近似点梯度法

文再文

北京大学北京国际数学研究中心

教材《最优化：建模、算法与理论》配套电子教案

http://bicmr.pku.edu.cn/~wenzw/optbook.html

致谢：本教案由陈乐恒、朱桢源协助准备

提纲

1. 近似点梯度法
2. 应用
   - LASSO问题
   - 低秩矩阵恢复
   - 小波模型求解
3. 收敛性分析
4. 拓展
   - 非凸函数的近似点梯度法
   - 镜像下降算法
   - 惯性近似点梯度算法
   - 条件梯度法

复合优化问题

我们将考虑如下复合优化问题：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = f(x) + h(x)$$

- 函数f为可微函数，其定义域$\mathbf{dom}\, f = \mathbb{R}^n$
- 函数h为凸函数，可以是非光滑的，并且邻近算子容易计算
- LASSO问题：$f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2$，$h(x) = \mu\|x\|_1$
- 次梯度法计算的复杂度：$\mathcal{O}(1/\sqrt{k})$

是否可以设计复杂度为$\mathcal{O}(1/k)$的算法?

邻近算子：回顾

定义

对于一个凸函数h，定义它的**邻近算子**为

$$\operatorname{prox}_h(x) = \operatorname*{argmin}_u \left(h(u) + \frac{1}{2}\|u - x\|_2^2 \right)$$

例子

- ℓ_1 范数: $h(x) = \|x\|_1, \quad \operatorname{prox}_{th}(x) = \operatorname{sign}(x)\max\{|x| - t, 0\}$
- ℓ_2 范数:$h(x) = \|x\|_2, \quad \operatorname{prox}_{th}(x) = \begin{cases} \left(1 - \frac{t}{\|x\|_2}\right)x, & \|x\|_2 \geqslant t, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases}$
- 二次函数(其中 A 对称正定):
  $h(x) = \frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax + b^{\mathrm{T}}x + c, \quad \operatorname{prox}_{th}(x) = (I + tA)^{-1}(x - tb)$
- 负自然对数的和:
  $h(x) = -\sum_{i=1}^{n} \ln x_i, \quad \operatorname{prox}_{th}(x)_i = \frac{x_i + \sqrt{x_i^2 + 4t}}{2}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$

对于光滑部分f做梯度下降，对于非光滑部分h使用邻近算子，则近似点梯度法的迭代格式为

$$x^{k+1} = \operatorname{prox}_{t_k h}\left(x^k - t_k \nabla f\left(x^k\right)\right) \tag{1}$$

其中 $t_k > 0$ 为每次迭代的步长，它可以是一个常数或者由线搜索得出.

Algorithm 1 近似点梯度法

1: 输入：函数 $f(x), h(x)$, 初始点 x^0.
2: **while** 未达到收敛准则 **do**
3: $\quad x^{k+1} = \operatorname{prox}_{t_k h}\left(x^k - t_k \nabla f\left(x^k\right)\right)$.
4: **end while**

对近似点梯度法的理解

根据定义，(1)式等价于

$$
\begin{aligned}
x^{k+1} &= \arg\min_u \left\{ h(u) + \frac{1}{2t_k} \left\| u - x^k + t_k \nabla f\left(x^k\right) \right\|^2 \right\} \\
&= \arg\min_u \left\{ h(u) + f\left(x^k\right) + \nabla f\left(x^k\right)^{\mathrm{T}} \left(u - x^k\right) + \frac{1}{2t_k} \left\| u - x^k \right\|^2 \right\}
\end{aligned}
$$

根据邻近算子与次梯度的关系, 又可以形式地写成

$$
x^{k+1} = x^k - t_k \nabla f\left(x^k\right) - t_k g^k, \quad g^k \in \partial h\left(x^{k+1}\right)
$$

即对光滑部分做显式的梯度下降，关于非光滑部分做隐式的梯度下降.

步长选取

- 当 f 为梯度L-利普希茨连续函数时，可取固定步长 $t_k = t \leqslant \frac{1}{L}$. 当$L$ 未知时可使用线搜索准则

$$f\left(x^{k+1}\right) \leqslant f\left(x^k\right) + \nabla f\left(x^k\right)^{\mathrm{T}}\left(x^{k+1} - x^k\right) + \frac{1}{2t_k}\left\|x^{k+1} - x^k\right\|^2$$

- 利用BB 步长作为 t_k 的初始估计并用非单调线搜索进行校正：

$$\alpha_{\mathrm{BB1}}^k \overset{\text{def}}{=} \frac{\left(s^{k-1}\right)^{\mathrm{T}} y^{k-1}}{\left(y^{k-1}\right)^{\mathrm{T}} y^{k-1}} \quad \text{或} \quad \alpha_{\mathrm{BB2}}^k \overset{\text{def}}{=} \frac{\left(s^{k-1}\right)^{\mathrm{T}} s^{k-1}}{\left(s^{k-1}\right)^{\mathrm{T}} y^{k-1}},$$

其中$s^{k-1} = x^k - x^{k-1}$ 以及 $y^{k-1} = \nabla f\left(x^k\right) - \nabla f\left(x^{k-1}\right)$.

