正交约束优化：理论、算法与应用

答辩人： 高 斌
指导教师：袁亚湘 研究员

中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences
中国科学院数学与系统科学研究院
计算数学与科学工程计算研究所
科学与工程计算国家重点实验室

博士论文答辩

2019 年 5 月 14 日

目录

1. 引言

正交约束优化问题

一般形式

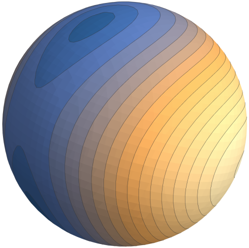
$$
\begin{aligned}
\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} \quad & f(X) \\
\text{s. t.} \quad & X^\top X = I_p \quad (p \ll n)
\end{aligned}
\tag{1.1}
$$

- $f:\mathbb{R}^{n\times p}\longmapsto\mathbb{R}$, 连续可微
- $p(p+1)/2$ 个约束
- Stiefel 流形:

$$\mathcal{S}_{n,p} = \{X\in\mathbb{R}^{n\times p} \mid X^\top X = I_p\}$$

难点和挑战

- 非凸约束
- NP-难的 (特殊的 f)
- 保持可行 (正交化)
- 算法的并行可扩展性



$f(x,y,z) = x^2 + 5y^2 - 3z^2 + 5x$

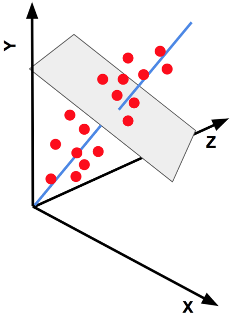
正交约束优化的应用

- 最小 p 个特征值/奇异值计算 [Liu, Wen, Yang, Zhang 2013-2016]

$$\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} \ \mathrm{tr}(X^\top AX) \quad \text{s. t.} \ X^\top X = I_p$$

$$\min_{U\in\mathbb{R}^{m\times p}} \ \mathrm{tr}(U^\top AA^\top U) \quad \text{s. t.} \ U^\top U = I_p$$

- 主成分分析 [Oja 2001; Jiang-Ma-So-Zhang 2017]
  - 样本数: n, 样本空间: $\mathbb{R}^m$
  - 观测矩阵: $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$
  - 降维: $m \longrightarrow p$



$$\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} \ -\frac{1}{m}\mathrm{tr}\left(X^\top(A-\bar{A})(A-\bar{A})^\top X\right) \quad \text{s. t.} \ X^\top X = I_p$$

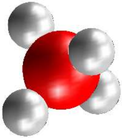
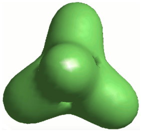
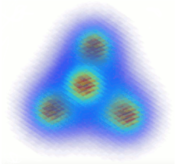
其中 $\bar{A} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^m A_i\mathbf{1}^\top$

正交约束优化的应用 (续)

- **Bose-Einstein 凝聚** [Griffin-Snoke-Stringari 1996; Hu-Jiang-Liu-Wen 2015]

$$\boxed{\min_{\phi \in \mathcal{S}} \quad E(\phi)} \xrightarrow{\text{离散模型}} \boxed{\begin{array}{ll} \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} & f(x) := \frac{1}{2} x^\top A x + \frac{\beta}{2} \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^4 \\ \text{s. t.} & \|x\|_2 = 1 \end{array}}$$

- **电子结构计算** [Liu, Yang, Wang, Wen 2006-2015; Chen, Dai, Gao, Zhou]

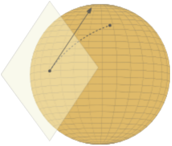




- **变分问题的压缩模型** [Ozoliņš-Lai-Caflisch-Osher 2013]
- **低秩相关矩阵** [Pietersz-Groenen 2004; Grubišić-Pietersz 2007]
- **联合对角化问题** [Theis-Cason-Absil 2009]
- . . .

已有算法

流形优化算法

- 最速下降法: [Helmke-Moore 1994; Udriste 1994]
- 共轭梯度法: [Smith 1994; Edelman-Arias-Smith 1998; Brace-Manton 2006; Gallivan-Absil 2010]
- 牛顿法: [Smith 1994; Edelman-Arias-Smith 1998; Hu-Wen-Milzarek-Yuan 2017]
- 拟牛顿法: [Edelman-Arias-Smith 1998; Brace-Manton 2006; Huang-Gallivan-Absil 2010, 2015]
- 信赖域法: [Absil-Baker-Gallivan 2007]
- 测地线方法: [Abrudan-Eriksson-Koivunen 2008]
- 拟测地线, Cayley 变换: [Nishimori-Akaho 2005]



切空间搜索

- 直接投影法: [Manton 2002; Absil-Mahony-Sepulchre 2008]
- 保约束算法: [Wen-Yin 2012; Jiang-Dai 2014]

其他相关研究

- 分裂算法, ADMM 和邻近点算法: [Lai-Osher 2014; Chen-Ji-You 2016; Zhu-Zhang-Chu-Liao 2017; Chen-Ma-So-Zhang 2018; Chen-Ma-Xue-Zou 2019]
- 无需向量运输的 SVRG: [Liu-So-Wu 2015; Jiang-Ma-So-Zhang 2017]

♣ Absil-Mahony-Sepulchre, *Optimization algorithms on matrix manifolds*, Princeton University Press, 2008

研究动机

黎曼流形优化

$$\min_{X \in \mathcal{S}_{n,p}} \quad f(X)$$

- 黎曼度量: $\langle Z_1, Z_2 \rangle_\rho = \mathrm{tr}(Z_1^\top (I - (1 - \frac{1}{\rho}) X X^\top) Z_2)$
- 切空间:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_X \mathcal{S}_{n,p} &= \{Z \in \mathbb{R}^{n\times p} : X^\top Z + Z^\top X = 0\} \\ &= \{XW + X_\perp K : W^\top + W = 0, W \in \mathbb{R}^{p\times p}, K \in \mathbb{R}^{(n-p)\times p}\} \\ &= \{AX : A^\top + A = 0, A \in \mathbb{R}^{n\times n}\} \end{aligned}$$

- 流形梯度:

$$\mathrm{grad}_\rho f(X) = (I - XX^\top)\nabla f(X) + \rho \cdot X \mathrm{skew}(X^\top \nabla f(X)) = 0$$

- 一阶最优性条件: $\mathrm{grad}_\rho\, f(X) = 0$

$$\boxed{\left\| \nabla f(X) - XX^\top \nabla f(X) \right\|_{\mathrm{F}}^2 + \rho^2 \left\| X^\top \nabla f(X) - \nabla f(X)^\top X \right\|_{\mathrm{F}}^2 = 0}$$

研究动机(续)

欧式空间约束优化

$$\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} \quad f(X), \quad \text{s. t.} \quad X^\top X = I_p$$

- 欧式度量: $\langle Z_1, Z_2\rangle_\rho = \mathrm{tr}(Z_1^\top Z_2)$
- 一阶最优性条件: $\begin{cases} (I_n - XX^\top)\nabla f(X) = 0; & \text{(次稳定性)} \\ X^\top \nabla f(X) = \nabla f(X)^\top X; & \text{(对称性)} \\ X^\top X = I_p & \text{(可行性)} \end{cases}$

	流形优化	欧式空间约束优化
流形计算	✓	-
下降方向	$\mathcal{T}_X\mathcal{S}_{n,p}$	$\mathbb{R}^{n\times p}$
正交化	收缩(矩阵分解/线性方程组)	可行/不可行方法
附加约束	-	✓
并行可扩展性	-	✓

主要工作 (贡献)

