
《First-Order Methods in Optimization》

读书笔记（II）

谢君 李庆生 李欢 倪元华

2025年9月

前言

优化理论作为现代应用数学的重要分支，广泛应用于数据科学、人工智能、控制工程等众多领域，其理论体系的发展对实际问题的建模与求解具有深远影响。正因如此，南开大学倪元华课题组于 2021 年 9 月开始组织优化理论专题讨论班，致力于从零开始较系统性地学习优化理论。随后，南开大学李欢老师、天津大学张新珍老师课题组也加入进来，讨论班的学习路线循序渐进、由浅入深。自 2022 年 9 月起，课题组师生一起学习 Yurii Nesterov 所著《Lectures on Convex Optimization》，和 Amir Beck 所著《First-Order Methods in Optimization》。

本笔记整理课题组于 2023 年 9 月至 2025 年 12 月期间优化讨论班上的读书笔记，内容围绕 Amir Beck 所著《First-Order Methods in Optimization》的第七章至第十二章展开。该书作为凸优化领域的重要著作，以其严谨的理论体系和前沿的视角在学界享有盛誉。在讨论班的学习过程中，通过课题组成员的深入交流与反复推敲，逐步补全了许多被省略的推导过程，厘清了若干复杂论证的内在逻辑。

本读书笔记是课题组全体师生共同努力的结果，笔记的整理过程始于讨论班的课堂讲解。首先，由主讲同学对书中对应章节进行详细阐述，在讲解过程中，通过现场提问和集体讨论不断凝练和深化问题。每当出现疑惑或关键难点时，老师和同学积极互动，提出各自的见解和疑问，进一步激发对问题的探讨。课后，由主讲同学根据讨论班上的讲解、提问与讨论，对原有思路进行梳理和总结，最终整理成这份笔记，以便为我们后续的学习和研究提供参考资料。笔记力求在保留原书整体结构与符号系统基础上，补充必要的推导细节与解释，尽管在整理过程中力求严谨准确，但由于我们水平所限，书中仍会存在笔误及不严谨之处，恳请批评指正。

除南开大学倪元华老师、李欢老师，天津大学张新珍老师外，期间参加优化讨论班的还有南开大学人工智能学院的研究生同学：司彬彬（现于某银行工作）、岳新辉（现为某地公务员）、刘丽萍（现为某地公务员）、徐宏远（现于北京航空航天大学攻读博士学位）、张迪（现为某中学教师）、贾晖、王雨焯（现于香港理工大学攻读博士学位）、张震（将赴某研究所工作）、冯乐晨（现于香港理工大学攻读博士学位）、李浩然（现于香港理工大学攻读博士学位）、葛涵、贾茹茹、刘姿含、于梅灵、李庆生、谢君、刘震、谭浩天、陈子涵、马燕琳、原增昀、丁依宁、贾顺、徐阳阳、王文远、吴映桥、方鑫，和天津大学数学学院的研究生同学：余泉（现于湖南大学攻读博士学位）、朱琳（现于某银行工作）、郭洵园（现于海外攻读

博士学位)、王一静(现于某公司工作)、许君霞(现于某公司工作)、王学友(将赴某银行工作)、许梦平、赵千一、司文栋、徐思敏、李佳泽、丁鹤、郭艳鑫、薛琛、阳诗雨、侯嘉琪等。

笔记主要内容

本笔记整理了《First-Order Methods in Optimization》第七章——第十章的全部内容，具体包括：

- 近端算子理论、谱函数性质
- 原始-对偶投影次梯度算法
- 镜面下降算法
- 近端梯度算法

如何阅读此笔记

本笔记按照《First-Order Methods in Optimization》第七章——第十章顺序整理，如无特殊说明，记号均与书中对应章节一致。

作者简介

谢君 2023年毕业于东南大学，获信息与计算科学理学学士学位，现为南开大学人工智能学院运筹学与控制论专业博士研究生。研究兴趣主要包括数据驱动控制、强化学习与最优控制的交叉融合。

李庆生 2023年毕业于大连理工大学，获信息与计算科学学士学位，现为南开大学人工智能学院运筹学与控制论专业博士研究生。研究兴趣主要包括最优控制与博弈方法。

李欢 2019年于北京大学获得博士学位，现为南开大学人工智能学院副教授，在JMLR、SIOPT、NIPS、ICML等期刊与会议上发表论文多篇，研究方向为优化方法与机器学习。

倪元华 2010年于中国科学院获得运筹学与控制论博士学位，现为南开大学人工智能学院教授、博士生导师，并曾于2014年4月至2015年5月在美国加州大学圣地亚哥分校、2016年1月至2017年1月在香港理工大学担任访问学者。在Automatica、IEEE TAC、SICON等期刊上发表论文多篇，研究方向为随机控制、最优控制、强化学习、智能博弈、群体智能等，现为《System & Control Letters》期刊编委。

目录

前言	i
作者简介	iii
目录	iv
第 7 章 谱函数	1
7.1 对称函数	1
7.1.1 定义和例子	1
7.1.2 对称共轭定理	4
7.2 S^n 上的对称谱函数	5
7.2.1 谱共轭公式	7
7.2.2 S^n 上对称谱函数的近端算子	9
7.3 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的对称谱函数	11
7.3.1 谱共轭公式	13
7.3.2 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上对称谱函数的近端算子	15
第 8 章 原始与对偶投影次梯度方法	19
8.1 从梯度下降到次梯度下降	19
8.1.1 下降方向?	19
8.1.2 Wolfe 的例子	21
8.2 投影次梯度下降法	27
8.2.1 方法	28
8.2.2 Polyak 步长规则的收敛性分析	29
8.2.3 凸可行性问题	35
8.2.4 具有动态步长的次梯度投影法	41
8.2.5 强凸情况	46
8.3 随机投影梯度法	49
8.3.1 背景和方法	49
8.3.2 分析	49

8.3.3	强凸情况下的随机投影梯度	54
8.4	增量投影次梯度法	56
8.5	对偶投影次梯度法	60
8.5.1	对偶问题	60
8.5.2	对偶投影次梯度法	62
8.5.3	收敛性分析	63
8.5.4	例子-网络效用最大化	72
第 9 章	镜面下降法	75
9.1	从投影次梯度到镜面下降	75
9.2	收敛性分析	80
9.2.1	工具箱	80
9.2.2	固定迭代次数	83
9.2.3	动态步长规则	88
9.3	复合模型的镜面下降 ⁵²	90
9.3.1	镜面-C 方法	91
第 10 章	近端梯度法	99
10.1	复合模型	99
10.2	近端梯度法	100
10.3	非凸案例下的近端梯度法分析	101
10.3.1	充分下降	101
10.3.2	梯度映射	102
10.3.3	近端梯度法的收敛性——非凸情形	108
10.4	近端梯度法的分析-凸性情况	111
10.4.1	基本的 Prox-Grad 不等式	111
10.4.2	凸情况下的步长策略	113
10.4.3	凸情况下的收敛分析	114
10.5	近端点法	118
10.6	近端梯度法的收敛性——强凸情况	119
10.7	快速近端梯度法-FISTA	120

10.7.1	方法	120
10.7.2	FISTA 的收敛性分析	122
10.7.3	例子	124
10.7.4	MFISTA	125
10.7.5	加权 FISTA	128
10.7.6	强凸情况下的重启 FISTA	129
10.7.7	强凸情形 (再次讨论)——FISTA 的变体	131
10.8	光滑化	134
10.8.1	动机	134
10.8.2	可光滑函数与光滑近似	134
10.8.3	再论莫罗包络	138
10.8.4	S-FISTA 方法	140
10.9	非欧近端梯度法	145
10.9.1	非欧几里得梯度方法	145
10.9.2	非欧几里得近端梯度法 ⁶³	156
第 11 章	分块近端梯度法	160
11.1	分解方法	160
11.2	模型和假设	161
11.3	工具箱	162
11.3.1	部分梯度映射	162
11.3.2	块下降引理	166
11.3.3	充分下降	167
11.4	循环块邻近梯度法	168
11.4.1	非凸情形下循环分块近端梯度法的收敛性分析	169
11.4.2	凸情形下循环分块近端梯度法的收敛性分析	172
11.5	随机分块近端梯度法	177
第 12 章	基于对偶的近端梯度法	182
12.1	原始模型与对偶模型	182
12.2	双重近端梯度法	183

12.3	快速对偶近端梯度法	187
12.4	示例 I	188
12.4.1	多面体集合上的正交投影	188
12.4.2	闭凸集交上的正交投影	191
12.4.3	一维总变差去噪	193
12.4.4	二维总变差去噪	196
12.5	对偶块近端梯度法	199
12.5.1	预备知识	199
12.5.2	对偶块近端梯度法	200
12.5.3	收敛性分析	202
12.5.4	双块情形下的加速方法	203

第 7 章 谱函数

在本章中,我们将集中讨论谱函数,谱函数是矩阵的函数,只依赖于矩阵的奇异值或特征值.本章的基本空间都是欧几里德空间.我们首先定义相对于一个给定正交矩阵集合对称的概念。

7.1 对称函数

7.1.1 定义和例子

定义 7.1 (对称函数). 令 $\mathcal{A} \subseteq \mathbb{O}^n$ 是一个正交矩阵的集合. 一个 proper 函数 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 称为相对于 \mathcal{A} 对称的, 如果

$$f(\mathbf{Ax}) = f(\mathbf{x}), \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{A} \in \mathcal{A}$$

成立.

下面是五种对称函数,每一种都是由 \mathcal{A} 中正交矩阵的选择决定的.

例 7.2 (偶函数). 如果 $\mathcal{A} = \{-\mathbf{I}\}$, 则 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 为相对于 \mathcal{A} 对称的, 若

$$f(\mathbf{x}) = f(-\mathbf{x}), \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

成立. 这样的函数被称为偶函数.

例 7.3 (绝对对称函数). 取 $\mathcal{A} = \{\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_n\} \subseteq \mathbb{R}^{n \times n}$, 其中 \mathbf{D}_i 为对角矩阵, 其对角元素除 (i, i) 项等于 1 外均为 1. 则一个 proper 函数 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 为相对于 \mathcal{A} 对称的, 当且仅当

$$f(\mathbf{x}) = f(|\mathbf{x}|), \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

成立; 我们称这样的函数为绝对对称函数.

证明: 必要性: 对任意的 $i \in \{1, \dots, n\}$, \mathbf{D}_i 的作用是将 \mathbf{x} 的第 i 个分量符号反转, 而其他分量符号保持不变, 即 $f(\mathbf{x})$ 在向量 \mathbf{x} 的第 i 个分量符号翻转后函数值不变. 有

$$f(\mathbf{D}_1 \mathbf{x}) = f([-x_1, x_2, \dots, x_n]^T) = f([x_1, x_2, \dots, x_n]^T),$$

随后对后面的分量依次进行上述处理, 可得当自变量的任意分量符号翻转时, 并不影响函数值, 必要性得证.

充分性: 对任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{D}_i \in \mathcal{A}$, 有

$$f(\mathbf{D}_i \mathbf{x}) = f(|\mathbf{D}_i \mathbf{x}|) = f(|\mathbf{x}|) = f(\mathbf{x}).$$

第二个等号由 \mathbf{D}_i 的结构可得, 充分性得证. 证毕. \square

性质: f 是绝对对称的, 当且仅当存在一个函数 $g: \mathbb{R}_+^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 使得 $f(\mathbf{x}) = g(|\mathbf{x}|)$ 对所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ 都成立.

证明: 必要性: 取 $g = f, \mathbf{x} > 0$, 可得 $f(\mathbf{x}) = g(|\mathbf{x}|)$ 对所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.

充分性: 将 $|\mathbf{x}|$ 带入 $f(\mathbf{x}) = g(|\mathbf{x}|)$, 可得 $f(|\mathbf{x}|) = g(|\mathbf{x}|) = f(\mathbf{x})$, 充分性得证. \square

例 7.4 (范数相关函数). 一个 proper 函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 为相对于 $\mathcal{A} = \mathbb{O}^n$ 对称的, 当且仅当

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{U}\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{U} \in \mathbb{O}^n$$

成立; 满足上述条件的函数称为范数相关函数. f 相对于 $\mathcal{A} = \mathbb{O}^n$ 对称, 当且仅当存在一个 proper 函数 $g: \mathbb{R} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 使得

$$f(\mathbf{x}) = g(\|\mathbf{x}\|_2), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n.$$

证明: 必要性: 取 $g(u) = f(\mathbf{e}_1 u), u \in \mathbb{R}$, 其中 $\mathbf{e}_1 = [1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^n$, 则 $g(\|\mathbf{x}\|_2) = f(\mathbf{e}_1 \|\mathbf{x}\|_2)$, 由于 \mathbf{x} 和 $\mathbf{e}_1 \|\mathbf{x}\|_2$ 的模相等, 注意到本章提到的空间都为欧式空间, 则存在 $V \in \mathbb{O}^n$ 使得 $V\mathbf{x} = \mathbf{e}_1 \|\mathbf{x}\|_2$ 成立, 从而

$$g(\|\mathbf{x}\|_2) = f(\mathbf{e}_1 \|\mathbf{x}\|_2) = f(V\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}),$$

必要性得证.

充分性: 对任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, U \in \mathbb{O}^n$, 有 $f(U\mathbf{x}) = g(\|U\mathbf{x}\|_2) = g(\|\mathbf{x}\|_2) = f(\mathbf{x})$, 充分性得证. 证毕. \square

在描述接下来的两个例子之前, 我们需要一些额外的符号. 对于给定向量 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 向量 \mathbf{x}^\downarrow 是向量 \mathbf{x} 非递增重排序. 例如, 如果 $\mathbf{x} = (2, -9, 2, 10)^T$, 则 $\mathbf{x}^\downarrow = (10, 2, 2, -9)^T$.

定义 7.5 (置换矩阵). 称一个 $n \times n$ 矩阵为置换矩阵, 如果它的所有元素不是 0 就是 1, 并且每一行每一列都只有一个非零元素, 所有 $n \times n$ 置换矩阵的集合记为 Λ_n .

定义 7.6 (广义置换矩阵). 称一个 $n \times n$ 矩阵为广义置换矩阵, 如果它的所有分量都是 0, 1 或 -1 , 并且每一行和每一列都只有一个非零元素, 所有 $n \times n$ 广义置换矩阵的集合用 Λ_n^G 表示.

因此, 例如,

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \in \Lambda_3, \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \in \Lambda_3^G.$$

通过置换矩阵和广义置换矩阵的定义, 我们不难看出, 对于任一 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 存在置换矩阵 $\mathbf{P} \in \Lambda_n$ 和广义置换矩阵 $\mathbf{Q} \in \Lambda_n^G$ 使得 $\mathbf{P}\mathbf{x} = \mathbf{x}^\downarrow$ 和 $\mathbf{Q}\mathbf{x} = |\mathbf{x}|^\downarrow$ 成立. 事实上, 利用初等行变换求矩阵的逆的思想, 交换 $[\mathbf{x} \ \mathbf{I}]$ 中行的顺序 (\mathbf{I} 是 $n \times n$ 单位矩阵) 可得

$$[\mathbf{x} \ \mathbf{I}] \xrightarrow{\text{初等行变换}} [\mathbf{x}^\downarrow \ \mathbf{P}],$$

从而存在第二类初等矩阵 $\mathbf{E}_1, \dots, \mathbf{E}_r$ (第二类初等变换是指单位矩阵中交换两行的顺序) 使得 $\mathbf{E}_r \cdots \mathbf{E}_1 [\mathbf{x} \ \mathbf{I}] = [\mathbf{x}^\downarrow \ \mathbf{P}]$, 故 $\mathbf{P}\mathbf{x} = \mathbf{E}_r \cdots \mathbf{E}_1 \mathbf{x} = \mathbf{x}^\downarrow$ 且 $\mathbf{P} = \mathbf{E}_r \cdots \mathbf{E}_1$. 进而, 任一 $n \times n$ 置换矩阵 $\mathbf{P} \in \Lambda_n$ 都可表示成若干个 n 阶第二类初等矩阵的乘积, 这是因为任一置换矩阵都可经过若干第二类初等变换化为单位矩阵, 而任一广义置换矩阵都可经过若干第一, 二类初等变换化为单位矩阵 (第一类初等变换是指某行乘以一常数). 注意到, 初等矩阵都是正交矩阵, 所以置换矩阵和广义置换矩阵都是正交矩阵.

例 7.7 (置换对称函数). 一个 proper 函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 称为相对于 Λ_n 对称的, 当且仅当

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{P}\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{P} \in \Lambda_n$$

成立; 这样的函数被称为置换对称函数. 很容易证明 f 是置换对称的, 当且仅当

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^\downarrow), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n.$$

事实上, 因为对于任一 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 存在置换矩阵 $\mathbf{P} \in \Lambda_n$ 使得 $\mathbf{P}\mathbf{x} = \mathbf{x}^\downarrow$. 反之, 对任意的 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{P} \in \Lambda_n$,

$$f(\mathbf{P}\mathbf{x}) = f((\mathbf{P}\mathbf{x})^\downarrow) = f(\mathbf{x}^\downarrow) = f(\mathbf{x}),$$

其中第 2 个等号是由于 \mathbf{P} 为置换矩阵, 因为一个列向量左乘一个置换矩阵只会改变其分量的顺序, 且 $(\mathbf{P}\mathbf{x})^\downarrow = \mathbf{x}^\downarrow$, 充分性得证.

例 7.8 (绝对置换对称函数). 一个 proper 函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 称为相对于 Λ_n^G 对称的, 当且仅当

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{Q}\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{Q} \in \Lambda_n^G$$

成立; 这样的函数被称为绝对置换对称函数. 很容易证明 f 是绝对置换对称的, 当

且仅当

$$f(\mathbf{x}) = f(|\mathbf{x}|^\downarrow), \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n.$$

事实上, 必要性是显然的, 因为对于任一 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 存在置换矩阵 $\mathbf{Q} \in \Lambda_n$ 使得 $\mathbf{Q}\mathbf{x} = |\mathbf{x}|^\downarrow$. 反之, 对任意的 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{Q} \in \Lambda_n^G$,

$$f(\mathbf{Q}\mathbf{x}) = f((|\mathbf{Q}\mathbf{x}|)^\downarrow) = f(|\mathbf{x}|^\downarrow) = f(\mathbf{x}),$$

其中第 2 个等号是由于 \mathbf{P} 为广义置换矩阵, 且有 $(|\mathbf{P}\mathbf{x}|)^\downarrow = |\mathbf{x}|^\downarrow$, 充分性得证.

7.1.2 对称共轭定理

现在我们将证明, 对称函数的共轭相对于同一组正交矩阵也是对称的.

定理 7.9 (对称共轭定理). 令 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个 proper 函数, 该函数是相对于一组正交矩阵 $\mathcal{A} \subseteq \mathbb{O}^n$ 对称的. 则 f^* 也是相对于 \mathcal{A} 对称的.

证明: 令 $\mathbf{A} \in \mathcal{A}$, $h = f \circ \mathbf{A}$: $h(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{A}\mathbf{x})$. 根据对称假设, 有

$$\begin{aligned} f^*(\mathbf{y}) &= \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x})\} \\ &= \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{A}\mathbf{x})\} \\ &= \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle - h(\mathbf{x})\} \\ &= h^*(\mathbf{y}), \quad \forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n. \end{aligned} \tag{7.1}$$

根据定理 4.13 和 \mathbf{A} 的正交性, 对任意的 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, 成立

$$h^*(\mathbf{y}) = f^*((\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{y}) = f^*(\mathbf{A}\mathbf{y}),$$

结合 (7.1) 得到

$$f^*(\mathbf{y}) = f^*(\mathbf{A}\mathbf{y}), \quad \forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n.$$

由于上述条件对任意 $\mathbf{A} \in \mathcal{A}$ 都成立, 可知 f^* 是相对于 \mathcal{A} 对称的. \square

例 7.10. 在这个例子中, 我们将通过验证第 4.4.16 节中的函数所满足的对称类型对它们的共轭也成立来说明对称共轭定理.

• 偶函数

$f(\mathbf{x})$	$\text{dom}(f)$	$f^*(\mathbf{y})$	Assumptions	Reference
$\frac{1}{p} x ^p$	\mathbb{R}	$\frac{1}{q} y ^q$	$p > 1, \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$	Section 4.4.4
$\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + c$	\mathbb{R}^n	$\frac{1}{2}\mathbf{y}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{y} - c$	$\mathbf{A} \in \mathbb{S}_{++}^n, c \in \mathbb{R}$	Section 4.4.6

• 置换对称函数

$f(\mathbf{x})$	$\text{dom}(f)$	$f^*(\mathbf{y})$	Reference
$\sum_{i=1}^n x_i \log x_i$	\mathbb{R}_+^n	$\sum_{i=1}^n e^{y_i-1}$	Section 4.4.8
$\sum_{i=1}^n x_i \log x_i$	Δ_n	$\log(\sum_{i=1}^n e^{y_i})$	Section 4.4.10
$\log(\sum_{i=1}^n e^{x_i})$	\mathbb{R}^n	$\sum_{i=1}^n y_i \log y_i$ ($\text{dom}(f^*) = \Delta_n$)	Section 4.4.11
$\max_i \{x_i\}$	\mathbb{R}^n	$\delta_{\Delta_n}(\mathbf{y})$	Example 4.10

• 绝对置换对称函数

$f(\mathbf{x})$	$\text{dom}(f)$	$f^*(\mathbf{y})$	Reference
$\ \mathbf{x}\ _p$	\mathbb{R}^n	$\delta_{B_{\ \cdot\ _q}[0,1]}(\mathbf{y})$	Section 4.4.12
$\frac{1}{2}\ \mathbf{x}\ _p^2$	\mathbb{E}	$\frac{1}{2}\ \mathbf{y}\ _q^2$	Section 4.4.15

其中 $p, q \in [1, \infty]$, $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ (约定俗成地说如果 $p = 1, \infty$, 则 $q = \infty, 1$, 分别地).

• 范数相关函数

f	$\text{dom}(f)$	f^*	Reference
$\ \mathbf{x}\ _2$	\mathbb{R}^n	$\delta_{B_{\ \cdot\ _2}[0,1]}(\mathbf{y})$	Section 4.4.12
$-\sqrt{\alpha^2 - \ \mathbf{x}\ _2^2}$ ($\alpha > 0$)	$B_{\ \cdot\ _2}[0, \alpha]$	$\alpha\sqrt{\ \mathbf{y}\ _2^2 + 1}$	Section 4.4.13
$\sqrt{\alpha^2 + \ \mathbf{x}\ _2^2}$ ($\alpha > 0$)	\mathbb{R}^n	$-\alpha\sqrt{1 - \ \mathbf{y}\ _2^2}$ ($\text{dom } f = B_{\ \cdot\ _2}[0, 1]$)	Section 4.4.14
$\frac{1}{2}\ \mathbf{x}\ _2^2$	\mathbb{R}^n	$\frac{1}{2}\ \mathbf{y}\ _2^2$	Section 4.4.15

7.2 \mathbb{S}^n 上的对称谱函数

本章主要关注定义在对称矩阵集 \mathbb{S}^n 或矩阵集 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的矩阵函数, 且将只处理依赖于其参数的特征值 (如果基本空间是 \mathbb{S}^n) 或奇异值 (如果基本空间是 $\mathbb{R}^{m \times n}$) 的函数, 这样的函数称为谱函数. 我们首先考虑 \mathbb{S}^n 上的函数, 给定一个矩阵 $\mathbf{X} \in \mathbb{S}^n$, 其非递增排序的特征值记为

$$\lambda_1(\mathbf{X}) \geq \lambda_2(\mathbf{X}) \geq \cdots \geq \lambda_n(\mathbf{X}).$$

定义特征值函数 $\boldsymbol{\lambda} : \mathbb{S}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$:

$$\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X}) \equiv (\lambda_1(\mathbf{X}), \lambda_2(\mathbf{X}), \dots, \lambda_n(\mathbf{X}))^T.$$

线性代数的一个关键事实是, 任何对称矩阵 $\mathbf{X} \in \mathbb{S}^n$ 都有谱分解, 这意味着存在一个正交矩阵 $\mathbf{U} \in \mathbb{O}^n$, 使得 $\mathbf{X} = \mathbf{U} \operatorname{diag}(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X}))\mathbf{U}^T$.

定义 7.11 (\mathbb{S}^n 上的谱函数). 一个 proper 函数 $g: \mathbb{S}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 称为 \mathbb{S}^n 上的谱函数, 如果存在一个 proper 函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$, 使得 $g = f \circ \boldsymbol{\lambda}$.

如果 $g = f \circ \boldsymbol{\lambda}$, 我们将把 f (实际上不一定是唯一的) 作为关联函数, 我们的主要兴趣是研究关联函数是置换对称的谱函数.

定义 7.12 (\mathbb{S}^n 上的对称谱函数). 一个 proper 函数 $g: \mathbb{S}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 称为 \mathbb{S}^n 上的对称谱函数, 如果存在一个 proper 置换对称的函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$, 使得 $g = f \circ \boldsymbol{\lambda}$.

例 7.13. 下面是置换对称函数及其关联对称谱函数的列表.

#	$f(x)$	$\operatorname{dom}(f)$	$f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X}))$	$\operatorname{dom}(f \circ \boldsymbol{\lambda})$
1	$\sum_{i=1}^n x_i$	\mathbb{R}^n	$\operatorname{Tr}(\mathbf{X})$	\mathbb{S}^n
2	$\max_{i=1,2,\dots,n} x_i$	\mathbb{R}^n	$\lambda_{\max}(\mathbf{X})$	\mathbb{S}^n
3	$\alpha \ \mathbf{x}\ _2 (\alpha \in \mathbb{R})$	\mathbb{R}^n	$\alpha \ \mathbf{X}\ _F$	\mathbb{S}^n
4	$\alpha \ \mathbf{x}\ _2^2 (\alpha \in \mathbb{R})$	\mathbb{R}^n	$\alpha \ \mathbf{X}\ _F^2$	\mathbb{S}^n
5	$\alpha \ \mathbf{x}\ _\infty (\alpha \in \mathbb{R})$	\mathbb{R}^n	$\alpha \ \mathbf{X}\ _{2,2}$	\mathbb{S}^n
6	$\alpha \ \mathbf{x}\ _1 (\alpha \in \mathbb{R})$	\mathbb{R}^n	$\alpha \ \mathbf{X}\ _{S_1}$	\mathbb{S}^n
7	$-\sum_{i=1}^n \log(x_i)$	\mathbb{R}_{++}^n	$-\log \det(\mathbf{X})$	\mathbb{S}_{++}^n
8	$\sum_{i=1}^n x_i \log(x_i)$	\mathbb{R}_+^n	$\sum_{i=1}^n \lambda_i(\mathbf{X}) \log(\lambda_i(\mathbf{X}))$	\mathbb{S}_+^n
9	$\sum_{i=1}^n x_i \log(x_i)$	Δ_n	$\sum_{i=1}^n \lambda_i(\mathbf{X}) \log(\lambda_i(\mathbf{X}))$	Υ_n

上表中最后一个函数的定义域是 spectahedron 集合

$$\Upsilon_n = \{\mathbf{X} \in \mathbb{S}_+^n : \operatorname{Tr}(\mathbf{X}) = 1\}.$$

在第 6 个函数中使用的范数是 Schatten 1-范数, 其对称矩阵的表达式由

$$\|\mathbf{X}\|_{S_1} = \sum_{i=1}^n |\lambda_i(\mathbf{X})|, \quad \mathbf{X} \in \mathbb{S}^n,$$

Schatten p -范数将在第 7.3 节中详细讨论. 下面验证例 7.13 表格中的第四项. 事实上, 已知 $f(x) = \alpha \|\mathbf{x}\|_2^2$, 则 $f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X})) = \alpha \sum_{i=1}^n (\lambda_i(\mathbf{X}))^2$. 对于矩阵 $\mathbf{X} \in \mathbb{S}^n$, 取它的一个谱分解 $\mathbf{X} = \mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{U}^T, \mathbf{U} \in \mathbb{O}^n$, 成立

$$\|\mathbf{X}\|_F^2 = \operatorname{Tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{X}) = \operatorname{Tr}((\mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{U}^T)^T (\mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{U}^T)) = \operatorname{Tr}(\mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}^2\mathbf{U}^T) = \operatorname{Tr}(\boldsymbol{\Lambda}^2) = \sum_{i=1}^n (\lambda_i(\mathbf{X}))^2,$$

因而 $f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X})) = \alpha \|\mathbf{X}\|_F^2$.

建立本节主要结果的关键技术是一个基本不等式, 即所谓的 Fan's 不等式, 它表明两个对称矩阵内积的上界是它们特征值向量的内积, 并且当且仅当两个矩阵同时是正交对角化矩阵时, 等式成立.

定理 7.14 (Fan's 不等式). 对任意两个对称矩阵 $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in \mathbb{S}^n$, 下式成立

$$\text{Tr}(\mathbf{X}\mathbf{Y}) \leq \langle \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X}), \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{Y}) \rangle,$$

且等式成立当且仅当存在 $\mathbf{V} \in \mathbb{O}^n$, 使得

$$\mathbf{X} = \mathbf{V} \text{diag}(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X})) \mathbf{V}^T,$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{V} \text{diag}(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{Y})) \mathbf{V}^T.$$

7.2.1 谱共轭公式

Fan's 不等式一个比较直接的应用是谱共轭公式, 该公式展示了如何根据其关联函数的共轭计算 \mathbb{S}^n 上对称谱函数的共轭.

定理 7.15 (\mathbb{S}^n 上的谱共轭公式). 令 $f: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty)$ 是一个置换对称矩阵, 则下式成立

$$(f \circ \boldsymbol{\lambda})^* = f^* \circ \boldsymbol{\lambda}.$$

证明: \mathbb{S}^n 的对偶空间仍为 \mathbb{S}^n , 故令 $\mathbf{Y} \in \mathbb{S}^n$, 有

$$\begin{aligned} (f \circ \boldsymbol{\lambda})^*(\mathbf{Y}) &= \max_{\mathbf{X} \in \mathbb{S}^n} \{ \langle \mathbf{Y}, \mathbf{X} \rangle - (f \circ \boldsymbol{\lambda})(\mathbf{X}) \} \\ &= \max_{\mathbf{X} \in \mathbb{S}^n} \{ \text{Tr}(\mathbf{X}\mathbf{Y}) - f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X})) \} \quad (\text{对称矩阵迹内积}) \\ &\leq \max_{\mathbf{X} \in \mathbb{S}^n} \{ \langle \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X}), \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{Y}) \rangle - f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X})) \} \quad (\text{Fan's 不等式}) \\ &\leq \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{ \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{Y}) \rangle - f(\mathbf{x}) \} \quad (\text{优化变量取值范围变大}) \\ &= f^*(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{Y})) = (f^* \circ \boldsymbol{\lambda})(\mathbf{Y}), \end{aligned}$$

为了证明反方向的不等号, 取 \mathbf{Y} 的一个谱分解

$$\mathbf{Y} = \mathbf{U} \text{diag}(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{Y})) \mathbf{U}^T, \quad \mathbf{U} \in \mathbb{O}^n.$$

从而

$$\begin{aligned} &(f^* \circ \boldsymbol{\lambda})(\mathbf{Y}) \\ &= \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{ \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{Y}) \rangle - f(\mathbf{x}) \} \\ &= \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{ \text{Tr}(\text{diag}(\mathbf{x}) \text{diag}(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{Y}))) - f(\mathbf{x}) \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{ \text{Tr}(\text{diag}(\mathbf{x})\mathbf{U}^T\mathbf{Y}\mathbf{U}) - f(\mathbf{x}^\downarrow) \} \quad (\text{代入上述谱分解, 置换对称函数定义}) \\
&= \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{ \text{Tr}(\text{diag}(\mathbf{x})\mathbf{U}^T\mathbf{Y}\mathbf{U}) - f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{U}\text{diag}(\mathbf{x})\mathbf{U}^T)) \} \\
&= \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{ \text{Tr}(\mathbf{U}\text{diag}(\mathbf{x})\mathbf{U}^T\mathbf{Y}) - f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{U}\text{diag}(\mathbf{x})\mathbf{U}^T)) \} \\
&\leq \max_{\mathbf{Z} \in \mathbb{S}^n} \{ \text{Tr}(\mathbf{Z}\mathbf{Y}) - f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{Z})) \} \quad (\text{优化变量取值范围变大}) \\
&= (f \circ \boldsymbol{\lambda})^*(\mathbf{Y}).
\end{aligned}$$

上面第 4 个等号是因为 $\mathbf{x}^\downarrow = \boldsymbol{\lambda}(\text{diag}(\mathbf{x})) = \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{U}\text{diag}(\mathbf{x})\mathbf{U}^T)$ □

例 7.16. 利用谱共轭公式, 我们可以计算例 7.13 表格中函数的共轭, 如下表所示, 该表还包括了 \mathbb{R}^n 上函数相应结果的引用. 编号与例 7.13 的表格中的编号相同.

#	$g(\mathbf{X})$	$\text{dom}(g)$	$g^*(\mathbf{Y})$	$\text{dom}(g^*)$	Reference
1	$\text{Tr}(\mathbf{X})$	\mathbb{S}^n	$\delta_{\{\mathbf{I}\}}(\mathbf{Y})$	$\{\mathbf{I}\}$	Section 4.4.7
2	$\lambda_{\max}(\mathbf{X})$	\mathbb{S}^n	$\delta_{\Upsilon_n}(\mathbf{Y})$	Υ_n	Example 4.10
3	$\alpha\ \mathbf{X}\ _F (a > 0)$	\mathbb{S}^n	$\delta_{B_{\ \cdot\ _F}[0, \alpha]}(\mathbf{Y})$	$B_{\ \cdot\ _F}[0, \alpha]$	Section 4.4.12
4	$\alpha\ \mathbf{X}\ _F^2 (a > 0)$	\mathbb{S}^n	$\frac{1}{4\alpha}\ \mathbf{Y}\ _F^2$	\mathbb{S}^n	Section 4.4.6
5	$\alpha\ \mathbf{X}\ _{2,2} (a > 0)$	\mathbb{S}^n	$\delta_{B_{\ \cdot\ _{S_1}}[0, \alpha]}(\mathbf{Y})$	$B_{\ \cdot\ _{S_1}}[0, \alpha]$	Section 4.4.6
6	$a\ \mathbf{X}\ _{S_1} (a > 0)$	\mathbb{S}^n	$\delta_{B_{\ \cdot\ _{2,2}}[0, \alpha]}(\mathbf{Y})$	$B_{\ \cdot\ _{2,2}}[0, \alpha]$	Section 4.4.12
7	$-\log \det(\mathbf{X})$	\mathbb{S}_{++}^n	$-n - \log \det(-\mathbf{Y})$	\mathbb{S}_{--}^n	Section 4.4.9
8	$\sum_{i=1}^n \lambda_i(\mathbf{X}) \log(\lambda_i(\mathbf{X}))$	\mathbb{S}_+^n	$\sum_{i=1}^n e^{\lambda_i(\mathbf{Y})-1}$	\mathbb{S}^n	Section 4.4.8
9	$\sum_{i=1}^n \lambda_i(\mathbf{X}) \log(\lambda_i(\mathbf{X}))$	Υ_n	$\log(\sum_{i=1}^n e^{\lambda_i(\mathbf{Y})})$	\mathbb{S}^n	Section 4.4.10

谱共轭公式有几个重要的结果, 其中之一是以下定理, 该定理指出对称谱函数是闭凸的, 当且仅当其关联函数是闭凸的.

定理 7.17 (\mathbb{S}^n 上对称谱函数的闭凸性). 令 $F: \mathbb{S}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 由 $F = f \circ \boldsymbol{\lambda}$ 给出, 其中 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个置换对称的 proper 函数. 则 F 是闭凸的当且仅当 f 是闭凸的.

证明: 由谱共轭公式 (定理 7.15), 有

$$F^* = (f \circ \boldsymbol{\lambda})^* = f^* \circ \boldsymbol{\lambda}.$$

由对称共轭定理 (定理 7.9) 可知 f^* 是置换对称的 (若 f 关于置换矩阵集合 Λ_n 对称, 则 f^* 关于 Λ_n 对称, 即 f^* 是置换对称的). 再次使用谱共轭公式 (定理 7.15) 得到

$$F^{**} = (f^* \circ \boldsymbol{\lambda})^* = f^{**} \circ \boldsymbol{\lambda}. \quad (7.2)$$

设 f 是闭凸的, 根据定理 4.8 ($f = f^{**}$ 对于 proper 闭凸函数成立) 可得 $f^{**} = f$. 由 (7.2) 知

$$F^{**} = f \circ \lambda = F.$$

即 $F = F^{**}$ 是 $f^* \circ \lambda$ 的共轭函数, 由定理 4.3 (共轭函数的闭凸性) 可知 F 是闭凸的.

另一方面, 设 F 是闭凸的. 由 f 是 proper 的, 知 $F = f \circ \lambda$ 也是 proper 的. 对于 proper 闭凸函数 F , 由定理 4.8 可知 $F^{**} = F$, 结合 (7.2), 得到下式

$$f \circ \lambda = F = F^{**} = f^{**} \circ \lambda.$$

从而对任意的 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 有

$$f(\mathbf{x}^\downarrow) = f(\lambda(\text{diag}(\mathbf{x}))) = (f \circ \lambda)(\text{diag}(\mathbf{x})) = (f^{**} \circ \lambda)(\text{diag}(\mathbf{x})) = f^{**}(\lambda(\text{diag}(\mathbf{x}))) = f^{**}(\mathbf{x}^\downarrow),$$

由于 f 和 f^{**} 的置换对称性 (例 7.7), 知 $f(\mathbf{x}^\downarrow) = f(\mathbf{x})$, $f^{**}(\mathbf{x}^\downarrow) = f^{**}(\mathbf{x})$, 故 $f(\mathbf{x}) = f^{**}(\mathbf{x})$ 对任意 $x \in \mathbb{R}^n$ 都成立, 即 $f = f^{**}$. 由定理 4.3, f 作为函数 (f^*) 的共轭是闭凸的. \square

7.2.2 \mathbb{S}^n 上对称谱函数的近端算子

下一定理给出了计算 \mathbb{S}^n 上 proper 闭凸的对称谱函数近端算子的简单公式.

定理 7.18 (\mathbb{S}^n 上谱近端公式 spectral prox formula). 令 $F : \mathbb{S}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 由 $F = f \circ \lambda$ 给出, 其中 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个置换对称的 proper 闭凸函数. 令 $\mathbf{X} \in \mathbb{S}^n$, 并假设 $\mathbf{X} = \mathbf{U} \text{diag}(\lambda(\mathbf{X})) \mathbf{U}^T$, $\mathbf{U} \in \mathbb{O}^n$. 则

$$\text{prox}_F(\mathbf{X}) = \mathbf{U} \text{diag}(\text{prox}_f(\lambda(\mathbf{X}))) \mathbf{U}^T.$$

证明: 注意到

$$\text{prox}_F(\mathbf{X}) = \underset{\mathbf{Z} \in \mathbb{S}^n}{\text{argmin}} \left\{ F(\mathbf{Z}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{Z} - \mathbf{X}\|_F^2 \right\}. \quad (7.3)$$

记 $\mathbf{D} = \text{diag}(\lambda(\mathbf{X}))$, 对任意的 $\mathbf{Z} \in \mathbb{S}^n$,

$$F(\mathbf{Z}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{Z} - \mathbf{X}\|_F^2 = F(\mathbf{Z}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{Z} - \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{U}^T\|_F^2 \stackrel{(*)}{=} F(\mathbf{U}^T \mathbf{Z} \mathbf{U}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{U}^T \mathbf{Z} \mathbf{U} - \mathbf{D}\|_F^2,$$

其中 (*) 是由于 $F(\mathbf{Z}) = f(\lambda(\mathbf{Z})) = f(\lambda(\mathbf{U}^T \mathbf{Z} \mathbf{U})) = F(\mathbf{U}^T \mathbf{Z} \mathbf{U})$ (相似矩阵有相同的特征根). 令 $\mathbf{W} = \mathbf{U}^T \mathbf{Z} \mathbf{U}$, 则 (7.3) 的最优解由下式给出:

$$\mathbf{Z} = \mathbf{U} \mathbf{W}^* \mathbf{U}^T, \quad (7.4)$$

其中 $\mathbf{W}^* \in \mathbb{S}^n$ 是以下问题的唯一最优解

$$\min_{\mathbf{W} \in \mathbb{S}^n} \left\{ G(\mathbf{W}) \equiv F(\mathbf{W}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{W} - \mathbf{D}\|_F^2 \right\}. \quad (7.5)$$

我们将证明 \mathbf{W}^* 是对角的. 对 $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, 取 \mathbf{V}_i 为对角矩阵, 除了 (i, i) 处对角元为 1 外, 其他对角元都为 1. 定义 $\widetilde{\mathbf{W}}_i = \mathbf{V}_i \mathbf{W}^* \mathbf{V}_i^T$, 因 $\mathbf{V}_i \in \mathbb{O}^n$, 成立

$$F(\mathbf{V}_i \mathbf{W}^* \mathbf{V}_i^T) = f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{V}_i \mathbf{W}^* \mathbf{V}_i^T)) = f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{W}^*)) = F(\mathbf{W}^*).$$

故

$$\begin{aligned} G(\widetilde{\mathbf{W}}_i) &= F(\widetilde{\mathbf{W}}_i) + \frac{1}{2} \left\| \widetilde{\mathbf{W}}_i - \mathbf{D} \right\|_F^2 \\ &= F(\mathbf{V}_i \mathbf{W}^* \mathbf{V}_i^T) + \frac{1}{2} \left\| \mathbf{V}_i \mathbf{W}^* \mathbf{V}_i^T - \mathbf{D} \right\|_F^2 \\ &= F(\mathbf{W}^*) + \frac{1}{2} \left\| \mathbf{W}^* - \mathbf{V}_i^T \mathbf{D} \mathbf{V}_i \right\|_F^2 \\ &\stackrel{(**)}{=} F(\mathbf{W}^*) + \frac{1}{2} \left\| \mathbf{W}^* - \mathbf{D} \right\|_F^2 \\ &= G(\mathbf{W}^*) \end{aligned}$$

其中 (**) 是因为 \mathbf{V}_i 和 \mathbf{D} 都是对角矩阵, 因此 $\mathbf{V}_i^T \mathbf{D} \mathbf{V}_i = \mathbf{V}_i^T \mathbf{V}_i \mathbf{D} = \mathbf{D}$. 故 $\widetilde{\mathbf{W}}_i$ 是一个最优解, 由于 F 是 proper 闭凸的, 知问题 (7.5) 的最优解存在唯一, 从而 $\mathbf{W}^* = \mathbf{V}_i \mathbf{W}^* \mathbf{V}_i^T$. 比较两个矩阵的第 i 行, 可得 $W_{ij}^* = 0$ 对任意 $j \neq i$ 成立. 由于该讨论对 $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ 均成立, 可得 \mathbf{W}^* 是一个对角矩阵.

因此 (7.5) 的最优解可表示为 $\mathbf{W}^* = \text{diag}(\mathbf{w}^*)$, 其中 \mathbf{w}^* 是以下问题的最优解

$$\min_{\mathbf{w}} \left\{ F(\text{diag}(\mathbf{w})) + \frac{1}{2} \left\| \text{diag}(\mathbf{w}) - \mathbf{D} \right\|_F^2 \right\}.$$

由于 $F(\text{diag}(\mathbf{w})) = f \circ \boldsymbol{\lambda}(\text{diag}(\mathbf{w})) = f(\mathbf{w}^\downarrow) = f(\mathbf{w})$ 和 $\left\| \text{diag}(\mathbf{w}) - \mathbf{D} \right\|_F^2 = \left\| \text{diag}(\mathbf{w}) - \text{diag} \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X}) \right\|_F^2 = \sum_{i=1}^n (\mathbf{w}_i - \lambda_i(\mathbf{X}))^2 = \left\| \mathbf{w} - \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X}) \right\|_2^2$, 所以 \mathbf{w}^* 由以下给出

$$\mathbf{w}^* = \text{argmin}_{\mathbf{w}} \left\{ f(\mathbf{w}) + \frac{1}{2} \left\| \mathbf{w} - \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X}) \right\|_2^2 \right\} = \text{prox}_f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X})).$$

综上, 由 $\mathbf{W}^* = \text{diag}(\text{prox}_f(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{X})))$ 和 (7.4) 可得想要的结果. \square

例 7.19. 使用定理 7.18(谱分近端公式), 我们可以通过关联函数的近端算子来计算对称谱函数的近端算子. 利用这一观察结果, 我们在下表中展示了多个函数的 prox 运算符表达式. 参数 α 设为正数, 并且 U 假定为满足 $X = U \text{diag}(\boldsymbol{\lambda}(X)) U^T$ 的正交矩阵. 该表还包括了相关函数的结果参考, 这些函数总是在 \mathbb{R}^n 上定义.

$F(X)$	$\text{dom}(F)$	$\text{prox}_F(X)$	Reference
$\alpha \ X\ _F^2$	S^n	$\frac{1}{1+2\alpha} X$	Section 6.2.3
$\alpha \ X\ _F$	S^n	$\left(1 - \frac{\alpha}{\max\{\ X\ _F, \alpha\}}\right) X$	Example 6.19
$\alpha \ X\ _{S_1}$	S^n	$\text{Udiag}(\tau_\alpha(\boldsymbol{\lambda}(X))) U^T$	Example 6.8
$\alpha \ X\ _{2,2}$	S^n	$\text{Udiag}(\boldsymbol{\lambda}(X) - \alpha P_{B_{\ \cdot\ _{2,2}}[0,1]}(\boldsymbol{\lambda}(X)/\alpha)) U^T$	Example 6.48
$-\alpha \log \det(X)$	S_{++}^n	$\text{Udiag}\left(\frac{\lambda_j(X) + \sqrt{\lambda_j(X)^2 + 4\alpha}}{2}\right) U^T$	Example 6.9
$\alpha \lambda_1(X)$	S^n	$\text{Udiag}(\boldsymbol{\lambda}(X) - \alpha P_{\Delta_n}(\boldsymbol{\lambda}(X)/\alpha)) U^T$	Example 6.49
$\alpha \sum_{i=1}^k \lambda_i(X)$	S^n	$X - \alpha \text{Udiag}(P_C(\boldsymbol{\lambda}(X)/\alpha)) U^T, C = H_e, k \cap \text{Box}[0, e]$	Example 6.50

称一个集合 $T \subseteq S^n$ 为 S^n 上的对称谱集, 如果该集合的示性函数 δ_T 是 S^n 上的对称谱函数, 即具有形式 $\delta_T = \delta_C \circ \lambda$, 其中 δ_C 是一个置换对称函数; 集合 $C \subseteq \mathbb{R}^n$ 称为关联集, 在这里我们要求 C 在其元素的置换变换下是封闭, 即要求 C 中元素各分量的取值范围是一样的.

复习: 对称谱函数只跟自变量矩阵 X 的特征值有关, 而与特征值的排列无关, 所以这里的关联函数 δ_C 必须是置换对称的

如果 C 是非空闭凸的, 则 δ_C 也是非空闭凸的, 故由定理 7.18 (谱近端公式) 知

$$\text{prox}_{\delta_T}(X) = U \text{diag}(\text{prox}_{\delta_C}(\lambda(X)))U^T, \quad X \in S^n.$$

因 $\text{prox}_{\delta_T} = P_T$, $\text{prox}_{\delta_C} = P_C$, 则

$$P_T(X) = U \text{diag}(P_C(\lambda(X)))U^T, \quad X \in S^n, \quad (7.6)$$

这里的 U 是一个满足 $X = U \text{diag}(\lambda(X))U^T$ 的正交矩阵.

例 7.20. 使用公式 (7.6), 我们在下表中展示了 S^n 中几个对称光谱集上的正交投影的表达式. 该表还包括了投影到 \mathbb{R}^n 关联子集的正交投影结果的参考. 矩阵 U 假定为满足 $X = U \text{diag}(\lambda(X))U^T$ 的正交矩阵.

set (T)	$P_T(X)$	假设	Reference
S_+^n	$U \text{diag}([\lambda(X)]_+)U^T$	—	Lemma 6.26
$\{X : \ell I \preceq X \preceq uI\}$	$U \text{diag}(v)U^T,$ $v_i = \min\{\max(\lambda_i(X), \ell), u\}$	$\ell \leq u$	Lemma 6.26
$B_{\ \cdot\ _F}[0, r]$	$\frac{r}{\max\{\ X\ _F, r\}}X$	$r > 0$	Lemma 6.26
$\{X : \text{Tr}(X) \leq b\}$	$U \text{diag}(v)U^T,$ $v = \lambda(X) - \frac{[e^T \lambda(X) - b]_+}{n} e$	$b \in \mathbb{R}$	Lemma 6.26
\mathcal{Y}_n	$U \text{diag}(v)U^T,$ $v = [\lambda(X) - \mu^* e]_+,$ 其中 $\mu^* \in \mathbb{R}$ 满足 $e^T [\lambda(X) - \mu^* e]_+ = 1$	—	Corollary 6.29
$B_{\ \cdot\ _{S_1}}[0, \alpha]$	$\begin{cases} X, & \ X\ _{S_1} \leq \alpha, \\ U \text{diag}(\tau_{\beta^*}(\lambda(X)))U^T, & \ X\ _{S_1} > \alpha, \\ \ \tau_{\beta^*}(\lambda(X))\ _1 = \alpha, & \beta^* > 0 \end{cases}$	$\alpha > 0$	Example 6.33

7.3 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的对称谱函数

设 m, n 是两个正整数, 且 $r = \min\{m, n\}$. 我们用 $\sigma : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}^r$ 表示奇异值函数, 该函数为每个矩阵 $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 赋予一个奇异值向量 $\sigma(X) = (\sigma_1(X), \sigma_2(X), \dots, \sigma_r(X))^T$, 其中 $\sigma_1(X) \geq \sigma_2(X) \geq \dots \geq \sigma_r(X) \geq 0$ 为矩阵 $X^T X$ 的特征值. 同时需

引入下述符号. 对于向量 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^r$, 矩阵 $\mathbf{dg}(\mathbf{v})$ 是定义如下的 $m \times n$ 矩阵:

$$\mathbf{dg}(\mathbf{v})_{i,j} = \begin{cases} v_i, & i = j, \\ 0, & \text{其他情况.} \end{cases}$$

运算符 $\mathbf{dg}(\cdot)$ 将 r 维向量映射到广义的 $m \times n$ 对角矩阵. 整数 m 和 n (因此也包括 r) 将在本节中保持固定, 因此在 \mathbf{dg} 运算符中无需指明它们的值. 我们不使用 “diag” 符号, 因为它被保留用于对角方阵.

众所周知 (参见 Golub 和 Van Loan [60, 定理 2.5.2]), 任何矩阵 $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 都有奇异值分解, 且奇异值分解式不唯一 (参见矩阵论定理 4.16). 这意味着存在正交矩阵 $U \in O^m, V \in O^n$, 使得 $X = U\mathbf{dg}(\sigma(X))V^T$.

本节的分析使用了与前一节非常类似的论证; 然而, 为了完整性起见, 我们将提供带有完整证明的结果.

我们首先正式定义在 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的谱函数的概念.

定义 7.21 ($\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的谱函数). 如果存在一个 proper 的函数 $f: \mathbb{R}^r \rightarrow (-\infty, \infty]$, 使得 $g = f \circ \sigma$, 则称函数 $g: \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 为 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的谱函数.

类似于 7.2 节中的符号, 如果 $g = f \circ \sigma$, 我们将 f (实际上并不一定是唯一的) 称为关联函数. 我们主要关注的是那些其关联函数为绝对置换对称的谱函数.

定义 7.22. ($\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的对称谱函数) 如果存在一个 proper 绝对置换对称函数 $f: \mathbb{R}^r \rightarrow (-\infty, \infty]$, 使得 $g = f \circ \sigma$, 则称函数 $g: \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 为 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的对称谱函数.

例 7.23. (Schatten p -范数). 设 $p \in [1, \infty]$. 则 Schatten p -范数定义为

$$\|X\|_{S_p} \equiv \|\sigma(X)\|_p = \left(\sum_{i=1}^r |\sigma_i(X)|^p \right)^{1/p}, \quad X \in \mathbb{R}^{m \times n}.$$

当 $p \in [1, \infty]$ 时, Schatten p -范数 $\|\cdot\|_{S_p}$ 满足范数的非负性, 齐次性和三角不等式的条件, 所以 $\|\cdot\|_{S_p}$ 确实是 $p \in [1, \infty]$ 下的范数. 具体的例子如下:

- 迹范数 (Schatten 1-范数)——也称为核范数:

$$\|X\|_{S_1} = \sum_{i=1}^r |\sigma_i(X)| = \sum_{i=1}^r \sigma_i(X).$$

- 谱范数 (Schatten ∞ -范数):

$$\|X\|_{S_\infty} = \max_{1 \leq i \leq r} |\sigma_i(X)| = \sigma_1(X) = \|X\|_{2,2}.$$

- **Frobenius** 范数 (Schatten 2-范数):

$$\|X\|_{S_2} = \sqrt{\sum_{i=1}^r \sigma_i(X)^2} = \sqrt{\text{Tr}(X^T X)}.$$

Schatten p -范数是 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的对称谱函数, 其关联函数是 \mathbb{R}^r 上的 l_p -范数 $\|x\|_p = (\sum_{i=1}^r |x_i|^p)^{1/p}$, $p \in [1, \infty]$. 因为该关联函数的值不受实向量 x 各分量的排序和正负的影响, 故是一个绝对置换对称函数.

例 7.24. (Ky Fan k -范数).

回顾例 6.51(sum-of-k-largest-absolute-values function) 中的符号: 给定向量 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^r$, $x_{(i)}$ 是 \mathbf{x} 中绝对值第 i 大的分量, 即

$$|x_{(1)}| \geq |x_{(2)}| \geq \cdots \geq |x_{(r)}|.$$

函数 $f_k(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^k |x_{(i)}|$ 是一个绝对置换对称函数. 相应的对称谱函数是所谓的 Ky Fan k -范数, 其定义为:

$$\|X\|_{(k)} = f_k(\sigma(X)) = \sum_{i=1}^k \sigma_i(X).$$

显然, $\|\cdot\|_{(1)} = \sigma_1(X)$ 是谱范数, 也就是 Schatten ∞ -范数; 而范数 $\|\cdot\|_{(r)} = \sum_{i=1}^r \sigma_i(X)$ 是迹范数, 也就是 Schatten 1-范数.

在 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上进行谱函数分析时有一个关键的不等式, 它为两个矩阵的内积提供一个基于奇异值向量内积的上界. 这个不等式归功于冯·诺依曼 (von Neumann), 在某种意义上, 它是 Fan 不等式 (定理 7.14) 在 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 矩阵空间中的对照版本.

定理 7.25. (冯·诺依曼迹不等式 [123]). 对于任意两个矩阵 $X, Y \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 成立不等式:

$$\langle X, Y \rangle \leq \langle \sigma(X), \sigma(Y) \rangle;$$

等号成立, 当且仅当 X, Y 存在同时非递增的奇异值分解, 即存在 $U \in O^m$ 和 $V \in O^n$ 使得

$$X = U \text{dg}(\sigma(X)) V^T, \quad Y = U \text{dg}(\sigma(Y)) V^T.$$

7.3.1 谱共轭公式

冯·诺依曼迹不等式的直接应用是 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的谱共轭公式.

定理 7.26. ($\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的谱共轭公式). 设 $f: E \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个绝对置换对称函数. 那么

$$(f \circ \sigma)^* = f^* \circ \sigma.$$

证明：设 $Y \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 则

$$\begin{aligned} (f \circ \sigma)^*(Y) &= \max_{X \in \mathbb{R}^{m \times n}} \{\text{Tr}(X^T Y) - f(\sigma(X))\} \\ &\leq \max_{X \in \mathbb{R}^{m \times n}} \{\langle \sigma(X), \sigma(Y) \rangle - f(\sigma(X))\} \\ &\leq \max_{x \in \mathbb{R}^r} \{\langle x, \sigma(Y) \rangle - f(x)\} \\ &= (f^* \circ \sigma)(Y), \end{aligned}$$

其中冯·诺依曼迹不等式 (定理 7.25) 用于第一个不等号. 为了证明反向的不等式, 需对 Y 进行奇异值分解:

$$Y = U \text{dg}(\sigma(Y)) V^T, \quad U \in O^m, V \in O^n.$$

则

$$\begin{aligned} (f^* \circ \sigma)(Y) &= \max_{x \in \mathbb{R}^r} \{\langle x, \sigma(Y) \rangle - f(x)\} \\ &= \max_{x \in \mathbb{R}^r} \{\text{Tr}(\text{dg}(x)^T \text{dg}(\sigma(Y))) - f(x)\} \\ &= \max_{x \in \mathbb{R}^r} \{\text{Tr}(\text{dg}(x)^T U^T Y V) - f(|x^\downarrow|)\} \\ &= \max_{x \in \mathbb{R}^r} \{\text{Tr}(\text{dg}(x)^T U^T Y V) - f(\sigma(U \text{dg}(x) V^T))\} \\ &= \max_{x \in \mathbb{R}^r} \{\text{Tr}(V \text{dg}(x)^T U^T Y) - f(\sigma(U \text{dg}(x) V^T))\} \\ &\leq \max_{Z \in \mathbb{R}^{m \times n}} \{\text{Tr}(Z^T Y) - f(\sigma(Z))\} \\ &= (f \circ \sigma)^*(Y). \end{aligned}$$

上面第 4 个等号用了性质 $|x^\downarrow| = \sigma(U \text{dg}(x) V^T)$. 证毕. \square

例 7.27. 使用 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的谱共轭公式, 我们在下表中展示了几个对称谱函数的共轭函数表达式 (均为全定义域). 该表还包括了在 \mathbb{R}^r 上的函数结果的相关参考. 常数 α 设为正数.

$g(X)$	$\text{dom}(g)$	$g^*(Y)$	$\text{dom}(g^*)$	Reference
$\alpha \sigma_1(X)$ ($\alpha > 0$)	$\mathbb{R}^{m \times n}$	$\delta_{B_{\ \cdot\ _{S_1}}[0, \alpha]}(Y)$	$B_{\ \cdot\ _{S_1}}[0, \alpha]$	Section 4.4.12
$\alpha \ X\ _F$ ($\alpha > 0$)	$\mathbb{R}^{m \times n}$	$\delta_{B_{\ \cdot\ _F}[0, \alpha]}(Y)$	$B_{\ \cdot\ _F}[0, \alpha]$	Section 4.4.12
$\alpha \ X\ _F^2$ ($\alpha > 0$)	$\mathbb{R}^{m \times n}$	$\frac{1}{4\alpha} \ Y\ _F^2$	$\mathbb{R}^{m \times n}$	Section 4.4.6
$\alpha \ X\ _{S_1}$ ($\alpha > 0$)	$\mathbb{R}^{m \times n}$	$\delta_{B_{\ \cdot\ _{S_\infty}}[0, \alpha]}(Y)$	$B_{\ \cdot\ _{S_\infty}}[0, \alpha]$	Section 4.4.12

谱共轭公式 (定理 7.26) 可以用来证明, 当且仅当关联函数是闭凸的情况下, $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的对称谱函数也是闭凸的.

定理 7.28. ($\mathbb{R}^{m \times n}$ 上对称谱函数的闭凸性).

设 $F : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 由 $F = f \circ \sigma$ 给出, 其中 $f : \mathbb{R}^r \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个绝对置换对称的 proper 函数. 则 F 是闭凸的当且仅当其关联函数 f 是闭凸的.

证明: 由谱共轭公式 (定理 7.26), 有

$$F^* = (f \circ \sigma)^* = f^* \circ \sigma.$$

由对称共轭定理 (定理 7.9) 可知 f^* 是绝对置换对称的 (绝对置换对称函数关于广义置换矩阵集合 Λ_n^G 对称, 而 $\Lambda_n^G \subseteq \mathbb{O}^n$, 所以 f^* 关于 Λ_n^G 对称, 即 f^* 是绝对置换对称的). 再次使用谱共轭公式 (定理 7.26) 得到

$$F^{**} = (f^* \circ \sigma)^* = f^{**} \circ \sigma. \quad (7.7)$$

如果 f 是闭凸的, 由定理 4.8 ($f = f^{**}$ for proper closed convex func) 可得 $f^{**} = f$. 从而, 由 (7.7) 知

$$F^{**} = f \circ \sigma = F.$$

因此, $F = F^{**}$ 是另一个函数 (F^*) 的共轭函数, 由定理 4.3 (convexity and closedness of conjugate functions) 可知 F 是闭凸的.

反之, 如果 F 是闭凸的, 由 f 是 proper 的, 知 $F = f \circ \sigma$ 也是 proper 的. 对于 proper 闭凸函数 F , 由定理 4.8 可知 $F^{**} = F$, 结合 (7.7) 得

$$f \circ \sigma = F = F^{**} = f^{**} \circ \sigma.$$

因此, 对任意的 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 下式成立

$$f(|\mathbf{x}|^\downarrow) = f(\sigma(\text{dg}(\mathbf{x}))) = (f \circ \sigma)(\text{dg}(\mathbf{x})) = (f^{**} \circ \sigma)(\text{ag}(\mathbf{x})) = f^{**}(\sigma(\text{dg}(\mathbf{x}))) = f^{**}(|\mathbf{x}|^\downarrow).$$

由 f 和 f^{**} 的绝对置换对称性 (例 7.8) 知 $f(|\mathbf{x}|^\downarrow) = f(\mathbf{x})$, $f^{**}(|\mathbf{x}|^\downarrow) = f^{**}(\mathbf{x})$, 从而知 $f(\mathbf{x}) = f^{**}(\mathbf{x})$ 对任意 $x \in \mathbb{R}^n$ 都成立, 即 $f = f^{**}$. 另外, 由定理 4.3, f 作为另一个函数 (f^*) 的共轭是闭凸的. 证毕. \square

7.3.2 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上对称谱函数的近端算子

下述公式用于计算 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上 proper 闭凸的对称谱函数的近端算子, 该算子可由自变量矩阵的奇异值分解和关联函数的近端算子表示.

定理 7.29. ($\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的谱近端公式). 设 $F : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 由 $F = f \circ \sigma$ 给出, 其中 $f : \mathbb{R}^r \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个绝对置换对称的 proper 闭凸函数. 设 $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 并

且假设

$$X = U \text{dg}(\sigma(X)) V^T, \quad U \in \mathbb{O}^m, V \in \mathbb{O}^n.$$

则

$$\text{prox}_F(X) = U \text{dg}(\text{prox}_f(\sigma(X))) V^T.$$

证明：注意到

$$\text{prox}_F(\mathbf{X}) = \operatorname{argmin}_{\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{m \times n}} \left\{ F(\mathbf{Z}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{Z} - \mathbf{X}\|_F^2 \right\}. \quad (7.8)$$

记 $\mathbf{D} = \text{dg}(\sigma(\mathbf{X}))$, 对任意的 $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 成立

$$F(\mathbf{Z}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{Z} - \mathbf{X}\|_F^2 = F(\mathbf{Z}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{Z} - \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}^T\|_F^2 \stackrel{(*)}{=} F(\mathbf{U}^T \mathbf{Z} \mathbf{V}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{U}^T \mathbf{Z} \mathbf{V} - \mathbf{D}\|_F^2,$$

其中 (*) 是由于 $F(\mathbf{Z}) = f(\sigma(\mathbf{Z})) = f(\sigma(\mathbf{U}^T \mathbf{Z} \mathbf{V})) = F(\mathbf{U}^T \mathbf{Z} \mathbf{V})$ (一矩阵乘以正交矩阵不会改变该矩阵的奇异值). 令 $\mathbf{W} = \mathbf{U}^T \mathbf{Z} \mathbf{V}$, 则 (7.8) 的最优解由下式给出:

$$\mathbf{Z} = \mathbf{U} \mathbf{W}^* \mathbf{V}^T, \quad (7.9)$$

其中 $\mathbf{W}^* \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 是以下问题的唯一最优解

$$\min_{\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{m \times n}} \left\{ G(\mathbf{W}) \equiv F(\mathbf{W}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{W} - \mathbf{D}\|_F^2 \right\}. \quad (7.10)$$

我们将证明 \mathbf{W}^* 是广义对角矩阵 (所有非对角元素均为 0). 令 $i \in \{1, 2, \dots, r\}$, 取 $\Sigma_i^{(1)} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 和 $\Sigma_i^{(2)} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 分别为 $m \times m$ 和 $n \times n$ 的对角矩阵, 除了 (i, i) 处对角元为 1 外, 其他的对角元都为 1. 定义 $\widetilde{\mathbf{W}}_i = \Sigma_i^{(1)} \mathbf{W}^* \Sigma_i^{(2)}$. 因 $\Sigma_i^{(1)} \in \mathbb{O}^m$, $\Sigma_i^{(2)} \in \mathbb{O}^n$, 成立

$$F(\Sigma_i^{(1)} \mathbf{W}^* \Sigma_i^{(2)}) = f(\sigma(\Sigma_i^{(1)} \mathbf{W}^* \Sigma_i^{(2)})) = f(\sigma(\mathbf{W}^*)) = F(\mathbf{W}^*).$$

故

$$\begin{aligned} G(\widetilde{\mathbf{W}}_i) &= F(\widetilde{\mathbf{W}}_i) + \frac{1}{2} \|\widetilde{\mathbf{W}}_i - \mathbf{D}\|_F^2 \\ &= F(\Sigma_i^{(1)} \mathbf{W}^* \Sigma_i^{(2)}) + \frac{1}{2} \|\Sigma_i^{(1)} \mathbf{W}^* \Sigma_i^{(2)} - \mathbf{D}\|_F^2 \\ &= F(\mathbf{W}^*) + \frac{1}{2} \|\mathbf{W}^* - \Sigma_i^{(1)} \mathbf{D} \Sigma_i^{(2)}\|_F^2 \\ &\stackrel{(**)}{=} F(\mathbf{W}^*) + \frac{1}{2} \|\mathbf{W}^* - \mathbf{D}\|_F^2 \\ &= G(\mathbf{W}^*), \end{aligned}$$

其中 (**) 是因为 $\Sigma_i^{(1)}$, $\Sigma_i^{(2)}$ 和 \mathbf{D} 都是 (广义) 对角矩阵, 成立 $\Sigma_i^{(1)} \mathbf{D} \Sigma_i^{(2)} = \mathbf{D}$. 由问题 (7.10) 最优解的唯一性知 $\mathbf{W}^* = \Sigma_i^{(1)} \mathbf{W}^* \Sigma_i^{(2)}$, 比较两个矩阵的第 i 行, 可得 $W_{ij}^* = 0$ 对任意 $j \neq i$ 均成立. 由于该讨论对 $i \in \{1, 2, \dots, r\}$ 均成立, 可得 \mathbf{W}^* 是一个广义

对角矩阵.

因而问题 (7.10) 的最优解可表示为 $\mathbf{W}^* = \text{dg}(\mathbf{w}^*)$, 其中 \mathbf{w}^* 是以下问题的最优解

$$\min_{\mathbf{w}} \left\{ F(\text{dg}(\mathbf{w})) + \frac{1}{2} \|\text{dg}(\mathbf{w}) - \mathbf{D}\|_F^2 \right\}.$$

由于 $F(\text{dg}(\mathbf{w})) = (f \circ \sigma)(\text{dg}(\mathbf{w})) = f(|\mathbf{w}|^\downarrow) = f(\mathbf{w})$ 和 $\|\text{dg}(\mathbf{w}) - \mathbf{D}\|_F^2 = \|\text{dg}(\mathbf{w}) - \text{dg}(\sigma(\mathbf{X}))\|_F^2 = \sum_{i=1}^n (\mathbf{w}_i - \sigma_i(X))^2 = \|\mathbf{w} - \sigma(\mathbf{X})\|_2^2$, 所以 \mathbf{w}^* 由以下给出

$$\mathbf{w}^* = \operatorname{argmin}_{\mathbf{w}} \left\{ f(\mathbf{w}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{w} - \sigma(\mathbf{X})\|_2^2 \right\} = \operatorname{prox}_f(\sigma(\mathbf{X})).$$

综上, 由 $\mathbf{W}^* = \text{dg}(\operatorname{prox}_f(\sigma(\mathbf{X})))$ 和 (7.9), (7.8) 可得结论. \square

例 7.30. 使用 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的谱近端公式 (定理 7.29), 我们可以通过关联函数的近端算子来计算对称谱函数的近端算子. 利用这一观察结果, 我们在下表中展示了多个函数的近端算子表达式. 参数 α 设为正数, 且正交矩阵 $U \in O^m, V \in O^n$ 满足 $X = U \text{dg}(\sigma(X)) V^T$. 该表还包括了相关函数结果的参考, 这些函数总是在 \mathbb{R}^r 上定义.

$F(X)$	$\operatorname{prox}_F(X)$	Reference
$\alpha \ X\ _F^2$	$\frac{1}{1+2\alpha} X$	Section 6.2.3
$\alpha \ X\ _F$	$\left(1 - \frac{\alpha}{\max\{\ X\ _F, \alpha\}}\right) X$	Example 6.19
$\alpha \ X\ _{S_1}$	$U \text{dg}(\mathcal{T}_\alpha(\sigma(X))) V^T$	Example 6.8
$\alpha \ X\ _{S_\infty}$	$X - \alpha U \text{dg}(P_{B_{\ \cdot\ _1}[0,1]}(\sigma(X)/\alpha)) V^T$	Example 6.48
$\alpha \ X\ _{\langle k \rangle}$	$X - \alpha U \text{dg}(P_C(\sigma(X)/\alpha)) V^T,$ $C = B_{\ \cdot\ _1[0,k]} \cap B_{\ \cdot\ _\infty[0,1]}$	Example 6.51

注意: $\|X\|_{S_\infty}$ 可以写成 $\sigma_1(X)$ 或 $\|X\|_{2,2}$.

称一个集合 $T \subseteq \mathbb{R}^{m \times n}$ 为 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的**对称谱集**, 如果该集合的示性函数 δ_T 是 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的对称谱函数, 即具有形式 $\delta_T = \delta_C \circ \sigma$, 其中 δ_C 是一个绝对置换对称函数, 集合 $C \subseteq \mathbb{R}^r$ 是**关联集**.

如果 C 是非空闭凸集, 则 δ_C 也是非空闭凸的, 由定理 7.29 (谱分解近端公式) 可知

$$\operatorname{prox}_{\delta_T}(X) = U \text{dg}(\operatorname{prox}_{\delta_C}(\sigma(X))) V^T, \quad X \in \mathbb{R}^{m \times n},$$

因 $\operatorname{prox}_{\delta_T} = P_T, \operatorname{prox}_{\delta_C} = P_C$, 则有

$$P_T(X) = U \text{dg}(P_C(\sigma(X))) V^T, \quad X \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad (7.11)$$

其中正交矩阵 $U \in O^m, V \in O^n$ 满足 $X = U \text{dg}(\sigma(X)) V^T$.

例 7.31. 使用公式 (7.11), 我们在下表中展示了 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上几个对称光谱集的正交投影表达式. 该表还包括了 \mathbb{R}^r 上关联子集上的正交投影结果的参考. 矩阵 $U \in O^m, V \in O^n$ 假定满足 $X = U \text{dg}(\sigma(X)) V^T$.

集合 T	$P_T(X)$	假设	参考文献
$B_{\ \cdot\ _{S_\infty}}[0, \alpha]$	$\text{Udg}(\mathbf{v})V^T, \quad v_i = \min\{\sigma_i(X), \alpha\}$	$\alpha > 0$	Lemma 6.26
$B_{\ \cdot\ _F}[0, r]$	$\frac{r}{\max\{\ X\ _F, r\}} X$	$r > 0$	Lemma 6.26
$B_{\ \cdot\ _{S_1}}[0, \alpha]$	$\begin{cases} X, & \ X\ _{S_1} \leq \alpha \\ \text{Udg}(\mathcal{T}_{\beta^*}(\sigma(X)))V^T, & \ X\ _{S_1} > \alpha, \\ & \ \mathcal{T}_{\beta^*}(\sigma(X))\ _1 = \alpha, \beta^* > 0 \end{cases}$	$\alpha > 0$	Example 6.33

第 8 章 原始与对偶投影次梯度方法

底层空间: 在本章中, \mathbb{E} 是一个欧几里得空间, 意味着一个有限维的空间, 带有内积 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 和欧几里得范数 $\|\cdot\| = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle}$.

8.1 从梯度下降到次梯度下降

8.1.1 下降方向?

考虑无约束问题

$$(P) \quad \min\{f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathbb{E}\}.$$

如果 f 在整个 \mathbb{E} 上可微, 那么用于求解问题 (P) 的一种众所周知的方法是梯度法, 也称为最速下降法, 其形式为

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - t_k \nabla f(\mathbf{x}^k), \quad (8.1)$$

其中 t_k 是一个适当选择的步长. 梯度方向的一个关键性质是它是一个下降方向, 首先回顾此概念.

定义 8.1. (下降方向). 设 $f : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个广义实值函数, 并且 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$. 若有向量 $\mathbf{0} \neq \mathbf{d} \in \mathbb{E}$, 使得方向导数 $f'(\mathbf{x}; \mathbf{d})$ 存在且为负值, 则称 \mathbf{d} 是 \mathbf{x} 处函数 f 的一个下降方向.

下降方向的一个重要性质可以直接从其定义得出, 即沿这些方向采取足够小的步长会导致函数值的下降.

引理 8.2. (下降方向的下降性质 [10, 引理 4.2]). 设 $f : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个广义实值函数. 令 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$, 并假设 $\mathbf{0} \neq \mathbf{d} \in \mathbb{E}$ 是 \mathbf{x} 处的一个下降方向. 那么存在 $\epsilon > 0$ 使得 $\mathbf{x} + t\mathbf{d} \in \text{dom}(f)$ 且

$$f(\mathbf{x} + t\mathbf{d}) < f(\mathbf{x})$$

对于任何 $t \in (0, \epsilon]$ 成立.

证明: 假设点 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$, 且 $\mathbf{d} \in \mathbb{E}$ 是在 \mathbf{x} 处的下降方向, 这意味着在点 \mathbf{x} 处的方向 \mathbf{d} 满足:

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{f(\mathbf{x} + t\mathbf{d}) - f(\mathbf{x})}{t} = f'(\mathbf{x}; \mathbf{d}) < 0.$$

选择一个负数 $c < 0$, 使得

$$f'(\mathbf{x}; \mathbf{d}) < c < 0.$$

成立. 因此, 对于足够小的 δ , $\forall t \in (0, \delta]$,

$$\frac{f(\mathbf{x} + t\mathbf{d}) - f(\mathbf{x})}{t} < c,$$

等价于

$$f(\mathbf{x} + t\mathbf{d}) - f(\mathbf{x}) < ct.$$

因为 $c < 0$, 故

$$f(\mathbf{x} + t\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}) + ct < f(\mathbf{x}).$$

即当 $t \in (0, \delta]$ 时, 函数值 $f(\mathbf{x} + t\mathbf{d})$ 确实小于 $f(\mathbf{x})$. 因此取 $\epsilon = \delta$, 从而得到

$$f(\mathbf{x} + t\mathbf{d}) < f(\mathbf{x}),$$

对于任何 $t \in (0, \epsilon]$ 都成立. 这就证明存在 $\epsilon > 0$, 使得在该区间内, 函数值沿下降方向 \mathbf{d} 下降. \square

回到梯度法, 我们注意到 f 在 \mathbf{x}^k 处沿 $-\nabla f(\mathbf{x}^k)$ 方向的方向导数是负的, 只要 $\nabla f(\mathbf{x}^k) \neq 0$:

$$f'(\mathbf{x}^k; -\nabla f(\mathbf{x}^k)) = \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), -\nabla f(\mathbf{x}^k) \rangle = -\|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|^2 < 0, \quad (8.2)$$

其中第一个等号由定理 3.29 可得.

我们已经证明 $-\nabla f(\mathbf{x}^k)$ 是 \mathbf{x}^k 处的下降方向, 根据引理 8.2, 这意味着存在 $\epsilon > 0$, 使得 $f(\mathbf{x}^k - t\nabla f(\mathbf{x}^k)) < f(\mathbf{x}^k)$ 对任何 $t \in (0, \epsilon]$ 成立. 特别地, 这意味着 t_k 总是可以以一种保证从一次迭代到下一次迭代函数值减少的方式选择. 例如, 一种保证下降的步长策略是精确线搜索策略, 其中 t_k 选择为

$$t_k \in \arg \min_{t \geq 0} f(\mathbf{x}^k - t\nabla f(\mathbf{x}^k)).$$

如果 f 不可微, 那么方案 (8.1) 是不明确的. 在我们的凸性假设下, 自然的推广到非光滑情况是用次梯度代替梯度 (假设它存在):

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - t_k \mathbf{g}^k, \quad \mathbf{g}^k \in \partial f(\mathbf{x}^k), \quad (8.3)$$

其中我们假设从 $\partial f(\mathbf{x}^k)$ 中选择的次梯度是任意的. 方案 (8.3) 称为次梯度法. 梯度法和次梯度法的一个重要区别是, 负次梯度的方向不一定是下降方向. 这意味着 t_k

不能保证以一种方式选择,使得方案 (8.3) 中的函数值有下降特性.

例 8.3. (非下降次梯度方向) 考虑函数 $f: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, 由 $f(x_1, x_2) = |x_1| + 2|x_2|$ 给出. 则

$$\partial f(1, 0) = \{(1, x) : |x| \leq 2\}.$$

特别地, $(1, 2) \in \partial f(1, 0)$. 然而, 方向 $-(1, 2)$ 不是一个下降方向. 为了说明这一点, 注意对于任何 $t > 0$, 有

$$g(t) \equiv f((1, 0) - t(1, 2)) = f(1 - t, -2t) = \begin{cases} 1 + 3t, & t \in (0, 1], \\ 5t - 1, & t \geq 1. \end{cases} \quad (8.4)$$

特别地,

$$f'(1, 0; -(1, 2)) = g'_+(0) = 3 > 0,$$

表明方向 $-(1, 2)$ 不是一个下降方向. 还值得注意的是, 由式 (8.4) 可知,

$$f((1, 0) - t(1, 2)) \geq 1 = f(1, 0) \quad \text{对任何 } t > 0,$$

这实际上表明, 在射线 $\{(1, 0) - t(1, 2) : t > 0\}$ 上没有点的函数值比 $(1, 0)$ 的函数值更小. \square

8.1.2 Wolfe 的例子

为了更好地理解非光滑性的影响, 我们回顾一个著名的 Wolfe 例子. 该例子涉及应用于非光滑凸函数的梯度法, 步长通过精确线搜索选择. 该函数在方法生成的所有迭代向量处都是可微的, 特别是, 方法选择的所有方向都是下降方向, 并且函数值序列严格减少. 然而, 虽然似乎非光滑性被“绕过”, 但事实并非如此. 该方法生成的序列收敛到一个非最优点.

设 $\gamma > 1$, 考虑函数 $f: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, 由

$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} \sqrt{x_1^2 + \gamma x_2^2}, & |x_2| \leq x_1, \\ \frac{x_1 + \gamma|x_2|}{\sqrt{1+\gamma}}, & \text{其他情况.} \end{cases} \quad (8.5)$$

我们首先在下面的引理 8.5 中展示, 函数 f 是闭凸的, 并给出其在 $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$ 中任意点的次微分集. 为此, 我们将证明, f 实际上是一个闭凸集的支撑函数. 引理 8.5 的证明使用了以下简单的技术引理, 其显然的证明被省略.

引理 8.4. 考虑问题

$$(P) \quad \max\{g(\mathbf{y}) : f_1(\mathbf{y}) \leq 0, f_2(\mathbf{y}) \leq 0\},$$

其中 $g: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 是凹的, $f_1, f_2: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 是凸的. 假设问题 $\max\{g(y) : f_1(y) \leq 0\}$ 有一个唯一解 \tilde{y} . 设 Y^* 是问题 (P) 的最优解集. 那么, 下面两种情况之一成立:

(i) $f_2(\tilde{y}) \leq 0$, 此时 $Y^* = \{\tilde{y}\}$.

(ii) $f_2(\tilde{y}) > 0$, 此时 $Y^* = \arg \max\{g(y) : f_1(y) \leq 0, f_2(y) = 0\}$.

证明: (i): 假设 $f_2(\tilde{y}) \leq 0$. 因为 \tilde{y} 是问题 $\max\{g(y) : f_1(y) \leq 0\}$ 的唯一解, 且 \tilde{y} 也满足约束 $f_2(y) \leq 0$, 因此 \tilde{y} 是问题 (P) 的可行解. 由于 \tilde{y} 是唯一解, 因此在可行集内没有其他解能使 $g(y)$ 取得更大值. 因此, 最优解集 Y^* 只能是 $\{\tilde{y}\}$.

(ii): 如果 $f_2(\tilde{y}) > 0$, 则 \tilde{y} 不满足约束 $f_2(y) \leq 0$, 因此 \tilde{y} 不是问题 (P) 的可行解. 在这种情况下, 考虑一个新的优化问题

$$\max\{g(y) : f_1(y) \leq 0, f_2(y) = 0\}.$$

由于 $f_1(y)$ 是凸函数, $f_2(y) = 0$ 将形成一个新的边界条件, 并且凹函数 $g(y)$ 在该边界条件下的最优解可以通过在新的可行集上优化获得. 若取 $\tilde{y} \in P, \tilde{y} \notin P, y_1 \notin P, y_1 \in P$, 由 $g(y)$ 的凹性, 有

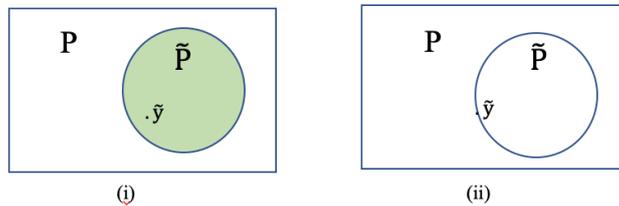
$$\begin{aligned} g(\theta\tilde{y} + (1-\theta)y_1) &\geq \theta g(\theta\tilde{y}) + (1-\theta)g(y_1) \\ &\geq \theta g(y_1) + (1-\theta)g(y_1) \\ &= g(y_1) \end{aligned}$$

可知, 在边界上所取的点是最优点. 因此, 问题 (P) 的最优解集 y^* 为

$$y^* = \arg \max\{g(y) : f_1(y) \leq 0, f_2(y) = 0\}.$$

如下图示来表示可行解:

□



可行解及最优解图示.