- 可构造如下适用于近似点梯度法的非单调线搜索准则：

$$\psi(x^{k+1}) \leq C^k - \frac{c_1}{2t_k}\|x^{k+1} - x^k\|^2,$$

$c_1 \in (0,1)$ 为正常数. 注意，定义C^k时需要使用整体函数值$\psi(x^k)$.

提纲

1. 近似点梯度法
2. 应用
   - LASSO问题
   - 低秩矩阵恢复
   - 小波模型求解
3. 收敛性分析
4. 拓展
   - 非凸函数的近似点梯度法
   - 镜像下降算法
   - 惯性近似点梯度算法
   - 条件梯度法

考虑用近似点梯度法求解 LASSO 问题

$$\min_x \quad \mu\|x\|_1 + \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2$$

令 $f(x) = \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2, h(x) = \mu\|x\|_1$,则

$$\begin{aligned}\nabla f(x) &= A^{\mathrm{T}}(Ax-b)\\ \operatorname{prox}_{t_k h}(x) &= \operatorname{sign}(x)\max\{|x|-t_k\mu, 0\}\end{aligned}$$

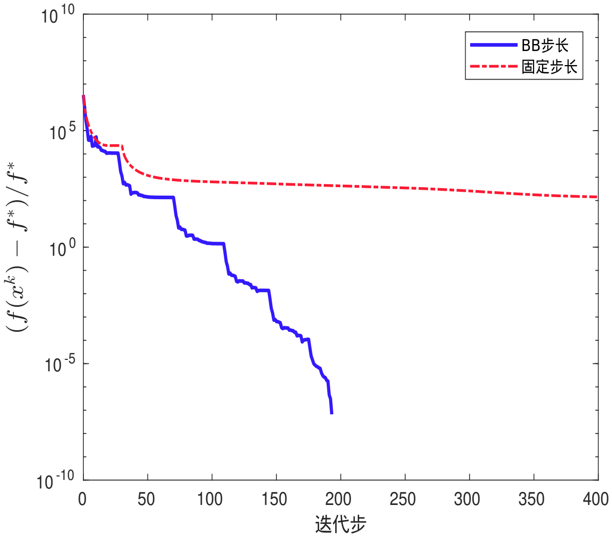
故相应的迭代格式为：

$$\begin{aligned}y^k &= x^k - t_k A^{\mathrm{T}}\left(Ax^k-b\right)\\ x^{k+1} &= \operatorname{sign}\left(y^k\right)\max\left\{\left|y^k\right|-t_k\mu, 0\right\}\end{aligned}$$

即第一步做梯度下降，第二步做收缩

LASSO问题

我们还可以使用BB步长加速收敛



考虑低秩矩阵恢复模型:

$$\min_{X\in\mathbb{R}^{m\times n}} \quad \mu\|X\|_* + \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in\Omega}(X_{ij}-M_{ij})^2$$

其中 M 是想要恢复的低秩矩阵，但是只知道其在下标集 Ω 上的值. 令

$$f(X) = \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in\Omega}(X_{ij}-M_{ij})^2, \quad h(X) = \mu\|X\|_*$$

定义矩阵$P \in \mathbb{R}^{m\times n}$：

$$P_{ij} = \begin{cases} 1, & (i,j)\in\Omega, \\ 0, & \text{其他}, \end{cases}$$

则

$$f(X) = \frac{1}{2}\|P\odot(X-M)\|_F^2$$

进一步可以得到

$$
\begin{aligned}
\nabla f(X) &= P \odot (X - M), \\
\operatorname{prox}_{t_k h}(X) &= U \operatorname{Diag}\left(\max\{|d| - t_k\mu, 0\}\right) V^{\mathrm{T}},
\end{aligned}
$$

其中 $X = U\operatorname{Diag}(d)V^{\mathrm{T}}$ 为矩阵 X 的约化的奇异值分解.

