. 记 $\mathcal{U}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}} = \mathcal{T}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}} \cap \mathcal{V}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$. 对于 $t \in \mathcal{U}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$, 将 \mathbf{t} 限定到 t 后: 由 $t \in \mathcal{T}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$ 知 $P_t^{\mathbf{A}}$ 是等维的且包含了 $m_{Q_{i,t}^{\mathbf{A}}}$; 由 $t \in \mathcal{V}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$ 知 $m_{Q_{i,t}^{\mathbf{A}}}$ 是首一的. 因此对所有的 $t \in \mathcal{U}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$, $\mathbb{C}[X_1, \dots, X_r] \rightarrow \mathbb{C}[\bar{X}]/Q_{i,t}^{\mathbf{A}}$ 为整扩张. 定义 $\mathcal{U}_{\mathbf{A}} = \bigcap_{i=1}^d \bigcap_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}} \in \mathcal{P}_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}} \mathcal{U}_{P_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}}$, 其中 $\mathcal{P}_{i,\mathbf{t}}^{\mathbf{A}}$ 为理

想 $\Delta_i^{\mathbf{A}}(\mathbf{t})$ 所有的有限个素分支. 由 [60, 命题 2] 的证明得出 $\sqrt{\Delta_i^{\mathbf{A}}(t)} = \bigcap \sqrt{Q_{i,t}^{\mathbf{A}}}$, 其中左边交集中的 $Q_{i,t}^{\mathbf{A}}$ 对应于 $\Delta_i^{\mathbf{A}}(\mathbf{t})$ 所有的素分支. 再根据 [60, 引理 1], 结论成立. ■

下面我们回到命题 4.3 的证明. 根据 [60, 第 2.5 节, 命题 3], 引理 4.5 及 [27, 引理 3.10], 对于 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}_1$ 及 $t \in \mathcal{U}_{\mathbf{A}}$, 下列性质成立:

- 对于根理想 $\sqrt{\Delta_i^{\mathbf{A}}(t)}$ 的每一个素分支 $P_{i,t}^{\mathbf{A}}$, 理想 $P_{i,t}^{\mathbf{A}}$ 的维数 $r \leq i-1$ 且 $\mathbb{C}[X_1, \dots, X_r] \rightarrow \mathbb{C}[\bar{X}]/P_{i,t}^{\mathbf{A}}$ 为整扩张.
- 投射函数 Π_{i-1} 限定到 $V(\Delta_i^{\mathbf{A}}(t))$ 时是常态的.

命题 4.3 中结论成立. ■

4.2.2 基于平方和的代数验证

为得到本章主要结论, 我们还要用到下列引理.

引理 4.6. 假定多项式集合 $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_p) \subset \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 满足正则性条件 **R**. 令 $V = V(\mathbf{F})$, $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 及 $f^* = \inf_{x \in V \cap \mathbb{R}^n} f(x)$. 如果存在 $x \in V \cap \mathbb{R}^n$ 使得 $f(x) = f^*$, 则 $x \in V(\mathbf{M}_0)$.

证明. 由定义知, \mathbf{M}_0 包含了多项式集合 \mathbf{F} 及 $\mathrm{jac}([\mathbf{F}, f], [\bar{X}])$ 所有的 $n-d+1$ 阶子式. 由假设条件 $x \in V$, 我们需要证明矩阵 $\mathrm{jac}([\mathbf{F}, f], [\bar{X}])$ 在点 x 处的秩 $\leq n-d$.

由正则性条件 **R**, $\langle \mathbf{F} \rangle$ 是等维的根理想, 代数簇 V 是光滑的且维数为 d . 因为 $x \in V$, 由 Jacobian 判定准则 ([17, 第 402 页, 定理 16.19]) 得出 $\mathrm{jac}(\mathbf{F}, [X_1, \dots, X_n])$ 在点 x 处的秩为 $n-d$.

不失一般性, 假定 $\mathrm{jac}([f_1, \dots, f_{n-d}], [X_1, \dots, X_n])$ 的秩为 $n-d$. 记 U 为 V 中所有使得 $\mathrm{jac}([f_1, \dots, f_{n-d}], [X_1, \dots, X_n])$ 秩为 $n-d$ 的点的集合. 因为 $x \in U$, 所以 U 非空.

相反的, 假设 $\mathrm{jac}([f_1, \dots, f_{n-d}, f], [X_1, \dots, X_n])$ 在点 x 处的秩为 $n-d+1$. 不失一般性, 假定

$$J = \mathrm{jac}([f_1, \dots, f_{n-d}, f], [X_1, \dots, X_{n-d+1}])$$

在点 x 处可逆. 记 x_i 为点 x 的第 i 个分量, 注意到

$$\tilde{J} = \mathrm{jac}([f_1, \dots, f_{n-d}, f, (X_k - x_k)_{n-d+2 \leq k \leq n}], [X_1, \dots, X_n])$$

在点 x 处是可逆的. 记 \tilde{U} 为 $U \cap V(X_{n-d+2} - x_{n-d+2}, \dots, X_n - x_n)$ 中所有使得 \tilde{J} 可逆的点的集合. 因为 $x \in \tilde{U}$, 所以 \tilde{U} 非空. 在集合 $\{(y, t) \mid y \in \tilde{U} \cap \mathbb{R}^n, t = f(y)\}$ 上应用流形上的反函数定理 ([38, 第 166 页, 定理 7.10]) 推出存在包含 f^* 的开区间 $(a, b) \subset \mathbb{R}$ 使得对于所有的 $\vartheta \in (a, b)$, $V(f - \vartheta) \cap \tilde{U} \cap \mathbb{R}^n \neq \emptyset$. 由 $V(f - \vartheta) \cap \tilde{U} \cap \mathbb{R}^n \subset V(f - \vartheta) \cap V \cap \mathbb{R}^n$ 知存在 $x' \in V \cap \mathbb{R}^n$ 使得 $f(x') < f^*$. 得出矛盾. ■

以下两个定理为本章的主要结论.

定理 4.7. 令多项式集合 $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_p) \subset \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 满足正则性条件 **R**, 记 $V = V(\mathbf{F})$ 及 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$, 则存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O} \subset \mathrm{GL}_n(\mathbb{C})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}$, 下列性质成立:

1. 存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{T}_{\mathbf{A}} \subset \mathbb{C}$ 使得对于所有的 $t \in \mathbb{R} \cap \mathcal{T}_{\mathbf{A}}$, 任给 $1 \leq i \leq d$, $V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap V(M_i^{\mathbf{A}})$ 为空集或零维集合. 集合 $V^{\mathbf{A}} \cap V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap \mathbb{R}^n$ 为空集, 当且仅当任给 $1 \leq i \leq d$, $V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap V(M_i^{\mathbf{A}}) \cap \mathbb{R}^n$ 为空集;
2. 记 $W^{\mathbf{A}}$ 为代数集 $\bigcup_{i=0}^d V(M_i^{\mathbf{A}})$, 则 $f^* = \inf_{x \in W^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n} f(x)$;
3. 对于任意 $0 \leq i \leq d$, $f^{\mathbf{A}}$ 在 $V(M_i^{\mathbf{A}})$ 上只有有限个实的渐近值.

证明. 由命题 4.3 知存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O}_1 \subset \mathrm{GL}_n(\mathbb{C})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}_1$, 存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{U}_{\mathbf{A}} \subset \mathbb{C}$ 满足:

P₂: 对于所有的 $t \in \mathbb{R} \cap \mathcal{U}_{\mathbf{A}}$, 任给 $1 \leq i \leq d$, 投射函数 Π_{i-1} 限制到 $V^{\mathbf{A}} \cap V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap V(\mathrm{Minors}(\mathrm{Jac}([\mathbf{F}^{\mathbf{A}}, f^{\mathbf{A}}], [X_{i+1}, \dots, X_n]), n - d + 1))$ 是常态的.

在下文中记 $\mathcal{O} = \mathcal{O}_1$ 且固定 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}$. 令 $\mathcal{T}_{\mathbf{A}} = \mathcal{U}_{\mathbf{A}} \setminus \{f^{\mathbf{A}}(x) \mid x \in V(M_0^{\mathbf{A}})\}$. 由命题 4.2 知 $\{f^{\mathbf{A}}(x) \mid x \in V(M_0^{\mathbf{A}})\}$ 为空集或者零维集合; 由 $\mathcal{U}_{\mathbf{A}}$ 为非空的 Zariski 开集得出 $\mathcal{T}_{\mathbf{A}}$ 也为非空的 Zariski 开集.

性质 1 的证明: 将命题 4.2 应用到 $F^{\mathbf{A}}$ 及 $f^{\mathbf{A}}$ 得出对所有的 $t \in \mathbb{R} \setminus \{f^{\mathbf{A}}(x) \mid x \in V(M_0^{\mathbf{A}})\}$, 由 $F^{\mathbf{A}}, f^{\mathbf{A}} - t$ 生成的理想为等维的根理想, 其相应的代数簇是光滑的 (性质 P₁) 且 $\{f^{\mathbf{A}}(x) \mid x \in V(M_0^{\mathbf{A}})\}$ 为空集或者零维集合. 根据命题 4.3, 对所有的 $t \in \mathbb{R} \cap \mathcal{T}_{\mathbf{A}}$, 在 $F^{\mathbf{A}}, f^{\mathbf{A}} - t$ 上应用 [60, 定理 2] 推出集合

$\bigcup_{i=1}^d (V^{\mathbf{A}} \cap V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap V(\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}}))$ 与 $V^{\mathbf{A}} \cap V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap \mathbb{R}^n$ 的每一个连通分支的交集为非空的有限集合.

性质 2 的证明: 首先注意到 $f^* = \inf_{x \in V \cap \mathbb{R}^n} f(x) = \inf_{x \in V^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n} f^{\mathbf{A}}(x)$ 及 $W^{\mathbf{A}} = \bigcup_{i=0}^d V(\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}})$. 因为 $W^{\mathbf{A}} \subset V^{\mathbf{A}}$, 不等式 $f^* \leq \inf_{x \in W^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n} f^{\mathbf{A}}(x)$ 成立. 下面我们证明 $\inf_{x \in W^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n} f^{\mathbf{A}}(x) \leq f^*$. 首先假设存在 $x \in V^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n$ 使得 $f^{\mathbf{A}}(x) = f^*$, 由引理 4.6 推出 $x \in V(\mathbf{M}_0^{\mathbf{A}}) \cap \mathbb{R}^n \subset W^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n$, 从而 $\inf_{x \in W^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n} f^{\mathbf{A}}(x) \leq f^*$. 下面假设对所有的 $x \in V^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n$, $f^{\mathbf{A}}(x) > f^*$. 由 $f^* = \inf_{x \in V^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n} f^{\mathbf{A}}(x)$ 得出存在实数 $c > f^*$ 使得对于所有的 $t \in (f^*, c)$, 集合 $V^{\mathbf{A}} \cap V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap \mathbb{R}^n$ 非空. 不失一般性, 假设 c 足够小使得 $(f^*, c) \cap \mathcal{U}_{\mathbf{A}} \neq \emptyset$. 由定理 4.7 中性质 1 知, 任给 $t \in (f^*, c)$, 集合 $W^{\mathbf{A}} \cap V(f^{\mathbf{A}} - t) \cap \mathbb{R}^n$ 非空. 从而不等式 $\inf_{x \in W^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n} f^{\mathbf{A}}(x) \leq f^*$ 成立.

性质 3 的证明: 令 $Z^{\mathbf{A}}$ 为 $V(\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}})$ 的任一不可约分支, 考虑映射 $x \in Z^{\mathbf{A}} \rightarrow f^{\mathbf{A}}(x) \in \mathbb{C}$. 记 $V_{\infty}(f^{\mathbf{A}}, Z^{\mathbf{A}}) \subset \mathbb{C}$ 为下列集合

$$\{t \in \mathbb{C} \mid \exists (x_k)_{k \in \mathbb{N}} \subset Z^{\mathbf{A}} \text{ s.t. } \lim_k \|x_k\| = \infty \text{ and } \lim_k f^{\mathbf{A}}(x_k) = t\}.$$

首先假设 $f^{\mathbf{A}}(Z^{\mathbf{A}})$ 为零维集合, 则 $R_{\infty}(f^{\mathbf{A}}, Z^{\mathbf{A}}) \subset f^{\mathbf{A}}(Z^{\mathbf{A}})$ 也为零维集合. 假设 $f^{\mathbf{A}}(Z^{\mathbf{A}})$ 的维数为 1, 由纤维丛维数定理 ([63, 第 76 页, 第 1 章, 定理 7]) 知, 存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{W} \subset \mathbb{C}$ 使得对于所有的 $t \in \mathcal{W}$, $\dim(Z^{\mathbf{A}} \cap V(f^{\mathbf{A}} - t)) = \dim(Z^{\mathbf{A}}) - 1$. 由定理 4.7 性质 1 推出 $Z^{\mathbf{A}} \cap V(f^{\mathbf{A}} - t)$ 为空集或者零维集合.

- 如果 $Z^{\mathbf{A}} \cap V(f^{\mathbf{A}} - t)$ 为空集, 则 $\dim(Z^{\mathbf{A}}) = 0$. 由假设条件 $\dim(f^{\mathbf{A}}(Z^{\mathbf{A}})) = 1$ 得出矛盾;
- 如果 $Z^{\mathbf{A}} \cap V(f^{\mathbf{A}} - t)$ 为零维集合, 则 $\dim(Z^{\mathbf{A}}) = 1$. 由 [27, 定理 3.8] 知 $V_{\infty}(f^{\mathbf{A}}, Z^{\mathbf{A}}) \subset \mathbb{C}$ 为映射 $x \in Z^{\mathbf{A}} \rightarrow f^{\mathbf{A}}(x)$ 非常态点 (Non-Properness Set) 集合. 而此集合为空集或者零维集合.

由于 $R_{\infty}(f^{\mathbf{A}}, Z^{\mathbf{A}}) \subset V_{\infty}(f^{\mathbf{A}}, Z^{\mathbf{A}})$ 且 $V(\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}})$ 只有有限个不可约分支, 从而证明了定理 4.7. ■

沿用第三章定义 3.2, 根据记号 4.1, 我们有以下主要结果.

定理 4.8. 假设多项式集合 $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_p) \subset \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 满足正则性条件 **R**, 记 $V = V(\mathbf{F})$, $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 及 $f^* = \inf_{x \in V \cap \mathbb{R}^n} f(x)$. 固定实数 $B \in f(V \cap \mathbb{R}^n)$, 则存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O} \subset \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}$:

(a) 如果性质 $\text{SOS}(f^{\mathbf{A}} - a, \mathbf{M}^{\mathbf{A}}, B)$ 成立, 那么 $a \leq f^*$.

(b) 如果 $a < f^*$, 那么性质 $\text{SOS}(f^{\mathbf{A}} - a, \mathbf{M}^{\mathbf{A}}, B)$ 成立.

证明. 参考第三章定理 3.7 的证明. ■

定理 4.9. 假设多项式集合 $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_p) \subset \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 满足正则性条件 **R**. 固定实数 $B \in f(V \cap \mathbb{R}^n)$, 对于 $0 \leq i \leq d$, 定义

$$f_i^* := \sup \left\{ a \in \mathbb{R} \mid f^{\mathbf{A}} - a = S_i^{\mathbf{A}} + T_i^{\mathbf{A}} (B - f^{\mathbf{A}}) \pmod{\langle \mathbf{M}_i^{\mathbf{A}} \rangle} \right\},$$

其中 $S_i^{\mathbf{A}}, T_i^{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 为多项式平方和. 则存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O} \subset \text{GL}_n(\mathbb{C})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \text{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}$ 有 $f^* = \min_{1 \leq i \leq d} f_i^*$.

证明. 由定理 3.1 和定理 4.7 我们得到

$$f_i^* = \inf \{f^{\mathbf{A}}(x) \mid x \in V(M_i^{\mathbf{A}}) \cap \mathbb{R}^n\}, \quad 0 \leq i \leq d.$$

由定理 4.8 推出 $f^* = \min_{0 \leq i \leq d} f_i^*$. 根据记号 4.1, 由 $\mathbf{M}_0^{\mathbf{A}} \supset \mathbf{M}_1^{\mathbf{A}}$ 得到 $V(\mathbf{M}_0^{\mathbf{A}}) \subset V(\mathbf{M}_1^{\mathbf{A}})$, 从而有 $f_1^* \leq f_0^*$ 及 $f^* = \min_{1 \leq i \leq d} f_i^*$. ■

注 3. 注意到 $\mathbf{M}_0^{\mathbf{A}}$ 实为文献 [46] 中的方法用于多项式等式约束问题时所构造的多项式集合.

由定理 4.8 给出的多项式正定性验证可以转化为求解一系列半定规划, 类似讨论还可以参见 [21, 62].