- 系统地研究了正交约束优化问题
  - Stiefel 流形优化和正交约束优化一阶最优性条件的对应关系
  - Lagrange 乘子在一阶稳定点处具有显式表达式
- 提出了一类非收缩算法框架
  - 梯度反射法和梯度投影法 (GR, GP)
  - 以列为块的块坐标下降方法 (CBCD)
- 将乘子校正步推广到一般的 Stiefel 流形收缩类算法
- 提出了基于增广 Lagrange 函数的并行算法
  - 邻近点线性化算法 (PLAM)
  - 可并行列极小化算法 (PCAL)
- 电子结构计算中的应用

2. 乘子校正算法

算法设计思路

问题假设

$$\begin{aligned} \min_{X \in \mathbb{R}^{n\times p}} \quad & f(X) := h(X) + \mathrm{tr}(G^\top X) \\ \text{s. t.} \quad & X^\top X = I_p \end{aligned} \tag{2.1}$$

其中 $h(X)$ 满足

- 正交不变性: $h(XQ) = h(X)$, $\forall Q \in \mathcal{S}_{p,p}$
- $\nabla h(X) = H(X)X$, 且 $H : \mathbb{R}^{n\times p} \mapsto \mathbb{SR}^{n\times n}$

一阶最优性条件

次稳定性	对称性	可行性
$\|\nabla f(X) - XX^\top \nabla f(X)\|_{\mathrm{F}}^2$	$\|X^\top \nabla f(X) - \nabla f(X)^\top X\|_{\mathrm{F}}^2$	$X^\top X = I_p$
$\downarrow$	$\|$	
0	0	✓

两阶段可行算法

步一：函数值充分下降 $X^k \longrightarrow \bar{X}$

基于当前点 $X^k \in \mathcal{S}_{n,p}$，搜索可行点 $\bar{X}$ 使其满足

$$f(X^k) - f(\bar{X}) \geq C_1 \cdot \left\| (I - X^k {X^k}^\top) \nabla f(X^k) \right\|_{\mathrm{F}}^2$$

步二：乘子对称校正 $\bar{X} \longrightarrow X^{k+1}$

基于中间点 $\bar{X} \in \mathcal{S}_{n,p}$，搜索可行点 X^{k+1} 使其满足

$${X^{k+1}}^\top \nabla f(X^{k+1}) = \nabla f(X^{k+1})^\top X^{k+1}$$

- 注意到 $\bar{X}^\top \nabla f(\bar{X}) = \bar{X}^\top H(\bar{X}) \bar{X} + \bar{X}^\top G$，故只需 $\bar{X}^\top G$ 对称
  1) $p \times p$ 奇异值分解：$U \Sigma T^\top = \bar{X}^\top G$
  2) $X^{k+1} = -\bar{X} U T^\top$

$$f(\bar{X}) - f(X^{k+1}) \geq \min\left\{ \frac{1}{8\theta}, 1 \right\} \cdot \left\| \bar{X}^\top \nabla f(\bar{X}) - \nabla f(\bar{X})^\top \bar{X} \right\|_{\mathrm{F}}^2$$

☺ **特殊情况无需校正**

– $G = 0$ 或 $p = 1$

算法框架

♋ 乘子校正算法

1. 初始化: $\epsilon > 0$, $X^0 \in \mathcal{S}_{n,p}$, 令 $k := 0$;
2. 搜索可行点 $\bar{X}$, 使其满足函数值下降条件

$$f(X^k) - f(\bar{X}) \geq C_1 \cdot \left\| (I - X^k {X^k}^\top) \nabla f(X^k) \right\|_F^2;$$

3. 计算乘子校正步, 得到

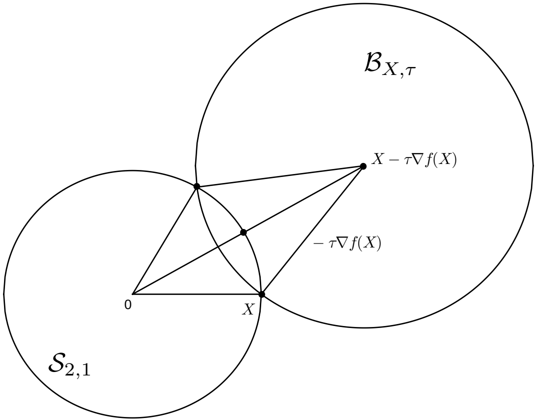
$$X^{k+1} := \begin{cases} \bar{X}, & \text{if } \bar{X}^\top G = G^\top \bar{X}; \\ -\bar{X} U T^\top, & \text{否则} \end{cases}$$

   其中 $U \Sigma T^\top$ 是 $\bar{X}^\top G$ 的奇异值分解;
4. 若 $\left\| (I - X^k {X^k}^\top) \nabla f(X^k) \right\|_F^2 < \epsilon$, 返回 X^{k+1}; 否则, 令 $k := k+1$ 并返回步 2.

步一：梯度类方法

对于任意的 $Y \in \mathcal{B}(X - \tau\nabla f(X), \tau||\nabla f(X)||_{\mathrm{F}})$，下式成立

$$f(X) - f(Y) \geq \frac{1-\rho\tau}{2\tau} \cdot ||X - Y||_{\mathrm{F}}^2, \quad \tau \in (0, \rho^{-1})$$

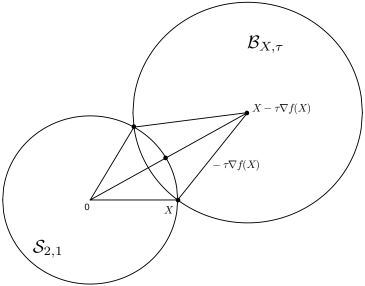


梯度反射法 (GR)

♣ Householder 变换

$$\boxed{\begin{array}{rcl} V & = & X^k - \tau \nabla f(X^k), \\ \bar{X} & = & (-I + 2V(V^\top V)^\dagger V^\top) X^k \end{array}}$$

其中 $C^\dagger$ 表示伪逆



性质

- 正交性满足: $\bar{X}^\top \bar{X} = I_p$
- 充分下降性:

$$f(X^k) - f(\bar{X}) \geq \frac{2(\tau^{-1} - \rho)}{(\tau^{-1} + \rho + \theta)^2} \cdot \left\| (I - X^k {X^k}^\top) \nabla f(X^k) \right\|_{\mathrm{F}}^2,$$

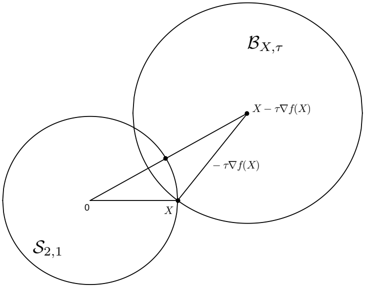
其中 $\tau \in (0, \rho^{-1})$

梯度投影法 (GP)

♣ 正交投影

$$\boxed{\begin{array}{rcl} V &=& X^k - \tau \nabla f(X^k), \\ \bar{X} &=& \mathcal{P}_{\mathcal{S}_{n,p}}(V) \end{array}}$$

其中 $\mathcal{P}_{\mathcal{S}_{n,p}}(C) = UV^\top$,
且 $C = U\Sigma V^\top$ 为奇异值分解



性质

- 正交性满足: $\bar{X}^\top \bar{X} = I_p$
- 充分下降性:

$$f(X^k) - f(\bar{X}) \geq \frac{\tau^{-1} - \rho}{(\tau^{-1} + \rho + \theta)^2} \cdot \left\| (I - X^k {X^k}^\top) \nabla f(X^k) \right\|_{\mathrm{F}}^2,$$