引理 8.5. 设 f 由式 (8.5) 给出. 则

(a) $f = \sigma_C$, 其中

$$C = \left\{ (y_1, y_2) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R} : y_1^2 + \frac{y_2^2}{\gamma} \leq 1, y_1 \geq \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}} \right\};$$

(b) f 是闭的且凸的;

(c)

$$\partial f(x_1, x_2) = \begin{cases} C, & x_1 = x_2 = 0, \\ \left(\frac{(x_1, \gamma x_2)}{\sqrt{x_1^2 + \gamma^2 x_2^2}}, \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}} \right), & |x_2| \leq x_1, x_1 \neq 0, \\ \left(\frac{1}{\sqrt{1+\gamma}}, \frac{\gamma \operatorname{sgn}(x_2)}{\sqrt{1+\gamma}} \right), & |x_2| > x_1, x_2 \neq 0, \\ \left\{ \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}} \right\} \times \left[-\frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma}}, \frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma}} \right], & x_2 = 0, x_1 < 0. \end{cases}$$

证明: 根据支撑函数的定义,

$$\sigma_C(x_1, x_2) = \max_{y_1, y_2} \left\{ x_1 y_1 + x_2 y_2 : y_1^2 + \frac{y_2^2}{\gamma} \leq 1, y_1 \geq \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}} \right\}. \quad (8.6)$$

注意, 如果 $(x_1, x_2) = (0, 0)$, 则 $\sigma_C(0, 0) = 0$, 并且

$$\arg \max_{y_1, y_2} \left\{ x_1 y_1 + x_2 y_2 : y_1^2 + \frac{y_2^2}{\gamma} \leq 1, y_1 \geq \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}} \right\} = C.$$

假设 $(x_1, x_2) \neq (0, 0)$. 令 $g(y_1, y_2) = x_1 y_1 + x_2 y_2$, $f_1(y_1, y_2) = y_1^2 + \frac{y_2^2}{\gamma} - 1$ 和 $f_2(y_1, y_2) = -y_1 + \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}}$, 问题 (8.6) 变为

$$\max_{y_1, y_2} \{g(y_1, y_2) : f_1(y_1, y_2) \leq 0, f_2(y_1, y_2) \leq 0\}.$$

由 g 是凹函数, f_1, f_2 是凸函数, 故引理 8.4 中的假设都成立, 并且问题

$$\max_{y_1, y_2} \{g(y_1, y_2) : f_1(y_1, y_2) \leq 0\}$$

的最优解是唯一的, 并且等于 $(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2) = \frac{(x_1, \gamma x_2)}{\sqrt{x_1^2 + \gamma x_2^2}}$. 因此, 根据引理 8.4, 有两种情况:

定义拉格朗日函数 $L(y_1, y_2, \lambda_1)$, 其中 λ_1 是拉格朗日乘子, 对应于约束 f_1 ,

$$L(y_1, y_2, \lambda_1) = x_1 y_1 + x_2 y_2 - \lambda_1 \left(y_1^2 + \frac{y_2^2}{\gamma} - 1 \right).$$

对 y_1 和 y_2 求偏导数:

$$\frac{\partial L}{\partial y_1} = x_1 - 2\lambda_1 y_1 = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial y_2} = x_2 - \frac{2\lambda_1 y_2}{\gamma} = 0,$$

可以得到

$$y_1 = \frac{x_1}{2\lambda_1}, \quad y_2 = \frac{\gamma x_2}{2\lambda_1},$$

进而, 将其代入 $y_1^2 + \frac{y_2^2}{\gamma} = 1$, 通过求解 λ_1 , 再代回即可求得最优解 $(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2) = \frac{(x_1, \gamma x_2)}{\sqrt{x_1^2 + \gamma x_2^2}}$.

情况 I: $f_2(\tilde{y}_1, \gamma \tilde{y}_2) \leq 0$, 这意味着 $\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} \geq \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}}$. 不难看出该不等式等价于

$|x_2| \leq x_1$. 在这种情况下, $(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2) = \frac{(x_1, \gamma x_2)}{\sqrt{x_1^2 + \gamma x_2^2}}$ 是问题 (8.6) 的唯一最优解, 其对应的函数值为 $\sigma_C(x_1, x_2) = \sqrt{x_1^2 + \gamma x_2^2}$.

”不难看出”: $\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + \gamma x_2^2}} \geq \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}}$, 有 $x_1 > 0$, 且 $\frac{x_1^2}{x_1^2 + \gamma x_2^2} \geq \frac{1}{1+\gamma}$, 即 $x_1^2(1+\gamma) \geq x_1^2 + \gamma x_2^2$, 展开并化简有, $x_1^2 + \gamma x_1^2 \geq x_1^2 + \gamma x_2^2$, 故 $|x_2| \leq x_1$.

情况 II: $f_2(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2) > 0$, 这等同于 $x_1 < |x_2|$. 在这种情况下, 根据引理 8.4, 问题 (8.6) 的所有最优解都满足 $y_1 = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}}$, 问题变为

$$\max_{y_2} \left\{ \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}} x_1 + x_2 y_2 : y_2^2 \leq \frac{\gamma^2}{1+\gamma} \right\},$$

若 $x_2 \neq 0$, 该问题的解集为 $\left\{ \frac{\gamma \operatorname{sgn}(x_2)}{\sqrt{1+\gamma}} \right\}$; 若 $x_2 = 0$, 该问题的解集为 $\left[-\frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma}}, \frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma}} \right]$. 在这两种情况下, $\sigma_C(x_1, x_2) = \frac{x_1 + \gamma |x_2|}{\sqrt{1+\gamma}}$.

综上所述, 我们已证明

$$\sigma_C(x_1, x_2) = \begin{cases} \sqrt{x_1^2 + \gamma x_2^2}, & |x_2| \leq x_1, \\ \frac{x_1 + \gamma |x_2|}{\sqrt{1+\gamma}}, & \text{否则,} \end{cases}$$

从而建立了部分 (a), 即 $f = \sigma_C$. 因此, f 作为支撑函数是闭且凸的函数, 故 (b) 成立.

为证明部分 (c), 我们首先有

$$\arg \max_{y_1, y_2} \{x_1 y_1 + x_2 y_2 : (y_1, y_2) \in C\} = \begin{cases} C, & x_1 = x_2 = 0, \\ \frac{(x_1, \gamma x_2)}{\sqrt{x_1^2 + \gamma x_2^2}}, & |x_2| \leq x_1, x_1 \neq 0, \\ \left(\frac{1}{\sqrt{1+\gamma}}, \frac{\gamma \operatorname{sgn}(x_2)}{\sqrt{1+\gamma}} \right), & |x_2| > x_1, x_2 \neq 0, \\ \left\{ \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}} \right\} \times \left[-\frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma}}, \frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma}} \right], & x_2 = 0, x_1 < 0. \end{cases}$$

结合共轭次梯度定理 (推论 4.21) 和例子 4.9, 以及 C 的闭性和凸性, 可以推出

$$\begin{aligned} \partial f(x_1, x_2) &= \partial \sigma_C(x_1, x_2) \\ &= \arg \max_{y_1, y_2} \{x_1 y_1 + x_2 y_2 - \sigma_C^*(y_1, y_2)\} \\ &= \arg \max_{y_1, y_2} \{x_1 y_1 + x_2 y_2 - \delta_C(y_1, y_2)\} \\ &= \arg \max_{y_1, y_2} \{x_1 y_1 + x_2 y_2 : (y_1, y_2) \in C\} \end{aligned}$$

$$= \begin{cases} C, & x_1 = x_2 = 0, \\ \frac{(x_1, x_2)}{\sqrt{x_1^2 + \gamma x_2^2}}, & |x_2| \leq x_1, x_1 \neq 0, \\ \left(\frac{1}{\sqrt{1+\gamma}}, \frac{\gamma \operatorname{sgn}(x_2)}{\sqrt{1+\gamma}} \right), & |x_2| > x_1, x_2 \neq 0, \\ \left\{ \frac{1}{\sqrt{1+\gamma}} \right\} \times \left[-\frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma}}, \frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma}} \right], & x_2 = 0, x_1 < 0. \end{cases}$$

□

注意, 引理 8.5 (c) 和定理 3.33 的直接结果是, f 只有在 x_1 轴的非正部分不可微.

接下来, 我们将证明使用精确线搜索的梯度法, 即使生成的所有点都是 f 可微的点, 仍会收敛到非最优点 $(0, 0)$.

引理 8.6. 令 $\{(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})\}_{k \geq 0}$ 为梯度法生成的序列, 使用精确线搜索, 并从初始点 $(x_1^0, x_2^0) = (\gamma, 1)$ 开始, 其中 $\gamma > 1$. 则对于任意 $k \geq 0$,

- (a) f 在 $(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})$ 处可微;
- (b) $|x_2^{(k)}| \leq x_1^{(k)}$ 且 $x_1^{(k)} \neq 0$;
- (c) $(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) = \left(\gamma \left(\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^k, \left(-\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^k \right)$.

证明: 我们只需证明部分 (c), 因为部分 (b) 直接来自 (c) 中给出的 $(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})$ 的表达式, 而部分 (a) 则是引理 8.5 (c) 的结果. 我们将通过归纳法证明部分 (c). 对于 $k = 0$, 该命题显然成立, 因为初始点的选择正确. 假设对于 k , 命题成立, 即

$$(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) = \left(\gamma \left(\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^k, \left(-\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^k \right).$$

我们将证明对于 $k+1$ 也成立, 即

$$(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}) = (\beta_k, \gamma_k), \quad (8.7)$$

其中

$$\beta_k = \gamma \left(\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^{k+1}, \quad \gamma_k = \left(-\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^{k+1}.$$

由于 $|x_2^{(k)}| \leq x_1^{(k)}$ 且 $x_1^{(k)} \neq 0$, 根据引理 8.5(c), f 在 $(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})$ 处可微, 且

$$\nabla f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) = \frac{1}{\sqrt{(x_1^{(k)})^2 + \gamma(x_2^{(k)})^2}} (x_1^{(k)}, \gamma x_2^{(k)}).$$

以上公式中重要的是 $\nabla f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})$ 可以写成

$$\nabla f(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) = \alpha_k (x_1^{(k)}, \gamma x_2^{(k)}) \quad (8.8)$$

对于某个正的常数 α_k . 为了证明公式 (8.7) 的有效性, 我们将定义 $g(t) \equiv f((x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) - t(x_1^{(k)}, \gamma x_2^{(k)}))$, 并证明以下两个陈述:

$$(A) (\beta_k, \gamma_k) = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) - \frac{2}{\gamma+1}(x_1^{(k)}, \gamma x_2^{(k)}).$$

$$(B) g' \left(\frac{2}{\gamma+1} \right) = 0.$$

因为 g 是严格凸的, 故 (A) 和 (B) 足以证明 (8.7). 通过以下计算可以证明 (A):

$$x_1^{(k)} - \frac{2}{\gamma+1}x_1^{(k)} = \frac{\gamma-1}{\gamma+1}x_1^{(k)} = \frac{\gamma-1}{\gamma+1}\gamma \left(\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^k = \gamma \left(\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^{k+1} = \beta_k,$$

$$x_2^{(k)} - \frac{2\gamma}{\gamma+1}x_2^{(k)} = \frac{-\gamma+1}{\gamma+1}x_2^{(k)} = \frac{-\gamma+1}{\gamma+1} \left(-\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^k = \left(-\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^{k+1} = \gamma_k$$

为证明 (B), 注意

$$\begin{aligned} g(t) &= f \left((x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) - t(x_1^{(k)}, \gamma x_2^{(k)}) \right) = f \left((1-t)x_1^{(k)}, (1-t)\gamma x_2^{(k)} \right) \\ &= \sqrt{(1-t)^2(x_1^{(k)})^2 + \gamma(1-t)^2(x_2^{(k)})^2} \end{aligned}$$

因此,

$$g'(t) = \frac{(t-1)(x_1^{(k)})^2 + \gamma^2(\gamma t-1)(x_2^{(k)})^2}{\sqrt{(1-t)^2(x_1^{(k)})^2 + \gamma(1-t)^2(x_2^{(k)})^2}}. \quad (8.9)$$

为证明 $g' \left(\frac{2}{\gamma+1} \right) = 0$, 只需要证明最后表达式的分子在 $t = \frac{2}{\gamma+1}$ 时为零. 实际上,

$$\begin{aligned} & \left(\frac{2}{\gamma+1} - 1 \right) (x_1^{(k)})^2 + \gamma^2 \left(\gamma \cdot \frac{2}{\gamma+1} - 1 \right) (x_2^{(k)})^2 \\ &= \left(-\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right) \gamma^2 \left(\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^{2k} + \gamma^2 \left(\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right) \left(\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right)^{2k} \\ &= 0. \end{aligned}$$

□

显然, 根据引理 8.6, 使用精确线搜索和初始点 $(\gamma, 1)$ 的梯度法生成的序列收敛到 $(0, 0)$, 但这并不是 f 的最小值, 因为 f 在下方没有界限 (取 $x_2 = 0$ 并且 $x_1 \rightarrow -\infty$). 实际上, $(-1, 0)$ 是点 $(0, 0)$ 处 f 的一个下降方向. 函数的等高线以及使用精确线搜索的梯度法生成的迭代过程在图 8.1 中描述.

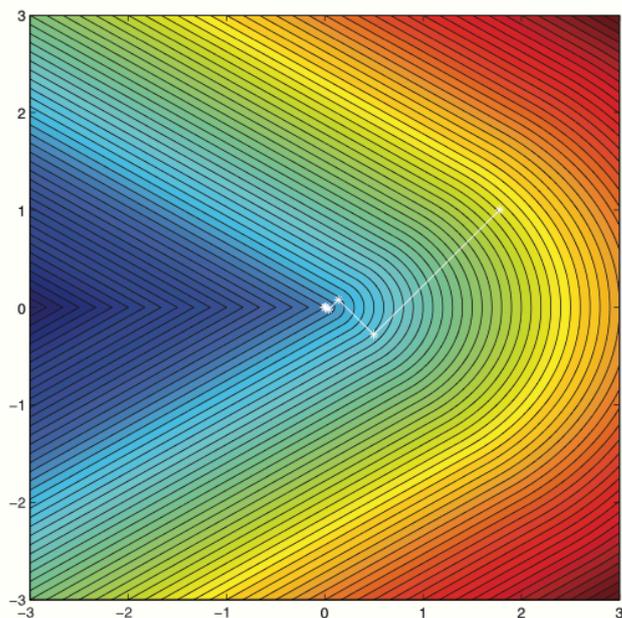


图 8.1 Wolfe 函数的等高线, $\gamma = \frac{16}{9}$, 以及使用精确线搜索的梯度法的迭代.

8.2 投影次梯度下降法

本节主要围绕问题 (8.10) 展开讨论.

$$\min\{f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in C\}, \quad (8.10)$$

此外, 约定假设 8.7 在本节中始终成立:

假设 8.7. (A) $f : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是 Proper 的闭凸函数.

(B) $C \subseteq \mathbb{E}$ 且 C 是非空的闭凸集.

(C) $C \subseteq \text{int}(\text{dom}(f))$.

(D) 式 (8.10) 的最优解集非空, 记为 X^* . 问题的最优值记为 f_{opt} .

注 8.8. (f 的次可微性及 X^* 的闭性) 由于 f 为凸函数且 $C \subseteq \text{int}(\text{dom}(f))$, 则可由定理 3.14 证得 f 在 C 上的次可微性. 又因 f 是闭函数, 可得

$$X^* = C \cap \text{Lev}(f, f_{\text{opt}}),$$

是闭集. 进而, 对于任意的 $\mathbf{x} \notin X^*$, \mathbf{x} 到 X^* 的距离 $d_{X^*}(\mathbf{x})$ 为正.

从此处开始, 记 f 在 \mathbf{x} 处的一个次梯度为 $f'(\mathbf{x})$, 即 $f'(\mathbf{x}) \in \partial f(\mathbf{x})$. 由此, 可将 f' 视为一个从 C 到 \mathbb{E}^* 的函数. 对于给定的 \mathbf{x} , $f'(\mathbf{x})$ 的选取可以是任意的, 但具有唯一性, 即当 $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ 时, 必有 $f'(\mathbf{x}) = f'(\mathbf{y})$.

通过阅读前文可知, 使用次梯度的优化算法不一定是下降算法, 且不需要基于

线搜索过程来选择步长. 下文所介绍的投影梯度法正好具备这两个特点.

8.2.1 方法

每次迭代的投影次梯度法由以下步骤组成: 选择次梯度的负方向, 并在此基础上进行正交投影到集合 C .

投影次梯度法

初始化: 任取 $\mathbf{x}^0 \in C$.

一般步骤: 对于任何 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

- (a) 选择一个步长 $t_k > 0$, 并选择一个次梯度 $f'(\mathbf{x}^k) \in \partial f(\mathbf{x}^k)$;
- (b) 设 $\mathbf{x}^{k+1} = P_C(\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k))$.

在迭代过程中, 投影次梯度法得到的求解序列记为 $\{\mathbf{x}^k\}_{k>0}$, 对应的目标函数列记为 $\{f(\mathbf{x}^k)\}_{k>0}$. 在前面已经讨论了目标函数列的非单调性. 此外, 定义最优函数值序列为

$$f_{\text{best}}^k \equiv \min_{n=0,1,\dots,k} f(\mathbf{x}^n). \quad (8.11)$$

显然, 序列 $\{f_{\text{best}}^k\}_{k \geq 0}$ 是非增的.

注 8.9. (次梯度投影法的停止准则) 投影次梯度方法的完整算法还必须包含一个停止准则. 在本书中我们不会讨论停止准则, 而是专注于算法的收敛问题.

注 8.10. (零梯度) 考虑一种少见的情况: 对于 k , 有 $f'(\mathbf{x}^k) = \mathbf{0}$. 此时, 由 Fermat 最优性条件 (参见定理 3.63), \mathbf{x}^k 是 f 在 \mathbb{E} 上的一个极小值点. 又因 $\mathbf{x}^k \in C \subseteq \mathbb{E}$, 故 \mathbf{x}^k 亦为 f 在 C 上的极小值点. 在这种情况下, 有

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{k+1} &= P_C(\mathbf{x}^k - t_k \cdot \mathbf{0}) \stackrel{(*)}{=} P_C(\mathbf{x}^k) = \mathbf{x}^k, \\ \mathbf{x}^{k+2} &= P_C(\mathbf{x}^{k+1} - t_{k+1} \cdot \mathbf{0}) = P_C(\mathbf{x}^{k+1}) = \mathbf{x}^{k+1}, \\ &\dots \end{aligned}$$

其中 (*) 处由 $\mathbf{x}^k \in C$ 推得. 进而, $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}_k$ 对任意的 $n \geq k$ 均成立.

引理 8.11. (次梯度投影的基本公式) 在假设 8.7 成立的前提下, 令 $\{\mathbf{x}^k\}$ 为次梯度投影法的求解序列, 则对于任意 $\mathbf{x}^* \in X^*$ 以及 $k > 0$, 有

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k(f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}}) + t_k^2 \|f'(\mathbf{x}^k)\|^2. \quad (8.12)$$

证明:

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 = \|P_C(\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k)) - P_C(\mathbf{x}^*)\|^2.$$

由正交投影的非扩张性 (参见定理 6.42) 得

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 &\leq \|\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k) - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &= \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* \rangle + t_k^2 \|f'(\mathbf{x}^k)\|^2 \\ &\stackrel{(**)}{\leq} \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k [f(\mathbf{x}^k) - f_{opt}] + t_k^2 \|f'(\mathbf{x}^k)\|^2. \end{aligned}$$

其中 (**) 处用到了次梯度不等式.

8.2.2 Polyak 步长规则的收敛性分析

为了确保 $\{f(\mathbf{x})\}^k$ 的收敛性, 需要在假设 8.7 的基础上, 额外引入假设 8.12.

假设 8.12. 存在一个正常数 L_f , 使得 $\|\mathbf{g}\| \leq L_f$ 对任意的 $\mathbf{g} \in \partial f(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in C$ 均成立.

由于 $C \subseteq \text{int}(\text{dom}(f))$, 则由定理 3.61 可得 f 在 C 上 Lipschitz 连续, 即

$$|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})| \leq L_f \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|, \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in C.$$

此外, 由定理 3.16 可知, 当 $C \subseteq \text{int}(\text{dom}(f))$ 为非空的紧集时, f 在 C 上的全体次微分集紧致, 此时假设 8.12 成立.

在选择步长时, 一个很自然的想法是取

$$t_k = \frac{f(\mathbf{x}^k) - f_{opt}}{\|f'(\mathbf{x}^k)\|^2}.$$

注意到 (8.12) 的右侧是关于 t_k 的二次函数, 如此选择 t_k 可以使该二次项取到最小, 使得 \mathbf{x}^{k+1} 与 \mathbf{x}^* 的距离有最小的上界. 注意到当 $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 时, $f(\mathbf{x}^k) = f_{opt}$, $t_k = 0/0$ (“0/0” 在本书中是未被定义的), 但此时 \mathbf{x}^k 恰好是函数 f 的一个极小值点. 为了确保取得的 t_k 始终有效, 可将 t_k 的计算公式修改为 (8.13):

$$t_k = \begin{cases} \frac{f(\mathbf{x}^k) - f_{opt}}{\|f'(\mathbf{x}^k)\|^2}, & (f'(\mathbf{x}^k) \neq \mathbf{0}), \\ 1, & (f'(\mathbf{x}^k) = \mathbf{0}), \end{cases} \quad (8.13)$$

(8.13) 又称为 **Polyak 步长规则**.

定理 8.13. (基于 Polyak 步长规则的次梯度投影法的收敛性) 在假设 8.7 与假设 8.12 成立的条件下, 令 $\{\mathbf{x}^k\}$ 表示次梯度投影法的求解序列, 且 t_k 采用 Polyak 步长规则更新, 则

(A) 对任意的 $k \geq 0, \mathbf{x}^* \in X^*$, 有 $\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2$;

(B) 当 $k \rightarrow \infty$ 时, $f(\mathbf{x}^k) \rightarrow f_{opt}$;

(C) 对任意 $k \geq 0$, 有 $f_{best}^k - f_{opt} \leq \frac{L_f d_{X^*}(\mathbf{x}^0)}{\sqrt{k+1}}$.

证明: 对于命题 (A), 取非负整数 n 以及 $\mathbf{x}^* \in X^*$. 由引理 8.11 可得

$$\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_n(f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) + t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2, \quad (8.14)$$

当 $f'(\mathbf{x}) \neq 0$ 时, 按照 Polyak 规则代入 $t_n = \frac{f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}}{\|f'(\mathbf{x}^n)\|^2}$, 可得

$$\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{(f(\mathbf{x}^n) - f_{opt})^2}{\|f'(\mathbf{x}^n)\|^2}, \quad (8.14a)$$

又根据假设 8.12, 将 $\|f'(\mathbf{x}^n)\| \leq L_f$ 代入上述不等式 (8.14a) 可得

$$\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{(f(\mathbf{x}^n) - f_{opt})^2}{L_f^2}, \quad (8.15)$$

即

$$\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2.$$

当 $f'(\mathbf{x}^n) = 0$ 时, 由式 (8.14) 可直接推得 $\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2$. 综上所述证得 (A) 成立.

对于命题 (B), 首先将式 (8.15) 变为

$$\frac{(f(\mathbf{x}^n) - f_{opt})^2}{L_f^2} \leq \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2, \quad (8.16a)$$

对 $n = 0, 1, \dots, k$, 将式 (8.16a) 两侧同时求和, 得到

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^k \frac{(f(\mathbf{x}^n) - f_{opt})^2}{L_f^2} &\leq \sum_{n=0}^k \left(\|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \right) \\ &= \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 - \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2, \end{aligned}$$

因此, 有

$$\sum_{n=0}^k (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt})^2 \leq L_f^2 \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2.$$

由于上式对任意的 $\mathbf{x}^* \in X^*$ 均成立, 则可进一步得到

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^k (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt})^2 &\leq L_f^2 \min_{\mathbf{x}^* \in X^*} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &= L_f^2 \|\mathbf{x}^0 - P_{X^*}(\mathbf{x}^0)\|^2 \\ &= L_f^2 d_{X^*}^2(\mathbf{x}^0). \end{aligned} \quad (8.17)$$

对任意的正数 k 成立. 上述正项级数收敛, 充分说明当 $k \rightarrow \infty$ 时, $f(\mathbf{x}^k) - f_{opt} \rightarrow 0$, 故 (B) 得证. 对于命题 (C), 注意到 $f(\mathbf{x}^n) \geq f_{best}^k$ 对任意的 $n = 0, 1, \dots, k$ 成立, 故有 $f(\mathbf{x}^n) - f_{opt} \geq f_{best}^k - f_{opt} \geq 0$. 对此式两侧求和, 可得

$$\sum_{n=0}^k (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt})^2 \geq \sum_{n=0}^k (f_{best}^k - f_{opt})^2,$$

结合式 (8.16), 可得

$$L_f^2 d_{X^*}^2(\mathbf{x}^0) \geq \sum_{n=0}^k (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt})^2 \geq \sum_{n=0}^k (f_{best}^k - f_{opt})^2 = (k+1)(f_{best}^k - f_{opt})^2,$$

即

$$f_{best}^k - f_{opt} \leq \frac{L_f d_{X^*}(\mathbf{x}^0)}{\sqrt{k+1}},$$

命题 (C) 证毕.

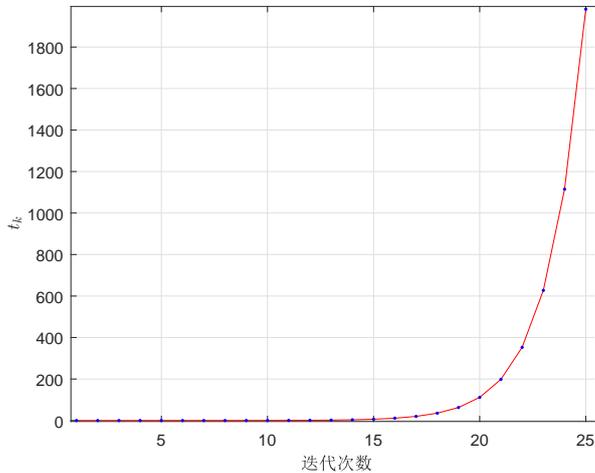
需要注意的是, Polyak 步长规则并不保证 t_k 的收敛性. 一个例子是取 $f(x_1, x_2) = 4x_1^4 + 4x_2^4$ 与 $C : \{(x_1, x_2) : x_1^2 + x_2^2 \leq 10\}$. 在这个例子中假设 8.7 与假设 8.12 都是满足的. 按照 Polyak 步长规则, 有

$$t_k = \frac{(x_1^k)^4 + (x_2^k)^4 - 0}{\|4((x_1^k)^3, (x_2^k)^3)\|^2},$$

以及

$$(x_1^{k+1}, x_2^{k+1}) = (x_1^k, x_2^k) - t_k \frac{[(x_1^k)^4 + (x_2^k)^4]^{1/2}}{\|4((x_1^k)^3, (x_2^k)^3)\|^2}.$$

若在迭代过程中, 得到了 $(x_1^k, x_2^k) = (0, \epsilon)$, 则 $t_k \rightarrow \infty$ 如果 $\epsilon \rightarrow 0$. 不妨将 (x_1^0, x_2^0) 设置为 $(6, 5)$. 在执行 25 次迭代后, 可以得到 t_k 的变化曲线:



值得注意的是, 虽然 t_k 可能是发散的, 但可以证明 $\frac{(f(\mathbf{x}^n) - f_{opt})^2}{\|f'(\mathbf{x}^n)\|^2}$ 的有界性. 这是因为

$$0 \geq f(\mathbf{x}^*) - f(\mathbf{x}^n) \geq \langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^n \rangle,$$

因此有

$$\begin{aligned} |f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}| &\leq |\langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{x}^n - \mathbf{x}^* \rangle| \\ &\leq \|f'(\mathbf{x}^n)\| \cdot \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|, \end{aligned}$$

即

$$\frac{(f(\mathbf{x}^n) - f_{opt})^2}{\|f'(\mathbf{x}^n)\|^2} \leq \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2.$$

注 8.14. 定理 8.13 中, 所有的 L_f 都可以被替换为 $\max_{n=0,1,\dots,k} \|f'(\mathbf{x}^n)\|$.

定理 8.13 中的 (A) 又称为 **Fejér 单调性**.

定义 8.15. (**Fejér 单调性**). 令点列 $\{\mathbf{x}^k\} \in \mathbb{E}$, S 为 \mathbb{E} 的子集. 若对于任意的 $k \geq 0$ 以及 $\mathbf{y} \in S$, 有

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}^k - \mathbf{y}\|,$$

则称点列 $\{\mathbf{x}^k\}$ 对点集 S **Fejér 单调**.

若一个点列 $\{\mathbf{x}^k\}$ 对 S Fejér 单调, 则表明 $\|\mathbf{x}^k - \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{y}\|$ 对全体 $k \geq 0$ 以及任意的 $\mathbf{y} \in S$ 成立, 进而可知 Fejér 单调列是有界的. 接下来将证明包含其极限点的 Fejér 单调列是收敛的.

定理 8.16. (**Fejér 单调列的收敛性**). 设 $\{\mathbf{x}^k\} \subseteq \mathbb{E}$ 是一点列, S, D 是两个点集且 D 是 $\{\mathbf{x}^k\}$ 的所有极限点构成的集合, $D \subseteq S$. 如果 $\{\mathbf{x}^k\}$ 关于 S Fejér 单调, 那么 $\{\mathbf{x}^k\}$ 收敛于 D 中一点.

证明: 显然, $\{\mathbf{x}^k\}$ 是有界的, 因此其必含有极限点 (参见 Bolzano - Weierstrass 定理). 令 $\tilde{\mathbf{x}}$ 为 $\{\mathbf{x}^k\}$ 的一个极限点, 那么有子列 $\{\mathbf{x}^{k_j}\} \rightarrow \tilde{\mathbf{x}}$. 又因 $\tilde{\mathbf{x}} \in D \subseteq S$, 且有

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \tilde{\mathbf{x}}\| \leq \|\mathbf{x}^k - \tilde{\mathbf{x}}\|,$$

可知数列 $\{\|\mathbf{x}^k - \tilde{\mathbf{x}}\|\}$ 单调不增并有下界 0. 又因为当 $j \rightarrow \infty$ 时, $\|\mathbf{x}^{k_j} - \tilde{\mathbf{x}}\| \rightarrow 0$, 则数列 $\{\|\mathbf{x}^k - \tilde{\mathbf{x}}\|\} \rightarrow 0$, 随即证得当 $k \rightarrow \infty$ 时, $\mathbf{x}^k \rightarrow \tilde{\mathbf{x}}$.

利用定理 8.16 可以证明基于 Polyak 步长规则的次梯度投影算法的收敛性 (定理 8.17), 接下来将对其进行详细讨论.

定理 8.17. (**基于 Polyak 步长规则的次梯度投影算法的收敛性**). 在假设 8.7 以及假设 8.12 成立的条件下, 设 $\{\mathbf{x}^k\}$ 是基于 Polyak 步长规则次梯度投影算法的求解序

列, 则 $\{\mathbf{x}^k\}$ 收敛于 X^* 中一点.

证明: 由定理 8.13(A), $\{\mathbf{x}^k\}$ 关于 X^* Fejér 单调. 为了利用 8.16 证明 $\{\mathbf{x}^k\}$ 收敛于 X^* 中一点, 只需证明 X^* 中包含有 $\{\mathbf{x}^k\}$ 的极限点. 设 $\tilde{\mathbf{x}}$ 是点列的极限点, 则存在子列 $\{\mathbf{x}^{k_j}\}$ 收敛于 $\tilde{\mathbf{x}}$. 由 C 是闭集可得 $\tilde{\mathbf{x}} \in C$. 由定理 8.13(b),

$$f(\mathbf{x}^{k_j}) \rightarrow f_{opt} \text{ as } j \rightarrow \infty. \quad (8.18)$$

又因为 $\tilde{\mathbf{x}} \in C \subseteq \text{int}(\text{dom}(f))$, 则由定理 2.21 可知 f 在 $\tilde{\mathbf{x}}$ 处连续. 结合 8.17 可得 $f(\tilde{\mathbf{x}}) = f_{opt}$, 即 $\tilde{\mathbf{x}} \in X^*$.

定理 8.13(C) 刻画了 $\{f_{\text{best}}^k\}$ 的收敛速率的上界. 特别地, 该定理表明 f_{best}^k 与 f_{opt} 的距离上界是与 $\frac{1}{\sqrt{k+1}}$ 正比例相关的, 其中 k 表示第 k 次迭代. 我们可以用 $O(1/\sqrt{k})$ 来表征其收敛速率. 符号“ O ”的原意为“渐进”. 我们还可以将收敛率结果写成复杂度结果, 为此, 我们将首先引入 ϵ -最优解的概念. 在对算法的复杂度分析时, 通常要考察的问题是得到一个 ϵ -最优解需要多少次迭代? 换句话说, 使得式 (8.18)

$$f_{\text{best}}^k - f_{opt} \leq \epsilon \quad (8.19)$$

成立的迭代次数 k 应为多少? 利用定理 8.13(C) 不难证明使得 8.18 满足的充分条件为式 (8.19):

$$\frac{L_f d_{X^*}(\mathbf{x}^0)}{\sqrt{k+1}} \leq \epsilon, \quad (8.20)$$

亦即

$$k \geq \frac{L_f^2 d_{X^*}^2(\mathbf{x}^0)}{\epsilon^2} - 1.$$

因此, 若需要保障解的 ϵ -最优性, 其迭代次数应当是与 $1/\epsilon^2$ 同阶的. 前文中关于计算复杂度的讨论结果将在定理 8.18 中呈现.

定理 8.18. (基于 Polyak 步长规则的次梯度投影算法的复杂度). 在假设 8.7 与假设 8.12 成立的条件下, 令 $\{\mathbf{x}^k\}$ 为基于 Polyak 步长规则的次梯度投影算法的迭代序列, 那么对于任意的非负整数 k , 当 k 满足

$$k \geq \frac{L_f^2 d_{X^*}^2(\mathbf{x}^0)}{\epsilon^2} - 1$$

时, 有

$$f_{\text{best}}^k - f_{opt} \leq \epsilon$$

成立.

例 8.19. 使用基于 Polyak 步长规则的次梯度投影法解决下列优化问题:

$$\min_{x_1, x_2} \{f(x_1, x_2) = |x_1 + 2x_2| + |3x_1 + 4x_2|\},$$

注意在本章中, 所有的问题都是在欧式空间中讨论的.

显然, $C = \mathbb{R}^2$, 本例的唯一解是 $(x_1, x_2) = (0, 0)$, $f_{opt} = 0$, 因此本例满足假设 8.7. 注意到 $f(x_1, x_2)$ 可被表示为 $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{Ax}\|_1$, 其中 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$, $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$. 对于任意的 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$, 有

$$\partial f(\mathbf{x}) = \mathbf{A}^\top \partial h(\mathbf{Ax}),$$

其中 $h(\mathbf{w}) = \|\mathbf{w}\|_1$. 由例 3.41, 对于任意的 $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^2$, 有

$$\partial h(\mathbf{w}) = \{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^2 : z_i = \text{sgn}(w_i), i \in I_{\neq}(\mathbf{w}), |z_j| \leq 1, j \in I_0(\mathbf{w})\},$$

其中

$$I_0(\mathbf{w}) = \{i : w_i = 0\}, I_{\neq}(\mathbf{w}) = \{i : w_i \neq 0\}.$$

由此可得,

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} \text{sgn}(x_1 + 2x_2) \\ \text{sgn}(3x_1 + 4x_2) \end{bmatrix} \in \partial h(\mathbf{Ax}).$$

此外, 如果 $\eta \in \partial h(\mathbf{Ax})$, 那么 $\eta \in [-1, 1] \times [-1, 1]$, 易得 $\|\eta\|_2 \leq \sqrt{2}$. 因此, 对于任意的次梯度 $\mathbf{g} \in \partial f(\mathbf{x})$, 可写为 $\mathbf{g} = \mathbf{A}^\top \eta$, $\eta \in \partial h(\mathbf{Ax})$, 且满足

$$\|\mathbf{g}\|_2 = \|\mathbf{A}^\top \eta\|_2 \leq \|\mathbf{A}^\top\|_{2,2} \|\eta\|_2 \leq \|\mathbf{A}^\top\|_{2,2} \cdot \sqrt{2} \approx 7.7827.$$

故本例同时满足假设 8.12, 且 L_f 可取 7.7827. 根据函数次梯度以及 Polyak 规则, 可求得 \mathbf{x} 的一个更新公式为

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_1^{k+1} \\ x_2^{k+1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_1^k \\ x_2^k \end{pmatrix} - \frac{|x_1^k + 2x_2^k| + |3x_1^k + 4x_2^k| - f_{opt}}{\|\mathbf{v}(x_1^k, x_2^k)\|_2^2} \mathbf{v}(x_1^k, x_2^k) \\ &= \begin{pmatrix} x_1^k \\ x_2^k \end{pmatrix} - \frac{|x_1^k + 2x_2^k| + |3x_1^k + 4x_2^k|}{\|\mathbf{v}(x_1^k, x_2^k)\|_2^2} \mathbf{v}(x_1^k, x_2^k). \end{aligned}$$

其中,

$$\mathbf{v}(x_1, x_2) = \mathbf{A}^\top \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \text{sgn}(x_1 + 2x_2) + 3\text{sgn}(3x_1 + 4x_2) \\ 2\text{sgn}(x_1 + 2x_2) + 4\text{sgn}(3x_1 + 4x_2) \end{bmatrix} \in \partial f(x_1, x_2).$$

本例中使用的符号函数 $\text{sgn}(s)$ 的定义参考 1.7.2, 即当 $s \geq 0$ 时 $\text{sgn}(s) = 1$, 而当 $s < 0$ 时 $\text{sgn}(s) = -1$. 注意到 \mathbf{v} 只可能为 4 个值, 分别为

$$\mathbf{u}_1 = \begin{bmatrix} -4 \\ -6 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_3 = \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_4 = \begin{bmatrix} 4 \\ 6 \end{bmatrix}$$

对应了 4 个更新方向. 此外, 根据注释 8.14, L_f 可进一步缩小为 $\max_i \{\|\mathbf{u}_i\|_2\} = 7.2111$. 将初始点设置为 $(1, 2)^\top$ 并执行 100 次迭代, $f(\mathbf{x}^k)$ 的变化过程以及 $\{\mathbf{x}^k\}$ 在平面上的轨迹如图 8.2 所示:

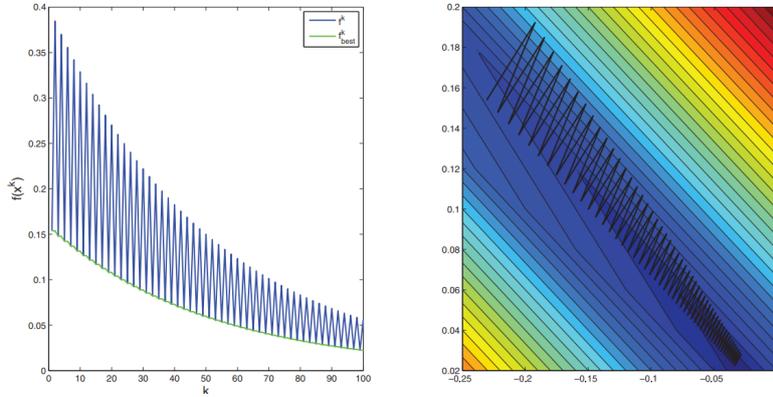


图 8.2 例 8.19 的求解结果

8.2.3 凸可行性问题

设 $S_1, S_2, \dots, S_m \in \mathbb{E}$ 且均为闭凸集, 并设

$$S \equiv \bigcap_{i=1}^m S_i \neq \emptyset, \quad (8.21)$$

则寻找 $\mathbf{x} \in \bigcap_{i=1}^m S_i$ 的问题称为凸可行性问题. 这个问题还可以被描述为式 (8.21):

$$\min_{\mathbf{x}} \left\{ f(\mathbf{x}) \equiv \max_{i=1,2,\dots,m} d_{S_i}(\mathbf{x}) \right\}. \quad (8.22)$$

显然, (8.21) 的最优解为 $f_{opt} = 0$, 最优解集为 S . 此外, f 的另一大性质是其为 1-Lipschitz 连续的, 引理 8.20 将给出详细的推导.

引理 8.20. 令 S_1, S_2, \dots, S_m 为非凸集, 则式 (8.21) 中的 f 是 1-Lipschitz 连续的.

证明: 取 $i \in \{1, 2, \dots, m\}$, 并令 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{E}$. 则有

$$\begin{aligned} d_{S_i}(\mathbf{x}) &= \|\mathbf{x} - P_{S_i}(\mathbf{x})\| \\ &\leq \|\mathbf{x} - P_{S_i}(\mathbf{y})\| \\ &\leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| + \|\mathbf{y} - P_{S_i}(\mathbf{y})\| \\ &= \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| + d_{S_i}(\mathbf{y}), \end{aligned}$$

进一步可得

$$d_{S_i}(\mathbf{x}) - d_{S_i}(\mathbf{y}) \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|, \quad (8.23)$$

亦有

$$d_{S_i}(\mathbf{y}) - d_{S_i}(\mathbf{x}) \leq \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|.$$

综上所述可得

$$|d_{S_i}(\mathbf{x}) - d_{S_i}(\mathbf{y})| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|. \quad (8.24)$$

最后, 对于 $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{E}$,

$$|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})| = \left| \max_{i=1,2,\dots,m} d_{S_i}(\mathbf{x}) - \max_{i=1,2,\dots,m} d_{S_i}(\mathbf{y}) \right| = \left| \|\mathbf{v}_x\|_\infty - \|\mathbf{v}_y\|_\infty \right|, \quad (8.25)$$

其中 $\mathbf{v}_x = d_{S_i}(\mathbf{x})_{i=1}^m \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{v}_y = d_{S_i}(\mathbf{y})_{i=1}^m \in \mathbb{R}^m$. 由 (8.24) 出发可进一步推得

$$\begin{aligned} |f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})| &= \left| \|\mathbf{v}_x\|_\infty - \|\mathbf{v}_y\|_\infty \right| \\ &\leq \|\mathbf{v}_x - \mathbf{v}_y\|_\infty \\ &= \max_{i=1,2,\dots,m} |d_{S_i}(\mathbf{x}) - d_{S_i}(\mathbf{y})| \\ &\leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|, \end{aligned}$$

其中, 第一个不等关系由三角不等式推出, 第二个不等关系由式 (8.23) 得来.

下文将直接给出使用基于 Polyak 规则的次梯度投影法求解问题 (8.23) 的过程. 首先, 给定一个初始点 $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{E}$. 如果第 k 次迭代的点 $\mathbf{x}^k \in S$, 那么可取 $f'(\mathbf{x}^k) = 0$, 从而 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k$. 否则, 依据 Polyak 规则选取合适的步长并结合相应的次梯度更新 \mathbf{x}^k . 由定理 3.50, 为了计算 \mathbf{x}^k 处的次梯度, 可采用下列步骤:

(i). 计算 $i_k \in \arg \max_{i=1,2,\dots,m} \{d_{S_i}(\mathbf{x}^k)\}$;

(ii). 取 $\mathbf{g}^k \in \partial d_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k)$.

例 3.49 表明, 可以取 $\mathbf{g}^k = \frac{\mathbf{x}^k - P_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k)}{d_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k)} \in \partial d_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k)$ 作为次梯度. 在这种情况下, 更新公式可以被表示为

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{k+1} &= \mathbf{x}^k - \frac{d_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k) - f_{opt}}{\|\mathbf{g}^k\|^2} \cdot \frac{\mathbf{x}^k - P_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k)}{d_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k)} \\ &= \mathbf{x}^k - d_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k) \cdot \frac{\mathbf{x}^k - P_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k)}{d_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k)} \\ &= P_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k). \end{aligned}$$

上述计算中, 第二个等号使用了 $f_{opt} = 0$ 以及 $\|\mathbf{g}^k\| = 1$ 这两个事实. 实际上, 前文所讨论的正是贪婪投影算法. 其特点是每次都将 \mathbf{x}^k 在 S_i 上的投影点中距离 \mathbf{x}^k 最近的一个取出并作为 \mathbf{x}^{k+1} . 贪婪投影算法可总结如下:

贪婪投影算法

输入: m 个非空闭凸集 S_1, S_2, \dots, S_m .

初始化: 取 $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{E}$.

一般步骤: 对于任何 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行:

$$\mathbf{x}^{k+1} = P_{S_{i_k}}(\mathbf{x}^k),$$

其中 $i_k \in \arg \max_{i=1,2,\dots,m} \{d_{S_i}(\mathbf{x}^k)\}$.

利用定理 8.13 以及 8.17 可证得贪婪投影算法的收敛性, 详见定理 8.21.

定理 8.21. (贪婪投影算法的收敛性) 设 $S_1, S_2, \dots, S_m \in \mathbb{E}$ 为非空的闭凸集, 且满足 $S \equiv \bigcap_{i=1}^m S_i \neq \emptyset$. $\{\mathbf{x}^k\}$ 为贪婪投影算法的求解序列, 则有

(a). 对于任意的 $k \geq 0$,

$$\min_{n=0,1,\dots,k} \left\{ \max_{i=1,2,\dots,m} d(\mathbf{x}^n, S_i) \right\} \leq \frac{d_S(\mathbf{x}^0)}{\sqrt{k+1}}; \quad (8.26)$$

(b). 存在 $\mathbf{x}^* \in S$ 使得当 $k \rightarrow \infty$ 时, $\mathbf{x}^k \rightarrow \mathbf{x}^*$.

证明: 对于 (a), 令 $f(\mathbf{x}) \equiv \max_{i=1,2,\dots,m} d(\mathbf{x}, S_i)$, 并令 $C = \mathbb{E}$. 显然, 该问题的极小值为 0, 最优解集 $X^* = S$. 在此处, f 是 proper 且闭凸的函数. $C = \mathbb{E}$ 也是非空的闭凸集, 且有 $C \subset \text{int}(\text{dom}(f)) = \mathbb{E}$, 故此处假设 8.7 全部满足. 此外, 前文已讨论过此处 L_f 可取 1, 因此假设 8.12 亦得到了满足. 由于贪婪投影法本就是基于 Polyak 规则次梯度投影法的一个特例, 故由定理 8.13(C) 证得式 (8.25) 成立, 并由定理 8.17 证得 (b) 成立.

当 $m = 2$ 时, 贪婪投影法相当于交替投影算法, 在下列方框中给出:

交替投影算法

输入: 非空闭凸集 S_1, S_2 .

初始化: 任取 $\mathbf{x}^0 \in S_2$.

一般步骤: 对于任何 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行:

$$\mathbf{x}^{k+1} = P_{S_2}(P_{S_1}(\mathbf{x}^k)).$$

事实上, 交替投影算法可作为贪婪投影算法的特例去理解. 注意到任意的 $\mathbf{x}^k \in S_2$. 不妨设 $k = 2r$, 则交替投影算法中 $\mathbf{x}^{k+1} = P_{S_2}(P_{S_1}(\mathbf{x}^k))$ 可以被拆解为 $\mathbf{x}^{2r+1} = (P_{S_1}(\mathbf{x}^{2r}))$, $\mathbf{x}^{2r+2} = (P_{S_2}(\mathbf{x}^{2r+1}))$, 而 $P_{S_1}(\mathbf{x}^{2r})$ 恰好对应距离 S_1, S_2 中距离 \mathbf{x}^{2r} 最远

的投影点, $P_{S_2}(\mathbf{x}^{2r+1})$ 恰好对应距离 S_1, S_2 中距离 \mathbf{x}^{2r+1} 最远的投影点. 故交替投影算法中的一步更新等价于贪婪投影法中的两步 (当 $m = 2$ 时).

推论 8.22. (交替投影算法的收敛性) 今有非空闭凸集 S_1, S_2 且 $S \equiv S_1 \cap S_2 \neq \emptyset$. 令 $\{\mathbf{x}^k\}$ 是交替投影算法的求解序列, 其中 $\mathbf{x}^0 \in S_2$, 则

(a). 对于任意的 $k \geq 0$,

$$\min_{n=0,1,\dots,k} \{d(\mathbf{x}^n, S_1)\} \leq \frac{d_S(\mathbf{x}^0)}{\sqrt{k+1}};$$

(b). 存在 $\mathbf{x}^* \in S$ 使得当 $k \rightarrow \infty$ 时, $\mathbf{x}^k \rightarrow \mathbf{x}^*$.

由于交替投影算法与贪婪投影法的等价性, (b) 显然. 对于 (a), 只需说明式 (8.25) 中的 $\max_{i=1,2} d(\mathbf{x}^n, S_i) \equiv d(\mathbf{x}^n, S_1)$ 即可. 注意到对于任意 n , 有 $\mathbf{x}^n \in S_2$, 则有 $d(\mathbf{x}^n, S_2) = 0$, $d(\mathbf{x}^n, S_1) \geq 0$, 因此有 $\max_{i=1,2} d(\mathbf{x}^n, S_i) \equiv d(\mathbf{x}^n, S_1)$.

例 8.23. (线性规划问题) 考虑式 (8.27) 所示的线性规划问题:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq 0, \quad (8.27)$$

其中 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 且是行满秩的, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. 解决 (8.27) 的一个思路是采用交替投影算法. 令

$$S_1 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{Ax} = \mathbf{b}\}, S_2 = \mathbb{R}_+^n,$$

引理 6.26 已经给出了 \mathbf{x} 在 S_1 以及 S_2 上的梯度计算公式, 即

$$P_{S_1}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{A}^\top (\mathbf{AA}^\top)^{-1} (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}), P_{S_2}(\mathbf{x}) = [\mathbf{x}]_+.$$

综上所述, 利用交替投影方法求解 (8.27) 的算法可总结如下:

Algorithm 1 (利用交替投影法解线性规划问题)

初始化: 任取 $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}_+^n$.

一般步骤: 对于 $k \geq 0$, 执行:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \left[\mathbf{x}^k - \mathbf{A}^\top (\mathbf{AA}^\top)^{-1} (\mathbf{Ax}^k - \mathbf{b}) \right]_+.$$

在算法的迭代步中, 需要反复计算 $(\mathbf{AA}^\top)^{-1} (\mathbf{Ax}^k - \mathbf{b})$, 即计算 \mathbf{AA}^\top 并解线性方程组 $(\mathbf{AA}^\top)\mathbf{z} = (\mathbf{Ax}^k - \mathbf{b})$. 当矩阵维数过大时, 如此计算不甚方便. 我们可以采纳另外一种投影算法以避免解线性方程组. 令 \mathbf{a}_i^\top 表示矩阵 \mathbf{A} 的第 i 行, 并定义

$$T_i = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} = b_i\}, i = 1, 2, \dots, m, T_{m+1} = \mathbb{R}_+^m.$$

此时, 求解 (8.27) 即转化为寻找 $\bigcap_{i=1}^{m+1} T_i$ 由引理 6.26,

$$P_{T_i}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \frac{\mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} - b_i}{\|\mathbf{a}_i\|_2^2} \mathbf{a}_i \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

由此,

$$d_{T_i}(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - P_{T_i}(\mathbf{x})\| = \frac{|\mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} - b_i|}{\|\mathbf{a}_i\|_2}.$$

由于现在所讨论的可行集有 $m+1$ 个, 故采用贪婪投影法求解, 其求解过程可总结为算法 2. 在每一次迭代中, 算法二比算法一的计算次数更少, 故其更为简便. 然而, 下面的一个算例将说明这种简便是有代价的! 取

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 6 & -7 & 1 \\ -1 & 2 & 10 & -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 \\ 10 \end{bmatrix},$$

图 8.3 表明了两种算法下解的误差 ($f(\mathbf{x}^k) = 0$ 时, \mathbf{x}^k 恰为线性方程组的解. $f(\mathbf{x}^k)$ 越大, 则 \mathbf{x}^k 距离真实解的偏差越大). 显然, 在迭代次数相同的情况下, 交替投影算法可以得到一个更精确的解.

Algorithm 2 (采用贪婪投影法解决 (8.27))

初始化: 取 $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{E}$.

一般步骤: 对于 $k \geq 0$, 执行:

计算 $i_k : i_k \in \arg \max_{i=1,2,\dots,m} \frac{|\mathbf{a}_i^\top \mathbf{x}^k - b_i|}{\|\mathbf{a}_i\|_2}$;

如果 $\frac{|\mathbf{a}_{i_k}^\top \mathbf{x}^k - b_{i_k}|}{\|\mathbf{a}_{i_k}\|_2} > \|\mathbf{x}^k - [\mathbf{x}^k]_+\|_2$, 则

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \frac{\mathbf{a}_{i_k}^\top \mathbf{x}^k - b_{i_k}}{\|\mathbf{a}_{i_k}\|_2^2} \mathbf{a}_{i_k};$$

否则,

$$\mathbf{x}^{k+1} = [\mathbf{x}^k]_+.$$

不难看出, 在迭代次数相同时, 交替投影算法能够得到更精确的解. 在这里, 进一步设计实验对比两种算法的性能. 取 $\mathbf{x}^0 = (0, 0, 0, 0)^\top$ ($\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}_+ = S_2$), $\mathbf{a}_1^\top = (0, 6, 7, -1)$, $\mathbf{a}_2^\top = (-1, 2, 10, -1)$ 与 $\mathbf{b} = (0, 10)^\top$, 分别执行 600 次迭代, 两种算法求解过程中的 $f(\mathbf{x}^k)$ 的变化如补充图-1 所示:

书中实验与此处的增补实验均表明, 达到相同的精度, 交替投影算法的迭代步数更少. 为了验证贪婪投影算法执行单次迭代的速度更快, 分别对两种求解算法的求解过程计时. 以迭代次数 k 为横坐标, 计算时间为纵坐标, 两种算法的求解时耗

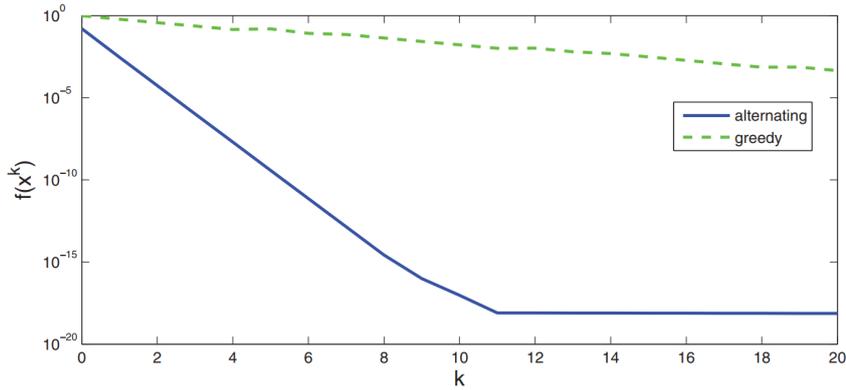
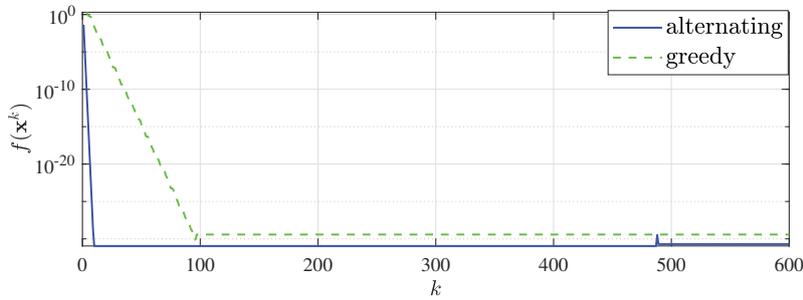


图 8.3 取 $\mathbf{a}_1^\top = (0, 6, 7, -1)$, $\mathbf{a}_2^\top = (-1, 2, 10, -1)$, $\mathbf{b} = (0, 10)^\top$ 时, 交替投影算法以及贪婪投影法实验数据.



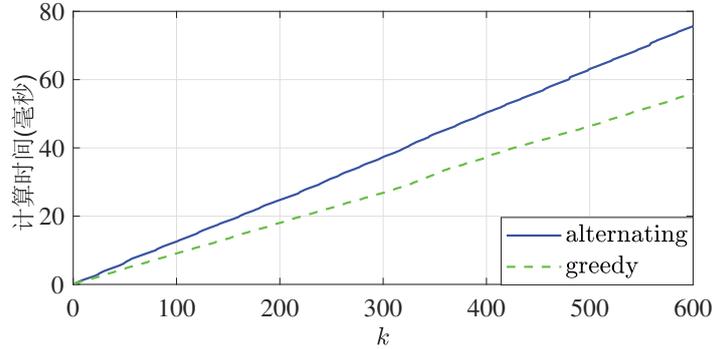
补充图-1: 分别采用交替投影法以及贪婪投影法, $f(\mathbf{x}^k)$ 在 600 次迭代中的下降过程

如补充图-2 所示:

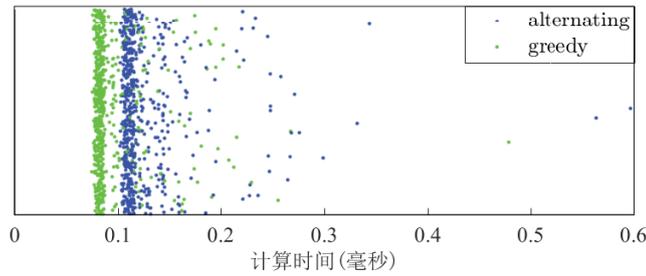
此外, 补充图-3 展示了两种算法单步迭代所消耗的时间. 其中, 每一个蓝色点的横坐标均表示交替投影算法的求解过程中的一侧迭代所消耗的时间, 相应地, 绿色点代表贪婪投影算法求解过程中一次迭代的时耗. 从以上数据可得, 交替投影法单次迭代的平均时间为 $126.7 \mu\text{s}$, 而贪婪投影法的单次迭代的平均时间为 $93.2 \mu\text{s}$, 快于交替投影算法.

值得注意的是, 我们可以证明交替投影算法的收敛有更快的收敛速率. 这里取非空闭凸集 S_1, S_2 以及 $S \equiv S_1 \cap S_2 \neq \emptyset$. 令迭代初始点 $\mathbf{x}^0 \in S_2$, $\{\mathbf{x}_a^p\}$ 与 $\{\mathbf{x}_g^q\}$ 分别代表贪婪投影算法和交替投影算法的求解轨迹. 不难发现, 当 $\mathbf{x}_a^{p'} = \mathbf{x}_g^{q'}$ 时, 有 $\mathbf{x}_a^{p'} \in S_2$, 进而,

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_g^{q'+1} &= P_{S_1}(\mathbf{x}_g^{q'}), \\ \mathbf{x}_g^{q'+2} &= P_{S_2}(P_{S_1}(\mathbf{x}_g^{q'})) \\ &= P_{S_2}(P_{S_1}(\mathbf{x}_a^{p'})) \\ &= \mathbf{x}_a^{p'+1}. \end{aligned}$$



补充图-2: 计算过程运行时间



补充图-3: 单步运行时间

这表明, 以 \mathbf{x}^0 为初始值时, 若分别使用贪婪投影算法和交替投影算法求解, 则有 $\mathbf{x}_g^2 = \mathbf{x}_a^1, \mathbf{x}_g^4 = \mathbf{x}_a^2, \dots, \mathbf{x}_g^{2n} = \mathbf{x}_a^n$. 可见, $\{\mathbf{x}_a^p\}$ 是 $\{\mathbf{x}_g^q\}$ 的一个子列. 由定理 8.17, $\{\mathbf{x}_a^p\}$ 与 $\{\mathbf{x}_g^q\}$ 收敛且收敛于同一极限点 (不妨设为 \mathbf{x}^*). 由 Fejér 单调性, 有 $\|\mathbf{x}_a^n - \mathbf{x}^*\| = \|\mathbf{x}_g^{2n} - \mathbf{x}^*\| \leq \|\mathbf{x}_g^n - \mathbf{x}^*\|$ 对任意的 $n \geq 1$ 成立, 因此交替投影算法比贪婪投影算法的收敛更快. 这一结论解释了例 8.26 的实验结果.

8.2.4 具有动态步长的次梯度投影法

Polyak 步长是最优的, 因为它最小化了基本不等式 (8.12) 给出的上界. 然而, 该步长的一个主要缺点是, 最优值 f_{opt} 通常是未知的, 此时步长是不可计算的. 在本节中, 我们将寻找一个可计算的步长规则并且次梯度投影法的收敛速度仍能够保持 $O(1/\sqrt{k})$. 下面的定理 8.25 描述了一个简单的步长条件, 在这个条件下可以保证 f_{best}^k 到 f_{opt} 的收敛性. 该定理使用了以下引理.

引理 8.24. 在假设 8.7 成立的前提下, 令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为次梯度投影法的求解序列且满足步长 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 为正, 则对于任意 $\mathbf{x}^* \in X^*$ 以及 $k > 0$, 有

$$\sum_{n=0}^k t_n (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2. \quad (8.28)$$

Proof. 由引理 8.11, 对任意 $n \geq 0$ 和 $\mathbf{x}^* \in X^*$, 我们有

$$\frac{1}{2} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - t_n(f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) + \frac{t_n^2}{2} \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2,$$

对上述不等式中 $n = 0, 1, 2, \dots, k$, 进行求和并整理得到下列不等式:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^k t_n(f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) &\leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{1}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 + \sum_{n=0}^k \frac{t_n^2}{2} \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2 \\ &\leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2, \end{aligned}$$

故该引理得证. □

定理 8.25. (保证次梯度投影法收敛的步长条件). 在假设 8.7 和假设 8.12 成立的前提下, 令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为次梯度投影法的求解序列且满足步长 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 为正, 则对于任意 $\mathbf{x}^* \in X^*$ 以及 $k > 0$, 如果

$$\frac{\sum_{n=0}^k t_n^2}{\sum_{n=0}^k t_n} \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty, \quad (8.29)$$

则

$$f_{best}^k - f_{opt} \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty, \quad (8.30)$$

其中 $\{f_{best}^k\}_{k \geq 0}$ 是 (8.11) 中定义的最优值序列.

Proof. 令 L_f 是一个常数, 对任意 $\mathbf{g} \in \partial f(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in C$, 满足 $\|\mathbf{g}\| \leq L_f$, 它的存在性由假设 8.12 保证. 利用引理 8.24 和不等式 $\|f'(\mathbf{x}^n)\| \leq L_f$ 以及 $f(\mathbf{x}^n) \geq f_{best}^k, n \leq k$, 我们可以得到

$$\left(\sum_{n=0}^k t_n\right)(f_{best}^k - f_{opt}) \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + \frac{L_f^2}{2} \sum_{n=0}^k t_n^2,$$

因此,

$$f_{best}^k - f_{opt} \leq \frac{1}{2} \frac{\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2}{\sum_{n=0}^k t_n} + \frac{L_f^2}{2} \frac{\sum_{n=0}^k t_n^2}{\sum_{n=0}^k t_n},$$

由式 (8.29) 成立即可得 (8.30) 成立, 因为 (8.28) 成立可推得当 $k \rightarrow \infty$ 时, $\sum_{n=0}^k t_n \rightarrow \infty$. □

根据定理 8.25, 当我们选择步长为 $t_k = \frac{1}{\sqrt{k+1}}$ 时, 可以保证函数值收敛到 f_{opt} , 因为 $\sum_{n=0}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}$ 的数量级为 \sqrt{k} 而 $\sum_{n=0}^k \frac{1}{n+1}$ 的数量级为 $\log(k)$. 在下面的定理 8.28 中我们将分析当步长为 $t_k = \frac{1}{\|f'(\mathbf{x}^k)\|\sqrt{k+1}}$ 时次梯度投影算法的收敛速度. 除了证明 $f_{best}^k \rightarrow f_{opt}$, 我们将进一步证明某一平均数序列的函数值也收敛于最优值, 这样的结果称为遍历收敛结果.

引理 8.26. 令 $f: [a-1, b+1] \rightarrow \mathbb{R}$ 是 $[a-1, b+1]$ 上的连续非增函数, 其中 a 和 b 是整数且满足 $a \leq b$. 则

$$\int_a^{b+1} f(t) dt \leq f(a) + f(a+1) + \cdots + f(b) \leq \int_{a-1}^b f(t) dt.$$

利用引理 8.26, 我们可以证明下面的引理, 它将有助于证明定理 8.28 以及后面的其他结果.

引理 8.27. 令 $D \in \mathbb{R}$. 那么

(a) 对任意的 $k \geq 1$,

$$\frac{D + \sum_{n=0}^k \frac{1}{n+1}}{\sum_{n=0}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}} \leq \frac{D + 1 + \log(k+1)}{\sqrt{k+1}}; \quad (8.31)$$

(b) 对任意的 $k \geq 2$,

$$\frac{D + \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{1}{n+1}}{\sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}} \leq \frac{4(D + \log(3))}{\sqrt{k+2}}. \quad (8.32)$$

Proof. (a) 利用引理 8.26, 我们可得以下不等式:

$$\sum_{n=0}^k \frac{1}{n+1} = 1 + \sum_{n=1}^k \frac{1}{n+1} \leq 1 + \int_0^k \frac{1}{x+1} dx = 1 + \log(k+1), \quad (8.33)$$

$$\sum_{n=0}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}} \geq \int_0^{k+1} \frac{1}{\sqrt{x+1}} dx = 2\sqrt{k+2} - 2 \geq \sqrt{k+1}, \quad (8.34)$$

最后一个不等式对所有 $k \geq 1$ 都成立. 由式 (8.33) 和式 (8.34) 即可得 (8.31) 成立.

(b) 利用引理 8.26, 对于任意的 $k \geq 2$ 可得以下不等式:

$$\begin{aligned} \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{1}{n+1} &\leq \int_{\lceil k/2 \rceil - 1}^k \frac{1}{t+1} dt = \log(k+1) - \log(\lceil k/2 \rceil) \\ &= \log\left(\frac{k+1}{\lceil 0.5k \rceil}\right) \leq \log\left(\frac{k+1}{0.5k}\right) = \log\left(2 + \frac{2}{k}\right) \\ &\leq \log(3) \end{aligned} \quad (8.35)$$

和

$$\begin{aligned} \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}} &\geq \int_{\lceil k/2 \rceil}^{k+1} \frac{1}{\sqrt{t+1}} dt = 2\sqrt{k+2} - 2\sqrt{\lceil k/2 \rceil + 1} \\ &\geq 2\sqrt{k+2} - 2\sqrt{k/2 + 2} = \frac{4(k+2) - 4(0.5k+2)}{2\sqrt{k+2} + 2\sqrt{0.5k+2}} \\ &= \frac{k}{\sqrt{k+2} + \sqrt{0.5k+2}} \geq \frac{k}{2\sqrt{k+2}} \end{aligned}$$

$$\geq \frac{1}{4}\sqrt{k+2}, \quad (8.36)$$

当 $k \geq 2$ 时, 最后一个不等式成立. 由式 (8.35) 和 (8.36) 可得式 (8.32) 成立. \square

现在我们将证明收敛结果.

定理 8.28. (次梯度投影法的收敛速度 $O(\log(k)/\sqrt{k})$). 在假设 8.7 和假设 8.12 成立的前提下, 令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为次梯度投影法的求解序列且满足 $f'(\mathbf{x}^k) \neq 0$ 时, $t_k = \frac{1}{\|f'(\mathbf{x}^k)\|\sqrt{k+1}}$, 否则 $t_k = \frac{1}{L_f}$. 那么

(a) 对任意的 $k \geq 1$,

$$f_{best}^k - f_{opt} \leq \frac{L_f \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + 1 + \log(k+1)}{2\sqrt{k+1}},$$

其中 $\{f_{best}^k\}_{k \geq 0}$ 是 (8.11) 中定义的最优值序列;

(b) 对任意的 $k \geq 1$,

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{opt} \leq \frac{L_f \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + 1 + \log(k+1)}{2\sqrt{k+1}},$$

其中

$$\mathbf{x}^{(k)} = \frac{1}{\sum_{n=0}^k t_n} \sum_{n=0}^k t_n \mathbf{x}^n.$$

证明. 利用 (8.28) 和不等式 $f(\mathbf{x}^n) \geq f_{best}^k, n = 0, 1, 2, \dots, k,$, 可得

$$f_{best}^k - f_{opt} \leq \frac{1}{2} \frac{\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2}{\sum_{n=0}^k t_n}, \quad (8.37)$$

由 Jensen 不等式, 有下列不等式成立

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) \leq \frac{1}{\sum_{n=0}^k t_n} \sum_{n=0}^k t_n f(\mathbf{x}^n),$$

结合 (8.27) 可得

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{opt} \leq \frac{1}{2} \frac{\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2}{\sum_{n=0}^k t_n}, \quad (8.38)$$

因此, 由 (8.37) 和 (8.38) 我们可推导出下式

$$\max\{f_{best}^k - f_{opt}, f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{opt}\} \leq \frac{1}{2} \frac{\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2}{\sum_{n=0}^k t_n}.$$

由 t_n 的定义可知, $t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2 \leq \frac{1}{n+1}$ 成立 ($f'(\mathbf{x}^n) \neq 0$ 时等号成立, $f'(\mathbf{x}^n) = 0$ 时严格取不等号); 此外, 因为 $\|f'(\mathbf{x}^n)\| \leq L_f$, 我们有 $t_n \geq \frac{1}{L_f \sqrt{n+1}}$. 因此,

$$\max\{f_{best}^k - f_{opt}, f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{opt}\} \leq \frac{L_f \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + \sum_{n=0}^k \frac{1}{n+1}}{2 \sum_{n=0}^k \sqrt{n+1}}. \quad (8.39)$$

令 $D = \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2$, 应用引理 8.27(a) 可推得如下不等式

$$\max\{f_{best}^k - f_{opt}, f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{opt}\} \leq \frac{L_f \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + 1 + \log(k+1)}{2\sqrt{k+1}},$$

该式成立即等价于 (a) 和 (b) 成立. \square

注 8.29. 定理 8.28 中定义的平均值序列 $\mathbf{x}^{(k)}$ 可以自适应计算, 只要注意以下简单递归关系成立:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \frac{T_k}{T_{k+1}} \mathbf{x}^{(k)} + \frac{t_{k+1}}{T_{k+1}} \mathbf{x}^{(k+1)},$$

其中 $T_k \equiv \sum_{n=0}^k t_n$ 可以通过递归关系: $T_{k+1} = T_k + t_{k+1}$ 来计算

定理 8.28 中证明的收敛速率 $O(\log(k)/\sqrt{k})$ 差于定理 8.13 中证明的选择 Polyak 步长的次梯度投影法的收敛速率 $O(1/\sqrt{k})$. 当我们增加假设可行集 C 是紧集时收敛速率 $O(1/\sqrt{k})$ 也是可能的. 注意到, 根据定理 3.16, C 的紧性可由假设 8.12 保证, 我们仍将在下面的定理中明确地说明.

定理 8.30. (次梯度投影法的收敛速度 $O(1/\sqrt{k})$). 在假设 8.7 和假设 8.12 成立并且 C 为紧集的前提下, 令 Θ 是 C 的直径平方一半的上界:

$$\Theta \geq \max_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in C} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2.$$

$\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为次梯度投影法的求解序列, 步长选择规则为

$$t_k = \frac{\sqrt{2\Theta}}{L_f \sqrt{k+1}} \quad (8.40)$$

或者

$$t_k = \begin{cases} \frac{\sqrt{2\Theta}}{\|f'(\mathbf{x}^k)\| \sqrt{k+1}} & \text{if } f'(\mathbf{x}^k) \neq 0, \\ \frac{\sqrt{2\Theta}}{L_f \sqrt{k+1}} & \text{if } f'(\mathbf{x}^k) = 0. \end{cases} \quad (8.41)$$

那么对于所有 $k \geq 2$,

$$f_{best}^k - f_{opt} \leq \frac{\delta L_f \sqrt{2\Theta}}{\sqrt{k+2}},$$

其中 $\delta = 2(1 + \log(3))$, f_{best}^k 是 (8.11) 中定义的最优值序列.

证明. 由引理 8.11, 对任意 $n \leq 0$,

$$\frac{1}{2} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - t_n (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) + \frac{t_n^2}{2} \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2$$

对上述不等式中的 $n = \lceil k/2 \rceil, \lceil k/2 \rceil + 1, \dots, k$ 进行求和并整理得到下列不等式:

$$\sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k t_n (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}^{\lceil k/2 \rceil} - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{1}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 + \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{t_n^2}{2} \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2$$

$$\begin{aligned}
&\leq \Theta + \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{t_n^2}{2} \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2 \\
&\leq \Theta + \Theta \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{1}{n+1}, \tag{8.42}
\end{aligned}$$

最后一个不等式成立是由步长的定义 (8.40), (8.41) 和 $t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2 \leq \frac{2\Theta}{n+1}$.

因为对任意 $n \leq k$, $t_n \geq \frac{\sqrt{2\Theta}}{L_f \sqrt{n+1}}$ 和 $f(\mathbf{x}^n) \geq f_{best}^k$ 成立, 故

$$\sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k t_n (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) \geq \left(\sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{\sqrt{2\Theta}}{L_f \sqrt{n+1}} \right) (f_{best}^k - f_{opt}). \tag{8.43}$$

因此, 结合 (8.42) 和 (8.43) 有

$$f_{best}^k - f_{opt} \leq \frac{L_f \sqrt{\Theta} \left(1 + \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{1}{n+1} \right)}{\sqrt{2} \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}}, \tag{8.44}$$

进而由引理 8.27(b) 即可得结果. \square

8.2.5 强凸情况

在本节我们将证明在 f 是强凸得情况下, 收敛速率可以从 $O(1/\sqrt{k})$ 提升到 $O(1/k)$. 为了达到这个改进的速率, 所使用的步长以 $1/k$ 的数量级递减. 我们还将使用定理 5.25(b) 中描述的强凸函数的增长性质, 来展示序列 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 收敛到最优解的速度.

定理 8.31. (强凸函数的次梯度投影法的收敛速度 $O(1/k)$). 在假设 8.7 和假设 8.12 成立的前提下, 设 f 是 σ 强凸函数 ($\sigma > 0$) 且 \mathbf{x}^* 是该函数的唯一最小值点. $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为次梯度投影法的求解序列且步长 $t_k = \frac{2}{\sigma(k+1)}$.

(a) $\{f_{best}^k\}_{k \geq 0}$ 是 (8.11) 中定义的最优值序列. 则对于任意 $k \geq 0$,

$$f_{best}^k - f_{opt} \leq \frac{2L_f^2}{\sigma(k+1)}. \tag{8.45}$$

此外,

$$\|\mathbf{x}^{i_k} - \mathbf{x}^*\| \leq \frac{2L_f}{\sigma\sqrt{k+1}}, \tag{8.46}$$

其中, $i_k \in \arg \min_{i=0,1,\dots,k} f(\mathbf{x}^i)$.

(b) 定义平均值顺序

$$\mathbf{x}^{(k)} = \sum_{n=0}^k \alpha_n^k \mathbf{x}^n,$$

其中 $\alpha_n^k \equiv \frac{2n}{k(k+1)}$. 那么对于所有的 $k \geq 0$,

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{opt} \leq \frac{2L_f^2}{\sigma(k+1)}. \quad (8.47)$$

此外,

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\| \leq \frac{2L_f}{\sigma\sqrt{k+1}}, \quad (8.48)$$

证明. (a) 重复引理 8.11 证明中的论证, 我们可以写出对于任意 $n \geq 0$,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 &= \|P_C(\mathbf{x}^n - t_n f'(\mathbf{x}^n)) - P_C(\mathbf{x}^*)\|^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}^n - t_n f'(\mathbf{x}^n) - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &= \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_n \langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{x}^n - \mathbf{x}^* \rangle + t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2. \end{aligned} \quad (8.49)$$

因为 f 是 σ 强凸的, 由定理 5.24 得

$$f(\mathbf{x}^*) \geq f(\mathbf{x}^n) + \langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^n \rangle + \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2,$$

即

$$\langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{x}^n - \mathbf{x}^* \rangle \geq f(\mathbf{x}^n) - f_{opt} + \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2,$$

结合 (8.48) 有

$$\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq (1 - \sigma t_n) \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_n (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) + t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|^2,$$

整理上式, 并在两端同时除以 $2t_n$, 由于 $\|f'(\mathbf{x}^n)\| \leq L_f$, 我们有

$$f(\mathbf{x}^n) - f_{opt} \leq \frac{1}{2}(t_n^{-1} - \sigma) \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{1}{2} t_n^{-1} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 + \frac{t_n}{2} L_f^2,$$

在上式中, 令 $t_n = \frac{2}{\sigma(n+1)}$, 可得

$$f(\mathbf{x}^n) - f_{opt} \leq \frac{\sigma(n-1)}{4} \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{\sigma(n+1)}{4} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 + \frac{1}{\sigma(n+1)} L_f^2,$$

对上式左右两端同时乘 n 得

$$n(f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) \leq \frac{\sigma n(n-1)}{4} \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{\sigma(n+1)n}{4} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 + \frac{n}{\sigma(n+1)} L_f^2,$$

将上式对 $n = 0, 1, \dots, k$ 进行求和可得

$$\sum_{n=0}^k n(f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) \leq 0 - \frac{\sigma}{4} k(k+1) \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 + \frac{L_f^2}{\sigma} \sum_{n=0}^k \frac{n}{n+1} \leq \frac{L_f^2 k}{\sigma}, \quad (8.50)$$

对于所有的 $n = 0, 1, \dots, k$, 有不等式 $f(\mathbf{x}^n) \geq f_{best}^k$ 成立, 根据该结论可得

$$\left(\sum_{n=0}^k n \right) (f_{best}^k - f(\mathbf{x}^n)) \leq \frac{L_f^2 k}{\sigma},$$

其中 $\sum_{n=0}^k n = \frac{k(k+1)}{2}$, 则

$$f_{best}^k - f(\mathbf{x}^n) \leq \frac{2L_f^2}{\sigma(k+1)}, \quad (8.51)$$

故 (8.56) 成立. 为证 (8.46), 记 $f_{best}^k = f(\mathbf{x}^{i_k})$, 将定理 5.25(b) 应用到 σ 强凸函数 $f + \delta_C$ 并结合 (8.58) 可得

$$\frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^{i_k} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq f_{best}^k - f_{opt} \leq \frac{2L_f^2}{\sigma(k+1)},$$

整理该式即得

$$\|\mathbf{x}^{i_k} - \mathbf{x}^*\| \leq \frac{2L_f}{\sigma\sqrt{k+1}}.$$

(b) 为了建立遍历收敛, 我们首先用 (8.57) 除以 $\frac{k(k+1)}{2}$ 可得

$$\sum_{n=0}^k \alpha_n^k (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) \leq \frac{2L_f^2}{\sigma(k+1)}.$$

由 Jensen 不等式 (利用事实 $(\alpha_n^k)_{n=0}^k \in \Delta_{k+1}$),

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{opt} = f\left(\sum_{n=0}^k \alpha_n^k \mathbf{x}^n\right) - f_{opt} \leq \sum_{n=0}^k \alpha_n^k (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) \leq \frac{2L_f^2}{\sigma(k+1)},$$

即 (8.56) 成立. (8.48) 的证明与 (a) 中 (8.46) 的证明相同. \square

注 8.32. 定理 8.31 中定义的平均值序列 $\mathbf{x}^{(k)}$ 可以自适应计算, 只要注意以下简单递归关系成立:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \frac{k}{k+2} \mathbf{x}^{(k)} + \frac{2}{k+2} \mathbf{x}^{(k+1)}.$$

函数值序列的 $O(1/k)$ 收敛速率自然导致获得 ϵ -最优解, 迭代次数与 $1/\epsilon$ 同阶. 这个证明与定理 8.18 的论证相同.

定理 8.33. (强凸函数的次梯度投影法的复杂度). 在定理 8.31 的设定和假设下, 对于任意非负整数 k 满足

$$k \geq \frac{2L_f^2}{\sigma\epsilon} - 1,$$

则下式成立

$$f_{best}^k - f_{opt} \leq \epsilon,$$

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{opt} \leq \epsilon.$$

8.3 随机投影梯度法

8.3.1 背景和方法

这部分我们仍然在假设 8.7 成立的情况下研究模型 (8.10), 主要的不同在于对于每次迭代不是用 \mathbf{x}^k 的次梯度而是用 f 在 \mathbf{x}^k 次梯度的一个随机估计 \mathbf{g}^k 去更新下降方向. 该方法具体步骤如下:

随机投影梯度法

初始化: 任取 $\mathbf{x}^0 \in C$.

一般步骤: 对于任何 $k = 0, 1, 2, \dots$ 执行如下步骤:

(A) 选取一个步长 $t_k > 0$ 和一个随机向量 $\mathbf{g}^k \in \mathbb{E}$;

(B) 令 $\mathbf{x}^k = P_C(\mathbf{x}^k - t_k \mathbf{g}^k)$.

显然, 由于向量 \mathbf{g}^k 是随机向量, 故迭代向量 \mathbf{x}^k 也是随机向量. 如下是对随机向量 \mathbf{g}^k 的具体假设.

假设 8.34. (A)(无偏性) 对于任意 $k \geq 0$, $\mathbf{E}(\mathbf{g}^k | \mathbf{x}^k) \in \partial f(\mathbf{x}^k)$.

(B)(有界性) 存在一个常数 $\tilde{L}_f > 0$ 使得对任意的 $k \geq 0$, $\mathbf{E}(\|\mathbf{g}^k\|^2 | \mathbf{x}^k) \leq \tilde{L}_f^2$.