定义 4.1. 对于 $i \in \{1, \dots, d\}$ 及 $k \in \mathbb{N}$, 令 $g_1^i, \dots, g_{m_i}^i$ 为集合 $\text{Minors}(\text{jac}([\mathbf{F}^{\mathbf{A}}, f^{\mathbf{A}}], [X_{i+1}, \dots, X_n]), n-d+1)$ 中的多项式. 对于固定 $B \in f^{\mathbf{A}}(V^{\mathbf{A}} \cap \mathbb{R}^n)$, 定义 $f^{\mathbf{A}}$ 在 $E_{B,i}^{\mathbf{A}}$ (参见定义 3.3) 上的 k 阶松弛最优值为

$$\begin{aligned} f_{i,k}^* := \\ \sup \left\{ a \in \mathbb{R} \mid f^{\mathbf{A}} - a = S_i^{\mathbf{A}} + T_i^{\mathbf{A}} (B - f^{\mathbf{A}}) + \sum_{j=1}^p \phi_{i,j}^{\mathbf{A}} f_j^{\mathbf{A}} + \sum_{j=1}^{m_i} \varphi_{i,j}^{\mathbf{A}} g_j^i + \sum_{j=1}^{i-1} \psi_{i,j}^{\mathbf{A}} X_j \right\}, \end{aligned} \tag{4.2}$$

其中多项式 $S_i^{\mathbf{A}}, T_i^{\mathbf{A}}, \phi_{i,j}^{\mathbf{A}}, \varphi_{i,j}^{\mathbf{A}}$ 及 $\psi_{i,j}^{\mathbf{A}}$ 使得 (4.2) 中等式右边每一项的次数 $\leq 2k$ 且 $S_i^{\mathbf{A}}$ 及 $T_i^{\mathbf{A}}$ 为多项式平方和.

注 4. 与定义 3.4 不同, 为了得到更好的数值稳定性, 此处我们要求 (4.2) 中等式右边每一项的次数 $\leq 2k$.

定理 4.10. 假设多项式集合 $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_p) \subset \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 满足正则性条件 \mathbf{R} , 固定实数 $B \in f(V \cap \mathbb{R}^n)$. 存在非空的 Zariski 开集 $\mathcal{O} \subset \mathrm{GL}_n(\mathbb{C})$ 使得对于所有的 $\mathbf{A} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{Q}) \cap \mathcal{O}$ 及 $1 \leq i \leq d$, 序列 $\{f_{i,k}^*\}, k \in \mathbb{N}$ 单增地收敛到 f_i^* .

证明. 参见第三章定理 3.9 的证明. ■

定义 $\widetilde{f^{\mathbf{A}}} = f^{\mathbf{A}}(0, \dots, 0, X_i, \dots, X_n)$ 及 $\widetilde{g_j^i} = g_j^i(0, \dots, 0, X_i, \dots, X_n)$, $1 \leq i \leq d$, $1 \leq j \leq m_i$. 根据第三章中第 3.2 节相关分析, 在实际计算中, 对于 f_i^* , 我们只需要求解

$$\sup \left\{ a \in \mathbb{R} \mid \widetilde{f^{\mathbf{A}}} - a = \widetilde{S_i^{\mathbf{A}}} + \widetilde{T_i^{\mathbf{A}}} (B - \widetilde{f^{\mathbf{A}}}) + \sum_{j=1}^p \widetilde{\phi_{i,j}^{\mathbf{A}}} \widetilde{f_j^{\mathbf{A}}} + \sum_{j=1}^{m_i} \widetilde{\varphi_{i,j}^{\mathbf{A}}} \widetilde{g_j^i} \right\},$$

其中多项式 $\widetilde{S_i^{\mathbf{A}}}, \widetilde{T_i^{\mathbf{A}}}, \widetilde{\phi_{i,j}^{\mathbf{A}}}, \widetilde{\varphi_{i,j}^{\mathbf{A}}} \in \mathbb{R}[X_i, \dots, X_n]$, $\widetilde{S_i^{\mathbf{A}}}$ 及 $\widetilde{T_i^{\mathbf{A}}}$ 为多项式平方和. 因此问题的变量减少, 从而具有更好的数值稳定性.

注 5. 当 (4.1) 中限制条件个数 $p = 0$ 时, 本章方法可以直接应用于多项式全局优化问题, 即第三章中给出的方法.

4.3 行列式环与等式约束个数

因为集合 $\mathrm{Minors}(\mathrm{Jac}([\mathbf{F}^{\mathbf{A}}, f^{\mathbf{A}}], [X_{i+1}, \dots, X_n]), n-d+1)$ 中多项式的个数往往很大, 我们利用行列式环理论的相关结果来减少集合 $\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}}$ 中多项式的个数. 以下讨论可参考文献 [10, 11].

令 $N = (N_{ij})$ 为 $m \times n$ 矩阵, 其元素为 \mathbb{C} 中的未定元, 记 $\Delta(N)$ 为其所有子式的集合. 定义行列式簇 (Determinantal Variety)

$$D_{t-1}^{m,n} = \{N \in \mathbb{C}^{m \times n} : N \text{ 的秩 } < t\}.$$

令指标 $a_1, \dots, a_t, b_1, \dots, b_t$ 满足 $t \leq \min(m, n)$, $1 \leq a_1 < \dots < a_t \leq m$, $1 \leq b_1 < \dots < b_t \leq n$, 记 $[a_1, \dots, a_t | b_1, \dots, b_t]$ 为矩阵 N 的 t 阶子式, 即 N 中行指标为 a_1, \dots, a_t , 列指标为 b_1, \dots, b_t 的子矩阵的行列式. 我们有

$$D_{t-1}^{m,n} = \{N \in \mathbb{C}^{m \times n} \mid [a_1, \dots, a_t | b_1, \dots, b_t] = 0, \forall [a_1, \dots, a_t | b_1, \dots, b_t] \in \Delta(N)\}$$

在 $\Delta(N)$ 上定义如下偏序(参见 [10, 第 46 页]):

$$\begin{aligned} [a_1, \dots, a_u | b_1, \dots, b_u] &\leq [c_1, \dots, c_v | d_1, \dots, d_v] \\ \iff u &\geq v, \quad a_1 \leq c_1, \dots, a_v \leq c_v, \quad b_1 \leq d_1, \dots, b_v \leq d_v. \end{aligned}$$

对于 $\Delta(N)$ 中的任一子式 $\xi = [a_1, \dots, a_u | b_1, \dots, b_u]$, 定义其长度(*Length*) 为:

$$\begin{aligned} \text{len}(\xi) = k &\iff \text{存在链 } \xi = \xi_k > \xi_{k-1} > \dots > \xi_1, \quad \xi_i \in \Delta(N), \\ &\quad \text{且不存在更长的以 } \xi \text{ 开头的链.} \end{aligned}$$

记 $\Omega(N)$ 为 N 的所有的 k 阶子式的集合, 其中 $k \geq t$. 对任意 $1 \leq l \leq mn - t^2 + 1$, 定义

$$\theta_l(N) = \sum_{\xi \in \Omega(N), \text{len}(\xi)=l} \xi.$$

引理 4.11. [10, 引理 5.9] 我们有

$$D_{t-1}^{m,n} = \{N \in \mathbb{C}^{m \times n} \mid \theta_l(N) = 0, \quad l = 1, \dots, mn - t^2 + 1\}.$$

[11, 定理 2] 证明最少需要 $mn - t^2 + 1$ 个多项式来定义行列式簇 $D_{t-1}^{m,n}$.

为方便地得到所有具有给定长度的子式, 以下构造由 $\Omega(N)$ 中所有子式构成的链的集合. 下列命题给出了 $\Omega(N)$ 中具有最大长度的子式. 进一步的, 在其证明中我们构造出 $\Omega(N)$ 中以此子式开头的所有的链.

命题 4.12. $\Omega(N)$ 中具有最大长度的子式为 $[m-t+1, \dots, m | n-t+1, \dots, n]$, 其长度为 $mn - t^2 + 1$.

为了使其证明更加清晰, 我们首先对于特殊情形 $m = 3, n = 4$ 且 $t = 2$ 构造出其所有的链. 首先构造所有的包含 2 阶子式的链. 以具有最大长度的子式开始, 如果我们将前一个子式的行列指标中的某一个减少 1 并且保持新的行列指标是严格单增的, 那么我们就构造出了一个具有更小长度的子式, 且其小于前一子式. 图 4.1 显示了所有的由 2 阶子式构成的链, 其中箭头显示了子式间的大关系并指向较大的子式. 然后我们将所有 3 阶子式加入已经生成的链中. 图 4.2 显示了 $\Omega(N)$ 中以所有子式构成链的集合, 其中 $m = 3, n = 4, t = 2$.

从图 4.1 和图 4.2, 我们观察到:

1. 同一列中所有 k 阶子式的行列指标之和相等且这一值比前一列子式的相应的值少 1.
2. 所有可以延长由 k 阶子式构成的链的 $k+1$ 阶子式都具有形式 $[1, 2, \dots, k, a|1, 2, \dots, k, b]$, 其中 $k+1 \leq a \leq m$ 且 $k+1 \leq b \leq n$.

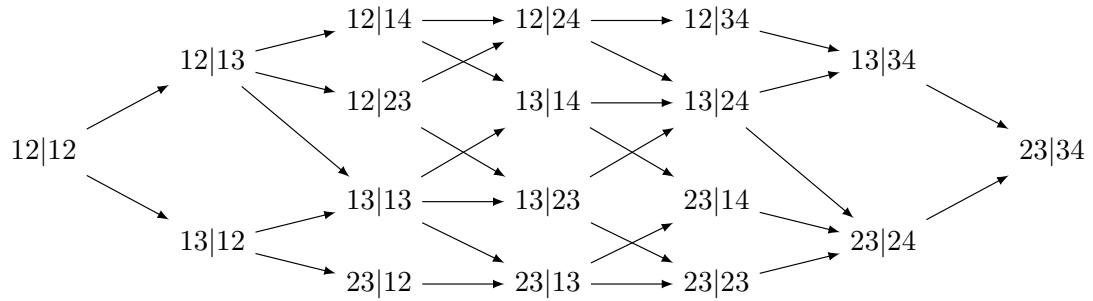


图 4.1: 所有由 2 阶子式构成的链的集合.

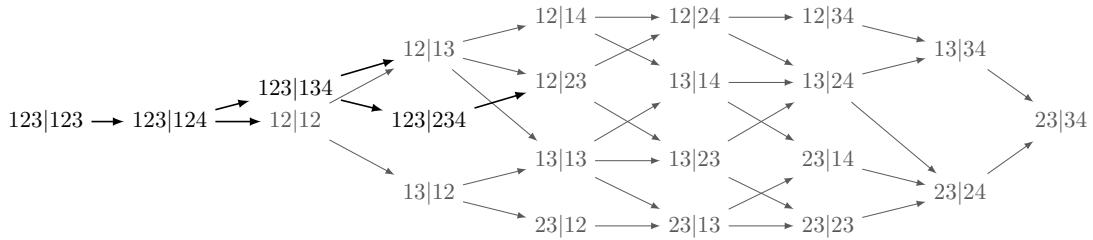


图 4.2: 所有由 2 阶和 3 阶子式构成的链的集合.

命题 4.12 的证明. 结论的第一部分是显然的, 以下证明第二部分. 不失一般性, 假设 $m \leq n$.

首先构造出所有由 t 阶子式构成的链的集合, 并记其为 \mathfrak{C}_t . 由具有最大长度的 t 阶子式 $\xi = [m-t+1, \dots, m | n-t+1, \dots, n]$ 开始, 通过将 ξ 行列指标中的某一个减少 1 并保持新的行列指标严格单增, 则构造出小于前一子式的新的 t 阶子式. 重复这一过程直到得到最小子式 $\xi_1 = [1, 2, \dots, t | 1, 2, \dots, t]$. 由观察 (1) 知, 以子式 ξ 开始到子式 ξ_1 结束的链 χ_t 的长度为

$$(2m-t+1)t/2 + (2n-t+1)t/2 - (1+t)t + 1 = (m+n)t - 2t^2 + 1.$$

接着我们指出如何将 $\Omega(N)$ 中 $t+1$ 子式加入到已构造的链的集合 \mathfrak{C}_t 中. 注意到对每一个 $t+1$ 阶子式 $\xi = [a_1, \dots, a_t, a_{t+1} | b_1, \dots, b_t, b_{t+1}]$, t 阶子式 $\eta = [a_1, \dots, a_t | b_1, \dots, b_t]$ 已经存在于链 \mathfrak{C}_t 之中. 因为 $\xi < \eta$, 我们将 ξ 放入子式 η 所在列的下一列中(左边一列). 重复这一过程则构造出了包含 $\Omega(N)$ 中所有 $t+1$ 阶子式的链的集合, 记其为 \mathfrak{C}_{t+1} . 根据观察 (1) 和观察 (2) 知由子式 $[1, \dots, t, m | 1, \dots, t, n]$ 开始到子式 $[1, \dots, t, t+1 | 1, \dots, t, t+1]$ 结束的链 χ_{t+1} 的长度为 $m+n-2(t+1)+1$. 因为 χ_{t+1} 中所有的子式比 χ_t 中所有子式都要小, 我们可以将链 χ_{t+1} 加入到链 χ_t 的尾部.

重复以上过程, 我们得到链 $\chi_{t+2}, \dots, \chi_m$. 显然的, 从子式 $[1, \dots, m | 1, \dots, m]$ 到子式 ξ 的链 $\chi_m \rightarrow \dots \rightarrow \chi_{t+1} \rightarrow \chi_t$ 具有最大长度

$$(m+n)t - 2t^2 + 1 + \sum_{s=t+1}^m (m+n-2s+1) = mn - t^2 + 1,$$

由定义, 此值也为子式 ξ 的长度. ■

我们得到下列结果

引理 4.13. 集合 $\text{Minors}(\text{jac}([\mathbf{F}^{\mathbf{A}}, f^{\mathbf{A}}], [X_{i+1}, \dots, X_n]), n-d+1)$ 可以由 $(n-i)(p+1) - (n-d+1)^2 + 1$ 个多项式代替.

证明. $\text{jac}([\mathbf{F}^{\mathbf{A}}, f^{\mathbf{A}}], [X_{i+1}, \dots, X_n])$ 为 $(p+1) \times (n-i)$ 的矩阵. 令 $t = n-d+1$, 应用引理 4.11, 集合 $\text{Minors}(\text{jac}([\mathbf{F}^{\mathbf{A}}, f^{\mathbf{A}}], [X_{i+1}, \dots, X_n]), n-d+1)$ 中多项式的个数由 $\binom{n-i}{n-d+1} \binom{p+1}{n-d+1}$ 减少为 $(n-i)(p+1) - (n-d+1)^2 + 1$. ■

对于较大的 n , 与原来个数 $\binom{n-i}{n-d+1} \binom{p+1}{n-d+1}$ 相比, 新的集合 $\mathbf{M}_i^{\mathbf{A}}$ 中多项式的个数大大减少.

4.4 数值实验

令 \mathbf{A} 为单位矩阵. 我们调用 Maple 软件包 `PolynomialIdeals` 中命令 `IsRadical` 来测试给定理想 I 是否为根理想并调用 `Groebner` 中命令 `HilbertDimension` 来得到簇 $V(I)$ 的维数. 然后应用 Matlab 软件包 SOSTOOLS [53] 来求解 (4.2).

多项式等式约束优化问题. 我们可以将本章的方法直接应用到下列多项式优化问题.

$$\inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad s.t. \quad f_1(x) = \dots = f_p(x) = 0. \quad (4.3)$$

和文献 [33], [16], 及 [46] 中的方法相比较, 我们的方法:

- 不要求问题的可行域是紧致的.
- 不要求下确界 f^* 在某个 KKT 点处到达.
- 正则性假设条件 **R** 比文献 [46] 中假设条件要弱.

例 4.1. [46, Example 5.2] 考虑优化问题

$$\begin{aligned} & \inf_{x \in \mathbb{R}^3} x_1^6 + x_2^6 + x_3^6 + 3x_1^2x_2^2x_3^2 - x_1^2(x_2^4 + x_3^4) - x_2^2(x_3^4 + x_1^4) - x_3^2(x_1^4 + x_2^4) \\ & \quad s.t. \quad x_1 + x_2 + x_3 - 1 = 0. \end{aligned}$$

此问题的可行域是非紧致的. 目标函数为 Robinson 多项式, 因此为非负的但不能写成多项式平方和. 我们有 $f^* = 0$. 令 $g := X_1 + X_2 + X_3 - 1$, 理想 $\langle g \rangle$ 的维数为 2.

- 计算 f_1^* , 我们有 $\mathbf{M}_1 = \{g, h\}$, 其中

$$\begin{aligned} h := & 6X_2^5 + 6X_1^2X_2X_3^2 - 4X_1^2X_2^3 - 2X_2X_3^4 - 2X_2X_1^4 - 4X_3^2X_2^3 \\ & - 6X_3^5 - 6X_1^2X_2^2X_3 + 4X_1^2X_3^3 + 4X_2^2X_3^3 + 2X_3X_1^4 + 2X_3X_2^4. \end{aligned}$$

设 $B = f(1, 0, 0) = 1$, 计算所得结果为: $f_{1,3}^* \approx -5.8186 \times 10^{-2}$, $f_{1,4}^* \approx -1.6531 \times 10^{-2}$, $f_{1,5}^* \approx -4.1363 \times 10^{-4}$, $f_{1,6}^* \approx 4.2929 \times 10^{-10}$. 由于数值误差的存在, 上述计算结果的符号有误.