其中 $\tau \in (0, \rho^{-1})$

步一：块坐标下降法 (CBCD)

♣ **以列为块的块坐标下降法**: $f_{i,X}(x) := f(X_1, \ldots, X_{i-1}, x, X_i, \ldots, X_p)$

$$\boxed{\begin{array}{ll} \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} & f_{i,X}(x) \\ \text{s. t.} & \|x\|_2 = 1, \\ & X_{\bar{i}}^\top x = 0 \end{array}}$$

- 子问题非精确求解:

$$\begin{aligned} f_{i,W^{i-1}}(X_i) - f_{i,W^{i-1}}(x^+) &\geq k_1 \left\|X_i - x^+\right\|_2^2, \\ \left\|X_i - x^+\right\|_2 &\geq k_2 \left\|(I - W^{i-1} {W^{i-1}}^\top) \nabla f_{i,W^{i-1}}(X_i)\right\|_2 \end{aligned}$$

- 充分下降性:

$$f(X) - f(\bar{X}) \geq C_2 \cdot \left\|(I - XX^\top) \nabla f(X)\right\|_F^2$$

全局收敛性

函数值充分下降

$$f(X^k) - f(\bar{X}) \geq C_1 \cdot \left\| (I - X^k {X^k}^\top) \nabla f(X^k) \right\|_{\mathrm{F}}^2$$

乘子校正步

$$f(\bar{X}) - f(X^{k+1}) \geq \min\left\{ \frac{1}{8\theta}, 1 \right\} \cdot \left\| \bar{X}^\top \nabla f(\bar{X}) - \nabla f(\bar{X})^\top \bar{X} \right\|_{\mathrm{F}}^2$$

定理 2.1

令 $\{X^k\}$ 是由乘子校正算法从初始点 $X^0 \in \mathcal{S}_{n,p}$ 生成的迭代点列. 则 $\{X^k\}$ 存在一个收敛子列, 并且点列 $\{X^k\}$ 的每一个聚点 X^* 都满足问题 (2.1) 的一阶最优性条件.

计算量比较

更新策略	计算量 首次 τ	计算量 重复 τ
	测地线类算法	
$\mathcal{R}_X^{\text{geoe}}$ [Abrudan-Eriksson-Koivunen 2008]	$O(n^3)$	$O(n^3)$
$\mathcal{R}_X^{\text{qgeo}}$ [Nishimori-Akaho 2005]	$O(n^3)$	$O(n^3)$
$\mathcal{R}_X^{\text{geoe}}$ [Edelman-Arias-Smith 1998]	$10np^2 + 2np + O(p^3)$	$4np^2 + O(p^3)$
$\mathcal{R}_X^{\text{wy}}$ [Wen-Yin 2012]	$7np^2 + 2np + O(p^3)$	$4np^2 + np + O(p^3)$
	投影类算法	
$\mathcal{R}_X^{\text{qr}}$ [Absil-Mahony-Sepulchre 2008]	$6np^2 + 3np + O(p^3)$	$2np^2 + 2np$
$\mathcal{R}_X^{\text{pd}}$ [Absil-Mahony-Sepulchre 2008]	$7np^2 + 4np + O(p^3)$	$2np^2 + 2np + O(p^3)$
$\mathcal{R}_X^{\text{pj}}$ [Manton 2002]	$7np^2 + 4np + O(p^3)$	$3np^2 + 3np + O(p^3)$
$\mathcal{R}_X^{\text{jd}}$ [Jiang-Dai 2014]	$7np^2 + 3np + O(p^3)$	$2np^2 + 3np + O(p^3)$
	我们的算法	
GR	$9np^2 + 4np + O(p^3)$	
GP	$7np^2 + 3np + O(p^3)$	
CBCD-GR	$4np^2 + 8np + O(p^3)$	
CBCD-GP	$4np^2 + 5np + O(p^3)$	

数值实验

测试问题

$$\boxed{\begin{array}{cc} \displaystyle\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} & \frac{1}{2}\mathrm{tr}(X^\top AX)+\mathrm{tr}(G^\top X) \\ \text{s.t.} & X^\top X = I \end{array}}$$

$$A := U\Lambda U^\top, \quad G := \alpha\cdot QD$$

测试算法

- MOptQR: QR 收缩流形算法+ BB 步长 (http://www.manopt.org)
- OptM: [Wen-Yin 2012] (BB 步长) (https://github.com/wenstone/OptM)
- GR-BB: 梯度反射法+ BB step size (https://github.com/opt-gaobin/FOForth)
- CBCD-C: 以列为块的块坐标下降法

步长选取

BB 步长 [Barzilai-Borwein 1988]

$$
\begin{aligned}
J^{k-1} &= X^k - X^{k-1} \\
W^{k-1} &= (I - X^{k-1}{X^{k-1}}^\top)\nabla f(X^{k-1}) \\
K^{k-1} &= W^k - W^{k-1}
\end{aligned}
$$

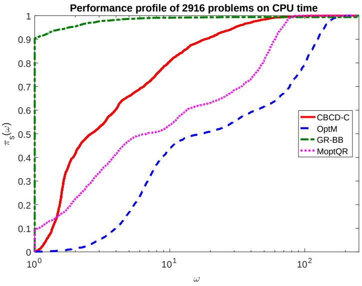
$$
\tau^{\text{BB1}} := \frac{\langle J^{k-1}, J^{k-1}\rangle}{|\langle J^{k-1}, K^{k-1}\rangle|}, \quad \tau^{\text{BB2}} := \frac{|\langle J^{k-1}, K^{k-1}\rangle|}{\langle K^{k-1}, K^{k-1}\rangle}
$$

自适应步长 [Liu-Han-Guo 2019]

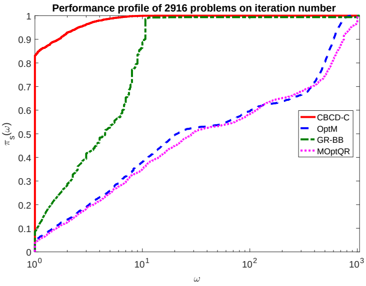
交替 BB 步长 (ABB) [Dai-Fletcher 2005]

$$
\tau := \begin{cases} \tau^{\text{BB1}}, & \text{当 } k \text{ 是偶数;} \\ \tau^{\text{BB2}}, & \text{当 } k \text{ 是奇数} \end{cases}
$$

综合性能比较



(a) CPU 时间



(b) 总迭代数

	CBCD-C	OptM	GR-BB	MOptQR
KKT 违反度	1.6075e-05	2.1730e-05	1.9501e-05	2.5072e-05
可行性违反度	1.9172e-14	1.5276e-14	1.9350e-14	2.1006e-15
相对函数值	6.5780e-06	8.1754e-06	3.0417e-06	7.9584e-06

– 相对函数值: $z_{m,s} := \left| \frac{F_{m,s} - \min_s\{F_{m,s}\}}{1+|\min_s\{F_{m,s}\}|} \right|$ (求解器 s 求解问题 m)

3. 子空间加速的收缩类算法

乘子校正步

问题假设

$$\begin{array}{ll} \min\limits_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} & f(X) := h(X) + \mathrm{tr}(G^\top X) \\ \text{s. t.} & X^\top X = I_p \end{array} \tag{3.1}$$

其中 $h(X)$ 满足

- 正交不变性: $h(XQ) = h(X)$, $\forall Q \in \mathcal{S}_{p,p}$
- $\nabla h(X) = H(X)X$, 且 $H: \mathbb{R}^{n\times p} \mapsto \mathbb{SR}^{n\times n}$