上述假设中 (A) 意思是 \mathbf{g}^k 是 \mathbf{x}^k 处次梯度的无偏估计, 也可以写成

$$f(\mathbf{z}) \geq f(\mathbf{x}^k) + \langle \mathbf{E}(\mathbf{g}^k | \mathbf{x}^k), \mathbf{z} - \mathbf{x}^k \rangle, \quad \forall \mathbf{z} \in \text{dom}(f).$$

假设 8.34 (B) 中的 \tilde{L}_f 在确定性问题中不必是 Lipschitz 常数.

8.3.2 分析

随机投影梯度法的分析几乎等同于确定性方法的分析. 如下定理总结了随机投影梯度法的主要结论.

定理 8.35. (随机投影梯度的收敛性). 假定假设 8.7 和 8.34 成立. $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是在正步长 $\{t^k\}_{k \geq 0}$ 下随机投影梯度法产生的序列. $\{f_{best}^k\}_{k \geq 0}$ 是 (8.11) 中定义的最佳逼近值所产生的序列.

(a) 当 $k \rightarrow \infty$, 若 $\frac{\sum_{n=0}^k t_n^2}{\sum_{n=0}^k t_n} \rightarrow 0$, 则有 $\mathbf{E}(f_{best}^k) \rightarrow f_{opt}$.

(b) 假设 C 是紧的. 令 \tilde{L}_f 是假设 8.34 中定义的正常数, Θ 是 C 上的半平方直径:

$$\Theta \geq \max_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in C} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2. \quad (8.52)$$

若 $t^k = \frac{\sqrt{2\Theta}}{\tilde{L}_f\sqrt{k+1}}$, 则对于所有 $k \geq 2$,

$$\mathbf{E}(f_{best}^k) - f_{opt} \leq \frac{\delta \tilde{L}_f \sqrt{2\Theta}}{\sqrt{k+2}},$$

其中 $\delta = 2(1 + \log(3))$.

证明. 对于任意 $n \geq 0$,

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 | \mathbf{x}^n) &= \mathbf{E}(\|P_C(\mathbf{x}^n - t_n \mathbf{g}^n) - P_C(\mathbf{x}^*)\|^2 | \mathbf{x}^n) \\ &\leq \mathbf{E}(\|\mathbf{x}^n - t_n \mathbf{g}^n - \mathbf{x}^*\|^2 | \mathbf{x}^n) \\ &= \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_n \mathbf{E}(\langle \mathbf{g}^n, \mathbf{x}^n - \mathbf{x}^* \rangle | \mathbf{x}^n) + t_n^2 \mathbf{E}(\|\mathbf{g}^n\|^2 | \mathbf{x}^n) \\ &= \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_n \langle \mathbf{E}(\mathbf{g}^n | \mathbf{x}^n), \mathbf{x}^n - \mathbf{x}^* \rangle + t_n^2 \mathbf{E}(\|\mathbf{g}^n\|^2 | \mathbf{x}^n) \\ &\leq \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_n \langle \mathbf{E}(\mathbf{g}^n | \mathbf{x}^n), \mathbf{x}^n - \mathbf{x}^* \rangle + t_n^2 \tilde{L}_f^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_n (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) + t_n^2 \tilde{L}_f^2. \end{aligned}$$

根据正交投影算子的非扩张性 (定理 6.42), 第一个不等号成立, 后两个不等号可由假设 8.34 得到. 进而取关于 \mathbf{x}^n 的期望, 我们可得

$$\mathbf{E}(\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2) \leq \mathbf{E}(\|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2) - 2t_n (\mathbf{E}(f(\mathbf{x}^n)) - f_{opt}) + t_n^2 \tilde{L}_f^2.$$

对上述式子从 $n = m, m+1, \dots, k$ 进行累加 (其中 m 是满足 $m \leq k$ 的整数),

$$\mathbf{E}(\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2) \leq \mathbf{E}(\|\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^*\|^2) - 2 \sum_{n=m}^k t_n (\mathbf{E}(f(\mathbf{x}^n)) - f_{opt}) + \tilde{L}_f^2 \sum_{n=m}^k t_n^2.$$

因此,

$$\sum_{n=m}^k t_n (\mathbf{E}(f(\mathbf{x}^n)) - f_{opt}) \leq \frac{1}{2} \left[\mathbf{E}(\|\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^*\|^2) + \tilde{L}_f^2 \sum_{n=m}^k t_n^2 \right],$$

上式表明

$$\left(\sum_{n=m}^k t_n \right) \left(\min_{n=m, m+1, \dots, k} \mathbf{E}(f(\mathbf{x}^n)) - f_{opt} \right) \leq \frac{1}{2} \left[\mathbf{E}(\|\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^*\|^2) + \tilde{L}_f^2 \sum_{n=m}^k t_n^2 \right].$$

利用不等式

$$\mathbf{E}(f_{best}^k) \leq \mathbf{E} \left(\min_{n=m, m+1, \dots, k} f(\mathbf{x}^n) \right) \leq \min_{n=m, m+1, \dots, k} \mathbf{E}(f(\mathbf{x}^n)),$$

第二个不等号两种方法可证得:

(i) 对任意 $i = m, m+1, \dots, k$ 显然有

$$\min_{n=m, m+1, \dots, k} f(\mathbf{x}^n) \leq f(\mathbf{x}^i),$$

对两边同时取期望, 有

$$\mathbf{E}(\min_{n=m, m+1, \dots, k} f(\mathbf{x}^n)) \leq \mathbf{E}(f(\mathbf{x}^i)),$$

再对右边取极小值, 得到不等式.

(ii) 令 $g(\mathbf{x}) = g(x_1, x_2, \dots, x_n) = \min\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, 对于任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, 记 $\mathbf{z} = \lambda\mathbf{x} + (1 - \lambda)\mathbf{y}$, 对所有的 $i = 1, 2, \dots, k$ 有

$$z_i = \lambda x_i + (1 - \lambda)y_i \geq \lambda g(\mathbf{x}) + (1 - \lambda)g(\mathbf{y}),$$

进而得

$$g(\lambda\mathbf{x} + (1 - \lambda)\mathbf{y}) = g(\mathbf{z}) = \min\{z_1, z_2, \dots, z_n\} \geq \lambda g(\mathbf{x}) + (1 - \lambda)g(\mathbf{y}),$$

因此 $g(\mathbf{x})$ 为凹函数, 由期望形式的 Jensen 不等式, 可得结果.

根据上面的结论总结得到

$$\mathbf{E}(f_{best}^k) - f_{opt} \leq \frac{\mathbf{E}(\|\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^*\|^2) + \tilde{L}_f^2 \sum_{n=m}^k t_n^2}{2 \sum_{n=m}^k t_n}, \quad (8.53)$$

代入 $m = 0$ 进入 (8.52), 得到

$$\mathbf{E}(f_{best}^k) - f_{opt} \leq \frac{\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + \tilde{L}_f^2 \sum_{n=0}^k t_n^2}{2 \sum_{n=0}^k t_n}$$

因此当 $k \rightarrow \infty$, 若 $\frac{\sum_{n=0}^k t_n^2}{\sum_{n=0}^k t_n} \rightarrow 0$, 则有 $\mathbf{E}(f_{best}^k) \rightarrow f_{opt}$. 为证 (b), 令 $m = \lceil k/2 \rceil$, 由 (8.51) 和 (8.52) 可得

$$\mathbf{E}(f_{best}^k) - f_{opt} \leq \frac{\Theta + \frac{\tilde{L}_f^2}{2} \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k t_n^2}{\sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k t_n}.$$

令 $t_n = \frac{\sqrt{2\Theta}}{\tilde{L}_f \sqrt{n+1}}$, 得到

$$\mathbf{E}(f_{best}^k) - f_{opt} \leq \frac{\tilde{L}_f \sqrt{2\Theta}}{2} \frac{1 + \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{1}{n+1}}{\sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}},$$

以上结合引理 8.27(b), 可得期望的结果. \square

例 8.36. (凸函数的和的最小值) 考虑最优化模型

$$(P) \quad \min \left\{ f(\mathbf{x}) \equiv \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in C \right\},$$

其中 $f_1, f_2, \dots, f_m : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是合适闭且凸函数. 假定假设 8.7 成立并且 C 是紧的, 后者表明存在某个常数 L_f 使得假设 8.12 成立. 由定理 3.61, L_f 是 f 在 C 上

的 Lipschitz 常数. Θ 是 C 上的半平方直径:

$$\max_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in C} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 \leq \Theta,$$

另外, 假设对于任意 $i = 1, 2, \dots, m$, 存在一个常数 L_{f_i} 满足

$$\|\mathbf{g}\| \leq L_{f_i}, \quad \forall \mathbf{g} \in \partial f_i(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in C.$$

由定理 3.61, L_{f_i} 是 f_i 在 C 上的 Lipschitz 常数, 为了解决问题 (P), 我们考虑两个选择. 第一个就是应用投影梯度法 (假设 $f'(\mathbf{x}^k) \neq 0$):

算法 1

初始化: 选择 $\mathbf{x}^0 \in C$.

一般步骤 ($k \geq 0$): 选择 $f'_i(\mathbf{x}^k) \in \partial f_i(\mathbf{x}), i = 1, 2, \dots, m$, 并且计算

$$\mathbf{x}^{k+1} = P_C \left(\mathbf{x}^k - \frac{\sqrt{2\Theta}}{\left\| \sum_{i=1}^m f'_i(\mathbf{x}^k) \right\| \sqrt{k+1}} \left(\sum_{i=1}^m f'_i(\mathbf{x}^k) \right) \right).$$

由定理 8.30, 可以得到以下估计效率对于 $k \geq 2$ 成立:

$$f_{best}^k - f_{opt} \leq \frac{\delta L_f \sqrt{2\Theta}}{\sqrt{k+2}}, \quad (8.54)$$

其中 $\delta = 2(1 + \log(3))$. 为了得到 ϵ -最优解需满足

$$N_1 = \max \left(\frac{2\delta^2 L_f^2 \Theta}{\epsilon^2} - 2, 2 \right)$$

迭代次数. 当 m 足够大的时候由于通过 $\sum_{i=1}^m f'_i(\mathbf{x}^k)$ 去计算 f 在 \mathbf{x}^k 处的次梯度可能会太复杂, 当迭代次数为 k 时我们可以改变随机投影梯度方法, 定义 $f'(\mathbf{x}^k)$ 无偏估计为

$$\mathbf{g}^k = m f'_{i_k}(\mathbf{x}),$$

其中 i_k 是随机地从平均分布的 $\{1, 2, \dots, m\}$ 抽取的. 显然,

$$\mathbf{E}(\mathbf{g}^k | \mathbf{x}^k) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m m f'_i(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m f'_i(\mathbf{x}^k) \in \partial f(\mathbf{x}^k),$$

并且,

$$\mathbf{E}(\|\mathbf{g}^k\|^2 | \mathbf{x}^k) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m m^2 \|f'_i(\mathbf{x})\|^2 = m \sum_{i=1}^m L_{f_i}^2 \equiv \tilde{L}_f^2,$$

故随机投影梯度法应用在问题 (P) 上有下面的形式:

算法 2

初始化: 选择 $\mathbf{x}^0 \in C$.

一般步骤 ($k \geq 0$):

(1) i_k 是随机地从平均分布的 $\{1, 2, \dots, m\}$ 抽取的并且计算 $f'_{i_k}(\mathbf{x}^k) \in \partial f_{i_k}(\mathbf{x}^k)$.

(2) 计算

$$\mathbf{x}^{k+1} = P_C \left(\mathbf{x}^k - \frac{\sqrt{2\Theta}m}{\tilde{L}_f \sqrt{k+1}} f'_{i_k}(\mathbf{x}^k) \right),$$

其中 $\tilde{L}_f = \sqrt{m} \sqrt{\sum_{i=1}^m L_{f_i}^2}$.

根据定理 8.35, 得到

$$\mathbf{E}(f_{best}^k) - f_{opt} \leq \frac{\delta \sqrt{m} \sqrt{\sum_{i=1}^m L_{f_i}^2} \sqrt{2\Theta}}{\sqrt{k+2}}. \quad (8.55)$$

特别地,

$$N_2 = \max \left(\frac{2\delta^2 m \Theta \sum_{i=1}^m L_{f_i}^2}{\epsilon^2} - 2, 2 \right).$$

当迭代次数足够大的时候就能保证得到 ϵ -最优解. 我们自然会想到, 是否可能比较这两个算法, 答案其实并不明确. 我们可以比较 N_2 和 N_1 这两个量, 但是这样的比较有两个主要的缺陷. 首先, 从某种意义上说, 这就像比较苹果和橘子, 因为 N_1 考虑的是一个函数值序列, 而 N_2 指的是一个预期函数值序列. 此外, 回想一下 N_1 和 N_2 只提供了获得 ϵ -最优解 (确定性或期望) 所需的迭代量的上界. 上界的比较可能会受到上界的紧致性的显著影响. 忽略这些缺点, 估计 N_1 和 N_2 之间的比率, 同时忽略不依赖于 ϵ 的常数项, 我们得到

$$\frac{N_2}{N_1} \approx \frac{\frac{2\delta^2 m \Theta \sum_{i=1}^m L_{f_i}^2}{\epsilon^2}}{\frac{2\delta^2 L_f^2 \Theta}{\epsilon^2}} = \frac{m \sum_{i=1}^m L_{f_i}^2}{L_f^2} \equiv \beta,$$

β 的值依赖于具体的问题. 例如, 考虑例子 $f_i(\mathbf{x}) = |\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + b_i|, i = 1, 2, \dots, m$, 其中 $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n, b_i \in \mathbb{R}$ 且 $C = B_{\|\cdot\|_2}[0, 1]$. 即

$$f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}\|_1,$$

其中 \mathbf{A} 是行为 \mathbf{a}_i^T 的 $m \times n$ 维矩阵, $\mathbf{b} = (b_i)_{i=1}^m$. 由于

$$\partial f_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{a}_i, & \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + b_i > 0, \\ -\mathbf{a}_i, & \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + b_i < 0, \\ \{\xi \mathbf{a}_i : \xi \in [-1, 1]\}, & \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + b_i = 0, \end{cases}$$

随后我们可以选择 $L_{f_i} = \|\mathbf{a}_i\|_2$. 为了估计 L_f , 由例 3.44, 对于任意 $\mathbf{g} \in \partial f(\mathbf{x})$ 有 $\mathbf{g} = \mathbf{A}^T \eta, \eta \in [-1, 1]^m$ 形式, 故 $\|\eta\|_2 \leq \sqrt{m}$. 因此有

$$\|\mathbf{g}\|_2 = \|\mathbf{A}^T \eta\|_2 \leq \|\mathbf{A}^T\|_{2,2} \|\eta\|_2 \leq \sqrt{m} \|\mathbf{A}^T\|_{2,2},$$

其中 $\|\cdot\|_{2,2}$ 是谱范数, 我们可以选择 $L_f = \sqrt{m} \|\mathbf{A}^T\|_{2,2}$. 故

$$\beta = \frac{m \sum_{i=1}^m \|\mathbf{a}_i\|_2^2}{m \|\mathbf{A}^T\|_{2,2}^2} = \frac{\|\mathbf{A}^T\|_F^2}{\|\mathbf{A}^T\|_{2,2}^2} = \frac{\sum_{i=1}^n \lambda_i(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)}{\max_{i=1,2,\dots,n} \lambda_i(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)},$$

其中 $\lambda_1(\mathbf{A}\mathbf{A}^T) \geq \lambda_2(\mathbf{A}\mathbf{A}^T) \geq \dots \geq \lambda_n(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)$ 是 $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ 递减的特征值. 对于任意非负数 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$, 满足

$$\max_{i=1,2,\dots,m} \alpha_i \leq \sum_{i=1}^m \alpha_i \leq m \max_{i=1,2,\dots,m} \alpha_i,$$

我们得到 $1 \leq \beta \leq m$. 极端的情况 $\beta = m$ 事实上也是合乎逻辑的, 因为算法 1 中每次迭代的子梯度计算次数比算法 2 所需的要大 m 倍, 因此算法 2 的迭代次数可能比算法 1 获得相同精度所需的迭代次数大 m 倍. 更不直观的是当 β 接近 1 时的情况. 在这些情况下, 两种算法需要 (对这种比较的错误取模) 相同的迭代阶数才能获得相同的精度阶数. 例如, 当 \mathbf{A} “接近” 为秩 1 时, 则 β 将接近于 1. 在这些情况下, 这两种算法的表现应该相似, 尽管算法 2 的计算要求要低得多. 我们可以通过以下事实来解释这个结果: 在这种情况下, 向量 \mathbf{a}_i 彼此 “几乎” 成正比, 因此所有的子梯度方向 $f'_i(\mathbf{x}^k)$ 都是相似的.

8.3.3 强凸情况下的随机投影梯度

强凸情况下的随机投影梯度的分析几乎等同于定理 8.31 中确定性的情况.

定理 8.37. (强凸函数的随机投影次梯度法的收敛性). 在假设 8.7 和假设 8.34 下, \tilde{L}_f 是定义在假设 8.34 中的正常数, 设 f 是 σ 强凸函数 ($\sigma > 0$). $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为次梯度投影法的求解序列且步长 $t_k = \frac{2}{\sigma(k+1)}$.

(a) $\{f_{best}^k\}_{k \geq 0}$ 是 (8.11) 中定义的最优值序列. 则对于任意 $k \geq 0$,

$$\mathbf{E}(f_{best}^k) - f_{opt} \leq \frac{2\tilde{L}_f^2}{\sigma(k+1)}.$$

(b) 定义平均值的序列

$$\mathbf{x}^{(k)} = \sum_{n=0}^k \alpha_n^k \mathbf{x}^n,$$

其中 $\alpha_n^k \equiv \frac{2n}{k(k+1)}$. 那么对于所有的 $k \geq 0$,

$$\mathbf{E}(f(\mathbf{x}^k)) - f_{opt} \leq \frac{2\tilde{L}_f^2}{\sigma(k+1)}.$$

证明. (a) 对于任意 $x^* \in X^*$, $n \geq 0$,

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2) &= \mathbf{E}(\|P_C(\mathbf{x}^n - t_n \mathbf{g}^n) - P_C(\mathbf{x}^*)\|^2 | \mathbf{x}^n) \\ &\leq \mathbf{E}(\|\mathbf{x}^n - t_n \mathbf{g}^n - \mathbf{x}^*\|^2 | \mathbf{x}^n) \\ &= \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_n \langle \mathbf{E}(\mathbf{g}^n | \mathbf{x}^n), \mathbf{x}^n - \mathbf{x}^* \rangle + t_n^2 \mathbf{E}(\|\mathbf{g}^n\|^2 | \mathbf{x}^n). \end{aligned} \quad (8.56)$$

因为 f 是 σ 强凸的且 $\mathbf{E}(\mathbf{g}^n | \mathbf{x}^n) \in \partial f(\mathbf{x}^n)$, 由定理 5.24(ii) 得下式

$$f(\mathbf{x}^*) \geq f(\mathbf{x}^n) + \langle \mathbf{E}(\mathbf{g}^n | \mathbf{x}^n), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^n \rangle + \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2.$$

即

$$\langle \mathbf{E}(\mathbf{g}^n | \mathbf{x}^n), \mathbf{x}^n - \mathbf{x}^* \rangle \geq f(\mathbf{x}^n) - f_{opt} + \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2.$$

上式结合 (8.55) 可得

$$\mathbf{E}(\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2) \leq (1 - \sigma t_n) \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_n (f(\mathbf{x}^n) - f_{opt}) + t_n^2 \mathbf{E}(\|\mathbf{g}^n\|^2 | \mathbf{x}^n).$$

整理上式, 并在两端同时除以 $2t_n$, 由于 $\mathbf{E}(\|\mathbf{g}^n\|^2 | \mathbf{x}^n) \leq \tilde{L}_f^2$, 我们可得

$$f(\mathbf{x}^n) - f_{opt} \leq \frac{1}{2}(t_n^{-1} - \sigma) \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{1}{2} t_n^{-1} \mathbf{E}(\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 | \mathbf{x}^n) + \frac{t_n}{2} \tilde{L}_f^2,$$

在上式中, 令 $t_n = \frac{2}{\sigma(n+1)}$, 可得

$$f(\mathbf{x}^n) - f_{opt} \leq \frac{\sigma(n-1)}{4} \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{\sigma(n+1)}{4} \mathbf{E}(\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 | \mathbf{x}^n) + \frac{1}{\sigma(n+1)} \tilde{L}_f^2,$$

对左右两端同时乘 n , 并且关于 \mathbf{x}^n 求期望, 有

$$n(\mathbf{E}(f(\mathbf{x}^n)) - f_{opt}) \leq \frac{\sigma n(n-1)}{4} \mathbf{E}(\|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2) - \frac{\sigma(n+1)n}{4} \mathbf{E}(\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2) + \frac{n}{\sigma(n+1)} \tilde{L}_f^2.$$

将上式对 $n = 0, 1, \dots, k$ 进行求和得

$$\sum_{n=0}^k n(\mathbf{E}(f(\mathbf{x}^n)) - f_{opt}) \leq 0 - \frac{\sigma}{4} k(k+1) \mathbf{E}(\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2) + \frac{\tilde{L}_f^2}{\sigma} \sum_{n=0}^k \frac{n}{n+1} \leq \frac{\tilde{L}_f^2 k}{\sigma}. \quad (8.57)$$

由于对于所有的 $n = 0, 1, \dots, k$, 有不等式 $\mathbf{E}(f(\mathbf{x}^n)) \geq \mathbf{E}(f_{best}^k)$ 成立, 根据该结论可得

$$\left(\sum_{n=0}^k n \right) (\mathbf{E}(f_{best}^k) - f(\mathbf{x}^k)) \leq \frac{\tilde{L}_f^2 k}{\sigma},$$

其中 $\sum_{n=0}^k n = \frac{k(k+1)}{2}$, 进而可得

$$\mathbf{E}(f_{best}^k) - f_{opt} \leq \frac{2\tilde{L}_f^2}{\sigma(k+1)}.$$

(b) 用 (8.56) 除以 $\frac{k(k+1)}{2}$ 可得

$$\sum_{n=0}^k \alpha_n^k (\mathbf{E}(f(\mathbf{x}^n)) - f_{opt}) \leq \frac{2\tilde{L}_f^2}{\sigma(k+1)}.$$

由 $(\alpha_n^k)_{n=0}^k \in \Delta_{k+1}$, 根据 Jensen 不等式有

$$\mathbf{E}(f(\mathbf{x}^{(k)})) - f_{opt} = \mathbf{E} \left(f \left(\sum_{n=0}^k \alpha_n^k \mathbf{x}^n \right) \right) - f_{opt} \leq \sum_{n=0}^k \alpha_n^k (\mathbf{E}(f(\mathbf{x}^n)) - f_{opt}) \leq \frac{2\tilde{L}_f^2}{\sigma(k+1)}.$$

□

8.4 增量投影次梯度法

对于模型 (8.10), 若函数 $f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x})$. 则 (8.10) 转化为

$$\min \left\{ f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in C \right\}. \quad (8.58)$$

在假设 8.7 的基本假设下, 我们还做出如下假设:

假设 8.38. (a) 对于任意 $i = 1, 2, \dots, m$, 函数 f_i 是 proper 且闭凸的.

(b) 存在常数 $L > 0$, 使得对任意的 $\mathbf{x} \in C$ 且 $g \in \partial f_i(\mathbf{x}), i = 1, 2, \dots, m$, 有 $\|g\| \leq L$.

在例 8.36 中, 我们也考虑了相同的模型, 并分析了一种投影次梯度方法, 该方法沿着方向 $-f'_{i_k}(\mathbf{x}^k)$ 前进. 并且该例中, 索引 i_k 是通过均匀分布在 $\{1, 2, \dots, m\}$ 上的随机选择的, 自然的问题是, 当 i_k 以确定的顺序选择时, 是否可以获得相似的收敛结果. 我们将考虑按确定的循环顺序选择索引的变体方法, 称为增量投影次梯度法. 尽管分析更加复杂, 但我们仍然能够获得相似的收敛速率.

增量投影次梯度法的每次迭代分为多个子迭代. 令 \mathbf{x}^k 为第 k 次迭代向量. 我们定义 $\mathbf{x}^{k,0} = \mathbf{x}^k$, 并通过 $\mathbf{x}^{k,i+1} = P_C(\mathbf{x}^{k,i} - t_k \mathbf{g}^{k,i})$ 来生成 m 次子迭代 $\mathbf{x}^{k,1}, \mathbf{x}^{k,2}, \dots, \mathbf{x}^{k,m}$, 其中 $\mathbf{g}^{k,i} \in \partial f_{i+1}(\mathbf{x}^{k,i}), t_k > 0$ 为步长. 最终, 下一次迭代定义为 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^{k,m}$.

增量投影次梯度法

初始化: 任取 $\mathbf{x}^0 \in C$.

通用步骤: 对于 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

- (a) 令 $\mathbf{x}^{k,0} = \mathbf{x}^k$, 并选择步长 $t_k > 0$;
 (b) 对于 $i = 0, 1, \dots, m-1$, 计算

$$\mathbf{x}^{k,i+1} = P_C(\mathbf{x}^{k,i} - t_k \mathbf{g}^{k,i}),$$

其中 $\mathbf{g}^{k,i} \in \partial f_{i+1}(\mathbf{x}^{k,i})$;

- (c) 设置 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^{k,m}$.

为证明增量投影次梯度法的收敛性结果, 首先给出如下的引理, 该引理与引理 8.11 中的结果类似, 但证明过程更加复杂.

引理 8.39. (增量投影次梯度法的基本不等式). 若假设 8.7 和假设 8.38 成立, 并且序列 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 由具有正步长 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 的增量投影次梯度法生成. 则对于任意 $k \geq 0$,

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k(f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}}) + t_k^2 m^2 L^2. \quad (8.59)$$

证明: 对于任意 $\mathbf{x}^* \in X^*$, $k \geq 0$ 且 $i \in \{0, 1, \dots, m-1\}$,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}^{k,i+1} - \mathbf{x}^*\|^2 &= \|P_C(\mathbf{x}^{k,i} - t_k \mathbf{g}^{k,i}) - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &= \|P_C(\mathbf{x}^{k,i} - t_k \mathbf{g}^{k,i}) - P_C(\mathbf{x}^*)\|^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}^{k,i} - t_k \mathbf{g}^{k,i} - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &= \|\mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k \langle \mathbf{g}^{k,i}, \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^* \rangle + t_k^2 \|\mathbf{g}^{k,i}\|^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k \langle \mathbf{g}^{k,i}, \mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^* \rangle + t_k^2 L^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k(f_{i+1}(\mathbf{x}^{k,i}) - f_{i+1}(\mathbf{x}^*)) + t_k^2 L^2, \end{aligned}$$

第一个等号是由 $\mathbf{x}^{k,i+1}$ 的更新规则, 第二个等号是由 $\mathbf{x}^* = P_C(\mathbf{x}^*)$, 第一个不等号是根据正交投影算子的非扩张性 (定理 6.42(b)), 第二个不等号是由于 $\mathbf{g}^{k,i}$ 的一致有界性, 第三个不等号是根据次微分的定义.

将上式对 $i = 0, 1, \dots, m-1$ 进行求和, 并利用 $\mathbf{x}^{k,0} = \mathbf{x}^k$ 和 $\mathbf{x}^{k,m} = \mathbf{x}^{k+1}$, 我们可以得到对于任意 $\mathbf{x}^* \in X^*$,

$$\begin{aligned} &\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k \sum_{i=0}^{m-1} (f_{i+1}(\mathbf{x}^{k,i}) - f_{i+1}(\mathbf{x}^*)) + t_k^2 m L^2. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k \left(f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}} + \sum_{i=0}^{m-1} (f_{i+1}(\mathbf{x}^{k,i}) - f_{i+1}(\mathbf{x}^k)) \right) + t_k^2 mL^2 \\
&\leq \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k (f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}}) + 2t_k \left(\sum_{i=0}^{m-1} L \|\mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^k\| \right) + t_k^2 mL^2, \quad (8.60)
\end{aligned}$$

其中, 第一个等号是由于 $f(\mathbf{x}^k) = \sum_{i=0}^{m-1} f_{i+1}(\mathbf{x}^k)$, $f_{\text{opt}} = \sum_{i=0}^{m-1} f_{i+1}(\mathbf{x}^*)$, 第二个不等号是由于在假设 8.7 和假设 8.38 下, $C \subset \text{int}(\text{dom}(f)) \subset \text{int}(\text{dom}(f_{i+1}))$, 并且对任意的 $g \in \partial f_{i+1}(x)$, $x \in C$, 有 $\|g\| \leq L$, 因此, 由定理 3.61 有 f_{i+1} 在 C 上是 L -利普西茨的.

继续使用正交投影算子的非扩张性, 我们可以得到

$$\|\mathbf{x}^{k,1} - \mathbf{x}^k\| = \|P_C(\mathbf{x}^{k,0} - t_k \mathbf{g}^{k,0}) - P_C(\mathbf{x}^k)\| \leq t_k \|\mathbf{g}^{k,0}\| \leq t_k L,$$

同样地,

$$\|\mathbf{x}^{k,2} - \mathbf{x}^k\| = \|P_C(\mathbf{x}^{k,1} - t_k \mathbf{g}^{k,1}) - P_C(\mathbf{x}^k)\| \leq \|\mathbf{x}^{k,1} - \mathbf{x}^k\| + t_k \|\mathbf{g}^{k,1}\| \leq 2t_k L,$$

一般地, 对于任意的 $i = 0, 1, \dots, m-1$,

$$\|\mathbf{x}^{k,i} - \mathbf{x}^k\| \leq t_k i L,$$

则接着由 (8.59) 可得

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 &\leq \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k (f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}}) + 2t_k^2 \sum_{i=0}^{m-1} iL^2 + t_k^2 mL^2 \\
&= \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_k (f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}}) + t_k^2 m^2 L^2,
\end{aligned}$$

引理 8.39 由此证明完毕. \square

在此基础上, 我们可以使用与定理 8.25 和 8.30 中相同的方法进行证明, 得到以下结果, 出于完整性考虑, 这里给出详细的证明.

定理 8.40. (增量投影次梯度法的收敛性). 若假设 8.7 和假设 8.38 成立, 令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为由具有正步长 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 的增量投影次梯度法生成的序列, 且 $\{f_{\text{best}}^k\}_{k \geq 0}$ 为 (8.11) 中定义的最佳逼近值所产生的序列.

(a) 当 $k \rightarrow \infty$, 若 $\frac{\sum_{n=0}^k t_n^2}{\sum_{n=0}^k t_n} \rightarrow 0$, 则有 $f_{\text{best}}^k \rightarrow f_{\text{opt}}$.

(b) 假设 C 是紧集. 令 Θ 为 C 的半平方直径的上界:

$$\Theta \geq \max_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in C} \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2.$$

如果 $t_k = \frac{\sqrt{\Theta}}{Lm\sqrt{k+1}}$, 则对于所有 $k \geq 2$,

$$f_{\text{best}}^k - f_{\text{opt}} \leq \frac{\delta m L \sqrt{\Theta}}{\sqrt{k+2}},$$

其中 $\delta = 2(2 + \log(3))$.

证明: 根据引理 8.39, 对于任意 $n \geq 0$,

$$\|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|^2 - 2t_n(f(\mathbf{x}^n) - f_{\text{opt}}) + L^2 m^2 t_n^2, \quad (8.61)$$

将 (8.60) 对 $n = p, p+1, \dots, k$ 求和, 我们得到

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \|\mathbf{x}^p - \mathbf{x}^*\|^2 - 2 \sum_{n=p}^k t_n (f(\mathbf{x}^n) - f_{\text{opt}}) + L^2 m^2 \sum_{n=p}^k t_n^2. \quad (8.62)$$

因此,

$$2 \sum_{n=p}^k t_n (f(\mathbf{x}^n) - f_{\text{opt}}) \leq \|\mathbf{x}^p - \mathbf{x}^*\|^2 + L^2 m^2 \sum_{n=p}^k t_n^2,$$

从而得到

$$f_{\text{best}}^k - f_{\text{opt}} \leq \frac{\|\mathbf{x}^p - \mathbf{x}^*\|^2 + L^2 m^2 \sum_{n=p}^k t_n^2}{2 \sum_{n=p}^k t_n}.$$

将 $p = 0$ 代入上式, 我们能够得到

$$f_{\text{best}}^k - f_{\text{opt}} \leq \frac{\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + L^2 m^2 \sum_{n=0}^k t_n^2}{2 \sum_{n=0}^k t_n},$$

因此, 当 $k \rightarrow \infty$, 若 $\frac{\sum_{n=0}^k t_n^2}{\sum_{n=0}^k t_n} \rightarrow 0$, 则有 $f_{\text{best}}^k \rightarrow f_{\text{opt}}$, 即 (a) 得证. 为证 (b), 将 $p = \lceil k/2 \rceil$ 代入, 可以得到

$$f_{\text{best}}^k - f_{\text{opt}} \leq \frac{2\Theta + L^2 m^2 \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k t_n^2}{2 \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k t_n}.$$

取 $t_n = \frac{\sqrt{\Theta}}{Lm\sqrt{n+1}}$, 进而可得

$$f_{\text{best}}^k - f_{\text{opt}} \leq \frac{Lm\sqrt{\Theta}}{2} \cdot \frac{2 + \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}}{\sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}},$$

结合引理 8.27(b), 取 $D = 2$, 即可得所需结果. \square

8.5 对偶投影次梯度法

8.5.1 对偶问题

考虑以下优化问题:

$$\begin{aligned} f_{\text{opt}} &= \min f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } & g(\mathbf{x}) \leq 0, \\ & \mathbf{x} \in X, \end{aligned} \quad (8.63)$$

并且我们作出如下的假设:

假设 8.41. (A) $X \subseteq \mathbb{E}$ 是凸集.

(B) 函数 $f: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 是凸函数.

(C) $\mathbf{g}(\cdot) = (g_1(\cdot), g_2(\cdot), \dots, g_m(\cdot))^T$, 其中 $g_1, g_2, \dots, g_m: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 均为凸函数.

(D) 该问题具有有限的最优值, 记为 f_{opt} , 且其最优解集合 (记为 X^*) 非空.

(E) (Slater 条件) 存在一个点 $\bar{\mathbf{x}} \in X$ 满足 $g(\bar{\mathbf{x}}) < 0$.

(F) 对任意 $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}_+^m$, 问题 $\min_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T g(\mathbf{x})\}$ 存在最优解.

问题 (8.62) 的拉格朗日对偶目标函数为

$$q(\boldsymbol{\lambda}) = \min_{\mathbf{x} \in X} \{L(\mathbf{x}; \boldsymbol{\lambda}) \equiv f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T g(\mathbf{x})\}. \quad (8.64)$$

根据假设 8.41(F), (8.63) 中的极小化问题存在解, 因此, 是对任意 $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}_+^m$, $q(\boldsymbol{\lambda})$ 是有限的. 回想一下, q 在 \mathbb{R}_+^m 上是凹的 (仿射函数的极小化, 对任意的 $\alpha \in [0, 1]$, $\boldsymbol{\lambda}_1, \boldsymbol{\lambda}_2 \in \mathbb{R}_+^m$, 由

$$\begin{aligned} q(\alpha \boldsymbol{\lambda}_1 + (1 - \alpha) \boldsymbol{\lambda}_2) &= \min_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + (\alpha \boldsymbol{\lambda}_1 + (1 - \alpha) \boldsymbol{\lambda}_2)^T g(\mathbf{x})\} \\ &= \min_{\mathbf{x} \in X} \{\alpha(f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_1^T g(\mathbf{x})) + (1 - \alpha)(f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_2^T g(\mathbf{x}))\} \\ &\geq \min_{\mathbf{x} \in X} \left\{ \alpha(f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_1^T g(\mathbf{x})) + \min_{\mathbf{x} \in X} \{(1 - \alpha)(f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_2^T g(\mathbf{x}))\} \right\} \\ &= \alpha \min_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_1^T g(\mathbf{x})\} + (1 - \alpha) \min_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_2^T g(\mathbf{x})\} \\ &= \alpha q(\boldsymbol{\lambda}_1) + (1 - \alpha) q(\boldsymbol{\lambda}_2), \end{aligned}$$

故 q 在 \mathbb{R}_+^m 上是凹的), 因此对偶问题定义为

$$q_{\text{opt}} = \max \{q(\boldsymbol{\lambda}) : \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}_+^m\}, \quad (8.65)$$

这是一个凸优化问题, 因为它是在凸集合上最大化凹函数. 我们注意到, 对偶问题定义在空间 \mathbb{R}^m 中, 我们假设在此上下文中配备了点积和 l_2 -范数.

根据定理 A.1 和假设 8.41, 原问题 (8.62) 和对偶问题 (8.64) 之间存在强对偶性, 即

$$f_{\text{opt}} = q_{\text{opt}}, \quad (8.66)$$

且对偶问题的最优解可以达到. 我们将对偶问题的最优解集合记为 Λ^* .

定理 A.1(强对偶性定理). 考虑优化问题:

$$\begin{aligned} f_{\text{opt}} = \min_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x}) \quad \text{s.t.} \quad & g_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m, \\ & h_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = 1, 2, \dots, p, \\ & s_k(\mathbf{x}) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, q, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

其中 $X = P \cap C$, P 是一个凸多面体集, C 是一个凸集. 函数 $f, g_i, i = 1, 2, \dots, m : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, 0]$ 是凸函数, 并且它们的定义域满足 $X \subseteq \text{dom}(f)$, $X \subseteq \text{dom}(g_i), i = 1, 2, \dots, m$. 函数 $h_j, s_k, j = 1, 2, \dots, p, k = 1, 2, \dots, q$ 是仿射函数.

假设存在:

- (i) 一个可行解 \mathbf{x} 满足 $g_i(\mathbf{x}) < 0$, 对于所有 $i = 1, 2, \dots, m$;
- (ii) 一个向量满足所有仿射约束 $h_j(\mathbf{x}) \leq 0, j = 1, 2, \dots, p, s_k(\mathbf{x}) = 0, k = 1, 2, \dots, q$, 并且该向量在 $P \cap \text{ri}(C)$ 中.

那么, 如果问题 (A.1) 有一个有限的最优值, 则其对偶问题的最优值为

$$q_{\text{opt}} = \max\{q(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\mu}) : (\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\mu}) \in \text{dom}(-q)\},$$

其中 $q : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^q \rightarrow \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ 由下式给出

$$\begin{aligned} q(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\mu}) &= \min_{\mathbf{x} \in X} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\mu}) \\ &= \min_{\mathbf{x} \in X} \left\{ f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^p \nu_j h_j(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^q \mu_k s_k(\mathbf{x}) \right\}, \end{aligned}$$

并且原问题和对偶问题的最优值相同:

$$f_{\text{opt}} = q_{\text{opt}}.$$

在满足 Slater 条件 (即假设 8.41 的 (E)) 下, 对偶问题的一个有趣的性质是其上水平集具有有界性.

定理 8.42. (对偶目标函数的上水平集的有界性) 若假设 8.41 满足, 则存在 $\bar{\mathbf{x}} \in X$

满足 $g(\bar{\mathbf{x}}) < 0$, 并且令 $\mu \in \mathbb{R}$. 则对于任意 $\boldsymbol{\lambda} \in S_\mu \equiv \{\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}_+^m : q(\boldsymbol{\lambda}) \geq \mu\}$, 有

$$\|\boldsymbol{\lambda}\|_2 \leq \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - \mu}{\min_{j=1,2,\dots,m} \{-g_j(\bar{\mathbf{x}})\}}.$$

证明: 由 $\boldsymbol{\lambda} \in S_\mu$, 我们有

$$\mu \leq q(\boldsymbol{\lambda}) \leq f(\bar{\mathbf{x}}) + \boldsymbol{\lambda}^T g(\bar{\mathbf{x}}) = f(\bar{\mathbf{x}}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j g_j(\bar{\mathbf{x}}),$$

其中, 第一个不等号是由上水平集的定义, 第二个不等号是由

$$q(\boldsymbol{\lambda}) = \min_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T g(\mathbf{x})\}.$$

因此,

$$-\sum_{j=1}^m \lambda_j g_j(\bar{\mathbf{x}}) \leq f(\bar{\mathbf{x}}) - \mu,$$

由于对任意的 $j = 1, \dots, m$, 都有 $\lambda_j \geq 0$ 和 $g_j(\bar{\mathbf{x}}) < 0$, 所以

$$\sum_{j=1}^m \lambda_j \leq \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - \mu}{\min_{j=1,2,\dots,m} \{-g_j(\bar{\mathbf{x}})\}}.$$

最后, 由于 $\boldsymbol{\lambda} \geq 0$, 我们有 $\|\boldsymbol{\lambda}\|_2 \leq \sum_{j=1}^m \lambda_j$, 因此得证. \square

取 $\mu = f_{\text{opt}} = q_{\text{opt}}$, 我们有 $S_\mu = \Lambda^*$, 此时定理 8.42 可理解为对偶最优解集有界.

推论 8.43. (对偶最优解集合的有界性) 若假设 8.41 满足, 则存在 $\bar{\mathbf{x}} \in X$ 满足 $g(\bar{\mathbf{x}}) < 0$, 并且令 Λ^* 为对偶问题 (8.64) 的最优解集合. 则对于任意 $\boldsymbol{\lambda} \in \Lambda^*$, 有

$$\|\boldsymbol{\lambda}\|_2 \leq \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - f_{\text{opt}}}{\min_{j=1,2,\dots,m} \{-g_j(\bar{\mathbf{x}})\}}.$$

8.5.2 对偶投影次梯度法

首先回顾如何计算负的对偶目标函数的负值的次梯度. 根据例 3.7, 若对于给定的 $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}_+^m$, $q(\boldsymbol{\lambda})$ 在某个 $\mathbf{x}_\lambda \in X$ 处达到最小值, 即 $q(\boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}_\lambda) + \boldsymbol{\lambda}^T g(\mathbf{x}_\lambda)$, 则有 $-g(\mathbf{x}_\lambda) \in \partial(-q)(\boldsymbol{\lambda})$.

利用上述关于 $-q$ 次梯度的表达式, 可以定义在对偶问题上使用的投影次梯度法.

对偶投影次梯度法

初始化: 任取 $\boldsymbol{\lambda}^0 \in \mathbb{R}_+^m$.

通用步骤: 对于 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

- (a) 选择一个正数 γ_k ;
- (b) 计算 $\mathbf{x}^k \in \arg \min_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + (\boldsymbol{\lambda}^k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x})\}$;
- (c) 如果 $\mathbf{g}(\mathbf{x}^k) = 0$, 则终止并输出 \mathbf{x}^k ; 否则

$$\boldsymbol{\lambda}^{k+1} = \left[\boldsymbol{\lambda}^k + \gamma_k \frac{\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|_2} \right]_+.$$

步长 $\gamma_k / \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|_2$ 的形式类似于第 8.2.4 节中讨论的标准化步长. 条件 $\mathbf{g}(\mathbf{x}^k) = 0$ 保证 \mathbf{x}^k 是问题 (8.62) 的最优解, 这一点在以下引理中得到了证明.

引理 8.44. 若假设 8.41 成立. 令 $\bar{\boldsymbol{\lambda}} \in \mathbb{R}_+^m$, 并令 $\bar{\mathbf{x}} \in X$ 满足

$$\bar{\mathbf{x}} \in \arg \min_{\mathbf{x} \in X} \left\{ f(\mathbf{x}) + \bar{\boldsymbol{\lambda}}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) \right\} \quad (8.65)$$

且 $\mathbf{g}(\bar{\mathbf{x}}) = 0$. 则 $\bar{\mathbf{x}}$ 是原问题 (8.62) 的最优解.

证明: 令 \mathbf{x} 为问题 (8.62) 的一个任意可行点, 即 $\mathbf{x} \in X$ 且 $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0$. 则有

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &\geq f(\mathbf{x}) + \bar{\boldsymbol{\lambda}}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) \\ &\geq f(\bar{\mathbf{x}}) + \bar{\boldsymbol{\lambda}}^T \mathbf{g}(\bar{\mathbf{x}}) \\ &= f(\bar{\mathbf{x}}), \end{aligned}$$

第一个不等号是由于 $\bar{\boldsymbol{\lambda}} \geq 0, \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0$, 第二个不等号是由于 (8.65) 式, 最后一个等号是根据 $\mathbf{g}(\bar{\mathbf{x}}) = 0$. 从而证明了 $\bar{\mathbf{x}}$ 的最优性. \square

8.5.3 收敛性分析

在不同的参数 $\{\gamma_k\}_{k \geq 0}$ 选择下, 证明对偶目标函数序列 $\{q(\boldsymbol{\lambda}^k)\}_{k \geq 0}$ 的收敛性是比较简单的任务, 因为之前章节已经证明了这类结果. 一个更有趣的问题是是否可以证明某种意义上的原始序列的收敛性. 答案是肯定的, 但或许有些出人意料的是, 序列 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 并不是“正确的”原始序列. 我们将考虑以下两种可能的原始序列定义, 它们涉及对序列 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 的平均处理.

- (a) **全局平均序列.** 在这种情况下, 我们对所有迭代历史进行平均:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \sum_{n=0}^k \mu_n^k \mathbf{x}^n, \quad (8.67)$$

其中 μ_n^k 定义为

$$\mu_n^k = \frac{\gamma_n / \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)\|_2}{\sum_{j=0}^k \gamma_j / \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^j)\|_2}, \quad n = 0, 1, \dots, k. \quad (8.68)$$

(b) 部分平均序列. 在此种情况下, 在第 k 次迭代时, 我们仅对第 $\lceil k/2 \rceil, \lceil k/2 \rceil + 1, \dots, k$ 次迭代进行平均:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \eta_n^k \mathbf{x}^n, \quad (8.69)$$

其中 η_n^k 定义为

$$\eta_n^k = \frac{\gamma_n / \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)\|_2}{\sum_{j=\lceil k/2 \rceil}^k \gamma_j / \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^j)\|_2}, \quad n = \lceil k/2 \rceil, \dots, k. \quad (8.70)$$

我们的基本假设是该方法没有终止, 即对任意 $k, \mathbf{g}(\mathbf{x}^k) \neq 0$ 都成立.

引理 8.45. 若假设 8.41 成立, 并进一步假设存在 $L > 0$, 使得对于任意 $\mathbf{x} \in X$, 都有 $\|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|_2 \leq L$. 设 $\rho > 0$ 为任意正数, 令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 和 $\{\boldsymbol{\lambda}^k\}_{k \geq 0}$ 为由对偶投影次梯度法生成的序列. 那么对于任意 $k \geq 2$, 有

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}} + \rho \left\| [\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)})]_+ \right\|_2 \leq \frac{L (\|\boldsymbol{\lambda}^0\|_2 + \rho)^2 + \sum_{n=0}^k \gamma_n^2}{\sum_{n=0}^k \gamma_n}, \quad (8.71)$$

以及

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}} + \rho \left\| [\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)})]_+ \right\|_2 \leq \frac{L (\|\boldsymbol{\lambda}^{\lceil k/2 \rceil}\|_2 + \rho)^2 + \sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \gamma_n^2}{\sum_{n=\lceil k/2 \rceil}^k \gamma_n}, \quad (8.72)$$

其中 $\mathbf{x}^{(k)}$ 和 $\mathbf{x}^{(k)}$ 分别由 (8.66) 和 (8.68) 定义.

证明: 令 $\bar{\boldsymbol{\lambda}} \in \mathbb{R}_+^m$. 对于任意 $n \geq 0$, 有

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\lambda}^{n+1} - \bar{\boldsymbol{\lambda}}\|_2^2 &= \left\| \left[\boldsymbol{\lambda}^n + \gamma_n \frac{\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)\|_2} \right]_+ - [\bar{\boldsymbol{\lambda}}]_+ \right\|_2^2 \\ &\leq \left\| \boldsymbol{\lambda}^n + \gamma_n \frac{\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)\|_2} - \bar{\boldsymbol{\lambda}} \right\|_2^2 \\ &= \|\boldsymbol{\lambda}^n - \bar{\boldsymbol{\lambda}}\|_2^2 + \gamma_n^2 + \frac{2\gamma_n}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)\|_2} \mathbf{g}(\mathbf{x}^n)^T (\boldsymbol{\lambda}^n - \bar{\boldsymbol{\lambda}}), \end{aligned}$$

其中不等号利用了正交投影算子的非扩张性 (定理 6.42(b)). 令 $p \in \{0, 1, 2, \dots, k\}$, 将上述不等式在 $n = p, p+1, \dots, k$ 上求和, 得到

$$\|\boldsymbol{\lambda}^{k+1} - \bar{\boldsymbol{\lambda}}\|_2^2 \leq \|\boldsymbol{\lambda}^p - \bar{\boldsymbol{\lambda}}\|_2^2 + \sum_{n=p}^k \gamma_n^2 + 2 \sum_{n=p}^k \frac{\gamma_n}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)\|_2} \mathbf{g}(\mathbf{x}^n)^T (\boldsymbol{\lambda}^n - \bar{\boldsymbol{\lambda}}),$$

因此,

$$2 \sum_{n=p}^k \frac{\gamma_n}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)\|_2} \mathbf{g}(\mathbf{x}^n)^T (\bar{\boldsymbol{\lambda}} - \boldsymbol{\lambda}^n) \leq \|\boldsymbol{\lambda}^p - \bar{\boldsymbol{\lambda}}\|_2^2 + \sum_{n=p}^k \gamma_n^2. \quad (8.73)$$

为方便引理的证明, 对于任意 $p \in \{0, 1, \dots, k\}$, 定义

$$\mathbf{x}^{k,p} \equiv \sum_{n=p}^k \alpha_n^{k,p} \mathbf{x}^n, \quad (8.74)$$

其中

$$\alpha_n^{k,p} = \frac{\gamma_n / \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)\|_2}{\sum_{j=p}^k \gamma_j / \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^j)\|_2}.$$

特别地, 序列 $\{\mathbf{x}^{k,0}\}_{k \geq 0}$ 和 $\{\mathbf{x}^{k, \lceil k/2 \rceil}\}_{k \geq 0}$ 分别对应序列 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k \geq 0}$ 和 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k \geq 0}$. 利用上述关于 $\alpha_n^{k,p}$ 的定义, 以及 $\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)\|_2 \leq L$, 由不等式 (8.72) 可以得出

$$\begin{aligned} \sum_{n=p}^k \alpha_n^{k,p} \mathbf{g}(\mathbf{x}^n)^T (\bar{\boldsymbol{\lambda}} - \boldsymbol{\lambda}^n) &= \frac{\sum_{n=p}^k \frac{\gamma_n}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^n)\|_2} \mathbf{g}(\mathbf{x}^n)^T (\bar{\boldsymbol{\lambda}} - \boldsymbol{\lambda}^n)}{\sum_{j=p}^k \gamma_j / \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^j)\|_2} \\ &\leq \frac{L \|\boldsymbol{\lambda}^p - \bar{\boldsymbol{\lambda}}\|_2^2 + \sum_{n=p}^k \gamma_n^2}{\sum_{n=p}^k \gamma_n}. \end{aligned} \quad (8.75)$$

由 \mathbf{x}^n 的定义, 对于任意 $\mathbf{x}^* \in X^*$, 有

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}^*) &\geq f(\mathbf{x}^*) + (\boldsymbol{\lambda}^n)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) \\ &\geq f(\mathbf{x}^n) + (\boldsymbol{\lambda}^n)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^n), \end{aligned}$$

第一个不等号是由于 $\boldsymbol{\lambda}^n \geq 0, \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) \leq 0$, 第二个不等号是由于 $\mathbf{x}^n \in \arg \min_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + (\boldsymbol{\lambda}^n)^T \mathbf{g}(\mathbf{x})\}$. 因此,

$$-(\boldsymbol{\lambda}^n)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^n) \geq f(\mathbf{x}^n) - f_{\text{opt}},$$

由此得到

$$\begin{aligned} \sum_{n=p}^k \alpha_n^{k,p} \mathbf{g}(\mathbf{x}^n)^T (\bar{\boldsymbol{\lambda}} - \boldsymbol{\lambda}^n) &\geq \sum_{n=p}^k \alpha_n^{k,p} \mathbf{g}(\mathbf{x}^n)^T \bar{\boldsymbol{\lambda}} + \sum_{n=p}^k \alpha_n^{k,p} f(\mathbf{x}^n) - \sum_{n=p}^k \alpha_n^{k,p} f_{\text{opt}} \\ &\geq \bar{\boldsymbol{\lambda}}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^{k,p}) + f(\mathbf{x}^{k,p}) - f_{\text{opt}}, \end{aligned} \quad (8.76)$$

第二个不等号利用 Jensen 不等式 (f 和 \mathbf{g} 的各分量均为凸函数) 以及 $\mathbf{x}^{k,p}$ 的定义 (8.73) 可得. 结合不等式 (8.74) 和 (8.75), 并利用关系 $\|\boldsymbol{\lambda}^p - \bar{\boldsymbol{\lambda}}\|_2 \leq \|\boldsymbol{\lambda}^p\|_2 + \|\bar{\boldsymbol{\lambda}}\|_2$, 我们得到

$$f(\mathbf{x}^{k,p}) - f_{\text{opt}} + \bar{\boldsymbol{\lambda}}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^{k,p}) \leq \frac{L (\|\boldsymbol{\lambda}^p\|_2 + \|\bar{\boldsymbol{\lambda}}\|_2)^2 + \sum_{n=p}^k \gamma_n^2}{\sum_{n=p}^k \gamma_n}. \quad (8.77)$$

将

$$\bar{\lambda} = \begin{cases} \frac{\rho[\mathbf{g}(\mathbf{x}^{k,p})]_+}{\|[\mathbf{g}(\mathbf{x}^{k,p})]_+\|_2}, & \text{若 } [\mathbf{g}(\mathbf{x}^{k,p})]_+ \neq 0, \\ 0, & \text{若 } [\mathbf{g}(\mathbf{x}^{k,p})]_+ = 0, \end{cases}$$

代入 (8.76), 得到

$$f(\mathbf{x}^{k,p}) - f_{\text{opt}} + \rho \left\| [\mathbf{g}(\mathbf{x}^{k,p})]_+ \right\|_2 \leq \frac{L (\|\boldsymbol{\lambda}^p\|_2 + \rho)^2 + \sum_{n=p}^k \gamma_n^2}{\sum_{n=p}^k \gamma_n}, \quad (8.78)$$

将 $p = 0$ 和 $p = \lceil k/2 \rceil$ 代入 (8.77), 即可分别得到不等式 (8.70) 和 (8.71). \square

全局平均序列分析我们首先开发由 (8.66) 所给出的序列 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k \geq 0}$ 的收敛速度. 与原始投影次梯度的分析类似, 选择 $\gamma_k = \frac{1}{\sqrt{k+1}}$ 将意味着 (8.70) 的右侧将收敛到零. 原则上, (8.70) 的左侧收敛到零并不一定意味着函数值中最优距离的表达式 $f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}}$ 和约束违反的表达式 $\|[\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)})]_+\|_2$ 都收敛到零. 但是, 使用定理 3.60, 只要适当选择 ρ , 我们就可以证明这些项的收敛性.

定理 8.46. (全局平均序列的收敛速度 $O(\log(k)/\sqrt{k})$) 若假设 8.41 成立, 并进一步假设存在 $L > 0$, 使得对于任意 $\mathbf{x} \in X$, 都有 $\|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|_2 \leq L$. 令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 和 $\{\boldsymbol{\lambda}^k\}_{k \geq 0}$ 为对偶投影次梯度法生成的序列, 其中 $\gamma_k = \frac{1}{\sqrt{k+1}}$. 那么对于任意 $k \geq 1$,

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}} \leq \frac{L (\|\boldsymbol{\lambda}^0\|_2 + 2\alpha)^2 + 1 + \log(k+1)}{2\sqrt{k+1}}, \quad (8.79)$$

$$\|[\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)})]_+\|_2 \leq \frac{L (\|\boldsymbol{\lambda}^0\|_2 + 2\alpha)^2 + 1 + \log(k+1)}{2\alpha\sqrt{k+1}}, \quad (8.80)$$

其中 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k \geq 0}$ 在 (8.66) 中给出并且

$$\alpha = \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - f_{\text{opt}}}{\min_{j=1,2,\dots,m} \{-g_j(\bar{\mathbf{x}})\}},$$

其中 $\bar{\mathbf{x}}$ 是一个 Slater 点, 它的存在性由假设 8.41(E) 保证.

证明: 利用引理 8.45 带有 $\rho = 2\alpha$, 并将 $\gamma_n = \frac{1}{\sqrt{n+1}}$ 代入得到

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}} + 2\alpha \|[\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)})]_+\|_2 \leq \frac{L (\|\boldsymbol{\lambda}^0\|_2 + 2\alpha)^2 + \sum_{n=0}^k \frac{1}{n+1}}{2 \sum_{n=0}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}}. \quad (8.81)$$

利用引理 8.27(a) 有

$$\text{引理 8.27(a). } \frac{D + \sum_{n=0}^k \frac{1}{n+1}}{\sum_{n=0}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}} \leq \frac{D+1+\log(k+1)}{\sqrt{k+1}}.$$

$$\frac{(\|\boldsymbol{\lambda}^0\|_2 + 2\alpha)^2 + \sum_{n=0}^k \frac{1}{n+1}}{\sum_{n=0}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}} \leq \frac{(\|\boldsymbol{\lambda}^0\|_2 + 2\alpha)^2 + 1 + \log(k+1)}{\sqrt{k+1}},$$

与(8.81)结合, 得出不等式

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}} + 2\alpha \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)})\|_+ \leq \frac{L(\|\boldsymbol{\lambda}^0\|_2 + 2\alpha)^2 + 1 + \log(k+1)}{2\sqrt{k+1}}. \quad (8.82)$$

根据推论 8.43, 2α 是任意对偶最优解的两倍 l_2 范数的上界, 因此根据定理 3.60, 不等式(8.82)蕴涵两个不等式(8.79)和(8.80).

推论 8.43.

$$\|\boldsymbol{\lambda}\|_2 \leq \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - f_{\text{opt}}}{\min_{j=1,2,\dots,m} \{-g_j(\bar{\mathbf{x}})\}}.$$

定理 3.60. 令 $f, g_1, \dots, g_m : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 为凸函数, $X \subseteq \mathbb{E}$ 为非空凸集, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$. 设 f_{opt} 和 q_{opt} 分别为原问题和对偶问题的最优值. 若 $f_{\text{opt}} = q_{\text{opt}} \in (-\infty, \infty)$ 以及对偶问题的最优集是非空的. 令 (y^*, z^*) 为对偶问题的最优解. 假设 $\tilde{\mathbf{x}} \in X$ 满足

$$f(\tilde{\mathbf{x}}) - f_{\text{opt}} + \rho_1 \|\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{x}})\|_+ + \rho_2 \|\mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{b}\|_2 \leq \delta,$$

其中 $\delta > 0$, $\rho_1 \geq 2\|y^*\|_2$, $\rho_2 \geq 2\|z^*\|_2$. 那么

$$f(\tilde{\mathbf{x}}) - f_{\text{opt}} \leq \delta, \quad \|\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{x}})\|_+ \leq \frac{2}{\rho_1} \delta, \quad \|\mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{b}\|_2 \leq \frac{2}{\rho_2} \delta.$$

证毕. □

部分平均序列分析

现在, 我们将展示函数值的 $O(1/\sqrt{k})$ 收敛速度以及 (8.68) 给出的部分平均序列的约束违反. 证明类似于定理 8.46 的证明, 利用不等式 (8.71), 但此外还利用了对偶变量序列的有界性——这一事实在下一个引理中得到证实.

引理 8.47. 若假设 8.41 成立, 并进一步假设存在 $L > 0$, 使得对于任意 $\mathbf{x} \in X$, 都有 $\|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|_2 \leq L$. 令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 和 $\{\boldsymbol{\lambda}^k\}_{k \geq 0}$ 分别为对偶投影次梯度法生成的序列, 其中正步长 γ_k 满足对所有 $k \geq 0$, 都有 $\gamma_k \leq \gamma_0$. 那么

$$\|\boldsymbol{\lambda}^k\|_2 \leq M, \quad (8.83)$$

其中

$$M = \left\{ \|\boldsymbol{\lambda}^0\|_2 + 2\alpha, \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - q_{\text{opt}}}{\beta} + \frac{\gamma_0 L}{2\beta} + 2\alpha + \gamma_0 \right\}, \quad (8.84)$$

这里

$$\alpha = \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - f_{\text{opt}}}{\min_{j=1,2,\dots,m} \{-g_j(\bar{\mathbf{x}})\}}, \quad \beta = \min_{j=1,2,\dots,m} \{-g_j(\bar{\mathbf{x}})\},$$

其中 $\bar{\mathbf{x}}$ 是问题 (8.62) 的 Slater 点, 它的存在性由假设 8.41(E) 保证.

证明: 令 $\boldsymbol{\lambda}^*$ 是对偶问题 (8.64) 的最优解. 我们首先通过 k 的归纳法证明对于任意 $k \geq 0$,

$$\|\boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2 \leq \max \left\{ \|\boldsymbol{\lambda}^0 - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2, \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - q_{\text{opt}}}{\beta} + \frac{\gamma_0 L}{2\beta} + \|\boldsymbol{\lambda}^*\|_2 + \gamma_0 \right\}. \quad (8.85)$$

对于 $k = 0$. 不等式显然成立. 假设它对 k 成立, 我们将证明它对 $k + 1$ 成立. 接下来我们将考虑两种情况.

Case I. 假设 $q(\boldsymbol{\lambda}^k) \geq q_{\text{opt}} - \frac{\gamma_k L}{2}$. 那么, $\boldsymbol{\lambda}^k \in S_{q_{\text{opt}} - \frac{\gamma_k L}{2}} \equiv \{\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}_+^m : q(\boldsymbol{\lambda}^k) \geq q_{\text{opt}} - \frac{\gamma_k L}{2}\}$, 根据定理 8.42 (对偶目标函数上水平集有界),

$$\|\boldsymbol{\lambda}^k\|_2 \leq \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - q_{\text{opt}} + \frac{\gamma_k L}{2}}{\beta},$$

其中 $\beta = \min_{i=1,2,\dots,m} \{-g_i(\bar{\mathbf{x}})\}$. 因此,

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\lambda}^{k+1} - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2 &= \left\| \left[\boldsymbol{\lambda}^k + \frac{\gamma_k}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|_2} \mathbf{g}(\mathbf{x}^k) \right]_+ - \boldsymbol{\lambda}^* \right\|_2 \quad (\text{定义}) \\ &\leq \left\| \boldsymbol{\lambda}^k + \frac{\gamma_k}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|_2} \mathbf{g}(\mathbf{x}^k) - \boldsymbol{\lambda}^* \right\|_2 \\ &\leq \|\boldsymbol{\lambda}^k\|_2 + \|\boldsymbol{\lambda}^*\|_2 + \gamma_k \quad (\text{三角不等式}) \\ &\leq \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - q_{\text{opt}}}{\beta} + \frac{\gamma_k L}{2\beta} + \|\boldsymbol{\lambda}^*\|_2 + \gamma_k \quad (\text{对偶目标函数上水平集有界}) \\ &\leq \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - q_{\text{opt}}}{\beta} + \frac{\gamma_0 L}{2\beta} + \|\boldsymbol{\lambda}^*\|_2 + \gamma_0. \quad (\gamma_k \leq \gamma_0) \end{aligned}$$

Case II. 现在假设 $q(\boldsymbol{\lambda}^k) < q_{\text{opt}} - \frac{\gamma_k L}{2}$. 在这种情况下, 可以写

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\lambda}^{k+1} - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2^2 &= \left\| \left[\boldsymbol{\lambda}^k + \frac{\gamma_k}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|_2} \mathbf{g}(\mathbf{x}^k) \right]_+ - \boldsymbol{\lambda}^* \right\|_2^2 \\ &\leq \left\| \boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^* + \frac{\gamma_k}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|_2} \mathbf{g}(\mathbf{x}^k) \right\|_2^2 \quad (8.86) \\ &= \|\boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2^2 + 2 \frac{\gamma_k}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|_2} (\boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^k) + \gamma_k^2. \end{aligned}$$

例 3.7. $-\mathbf{g}(\mathbf{x}_0) \in \partial(-q)(\boldsymbol{\lambda}_0)$.

因为 $-\mathbf{g}(\mathbf{x}^k) \in \partial(-q)(\boldsymbol{\lambda}^k)$ (例 3.7), 由次梯度不等式可知

$$-q_{\text{opt}} \geq -q(\boldsymbol{\lambda}^k) - \mathbf{g}(\mathbf{x}^k)^T(\boldsymbol{\lambda}^* - \boldsymbol{\lambda}^k). \quad (-q \text{ 是凸函数})$$

因此, 将上式代入(8.86),

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\lambda}^{k+1} - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2^2 &\leq \|\boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2^2 + 2\frac{\gamma_k}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|_2}(q(\boldsymbol{\lambda}^k) - q_{\text{opt}}) + \gamma_k^2 \\ &= \|\boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2^2 + 2\frac{\gamma_k}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|_2}\left(q(\boldsymbol{\lambda}^k) - q_{\text{opt}} + \frac{\gamma_k\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|_2}{2}\right) \\ &\leq \|\boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2^2 + 2\frac{\gamma_k}{\|\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\|_2}\left(q(\boldsymbol{\lambda}^k) - q_{\text{opt}} + \frac{\gamma_k L}{2}\right) \quad (\|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|_2 \leq L) \\ &< \|\boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2^2, \end{aligned}$$

在最后一个不等式中, 我们使用了假设 $q(\boldsymbol{\lambda}^k) < q_{\text{opt}} - \frac{\gamma_k L}{2}$. 现在我们可以使用归纳假设并得出结论

$$\|\boldsymbol{\lambda}^{k+1} - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2 \leq \max\left\{\|\boldsymbol{\lambda}^0 - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2, \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - q_{\text{opt}}}{\beta} + \frac{\gamma_0 L}{2\beta} + \|\boldsymbol{\lambda}^*\|_2 + \gamma_0\right\}.$$

这样, 我们就证明了 (8.85) 对所有 $k \geq 0$ 的有效性. 现在, 结果 (8.83) 可以通过回顾推论 8.43 得出, $\|\boldsymbol{\lambda}^*\|_2 \leq \alpha$, 因此

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\lambda}^k\|_2 &= \|\boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^* + \boldsymbol{\lambda}^*\|_2 \\ &\leq \|\boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2 + \|\boldsymbol{\lambda}^*\|_2 \quad (\text{三角不等式}) \\ &\leq \max\left\{\|\boldsymbol{\lambda}^0 - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2, \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - q_{\text{opt}}}{\beta} + \frac{\gamma_0 L}{2\beta} + \|\boldsymbol{\lambda}^*\|_2 + \gamma_0\right\} + \|\boldsymbol{\lambda}^*\|_2 \\ &\leq \max\left\{\|\boldsymbol{\lambda}^0\|_2 + 2\alpha, \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - q_{\text{opt}}}{\beta} + \frac{\gamma_0 L}{2\beta} + 2\alpha + \gamma_0\right\}. \quad (\|\boldsymbol{\lambda}^*\|_2 \leq \alpha) \end{aligned}$$

证毕. □

有了对偶变量序列的上界, 我们可以使用与定理 8.46 证明中类似的论证, 证明由对偶投影次梯度方法生成的部分平均序列具有 $O(1/\sqrt{k})$ 的收敛速度.

定理 8.48. (部分平均序列的收敛速度 $O(1/\sqrt{k})$) 若假设 8.41 成立, 并进一步假设存在 $L > 0$, 使得对于任意 $\mathbf{x} \in X$, 都有 $\|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|_2 \leq L$, 令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 和 $\{\boldsymbol{\lambda}^k\}_{k \geq 0}$ 为对偶投影次梯度法生成的序列, 其中 $\gamma_k = \frac{1}{\sqrt{k+1}}$. 那么对于任意 $k \geq 2$,

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}} \leq \frac{2L((M + 2\alpha)^2 + \log(3))}{\sqrt{k} + 2}, \quad (8.87)$$

$$\|[\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)})]_+\|_2 \leq \frac{2L((M + 2\alpha)^2 + \log(3))}{\alpha\sqrt{k} + 2}, \quad (8.88)$$

其中 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k \geq 0}$ 在 (8.68) 给出, M 在 (8.84) 中给出, 以及

$$\alpha = \frac{f(\bar{\mathbf{x}}) - f_{\text{opt}}}{\min_{j=1,2,\dots,m} \{-g_j(\bar{\mathbf{x}})\}},$$

其中 $\bar{\mathbf{x}}$ 是一个 Slater 点, 它的存在性由假设 8.41(E) 保证.

证明: 利用引理 8.45 带有 $\rho = 2\alpha$, 并将 $\gamma_n = \frac{1}{\sqrt{n+1}}$ 代入得到

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}} + 2\alpha \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)})\|_+ &\leq \frac{L(\|\boldsymbol{\lambda}^{[k/2]}\|_2 + 2\alpha)^2 + \sum_{n=[k/2]}^k \frac{1}{n+1}}{2 \sum_{n=[k/2]}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}} \\ &\leq \frac{L(M + 2\alpha)^2 + \sum_{n=[k/2]}^k \frac{1}{n+1}}{2 \sum_{n=[k/2]}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}}, \quad (\|\boldsymbol{\lambda}^k\|_2 \leq M) \end{aligned} \quad (8.89)$$

在最后一个不等式中, 我们使用了引理 8.47 中给出的对偶迭代的界限. 现在, 使用引理 8.27(b), 我们有

引理 8.27b. $\frac{D + \sum_{n=[k/2]}^k \frac{1}{n+1}}{\sum_{n=[k/2]}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}} \leq \frac{4(D + \log(3))}{\sqrt{k+2}}.$

$$\frac{(M + 2\alpha)^2 + \sum_{n=[k/2]}^k \frac{1}{n+1}}{\sum_{n=[k/2]}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}} \leq \frac{4((M + 2\alpha)^2 + \log(3))}{\sqrt{k+2}},$$

结合 (8.89) 式得到

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}} + 2\alpha \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)})\|_+ \leq \frac{2L((M + 2\alpha)^2 + \log(3))}{\sqrt{k+2}}. \quad (8.90)$$

根据推论 8.43, 2α 是任意对偶最优解的两倍 l_2 范数的上界, 所以根据定理 3.60, 不等式 (8.90) 蕴涵两个不等式 (8.87) 和 (8.88). \square

为了推导出对偶投影次梯度法的复杂度结果, 我们首先应该注意到原始序列是不可行的, 因为它不一定满足不等式约束 $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0$. 因此, 询问需要多少次迭代才能获得 ε -最优解是没有意义的. 相反, 我们将考虑 ε -最优和可行解的相关概念. 一个向量 $\mathbf{x} \in X$ 被称为问题 (8.62) 的 ε -最优和可行解, 如果有 $f(\mathbf{x}) - f_{\text{opt}} \leq \varepsilon$ 且 $\|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|_+ \leq \varepsilon$. 定理 8.48 可以得出一个复杂度结果, 表明需要 $\frac{1}{\varepsilon^2}$ 次迭代才能获得 ε -最优和可行解.

推论 8.49. (对偶投影次梯度法的复杂度结果为 $O(1/\varepsilon^2)$). 在定理 8.48 的设定下, 如果 $k \geq 2$ 满足

$$k \geq \frac{4L^2((M + 2\alpha)^2 + \log(3))^2}{\min\{\alpha^2, 1\}\varepsilon^2} - 2, \quad (\text{A})$$

则

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}} &\leq \varepsilon, \\ \|\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)})_+\|_2 &\leq \varepsilon. \end{aligned}$$

证明：将上式 (A) 代入(8.87)和(8.88)即可容易得到。 □

例 8.50. (线性规划例子). 考虑线性规划问题

$$\begin{aligned} \min \quad & \mathbf{c}^T \mathbf{x} \\ \text{(LP) s.t.} \quad & \mathbf{A} \mathbf{x} \leq \mathbf{b}, \\ & \mathbf{x} \in \Delta_n, \quad (\Delta_n = \text{conv}\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n\}) \end{aligned}$$

其中 $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. 当基础集合 X 为 Δ_n 且 $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}$ 时, 我们将考虑对偶投影次梯度法. 向量 \mathbf{x}^k 由更新规则 $\mathbf{x}^k \in \text{argmin}_{\mathbf{x} \in \Delta_n} (\mathbf{c} + \mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda}^k)^T \mathbf{x}$ 计算得出. 很容易看出, 该子问题的最优解由 \mathbf{e}_i 给出, 其中 i 是 $(\mathbf{c} + \mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda}^k)_i$ 最小的下标. 因此, 算法 (其中 $\gamma_k = \frac{1}{\sqrt{k+1}}$) 采用以下形式

求解 (LP) 的对偶投影子梯度

- 初始化: 取 $\boldsymbol{\lambda}^0 \in \mathbb{R}_+^m$.
- 通用步骤 ($k \geq 0$):

$$\begin{aligned} i_k &\in \text{argmin}_{i=1,2,\dots,n} v_i; \quad \mathbf{v} = \mathbf{c} + \mathbf{A}^T \boldsymbol{\lambda}^k, \\ \mathbf{x}^k &= \mathbf{e}_{i_k}, \\ \boldsymbol{\lambda}^{k+1} &= \left[\boldsymbol{\lambda}^k + \frac{1}{\sqrt{k+1}} \frac{\mathbf{A} \mathbf{x}^k - \mathbf{b}}{\|\mathbf{A} \mathbf{x}^k - \mathbf{b}\|_2} \right]_+. \end{aligned}$$

注意, 我们隐含地假设 $\mathbf{A} \mathbf{x}^k \neq \mathbf{b}$. 上述对对偶投影次梯度法的描述说明了序列 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 不是“正确的”原始序列. 事实上, 在这种情况下, 向量 \mathbf{x}^k 始终是单位向量, 并且没有特别的理由说明为什么 (LP) 的解应该在单位向量处获得. 作为一个具体的例子, 考虑问题

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1 + 3x_2 + 2x_3 \\ \text{s.t.} \quad & 3x_1 + 2x_2 - x_3 \leq 1, \\ & -2x_3 \leq 2, \\ & x_1 + x_2 + x_3 = 1, \\ & x_1, x_2, x_3 \geq 0, \end{aligned} \tag{8.91}$$

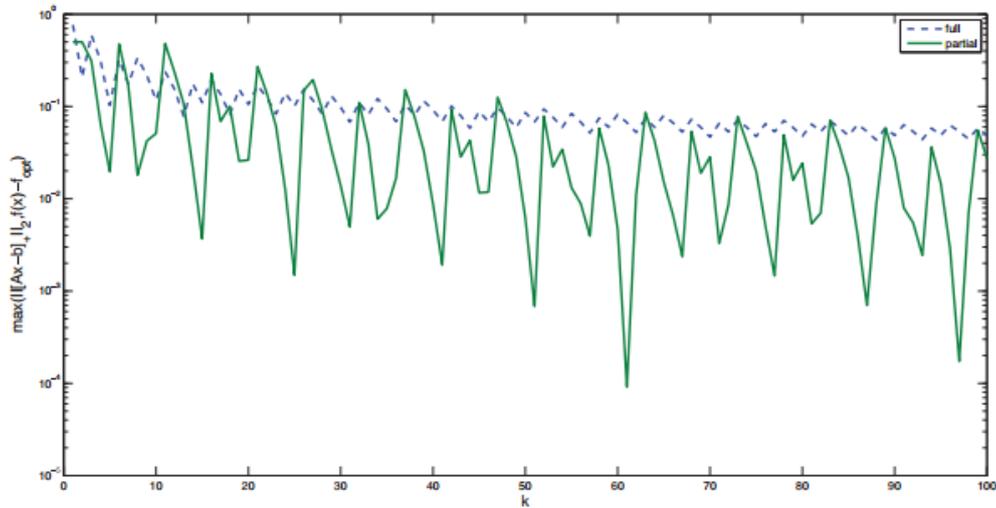


图 8.4 问题 (8.90) 上使用的对偶投影次梯度法的前 100 次迭代. y 轴 (以对数刻度) 描述数量 $\max\{f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}}, \|\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{b}\|_2\}$ 和 $\max\{f(\mathbf{x}^{(k)}) - f_{\text{opt}}, \|\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{b}\|_2\}$.

它符合问题 (LP) 带有

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

问题 (8.91) 的最优解是 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$. 我们采用了上面描述的对偶投影次梯度法, 其中 $\lambda^0 = \mathbf{0}$, 并比较了完全平均方案和部分平均方案在前 100 次迭代中的行为. 结果如图 8.4 所示. 显然, 与完全平均方案相比, 部分平均方案表现出了更优的行为. ■

8.5.4 例子-网络效用最大化

考虑一个网络, 它由源集合 $\mathcal{S} = \{1, 2, \dots, S\}$ 和链接集合 $\mathcal{L} = \{1, 2, \dots, L\}$ 组成, 其中链接 l 具有容量 c_l . 对于每个源 $s \in \mathcal{S}$, 我们用 $\mathcal{L}(s) \subseteq \mathcal{L}$ 表示源 s 使用的所有链接的集合. 类似地, 对于给定链接 $l \in \mathcal{L}$, 集合 $\mathcal{S}(l) \subseteq \mathcal{S}$ 包含使用链接 l 的所有源. 特别地, 对于一对 $l \in \mathcal{L}$ 和 $s \in \mathcal{S}$, 关系 $s \in \mathcal{S}(l)$ 当且仅当 $l \in \mathcal{L}(s)$ 成立. 每个源 $s \in \mathcal{S}$ 都与一个凹效用函数 $u_s : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 相关联, 这意味着如果源 s 以速率 x_s 发送数据, 它将获得效用 $u_s(x_s)$. 我们还假设源 s 的速率被限制在区间 $I_s = [0, M_s]$ 内, 其中 $M_s \in \mathbb{R}_{++}$. 网络效用最大化问题 (缩写为 NUM) 的目标是将源速率分配为以

下凸问题的最优解:

$$\begin{aligned} & \max \sum_{s \in \mathcal{S}} u_s(x_s) \\ & \text{s.t.} \quad \sum_{s \in \mathcal{S}(\ell)} x_s \leq c_\ell, \quad \ell \in \mathcal{L}, \\ & \quad \quad x_s \in I_s, \quad s \in \mathcal{S}. \end{aligned} \quad (8.92)$$

问题 (8.92) 的最小化形式是一个凸问题, 并且符合主模型 (8.62)

$$\begin{aligned} \mathbf{g}(\mathbf{x}) &= \left(\sum_{s \in \mathcal{S}(\ell)} x_s - c_\ell \right)_{\ell=1,2,\dots,L}, \\ X &= I_1 \times I_2 \times \cdots \times I_S, \\ f(\mathbf{x}) &= - \sum_{s=1}^S u_s(x_s), \end{aligned}$$

在迭代 k 时, 向量 \mathbf{x}^k 被选为问题 $\min_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + (\boldsymbol{\lambda}^k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x})\}$ 的最优解, 这意味着

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^k &\in \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + (\boldsymbol{\lambda}^k)^T \mathbf{g}(\mathbf{x})\} \\ &= \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in X} \left\{ - \sum_{s=1}^S u_s(x_s) + \sum_{\ell=1}^L \lambda_\ell^k \left[\sum_{s \in \mathcal{S}(\ell)} x_s - c_\ell \right] \right\} \\ &= \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in X} \left\{ - \sum_{s=1}^S u_s(x_s) + \sum_{\ell=1}^L \sum_{s \in \mathcal{S}(\ell)} \lambda_\ell^k x_s \right\} \\ &= \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in X} \left\{ - \sum_{s=1}^S u_s(x_s) + \sum_{s=1}^S \left[\sum_{\ell \in \mathcal{L}(s)} \lambda_\ell^k \right] x_s \right\}. \end{aligned}$$

上述最小化问题相对于决策变量 x_1, x_2, \dots, x_S 是可分离的. 因此, \mathbf{x}^k 的第 s 个元素可以通过更新规则 (返回最大值形式) 来选择,

$$x_s^k \in \operatorname{argmax}_{x_s \in I_s} \left\{ u_s(x_s) - \left[\sum_{\ell \in \mathcal{L}(s)} \lambda_\ell^k \right] x_s \right\}.$$

因此, 在问题 (8.92) 上采用的对偶投影次梯度法具有以下形式: 步长为 α_k , 初始化为 $\boldsymbol{\lambda}^0 = \mathbf{0}$. 请注意, 我们在这里不考虑标准化的步长 (实际上, 在许多实际场景中, 使用恒定的步长).

用于解决 NUM 问题 (8.92) 的对偶投影次梯度法

初始化: 定义 $\lambda_\ell^0 = 0$ 对所有 $\ell \in \mathcal{L}$. (A) **Source-rate** 更新:

$$x_s^k = \operatorname{argmax}_{x_s \in I_s} \left\{ u_s(x_s) - \left[\sum_{\ell \in \mathcal{L}(s)} \lambda_\ell^k \right] x_s \right\}, \quad s \in \mathcal{S}. \quad (8.93)$$

(B) **Link-price** 更新:

$$\lambda_\ell^{k+1} = \left[\lambda_\ell^k + \alpha_k \left(\sum_{s \in \mathcal{S}(\ell)} x_s^k - c_\ell \right) \right]_+, \quad \ell \in \mathcal{L}.$$

乘数 λ_ℓ^k 实际上可以看作与链接相关的价格. 上述算法可以按照以下方式以分布式方式实现:

- (a) 每个源 s 需要解决优化问题 (8.92), 该问题仅涉及其自己的效用函数 u_s 和与其使用的链接相关的乘数 (即价格), 即 $\lambda_\ell^k, \ell \in \mathcal{L}(s)$.
- (b) 每个链接 ℓ 的价格 (即乘数) 根据使用链接 ℓ 的源的费率进行更新, 即 $x_s, s \in \mathcal{S}(\ell)$.