- 计算 f_2^* , 我们有 $\mathbf{M}_2 = \{g, X_1\}$. 问题等价于求解

$$\begin{aligned} & \inf_{x_2, x_3 \in \mathbb{R}} x_2^6 + x_3^6 - x_2^2x_3^4 - x_3^2x_2^4 \\ & \quad s.t. \quad x_2 + x_3 - 1 = 0. \end{aligned}$$

设 $B = f(1, 0) = 1$, 数值结果为: $f_{2,2}^* \approx -8.0658 \times 10^{-12}$, $f_{2,3}^* \approx -9.1665 \times 10^{-12}$. 显然 f_2^* 也等于 f^* .

例 4.2. 考虑优化问题

$$\begin{aligned} \inf_{x \in \mathbb{R}^2} & (x_1 + 1)^2 + x_2^2 \\ \text{s.t. } & -x_1^3 + x_2^2 = 0. \end{aligned}$$

显然的, 我们有 $x^* = (0, 0)$ 且 $f^* = 1$. 容易验证问题的可行域是非紧致的且最优点不满足 KKT 条件. 此问题满足正则性条件 \mathbf{R} 且维数 $d = 1$. 令 $\mathbf{M}_1 = \{-X_1^3 + X_2^2\}$ 及 $B = f(0, 0) = 1$, 计算结果为: $f_{1,2}^* \approx 0.99842$, $f_{1,3}^* \approx 0.9989$, $f_{1,4}^* \approx 0.99865$, $f_{1,5}^* \approx 0.99844$. 虽然存在数值误差, 我们的结果依然非常接近 f^* .

例 4.3. 考虑优化问题

$$\begin{aligned} \inf_{x \in \mathbb{R}^2} & x_1 \\ \text{s.t. } & x_1 x_2^2 - 1 = 0. \end{aligned}$$

此问题的 KKT 系统 $\{1 - \lambda X_2^2, -2X_1 X_2 \lambda, X_1 X_2^2 - 1\}$ 无解. 应用我们的方法, $d = 1$ 且 $\mathbf{M}_1 = \{X_1 X_2^2 - 1\}$. 设 $B = f(1, 1) = 1$, 计算结果为: $f_{1,3}^* \approx 2.5255 \times 10^{-3}$, $f_{1,4}^* \approx 1.902 \times 10^{-2}$, $f_{1,5}^* \approx 8.1335 \times 10^{-2}$. 显然此处计算具有很大的数值问题: 在最优点处 $X_2 \rightarrow \infty$, 使得相应的半定规划中的 Moment 矩阵的某些元素趋向于无穷. 我们可以在计算 (4.2) 时尝试采用稀疏单项式向量的方法去解决这一问题. 类似分析可以参见第三章.

具有不等式约束的多项式优化问题. 下面我们考虑更一般的优化问题

$$\begin{aligned} \inf_{x \in \mathbb{R}^n} & f(x) \\ \text{s.t. } & f_1(x) = \dots = f_p(x) = 0, \\ & g_1(x) \geq 0, \dots, g_q(x) \geq 0. \end{aligned} \tag{4.4}$$

如果我们引入新的变量 $T = [T_1, \dots, T_q]$ 得到等价优化问题:

$$\begin{aligned} \inf_{x \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R}^q} & f(x) \\ \text{s.t. } & f_1(x) = \dots = f_p(x) = 0, \\ & g_1(x) - t_1^2 = 0, \dots, g_q(x) - t_q^2 = 0. \end{aligned}$$

则依然可以采用本章的方法来求解 (4.4). 然而, 由于加入新的变量, 相应的半定规划问题的条件数可能会很差. 下面是一些用来处理其数值问题提高计算精度的技巧方法:

- 缩放问题的参数, 使得问题的最优解的各个非零分量接近于 1. 尽管在知道最优解前很难得到理想的缩放比例, 但如果知道最优解处各个分量的上下界, 有时依然可以通过对变量进行线性变换来达到这一目的.
- 选择尽可能接近最优值的 B .
- 将 (4.4) 中多项式的系数正规化.

更多的细节可以参见 [71].

例 4.4. [16, 例 4.3] 考虑优化问题

$$\begin{aligned} & \inf_{x \in \mathbb{R}^2} (-4x_1^2 + x_2^2)(3x_1 + 4x_2 - 12) \\ & \text{s.t. } 3x_1 - 4x_2 \leq 12, \quad 2x_1 - x_2 \leq 0, \quad -2x_1 - x_2 \leq 0. \end{aligned}$$

由约束多项式定义的半代数集是非紧致的. 最优值 $f^* = -\frac{1024}{55} \approx -18.6182$ 且最优解为 $x^* = (24/55, 128/55) \approx (-0.4364, 2.3273)$. 令 $g_1 := 12 - 3X_1 + 4X_2 - T_1^2$, $g_2 := X_2 - 2X_1 - T_2^2$, $g_3 := X_2 + 2X_1 - T_3^2$, 则理想 $\langle g_1, g_2, g_3 \rangle$ 的维数为 2.

- 计算 f_1^* , 我们有 $\mathsf{M}_1 = \{g_1, g_2, g_3, h\}$, 其中 $h := (-16X_1^2 + 6X_2X_1 + 12X_2^2 - 24X_2)T_1T_2T_3$. 设 $B = f(0, 0, 0) = 0$, 计算结果为: $f_{1,3}^* \approx -20.184$, $f_{1,4}^* \approx -18.618$.
- 计算 f_2^* , 我们有 $\mathsf{M}_1 = \{g_1, g_2, g_3, X_1\}$. 问题等价于求解

$$\begin{aligned} & \inf_{x \in \mathbb{R}^4, t \in \mathbb{R}^3} x_2^2(4x_2 - 12) \\ & \text{s.t. } -4x_2 + t_1^2 = 12, \quad -x_2 + t_2^2 = 0, \quad -x_2 + t_3^2 = 0. \end{aligned}$$

容易看出 $f_2^* = -16$.

例 4.5. [16, 例 4.5] 考虑下面非凸的二次优化问题

$$\begin{aligned} & \inf_{x \in \mathbb{R}^2} x_1^2 + x_2^2 \\ & \text{s.t. } x_2^2 - 1 \geq 0, \\ & \quad x_1^2 - Nx_1x_2 - 1 \geq 0, \\ & \quad x_1^2 + Nx_1x_2 - 1 \geq 0. \end{aligned}$$

文献 [16] 中证明 $f^* = \frac{1}{2}(N^2 + N\sqrt{N^2 + 4}) + 2$. 令 $g_1 := X_2^2 - 1 - T_1^2$, $g_2 := X_1^2 - NX_1X_2 - 1 - T_2^2$, $g_3 := X_1^2 + NX_1X_2 - 1 - T_3^2$, 则理想 $\langle g_1, g_2, g_3 \rangle$ 的维数为 2. 可以验证 $V(\mathbb{M}_2) = \emptyset$. 从而对于给定常量 N , 我们只需要计算 f_1^* . 我们有 $\mathbb{M}_1 = \{g_1, g_2, g_3, h\}$, 其中 $h = X_2T_1T_2T_3$.

- $N = 2$, 则有 $f^* \approx 6.8284$. 对于 $B = f(3, 1) = 10$, 计算结果为: $f_{1,2}^* \approx 4$, $f_{1,3}^* \approx 6.7692$, $f_{1,4}^* \approx 6.8284$.
- $N = 3$, 则有 $f^* \approx 11.9083$. 对于 $B = f(4, 1) = 17$, 计算结果为: $f_{1,2}^* \approx 5$, $f_{1,3}^* \approx 11.316$, $f_{1,4}^* \approx 11.908$.
- $N = 4$, 则有 $f^* \approx 18.9443$. 对于 $B = f(5, 1) = 26$, 计算结果为: $f_{1,2}^* \approx 6$, $f_{1,3}^* \approx 17.2$, $f_{1,4}^* \approx 22.168$. 如果令 $B = f(4.3, 1) = 19.49$, 计算结果为: $f_{1,2}^* \approx 15.333$, $f_{1,3}^* \approx 18.944$.

第五章 非负多项式的 Hilbert-Artin 表达式

5.1 前言

本论文第三章和第四章及其中引用的相关文献给出了多种求解多项式全局或者在给定可行域上的下确界的方法, 其基本思路都是将问题松弛为一系列的半定规划问题, 然后通过求解半定规划问题得到收敛于下确界的序列. 由于计算的数值结果存在浮点数舍入误差并且下确界可能是代数数, 因此所得结果只是下确界的近似下界. 此处自然产生的一个问题为, 给定多项式 $f(\bar{X}) \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$, 如何得到其准确可信下界. 此问题涉及到如何判定给定多项式在 \mathbb{R}^n 上为非负多项式. 关于非负多项式的讨论可以追溯到著名数学家 Hilbert 的第十七问题. 在 1900 年法国巴黎的国际数学家大会上, Hilbert 提出下面问题: 对于任何非负多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 是否存在有理函数 $g_1, \dots, g_s \in \mathbb{R}(\bar{X})$ 使得 $f = \sum_{i=1}^s g_i^2$? 1927 年, 奥地利数学家 Emil Artin 对这一问题给出了肯定的证明并以此为实代数理论的发展奠定了基础.

以下假设 f 的最高系数为偶次. 首先我们考虑如何得到 $f(\bar{X}) \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 准确的平方和下界, 即求解有理数 \tilde{r} 及有理矩阵 \tilde{W} 使得下式成立:

$$f - \tilde{r} = m_e(\bar{X})^T \cdot \tilde{W} \cdot m_e(\bar{X}), \quad \tilde{W} \succeq 0, \quad \tilde{W}^T = \tilde{W},$$

其中 $e = \deg(f)/2$, $m_e(\bar{X})$ 为所有次数 $\leq e$ 的单项式构成的列向量. 由于计算误差, 我们只能得到浮点数 r^* 及浮点数矩阵 W , 使得上述条件近似成立:

$$f - r^* \approx m_e(\bar{X})^T \cdot W \cdot m_e(\bar{X}), \quad W \succeq 0, \quad W^T \approx W.$$

受 Peyrl 和 Parillo 在 [52] 中的有理化投影方法启发, [29] 将求解半定规划得到的数值矩阵 W 作为初始值, 随后用 Newton 迭代方法来精化矩阵 W , 然后将 r^* 减小为一个有理下界 \tilde{r} , 将矩阵 W 转化为一个有理矩阵并且将其投影到如下仿射线性超平面

$$\mathcal{X} = \{A \mid A^T = A, f(\bar{X}) - \tilde{r} = m_e(\bar{X})^T \cdot A \cdot m_e(\bar{X})\}. \quad (5.1)$$

令数域 $K = \mathbb{R}$ 或 \mathbb{Q} , 根据Artin 对 Hilbert 第十七问题的证明, 多项式 $f(\bar{X}) \in K[\bar{X}]$ 非负当且仅当

$$\forall \xi_1, \dots, \xi_n \in K: f(\xi_1, \dots, \xi_n) \geq 0,$$

当且仅当

$$\exists u_i, v_j \in K[\bar{X}]: f(\bar{X}) = \frac{\sum_{i=1}^{t_1} u_i^2}{\sum_{j=1}^{t_2} v_j^2},$$

当且仅当存在 $e \geq 0$, 数域 K 上矩阵 $W^{[1]} \succeq 0$, $W^{[2]} \succeq 0$, $W^{[2]} \neq 0$ 使得

$$f(\bar{X}) \cdot (m_e(\bar{X})^T W^{[2]} m_e(\bar{X})) = m_{\tilde{e}}(\bar{X})^T W^{[1]} m_{\tilde{e}}(\bar{X}), \quad (5.2)$$

其中 $\tilde{e} = e + (\deg f)/2$, $m_e(\bar{X})$ 和 $m_{\tilde{e}}(\bar{X})$ 分别为所有次数小于等于 e 和 \tilde{e} 的单项式构成的列向量. [30] 中作者将 [29] 种方法推广到如何求解非负有理系数多项式的准确有理函数平方和分解, 即固定分母次数 e , 求解有理半正定矩阵 $W^{[1]}, W^{[2]}$ 使得 (5.2) 严格成立. 由上述分析知, 当固定分母次数 e 或者将 $m_e(\bar{X})$ 由给定子集代替后, 分子次数 \tilde{e} 及矩阵 $W^{[1]}, W^{[2]}$ 的维数随之确定. 假设多项式 $f(\bar{X}) \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 非负, 如果在有限步内, 利用 [30] 中的方法得不到准确的 $W^{[1]}, W^{[2]}$ 使得 (5.2) 严格成立, 则有两种情形可能发生:

1. 对于已固定的 e 或代替 $m_e(\bar{X})$ 的给定子集, 不存在有理半正定矩阵 $W^{[1]}, W^{[2]}$ 使得 (5.2) 成立.
2. 存在有理半正定矩阵 $W^{[1]}, W^{[2]}$ 使得 (5.2) 成立, 但是难以求得. 例如, 有限步 Newton 迭代后的解仍不够精确或者 $W^{[1]}, W^{[2]}$ 为亏秩较大的矩阵.

对于情形 1, 我们可以增加次数 e 或选择新的支撑单项式集重新计算; 对于情形 2, 我们可以增加 Newton 迭代次数或者利用 [30] 中所述技巧得到准确有理函数平方和分解. 这里产生的问题是如何区分这两种情形. 为了使得问题更加清晰和一般化, 我们作下面一些记号.

对 $t \in \mathbb{N}$, 记 $\mathbb{N}_t^n = \{\alpha \in \mathbb{N}^n \mid |\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i \leq t\}$. 给定多项式 $f = \sum_{\alpha} f_{\alpha} X_1^{\alpha_1} \dots X_n^{\alpha_n} \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 令 $\text{supp}(f) = \{X_1^{\alpha_1} \dots X_n^{\alpha_n} \mid f_{\alpha} \neq 0\}$, 即 f 支撑单项式的集合. 令 SOS 表示环 $\mathbb{R}[\bar{X}]$ 中多项式平方和的集合. 给定 $n > 0$ 及 $e \geq 0$, 令 $\mathcal{T}[\bar{X}; e] = \{X_1^{e_1} \dots X_n^{e_n} \mid e_1 + \dots + e_n \leq e\}$, 即所有带有 n 个变元且次数 $\leq e$ 的单项式的集合. 对于子集 $S[\bar{X}; e] \subseteq \mathcal{T}[\bar{X}; e]$, 记 $\text{SOS}_{S[\bar{X}; e]} = \{\sum v_j^2 \mid v_j \in$

$\mathbb{R}[\bar{X}], \text{supp}(v_j) \subseteq S[\bar{X}; e] \subseteq T[\bar{X}; e]\}$. 符号 $\text{SOS}/\text{SOS}_{S[\bar{X}; e]}$ 表示有理函数的子集 $\{\sum u_i^2 / \sum v_j^2 \mid u_i, v_j \in \mathbb{R}[\bar{X}], \text{supp}(v_j) \subseteq S[\bar{X}; e] \subseteq T[\bar{X}; e]\}$. 粗体的 $\mathbf{0}$ 零矩阵, I 表示单位矩阵.

问题: 对于给定多项式 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$, $e \geq 0$ 及子集 $S[\bar{X}; e] \subseteq T[\bar{X}; e]$, 如何验证 $f \notin \text{SOS}/\text{SOS}_{S[\bar{X}; e]}$?

5.2 非负多项式的 Hilbert-Artin 表达式

5.2.1 有理函数平方和与半定规划

注意到 $f \in \text{SOS}/\text{SOS}_{S[\bar{X}; e]}$ 当且仅当存在多项式 $u_i(\bar{X}), v_j(x) \in \mathbb{R}[\bar{X}]$ 其中 $\text{supp}(v_j) \in S[\bar{X}; e]$, 使得

$$0 = \sum_{i=1}^{t_1} u_i(\bar{X})^2 + (-f) \sum_{j=1}^{t_2} v_j(\bar{X})^2,$$

考虑下面集合

$$\left\{ [W^{[1]}, W^{[2]}] \left| \begin{array}{l} m_{T[\bar{X}; \tilde{e}]}^T W^{[1]} m_{T[\bar{X}; \tilde{e}]} = f(\bar{X}) \cdot m_{S[\bar{X}; e]}^T W^{[2]} m_{S[\bar{X}; e]} \\ W^{[1]} \succeq 0, W^{[2]} \succeq 0, \mathbf{Tr}(W^{[2]}) = 1 \end{array} \right. \right\}, \quad (5.3)$$

其中 $m_{S[\bar{X}; e]}$ 和 $m_{T[\bar{X}; \tilde{e}]}$ 分别表示由 $S[\bar{X}; e]$ 和 $T[\bar{X}; \tilde{e}]$ 中元素构成的列向量. 约束条件 $\mathbf{Tr}(W^{[2]}) = 1$ 使得 $W^{[2]} \neq \mathbf{0}$, 即分母 $\sum_{j=1}^{t_2} v_j(\bar{X})^2$ 不为零多项式. 令 $\tilde{e} = e + \deg(f)/2$, 我们有

$$\{\bar{X}^{\alpha+\beta} \mid \bar{X}^\alpha, \bar{X}^\beta \in T[\bar{X}; \tilde{e}]\} \supseteq \{\bar{X}^{\alpha+\beta+\gamma} \mid \bar{X}^\gamma \in \text{supp}(f), \bar{X}^\alpha, \bar{X}^\beta \in S[\bar{X}; e]\}.$$

因此 $f \notin \text{SOS}/\text{SOS}_{S[\bar{X}; e]}$ 当且仅当集合 (5.3) 为空集.