乘子校正步: ${X^{k+1}}^\top \nabla f(X^{k+1}) = \nabla f(X^{k+1})^\top X^{k+1}$

$$X^{k+1} := \begin{cases} \bar{X}, & \text{if } \bar{X}^\top G = G^\top \bar{X}; \\ -\bar{X}UT^\top, & \text{否则} \end{cases}$$

其中 $U\Sigma T^\top$ 是 $\bar{X}^\top G$ 的奇异值分解

$$\boxed{f(\bar{X}) - f(X^{k+1}) \geq \min\left\{\frac{1}{8\theta}, 1\right\} \cdot \left\|\bar{X}^\top \nabla f(\bar{X}) - \nabla f(\bar{X})^\top \bar{X}\right\|_{\mathrm{F}}^2}$$

子空间优化

♣ 乘子校正步满足

$$\boxed{Q^* := \arg\min_{Q \in \mathcal{S}_{p,p}} f(\bar{X}Q)} \quad \Longrightarrow \quad \boxed{X^{k+1} = \bar{X}Q^*}$$

♣ 子空间优化: $\bar{X} \in \mathcal{S}_{n,p}$

$$\begin{array}{cc} \min\limits_{X \in \mathbb{R}^{n\times p}} & f(X) \\ \text{s.t.} & X \in \mathcal{D}_{\bar{X}} \end{array}$$

其中 $\mathcal{D}_{\bar{X}} := \left\{\bar{X}Q : Q \in \mathcal{S}_{p,p}\right\} \subset \mathcal{S}_{n,p}$ 是 $\bar{X}$ 的正交不变子空间.

☺ 显式解

$$\boxed{X^{k+1} = -\bar{X}UT^\top}$$

♣ 加速算法

$$X^k \xrightarrow{\text{下降阶段: 任意可行下降方法}} \bar{X} \xrightarrow{\text{加速阶段}} X^{k+1}$$

子空间加速的收缩类线搜索算法

1. 初始化: 给定 Stiefel 流形 $\mathcal{S}_{n,p}$ 上的收缩映射 $\mathcal{R}$, 常数 $\bar{\alpha} > 0, c, \beta, \sigma \in (0, 1)$; $X^0 \in \mathcal{S}_{n,p}$, 令 $k := 0$;
2. (函数值下降阶段)
   选取搜索方向 $D^k \in \mathcal{T}_{X^k}\mathcal{S}_{n,p}$, 使用收缩类算法求解问题, 得到 $\bar{X} \in \mathcal{S}_{n,p}$;
3. (加速阶段)
   基于 $\bar{X}$, 由子空间问题的解计算可行点 X^{k+1}, 也就是
   $$X^{k+1} = -\bar{X}UT^\top$$
   其中 $U\Sigma T^\top$ 是 $\bar{X}^\top G$ 的奇异值分解;
4. 若停机准则满足, 则返回 X^{k+1}; 否则, 令 $k := k + 1$ 并返回步 2.

收敛性分析

全局收敛性

定理 3.1

令 $\{X^k\}$ 是由子空间加速的收缩类线搜索算法从初始点 $X^0 \in \mathcal{S}_{n,p}$ 生成的迭代点列. 则 $\{X^k\}$ 存在一个收敛子列, 并且点列 $\{X^k\}$ 的每一个聚点 X^* 都满足问题 (3.1) 的一阶最优性条件.

局部线性收敛速度 [Absil-Mahony-Sepulchre 2008]

- 局部极小值点
- 下降方向: $D^k = -\mathrm{grad}\, f(X^k)$
- Armijo 线搜索

数值实验

测试问题

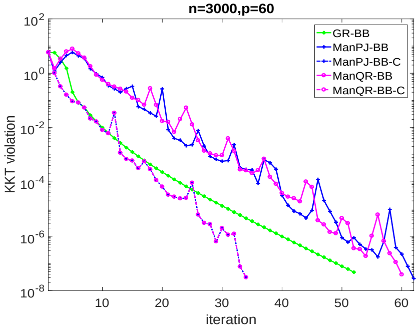
$$\boxed{\begin{array}{cc} \min\limits_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} & \frac{1}{2}\mathrm{tr}(X^\top AX) + \mathrm{tr}(G^\top X) \\ \mathrm{s.\,t.} & X^\top X = I \end{array}}$$

$$A := U\Lambda U^\top, \quad G := \alpha \cdot QD$$

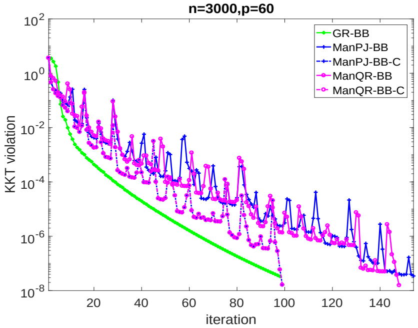
测试算法

- MOptPJ: SVD 收缩流形算法+ BB 步长 (http://www.manopt.org)
- MOptPJ-C: 子空间加速的MOptPJ
- MOptQR: QR 收缩流形算法+ BB 步长 (http://www.manopt.org)
- MOptQR-C: 子空间加速的MOptQR
- GR-BB: 梯度反射法+ BB step size (https://github.com/opt-gaobin/FOForth)

数值结果



(a) 问题参数: $\xi = 0$



(b) 问题参数: $\xi = 0.5$

- 加速后收敛速度更快
- SVD 和 QR 分解得到相同的子空间 $\mathrm{span}\{\bar{X}\}$

数值结果 (续)

变化参数	测试方法	函数值	KKT 违反度	总迭代数	CPU 时间(s)
$p = 120$	GR-BB	-25.5806718521	2.04e-08	31	1.80
	ManPJ-BB	-25.5806718521	3.51e-08	149	5.76
	ManPJ-BB-C	-25.5806718521	3.60e-08	**104**	**5.24**
	ManQR-BB	-25.5806718521	3.45e-08	158	6.22
	ManQR-BB-C	-25.5806718521	3.60e-08	**104**	**5.18**
$\zeta = 1.1$	GR-BB	-10.9204582842	1.19e-08	32	0.98
	ManPJ-BB	-10.9204582842	2.33e-08	278	5.91
	ManPJ-BB-C	-10.9204582842	2.27e-08	**157**	**4.07**
	ManQR-BB	-10.9204582842	2.34e-08	229	4.82
	ManQR-BB-C	-10.9204582842	2.24e-08	**156**	**4.00**
$\xi = 0.5$	GR-BB	-23.3612295898	3.33e-08	98	2.89
	ManPJ-BB	-23.3612295898	3.46e-08	154	3.27
	ManPJ-BB-C	-23.3612295898	1.64e-08	**99**	**2.53**
	ManQR-BB	-23.3612295898	1.57e-08	148	3.06
	ManQR-BB-C	-23.3612295898	1.64e-08	**99**	**2.57**

- 加速后迭代步数显著减少
- CPU 运行时间减少

4. 基于增广 Lagrange 函数的并行算法

主要瓶颈 — 保持可行性

♣ 函数/梯度信息计算

— 电子结构计算

L — 离散的拉普拉斯算子

V_{ion} — 低秩线性算子

计算项	复杂度	
	串行	并行 (m 核)
$\mathrm{tr}(X^\top L X)$ $\mathrm{tr}(X^\top V_{ion} X)$ $\sum_i \sum_l \lvert x_i^\top w_l \rvert^2$ $e^\top \epsilon_{xc}(\rho)$	$O(np)$	$O(np/m)$
$L^\dagger \rho$	$O(n)$ $O(n \log n)$	$O(n/m)$ $O(n \log n/m)$

♣ 基础线性代数操作 (BLAS)