因此, 该算法只需要源和链路之间的本地通信, 并且可以以分散的方式实现, 让源和链路按照上述源费率/价格链路更新方案协作寻求问题的最佳解决方案. 这是分布式优化方法的一个例子.

第 9 章 镜面下降法

本章专注于研究镜像下降方法及其一些变体. 该方法本质上是投影次梯度方法在非欧几里得设定中的推广. 因此, 本章我们自然不会假设基础空间是欧几里得空间.

9.1 从投影次梯度到镜面下降

考虑优化问题

$$(\mathbf{P}) \quad \min\{f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in C\}, \quad (9.1)$$

我们假设以下条件成立.¹

假设 9.1. (A) $f : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是 proper 闭凸函数.

(B) $C \subseteq \mathbb{E}$ 是非空闭凸集.

(C) $C \subseteq \text{int}(\text{dom}(f))$.

(D) 问题 (P) 的最优解集非空, 记为 X^* . 该问题的最优值记为 f_{opt} .

第八章研究了用于求解问题 (P) 的投影次梯度法. 在第八章的分析过程中使用的一个基本假设是基础空间是欧几里得空间, 即 $\|\cdot\| = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle}$. 回顾投影次梯度法的一般更新步骤, 其形式为

$$\mathbf{x}^{k+1} = P_C(\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k)), \quad f'(\mathbf{x}^k) \in \partial f(\mathbf{x}^k), \quad (9.2)$$

其中 t_k 是适当的步长. 在非欧几里得空间中, 更新规则 (9.2) 实际上存在一个“哲学性”问题——向量 x^k 和 $f'(x^k)$ 属于不同的空间; 一个属于 \mathbb{E} , 另一个属于 \mathbb{E}^* . 当然, 这个问题并不是真正的问题, 因为我们可以约定, 即 \mathbb{E} 和 \mathbb{E}^* 中的向量是相同的, 仅在每个空间的范数上有所不同. 然而, 这个问题是寻找更适合非欧几里得设置的投影次梯度方法推广的动机之一.

为了理解欧几里得范数在投影次梯度法定义中的作用, 我们考虑更新步骤 (9.2) 的以下重述:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|^2 \right\}, \quad (9.3)$$

这实际上表明 \mathbf{x}^{k+1} 是通过最小化目标函数的线性化加一个二次邻近项构造的. 欧

¹假设 9.1 与第八章中的假设 8.7 相同

几里得情况下 (9.2) 和 (9.3) 两种形式的等价性通过以下恒等式可得:

$$f(\mathbf{x}^k) + \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|^2 = \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x} - [\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k)]\|^2 + D,$$

其中 D 是常数 (即不依赖于 \mathbf{x}).

回到非欧几里得情况, 想法是用一种不同的距离代替 (9.3) 中的欧几里得“距离”函数 $\frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2$, 这种距离不基于欧几里得范数. 我们将使用的非欧几里得距离是 Bregman 距离.

定义 9.2 (Bregman 距离). 令 $\omega : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个 proper 闭凸函数, 并且在 $\text{dom}(\partial\omega)$ 上可微. 与 ω 相关联的 **Bregman 距离** 是函数 $B_\omega : \text{dom}(\omega) \times \text{dom}(\partial\omega) \rightarrow \mathbb{R}$, 其定义为

$$B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \omega(\mathbf{x}) - \omega(\mathbf{y}) - \langle \nabla\omega(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle.$$

关于 ω 的假设 (给定集合 C) 汇总如下.

假设 9.3 (ω 的性质). • ω 是 proper 闭凸函数.

- ω 在 $\text{dom}(\partial\omega)$ 上可微.
- $C \subseteq \text{dom}(\omega)$.
- $\omega + \delta_C$ 是 σ -强凸的 ($\sigma > 0$).

Bregman 距离实际上并不一定是距离. 它是非负的, 当且仅当其两个参数相同时为零, 但除此之外, 一般情况下它既不对称, 也不满足三角不等式. 以下引理总结了 Bregman 距离的性质.

引理 9.4. 假设 $C \subseteq E$ 是非空闭凸集, 并且 ω 满足假设 9.3 中的性质. 令 B_ω 是与 ω 相关联的 Bregman 距离. 那么:

(a) 对任意 $\mathbf{x} \in C, \mathbf{y} \in C \cap \text{dom}(\partial\omega)$, 有

$$B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \geq \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2.$$

(b) 对任意 $\mathbf{x} \in C, \mathbf{y} \in C \cap \text{dom}(\partial\omega)$, 有:

- $B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \geq 0$;
- $B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ 当且仅当 $\mathbf{x} = \mathbf{y}$.

证明: (a) 基于定理 5.24(ii) 中描述的强凸函数的一阶特征. (b) 是 (a) 的直接结果. □

假设 $\mathbf{x}^k \in C \cap \text{dom}(\partial\omega)$, 将公式 (9.3) 中的二次欧几里得距离项 $\frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|^2$ 替

换为 Bregman 距离 $B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^k)$, 得到以下更新步骤:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{t_k} B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^k) \right\}. \quad (9.4)$$

省略常数项后, 公式 (9.4) 可简化为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \left\{ \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + \frac{1}{t_k} B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^k) \right\}. \quad (9.5)$$

可以利用以下简单的恒等式进一步简化该更新公式:

$$\begin{aligned} \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + \frac{1}{t_k} B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^k) &= \frac{1}{t_k} [\langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + \omega(\mathbf{x})] \\ &\quad - \underbrace{\frac{1}{t_k} \omega(\mathbf{x}^k) + \frac{1}{t_k} \langle \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^k \rangle}_{\text{常数项}}, \end{aligned}$$

因此, 镜像下降法的更新公式可以写成如下最简形式:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \left\{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + \omega(\mathbf{x}) \right\}.$$

现在我们定义镜像下降法.

镜像下降方法

初始化: 选取 $\mathbf{x}_0 \in C \cap \text{dom}(\partial\omega)$.

步骤: 对于每个 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下操作:

- (a) 选取步长 $t_k > 0$, 并选择一个次梯度 $f'(\mathbf{x}^k) \in \partial f(\mathbf{x}^k)$;
- (b) 更新:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \left\{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + \omega(\mathbf{x}) \right\}. \quad (9.6)$$

注 9.5. 尽管 (9.6) 是镜像下降方法更新步骤的最简形式, 但 (9.5) 也可以写成如下形式:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \left\{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^k) \right\}, \quad (9.7)$$

这一形式在分析中也很有用.

注 9.6. 定义 $\tilde{\omega} = \omega + \delta_C$, 可以将 (9.6) 写为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \left\{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + \tilde{\omega}(\mathbf{x}) \right\}. \quad (9.8)$$

由于 $\nabla \omega(\mathbf{x}^k) \in \partial \tilde{\omega}(\mathbf{x}^k)$, 可以将其写作 $\tilde{\omega}'(\mathbf{x}^k)$, 于是公式 (9.8) 可改写为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \left\{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \tilde{\omega}'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + \tilde{\omega}(\mathbf{x}) \right\}. \quad (9.9)$$

通过对式 (9.9) 使用共轭对应定理 (定理 5.26), 在假设满足适当性、闭性和强凸性条件下, 共轭函数 $\tilde{\omega}^*$ 是可微的. 结合共轭次梯度定理 (推论 4.21), 式 (9.9) 等价于镜像下降方法的以下公式:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \nabla \tilde{\omega}^* (\tilde{\omega}'(\mathbf{x}^k) - t_k f'(\mathbf{x}^k)).$$

镜像下降方法的基本步骤 (9.6) 的形式可写为:

$$\min_{\mathbf{x} \in C} \{ \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle + \omega(\mathbf{x}) \}, \quad (9.10)$$

其中 $\mathbf{a} \in \mathbb{E}^*$. 为了证明该方法是良定义的, 下述定理 9.8 说明了问题 (9.10) 的最优解是唯一且存在于 $C \cap \text{dom}(\partial\omega)$ 中. 这一点的重要性在于, 该方法需要在新迭代点上计算 ω 的梯度 (回顾 ω 在 $\text{dom}(\partial\omega)$ 上是可微的). 我们将证明一个更一般的引理, 它在其他场景中也有用.

引理 9.7. 假设以下条件成立:

- $\omega : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个 proper 闭凸函数, 并在 $\text{dom}(\partial\omega)$ 上可微;
- $\psi : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个 proper 闭凸函数, 满足 $\text{dom}(\psi) \subseteq \text{dom}(\omega)$;
- $\omega + \delta_{\text{dom}(\psi)}$ 是 σ -强凸的 ($\sigma > 0$).

则问题

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{ \psi(\mathbf{x}) + \omega(\mathbf{x}) \}, \quad (9.11)$$

的最优解是唯一的, 并且在 $\text{dom}(\psi) \cap \text{dom}(\partial\omega)$ 中.

证明: 问题 (9.11) 等价于

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \varphi(\mathbf{x}), \quad (9.12)$$

其中 $\varphi = \psi + \omega$. 由于 ψ 和 ω 都是闭的, φ 是闭的; 并且 $\text{dom}(\varphi) = \text{dom}(\psi) \neq \emptyset$, 所以 φ 是 proper 的. 由于 $\omega + \delta_{\text{dom}(\psi)}$ 是 σ -强凸的, 并且 ψ 是凸的, 它们的和 $\varphi = \psi + \omega + \delta_{\text{dom}(\psi)} = \psi + \omega$ 也是 σ -强凸的. 综上, φ 是适当的、闭的、且 σ -强凸的, 因此根据定理 5.25(a), 问题 (9.12) 在 $\text{dom}(\varphi) = \text{dom}(\psi)$ 中有唯一的最优解 \mathbf{x}^* . 为了证明 $\mathbf{x}^* \in \text{dom}(\partial\omega)$, 根据 Fermat 最优条件 (定理 3.63), $\mathbf{0} \in \partial\varphi(\mathbf{x}^*)$, 因此 $\partial\varphi(\mathbf{x}^*) \neq \emptyset$. 由于次梯度的加法法则 (定理 3.40), $\partial\varphi(\mathbf{x}^*) = \partial\psi(\mathbf{x}^*) + \partial\omega(\mathbf{x}^*)$, 因此 $\partial\omega(\mathbf{x}^*) \neq \emptyset$, 这意味着 $\mathbf{x}^* \in \text{dom}(\partial\omega)$. \square

镜像下降方法的良定义性可以直接从上述引理中推导出来.

定理 9.8 (镜像下降方法是良定义的). 假设 9.1 和假设 9.3 成立. 令 $\mathbf{a} \in \mathbb{E}^*$. 则问题

$$\min_{\mathbf{x} \in C} \{ \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle + \omega(\mathbf{x}) \}$$

有唯一的最优解, 并存在于 $C \cap \text{dom}(\partial\omega)$ 中.

证明：通过引理 9.7, 将 $\psi(\mathbf{x})$ 取为 $\langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle + \delta_C(\mathbf{x})$ 即得证. \square

以下是两种常见的强凸函数选择:

例 9.9 (平方欧几里得范数). 假设满足假设 9.1, 并且 \mathbb{E} 是欧几里得空间, 其范数满足 $\|\cdot\| = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle}$. 定义

$$\omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{x}\|^2.$$

显然, ω 满足假设 9.3 中的性质——它是 proper 的、闭的、且 1-强凸的. 由于 $\nabla\omega(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$, 镜像下降方法的一般更新步骤可写为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \left\{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \mathbf{x}^k, \mathbf{x} \rangle + \frac{1}{2} \|\mathbf{x}\|^2 \right\},$$

这与投影次梯度更新步骤相同: $\mathbf{x}^{k+1} = P_C(\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k))$. 这并不令人惊讶, 因为镜像下降方法是投影次梯度方法的推广.

例 9.10 (单位单纯形上的负熵). 假设满足假设 9.1, 其中 $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$, 赋予 l_1 范数, 且 $C = \Delta_n$. 取 ω 为非负正交体上定义的负熵:

$$\omega(\mathbf{x}) = \begin{cases} \sum_{i=1}^n x_i \log x_i, & \mathbf{x} \in \mathbb{R}_+^n, \\ \infty, & \text{其他情况.} \end{cases}$$

按照惯例, 规定 $0 \log 0 = 0$. 根据例 5.27, $\omega + \delta_{\Delta_n}$ 是关于 l_1 范数 1-强凸的. 在这种情况下,

$$\text{dom}(\partial\omega) = \mathbb{R}_{++}^n,$$

且 ω 在 $\text{dom}(\partial\omega)$ 上可微. 因此, 假设 9.3 的所有性质均满足. 与 ω 相关联的 Bregman 距离对于任意 $\mathbf{x} \in \Delta_n$ 和 $\mathbf{y} \in \Delta_n^+ \equiv \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}_{++}^n : \mathbf{e}^\top \mathbf{x} = 1\}$ 为:

$$\begin{aligned} B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \sum_{i=1}^n x_i \log x_i - \sum_{i=1}^n y_i \log y_i - \sum_{i=1}^n (\log y_i + 1)(x_i - y_i) \\ &= \sum_{i=1}^n x_i \log \frac{x_i}{y_i} + \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n x_i \\ &= \sum_{i=1}^n x_i \log \frac{x_i}{y_i}. \end{aligned} \quad (9.13)$$

这一表达式即所谓的 Kullback-Leibler 散度度量. 镜像下降方法的一般更新步骤形式为 (其中 $f'_i(\mathbf{x}^k)$ 是 $f'(\mathbf{x}^k)$ 的第 i 个分量):

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \Delta_n} \left\{ \sum_{i=1}^n (t_k f'_i(\mathbf{x}^k) - 1 - \log x_i^k) x_i + \sum_{i=1}^n x_i \log x_i \right\}. \quad (9.14)$$

根据例 3.71, 问题 (9.14) 的最优解为:

$$x_i^{k+1} = \frac{e^{\log x_i^k + 1 - t_k f'_i(\mathbf{x}^k)}}{\sum_{j=1}^n e^{\log x_j^k + 1 - t_k f'_j(\mathbf{x}^k)}}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

进一步化简可得

$$x_i^{k+1} = \frac{x_i^k e^{-t_k f'_i(\mathbf{x}^k)}}{\sum_{j=1}^n x_j^k e^{-t_k f'_j(\mathbf{x}^k)}}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

接着自然产生的问题是如何选择步长. 接下来的将展开的收敛分析将揭示这个问题可能的答案.

9.2 收敛性分析

9.2.1 工具箱

以下恒等式 (也称为三点引理) 在镜像下降的收敛性分析中起到了关键作用.

引理 9.11. (三点引理).⁵⁰ 设 $\omega : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是适定闭且凸的. 进一步假设 ω 在 $\text{dom}(\partial\omega)$ 上可微, 且 $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \text{dom}(\partial\omega)$, $\mathbf{c} \in \text{dom}(\omega)$. 则以下等式成立:

$$\langle \nabla\omega(\mathbf{b}) - \nabla\omega(\mathbf{a}), \mathbf{c} - \mathbf{a} \rangle = B_\omega(\mathbf{c}, \mathbf{a}) + B_\omega(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - B_\omega(\mathbf{c}, \mathbf{b}).$$

证明. 由 B_ω 的定义,

$$B_\omega(\mathbf{c}, \mathbf{a}) = \omega(\mathbf{c}) - \omega(\mathbf{a}) - \langle \nabla\omega(\mathbf{a}), \mathbf{c} - \mathbf{a} \rangle,$$

$$B_\omega(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \omega(\mathbf{a}) - \omega(\mathbf{b}) - \langle \nabla\omega(\mathbf{b}), \mathbf{a} - \mathbf{b} \rangle,$$

$$B_\omega(\mathbf{c}, \mathbf{b}) = \omega(\mathbf{c}) - \omega(\mathbf{b}) - \langle \nabla\omega(\mathbf{b}), \mathbf{c} - \mathbf{b} \rangle.$$

因此,

$$\begin{aligned} B_\omega(\mathbf{c}, \mathbf{a}) + B_\omega(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - B_\omega(\mathbf{c}, \mathbf{b}) &= -\langle \nabla\omega(\mathbf{a}), \mathbf{c} - \mathbf{a} \rangle - \langle \nabla\omega(\mathbf{b}), \mathbf{a} - \mathbf{b} \rangle + \langle \nabla\omega(\mathbf{b}), \mathbf{c} - \mathbf{b} \rangle \\ &= \langle \nabla\omega(\mathbf{b}) - \nabla\omega(\mathbf{a}), \mathbf{c} - \mathbf{a} \rangle. \end{aligned}$$

从而得证. □

另一个关键引理是将第二近端定理 (定理 6.39 P157) 扩展到非欧几里得距离的情况.

定理 9.12. (非欧几里得第二近端定理). 设

- $\omega : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个在 $\text{dom}(\partial\omega)$ 上可微的适定闭且凸的函数;
- $\psi : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个满足 $\text{dom}(\psi) \subseteq \text{dom}(\omega)$ 的适定闭且凸的函数;

⁵⁰三点引理由 Chen 和 Teboulle 在 [43] 中证明.

- $\omega + \delta_{\text{dom}(\psi)}$ 是 σ -强凸的 ($\sigma > 0$).

假设 $\mathbf{b} \in \text{dom}(\partial\omega)$, 定义 \mathbf{a} 如下

$$\mathbf{a} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{\psi(\mathbf{x}) + B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{b})\}. \quad (9.15)$$

则 $\mathbf{a} \in \text{dom}(\partial\omega)$, 且对于所有 $\mathbf{u} \in \text{dom}(\psi)$, 有

$$\langle \nabla\omega(\mathbf{b}) - \nabla\omega(\mathbf{a}), \mathbf{u} - \mathbf{a} \rangle \leq \psi(\mathbf{u}) - \psi(\mathbf{a}). \quad (9.16)$$

证明. 使用 B_ω 的定义, 式 (9.15) 可以重写为

$$\mathbf{a} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{\psi(\mathbf{x}) - \langle \nabla\omega(\mathbf{b}), \mathbf{x} \rangle + \omega(\mathbf{x})\}. \quad (9.17)$$

由引理 9.7 (P250) (将 $\psi(\mathbf{x}) - \langle \nabla\omega(\mathbf{b}), \mathbf{x} \rangle$ 替代 $\psi(\mathbf{x})$) 可知 $\mathbf{a} \in \text{dom}(\partial\omega)$. 根据费马最优性条件 (定理 3.63 P73), 可得存在 $\psi'(\mathbf{a}) \in \partial\psi(\mathbf{a})$, 使得

$$\psi'(\mathbf{a}) + \nabla\omega(\mathbf{a}) - \nabla\omega(\mathbf{b}) = 0$$

因此, 由次梯度不等式, 对于任意 $\mathbf{u} \in \text{dom}(\psi)$, 有

$$\langle \nabla\omega(\mathbf{b}) - \nabla\omega(\mathbf{a}), \mathbf{u} - \mathbf{a} \rangle = \langle \psi'(\mathbf{a}), \mathbf{u} - \mathbf{a} \rangle \leq \psi(\mathbf{u}) - \psi(\mathbf{a}),$$

从而得证. □

利用非欧几里得第二近端定理和三点引理, 我们可以建立镜面下降方法生成的序列所满足的基本不等式. 该不等式可以看作是引理 8.11 (P203) 的推广.

引理 9.13. (镜面下降的基本不等式). 假设假设 9.1 和 9.3 成立. 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是镜面下降方法生成的序列, 且步长 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 为正数. 那么对于任意 $\mathbf{x}^* \in \mathbf{X}^*$ 和 $k \geq 0$, 有

$$t_k(f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}}) \leq B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^k) - B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{k+1}) + \frac{t_k^2}{2\sigma} \|f'(\mathbf{x}^k)\|_*^2.$$

证明. 由 \mathbf{x}^{k+1} 的更新公式 (9.7 P250) 和非欧几里得第二近端定理 (定理 9.12), 将 $\mathbf{b} = \mathbf{x}^k$ 且 $\psi(\mathbf{x}) \equiv t_k \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + \delta_C(\mathbf{x})$ 代入 (因此 $\mathbf{a} = \mathbf{x}^{k+1}$), 对于任意 $\mathbf{u} \in C$ 有:

$$\langle \nabla\omega(\mathbf{x}^k) - \nabla\omega(\mathbf{x}^{k+1}), \mathbf{u} - \mathbf{x}^{k+1} \rangle \leq t_k \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{u} - \mathbf{x}^{k+1} \rangle. \quad (9.18)$$

根据三点引理 (令 $\mathbf{a} = \mathbf{x}^{k+1}$, $\mathbf{b} = \mathbf{x}^k$, $\mathbf{c} = \mathbf{u}$), 有

$$\langle \nabla\omega(\mathbf{x}^k) - \nabla\omega(\mathbf{x}^{k+1}), \mathbf{u} - \mathbf{x}^{k+1} \rangle = B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{k+1}) + B_\omega(\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{x}^k) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^k),$$

结合式 (9.18), 得到

$$B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{k+1}) + B_\omega(\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{x}^k) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^k) \leq t_k \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{u} - \mathbf{x}^{k+1} \rangle.$$

因此,

$$\begin{aligned}
& t_k \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^k - \mathbf{u} \rangle \\
& \leq B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^k) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{k+1}) - B_\omega(\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{x}^k) + t_k \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1} \rangle \\
& \stackrel{(*)}{\leq} B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^k) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{k+1}) - \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 + t_k \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1} \rangle \\
& = B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^k) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{k+1}) - \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 + \left\langle \frac{t_k}{\sqrt{\sigma}} f'(\mathbf{x}^k), \sqrt{\sigma}(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1}) \right\rangle \\
& \stackrel{(**)}{\leq} B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^k) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{k+1}) - \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 + \frac{t_k^2}{2\sigma} \|f'(\mathbf{x}^k)\|_*^2 + \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \\
& = B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^k) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{k+1}) + \frac{t_k^2}{2\sigma} \|f'(\mathbf{x}^k)\|_*^2
\end{aligned}$$

其中不等式 (*) 由引理 9.4(a) (P249) 和 (**) 由 Fenchel 不等式 (定理 4.6) (P88) 应用于函数 $\frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2$ (其共轭函数为 $\frac{1}{2}\|y\|_*^2$, 见第 4.4.15 节) 得出. 令 $\mathbf{u} = \mathbf{x}^*$ 并使用次梯度不等式, 得到

$$t_k(f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}}) \leq B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^k) - B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{k+1}) + \frac{t_k^2}{2\sigma} \|f'(\mathbf{x}^k)\|_*^2.$$

证毕. □

在 $B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^0)$ 在 C 上有界的假设下, 可以推导出序列中最佳函数值的一个有用上界, 其定义为

$$f_{\text{best}}^k \equiv \min_{n=0,1,\dots,k} f(\mathbf{x}^n). \quad (9.19)$$

引理 9.14. 假设假设 9.1 和 9.3 成立, 且 $\|f'(\mathbf{x})\|_* \leq L_f$ 对于所有 $\mathbf{x} \in C$ 成立, 其中 $L_f > 0$. 假设 $B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^0)$ 在 C 上有界, 定义 $\Theta(\mathbf{x}^0)$ 满足:

$$\Theta(\mathbf{x}^0) \geq \max_{\mathbf{x} \in C} B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^0).$$

设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为镜面下降方法生成的序列, 步长 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 为正数. 那么对于任意 $N \geq 0$, 有

$$f_{\text{best}}^N - f_{\text{opt}} \leq \frac{\Theta(\mathbf{x}^0) + \frac{L_f^2}{2\sigma} \sum_{k=0}^N t_k^2}{\sum_{k=0}^N t_k}, \quad (9.20)$$

其中 f_{best}^N 定义见式 (9.19).

证明. 令 $\mathbf{x}^* \in X^*$. 由引理 9.13 可知, 对于任意 $k \geq 0$, 有

$$t_k(f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}}) \leq B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^k) - B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{k+1}) + \frac{t_k^2}{2\sigma} \|f'(\mathbf{x}^k)\|_*^2. \quad (9.21)$$

对 $k = 0, 1, \dots, N$ 求和, 得到:

$$\sum_{k=0}^N t_k(f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}}) \leq B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) - B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{N+1}) + \sum_{k=0}^N \frac{t_k^2}{2\sigma} \|f'(\mathbf{x}^k)\|_*^2$$

$$\leq \Theta(\mathbf{x}^0) + \frac{L_f^2}{2\sigma} \sum_{k=0}^N t_k^2,$$

结合不等式 $(\sum_{k=0}^N t_k) (f_{\text{best}}^N - f_{\text{opt}}) \leq \sum_{k=0}^N t_k (f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}})$, 可得结果 (9.20). \square

9.2.2 固定迭代次数

首先通过固定迭代次数 N , 来推导“最优”步长的形式, 使 (9.20) 右侧达到最小值. 为此, 我们证明以下技术性引理.

引理 9.15. 问题的最优解

$$\min_{t_1, \dots, t_m > 0} \frac{\alpha + \beta \sum_{k=1}^m t_k^2}{\sum_{k=1}^m t_k}, \quad (9.22)$$

其中 $\alpha, \beta > 0$, 最优解为 $t_k = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta m}}$, $k = 1, 2, \dots, m$. 最优值为 $2\sqrt{\frac{\alpha\beta}{m}}$.

证明. 记 (9.22) 的目标函数为

$$\phi(\mathbf{t}) \equiv \frac{\alpha + \beta \sum_{k=1}^m t_k^2}{\sum_{k=1}^m t_k}.$$

注意到 ϕ 是一个对称函数, 即对于任意置换矩阵 $\mathbf{P} \in \Lambda_m$, $\phi(\mathbf{t}) = \phi(\mathbf{P}\mathbf{t})$. 由此可知, 如果问题 (9.22) 存在最优解, 则必定存在一个所有变量相等的最优解. 为证明这一点, 取任意最优解 \mathbf{t}^* 和置换矩阵 $\mathbf{P} \in \Lambda_m$, 由于 $\phi(\mathbf{P}\mathbf{t}^*) = \phi(\mathbf{t}^*)$, 因此 $\mathbf{P}\mathbf{t}^*$ 也是问题 (9.22) 的最优解. 因此, 由于 ϕ 在正交第一象限上是凸的⁵¹, 有

$$\frac{1}{m!} \sum_{\mathbf{P} \in \Lambda_m} \mathbf{P}\mathbf{t}^* = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} \mathbf{e}^T \mathbf{t} \\ \vdots \\ \mathbf{e}^T \mathbf{t} \end{pmatrix}$$

也是最优解, 这表明总是存在所有分量相等的最优解.

对于 $m = 3$, 向量 t 及其所有排列如下:

$$t = \begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{bmatrix}.$$

所有可能的排列:

$$\begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} t_1 \\ t_3 \\ t_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} t_2 \\ t_1 \\ t_3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} t_2 \\ t_3 \\ t_1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} t_3 \\ t_1 \\ t_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} t_3 \\ t_2 \\ t_1 \end{bmatrix}.$$

⁵¹ 见 [10, 例 7.18]

共有 $3! = 6$ 种排列方式.

计算:

$$\frac{1}{m!} \sum_{P \in \Lambda_m} Pt^*.$$

由于 t_1, t_2, t_3 在每个位置均匀出现 $(m-1)! = 2$ 次, 因此每一行的均值均为:

$$\frac{1}{3!} \sum_P Pt^* = \frac{1}{6} \sum_P Pt^* = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} t_1 + t_2 + t_3 \\ t_1 + t_2 + t_3 \\ t_1 + t_2 + t_3 \end{bmatrix}.$$

类似地, 对于一般的 m 维情况, 我们可以推广得到:

$$\frac{1}{m!} \sum_{P \in \Lambda_m} Pt^* = \frac{1}{m} \begin{bmatrix} e^\top t \\ \vdots \\ e^\top t \end{bmatrix}.$$

其中 $e^\top t = t_1 + t_2 + \cdots + t_m$.

[10 例 7.18] (二次-线性函数的凸性) 函数

$$\varphi(x_1, x_2) = \frac{x_1^2}{x_2}$$

在定义域 $\mathbb{R} \times \mathbb{R}_{++} = \{(x_1, x_2) \mid x_2 > 0\}$ 上是凸的.

证明. 函数 $\varphi(x_1, x_2)$ 的 Hessian 矩阵为

$$\nabla^2 \varphi(x_1, x_2) = 2 \begin{bmatrix} \frac{1}{x_2} & -\frac{x_1}{x_2^2} \\ -\frac{x_1}{x_2^2} & \frac{x_1^2}{x_2^3} \end{bmatrix}.$$

计算 Hessian 的迹和行列式:

$$\text{Tr}(\nabla^2 \varphi) = 2 \left(\frac{1}{x_2} + \frac{x_1^2}{x_2^3} \right) > 0,$$

$$\det(\nabla^2 \varphi) = 4 \left(\frac{1}{x_2} \cdot \frac{x_1^2}{x_2^3} - \left(\frac{x_1}{x_2^2} \right)^2 \right) = 0.$$

由于 Hessian 矩阵是半正定的, $\varphi(x_1, x_2)$ 是凸函数. □

定理 . 函数

$$g(x) = \frac{\|Ax + b\|^2}{c^\top x + d}$$

在其定义域 $D = \{x \in \mathbb{R}^n \mid c^T x + d > 0\}$ 上是凸的.

证明. 定义辅助函数

$$h(y, t) = \frac{\|y\|^2}{t}, \quad \text{其中 } (y, t) \in C = \{(y, t) \in \mathbb{R}^{m+1} \mid y \in \mathbb{R}^m, t > 0\}$$

首先, 证明 $h(y, t)$ 在 C 上是凸的. 注意到 $h(y, t)$ 可以写成

$$h(y, t) = \sum_{i=1}^m h_i(y, t), \quad \text{其中 } h_i(y, t) = \frac{y_i^2}{t}.$$

由 [10], 每个 $h_i(y, t)$ 均为凸函数, 因此其和 $h(y, t)$ 也是凸的.

接下来, 考虑仿射变换

$$y = Ax + b, \quad t = c^T x + d$$

由于仿射变换保持凸性, 函数

$$f(x) = h(Ax + b, c^T x + d)$$

在定义域 D 上仍然是凸的, 可证得 $\phi(t)$ 为凸函数. □

设 $P_1, P_2, \dots, P_{m!}$ 为所有排列矩阵, 计算所有排列后的 Pt^* 并取均值:

$$\frac{1}{m!} \sum_{i=1}^{m!} P_i t^*.$$

计算每个排列下的映射:

$$\phi(P_1 t^*) + \phi(P_2 t^*) + \dots + \phi(P_{m!} t^*).$$

由于 ϕ 是凸函数, 根据 **Jensen 不等式**, 有:

$$\phi \left(\frac{1}{m!} \sum_{i=1}^{m!} P_i t^* \right) \leq \frac{1}{m!} \sum_{i=1}^{m!} \phi(P_i t^*).$$

结合对称性, 我们可以得到:

$$\phi \left(\frac{1}{m} \sum_P P t^* \right) \leq \frac{1}{m} \sum_P \phi(P t^*).$$

因此, 问题 (9.22) 可以化简为 (令 $t_1 = t_2 = \dots = t_m = t$):

$$\min_{t>0} \frac{\alpha + \beta m t^2}{m t},$$

其最优解为 $t = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta m}}$, 从而问题 (9.22) 的最优解为 $t_k = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta m}}$, $k = 1, 2, \dots, m$. 将该值代入 ϕ , 得到最优值为 $2\sqrt{\frac{\alpha\beta}{m}}$. \square

利用引理 9.15 中的 $\alpha = \Theta(\mathbf{x}^0)$, $\beta = \frac{L_f^2}{2\sigma}$, $m = N + 1$, 我们得出 (9.20) 右侧的最小值在 $t_k = \sqrt{\frac{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma}{L_f^2(N+1)}}$ 处取得. 收敛率 $O(1/\sqrt{N})$ 可直接推导.

定理 9.16. (镜面下降方法在固定迭代次数下的 $O(1/\sqrt{N})$ 收敛率). 假设假设 9.1 和 9.3 成立, 且 $\|f'(\mathbf{x})\|_* \leq L_f$ 对于所有 $\mathbf{x} \in C$ 成立, 其中 $L_f > 0$. 假设 $B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^0)$ 在 C 上有界, 且 $\Theta(\mathbf{x}^0)$ 满足:

$$\Theta(\mathbf{x}^0) \geq \max_{\mathbf{x} \in C} B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^0).$$

设 N 为正整数, $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为镜面下降方法生成的序列, 其中步长定义为

$$t_k = \frac{\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma}}{L_f\sqrt{N+1}}, \quad k = 0, 1, \dots, N. \quad (9.23)$$

则有

$$f_{\text{best}}^N - f_{\text{opt}} \leq \frac{\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)L_f}}{\sqrt{\sigma}\sqrt{N+1}},$$

其中 f_{best}^N 的定义见式 (9.19).

证明. 由引理 9.14, 得

$$f_{\text{best}}^N - f_{\text{opt}} \leq \frac{\Theta(\mathbf{x}^0) + \frac{L_f^2}{2\sigma} \sum_{k=0}^N t_k^2}{\sum_{k=0}^N t_k}.$$

将步长 (9.23) 代入上述不等式, 即得证.

$$\sum_{k=0}^N t_k = \sum_{k=0}^N \frac{\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma}}{L_f\sqrt{N+1}} = \frac{(N+1)\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma}}{L_f\sqrt{N+1}} = \frac{\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma} \cdot (N+1)^{1/2}}{L_f}.$$

$$\sum_{k=0}^N t_k^2 = \sum_{k=0}^N \left(\frac{\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma}}{L_f\sqrt{N+1}} \right)^2 = \sum_{k=0}^N \frac{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma}{L_f^2(N+1)} = (N+1) \cdot \frac{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma}{L_f^2(N+1)} = \frac{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma}{L_f^2}.$$

代入 $\sum t_k$ 和 $\sum t_k^2$:

$$\begin{aligned} f_{\text{best}}^N - f_{\text{opt}} &\leq \frac{\Theta(\mathbf{x}^0) + \frac{L_f^2}{2\sigma} \cdot \frac{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma}{L_f^2}}{\frac{\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma} \cdot (N+1)^{1/2}}{L_f}} = \frac{\Theta(\mathbf{x}^0) + \Theta(\mathbf{x}^0)}{\frac{\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma} \cdot (N+1)^{1/2}}{L_f}} \\ &= \frac{2\Theta(\mathbf{x}^0)}{\frac{\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma} \cdot (N+1)^{1/2}}{L_f}} = \frac{\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)} \cdot L_f}{\sqrt{\sigma}\sqrt{N+1}}. \end{aligned}$$

即证. \square

例 9.17. (单位单纯形上的优化). 考虑如下问题:

$$\min\{f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \Delta_n\},$$

其中 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是适当闭且凸的, 并满足 $\Delta_n \subseteq \text{int}(\text{dom}(f))$. 考虑以下两种可能的算法.

• 欧几里得设置. 我们假设 \mathbb{R}^n 上的基础范数是 l_2 -范数, $\omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|_2^2$ 是关于 l_2 -范数的 1-强凸函数. 在这种情况下, 镜面下降算法等价于投影次梯度法:

$$\mathbf{x}^{k+1} = P_{\Delta_n}(\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k)).$$

我们假设该方法以向量 $\mathbf{x}^0 = \frac{1}{n}\mathbf{e}$ 开始. 对于该选择, 有

$$\max_{\mathbf{x} \in \Delta_n} B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^0) = \max_{\mathbf{x} \in \Delta_n} \frac{1}{2} \left\| \mathbf{x} - \frac{1}{n}\mathbf{e} \right\|_2^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{n} \right),$$

因此取 $\Theta(\mathbf{x}^0) = 1$. 由定理 9.16 可知, 对于给定的正整数 N , 通过适当选择步长, 可以得到

$$f_{\text{best}}^N - f_{\text{opt}} \leq \underbrace{\frac{\sqrt{2}L_{f,2}}{\sqrt{N+1}}}_{C_e}, \quad (9.24)$$

其中 $L_{f,2} = \max_{\mathbf{x} \in \Delta_n} \|f'(\mathbf{x})\|_2$.

• 非欧几里得设置. 在这里, 我们假设 \mathbb{R}^n 上的基础范数是 l_1 -范数, 且凸函数 ω 选择为负熵函数:

$$\omega(\mathbf{x}) = \begin{cases} \sum_{i=1}^n x_i \log(x_i), & \mathbf{x} \in \mathbb{R}_+^n, \\ \infty, & \text{其他情况.} \end{cases} \quad (9.25)$$

由例 5.27 (P124) 可知, $\omega + \delta_{\Delta_n}$ 关于 l_1 -范数是 1-强凸的. 由例 9.10 (P251), 镜面下降方法取如下形式:

$$x_i^{k+1} = \frac{x_i^k e^{-t_k f'_i(x^k)}}{\sum_{j=1}^n x_j^k e^{-t_k f'_j(x^k)}}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

与欧几里得设置类似, 我们也令方法以 $\mathbf{x}^0 = \frac{1}{n}\mathbf{e}$ 开始. 对于该选择, 利用 Bregman 距离等于 Kullback-Leibler 散度 (见 (9.13) (P252)), 有

$$\begin{aligned} \max_{\mathbf{x} \in \Delta_n} B_\omega\left(\mathbf{x}, \frac{1}{n}\mathbf{e}\right) &= \max_{\mathbf{x} \in \Delta_n} \sum_{i=1}^n x_i \log(nx_i) = \log(n) + \max_{\mathbf{x} \in \Delta_n} \sum_{i=1}^n x_i \log x_i \\ &= \log(n). \end{aligned}$$

因此取 $\Theta(\mathbf{x}^0) = \log(n)$. 由定理 9.16 可知, 对于给定的正整数 N , 通过适当选择步

长, 可以得到

$$f_{\text{best}}^N - f_{\text{opt}} \leq \underbrace{\frac{\sqrt{2\log(n)}L_{f,\infty}}{\sqrt{N+1}}}_{C_{ne}}, \quad (9.26)$$

其中 $L_{f,\infty} = \max_{\mathbf{x} \in \Delta_n} \|f'(\mathbf{x})\|_{\infty}$.

两种设置上下界的比值由以下公式给出:

$$\rho^f = \frac{C_{f,ne}}{C_{f,e}} = \sqrt{\log(n)} \frac{L_{f,\infty}}{L_{f,2}}.$$

ρ^f 是否大于 1 (欧几里得设置的优越性) 或小于 1 (非欧几里得设置的优越性) 取决于函数 f 的性质. 在任何情况下, 由于 $\|\mathbf{y}\|_{\infty} \leq \|\mathbf{y}\|_2 \leq \sqrt{n}\|\mathbf{y}\|_{\infty}$ 对于所有 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ 成立, 可得

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \leq \frac{L_{f,\infty}}{L_{f,2}} \leq 1,$$

因此,

$$\frac{\sqrt{\log(n)}}{\sqrt{n}} \leq \rho^f \leq \sqrt{\log(n)},$$

效率估计比率的范围介于 $\frac{\sqrt{\log(n)}}{\sqrt{n}}$ (非欧几里得设置的显著优越性) 和 $\sqrt{\log(n)}$ (欧几里得设置的轻微优越性) 之间. \square

9.2.3 动态步长规则

固定步长规则相对容易分析, 但缺点是需要预先知道算法所需的总迭代次数. 在实际情况下, 迭代次数通常并不是先验固定的, 并且通常会引入不同于固定总迭代次数的停止准则. 因此, 动态 (即非恒定) 步长规则变得非常重要. 类似于第 8 章中对投影次梯度法的分析, 我们可以使用镜面下降方法的基本不等式 (引理 9.13) 来建立在动态步长规则下的收敛结果.

定理 9.18. (动态步长下镜面下降方法的收敛性). 假设假设 9.1 和 9.3 成立, 且 $\|f'(\mathbf{x})\|_* \leq L_f$ 对于任意 $\mathbf{x} \in C$ ($L_f > 0$). 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为镜面下降方法生成的序列, 步长 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 为正数, $\{f_{\text{best}}^k\}_{k \geq 0}$ 为最佳函数值序列 (定义见 (9.19)). 则有:

(a) 如果 $\frac{\sum_{n=0}^k t_n^2}{\sum_{n=0}^k t_n} \rightarrow 0$, 当 $k \rightarrow \infty$ 时, $f_{\text{best}}^k \rightarrow f_{\text{opt}}$.

(b) 如果步长选为以下两种之一:

– 预定义减小步长:

$$t_k = \frac{\sqrt{2\sigma}}{L_f \sqrt{k+1}},$$

– 自适应步长:

$$t_k = \begin{cases} \frac{\sqrt{2\sigma}}{\|f'(\mathbf{x}^k)\|_* \sqrt{k+1}}, & f'(\mathbf{x}^k) \neq \mathbf{0}, \\ \frac{\sqrt{2\sigma}}{L_f \sqrt{k+1}}, & f'(\mathbf{x}^k) = \mathbf{0}, \end{cases}$$

则对于任意 $k \geq 1$, 有

$$f_{\text{best}}^k - f_{\text{opt}} \leq \frac{L_f}{\sqrt{2\sigma}} \frac{B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) + 1 + \log(k+1)}{\sqrt{k+1}}.$$

证明. 根据镜面下降方法的基本不等式 (引理 9.13), 对于任意 $n \geq 0$, 有:

$$t_n(f(\mathbf{x}^n) - f_{\text{opt}}) \leq B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{n+1}) + \frac{t_n^2}{2\sigma} \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2.$$

对 $n = 0, 1, \dots, k$ 求和, 得到:

$$\sum_{n=0}^k t_n(f(\mathbf{x}^n) - f_{\text{opt}}) \leq B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) - B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{k+1}) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2.$$

利用 $B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{k+1}) \geq 0$ 和 $f(\mathbf{x}^n) \geq f_{\text{best}}^k$ (对于 $n \leq k$), 可得:

$$f_{\text{best}}^k - f_{\text{opt}} \leq \frac{B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2}{\sum_{n=0}^k t_n}. \quad (9.27)$$

由于 $\|f'(\mathbf{x}^n)\|_* \leq L_f$, 可进一步得:

$$f_{\text{best}}^k - f_{\text{opt}} \leq \frac{B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) + \frac{L_f^2}{2\sigma} \sum_{n=0}^k t_n^2}{\sum_{n=0}^k t_n}.$$

因此, 如果 $\frac{\sum_{n=0}^k t_n^2}{\sum_{n=0}^k t_n} \rightarrow 0$, 当 $k \rightarrow \infty$, 则 $f_{\text{best}}^k \rightarrow f_{\text{opt}}$, 证明了结论 (a).

为了验证结论 (b), 注意对于两种步长规则, 都有 $t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2 \leq \frac{2\sigma}{n+1}$ 且 $t_n \geq \frac{\sqrt{2\sigma}}{L_f \sqrt{n+1}}$. 因此, 由 (9.27), 有

$$f_{\text{best}}^k - f_{\text{opt}} \leq \frac{L_f}{\sqrt{2\sigma}} \frac{B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) + \sum_{n=0}^k \frac{1}{n+1}}{\sum_{n=0}^k \frac{1}{\sqrt{n+1}}}.$$

结合引理 8.27(a) (P215), 即得所需结果. \square

例 9.19. (镜面下降与投影次梯度法——数值例子) 考虑如下问题:

$$\min\{\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_1 : \mathbf{x} \in \Delta_n\}, \quad (9.28)$$

其中 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$. 按照例 9.17 的方法, 我们考虑两种方法.

第一种是投影次梯度法, 其中假设 \mathbb{R}^n 被赋予了欧几里得 l_2 -范数. 更新公式为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = P_{\Delta_n}(\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k)),$$

其中 $f'(\mathbf{x}^k)$ 取为 $\mathbf{A}^T \text{sgn}(\mathbf{A}\mathbf{x}^k - \mathbf{b})$, 步长 t_k 由自适应步长规则选取 (在实际中, $f'(\mathbf{x}^k)$

永远不是零向量):

$$t_k = \frac{\sqrt{2}}{\|f'(\mathbf{x}^k)\|_2 \sqrt{k+1}}.$$

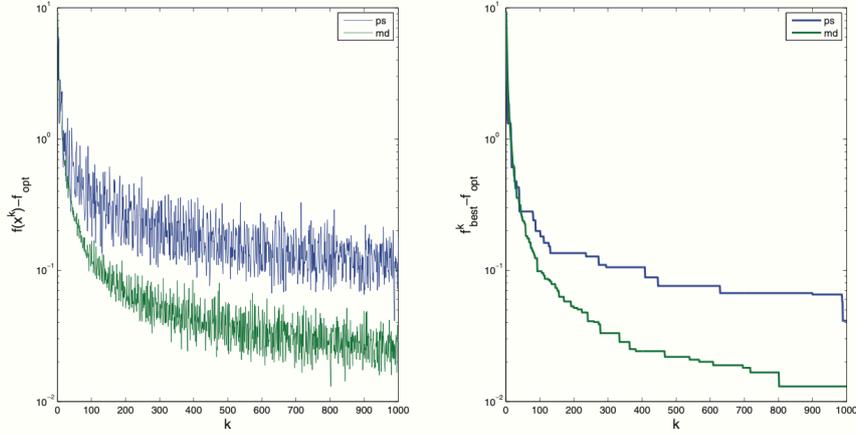


图 9.1 镜面下降方法和投影次梯度方法生成的值 $f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}}$ 和 $f_{\text{best}}^k - f_{\text{opt}}$.

第二种方法是镜面下降法, 其中 \mathbb{R}^n 的基础范数为 l_1 -范数, ω 选为负熵函数 (定义见 (9.25)). 在这种情况下, 方法的形式如下 (参见例 9.17):

$$x_i^{k+1} = \frac{x_i^k e^{-t_k f'_i(\mathbf{x}^k)}}{\sum_{j=1}^n x_j^k e^{-t_k f'_j(\mathbf{x}^k)}}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

其中步长取为:

$$t_k = \frac{\sqrt{2}}{\|f'(\mathbf{x}^k)\|_\infty \sqrt{k+1}}.$$

注意, 在两种设置下, 强凸参数均为 $\sigma = 1$. 我们通过生成 A 和 b 的分量, 分别从标准正态分布中独立抽样, 构造问题 (9.28) 的一个实例, 其中 $n = 100$. 两种方法的 $f(\mathbf{x}^k) - f_{\text{opt}}$ 和 $f_{\text{best}}^k - f_{\text{opt}}$ 数值描述如图 9.1 所示. 显然, 非欧几里得方法 (镜面下降法, 记为 md) 优于欧几里得投影次梯度法 (记为 ps). \square

9.3 复合模型的镜面下降⁵²

在本节中, 我们将研究比模型 (9.1) 更一般的优化模型, 该模型已在第 9.1 和 9.2 节中讨论. 考虑如下优化问题:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{F(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})\}, \quad (9.29)$$

其中, 函数 f 和 g 需满足以下假设条件.

⁵² 镜面下降方法的分析基于 Duchi、Shalev-Shwartz、Singer 和 Tewari 的工作 [49], 其中该算法在在线和随机环境中被引入.

假设 9.20. (关于 f 和 g 的性质)

(A) $f, g: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是 proper 闭凸的函数.

(B) 函数 g 的定义域满足:

$$\text{dom}(g) \subseteq \text{int}(\text{dom}(f)).$$

(C) 任何 $\mathbf{x} \in \text{dom}(g)$ 均满足:⁵³

$$\|f'(\mathbf{x})\|_* \leq L_f, \quad L_f > 0.$$

(D) 问题 (9.29) 的最优解集非空, 记为 X^* , 最优值记为 F_{opt} .

此外, 我们通常假设可以使用一个凸函数 ω , 该函数满足以下性质, 这些性质是对假设 9.3 的轻微调整.

假设 9.21. (关于 ω 的性质)

- ω 是 proper 闭凸的.
- ω 在 $\text{dom}(\partial\omega)$ 上可微.
- $\text{dom}(g) \subseteq \text{dom}(\omega)$.
- $\omega + \delta_{\text{dom}(g)}$ 是关于 σ 强凸的 ($\sigma > 0$).

显然, 我们可以忽略问题 (9.29) 的复合结构, 而直接在函数 $F = f + g$ 上使用镜面下降方法, 其中 $\text{dom}(g)$ 充当约束集合 C 的角色:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \left\{ \langle f'(\mathbf{x}^k) + g'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + \frac{1}{t_k} B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^k) \right\}. \quad (9.30)$$

9.3.1 镜面-C 方法

直接应用前述的镜面下降方案可能会遇到问题. 首先, 我们并未假设 $C = \text{dom}(g)$ 是闭集, 因此 (9.30) 公式中的极小值可能为空集. 其次, 即使该更新步骤是良定义的, 我们并未假设 g 在 C 上是 Lipschitz 连续的, 就像在假设 9.20(C) 中对 f 所要求的那样, 而 Lipschitz 连续性是镜面下降方法收敛性分析的关键要素. 最后, 即使 g 在 C 上是 Lipschitz 连续的, 函数 $F = f + g$ 的 Lipschitz 常数可能远大于 f 的 Lipschitz 常数, 而我们的目标是定义一种方法, 使其收敛速率仅取决于 f 在 $\text{dom}(g)$ 上的 Lipschitz 常数.

因此, 我们不像 (9.30) 公式那样同时对 f 和 g 进行线性化, 而是仅对 f 进行线性化, 并保持 g 原样. 这样就得到了如下更新公式:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x}} \left\{ \langle f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + g(\mathbf{x}) + \frac{1}{t_k} B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^k) \right\}. \quad (9.31)$$

该公式可以进一步改写为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x}} \{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + t_k g(\mathbf{x}) + \omega(\mathbf{x}) \}.$$

执行上述更新步骤的算法称为镜面-C (Mirror-C) 方法.

镜面-C 方法

初始化: 选择初始点 $\mathbf{x}^0 \in \text{dom}(g) \cap \text{dom}(\partial\omega)$.

一般步骤: 对于任意 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

(a) 选择步长 $t_k > 0$, 并选择次梯度 $f'(\mathbf{x}^k) \in \partial f(\mathbf{x}^k)$;

(b) 更新:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x}} \{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + t_k g(\mathbf{x}) + \omega(\mathbf{x}) \}. \quad (9.1)$$

注 9.22. (更新公式的另一种形式) 更新公式 (9.32) 还可以写为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x}} \{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + t_k g(\mathbf{x}) + B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^k) \}. \quad (9.33)$$

注 9.23. (欧几里得情形——近端次梯度方法) 当基础空间 \mathbb{E} 是欧几里得空间, 且 $\omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2$ 时, 更新公式 (9.33) 变为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x}} \left\{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + t_k g(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|^2 \right\},$$

经过适当的项重排和去除常数项, 该公式可化简为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x}} \left\{ t_k g(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - [\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k)]\|^2 \right\}.$$

根据近端算子的定义 (参见第 6 章), 上式可以重写为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \text{prox}_{t_k g}(\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k)).$$

因此, 在每次迭代中, 该方法先沿着次梯度的负方向移动一步, 然后执行近端投影 (prox) 步骤. 由此得到的方法称为近端次梯度方法. 在第 10 章中, 我们将在 f 具有某些可微性质的情况下, 对该方法进行详细讨论.

当然, 当取 $g = \delta_C$ 且 C 为非空闭凸集时, 镜面-C 方法与镜面下降方法是一致的. 我们首先证明镜面-C 方法是良定义的, 即 (9.32) 中的极小值在 $\text{dom}(g) \cap \text{dom}(\partial\omega)$ 内唯一达到.

定理 9.24. (镜面-C 方法的良定义性) 假设假设 9.20 和 9.21 成立. 令 $\mathbf{a} \in \mathbb{E}^*$. 那么优化问题

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{ \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle + g(\mathbf{x}) + \omega(\mathbf{x}) \}$$

在 $\text{dom}(g) \cap \text{dom}(\partial\omega)$ 内存在唯一的最优解.

证明: 证明通过引理 9.7 来得出, 其中令 $\psi(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle + g(\mathbf{x})$. \square

分析镜面-C 方法的收敛性依赖于与第 9.2 节分析镜面下降方法类似的推理. 我们首先证明一个技术性引理, 该引理建立了一个类似于引理 9.14 的不等式. 此外, 除了基本假设外, 我们还假设 g 是非负函数, 并且步长序列是非递增的.

引理 9.25. 假设 Assumption 9.20 和 9.21 成立, 且 g 是非负函数. 令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为镜面-C 方法生成的序列, 且步长序列 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 是正的并且非递增的. 那么对于任意 $\mathbf{x}^* \in X^*$ 和 $k \geq 0$, 有:

$$\min_{n=0,1,\dots,k} (F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}}) \leq \frac{t_0 g(\mathbf{x}^0) + B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2}{\sum_{n=0}^k t_n}. \quad (9.34)$$

证明: 由更新公式, 有

$$\mathbf{x}^{n+1} = \arg \min_{\mathbf{x}} [\langle t_n f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{x} \rangle + t_n g(\mathbf{x}) + B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n)] = \arg \min_{\mathbf{x}} [\psi(\mathbf{x}) + B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n)],$$

其中 $\psi(\mathbf{x}) \equiv t_n \langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{x} \rangle + t_n g(\mathbf{x})$. 令 $\mathbf{b} = \mathbf{x}^n$, $\mathbf{a} = \mathbf{x}^{n+1}$, 则由非欧空间的近端第二定理 (Theorem 9.12), 可得

$$\langle \nabla\omega(\mathbf{b}) - \nabla\omega(\mathbf{a}), \mathbf{u} - \mathbf{a} \rangle \leq \psi(\mathbf{u}) - \psi(\mathbf{a}),$$

代入 \mathbf{a}, \mathbf{b} 即得

$$\langle \nabla\omega(\mathbf{x}^n) - \nabla\omega(\mathbf{x}^{n+1}), \mathbf{u} - \mathbf{x}^{n+1} \rangle \leq t_n \langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{u} - \mathbf{x}^{n+1} \rangle + t_n g(\mathbf{u}) - t_n g(\mathbf{x}^{n+1}). \quad (9.35)$$

应用三点引理 (引理 9.11), 可得:

$$\langle \nabla\omega(\mathbf{x}^n) - \nabla\omega(\mathbf{x}^{n+1}), \mathbf{u} - \mathbf{x}^{n+1} \rangle = B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{n+1}) + B_\omega(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^n),$$

结合上式可得:

$$B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{n+1}) + B_\omega(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^n) \leq t_n \langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{u} - \mathbf{x}^{n+1} \rangle + t_n g(\mathbf{u}) - t_n g(\mathbf{x}^{n+1}).$$

因此,

$$\begin{aligned} & t_n \langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{x}^n - \mathbf{u} \rangle + t_n g(\mathbf{x}^{n+1}) - t_n g(\mathbf{u}) \\ & \leq B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{n+1}) - B_\omega(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) + t_n \langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n+1} \rangle \\ & \leq B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{n+1}) - \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n\|^2 + t_n \langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n+1} \rangle \\ & = B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{n+1}) - \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n\|^2 + \left\langle \frac{t_n}{\sqrt{\sigma}} f'(\mathbf{x}^n), \sqrt{\sigma}(\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n+1}) \right\rangle \\ & \leq B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{n+1}) - \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n\|^2 + \frac{t_n^2}{2\sigma} \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2 + \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n\|^2 \end{aligned}$$

$$= B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{u}, \mathbf{x}^{n+1}) + \frac{t_n^2}{2\sigma} \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2.$$

注意到 $t_n \langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{x}^n - \mathbf{u} \rangle = -t_n \langle f'(\mathbf{x}^n), \mathbf{u} - \mathbf{x}^n \rangle \geq -t_n (f(\mathbf{u}) - f(\mathbf{x}^n))$. 令 $\mathbf{u} = \mathbf{x}^*$ 可进一步得到

$$t_n [f(\mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}^{n+1}) - F_{\text{opt}}] \leq B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{n+1}) + \frac{t_n^2}{2\sigma} \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2.$$

对于 $n = 0, 1, \dots, k$ 求和, 得到

$$\sum_{n=0}^k t_n [f(\mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}^{n+1}) - F_{\text{opt}}] \leq B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) - B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{k+1}) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2. \quad (*)$$

现将不等式 (*) 两侧同时加上 $t_0 g(\mathbf{x}^0) - t_k g(\mathbf{x}^{k+1})$. 对于 (*) 左边, 有

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^k t_n [f(\mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}^{n+1}) - F_{\text{opt}}] + t_0 g(\mathbf{x}^0) - t_k g(\mathbf{x}^{k+1}) \\ &= t_0 (f(\mathbf{x}^0) - F_{\text{opt}}) + t_k g(\mathbf{x}^{k+1}) + \sum_{n=1}^k [t_n f(\mathbf{x}^n) + t_{n-1} g(\mathbf{x}^n) - t_n F_{\text{opt}}] \\ & \quad + t_0 g(\mathbf{x}^0) - t_k g(\mathbf{x}^{k+1}) \\ &= t_0 (F(\mathbf{x}^0) - F_{\text{opt}}) + \sum_{n=1}^k [t_n f(\mathbf{x}^n) + t_{n-1} g(\mathbf{x}^n) - t_n F_{\text{opt}}] \\ & \geq \sum_{n=0}^k t_n [f(\mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}}] \geq \left(\sum_{n=0}^k t_n \right) \left(\min_{n=0,1,\dots,k} F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}} \right). \end{aligned}$$

对于 (*) 的右边, 由于 $B_\omega(\cdot, \cdot)$ 以及 $t_k g(\cdot)$ 的非负性, 有

$$\begin{aligned} & t_0 g(\mathbf{x}^0) - t_k g(\mathbf{x}^{k+1}) + B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) - B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{k+1}) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2 \\ & \leq t_0 g(\mathbf{x}^0) + B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2. \end{aligned}$$

因此, (*) 可放缩为

$$\left(\sum_{n=0}^k t_n \right) \left(\min_{n=0,1,\dots,k} F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}} \right) \leq t_0 g(\mathbf{x}^0) + B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2,$$

遂得不等式 (9.34). □

定理 9.26. (迭代次数取定时, 镜面-C 方法的收敛速率与 $O(1/\sqrt{N})$ 同阶) 假设 Assumption 9.20 和 9.21 成立, 并且 g 是非负函数. 设 $B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^0)$ 在 $\text{dom}(g)$ 上有上界,

并令 $\Theta(\mathbf{x}^0)$ 满足:

$$\Theta(\mathbf{x}^0) \geq \max_{\mathbf{x} \in \text{dom}(g)} B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^0).$$

假设 $g(\mathbf{x}^0) = 0$. 设 N 为正整数, 并且 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为镜面-C 方法以恒定步长

$$t_k = \frac{\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)\sigma}}{L_f\sqrt{N}} \quad (9.36)$$

生成的序列, 则:

$$\min_{n=0,1,\dots,N-1} F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}} \leq \frac{\sqrt{2\Theta(\mathbf{x}^0)L_f}}{\sqrt{\sigma}\sqrt{N}}.$$

证明: 由引理 9.25, 利用 $g(\mathbf{x}^0) = 0$ 及不等式 $\|f'(\mathbf{x}^n)\|_* \leq L_f$ 和 $B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) \leq \Theta(\mathbf{x}^0)$, 我们有:

$$\min_{n=0,1,\dots,N-1} F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}} \leq \frac{\Theta(\mathbf{x}^0) + \frac{L_f^2}{2\sigma} \sum_{n=0}^{N-1} t_n^2}{\sum_{n=0}^{N-1} t_n}.$$

将步长公式 (9.36) 代入上式, 即得结论. \square

定理 9.27. (在动态步长规则下, 镜面-C 方法的收敛速率与 $O(\log k/\sqrt{k})$ 同阶) 假设 Assumption 9.20 和 9.21 成立, 且 g 是非负函数. 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为镜面-C 方法生成的序列, 步长 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 选取为:

$$t_k = \frac{\sqrt{2\sigma}}{L_f\sqrt{k+1}}.$$

则对于所有 $k \geq 1$, 有:

$$\min_{n=0,1,\dots,k} F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}} \leq \frac{\frac{L_f}{\sqrt{2\sigma}} B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) + \frac{\sqrt{2\sigma}}{L_f} g(\mathbf{x}^0) + 1 + \log(k+1)}{\sqrt{k+1}}. \quad (9.37)$$

证明: 由引理 9.25, 并代入 $t_0 = \frac{\sqrt{2\sigma}}{L_f}$, 我们得到:

$$\min_{n=0,1,\dots,k} F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}} \leq \frac{B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) + \frac{\sqrt{2\sigma}}{L_f} g(\mathbf{x}^0) + \frac{1}{2\sigma} \sum_{n=0}^k t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2}{\sum_{n=0}^k t_n}. \quad (0.38)$$

结合 $t_n^2 \|f'(\mathbf{x}^n)\|_*^2 \leq \frac{2\sigma}{n+1}$ 及 $t_n = \frac{\sqrt{2\sigma}}{L_f\sqrt{n+1}}$, 可得:

$$\min_{n=0,1,\dots,k} F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}} \leq \frac{\frac{L_f}{\sqrt{2\sigma}} B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) + \frac{\sqrt{2\sigma}}{L_f} g(\mathbf{x}^0) + \sum_{n=0}^k \frac{1}{n+1}}{\sqrt{k+1}}.$$

($\sum_{n=0}^k \frac{1}{\sqrt{1+n}} \geq \sum_{n=0}^k \frac{1}{\sqrt{1+k}} = \sqrt{1+k}$) 由引理 8.27(a): $1 + \log(k+1) \geq \sum_{n=0}^k \frac{1}{1+n}$ 得 (9.37). \square

例 9.28. (镜面-C 方法示例) 假设基础空间是赋范空间 \mathbb{R}^n , 其范数为欧几里得范数

l_2 -norm. 令 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 是在 \mathbb{R}^n 上是 Lipschitz 连续的凸函数, 即存在 $L_f > 0$ 使得:

$$\|f'(\mathbf{x})\|_2 \leq L_f, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n.$$

现在考虑如下优化问题:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}_{++}^n} \left\{ F(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^n \frac{1}{x_i} \right\}.$$

其中, 选择镜面函数 $\omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2$. 在这种情况下, 镜面下降法和镜面-C 方法分别与投影次梯度方法和近端次梯度方法一致. 然而, 投影次梯度方法是不能直接应用于本问题, 因为难以确定一个实用的可行集. 此外, 目标函数 F 明显不是 Lipschitz 连续的, 因此无法保证收敛性.

另一方面, 通过选择 $g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{x_i} + \delta_{\mathbb{R}_{++}^n}$, 近端次梯度方法是可以使用的. 由此可知, 假设 9.20 和 9.21 对于 f, g 均成立, 并且 g 为非负函数, 方法的更新形式如下:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \text{prox}_{t_k g}(\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k)).$$

计算 $\text{prox}_{t_k g}$ 需要求解 n 元三次方程组.

例 9.29. (投影次梯度 vs. 近端次梯度) 设基础空间为欧几里得空间 \mathbb{R}^n , 考虑如下优化问题:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{F(\mathbf{x}) \equiv \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_1 + \lambda\|\mathbf{x}\|_1\}, \quad (9.39)$$

其中, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $\lambda > 0$. 我们考虑两种方法求解该问题:

- 投影次梯度: 应用于问题 (9.39), 其中 $C = \mathbb{R}^n$. 方法的更新形式如下 (选取 $\|\mathbf{y}\|_1$ 的次梯度 $\text{sgn}(\mathbf{y})$):

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - t_k (\mathbf{A}^\top \text{sgn}(\mathbf{A}\mathbf{x}^k - \mathbf{b}) + \lambda \text{sgn}(\mathbf{x})).$$

其中, 步长按定理 8.28 选择:

$$t_k = \frac{1}{\|F'(\mathbf{x}^k)\|_2 \sqrt{k+1}}.$$

- 近端次梯度: 设 $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_1$, $g(\mathbf{x}) = \lambda\|\mathbf{x}\|_1$, 则 $F = f + g$. 方法的更新形式如下:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \text{prox}_{s_k g}(\mathbf{x}^k - s_k \mathbf{A}^\top \text{sgn}(\mathbf{A}\mathbf{x}^k - \mathbf{b})).$$

由于 $g(\mathbf{x}) = \lambda\|\mathbf{x}\|_1$, 可知 $\text{prox}_{s_k g}$ 是一个软阈值算子. 因此, 更新规则可表示为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathcal{T}_{\lambda s_k}(\mathbf{x}^k - s_k \mathbf{A}^\top \text{sgn}(\mathbf{A}\mathbf{x}^k - \mathbf{b})).$$

其中,步长按如下方式选择:

$$s_k = \frac{1}{\|f'(\mathbf{x}^k)\|_2 \sqrt{k+1}}.$$

从理论上讲,近端次梯度方法应当优于投影次梯度方法,因为近端次梯度方法的效率估计界依赖于 L_f , 而投影次梯度方法的相应常数依赖于更大的常数 L_F . 这一现象在实践中也得到了明显的体现. 我们构造了问题 (9.39) 的一个实例, 其中 $m = 10, n = 15$, 通过标准正态分布独立生成矩阵 \mathbf{A} 和向量 \mathbf{b} 的分量. 对于两种方法, 我们计算了 $F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}}$ 的值, 如图 9.2 所示. 显然, 在这种情况下, 近端次梯度方法比投影次梯度方法高出若干个数量级的精度.

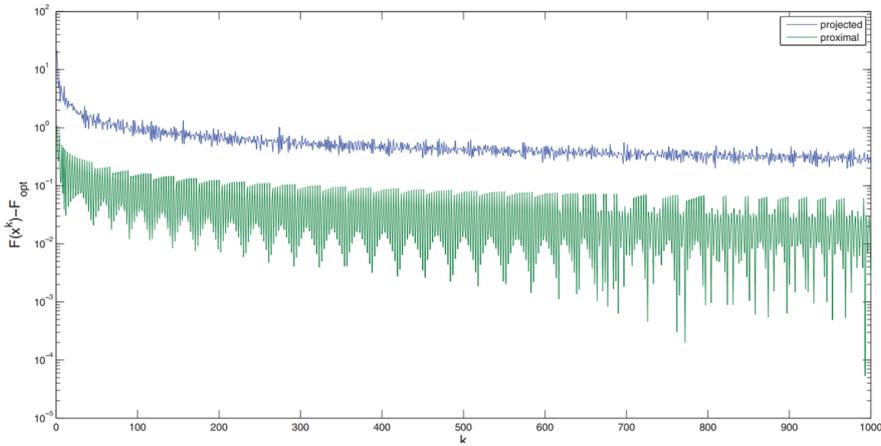


图 9.2 前 1000 次迭代的投影次梯度和近端次梯度方法. y -轴表示 (以对数刻度) $F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}}$ 的值.

在例 9.28 以及例 9.29 中, 我们使用了镜面下降以及镜面-C 方法在 $\omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2$ 时分别与投影次梯度法和近端次梯度法等价这一事实. 这里将对这一事实进行讨论.

由镜面 - C 方法更新公式为

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x}} \{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + t_k g(\mathbf{x}) + \omega(\mathbf{x}) \},$$

代入 $\omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2$, $\nabla \omega(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$ 得

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{k+1} &= \arg \min_{\mathbf{x}} \left\{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \mathbf{x}^k, \mathbf{x} \rangle + t_k g(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2 \right\} \\ &= \arg \min_{\mathbf{x}} \left\{ \frac{1}{2}\|\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k)\|^2 - \langle \mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + t_k g(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2 \right\} \\ &= \arg \min_{\mathbf{x}} \left\{ \frac{1}{2}\|\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k) - \mathbf{x}\|^2 + t_k g(\mathbf{x}) \right\} \\ &= \text{prox}_{t_k g}(\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k)). \end{aligned} \quad (*)$$

(*) 即是近端此梯度的更新公式. 事实上, 若取 $g(\cdot) = \delta_C(\cdot)$, $\omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2$, 则镜面 - C 方法的更新公式可变为

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{k+1} &= \arg \min_{\mathbf{x}} \{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + t_k \delta_C(\mathbf{x}) + \omega(\mathbf{x}) \} \\ &= \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \{ \langle t_k f'(\mathbf{x}^k) - \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \rangle + \omega(\mathbf{x}) \} \end{aligned} \quad (**)$$

(**) 恰好是投影次梯度法的更新公式. 由此不难发现, 镜面下降法实际上是镜面 - C 方法在 $g(\cdot) = \delta_C(\cdot)$ 时的特例. 为此, 当 $\frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2$ 时, 镜面下降法的更新公式又写作 $\mathbf{x}^{k+1} = \text{prox}_{\delta_C}(\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k)) = P_C(\mathbf{x}^k - t_k f'(\mathbf{x}^k))$, 恰为投影此梯度法的更新公式.

第 10 章 近端梯度法

声明: 在本章中, 除了第 10.9 节外, 我们约定 \mathbb{E} 是欧氏空间, 即满足 $\|\cdot\| = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle}$ 的有限维空间.

10.1 复合模型

本章主要围绕

$$\{F(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})\} \quad (10.1)$$

展开讨论.

假设 10.1.

- (A) $g: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是 proper 的闭凸函数.
- (B) $f: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是 proper 的闭函数, $\text{dom}(f)$ 为凸集, $\text{dom}(g) \subseteq \text{inter}(\text{dom}(f))$, 且 f 在其有效域的内部是 L_f 光滑的.
- (C) 问题 (10.1) 的最优解集是非空的, 记为 X^* . 其极小值记为 F_{opt} .

例 10.2 将介绍可被建模为 (10.1) 的三个实例.

例 10.2.

- 光滑无约束优化问题. 假设 $g \equiv 0$ 且 $\text{dom}(f) = \mathbb{E}$, 那么 (10.1) 将退化为求解

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} f(\mathbf{x}),$$

其中 $f: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 为 L_f 光滑的函数.

- 含有凸约束的光滑函数极小值问题. 如果 $g = \delta_C$, C 是非空的闭凸集, 那么 (10.1) 相当于在一个非空闭凸集上对一个可微函数求极小值:

$$\min_{\mathbf{x} \in C} f(\mathbf{x}),$$

在此情形下, f 在 $\text{inter}(\text{dom}(f))$ 中 L_f 光滑, 且 $C \subseteq \text{inter}(\text{dom}(f))$.

- l_1 -正则化极小值问题. 取 $g(\mathbf{x}) = \lambda \|\mathbf{x}\|_1$, $\lambda > 0$. 则 (10.1) 可被用于求解

$$\min_{\mathbf{x} \in C} f(\mathbf{x}) + \lambda \|\mathbf{x}\|_1,$$

其中 f 在 \mathbb{E} 上是 L_f 光滑的.

10.2 近端梯度法

为了理解我们将要研究的求解 (10.1) 方法的基本思想, 我们首先回顾在 $g = \delta_C$ 情况下 (其中 C 为非空闭凸集) 求解 (10.1) 的投影梯度法. 此时, 该问题可表述为以下形式

$$\min\{f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in C\}. \quad (10.2)$$

在投影次梯度法中, 求解 (10.2) 的迭代更新公式为

$$\mathbf{x}^{k+1} = P_C(\mathbf{x}^k - t_k \nabla f(\mathbf{x}^k)),$$

其中 t_k 是第 k 步的步长. 不难验证, 上述更新公式可转化为

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|^2 \right\}.$$

换言之, 下一个迭代点是光滑部分在当前迭代点处的线性近似与二次邻近项之和在集合 C 上的极小化点.

回到问题 (10.1), 很自然地可以将上述思想推广, 并将下一次迭代点定义为以下三项之和的极小化点: f 在 \mathbf{x}^k 处的线性近似、非光滑函数 g 以及近端项, 即

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + g(\mathbf{x}) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|^2 \right\}. \quad (10.3)$$

不妨设 $G = f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + g(\mathbf{x}) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|^2$, 则

$$\begin{aligned} G &= f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + g(\mathbf{x}) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|^2 \\ &= f(\mathbf{x}^k) + \frac{1}{2t_k} \langle 2t_k \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + g(\mathbf{x}) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|^2 \\ &\quad + \frac{t_k^2}{2t_k} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|^2 - \frac{t_k^2}{2t_k} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|^2 \\ &= f(\mathbf{x}^k) - \frac{t_k^2}{2t_k} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|^2 + g(\mathbf{x}) + \frac{1}{2t_k} \|\mathbf{x} - (\mathbf{x}^k - t_k \nabla f(\mathbf{x}^k))\|^2, \end{aligned}$$

则有

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{k+1} &= \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \{G\} \\ &= \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \left\{ t_k \left(G - f(\mathbf{x}^k) + \frac{t_k^2}{2t_k} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|^2 \right) \right\} \\ &= \arg \min_{\mathbf{x} \in C} \left\{ t_k g(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - (\mathbf{x}^k - t_k \nabla f(\mathbf{x}^k))\|^2 \right\} \\ &= \text{prox}_{t_k g}(\mathbf{x}^k - t_k \nabla f(\mathbf{x}^k)). \end{aligned}$$

上述方法即是近端梯度法, 即在梯度下降之后再进行一次近端映射变换. 从现在开

始令 $t_k = \frac{1}{L_k}$, 则近端梯度法的算法描述如下:

近端梯度法

Initialization: 取 $\mathbf{x}^0 \in \text{inter}(\text{dom}(f))$.

General step: 对于 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行:

(a) 取 $L_k > 0$;

(b) 计算 $\mathbf{x}^{k+1} = \text{prox}_{\frac{1}{L_k}g}(\mathbf{x}^k - \frac{1}{L_k}\nabla f(\mathbf{x}^k))$.

不妨定义近端梯度算子

$$T_L^{f,g}(\mathbf{x}) = \text{prox}_{\frac{1}{L}g}\left(\mathbf{x} - \frac{1}{L}\nabla f(\mathbf{x})\right),$$

其中 $T_L^{f,g} : \text{inter}(\text{dom}(f)) \rightarrow \mathbb{E}$, 则近端梯度法的更新公式可以简写为

$$\mathbf{x}^{k+1} = T_{L_k}^{f,g}(\mathbf{x}^k).$$

此外, 约定当省略 f, g 不会引起混淆时, $T_L^{f,g}(\cdot)$ 可进一步简写为 $T_L(\cdot)$.

稍后将讨论两种步长规则, 分别是常值步长以及回溯步长. 需要注意的是, “回溯”的具体含义会随不同情境而略有变化, 因此我们将定义多种回溯过程.

例 10.3. 下表给出了近端梯度方法应用于例 (10.2) 讨论的三种特定模型时的显式更新步骤. 这些模型的具体假设条件详见例 (10.2) 说明. 其中, ISTA 就是著名的

优化模型	更新公式	名称
$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} f(\mathbf{x}) \ (g \equiv 0)$	$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - t_k \nabla f(\mathbf{x}^k)$	梯度法
$\min_{\mathbf{x} \in C} f(\mathbf{x}) \ (g = \delta_C)$	$\mathbf{x}^{k+1} = P_C(\mathbf{x}^k - t_k \nabla f(\mathbf{x}^k))$	投影梯度法
$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} f(\mathbf{x}) + \lambda \ \mathbf{x}\ _1 \ (g = \lambda \ \cdot\ _1)$	$\mathbf{x}^{k+1} = \mathcal{T}_{\lambda t_k}(\mathbf{x}^k - t_k \nabla f(\mathbf{x}^k))$	ISTA

迭代收缩阈值法, 在其每一步迭代中, 都会进行一次软阈值 (亦称“收缩”) 操作. 事实上, 上述三种方法都可以被视作近端投影法的特例, 因为上述三个更新公式是 $\mathbf{x}^{k+1} = T_{L_k}^{f,g}(\mathbf{x}^k)$ 分别代入 $g \equiv 0, g = \delta_C(\cdot), g = \lambda_1 \|\cdot\|$ 时的情形.

10.3 非凸案例下的近端梯度法分析

10.3.1 充分下降

为了证明近端梯度法的收敛性, 首先需要证明复合函数的充分下降引理.

引理 10.4. (充分下降引理). 假设 f, g 分别满足 Assumption 10.1 中的 (A), (B). 令 $F = f + g, T_L \equiv T_L^{f,g}$. 那么对于任意的 $\mathbf{x} \in \text{inter}(\text{dom}(f))$ 和 $L \in (L_f/2, \infty)$, 下式

成立:

$$F(\mathbf{x}) - F(T_L(\mathbf{x})) \geq \frac{L - \frac{L_f}{2}}{L^2} \left\| G_L^{f,g}(\mathbf{x}) \right\|^2, \quad (10.4)$$

其中, $G_L^{f,g} : \text{inter}(\text{dom}(f)) \rightarrow \mathbb{E}$, 被定义为 $G_L^{f,g}(\mathbf{x}) = L(\mathbf{x} - T_L(\mathbf{x}))$, $\forall \mathbf{x} \in \text{inter}(\text{dom}(f))$.

证明: 为简便起见, 不妨使用 \mathbf{x}^+ 表示 $T_L(\mathbf{x})$. 根据下降引理 (参见 Lemma 5.7) 可得

$$f(\mathbf{x}^+) \leq f(\mathbf{x}) + \langle \nabla f(\mathbf{x}), \mathbf{x}^+ - \mathbf{x} \rangle + \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}\|^2. \quad (10.5)$$

根据第二近端定理, 由于 $\mathbf{x}^+ = \text{prox}_{\frac{1}{L}g}(\mathbf{x} - \frac{1}{L}\nabla f(\mathbf{x}))$, 则有

$$\left\langle \mathbf{x} - \frac{1}{L}\nabla f(\mathbf{x}) - \mathbf{x}^+, \mathbf{x} - \mathbf{x}^+ \right\rangle \leq \frac{1}{L}g(\mathbf{x}) - \frac{1}{L}g(\mathbf{x}^+),$$

整理上式, 可进一步得到

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}), \mathbf{x}^+ - \mathbf{x} \rangle \leq -L\|\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}\|^2 + g(\mathbf{x}) - g(\mathbf{x}^+).$$

结合式 (10.5), 可得

$$\underbrace{f(\mathbf{x}^+) + g(\mathbf{x}^+)}_{F(\mathbf{x}^+)} \leq \underbrace{f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})}_{F(\mathbf{x})} + \left(-L + \frac{L_f}{2}\right) \|\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}\|^2.$$

注意到

$$\left(-L + \frac{L_f}{2}\right) \|\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}\|^2 = \left(-L + \frac{L_f}{2}\right) \|\mathbf{x} - T_L(\mathbf{x})\|^2 = -\frac{L - \frac{L_f}{2}}{L^2} \left\| G_L^{f,g}(\mathbf{x}) \right\|^2,$$

故整理后可得 $F(\mathbf{x}) - F(T_L(\mathbf{x})) \geq \frac{L - \frac{L_f}{2}}{L^2} \left\| G_L^{f,g}(\mathbf{x}) \right\|^2$, 即式 (10.4) 成立. \square

10.3.2 梯度映射

在式 (10.4) 中出现的 $G_L^{f,g}$ 是一个极其重要的映射, 可以被视为梯度的推广.

定义 10.5. (梯度映射). 假设 f, g 分别满足 Assumption 10.1 中的 (A), (B), 那么称 $G_L^{f,g} : \text{inter}(\text{dom}(f)) \rightarrow \mathbb{E}$ 为梯度映射算子, 其中

$$G_L^{f,g}(\mathbf{x}) \equiv L(\mathbf{x} - T_L^{f,g}(\mathbf{x}))$$

对 $\forall \mathbf{x} \in \text{inter}(\text{dom}(f))$ 成立.

为了简便起见, 当 f, g 指代明确时, 不妨将 $G_L^{f,g}$ 简写作 G_L . 事实上, 使用梯度映射的定义, 近端梯度法的更新规则可另写为

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \frac{1}{L_k} G_{L_k}(\mathbf{x}^k).$$

不难发现上式和梯度下降法具有相似的形式. 当 $L = L_f$ 时, 充分下降不等式 (10.4)

有更简洁的形式.

推论 10.6. 在引理 10.4 的情形下, 不等式

$$F(\mathbf{x}) - F(T_{L_f}(\mathbf{x})) \geq \frac{1}{2L_f} \|G_{L_f}(\mathbf{x})\|^2$$

对于 $\forall \mathbf{x} \in \text{inter}(\text{dom}(f))$ 均成立.

下面将说明把梯度映射看成梯度算子 $\mathbf{x} \mapsto \nabla \mathbf{x}$ 的推广的合理性. 首先, 二者在 $g \equiv 0$ 时是相等的; 其次, 对于普遍的 g , 梯度映射的消失点恰是 $f + g$ 的驻点, 这与梯度及次梯度的性质高度相似 (梯度消失点是可微函数的驻点, 包含零次梯度的点是一般凸函数的极小值点). 我们将通过定理 10.7 证明以上两个事实.

定理 10.7. 令 f, g 分别满足 Assumption 10.1 中的性质 (A), (B). 取 $L > 0$, 则

- (a) $G_L^{f, g_0}(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x})$ 对 $\forall \mathbf{x} \in \text{inter}(\text{dom}(f))$ 成立, 其中 $g_0(\mathbf{x}) \equiv 0$;
- (b) 对于 $\mathbf{x}^* \in \text{inter}(\text{dom}(f))$, 当且仅当 \mathbf{x}^* 是优化问题 (10.1) 的驻点时, $G_L^{f, g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$.

证明: 对于 (a), 由于 $\text{prox}_{\frac{1}{L_0}g_0}(\mathbf{y}) = \text{prox}_0(\mathbf{y}) = \mathbf{y}$ 对任意 $\mathbf{y} \in \mathbb{E}$ 成立, 则

$$\begin{aligned} G_L^{f, g_0}(\mathbf{x}) &= L(\mathbf{x} - T_L^{f, g_0}(\mathbf{x})) \\ &= L \left[\mathbf{x} - \text{prox}_{\frac{1}{L_0}g_0} \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L} \nabla \mathbf{x} \right) \right] \\ &= L \left[\mathbf{x} - \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L} \nabla \mathbf{x} \right) \right] \\ &= \nabla f(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

对于 (b), 注意到 $G_L^{f, g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ 当且仅当 $\mathbf{x}^* = \text{prox}_{\frac{1}{L}g}(\mathbf{x}^* - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{x}^*))$. 根据近端第二定理,

$$\mathbf{x}^* = \text{prox}_{\frac{1}{L}g}(\mathbf{x}^* - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{x}^*)) \Leftrightarrow \mathbf{x}^* - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{x}^*) - \mathbf{x}^* \in \frac{1}{L} \partial g(\mathbf{x}^*).$$

对箭头右边的式子化简, 即得

$$-\nabla f(\mathbf{x}^*) \in \partial g(\mathbf{x}^*) \Rightarrow \mathbf{0} \in \partial(f + g)(\mathbf{x}^*),$$

恰为 $(f + g)$ 取得极值的驻点条件. □

此外, 如果 f 凸, 驻点条件便是最优解的充分必要条件. 因此, 我们可以进一步得到推论 10.8:

推论 10.8. (凸性保障下的充分必要条件). 令 f, g 分别满足 Assumption 10.1 中的性质 (A), (B), $L > 0$. 若 f 是凸函数, 则对于 $\mathbf{x}^* \in \text{dom}(g)$, $G_L^{f, g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ 当且仅当 \mathbf{x}^*

是问题 (10.1) 的极小值点.