回顾下面标准的半定规划问题 (参见 [70]),

$$\mathbb{P} \mapsto \begin{cases} \sup_W -\mathbf{Tr}(CW) \\ s.t. \mathbf{Tr}(A_i W) = b_i, i = 1 \dots l, \\ W \succeq 0, W^T = W. \end{cases} \quad \mathbb{P}^* \mapsto \begin{cases} \inf_{y \in \mathbb{R}^l} b^T y \\ s.t. C + \sum y_i A_i \succeq 0. \end{cases} \quad (5.4)$$

将 (5.3) 中等式左边展开, 则对于其中所有可能出现的次数 $\leq 2\tilde{e}$ 的单项式 \bar{X}^α , 存在对称矩阵 $G^{[\alpha]}$ 使得

$$m_{T[\bar{X}; \tilde{e}]}^T W^{[1]} m_{T[\bar{X}; \tilde{e}]} = \sum_\alpha \mathbf{Tr}(G^{[\alpha]} W^{[1]}) \bar{X}^\alpha, \quad (5.5)$$

类似的, 存在对称矩阵 $H^{[\beta]}$ 使得

$$(-f(\bar{X})) \cdot m_{S[\bar{X};e]}^T W^{[2]} m_{S[\bar{X};e]} = \sum_{\beta} \mathbf{Tr}(H^{[\beta]} W^{[2]}) \bar{X}^{\beta},$$

其中 \bar{X}^{β} 为等式左边乘积中所有可能出现的次数 $\leq 2e$ 的单项式. 考虑下列半定规划:

$$\begin{aligned} r^* := \sup_W -\mathbf{Tr}(CW) \\ s.t. \quad \begin{bmatrix} \vdots \\ \mathbf{Tr}(A^{[\alpha]}W) \\ \vdots \\ \mathbf{Tr}(AW) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}, \quad W \succeq 0, \quad W^T = W, \end{aligned} \quad (5.6)$$

其中 $C := \mathbf{0}$,

$$W := \begin{bmatrix} W^{[1]} & * \\ * & W^{[2]} \end{bmatrix}, \quad A^{[\alpha]} := \begin{bmatrix} G^{[\alpha]} & \\ & H^{[\alpha]} \end{bmatrix}, \quad A := \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \\ & I \end{bmatrix}$$

且 α 为集合 \mathbb{N}_{2e}^n 中任意元素. 其中 C 可以取作任何实的对称矩阵, 为了使得后面的证明和可信验证方法简便, 我们令其为零矩阵. 本章中出现的所有分块半正定矩阵中, 相应位置记为 * 表示其可以为任何使得整个矩阵为半正定的元素; 相应位置留为空白表示其为零矩阵.

我们有, $f \notin \text{SOS/SOS}_{S[\bar{X};e]}$ 当且仅当半定规划 (5.6) 是不可行的.

5.2.2 对偶问题与可信验证

在我们介绍 (5.6) 的对偶问题之前, 我们回顾一下 Moment 矩阵和局部 Moment 矩阵的概念. 给定序列 $y = (y_{\alpha})_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}^n}$, 其相应的(无穷维的) Moment 矩阵 $M(y)$ 的行列由 \mathbb{N}^n 中元素标示. 对于 $\alpha, \beta \in \mathbb{N}^n$, 其位于 (α, β) 处的元素为 $y_{\alpha+\beta}$. 给定整数 $t \geq 1$ 和截断的序列 $y = (y_{\alpha})_{\alpha \in \mathbb{N}_{2t}^n} \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}_{2t}^n}$, 对于 $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_t^n$, 其相应的 t 阶 Moment 矩阵 $M_t(y)$ 中 (α, β) 处的元素为 $y_{\alpha+\beta}$. 给定多项式 $q \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 如果 $M_t(y)$ 中位于 (i, j) 处的元素为 y_{β} , 那么关于 q 的 t 阶局部化 Moment 矩阵定义为

$$M_t(qy)(i, j) := \sum_{\alpha} q_{\alpha} y_{\alpha+\beta}.$$

更详细的介绍, 参见文献 [33, 36].

根据 (5.4), (5.6) 的对偶问题为

$$\begin{aligned} s^* := \inf_{(y,s) \in \mathbb{R}^{m+1}} & s \\ \text{s.t. } & M(y, s) \succeq 0, \end{aligned} \tag{5.7}$$

其中

$$M(y, s) := \begin{bmatrix} M_{\tilde{e}}(y) & \\ & M_e((-f)y) + sI \end{bmatrix},$$

$y := (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}_{2\tilde{e}}^n} \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}_{2\tilde{e}}^n}$, m 为集合 $\mathbb{N}_{2\tilde{e}}^n$ 中所有元素的个数. $M_{\tilde{e}}(y)$ 和 $M_e((-f)y)$ 分别为 Moment 矩阵和局部化 Moment 矩阵.

对于 (5.4) 中标准的半定规划, 我们有下面的 Farkas 引理

引理 5.1. [15, Farkas 引理] 给定 $\{A_i, i = 1, \dots, l \mid A_i^T = A_i\}$, 向量 $b = [b_i] \in \mathbb{R}^l$ 及仿射子集 $\mathcal{A} = \{W \mid W^T = W, \text{Tr}(A_i W) = b_i, i = 1, \dots, l\}$, 假设向量集合 $\{\text{Tr}(A_i W) \mid W \succeq 0\}$ 是闭集, 则当且仅当对于所有使得 $\sum_{i=1}^l y_i A_i \succeq 0$ 成立的向量 $y = [y_i] \in \mathbb{R}^l$, 有 $b^T y \geq 0$ 成立时, 原始问题 \mathbb{P} 的可行域是非空的.

为应用上述 Farkas 引理, 需要证明特殊情形 (5.6) 和 (5.7) 满足引理中假设条件. 我们有以下结论:

引理 5.2. [55] 锥 $SOS_{\mathcal{T}[n;e]}$ 是凸且闭的.

推论 5.3. 对任意子集 $S[n; e] \subseteq \mathcal{T}[n; e]$, 锥 $SOS_{S[n;e]}$ 是凸且闭的.

以下引理证明半定规划 (5.6) 和 (5.7) 满足 Farkas 引理中假设条件

引理 5.4. 半定规划 (5.6) 中, 由所有向量

$$\begin{bmatrix} \vdots \\ \text{Tr}(A^{[\alpha]} W) \\ \vdots \\ \text{Tr}(AW) \end{bmatrix}, \forall W \succeq 0,$$

构成的集合是闭的.

证明. 引理中所述结论等价于: 给定两个多项式序列 $\{q_k\} \in \text{SOS}_{T[n;\tilde{e}]}$ 及 $\{h_k\} \in \text{SOS}_{S[n;e]}$, 如果

1. $\lim_{k \rightarrow \infty} (q_k - f \cdot h_k) = p$, 且
2. $\lim_{k \rightarrow \infty} (\sum_{\alpha} h_{k,2\alpha}) = c$, 其中 $h_{k,2\alpha}$ 多项式 h_k 中项 $\bar{X}^{2\alpha}$ 的系数,

则存在 $q \in \text{SOS}_{T[n;\tilde{e}]}$ 及 $h \in \text{SOS}_{S[n;e]}$, 使得 $p = q - f \cdot h$ 及 $\sum_{\alpha} h_{2\alpha} = c$. 由于所有的 h_k 为多项式平方和, 由 (2) 知对于所有的 α 及 k , $h_{k,\alpha}$ 是有界的. 根据 Bolzano-Weierstrass 定理, $\{h_k\}$ 中存在收敛的子序列 $\{h_{k_i}\}$. 令 $\lim_{i \rightarrow \infty} h_{k_i} = h$ 及 $p_k := q_k - f \cdot h_k$, 则 $\sum_{\alpha} h_{2\alpha} = c$ 且 $\lim_{i \rightarrow \infty} (p_{k_i} + f \cdot h_{k_i}) = p + f \cdot h$. 设 $q := p + f \cdot h$ 则有 $\lim_{i \rightarrow \infty} q_{k_i} = q$. 由推论 5.3 知 $h \in \text{SOS}_{S[n;e]}$, $q \in \text{SOS}_{T[n;\tilde{e}]}$ 及 $p = q - f \cdot h$. 结论成立. ■

以下定理是本章的主要结果

定理 5.5. 给定多项式 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 及整数 $e \geq 0$, 令 $\tilde{e} = e + \deg(f)/2$, 对于任何子集 $S[\bar{X};e] \subseteq T[\bar{X};e]$, 下列结论等价:

1. $f \notin \text{SOS}/\text{SOS}_{S[\bar{X};e]}$,
2. 存在有理数序列 $\hat{y} = (\hat{y}_\alpha) \in \mathbb{Q}^m$, 使得 $M_{\tilde{e}}(\hat{y}) \succeq 0$, $M_e(f\hat{y}) \prec 0$,

其中 m 为集合 $\mathbb{N}_{2\tilde{e}}^n$ 中所有元素的数目.

证明. 由引理 5.1 和引理 5.4 知 $f \notin \text{SOS}/\text{SOS}_{S[\bar{X};e]}$ 当且仅当 (5.7) 中存在可行解 $p' = (y', s') \in \mathbb{R}^{m+1}$ 使得 $M(y', s') \succeq 0$ 且 $s' < 0$. 以下我们证明可以取 p' 为有理数解. 我们需要如下引理

引理 5.6. 半定规划 (5.7) 存在可行点 $\tilde{p} = (\tilde{y}, \tilde{s})$ 使得 $M_{\tilde{e}}(\tilde{y}) \succ 0$ 及 $M_e(-f\tilde{y}) + \tilde{s}I \succ 0$.

证明. 如 [33, 命题 3.1] 的证明, 令 μ 是 \mathbb{R}^n 上一个测度, 它关于 Lebesgue 测度有严格正密度且满足

$$\tilde{y}_\alpha := \int \bar{X}^\alpha d\mu < \infty.$$

则有 $M_{\tilde{e}}(\tilde{y}) \succ 0$. 取

$$\tilde{s} > -\lambda_{\min}(M_e((-f)\tilde{y})),$$

则有 $M_e(-f\tilde{y}) + \tilde{s}I \succ 0$. ■

任给 $0 < t \leq 1$, 令 $\bar{y} = (1-t)y' + t\tilde{y}$ 及 $\bar{s} = (1-t)s' + t\tilde{s}$, 则 $M(\bar{y}, \bar{s}) \succ 0$. 固定 t 使得 $\bar{s} < 0$. 从而存在 $\varepsilon > 0$, 使得任给 $p = (y, s) \in B_{\bar{p}}(\varepsilon)$, 其中 $B_{\bar{p}}(\varepsilon)$ 为以 \bar{p} 为中心以 ε 为半径的球, 我们有 $M(y, s) \succeq 0$. 令 $\varepsilon < \frac{1}{2}|\bar{s}|$, 则存在 $\hat{p} = (\hat{y}, \hat{s}) \in B_{\bar{p}}(\varepsilon)$, 使得 $\hat{p} \in \mathbb{Q}^{m+1}$, $M_{\tilde{e}}(\hat{y}) \succeq 0$, $M_e(-f\hat{y}) + \hat{s}I \succeq 0$ 及 $\hat{s} < 0$, 从而推出 $M_e(f\hat{y}) \prec 0$. 结论成立. ■

5.2.3 Moment 矩阵和多项式环上的线性型

在这一节, 我们从 Moment 矩阵和 $\mathbb{R}[\bar{X}]$ 上线性型关系的角度, 对上一节中给出的可信验证方法进行等价的阐述. 关于 Moment 矩阵和 $\mathbb{R}[\bar{X}]$ 上线性型关系, 参见文献 [36].

给定序列 $y \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}^n}$ 及 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 令 $\text{vec}(f)$ 为多项式 f 的系数向量, 定义相应线性型 $L_y \in (\mathbb{R}[\bar{X}])^*$

$$L_y(f) := y^T \text{vec}(f) = \sum_{\alpha} y_{\alpha} f_{\alpha} \text{ for } f = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \bar{X}^{\alpha} \in \mathbb{R}[\bar{X}]. \quad (5.8)$$

引理 5.7. [36] 给定 $y \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}^n}$, $L_y \in (\mathbb{R}[\bar{X}])^*$ 为 (5.8) 定义的相应线性型, 令 $f, g, h \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 则

1. $L_y(fg) = \text{vec}(f)^T M(y) \text{vec}(g)$; 特别的, $L_y(f^2) = \text{vec}(f)^T M(y) \text{vec}(f)$, $L_y(f) = \text{vec}(1)^T M(y) \text{vec}(f)$;
2. $L_y(fgh) = \text{vec}(f)^T M(y) \text{vec}(gh) = \text{vec}(fg)^T M(y) \text{vec}(h) = \text{vec}(f)^T M(hy) \text{vec}(g)$,

其中 $M(y)$ 和 $M(hy)$ 分别为 Moment 矩阵和局部化的 Moment 矩阵.

利用上述性质, 我们有下面与定理 5.5 等价的结论:

定理 5.8. 给定多项式 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 及整数 $e \geq 0$, 令 $\mathbb{R}[\bar{X}]_{2\tilde{e}} := \{p \in \mathbb{R}[\bar{X}] \mid \text{supp}(p) \in \mathcal{T}[\bar{X}; 2\tilde{e}]\}$ 其中 $\tilde{e} = e + \deg(f)/2$, 则对于任何子集 $S[\bar{X}; e] \subseteq \mathcal{T}[\bar{X}; e]$, 下面结论等价:

1. $f \notin \text{SOS/SOS}_{S[\bar{X};e]}$,
2. 存在 $\hat{y} \in \mathbb{Q}^m$ 及其相应线性型 $L_{\hat{y}} \in (\mathbb{R}[\bar{X}]_{2\tilde{e}})^*$, 使得对于所有的多项式 $v, u \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 其中 $\text{supp}(v) \in S[\bar{X};e]$ 且 $\text{supp}(u) \in T[\bar{X};\tilde{e}]$, 我们有 $L_{\hat{y}}(fv^2) < 0$ 及 $L_{\hat{y}}(u^2) \geq 0$,

其中 m 为集合 $\{\bar{X}^{\alpha+\beta} \mid \bar{X}^\alpha, \bar{X}^\beta \in T[\bar{X};\tilde{e}]\}$ 中所有元素的数目.

证明. 由半定规划 (5.7) 及定理 (5.5) 知, $f \notin \text{SOS/SOS}_{S[\bar{X};e]}$ 当且仅当存在 $\hat{y} \in \mathbb{Q}^m$ 使得 $M_{\tilde{e}}(\hat{y}) \succeq 0$ 及 $M_e(f\hat{y}) \prec 0$. 由引理 5.7, 结论成立. ■

根据定理 5.8 容易看出定理 5.5 中验证元 (Certificate) \hat{y} 的存在可以推出 $f \notin \text{SOS/SOS}_{S[\bar{X};e]}$. 否则令 $f = \sum_i u_i^2 / \sum_j v_j^2$, 其中 $\text{supp}(u_i) \in T[\bar{X};\tilde{e}]$ 且 $\text{supp}(v_j) \in S[\bar{X};e]$, 则 $0 \leq L_{\hat{y}}(\sum_i u_i^2) = \sum_j L_{\hat{y}}(fv_j^2) < 0$, 得出矛盾.

注 6. 考虑特殊情形: $e = 0$. 此时问题变为如何验证给定多项式 f 没有平方和分解. 根据定理 5.8, f 没有平方和分解当且仅当存在 $\hat{y} \in \mathbb{Q}^m$ 及相应的线性型 $L_{\hat{y}}$, 使得所有的多项式 $u \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 其中 $\text{supp}(u) \in T[\bar{X}; \deg(f)/2]$, 有 $L_{\hat{y}}(u^2) \geq 0$ 且 $L_{\hat{y}}(f) < 0$. 文献 [1] 已对这一特殊情形做出过研究并称 \hat{y} 为分离超平面 (Separating Hyperplane).

5.3 验证元的实际计算

5.3.1 利用 Big- \mathcal{M} 方法求解验证元

给定多项式 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 及整数 $e \geq 0$, 注意到 $f \notin \text{SOS/SOS}_{S[\bar{X};e]}$ 当且仅当半定规划 (5.6) 是不可行的. 由定理 5.5 的证明, 我们有

引理 5.9. $f \notin \text{SOS/SOS}_{S[\bar{X};e]}$ 当且仅当对偶问题 (5.7) 的下确界 $s^* = -\infty$.