计算项	复杂度	
	串行	并行 (m 核)
$Y_1 + Y_2$ $\mathrm{tr}(Y_1^\top Y_2)$	$O(np)$	$O(np/m)$
$Y_1^\top Y_2$	$O(np^2)$	$O(np^2/m)$
正交化	$O(np^2) + O(p^3)$	—

☹ 瓶颈: 正交化过程的低可扩展性

不可行方法

Courant 罚函数 $\longrightarrow$ 增广 Lagrange 函数

- 二次罚函数不适用于一般目标函数 [Wen-Yang-Liu-Zhang 2016]
- 增广 Lagrange 函数法 [Powell 1969; Hestenes 1969]

$$\mathcal{L}_\beta(X,\Lambda) \quad = \quad f(X) - \frac{1}{2}\langle \Lambda, X^\top X - I_p\rangle + \frac{\beta}{4}\left\|X^\top X - I_p\right\|_{\mathrm{F}}^2$$

♋ 增广 Lagrange 函数法

1. 给定 X^k, Λ^k;
2. 更新原始变量 X:
$$X^{k+1} := \arg\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} \mathcal{L}_\beta(X,\Lambda^k)$$
3. 更新对偶变量 Λ (Lagrange 乘子):
$$\Lambda^{k+1} := \Lambda^k - \beta({X^{k+1}}^\top X^{k+1} - I)$$
4. 更新罚参数 β.

乘子显式解

一阶最优性条件

$$\begin{cases} \nabla f(X) - X\Lambda = 0; & \text{(次稳定性)} \\ \Lambda = \Lambda^\top; & \text{(对称性)} \\ X^\top X = I_p & \text{(可行性)} \end{cases}$$

推论 4.1

假设 X 是正交约束优化问题的一阶稳定点，此时正交约束对应的 *Lagrange* 乘子满足

$$\Lambda = X^\top \nabla f(X) = \nabla f(X)^\top X.$$

♣ **乘子显式更新格式**

$$\boxed{\Lambda^k := \Psi(\nabla f(X^k)^\top X^k)}$$

其中 $\Psi : \mathbb{R}^{n\times n} \mapsto \mathbb{SR}^{n\times n}$ 为对称化算子 $\Psi(A) := \frac{1}{2}(A + A^\top)$

乘子显式更新的增广 Lagrange 函数法

乘子显式更新的增广 Lagrange 函数法

1. 初始化: $X^0 \in \mathbb{R}^{n\times p}$, 令 $k := 0$;
2. 更新对偶变量 Λ (Lagrange 乘子):
$$\Lambda^k := \Psi(\nabla f(X^k)^\top X^k);$$
3. 更新原始变量 X:
$$X^{k+1} := \arg\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} \mathcal{L}_\beta(X, \Lambda^k)$$
4. 若停机准则满足, 则返回 X^{k+1}; 否则, 令 $k := k + 1$ 并返回步 2.

新乘子更新性质

一阶性质

引理 4.1

对于任意满足 $\sigma_{\min}(X^*) > 0$ 的 X^*，假设 $\beta > \frac{\|\nabla f(X^*)\|_2 \cdot \|X^*\|_2 + \delta}{\sigma_{\min}^2(X^*)}$，其中 $\delta > 0$. 则下式成立

$$\left\| {X^*}^\top X^* - I_p \right\|_{\mathrm{F}} \leq \frac{\|X^*\|_2}{\delta} \cdot \|\nabla_X \mathcal{L}_\beta(X^*, \Lambda^*)\|_{\mathrm{F}},$$

其中 $\Lambda^* = \Psi(\nabla f(X^*)^\top X^*)$. 特别的，如果 X^* 还是如下问题

$$\min_{X \in \mathbb{R}^{n \times p}} \mathcal{L}_\beta(X, \Lambda^*)$$

的一阶稳定点，其中 $\Lambda^* = \Psi(\nabla f(X^*)^\top X^*)$，则 X^* 也是原问题的一阶稳定点.

- 精确罚函数

子问题求解

$$\boxed{\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} \mathcal{L}_\beta(X,\Lambda^k)} \xrightarrow{\text{近似模型}} \boxed{\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} m_k(X)}$$

♣ 邻近点线性化逼近 — 可并行策略

$$m_{k,1}(X) := \left\langle \nabla_X \mathcal{L}_\beta(X^k,\Lambda^k), X - X^k \right\rangle + \frac{\eta_k}{2}\left\|X - X^k\right\|_{\mathrm{F}}^2$$

☺ 显式解

$$X^{k+1} := \arg\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} m_{k,1}(X)$$

具体来讲，

$$\boxed{X^{k+1} = X^k - \frac{1}{\eta_k}\nabla_X \mathcal{L}_\beta(X^k,\Lambda^k)}$$

- $1/\eta_k$ 为原始变量更新步长

邻近点线性化增广 Lagrange 算法 (PLAM)

PLAM

1. 初始化: $X^0 \in \mathbb{R}^{n\times p}$, 令 $k := 0$;
2. 更新对偶变量 Λ (Lagrange 乘子):

$$\Lambda^k := \Psi(\nabla f(X^k)^\top X^k);$$

3. (可并行) 更新原始变量 X:

$$\begin{aligned} X^{k+1} &:= \arg\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} m_{k,1}(X) \\ &= X^k - \frac{1}{\eta_k}\nabla_X \mathcal{L}_\beta(X^k, \Lambda^k); \end{aligned}$$

4. 若停机准则满足, 则返回 X^{k+1}; 否则, 令 $k := k+1$ 并返回步 2.

理论分析 — 假设

初始点假设

假设 4.1

对于给定的 X^0, 如果存在 $\underline{\sigma} \in (0,1)$ 使得

$$\sigma_{\min}(X^0) \geq \underline{\sigma}, \qquad 0 < \left\| {X^0}^\top X^0 - I_p \right\|_{\mathrm{F}} \leq 1 - \underline{\sigma}^2,$$

则我们称其为一个合格的初始值.

X^0 可以很容易得到

(i) $X^0 = Q\Sigma$, 其中 $Q \in \mathcal{S}_{n,p}$, $\Sigma = \mathrm{diag}(\underbrace{1, ..., 1}_{p-1}, \sqrt{1-\underline{\sigma}^2})$

(ii) $X^0 \notin \mathcal{S}_{n,p}$ 满足 $\sigma^2_{\min}(X^0) > 1 - \frac{1}{\sqrt{p}}$ 且$\sigma^2_{\max}(X^0) < 1 + \frac{1}{\sqrt{p}}$

理论分析 — 假设 (续)

记号

$$R = \left\| X^{0\top} X^0 - I_p \right\|_{\mathrm{F}}; \quad \mathcal{C} = \{X \mid \|X^\top X - I_p\|_{\mathrm{F}} \le R\}; \quad \underline{f} = \min_{X \in \mathcal{C}} f(X);$$

$$M = \max_{X \in \mathcal{C}} \|X\|_2; \quad N = \max_{X \in \mathcal{C}} \|\nabla f(X)\|_{\mathrm{F}}; \quad L = \max_{X \in \mathcal{C}} \left\|\nabla^2 f(X)\right\|_2$$

评价函数

$$h(X) = f(X) - \frac{1}{2}\left\langle \Psi(\nabla f(X)^\top X), X^\top X - I_p \right\rangle + \frac{\beta}{4}\left\|X^\top X - I_p\right\|_{\mathrm{F}}^2$$

- f 二次连续可微
- $\nabla f(X)$ 在紧集 $\mathcal{C}$ 上 Lipschitz 连续
- 存在常数 $L_h > 0$, 与 β 有关, 使得

$$\|\nabla h(X) - \nabla h(y)\|_{\mathrm{F}} \le L_h \|X - Y\|_{\mathrm{F}}, \quad \forall X, Y \in \mathcal{C}$$