事实上, 我们可以将标量 $\|G_L(\mathbf{x})\|$ 理解为“最优性度量”: 首先, 其值是非负的; 其次, 且仅当 \mathbf{x} 取到极小值点时, 有 $\|G_L(\mathbf{x})\| = 0$. 接下来将通过定理 10.9 说明 $\|G_L(\mathbf{x})\|$ 关于 L 的单调性.

定理 10.9. 令 f, g 分别满足假设 10.1 中的性质 (A), (B), 且记 $G_L \equiv G_L^{f,g}$. 取 $L_1 \geq L_2 > 0$, 则

$$\|G_{L_1}(\mathbf{x})\| \geq \|G_{L_2}(\mathbf{x})\| \quad (10.6)$$

且

$$\frac{\|G_{L_1}(\mathbf{x})\|}{L_1} \leq \frac{\|G_{L_2}(\mathbf{x})\|}{L_2} \quad (10.7)$$

对于 $\forall \mathbf{x} \in \text{inter}(\text{dom}(\mathbf{x}))$ 成立.

证明: 再度利用第二近端定理 (定理 6.39), 对于任意的 $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{E}$ 以及 $L > 0$, 有下式成立:

$$\left\langle \mathbf{v} - \text{prox}_{\frac{1}{L}g}(\mathbf{v}), \text{prox}_{\frac{1}{L}g}(\mathbf{v}) - \mathbf{w} \right\rangle \geq \frac{1}{L}g\left(\text{prox}_{\frac{1}{L}g}(\mathbf{v})\right) - \frac{1}{L}g(\mathbf{w}).$$

令 $L = L_1$, $\mathbf{v} = \mathbf{x} - \frac{1}{L_1}\nabla f(\mathbf{x})$ 以及 $\mathbf{w} = \text{prox}_{\frac{1}{L_2}g}\left(\mathbf{x} - \frac{1}{L_2}\nabla f(\mathbf{x})\right) = T_{L_2}(\mathbf{x})$ 可得

$$\left\langle \mathbf{x} - \frac{1}{L_1}\nabla f(\mathbf{x}) - T_{L_1}(\mathbf{x}), T_{L_1}(\mathbf{x}) - T_{L_2}(\mathbf{x}) \right\rangle \geq \frac{1}{L_1}g(T_{L_1}(\mathbf{x})) - \frac{1}{L_1}g(T_{L_2}(\mathbf{x})).$$

代入 $G_{L_1}(\mathbf{x}) = L_1(\mathbf{x} - T_{L_1}(\mathbf{x}))$ 上式可变为

$$\left\langle \frac{1}{L_1}G_{L_1}(\mathbf{x}) - \frac{1}{L_1}\nabla f(\mathbf{x}), \frac{1}{L_2}G_{L_2}(\mathbf{x}) - \frac{1}{L_1}G_{L_1}(\mathbf{x}) \right\rangle \geq \frac{1}{L_1}g(T_{L_1}(\mathbf{x})) - \frac{1}{L_1}g(T_{L_2}(\mathbf{x})). \quad (*)$$

交换 L_1, L_2 , 还可以推导出

$$\left\langle \frac{1}{L_2}G_{L_2}(\mathbf{x}) - \frac{1}{L_2}\nabla f(\mathbf{x}), \frac{1}{L_1}G_{L_1}(\mathbf{x}) - \frac{1}{L_2}G_{L_2}(\mathbf{x}) \right\rangle \geq \frac{1}{L_2}g(T_{L_2}(\mathbf{x})) - \frac{1}{L_2}g(T_{L_1}(\mathbf{x})). \quad (**)$$

将 (*) 和 (**) 分别乘上 L_1 以及 L_2 后相加, 可得

$$\left\langle G_{L_1}(\mathbf{x}) - G_{L_2}(\mathbf{x}), \frac{1}{L_2}G_{L_2}(\mathbf{x}) - \frac{1}{L_1}G_{L_1}(\mathbf{x}) \right\rangle \geq 0,$$

展开得

$$-\frac{1}{L_1}\|G_{L_1}(\mathbf{x})\|^2 - \frac{1}{L_2}\|G_{L_2}(\mathbf{x})\|^2 + \left\langle G_{L_1}(\mathbf{x}), \frac{1}{L_2}G_{L_2}(\mathbf{x}) \right\rangle + \left\langle -G_{L_2}(\mathbf{x}), -\frac{1}{L_1}G_{L_1}(\mathbf{x}) \right\rangle \geq 0,$$

即

$$\frac{1}{L_1}\|G_{L_1}(\mathbf{x})\|^2 + \frac{1}{L_2}\|G_{L_2}(\mathbf{x})\|^2 \leq \left(\frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2}\right) \langle G_{L_1}(\mathbf{x}), G_{L_2}(\mathbf{x}) \rangle.$$

利用 Cauchy-Schwarz 不等式对上述不等式右侧放缩, 可进一步得到

$$\frac{1}{L_1} \|G_{L_1}(\mathbf{x})\|^2 + \frac{1}{L_2} \|G_{L_2}(\mathbf{x})\|^2 \leq \left(\frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} \right) \|G_{L_1}(\mathbf{x})\| \cdot \|G_{L_2}(\mathbf{x})\|. \quad (10.8)$$

注意到当 $G_{L_2}(\mathbf{x}), G_{L_1}(\mathbf{x})$ 中有一个取 $\mathbf{0}$ 时, 由 (10.8) 可推得 $G_{L_2}(\mathbf{x}), G_{L_1}(\mathbf{x})$ 全为 $\mathbf{0}$, 此时 (10.6) 以及 (10.7) 是显然的. 为此, 考虑 $G_{L_2}(\mathbf{x}) \neq \mathbf{0}$, 并设 $t = \|G_{L_1}(\mathbf{x})\| / \|G_{L_2}(\mathbf{x})\|$. 由 (10.8) 可得

$$\frac{1}{L_1} t + \frac{1}{L_2} t^{-1} \leq \left(\frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} \right) \Rightarrow \frac{1}{L_1} t^2 - \left(\frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} \right) t + \frac{1}{L_2} \leq 0.$$

事实上, 上述二次不等式的解集是 $t \in [1, L_1/L_2]$, 即可推出

$$1 \leq \frac{\|G_{L_1}(\mathbf{x})\|}{\|G_{L_2}(\mathbf{x})\|} \leq \frac{L_1}{L_2} \Rightarrow \begin{cases} \|G_{L_2}(\mathbf{x})\| \leq \|G_{L_1}(\mathbf{x})\| \\ \|G_{L_1}(\mathbf{x})\| / L_1 \leq \|G_{L_2}(\mathbf{x})\| / L_2. \end{cases}$$

即证. □

一个直接的结果可由近端算子的非扩张性以及函数 f 在 $\text{int}(\text{dom}(f))$ 上的 L_f -光滑性得到: 算子 $G_L(\cdot)$ 是 Lipschitz 连续的, Lipschitz 常数为 $2L + L_f$. 确实, 对于任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \text{int}(\text{dom}(f))$, 有:

$$\begin{aligned} & \|G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y})\| \\ &= L \left\| \mathbf{x} - \text{prox}_{\frac{1}{L}g} \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{x}) \right) - \mathbf{y} + \text{prox}_{\frac{1}{L}g} \left(\mathbf{y} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{y}) \right) \right\| \\ &\leq L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| + L \left\| \text{prox}_{\frac{1}{L}g} \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{x}) \right) - \text{prox}_{\frac{1}{L}g} \left(\mathbf{y} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{y}) \right) \right\| \\ &\leq L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| + L \left\| \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{x}) \right) - \left(\mathbf{y} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{y}) \right) \right\| \\ &\leq 2L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| + \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\| \\ &\leq (2L + L_f) \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|. \end{aligned}$$

特别地, 当 $L = L_f$ 时, 可以得到不等式

$$\|G_{L_f}(\mathbf{x}) - G_{L_f}(\mathbf{y})\| \leq 3L_f \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|.$$

上述讨论总结如下引理.

引理 10.10 (梯度映射的 Lipschitz 连续性). 设函数 f 和 g 满足假设 10.1 中的性质 (A) 和 (B). 令 $G_L = G_L^{f,g}$. 则有:

(a) 对于任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \text{int}(\text{dom}(f))$, 有

$$\|G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y})\| \leq (2L + L_f) \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|; \quad (10.9)$$

(b) 对于任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \text{int}(\text{dom}(f))$, 有

$$\|G_{L_f}(\mathbf{x}) - G_{L_f}(\mathbf{y})\| \leq 3L_f \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|.$$

引理 10.11 表明, 当函数 f 被假设为在整个空间上是凸且 L_f -光滑的函数时, 算子 $\frac{3}{4L_f}G_{L_f}$ 是强非扩张的. 一个直接的推论是, G_{L_f} 是 Lipschitz 连续的, Lipschitz 常数为 $\frac{4L_f}{3}$.

引理 10.11 ($\frac{3}{4L_f}G_{L_f}$ 的强非扩张性). 设 f 是一个凸且 L_f -光滑函数 ($L_f > 0$), $g : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个 proper 闭凸函数. 则有:

(a) 对于任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{E}$, 梯度映射 $G_{L_f} \equiv G_{L_f}^{f,g}$ 满足关系式:

$$\langle G_{L_f}(\mathbf{x}) - G_{L_f}(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle \geq \frac{3}{4L_f} \|G_{L_f}(\mathbf{x}) - G_{L_f}(\mathbf{y})\|^2;$$

(b) 对于任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{E}$, 有不等式:

$$\|G_{L_f}(\mathbf{x}) - G_{L_f}(\mathbf{y})\| \leq \frac{4L_f}{3} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|.$$

证明: (b) 是 (a) 和柯西 - 施瓦茨不等式的直接推论. 因此, 我们将证明 (a). 为简化表述, 我们使用记号 $L = L_f$. 根据近端算子的强非扩张性 (定理 6.42(a)), 对于任意的 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{E}$, 有

$$\left\langle T_L(\mathbf{x}) - T_L(\mathbf{y}), \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{x}) \right) - \left(\mathbf{y} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{y}) \right) \right\rangle \geq \|T_L(\mathbf{x}) - T_L(\mathbf{y})\|^2,$$

其中 $T_L \equiv T_L^{f,g}$ 是近端梯度映射. 由于 $T_L = \mathcal{I} - \frac{1}{L}G_L$, 我们得到

$$\begin{aligned} & \left\langle \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L}G_L(\mathbf{x}) \right) - \left(\mathbf{y} - \frac{1}{L}G_L(\mathbf{y}) \right), \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{x}) \right) - \left(\mathbf{y} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{y}) \right) \right\rangle \\ & \geq \left\| \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L}G_L(\mathbf{x}) \right) - \left(\mathbf{y} - \frac{1}{L}G_L(\mathbf{y}) \right) \right\|^2, \end{aligned}$$

这等同于

$$\left\langle \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L}G_L(\mathbf{x}) \right) - \left(\mathbf{y} - \frac{1}{L}G_L(\mathbf{y}) \right), (G_L(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{x})) - (G_L(\mathbf{y}) - \nabla f(\mathbf{y})) \right\rangle \geq 0,$$

因此,

$$\begin{aligned} \langle G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle & \geq \frac{1}{L} \|G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y})\|^2 + \langle \nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle \\ & \quad - \frac{1}{L} \langle G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y}), \nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}) \rangle. \end{aligned}$$

因为 f 是 L -光滑的, 根据定理 5.8(i) 和 (iv) 的等价性, 有

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle \geq \frac{1}{L} \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|^2,$$

从而,

$$L \langle G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle \geq \|G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y})\|^2 + \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|^2 \\ - \langle G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y}), \nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}) \rangle,$$

由柯西 - 施瓦茨不等式, 我们有

$$L \langle G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle \geq \|G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y})\|^2 + \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|^2 \\ - \|G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y})\| \cdot \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|. \quad (10.10)$$

记 $\alpha = \|G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y})\|$, $\beta = \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|$, (10.10) 式的右边为 $\alpha^2 + \beta^2 - \alpha\beta$, 且满足

$$\alpha^2 + \beta^2 - \alpha\beta = \frac{3}{4}\alpha^2 + \left(\frac{\alpha}{2} - \beta\right)^2 \geq \frac{3}{4}\alpha^2,$$

将其与 (10.10) 式结合, 可得不等式

$$L \langle G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle \geq \frac{3}{4}\|G_L(\mathbf{x}) - G_L(\mathbf{y})\|^2,$$

因此, (10.9) 式成立. □

下一个结果展示了在引理 10.11 的设定下, 梯度映射范数的一种不同类型的单调性性质——如果对其自变量采用近端梯度步长, 梯度映射的范数不会增加.

引理 10.12 (梯度映射范数关于近端梯度算子的单调性). 设 f 为凸且 L_f -光滑的函数 ($L_f > 0$), $g: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 为 proper 闭凸函数. 则对任意 $x \in \mathbb{E}$, 有

$$\|G_{L_f}(T_{L_f}(\mathbf{x}))\| \leq \|G_{L_f}(\mathbf{x})\|,$$

其中 $G_{L_f} \equiv G_{L_f}^{f,g}$ 且 $T_{L_f} \equiv T_{L_f}^{f,g}$.

证明: 设 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$, 记 $\mathbf{x}^+ = T_{L_f}(\mathbf{x})$. 根据定理 5.8(i) 和 (iv) 的等价性, 可得

$$\|\nabla f(\mathbf{x}^+) - \nabla f(\mathbf{x})\|^2 \leq L_f \langle \nabla f(\mathbf{x}^+) - \nabla f(\mathbf{x}), \mathbf{x}^+ - \mathbf{x} \rangle. \quad (10.11)$$

令 $\mathbf{a} = \nabla f(\mathbf{x}^+) - \nabla f(\mathbf{x})$, $\mathbf{b} = \mathbf{x}^+ - \mathbf{x}$, 则式 (10.11) 可重写为 $\|\mathbf{a}\|^2 \leq L_f \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$, 等价于

$$\left\| \mathbf{a} - \frac{L_f}{2}\mathbf{b} \right\|^2 \leq \frac{L_f^2}{4}\|\mathbf{b}\|^2,$$

或进一步表示为

$$\left\| \frac{1}{L_f}\mathbf{a} - \frac{1}{2}\mathbf{b} \right\| \leq \frac{1}{2}\|\mathbf{b}\|.$$

利用三角不等式,

$$\left\| \frac{1}{L_f}\mathbf{a} - \mathbf{b} \right\| \leq \left\| \frac{1}{L_f}\mathbf{a} - \mathbf{b} + \frac{1}{2}\mathbf{b} \right\| + \frac{1}{2}\|\mathbf{b}\| \leq \|\mathbf{b}\|.$$

将 \mathbf{a} 和 \mathbf{b} 的表达式代入上述不等式, 可得

$$\left\| \mathbf{x} - \frac{1}{L_f} \nabla f(\mathbf{x}) - \mathbf{x}^+ + \frac{1}{L_f} \nabla f(\mathbf{x}^+) \right\| \leq \|\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}\|.$$

结合邻近算子的非扩张性 (定理 6.42(b)), 最终得到

$$\begin{aligned} \|G_{L_f}(T_{L_f}(\mathbf{x}))\| &= \|G_{L_f}(\mathbf{x}^+)\| = L_f \|\mathbf{x}^+ - T_{L_f}(\mathbf{x}^+)\| = L_f \|T_{L_f}(\mathbf{x}) - T_{L_f}(\mathbf{x}^+)\| \\ &= L_f \left\| \text{prox}_{\frac{1}{L_f}g} \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L_f} \nabla f(\mathbf{x}) \right) - \text{prox}_{\frac{1}{L_f}g} \left(\mathbf{x}^+ - \frac{1}{L_f} \nabla f(\mathbf{x}^+) \right) \right\| \\ &\leq L_f \left\| \mathbf{x} - \frac{1}{L_f} \nabla f(\mathbf{x}) - \mathbf{x}^+ + \frac{1}{L_f} \nabla f(\mathbf{x}^+) \right\| \\ &\leq L_f \|\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}\| = L_f \|T_{L_f}(\mathbf{x}) - \mathbf{x}\| = \|G_{L_f}(\mathbf{x})\|, \end{aligned}$$

由此证得所需结果. \square

10.3.3 近端梯度法的收敛性——非凸情形

我们现在分析在满足假设 10.1 的前提下, 近端梯度法的收敛性. 注意, 我们在此阶段并不假设 f 是凸的. 我们将考虑两种步长策略是: 恒定步长和回溯步长.

- 恒定步长: $L_k = \bar{L} \in \left(\frac{L_f}{2}, \infty\right)$, 对所有 k 成立.
- 回溯策略 **B1**: 该策略需要三个参数 (s, γ, η) , 其中 $s > 0$, $\gamma \in (0, 1)$, $\eta > 1$. L_k 的选取方式如下:

首先, 令 L_k 等于初始猜测 s . 接着, 当满足以下条件时:

$$F(\mathbf{x}^k) - F(T_{L_k}(\mathbf{x}^k)) < \frac{\gamma}{L_k} \|G_{L_k}(\mathbf{x}^k)\|^2,$$

我们设置 $L_k := \eta L_k$. 换句话说, L_k 被选择为 $L_k = s\eta^{i_k}$, 其中 i_k 是使下式成立的最小非负整数:

$$F(\mathbf{x}^k) - F(T_{s\eta^{i_k}}(\mathbf{x}^k)) \geq \frac{\gamma}{s\eta^{i_k}} \|G_{s\eta^{i_k}}(\mathbf{x}^k)\|^2.$$

注 10.13. 注意, 根据假设 10.1, 回溯策略是有限步终止的. 实际上, 将 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^k$ 代入公式 (10.4), 我们可以得到

$$F(\mathbf{x}^k) - F(T_L(\mathbf{x}^k)) \geq \frac{L - \frac{L_f}{2}}{L^2} \|G_L(\mathbf{x}^k)\|^2. \quad (10.12)$$

如果 $L \geq \frac{L_f}{2(1-\gamma)}$, 那么 $\frac{L - \frac{L_f}{2}}{L} \geq \gamma$, 从而, 根据公式 (10.12), 有不等式

$$F(\mathbf{x}^k) - F(T_L(\mathbf{x}^k)) \geq \frac{\gamma}{L} \|G_L(\mathbf{x}^k)\|^2$$

成立, 这意味着当 $L_k \geq \frac{L_f}{2(1-\gamma)}$ 时, 回溯策略必须终止.

我们还可以对 L_k 给出一个上界: 要么 $L_k = s$, 要么回溯策略被执行, 意味着 $\frac{L_k}{\eta}$ 不满足回溯条件. 根据上面的讨论, 这意味着

$$\frac{L_k}{\eta} < \frac{L_f}{2(1-\gamma)},$$

因此有

$$L_k < \frac{\eta L_f}{2(1-\gamma)}.$$

总结来说, 在回溯策略 B1 中, 参数 L_k 满足

$$L_k \leq \max \left\{ s, \frac{\eta L_f}{2(1-\gamma)} \right\}. \quad (10.13)$$

非凸情形下近端梯度方法的收敛性主要基于充分下降引理 (引理 10.4). 我们首先给出以下引理, 表明由近端梯度方法生成的序列的相邻函数值至少减少一个常数乘以梯度映射范数的平方.

引理 10.14 (近端梯度方法的充分下降性). 若假设 10.1 成立. 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为用近端梯度方法求解问题 (10.1) 生成的序列, 所用步长或为常数步长 $L_k = \bar{L} \in \left(\frac{L_f}{2}, \infty\right)$, 或为由参数 (s, γ, η) (其中 $s > 0, \gamma \in (0, 1), \eta > 1$) 通过回溯策略 B1 选择的步长. 则对任意 $k \geq 0$, 有

$$F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq M \|G_d(\mathbf{x}^k)\|^2, \quad (10.14)$$

其中

$$M = \begin{cases} \frac{\bar{L} - \frac{L_f}{2}}{(\bar{L})^2}, & \text{常数步长情形,} \\ \frac{\gamma}{\max\{s, \frac{\eta L_f}{2(1-\gamma)}\}}, & \text{回溯步长情形,} \end{cases} \quad (10.15)$$

且

$$d = \begin{cases} \bar{L}, & \text{常数步长情形,} \\ s, & \text{回溯步长情形.} \end{cases} \quad (10.16)$$

证明: 常数步长情形下的结果可通过将 $L = \bar{L}$ 和 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^k$ 代入式 (10.4) 得到. 对于

使用回溯步长的情形, 根据回溯过程的定义有

$$F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq \frac{\gamma}{L_k} \|G_{L_k}(\mathbf{x}^k)\|^2 \geq \frac{\gamma}{\max\left\{s, \frac{\eta L_f}{2(1-\gamma)}\right\}} \|G_{L_k}(\mathbf{x}^k)\|^2,$$

其中最后一个不等式源于式 (10.13) 给出的 L_k 上界. 结合梯度映射的单调性 (定理 10.9) 以及 $L_k \geq s$ 的约束 (该约束蕴含不等式 $\|G_{L_k}(\mathbf{x}^k)\| \geq \|G_s(\mathbf{x}^k)\|$), 即可得到回溯情形下的结论. \square

现在我们可以证明梯度映射范数收敛于零, 且该方法生成的序列的极限点均为问题 (10.1) 的驻点.

定理 10.15 (近端梯度方法的收敛性——非凸情形). 若假设 10.1 成立, 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为用近端梯度方法求解问题 (10.1) 生成的序列, 所用步长或为常数步长 $L_k = \bar{L} \in \left(\frac{L_f}{2}, \infty\right)$, 或为由参数 (s, γ, η) (其中 $s > 0, \gamma \in (0, 1), \eta > 1$) 通过回溯策略 B1 选择的步长. 则

- (a) 序列 $\{F(\mathbf{x}^k)\}_{k \geq 0}$ 是非增的. 此外, $F(\mathbf{x}^{k+1}) < F(\mathbf{x}^k)$ 当且仅当 \mathbf{x}^k 不是问题 (10.1) 的驻点;
- (b) 当 $k \rightarrow \infty$ 时, $G_d(\mathbf{x}^k) \rightarrow \mathbf{0}$, 其中 d 由式 (10.16) 给出;
- (c)

$$\min_{n=0,1,\dots,k} \|G_d(\mathbf{x}^n)\| \leq \frac{\sqrt{F(\mathbf{x}^0) - F_{\text{opt}}}}{\sqrt{M(k+1)}}, \quad (10.17)$$

其中 M 由式 (10.15) 给出;

- (d) 序列 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 的所有极限点均为问题 (10.1) 的驻点.

证明: (a) 由引理 10.14 可知

$$F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq M \|G_d(\mathbf{x}^k)\|^2, \quad (10.18)$$

由此可直接推出 $F(\mathbf{x}^k) \geq F(\mathbf{x}^{k+1})$. 若 \mathbf{x}^k 不是问题 (10.1) 的驻点, 则 $G_d(\mathbf{x}^k) \neq \mathbf{0}$ (定理 10.7(b)), 从而由式 (10.18) 得 $F(\mathbf{x}^k) > F(\mathbf{x}^{k+1})$. 若 \mathbf{x}^k 是问题 (10.1) 的驻点, 则 $G_{L_k}(\mathbf{x}^k) = \mathbf{0}$, 进而有

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \frac{1}{L_k} G_{L_k}(\mathbf{x}^k) = \mathbf{x}^k,$$

因此 $F(\mathbf{x}^k) = F(\mathbf{x}^{k+1})$.

- (b) 由于序列 $\{F(\mathbf{x}^k)\}_{k \geq 0}$ 是非增且有下界的, 故其收敛. 特别地, 当 $k \rightarrow \infty$ 时, $F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \rightarrow 0$, 结合式 (10.18) 可知 $\|G_d(\mathbf{x}^k)\| \rightarrow 0$.
- (c) 将不等式

$$F(\mathbf{x}^n) - F(\mathbf{x}^{n+1}) \geq M \|G_d(\mathbf{x}^n)\|^2$$

对 $n = 0, 1, \dots, k$ 求和, 得到

$$F(\mathbf{x}^0) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq M \sum_{n=0}^k \|G_d(\mathbf{x}^n)\|^2 \geq M(k+1) \min_{n=0,1,\dots,k} \|G_d(\mathbf{x}^n)\|^2.$$

利用 $F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq F_{\text{opt}}$, 即得式 (10.17).

(d) 设 $\bar{\mathbf{x}}$ 为序列 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 的一个极限点. 则存在收敛于 $\bar{\mathbf{x}}$ 的子序列 $\{\mathbf{x}^{k_j}\}_{j \geq 0}$. 对任意 $j \geq 0$, 有

$$\|G_d(\bar{\mathbf{x}})\| \leq \|G_d(\mathbf{x}^{k_j}) - G_d(\bar{\mathbf{x}})\| + \|G_d(\mathbf{x}^{k_j})\| \leq (2d + L_f)\|\mathbf{x}^{k_j} - \bar{\mathbf{x}}\| + \|G_d(\mathbf{x}^{k_j})\|, \quad (10.19)$$

其中第二个不等式应用了引理 10.10(a). 由于当 $j \rightarrow \infty$ 时式 (10.19) 的右侧趋于 0, 故有 $G_d(\bar{\mathbf{x}}) = \mathbf{0}$. 根据定理 10.7(b), 这意味着 $\bar{\mathbf{x}}$ 是问题 (10.1) 的驻点. □

10.4 近端梯度法的分析—凸性情况

10.4.1 基本的 Prox-Grad 不等式

对近端梯度法在 f 为凸函数情形下的分析依赖于如下关键不等式 (实际上并不要求 f 是凸的).

定理 10.16 (基本的 Prox-Grad 不等式). 假设 f 和 g 满足假设 10.1 的性质 (A) 和 (B). 对任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$, $\mathbf{y} \in \text{int}(\text{dom}(f))$ 和 $L > 0$, 若满足

$$f(T_L(\mathbf{y})) \leq f(\mathbf{y}) + \langle \nabla f(\mathbf{y}), T_L(\mathbf{y}) - \mathbf{y} \rangle + \frac{L}{2} \|T_L(\mathbf{y}) - \mathbf{y}\|^2, \quad (10.20)$$

则成立:

$$F(\mathbf{x}) - F(T_L(\mathbf{y})) \geq \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - T_L(\mathbf{y})\|^2 - \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \ell_f(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (10.21)$$

其中

$$\ell_f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y}) - \langle \nabla f(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle.$$

证明: 考虑如下函数:

$$\varphi(\mathbf{u}) = f(\mathbf{y}) + \langle \nabla f(\mathbf{y}), \mathbf{u} - \mathbf{y} \rangle + g(\mathbf{u}) + \frac{L}{2} \|\mathbf{u} - \mathbf{y}\|^2.$$

由于 φ 是 L -强凸函数, 且 $T_L(\mathbf{y}) = \arg \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{E}} \varphi(\mathbf{u})$:

$$T_L(\mathbf{y}) = \text{prox}_{\frac{1}{L}g}(\mathbf{y} - \frac{1}{L}\nabla f(\mathbf{y}))$$

$$\begin{aligned}
&= \arg \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{E}} \left\{ \frac{1}{L}g(\mathbf{u}) + \frac{1}{2} \left\| \mathbf{u} - \left(\mathbf{y} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{y}) \right) \right\|^2 \right\} \\
&= \arg \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{E}} \varphi(\mathbf{u}).
\end{aligned}$$

那么根据定理 5.25(b) 可得:

$$\varphi(\mathbf{x}) - \varphi(T_L(\mathbf{y})) \geq \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - T_L(\mathbf{y})\|^2. \quad (10.22)$$

注意到根据 (10.20) 式, 有:

$$\begin{aligned}
\varphi(T_L(\mathbf{y})) &= f(\mathbf{y}) + \langle \nabla f(\mathbf{y}), T_L(\mathbf{y}) - \mathbf{y} \rangle + \frac{L}{2} \|T_L(\mathbf{y}) - \mathbf{y}\|^2 + g(T_L(\mathbf{y})) \\
&\geq f(T_L(\mathbf{y})) + g(T_L(\mathbf{y})) = F(T_L(\mathbf{y})),
\end{aligned}$$

因此, (10.22) 式意味着对任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$ 都有:

$$\varphi(\mathbf{x}) - F(T_L(\mathbf{y})) \geq \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - T_L(\mathbf{y})\|^2.$$

将 $\varphi(\mathbf{x})$ 的表达式代入上式, 我们得到:

$$f(\mathbf{y}) + \langle \nabla f(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle + g(\mathbf{x}) + \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 - F(T_L(\mathbf{y})) \geq \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - T_L(\mathbf{y})\|^2,$$

即等价于我们想要的结论:

$$F(\mathbf{x}) - F(T_L(\mathbf{y})) \geq \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - T_L(\mathbf{y})\|^2 - \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y}) - \langle \nabla f(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle,$$

定理得证. \square

注 10.17. 显然, 根据下降引理 (引理 5.7), 式 (10.20) 对于 $L = L_f$ 是满足的, 因此, 对于任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$ 和 $\mathbf{y} \in \text{int}(\text{dom}(f))$, 有不等式

$$F(\mathbf{x}) - F(T_{L_f}(\mathbf{y})) \geq \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x} - T_{L_f}(\mathbf{y})\|^2 - \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \ell_f(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

成立.

定理 10.16 的一个直接推论是另一个版本的充分下降引理 (引理 10.4). 这可以通过在基本的 Prox-Grad 不等式中令 $\mathbf{y} = \mathbf{x}$ 来实现.

推论 10.18 (充分下降引理——第二版本). 假设 f 和 g 满足假设 10.1 中的性质 (A) 和 (B). 对于任何 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$, 如果

$$f(T_L(\mathbf{x})) \leq f(\mathbf{x}) + \langle \nabla f(\mathbf{x}), T_L(\mathbf{x}) - \mathbf{x} \rangle + \frac{L}{2} \|T_L(\mathbf{x}) - \mathbf{x}\|^2,$$

那么有

$$F(\mathbf{x}) - F(T_L(\mathbf{x})) \geq \frac{1}{2L} \|G_L(\mathbf{x})\|^2.$$

10.4.2 凸情况下的步长策略

当 f 也是凸函数时, 我们将考虑与非凸情况相同的固定步长和回溯步长策略. 回溯过程 (我们称之为“回溯过程 B2”) 将与非凸情况下的略有不同, 其目标是找到一个常数 L_k , 满足

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq f(\mathbf{x}_k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k \rangle + \frac{L_k}{2} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\|^2. \quad (10.23)$$

在 $g \equiv 0$ 的特殊情况下, 近端梯度法简化为梯度法 $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{1}{L_k} \nabla f(\mathbf{x}_k)$, 条件 (10.23) 简化为

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_{k+1}) \geq \frac{1}{2L_k} \|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|^2,$$

这与引理 10.4 中描述的充分下降条件相似, 因此条件 (10.23) 也可以被视为一种“充分下降条件”.

- 固定步长: $L_k = L_f$ 对所有 k .
- 回溯过程 B2: 该过程需要两个参数 (s, η) , 其中 $s > 0$ 和 $\eta > 1$. 定义 $L_{-1} = s$. 在第 k 次迭代中 ($k \geq 0$), L_k 的选择如下. 首先, 将 L_k 设置为等于 L_{k-1} . 然后, 当

$$f(T_{L_k}(\mathbf{x}_k)) > f(\mathbf{x}_k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}_k), T_{L_k}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{x}_k \rangle + \frac{L_k}{2} \|T_{L_k}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{x}_k\|^2$$

时, 将 L_k 设置为 $L_k := \eta L_k$. 换句话说, L_k 被选择为 $L_k = L_{k-1} \eta^{i_k}$, 其中 i_k 是满足条件的最小非负整数:

$$f(T_{L_{k-1} \eta^{i_k}}(\mathbf{x}_k)) \leq f(\mathbf{x}_k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}_k), T_{L_{k-1} \eta^{i_k}}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{x}_k \rangle + \frac{L_k}{2} \|T_{L_{k-1} \eta^{i_k}}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{x}_k\|^2.$$

注 10.19 (关于 L_k 的上下界). 根据假设 10.1 和下降引理 (引理 5.7), 两种步长规则都确保了在每次迭代中满足充分下降条件 (10.23). 此外, 回溯过程 B2 产生的常数 L_k 满足以下界限, 对所有 $k \geq 0$:

$$s \leq L_k \leq \max\{\eta L_f, s\}. \quad (10.24)$$

不等式 $s \leq L_k$ 是显而易见的. 为了理解不等式 $L_k \leq \max\{\eta L_f, s\}$, 注意有两种情况. 要么 $L_k = s$, 要么 $L_k > s$, 在后一种情况下, 存在一个索引 $0 \leq k' \leq k$, 使得条件 (10.23) 在 $k = k'$ 和 L_k/η 替换 L_k 时不满足. 根据下降引理, 这意味着

$$\frac{L_k}{\eta} < L_f,$$

因此我们已经证明了 $L_k \leq \max\{\eta L_f, s\}$. 我们还注意到, L_k 的界限可以重写为

$$\beta L_f \leq L_k \leq \alpha L_f,$$

其中

$$\alpha = \begin{cases} 1, & \text{固定步长,} \\ \max\left\{\eta, \frac{s}{L_f}\right\}, & \text{回溯步长.} \end{cases} \quad \beta = \begin{cases} 1, & \text{固定步长,} \\ \frac{s}{L_f}, & \text{回溯步长.} \end{cases} \quad (10.25)$$

注 10.20 (近端梯度法的单调性). 由于条件 (10.23) 对于两种步长规则都成立, 对于任意 $k \geq 0$, 我们可以调用基本的近端梯度不等式 (10.21), 取 $\mathbf{y} = \mathbf{x} = \mathbf{x}_k$ 和 $L = L_k$, 得到不等式

$$F(\mathbf{x}_k) - F(\mathbf{x}_{k+1}) \geq \frac{L_k}{2} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1}\|^2,$$

这特别意味着 $F(\mathbf{x}_k) \geq F(\mathbf{x}_{k+1})$, 即该方法生成的函数值序列是非递增的.

10.4.3 凸情况下的收敛分析

在假设 10.1 的基础上, 我们进一步假设 f 是凸函数. 我们首先建立生成的函数值序列收敛到最优值的速率是 $O(1/k)$. 这种收敛速率被称为次线性速率. 这当然比投影次梯度法和镜像下降法的 $O(1/\sqrt{k})$ 这当然比投影次梯度法和镜像下降法的 $O(1/\sqrt{k})$ 收敛速率有所改进. 由于对目标函数假设了额外的性质, 因此可以建立改进的收敛速率也不足为奇.

定理 10.21. (近端梯度法的 $O(1/k)$ 收敛速率) 假设假设 10.1 成立, 并且 f 是凸函数. 设 $\{\mathbf{x}_k\}_{k \geq 0}$ 是由近端梯度法生成的序列, 用于求解问题 (10.1), 步长规则可以是固定步长 $L_k \equiv L_f$ (对所有 $k \geq 0$), 也可以是回溯过程 B2. 那么对于任意 $\mathbf{x}^* \in \mathbf{X}^*$ 和 $k \geq 0$,

$$F(\mathbf{x}_k) - F_{\text{opt}} \leq \frac{\alpha L_f \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2}{2k}, \quad (10.26)$$

其中在固定步长设置中 $\alpha = 1$, 如果使用回溯规则, 则 $\alpha = \max\left\{\eta, \frac{s}{L_f}\right\}$.

证明: 对于任意 $n \geq 0$, 在基本的近端梯度不等式 (10.21) 中取 $L = L_n$, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ 和 $\mathbf{y} = \mathbf{x}_n$, 并考虑到在两种步长规则中条件 (10.20) 都是满足的, 我们得到

$$\begin{aligned} \frac{2}{L_n} (F(\mathbf{x}^*) - F(\mathbf{x}_{n+1})) &\geq \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{n+1}\|^2 - \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_n\|^2 + \frac{2}{L_n} \ell_f(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_n) \\ &\geq \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{n+1}\|^2 - \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_n\|^2, \end{aligned}$$

其中最后一个不等式使用了 f 的凸性. 对上述不等式从 $n = 0, 1, \dots, k-1$ 求和, 并

利用对所有 $n \geq 0$ 有 $L_n \leq \alpha L_f$ (见注释 10.19), 我们得到

$$\frac{2}{\alpha L_f} \sum_{n=0}^{k-1} (F(\mathbf{x}^*) - F(\mathbf{x}_{n+1})) \geq \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k\|^2 - \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\|^2.$$

因此,

$$\sum_{n=0}^{k-1} (F(\mathbf{x}_{n+1}) - F_{\text{opt}}) \leq \frac{\alpha L_f}{2} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\|^2 - \frac{\alpha L_f}{2} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k\|^2 \leq \frac{\alpha L_f}{2} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\|^2.$$

根据序列 $\{F(\mathbf{x}_n)\}_{n \geq 0}$ 的单调性 (见注释 10.20), 我们可以得出

$$k(F(\mathbf{x}_k) - F_{\text{opt}}) \leq \sum_{n=0}^{k-1} (F(\mathbf{x}_{n+1}) - F_{\text{opt}}) \leq \frac{\alpha L_f}{2} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\|^2.$$

因此,

$$F(\mathbf{x}_k) - F_{\text{opt}} \leq \frac{\alpha L_f \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\|^2}{2k}.$$

定理得证. \square

注 10.22. 注意, 在定理 10.21 的证明中, 我们没有利用过程 B2 生成的常数序列 $\{L_k\}_{k \geq 0}$ 是非递减的这一事实. 这意味着该常数序列的单调性并不重要. 实际上我们可以证明, 对于任何保证条件 (10.23) 成立且满足 $L_k \leq \alpha L_f$ 的回溯过程, 都可以得到相同的收敛速率.

定理 10.23 (由近端梯度法生成的序列的 Fejér 单调性). 假设假设 10.1 成立, 并且 f 是凸函数. 设 $\{\mathbf{x}_k\}_{k \geq 0}$ 是由近端梯度法生成的序列, 用于求解问题 (10.1), 步长规则可以是固定步长 $L_k \equiv L_f$ (对所有 $k \geq 0$), 也可以是回溯过程 B2. 那么对于任意 $\mathbf{x}^* \in \mathbf{X}^*$ 和 $k \geq 0$,

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|. \quad (10.27)$$

证明: 我们将重复定理 10.21 证明中的一些论证. 在基本的近端梯度不等式 (10.21) 中取 $L = L_k$, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ 和 $\mathbf{y} = \mathbf{x}_k$, 并考虑到在两种步长规则中条件 (10.20) 都是满足的, 我们得到

$$\begin{aligned} \frac{2}{L_k} (F(\mathbf{x}^*) - F(\mathbf{x}_{k+1})) &\geq \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{k+1}\|^2 - \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k\|^2 + \frac{2}{L_k} \ell_f(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_k) \\ &\geq \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{k+1}\|^2 - \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k\|^2, \end{aligned}$$

其中最后一个不等式使用了 f 的凸性. 结果 (10.27) 现在由不等式 $F(\mathbf{x}^*) - F(\mathbf{x}_{k+1}) \leq 0$ 得出. \square

定理 10.24 (由近端梯度法生成的序列的收敛性). 假设假设 10.1 成立, 并且 f 是凸函数. 设 $\{\mathbf{x}_k\}_{k \geq 0}$ 是由近端梯度法生成的序列, 用于求解问题 (10.1), 步长规则可以

是固定步长 $L_k \equiv L_f$ (对所有 $k \geq 0$), 也可以是回溯过程 B2. 那么序列 $\{\mathbf{x}_k\}_{k \geq 0}$ 收敛到问题 (10.1) 的一个最优解.

证明: 根据定理 10.23, 序列相对于 \mathbf{X}^* 是 Fejér 单调的. 因此, 根据定理 8.16, 为了证明序列收敛到 \mathbf{X}^* 中的一个点, 只需证明该序列的任意极限点必然属于 \mathbf{X}^* . 设 $\tilde{\mathbf{x}}$ 是序列的一个极限点, 则存在一个子序列 $\{\mathbf{x}_{k_j}\}_{j \geq 0}$ 收敛到 $\tilde{\mathbf{x}}$. 根据定理 10.21,

$$F(\mathbf{x}_{k_j}) \rightarrow F_{\text{opt}}, \quad \text{当 } j \rightarrow \infty. \quad (10.28)$$

由于 F 是闭函数, 因此它也是下半连续的, 从而 $F(\tilde{\mathbf{x}}) \leq \lim_{j \rightarrow \infty} F(\mathbf{x}_{k_j}) = F_{\text{opt}}$, 这意味着 $\tilde{\mathbf{x}} \in \mathbf{X}^*$. \square

为了推导近端梯度法的复杂性结果, 我们假设对于某个 $\mathbf{x}^* \in \mathbf{X}^*$ 和某个常数 $R > 0$, 有 $\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\| \leq R$; 例如, 如果 $\text{dom}(g)$ 是有界的, 则可以取 R 为其直径. 根据不等式 (10.26), 为了获得问题 (10.1) 的 ε -最优解, 只需满足

$$\frac{\alpha L_f R^2}{2k} \leq \varepsilon,$$

这等价于

$$k \geq \frac{\alpha L_f R^2}{2\varepsilon}.$$

因此, 为了获得一个 ε -最优解, 需要的迭代次数为 $O\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$, 这比投影次梯度法的结果有所改进, 后者需要 $O\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$ 次迭代 (参见定理 8.18). 我们将上述观察总结在以下定理中.

定理 10.25 (近端梯度法的复杂性). 在定理 10.21 的设置下, 对于任意满足

$$k \geq \left\lceil \frac{\alpha L_f R^2}{2\varepsilon} \right\rceil$$

的 k , 都有 $F(\mathbf{x}_k) - F_{\text{opt}} \leq \varepsilon$, 其中 R 是 $\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\|$ 的上界, 对某个 $\mathbf{x}^* \in \mathbf{X}^*$ 成立.

在非凸情况下 (即 f 不一定为凸函数时), 定理 10.15(c) 建立了梯度映射范数的收敛速率为 $O\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$. 接下来, 我们将证明在 f 的额外凸性假设下, 这一速率可以提高到 $O\left(\frac{1}{k}\right)$.

定理 10.26 (梯度映射最小范数的 $O\left(\frac{1}{k}\right)$ 收敛速率). 假设假设 10.1 成立, 并且 f 是凸函数. 设 $\{\mathbf{x}_k\}_{k \geq 0}$ 是由近端梯度法生成的序列, 用于求解问题 (10.1), 步长规则可以是固定步长 $L_k \equiv L_f$ (对所有 $k \geq 0$), 也可以是回溯过程 B2. 那么对于任意 $\mathbf{x}^* \in \mathbf{X}^*$ 和 $k \geq 1$,

$$\min_{n=0,1,\dots,k} \|G_{\alpha L_f}(\mathbf{x}_n)\| \leq \frac{2\alpha^{1.5} L_f \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|}{\sqrt{\beta k}}, \quad (10.29)$$

其中在固定步长设置中 $\alpha = \beta = 1$, 如果使用回溯规则, 则 $\alpha = \max\left\{\eta, \frac{s}{L_f}\right\}$, $\beta = \frac{s}{L_f}$.

证明: 根据充分下降引理 (推论 10.18), 对于任意 $n \geq 0$,

$$F(\mathbf{x}_n) - F(\mathbf{x}_{n+1}) = F(\mathbf{x}_n) - F(T_{L_n}(\mathbf{x}_n)) \geq \frac{1}{2L_n} \|G_{L_n}(\mathbf{x}_n)\|^2. \quad (10.30)$$

根据定理 10.9 以及 $\beta L_f \leq L_n \leq \alpha L_f$ (参见注释 10.19), 可以得到

$$\frac{1}{2L_n} \|G_{L_n}(\mathbf{x}_n)\|^2 = \frac{L_n}{2} \frac{\|G_{L_n}(\mathbf{x}_n)\|^2}{L_n^2} \geq \frac{\beta L_f}{2} \frac{\|G_{\alpha L_f}(\mathbf{x}_n)\|^2}{\alpha^2 L_f^2} = \frac{\beta}{2\alpha^2 L_f} \|G_{\alpha L_f}(\mathbf{x}_n)\|^2. \quad (10.31)$$

因此, 结合 (10.30) 和 (10.31),

$$F(\mathbf{x}_n) - F_{\text{opt}} \geq F(\mathbf{x}_{n+1}) - F_{\text{opt}} + \frac{\beta}{2\alpha^2 L_f} \|G_{\alpha L_f}(\mathbf{x}_n)\|^2. \quad (10.32)$$

设 p 是一个正整数. 对 (10.32) 从 $n = p, p+1, \dots, 2p-1$ 求和, 得到

$$F(\mathbf{x}_p) - F_{\text{opt}} \geq F(\mathbf{x}_{2p}) - F_{\text{opt}} + \frac{\beta}{2\alpha^2 L_f} \sum_{n=p}^{2p-1} \|G_{\alpha L_f}(\mathbf{x}_n)\|^2. \quad (10.33)$$

根据定理 10.21, $F(\mathbf{x}_p) - F_{\text{opt}} \leq \frac{\alpha L_f \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2}{2p}$, 结合 $F(\mathbf{x}_{2p}) - F_{\text{opt}} \geq 0$ 和 (10.33), 可以得到

$$\frac{\beta p}{2\alpha^2 L_f} \min_{n=0,1,\dots,2p-1} \|G_{\alpha L_f}(\mathbf{x}_n)\|^2 \leq \frac{\beta}{2\alpha^2 L_f} \sum_{n=p}^{2p-1} \|G_{\alpha L_f}(\mathbf{x}_n)\|^2 \leq \frac{\alpha L_f \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2}{2p}.$$

因此,

$$\min_{n=0,1,\dots,2p-1} \|G_{\alpha L_f}(\mathbf{x}_n)\|^2 \leq \frac{\alpha^3 L_f^2 \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2}{\beta p^2} \quad (10.34)$$

并且

$$\min_{n=0,1,\dots,2p} \|G_{\alpha L_f}(\mathbf{x}_n)\|^2 \leq \frac{\alpha^3 L_f^2 \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2}{\beta p^2}. \quad (10.35)$$

我们得出结论, 对于任意 $k \geq 1$,

$$\min_{n=0,1,\dots,k} \|G_{\alpha L_f}(\mathbf{x}_n)\|^2 \leq \frac{4\alpha^3 L_f^2 \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2}{\beta k^2}.$$

定理得证. \square

当进一步假设 f 在整个空间 \mathbb{E} 上是 L_f -光滑的时, 我们可以使用引理 10.12 来获得固定步长情况下的改进结果.

定理 10.27 (固定步长规则下梯度映射范数的 $O(\frac{1}{k})$ 收敛速率). 假设假设 10.1 成立, 并且 f 是凸函数且在整个空间 \mathbb{E} 上是 L_f -光滑的. 设 $\{\mathbf{x}_k\}_{k \geq 0}$ 是由近端梯度法

生成的序列, 用于求解问题 (10.1), 步长规则为固定步长 $L_k \equiv L_f$ (对所有 $k \geq 0$). 那么对于任意 $\mathbf{x}^* \in \mathbf{X}^*$ 和 $k \geq 0$,

- (a) $\|G_{L_f}(\mathbf{x}_{k+1})\| \leq \|G_{L_f}(\mathbf{x}_k)\|$;
 (b) $\|G_{L_f}(\mathbf{x}_k)\| \leq \frac{2L_f\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|}{k+1}$.

证明: 根据引理 10.12, 取 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_k$, 可以得到 (a). 将 $\alpha = \beta = 1$ 代入定理 10.26 的结果中, 并注意到根据 (a), $\|G_{L_f}(\mathbf{x}_k)\| = \min_{n=0,1,\dots,k} \|G_{L_f}(\mathbf{x}_n)\|$, 可以得到 (b). \square

10.5 近端点法

考虑问题

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} g(\mathbf{x}), \quad (10.36)$$

其中 $g: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个 proper 的闭凸函数. 问题 (10.36) 实际上是复合问题 (10.1) 的一个特殊情况, 其中 $f \equiv 0$. 在这种情况下, 近端梯度法的更新步骤为

$$\mathbf{x}_{k+1} = \text{prox}_{\frac{1}{L_k}} g(\mathbf{x}_k).$$

取 $L_k = \frac{1}{c}$ (其中 $c > 0$), 我们得到近端点法.

近端点法

初始化: 选择 $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{E}$ 和 $c > 0$.

一般步骤 ($k \geq 0$):

$$\mathbf{x}_{k+1} = \text{prox}_{cg}(\mathbf{x}_k).$$

由于近端点法的一般步骤要求最小化函数 $g(\mathbf{x}) + \frac{c}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|^2$, 这通常与求解原问题 $\min g(\mathbf{x})$ 一样困难, 因此近端点法实际上不是一个实用的算法. 由于近端点法是近端梯度法的一个特殊情况, 我们可以从近端梯度法的相应结果中推导出其主要的收敛结果. 具体来说, 由于光滑部分 $f \equiv 0$ 是 0-光滑的. 我们可以取任意固定步长来保证收敛, 定理 10.21 和 10.24 意味着以下结果.

定理 10.28 (近端点法的收敛性). 设 $g: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个 proper 的闭凸函数, 假设问题

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} g(\mathbf{x})$$

有一个非空的最优解集 \mathbf{X}^* , 并设最优值为 g_{opt} . 设 $\{\mathbf{x}_k\}_{k \geq 0}$ 是由近端点法生成的序列, 参数为 $c > 0$. 那么

- (a) 对于任意 $\mathbf{x}^* \in \mathbf{X}^*$ 和 $k \geq 0$, 有 $g(\mathbf{x}_k) - g_{\text{opt}} \leq \frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2}{2ck}$;

(b) 序列 $\{\mathbf{x}_k\}_{k \geq 0}$ 收敛到 \mathbf{X}^* 中的某一点.

10.6 近端梯度法的收敛性——强凸情况

在假设 f 是 σ -强凸的 ($\sigma > 0$) 的情况下, 可以将次线性收敛速度改进为线性收敛速度, 即形式为 $O(q^k)$ 的收敛速度, 其中 $q \in (0, 1)$. 在强凸情况的分析中, 我们用 \mathbf{x}^* 表示问题 (10.1) 的唯一最优解.

定理 10.29 (近端梯度法的线性收敛速度——强凸情况). 假设假设 10.1 成立, 并且 f 是 σ -强凸的 ($\sigma > 0$). 设 $\{\mathbf{x}_k\}_{k \geq 0}$ 是由近端梯度法生成的序列, 用于求解问题 (10.1), 其中步长规则为常数步长 $L_k \equiv L_f$ 对所有 $k \geq 0$ 或回溯过程 B2. 设

$$\alpha = \begin{cases} 1, & \text{常数步长,} \\ \max\left\{\eta, \frac{s}{L_f}\right\}, & \text{回溯步长.} \end{cases}$$

那么对于任意 $k \geq 0$,

- (a) $\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \left(1 - \frac{\sigma}{\alpha L_f}\right) \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2;$
- (b) $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \left(1 - \frac{\sigma}{\alpha L_f}\right)^k \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2;$
- (c) $F(\mathbf{x}_{k+1}) - F_{\text{opt}} \leq \frac{\alpha L_f}{2} \left(1 - \frac{\sigma}{\alpha L_f}\right)^{k+1} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2.$

证明: 将 $L = L_k$, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, 和 $\mathbf{y} = \mathbf{x}_k$ 代入基本近端梯度不等式 (10.21) 并考虑到在两种步长规则中条件 (10.20) 都满足, 我们得到

$$F(\mathbf{x}^*) - F(\mathbf{x}_{k+1}) \geq \frac{L_k}{2} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{k+1}\|^2 - \frac{L_k}{2} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k\|^2 + \ell_f(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_k).$$

由于 f 是 σ -强凸的, 根据定理 5.24(ii) 有

$$\ell_f(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_k) = f(\mathbf{x}^*) - f(\mathbf{x}_k) - \langle \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k \rangle \geq \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2.$$

因此,

$$F(\mathbf{x}^*) - F(\mathbf{x}_{k+1}) \geq \frac{L_k}{2} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{k+1}\|^2 - \frac{L_k - \sigma}{2} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k\|^2. \quad (10.37)$$

由于 \mathbf{x}^* 是 F 的最小化点, $F(\mathbf{x}^*) - F(\mathbf{x}_{k+1}) \leq 0$, 因此, 根据 (10.37) 和 $L_k \leq \alpha L_f$ (见注释 10.19),

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \left(1 - \frac{\sigma}{L_k}\right) \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \left(1 - \frac{\sigma}{\alpha L_f}\right) \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2,$$

这证明了部分 (a). 部分 (b) 直接由 (a) 得出. 为了证明 (c), 注意根据 (10.37),

$$F(\mathbf{x}^{k+1}) - F_{\text{opt}} \leq \frac{L_k - \sigma}{2} \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{L_k}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2$$

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{\alpha L_f - \sigma}{2} \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 \\
&= \frac{\alpha L_f}{2} \left(1 - \frac{\sigma}{\alpha L_f}\right) \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 \\
&\leq \frac{\alpha L_f}{2} \left(1 - \frac{\sigma}{\alpha L_f}\right)^{k+1} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2,
\end{aligned}$$

其中在最后一个不等式中使用了部分 (b). 定理得证. \square

定理 10.29 立即意味着在强凸情况下, 近端梯度法需要 $\log\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$ 次迭代来获得一个 ε -最优解.

定理 10.30 (近端梯度法的复杂性——强凸情况). 在定理 10.29 的设定下, 对于任意 $k \geq 1$ 满足

$$k \geq \alpha\kappa \log\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) + \alpha\kappa \log\left(\frac{\alpha L_f R^2}{2}\right),$$

其中 R 是 $\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|$ 的一个上界, $\kappa = \frac{L_f}{\sigma}$, 则 $F(\mathbf{x}_k) - F_{\text{opt}} \leq \varepsilon$ 成立.

证明: 设 $k \geq 1$. 根据定理 10.29 和 κ 的定义, 不等式 $F(\mathbf{x}_k) - F_{\text{opt}} \leq \varepsilon$ 成立的一个充分条件是

$$\frac{\alpha L_f}{2} \left(1 - \frac{1}{\alpha\kappa}\right)^k R^2 \leq \varepsilon,$$

这等价于

$$k \log\left(1 - \frac{1}{\alpha\kappa}\right) \leq \log\left(\frac{2\varepsilon}{\alpha L_f R^2}\right). \quad (10.38)$$

由于对于任意 $x \leq 1$, 有 $\log(1 - x) \leq -x$, 因此 (10.38) 成立的一个充分条件是

$$-\frac{1}{\alpha\kappa} k \leq \log\left(\frac{2\varepsilon}{\alpha L_f R^2}\right),$$

即

$$k \geq \alpha\kappa \log\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) + \alpha\kappa \log\left(\frac{\alpha L_f R^2}{2}\right).$$

定理得证. \square

10.7 快速近端梯度法-FISTA

10.7.1 方法

近端梯度法在函数值向最优值收敛方面达到了 $O(1/k)$ 的收敛速度. 在本节中, 我们将展示如何对该方法进行加速, 以便在函数值方面获得 $O(1/k^2)$ 的收敛速度. 该方法被称为“快速近端梯度法”, 但我们也将它称为“FISTA”, 它是“快速迭代收缩阈值算法”的首字母缩写词; 有关进一步的解释, 请参见例 10.37. 该方法由

Beck 和 Teboulle 在论文 [18] 中设计和分析, 并从中得出收敛分析.

我们假设 f 是凸函数, 并且是 L_f -光滑, 即它在整个空间 \mathbb{E} 上都是 L_f -光滑. 我们将所有必要的性质归纳在以下假设中.

假设 10.31. (A) $g: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是 *proper*, 闭且凸的.

(B) $f: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 是 L_f -光滑且凸的.

(C) 优化问题 (10.1) 的可行集非空, 记为 \mathbf{X}^* . 该问题的最优值记为 F_{opt} .

FISTA 的描述现在如下.

FISTA

输入: (f, g, \mathbf{x}^0) , 其中 f 和 g 满足假设 10.31 中的性质 (A) 和 (B), 且 $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{E}$.

初始化: 令 $\mathbf{y}^0 = \mathbf{x}^0$ 且 $t_0 = 1$.

一般步骤: 对于任意 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

- (a) 选取 $L_k > 0$;
- (b) 令 $\mathbf{x}^{k+1} = \text{prox}_{\frac{1}{L_k}g} \left(\mathbf{y}^k - \frac{1}{L_k} \nabla f(\mathbf{y}^k) \right)$;
- (c) 令 $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
- (d) 计算 $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{x}^{k+1} + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}} \right) (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k)$.

和往常一样, 我们将考虑选择 L_k 的两种方式: 恒定步长和回溯法. 用于选择步长的回溯过程被称为“回溯过程 B3”, 它与过程 B2 完全相同, 唯一的区别在于它是作用于向量 \mathbf{x}^k 而非 \mathbf{y}^k .

- **恒定步长:** 对于所有的 $k, L_k = L_f$.
- **回溯过程 B3:** 该过程需要两个参数 (s, η) , 其中 $s > 0$ 且 $\eta > 1$. 定义 $L_{-1} = s$. 在第 $k (k \geq 0)$ 次迭代时, L_k 的选择如下: 首先, 令 L_k 等于 L_{k-1} . 然后, 当满足

$$f(T_{L_k}(\mathbf{y}^k)) > f(\mathbf{y}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{y}^k), T_{L_k}(\mathbf{y}^k) - \mathbf{y}^k \rangle + \frac{L_k}{2} \|T_{L_k}(\mathbf{y}^k) - \mathbf{y}^k\|^2$$

时 (回想 $T_{L_k}(\mathbf{y}) = \text{prox}_{\frac{1}{L_k}g}(\mathbf{y} - \frac{1}{L_k} \nabla f(\mathbf{y}))$), 我们设置 $L_k := \eta L_k$. 换句话说, 步长选择为 $L_k = L_{k-1} \eta^{i_k}$, 其中 i_k 是使以下条件成立的最小非负整数.

$$\begin{aligned} f(T_{L_{k-1}\eta^{i_k}}(\mathbf{y}^k)) &\leq f(\mathbf{y}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{y}^k), T_{L_{k-1}\eta^{i_k}}(\mathbf{y}^k) - \mathbf{y}^k \rangle \\ &\quad + \frac{L_k}{2} \|T_{L_{k-1}\eta^{i_k}}(\mathbf{y}^k) - \mathbf{y}^k\|^2. \end{aligned}$$

在这两种步长规则下, 对于任意的 $k \geq 0$, 都满足以下不等式:

$$f(T_{L_k}(\mathbf{y}^k)) \leq f(\mathbf{y}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{y}^k), T_{L_k}(\mathbf{y}^k) - \mathbf{y}^k \rangle + \frac{L_k}{2} \|T_{L_k}(\mathbf{y}^k) - \mathbf{y}^k\|^2. \quad (10.39)$$

注 10.32. 由于回溯过程 B3 与 B2 过程相同 (只是应用于 \mathbf{y}^k), 注 10.19 中的论述仍然有效, 并且我们有

$$\beta L_f \leq L_k \leq \alpha L_f,$$

其中 α 和 β 由 (10.25) 给出.

下一个引理给出了序列 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 的一个重要下界, 该下界将用于收敛性证明.

引理 10.33. 设 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 是由

$$t_0 = 1, \quad t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}, \quad k \geq 0,$$

定义的序列. 那么对于所有 $k \geq 0$, 有 $t_k \geq \frac{k+2}{2}$.

证明: 通过对 k 进行归纳证明. 显然, 当 $k = 0$ 时, $t_0 = 1 \geq \frac{0+2}{2}$. 假设该结论对 k 成立, 即 $t_k \geq \frac{k+2}{2}$. 我们将证明 $t_{k+1} \geq \frac{k+3}{2}$. 根据定义序列的递推关系和归纳假设:

$$t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2} \geq \frac{1 + \sqrt{1 + (k+2)^2}}{2} \geq \frac{1 + (k+2)}{2} = \frac{k+3}{2}.$$

定理得证. \square

\square

10.7.2 FISTA 的收敛性分析

定理 10.34 (FISTA 的 $O(1/k^2)$ 收敛速率). 假设假设 10.31 成立. 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是由 FISTA 算法用于求解问题 (10.1) 生成的序列, 采用常数步长规则 (其中对于所有 $k \geq 0, L_k \equiv L_f$) 或回溯过程 B3. 那么对于任何 $\mathbf{x}^* \in \mathbf{X}^*$ 和 $k \geq 1$, 有

$$F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}} \leq \frac{2\alpha L_f \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2}{(k+1)^2},$$

其中在常数步长设置中 $\alpha = 1$, 如果采用回溯规则, 则 $\alpha = \max\left\{\eta, \frac{s}{L_f}\right\}$.

证明: 当 $k \geq 1$ 时, 将 $\mathbf{x} = t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^k$ 以及 $L = L_k$ 代入基本近端梯度不等式 (10.21), 考虑到不等式 (10.39) 成立且 f 是凸函数, 我们得到:

$$\begin{aligned} & F(t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \\ & \geq \frac{L_k}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - (t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k)\|^2 - \frac{L_k}{2} \|\mathbf{y}^k - (t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k)\|^2 \\ & = \frac{L_k}{2t_k^2} \|t_k\mathbf{x}^{k+1} - (\mathbf{x}^* + (t_k - 1)\mathbf{x}^k)\|^2 - \frac{L_k}{2t_k^2} \|t_k\mathbf{y}^k - (\mathbf{x}^* + (t_k - 1)\mathbf{x}^k)\|^2. \quad (10.40) \end{aligned}$$

由于 F 是凸函数, 有

$$F(t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k) \leq t_k^{-1}F(\mathbf{x}^*) + (1 - t_k^{-1})F(\mathbf{x}^k).$$

因此, 对于任意 $n \geq 0$, 使用记号 $v_n \equiv F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}}$, 可得

$$\begin{aligned} F(t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) &\leq (1 - t_k^{-1})(F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^*)) - (F(\mathbf{x}^{k+1}) - F(\mathbf{x}^*)) \\ &= (1 - t_k^{-1})\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_{k+1}. \end{aligned} \quad (10.41)$$

另一方面, 利用关系 $\mathbf{y}^k = \mathbf{x}^k + \frac{t_{k-1}-1}{t_k}(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1})$, 可得

$$\begin{aligned} \|t_k\mathbf{y}^k - (\mathbf{x}^* + (t_k - 1)\mathbf{x}^k)\|^2 &= \|t_k\mathbf{x}^k + (t_{k-1} - 1)(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}) - (\mathbf{x}^* + (t_k - 1)\mathbf{x}^k)\|^2 \\ &= \|t_{k-1}\mathbf{x}^k - (\mathbf{x}^* + (t_{k-1} - 1)\mathbf{x}^{k-1})\|^2. \end{aligned} \quad (10.42)$$

结合 (10.40), (10.41) 和 (10.42), 我们得到

$$(t_k^2 - t_k)v_k - t_k^2v_{k+1} \geq \frac{L_k}{2} \|\mathbf{u}_{k+1}\|^2 - \frac{L_k}{2} \|\mathbf{u}_k\|^2,$$

其中, 对于任意 $n \geq 0$, 我们使用记号 $\mathbf{u}_n = t_{n-1}\mathbf{x}^n - (\mathbf{x}^* + (t_{n-1} - 1)\mathbf{x}^{n-1})$. 根据 t_{k+1} 的更新规则, 我们有 $t_k^2 - t_k = t_{k-1}^2$, 因此

$$\frac{2}{L_k}t_{k-1}^2v_k - \frac{2}{L_k}t_k^2v_{k+1} \geq \|\mathbf{u}_{k+1}\|^2 - \|\mathbf{u}_k\|^2.$$

由于 $L_k \geq L_{k-1}$, 我们可以得出

$$\frac{2}{L_{k-1}}t_{k-1}^2v_k - \frac{2}{L_k}t_k^2v_{k+1} \geq \|\mathbf{u}_{k+1}\|^2 - \|\mathbf{u}_k\|^2.$$

于是

$$\|\mathbf{u}_{k+1}\|^2 + \frac{2}{L_k}t_k^2v_{k+1} \leq \|\mathbf{u}_k\|^2 + \frac{2}{L_{k-1}}t_{k-1}^2v_k,$$

因此, 对于任意 $k \geq 1$, 有

$$\|\mathbf{u}_k\|^2 + \frac{2}{L_{k-1}}t_{k-1}^2v_k \leq \|\mathbf{u}_1\|^2 + \frac{2}{L_0}t_0^2v_1 = \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^*\|^2 + \frac{2}{L_0}(F(\mathbf{x}^1) - F_{\text{opt}}). \quad (10.43)$$

将 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^0$ 以及 $L = L_0$ 代入基本近端梯度不等式 (10.21), 考虑到 f 的凸性可得

$$\frac{2}{L_0}(F(\mathbf{x}^*) - F(\mathbf{x}^1)) \geq \|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^*\|^2 - \|\mathbf{y}^0 - \mathbf{x}^*\|^2,$$

再结合 $\mathbf{y}^0 = \mathbf{x}^0$ 这一事实, 可得如下界

$$\|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^*\|^2 + \frac{2}{L_0}(F(\mathbf{x}^1) - F_{\text{opt}}) \leq \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2.$$

将最后一个不等式与 (10.43) 相结合, 我们得到

$$\frac{2}{L_{k-1}} t_{k-1}^2 v_k \leq \|\mathbf{u}_k\|^2 + \frac{2}{L_{k-1}} t_{k-1}^2 v_k \leq \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2.$$

因此, 利用 $L_{k-1} \leq \alpha L_f$, v_k 的定义以及引理 10.33, 可得

$$F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}} \leq \frac{L_{k-1} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2}{2t_{k-1}^2} \leq \frac{2\alpha L_f \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2}{(k+1)^2}.$$

定理得证

□

□

注 10.35 (t_k 的替代选择). 仔细检查定理 10.34 的证明可知, 若 $\{t_k\}_{k \geq 0}$ 是满足以下两个性质的任意序列, 则该结果是正确的: 对于任意 $k \geq 0$, (a) $t_k \geq \frac{k+2}{2}$; (b) $t_{k+1}^2 - t_{k+1} \leq t_k^2$. 选择 $t_k = \frac{k+2}{2}$ 满足这两个性质, (a) 的有效性是显而易见的, 为了证明 (b), 注意到

$$\begin{aligned} t_{k+1}^2 - t_{k+1} &= t_{k+1}(t_{k+1} - 1) = \frac{k+3}{2} \cdot \frac{k+1}{2} = \frac{k^2 + 4k + 3}{4} \\ &\leq \frac{k^2 + 4k + 4}{4} = \frac{(k+2)^2}{4} = t_k^2. \end{aligned}$$

注 10.36. 注意到 *FISTA* 在函数值方面具有 $O(1/k^2)$ 的收敛速率, 而近端梯度法具有 $O(1/k)$ 的收敛速率. 尽管在每次迭代中这两种方法的主要计算步骤本质上是相同的: 一次梯度评估和一次近端计算, 但仍实现了这种改进.

10.7.3 例子

例 10.37. 考虑以下模型, 该模型已在例 10.2 中讨论过:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) + \lambda \|\mathbf{x}\|_1,$$

其中 $\lambda > 0$, 并且假定 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 是凸函数且具有 L_f -光滑性. 步长恒定为 $\frac{1}{L_f}$ 的近端梯度法的更新公式具有以下形式:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathcal{T}_{\frac{\lambda}{L_f}} \left(\mathbf{x}^k - \frac{1}{L_f} \nabla f(\mathbf{x}^k) \right).$$

正如在例 10.3 中已指出的, 由于在每次迭代中都要执行一次收缩/软阈值操作, 所以这种方法也被称为迭代收缩阈值算法 (ISTA). 本节所讨论的加速近端梯度法的一般更新步骤具有以下形式:

- (a) 设 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathcal{T}_{\frac{\lambda}{L_f}} \left(\mathbf{y}^k - \frac{1}{L_f} \nabla f(\mathbf{y}^k) \right)$;
- (b) 计算 $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
- (c) 计算 $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{x}^{k+1} + \frac{t_k - 1}{t_{k+1}} (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k)$.

上述方案确实值得称为“快速迭代收缩/阈值算法” (FISTA), 因为它是一种加速方

法, 在每次迭代时执行阈值步骤. 在本书中, 我们采用约定, 并使用首字母缩略词 FISTA 作为一般非光滑部分 g 的快速近端梯度方法的名称.

例 10.38 (L_1 正则化最小二乘法). 作为例 10.37 的一个特殊实例, 考虑如下问题:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{x}\|_1, \quad (10.44)$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, 且 $\lambda > 0$. 该问题符合模型 (10.1), 其中 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2$, $g(\mathbf{x}) = \lambda \|\mathbf{x}\|_1$. 函数 f 是 L_f -光滑的, 且 $L_f = \|A^\top A\|_{2,2} = \lambda_{\max}(A^\top A)$ (见例 5.2). FISTA 的更新步骤具有如下形式:

- (a) 设 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathcal{T}_{\frac{\lambda}{L_k}} \left(\mathbf{y}^k - \frac{1}{L_k} A^\top (\mathbf{A}\mathbf{y}^k - \mathbf{b}) \right)$;
- (b) 设 $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
- (c) 计算 $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{x}^{k+1} + \frac{t_k - 1}{t_{k+1}} (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k)$.

近端梯度法 (在这种情况下与 ISTA 相同) 的更新步骤为:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathcal{T}_{\frac{\lambda}{L_k}} \left(\mathbf{x}^k - \frac{1}{L_k} A^\top (\mathbf{A}\mathbf{x}^k - \mathbf{b}) \right).$$

这两种方法中的步长都可以选择为常数 $L_k \equiv \lambda_{\max}(A^\top A)$.

为了说明 ISTA 和 FISTA 在实际性能上的差异, 我们生成了一个 $\lambda = 1$ 且 $A \in \mathbb{R}^{100 \times 110}$ 的问题实例. A 的元素是使用标准正态分布独立生成的. “真实”向量为 $\mathbf{x}_{\text{true}} = \mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_7$, 并且选择 $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}_{\text{true}}$. 我们运行 ISTA 和 FISTA 各 200 次迭代, 以初始向量 $\mathbf{x} = \mathbf{e}$ (全 1 向量) 来求解问题 (10.44). 众所周知, 目标函数中的 l_1 -范数项是一个正则化项, 它促进稀疏性, 因此我们期望 (10.44) 的最优解接近“真实”的稀疏向量 \mathbf{x}_{true} . 两种方法生成的序列在函数值方面与最优性的距离作为迭代次数的函数绘制在图 10.1 中, 显然 FISTA 远优于 ISTA.

在图 10.2 中, 我们绘制了两种方法得到的向量. 显然, FISTA 经过 200 次迭代得到的解比 ISTA 经过 200 次迭代得到的解更接近最优解 (最优解非常接近 $\mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_7$).

10.7.4 MFISTA

FISTA 不是一种单调方法, 这意味着它所产生的函数值序列未必是单调递减的. 可以定义 FISTA 的一种单调版本, 我们称之为 MFISTA, 它是一种下降方法, 同时保持与 FISTA 相同的收敛速度.

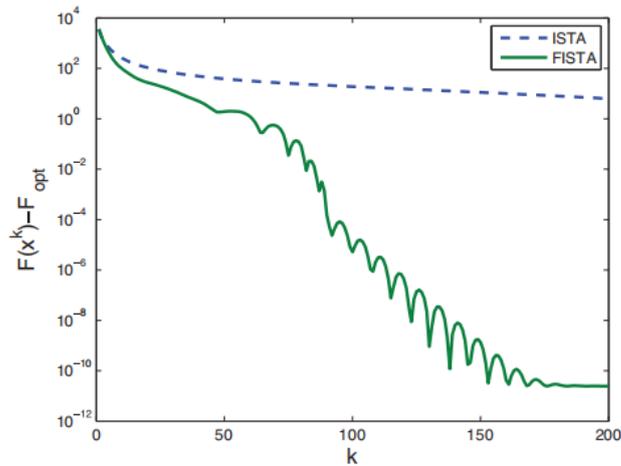


图 10.1 ISTA 和 FISTA 对 l_1 正则化最小二乘问题进行 200 次迭代的结果.

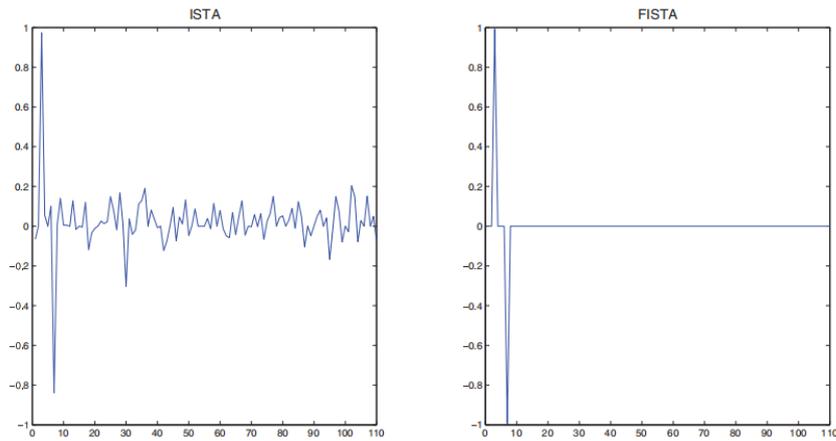


图 10.2 由 ISTA (左) 和 FISTA (右) 获得的解.

MFISTA 输入: (f, g, \mathbf{x}^0) , 其中 f 和 g 满足假设 10.31 中的性质 (A) 和 (B), 且 $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{E}$.

初始化: 设 $\mathbf{y}^0 = \mathbf{x}^0, t_0 = 1$.

一般步骤: 对于任意 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

- (a) 选取 $L_k > 0$;
- (b) 设 $\mathbf{z}^k = \text{prox}_{\frac{1}{L_k}g} \left(\mathbf{y}^k - \frac{1}{L_k} \nabla f(\mathbf{y}^k) \right)$;
- (c) 选择 $\mathbf{x}^{k+1} \in \mathbb{E}$, 使得 $F(\mathbf{x}^{k+1}) \leq \min\{F(\mathbf{z}^k), F(\mathbf{x}^k)\}$;
- (d) 设 $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
- (e) 计算 $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{x}^{k+1} + \frac{t_k}{t_{k+1}}(\mathbf{z}^k - \mathbf{x}^{k+1}) + \frac{t_k - 1}{t_{k+1}}(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k)$.

注 10.39. 选择 $\mathbf{x}^{k+1} \in \arg \min\{F(\mathbf{x}) : \mathbf{x} = \mathbf{x}^k, \mathbf{z}^k\}$ 是保证条件 $F(\mathbf{x}^{k+1}) \leq \min\{F(\mathbf{z}^k), F(\mathbf{x}^k)\}$ 满足的一个非常自然的规则. 我们还注意到, 定理 10.40 中所确立的收敛性仅要求满足条件 $F(\mathbf{x}^{k+1}) \leq F(\mathbf{z}^k)$. MFISTA 的收敛性结果如下, 其证明是对定理 10.34 证

明的微小调整.

定理 10.40 (MFISTA 的 $O(1/k^2)$ 收敛速度). 假设假设 10.31 成立. 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是 MFISTA 为求解问题 (10.1) 所生成的序列, 其中步长规则要么是对所有 $k \geq 0$, $L_k \equiv L_f$ 的常步长规则, 要么是回溯过程 B3. 那么对于任意 $\mathbf{x}^* \in X^*$ 以及 $k \geq 1$, 有

$$F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}} \leq \frac{2\alpha L_f \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2}{(k+1)^2},$$

其中, 在常步长设置下 $\alpha = 1$, 若采用回溯规则, 则 $\alpha = \max\left\{\eta, \frac{s}{L_f}\right\}$.

证明: 设 $k \geq 1$. 将 $\mathbf{x} = t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^k$, $L = L_k$ 代入基本近端梯度不等式 (10.21) 且 f 是凸函数, 我们得到:

$$\begin{aligned} & F(t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{z}^k) \\ & \geq \frac{L_k}{2} \|\mathbf{z}^k - (t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k)\|^2 - \frac{L_k}{2} \|\mathbf{y}^k - (t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k)\|^2 \\ & = \frac{L_k}{2t_k^2} \|t_k\mathbf{z}^k - (\mathbf{x}^* + (t_k - 1)\mathbf{x}^k)\|^2 - \frac{L_k}{2t_k^2} \|t_k\mathbf{y}^k - (\mathbf{x}^* + (t_k - 1)\mathbf{x}^k)\|^2. \end{aligned} \quad (10.45)$$

由 F 的凸性可得,

$$F(t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k) \leq t_k^{-1}F(\mathbf{x}^*) + (1 - t_k^{-1})F(\mathbf{x}^k).$$

因此, 对于任意 $n \geq 0$, 使用记号 $v_n \equiv F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}}$, 并且考虑到 $F(\mathbf{x}^{k+1}) \leq F(\mathbf{z}^k)$, 可得:

$$\begin{aligned} F(t_k^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t_k^{-1})\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{z}^k) & \leq (1 - t_k^{-1})(F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^*)) - (F(\mathbf{x}^{k+1}) - F(\mathbf{x}^*)) \\ & = (1 - t_k^{-1})v_k - v_{k+1}. \end{aligned} \quad (10.46)$$

另一方面, 利用 $\mathbf{y}^k = \mathbf{x}^k + \frac{t_{k-1}}{t_k}(\mathbf{z}^{k-1} - \mathbf{x}^k) + \frac{t_{k-1}-1}{t_k}(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1})$ 这一关系, 我们有:

$$t_k\mathbf{y}^k - (\mathbf{x}^* + (t_k - 1)\mathbf{x}^k) = t_{k-1}\mathbf{z}^{k-1} - (\mathbf{x}^* + (t_{k-1} - 1)\mathbf{x}^{k-1}). \quad (10.47)$$

对于任意 $n \geq 0$, 我们使用记号 $\mathbf{u}^n = t_{n-1}\mathbf{z}^{n-1} - (\mathbf{x}^* + (t_{n-1} - 1)\mathbf{x}^{n-1})$, 再结合 (10.45)(10.46) 和 (10.47), 我们得到:

$$(t_k^2 - t_k)v_k - t_k^2v_{k+1} \geq \frac{L_k}{2} \|\mathbf{u}^{k+1}\|^2 - \frac{L_k}{2} \|\mathbf{u}^k\|^2,$$

根据 t_{k+1} 的更新规则, 我们有 $t_k^2 - t_k = t_{k-1}^2$, 因此:

$$\frac{2}{L_k} t_{k-1}^2 v_k - \frac{2}{L_k} t_k^2 v_{k+1} \geq \|\mathbf{u}^{k+1}\|^2 - \|\mathbf{u}^k\|^2.$$

由于 $L_k \geq L_{k-1}$, 我们可以得出:

$$\frac{2}{L_{k-1}} t_{k-1}^2 v_k - \frac{2}{L_k} t_k^2 v_{k+1} \geq \|\mathbf{u}^{k+1}\|^2 - \|\mathbf{u}^k\|^2.$$

于是,

$$\|\mathbf{u}^{k+1}\|^2 + \frac{2}{L_k} t_k^2 v_{k+1} \leq \|\mathbf{u}^k\|^2 + \frac{2}{L_{k-1}} t_{k-1}^2 v_k,$$

因此, 对于 $k \geq 1$, 有

$$\|\mathbf{u}^k\|^2 + \frac{2}{L_{k-1}} t_{k-1}^2 v_k \leq \|\mathbf{u}^1\|^2 + \frac{2}{L_0} t_0^2 v_1 = \|\mathbf{z}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + \frac{2}{L_0} (F(\mathbf{x}^1) - F_{\text{opt}}). \quad (10.48)$$

将 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^0$, $L = L_0$ 代入基本近端梯度不等式 (10.21), 考虑到 f 的凸性, 可得:

$$\frac{2}{L_0} (F(\mathbf{x}^*) - F(\mathbf{z}^0)) \geq \|\mathbf{z}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 - \|\mathbf{y}^0 - \mathbf{x}^*\|^2,$$

又因为 $\mathbf{y}^0 = \mathbf{x}^0$, $F(\mathbf{x}^1) \leq F(\mathbf{z}^0)$ 所以有界:

$$\|\mathbf{z}^0 - \mathbf{x}^*\|^2 + \frac{2}{L_0} (F(\mathbf{x}^1) - F_{\text{opt}}) \leq \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2.$$

结合最后一个不等式与 (10.48), 我们得到:

$$\frac{2}{L_{k-1}} t_{k-1}^2 v_k \leq \|\mathbf{u}^k\|^2 + \frac{2}{L_{k-1}} t_{k-1}^2 v_k \leq \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2.$$

因此, 利用界 $L_{k-1} \leq \alpha L_f$, v_k 的定义以及引理 10.33,

$$F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}} \leq \frac{L_{k-1} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2}{2t_{k-1}^2} \leq \frac{2\alpha L_f \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2}{(k+1)^2}.$$

定理得证. □

10.7.5 加权 FISTA

考虑假设 10.31 下的主要复合模型 (10.1). 假设 $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$. 回顾本章的一个基本假设是基础空间为欧几里得空间, 但这并不意味着赋予的内积是点积. 假设赋予的内积是 \mathbf{Q} -内积:

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{y},$$

其中 $\mathbf{Q} \in \mathbb{S}_{++}^n$. 在这种情况下, 如注释 3.32 所述, 梯度由下式给出:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{Q}^{-1} D_f(\mathbf{x}),$$

其中

$$D_f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}) \\ \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}.$$

我们假设 f 对 \mathbf{Q} -范数是 $L_f^{\mathbf{Q}}$ -光滑的, 即

$$\|\mathbf{Q}^{-1}D_f(\mathbf{x}) - \mathbf{Q}^{-1}D_f(\mathbf{y})\|_{\mathbf{Q}} \leq L_f^{\mathbf{Q}} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_{\mathbf{Q}}, \quad \text{对任意 } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n.$$

在这种情况下, FISTA 的一般更新规则将具有以下形式:

- (a) 设 $\mathbf{x}^{k+1} = \text{prox}_{\frac{1}{L_f^{\mathbf{Q}}}g} \left(\mathbf{y}^k - \frac{1}{L_f^{\mathbf{Q}}} \mathbf{Q}^{-1}D_f(\mathbf{y}^k) \right)$;
- (b) 设 $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
- (c) 计算 $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{x}^{k+1} + \frac{t_k - 1}{t_{k+1}} (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k)$.