由定理 5.5 的证明, 我们需要得到对偶问题 (5.7) 一个可行解 (\hat{y}, \hat{s}) 使得对偶问题的目标函数在此点处的值为负. 由于此时原始问题 (5.6) 不可行, 我们将 Big- \mathcal{M} 方法 ([70]) 应用到半定规划 (5.6) 和 (5.7) 中. 为了使后面给出的验证方

法更为简便, 此处我们只引入一个大 \mathcal{M} 值将 (5.6) 和 (5.7) 变为:

$$\begin{aligned} r^* := \sup & -\mathbf{Tr}(C(W - wI)) - \mathcal{M}w \\ s.t. & \begin{bmatrix} \vdots \\ \mathbf{Tr}(A^{[\alpha]}(W - wI)) \\ \vdots \\ \mathbf{Tr}(A(W - wI)) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}, \quad W \succeq 0, w \geq 0, \end{aligned} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} s^* := \inf & s \\ s.t. & M(y, s) \succeq 0, \\ & \mathbf{Tr}M(y, s) \leq \mathcal{M}, \end{aligned} \quad (5.10)$$

其中 (5.9) 和 (5.10) 中矩阵 $C, A^{[\alpha]}, A, M(y, s)$ 如 (5.6) 和 (5.7) 中所定义. 注意到 (5.10) 的任何可行解同时也是 (5.7) 的可行解. 如文献 [70] 中证明, (5.9) 和 (5.10) 总是严格可行的且随着 $\mathcal{M} \rightarrow \infty$, $r^* = s^* \rightarrow -\infty$. 因此固定大的 \mathcal{M} , 通过求解 (5.9) 和 (5.10), 可以得到所需验证元 \hat{y} . 于是我们有下面算法

算法5.10.

输入: $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}], e \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ 及子集 $S[\bar{X}; e] \subseteq \mathcal{T}[\bar{X}; e]$.

输出: 如果 $f \notin SOS/SOS_{S[\bar{X}; e]}$, 输出验证元 $\hat{y} \in \mathbb{Q}^m$.

1. 将问题转化为半定规划 (5.6) 和 (5.7).
2. 固定大的整数 $\mathcal{M} \in \mathbb{Z}$ 将 (5.6), (5.7) 修改为 (5.9), (5.10).
3. 利用迭代方法求解 (5.9) 和 (5.10) 直到得到解 $p_k = (y^k, s^k)$, 其中 $s^k < 0$.
4. 找到 (5.7) 的一个严格可行解 $\tilde{p} = (\tilde{y}, \tilde{s})$.
5. 固定 $0 < t \leq 1$ 及 $\bar{p} = (1 - t)p_k + t\tilde{p} = (\bar{y}, \bar{s})$ 使得 $\bar{s} < 0$.
6. 在球 $B_\varepsilon(\bar{p})$ 中得到有理数解 $\hat{p} = (\hat{y}, \hat{s}) \in \mathbb{Q}^{m+1}$, 其中 $\varepsilon < \frac{1}{2}|\bar{s}|$.

注 7. 在第 3 步中, 当给定问题规模很大且为良态时, 我们利用 Matlab 中快速且高效的 SDP 软件包求解 (5.9) 和 (5.10), 如 SeDuMi [68]. 如果给定问题规模不大且要求高精度计算 (比如一些病态问题, 我们最后给出一个实例), 可以选择

Maple 中的 SDP 软件包 SDPTools 来求解. 我们在 SDPTools 已经实现了上述算法. 高精度 SDP 软件包的介绍将在第六章中给出.

注 8. 在实际计算中, 如果第 3 步中利用内点法精确求解 (5.9) 和 (5.10), 则其浮点数解 (y^k, s^k) 将非常近似于 (5.7) 的一个严格可行解. 因此, 不通过第 4, 5, 6 步, 我们可以将 (y^k, s^k) 简单地截断为有理数点 (\hat{y}, \hat{s}) , 使得其依然为 (5.7) 的可行解且 $\hat{s} < 0$, 从而得到所需验证元.

5.3.2 考虑问题稀疏性

为了减少计算量, 根据定理 2.2, 我们可以将 (5.3) 中 $m_{T[\bar{X}; \tilde{e}]}$, 即由所有次数 $\leq \tilde{e}$ 的单项式构成的向量, 由其某个子集所代替, 从而降低相应半定规划的规模.

定义 5.1. 给定多项式 $f \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 整数 $e \geq 0$ 及子集 $S[\bar{X}; e] \subseteq T[\bar{X}; e]$, 令 $\mathcal{C}_{f, S[\bar{X}; e]}$ 为集合 $\{\alpha \in \mathbb{N}^n \mid \alpha = \beta + \gamma_1 + \gamma_2, \bar{X}^\beta \in \text{supp}(f), \bar{X}^{\gamma_1}, \bar{X}^{\gamma_2} \in S[\bar{X}; e]\}$ 的凸包. 定义 $\mathcal{G}_{f, S[\bar{X}; e]} = \{\bar{X}^\alpha \mid 2\alpha \in \mathcal{C}_{f, S[\bar{X}; e]}\}$.

由定理 2.2, 我们有 $m_{\mathcal{G}_{f, S[\bar{X}; e]}} \subseteq m_{T[\bar{X}; \tilde{e}]}$ 且 $f \in \text{SOS}/\text{SOS}_{S[\bar{X}; e]}$ 当且仅当

$$0 = m_{\mathcal{G}_{f, S[\bar{X}; e]}}^T W^{[1]} m_{\mathcal{G}_{f, S[\bar{X}; e]}} + (-f(\bar{X})) \cdot m_{S[\bar{X}; e]}^T W^{[2]} m_{S[\bar{X}; e]}.$$

因此推论 5.8 变为

推论 5.11. 给定多项式 $f \in \mathbb{Q}[\bar{X}]$ 及整数 $e \geq 0$, 令 $\mathbb{R}[\bar{X}]_{2\tilde{e}} := \{p \in \mathbb{R}[\bar{X}] \mid \text{supp}(p) \in T[\bar{X}; 2\tilde{e}]\}$, 其中 $\tilde{e} = e + \deg(f)/2$, 则对于任何子集 $S[\bar{X}; e] \subseteq T[\bar{X}; e]$, 下面结论等价:

1. $f \notin \text{SOS}/\text{SOS}_{S[\bar{X}; e]}$,
2. 存在 $\hat{y} \in \mathbb{Q}^m$ 及相应的线性型 $L_{\hat{y}} \in (\mathbb{R}[\bar{X}]_{2\tilde{e}})^*$, 使得对于所有的多项式 $v, u \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 其中 $\text{supp}(v) \in S[\bar{X}; e]$, $\text{supp}(u) \in \mathcal{G}_{f, S[\bar{X}; e]}$, 有 $L_{\hat{y}}(fv^2) < 0$ 及 $L_{\hat{y}}(u^2) \geq 0$.

其中 m 为集合 $\{\bar{X}^{\alpha+\beta} \mid \bar{X}^\alpha, \bar{X}^\beta \in \mathcal{G}_{f, S[\bar{X}; e]}\}$ 中所有元素的数目.

5.4 非负有理函数的 Hilbert-Artin 表达式

我们可以将上述验证方法推广到如下问题: 给定有理函数 $f/g \in \mathbb{Q}(\bar{X})$, 其中 $g(\bar{X}) \geq 0$, 整数 $e \geq 0$ 及子集 $S[\bar{X}; e] \subseteq \mathcal{T}[\bar{X}; e]$, 如何准确验证 $f/g \notin \text{SOS}/\text{SOS}_{S[\bar{X}; e]}$. 注意如果 $g(\bar{X}) \not\geq 0$, 则考虑有理函数 $f^2/g^2 \in \mathbb{Q}(\bar{X})$.

考虑下面集合

$$\left\{ [W^{[1]}, W^{[2]}] \mid \begin{array}{l} g(\bar{X}) \cdot m_{\mathcal{T}[\bar{X}; \tilde{e}]}^T W^{[1]} m_{\mathcal{T}[\bar{X}; \tilde{e}]} = f(\bar{X}) \cdot m_{S[\bar{X}; e]}^T W^{[2]} m_{S[\bar{X}; e]} \\ W^{[1]} \succeq 0, W^{[2]} \succeq 0, \text{Tr}(W^{[2]}) = 1 \end{array} \right\}, \quad (5.11)$$

其中 $\tilde{e} = e + (\deg f - \deg g)/2$. 则有 $f/g \notin \text{SOS}/\text{SOS}_{S[\bar{X}; e]}$ 当且仅当集合 (5.11) 是空集. 令

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &:= \{\bar{X}^{\alpha+\beta+\gamma} \mid \bar{X}^\gamma \in \text{supp}(g), \bar{X}^\alpha, \bar{X}^\beta \in \mathcal{T}[\bar{X}; \tilde{e}]\}, \\ \Gamma_2 &:= \{\bar{X}^{\alpha+\beta+\gamma} \mid \bar{X}^\gamma \in \text{supp}(f), \bar{X}^\alpha, \bar{X}^\beta \in S[\bar{X}; e]\}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

假定 $\Gamma_1 \supseteq \Gamma_2$, 否则显然有 $f/g \notin \text{SOS}/\text{SOS}_{S[\bar{X}; e]}$, 类似第 5.2 节中的分析, 我们有和 (5.6) 中相同形式的半定规划问题. 与 (5.5) 中矩阵 $G^{[\alpha]}$ 的定义不同, 此处令

$$g(\bar{X}) \cdot m_{\mathcal{T}[\bar{X}; \tilde{e}]}^T W^{[1]} m_{\mathcal{T}[\bar{X}; \tilde{e}]} = \sum_{\alpha} \text{Tr}(G^{[\alpha]} W^{[1]}) \bar{X}^\alpha.$$

引理 5.4 中封闭性的结论在本节同样成立, 故在此将其略去. 我们有对偶问题

$$\begin{aligned} s^* &:= \inf_{(y, s) \in \mathbb{R}^{m+1}} s \\ &\text{s.t. } M(y, s) \succeq 0, \end{aligned} \quad (5.13)$$

其中

$$M(y, s) := \begin{bmatrix} M_{\tilde{e}}(gy) & \\ & M_e((-f)y) + sI \end{bmatrix},$$

$y = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}_{2\tilde{e}}^n} \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}_{2\tilde{e}}^n}$, m 为集合 $\mathbb{N}_{2\tilde{e}}^n$ 中所有元素的个数. $M_{\tilde{e}}(gy)$ 和 $M_e((-f)y)$ 分别为局部化的 Moment 矩阵. 类似引理 5.6, 如下结论成立:

引理 5.12. 存在点 $\tilde{p} = (\tilde{y}, \tilde{s})$ 使得 $M_{\tilde{e}}(g\tilde{y}) \succ 0$ and $M_e(-f\tilde{y}) + \tilde{s}I \succ 0$.

证明. 因为 $g(\bar{X})$ 是非负的且具有有限个实根, 根据引理 5.6 中相关证明, 结论成立. ■

根据引理 5.12 及 Farkas 引理, 与定理 5.5 类似, 下列结论成立:

定理 5.13. 给定有理函数 $f/g \in \mathbb{Q}(\bar{X})$, 其中 $g(\bar{X}) \geq 0$, 及整数 $e \geq 0$, 令 $\tilde{e} = e + (\deg f - \deg g)/2$, 则对任何子集 $S[\bar{X}; e] \subseteq \mathcal{T}[\bar{X}; e]$, 下面结论等价:

1. $f/g \notin SOS/SOS_{S[\bar{X}; e]}$,
2. (5.12) 中 $\Gamma_1 \not\supseteq \Gamma_2$, 或者存在有理数序列 $\hat{y} = (\hat{y}_\alpha) \in \mathbb{Q}^m$, 使得 (5.13) 中 $M_{\tilde{e}}(g\hat{y}) \succeq 0$, $M_e(f\hat{y}) \prec 0$,

其中 m 为集合 Γ_1 中所有元素的数目.

从 $\mathbb{R}[\bar{X}]$ 中线性型的角度, 定理 5.13 有下列等价阐述:

定理 5.14. 给定有理函数 $f/g \in \mathbb{Q}(\bar{X})$, 其中 $g(\bar{X}) \geq 0$, 及整数 $e \geq 0$, 令 $\mathbb{R}[\bar{X}]_{2\tilde{e}+\deg g} := \{p \in \mathbb{R}[\bar{X}] \mid \text{supp}(p) \in \mathcal{T}[\bar{X}; 2\tilde{e} + \deg g]\}$, 其中 $\tilde{e} = e + (\deg f - \deg g)/2$, 则对于任何子集 $S[\bar{X}; e] \subseteq \mathcal{T}[\bar{X}; e]$, 下面结论等价:

1. $f/g \notin SOS/SOS_{S[\bar{X}; e]}$,
2. (5.12) 中 $\Gamma_1 \not\supseteq \Gamma_2$, 或者存在有理序列 $\hat{y} \in \mathbb{Q}^m$ 及相应线性型 $L_{\hat{y}} \in (\mathbb{R}[\bar{X}]_{2\tilde{e}+\deg g})^*$, 使得对于所有的多项式 $v, u \in \mathbb{R}[\bar{X}]$, 其中 $\text{supp}(v) \in S[\bar{X}; e]$, $\text{supp}(u) \in \mathcal{T}[\bar{X}; \tilde{e}]$, 我们有 $L_{\hat{y}}(fv^2) < 0$ 且 $L_{\hat{y}}(gu^2) \geq 0$,

其中 m 为集合 Γ_1 中所有元素的数目.

5.5 数值试验

例 5.1. 我们证明 Motzkin 多项式

$$f(X_1, X_2) = X_1^4 X_2^2 + X_1^2 X_2^4 + 1 - 3X_1^2 X_2^2$$

没有平方和分解. 设 $n = 2$, $e = 0$ 及 $\tilde{e} = 3$. 通过考虑稀疏性, 我们有 $\mathcal{G}_{f,[2;0]} = \{1, X_1 X_2, X_1^2 X_2, X_1 X_2^2\}$, 即如果 f 有平方和分解, 那么 f 能够写成 $f = \sum u_i(X_1, X_2)^2$, 其中 $\text{supp}(u_i) \subseteq \mathcal{G}_{f,[2;0]}$. 根据推论 5.11, $m = 10$. 应用软件包 SDPTools 的相关函数, 我们得到验证元

$$\begin{aligned} \hat{y} = & (\hat{y}_{0,0} = \frac{22011}{55402}, \hat{y}_{1,1} = 0, \hat{y}_{2,1} = 0, \hat{y}_{1,2} = 0, \hat{y}_{2,2} = \frac{358944}{9403}, \hat{y}_{3,2} = 0, \hat{y}_{2,3} = 0, \\ & \hat{y}_{4,2} = \frac{96310}{4693}, \hat{y}_{3,3} = 0, \hat{y}_{2,4} = \frac{96310}{4693}). \end{aligned}$$

对于展开式

$$\begin{aligned} u(X_1, X_2)^2 = & u_{0,0}^2 + u_{0,0}u_{1,1}X_1X_2 + u_{0,0}u_{2,1}X_1^2X_2 + u_{0,0}u_{1,2}X_1X_2^2 + u_{1,1}^2X_1^2X_2^2 + \\ & u_{1,1}u_{2,1}X_1^3X_2^2 + u_{1,1}u_{1,2}X_1^2X_2^3 + u_{2,1}^2X_1^4X_2^2 + u_{2,1}u_{1,2}X_1^3X_2^3 + u_{1,2}^2X_1^2X_2^4. \end{aligned}$$

我们有

$$L_{\hat{y}}(u^2) = \frac{22011}{55402}u_{0,0}^2 + \frac{358944}{9403}u_{1,1}^2 + \frac{96310}{4693}u_{2,1}^2 + \frac{96310}{4693}u_{1,2}^2 \geq 0$$

而

$$L_{\hat{y}}(f) = \frac{96310}{4693} + \frac{96310}{4693} + \frac{22011}{55402} - 3 \times \frac{358944}{9403} = -\frac{178662293250763}{2444794913158} < 0,$$

从而证明 f 没有平方和分解.

例 5.2. 文献 [31] 中作者通过验证某些多项式非负来证明 Monotone Column Permanent (MCP) 猜想在维数为 4 时成立. 所有要证明的多项式, 记为 $p_{1,1}, p_{1,2}, p_{1,3}, p_{2,2}, p_{2,3}, p_{3,3}$, 都为 8 元 8 次多项式, 对于这些多项式的具体形式参见 [31]. 在这些多项式中, $p_{1,1}, p_{3,3}$ 为平方多项式. [30] 中作者利用符号数值混合算法证明了 $p_{1,3}$ 具有平方和分解; $p_{1,2}, p_{2,2}, p_{2,3}$ 可以写成多项式平方和与带权重的变量的平方和的比值. 我们利用本章方法验证了 $p_{1,2}, p_{2,2}, p_{2,3}$ 没有平方和分解. 通过考虑稀疏性, 对于多项式 $p_{1,2}$, (5.6), (5.7) 中矩阵 $W, M(y, s)$ 的维数为 45×45 及 $m = 522$; 对于 $p_{2,2}$, W 和 $M(y, s)$ 的维数为 35×35 及 $m = 373$; 对于 $p_{2,3}$, W 和 $M(y, s)$ 的维数为 28×28 及 $m = 265$.

例 5.3. [25] 考虑多项式

$$f(X_1, X_2) = X_1^2 + X_2^2 - 2X_1X_2 \in \mathbb{R}[X_1, X_2].$$

由于 $f = (X_1 - X_2)^2$, 我们有 $f^* = \inf f = 0$. 然而, 对任意 $\varepsilon > 0$, 如果对 f 的系数作扰动得到

$$f_\varepsilon(X_1, X_2) = (1 - \varepsilon^2)X_1^2 + X_2^2 - 2X_1X_2,$$

则 f_ε 不再具有平方和分解. 实际上, 令 $x = y = C \in \mathbb{R}$, 则由 $f_\varepsilon(x, y) = -\varepsilon^2C^2$ 推出 $\inf f_\varepsilon = -\infty$. 因此 f 为病态 (Ill-Posed) 多项式.