理论分析 — 假设 (续)

参数假设

假设 4.2

$$c_1 \in \left(0, \frac{1}{2}\right);\ \beta > \max\left\{\frac{MN}{\underline{\sigma}^2} + \sqrt{\frac{M^2N^2}{\underline{\sigma}^4} + \frac{(N+LM)^2}{4\underline{\sigma}^2(1-2c_1)}}, \frac{MN}{\underline{\sigma}}, \frac{4MN}{\underline{\sigma}^2}\right\};$$

$$c_2 \in \left(0, \frac{R^2(\beta\underline{\sigma}^2 - 4MN)}{2N_L^2}\right];\quad \eta^k \in [\underline{\eta}, \bar{\eta}],$$

$$\text{其中}\ \ \underline{\eta} = \max\left\{\frac{L_h}{2c_1}, \frac{2N_L M + N_L\sqrt{4M^2+2R}}{R}, \frac{R+2M^2}{c_2}\right\},$$

$$N_L = (1+M^2)N + \beta RM, \quad \bar{\eta} \geq \underline{\eta}.$$

全局收敛性

定理 4.1

令 $\{X^k\}$ 是由算法 *PLAM* 从初始点 X^0 生成的迭代点列, 其中初始点 X^0 满足假设 *4.1* 并且问题的参数满足假设 *4.2*. 则序列 $\{X^k\}$ 至少有一个聚点, 且任意聚点都是原正交约束优化问题的一阶稳定点. 进一步, 对于任意的 $K>1$, 下式成立,

$$\min_{k=0,\ldots,K-1} \left\|\nabla_X \mathcal{L}_\beta(X^k,\Lambda^k)\right\|_{\mathrm{F}} < \sqrt{\frac{f(X^0)-\underline{f}+MNR+\beta R^2/4}{c_3 K}}.$$

- 次线性收敛速度
- 需要 $O(1/\epsilon^2)$ 次迭代使得

$$\max\left\{\left\|\nabla_X \mathcal{L}_\beta(X^k,\Lambda^k)\right\|_{\mathrm{F}},\ \left\|{X^k}^\top X^k - I\right\|_{\mathrm{F}}\right\} < \epsilon$$

局部收敛速度

定理 4.2

假设 X^* 是原正交约束优化问题的一个孤立局部极小值点, 同时我们记

$$\tau := \inf_{0 \neq Y \in \mathcal{T}_X \mathcal{S}_{n,p}} \frac{\mathit{tr}(Y^\top \nabla^2 f(X)[Y] - \Lambda Y^\top Y)}{||Y||_{\mathrm{F}}^2}.$$

算法的参数满足 $\beta \geq \frac{L+MN+\tau}{2}$ 和 $\eta^k \in [\underline{\eta}, \bar{\eta}]$, 其中 $\bar{\eta} \geq \underline{\eta} \geq L + MN + 2\beta$. 则存在 $\varepsilon > 0$ 使得, 算法 *PLAM* 从任意满足 $||X^0 - X^*||_{\mathrm{F}} < \varepsilon$ 的初始点 X^0 出发生成的迭代点列 $\{X^k\}$, 以 *Q*-线性速度收敛到 X^*.

改进的 PLAM

PLAM 的局限

- 数值表现对参数 β_k 和 η_k 非常敏感
- 较小 $\beta_k \rightarrow$ 不收敛
- 较大 β_k 需要更大的 $\eta_k \rightarrow$ 收敛变慢

♣ 改进策略: 增加冗余单位球约束

$$\begin{aligned} \min_{X \in \mathbb{R}^{n \times p}} \quad & \tilde{\mathcal{L}}_\beta(X) := \left\langle \nabla_X \mathcal{L}_\beta(X^k, \Lambda^k), X - X^k \right\rangle + \frac{\eta_k}{2} \left\| X - X^k \right\|_{\mathrm{F}}^2 \\ \text{s. t.} \quad & \|X_i\| = 1, \quad i = 1, \ldots, p \end{aligned}$$

相应的乘子显式更新

$$\boxed{\Lambda^k := \Psi\left(\nabla f(X^k)^\top X^k\right) + \Phi\left({X^k}^\top \nabla_X L_\beta\left(X^k, \Psi(\nabla f(X^k)^\top X^k)\right)\right)}$$

其中 $\Phi(M) := \mathrm{Diag}(\mathsf{diag}(M))$

改进的 PLAM (续)

子问题可并行求解

对 $i = 1, \ldots, p$, 求解以列为块的子问题

$$
\begin{aligned}
X_i^{k+1} := \arg\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & \tilde{\mathcal{L}}_\beta^{(i)}(x) = \nabla_X \mathcal{L}_\beta(X^k, \Lambda^k)_i^\top (x - X_i^k) + \frac{\eta_k}{2} ||x - X_i^k||_2^2, \\
\text{s. t.} \quad & ||x||_2 = 1
\end{aligned}
$$

更新 $X^{k+1} = [X_1^{k+1}, \ldots, X_p^{k+1}]$.

☺ 显式解

$$
\boxed{X_i^{k+1} = \frac{X_i^k - \frac{1}{\eta_k} \nabla_{X_i} \mathcal{L}_\beta(X^k, \Lambda^k)}{\left\| X_i^k - \frac{1}{\eta_k} \nabla_{X_i} \mathcal{L}_\beta(X^k, \Lambda^k) \right\|_2}}
$$

PLAM 的可并行列极小化算法 (PCAL)

PCAL

1. 初始化: $X^0 \in \mathbb{R}^{n\times p}$, 令 $k := 0$;
2. 更新对偶变量 Λ (Lagrange 乘子):

$$\Lambda^k := \Psi(\nabla f(X^k)^\top X^k) + \Phi\left({X^k}^\top \nabla_X L_\beta(X^k, \Psi(\nabla f(X^k)^\top X^k))\right);$$

3. (可并行) 对 $i = 1, \ldots, p$, 更新原始变量的第 i 列

$$X_i^{k+1} := \frac{X_i^k - \frac{1}{\eta_k}\nabla_{X_i}\mathcal{L}_\beta(X^k, \Lambda^k)}{\left\|X_i^k - \frac{1}{\eta_k}\nabla_{X_i}\mathcal{L}_\beta(X^k, \Lambda^k)\right\|_2},$$

得到 $X^{k+1} := [X_1^{k+1}, \ldots, X_p^{k+1}]$;

4. 若停机准则满足, 则返回 X^{k+1}; 否则, 令 $k := k + 1$ 并返回步 2.