显然, 步骤 (a) 中的近端算子是根据 \mathbf{Q} -范数计算的, 即

$$\text{prox}_h(\mathbf{x}) = \arg \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n} \left\{ h(\mathbf{u}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|_{\mathbf{Q}}^2 \right\}.$$

定理 10.34 的收敛结果也将用 \mathbf{Q} -范数表示:

$$F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}} \leq \frac{2L_f^{\mathbf{Q}} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|_{\mathbf{Q}}^2}{(k+1)^2}.$$

10.7.6 强凸情况下的重启 FISTA

除了假设 10.31 之外, 我们假设对于某个 $\sigma > 0$, 函数 f 是 σ -强凸的. 回顾一下, 根据定理 10.30, 近端梯度法在强凸情形下, 经过 $O(\kappa \log(\frac{1}{\varepsilon}))$ 次迭代 ($\kappa = \frac{L_f}{\sigma}$) 后能得到一个 ε -最优解. 显然, 一个很自然的问题是, 当使用快速迭代收缩阈值算法 (FISTA) 而不是近端梯度法时, 复杂度结果会如何得到改善. 也许令人惊讶的是, 获得这种改进结果的一种方法是考虑一种 FISTA 的变体, 即在固定数量的迭代之后对该方法进行重启.

重启 FISTA 算法

初始化: 选取 $\mathbf{z}^{-1} \in \mathbb{E}$ 以及一个正整数 N . 设 $\mathbf{z}^0 = T_{L_f}(\mathbf{z}^{-1})$.

一般过程: ($k \geq 0$):

- 以常步长 ($L_k \equiv L_f$) 运行 N 次 FISTA 迭代, 输入为 (f, g, \mathbf{z}^k) , 得到序列 $\{\mathbf{x}^n\}_{n=0}^N$;
- 设 $\mathbf{z}^{k+1} = \mathbf{x}^N$.

该算法本质上由“外层”迭代组成, 并且每一层都采用了 FISTA 的 N 次迭代. 为避免混淆, 外层迭代将被称为循环. 下面的定理 10.41 表明, $O(\sqrt{\kappa} \log(\frac{1}{\varepsilon}))$ 阶的 FISTA 迭代足以保证获得 ε -最优解.

定理 10.41 (重启 FISTA 的 $O(\sqrt{\kappa} \log(\frac{1}{\varepsilon}))$ 复杂度). 假设假设 10.31 成立, 且 f 是 σ -强凸的 ($\sigma > 0$). 设 $\{\mathbf{z}^k\}_{k \geq 0}$ 是使用 $N = \lceil \sqrt{8\kappa} - 1 \rceil$, 的重启 FISTA 方法生成的序

列, 其中 $\kappa = \frac{L_f}{\sigma}$. 设 R 是 $\|\mathbf{z}^{-1} - \mathbf{x}^*\|$ 的一个上界, 其中 \mathbf{x}^* 是问题 (10.1) 的唯一最优解. 那么:

(a) 对于任意 $k \geq 0$,

$$F(\mathbf{z}^k) - F_{\text{opt}} \leq \frac{L_f R^2}{2} \left(\frac{1}{2}\right)^k;$$

(b) 在重启 FISTA 中进行 k 次 FISTA 迭代后, 当 k 满足

$$k \geq \sqrt{8\kappa} \left(\frac{\log(\frac{1}{\epsilon})}{\log(2)} + \frac{\log(L_f R^2)}{\log(2)} \right),$$

时, 则在最后一个循环结束时可得到一个 ϵ -最优解, 即,

$$F(\mathbf{z}^{\lfloor k/N \rfloor}) - F_{\text{opt}} \leq \epsilon.$$

证明: (a) 根据定理 10.34, 对于任意 $n \geq 0$,

$$F(\mathbf{z}^{n+1}) - F_{\text{opt}} \leq \frac{2L_f \|\mathbf{z}^n - \mathbf{x}^*\|^2}{(N+1)^2}. \quad (10.49)$$

由于 f 是 σ -强凸的, 根据定理 5.25(b) 可得

$$F(\mathbf{z}^n) - F_{\text{opt}} \geq \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{z}^n - \mathbf{x}^*\|^2,$$

结合 (10.49), 可得 (注意 $\kappa = L_f/\sigma$)

$$F(\mathbf{z}^{n+1}) - F_{\text{opt}} \leq \frac{4\kappa(F(\mathbf{z}^n) - F_{\text{opt}})}{(N+1)^2}. \quad (10.50)$$

由于 $N \geq \sqrt{8\kappa} - 1$, 可得 $\frac{4\kappa}{(N+1)^2} \leq \frac{1}{2}$, 因此由 (10.50) 可得

$$F(\mathbf{z}^{n+1}) - F_{\text{opt}} \leq \frac{1}{2}(F(\mathbf{z}^n) - F_{\text{opt}}).$$

对 $n = 0, 1, \dots, k-1$ 应用上述不等式, 我们得出

$$F(\mathbf{z}^k) - F_{\text{opt}} \leq \left(\frac{1}{2}\right)^k (F(\mathbf{z}^0) - F_{\text{opt}}). \quad (10.51)$$

注意 $\mathbf{z}^0 = T_{L_f}(\mathbf{z}^{-1})$. 对 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, $\mathbf{y} = \mathbf{z}^{-1}$, $L = L_f$ 应用基本近端梯度不等式 (10.21), 并考虑到 f 的凸性, 我们得到

$$F(\mathbf{x}^*) - F(\mathbf{z}^0) \geq \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{z}^0\|^2 - \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{z}^{-1}\|^2.$$

因此,

$$F(\mathbf{z}^0) - F_{\text{opt}} \leq \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x}^* - \mathbf{z}^{-1}\|^2 \leq \frac{L_f R^2}{2}. \quad (10.52)$$

结合 (10.51) 和 (10.52), 我们得到

$$F(\mathbf{z}^k) - F_{\text{opt}} \leq \frac{L_f R^2}{2} \left(\frac{1}{2}\right)^k.$$

(b) 如果在重启 FISTA 中进行了 k 次 FISTA 迭代, 则完成了 $\lfloor \frac{k}{N} \rfloor$ 个循环. 由 (a) 部分可知,

$$F(\mathbf{z}^{\lfloor k/N \rfloor}) - F_{\text{opt}} \leq \frac{L_f R^2}{2} \left(\frac{1}{2}\right)^{\lfloor \frac{k}{N} \rfloor} \leq L_f R^2 \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{k}{N}}.$$

因此, 不等式 $F(\mathbf{z}^{\lfloor k/N \rfloor}) - F_{\text{opt}} \leq \varepsilon$ 成立的充分条件是

$$L_f R^2 \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{k}{N}} \leq \varepsilon,$$

这等价于不等式

$$k \geq N \left(\frac{\log(\frac{1}{\varepsilon})}{\log(2)} + \frac{\log(L_f R^2)}{\log(2)} \right).$$

因此, 进一步由 $N = \lceil \sqrt{8\kappa} - 1 \rceil \leq \sqrt{8\kappa}$ 这一事实可证得结论. \square

10.7.7 强凸情形 (再次讨论)——FISTA 的变体

和上一节一样, 我们将假设除了假设 10.31 之外, 对于某个 $\sigma > 0$, 函数 f 是 σ -强凸的. 我们将定义快速迭代收缩阈值算法 (FISTA) 的一个变体, 称为 V-FISTA, 它将展现出与重启 FISTA 相同的线性收敛速率. 而这种收敛速率的达成无需对该方法进行任何重启操作.

V-FISTA

输入: (f, g, \mathbf{x}^0) , 其中 f 和 g 满足假设 10.31 中的性质 (A) 和 (B), f 是 σ -强凸的 ($\sigma > 0$), 且 $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{E}$.

初始化: 设 $\mathbf{y}^0 = \mathbf{x}^0$, $t_0 = 1$, $\kappa = \frac{L_f}{\sigma}$.

一般过程: 对于任意 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

- (a) 设 $\mathbf{x}^{k+1} = \text{prox}_{\frac{1}{L_f}g} \left(\mathbf{y}^k - \frac{1}{L_f} \nabla f(\mathbf{y}^k) \right)$;
- (b) 计算 $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{x}^{k+1} + \frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1} (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k)$.

在下一个结果中建立了改进的线性收敛率, 其证明是非强凸情况下 FISTA 收敛率证明的变体 (定理 10.34).

定理 10.42 (V-FISTA 的 $O((1 - 1/\sqrt{\kappa})^k)$ 收敛速率). 假设假设 10.31 成立, 且 f 是

σ -强凸的 ($\sigma > 0$). 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是由 V-FISTA 生成的序列. 则对于任意 $k \geq 0$, 有

$$F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}} \leq \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\kappa}}\right)^k \left(F(\mathbf{x}^0) - F_{\text{opt}} + \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2\right), \quad (10.53)$$

其中 $\kappa = \frac{L_f}{\sigma}$.

证明: 根据基本近端梯度不等式 (定理 10.16) 以及 f 的 σ -强凸性 (引用定理 5.24), 对于任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{E}$, 有:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}) - F(T_{L_f}(\mathbf{y})) &\geq \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x} - T_{L_f}(\mathbf{y})\|^2 - \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y}) - \langle \nabla f(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle \\ &\geq \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x} - T_{L_f}(\mathbf{y})\|^2 - \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2. \end{aligned}$$

因此,

$$F(\mathbf{x}) - F(T_{L_f}(\mathbf{y})) \geq \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x} - T_{L_f}(\mathbf{y})\|^2 - \frac{L_f - \sigma}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2. \quad (10.54)$$

设 $k \geq 0$ 且 $t = \sqrt{\kappa} = \sqrt{\frac{L_f}{\sigma}}$. 将 $\mathbf{x} = t^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t^{-1})\mathbf{x}^k$ 和 $\mathbf{y} = \mathbf{y}^k$ 代入 (10.54), 我们得到:

$$\begin{aligned} &F(t^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t^{-1})\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \\ &\geq \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - (t^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t^{-1})\mathbf{x}^k)\|^2 - \frac{L_f - \sigma}{2} \|\mathbf{y}^k - (t^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t^{-1})\mathbf{x}^k)\|^2 \\ &= \frac{L_f}{2t^2} \|t\mathbf{x}^{k+1} - (\mathbf{x}^* + (t - 1)\mathbf{x}^k)\|^2 - \frac{L_f - \sigma}{2t^2} \|t\mathbf{y}^k - (\mathbf{x}^* + (t - 1)\mathbf{x}^k)\|^2. \end{aligned} \quad (10.55)$$

由于 F 的 σ -强凸性,

$$F(t^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t^{-1})\mathbf{x}^k) \leq t^{-1}F(\mathbf{x}^*) + (1 - t^{-1})F(\mathbf{x}^k) - \frac{\sigma}{2}t^{-1}(1 - t^{-1})\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2.$$

因此, 对于任意 $n \geq 0$, 使用记号 $v_n \equiv F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}}$,

$$\begin{aligned} &F(t^{-1}\mathbf{x}^* + (1 - t^{-1})\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \\ &\leq (1 - t^{-1})(F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^*)) - (F(\mathbf{x}^{k+1}) - F(\mathbf{x}^*)) - \frac{\sigma}{2}t^{-1}(1 - t^{-1})\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &= (1 - t^{-1})v_k - v_{k+1} - \frac{\sigma}{2}t^{-1}(1 - t^{-1})\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2, \end{aligned}$$

将其与 (10.55) 结合, 得到不等式

$$\begin{aligned} &t(t - 1)v_k + \frac{L_f - \sigma}{2} \|t\mathbf{y}^k - (\mathbf{x}^* + (t - 1)\mathbf{x}^k)\|^2 - \frac{\sigma(t - 1)}{2} \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &\geq t^2v_{k+1} + \frac{L_f}{2} \|t\mathbf{x}^{k+1} - (\mathbf{x}^* + (t - 1)\mathbf{x}^k)\|^2. \end{aligned} \quad (10.56)$$

我们将使用以下恒等式, 对于任意 $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{E}$ 和 $\beta \in [0, 1)$ 都成立,

$$\|\mathbf{a} + \mathbf{b}\|^2 - \beta\|\mathbf{a}\|^2 = (1 - \beta) \left\| \mathbf{a} + \frac{1}{1 - \beta}\mathbf{b} \right\|^2 - \frac{\beta}{1 - \beta}\|\mathbf{b}\|^2.$$

将 $\mathbf{a} = \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*$, $\mathbf{b} = t(\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k)$, $\beta = \frac{\sigma(t-1)}{L_f - \sigma}$ 代入, 我们得到:

$$\begin{aligned} & \frac{L_f - \sigma}{2} \|t(\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k) + \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{\sigma(t-1)}{2} \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &= \frac{L_f - \sigma}{2} \left[\|t(\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k) + \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{\sigma(t-1)}{L_f - \sigma} \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 \right] \\ &= \frac{L_f - \sigma}{2} \left[\frac{L_f - \sigma t}{L_f - \sigma} \left\| \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* + \frac{L_f - \sigma}{L_f - \sigma t} t(\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k) \right\|^2 - \frac{\sigma(t-1)}{L_f - \sigma t} \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 \right] \\ &\leq \frac{L_f - \sigma t}{2} \left\| \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* + \frac{L_f - \sigma}{L_f - \sigma t} t(\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k) \right\|^2. \end{aligned}$$

因此, 由上述不等式和 (10.56) 我们可以得出:

$$\begin{aligned} & t(t-1)v_k + \frac{L_f - \sigma t}{2} \left\| \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* + \frac{L_f - \sigma}{L_f - \sigma t} t(\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k) \right\|^2 \\ &\geq t^2 v_{k+1} + \frac{L_f}{2} \|t\mathbf{x}^{k+1} - (\mathbf{x}^* + (t-1)\mathbf{x}^k)\|^2. \end{aligned} \quad (10.57)$$

如果 $k \geq 1$, 那么使用关系 $\mathbf{y}^k = \mathbf{x}^k + \frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1})$ 以及 $t = \sqrt{\kappa} = \sqrt{\frac{L_f}{\sigma}}$, 我们得到:

$$\begin{aligned} & \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* + \frac{L_f - \sigma}{L_f - \sigma t} t(\mathbf{y}^k - \mathbf{x}^k) \\ &= \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* + \frac{L_f - \sigma}{L_f - \sigma t} \frac{t(t-1)}{t+1} (\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}) \\ &= \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* + \frac{\kappa - 1}{\kappa - \sqrt{\kappa}} \frac{\sqrt{\kappa}(\sqrt{\kappa} - 1)}{\sqrt{\kappa} + 1} (\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}) \\ &= \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* + (\sqrt{\kappa} - 1)(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}) \\ &= t\mathbf{x}^k - (\mathbf{x}^* + (t-1)\mathbf{x}^{k-1}), \end{aligned}$$

并且显然, 对于 $k = 0$ 的情况 (回想 $\mathbf{y}^0 = \mathbf{x}^0$), $\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^* + \frac{L_f - \sigma}{L_f - \sigma t} t(\mathbf{y}^0 - \mathbf{x}^0) = \mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*$. 因此我们可以推断出 (10.57) 可以改写为 (在除以 t^2 并再次使用 $t = \sqrt{\frac{L_f}{\sigma}}$ 的定义后):

$$\begin{aligned} & v_{k+1} + \frac{\sigma}{2} \|t\mathbf{x}^{k+1} - (\mathbf{x}^* + (t-1)\mathbf{x}^k)\|^2 \\ &\leq \begin{cases} (1 - \frac{1}{t}) [v_k + \frac{\sigma}{2} \|t\mathbf{x}^k - (\mathbf{x}^* + (t-1)\mathbf{x}^{k-1})\|^2], & k \geq 1, \\ (1 - \frac{1}{t}) [v_0 + \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2], & k = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

因此, 我们可以得出对于任意 $k \geq 0$,

$$v_k \leq \left(1 - \frac{1}{t}\right)^k \left(v_0 + \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|^2\right),$$

这就是我们想要的结果 (10.53). □

10.8 光滑化

10.8.1 动机

在第 8 章和第 9 章中, 我们探讨了用于求解非光滑凸优化问题的方法, 其复杂度为 $O(1/\varepsilon^2)$, 这意味着为了得到一个 ε -最优解, 需要进行 $1/\varepsilon^2$ 量级的迭代. 另一方面, 快速迭代收缩阈值算法 (FISTA) 为了找到复合模型

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x}), \quad (10.58)$$

的 ε -最优解, 需要 $O(1/\sqrt{\varepsilon})$ 次迭代, 其中 f 是 L_f -光滑且凸的函数, g 是 proper 闭凸函数. 在本节中, 我们将展示如何使用 FISTA 来设计一种方法, 用于求解更一般的非光滑凸问题, 且复杂度可提升至 $O(1/\varepsilon)$. 特别地, 我们将考虑模型在式 (10.58) 的基础上增加了第三项:

$$\min\{f(\mathbf{x}) + h(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathbb{E}\}. \quad (10.59)$$

假设函数 h 为实值凸函数. 我们不假定其近端算子易于计算 (不像对函数 g 那样隐含地假定), 因此, 将光滑部分和非光滑部分分别取为 $(f, g+h)$, 直接用 FISTA 算法来求解该问题并非可行的解决办法. 思路是找到 h 的一个平滑近似, 记为 \tilde{h} , 然后将光滑部分和非光滑部分分别取为 $(f + \tilde{h}, g)$, 通过 FISTA 算法来求解问题. 这个简单的想法将成为改进的 $O(1/\varepsilon)$ 复杂度的基础. 为了能够描述该方法, 我们需要更详细地研究光滑近似和光滑性的概念.

10.8.2 可光滑函数与光滑近似

定义 10.43 (可光滑函数). 一个凸函数 $h: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$, 若对于任意 $\mu > 0$, 都存在一个凸可微函数 $h_\mu: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$, 使得以下条件成立, 则称其为 (α, β) -可平滑函数 ($\alpha, \beta > 0$):

- (a) 对于所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$, 有 $h_\mu(\mathbf{x}) \leq h(\mathbf{x}) \leq h_\mu(\mathbf{x}) + \beta\mu$.
- (b) h_μ 是 $\frac{\alpha}{\mu}$ -光滑的.

函数 h_μ 被称为 h 的一个参数为 (α, β) 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似.

例 10.44 ($\|\mathbf{x}\|_2$ 的光滑近似). 考虑函数 $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 定义为 $h(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2$. 对于任意 $\mu > 0$, 定义 $h_\mu(\mathbf{x}) \equiv \sqrt{\|\mathbf{x}\|_2^2 + \mu^2} - \mu$. 那么对于任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 有

$$h_\mu(\mathbf{x}) = \sqrt{\|\mathbf{x}\|_2^2 + \mu^2} - \mu \leq \|\mathbf{x}\|_2 + \mu - \mu = \|\mathbf{x}\|_2 = h(\mathbf{x}),$$

$$h(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2 \leq \sqrt{\|\mathbf{x}\|_2^2 + \mu^2} = h_\mu(\mathbf{x}) + \mu,$$

这表明可光滑函数定义中的性质 (a) 在 $\beta = 1$ 时成立. 为了表明性质 (b) 在 $\alpha = 1$ 时成立, 注意根据例 5.14, 函数 $\varphi(\mathbf{x}) \equiv \sqrt{\|\mathbf{x}\|_2^2 + 1}$ 是 1 - 光滑的, 因此 $h_\mu(\mathbf{x}) = \mu\varphi(\mathbf{x}/\mu) - \mu$ 是 $\frac{1}{\mu}$ - 光滑的. 我们得出结论, h_μ 是 h 的一个参数为 $(1, 1)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ - 光滑近似. 按照定义 10.43 中的术语, 我们证明了 h 是 $(1, 1)$ - 可光滑的.

例 10.45 ($\max_i\{x_i\}$ 的光滑近似). 考虑函数 $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 定义为 $h(\mathbf{x}) = \max\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$. 对于任意 $\mu > 0$, 定义函数

$$h_\mu(\mathbf{x}) = \mu \log \left(\sum_{i=1}^n e^{x_i/\mu} \right) - \mu \log n,$$

那么对于任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$,

$$\begin{aligned} h_\mu(\mathbf{x}) &= \mu \log \left(\sum_{i=1}^n e^{x_i/\mu} \right) - \mu \log n \\ &\leq \mu \log (ne^{\max_i\{x_i\}/\mu}) - \mu \log n = h(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (10.60)$$

$$h(\mathbf{x}) = \max\{x_i\} \leq \mu \log \left(\sum_{i=1}^n e^{x_i/\mu} \right) = h_\mu(\mathbf{x}) + \mu \log n. \quad (10.61)$$

根据例 5.15, 函数 $\varphi(\mathbf{x}) = \log(\sum_{i=1}^n e^{x_i})$ 是 1 - 光滑的, 因此函数 $h_\mu(\mathbf{x}) = \mu\varphi(\mathbf{x}/\mu) - \mu \log n$ 是 $\frac{1}{\mu}$ - 光滑的. 结合 (10.60) 和 (10.61) 可知, h_μ 是 h 的一个参数为 $(1, \log n)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ - 光滑近似. 我们特别得出 h 是 $(1, \log n)$ - 可光滑的.

以下结果描述了平滑近似的两条重要运算规则.

定理 10.46 (光滑近似运算规则).

- (a) 设 $h^1, h^2: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 为凸函数, γ_1, γ_2 为非负实数. 假设对于给定的 $\mu > 0$, 对 $i = 1, 2$, h_μ^i 是 h^i 的参数为 (α_i, β_i) 的 $\frac{1}{\mu}$ - 光滑近似. 那么 $\gamma_1 h_\mu^1 + \gamma_2 h_\mu^2$ 是 $\gamma_1 h^1 + \gamma_2 h^2$ 的参数为 $(\gamma_1 \alpha_1 + \gamma_2 \alpha_2, \gamma_1 \beta_1 + \gamma_2 \beta_2)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ - 光滑近似.
- (b) 设 $\mathcal{A}: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{V}$ 是欧几里得空间 \mathbb{E} 与 \mathbb{V} 之间的线性变换. 设 $h: \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$ 为凸函数, 并定义

$$q(\mathbf{x}) \equiv h(\mathcal{A}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}),$$

其中 $\mathbf{b} \in \mathbb{V}$. 假设对于给定的 $\mu > 0$, h_μ 是 h 的参数为 (α, β) 的 $\frac{1}{\mu}$ - 光滑近似. 那么函数 $q_\mu(\mathbf{x}) \equiv h_\mu(\mathcal{A}(\mathbf{x}) + \mathbf{b})$ 是 q 的参数为 $(\alpha\|\mathcal{A}\|^2, \beta)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ - 光滑近似.

证明: (a) 根据定义, h_μ^i ($i = 1, 2$) 是凸的且 $\frac{\alpha_i}{\mu}$ - 光滑的, 并且对于任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$, 满足 $h_\mu^i(\mathbf{x}) \leq h^i(\mathbf{x}) \leq h_\mu^i(\mathbf{x}) + \beta_i \mu$. 因此我们可以得出 $\gamma_1 h_\mu^1 + \gamma_2 h_\mu^2$ 是凸的, 并且对于

任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{E}$, 有

$$\begin{aligned} \gamma_1 h_\mu^1(\mathbf{x}) + \gamma_2 h_\mu^2(\mathbf{x}) &\leq \gamma_1 h^1(\mathbf{x}) + \gamma_2 h^2(\mathbf{x}) \\ &\leq \gamma_1 h_\mu^1(\mathbf{x}) + \gamma_2 h_\mu^2(\mathbf{x}) + (\gamma_1 \beta_1 + \gamma_2 \beta_2) \mu, \end{aligned}$$

并且

$$\begin{aligned} &\|\nabla(\gamma_1 h_\mu^1 + \gamma_2 h_\mu^2)(\mathbf{x}) - \nabla(\gamma_1 h_\mu^1 + \gamma_2 h_\mu^2)(\mathbf{y})\| \\ &\leq \gamma_1 \|\nabla h_\mu^1(\mathbf{x}) - \nabla h_\mu^1(\mathbf{y})\| + \gamma_2 \|\nabla h_\mu^2(\mathbf{x}) - \nabla h_\mu^2(\mathbf{y})\| \\ &\leq \gamma_1 \frac{\alpha_1}{\mu} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| + \gamma_2 \frac{\alpha_2}{\mu} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \\ &= \frac{\gamma_1 \alpha_1 + \gamma_2 \alpha_2}{\mu} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|, \end{aligned}$$

这就证明了 $\gamma_1 h_\mu^1 + \gamma_2 h_\mu^2$ 是 $\gamma_1 h^1 + \gamma_2 h^2$ 的参数为 $(\gamma_1 \alpha_1 + \gamma_2 \alpha_2, \gamma_1 \beta_1 + \gamma_2 \beta_2)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似.

(b) 由于 h_μ 是 h 的参数为 (α, β) 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似, 所以 h_μ 是凸的且 $\frac{\alpha}{\mu}$ -光滑的, 并且对于任意 $\mathbf{y} \in \mathbb{V}$, 有

$$h_\mu(\mathbf{y}) \leq h(\mathbf{y}) \leq h_\mu(\mathbf{y}) + \beta \mu. \quad (10.62)$$

设 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$. 将 $\mathbf{y} = \mathcal{A}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}$ 代入 (10.62), 我们得到

$$q_\mu(\mathbf{x}) \leq q(\mathbf{x}) \leq q_\mu(\mathbf{x}) + \beta \mu. \quad (10.63)$$

此外, 由 h_μ 的 $\frac{\alpha}{\mu}$ -光滑性, 对于任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{E}$, 我们有

$$\begin{aligned} \|\nabla q_\mu(\mathbf{x}) - \nabla q_\mu(\mathbf{y})\| &= \|\mathcal{A}^\top \nabla h_\mu(\mathcal{A}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}) - \mathcal{A}^\top \nabla h_\mu(\mathcal{A}(\mathbf{y}) + \mathbf{b})\| \\ &\leq \|\mathcal{A}^\top\| \cdot \|\nabla h_\mu(\mathcal{A}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}) - \nabla h_\mu(\mathcal{A}(\mathbf{y}) + \mathbf{b})\| \\ &\leq \frac{\alpha}{\mu} \|\mathcal{A}^\top\| \cdot \|\mathcal{A}(\mathbf{x}) + \mathbf{b} - \mathcal{A}(\mathbf{y}) - \mathbf{b}\| \\ &\leq \frac{\alpha}{\mu} \|\mathcal{A}^\top\| \cdot \|\mathcal{A}\| \cdot \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \\ &= \frac{\alpha \|\mathcal{A}\|^2}{\mu} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|. \end{aligned}$$

其中最后一个等式是因为 $\|\mathcal{A}\| = \|\mathcal{A}^\top\|$ (见 1.14 节). 因此, 我们已经证明了凸函数 h_μ 是 $\frac{\alpha \|\mathcal{A}\|^2}{\mu}$ -光滑的, 并且对于任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$ 满足 (10.63), 从而证明了所需的结果. \square

定理 10.46 的一个直接推论如下, 该推论表明在对变量进行非负线性组合和仿射变换时, 可光滑性得以保持.

推论 10.47 (保持可光滑性的运算).

(a) 设 $h^1, h^2: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 分别为 (α_1, β_1) -可平滑和 (α_2, β_2) -可光滑的凸函数, γ_1, γ_2

为非负实数. 那么 $\gamma_1 h^1 + \gamma_2 h^2$ 是 $(\gamma_1 \alpha_1 + \gamma_2 \alpha_2, \gamma_1 \beta_1 + \gamma_2 \beta_2)$ -可光滑函数.

(b) 设 $\mathcal{A}: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{V}$ 是欧几里得空间 \mathbb{E} 与 \mathbb{V} 之间的线性变换. 设 $h: \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$ 为凸的 (α, β) -可光滑函数, 并定义

$$q(\mathbf{x}) \equiv h(\mathcal{A}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}),$$

其中 $\mathbf{b} \in \mathbb{V}$. 那么 q 是 $(\alpha \|\mathcal{A}\|^2, \beta)$ -可光滑的.

例 10.48 ($\|\mathbf{Ax} + \mathbf{b}\|_2$ 的光滑近似). 设 $q: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 由 $q(\mathbf{x}) = \|\mathbf{Ax} + \mathbf{b}\|_2$ 给出, 其中 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 且 $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. 那么 $q(\mathbf{x}) = g(\mathbf{Ax} + \mathbf{b})$, 其中 $g: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ 由 $g(\mathbf{y}) = \|\mathbf{y}\|_2$ 给出. 设 $\mu > 0$. 根据例 10.44, $g_\mu(\mathbf{y}) = \sqrt{\|\mathbf{y}\|_2^2 + \mu^2} - \mu$ 是 g 的参数为 $(1, 1)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似. 因此, 根据定理 10.46(b),

$$q_\mu(\mathbf{x}) \equiv g_\mu(\mathbf{Ax} + \mathbf{b}) = \sqrt{\|\mathbf{Ax} + \mathbf{b}\|_2^2 + \mu^2} - \mu$$

是 q 的参数为 $(\|\mathbf{A}\|_{2,2}^2, 1)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似.

例 10.49 (分段仿射函数的平滑近似). 设 $q: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 由 $q(\mathbf{x}) = \max_{i=1, \dots, m} \{\mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} + b_i\}$ 给出, 其中对于任意 $i = 1, 2, \dots, m$, $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$ 且 $b_i \in \mathbb{R}$. 那么 $q(\mathbf{x}) = g(\mathbf{Ax} + \mathbf{b})$, 其中 $g(\mathbf{y}) = \max\{y_1, y_2, \dots, y_m\}$, \mathbf{A} 是以 $\mathbf{a}_1^\top, \mathbf{a}_2^\top, \dots, \mathbf{a}_m^\top$ 为行的矩阵, 且 $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \dots, b_m)^\top$. 设 $\mu > 0$. 根据例 10.45, $g_\mu(\mathbf{y}) = \mu \log(\sum_{i=1}^m e^{y_i/\mu}) - \mu \log m$ 是 g 的参数为 $(1, \log m)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似. 因此, 根据定理 10.46(b), 函数

$$q_\mu(\mathbf{x}) \equiv g_\mu(\mathbf{Ax} + \mathbf{b}) = \mu \log \left(\sum_{i=1}^m e^{(\mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} + b_i)/\mu} \right) - \mu \log m$$

是 q 的参数为 $(\|\mathbf{A}\|_{2,2}^2, \log m)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似.

例 10.50 (光滑参数的紧性). 考虑绝对值函数 $q: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, 其定义为 $q(x) = |x|$. 根据例 10.44, 对于任意 $\mu > 0$, 函数 $\sqrt{x^2 + \mu^2} - \mu$ 是 q 的参数为 $(1, 1)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似. 我们考虑使用定理 10.46 来构造 q 的另一种光滑近似. 注意到 $q(x) = \max\{x, -x\}$. 因此, 根据例 10.49, 函数 $q_\mu(x) = \mu \log(e^{x/\mu} + e^{-x/\mu}) - \mu \log 2$ 是 q 的参数为 $(\|\mathbf{A}\|_{2,2}^2, \log 2)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似, 其中 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. 由于 $\|\mathbf{A}\|_{2,2}^2 = 2$, 我们得出 q_μ 是 q 的参数为 $(2, \log 2)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似. 由此产生的问题是这些参数是否是紧的, 即它们是否是可能的最小参数. β 参数确实是紧的 (因为 $\lim_{x \rightarrow \infty} q(x) - q_\mu(x) = \mu \log(2)$); 然而, α 参数不是紧的. 要看到这一点, 注意对于任意 $x \in \mathbb{R}$,

$$q_1''(x) = \frac{4}{(e^x + e^{-x})^2}.$$

因此, 对于任意 $x \in \mathbb{R}$, 有 $|q_1''(x)| \leq 1$, 因此, 根据定理 5.12, q_1 是 1-光滑的. 因此, q_μ (也可以写成 $q_\mu(\mathbf{x}) = \mu q_1(\mathbf{x}/\mu)$) 是 $\frac{1}{\mu}$ -光滑的. 我们得出结论, q_μ 是 q 的参数为

$(1, \log 2)$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似.

10.8.3 再论莫罗包络

对于给定的实值凸函数 $h: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$, 其一种自然的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似是莫罗包络 M_h^μ , 我们在 6.7 节已对其进行过详细讨论. 回顾一下, h 的莫罗包络由下式给出

$$M_h^\mu(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{E}} \left\{ h(\mathbf{u}) + \frac{1}{2\mu} \|\mathbf{x} - \mathbf{u}\|^2 \right\}.$$

我们现在将证明, 当 h 还是利普希茨连续时, 莫罗包络确实是一种 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似.

定理 10.51 (实值利普希茨凸函数的可平滑性). 设 $h: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 为凸函数, 且对于所有 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{E}$, 满足

$$|h(\mathbf{x}) - h(\mathbf{y})| \leq \ell_h \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|.$$

那么对于任意 $\mu > 0$, M_h^μ 是 h 的参数为 $(1, \frac{\ell_h^2}{2})$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似.

证明: 根据定理 6.60, M_h^μ 是 $\frac{1}{\mu}$ -光滑的. 对于任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$,

$$M_h^\mu(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{E}} \left\{ h(\mathbf{u}) + \frac{1}{2\mu} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2 \right\} \leq h(\mathbf{x}) + \frac{1}{2\mu} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}\|^2 = h(\mathbf{x}).$$

设 $\mathbf{g}_x \in \partial h(\mathbf{x})$. 由于 h 是利普希茨常数为 ℓ_h 的利普希茨函数, 根据定理 3.61 可得 $\|\mathbf{g}_x\| \leq \ell_h$, 因此

$$\begin{aligned} M_h^\mu(\mathbf{x}) - h(\mathbf{x}) &= \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{E}} \left\{ h(\mathbf{u}) - h(\mathbf{x}) + \frac{1}{2\mu} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2 \right\} \\ &\geq \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{E}} \left\{ \langle \mathbf{g}_x, \mathbf{u} - \mathbf{x} \rangle + \frac{1}{2\mu} \|\mathbf{u} - \mathbf{x}\|^2 \right\} \\ &= -\frac{\mu}{2} \|\mathbf{g}_x\|^2 \\ &\geq -\frac{\ell_h^2}{2} \mu, \end{aligned}$$

其中第一个不等式使用了次梯度不等式. 综上所述, 我们得到凸函数 M_h^μ 是 $\frac{1}{\mu}$ -光滑的, 并且满足

$$M_h^\mu(\mathbf{x}) \leq h(\mathbf{x}) \leq M_h^\mu(\mathbf{x}) + \frac{\ell_h^2}{2} \mu,$$

这表明 M_h^μ 是 h 的参数为 $(1, \frac{\ell_h^2}{2})$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似. \square

推论 10.52. 设 $h: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 是凸函数且是利普希茨常数为 ℓ_h 的利普希茨函数. 那么 h 是 $(1, \frac{\ell_h^2}{2})$ -可光滑的.

例 10.53 (l_2 范数的光滑近似). 考虑函数 $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 其定义为 $h(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2$. 那么 h 是凸函数, 且是利普希茨常数 $\ell_h = 1$ 的利普希茨函数. 因此, 根据定理 10.51, 对于

任意 $\mu > 0$, 函数 (见例 6.54)

$$M_h^\mu(\mathbf{x}) = H_\mu(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{1}{2\mu} \|\mathbf{x}\|_2^2, & \|\mathbf{x}\|_2 \leq \mu, \\ \|\mathbf{x}\|_2 - \frac{\mu}{2}, & \|\mathbf{x}\|_2 > \mu, \end{cases}$$

是 h 的参数为 $(1, \frac{1}{2})$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似.

例 10.54 (l_1 范数的光滑近似). 考虑函数 $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 其定义为 $h(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_1$. 那么 h 是凸函数, 且是利普希茨常数 $\ell_h = \sqrt{n}$ 的利普希茨函数. 因此, 根据定理 10.51, 对于任意 $\mu > 0$, h 的莫罗包络为

$$M_h^\mu(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n H_\mu(x_i),$$

它是 h 的参数为 $(1, \frac{n}{2})$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似.

例 10.55 (绝对值函数的光滑近似). 我们再次考虑绝对值函数 $h(x) = |x|$. 在我们的讨论中, 实际上考虑了 h 的三种可能的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似, 下面详细列出它们及其参数:

- (例 10.44) $h_\mu^1(x) = \sqrt{x^2 + \mu^2} - \mu$, $(\alpha, \beta) = (1, 1)$.
- (例 10.50) $h_\mu^2(x) = \mu \log(e^{x/\mu} + e^{-x/\mu}) - \mu \log 2$, $(\alpha, \beta) = (1, \log 2)$.
- (例 10.53) $h_\mu^3(x) = H_\mu(x)$, $(\alpha, \beta) = (1, \frac{1}{2})$.

显然, 在这三个函数中, Huber 函数是最佳的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似, 因为所有函数的 α 参数相同, 但 h_μ^3 的 β 参数最小. 图 10.3 展示了这种现象, 其中绘制了这三个函数 ($\mu = 0.2$ 的情况).

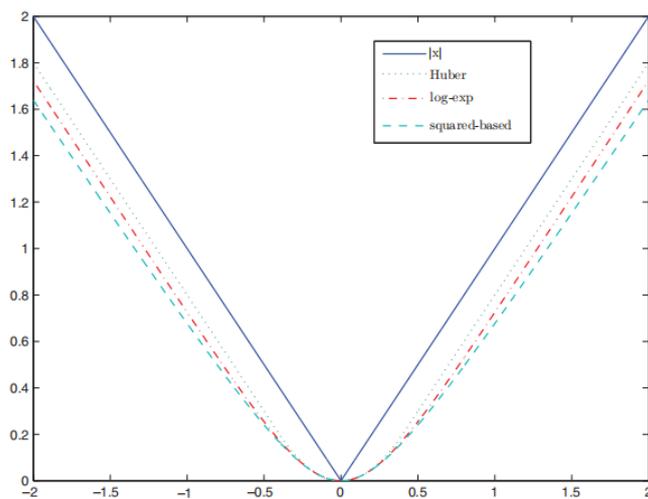


图 10.3 绝对值函数及其三种 5-光滑近似 ($\mu = 0.2$). “squared - based” 是函数 $h_\mu^1(x) = \sqrt{x^2 + \mu^2} - \mu$, “log - exp” 是 $h_\mu^2(x) = \mu \log(e^{x/\mu} + e^{-x/\mu}) - \mu \log 2$, “Huber” 是 $h_\mu^3(x) = H_\mu(x)$.

10.8.4 S-FISTA 方法

本节考虑的优化模型为

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{H(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{x}) + h(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})\}, \quad (10.64)$$

其中做了以下假设.

假设 10.56.

- (A) $f: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 是 L_f -光滑的凸函数 ($L_f \geq 0$),。
- (B) $h: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 是 (α, β) -光滑的 ($\alpha, \beta > 0$) 凸函数. 对于任意 $\mu > 0$, h_μ 表示 h 的参数为 (α, β) 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似.
- (C) $g: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是 proper 闭凸函数.
- (D) H 具有有界的水平集. 具体来说, 对于任意 $\delta > 0$, 存在 $R_\delta > 0$, 使得对任意满足 $H(\mathbf{x}) \leq \delta$ 的 \mathbf{x} , 有 $\|\mathbf{x}\| \leq R_\delta$.
- (E) 问题 (10.64) 的最优解集非空, 记为 X^* . 该问题的最优值记为 H_{opt} .

假设 (E) 实际上是假设 (A)-(D) 的推论 (定理 2.12). S-FISTA 算法的思路是考虑问题 (10.64) 的光滑版本:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{H_\mu(\mathbf{x}) \equiv \underbrace{f(\mathbf{x}) + h_\mu(\mathbf{x})}_{F_\mu(\mathbf{x})} + g(\mathbf{x})\}, \quad (10.65)$$

对于某个光滑参数 $\mu > 0$, 并采用函数值的收敛速度为 $O(1/k^2)$ 的加速算法进行求解. 实际上, 可以采用任意加速方法, 但我们将介绍对问题 (10.65) 使用固定步长的 FISTA 算法的版本, 其中光滑部分和非光滑部分分别取为 F_μ 和 g . 下面将详细描述该算法. 注意, F_μ 的梯度的 Lipschitz 常数是 $L_f + \frac{\alpha}{\mu}$, 因此步长取为 $\frac{1}{L_f + \frac{\alpha}{\mu}}$.

S-FISTA 算法

输入: $\mathbf{x}^0 \in \text{dom}(g)$, $\mu > 0$.

初始化: 令 $\mathbf{y}^0 = \mathbf{x}^0$, $t_0 = 1$; 构造 h_μ 为 h 的参数为 (α, β) 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似; 令 $F_\mu = f + h_\mu$, $\tilde{L} = L_f + \frac{\alpha}{\mu}$.

一般步骤: 对于任意 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

- (a) 令 $\mathbf{x}^{k+1} = \text{prox}_{\frac{1}{\tilde{L}}g}(\mathbf{y}^k - \frac{1}{\tilde{L}}\nabla F_\mu(\mathbf{y}^k))$;
- (b) 令 $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
- (c) 计算 $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{x}^{k+1} + (\frac{t_k - 1}{t_{k+1}})(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k)$.

定理 10.57 表明, 当给定精度水平 $\varepsilon > 0$ 时, 可以通过选择参数 μ 来保证在 $O(1/\varepsilon)$ 迭代内得到原问题 (10.64) 的 ε -最优解.

定理 10.57 (S-FISTA 的 $O(1/\varepsilon)$ 复杂度). 假设假设 10.56 成立. 对于某个固定的 $\bar{\varepsilon} > 0$, 令 $\varepsilon \in (0, \bar{\varepsilon})$. 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是由 S-FISTA 算法生成的序列, 其光滑参数为

$$\mu = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta} \frac{\varepsilon}{\sqrt{\alpha\beta} + \sqrt{\alpha\beta + L_f \varepsilon}}}.$$

则对于任意满足下式的 k ,

$$k \geq 2\sqrt{2\alpha\beta\Gamma} \frac{1}{\varepsilon} + \sqrt{2L_f\Gamma} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}},$$

其中 $\Gamma = (R_{H(\mathbf{x}^0) + \frac{\varepsilon}{2}} + \|\mathbf{x}^0\|)^2$, 有 $H(\mathbf{x}^k) - H_{\text{opt}} \leq \varepsilon$ 成立.

证明: 根据 S-FISTA 的定义, $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是将 FISTA 应用于问题 (10.65) 时生成的序列, 其中输入为 (F_μ, g, \mathbf{x}^0) . 注意到

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} H_\mu(\mathbf{x}) = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{H_\mu(\mathbf{x}) : H_\mu(\mathbf{x}) \leq H_\mu(\mathbf{x}^0)\}. \quad (10.66)$$

由于 H_μ 是闭函数, 所以 (10.66) 右式的可行集 $C \equiv \{\mathbf{x} \in \mathbb{E} : H_\mu(\mathbf{x}) \leq H_\mu(\mathbf{x}^0)\}$ 是闭集 (定理 2.6 (iii)). 我们将证明它也是有界的. 事实上, 因为 h_μ 是 h 的参数为 (α, β) 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似, 所以对于任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$, 有 $h(\mathbf{x}) \leq h_\mu(\mathbf{x}) + \beta\mu$, 因此对于任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$, 有 $H(\mathbf{x}) \leq H_\mu(\mathbf{x}) + \beta\mu$. 于是,

$$C \subseteq \{\mathbf{x} \in \mathbb{E} : H(\mathbf{x}) \leq H_\mu(\mathbf{x}^0) + \beta\mu\},$$

根据假设 10.56 (D), 这意味着 C 是有界的, 并且由于它是闭集, 所以 C 是紧集. 因此, 根据闭函数的 Weierstrass 定理 (定理 2.12), 问题 (10.65) 的最优解在某点 \mathbf{x}_μ^* 处取得, 最优值为 $H_{\mu, \text{opt}}$. 根据定理 10.34, 由于 F_μ 是 $(L_f + \frac{\alpha}{\mu})$ -光滑的, 所以有

$$H_\mu(\mathbf{x}^k) - H_{\mu, \text{opt}} \leq 2 \left(L_f + \frac{\alpha}{\mu} \right) \frac{\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}_\mu^*\|^2}{(k+1)^2} = 2 \left(L_f + \frac{\alpha}{\mu} \right) \frac{\Lambda}{(k+1)^2}, \quad (10.67)$$

其中 $\Lambda = \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}_\mu^*\|^2$. 我们再次利用 h_μ 是 h 的参数为 (α, β) 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似这一事实, 由此可得对于任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$, 有

$$H_\mu(\mathbf{x}) \leq H(\mathbf{x}) \leq H_\mu(\mathbf{x}) + \beta\mu. \quad (10.68)$$

特别地, 以下两个不等式成立:

$$H_{\text{opt}} \geq H_{\mu, \text{opt}} \quad \text{且} \quad H(\mathbf{x}^k) \leq H_\mu(\mathbf{x}^k) + \beta\mu, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (10.69)$$

将其与 (10.67) 结合, 可得

$$\begin{aligned} H(\mathbf{x}^k) - H_{\text{opt}} &\leq H_\mu(\mathbf{x}^k) + \beta\mu - H_{\mu, \text{opt}} \leq 2L_f \frac{\Lambda}{(k+1)^2} + \left(\frac{2\alpha\Lambda}{(k+1)^2} \right) \frac{1}{\mu} + \beta\mu \\ &\leq 2L_f \frac{\Lambda}{k^2} + \left(\frac{2\alpha\Lambda}{k^2} \right) \frac{1}{\mu} + \beta\mu. \end{aligned}$$

因此, 对于给定的 $K > 0$, 对于任意 $k \geq K$, 有

$$H(\mathbf{x}^k) - H_{\text{opt}} \leq 2L_f \frac{\Lambda}{K^2} + \left(\frac{2\alpha\Lambda}{K^2} \right) \frac{1}{\mu} + \beta\mu. \quad (10.70)$$

关于 μ 最小化 (10.70) 的右式, 我们得到

$$\mu = \sqrt{\frac{2\alpha\Lambda}{\beta} \frac{1}{K}}. \quad (10.71)$$

将上述表达式代入 (10.70), 我们得出对于任意 $k \geq K$,

$$H(\mathbf{x}^k) - H_{\text{opt}} \leq 2L_f \frac{\Lambda}{K^2} + 2\sqrt{2\alpha\beta\Lambda} \frac{1}{K}.$$

因此, 为了保证对于任意 $k \geq K$, \mathbf{x}^k 是 ε -最优解, 只需使 K 满足

$$2L_f \frac{\Lambda}{K^2} + 2\sqrt{2\alpha\beta\Lambda} \frac{1}{K} \leq \varepsilon.$$

令 $t = \frac{\sqrt{2\Lambda}}{K}$, 上述不等式可化为

$$L_f t^2 + 2\sqrt{\alpha\beta} t - \varepsilon \leq 0,$$

由于 $t > 0$, 这等价于

$$\frac{\sqrt{2\Lambda}}{K} = t \leq \frac{-\sqrt{\alpha\beta} + \sqrt{\alpha\beta + L_f \varepsilon}}{L_f} = \frac{\varepsilon}{\sqrt{\alpha\beta} + \sqrt{\alpha\beta + L_f \varepsilon}}.$$

因此 K 应满足

$$K \geq \frac{\sqrt{2\Lambda\alpha\beta} + \sqrt{2\Lambda\alpha\beta + 2\Lambda L_f \varepsilon}}{\varepsilon}.$$

特别地, 如果我们选择

$$K = K_1 \equiv \frac{\sqrt{2\Lambda\alpha\beta} + \sqrt{2\Lambda\alpha\beta + 2\Lambda L_f \varepsilon}}{\varepsilon},$$

并根据 (10.71) 选择 μ , 即

$$\mu = \sqrt{\frac{2\alpha\Lambda}{\beta} \frac{1}{K_1}} = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta} \frac{\varepsilon}{\sqrt{\alpha\beta} + \sqrt{\alpha\beta + L_f \varepsilon}}},$$

那么对于任意 $k \geq K_1$, 有 $H(\mathbf{x}^k) - H_{\text{opt}} \leq \varepsilon$. 由 (10.68) 和 (10.69) 可得,

$$H(\mathbf{x}_\mu^*) - \beta\mu \leq H_\mu(\mathbf{x}_\mu^*) = H_{\mu, \text{opt}} \leq H_{\text{opt}} \leq H(\mathbf{x}^0),$$

结合不等式

$$\mu = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta} \frac{\varepsilon}{\sqrt{\alpha\beta} + \sqrt{\alpha\beta + L_f \varepsilon}}} \leq \sqrt{\frac{\alpha}{\beta} \frac{\varepsilon}{\sqrt{\alpha\beta} + \sqrt{\alpha\beta}}} \leq \frac{\bar{\varepsilon}}{2\beta}$$

可得 $H(\mathbf{x}_\mu^*) \leq H(\mathbf{x}^0) + \frac{\bar{\varepsilon}}{2}$. 因此, 根据假设 10.56 (D), 可得 $\|\mathbf{x}_\mu^*\| \leq R_\delta$, 其中 $\delta =$

$H(\mathbf{x}^0) + \frac{\varepsilon}{2}$. 所以, $\Lambda = \|\mathbf{x}_\mu^* - \mathbf{x}^0\|^2 \leq (R_\delta + \|\mathbf{x}^0\|)^2 = \Gamma$. 因此,

$$\begin{aligned} K_1 &= \frac{\sqrt{2\Lambda\alpha\beta} + \sqrt{2\Lambda\alpha\beta + 2\Lambda L_f \varepsilon}}{\varepsilon} \\ &\stackrel{\sqrt{\gamma+\delta} \leq \sqrt{\gamma} + \sqrt{\delta} \quad \forall \gamma, \delta \geq 0}{\leq} \frac{2\sqrt{2\Lambda\alpha\beta} + \sqrt{2\Lambda L_f \varepsilon}}{\varepsilon} \\ &\leq \frac{2\sqrt{2\Gamma\alpha\beta} + \sqrt{2\Gamma L_f \varepsilon}}{\varepsilon} \equiv K_2, \end{aligned}$$

并且对于任意 $k \geq K_2$, 我们有 $H(\mathbf{x}^k) - H_{\text{opt}} \leq \varepsilon$, 由此完成定理的证明. \square

注 10.58. 注意, 定理 10.57 中选择的光滑参数不依赖于 Γ , 尽管得到的 ε -最优解所需的迭代次数确实依赖于 Γ .

例 10.59. 考虑问题

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{h(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in C\}, \quad (10.72)$$

其中 C 是一个非空闭凸集, $h: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 是凸函数, 其 Lipschitz 常数为 ℓ_h . 问题 (10.72) 符合模型 (10.64), 其中 $f \equiv 0$ 且 $g = \delta_C$ (命题 3.3 和例 2.20 得到闭凸性). 根据定理 10.51, 对于任意 $\mu > 0$, 莫罗包络 M_h^μ 是 h 的参数为 $(\alpha, \beta) = (1, \frac{\ell_h^2}{2})$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似. 此外, 根据定理 6.60 可得, $\nabla M_h^\mu(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mu}(\mathbf{x} - \text{prox}_{\mu h}(\mathbf{x}))$. 我们选择 $h_\mu = M_h^\mu$, 因此 $F_\mu = f + M_h^\mu = M_h^\mu$. 根据定理 10.57, 使用 S-FISTA 方法进行 $O(1/\varepsilon)$ 次迭代 (注意 $L_f = 0$), 有

$$\mu = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \frac{\varepsilon}{\sqrt{\alpha\beta} + \sqrt{\alpha\beta + L_f \varepsilon}} = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \frac{\varepsilon}{\sqrt{\alpha\beta} + \sqrt{\alpha\beta}} = \frac{\varepsilon}{2\beta} = \frac{\varepsilon}{\ell_h^2},$$

且将得到一个 ε -最优解. 其步长为 $\frac{1}{\tilde{L}}$, 其中 $\tilde{L} = \frac{\alpha}{\mu} = \frac{1}{\mu}$. S-FISTA 的主要更新步骤具有以下形式:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{k+1} &= \text{prox}_{\frac{1}{\tilde{L}}g}(\mathbf{y}^k - \frac{1}{\tilde{L}}\nabla F_\mu(\mathbf{y}^k)) = P_C(\mathbf{y}^k - \frac{1}{\tilde{L}\mu}(\mathbf{y}^k - \text{prox}_{\mu h}(\mathbf{y}^k))) \\ &= P_C(\text{prox}_{\mu h}(\mathbf{y}^k)). \end{aligned}$$

用于求解 (10.72) 的 S-FISTA 方法描述如下.

用于求解 (10.72) 的 S-FISTA 算法

初始化: 令 $\mathbf{y}^0 = \mathbf{x}^0 \in C$, $t_0 = 1$, $\mu = \frac{\varepsilon}{\ell_h^2}$, $\tilde{L} = \frac{\ell_h^2}{\varepsilon}$.

一般步骤: 对于任意 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

- (a) $\mathbf{x}^{k+1} = P_C(\text{prox}_{\mu h}(\mathbf{y}^k));$
- (b) $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2};$
- (c) $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{x}^{k+1} + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}}\right)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k).$

例 10.60. 考虑问题

$$(P) \quad \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \|\mathbf{Dx}\|_1 + \lambda \|\mathbf{x}\|_1 \right\},$$

其中 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{p \times n}$, 且 $\lambda > 0$. 问题 (P) 符合模型 (10.64), 其中 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2$, $h(\mathbf{x}) = \|\mathbf{Dx}\|_1$, $g(\mathbf{x}) = \lambda \|\mathbf{x}\|_1$. 假设 10.56 成立, 即 f 是凸函数且为 L_f -光滑函数, 其中 $L_f = \|\mathbf{A}^\top \mathbf{A}\|_{2,2} = \|\mathbf{A}\|_{2,2}^2$ (例 5.2), g 是 proper 闭凸函数, h 是实值凸函数, 且目标函数的水平集有界. 为了说明 h 是可光滑的并找到其参数, 注意到 $h(\mathbf{x}) = q(\mathbf{Dx})$, 其中 $q: \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ 定义为 $q(\mathbf{y}) = \|\mathbf{y}\|_1$. 根据例 10.54, 对于任意 $\mu > 0$, $q_\mu(\mathbf{y}) = M_q^\mu(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^p H_\mu(y_i)$ 是 q 的参数为 $(1, \frac{p}{2})$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似. 根据定理 10.46 (b), $q_\mu(\mathbf{Dx})$ 是 h 的参数为 $(\alpha, \beta) = (\|\mathbf{D}\|_{2,2}^2, \frac{p}{2})$ 的 $\frac{1}{\mu}$ -光滑近似, 我们令 $h_\mu(\mathbf{x}) = M_q^\mu(\mathbf{Dx})$ 且 $F_\mu(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + h_\mu(\mathbf{x})$. 因此, 根据定理 10.57, 为了得到问题 (P) 的 ε -最优解, 我们需要使用 S-FISTA 方法, 其中

$$\begin{aligned} \mu &= \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \frac{\varepsilon}{\sqrt{\alpha\beta} + \sqrt{\alpha\beta + L_f\varepsilon}} \\ &= \frac{2\|\mathbf{D}\|_{2,2}}{\sqrt{p}} \cdot \frac{\varepsilon}{\sqrt{\|\mathbf{D}\|_{2,2}^2 p + \sqrt{\|\mathbf{D}\|_{2,2}^2 p + 2\|\mathbf{A}^\top \mathbf{A}\|_{2,2}\varepsilon}}}. \end{aligned} \quad (10.73)$$

由于 $F_\mu(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + M_q^\mu(\mathbf{Dx})$, 可得

$$\begin{aligned} \nabla F_\mu(\mathbf{x}) &= \nabla f(\mathbf{x}) + \mathbf{D}^\top \nabla M_q^\mu(\mathbf{Dx}) \\ &= \nabla f(\mathbf{x}) + \frac{1}{\mu} \mathbf{D}^\top (\mathbf{Dx} - \text{prox}_{\mu q}(\mathbf{Dx})). \quad [\text{定理 6.60}] \\ &= \nabla f(\mathbf{x}) + \frac{1}{\mu} \mathbf{D}^\top (\mathbf{Dx} - \mathcal{T}_\mu(\mathbf{Dx})). \quad [\text{例 6.8}] \end{aligned}$$

下面我们写出针对给定精度参数 $\varepsilon > 0$ 求解问题 (P) 的 S-FISTA 算法.

求解 (P) 的 S-FISTA 算法

初始化: 令 $\mathbf{y}^0 = \mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$, $t_0 = 1$; 按 (10.73) 设置 μ , 且 $\tilde{L} = \|\mathbf{A}\|_{2,2}^2 + \frac{\|\mathbf{D}\|_{2,2}^2}{\mu}$.

一般步骤: 对于任意 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

$$(a) \quad \mathbf{x}^{k+1} = \mathcal{T}_{\lambda/\tilde{L}} \left(\mathbf{y}^k - \frac{1}{\tilde{L}} \left(\mathbf{A}^\top (\mathbf{A}\mathbf{y}^k - \mathbf{b}) + \frac{1}{\mu} \mathbf{D}^\top (\mathbf{D}\mathbf{y}^k - \mathcal{T}_\mu(\mathbf{D}\mathbf{y}^k)) \right) \right);$$

$$(b) \quad t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2};$$

$$(c) \quad \mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{x}^{k+1} + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}} \right) (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k).$$

有趣的是, 在问题 (P) 的情形下, 我们实际上可以计算出定理 10.57 中出现的常数 Γ . 确实, 如果 $H(\mathbf{x}) \leq \alpha$, 那么

$$\lambda \|\mathbf{x}\|_1 \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \|\mathbf{Dx}\|_1 + \lambda \|\mathbf{x}\|_1 \leq \alpha,$$

并且由于 $\|\mathbf{x}\|_2 \leq \|\mathbf{x}\|_1$, 由此可得 R_α 可以取为 $\frac{\alpha}{\lambda}$, 据此可以计算出 Γ .

10.9 非欧近端梯度法

在本节中 (仅限于本节), 我们不再假设底层空间为欧几里得空间. 我们将考虑两种不同的方法来处理非欧空间上的近端梯度法. 第一种方法通过梯度法的变体来解决无约束光滑问题, 第二种方法旨在解决复合模型, 用基于 Bregman 距离的映射来替换欧几里得近端算子.

10.9.1 非欧几里得梯度方法

考虑无约束问题

$$\min\{f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathbb{E}\}, \quad (10.74)$$

其中我们假设 f 在底层范数下是 L_f -光滑的. 回想一下, 梯度方法 (见 10.2 节) 的形式为

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - t_k \nabla f(\mathbf{x}^k). \quad (10.75)$$

正如在 9.1 节中讨论的 (在镜面下降方法的背景下), 该方法存在一个“哲学”上的缺陷, 即 $\mathbf{x}^k \in \mathbb{E}$ 而 $\nabla f(\mathbf{x}^k) \in \mathbb{E}^*$. 显然, 在本书中 \mathbb{E} 和 \mathbb{E}^* 之间的唯一区别在于它们的底层范数, 因此调用方法 (10.75) 没有实际问题. 尽管如此, 我们将改变方法 (10.75), 并将 $\nabla f(\mathbf{x}^k) \in \mathbb{E}^*$ 替换为 \mathbb{E} 中的“原始对应物”. 对于任何向量 $\mathbf{a} \in \mathbb{E}^*$, 我们定义 \mathbf{a} 的原始对应物集合为

$$\Lambda_{\mathbf{a}} = \arg \max_{\mathbf{v} \in \mathbb{E}} \{\langle \mathbf{a}, \mathbf{v} \rangle : \|\mathbf{v}\| \leq 1\}. \quad (10.76)$$

引理 10.61 呈现了 $\Lambda_{\mathbf{a}}$ 的一些基本性质, 这些性质直接由其定义和对偶范数的定义得出.

引理 10.61 (原始对应物集合的基本性质). 令 $\mathbf{a} \in \mathbb{E}^*$.

- (a) 如果 $\mathbf{a} \neq 0$, 则对于任意 $\mathbf{a}^\dagger \in \Lambda_{\mathbf{a}}$, 有 $\|\mathbf{a}^\dagger\| = 1$.
- (b) 如果 $\mathbf{a} = 0$, 则 $\Lambda_{\mathbf{a}} = B_{\|\cdot\|}[0, 1]$.
- (c) 对于任意 $\mathbf{a}^\dagger \in \Lambda_{\mathbf{a}}$, 有 $\langle \mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger \rangle = \|\mathbf{a}\|_*$.

我们注意到, 根据共轭次梯度定理 (推论 4.21) 和例 4.4.12, 有

$$\Lambda_{\mathbf{a}} = \partial h(\mathbf{a}), \text{ 其中 } h(\cdot) = \|\cdot\|_*.$$

证明: (a) 利用反证法. 根据原始对应物的定义可得 $\|\mathbf{a}^\dagger\| \leq 1$, 所以我们假设 $\|\mathbf{a}^\dagger\| <$

1. 令 $v = \frac{a^\dagger}{\|a^\dagger\|}$, 且 $\|v\| = 1$. 此时可由 $a \neq 0$ 得到

$$\langle a, v \rangle = \frac{1}{\|a^\dagger\|} \langle a, a^\dagger \rangle > \langle a, a^\dagger \rangle,$$

这与 $a^\dagger \in \Lambda_a$ 矛盾, 所以 $\|a^\dagger\| = 1$, 即证.

(b) 当 $\mathbf{a} = 0$ 时, 有

$$\Lambda_{\mathbf{a}} = \operatorname{argmax}_{\mathbf{v} \in \mathbb{E}} \{0 : \|\mathbf{v}\| \leq 1\} = \{\mathbf{v} : \|\mathbf{v}\| \leq 1\} = B_{\|\cdot\|}[0, 1].$$

(c) 由对偶范数定义得:

$$\|\mathbf{a}\|_* = \max_{\mathbf{v} \in \mathbb{E}} \{\langle \mathbf{a}, \mathbf{v} \rangle : \|\mathbf{v}\| \leq 1\},$$

故 $\langle \mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger \rangle = \|\mathbf{a}\|_*$.

下证 $\Lambda_{\mathbf{a}} = \partial h(\mathbf{a})$, 其中 $h(\cdot) = \|\cdot\|_*$. 根据例 4.12 以及其自对偶性可得, 当 $h(x) = \|x\|_*$ 时, 有

$$h^*(y) = \begin{cases} 0, & \|y\| \leq 1, \\ \infty, & \text{否则.} \end{cases}$$

进一步, 由推论 4.21 得

$$\partial h(\mathbf{a}) = \operatorname{argmax}_{\mathbf{v} \in \mathbb{E}} \{\langle \mathbf{a}, \mathbf{v} \rangle - h^*(\mathbf{v})\} = \operatorname{argmax}_{\mathbf{v} \in \mathbb{E}} \{\langle \mathbf{a}, \mathbf{v} \rangle : \|\mathbf{v}\| \leq 1\} = \Lambda_{\mathbf{a}},$$

即证. □

例 10.62. 假设 $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$, 底层范数为欧几里得 l_2 -范数. 在这种情况下, 对于任意 $\mathbf{a} \neq 0$ (可微), 根据例 1.5 有

$$\Lambda_{\mathbf{a}} = \left\{ \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|_2} \right\}.$$

例 10.63. 假设 $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$, 底层范数为 l_1 -范数. 在这种情况下, 对于任意 $\mathbf{a} \neq 0$, 根据例 3.52 可得

$$\Lambda_{\mathbf{a}} = \partial \|\cdot\|_\infty(\mathbf{a}) = \left\{ \sum_{i \in I(\mathbf{a})} \lambda_i \operatorname{sgn}(a_i) \mathbf{e}_i : \sum_{i \in I(\mathbf{a})} \lambda_i = 1, \lambda_j \geq 0, j \in I(\mathbf{a}) \right\},$$

其中 $I(\mathbf{a}) = \operatorname{arg} \max_{i=1,2,\dots,n} |a_i|$.

例 10.64. 假设 $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$, 底层范数为 l_∞ -范数. 对于任意 $\mathbf{a} \neq 0$, $\Lambda_{\mathbf{a}} = \partial h(\mathbf{a})$, 其中 $h(\cdot) = \|\cdot\|_1$. 则根据例 3.41 可得

$$\Lambda_{\mathbf{a}} = \{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n : z_i = \operatorname{sgn}(a_i), i \in I_{\neq}(\mathbf{a}), |z_j| \leq 1, j \in I_0(\mathbf{a})\},$$

其中

$$I_{\neq}(\mathbf{a}) = \{i \in \{1, 2, \dots, n\} : a_i \neq 0\}, \quad I_0(\mathbf{a}) = \{i \in \{1, 2, \dots, n\} : a_i = 0\}.$$

下面介绍非欧几里得梯度方法, 在该方法中梯度 $\nabla f(\mathbf{x}^k)$ 被替换为原始对应物 $\nabla f(\mathbf{x}^k)^\dagger \in \Lambda_{\nabla f(\mathbf{x}^k)}$.

非欧几里得梯度方法

初始化: 任意选择 $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{E}$.

一般步骤: 对于任意 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

- (a) 选择 $\nabla f(\mathbf{x}^k)^\dagger \in \Lambda_{\nabla f(\mathbf{x}^k)}$ 和 $L_k > 0$;
- (b) 令 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \frac{\|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*}{L_k} \nabla f(\mathbf{x}^k)^\dagger$.

我们首先建立一个充分下降性质. 其证明几乎与引理 10.4 的证明相同.

引理 10.65 (非欧几里得梯度法的充分下降). 设 $f: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个 L_f -光滑函数, 且 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是由非欧几里得梯度方法生成的序列. 那么对于任意 $k \geq 0$ 有

$$f(\mathbf{x}^k) - f(\mathbf{x}^{k+1}) \geq \frac{L_k - \frac{L_f}{2}}{L_k^2} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2. \quad (10.77)$$

证明: 根据下降引理 (引理 5.7), 有

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}^{k+1}) &\leq f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{L_f}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \\ &\leq f(\mathbf{x}^k) - \frac{\|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*}{L_k} \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \nabla f(\mathbf{x}^k)^\dagger \rangle + \frac{L_f \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2}{2L_k^2} \\ &\stackrel{(*)}{=} f(\mathbf{x}^k) - \frac{\|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2}{L_k} + \frac{L_f \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2}{2L_k^2} \\ &= f(\mathbf{x}^k) - \frac{L_k - \frac{L_f}{2}}{L_k^2} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2, \end{aligned}$$

其中等式 (*) 由引理 10.61(c) 得出. □

与第 10.3.3 节类似, 我们将考虑常数步长和回溯步长策略. 此外, 我们还将考虑精确线搜索过程.

- 常数步长. $L_k = \bar{L} \in \left(\frac{L_f}{2}, \infty\right)$, 对所有 k 成立.
- 回溯步长 **B4**. 该过程需要 (s, γ, η) 三个参数, 其中 $s > 0, \gamma \in (0, 1)$, 且 $\eta > 1$. L_k 的选择如下: 首先, 将 L_k 设置为等于初始猜测 s . 然后, 当

$$f(\mathbf{x}^k) - f\left(\mathbf{x}^k - \frac{\|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*}{L_k} \nabla f(\mathbf{x}^k)^\dagger\right) < \frac{\gamma}{L_k} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2,$$

我们设置 $L_k := \eta L_k$. 换句话说, L_k 被选择为 $L_k = s\eta^{i_k}$, 其中 i_k 是满足以下条件的最小非负整数:

$$f(\mathbf{x}^k) - f\left(\mathbf{x}^k - \frac{\|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*}{s\eta^{i_k}} \nabla f(\mathbf{x}^k)^\dagger\right) \geq \frac{\gamma}{s\eta^{i_k}} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2.$$

- 精确线搜索. L_k 被选择为

$$L_k \in \arg \min_{L>0} f\left(\mathbf{x}^k - \frac{\|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*}{L} \nabla f(\mathbf{x}^k)^\dagger\right).$$

与注 10.13 中给出的论据相同, 可以得出如果使用回溯过程 B4, 则有

$$L_k \leq \max\left\{s, \frac{\eta L_f}{2(1-\gamma)}\right\}. \quad (10.78)$$

非凸情况下的收敛性分析

下面两个结果 (引理 10.66 和定理 10.67) 的证明与引理 10.14 和定理 10.15 的证明类似.

引理 10.66 (非欧几里得梯度法的充分下降). 设 f 是一个 L_f -光滑函数. 令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是非欧几里得梯度方法用于求解问题 (10.74) 生成的序列, 其中步长可以是 $L_k = \bar{L} \in \left(\frac{L_f}{2}, \infty\right)$ 的常数步长, 或通过回溯过程 B4 选择的步长, 其中参数 (s, γ, η) 满足 $s > 0, \gamma \in (0, 1), \eta > 1$, 或者精确线搜索计算的步长. 则对于任意 $k \geq 0$, 有

$$f(\mathbf{x}^k) - f(\mathbf{x}^{k+1}) \geq M \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2, \quad (10.79)$$

其中

$$M = \begin{cases} \frac{\bar{L} - \frac{L_f}{2}}{L^2}, & \text{常数步长,} \\ \frac{\gamma}{\max\left\{s, \frac{\eta L_f}{2(1-\gamma)}\right\}}, & \text{回溯,} \\ \frac{1}{2L_f}, & \text{精确线搜索.} \end{cases} \quad (10.80)$$

证明: 常数步长设置的结果通过将 $L_k = \bar{L}$ 代入式 (10.77) 得到. 如果 L_k 是通过精确线搜索过程选择的, 则有 $f(\mathbf{x}^{k+1}) \leq f(\tilde{\mathbf{x}}^k)$, 其中 $\tilde{\mathbf{x}}^k = \mathbf{x}^k - \frac{\|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*}{L_f} \nabla f(\mathbf{x}^k)^\dagger$, 因

此

$$f(\mathbf{x}^k) - f(\mathbf{x}^{k+1}) \geq f(\mathbf{x}^k) - f(\tilde{\mathbf{x}}^k) \geq \frac{1}{2L_f} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2,$$

其中第二个不等式中使用了常数步长下建立的结果. 至于回溯过程, 根据其定义和 L_k 的上界 (10.78), 有

$$f(\mathbf{x}^k) - f(\mathbf{x}^{k+1}) \geq \frac{\gamma}{L_k} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2 \geq \frac{\gamma}{\max\left\{s, \frac{\eta L_f}{2(1-\gamma)}\right\}} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2.$$

即证. □

引理 10.67 (非欧几里得梯度方法的收敛性-非凸情况). 假设 f 是一个 L_f -光滑函数. 令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是由非欧几里得梯度方法求解如下问题生成的序列,

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} f(\mathbf{x}), \quad (10.81)$$

其中步长可以是对应于 $L_k = \bar{L} \in (\frac{L_f}{2}, \infty)$ 的常数步长, 或者是通过参数为 (s, γ, η) 的回溯过程 B4 选择的步长, 这些参数满足 $s > 0, \gamma \in (0, 1), \eta > 1$, 或者精确线搜索计算的步长. 则有

- (a) 序列 $\{f(\mathbf{x}^k)\}_{k \geq 0}$ 是非增的; 此外, $f(\mathbf{x}^{k+1}) < f(\mathbf{x}^k)$ 当且仅当 $\nabla f(\mathbf{x}^k) \neq \mathbf{0}$;
- (b) 如果序列 $\{f(\mathbf{x}^k)\}_{k \geq 0}$ 有下界, 则当 $k \rightarrow \infty$ 时, $\nabla f(\mathbf{x}^k) \rightarrow \mathbf{0}$;
- (c) 如果 (10.81) 的最优值是有限的并且等于 f_{opt} , 则

$$\min_{n=0,1,\dots,k} \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_* \leq \frac{\sqrt{f(\mathbf{x}^0) - f_{\text{opt}}}}{\sqrt{M(k+1)}}, \quad (10.82)$$

其中 M 在 (10.80) 中给出;

- (d) 序列 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 的所有极限点都是问题 (10.81) 的驻点.

证明: (a) 根据引理 10.66 可得,

$$f(\mathbf{x}^k) - f(\mathbf{x}^{k+1}) \geq M \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|_*^2, \quad (10.83)$$

其中 $M > 0$ 在 (10.80) 中给出. 不等式 (10.83) 意味着 $f(\mathbf{x}^k) \geq f(\mathbf{x}^{k+1})$, 并且如果 $\nabla f(\mathbf{x}^k) \neq \mathbf{0}$, 则 $f(\mathbf{x}^{k+1}) < f(\mathbf{x}^k)$. 最后, 如果 $\nabla f(\mathbf{x}^k) = \mathbf{0}$, 那么 $\mathbf{x}^k = \mathbf{x}^{k+1}$, 因此 $f(\mathbf{x}^k) = f(\mathbf{x}^{k+1})$.

(b) 由于序列 $\{f(\mathbf{x}^k)\}_{k \geq 0}$ 是非增且有下界的, 因此它是收敛的. 特别地, 当 $k \rightarrow \infty$ 时, $f(\mathbf{x}^k) - f(\mathbf{x}^{k+1}) \rightarrow 0$, 这与 (10.83) 结合起来, 意味着当 $k \rightarrow \infty$ 时, $\nabla f(\mathbf{x}^k) \rightarrow \mathbf{0}$.

(c) 根据引理 10.66, 对于任意 $n \geq 0$, 有

$$f(\mathbf{x}^n) - f(\mathbf{x}^{n+1}) \geq M \|\nabla f(\mathbf{x}^n)\|_*^2.$$

对上述不等式在 $n = 0, 1, \dots, k$ 上求和, 我们得到

$$f(\mathbf{x}^0) - f(\mathbf{x}^{k+1}) \geq M \sum_{n=0}^k \|\nabla f(\mathbf{x}^n)\|_*^2 \geq (k+1)M \min_{n=0,1,\dots,k} \|\nabla f(\mathbf{x}^n)\|_*^2.$$

利用 $f(\mathbf{x}^{k+1}) \geq f_{\text{opt}}$ 这一事实, 不等式 (10.82) 成立.

(d) 设 $\bar{\mathbf{x}}$ 是序列 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 的一个极限点. 那么存在一个子序列 $\{\mathbf{x}^{k_j}\}_{j \geq 0}$ 收敛到 $\bar{\mathbf{x}}$. 对于任意 $j \geq 0$, 有

$$\|\nabla f(\bar{\mathbf{x}})\|_* \leq \|\nabla f(\mathbf{x}^{k_j}) - \nabla f(\bar{\mathbf{x}})\|_* + \|\nabla f(\mathbf{x}^{k_j})\|_* \leq L_f \|\mathbf{x}^{k_j} - \bar{\mathbf{x}}\| + \|\nabla f(\mathbf{x}^{k_j})\|_*. \quad (10.84)$$

由于当 $j \rightarrow \infty$ 时, (10.84) 的右侧趋于 0, 因此有 $\nabla f(\bar{\mathbf{x}}) = \mathbf{0}$. \square

收敛性分析: 凸情形

为了在 f 为凸函数的情况下建立收敛速率, 我们需要一个附加的有界性假设. 所有必要的假设总结如下.

假设 10.68.