对于 $\varepsilon = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}$, Matlab 中软件包 SeDuMi 可以数值上判定 f_ε 没有平方和分解. 然而, 当取 $\varepsilon = 10^{-5}$ 或者更小时, SeDuMi 则给出错误的平方和分解. 对于 $\varepsilon = 10^{-8}$ 甚至更小, 我们的方法在 Maple 中都可以准确验证 f_ε 没有平方和分解.

例 5.4. 本例中的多项式取自文献 [12]. 令

$$M_r(\bar{X}) = \sum_{i=1}^n X_i^r,$$

当 $k = 0$ 时, 定义

$$f_0 = -nM_6 + (n+1)M_2M_4 - M_2^3,$$

当 $1 \leq k \leq n-1$ 时, 定义

$$f_k = (k^2 + k)M_6 - (2k+1)M_2M_4 + M_2^3, .$$

对于上述多项式集合, 文献 [12] 中证明:

命题 5.15. 对于 $n \geq 3$,

1. 对于所有的 $0 \leq k \leq n-1$, 多项式 f_k 在 \mathbb{R}^n 上非负;
2. f_0 和 f_1 具有平方和分解;
3. 多项式 f_2, \dots, f_{n-1} 没有平方和分解;
4. 当 $n = 3$ 时, $M_2 \cdot f_2$ 具有平方和分解 (由 [56] 中证明);
5. 当 $n \geq 4$ 时, $M_2 \cdot f_{n-1}$ 具有平方和分解.

一个有趣的问题是对于 $n \geq 4$ 及 $2 \leq i \leq n-2$, $M_2 \cdot f_i$ 是否具有平方和分解. 我们有下列结论:

- 对于 $n = 4$, 令 $e = 1$, 我们可以验证 $f_2 \notin \text{SOS/SOS}_{T[\bar{X};1]}$. 通过考虑稀疏性, (5.6) 中 $W^{[1]}$ 的维数为 70×70 ; $W^{[2]}$ 的维数为 5×5 . (5.7) 中 $m = 495$.
- 对于 $n = 5$, 令 $e = 1$, 我们可以验证 $f_2, f_3 \notin \text{SOS/SOS}_{T[\bar{X};1]}$. 通过考虑稀疏性, (5.6) 中 $W^{[1]}$ 维数为 126×126 ; $W^{[2]}$ 的维数为 6×6 . (5.7) 中 $m = 1287$.

据我们所知, 当 $n = 4$ 时, 多项式 f_2 和当 $n = 5$ 时, 多项式 f_2, f_3 是第一组满足非负但是不能写成分母次数 ≤ 2 的两个多项式平方和比值的例子.

第六章 基于Maple的高精度求解SDP软件包

6.1 前言

回顾本文前几章所述内容知, 求解和验证给定多项式的下界最终需要求解相应的半定规划 (SDP) 问题. 半定规划问题是一类具有如下形式的凸优化问题:

$$\begin{aligned} \min \quad & c^T x \\ \text{s.t.} \quad & F(x) \succeq 0, \end{aligned} \tag{6.1}$$

其中

$$F(x) \stackrel{\Delta}{=} F_0 + \sum_{i=1}^m x_i F_i, \tag{6.2}$$

c 为 m 维实向量, F_0, \dots, F_m 为 $m+1$ 个 $n \times n$ 实对称矩阵. 不等式 $F(x) \succeq 0$ 表示 $F(x)$ 为半正定矩阵. 问题 (6.1) 的对偶问题为

$$\begin{aligned} \max \quad & -\mathbf{Tr}(F_0 Z) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{Tr}(F_i Z) = c_i, \quad i = 1, \dots, m, \\ & Z \succeq 0. \end{aligned} \tag{6.3}$$

其中变量 $Z = Z^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为半正定矩阵并且满足 m 个等式限制. 半定规划在许多领域, 特别是控制论和组合优化中, 有着广泛的应用. 许多问题都可以转化为SDP问题, 比如矩阵的特征值最大化问题和范数极小化问题, Max-Cut问题等.

SDP 问题 (6.1) 和其对偶问题 (6.3) 可以由 Matlab 中的 SDP 软件包高效求解, 比如 SeDuMi [68], SDPT3 [69], DSDP [7]. 然而由于 Matlab 只能进行有限精度的计算, 所得结果往往带有很大的数值误差, 所求解只是近似地满足问题的等式或不等式限制. 在某些问题的应用中, 比如 Rump's Model 问题 ([57]), 由于数值误差的原因, 计算得到的下界比问题的上界还要大, 参见 [29] 中表格1. 由于符号计算软件 Maple 可以进行任意精度的计算, 上述问题促使我们考虑如何在 Maple 中设计高精度求解 SDP 问题的软件包.

6.2 原始对偶势函数下降算法

SDP 问题是凸优化问题, 利用内点法可以高效地求解. 原始对偶势函数下降算法是一类内点算法, 其基本思想是: 根据问题的可行域确定合适的障碍函数, 基于此障碍函数定义原始-对偶中心路径, 然后定义一种势函数用来度量当前迭代点到中心路径的距离, 最后通过迭代使势函数下降, 迭代点趋向于问题最优点. 一个好的势函数具有以下特性 (参见[72, §9.3]):

- 势函数能够度量一个给定可行点有“多好”. 势函数的值能够反映出当前可行点到中心路径的距离和目标函数在此点的值.
- 势函数能够提供关于“好”的搜索方向的信息. 比如, 如果势函数是连续可微的, 我们可以取最速下降方向作为搜索方向.
- 一旦搜索方向确定, 势函数沿着搜索方向的值变为关于步长的函数, 因此我们可以采用线搜索或面搜索确定步长, 从而最大限度地降低势函数的值.
- 势函数下降方法有利于复杂度的分析.

SDPTools 实现的是文献 [70] 中的原始-对偶势函数下降内点算法. 其势函数具有如下形式:

$$\begin{aligned}\varphi(x, Z) &\triangleq v\sqrt{n}\log(\mathbf{Tr}(F(x)Z)) + \psi(x, Z) \\ &= (n + v\sqrt{n})\log(\mathbf{Tr}(F(x)Z)) - \log \det F(x) - \log \det Z - n\log n.\end{aligned}\tag{6.4}$$

上式右边第一部分是 SDP 原始-对偶问题在当前可行点 x, Z 处的对偶差, 第二部分 $\psi(x, Z)$ 反映了当前点 x, Z 到中心路径的距离, 而参数 v 反映了这两部分在势函数值中的权重. 给定一对严格可行点 x_0, Z_0 , 我们通过迭代方法降低势函数 $\varphi(x, Z)$ 的值, 其中第一部分保证新的迭代点 (x_k, Z_k) 趋向于问题的最优点, 而第二部分保证 (x_k, Z_k) 仍是严格可行点. 给定严格可行点, 势函数下降算法在每一步能够将 φ 至少减小一固定常量 δ :

$$\varphi(x^{(k+1)}, Z^{(k+1)}) \leq \varphi(x^{(k)}, Z^{(k)}) - \delta\tag{6.5}$$

从而容易证明下面定理

定理 6.1. [70] 假设 (6.5) 对某一固定量 δ 成立, 并且 δ 不依赖与 n 或 ϵ , 其中 $0 < \epsilon < 1$, 则当

$$k \geq \frac{v\sqrt{n}\log(1/\epsilon) + \psi(x^{(0)}, Z^{(0)})}{\delta},$$

我们有 $\mathbf{Tr}(F(x^{(k)})Z^{(k)}) < \epsilon \mathbf{Tr}(F(x^{(0)})Z^{(0)})$.

由此可知当给定初始点足够靠近中心路径时, 算法在 $\mathcal{O}(\sqrt{n})$ 步后收敛, 算法在最坏情况下具有多项式时间复杂度. 更多细节参见文献 [70]. 势函数下降算法的大致结构为:

算法6.2 (势函数下降内点算法).

输入: 严格可行点 x, Z 和计算容差 ϵ .

输出: 更新的严格可行点 x, Z .

重复:

1. 搜索 (6.4) 的可行下降方向 δx 及 δZ .
2. 搜索步长 $p, q \in \mathbb{R}$ 使得 $\varphi(x + p\delta x, Z + q\delta Z)$ 下降量最大.
3. 更新: $x := x + p\delta x$ 及 $Z := Z + q\delta Z$.

直至对偶差 $\leq \epsilon$.

注 9. 在算法的第二步确定步长时, 由文献 [70], 我们要求解如下形式的优化问题:

$$\min \quad (n + v\sqrt{n})\log(1 + c_1p + c_2q) - \sum_{i=1}^n \log(1 + p\mu_i) - \sum_{i=1}^n \log(1 + q\nu_i) \quad (6.6)$$

$$\text{s.t.} \quad p_{\min} \leq p \leq p_{\max}, \quad q_{\min} \leq q \leq q_{\max},$$

其中

$$c_1 = \frac{c^T \delta x}{\mathbf{Tr}(F(x)Z)}, \quad c_2 = \frac{\mathbf{Tr}(F_0 \delta Z)}{\mathbf{Tr}(F(x)Z)},$$

μ_1, \dots, μ_n 和 ν_1, \dots, ν_n 分别是矩阵 $F^{-1/2} \delta F F^{-1/2}$ 和 $Z^{-1/2} \delta Z Z^{-1/2}$ 的特征值. 由于目标函数是一个拟凸函数, SDPTTools 中采用牛顿方法与最速下降方法相结合的迭代方法求解. 由图 6.1 可以看出, 目标函数在问题最优点处非常敏感, 很小的数值误差往往导致迭代方法不收敛. 为了得到精确的步长, 在实际运行

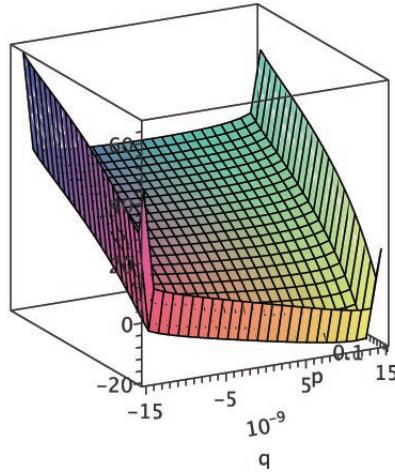


图 6.1: 面搜索的目标函数

SDPTools 时, 要求设置比较高的精度. 由于 Maple 可以设置任意精度, 所以往往可以得到高精度的 SDP 问题的解, 这也是在 Maple 中实现 SDP 软件包的优势所在.

由于原始-对偶势函数下降方法需要严格的可行点, 而这些点在实际问题中往往不容易求得, SDPTools 采用了 Big- \mathcal{M} 方法, 方法, 参见文献 [70]. Big- \mathcal{M} 通过引进两个常量 $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2$ 将 SDP 原始问题变为如下形式:

$$\begin{aligned} \min \quad & c^T x + \mathcal{M}_1 t \\ s.t \quad & F(x) + tI \succeq 0, \\ & \mathbf{Tr} F \leq \mathcal{M}_2, \\ & t \geq 0. \end{aligned} \tag{6.7}$$

对偶问题变为:

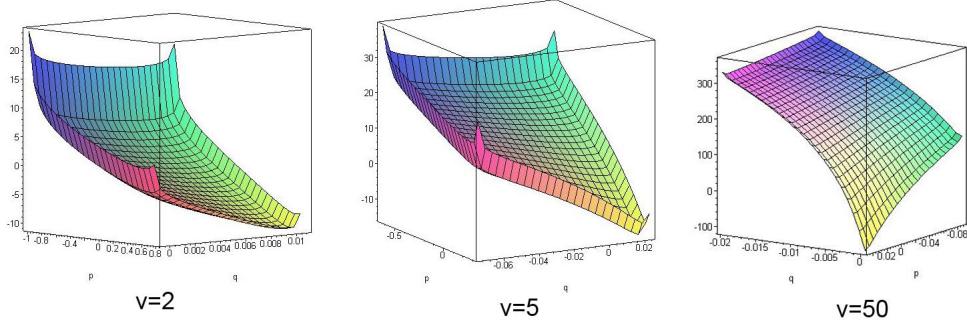
$$\begin{aligned} \max \quad & -\mathbf{Tr}(F_0(Z - zI)) - \mathcal{M}_2 z \\ s.t \quad & \mathbf{Tr}(F_i(Z - zI)) = c_i, \quad i = 1, \dots, m. \\ & \mathbf{Tr} Z \leq \mathcal{M}_1, \\ & Z \succeq 0, z \geq 0. \end{aligned} \tag{6.8}$$

假设原 SDP 的原始和对偶问题在最优点处是有界的, 当 $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2$ 足够大时, 问题 (6.7), (6.8) 和(6.1), (6.3) 是分别等价的. 而问题 (6.7), (6.8) 经过修改可以写成如 (6.1), (6.3) 中的 SDP 标准形式, 且容易求得其严格可行点. 对于 $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2$ 的选择, 某些情况下可以根据原问题的数据估计得到. 其他情况下, 我们检测附加条件 $\text{Tr}F \leq \mathcal{M}_2, \text{Tr}Z \leq \mathcal{M}_1$ 在 (6.7) 和 (6.8) 的解处是否是积极的, 如果都不是积极的, 则已求得原问题的解, 否则就增加相应的 \mathcal{M}_1 或 \mathcal{M}_2 的值. 具体细节参见[70].

SDPTools中主要函数的调用方式为:

- **BigM:=proc(L::list, c::list, m1, m2)**
 - 描述: 将原 SDP 问题进行等价的转化, 输出新的 SDP 原始和对偶问题, 及其严格可行点.
 - 输入:
 - $L = [F_0 \dots F_m]$, c : 分别是原 SDP 问题的参数.
 - $m1, m2$ 分别是预先估计的原SDP问题中矩阵 $F(x), Z$ 在最优点处迹的上界.
 - 输出:
 - 新的 SDP 问题的参数和其严格可行点.
- **SolveSDP:=proc(c, x_0 , Z_0 ::Matrix, L::list, max_iter::integer, v::integer:=5)**
 - 描述: 给定一个 SDP 问题及其严格可行点, 求解 SDP 问题.
 - 输入:
 - $L = [F_0 \dots F_m]$, c : 分别是 SDP 问题的参数.
 - x_0, Z_0 : 分别是 SDP 原始问题和对偶问题的严格可行点.
 - v : 势函数 (6.4) 中两部分数值的权重, 默认值为 5.
 - max_iter : 最大迭代次数.
 - 输出: SDP 问题的原始和对偶问题的解.

注 10. 由势函数 (6.4) 知, 权重 v 越大, 在迭代的每一步对偶差下降量越大, 收敛速度越快. 但是由图 6.2 可以看出权重 v 越大, 相应的面搜索的目标函数在

图 6.2: 不同权重 v 对应的面搜索目标函数

最优点处越为“陡峭”，越为敏感，越不容易求得精确的步长，从而影响收敛速度。由数值实验的经验知，开始时设置比较小的 v ，随着对偶差的减小逐步加大权重，可以得到较高的收敛速度。SDPTools 中将 $v = 5$ 作为默认值。

6.3 在有理函数全局最优值可信验证中的应用

6.3.1 有理函数全局最优值的可信验证

有理函数的全局最优可信验证是指给定有理函数

$$\min_{\xi \in \mathbb{R}^n} \frac{f(\xi)}{g(\xi)} \quad (\text{对于所有的 } \xi \in \mathbb{R}^n \text{ 有 } g(\xi) > 0) \quad (6.9)$$

其中 $f(\xi), g(\xi) \in \mathbb{Q}^n$ ，求解实数 r ，使得 r 小于等于有理数的下界，“可信”是指这一不等式是准确满足的，没有数值误差的。实数 r 是有理数 (6.9) 的下界当且仅当多项式 $f(\bar{X}) - rg(\bar{X})$ 是非负的。因此我们考虑如下有理数的多项式平方和松弛：

$$\left. \begin{aligned} r^* &:= \sup_{r \in \mathbb{R}, W} r \\ s.t. \quad &f(\bar{X}) - rg(\bar{X}) = m_e(\bar{X})^T \cdot W \cdot m_e(\bar{X}), \\ &W \succeq 0, \quad W^T = W. \end{aligned} \right\} \quad (6.10)$$

其中 $m_e(\bar{X})$ 是关于变量 X_1, \dots, X_n 的所有次数小于等于 e 的单项式组成的列向量. 问题 (6.10) 的对偶问题为:

$$\left. \begin{array}{l} r_{mom}^* := \inf_y \sum_{\alpha \in \mathcal{F}} f_\alpha y_\alpha \\ s.t. \quad \sum_{\alpha \in \mathcal{F}} g_\alpha y_\alpha = 1, \\ M_e(y) \succeq 0. \end{array} \right\} \quad (6.11)$$

其中 \mathcal{F} 为多项式 $f(\bar{X})$ 和 $g(\bar{X})$ 的支撑集, 对偶变量 y_α 称为矩量, $M_e(y)$ 为 e 阶矩量矩阵. 而问题 (6.10) 和 (6.11) 分别可以转化为标准 SDP 问题 (6.3) 和 (6.1). 关于矩量问题与多项式全局优化的内容参见文献 [33, 47]. 利用求解 SDP 的软件包我们可以得到半正定矩阵 W 和 r^* , 近似地满足:

$$f(\bar{X}) - r^* g(\bar{X}) \approx m_e(\bar{X})^T \cdot W \cdot m_e(\bar{X}), \quad W \gtrless 0 \quad (6.12)$$

为了验证 r^* , 我们将 r^*, W 分别转换为有理数和有理矩阵并将 W 矩阵垂直投影到仿射线性超平面:

$$\chi = \{A | A^T = A, f(\bar{X}) - rg(\bar{X}) = m_e(\bar{X})^T \cdot A \cdot m_e(\bar{X}), \text{ 对某些 } r \text{ 成立.}\} \quad (6.13)$$

我们期望投影以后 W 变为半正定矩阵, 参见[29].