数值实验 — 串行

停机准则

- $\frac{\left\|\nabla f(X)-X\nabla f(X)^\top X\right\|_{\mathrm{F}}}{\|\nabla f(X^0)-X^0\nabla f(X^0)^\top X^0\|_{\mathrm{F}}} < 10^{-8}$ and $\left\|X^\top X - I\right\|_{\mathrm{F}} < 10^{-12}$
- 最大迭代数: 3000

测试问题

问题 1: 非线性特征值

$$\begin{array}{cc} \min\limits_{X \in \mathbb{R}^{n \times p}} & \frac{1}{2}\mathrm{tr}(X^\top L X) + \frac{\alpha}{4}\rho(X)^\top L^\dagger \rho(X) \\ \text{s. t.} & X^\top X = I_p, \end{array}$$

问题 2: 正交约束二次规划

$$\begin{array}{cc} \min\limits_{X \in \mathbb{R}^{n \times p}} & \frac{1}{2}\mathrm{tr}(X^\top A X) + \mathrm{tr}(G^\top X) \\ \text{s.t.} & X^\top X = I_p \end{array}$$

问题 3: Rayleigh-Ritz 迹极小化

$$\begin{array}{cc} \min\limits_{X \in \mathbb{R}^{n \times p}} & \frac{1}{2}\mathrm{tr}(X^\top A X) \\ \text{s.t.} & X^\top X = I_p \end{array}$$

问题 4: 一类二次问题

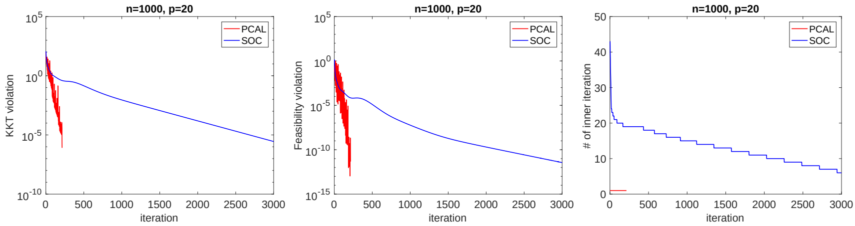
$$\begin{array}{cc} \min\limits_{X \in \mathbb{R}^{n \times p}} & \frac{1}{2}\mathrm{tr}(A^\top X B X^\top) \\ \text{s.t.} & X^\top X = I_p \end{array}$$

PCAL 与 ADMM 的数值比较

比较算法

– SOC [Lai-Osher 2014] (https://homepages.rpi.edu/~lair/codes/CMs_codes_share.zip)

问题 1



(a) KKT 违反度 (b) 可行性违反度 (c) 子问题迭代数

- PCAL 内迭代只需要一步

数值实验 — 并行

♣ 停机准则

- $\frac{\left\|\nabla f(X)-X\nabla f(X)^\top X\right\|_\mathrm{F}}{\|\nabla f(X^0)-X^0\nabla f(X^0)^\top X^0\|_\mathrm{F}} < 10^{-8}$
- 最大迭代数 1000

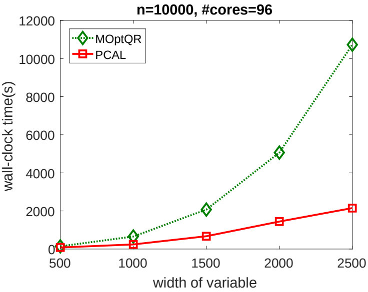
♣ 并行加速比

$$\text{并行加速比}(m) = \frac{\text{单核墙钟时间}}{m\ \text{核墙钟时间}}$$

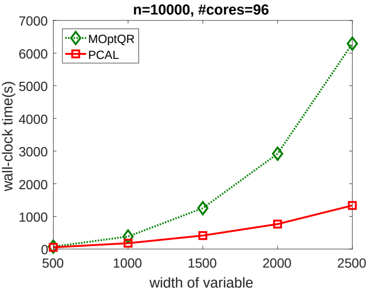
#cores: 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 96

墙钟时间——96 核

列数变化



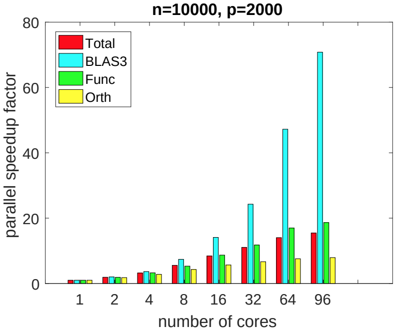
(a) Problem 1



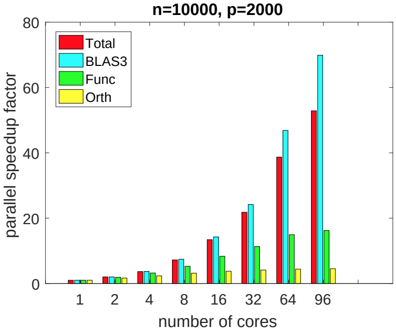
(b) Problem 2

- PCAL: 墙钟时间线性增长

并行加速比 ($p = 2000$)



(a) 问题 1: MOptQR



(b) 问题 1: PCAL

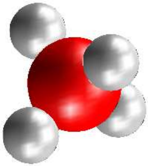
- PCAL: 更高的总并行加速比 **Total**

5. 正交约束优化在电子结构计算中的应用

电子结构计算

Kohn-Sham 密度泛函理论 [Kohn-Sham 1965]

- 多体 Schrödinger 方程 $\longrightarrow$ 单体问题



Kohn-Sham 总能量极小化问题

$$\boxed{\begin{array}{cc} \min\limits_{\psi_1,\ldots,\psi_p} & E_{\text{total}}^{\text{KS}}(\psi_1,\ldots,\psi_p) \\ \text{s. t.} & \psi_i^*\psi_j = \delta_{ij} \end{array}}$$

其中 $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & 若\ i=j; \\ 0, & 否则 \end{cases}$

- Kohn-Sham 总能量泛函 $E_{\text{total}}^{\text{KS}}(\psi_1,\ldots,\psi_p)$:

$$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{p}\int_{\Omega}\|\nabla\psi_i(r)\|^2\,\mathrm{d}r + \int_{\Omega}\rho(r)V_{\text{ion}}(r)\mathrm{d}r + \frac{1}{2}\int_{\Omega}\int_{\Omega}\frac{\rho(r)\rho(r')}{\|r-r'\|}\mathrm{d}r\mathrm{d}r' + E_{\text{xc}}(\rho)$$

  - $\Omega \in \mathbb{R}^3$
  - 原子核数: n_u
  - 单粒子波函数: $\psi_i(i=1,\ldots,p)$
  - 电荷密度: $\rho(r) = \sum_{i=1}^{p}\psi_i^*(r)\psi_i(r)$
  - 离子势能: $V_{\text{ion}}(r) = \sum_{j=1}^{n_u} zj/\|r-\hat{r}_j\|$
  - 交换关联能: $E_{\text{xc}}(\rho)$

离散问题

离散的 Kohn-Sham 总能量泛函极小化

$$\boxed{\begin{array}{cc} \min\limits_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} & E(X) \\ \text{s.t.} & X^\top X = I \end{array}}$$

其中，电荷密度 $\rho(X) := \mathrm{diag}(XX^\top)$，总能量泛函

$$E(X) := \frac{1}{4}\mathrm{tr}(X^\top LX) + \frac{1}{2}\mathrm{tr}(X^\top V_{ion}X) + \frac{1}{2}\sum_i\sum_l |x_i^\top w_l|^2 + \frac{1}{4}\rho^\top L^\dagger\rho + \frac{1}{2}e^\top\epsilon_{xc}(\rho)$$

1. 动能 (L: 是平面波基底下拉普拉斯算子的有限维表示)
2. 局部离子势能 (V_{ion}: 笛卡尔直角网格下的离子赝势)
3. 非局部离子势能 (w_l: 投影函数的离散赝势)
4. Hartree 势能 ($L^\dagger$: L 的伪逆)
5. 非经典的交换关联能 (ϵ_{xc}: 电子作用)

数值实验 — 串行

测试问题

- 工具包: KSSOLV [Yang-Meza-Lee-Wang 2009] (http://crd-legacy.lbl.gov/~chao/KSSOLV/)

问题	$n \times p$
al	16879×12
alanine	12671×18
benzene	8407×15
c2h6	2103×7
c12h26	5709×37
co2	2103×8

问题	$n \times p$
ctube661	12599×48
glutamine	16517×29
graphene16	3071×37
graphene30	12279×67
h2o	2103×4
hnco	2103×8