(A) $f: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 是 L_f -光滑且凸的;

(B) 问题

$$\min_{x \in \mathbb{E}} f(x)$$

的最优解集非空, 记为 X^* , 其最优值记为 f_{opt} ;

(C) 对任意 $\alpha > 0$, 存在常数 $R_\alpha > 0$ 使得

$$\max_{x, x^*} \{\|x^* - x\| : f(x) \leq \alpha, x^* \in X^*\} \leq R_\alpha.$$

收敛速率的证明依赖下列简单引理。

补充. 若函数 f 是闭且 σ -强凸的, 则可以保证假设 10.68 中的条件 (C) 成立. 由定理 5.25 知, 如果 f 是闭且 σ -强凸的, 则有

$$f(x) - f(x^*) \geq \frac{\sigma}{2} \|x - x^*\|^2$$

成立, 其中 $x^* \in X^*$. 所以有

$$\frac{\sigma}{2} \|x - x^*\|^2 \leq f(x) - f(x^*) \leq \alpha - f(x^*)$$

成立, 即 (C) 成立。

补充. 若函数 f 是强制的 (即当 $\|x\| \rightarrow \infty$ 时有 $f(x) \rightarrow +\infty$), 也可保证假设 10.68 中的 (C) 成立. 若函数 f 是强制的, 则其任意下水平集 $\{x \mid f(x) \leq \alpha\}$ 都是有界的. 又由于 f 连续且最优解集 X^* 非空, 可知 X^* 亦为有界集. 因此, 对任意

$\alpha > 0$, 集合 $\{(x, x^*) \mid f(x) \leq \alpha, x^* \in X^*\}$ 是有界的, 从而存在常数 $R_\alpha > 0$ 使得条件 (C) 成立。

引理 10.69. 设假设 10.68 成立。设 $\{x_k\}_{k \geq 0}$ 是由非欧几里得梯度法生成的序列, 用以在空间 \mathbb{R} 上最小化 f , 步长选择可为: 常数步长: $L_k = \bar{L} \in \left(\frac{L_f}{2}, \infty\right)$; 回溯步长 B4, 参数 (s, γ, η) 满足 $s > 0, \gamma \in (0, 1), \eta > 1$; 或精确线搜索。则有

$$f(x^k) - f(x^{k+1}) \geq \frac{1}{C} (f(x^k) - f_{\text{opt}})^2, \quad (10.85)$$

其中常数 C 为

$$C = \begin{cases} \frac{R_\alpha^2 \bar{L}^2}{\bar{L} - \frac{L_f}{2}}, & \text{常数步长,} \\ \frac{R_\alpha^2}{\gamma} \max\left\{s, \frac{\eta L_f}{2(1-\gamma)}\right\}, & \text{回溯,} \\ 2R_\alpha^2 L_f, & \text{精确线搜索,} \end{cases} \quad (10.86)$$

其中 $\alpha = f(x^0)$ 。

证明: 由定理 10.67(a) 可知 $\{f(x^k)\}_{k \geq 0}$ 单调不减, 因而对任意 $k \geq 0$ 有 $f(x^k) \leq f(x^0)$ 。于是对任意 $x^* \in X^*$ 与 $k \geq 0$ 均有

$$\|x^k - x^*\| \leq R_\alpha,$$

其中 $\alpha = f(x_0)$ 。为证明式 (10.85), 注意一方面, 由引理 10.66 有

$$f(x^k) - f(x^{k+1}) \geq M \|\nabla f(x^k)\|_*^2, \quad (10.87)$$

其中 M 由式 (10.80) 给出。另一方面, 由梯度不等式与广义 Cauchy-Schwarz 不等式 (引理 1.4) 对任意 $x^* \in X^*$ 有:

$$f(x^k) - f_{\text{opt}} = f(x^k) - f(x^*) \leq \langle \nabla f(x^k), x^k - x^* \rangle \leq \|\nabla f(x^k)\|_* \|x^k - x^*\| \leq R_\alpha \|\nabla f(x^k)\|_*. \quad (10.88)$$

综合 (10.87) 和 (10.88) 可得

$$f(x^k) - f(x^{k+1}) \geq M \|\nabla f(x^k)\|_*^2 \geq \frac{M}{R_\alpha^2} (f(x^k) - f_{\text{opt}})^2.$$

将 M 的表达式 (10.80) 代入即可得到所需结论。 \square

为了得到函数值的收敛速率, 我们用以下关于非负序列的引理。

引理 10.70. 设 $\{a_k\}_{k \geq 0}$ 为非负实数列, 满足对任意 $k \geq 0$ 有

$$a_k - a_{k+1} \geq \frac{1}{\gamma} a_k^2,$$

其中 $\gamma > 0$ 。则对任意 $k \geq 1$ 有

$$a_k \leq \frac{\gamma}{k}. \quad (10.89)$$

证明： 令 k 是一个正整数。若 $a_k = 0$ ，结论显然成立。若 $a_k > 0$ ，则由于 $\{a_n\}$ 单调不增，可得 $a_0, \dots, a_k > 0$ 。对任意 $n = 1, \dots, k$ ，

$$\frac{1}{a_n} - \frac{1}{a_{n-1}} = \frac{a_{n-1} - a_n}{a_{n-1}a_n} \geq \frac{1}{\gamma} \frac{a_{n-1}^2}{a_{n-1}a_n} = \frac{1}{\gamma} \frac{a_{n-1}}{a_n} \geq \frac{1}{\gamma}. \quad (10.90)$$

两边对 $n = 1, \dots, k$ 求和，得

$$\frac{1}{a_k} \geq \frac{1}{a_0} + \frac{k}{\gamma} \geq \frac{k}{\gamma},$$

从而 (10.89) 得证。 \square

由引理 10.69 与 10.70 可得由非欧几里得梯度法生成的函数值序列以 $O(1/k)$ 速率收敛。

定理 10.71. 在引理 10.69 的条件下，对任意 $k \geq 1$ 成立：

$$f(x^k) - f_{\text{opt}} \leq \frac{C}{k}, \quad (10.91)$$

其中 C 如式 (10.86) 所示。

证明： 由引理 10.69 可知

$$a_k - a_{k+1} \geq \frac{1}{C} a_k^2,$$

其中 $a_k = f(x^k) - f_{\text{opt}}$ 。再根据引理 10.70，令 $\gamma = C$ ， $a_k \leq \frac{C}{k}$ 可知式 (10.91) 成立。 \square

注 10.72. 当步长取常数 $1/L_f$ （即 $L_k \equiv \bar{L} \equiv L_f$ ）时，式 (10.91) 化为

$$f(x^k) - f_{\text{opt}} \leq \frac{2R_\alpha^2 L_f}{k},$$

其形式与欧几里得情形下的结果类似，即（参见定理 10.21）：

$$f(x_k) - f_{\text{opt}} \leq \frac{L_f \|x_0 - x^*\|^2}{2k}.$$

\mathbb{R}^n 空间上的 ℓ_1 -范数下的非欧几里得梯度法

例 10.73. 设底层空间为 \mathbb{R}^n 并赋以 ℓ_1 范数，且 f 关于该范数是 L_f -光滑的。回忆 Example 10.63 中的结果，对于任意 $\mathbf{a} \neq 0$ ，其原始对应物集合为

$$\Lambda_{\mathbf{a}} = \left\{ \sum_{i \in I(\mathbf{a})} \lambda_i \text{sgn}(a_i) e_i : \sum_{i \in I(\mathbf{a})} \lambda_i = 1, \lambda_j \geq 0, j \in I(\mathbf{a}) \right\},$$

其中 $I(a) = \arg \max_{i=1, \dots, n} |a_i|$ 。在算法实现中, 可任选 $i \in I(a)$ 并取 $a^\dagger = \operatorname{sgn}(a_i)e_i$ 。于是方法形式为:

非欧几里得梯度法 (ℓ_1 范数下)

初始化: 选取 $x^0 \in \mathbb{R}^n$ 。

一般步骤: 对 $k = 0, 1, 2, \dots$,

1. 选取 $i_k \in \arg \max_i \left| \frac{\partial f(x^k)}{\partial x_i} \right|$;
2. 更新:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\|\nabla f(x^k)\|_\infty}{L_k} \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial f(x^k)}{\partial x_{i_k}}\right) e_{i_k}.$$

常数 L_k 可按三种方式选取: 常数步长 $L_k \equiv \bar{L} \in \left(\frac{L_f}{2}, \infty\right)$ 、回溯过程 B4 或精确线搜索。注意, 每次迭代仅改变一个坐标, 因此该方法可视为坐标下降法的一个变体, 并且可解释为一种非欧几里得梯度方法。

补充. 在诱导范数的定义中并没有 $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ 的要求, 然而例 5.2 中加上这个要求是因为要确保 $\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|_q$ 有意义。

例 10.74. 考虑如下最小化问题:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2} x^\top A x + b^\top x \right\},$$

其中 $A \in \mathbb{S}_{++}^n$, $b \in \mathbb{R}^n$ 。设底层空间为 $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$, 并赋以 ℓ_p 范数 ($p \in [1, \infty]$)。由 Example 5.2 可知, f 关于该范数是 $L_f^{(p)}$ -光滑的, 其中

$$L_f^{(p)} = \|A\|_{p,q} = \max_x \{ \|Ax\|_q : \|x\|_p \leq 1 \},$$

$q \in [1, \infty]$ 满足 $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ 。两个典型情形如下:

- 当 $p = 2$ 时, 由于 A 正定, $L_f^{(2)} = \|A\|_{2,2} = \lambda_{\max}(A)$;
- 当 $p = 1$ 时, $L_f^{(1)} = \|A\|_{1,\infty} = \max_{i,j} |A_{ij}|$ 。

若取 $p = 2$, 非欧几里得梯度法即退化为欧几里得梯度法。在步长 $L_k = L_f^{(2)} = \lambda_{\max}(A)$ 的情况下, 其形式为:

算法 G2

1. 初始化: 选取 $x^0 \in \mathbb{R}^n$;
2. 一般步骤 ($k \geq 0$):

$$x^{k+1} = x^k - \frac{1}{L_f^{(2)}} (Ax^k + b)$$

当 $p = 1$ 时,该方法是一种坐标下降型方法。取常数步长 $L_k = L_f^{(1)} = \max_{i,j} |A_{ij}|$, 算法形式如下:

算法 G1

1. 初始化: 选取 $x^0 \in \mathbb{R}^n$;

2. 一般步骤 ($k \geq 0$):

(a) 选取

$$i_k \in \arg \max_{i=1,\dots,n} |A_i x^k + b_i|,$$

其中 A_i 表示矩阵 A 的第 i 行;

(b) 更新:

$$x_j^{k+1} = \begin{cases} x_j^k, & j \neq i_k, \\ x_{i_k}^k - \frac{1}{L_f^{(1)}} (A_{i_k} x^k + b_{i_k}), & j = i_k. \end{cases}$$

根据定理 10.71 可得¹

$$f(x^k) - f_{\text{opt}} \leq \frac{2L_f^{(p)} R_f^2(x_0)}{k}.$$

因此,比例

$$\frac{L_f^{(2)}}{L_f^{(1)}}$$

可用于判断哪种算法在收敛性能上更具优势。

注 10.75. 算法 G2 每次迭代需计算一次矩阵/向量乘 Ax^k , 计算复杂度为 $O(n^2)$ 。而若对算法 G1 进行巧妙实现, 则每次迭代仅需 $O(n)$ 运算: 可利用关系

$$g^{k+1} = g^k - \frac{A_{i_k} x^k + b_{i_k}}{L_f^{(1)}} A e_{i_k},$$

来更新梯度 $g^k \equiv Ax^k + b$, 其中 $A e_{i_k}$ 是 A 的第 i_k 列。因此, 要对算法 G1 和 G2 进行公平比较, 需将算法 G1 的每 n 次迭代计为“一次迭代”。我们将这种迭代称为“元迭代”(meta-iteration)。

例 10.76. 延续 Example 10.74, 设矩阵

$$A = A^{(d)} = J + dI,$$

¹注意, $R_f(x_0)$ 也可能依赖所选范数。

其中 J 为全 1 矩阵。则对任意 $d > 0$, $A(d)$ 正定, 且 $\lambda_{\max}(A(d)) = d+n, \max_{i,j} |A_{ij}^{(d)}| = d+1$ 。因此比值

$$\rho_f = \frac{L_f^{(2)}}{L_f^{(1)}} = \frac{d+n}{d+1}$$

越大, 欧几里得梯度法 (算法 G2) 相对非欧几里得版本 (算法 G1) 的劣势越明显。

我们取 $A = A^{(2)}$, $b = 10e_1$, 初值 $x^0 = e_n$, 运行两种算法。图 10.4 与 10.5 分别绘制了 $n = 10$ 与 $n = 100$ 时 $f(x_k) - f_{\text{opt}}$ 随迭代步 k 的变化。

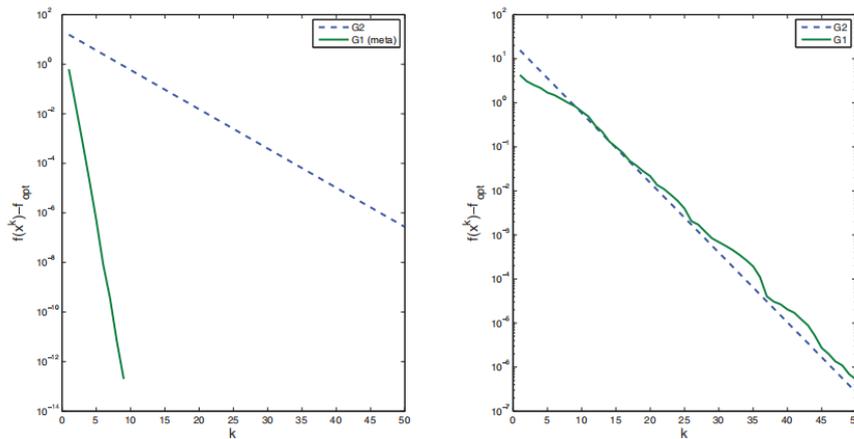


图 10.4 例 10.76 中, $n = 10$ 时欧几里得梯度法 (G2) 与非欧几里得梯度法 (G1) 的比较。左图将 G1 的 10 次迭代视作一次“元迭代”, 右图则每次坐标更新均计为一次迭代。

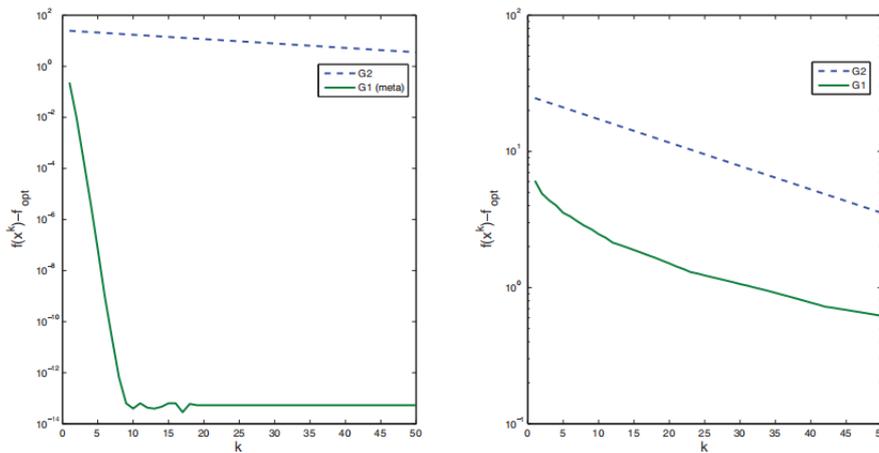


图 10.5 例 10.76 中, $n = 100$ 时欧几里得梯度法 (G2) 与非欧几里得梯度法 (G1) 的比较。左图为“元迭代”计数, 右图为逐坐标计数。

如图所示, 当以“元迭代”标准比较时, 算法 G1 显著优于 G2。若按单步坐标更新计数, 即不考虑元迭代的概念, 当 $n = 10$ 时两者性能相近, 看不出对 G1 或 G2 有明显偏好, 但 $n = 100$ 时, 算法 G1 每次迭代的操作次数远少于 G2 (成本更低), 它相较于 G2 具备显著优势。其原因可能在于: 当 $n = 10$ 时, $\rho_f = \frac{2+10}{2+1} = 4$; 而当 $n = 100$ 时, $\rho_f = \frac{2+100}{2+1} = 34$, 因而在高维情形下 G1 的优势更为显著。

10.9.2 非欧几里得近端梯度法⁶³

在本节中我们重新考虑复合模型：

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{F(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})\}, \quad (10.92)$$

其中 \mathbb{E} 上的范数不再假设为欧几里得范数。我们的目标是构建“非欧几里得”版本的近端梯度法。需要注意的是，当 $g \equiv 0$ 时，本方法并不退化为 Section 10.9.1 节中的非欧几里得梯度法。该方法更接近于将投影次梯度法推广为镜像下降（参见第 9 章）的思路，与前节方法在本质上不同。我们作以下假设。

假设 10.77.

- (A) $g : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是 proper 闭凸函数；
- (A) $f : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是 proper 闭凸函数，且 $\text{dom}(g) \subseteq \text{int}(\text{dom}(f))$ ，并且 f 在 $\text{int}(\text{dom}(f))$ 上 L_f -光滑；
- (A) 问题 (10.1) 的最优解集非空，记为 X^* ，其最优值记为 F_{opt} 。

在欧几里得情形下，近端梯度法（见 Section 10.2 处的讨论）的一般更新规则可写为

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + g(\mathbf{x}) + \frac{L_k}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|^2 \right\}.$$

借鉴镜像下降法的思想，将平方欧几里得距离替换为 Bregman 距离，得到更新规则：

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + g(\mathbf{x}) + L_k B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^k) \right\},$$

其中 B_ω 是与 ω 相关的 Bregman 距离（见定义 9.2），函数 ω 需满足以下性质。

假设 10.78. (ω 的性质)

- ω 是 proper 闭凸函数；
- ω 在 $\text{dom}(\partial\omega)$ 上可微；
- $\text{dom}(g) \subseteq \text{dom}(\omega)$ ；
- $\omega + \delta_{\text{dom}(g)}$ 是 1-强凸的。

非欧几里得近端梯度法定义如下。

¹⁶³ Tseng [121] 在研究中分析了 Section 10.9.2 中的非欧几里得近端梯度法。

非欧几里得近端梯度法.

初始化: 选取 $\mathbf{x}^0 \in \text{dom}(g) \cap \text{dom}(\partial\omega)$.

一般步骤: 对 $k = 0, 1, 2, \dots$ 执行以下步骤:

1. 取 $L_k > 0$;
2. 计算

$$\mathbf{x}_{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \left\{ \left\langle \frac{1}{L_k} \nabla f(\mathbf{x}^k) - \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \right\rangle + \frac{1}{L_k} g(\mathbf{x}) + \omega(\mathbf{x}) \right\}. \quad (10.93)$$

在假设 10.77 和 10.78 下, 非欧几里得近端梯度算法是良定义的: 这说明若 $x_k \in \text{dom}(g) \cap \text{dom}(\partial\omega)$, 最小化问题 (10.93) 在该集合内有唯一最优解. 这一结果可由引理 9.7 取 $\psi(\mathbf{x}) = \left\langle \frac{1}{L_k} \nabla f(\mathbf{x}^k) - \nabla \omega(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} \right\rangle + \frac{1}{L_k} g(\mathbf{x})$ 直接得到. 下面将详细分析两种步长规则. 我们使用如下符号

$$V_L(\bar{\mathbf{x}}) \equiv \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \left\{ \left\langle \frac{1}{L} \nabla f(\bar{\mathbf{x}}) - \nabla \omega(\bar{\mathbf{x}}), \mathbf{x} \right\rangle + \frac{1}{L} g(\mathbf{x}) + \omega(\mathbf{x}) \right\}.$$

- **常数** 对于任意 k , 取 $L_k = \bar{L} = L_f$.
- **回溯过程 B5** 该过程需要两个参数 (s, η) , 其中 $s > 0$ 且 $\eta > 1$. 定义 $L_{-1} = s$. 在第 k 次迭代 ($k \geq 0$) 时, L_k 的选择方法如下: 首先, 将 L_k 设为与 L_{k-1} 相等, 然后, 当

$$f(V_{L_k}(\mathbf{x}^k)) > f(\mathbf{x}^k) + \left\langle \nabla f(\mathbf{x}^k), V_{L_k}(\mathbf{x}^k) - \mathbf{x}^k \right\rangle + \frac{L_k}{2} \|V_{L_k}(\mathbf{x}^k) - \mathbf{x}^k\|^2$$

时, 定义 $L_k := \eta L_{k-1}$. 换言之, 步长的选取方式为 $L_k = L_{k-1} \eta^{i_k}$, 其中 i_k 是满足如下条件的最小非负整数

$$\begin{aligned} f(V_{L_{k-1} \eta^{i_k}}(\mathbf{x}^k)) &\leq f(\mathbf{x}^k) + \left\langle \nabla f(\mathbf{x}^k), V_{L_{k-1} \eta^{i_k}}(\mathbf{x}^k) - \mathbf{x}^k \right\rangle \\ &\quad + \frac{L_{k-1} \eta^{i_k}}{2} \|V_{L_{k-1} \eta^{i_k}}(\mathbf{x}^k) - \mathbf{x}^k\|^2. \end{aligned}$$

注 10.79. 在两种步长规则中, 以下不等式都成立:

$$f(\mathbf{x}^{k+1}) \leq f(\mathbf{x}^k) + \left\langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k \right\rangle + \frac{L_k}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2.$$

注 10.80. 通过与注 10.19 相同的论证, 我们得到 $L_k \leq \alpha L_f$, 其中, 对于常数步长情形有 $\alpha = 1$ 成立, 对于回溯过程 B5 有 $\alpha = \max\{\eta, \frac{s}{L_f}\}$ 成立.

下面陈述并证明收敛速率结果。

定理 10.81. (非欧几里得近端梯度法的 $O(1/k)$ 收敛速率) 假设 10.77 和 10.78 成立。令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为通过非欧近端梯度法求解问题 (10.92) 时生成的序列, 其中步长规则为: 对于任意 $k \geq 0$, 采用常数步长 $L_k \equiv L_f$ 或是采用回溯过程 B5。则

- (a) 序列 $\{F(\mathbf{x}^k)\}_{k \geq 0}$ 是非增的;
 (b) 对于任意 $k \geq 1$ 和 $\mathbf{x}^* \in X^*$,

$$F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}} \leq \frac{\alpha L_f B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0)}{k},$$

其中 $\alpha = 1$ 为恒定步长设置, 而若采用回溯规则, $\alpha = \max\{\eta, \frac{s}{L_f}\}$ 。

证明: (a) 我们使用符号 $m(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv f(\mathbf{y}) + \langle \nabla f(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle$ 。对于任意 $n \geq 0$, 两种步长规则下都有 (见注解 10.79),

$$f(\mathbf{x}^{n+1}) \leq m(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) + \frac{L_n}{2} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n\|^2.$$

因此,

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}^{n+1}) &= f(\mathbf{x}^{n+1}) + g(\mathbf{x}^{n+1}) \\ &\leq m(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}^{n+1}) + \frac{L_n}{2} \|\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n\|^2 \\ &\leq m(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}^{n+1}) + L_n B_\omega(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n), \end{aligned} \quad (10.94)$$

在最后一个不等式中使用了 $\omega + \delta_{\text{dom}(g)}$ 的 1-强凸性。注意

$$\mathbf{x}^{n+1} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{m(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}) + L_n B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n)\}. \quad (10.95)$$

因此, 特别地,

$$\begin{aligned} m(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}^{n+1}) + L_n B_\omega(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) &\leq m(\mathbf{x}^n, \mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}^n) + L_n B_\omega(\mathbf{x}^n, \mathbf{x}^n) \\ &= f(\mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}^n) \\ &= F(\mathbf{x}^n), \end{aligned}$$

结合 (10.94) 可知 $F(\mathbf{x}^{n+1}) \leq F(\mathbf{x}^n)$, 即函数值序列 $\{F(\mathbf{x}^n)\}_{n \geq 0}$ 是非增的。

(b) 设 $k \geq 1$, 且 $\mathbf{x}^* \in X^*$ 。利用式 (10.95) 并将 $\psi(\mathbf{x}) = \frac{m(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x})}{L_n}$, $\mathbf{b} = \mathbf{x}^n$, $\mathbf{a} = \mathbf{x}^{n+1}$ 代入非欧第二近端定理 (定理 9.12), 可知对于任意 $\mathbf{x} \in \text{dom}(g)$ 有,

$$\langle \nabla \omega(\mathbf{x}^n) - \nabla \omega(\mathbf{x}^{n+1}), \mathbf{x} - \mathbf{x}^{n+1} \rangle \leq \frac{m(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) - m(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}) - g(\mathbf{x}^{n+1})}{L_n},$$

结合三点引理 (引理 9.11), 令 $\mathbf{a} = \mathbf{x}^{n+1}$, $\mathbf{b} = \mathbf{x}^n$, $\mathbf{c} = \mathbf{x}$, 可得不等式

$$B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{n+1}) + B_\omega(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) \leq \frac{m(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) - m(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}) - g(\mathbf{x}^{n+1})}{L_n}.$$

重新排列各项后，我们得到

$$m(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}^{n+1}) + L_n B_\omega(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) \leq m(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}) + L_n B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) - L_n B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{n+1}),$$

与式 (10.94) 结合后，可得到不等式

$$F(\mathbf{x}^{n+1}) \leq m(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) + g(\mathbf{x}) + L_n B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) - L_n B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{n+1}).$$

由于 f 是凸函数， $m(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) \leq f(\mathbf{x})$ ，因此有

$$F(\mathbf{x}^{n+1}) - F(\mathbf{x}) \leq L_n B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) - L_n B_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{n+1}).$$

将 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ 代入并除以 L_n ，我们得到

$$\frac{F(\mathbf{x}^{n+1}) - F(\mathbf{x}^*)}{L_n} \leq B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{n+1}).$$

利用有界条件 $L_n \leq \alpha L_f$ (参考注解 10.80)，

$$\frac{F(\mathbf{x}^{n+1}) - F(\mathbf{x}^*)}{\alpha L_f} \leq B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^n) - B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{n+1}),$$

因此

$$F(\mathbf{x}^{n+1}) - F_{\text{opt}} \leq \alpha L_f B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^n) - \alpha L_f B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{n+1}).$$

将上述不等式对 $n = 0, 1, \dots, k-1$ 求和，我们得到

$$\sum_{n=0}^{k-1} (F(\mathbf{x}^{n+1}) - F_{\text{opt}}) \leq \alpha L_f B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0) - \alpha L_f B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^k) \leq \alpha L_f B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0).$$

根据函数值序列的单调性，我们得出结论：

$$k(F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}}) \leq \alpha L_f B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0),$$

从而得到结果

$$F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}} \leq \frac{\alpha L_f B_\omega(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^0)}{k}.$$

□

第 11 章 分块近端梯度法

底层空间：本章中所有底层空间都是欧氏空间 (详见第 11.2 节)。

11.1 分解方法

本书讨论的诸多方法都属于分解方法，通俗来说，这类方法在每一步骤中仅利用问题数据的某一部分，或求解低维问题。其中有一类方法为函数分解法，其特点是：问题数据由多个函数构成，每次迭代仅处理其中一些函数 (可能仅处理单个函数)。曾在该模型下研究函数分解方法的相关例子

$$\min_{\mathbf{x}} \left\{ \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in C \right\}.$$

在例 8.36 中展示了随机投影次梯度方法的实现，形式为

$$\mathbf{x}^{k+1} = P_C(\mathbf{x}^k - t_k f'_{i_k}(\mathbf{x}^k)),$$

其中，索引 i_k 从均匀分布中随机选取。该方法的确定性版本是增量投影次梯度法，该方法在第 8.4 节已有研究，其 i_k 通过循环顺序选取。两种方法在每一步中仅利用构成问题数据的 m 个函数中的一个。近端梯度法实际上是函数分解法的另一个典型例子，其相关模型为 (详见第 10 章)

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x}).$$

近端梯度法的一般步骤为以下形式

$$\mathbf{x}^{k+1} = \text{prox}_{t_k g}(\mathbf{x}^k - t_k \nabla f(\mathbf{x}^k)).$$

在上述更新公式中，函数 f 和 g 是分开处理的。首先对 f 求梯度步，然后计算 g 的近端算子。

另一类分解方法为变量分解法，每次迭代仅调整部分决策变量，其余变量保持不变。例 10.73 是这一方法的一个例子，考虑 \mathbb{R}^n 空间上可微函数的最小化问题。例 10.73 中所述方法 (l_1 -范数下的非欧梯度法)，每次迭代通过特定贪心规则逐个选取变量，在保持其他变量不变的前提下，针对选定变量执行梯度优化步骤。

本章将探讨变量分解的其他方法，这些方法在每次迭代过程中选取一个变量块，并针对该分块执行近端梯度步骤。

11.2 模型和假设

本章将讨论在 g 具有分块可分结构的情况下, 求解复合模型 $f + g$ 的方法。更具体地说, 本章的主要模型是

$$\min_{\mathbf{x}_1 \in \mathbb{E}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{E}_2, \dots, \mathbf{x}_p \in \mathbb{E}_p} \left\{ F(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p) = f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p) + \sum_{j=1}^p g_j(\mathbf{x}_j) \right\}, \quad (11.1)$$

其中, $\mathbb{E}_1, \mathbb{E}_2, \dots, \mathbb{E}_p$ 是欧几里得空间。我们将乘积空间记作 $\mathbb{E} = \mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2 \times \dots \times \mathbb{E}_p$, 根据惯例 (见第 1.9 节), 乘积空间本身也是欧几里得空间, 并赋予其范数

$$\|(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_p)\|_{\mathbb{E}} = \sqrt{\sum_{i=1}^p \|\mathbf{u}_i\|_{\mathbb{E}_i}^2}.$$

在大多数情况下, 我们将省略表示底层向量空间的范数下标 (其具体内容可从上下文中判断)。函数 $g: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 定义为

$$g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p) \equiv \sum_{i=1}^p g_i(\mathbf{x}_i).$$

第 i 个分块 ($i \in \{1, 2, \dots, p\}$) 的梯度用 $\nabla_i f$ 表示, 只要函数可微, 就有

$$\nabla f(\mathbf{x}) = (\nabla_1 f(\mathbf{x}), \nabla_2 f(\mathbf{x}), \dots, \nabla_p f(\mathbf{x}))$$

成立。对于任意 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$, 定义 $\mathcal{U}_i: \mathbb{E}_i \rightarrow \mathbb{E}$ 为线性变换, 其定义为

$$\mathcal{U}_i(\mathbf{d}) = (\mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}, \underbrace{\mathbf{d}}_{i\text{th block}}, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}), \quad \mathbf{d} \in \mathbb{E}_i.$$

本章中, 我们还使用如下记号: 向量 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$ 可写为

$$\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p),$$

并且该关系式也可写成 $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_i)_{i=1}^p$ 。因此, 主模型 (11.1) 可以简单地写成

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{F(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})\}.$$

模型的基本假设总结如下。

假设 11.1.

- (A) 对于任意 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$, $g_i: \mathbb{E}_i \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是 **proper** 闭凸函数。
- (B) $f: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是 **proper** 且闭的, $\text{dom}(f)$ 是凸的; $\text{dom}(g) \subseteq \text{int}(\text{dom}(f))$,

且 f 在 $\text{int}(\text{dom}(f))$ 上可微。

(C) f 在 $\text{int}(\text{dom}(f))$ ($L_f > 0$) 上是 L_f -光滑的。

(D) 存在 $L_1, L_2, \dots, L_p > 0$ 使得对于任意的 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$ 有

$$\|\nabla_i f(\mathbf{x}) - \nabla_i f(\mathbf{x} + \mathcal{U}_i(\mathbf{d}))\| \leq L_i \|\mathbf{d}\| \quad (11.2)$$

对于所有 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$, $\mathbf{d} \in \mathbb{E}_i$ 和 $\mathbf{x} + \mathcal{U}_i(\mathbf{d}) \in \text{int}(\text{dom}(f))$ 成立。

(E) 问题 (11.1) 的最优解集非空, 记为 X^* , 问题的最优值记为 F_{opt} 。

注 11.2. (分块/全局 Lipschitz 常数) 常数 L_f 被称为“全局 Lipschitz 常数”, 而 L_1, L_2, \dots, L_p 为“分块 Lipschitz 常数”。显然, 我们可以对所有 i 选择 $L_i = L_f$ 成立, 根据 L_f 的定义, (11.2) 对于 $L_i = L_f$ 也成立。然而, 分块 Lipschitz 常数可能显著小于全局 Lipschitz 常数-这一事实可能对所推导算法的性能及其收敛速度产生严重影响。

11.3 工具箱

11.3.1 部分梯度映射

回忆在 10.3.2 节中定义的, 与函数 f, g 和常数 $L > 0$ 相关的梯度映射是一个从 $\text{int}(\text{dom}(f))$ 到 \mathbb{E} 的映射, 其定义为

$$G_L^{f,g}(x) = L \left(x - T_L^{f,g}(x) \right),$$

其中 $T_L^{f,g} : \text{int}(\text{dom}(f)) \rightarrow \mathbb{E}$ 是邻近梯度映射, 定义为

$$T_L^{f,g}(x) = \text{prox}_{\frac{1}{L}g} \left(x - \frac{1}{L} \nabla f(x) \right).$$

从现在开始, 我们将总是省略上标, 用 T_L 和 G_L 分别表示 $T_L^{f,g}$ 和 $G_L^{f,g}$ 。在块变量分解方法的背景下, 考虑部分邻近梯度映射和部分梯度映射的概念也是重要的。

定义 11.3 (部分邻近梯度映射). 若 f 和 g_1, g_2, \dots, g_p 满足假设 11.1 的性质 (A) 和 (B), $L > 0$ 且令 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$, 则第 i 个部分邻近梯度映射是算子 $T_L^i : \text{int}(\text{dom}(f)) \rightarrow \mathbb{E}_i$,

$$T_L^i(\mathbf{x}) = \text{prox}_{\frac{1}{L}g_i} \left(\mathbf{x}_i - \frac{1}{L} \nabla_i f(\mathbf{x}) \right).$$

定义 11.4 (部分梯度映射). 若 f 和 g_1, g_2, \dots, g_p 满足假设 11.1 的性质 (A) 和 (B), $L > 0$ 且令 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$, 则第 i 个部分的梯度映射是算子 $G_L^i : \text{int}(\text{dom}(f)) \rightarrow$

\mathbb{E}_i ,

$$G_L^i(\mathbf{x}) = L(\mathbf{x}_i - T_L^i(\mathbf{x})).$$

第 i 个部分邻近梯度映射和梯度映射依赖于 f 和 g_i , 但这种依赖关系在我们的记号中并未标明。如果对于某个 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$ 有 $g_i \equiv 0$, 则 $G_L^i(\mathbf{x}) = \nabla_i f(\mathbf{x})$; 也就是说, 在这种情况下, 部分梯度映射与映射 $\mathbf{x} \mapsto \nabla_i f(\mathbf{x})$ 一致。部分邻近梯度映射和梯度映射的一些基本性质总结在以下引理中。

$g_i = 0$ 时 $G_L^i(\mathbf{x}) = \nabla_i f(\mathbf{x})$: 当 $g_i \equiv 0$ 时, 代入邻近算子定义:

$$\begin{aligned} \text{prox}_{\frac{1}{L}g_i}(\mathbf{x}_i) &= \arg \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{E}_i} \left\{ \frac{1}{L}g_i(\mathbf{u}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{u} - \mathbf{x}_i\|^2 \right\} \\ &= \arg \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{E}_i} \left\{ 0 + \frac{1}{2}\|\mathbf{u} - \mathbf{x}_i\|^2 \right\} \\ &= \arg \min_{\mathbf{u} \in \mathbb{E}_i} \left\{ \frac{1}{2}\|\mathbf{u} - \mathbf{x}_i\|^2 \right\} \\ &= \mathbf{x}_i, \end{aligned}$$

故 $T_L^i(\mathbf{x}) = \text{prox}_{\frac{1}{L}g_i}(\mathbf{x}_i - \frac{1}{L}\nabla_i f(\mathbf{x})) = \mathbf{x}_i - \frac{1}{L}\nabla_i f(\mathbf{x})$, 因此, $G_L^i(\mathbf{x}) = L(\mathbf{x}_i - T_L^i(\mathbf{x})) = \nabla_i f(\mathbf{x})$.

引理 11.5. 若 f 和 g_1, g_2, \dots, g_p 满足假设 11.1 的性质 (A) 和 (B), $L > 0$ 且令 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$, 则对于任意 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$,

$$\begin{aligned} T_L(\mathbf{x}) &= (T_L^1(\mathbf{x}), T_L^2(\mathbf{x}), \dots, T_L^p(\mathbf{x})), \\ G_L(\mathbf{x}) &= (G_L^1(\mathbf{x}), G_L^2(\mathbf{x}), \dots, G_L^p(\mathbf{x})). \end{aligned} \quad (11.3)$$

证明: 根据定理 6.6, 对于任意 $\mathbf{y} \in \text{dom}(f)$, 有

$$\text{prox}_{\frac{1}{L}g}(\mathbf{y}) = (\text{prox}_{\frac{1}{L}g_i}(\mathbf{y}_i))_{i=1}^p.$$

因此, 对于任意 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$,

$$\begin{aligned} T_L(\mathbf{x}) &= \text{prox}_{\frac{1}{L}g} \left(\mathbf{x} - \frac{1}{L}\nabla f(\mathbf{x}) \right) \\ &= \left(\text{prox}_{\frac{1}{L}g_i} \left(\left[\mathbf{x} - \frac{1}{L}\nabla f(\mathbf{x}) \right]_i \right) \right)_{i=1}^p \\ &= \left(\text{prox}_{\frac{1}{L}g_i} \left(\mathbf{x}_i - \frac{1}{L}\nabla_i f(\mathbf{x}) \right) \right)_{i=1}^p \\ &= (T_L^i(\mathbf{x}))_{i=1}^p. \end{aligned}$$

第二个等式可由上式立即得出：

$$\begin{aligned} G_L(\mathbf{x}) &= L(\mathbf{x} - T_L(\mathbf{x})) \\ &= L\left(\left(\mathbf{x}_i\right)_{i=1}^p - \left(T_L^i(\mathbf{x})\right)_{i=1}^p\right) \\ &= \left(L\left(\mathbf{x}_i - T_L^i(\mathbf{x})\right)\right)_{i=1}^p \\ &= \left(G_L^i(\mathbf{x})\right)_{i=1}^p. \end{aligned}$$

综上，引理得证。 \square

若点 $\mathbf{x}^* \in \text{dom}(g)$ 且满足 $-\nabla f(\mathbf{x}^*) \in \partial g(\mathbf{x}^*)$ （参见定义 3.73），则称 \mathbf{x}^* 为问题 (11.1) 的稳定点。下述定理表明，问题 (11.1) 的稳定点条件可以分解为用部分梯度映射表示的 p 个条件。

定理 11.6. 若 f 和 g_1, g_2, \dots, g_p 满足假设 11.1 的性质 (A) 和 (B)。则

(a) $\mathbf{x}^* \in \text{dom}(g)$ 是问题 (11.1) 的稳定点当且仅当

$$-\nabla_i f(\mathbf{x}^*) \in \partial g_i(\mathbf{x}_i^*), \quad i = 1, 2, \dots, p; \quad (11.4)$$

(b) 对于任意 p 个正数 $M_1, M_2, \dots, M_p > 0$ ， $\mathbf{x}^* \in \text{dom}(g)$ 是问题 (11.1) 的稳定点当且仅当

$$G_{M_i}^i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, p.$$

证明：(a). 根据定义， $\mathbf{x}^* \in \text{dom}(g)$ 是问题 (11.1) 的稳定点当且仅当

$$-\nabla f(\mathbf{x}^*) \in \partial g(\mathbf{x}^*). \quad (11.5)$$

由 g 的块可分结构，容易证明

$$\partial g(\mathbf{x}^*) = \partial g_1(\mathbf{x}_1^*) \times \partial g_2(\mathbf{x}_2^*) \times \cdots \times \partial g_p(\mathbf{x}_p^*),$$

结合

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = (\nabla_1 f(\mathbf{x}^*), \nabla_2 f(\mathbf{x}^*), \dots, \nabla_p f(\mathbf{x}^*)),$$

这意味着关系式 (11.5) 等价于

$$-(\nabla_1 f(\mathbf{x}^*), \nabla_2 f(\mathbf{x}^*), \dots, \nabla_p f(\mathbf{x}^*)) \in \partial g_1(\mathbf{x}_1^*) \times \partial g_2(\mathbf{x}_2^*) \times \cdots \times \partial g_p(\mathbf{x}_p^*),$$

即等价于式 (11.4)。

(b). 由部分梯度映射的定义， $G_{M_i}^i(\mathbf{x}^*) = 0$ 当且仅当 $\mathbf{x}_i^* = \text{prox}_{\frac{1}{M_i} g_i}(\mathbf{x}_i^* - \frac{1}{M_i} \nabla_i f(\mathbf{x}^*))$ ，根据第二邻近定理（定理 6.39），这等价于

$$\left(\mathbf{x}_i^* - \frac{1}{M_i} \nabla_i f(\mathbf{x}^*)\right) - \mathbf{x}_i^* \in \frac{1}{M_i} \partial g_i(\mathbf{x}_i^*),$$

即等价于

$$-\nabla_i f(\mathbf{x}^*) \in \partial g_i(\mathbf{x}_i^*).$$

总结来说, 对所有 i 有 $G_{M_i}^i(\mathbf{x}^*) = 0$ 当且仅当对所有 i 有 $-\nabla_i f(\mathbf{x}^*) \in \partial g_i(\mathbf{x}_i^*)$, 根据 (a), 这等价于 \mathbf{x}^* 是问题 (11.1) 的稳定点。□

块可分函数的次微分分解证明: 设 $g: \mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2 \times \cdots \times \mathbb{E}_p \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个块可分函数, 即

$$g(\mathbf{x}) = g_1(\mathbf{x}_1) + g_2(\mathbf{x}_2) + \cdots + g_p(\mathbf{x}_p),$$

其中每个 $g_i: \mathbb{E}_i \rightarrow (-\infty, \infty]$ 都是 proper 闭凸函数。则对于任意 $\mathbf{x}^* \in \text{dom}(g)$, 有

$$\partial g(\mathbf{x}^*) = \partial g_1(\mathbf{x}_1^*) \times \partial g_2(\mathbf{x}_2^*) \times \cdots \times \partial g_p(\mathbf{x}_p^*).$$

证明: (1). 先证 $\partial g_1(\mathbf{x}_1^*) \times \cdots \times \partial g_p(\mathbf{x}_p^*) \subseteq \partial g(\mathbf{x}^*)$ 。

设 $\mathbf{v} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_p) \in \partial g_1(\mathbf{x}_1^*) \times \cdots \times \partial g_p(\mathbf{x}_p^*)$, 即 $\mathbf{v}_i \in \partial g_i(\mathbf{x}_i^*)$ 对每个 $i = 1, \dots, p$ 。由次微分的定义, 对于每个 i 和任意 $\mathbf{y}_i \in \mathbb{E}_i$, 有

$$g_i(\mathbf{y}_i) \geq g_i(\mathbf{x}_i^*) + \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{y}_i - \mathbf{x}_i^* \rangle.$$

对所有的 i 求和, 得到对于任意 $\mathbf{y} = (\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_p) \in \mathbb{E}$,

$$\sum_{i=1}^p g_i(\mathbf{y}_i) \geq \sum_{i=1}^p g_i(\mathbf{x}_i^*) + \sum_{i=1}^p \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{y}_i - \mathbf{x}_i^* \rangle,$$

即

$$g(\mathbf{y}) \geq g(\mathbf{x}^*) + \langle \mathbf{v}, \mathbf{y} - \mathbf{x}^* \rangle.$$

因此, $\mathbf{v} \in \partial g(\mathbf{x}^*)$ 。

(2). 下证 $\partial g(\mathbf{x}^*) \subseteq \partial g_1(\mathbf{x}_1^*) \times \cdots \times \partial g_p(\mathbf{x}_p^*)$ 。

设 $\mathbf{v} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_p) \in \partial g(\mathbf{x}^*)$ 。我们需要证明对每个 i , 有 $\mathbf{v}_i \in \partial g_i(\mathbf{x}_i^*)$ 。固定 $i \in \{1, \dots, p\}$, 考虑向量 $\mathbf{y} = (\mathbf{x}_1^*, \dots, \mathbf{x}_{i-1}^*, \mathbf{y}_i, \mathbf{x}_{i+1}^*, \dots, \mathbf{x}_p^*)$, 其中 $\mathbf{y}_i \in \mathbb{E}_i$ 是任意的。由于 $\mathbf{v} \in \partial g(\mathbf{x}^*)$, 由次微分的定义, 有

$$g(\mathbf{y}) \geq g(\mathbf{x}^*) + \langle \mathbf{v}, \mathbf{y} - \mathbf{x}^* \rangle,$$

代入 g 的块可分结构和 \mathbf{y} 的特殊形式:

$$\sum_{j \neq i} g_j(\mathbf{x}_j^*) + g_i(\mathbf{y}_i) \geq \sum_{j=1}^p g_j(\mathbf{x}_j^*) + \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{y}_i - \mathbf{x}_i^* \rangle,$$

化简得:

$$g_i(\mathbf{y}_i) \geq g_i(\mathbf{x}_i^*) + \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{y}_i - \mathbf{x}_i^* \rangle,$$

由于这对任意 $\mathbf{y}_i \in \mathbb{E}_i$ 都成立, 因此 $\mathbf{v}_i \in \partial g_i(\mathbf{x}_i^*)$ 。由 i 的任意性可得 $\mathbf{v} \in \partial g_1(\mathbf{x}_1^*) \times \cdots \times \partial g_p(\mathbf{x}_p^*)$ 。

综上, $\partial g(\mathbf{x}^*) = \partial g_1(\mathbf{x}_1^*) \times \partial g_2(\mathbf{x}_2^*) \times \cdots \times \partial g_p(\mathbf{x}_p^*)$, 结论得证。 \square

接下来的结果展示了部分梯度映射关于其参数的一些单调性质。该结果未附证明, 因为其证明几乎是定理 10.9 论证的逐字重复。

定理 11.7 (部分梯度映射的单调性). 若 f 和 g_1, g_2, \dots, g_p 满足假设 11.1 的性质 (A) 和 (B), 且令 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$ 。假设 $L_1 \geq L_2 > 0$ 。则对于任意 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$, 有

$$\|G_{L_1}^i(\mathbf{x})\| \geq \|G_{L_2}^i(\mathbf{x})\|$$

和

$$\frac{\|G_{L_1}^i(\mathbf{x})\|}{L_1} \leq \frac{\|G_{L_2}^i(\mathbf{x})\|}{L_2}.$$

11.3.2 块下降引理

块下降引理是下降引理 (引理 5.7) 的一个变体, 其证明几乎相同。

引理 11.8 (块下降引理). 设 $f: \mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2 \times \cdots \times \mathbb{E}_p \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是一个 proper 函数, 其有效域 $\text{dom}(f)$ 是凸的, 且 f 在 $\text{int}(\text{dom}(f))$ 上可微。令 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$ 。若存在 $L_i > 0$ 使得对于 $\mathbf{y} \in \text{int}(\text{dom}(f))$, $\mathbf{d} \in \mathbb{E}_i$ 和 $\mathbf{y} + \mathcal{U}_i(\mathbf{d}) \in \text{int}(\text{dom}(f))$, 有

$$\|\nabla_i f(\mathbf{y}) - \nabla_i f(\mathbf{y} + \mathcal{U}_i(\mathbf{d}))\| \leq L_i \|\mathbf{d}\|.$$

那么对于任意 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$ 和 $\mathbf{d} \in \mathbb{E}_i$, 若 $\mathbf{x} + \mathcal{U}_i(\mathbf{d}) \in \text{int}(\text{dom}(f))$, 则有

$$f(\mathbf{x} + \mathcal{U}_i(\mathbf{d})) \leq f(\mathbf{x}) + \langle \nabla_i f(\mathbf{x}), \mathbf{d} \rangle + \frac{L_i}{2} \|\mathbf{d}\|^2.$$

证明: 设 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$ 和 $\mathbf{d} \in \mathbb{E}_i$ 满足 $\mathbf{x} + \mathcal{U}_i(\mathbf{d}) \in \text{int}(\text{dom}(f))$ 。记 $\mathbf{x}^{(t)} = \mathbf{x} + \mathcal{U}_i(t\mathbf{d})$ 并定义 $g(t) = f(\mathbf{x}^{(t)})$ 。由微积分基本定理有

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}^{(1)}) - f(\mathbf{x}) &= g(1) - g(0) = \int_0^1 g'(t) dt \\ &= \int_0^1 \langle \nabla f(\mathbf{x}^{(t)}), \mathcal{U}_i(\mathbf{d}) \rangle dt = \int_0^1 \langle \nabla_i f(\mathbf{x}^{(t)}), \mathbf{d} \rangle dt \\ &= \langle \nabla_i f(\mathbf{x}), \mathbf{d} \rangle + \int_0^1 \langle \nabla_i f(\mathbf{x}^{(t)}) - \nabla_i f(\mathbf{x}), \mathbf{d} \rangle dt, \end{aligned}$$

因此,

$$|f(\mathbf{x}^{(1)}) - f(\mathbf{x}) - \langle \nabla_i f(\mathbf{x}), \mathbf{d} \rangle| = \left| \int_0^1 \langle \nabla_i f(\mathbf{x}^{(t)}) - \nabla_i f(\mathbf{x}), \mathbf{d} \rangle dt \right|$$

$$\begin{aligned}
&\leq \int_0^1 |\langle \nabla_i f(\mathbf{x}^{(t)}) - \nabla_i f(\mathbf{x}), \mathbf{d} \rangle| dt \\
&\leq \int_0^1 \|\nabla_i f(\mathbf{x}^{(t)}) - \nabla_i f(\mathbf{x})\| \cdot \|\mathbf{d}\| dt \\
&\leq \int_0^1 t L_i \|\mathbf{d}\|^2 dt \\
&= \frac{L_i}{2} \|\mathbf{d}\|^2,
\end{aligned}$$

故结论得证。 □

11.3.3 充分下降

本章讨论的所有方法，其核心操作均是针对给定变量块执行一次邻近梯度步。具体来说，对于给定的 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$ 和 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$ ，下一个更新向量 \mathbf{x}^+ 将具有形式

$$\mathbf{x}_j^+ = \begin{cases} \mathbf{x}_j, & j \neq i, \\ T_{L_i}^i(\mathbf{x}), & j = i. \end{cases}$$

上述更新公式可以紧凑地写为

$$\mathbf{x}^+ = \mathbf{x} + \mathcal{U}_i(T_{L_i}^i(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i).$$

我们现在将证明充分下降引理（引理 10.4）的一个变体，其中仅假设函数梯度关于某个块的 Lipschitz 连续性。

引理 11.9 (块充分下降引理). 若 f 和 g_1, g_2, \dots, g_p 满足假设 11.1 的性质 (A) 和 (B)，且令 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$ 。若存在 $L_i > 0$ 使得对于任意 $\mathbf{y} \in \text{int}(\text{dom}(f))$ ， $\mathbf{d} \in \mathbb{E}_i$ 且 $\mathbf{y} + \mathcal{U}_i(\mathbf{d}) \in \text{int}(\text{dom}(f))$ ，有

$$\|\nabla_i f(\mathbf{y}) - \nabla_i f(\mathbf{y} + \mathcal{U}_i(\mathbf{d}))\| \leq L_i \|\mathbf{d}\|,$$

则对于任意 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$ ，有

$$F(\mathbf{x}) - F(\mathbf{x} + \mathcal{U}_i(T_{L_i}^i(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i)) \geq \frac{1}{2L_i} \|G_{L_i}^i(\mathbf{x})\|^2. \quad (11.6)$$

证明：为简单起见，我们使用简写记号 $\mathbf{x}^+ = \mathbf{x} + \mathcal{U}_i(T_{L_i}^i(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i)$ 。由块下降引理（引理 11.8），有

$$f(\mathbf{x}^+) \leq f(\mathbf{x}) + \langle \nabla_i f(\mathbf{x}), T_{L_i}^i(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i \rangle + \frac{L_i}{2} \|T_{L_i}^i(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i\|^2. \quad (11.7)$$

根据第二邻近定理（定理 6.39），由于 $T_{L_i}^i(\mathbf{x}) = \text{prox}_{\frac{1}{L_i}g_i}(\mathbf{x}_i - \frac{1}{L_i}\nabla_i f(\mathbf{x}))$ ，有

$$\left\langle \mathbf{x}_i - \frac{1}{L_i}\nabla_i f(\mathbf{x}) - T_{L_i}^i(\mathbf{x}), \mathbf{x}_i - T_{L_i}^i(\mathbf{x}) \right\rangle \leq \frac{1}{L_i}g_i(\mathbf{x}_i) - \frac{1}{L_i}g_i(T_{L_i}^i(\mathbf{x})),$$

因此

$$\langle \nabla_i f(\mathbf{x}), T_{L_i}^i(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i \rangle \leq -L_i \|T_{L_i}^i(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i\|^2 + g_i(\mathbf{x}_i) - g_i(\mathbf{x}_i^+),$$

将其与式 (11.7) 结合，可得

$$f(\mathbf{x}^+) + g_i(\mathbf{x}_i^+) \leq f(\mathbf{x}) + g_i(\mathbf{x}_i) - \frac{L_i}{2} \|T_{L_i}^i(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i\|^2.$$

最后，将恒等式 $\sum_{j \neq i} g_j(\mathbf{x}_j^+) = \sum_{j \neq i} g_j(\mathbf{x}_j)$ 加到上述不等式两边，可得

$$F(\mathbf{x}^+) \leq F(\mathbf{x}) - \frac{L_i}{2} \|T_{L_i}^i(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i\|^2,$$

根据部分梯度映射的定义，这等价于式 (11.6)。 \square

注 11.10. 在引理 11.9 的设定下，如果我们记 $\mathbf{x}^+ = \mathbf{x} + \mathcal{U}_i(T_{L_i}^i(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i)$ ，则式 (11.6) 可以写成以下形式：

$$F(\mathbf{x}) - F(\mathbf{x}^+) \geq \frac{L_i}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^+\|^2.$$

11.4 循环块邻近梯度法

在循环块邻近梯度法（CBPG）中，我们以循环方式依次选取变量块，并对所选块执行一次邻近梯度步。第 k 次迭代点记为 $\mathbf{x}^k = (\mathbf{x}_1^k, \mathbf{x}_2^k, \dots, \mathbf{x}_p^k)$ 。CBPG 方法的每次迭代包含 p 个“子迭代”，这些子迭代的中间结果用以下辅助子序列表示：

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{k,0} &= \mathbf{x}^k = (\mathbf{x}_1^k, \mathbf{x}_2^k, \dots, \mathbf{x}_p^k), \\ \mathbf{x}^{k,1} &= (\mathbf{x}_1^{k+1}, \mathbf{x}_2^k, \dots, \mathbf{x}_p^k), \\ \mathbf{x}^{k,2} &= (\mathbf{x}_1^{k+1}, \mathbf{x}_2^{k+1}, \mathbf{x}_3^k, \dots, \mathbf{x}_p^k), \\ &\vdots \\ \mathbf{x}^{k,p} &= \mathbf{x}^{k+1} = (\mathbf{x}_1^{k+1}, \mathbf{x}_2^{k+1}, \dots, \mathbf{x}_p^{k+1}). \end{aligned}$$

我们还可以为第 i 个辅助序列的第 k 个元素写出如下公式：

$$\mathbf{x}^{k,i} = \sum_{j=1}^i \mathcal{U}_j(\mathbf{x}_j^{k+1}) + \sum_{j=i+1}^p \mathcal{U}_j(\mathbf{x}_j^k). \quad (11.8)$$

现在我们可以正式介绍该方法。

循环块近端梯度 (CBPG) 方法

初始化: 选取 $\mathbf{x}^0 = (\mathbf{x}_1^0, \mathbf{x}_2^0, \dots, \mathbf{x}_p^0) \in \text{int}(\text{dom}(f))$ 。

一般步骤: 对于 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

- 令 $\mathbf{x}^{k,0} = \mathbf{x}^k$;
- 对于 $i = 1, 2, \dots, p$, 计算

$$\mathbf{x}^{k,i} = \mathbf{x}^{k,i-1} + \mathcal{U}_i(T_{L_i}^i(\mathbf{x}^{k,i-1}) - \mathbf{x}_i^{k,i-1});$$

- 令 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^{k,p}$ 。

11.4.1 非凸情形下循环分块近端梯度法的收敛性分析

循环分块近端梯度法 (CBPG) 的收敛性分析依赖于下述技术性引理, 该引理是引理 11.9 充分下降性质的直接推论。

引理 11.11 (循环分块近端梯度法的充分下降性质——版本一). 假设假设 11.1 成立, 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是循环分块近端梯度法求解问题 (11.1) 时生成的序列, 其辅助序列由式 (11.8) 定义, 则:

(a) 对所有 $k \geq 0$ 及 $j \in \{0, 1, \dots, p-1\}$, 成立

$$F(\mathbf{x}^{k,j}) - F(\mathbf{x}^{k,j+1}) \geq \frac{1}{2L_{j+1}} \left\| G_{L_{j+1}}^{j+1}(\mathbf{x}^{k,j}) \right\|^2, \quad (11.9)$$

或等价地,

$$F(\mathbf{x}^{k,j}) - F(\mathbf{x}^{k,j+1}) \geq \frac{L_{j+1}}{2} \left\| \mathbf{x}^{k,j} - \mathbf{x}^{k,j+1} \right\|^2; \quad (11.10)$$

(b) 对所有 $k \geq 0$,

$$F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq \frac{L_{\min}}{2} \left\| \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1} \right\|^2, \quad (11.11)$$

其中 $L_{\min} = \min_{i=1,2,\dots,p} L_i$.

证明: (a) 令 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{k,j}$, 并利用 $\left\| T_{L_{j+1}}^{j+1}(\mathbf{x}^{k,j}) - \mathbf{x}_{j+1}^k \right\|^2 = \frac{1}{L_{j+1}^2} \left\| G_{L_{j+1}}^{j+1}(\mathbf{x}^{k,j}) \right\|^2$, 代入引理 11.9 即可得到不等式 (11.9).

(b) 对 $j = 0, 1, \dots, p-1$ 求和不等式 (11.10), 可得:

$$\begin{aligned}
 F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) &= \sum_{j=0}^{p-1} (F(\mathbf{x}^{k,j}) - F(\mathbf{x}^{k,j+1})) \\
 &\geq \sum_{j=0}^{p-1} \frac{L_{j+1}}{2} \|\mathbf{x}^{k,j} - \mathbf{x}^{k,j+1}\|^2 \\
 &= \sum_{j=0}^{p-1} \frac{L_{j+1}}{2} \|\mathbf{x}_{j+1}^k - \mathbf{x}_{j+1}^{k+1}\|^2 \\
 &\geq \frac{L_{\min}}{2} \sum_{j=0}^{p-1} \|\mathbf{x}_{j+1}^k - \mathbf{x}_{j+1}^{k+1}\|^2 \\
 &= \frac{L_{\min}}{2} \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1}\|^2.
 \end{aligned}$$

证毕. □

上述引理的直接推论是循环分块近端梯度法生成序列的函数值单调性.

推论 11.12 (循环分块近端梯度法生成序列的单调性). 在引理 11.11 的条件下, 对任意 $k \geq 0$, 有 $F(\mathbf{x}^{k+1}) \leq F(\mathbf{x}^k)$, 且等号成立当且仅当 $\mathbf{x}^k = \mathbf{x}^{k+1}$.

接下来, 我们证明循环分块近端梯度法关于 (非偏) 梯度映射的充分下降性质.

引理 11.13 (循环分块近端梯度法的充分下降性质——版本二). 假设假设 11.1 成立, 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是循环分块近端梯度法求解问题 (11.1) 时生成的序列, 则对任意 $k \geq 0$,

$$F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq \frac{C}{p} \|G_{L_{\min}}(\mathbf{x}^k)\|^2, \quad (11.12)$$

其中

$$C = \frac{L_{\min}}{2(L_f + 2L_{\max} + \sqrt{L_{\min}L_{\max}})^2} \quad (11.13)$$

并且

$$L_{\min} = \min_{i=1,2,\dots,p} L_i, \quad L_{\max} = \max_{i=1,2,\dots,p} L_i.$$

证明: 设 $i \in \{0, 1, \dots, p-1\}$. 由式 (11.9) 可知:

$$F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq F(\mathbf{x}^{k,i}) - F(\mathbf{x}^{k,i+1}) \geq \frac{1}{2L_{i+1}} \left\| G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^{k,i}) \right\|^2. \quad (11.14)$$

我们可以如下估计 $\|G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^k)\|$:

$$\begin{aligned} \|G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^k)\| &\leq \|G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^k) - G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^{k,i})\| + \|G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^{k,i})\| && \text{[三角不等式]} \\ &\leq \|G_{L_{i+1}}(\mathbf{x}^k) - G_{L_{i+1}}(\mathbf{x}^{k,i})\| + \|G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^{k,i})\| && \text{[(11.3) 式]} \\ &\leq (2L_{i+1} + L_f) \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k,i}\| + \|G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^{k,i})\| && \text{[引理 10.10(a)]} \\ &\leq (2L_{i+1} + L_f) \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1}\| + \|G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^{k,i})\|, \end{aligned}$$

其中最后一个不等式源于以下论证:

$$\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k,i}\| = \sqrt{\sum_{j=1}^i \|\mathbf{x}_j^k - \mathbf{x}_j^{k+1}\|^2} \leq \sqrt{\sum_{j=1}^p \|\mathbf{x}_j^k - \mathbf{x}_j^{k+1}\|^2} = \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1}\|.$$

利用不等式 (11.11) 和 (11.14), 可继续界估计 $\|G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^k)\|$:

$$\begin{aligned} \|G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^k)\| &\leq (2L_{i+1} + L_f) \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1}\| + \|G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^{k,i})\| \\ &\leq \left[\frac{\sqrt{2}(2L_{i+1} + L_f)}{\sqrt{L_{\min}}} + \sqrt{2L_{i+1}} \right] \sqrt{F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1})} \\ &\leq \sqrt{\frac{2}{L_{\min}}} (L_f + 2L_{\max} + \sqrt{L_{\min}L_{\max}}) \sqrt{F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1})}. \end{aligned}$$

由部分梯度映射的单调性 (定理 11.7), 可得 $\|G_{L_{\min}}^{i+1}(\mathbf{x}^k)\| \leq \|G_{L_{i+1}}^{i+1}(\mathbf{x}^k)\|$, 因此对任意 $i \in \{0, 1, \dots, p-1\}$, 有

$$F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq C \|G_{L_{\min}}^{i+1}(\mathbf{x}^k)\|^2,$$

其中 C 由式 (11.13) 给出. 由此我们可推出:

$$\|G_{L_{\min}}(\mathbf{x}^k)\|^2 = \sum_{i=0}^{p-1} \|G_{L_{\min}}^{i+1}(\mathbf{x}^k)\|^2 \leq \sum_{i=0}^{p-1} \frac{F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1})}{C} = \frac{p}{C} (F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1})),$$

这与式 (11.12) 等价. \square

借助引理 11.13, 可轻松证明循环分块近端梯度法的一些标准收敛性质.

定理 11.14 (循环分块近端梯度法的收敛性——非凸情形). 假设假设 11.1 成立, 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是循环分块近端梯度法求解问题 (11.1) 时生成的序列. 记 $L_{\min} = \min_{i=1,2,\dots,p} L_i$, $L_{\max} = \max_{i=1,2,\dots,p} L_i$, C 为式 (11.13) 定义的常数, 则:

- $\lim_{k \rightarrow \infty} G_{L_{\min}}(\mathbf{x}^k) = 0$;
- $\min_{n=0,1,\dots,k} \|G_{L_{\min}}(\mathbf{x}^n)\|^2 \leq \frac{p(F(\mathbf{x}^0) - F_{\text{opt}})}{C(k+1)}$;
- 序列的所有极限点都是问题 (11.1) 的平稳点.

证明: (a) 由于序列 $\{F(\mathbf{x}^k)\}_{k \geq 0}$ 是非增的 (推论 11.12) 且下方有界 (假设 11.1(E)), 故其收敛. 因此, 特别地, $F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \rightarrow 0$ (当 $k \rightarrow \infty$ 时), 结合式 (11.12) 可得 $\|G_{L_{\min}}(\mathbf{x}^k)\| \rightarrow 0$ (当 $k \rightarrow \infty$ 时).

(b) 由引理 11.13, 对任意 $n \geq 0$,

$$F(\mathbf{x}^n) - F(\mathbf{x}^{n+1}) \geq \frac{C}{p} \|G_{L_{\min}}(\mathbf{x}^n)\|^2. \quad (11.15)$$

对 $n = 0, 1, \dots, k$ 求和上式, 可得:

$$F(\mathbf{x}^0) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq \frac{C}{p} \sum_{n=0}^k \|G_{L_{\min}}(\mathbf{x}^n)\|^2 \geq \frac{C(k+1)}{p} \min_{n=0,1,\dots,k} \|G_{L_{\min}}(\mathbf{x}^n)\|^2.$$

利用 $F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq F_{\text{opt}}$, 即可得证.

(c) 设 $\bar{\mathbf{x}}$ 是 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 的一个极限点, 则存在子序列 $\{\mathbf{x}^{k_j}\}_{j \geq 0}$ 收敛到 $\bar{\mathbf{x}}$. 对任意 $j \geq 0$,

$$\begin{aligned} \|G_{L_{\min}}(\bar{\mathbf{x}})\| &\leq \|G_{L_{\min}}(\mathbf{x}^{k_j}) - G_{L_{\min}}(\bar{\mathbf{x}})\| + \|G_{L_{\min}}(\mathbf{x}^{k_j})\| \\ &\leq (2L_{\min} + L_f) \|\mathbf{x}^{k_j} - \bar{\mathbf{x}}\| + \|G_{L_{\min}}(\mathbf{x}^{k_j})\|, \end{aligned} \quad (11.16)$$

其中最后一个不等式用到了引理 10.10(a). 由于当 $j \rightarrow \infty$ 时, 上式右端趋于 0, 故 $G_{L_{\min}}(\bar{\mathbf{x}}) = 0$, 由定理 10.7(b) 可知 $\bar{\mathbf{x}}$ 是问题 (11.1) 的平稳点. \square

11.4.2 凸情形下循环分块近端梯度法的收敛性分析

现在我们考虑 f 为凸函数且 F 的水平集满足某种有界性时, 循环分块近端梯度法的函数值收敛速率.

假设 11.15.

- (A) f 是凸函数;
- (B) 对任意 $\alpha > 0$, 存在 $R_\alpha > 0$, 使得

$$\max_{\mathbf{x}, \mathbf{x}^* \in \mathbb{E}} \{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| : F(\mathbf{x}) \leq \alpha, \mathbf{x}^* \in \mathbf{X}^*\} \leq R_\alpha$$

凸情形下的分析基于以下关键引理, 该引理描述了函数值序列的递归不等式关系.

引理 11.16. 假设假设 11.1 和假设 11.15 成立, 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是循环分块近端梯度法求解问题 (11.1) 时生成的序列, 则对任意 $k \geq 0$,

$$F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq \frac{L_{\min}}{2p(L_f + L_{\max})^2 R^2} (F(\mathbf{x}^{k+1}) - F_{\text{opt}})^2,$$

其中 $R = R_{F(\mathbf{x}^0)}$, $L_{\max} = \max_{j=1,2,\dots,p} L_j$, $L_{\min} = \min_{j=1,2,\dots,p} L_j$.

证明： 设 $\mathbf{x}^* \in \mathbf{X}^*$. 由循环分块近端梯度法的定义, 对任意 $k \geq 0$ 和 $j \in \{1, 2, \dots, p\}$,

$$\mathbf{x}_j^{k,j} = \text{prox}_{\frac{1}{L_j}g_j} \left(\mathbf{x}_j^{k,j-1} - \frac{1}{L_j} \nabla_j f(\mathbf{x}^{k,j-1}) \right).$$

因此, 调用第二邻近定理 (定理 6.39), 对任意 $\mathbf{y} \in \mathbb{E}_j$,

$$g_j(\mathbf{y}) \geq g_j(\mathbf{x}_j^{k,j}) + L_j \left\langle \mathbf{x}_j^{k,j-1} - \frac{1}{L_j} \nabla_j f(\mathbf{x}^{k,j-1}) - \mathbf{x}_j^{k,j}, \mathbf{y} - \mathbf{x}_j^{k,j} \right\rangle.$$

由式 (11.8) 定义的辅助序列可知, $\mathbf{x}_j^{k,j-1} = \mathbf{x}_j^k$, $\mathbf{x}_j^{k,j} = \mathbf{x}_j^{k+1}$, 因此上式可改写为:

$$g_j(\mathbf{y}) \geq g_j(\mathbf{x}_j^{k+1}) + L_j \left\langle \mathbf{x}_j^k - \frac{1}{L_j} \nabla_j f(\mathbf{x}^{k,j-1}) - \mathbf{x}_j^{k+1}, \mathbf{y} - \mathbf{x}_j^{k+1} \right\rangle.$$

特别地, 若令 $\mathbf{y} = \mathbf{x}_j^*$, 则:

$$g_j(\mathbf{x}_j^*) \geq g_j(\mathbf{x}_j^{k+1}) + L_j \left\langle \mathbf{x}_j^k - \frac{1}{L_j} \nabla_j f(\mathbf{x}^{k,j-1}) - \mathbf{x}_j^{k+1}, \mathbf{x}_j^* - \mathbf{x}_j^{k+1} \right\rangle.$$

对 $j = 1, 2, \dots, p$ 求和上式, 可得:

$$g(\mathbf{x}^*) \geq g(\mathbf{x}^{k+1}) + \sum_{j=1}^p L_j \left\langle \mathbf{x}_j^k - \frac{1}{L_j} \nabla_j f(\mathbf{x}^{k,j-1}) - \mathbf{x}_j^{k+1}, \mathbf{x}_j^* - \mathbf{x}_j^{k+1} \right\rangle. \quad (11.17)$$

利用 f 的凸性, 我们可以写出:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}^{k+1}) - F(\mathbf{x}^*) &= f(\mathbf{x}^{k+1}) - f(\mathbf{x}^*) + g(\mathbf{x}^{k+1}) - g(\mathbf{x}^*) \\ &\leq \langle \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}), \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^* \rangle + g(\mathbf{x}^{k+1}) - g(\mathbf{x}^*) \\ &= \sum_{j=1}^p \langle \nabla_j f(\mathbf{x}^{k+1}), \mathbf{x}_j^{k+1} - \mathbf{x}_j^* \rangle + g(\mathbf{x}^{k+1}) - g(\mathbf{x}^*), \end{aligned}$$

结合式 (11.17), 可得:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}^{k+1}) - F(\mathbf{x}^*) &\leq \sum_{j=1}^p \langle \nabla_j f(\mathbf{x}^{k+1}), \mathbf{x}_j^{k+1} - \mathbf{x}_j^* \rangle \\ &\quad + \sum_{j=1}^p L_j \left\langle \mathbf{x}_j^k - \frac{1}{L_j} \nabla_j f(\mathbf{x}^{k,j-1}) - \mathbf{x}_j^{k+1}, \mathbf{x}_j^{k+1} - \mathbf{x}_j^* \right\rangle \\ &= \sum_{j=1}^p \langle \nabla_j f(\mathbf{x}^{k+1}) - \nabla_j f(\mathbf{x}^{k,j-1}) + L_j(\mathbf{x}_j^k - \mathbf{x}_j^{k+1}), \mathbf{x}_j^{k+1} - \mathbf{x}_j^* \rangle. \end{aligned}$$

利用柯西-施瓦茨不等式和三角不等式, 我们可以推出:

$$\begin{aligned}
& F(\mathbf{x}^{k+1}) - F(\mathbf{x}^*) \\
& \leq \sum_{j=1}^p (\|\nabla_j f(\mathbf{x}^{k+1}) - \nabla_j f(\mathbf{x}^{k,j-1})\| + L_j \|\mathbf{x}_j^k - \mathbf{x}_j^{k+1}\|) \|\mathbf{x}_j^{k+1} - \mathbf{x}_j^*\| \\
& \leq \sum_{j=1}^p (\|\nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}^{k,j-1})\| + L_j \|\mathbf{x}_j^k - \mathbf{x}_j^{k+1}\|) \|\mathbf{x}_j^{k+1} - \mathbf{x}_j^*\| \\
& \leq \sum_{j=1}^p (L_f \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^{k,j-1}\| + L_{\max} \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1}\|) \|\mathbf{x}_j^{k+1} - \mathbf{x}_j^*\| \\
& \leq (L_f + L_{\max}) \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\| \sum_{j=1}^p \|\mathbf{x}_j^{k+1} - \mathbf{x}_j^*\|.
\end{aligned}$$

因此,

$$\begin{aligned}
(F(\mathbf{x}^{k+1}) - F(\mathbf{x}^*))^2 & \leq (L_f + L_{\max})^2 \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \left(\sum_{j=1}^p \|\mathbf{x}_j^{k+1} - \mathbf{x}_j^*\| \right)^2 \\
& \leq p(L_f + L_{\max})^2 \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \sum_{j=1}^p \|\mathbf{x}_j^{k+1} - \mathbf{x}_j^*\|^2 \quad (11.18) \\
& = p(L_f + L_{\max})^2 \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \cdot \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \\
& \leq p(L_f + L_{\max})^2 R_{F(\mathbf{x}^0)}^2 \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2,
\end{aligned}$$

其中最后一个不等式源于函数值序列的单调性 (推论 11.12) 和假设 11.15(B). 结合式 (11.11), 可得:

$$F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq \frac{L_{\min}}{2} \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|^2 \geq \frac{L_{\min}}{2p(L_f + L_{\max})^2 R^2} (F(\mathbf{x}^{k+1}) - F_{\text{opt}})^2,$$

其中 $R = R_{F(\mathbf{x}^0)}$. □

为了推导函数值收敛速率, 我们将使用以下关于满足特定递归不等式的非负标量序列收敛性的引理. 该结果与引理 10.70 相似, 但递归不等式形式不同.

引理 11.17. 设 $\{a_k\}_{k \geq 0}$ 是满足以下递归不等式的非负实数列:

$$a_k - a_{k+1} \geq \frac{1}{\gamma} a_{k+1}^2, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (11.19)$$

其中 $\gamma > 0$ 为常数, 则对任意 $n \geq 2$,

$$a_n \leq \max \left\{ \left(\frac{1}{2} \right)^{\frac{n-1}{2}} a_0, \frac{4\gamma}{n-1} \right\}. \quad (11.20)$$

此外, 对任意 $\varepsilon > 0$, 若 $n \geq 2$ 满足:

$$n \geq \max \left\{ \frac{2}{\log 2} \left(\log a_0 + \log \frac{1}{\varepsilon} \right), \frac{4\gamma}{\varepsilon} \right\} + 1,$$

则 $a_n \leq \varepsilon$.

证明: 设 $n \geq 2$. 若 $a_n = 0$, 则式 (11.20) 显然成立. 因此可假设 $a_n > 0$, 由此可知 $a_1, a_2, \dots, a_{n-1} > 0$. 对任意 $k \in \{0, 1, \dots, n-1\}$,

$$\frac{1}{a_{k+1}} - \frac{1}{a_k} = \frac{a_k - a_{k+1}}{a_k a_{k+1}} \geq \frac{1}{\gamma} \frac{a_{k+1}}{a_k}. \quad (11.21)$$

对每个 k , 有两种情况:

(i) $\frac{a_{k+1}}{a_k} \leq \frac{1}{2}$.

(ii) $\frac{a_{k+1}}{a_k} > \frac{1}{2}$.

由式 (11.21), 在情况 (ii) 下,

$$\frac{1}{a_{k+1}} - \frac{1}{a_k} \geq \frac{1}{2\gamma}.$$

假设 n 是正偶数. 若在 $k = 0, 1, \dots, n-1$ 中至少有 $\frac{n}{2}$ 个指标满足情况 (ii), 则

$$\frac{1}{a_n} - \frac{1}{a_0} = \sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{1}{a_{k+1}} - \frac{1}{a_k} \right) \geq \frac{n}{4\gamma},$$

因此

$$a_n \leq \frac{4\gamma}{n}.$$

另一方面, 若不满足上述条件, 则至少有 $\frac{n}{2}$ 个指标满足情况 (i), 因此

$$\frac{a_n}{a_0} = \frac{a_n}{a_{n-1}} \frac{a_{n-1}}{a_{n-2}} \dots \frac{a_1}{a_0} \leq \left(\frac{1}{2} \right)^{\frac{n}{2}}, \quad a_n \leq \left(\frac{1}{2} \right)^{\frac{n}{2}} a_0.$$

因此, 对偶数 n ,

$$a_n \leq \max \left\{ \left(\frac{1}{2} \right)^{\frac{n}{2}} a_0, \frac{4\gamma}{n} \right\}. \quad (11.22)$$

若 $n \geq 3$ 是正奇数, 则

$$a_n \leq a_{n-1} \leq \max \left\{ \left(\frac{1}{2} \right)^{\frac{n-1}{2}} a_0, \frac{4\gamma}{n-1} \right\}. \quad (11.23)$$

由于式 (11.23) 的右端大于式 (11.22) 的右端, 故结论 (11.20) 成立. 令 $n \geq 2$, 为保证不等式 $a_n \leq \varepsilon$ 成立, 只需不等式

$$\max \left\{ \left(\frac{1}{2} \right)^{(n-1)/2} a_0, \frac{4\gamma}{n-1} \right\} \leq \varepsilon$$

成立, 这意味着需满足以下两个不等式:

$$\left(\frac{1}{2}\right)^{(n-1)/2} a_0 \leq \varepsilon, \quad \frac{4\gamma}{n-1} \leq \varepsilon.$$

显然, 这些不等式等价于

$$n \geq \frac{2}{\log(2)} (\log(a_0) + \log(1/\varepsilon)) + 1, \quad n \geq \frac{4\gamma}{\varepsilon} + 1.$$

因此, 若

$$n \geq \max \left\{ \frac{2}{\log(2)} (\log(a_0) + \log(1/\varepsilon)), \frac{4\gamma}{\varepsilon} \right\} + 1,$$

则可保证不等式 $a_n \leq \varepsilon$ 成立. \square

结合引理 11.16 与引理 11.17, 我们可以得到 CBPG 方法生成序列在函数值上的 $O(1/k)$ 收敛速率, 同时得到复杂度结果.

定理 11.18 (循环分块近端梯度法的 $O(1/k)$ 收敛速率). 假设假设 11.1 和假设 11.15 成立, 设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是循环分块近端梯度法求解问题 (11.1) 时生成的序列, 则对任意 $k \geq 2$,

$$F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}} \leq \max \left\{ \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{k-1}{2}} (F(\mathbf{x}^0) - F_{\text{opt}}), \frac{8p(L_f + L_{\max})^2 R^2}{L_{\min}(k-1)} \right\}, \quad (11.24)$$

其中 $L_{\min} = \min_{i=1,2,\dots,p} L_i$, $L_{\max} = \max_{i=1,2,\dots,p} L_i$, $R = R_{F(\mathbf{x}^0)}$. 此外, 若 $n \geq 2$ 满足:

$$n \geq \max \left\{ \frac{2}{\log 2} \left(\log(F(\mathbf{x}^0) - F_{\text{opt}}) + \log \frac{1}{\varepsilon} \right), \frac{8p(L_f + L_{\max})^2 R^2}{L_{\min} \varepsilon} \right\} + 1,$$

则 $F(\mathbf{x}^n) - F_{\text{opt}} \leq \varepsilon$.

证明: 令 $a_k = F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}}$. 由引理 11.16,

$$a_k - a_{k+1} \geq \frac{1}{D} a_{k+1}^2,$$

其中 $D = \frac{2p(L_f + L_{\max})^2 R^2}{L_{\min}}$. 令 $\gamma = D$, 调用引理 11.17 即可得证. \square

注 11.19 (指标顺序). 循环分块近端梯度法的分析是在指标选择策略为循环的假设下进行的. 但显然, 相同的分析 (进而主要结果 (定理 11.14 和定理 11.18)) 适用于任何在连续迭代之间每个分块恰好更新一次的指标选择策略. 此类指标选择策略的一个例子是“循环洗牌”顺序, 即在每次迭代开始时通过随机置换选择分块顺序; 在某种意义上, 这是一种“准随机”策略. 下一节我们将研究完全随机的方法.

最后, 我们证明对于 (整个空间上的) 凸可微函数, 分块 Lipschitz 连续性 (假设 11.1(D)) 蕴含该函数是 L -光滑的 (假设 11.1(C)), 其中 L 是分块 Lipschitz 常数之和. 这意味着在这种情况下, 我们实际上可以去掉假设 11.1(C).

定理 11.20. 设 $\phi: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}$ ($\mathbb{E} = \mathbb{E}_1 \times \mathbb{E}_2 \times \cdots \times \mathbb{E}_p$) 是凸函数, 满足以下假设:

- (A) ϕ 在 \mathbb{E} 上可微;
 (B) 存在 $L_1, L_2, \dots, L_p > 0$, 使得对任意 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$, 对所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$ 和 $d \in \mathbb{E}_i$, 成立

$$\|\nabla_i \phi(\mathbf{x}) - \nabla_i \phi(\mathbf{x} + \mathcal{U}_i(d))\| \leq L_i \|d\|.$$

则 ϕ 是 L -光滑的, 其中 $L = L_1 + L_2 + \cdots + L_p$.

证明: 设 $\mathbf{y} \in \mathbb{E}$, 定义函数

$$f(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) - \phi(\mathbf{y}) - \langle \nabla \phi(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle. \quad (11.25)$$

显然, f 也满足性质 (A) 和 (B). 此外, ϕ 的凸性蕴含 f 的凸性以及 f 是非负的. 令 $g_1 = g_2 = \cdots = g_p \equiv 0$, 调用引理 11.9, 可得对所有 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$ 和 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$,

$$f(\mathbf{x}) - f\left(\mathbf{x} - \frac{1}{L_i} \mathcal{U}_i(\nabla_i f(\mathbf{x}))\right) \geq \frac{1}{2L_i} \|\nabla_i f(\mathbf{x})\|^2,$$

结合 f 的非负性, 可得

$$f(\mathbf{x}) \geq \frac{1}{2L_i} \|\nabla_i f(\mathbf{x})\|^2.$$

由于上式对任意 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$ 成立, 故

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &\geq \max_{i=1,2,\dots,p} \left\{ \frac{1}{2L_i} \|\nabla_i f(\mathbf{x})\|^2 \right\} \geq \sum_{i=1}^p \frac{L_i}{\sum_{j=1}^p L_j} \cdot \frac{1}{2L_i} \|\nabla_i f(\mathbf{x})\|^2 \\ &= \frac{1}{2 \left(\sum_{j=1}^p L_j \right)} \|\nabla f(\mathbf{x})\|^2. \end{aligned}$$

将式 (11.25) 中 f 的表达式代入上式, 可得

$$\phi(\mathbf{x}) \geq \phi(\mathbf{y}) + \langle \nabla \phi(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle + \frac{1}{2 \left(\sum_{j=1}^p L_j \right)} \|\nabla \phi(\mathbf{x}) - \nabla \phi(\mathbf{y})\|^2.$$

由于上式对任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{E}$ 成立, 由定理 5.8 可知 ϕ 是 $(L_1 + L_2 + \cdots + L_p)$ -光滑的. \square

11.5 随机分块近端梯度法

在本节中, 我们将分析一种块近端梯度方法的变体, 在该方法中, 每次迭代都会在随机选择的块上执行一次近端梯度步骤. 分析是在下面给出的假设 11.21 下进行的. 请注意, 此时我们不假设 f 是凸的, 但主要收敛结果定理 11.25 将需要 f 的凸性.

假设 11.21.