如果我们将应用 Matlab 中的只有有限精度的 SDP 软件包, 由于输出矩阵 W 过于粗糙而不能投影到半正定矩阵锥中. 文献 [29] 中作者采用 Gauss-Newton 方法将 r^*, W 进行精化然后再进行投影. 此处高精度软件包 SDPTools 显示出其优越性. 由于 Maple 可以设置任意精度, 利用 SDPTools 解得的 r^*, W 可以具有非常高的精度, 从而不通过精化就可以直接进行成功的投影.

通常问题 (6.10) 的严格可行点不容易求得, 此处我们采用 Big- \mathcal{M} 方法. 将问题 (6.10) 转化为形式 (6.8) 以后, 问题 (6.9) 的 SOS 松弛变为

$$\left. \begin{array}{l} \hat{r}^* := \sup_{\hat{r} \in \mathbb{R}, \hat{W}} \hat{r} - \mathcal{M}_2 z \\ s.t. \quad f(\bar{X}) - \hat{r} g(\bar{X}) + z(m_e(\bar{X})^T \cdot m_e(\bar{X})) = m_e(\bar{X})^T \cdot \hat{W} \cdot m_e(\bar{X}), \\ \hat{W} \succeq 0, \quad \hat{W}^T = \hat{W}, \quad z \geq 0. \end{array} \right\} \quad (6.14)$$

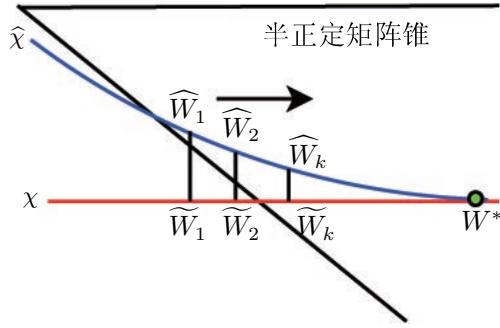


图 6.3: SOS 问题有理化

容易看出问题 (6.10) 和 (6.14) 是等价的, 而问题 (6.14) 在最优点处变量 z 取值应为 0. 我们定义

$$\begin{aligned}\widehat{\chi} = \{ & \widehat{A} \mid \widehat{A}^T = \widehat{A}, f(\bar{X}) - \widehat{r}g(\bar{X}) + z(m_e(\bar{X})^T \cdot m_e(\bar{X})) \\ & = m_e(\bar{X})^T \cdot \widehat{A} \cdot m_e(\bar{X}), \text{ 对于某些 } \widehat{r}, z \text{ 成立} \}. \end{aligned}\quad (6.15)$$

注意到 $\widehat{\chi}$ 在最优点 (W^*, r^*) 处应与 χ 相交, 见图 6.3.

经过每次迭代, 我们得到 $\widehat{\chi}$ 附近浮点数的点 $(\widehat{r}, \widehat{W})$, 然后我们将 $(\widehat{r}, \widehat{W})$ 转化为有理数并将矩阵 \widehat{W} 垂直投影到 χ 上, 我们记 χ 上距离 \widehat{W} 最近的点为 \widetilde{W} . 因为问题 (6.10) 和 (6.14) 是等价的, 我们可以期望经过开始的几步以后, 每次迭代都可以得到半正定矩阵 \widetilde{W} 和可验证的下界 r . 与文献 [29] 中的只能得到一个可信下界的方法不同, 我们能够得到一组可信的下界 r_n . 迭代的次数越多, 我们得到的下界 r_n 越好. 上述过程参见图 6.3.

为了减小问题的规模, 我们还要考虑问题的稀疏结构. 利用定理 2.2, 我们可以去掉 (6.10) 中冗余的单项式.

对于给定的 n 维向量空间的有限点集, 基于 Quickhull 算法(参见文献 [6]), SDPTools 中提供了可以计算其凸包及判定另一给定点是否属于其凸包的函数.

其主要函数的调用方式为:

- `affineDims:=proc(S::set)`

- 描述: 给定 n 维向量空间的有限点集, 返回其仿射维数及一组极大仿射无关点集.

– 输入:

S : n 维向量空间的有限点集.

– 输出:

S 的仿射维数.

S 中一组r-仿射无关的点集.

- **convexHull:=proc(S ::set)**

– 描述: 给定 n 维向量空间的有限点集, 计算其凸包.

– 输入:

S : n 维向量空间的有限点集.

– 输出:

凸包的每个面的顶点的集合和对应的每个面的法向量的集合.

- **inConvexHull:=proc(S ::set, L)**

– 描述: 给定 n 维向量空间的有限点集 S, L , 返回 L 中属于 S 凸包中的点.

– 输入:

S, L : n 维向量空间的有限点集.

– 输出:

L 中属于 S 凸包中的点.

利用定理 2.2, SDPTools 中提供了用于计算考虑稀疏结构后 (6.10) 中的单项式列向量的函数:

- **getMonos:=proc($f, g, vars$::list)**

– 描述: 给定有理函数 f/g , 返回考虑稀疏结构后 (6.10) 中的单项式列向量.

– 输入:

f, g : 给定有理函数的分子部分和分母部分.

vars: 有理函数中出现的变量集合.

– 输出:

L 中属于 S 凸包中的点.

利用本节所述方法, 给定有理函数 f/g , SDPTools提供了如下函数求解其可信下界:

- certifiSOS:=proc($f, g, \text{iter_num}, \text{SOSmonomials}, \text{SOSM1}, \text{SOSM2}, c_T, F0_Fm, x_SF, Z_SF$)

– 描述: 给定有理函数 f/g , 计算其下界并判定此下界是否为可信的. 初次运行时其中的可选参数可以不用输入, 函数会自动生成并输出, 便于在下次运行时输入, 以节省运算时间取得更好的下界.

– 输入:

f, g : 给定有理函数的分子部分和分母部分.

iter_num: 迭代次数.

vars: 有理函数中出现的变量集合.

$F0_Fm, c_T$ (可选): 由 (6.10) 转化的SDP问题的参数.

x_SF, Z_SF (可选): 由 (6.10) 转化的SDP问题的严格可行点.

$SOSmonomials$ (可选): (6.10) 中出现的单项式向量 $m_e(\bar{X})$.

$SOSM1$ (可选): 由 (6.10) 转化得到的 (6.3) 中最优点 Z 的迹的上界.

$SOSM2$ (可选): 由 (6.11) 转化得到的 (6.1) 中最优点处 $F(x)$ 的迹的上界.

– 输出:

由 (6.10) 和 (6.11) 转化得到的SDP问题 (6.3) 和 (6.1) 的参数及严格可行点.

有理函数 f/g 的下界, 并判定其是否为可信的.

Gram矩阵.

(6.10) 中出现的单项式向量 $m_e(\bar{X})$.

6.3.2 例子: Rump's Model 问题

以下关于 Rump's Model 问题 ([57]) 的介绍大部分出自文献 [29]. 这一问题与 Toeplitz 矩阵的结构条件数及多项式因子系数的界相关, 给定自然数 $n = 1, 2, 3, \dots$, 计算下式的最小值

$$\begin{aligned} \mu_n &= \min_{P, Q} \frac{\|PQ\|_2^2}{\|P\|_2^2\|Q\|_2^2} \\ \text{s. t. } P(z) &= \sum_{i=1}^n p_i z^{i-1}, Q(z) = \sum_{i=1}^n q_i z^{i-1} \in \mathbb{R}[z] \setminus \{0\}. \end{aligned} \quad (6.16)$$

文献 [58] 中已经证明了在取得最小值处的多项式 P, Q 必须是对称或反对称的. 因此 Rump's Model 问题可以重写为以下三种具有不同限制条件的优化问题:

$$\begin{aligned} k = 1: \quad p_{n+1-i} &= p_i, \quad q_{n+1-i} = q_i, \quad 1 \leq i \leq n, \\ k = 2: \quad p_{n+1-i} &= p_i, \quad q_{n+1-i} = -q_i, \quad 1 \leq i \leq n, \\ k = 3: \quad p_{n+1-i} &= -p_i, \quad q_{n+1-i} = -q_i, \quad 1 \leq i \leq n, \end{aligned} \quad (6.17)$$

三个优化问题最优值中最小者即为 μ_n . 对于这三种情形, 我们极小化有理函数 $f(x)/g(x)$ 其中

$$f(x) = \|PQ\|_2^2 = \sum_{k=2}^{2n} \left(\sum_{i+j=k} p_i q_j \right)^2, \quad g(x) = \|P\|_2^2\|Q\|_2^2 = \left(\sum_{i=1}^n p_i^2 \right) \left(\sum_{j=1}^n q_j^2 \right) \quad (6.18)$$

变量 $x = \{p_1, \dots, p_k\} \cup \{q_1, \dots, q_k\}$, 其中 $k = \lceil n/2 \rceil$.

在本文中, 我们应用高精度的 SDPTools 计算 Rump's Model 问题并得到目前最好的结果, 见表 6.1. 其中机器配置为: Intel Xeon 2.67GHz 16核, 32G内存, Linux version 2.6.22-16 (Ubuntu) 系统. 采用任意精度的计算是以牺牲计算量为代价的, 由表中数据可以看出计算效率要比 Matlab 中软件包低很多。

SDPTools的下载地址为: <http://www.mmrcc.iss.ac.cn/~lzhi/Research/hybrid/SDPTools/>

| n | k | # 次数 | 精度 | 秒/每次 | 下界 r_n | 上界 |
|-----|-----|------|---------------|--------|----------------------------|----------------------------|
| 4 | 2 | 50 | 4×15 | 0.71 | 0.01742917332143265287 | 0.01742917332143265289 |
| 5 | 1 | 50 | 4×15 | 2.03 | 0.00233959554815559112 | 0.00233959554815559113 |
| 6 | 2 | 50 | 4×15 | 1.76 | 0.00028973187527968191 | 0.00028973187527968193 |
| 7 | 1 | 75 | 5×15 | 11.36 | 0.00003418506980008284 | 0.00003418506980008285 |
| 8 | 2 | 75 | 5×15 | 12.49 | 0.00000390543564975572 | 0.00000390543564975573 |
| 9 | 1 | 75 | 5×15 | 84.12 | 0.43600165391810484612e-06 | 0.43600165391810484613e-06 |
| 10 | 2 | 75 | 5×15 | 92.79 | 0.47839395687709759326e-07 | 0.47839395687709759327e-07 |
| 11 | 1 | 85 | 5×15 | 622.03 | 0.51787490974469905330e-08 | 0.51787490974469908331e-08 |
| 12 | 2 | 85 | 5×15 | 634.48 | 0.55458818311631347611e-09 | 0.55458818311631347612e-09 |
| 13 | 1 | 100 | 5×15 | 3800.0 | 0.58866880811866093129e-10 | 0.58866880811866093130e-10 |
| 14 | 2 | 100 | 5×15 | 3800.0 | 0.62024449920539050219e-11 | 0.62024449920539050220e-11 |
| 15 | 1 | 120 | 6×15 | 15000 | 0.64943654185809512879e-12 | 0.64943654185809512880e-12 |
| 16 | 2 | 120 | 6×15 | 23000 | 0.67636042558221379057e-13 | 0.67636042558221379058e-13 |
| 17 | 1 | 70 | 6×15 | 72400 | 0.70112506868215595815e-14 | 0.70112631970143741585e-14 |
| 18 | 2 | 50 | 6×15 | 95720 | 0.37045660047531072621e-15 | 0.72383944796943875862e-15 |

表 6.1: Rump's Model 问题可验证的下界

第七章 结论与展望

本论文前半部分给出了求解多项式优化问题的一种方法。利用推广的 Schmüdgen 定理和极簇的相关理论，我们将问题松弛为一系列的半定规划问题。本方法可用于全局或等式约束多项式优化问题中最优值为渐近值的情形，即不要求目标多项式的下确界在可行域的有限点处达到。通过添加新的变量，我们的方法还可以应用到不等式约束问题。和同类方法相比较，本文方法对可行域的假设条件更弱。另外，本方法中添加的多项式限制条件更少且其次数更低，因此相应的 SDP 问题规模更小。在等式约束问题中，我们还利用行列式环的相关理论来减少方法中添加的辅助多项式的个数，从而降低了问题的规模，扩大了本方法适用的范围。实际应用中，相应的数值试验显示我们的方法具有较好的数值稳定性，可以得到与同类方法相当或者更好的数值结果。当同类方法实际应用到最优值为渐近值情形时往往会出现严重的数值问题，我们通过分析相应半定规划问题中 Moment 矩阵的结构，找到该类数值问题的原因，并尝试通过考虑问题的稀疏结构给出解决这一问题的方法。理论上，我们的方法需要求解目标多项式在多个可行域的低维子集上的下确界，这些下确界的最小值即为目标多项式在整个可行域上的下确界。然而数值试验显示，目标多项式在整个可行域上的下确界往往可以在特定的子集 $E_{B,1}^A$ 上达到。如果能够证明在一般情形下此结论成立，则我们的方法将更为简单实用。

在利用 Hilbert-Artin 表达式验证非负多项式的工作中，我们必须事先固定分母多项式的次数或者其支撑单项式集，从而得到相应半定规划问题，然后利用有理化投影相关技术将不准确的数值解转化为有理系数的准确表达式。如果对于给定分母次数或支撑单项式集，我们利用半定规划情形下的 Farkas 引理给出非负目标多项式没有相应表达式的有理验证元。利用此方法，我们发现了第一组不能写成分母次数 ≤ 2 的两个多项式平方和比值的非负多项式的例子。由于问题规模的原因，现在我们还不能验证这组多项式能否写成分母次数为 4 的两个多项式平方和比值。如何提高算法的效率，验证规模更大的问题是以后工作方向。我们同时发现，这种对于给定次数验证表达式是否存在方法可以应用到很多其他问题。例如，通过正零点定理，我们可以验证一组给定多项式是否具有公共实零点。此处同样面临对于给定次数是否存在准确表达式的问题。因

此, 我们相信本文中的验证方法可以得到更广泛的应用.

如前文所述, 求解和验证给定多项式的下界最终需要求解相应的 SDP 问题. Matlab 中有许多高效的 SDP 软件包. 然而由于 Matlab 只能进行有限精度的计算, 所得结果往往带有很大的数值误差, 所求解只是近似地满足问题的等式或不等式限制. SDPTTools 是基于 Maple 开发的可以高精度求解 SDP 问题的软件包. SDPTTools 实现了经典的原始-对偶势函数下降算法, 提供了求解和验证有理函数的全局下界的相应功能. 对于 Rump's Model 问题, 我们得到迄今为止最好的计算结果. 在用于求解和验证有理函数下界的问题中, 为了考虑其稀疏结构, SDPTTools 还提供了求解任意维度上给定有限点集凸包的函数. SDPTTools 还在开发之中. 由于 Maple 中高精度求解需要非常大的计算量, 以及原始-对偶势函数下降算法固有的不足, SDPTTools 所能求解的问题规模有限. 在以后的工作中, 我们希望通过研究 SDP 问题的稀疏结构, 以及实现更新的更高效的算法, 来解决这一问题. 在解决初始严格可行点的问题时, SDPTTools 采用了 Big- \mathcal{M} 方法, 并得到了实际应用. 我们希望研究 SDP 问题可行解的存在性, 以及实现不需要严格可行点的求解 SDP 的算法.

参考文献

- [1] A. A. Ahmadi and Pablo A. Parrilo. A convex polynomial that is not sos-convex. *Mathematical Programming (to appear)*, 2009.
- [2] M. Atiyah and I. MacDonald. *Introduction to commutative algebra*. Addison-Wesley, 1969.
- [3] B. Bank, M. Giusti, J. Heintz, R. Mandel, and G. M. Mbakop. Polar varieties and efficient real equation solving: the hypersurface case. *Journal of Complexity*, 13:5–27, 1997.
- [4] B. Bank, M. Giusti, J. Heintz, and LM Pardo. Generalized polar varieties: Geometry and algorithms. *Journal of complexity*, 21(4):377–412, 2005.
- [5] B. Bank, M. Giusti, J. Heintz, M. Safey El Din, and E. Schost. On the geometry of polar varieties. *Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing*, 21(1):33–83, 2010.
- [6] C. Bradford Barber, David P. Dobkin, and Hannu Huhdanpaa. The quickhull algorithm for convex hulls. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 22(4):469–483, December 1996.
- [7] Steven J. Benson and Yinyu Ye. DSDP5: Software for semidefinite programming. Technical Report ANL/MCS-P1289-0905, Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, September 2005.
- [8] Grigoriy Blekherman. There are significantly more nonnegative polynomials than sums of squares. *Israel Journal of Mathematics*, 153(1):355–380, December 2006.
- [9] J. Bochnak, M. Coste, and M.F. Roy. *Real algebraic geometry*. Springer Verlag, 1998.