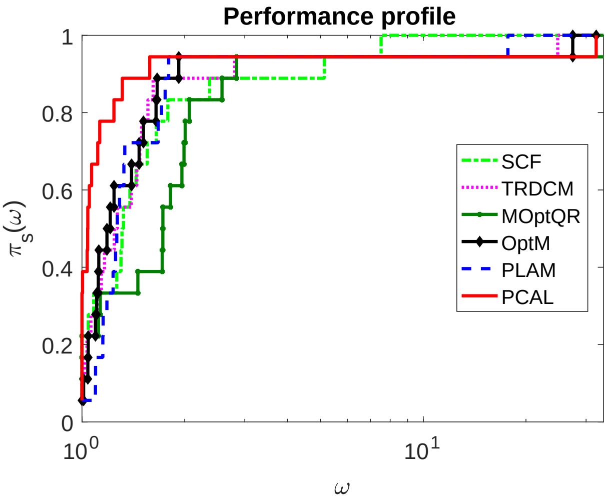
问题	$n \times p$
nic	251×7
pentacene	44791×51
ptnio	4609×43
qdot	2103×8
si2h4	2103×6
sih4	2103×4

测试算法

- SCF: 自洽场迭代
- TRDCM: 信赖域直接极小化 [Meza-Wang-Yang 2007]
- MOptQR: QR 收缩流形算法+ BB 步长 (http://www.manopt.org)
- OptM: [Wen-Yin 2012] (BB 步长) (https://github.com/wenstone/OptM)
- PLAM: $\eta = \eta_{\mathrm{ABB}}$, $\beta = 10$
- PCAL: $\eta = \eta_{\mathrm{ABB}}$, $\beta = 1$ (https://github.com/opt-gaobin/PCAL)

Solver	E_{tot}	KKT violation	Iteration	Feasibility violation	CPU time(s)
	al, $n = 16879$, $p = 12$			($\beta_{\text{PLAM}} = 10$, $\beta_{\text{PCAL}} = 1$)	
SCF	-1.5789379003e+01	4.88e-03	200	6.53e-15	539.51
TRDCM	-1.5803791151e+01	6.36e-06	154	4.94e-15	336.79
MOptQR	-1.5803814080e+01	1.88e-04	1000	1.33e-14	393.54
OptM	-1.5803791098e+01	2.38e-05	1000	3.19e-14	378.80
PLAM	-1.5803790675e+01	1.29e-05	1000	3.34e-07	399.80
PCAL	-1.5803791055e+01	8.96e-06	596	5.95e-15	**228.06**
	graphene30, $n = 12279$, $p = 67$			($\beta_{\text{PLAM}} = 13$, $\beta_{\text{PCAL}} = 1$)	
SCF	-1.7358453985e+02	5.19e-03	200	1.93e-14	2815.79
TRDCM	-1.7359510506e+02	4.80e-06	71	1.42e-14	765.92
MOptQR	-1.7359510505e+02	9.92e-06	456	2.59e-14	800.08
OptM	-1.7359510506e+02	2.47e-06	472	2.49e-14	904.44
PLAM	-1.7359510505e+02	8.88e-06	330	2.75e-14	601.41
PCAL	-1.7359510505e+02	8.52e-06	253	2.62e-14	**548.70**
	ctube661, $n = 12599$, $p = 48$			($\beta_{\text{PLAM}} = 13$, $\beta_{\text{PCAL}} = 1$)	
SCF	-1.3463843175e+02	3.88e-07	11	1.43e-14	56.43
TRDCM	-1.3463843176e+02	6.85e-06	23	1.09e-14	87.41
MOptQR	-1.3463843176e+02	7.21e-06	152	1.78e-14	107.62
OptM	-1.3463843176e+02	2.35e-06	82	2.15e-14	59.23
PLAM	-1.3463843176e+02	4.34e-06	107	2.37e-14	72.18
PCAL	-1.3463843176e+02	9.68e-06	65	1.95e-14	**54.07**
	pentacene, $n = 44791$, $p = 51$			($\beta_{\text{PLAM}} = 13$, $\beta_{\text{PCAL}} = 1$)	
SCF	-1.3189029494e+02	5.76e-07	13	1.58e-14	293.68
TRDCM	-1.3189029495e+02	7.60e-06	22	1.08e-14	276.25
MOptQR	-1.3189029495e+02	7.78e-06	112	3.21e-14	306.97
OptM	-1.3189029495e+02	1.39e-06	97	3.39e-14	283.02
PLAM	-1.3189029495e+02	8.66e-06	123	3.52e-14	321.04
PCAL	-1.3189029495e+02	7.67e-06	89	3.08e-14	**271.32**

综合性能比较



Performance profile
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
$\pi_s(\omega)$
10^0
10^1
ω
SCF
TRDCM
MOptQR
OptM
PLAM
PCAL

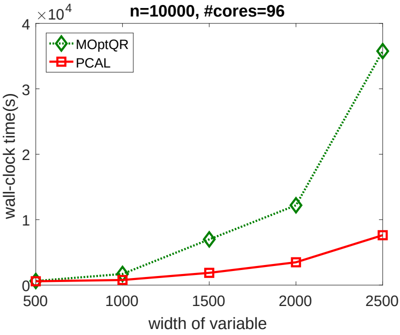
近似的离散 Kohn-Sham 总能量极小化问题

$$\begin{aligned} \min_{X \in \mathbb{R}^{n\times p}} \quad & \frac{1}{2}\mathsf{tr}(X^\top L X) + \frac{1}{2}\rho(X)^\top L^\dagger \rho(X) - \frac{3}{4}\gamma\rho(X)^\top \rho(X)^{\frac{1}{3}} \\ \text{s. t.} \quad & X^\top X = I_p, \end{aligned}$$

- $\rho(X) := \mathsf{diag}(XX^\top)$
- $L = \mathrm{Diag}(L_1, \ldots, L_s)$, 其中 $L_i \in \mathbb{R}^{5\times 5}$ 为 $(-1, 2, -1)$ 类型的三对角矩阵
- $\gamma = 2(\frac{3}{\pi})^{1/3}$
- PCAL: 罚参数 $\beta = 2$

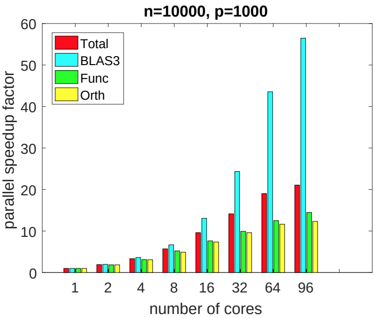
墙钟时间

列数变化

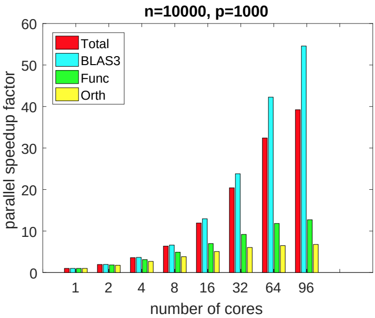


- PCAL: 墙钟时间线性增长

并行加速比 ($p = 1000$)



(a) MOptQR



(b) PCAL

- PCAL: 更高的总并行加速比 **Total**

6. 总结与展望

总结

- 正交约束优化问题
  - 一阶最优性条件
  - 乘子显式表达式
- 非收缩算法框架
  - 收敛性
  - 数值表现优异
- 子空间加速算法
- 正交约束优化的并行算法
  - 收敛性，局部线性收敛速度，复杂度
  - 并行可扩展性高
- 电子结构计算中的应用

展望

- 推广乘子校正算法
- 开发并行算法软件包
- 考虑更大规模的电子结构体系 (百万量级)

谢谢各位专家！