- (A) 对任意 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$, $g_i: \mathbb{E}_i \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是正常闭凸函数。
 (B) $f: \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, \infty]$ 是正常闭凸函数, 满足 $\text{dom}(g) \subseteq \text{int}(\text{dom}(f))$, 且 f 在 $\text{int}(\text{dom}(f))$ 上是可微的。
 (C) 存在 $L_1, L_2, \dots, L_p > 0$, 使得对任意 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$, 对所有满足 $\mathbf{x} + \mathcal{U}_i(\mathbf{d}) \in \text{int}(\text{dom}(f))$ 的 $\mathbf{x} \in \text{int}(\text{dom}(f))$ 和 $\mathbf{d} \in \mathbb{E}_i$, 都有

$$\|\nabla_i f(\mathbf{x}) - \nabla_i f(\mathbf{x} + \mathcal{U}_i(\mathbf{d}))\| \leq L_i \|\mathbf{d}\|$$

成立。

- (D) 问题 (11.1) 的最优解集非空, 记为 X^* ; 最优值记为 F_{opt} 。

随机块近端梯度 (RBPG) 方法

初始化: 选取 $\mathbf{x}^0 = (\mathbf{x}_1^0, \mathbf{x}_2^0, \dots, \mathbf{x}_p^0) \in \text{int}(\text{dom}(f))$ 。

一般步骤: 对任意 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:

- (a) 按照均匀分布从 $\{1, 2, \dots, p\}$ 中随机选取 i_k ;
 (b) $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \mathcal{U}_{i_k} \left(T_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) - \mathbf{x}_{i_k}^k \right)$ 。

注 11.22. 该算法的步骤 (b) 也可以写成

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \frac{1}{L_{i_k}} \mathcal{U}_{i_k} \left(G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right)。$$

从计算复杂度的角度粗略来说, RBPG 方法的每 p 次迭代, 与 CBPG 方法的 1 次迭代是相当的。

利用块充分下降引理 (引理 11.9), 可以很容易证明 RBPG 方法具有充分下降性质。

定理 11.23 (RBPG 方法的充分下降). 假设假设 11.21 成立, 且 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是由 RBPG 方法生成的序列。则对任意 $k \geq 0$, 有

$$F(\mathbf{x}^k) - F(\mathbf{x}^{k+1}) \geq \frac{1}{2L_{i_k}} \left\| G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right\|^2。$$

证明: 取 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^k$ 且 $i = i_k$, 应用引理 11.9 即可。 \square

注 11.24. 定理 11.23 的一个直接推论是: RBPG 方法生成的函数值序列 $\{F(\mathbf{x}^k)\}_{k \geq 0}$ 是非增的。因此, 期望函数值序列

$$\{\mathbb{E}_{i_0, \dots, i_{k-1}}(F(\mathbf{x}^k))\}_{k \geq 0}$$

同样是非增的, 这一结论也成立。

在我们的分析中, 将使用以下符号:

- $\xi_{k-1} \equiv \{i_0, i_1, \dots, i_{k-1}\}$ 是一个多元随机变量。
- 除了空间 \mathbb{R} 自带的欧几里得范数外，我们定义如下加权范数：

$$\|\mathbf{x}\|_L \equiv \sqrt{\sum_{i=1}^p L_i \|\mathbf{x}_i\|^2}$$

及其对偶范数：

$$\|\mathbf{x}\|_{L,*} = \sqrt{\sum_{i=1}^p \frac{1}{L_i} \|\mathbf{x}_i\|^2}.$$

- 我们将考虑如下形式的梯度映射变体：

$$\tilde{G}(\mathbf{x}) = \left(G_{L_1}^1(\mathbf{x}^k), G_{L_2}^2(\mathbf{x}^k), \dots, G_{L_p}^p(\mathbf{x}^k) \right). \quad (11.26)$$

显然，若 $L_1 = L_2 = \dots = L_p = L$ ，则 $\tilde{G}(\mathbf{x}) = G_L(\mathbf{x})$ 。现在将陈述并证明主要的收敛结果。

定理 11.25 (RBPG 方法的 $O(1/k)$ 收敛速率). 假设假设 11.21 成立且 f 是凸函数。设 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 是通过 RBPG 方法求解问题 (11.1) 生成的序列，且 $\mathbf{x}^* \in X^*$ 。则对任意 $k \geq 0$ ，有

$$\mathbb{E}_{\xi_k} (F(\mathbf{x}^{k+1})) - F_{\text{opt}} \leq \frac{p}{p+k+1} \left(\frac{1}{2} \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\|_L^2 + F(\mathbf{x}^0) - F_{\text{opt}} \right). \quad (11.27)$$

证明： 设 $\mathbf{x}^* \in X^*$ 。对任意 $n \geq 0$ ，记 $r_n \equiv \|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^*\|_L$ 。则对任意 $k \geq 0$ ，

$$\begin{aligned} r_{k+1}^2 &= \|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|_L^2 \\ &= \left\| \mathbf{x}^k - \frac{1}{L_{i_k}} \mathcal{U}_{i_k} \left(G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right) - \mathbf{x}^* \right\|_L^2 \\ &= \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|_L^2 - \frac{2}{L_{i_k}} L_{i_k} \left\langle G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}_{i_k}^k - \mathbf{x}_{i_k}^* \right\rangle + \frac{L_{i_k}}{L_{i_k}^2} \left\| G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right\|^2 \\ &= \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|_L^2 - 2 \left\langle G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}_{i_k}^k - \mathbf{x}_{i_k}^* \right\rangle + \frac{1}{L_{i_k}} \left\| G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right\|^2 \\ &= r_k^2 - 2 \left\langle G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}_{i_k}^k - \mathbf{x}_{i_k}^* \right\rangle + \frac{1}{L_{i_k}} \left\| G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right\|^2. \end{aligned}$$

对 i_k 取期望（利用符号 (11.26)），可得：

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{i_k} \left(\frac{1}{2} r_{k+1}^2 \right) &= \frac{1}{2} r_k^2 - \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \left\langle G_{L_i}^i(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}_i^k - \mathbf{x}_i^* \right\rangle + \frac{1}{2p} \sum_{i=1}^p \frac{1}{L_i} \left\| G_{L_i}^i(\mathbf{x}^k) \right\|^2 \\ &= \frac{1}{2} r_k^2 - \frac{1}{p} \left\langle \tilde{G}(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* \right\rangle + \frac{1}{2p} \left\| \tilde{G}(\mathbf{x}^k) \right\|_{L,*}^2 \end{aligned} \quad (11.28)$$

由块下降引理（引理 11.8），

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}^{k+1}) &= f\left(\mathbf{x}^k - \frac{1}{L_{i_k}} \mathcal{U}_{i_k}\left(G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k)\right)\right) \\ &\leq f(\mathbf{x}^k) - \frac{1}{L_{i_k}} \left\langle \nabla_{i_k} f(\mathbf{x}^k), G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right\rangle + \frac{1}{2L_{i_k}} \left\| G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right\|^2. \end{aligned}$$

因此，

$$F(\mathbf{x}^{k+1}) \leq f(\mathbf{x}^k) - \frac{1}{L_{i_k}} \left\langle \nabla_{i_k} f(\mathbf{x}^k), G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right\rangle + \frac{1}{2L_{i_k}} \left\| G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right\|^2 + g(\mathbf{x}^{k+1}).$$

对上述不等式两边关于 i_k 取期望，可得

$$\mathbb{E}_{i_k}(F(\mathbf{x}^{k+1})) \leq f(\mathbf{x}^k) - \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \frac{1}{L_i} \left\langle \nabla_i f(\mathbf{x}^k), G_{L_i}^i(\mathbf{x}^k) \right\rangle + \frac{1}{2p} \left\| \tilde{G}(\mathbf{x}^k) \right\|_{\mathcal{L},*}^2 + \mathbb{E}_{i_k}(g(\mathbf{x}^{k+1})). \quad (11.29)$$

由于 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \frac{1}{L_{i_k}} G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) = \text{prox}_{\frac{1}{L_{i_k}} g_{i_k}}\left(\mathbf{x}^k - \frac{1}{L_{i_k}} \nabla_{i_k} f(\mathbf{x}^k)\right)$ ，由第二邻近点定理（定理 6.39）可知

$$\begin{aligned} g_{i_k}(\mathbf{x}_{i_k}^*) &\geq g_{i_k}\left(\mathbf{x}_{i_k}^k - \frac{1}{L_{i_k}} G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k)\right) \\ &\quad + L_{i_k} \left\langle \mathbf{x}_{i_k}^k - \frac{1}{L_{i_k}} \nabla_{i_k} f(\mathbf{x}^k) - \mathbf{x}_{i_k}^k + \frac{1}{L_{i_k}} G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}_{i_k}^* - \mathbf{x}_{i_k}^k + \frac{1}{L_{i_k}} G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right\rangle. \end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned} g_{i_k}(x_{i_k}^*) &\geq g_{i_k}\left(x_{i_k}^k - \frac{1}{L_{i_k}} G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k)\right) \\ &\quad + \left\langle -\nabla_{i_k} f(\mathbf{x}^k) + G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k), x_{i_k}^* - x_{i_k}^k + \frac{1}{L_{i_k}} G_{L_{i_k}}^{i_k}(\mathbf{x}^k) \right\rangle. \end{aligned} \quad (11.30)$$

注意到

$$\mathbb{E}_{i_k}(g_{i_k}(\mathbf{x}_{i_k}^*)) = \frac{1}{p} g(\mathbf{x}^*), \quad (11.31)$$

$$\mathbb{E}_{i_k}(g(\mathbf{x}^{k+1})) = \frac{p-1}{p} g(\mathbf{x}^k) + \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p g_i\left(\mathbf{x}_i^k - \frac{1}{L_i} G_{L_i}^i(\mathbf{x}^k)\right). \quad (11.32)$$

对 (11.30) 关于 i_k 取期望，并代入关系式 (11.31) 和 (11.32)，可得如下不等式：

$$\begin{aligned} \frac{1}{p} g(\mathbf{x}^*) &\geq \mathbb{E}_{i_k}(g(\mathbf{x}^{k+1})) - \frac{p-1}{p} g(\mathbf{x}^k) + \frac{1}{p} \left\langle -\nabla f(\mathbf{x}^k) + \tilde{G}(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^k \right\rangle \\ &\quad - \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \frac{1}{L_i} \left\langle \nabla_i f(\mathbf{x}^k), G_{L_i}^i(\mathbf{x}^k) \right\rangle + \frac{1}{p} \left\| \tilde{G}(\mathbf{x}^k) \right\|_{\mathcal{L},*}^2. \end{aligned}$$

上述不等式等价于：

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}_{i_k} (g(\mathbf{x}^{k+1})) - \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \frac{1}{L_i} \langle \nabla_i f(\mathbf{x}^k), G_{L_i}^i(\mathbf{x}^k) \rangle \\ & \leq \frac{1}{p} g(\mathbf{x}^*) + \frac{p-1}{p} g(\mathbf{x}^k) + \frac{1}{p} \langle \nabla f(\mathbf{x}^k) - \tilde{G}(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^k \rangle - \frac{1}{p} \left\| \tilde{G}(\mathbf{x}^k) \right\|_{L,*}^2. \end{aligned}$$

将上述不等式代入 (11.29)，可得：

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{i_k} (F(\mathbf{x}^{k+1})) & \leq f(\mathbf{x}^k) - \frac{1}{2p} \left\| \tilde{G}(\mathbf{x}^k) \right\|_{L,*}^2 + \frac{1}{p} g(\mathbf{x}^*) + \frac{1}{p} \langle \nabla f(\mathbf{x}^k) - \tilde{G}(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^k \rangle \\ & \quad + \frac{p-1}{p} g(\mathbf{x}^k), \end{aligned}$$

结合梯度不等式 $\langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^k \rangle \leq f(\mathbf{x}^*) - f(\mathbf{x}^k)$ ，上式可推出：

$$\mathbb{E}_{i_k} (F(\mathbf{x}^{k+1})) \leq \frac{p-1}{p} F(\mathbf{x}^k) + \frac{1}{p} F(\mathbf{x}^*) - \frac{1}{2p} \left\| \tilde{G}(\mathbf{x}^k) \right\|_{L,*}^2 - \frac{1}{p} \langle \tilde{G}(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^k \rangle.$$

将上式与 (11.28) 结合，可得如下关系：

$$\mathbb{E}_{i_k} \left(\frac{1}{2} r_{k+1}^2 \right) \leq \frac{1}{2} r_k^2 + \frac{p-1}{p} F(\mathbf{x}^k) + \frac{1}{p} F(\mathbf{x}^*) - \mathbb{E}_{i_k} (F(\mathbf{x}^{k+1})),$$

整理后为：

$$\mathbb{E}_{i_k} \left(\frac{1}{2} r_{k+1}^2 + F(\mathbf{x}^{k+1}) - F_{\text{opt}} \right) \leq \left(\frac{1}{2} r_k^2 + F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}} \right) - \frac{1}{p} (F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}}).$$

对 ξ_{k-1} 取期望（约定 $\mathbb{E}_{\xi_{-1}} (F(\mathbf{x}^0))$ 表示 $F(\mathbf{x}^0)$ ），可得：

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\xi_k} \left(\frac{1}{2} r_{k+1}^2 + F(\mathbf{x}^{k+1}) - F_{\text{opt}} \right) & \leq \mathbb{E}_{\xi_{k-1}} \left(\frac{1}{2} r_k^2 + F(\mathbf{x}^k) - F_{\text{opt}} \right) \\ & \quad - \frac{1}{p} (\mathbb{E}_{\xi_{k-1}} (F(\mathbf{x}^k)) - F_{\text{opt}}). \end{aligned}$$

由此可推出：

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\xi_k} (F(\mathbf{x}^{k+1})) - F_{\text{opt}} & \leq \mathbb{E}_{\xi_k} \left(\frac{1}{2} r_{k+1}^2 + F(\mathbf{x}^{k+1}) - F_{\text{opt}} \right) \\ & \leq \frac{1}{2} r_0^2 + F(\mathbf{x}^0) - F_{\text{opt}} - \frac{1}{p} \sum_{j=0}^k (\mathbb{E}_{\xi_{j-1}} (F(\mathbf{x}^j)) - F_{\text{opt}}), \end{aligned}$$

结合期望函数值序列 $\{\mathbb{E}_{\xi_{k-1}} (F(\mathbf{x}^k))\}_{k \geq 0}$ 的单调性（见注 11.24），上式可推出：

$$\mathbb{E}_{\xi_k} (F(\mathbf{x}^{k+1})) - F_{\text{opt}} \leq \frac{1}{2} r_0^2 + F(\mathbf{x}^0) - F_{\text{opt}} - \frac{k+1}{p} (\mathbb{E}_{\xi_k} (F(\mathbf{x}^{k+1})) - F_{\text{opt}}). \quad (11.33)$$

由 (11.33) 可直接得到所需结论 (11.27)。 \square

第 12 章 基于对偶的近端梯度法

12.1 原始模型与对偶模型

本章讨论的主要模型是

$$f_{\text{opt}} = \min_{x \in \mathbb{E}} \{f(x) + g(\mathcal{A}(x))\}, \quad (12.1)$$

在此做出以下假设。

假设 12.1.

- (A) $f : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, +\infty]$ 是 proper 闭函数且 σ -强凸 ($\sigma > 0$)。
- (B) $g : \mathbb{V} \rightarrow (-\infty, +\infty]$ 是 proper 闭凸函数。
- (C) $\mathcal{A} : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{V}$ 是线性变换。
- (D) 存在 $\hat{x} \in \text{ri}(\text{dom}(f))$ 和 $\hat{z} \in \text{ri}(\text{dom}(g))$, 使得 $\mathcal{A}(\hat{x}) = \hat{z}$ 。

在假设 12.1 的条件下, 函数 $x \mapsto f(x) + g(\mathcal{A}(x))$ 是 proper 闭函数且为 σ -强凸函数, 因此根据定理 5.25(a), 问题 (12.1) 存在唯一最优解, 本章中始终将其记为 x^* 。

为构造问题 (12.1) 的对偶问题, 我们首先将其重写为如下形式:

$$\begin{aligned} \min_{x, z} f(x) + g(z) \\ \text{s.t. } \mathcal{A}(x) - z = 0. \end{aligned} \quad (12.2)$$

为式 (12.2) 中的等式约束引入拉格朗日对偶向量 $y \in \mathbb{V}$, 可将拉格朗日函数写为:

$$L(x, z; y) = f(x) + g(z) - \langle y, \mathcal{A}(x) - z \rangle = f(x) + g(z) - \langle \mathcal{A}^T(y), x \rangle + \langle y, z \rangle. \quad (12.3)$$

对拉格朗日函数关于 x 和 z 取极小值:

$$\begin{aligned} \inf_{x, z} L(x, z; y) &= \inf_x [f(x) - \langle \mathcal{A}^T(y), x \rangle] + \inf_z [g(z) + \langle y, z \rangle] \\ &= -\sup_x [-f(x) + \langle \mathcal{A}^T(y), x \rangle] - \sup_z [-g(z) + \langle -y, z \rangle] \\ &= -f^*(\mathcal{A}^T(y)) - g^*(-y). \end{aligned}$$

得到的对偶问题为:

$$q_{\text{opt}} = \max_{y \in \mathbb{V}} \{q(y) \equiv -f^*(\mathcal{A}^T(y)) - g^*(-y)\}. \quad (12.4)$$

根据凸问题的强对偶定理（见定理 A.1），可知问题 (12.1) 与 (12.4) 满足强对偶性。

定理 12.2 (问题 (12.1) 和 (12.4) 对的强对偶性). 假设 12.1 成立，设 f_{opt} 和 q_{opt} 分别为原问题 (12.1) 与对偶问题 (12.4) 的最优值，则 $f_{opt} = q_{opt}$ ，且对偶问题 (12.4) 存在最优解。

我们将对偶问题转化为极小化形式进行分析：

$$\min_{y \in \mathbb{V}} \{F(y) + G(y)\}, \quad (12.5)$$

其中

$$F(y) \equiv f^*(\mathcal{A}^T(y)), \quad (12.6)$$

$$G(y) \equiv g^*(-y). \quad (12.7)$$

函数 F 与 G 的基本性质总结于下述引理。

引理 12.3 (函数 F 与 G 的性质). 假设 12.1 成立，且 F 、 G 分别由 (12.6) 与 (12.7) 定义，则

1. $F: \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$ 是凸函数，且为 L_F -光滑函数，其中 $L_F = \frac{\|\mathcal{A}\|^2}{\sigma}$ ；
2. $G: \mathbb{V} \rightarrow (-\infty, +\infty]$ 是 proper 闭凸函数。

证明：(a) 由于 f 为 proper 闭函数且 σ -强凸，根据共轭对应定理（定理 5.26(b)）， f^* 是 $\frac{1}{\sigma}$ -光滑函数。因此，对任意 $y_1, y_2 \in \mathbb{V}$ ，有

$$\begin{aligned} \|\nabla F(y_1) - \nabla F(y_2)\| &= \|\mathcal{A}(\nabla f^*(\mathcal{A}^T(y_1))) - \mathcal{A}(\nabla f^*(\mathcal{A}^T(y_2)))\| \\ &\leq \|\mathcal{A}\| \cdot \|\nabla f^*(\mathcal{A}^T(y_1)) - \nabla f^*(\mathcal{A}^T(y_2))\| \\ &\leq \frac{1}{\sigma} \|\mathcal{A}\| \cdot \|\mathcal{A}^T(y_1) - \mathcal{A}^T(y_2)\| \\ &\leq \frac{\|\mathcal{A}\| \cdot \|\mathcal{A}^T\|}{\sigma} \|y_1 - y_2\| = \frac{\|\mathcal{A}\|^2}{\sigma} \|y_1 - y_2\|, \end{aligned}$$

其中最后一个等式利用了性质 $\|\mathcal{A}\| = \|\mathcal{A}^T\|$ （见 1.14 节）。

为证明 F 的凸性，注意到共轭函数 f^* 是凸函数（定理 4.3），因此根据定理 2.16， F 作为凸函数与线性映射的复合，也是凸函数。

(b) 由于 g 是 proper 闭凸函数，根据定理 4.3 与定理 4.5，其共轭函数 g^* 也具有该性质。因此，由 $G(y) \equiv g^*(-y)$ 定义的 G 同样是 proper 闭凸函数。□

12.2 双重近端梯度法

问题 (12.5) 是极小化“凸 L -光滑函数”与“proper 闭凸函数”的和。因此，可对问题 (12.5) 应用近端梯度方法，而该问题等价于 (12.1) 的对偶问题。我们将此算

法称为“对偶近端梯度 (Dual Proximal Gradient, DPG) 方法”，其对偶形式表述如下。

对偶近端梯度法——对偶形式

- 初始化：选取 $\mathbf{y}^0 \in \mathbb{V}$ ，且 $L \geq L_F = \frac{\|\mathcal{A}\|^2}{\sigma}$ 。
- 一般步 ($k \geq 0$)：

$$\mathbf{y}^{k+1} = \text{prox}_{\frac{1}{L}G} \left(\mathbf{y}^k - \frac{1}{L} \nabla F(\mathbf{y}^k) \right). \quad (12.8)$$

由于 F 是凸 L_F -光滑函数，且 G 是 proper 闭凸函数，可调用定理 10.21 得到：对偶目标函数值的收敛速率为 $O(1/k)$ 。

定理 12.4. 假设 12.1 成立，设 $\{\mathbf{y}^k\}_{k \geq 0}$ 是由 DPG 方法生成的序列，其中 $L \geq L_F = \frac{\|\mathcal{A}\|^2}{\sigma}$ 。则对对偶问题 (12.4) 的任意最优解 \mathbf{y}^* 及 $k \geq 1$ ，有

$$q_{opt} - q(\mathbf{y}^k) \leq \frac{L \|\mathbf{y}^0 - \mathbf{y}^*\|^2}{2k}.$$

我们接下来的目标是推导该方法的原始形式——将其用问题的已知数据（即 f, g, \mathcal{A} ）更显式地表示。为实现这一目标，我们需要如下技术性引理。

引理 12.5. 设 $F(y) = f^*(\mathcal{A}^T(y) + \mathbf{b})$ ， $G(y) = g^*(-y)$ ，其中 f, g, \mathcal{A} 满足假设 12.1 的性质 (A)、(B)、(C)，且 $\mathbf{b} \in \mathbb{E}$ 。则对任意 $y, v \in \mathbb{V}$ 及 $L > 0$ ，关系

$$y = \text{prox}_{\frac{1}{L}G} \left(v - \frac{1}{L} \nabla F(v) \right) \quad (12.9)$$

成立的充要条件是

$$y = v - \frac{1}{L} \mathcal{A}(\tilde{x}) + \frac{1}{L} \text{prox}_{Lg}(\mathcal{A}(\tilde{x}) - Lv),$$

其中

$$\tilde{x} = \text{argmax}_x \{ \langle x, \mathcal{A}^T(v) + \mathbf{b} \rangle - f(x) \}.$$

证明： 根据共轭次梯度定理（推论 4.21），由于 f 是 proper 闭凸函数，有

$$\nabla f^*(\mathcal{A}^T(v) + \mathbf{b}) = \tilde{x} \in \mathbb{E} \equiv \text{argmax}_x \{ \langle x, \mathcal{A}^T(v) + \mathbf{b} \rangle - f(x) \}.$$

由于 $\nabla F(v) = \mathcal{A}(\nabla f^*(\mathcal{A}^T(v) + \mathbf{b})) = \mathcal{A}(\tilde{x})$ ，可得

$$y = \text{prox}_{\frac{1}{L}G} \left(v - \frac{1}{L} \mathcal{A}(\tilde{x}) \right). \quad (12.10)$$

对定理 6.15, 取 $g \leftarrow \frac{1}{L}g^*$ 、 $\mathcal{A} = -\mathcal{I}$ 、 $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, 可得: 对任意 $z \in \mathbb{V}$, 有

$$\text{prox}_{\frac{1}{L}G}(z) = -\text{prox}_{\frac{1}{L}g^*}(-z). \quad (12.11)$$

结合 (12.10) 与 (12.11), 并利用扩展莫罗分解公式 (定理 6.45), 最终可得:

$$\begin{aligned} y &= \text{prox}_{\frac{1}{L}G} \left(v - \frac{1}{L}\mathcal{A}(\tilde{x}) \right) = -\text{prox}_{\frac{1}{L}g^*} \left(\frac{1}{L}\mathcal{A}(\tilde{x}) - v \right) \\ &= - \left[\frac{1}{L}\mathcal{A}(\tilde{x}) - v - \frac{1}{L}\text{prox}_{Lg}(\mathcal{A}(\tilde{x}) - Lv) \right] \\ &= v - \frac{1}{L}\mathcal{A}(\tilde{x}) + \frac{1}{L}\text{prox}_{Lg}(\mathcal{A}(\tilde{x}) - Lv). \end{aligned}$$

结论得证。 □

借助引理 12.5, 我们可以写出 DPG 方法的原始形式。

对偶近端梯度法 (DPG) —— 原始形式

- 初始化: 选取 $\mathbf{y}^0 \in \mathbb{V}$, 且 $L \geq \frac{\|\mathcal{A}\|^2}{\sigma}$ 。
- 一般步: 对任意 $k = 0, 1, 2, \dots$, 执行以下步骤:
 1. 令 $\mathbf{x}^k = \text{argmax}_x \{ \langle x, \mathcal{A}^T(\mathbf{y}^k) \rangle - f(x) \}$;
 2. 令 $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{y}^k - \frac{1}{L}\mathcal{A}(\mathbf{x}^k) + \frac{1}{L}\text{prox}_{Lg}(\mathcal{A}(\mathbf{x}^k) - L\mathbf{y}^k)$ 。

注 12.6 (原始序列). 由该方法生成的序列 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 将被称为“原始序列”。该序列的元素实际上不一定满足原始问题 (12.1) 的可行性, 因为它们不能保证属于 $\text{dom}(g)$; 然而, 我们将证明该原始序列收敛到最优解 \mathbf{x}^* 。

为了证明关于原始序列的收敛性结果, 我们需要以下基本的原始-对偶关系。

引理 12.7 (原始-对偶关系). 假定假设 12.1 成立。令 $\bar{\mathbf{y}} \in \text{dom}(G)$, 其中 G 如 (12.7) 所定义, 并令

$$\bar{\mathbf{x}} = \text{argmax}_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{ \langle \mathbf{x}, \mathcal{A}^T(\bar{\mathbf{y}}) \rangle - f(\mathbf{x}) \}. \quad (12.12)$$

则有

$$\|\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \frac{2}{\sigma}(q_{\text{opt}} - q(\bar{\mathbf{y}})). \quad (12.13)$$

证明: 回顾原始问题 (12.1) 可以等价地写为如下问题:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}, \mathbf{z} \in \mathbb{V}} \{ f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{z}) : \mathcal{A}(\mathbf{x}) - \mathbf{z} = \mathbf{0} \},$$

其拉格朗日函数为 (另见 (12.3)):

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) - \langle \mathcal{A}^T(\mathbf{y}), \mathbf{x} \rangle + g(\mathbf{z}) + \langle \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle.$$

特别地, 当 $\mathbf{y} = \bar{\mathbf{y}}$ 时, 有

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \bar{\mathbf{y}}) = h(\mathbf{x}) + s(\mathbf{z}), \quad (12.14)$$

其中

$$\begin{aligned} h(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) - \langle \mathcal{A}^T(\bar{\mathbf{y}}), \mathbf{x} \rangle, \\ s(\mathbf{z}) &= g(\mathbf{z}) + \langle \bar{\mathbf{y}}, \mathbf{z} \rangle. \end{aligned}$$

由于 h 是 σ -强凸函数且 $\bar{\mathbf{x}}$ 是其极小值点 (见关系式 (12.12)), 根据定理 5.25(b) 可得

$$h(\mathbf{x}) - h(\bar{\mathbf{x}}) \geq \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}\|^2. \quad (12.15)$$

由于关系 $\bar{\mathbf{y}} \in \text{dom}(G)$ 等价于 $-\bar{\mathbf{y}} \in \text{dom}(g^*)$, 因此有

$$g^*(-\bar{\mathbf{y}}) = \max_{\mathbf{z} \in \mathbb{V}} \{ \langle -\bar{\mathbf{y}}, \mathbf{z} \rangle - g(\mathbf{z}) \} = \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{V}} \{ g(\mathbf{z}) + \langle \bar{\mathbf{y}}, \mathbf{z} \rangle \} = \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{V}} s(\mathbf{z}) > -\infty.$$

设 $\varepsilon > 0$. 则存在 $\bar{\mathbf{z}}_\varepsilon$ 使得

$$s(\bar{\mathbf{z}}_\varepsilon) \leq \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{V}} s(\mathbf{z}) + \varepsilon. \quad (12.16)$$

结合 (12.14), (12.15) 和 (12.16) 式, 对任意 $\mathbf{x} \in \text{dom}(f)$ 和 $\mathbf{z} \in \text{dom}(g)$, 有

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \bar{\mathbf{y}}) - L(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{z}}_\varepsilon; \bar{\mathbf{y}}) = h(\mathbf{x}) - h(\bar{\mathbf{x}}) + s(\mathbf{z}) - s(\bar{\mathbf{z}}_\varepsilon) \geq \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}\|^2 - \varepsilon.$$

特别地, 代入 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, $\mathbf{z} = \mathbf{z}^* \equiv \mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$, 注意到 $L(\mathbf{x}^*, \mathbf{z}^*; \bar{\mathbf{y}}) = f(\mathbf{x}^*) + g(\mathcal{A}(\mathbf{x}^*)) = f_{\text{opt}} = q_{\text{opt}}$ (由定理 12.2), 可得

$$q_{\text{opt}} - L(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{z}}_\varepsilon; \bar{\mathbf{y}}) \geq \frac{\sigma}{2} \|\mathbf{x}^* - \bar{\mathbf{x}}\|^2 - \varepsilon. \quad (12.17)$$

此外, 由对偶目标函数值的定义, 知

$$L(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{z}}_\varepsilon; \bar{\mathbf{y}}) \geq \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}, \mathbf{z} \in \mathbb{V}} L(\mathbf{x}, \mathbf{z}; \bar{\mathbf{y}}) = q(\bar{\mathbf{y}}),$$

进而, 结合 (12.17) 式可得不等式

$$\|\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \frac{2}{\sigma} (q_{\text{opt}} - q(\bar{\mathbf{y}})) + \frac{2}{\sigma} \varepsilon.$$

由于上述不等式对任意 $\varepsilon > 0$ 均成立, 即得所需结果 (不等式 (12.13)). \square

结合引理 12.7 的原始-对偶关系与定理 12.4 中所述的对偶目标函数值序列的收敛速率, 我们可以推导出原始序列到唯一最优解的收敛速率结果.

定理 12.8 (DPG 方法原始序列的 $\mathcal{O}(1/k)$ 收敛速率). 假定假设 12.1 成立, 并设 $\{x^k\}_{k \geq 0}$ 和 $\{y^k\}_{k \geq 0}$ 是由 DPG 方法生成的原始序列和对偶序列, 其中 $L \geq L_F =$

$\frac{\|A\|^2}{\sigma}$. 则对于对偶问题 (12.4) 的任意最优解 y^* 以及 $k \geq 1$, 有

$$\|x^k - x^*\|^2 \leq \frac{L\|y^0 - y^*\|^2}{\sigma k}. \quad (12.18)$$

证明: 在引理 12.7 中取 $\bar{y} = y^k$, 由 \bar{x} 的定义 (方程 (12.12)) 可得 $\bar{x} = x^k$, 因此 (12.13) 式变为

$$\|x^k - x^*\|^2 \leq \frac{2}{\sigma}(q_{\text{opt}} - q(y^k)),$$

结合定理 12.4, 即得所需结果. \square

12.3 快速对偶近端梯度法

DPG 方法在对偶问题上使用近端梯度法。或者，我们也可以在原问题 (12.4) 上使用 FISTA 方法（见第 10.7 节）。该方法的对偶表述如下。

快速对偶近端梯度 (FDPG) 方法—对偶表述

- **初始化:** 取 $L \geq L_F = \frac{\|A\|^2}{\sigma}$, $\mathbf{w}^0 = \mathbf{y}^0 \in \mathbb{E}$, $t_0 = 1$ 。
- **一般步骤 ($k \geq 0$):**
 1. $\mathbf{y}^{k+1} = \text{prox}_{\frac{1}{L}G}(\mathbf{w}^k - \frac{1}{L}\nabla F(\mathbf{w}^k));$
 2. $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2};$
 3. $\mathbf{w}^{k+1} = \mathbf{y}^{k+1} + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}}\right)(\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k).$

由于这正是在对偶问题上使用的 FISTA 方法, 我们可以引用定理 10.34 并获得关于对偶目标函数值的收敛结果。

定理 12.9 (定理 12.9). 假定假设 12.1 成立, 且 $\{\mathbf{y}^k\}_{k \geq 0}$ 是由 FDPG 方法生成的序列, 其中 $L \geq L_F = \frac{\|A\|^2}{\sigma}$. 则对于问题 (12.4) 的任意最优解 \mathbf{y}^* 以及 $k \geq 1$, 有

$$q_{\text{opt}} - q(\mathbf{y}^k) \leq \frac{2L\|\mathbf{y}^0 - \mathbf{y}^*\|^2}{(k+1)^2}.$$

通过引理 12.5, 取 $\mathbf{v} = \mathbf{w}^k$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^{k+1}$, 以及 $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, 我们可以得到 FDPG 方法的步骤 (a), 即

$$\mathbf{y}^{k+1} = \text{prox}_{\frac{1}{L}G} \left(\mathbf{w}^k - \frac{1}{L}\nabla F(\mathbf{w}^k) \right),$$

等价地可写为

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^k &= \underset{\mathbf{u}}{\text{argmax}} \{ \langle \mathbf{u}, \mathcal{A}^T(\mathbf{w}^k) \rangle - f(\mathbf{u}) \}, \\ \mathbf{y}^{k+1} &= \mathbf{w}^k - \frac{1}{L}\mathcal{A}(\mathbf{u}^k) + \frac{1}{L}\text{prox}_{Lg}(\mathcal{A}(\mathbf{u}^k) - L\mathbf{w}^k). \end{aligned}$$

因此, 我们可以给出该方法的原始表示。

快速对偶近端梯度 (FDPG) 方法—原始表示

- 初始化: 取 $L \geq L_F = \frac{\|A\|^2}{\sigma}$, $\mathbf{w}^0 = \mathbf{y}^0 \in \mathbb{V}$, $t_0 = 1$.
- 一般步骤 ($k \geq 0$):
 1. $\mathbf{u}^k = \operatorname{argmax}_{\mathbf{u}} \{ \langle \mathbf{u}, \mathcal{A}^T(\mathbf{w}^k) \rangle - f(\mathbf{u}) \}$;
 2. $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{w}^k - \frac{1}{L} \mathcal{A}(\mathbf{u}^k) + \frac{1}{L} \operatorname{prox}_{Lg}(\mathcal{A}(\mathbf{u}^k) - L\mathbf{w}^k)$;
 3. $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
 4. $\mathbf{w}^{k+1} = \mathbf{y}^{k+1} + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}} \right) (\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k)$.

我们将关注的原始序列实际上并非由 FDPG 方法的步骤计算得到。收敛性结果将证明的原始序列定义为

$$\mathbf{x}^k = \operatorname{argmax}_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \{ \langle \mathbf{x}, \mathcal{A}^T(\mathbf{y}^k) \rangle - f(\mathbf{x}) \}. \quad (12.19)$$

关于原始序列的收敛性结果如下, 其证明几乎完全重复定理 12.8 的证明。

定理 12.10 (FDPG 方法原始序列的 $\mathcal{O}(1/k^2)$ 收敛性). 假定假设 12.1 成立, 且设 $\{\mathbf{y}^k\}_{k \geq 0}$ 是由 FDPG 方法生成的序列, 其中 $L \geq L_F = \frac{\|A\|^2}{\sigma}$ 。令 $\{\mathbf{x}^k\}_{k \geq 0}$ 为由 (12.19) 定义的序列。则对于对偶问题 (12.4) 的任意最优解 \mathbf{y}^* 以及 $k \geq 1$, 有

$$\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \frac{4L \|\mathbf{y}^0 - \mathbf{y}^*\|^2}{\sigma(k+1)^2}.$$

证明: 在引理 12.7 中取 $\bar{y} = y^k$, 由 \bar{x} 的定义 (方程 (12.12)) 可得 $\bar{x} = x^k$, 因此 (12.13) 式可写为

$$\|x^k - x^*\|^2 \leq \frac{2}{\sigma} (q_{\text{opt}} - q(y^k)),$$

将其与定理 12.9 结合, 即得所需结果。 □

12.4 示例 I

12.4.1 多面体集合上的正交投影

设

$$S = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{A}\mathbf{x} \leq \mathbf{b} \},$$

其中 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$ 。我们假设 S 是非空的。任取 $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, \mathbf{d} 到 S 的正交投影是如下问题的唯一最优解:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|^2 : \mathbf{A}\mathbf{x} \leq \mathbf{b} \right\}. \quad (12.20)$$

问题 (12.20) 符合模型 (12.1), 其中 $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$, $\mathbb{V} = \mathbb{R}^p$, $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|^2$,

$$g(\mathbf{z}) = \delta_{\text{Box}(-\infty, \mathbf{b}]}(\mathbf{z}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{z} \leq \mathbf{b}, \\ \infty, & \text{其他}, \end{cases}$$

且 $\mathcal{A}(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{A}\mathbf{x}$ 。我们有以下结论:

- 对任意 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$, $\arg \max_{\mathbf{x}} \{\langle \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x})\} = \mathbf{v} + \mathbf{d}$;
- $\|\mathcal{A}\| = \|\mathbf{A}\|_{2,2}$;
- $\sigma = 1$;
- 对任意 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$, $\mathcal{A}^T(\mathbf{y}) = \mathbf{A}^T \mathbf{y}$;
- $\text{prox}_{Lg}(\mathbf{z}) = P_{\text{Box}(-\infty, \mathbf{b}]}(\mathbf{z}) = \min\{\mathbf{z}, \mathbf{b}\}$, 其中 $\min\{\mathbf{z}, \mathbf{b}\}$ 是分量为 $\min\{z_i, b_i\}$ ($i = 1, \dots, p$) 的向量。

1. 证明: 对任意 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$, $\arg \max_{\mathbf{x}} \{\langle \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x})\} = \mathbf{v} + \mathbf{d}$ 。考虑函数:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x}) = \mathbf{v}^T \mathbf{x} - \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|^2,$$

对 \mathbf{x} 求梯度得

$$\nabla \varphi(\mathbf{x}) = \mathbf{v} - (\mathbf{x} - \mathbf{d}) = \mathbf{v} + \mathbf{d} - \mathbf{x},$$

令梯度为零:

$$\mathbf{v} + \mathbf{d} - \mathbf{x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{x} = \mathbf{v} + \mathbf{d}.$$

由于 $f(\mathbf{x})$ 是严格凸函数, 因此该点为唯一最大值点, 即

$$\arg \max_{\mathbf{x}} \{\langle \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x})\} = \mathbf{v} + \mathbf{d}.$$

2. 证明: 伴随算子 \mathcal{A}^T 的矩阵表示

设线性算子 $\mathcal{A} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ 定义为 $\mathcal{A}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x}$, 其中 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times n}$, 其伴随算子 $\mathcal{A}^T : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^n$ 由下式定义:

$$\langle \mathbf{y}, \mathcal{A}(\mathbf{x}) \rangle = \langle \mathcal{A}^T(\mathbf{y}), \mathbf{x} \rangle \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^p.$$

将 $\mathcal{A}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x}$ 代入上式可得

$$\langle \mathcal{A}^T(\mathbf{y}), \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{y}, \mathbf{A}\mathbf{x} \rangle = \mathbf{y}^T (\mathbf{A}\mathbf{x}) = (\mathbf{A}^T \mathbf{y})^T \mathbf{x} = \langle \mathbf{A}^T \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle.$$

由于上式对所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$ 都成立, 则

$$\mathcal{A}^T(\mathbf{y}) = \mathbf{A}^T \mathbf{y}.$$

现假设有两个算子 $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2 : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^n$ 满足

$$\langle y, \mathcal{A}(x) \rangle = \langle \mathcal{A}_1(y), x \rangle = \langle \mathcal{A}_2(y), x \rangle, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}^p.$$

则对每个固定的 $y \in \mathbb{R}^p$, 有

$$\langle \mathcal{A}_1(y) - \mathcal{A}_2(y), x \rangle = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

特别地, 取 $x = \mathcal{A}_1(y) - \mathcal{A}_2(y)$, 得

$$\|\mathcal{A}_1(y) - \mathcal{A}_2(y)\|^2 = 0,$$

故 $\mathcal{A}(y) = \mathcal{A}_2(y)$ 。由于该式对所有 $y \in \mathbb{R}^p$ 都成立, 所以 $\mathcal{A}_1 = \mathcal{A}_2$, 因而伴随算子唯一。

3. 证明: $\text{prox}_{Lg}(z) = P_{\text{Box}(-\infty, b]}(z) = \min\{z, b\}$ 。

首先, proximal 算子定义为:

$$\text{prox}_{Lg}(u) = \arg \min_z \left\{ g(z) + \frac{1}{2L} \|z - u\|^2 \right\}$$

代入 $g(z)$: 若 $z \not\leq b$, 则 $g(z) = +\infty$, 不会是最小值点, 所以只考虑 $z \leq b$, 此时 $g(z) = 0$ 。于是问题简化为:

$$\text{prox}_{Lg}(u) = \arg \min_{z \leq b} \frac{1}{2L} \|z - u\|^2$$

即:

$$\text{prox}_{Lg}(u) = \arg \min_{z \leq b} \|z - u\|^2$$

最小化 $\|z - u\|^2$ 且满足 $z \leq b$ 等价于将 u 投影到集合 $C = \{z \leq b\}$:

$$\text{prox}_{Lg}(u) = P_C(u)$$

因为约束是分量独立的: $z_i \leq b_i$, 所以投影可以分量进行: 对每个 $i = 1, \dots, p$, 有

$$[P_C(u)]_i = \min\{u_i, b_i\}$$

即: 如果 $u_i \leq b_i$, 则保持 u_i ; 如果 $u_i > b_i$, 则取 b_i 。向量形式记作:

$$P_C(u) = \min\{u, b\}$$

其中 \min 是分量取最小。

算法 1 [求解 (12.20) 的 DPG 方法]

- 初始化: $L \geq \|\mathbf{A}\|_{2,2}^2$, $\mathbf{y}^0 \in \mathbb{R}^p$ 。
- 通用步骤 ($k \geq 0$):
 - (a) $\mathbf{x}^k = \mathbf{A}^T \mathbf{y}^k + \mathbf{d}$;
 - (b) $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{y}^k - \frac{1}{L} \mathbf{A} \mathbf{x}^k + \frac{1}{L} \min\{\mathbf{A} \mathbf{x}^k - L \mathbf{y}^k, \mathbf{b}\}$ 。

算法 2 [求解 (12.20) 的 FDPG 方法]

- 初始化: $L \geq \|\mathbf{A}\|_{2,2}^2$, $\mathbf{w}^0 = \mathbf{y}^0 \in \mathbb{R}^p$, $t_0 = 1$ 。
- 通用步骤 ($k \geq 0$):
 - (a) $\mathbf{u}^k = \mathbf{A}^T \mathbf{w}^k + \mathbf{d}$;
 - (b) $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{w}^k - \frac{1}{L} \mathbf{A} \mathbf{u}^k + \frac{1}{L} \min\{\mathbf{A} \mathbf{u}^k - L \mathbf{w}^k, \mathbf{b}\}$;
 - (c) $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
 - (d) $\mathbf{w}^{k+1} = \mathbf{y}^{k+1} + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}}\right) (\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k)$ 。

FDPG 方法的原始序列由 $\mathbf{x}^k = \mathbf{A}^T \mathbf{y}^k + \mathbf{d}$ 给出。

12.4.2 闭凸集交上的正交投影

给定 p 个闭凸集 $C_1, C_2, \dots, C_p \subseteq \mathbb{E}$ 和一点 $\mathbf{d} \in \mathbb{E}$, \mathbf{d} 到交 $\bigcap_{i=1}^p C_i$ 的正交投影是如下问题的最优解:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|^2 : \mathbf{x} \in \bigcap_{i=1}^p C_i \right\}. \quad (12.21)$$

我们假设交 $\bigcap_{i=1}^p C_i$ 非空, 且到每个集合 C_i 的投影是易求解的任务。我们的目标是设计一种求解问题 (12.21) 的方法, 使得每次迭代除基本线性代数运算外, 仅需计算到集合 C_i 的正交投影。

问题 (12.21) 符合模型 (12.1), 其中 $\mathbb{V} = \mathbb{E}^p$, $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|^2$, $g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p) = \sum_{i=1}^p \delta_{C_i}(\mathbf{x}_i)$, 且映射 $\mathcal{A}: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{V}$ 定义为:

$$\mathcal{A}(\mathbf{z}) = \underbrace{(\mathbf{z}, \mathbf{z}, \dots, \mathbf{z})}_{p \text{ 次}}, \quad \forall \mathbf{z} \in \mathbb{E}.$$

我们有以下结论:

- 对任意 $\mathbf{v} \in \mathbb{E}$, $\arg \max_{\mathbf{x}} \{\langle \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x})\} = \mathbf{v} + \mathbf{d}$;
- $\|\mathcal{A}\|^2 = p$;
- $\sigma = 1$;
- 对任意 $\mathbf{y} \in \mathbb{E}^p$, $\mathcal{A}^T(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^p \mathbf{y}_i$;

- 对任意 $\mathbf{v} \in \mathbb{E}^p$, $\text{prox}_{Lg}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_p) = (P_{C_1}(\mathbf{v}_1), P_{C_2}(\mathbf{v}_2), \dots, P_{C_p}(\mathbf{v}_p))$ 。

利用这些结论, 可明确写出求解问题 (12.21) 的 DPG 与 FDPG 方法。

算法 3 [求解 (12.21) 的 DPG 方法]

- 初始化: $L \geq p$, $\mathbf{y}^0 \in \mathbb{E}^p$ 。
- 通用步骤 ($k \geq 0$):
 - (a) $\mathbf{x}^k = \sum_{i=1}^p \mathbf{y}_i^k + \mathbf{d}$;
 - (b) $\mathbf{y}_i^{k+1} = \mathbf{y}_i^k - \frac{1}{L}\mathbf{x}^k + \frac{1}{L}P_{C_i}(\mathbf{x}^k - L\mathbf{y}_i^k)$, $i = 1, 2, \dots, p$ 。

算法 4 [求解 (12.21) 的 FDPG 方法]

- 初始化: $L \geq p$, $\mathbf{w}^0 = \mathbf{y}^0 \in \mathbb{E}^p$, $t_0 = 1$ 。
- 通用步骤 ($k \geq 0$):
 - (a) $\mathbf{u}^k = \sum_{i=1}^p \mathbf{w}_i^k + \mathbf{d}$;
 - (b) $\mathbf{y}_i^{k+1} = \mathbf{w}_i^k - \frac{1}{L}\mathbf{u}^k + \frac{1}{L}P_{C_i}(\mathbf{u}^k - L\mathbf{w}_i^k)$, $i = 1, 2, \dots, p$;
 - (c) $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
 - (d) $\mathbf{w}^{k+1} = \mathbf{y}^{k+1} + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}}\right)(\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k)$ 。

为确保该方法收敛, 需满足假设 12.1, 即我们假设 $\bigcap_{i=1}^p \text{ri}(C_i) \neq \emptyset$ 。FDPG 方法的原始序列由 $\mathbf{x}^k = \sum_{i=1}^p \mathbf{y}_i^k + \mathbf{d}$ 给出。

例 12.11 (再谈多面体集合上的正交投影). 注意: 算法 4 也可用于求解点 $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ 到多面体集合 $C = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{A}\mathbf{x} \leq \mathbf{b}\}$ (其中 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$) 的正交投影。

实际上, C 可表示为如下半空间的交:

$$C = \bigcap_{i=1}^p C_i,$$

其中

$$C_i = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} \leq b_i\}, \quad (12.22)$$

$\mathbf{a}_1^T, \mathbf{a}_2^T, \dots, \mathbf{a}_p^T$ 是矩阵 \mathbf{A} 的行向量。

半空间上的投影运算很简单, 由 (见引理 6.26)

$$P_{C_i}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \frac{[\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i]_+}{\|\mathbf{a}_i\|^2} \mathbf{a}_i$$

给出。

综上, 问题

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|_2^2 : \mathbf{A}\mathbf{x} \leq \mathbf{b} \right\}$$

可通过两种不同的 FDPG 方法求解：第一种是算法 2，第二种是如下算法（即算法 4 在“ C_i 由 (12.22) 定义 ($\forall i \in \{1, 2, \dots, p\}$)”这一情形下的具体化形式)。

算法 5 [求解 (12.20) 的 FDPG 方法 (第二种版本)]

- 初始化: $L \geq p$, $\mathbf{w}^0 = \mathbf{y}^0 \in \mathbb{E}^p$, $t_0 = 1$ 。
- 通用步骤 ($k \geq 0$):
 - (a) $\mathbf{u}^k = \sum_{i=1}^p \mathbf{w}_i^k + \mathbf{d}$;
 - (b) $\mathbf{y}_i^{k+1} = -\frac{1}{L\|\mathbf{a}_i\|^2} [\mathbf{a}_i^T (\mathbf{u}^k - L\mathbf{w}_i^k) - b_i]_+ \mathbf{a}_i$, $i = 1, 2, \dots, p$;
 - (c) $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
 - (d) $\mathbf{w}^{k+1} = \mathbf{y}^{k+1} + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}}\right) (\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k)$ 。

例 12.12 (DPG 与 FDPG 的对比). FDPG 方法的收敛速率为 $O(1/k^2)$ (定理 12.10), 优于 DPG 方法的 $O(1/k)$ 收敛速率 (定理 12.8)。为说明这一理论优势在实际中也成立, 我们考虑将点 $(0.5, 1.9)^T$ 投影到十二边形 (由 12 个半空间交构成的正多边形) 的问题。

取 $L = p = 12$, DPG 与 FDPG 方法的前 10 次迭代结果如图 12.1 所示 (此处使用的是闭凸集交情形下的算法 3 与算法 4, 而非算法 1 与算法 2)。显然, FDPG 方法在 10 次迭代后已能得到投影的良好近似, 而 DPG 方法的结果与所需解仍有较大差距。

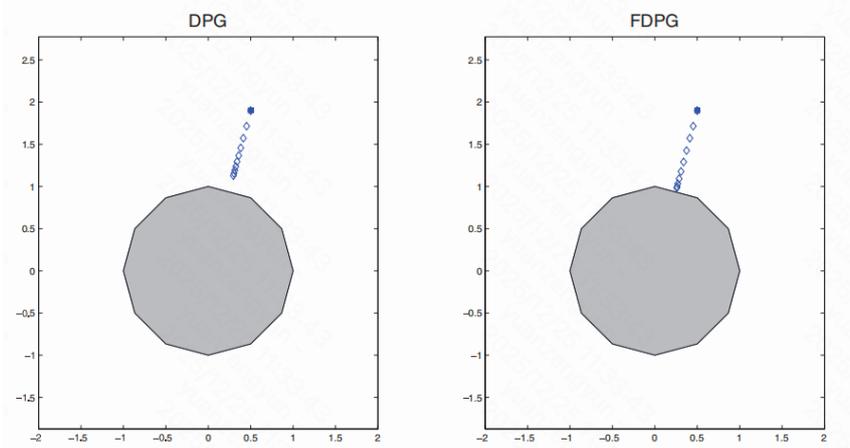


图 12.1 DPG 方法 (算法 3) 与 FDPG 方法 (算法 4/5) 的前 10 次迭代。两种方法中对偶向量 \mathbf{y} 的初始值均为零向量。

12.4.3 一维总变差去噪

在去噪问题中, 给定一个受噪声污染的信号 $\mathbf{d} \in \mathbb{E}$, 我们需要找到另一个向量 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$: 一方面, \mathbf{x} 与 \mathbf{d} 足够接近 (即范数 $\|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|$ 较小); 另一方面, \mathbf{x} 对应的正则项 $R(\mathcal{A}(\mathbf{x}))$ 较小 (其中 $\mathcal{A}: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{V}$ 是线性变换, $R: \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}_+$ 是衡量信号平滑程

度的凸函数)。去噪问题可定义为:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{E}} \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|^2 + R(\mathcal{A}(\mathbf{x})) \right\}. \quad (12.23)$$

在一维总变差去噪问题中, 我们考虑 $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$ 、 $\mathbb{V} = \mathbb{R}^{n-1}$ 、 $\mathcal{A}(\mathbf{x}) = \mathbf{D}\mathbf{x}$ 且 $R(\mathbf{z}) = \lambda \|\mathbf{z}\|_1$ 的情形 (其中 $\lambda > 0$ 是正则化参数, \mathbf{D} 是满足 $\mathbf{D}\mathbf{x} = (x_1 - x_2, x_2 - x_3, \dots, x_{n-1} - x_n)^T$ 的矩阵, $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$)。此时问题 (12.23) 可表示为⁶⁸:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{D}\mathbf{x}\|_1 \right\}, \quad (12.24)$$

或更显式地写为:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|_2^2 + \lambda \sum_{i=1}^{n-1} |x_i - x_{i+1}| \right\}.$$

函数 $\mathbf{x} \mapsto \|\mathbf{D}\mathbf{x}\|_1$ 被称为一维总变差函数, 它是众多总变差函数变体中的一种。问题 (12.24) 符合模型 (12.1), 其中 $\mathbb{E} = \mathbb{R}^n$ 、 $\mathbb{V} = \mathbb{R}^{n-1}$ 、 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|_2^2$ 、 $g(\mathbf{y}) = \lambda \|\mathbf{y}\|_1$ 且 $\mathcal{A}(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{D}\mathbf{x}$ 。为明确写出 DPG 与 FDPG 方法, 我们先给出以下结论:

- 对任意 $\mathbf{v} \in \mathbb{E}$, $\arg \max_{\mathbf{x}} \{\langle \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x})\} = \mathbf{v} + \mathbf{d}$;
- $\|\mathcal{A}\|^2 = \|\mathbf{D}\|_{2,2}^2 \leq 4$;
- $\sigma = 1$;
- 对任意 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n-1}$, $\mathcal{A}^T(\mathbf{y}) = \mathbf{D}^T \mathbf{y}$;
- $\text{prox}_{Lg}(\mathbf{y}) = \mathcal{T}_{\lambda L}(\mathbf{y})$ (\mathcal{T} 为软阈值算子)。

$\|\mathbf{D}\|_{2,2}$ 的上界可通过以下推导得到:

$$\|\mathbf{D}\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2 \leq 2 \sum_{i=1}^{n-1} (x_i^2 + x_{i+1}^2) \leq 4 \|\mathbf{x}\|^2.$$

取 $L = 4$, 对应的 DPG 与 FDPG 方法将在下文给出。

算法 6 [求解 (12.24) 的 DPG 方法]

- 初始化: $\mathbf{y}^0 \in \mathbb{R}^{n-1}$ 。
- 通用步骤 ($k \geq 0$):
 - (a) $\mathbf{x}^k = \mathbf{D}^T \mathbf{y}^k + \mathbf{d}$;
 - (b) $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{y}^k - \frac{1}{4} \mathbf{D}\mathbf{x}^k + \frac{1}{4} \mathcal{T}_{4\lambda}(\mathbf{D}\mathbf{x}^k - 4\mathbf{y}^k)$ 。

⁶⁸由于本章中所有基础空间都是欧氏空间, 且默认假设 (除非另有说明) \mathbb{R}^n 配备点积, 因此 \mathbb{R}^n 是赋予 ℓ_2 范数的空间。

算法 7 [求解 (12.24) 的 FDPG 方法]

- 初始化: $\mathbf{w}^0 = \mathbf{y}^0 \in \mathbb{R}^{n-1}$, $t_0 = 1$ 。
- 通用步骤 ($k \geq 0$):
 - (a) $\mathbf{u}^k = \mathbf{D}^T \mathbf{w}^k + \mathbf{d}$;
 - (b) $\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{w}^k - \frac{1}{4} \mathbf{D} \mathbf{u}^k + \frac{1}{4} \mathcal{T}_{4\lambda} (\mathbf{D} \mathbf{u}^k - 4 \mathbf{w}^k)$;
 - (c) $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
 - (d) $\mathbf{w}^{k+1} = \mathbf{y}^{k+1} + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}} \right) (\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k)$ 。

例 12.13. 考虑 $n = 1000$ 的情形, 干净 (实际未知) 信号为向量 \mathbf{d}^{true} , 它是一个阶跃函数的离散化形式:

$$d_i^{\text{true}} = \begin{cases} 1, & 1 \leq i \leq 250, \\ 3, & 251 \leq i \leq 500, \\ 0, & 501 \leq i \leq 750, \\ 2, & 751 \leq i \leq 1000. \end{cases}$$

观测向量 \mathbf{d} 的构造方式为: 给 \mathbf{d}^{true} 的每个分量独立添加零均值、标准差 0.05 的正态分布噪声。真实信号与含噪信号如图 12.2 所示。

我们以 $\mathbf{y}^0 = \mathbf{0}$ 为初始值, 对算法 6 (DPG) 和算法 7 (FDPG) 各运行 100 次迭代, 得到的信号如图 12.3 所示。显然, FDPG 方法对原始阶跃函数的重构质量远优于 DPG 方法。

这一点也体现在两种方法生成向量的目标函数值中: 100 次迭代后, DPG 与 FDPG 方法对应的目标函数值分别为 9.1667 和 8.4621, 而最优目标函数值为 8.3031。

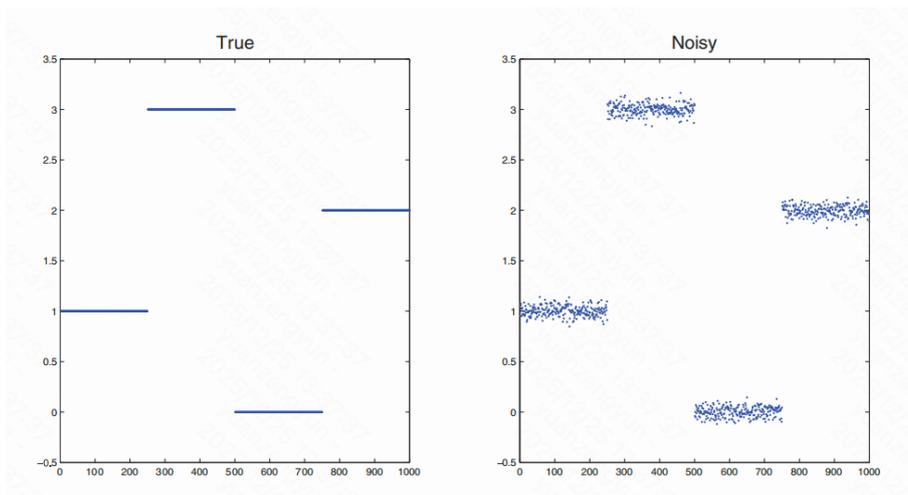


图 12.2 真实信号 (左) 与含噪信号 (右)。

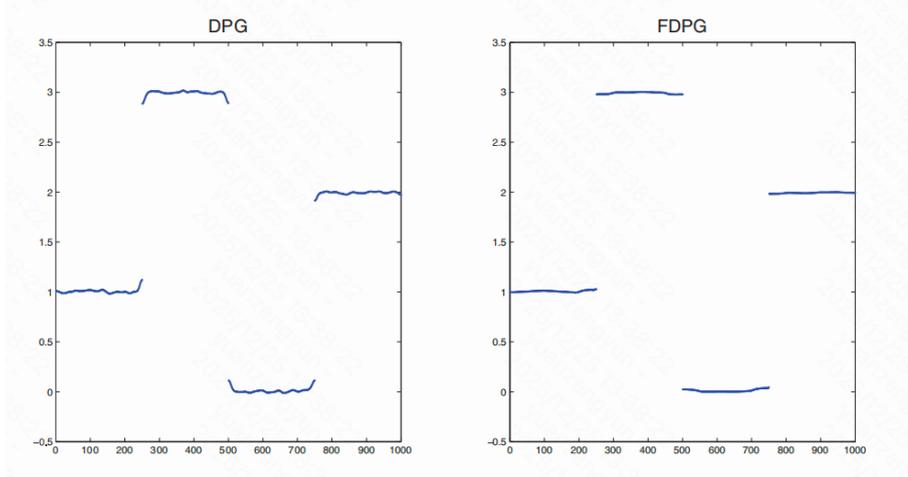


图 12.3 DPG 与 FDPG 方法的结果。

12.4.4 二维总变差去噪

在二维总变差去噪问题中，给定一个含噪声的观测矩阵 $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ，我们需要求解如下问题：

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{m \times n}} \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|_F^2 + \lambda \text{TV}(\mathbf{x}) \right\}. \quad (12.25)$$

二维总变差函数 $\text{TV}(\cdot)$ 有多种可选形式，其中两种常用形式如下：

各向同性总变差：对任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ，定义为

$$\begin{aligned} \text{TV}_I(\mathbf{x}) = & \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^{n-1} \sqrt{(x_{i,j} - x_{i,j+1})^2 + (x_{i,j} - x_{i+1,j})^2} \\ & + \sum_{j=1}^{n-1} |x_{m,j} - x_{m,j+1}| + \sum_{i=1}^{m-1} |x_{i,n} - x_{i+1,n}| \end{aligned} \quad (12.26)$$

以及基于 ℓ_1 的各向异性总变差，定义为

$$\begin{aligned} \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad \text{TV}_{\ell_1}(\mathbf{x}) = & \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^{n-1} \{|x_{i,j} - x_{i,j+1}| + |x_{i,j} - x_{i+1,j}|\} \\ & + \sum_{j=1}^{n-1} |x_{m,j} - x_{m,j+1}| + \sum_{i=1}^{m-1} |x_{i,n} - x_{i+1,n}|. \end{aligned}$$

问题 (12.25) 符合主模型 (12.1)，其中 $\mathbb{E} = \mathbb{R}^{m \times n}$ ， $\mathbb{V} = \mathbb{R}^{m \times (n-1)} \times \mathbb{R}^{(m-1) \times n}$ ， $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{d}\|_F^2$ ，且 $\mathcal{A}(\mathbf{x}) = (\mathbf{p}^x, \mathbf{q}^x)$ （其中 $\mathbf{p}^x \in \mathbb{R}^{m \times (n-1)}$ 、 $\mathbf{q}^x \in \mathbb{R}^{(m-1) \times n}$ 定义为）：

$$p_{i,j}^x = x_{i,j} - x_{i,j+1}, \quad i = 1, 2, \dots, m, j = 1, 2, \dots, n-1,$$

$$q_{i,j}^x = x_{i,j} - x_{i+1,j}, \quad i = 1, 2, \dots, m-1, j = 1, 2, \dots, n.$$

函数 $g: \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$ 在各向同性情形下的形式为:

$$g(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = g_I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \equiv \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^{n-1} \sqrt{p_{i,j}^2 + q_{i,j}^2} + \sum_{j=1}^{n-1} |p_{m,j}| + \sum_{i=1}^{m-1} |q_{i,n}|$$

在各向异性情形下的形式为:

$$g(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = g_{l_1}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \equiv \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n-1} |p_{i,j}| + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^n |q_{i,j}|.$$

由于 g_I 和 g_{l_1} 是绝对值或 l_2 范数的可分, 可利用定理 6.6 (可分函数的邻近算子)、例 6.8 (l_1 范数的邻近算子) 和例 6.19 (欧氏范数的邻近算子) 计算它们的邻近映射。

对于任意 $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^{m \times (n-1)}$ 和 $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^{(m-1) \times n}$, 各向同性情形的邻近映射为:

$$\text{prox}_{\lambda g_I}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = (\tilde{\mathbf{p}}, \tilde{\mathbf{q}}),$$

其中

$$\tilde{p}_{i,j} = \left(1 - \lambda / \max \left\{ \sqrt{p_{i,j}^2 + q_{i,j}^2}, \lambda \right\}\right) p_{i,j}, \quad i = 1, 2, \dots, m-1, j = 1, 2, \dots, n-1,$$

$$\tilde{p}_{m,j} = \mathcal{T}_\lambda(p_{m,j}), \quad j = 1, 2, \dots, n-1,$$

$$\tilde{q}_{i,j} = \left(1 - \lambda / \max \left\{ \sqrt{p_{i,j}^2 + q_{i,j}^2}, \lambda \right\}\right) q_{i,j}, \quad i = 1, 2, \dots, m-1, j = 1, 2, \dots, n-1,$$

$$\tilde{q}_{i,n} = \mathcal{T}_\lambda(q_{i,n}), \quad i = 1, 2, \dots, m-1.$$

各向异性情形的邻近映射为:

$$\text{prox}_{\lambda g_{l_1}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = (\tilde{\mathbf{p}}, \tilde{\mathbf{q}}),$$

其中

$$\tilde{p}_{i,j} = \mathcal{T}_\lambda(p_{i,j}), \quad i = 1, 2, \dots, m, j = 1, 2, \dots, n-1,$$

$$\tilde{q}_{i,j} = \mathcal{T}_\lambda(q_{i,j}), \quad i = 1, 2, \dots, m-1, j = 1, 2, \dots, n.$$

要明确写出求解问题 (12.25) 的 DPG 或 FDPG 方法, 还需确定 $\mathcal{A}^T: \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{E}$ 在 \mathbb{V} 中点处的计算方式。注意到对任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$ 和 $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \in \mathbb{V}$, 有:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}(\mathbf{x}), (\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rangle &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n-1} (x_{i,j} - x_{i,j+1}) p_{i,j} + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^n (x_{i,j} - x_{i+1,j}) q_{i,j} \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n x_{i,j} (p_{i,j} + q_{i,j} - p_{i,j-1} - q_{i-1,j}) \\ &= \langle \mathbf{x}, \mathcal{A}^T(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rangle, \end{aligned}$$

这里我们采用如下约定：

$$p_{i,0} = p_{i,n} = q_{0,j} = q_{m,j} = 0, \quad \forall i = 1, 2, \dots, m, j = 1, 2, \dots, n.$$

结合上述约定，对任意 $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \in \mathbb{V}$ ， $\mathcal{A}^T(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ 的第 (i, j) 分量为：

$$\mathcal{A}^T(\mathbf{p}, \mathbf{q})_{i,j} = p_{i,j} + q_{i,j} - p_{i,j-1} - q_{i-1,j}, \quad i = 1, 2, \dots, m, j = 1, 2, \dots, n.$$

接下来我们计算 $\|\mathcal{A}\|^2$ 的上界，方法与一维情形一致：对任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ，有

$$\begin{aligned} \|\mathcal{A}(\mathbf{x})\|^2 &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n-1} (x_{i,j} - x_{i,j+1})^2 + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^n (x_{i,j} - x_{i+1,j})^2 \\ &\leq 2 \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n-1} (x_{i,j}^2 + x_{i,j+1}^2) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^n (x_{i,j}^2 + x_{i+1,j}^2) \\ &\leq 8 \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n x_{i,j}^2. \end{aligned}$$

因此， $\|\mathcal{A}\|^2 \leq 8$ 。下面我们明确写出二维各向异性总变差问题（即取 $g = g_{l_1}$ 的问题 (12.25)）的 FDPG 方法，步长取 $L = 8$ 。

算法 8 [求解取 $g = \lambda \text{TV}_{l_1}$ 的 (12.25) 的 FDPG 方法]

• 初始化： $\tilde{\mathbf{p}}^0 = \mathbf{p}^0 \in \mathbb{R}^{m \times (n-1)}$ ， $\tilde{\mathbf{q}}^0 = \mathbf{q}^0 \in \mathbb{R}^{(m-1) \times n}$ ， $t_0 = 1$ 。

• 通用步骤 ($k \geq 0$)：

(a) 计算 $\mathbf{u}^k \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ，其第 (i, j) 分量为：

$$u_{i,j}^k = \tilde{p}_{i,j}^k + \tilde{q}_{i,j}^k - \tilde{p}_{i,j-1}^k - \tilde{q}_{i-1,j}^k + d_{i,j};$$

(b) 设定 $(\mathbf{p}^{k+1}, \mathbf{q}^{k+1})$ ：

$$p_{i,j}^{k+1} = \tilde{p}_{i,j}^k - \frac{1}{8}(u_{i,j}^k - u_{i,j+1}^k) + \frac{1}{8}\mathcal{T}_{8\lambda}(u_{i,j}^k - u_{i,j+1}^k - 8\tilde{p}_{i,j}^k),$$

$$q_{i,j}^{k+1} = \tilde{q}_{i,j}^k - \frac{1}{8}(u_{i,j}^k - u_{i+1,j}^k) + \frac{1}{8}\mathcal{T}_{8\lambda}(u_{i,j}^k - u_{i+1,j}^k - 8\tilde{q}_{i,j}^k);$$

(c) 计算步长参数：

$$t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2};$$

(d) 更新对偶变量：

$$(\tilde{\mathbf{p}}^{k+1}, \tilde{\mathbf{q}}^{k+1}) = (\mathbf{p}^{k+1}, \mathbf{q}^{k+1}) + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}} \right) (\mathbf{p}^{k+1} - \mathbf{p}^k, \mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k).$$

12.5 对偶块近端梯度法

12.5.1 预备知识

在本节中，我们将考虑如下问题：

$$\min_{x \in \mathbb{E}} \left\{ f(x) + \sum_{i=1}^p g_i(x) \right\}, \quad (12.27)$$

其中满足以下假设：

假设 12.14.

- (A) $f : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, +\infty]$ 是 proper 闭且 σ -强凸函数 ($\sigma > 0$)；
- (B) 对任意 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$, $g_i : \mathbb{E} \rightarrow (-\infty, +\infty]$ 是 proper 闭凸函数；
- (C) $ri(\text{dom}(f)) \cap (\bigcap_{i=1}^p ri(\text{dom}(g_i))) \neq \emptyset$.

问题 (12.27) 实际上是 12.4.2 节中讨论的投影问题的推广。我们可以采用与那里类似的观察,注意到问题 (12.27) 符合模型 (12.1),其中: $\mathbb{V} = \mathbb{E}^p, g(x_1, x_2, \dots, x_p) = \sum_{i=1}^p g_i(x_i)$, 线性变换 $A : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{V}$ 定义为: 对任意 $z \in \mathbb{E}$,

$$A(z) = \underbrace{(z, z, \dots, z)}_p$$

注意到以下性质：

- $\|A\|^2 = p$;
- 对任意 $y \in \mathbb{E}^p$, 有 $A^T(y) = \sum_{i=1}^p y_i$;
- 对任意 $v_i \in E$ ($i = 1, 2, \dots, p$), 有

$$\text{prox}_{L_g}(v_1, v_2, \dots, v_p) = (\text{prox}_{L_g}(v_1), \text{prox}_{L_g}(v_2), \dots, \text{prox}_{L_g}(v_p)).$$

我们可以显式地写出 $L = \frac{\|A\|^2}{\sigma} = \frac{p}{\sigma}$ 时的快速对偶近端梯度法 (FDPG)。

算法 9 [求解 (12.27) 的快速对偶近端梯度法 (FDPG)]

- 初始化: $w^0 = y^0 \in \mathbb{E}^p, t_0 = 1$;
- 迭代步骤: ($k \geq 0$):
 1. 计算 $u^k = \text{argmax}_{u \in \mathbb{E}} \{ \langle u, \sum_{i=1}^p w_i^k \rangle - f(u) \}$;
 2. 对 $i = 1, 2, \dots, p$, 更新 $y_i^{k+1} = w_i^k - \frac{\sigma}{p} u^k + \frac{\sigma}{p} \text{prox}_{\frac{p}{\sigma} g_i} (u^k - \frac{p}{\sigma} w_i^k)$;
 3. 计算 $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
 4. 更新 $w^{k+1} = y^{k+1} + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}} \right) (y^{k+1} - y^k)$ 。

原始序列定义为:

$$x^k = \operatorname{argmax}_{x \in \mathbb{E}} \left\{ \langle x, \sum_{i=1}^p y_i^k \rangle - f(x) \right\}.$$

12.5.2 对偶块近端梯度法

注意到算法 9 中每次迭代所采用的步长为 $\frac{\sigma}{p}$, 该步长注意到当块数 p 较大时, 该步长可能会极小。因此一个自然的问题是: 是否可能定义一种基于对偶的方法, 其步长独立于维度? 为此, 我们考虑问题 (12.27) 的对偶问题, 即问题 (12.4)。结合 $A^T(y) = \sum_{i=1}^p y_i$ 以及 $g^*(y) = \sum_{i=1}^p g_i^*(y_i)$ 这一事实 (见定理 4.12), 可得到对偶问题的如下形式:

$$q_{opt} = \max_{y \in \mathbb{E}^p} \left\{ -f^* \left(\sum_{i=1}^p y_i \right) - \sum_{i=1}^p \underbrace{g_i^*(-y_i)}_{G_i(y_i)} \right\}. \quad (12.28)$$

令 $G_i(y_i) \equiv g_i^*(-y_i)$ 。由于式 (12.28) 中的非光滑部分具有块分离性, 我们可以在对偶问题 (的极小化形式) 上采用块近端梯度法 (见第 11 章)。假设当前迭代点为 $y^k = (y_1^k, y_2^k, \dots, y_p^k)$, 在块近端梯度法的每次迭代中, 我们按照某种规则选取一个索引 i , 仅对第 i 块执行近端梯度步, 该块的更新公式为:

$$y_i^{k+1} = \operatorname{prox}_{\sigma G_i} \left(y_i^k - \sigma \nabla f^* \left(\sum_{j=1}^p y_j^k \right) \right).$$

步长选择为 σ , 因为 f 是 proper 闭且 σ -强凸函数, 因此根据共轭对应定理 (定理 5.26), f^* 是 $\frac{1}{\sigma}$ -光滑的, 由此可推出函数 $(y_1, y_2, \dots, y_p) \mapsto f^*(\sum_{i=1}^p y_i)$ 的块 Lipschitz 常数为 $\frac{1}{\sigma}$ 。因此, 可选取常数步长 σ 。下面我们给出对偶块近端梯度法 (DBPG) 的对偶表示。

对偶块近端梯度法 (DBPG) - 对偶表示

- 初始化: 选取 $y^0 = (y_1^0, y_2^0, \dots, y_p^0) \in \mathbb{E}^p$;
- 迭代步骤 ($k \geq 0$):
 - 选取索引 $i_k \in \{1, 2, \dots, p\}$;
 - 按如下规则更新对偶变量:

$$y_j^{k+1} = \begin{cases} \operatorname{prox}_{\sigma G_{i_k}} \left(y_{i_k}^k - \sigma \nabla f^* \left(\sum_{j=1}^p y_j^k \right) \right), & j = i_k, \\ y_j^k, & j \neq i_k. \end{cases}$$

我们可以利用引理 12.5 得到对偶块近端梯度法 (DBPG) 一般步骤的原始表

示。

引理 12.15. 设函数 f 与 g_1, g_2, \dots, g_p 满足假设 12.14 中的条件 (A) 与 (B)。任取 $i \in \{1, 2, \dots, p\}$, 令 $G_i(y_i) \equiv g_i^*(-y_i)$, 且设 $L > 0$ 。则 $y_i \in \mathbb{E}$ 与 $v \in \mathbb{E}^p$ 满足关系式

$$y_i = \text{prox}_{\frac{1}{L}G_i} \left(v_i - \frac{1}{L} \nabla f^* \left(\sum_{j=1}^p v_j \right) \right)$$

成立的充要条件

$$y_i = v_i - \frac{1}{L} \tilde{x} + \frac{1}{L} \text{prox}_{Lg_i} (\tilde{x} - Lv_i),$$

其中

$$\tilde{x} = \operatorname{argmax}_{x \in \mathbb{E}} \left\{ \langle x, \sum_{j=1}^p v_j \rangle - f(x) \right\}.$$

证明: 令 $\mathbb{V} = \mathbb{E}$ 、 $A = I$ 、 $b = \sum_{j \neq i} v_j$ 、 $g = g_i$ 、 $y = y_i$ 以及 $v = v_i$, 代入引理 12.5 即可得证。 \square

利用引理 12.15, 我们可以给出对偶块近端梯度法 (DBPG) 的原始表示形式。

对偶块近端梯度法 (DBPG) —— 原始表示形式

- **初始化:** 选取 $y^0 = (y_1^0, y_2^0, \dots, y_p^0) \in \mathbb{E}^p$
- **迭代步骤** ($k \geq 0$):
 1. 选取索引 $i_k \in \{1, 2, \dots, p\}$;
 2. 计算 $x^k = \operatorname{argmax}_{x \in \mathbb{E}} \left\{ \langle x, \sum_{j=1}^p y_j^k \rangle - f(x) \right\}$;
 3. 按如下规则更新变量:

$$y_j^{k+1} = \begin{cases} y_{i_k}^k - \sigma x^k + \sigma \operatorname{prox}_{g_{i_k}/\sigma} \left(x^k - \frac{y_{i_k}^k}{\sigma} \right), & j = i_k, \\ y_j^k, & j \neq i_k \end{cases}$$

需要注意的是, 所推导的对偶块近端梯度法 (DBPG) 是一种“函数分解方法”。该方法在每次迭代中仅需利用函数 g_1, g_2, \dots, g_p 中的一个, 并且涉及函数 f 的计算 (步骤 (b)) 不依赖于任何其他函数。因此我们可以得出结论: 在该情形下, 对偶空间中的变量分解方法对应于原始空间中的函数分解方法。

上述对偶块近端梯度法 (DBPG) 描述中所欠缺的内容, 是索引选取策略, 即每次迭代中选取 i_k 所遵循的规则。下文我们将介绍两种常见的选取方式。

- 循环选取策略: $i_k = (k \bmod p) + 1$
- 随机选取策略: i_k 从集合 $\{1, 2, \dots, p\}$ 中按照均匀分布随机选取。

12.5.3 收敛性分析

DBPG 方法的收敛速率是第 11 章中块近端梯度法已建立的收敛速率结合引理 12.7 中提出的原始-对偶关系的简单推论。

循环块顺序

回顾: 由于模型 (12.27) 是一般模型 (12.1) 的特例 (其中 $\mathbb{V} = \mathbb{E}^p$, 映射 $A: z \mapsto (z, z, \dots, z)$, 函数 $g(x) = \sum_{i=1}^p g_i(x_i)$), 因此在假设 12.14 成立的条件下, 强对偶定理 (定理 12.2) 成立, 进而对偶问题 (12.28) 的最优解集非空。我们记对偶最优解集为 Λ^* 。为给出循环索引选取策略下对偶块近端梯度法 (DBPG) 的收敛性结果, 需要引入如下假设。

假设 12.16. 对任意 $\alpha > 0$, 存在常数 $R_\alpha > 0$, 使得

$$\max_{y, y^* \in \mathbb{E}^p} \{\|y - y^*\| \mid q(y) \geq \alpha, y^* \in \Lambda^*\} \leq R_\alpha,$$

其中

$$q(y) \equiv -f^* \left(\sum_{i=1}^p y_i \right) - \sum_{i=1}^p g_i^*(-y_i).$$

定理 12.17 (循环块顺序对偶块近端梯度法的 $O(1/k)$ 收敛速率). 设假设 12.14 与假设 12.16 成立。令 $\{x^k\}_{k \geq 0}$ 与 $\{y^k\}_{k \geq 0}$ 分别为采用循环索引选取策略的对偶块近端梯度法 (DBPG) 求解问题 (12.27) 所生成的原始序列与对偶序列。则对任意 $k \geq 2$, 有

$$(a) \quad q_{\text{opt}} - q(y^{pk}) \leq \max \left\{ \left(\frac{1}{2} \right)^{\frac{k-1}{2}} (q_{\text{opt}} - q(y^0)), \frac{8p(p+1)^2 R^2}{\sigma(k-1)} \right\};$$

$$(b) \quad \|x^{pk} - x^*\|^2 \leq \frac{2}{\sigma} \max \left\{ \left(\frac{1}{2} \right)^{\frac{k-1}{2}} (q_{\text{opt}} - q(y^0)), \frac{8p(p+1)^2 R^2}{\sigma(k-1)} \right\}.$$

上述两式中, $R = R_{q(y^0)}$ 。

证明: (a) 本结论可通过调用定理 11.18 证得, 其中需注意式 (11.24) 中的常数满足

$$L_{\max} = L_{\min} = \frac{1}{\sigma}, \quad L_f = \frac{p}{\sigma}.$$

(b) 根据原始 - 对偶关系 (引理 12.7), 有

$$\|x^{pk} - x^*\|^2 \leq \frac{2}{\sigma} (q_{\text{opt}} - q(y^{pk})).$$

将此式与结论 (a) 相结合, 即可证得结论 (b) 中的不等式。□

随机块顺序

结合定理 11.25 给出的随机块近端梯度法 (RBPG) 的 $O(1/k)$ 收敛速率, 以及原始 - 对偶关系 (引理 12.7), 可直接得到随机索引选取策略下对偶块近端梯度法 (DBPG) 的收敛性结果。与 11.5 节的处理方式一致, 我们将采用随机变量的记号。 $\xi_k \equiv \{i_0, i_1, \dots, i_k\}$ 注: 在随机选取的情形下, 我们不要求假设 12.16 成立。

定理 12.18 (随机块顺序对偶块近端梯度法的 $O(1/k)$ 收敛速率). 设假设 12.14 成立。令 $\{x^k\}_{k \geq 0}$ 与 $\{y^k\}_{k \geq 0}$ 分别为采用随机索引选取策略的对偶块近端梯度法 (DBPG) 所生成的原始序列与对偶序列。则对任意 $k \geq 0$, 有

$$(a) \quad q_{\text{opt}} - \mathbb{E}_{\xi_k} (q(y^{k+1})) \leq \frac{p}{p+k+1} \left(\frac{1}{2\sigma} \|y^0 - y^*\|^2 + q_{\text{opt}} - q(y^0) \right);$$

$$(b) \quad \mathbb{E}_{\xi_k} \|x^{k+1} - x^*\|^2 \leq \frac{2p}{\sigma(p+k+1)} \left(\frac{1}{2\sigma} \|y^0 - y^*\|^2 + q_{\text{opt}} - q(y^0) \right).$$

12.5.4 双块情形下的加速方法

确定性与随机性对偶块近端梯度法 (DBPG) 均非加速算法, 因此仅能证明其收敛速率为 $O(1/k)$ 。当 $p = 2$ 时, 我们将证明可通过一个简单的技巧, 推导得到加速对偶块近端梯度法。注意到, 当 $p = 2$ 时, 该模型等价于

$$f_{\text{opt}} = \min_{x \in \mathbb{E}} \{F(x) \equiv f(x) + g_1(x) + g_2(x)\}. \quad (12.29)$$

我们可将该问题重写为

$$\min_{x \in \mathbb{E}} \left\{ \tilde{f}(x) + g_2(x) \right\}, \quad (12.30)$$

其中 $\tilde{f} = f + g_1$ 。若假设 12.14 在 $p = 2$ 时成立, 则 \tilde{f} 是 proper 闭且 σ -强凸的, g_2 是 proper 闭且凸的, 并且正则性条件 $ri(\text{dom}(\tilde{f})) \cap ri(\text{dom}(g_2)) \neq \emptyset$ 成立。这表明, 当取 $f = \tilde{f}$ 、 $g = g_2$ 且 $A = I$ 时, 假设 12.1 成立。此时我们可定义加速对偶块近端梯度法 (ADBPG), 该算法即为步长取 σ 时, 对取 $f = \tilde{f}$ 、 $g = g_2$ 且 $A = I$ 的模型 (12.1) 应用 FDPG 方法所得到的算法。

加速对偶块近端梯度法 (ADBPG)

- 初始化: $w^0 = y^0 \in \mathbb{E}$, $t_0 = 1$
- 迭代步骤 ($k \geq 0$):
 1. $u^k = \operatorname{argmax}_u \{ \langle u, w^k \rangle - f(u) - g_1(u) \}$;
 2. $y^{k+1} = w^k - \sigma u^k + \sigma \operatorname{prox}_{g_2/\sigma} \left(u^k - \frac{w^k}{\sigma} \right)$;
 3. $t_{k+1} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}}{2}$;
 4. $w^{k+1} = y^{k+1} + \left(\frac{t_k - 1}{t_{k+1}} \right) (y^{k+1} - y^k)$.

定理 12.10 的一个直接推论, 是下述关于加速对偶块近端梯度法 (ADBPG) 收敛速率的结论。

定理 12.19 (加速对偶块近端梯度法的 $O(1/k^2)$ 收敛速率). 设假设 12.14 在 $p = 2$ 时成立, $\{y^k\}_{k \geq 0}$ 为加速对偶块近端梯度法 (ADBPG) 生成的序列。则对对偶问题

$$\min_{y \in \mathbb{E}} \{f^*(y) + g_2^*(-y)\}$$

的任意最优解 y^* 以及任意 $k \geq 1$, 成立

$$\|x^k - x^*\|^2 \leq \frac{4 \|y^0 - y^*\|^2}{\sigma^2 (k+1)^2},$$

其中 $x^k = \operatorname{argmax}_x \{ \langle x, y^k \rangle - f(x) - g_1(x) \}$ 。

注 12.20. 当 $f(x) = \frac{1}{2} \|x - d\|^2$ (其中 $d \in \mathbb{E}$) 时, 加速对偶块近端梯度法 (ADBPG) 的步骤 (a) 可表示为邻近算子的计算形式:

$$u^k = \operatorname{prox}_{g_1} (d + w^k).$$

注 12.21. 注意到加速对偶块近端梯度法 (ADBPG) 并非完全的函数分解方法, 这是因为步骤 (a) 的计算同时涉及函数 f 与 g_1 , 但该方法仍实现了 g_1 与 g_2 的分离。该方法具有两个主要特点: 第一, 它是一种加速算法; 第二, 该方法采用的步长为 σ , 而另一类函数分解近端梯度法 (FDPG) 即算法 9 所采用的步长为 $\frac{\sigma}{2}$ 。