- [10] W. Bruns and U. Vetter. *Determinantal rings*. Springer, Berlin, 1988.
- [11] Winfried Bruns and Roland Schwänzl. The number of equations defining a determinantal variety. *Bull. London Math. Soc.*, 22(5):439–445, 1990.
- [12] M. D. Choi, T. Y. Lam, and Bruce Reznick. Even symmetric sextics. *Mathematische Zeitschrift*, 195:559–580, 12 1987.
- [13] Patrick Cousot. Proving program invariance and termination by parametric abstraction, lagrangian relaxation and semidefinite programming. In Radhia Cousot, editor, *Verification, Model Checking, and Abstract Interpretation*, volume 3385 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 1–24. Springer Berlin / Heidelberg, 2005.
- [14] David A. Cox, John Little, and Donal O’Shea. *Ideals, Varieties, and Algorithms: An Introduction to Computational Algebraic Geometry and Commutative Algebra, 3/e (Undergraduate Texts in Mathematics)*. Springer-Verlag New York, Inc., Secaucus, NJ, USA, 2007.
- [15] Jon Dattorro. *Convex Optimization & Euclidean Distance Geometry*. Meboo Publishing, USA, 2011.
- [16] James Demmel, Jiawang Nie, and Victoria Powers. Representations of positive polynomials on noncompact semialgebraic sets via KKT ideals. *J. Pure Appl. Algebra*, 209(1):189–200, 2007.
- [17] D. Eisenbud. *Commutative algebra with a view toward algebraic geometry*. Springer-Verlag, 1995.
- [18] Michael R. Garey and David S. Johnson. *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness*. W. H. Freeman & Company, San Francisco, 1979.
- [19] Martin Grötschel, László Lovász, and Alexander Schrijver. *Geometric Algorithms and Combinatorial Optimization*. Springer-Verlag, Berlin, 1988.

- [20] Huy Vui Hà and Tiên Sòn Phạm. Global optimization of polynomials using the truncated tangency variety and sums of squares. *SIAM J. on Optimization*, 19(2):941–951, 2008.
- [21] Huy Vui Hà and Tiên Sòn Phạm. Solving polynomial optimization problems via the truncated tangency variety and sums of squares. *J. Pure Appl. Algebra*, 213(11):2167–2176, 2009.
- [22] D. Henrion and A. Garulli, editors. *Positive polynomials in control*, volume 312 of *Lecture Notes in Control and Information Sciences*. Springer-Verlag, Berlin, 2005.
- [23] Didier Henrion and Jean Bernard Lasserre. GloptiPoly: global optimization over polynomials with Matlab and SeDuMi. *ACM Trans. Math. Software*, 29(2):165–194, 2003.
- [24] Didier Henrion, Michael Šebek, and Vladimír Kučera. Positive polynomials and robust stabilization with fixed-order controllers. *IEEE Trans. Automat. Control*, 48(7):1178–1186, 2003.
- [25] Sharon Hutton, Erich Kaltofen, and Lihong Zhi. Computing the radius of positive semidefiniteness of a multivariate real polynomial via a dual of seidenberg’s method. In *ISSAC 2010*, pages 227–234, 2010.
- [26] David Jeffrey, editor. *ISSAC 2008*, New York, N. Y., 2008. ACM Press.
- [27] Zbigniew Jelonek. Testing sets for properness of polynomial mappings. *Math. Ann.*, 315(1):1–35, 1999.
- [28] Dorina Jibetean and Monique Laurent. Semidefinite approximations for global unconstrained polynomial optimization. *SIAM J. on Optimization*, 16(2):490–514, 2005.
- [29] Erich Kaltofen, Bin Li, Zhengfeng Yang, and Lihong Zhi. Exact certification of global optimality of approximate factorizations via rationalizing sums-of-squares with floating point scalars. In Jeffrey [26], pages 155–163.

- [30] Erich Kaltofen, Bin Li, Zhengfeng Yang, and Lihong Zhi. Exact certification in global polynomial optimization via sums-of-squares of rational functions with rational coefficients, 2009. Accepted for publication in *J. Symbolic Comput.*
- [31] Erich Kaltofen, Zhengfeng Yang, and Lihong Zhi. A proof of the Monotone Column Permanent (mcp) Conjecture for dimension 4 via sums-of-squares of rational functions. In Hiroshi Kai and Hiroshi Sekigawa, editors, *SNC'09 Proc. 2009 Internat. Workshop on Symbolic-Numeric Comput.*, pages 65–69. ACM Press, 2009.
- [32] K. Kurdyka, P. Orro, and S. Simon. Semialgebraic sard theorem for generalized critical values. *J. Differential Geom.*, 56(1):67–92, 2000.
- [33] Jean B. Lasserre. Global optimization with polynomials and the problem of moments. *SIAM J. Optim.*, 11(3):796–817 (electronic), 2001.
- [34] Jean B. Lasserre. Polynomials nonnegative on a grid and discrete representations. *Transactions of the American Mathematical Society*, 354, 2001.
- [35] Jean B. Lasserre. A sum of squares approximation of nonnegative polynomials. *SIAM J. on Optimization*, 16:751–765, March 2006.
- [36] Monique Laurent. Sums of squares, moment matrices and optimization over polynomials. In *Emerging Applications of Algebraic Geometry of IMA Volumes in Mathematics and its Applications*, volume 149, pages 157–270. Springer, 2009.
- [37] Anneli Lax and Peter D. Lax. On sums of squares. *Linear Algebra and its Applications*, 20:71–75, 1978.
- [38] John M. Lee. *Introduction to Smooth Manifolds*. Springer, 2002.
- [39] J. Löfberg. Yalmip: A toolbox for modeling and optimization in matlab. *Proc. IEEE CCA/ISIC/CACSD Conf.*, 2004.

- [40] Murray Marshall. *Positive polynomials and sums of squares*, volume 146 of *Mathematical Surveys and Monographs*. American Mathematical Society, USA, 2008.
- [41] David Monniaux. On using sums-of-squares for exact computations without strict feasibility. 2010.
- [42] D. Mumford. *Algebraic Geometry I, Complex projective varieties*. Classics in Mathematics. Springer Verlag, 1976.
- [43] Katta G. Murty and Santosh N. Kabadi. NP-complete problems in quadratic and nonlinear programming. *Mathematical Programming*, 39, 1987.
- [44] Y. Nesterov. Squared functional systems and optimization problems. In H. Frenk, K. Roos, T. Terlaky, and S. Zhang, editors, *High Performance Optimization*, pages 405–440. Kluwer Academic Publishers, 2000.
- [45] Yurii Nesterov and Arkadii Nemirovskii. *Interior-Point polynomial algorithms in convex programming*, volume 13 of *Studies in Applied Mathematics*. SIAM, Philadelphia, PA, 1994.
- [46] Jiawang Nie. An exact Jacobian SDP relaxation for polynomial optimization. Preprint, 2010.
- [47] Jiawang Nie, James Demmel, and Ming Gu. Global minimization of rational functions and the nearest GCDs. *J. of Global Optimization*, 40(4):697–718, 2008.
- [48] Jiawang Nie, James Demmel, and Bernd Sturmfels. Minimizing polynomials via sum of squares over the gradient ideal. *Math. Program.*, 106(3, Ser. A):587–606, 2006.
- [49] Pablo A. Parrilo. *Structured semidefinite programs and semialgebraic geometry methods in robustness and optimization*. Dissertation (Ph.D.), California Institute of Technology, 2000.

- [50] Pablo A. Parrilo. Semidefinite programming relaxations for semialgebraic problems. *Mathematical Programming*, 96(2):293–320, May 2003.
- [51] Pablo A. Parrilo and Bernd Sturmfels. Minimizing polynomial functions. In *Algorithmic and quantitative real algebraic geometry (Piscataway, NJ, 2001)*, volume 60 of *DIMACS Ser. Discrete Math. Theoret. Comput. Sci.*, pages 83–99. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2003.
- [52] H. Peyrl and Pablo A. Parrilo. Computing sum of squares decompositions with rational coefficients. *Theoretical Computer Science*, 409(2):269–281, 2008.
- [53] S. Prajna, A. Papachristodoulou, P. Seiler, and Pablo A. Parrilo. SOS-TOOLS: Sum of squares optimization toolbox for MATLAB. 2004.
- [54] Bruce Reznick. Extremal PSD forms with few terms. *Duke Mathematical Journal*, 45(2):363–374, 1978.
- [55] Bruce Reznick. Some concrete aspects of Hilbert’s 17th problem. pages 251–272, 1996.
- [56] R. M. Robinson. Some definite polynomials which are not sums of squares of real polynomials robinson. In *Selected questions of algebra and logic*, pages 264–282, 1973.
- [57] Siegfried M. Rump. Global optimization: a model problem, 2006. <http://www.ti3.tu-harburg.de/rump/Research/ModelProblem.pdf>.
- [58] Siegfried M. Rump and H. Sekigawa. The ratio between the Toeplitz and the unstructured condition number, 2006. <http://www.ti3.tu-harburg.de/paper/rump/RuSe06.pdf>.
- [59] Mohab Safey El Din. Computing the global optimum of a multivariate polynomial over the reals. In Jeffrey [26], pages 71–78.

- [60] Mohab Safey El Din and Éric Schost. Polar varieties and computation of one point in each connected component of a smooth algebraic set. In *Proceedings of the 2003 International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation*, pages 224–231 (electronic), New York, 2003. ACM.
- [61] Konrad Schmüdgen. The K-moment problem for compact semi-algebraic sets. *Mathematische Annalen*, 289(1):203–206, 1991.
- [62] Markus Schweighofer. Global optimization of polynomials using gradient tentacles and sums of squares. *SIAM Journal on Optimization*, 17(3):920–942 (electronic), 2006.
- [63] I. Shafarevich. *Basic Algebraic Geometry 1*. Springer Verlag, 1977.
- [64] N. Z. Shor. An approach to obtaining global extrema in polynomial problems of mathematical programming. *Kibernetika (Kiev)*, (5):102–106, 136, 1987.
- [65] N Z Shor. Quadratic optimization problems. *Soviet Journal of Computer and Systems Sciences*, 25:1–11, 1987.
- [66] N Z Shor. An approach to obtaining global extremums in polynomial mathematical programming problems. *Cybernetics*, 23(5):695–700, 1988.
- [67] N Z Shor. Class of global minimum bounds of polynomial functions. *Cybernetics*, 23(6):731–734, 1988.
- [68] Jos F. Sturm. Using SeDuMi 1.02, a MATLAB toolbox for optimization over symmetric cones. *Optimization Methods and Software*, 11/12:625–653, 1999.
- [69] K. C. Toh, M. J. Todd, R. H. Tütüncü, and R. H. Tutuncu. SDPT3 - A Matlab software package for semidefinite programming. *Optimization Methods and Software*, 11:545–581, 1998.
- [70] Lieven Vandenberghe and Stephen Boyd. Semidefinite programming. *SIAM Review*, 38(1):49–95, 1996.

- [71] Hayato Waki, Sunyoung Kim, Masakazu Kojima, Masakazu Muramatsu, and Hiroshi Sugimoto. Algorithm 883: SparsePOP—a sparse semidefinite programming relaxation of polynomial optimization problems. *ACM Trans. Math. Software*, 35(2):15:1–15:13, 2009.
- [72] Henry Wolkowicz, Romesh Saigal, and Lieven Vandenberghe. *Handbook of Semidefinite Programming - Theory, Algorithms, and Applications*. Kluwer Academic Publisher, Dordrecht, 2000.
- [73] O. Zariski and P. Samuel. *Commutative algebra*. Van Nostrand, 1958.

发表文章目录

- [1] Feng Guo, Mohab Safey El Din and Lihong Zhi. Global optimization of polynomials using generalized critical values and sums of squares. In Stephen M.Watt, editor, ISSAC 2010, 107–114, New York, N. Y., 2010. ACM Press, EI.
- [2] Aurélien Greuet, Feng Guo, Mohab Safey El Din and Lihong Zhi. Global optimization of polynomials restricted to a smooth variety using sums of squares. Accepted by Journal of Symbolic Computation, 2011, SCI.
- [3] 郭 峰. SDPTTools: 基于Maple的高精度求解SDP软件包. 系统科学与数学, Vol. 30 (11): 1512-1521, 2010.

简 历

郭峰, 男, 山东德州人, 1984 年出生。 E-mail: fguo@mmrc.iss.ac.cn

教育状况

2011.2–2012.1 美国北卡罗来纳州立大学交流访问。

方向: 符号与数值混合计算, 导师: Erich Kaltofen。

2007.9–2011.12 中国科学院数学与系统科学研究院, 系统所, 硕博连读。

方向: 符号与数值混合计算, 导师: 支丽红。

2003.9–2007.7 山东大学, 数学学院, 本科。

2000.9–2003.7 山东德州第一高级中学。

参加学术会议情况

2011 年 11 月, 应邀参加符号数值混合计算方法研讨会并做报告, 加拿大多伦多菲尔兹研究所。

2011 年 10 月, 参加 SIAM 应用代数几何会议 (SIAM/AAG'11) 并做报告, 美国罗利。

2011 年 6 月, 参加第 17 届国际应用计算机代数会议 (ACA 2011) 并做报告, 美国休斯敦。

2010 年 7 月, 参加第 35 届国际符号和代数计算会议 (ACM ISSAC'10) 并做报告, 德国慕尼黑。

2010 年 7 月, 访问交流 University Pierre and Marie, 法国巴黎。

2009 年 7 月, 参加第四届国际符号计算暑期培训班, 奥地利林茨。

获奖经历

2010 年 9 月, 中科院数学院院长奖学金优秀奖

2008 年 9 月, 中国科学院研究生院三好学生

2006 年 10 月, 山东大学一等奖学金

2005 年 10 月, 山东大学一等奖学金

2004 年 10 月, 山东大学二等奖学金

致 谢

值此论文完成之际，谨在此向多年来给予我关心和帮助的各位老师、同学、朋友和家人表示衷心的感谢！

首先要特别感谢我的导师支丽红研究员！如果没有支老师当年招我作为研究生，我就不可能来到中科院数学学院这个国内顶级的科研机构深造学习，不可能接触到数学发展的前沿问题，不可能得到后来多次的国际交流机会，也不可能认识其他的老师，同学和朋友。当后来我为自己以后是否要继续作科研而迷茫时，支老师给了我很大的鼓励和支持。我清楚地记得支老师在给我的电子邮件中援引著名数学家的事迹，让我相信自己并坚持现在的选择。让我深深感激的是，在读研的这些年中，支老师尽心尽力的为我及她的其他研究生寻找各种国际交流的机会，开阔我们的视野，提高我们的水平。正是因为支老师的帮助，我才能有机会去美国北卡州立大学交流学习。支老师还积极为我联系博士后的机会，对此我铭记在心并深深地感谢。支老师的严格要求和教诲无论是在学习还是生活上都使我受益良多。我清晰地记得，支老师曾耐心地指出我论文中误用的每一个标点符号。她活跃的思维，崇高的敬业精神和严谨的治学态度都深深影响了我并值得我学习。

我要特别感谢 Kaltofen 教授。他是我在美国北卡州立大学交流学习时的指导老师。在这一年的交流学习中，Kaltofen 教授无论在科研还是生活中都给予了我很大的支持和帮助。他活跃的思维和平易近人态度，给了我很深的印象。他为我在北卡的交流学习提供了舒适的环境，并提供了莫大的帮助使我能够参加多次国际学术会议，展示自己的科研成果，认识本领域的前沿数学家。对于这些难得的机会，我都终身难忘并深深感谢！

我要特别感谢中国科学院数学机械化重点实验室给我提供的优越的学习，科研环境。感谢机械化中心的各位老师！特别感谢吴文俊院士、高小山研究员、李子明研究员、李洪波研究员、王定康副研究员。从他们那里我学习到了很多的知识并且获得了很多的帮助。非常感谢李子明研究员，感谢他在实验室招生方面辛勤的工作。正因为此，我才能顺利进入实验室深造学习。他严谨的治学态度和淡泊名利的性格也给了我很深的印象。

感谢我的父母，没有你们二十多年来辛苦的抚养和照顾，我就不可能有现在

的生活。你们为我们兄弟两人倾尽了一生的心血，对此我们终身无法偿还。感谢你们每天的牵挂，是你们无私的爱包容了我的一切优点与缺点。这里我还要感谢我的女朋友，同在中科院数学院学习的孙晓霞。正是因为你的陪伴，我们的生活才这么丰富多彩。感谢你在我生活学习中非常困难的时候，依然坚定地相信和支持我。感谢你对我日常的照顾和关心，对我每一次选择的理解和肯定。

感谢现在或曾经在数学机械化实验室学习的杨争锋师兄、吴晓丽师姐、陈绍示师兄、李斌师兄、马月、李子佳师弟、李楠师弟、郭庆东师弟等其他师弟师妹。感谢在美国北卡州立大学的朋友 Matthew Comer 和 Sharon Hutton。也感谢一起上讨论班的其他老师和同学，通过讨论班上的讨论交流让我学习到了很多知识。

最后还要感谢数学与系统科学研究院和中科院研究生院的各位老师！他们的辛勤工作为我们创造了良好的学习和生活环境。