由此可以得到近似点梯度法的迭代格式：

$$
\begin{aligned}
Y^k &= X^k - t_k P \odot \left(X^k - M\right) \\
X^{k+1} &= \operatorname{prox}_{t_k h}\left(Y^k\right)
\end{aligned}
$$

小波模型求解

考虑小波分解模型：

$$\min_{u} \quad \|\lambda \odot (Wu)\|_1 + \frac{1}{2}\|Au - b\|^2$$

其中 W 是紧小波框架算子，即满足$W^{\mathrm{T}}W = I$, 第二项为问题的损失函数.引入 $d = Wu$, 则 $u = W^{\mathrm{T}}d$,，即有合成模型：

$$\min_{d} \quad \|\lambda \odot d\|_1 + \frac{1}{2}\left\|AW^{\mathrm{T}}d - b\right\|^2 \tag{2}$$

此外还有平衡小波模型：

$$\min_{\alpha} \quad \|\lambda \odot \alpha\|_1 + \frac{\kappa}{2}\left\|\left(I - WW^{\mathrm{T}}\right)\alpha\right\|^2 + \frac{1}{2}\left\|AW^{\mathrm{T}}\alpha - b\right\|^2 \tag{3}$$

其中不要求 W是紧框架

小波模型求解

对于合成模型(2)

$$\min_{d} \quad \|\lambda \odot d\|_1 + \frac{1}{2}\left\|AW^{\mathrm{T}}d - b\right\|^2$$

令 $f(d) = \frac{1}{2}\left\|AW^{\mathrm{T}}d - b\right\|^2, h(d) = \|\lambda \odot d\|_1$，则

$$\begin{aligned}
\nabla f(d) =& WA^{\mathrm{T}}\left(AW^{\mathrm{T}}d - b\right) \\
\operatorname{prox}_{t_k h}(d) =& \operatorname{sign}(d)\max\{|d| - t_k\lambda, 0\}
\end{aligned}$$

近似点梯度算法的迭代格式为：

$$\begin{aligned}
y^k &= d^k - t_k WA^{\mathrm{T}}\left(AW^{\mathrm{T}}d^k - b\right) \\
d^{k+1} &= \operatorname{sign}\left(y^k\right)\max\left\{\left|y^k\right| - t_k\lambda, 0\right\}
\end{aligned}$$

小波模型求解

对于平衡小波模型(3)

$$\min_{\alpha} \quad \|\lambda \odot \alpha\|_1 + \frac{\kappa}{2}\left\|\left(I - WW^{\mathrm{T}}\right)\alpha\right\|^2 + \frac{1}{2}\left\|AW^{\mathrm{T}}\alpha - b\right\|^2$$

我们令

$$f(\alpha) = \frac{\kappa}{2}\left\|\left(I - WW^{\mathrm{T}}\right)\alpha\right\|^2 + \frac{1}{2}\left\|AW^{\mathrm{T}}\alpha - b\right\|^2, \quad h(\alpha) = \|\lambda \odot \alpha\|_1$$

则

$$\begin{aligned}
\nabla f(\alpha) &= \kappa\left(I - WW^{\mathrm{T}}\right)\alpha + WA^{\mathrm{T}}\left(AW^{\mathrm{T}}\alpha - b\right) \\
\operatorname{prox}_{t_k h}(\alpha) &= \operatorname{sign}(\alpha)\max\left\{|\alpha| - t_k\lambda, 0\right\}
\end{aligned}$$

近似点梯度算法的迭代格式为：

$$\begin{aligned}
y^k &= \alpha^k - t_k\left(\kappa\left(I - WW^{\mathrm{T}}\right)\alpha^k + WA^{\mathrm{T}}\left(AW^{\mathrm{T}}\alpha^k - b\right)\right) \\
\alpha^{k+1} &= \operatorname{sign}\left(y^k\right)\max\left\{\left|y^k\right| - t_k\lambda, 0\right\}
\end{aligned}$$

提纲

收敛性分析

基本假设：

- f 在$\mathbb{R}^n$ 上是凸的; ∇f 为 L-利普希茨连续，即

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leqslant L\|x - y\|, \quad \forall x, y$$

- h 是适当的闭凸函数 (因此 prox_{th} 的定义是合理的);

- 函数 $\psi(x) = f(x) + h(x)$ 的最小值 ψ^* 是有限的，并且在点x^* 处可取到(并不要求唯一).

梯度映射

在基本假设的基础上，我们定义**梯度映射**：

$$G_t(x) = \frac{1}{t}\left(x - \operatorname{prox}_{th}(x - t\nabla f(x))\right) \quad (t > 0) \tag{4}$$

不难推出梯度映射具有以下的性质：

- “负搜索方向”：$x^{k+1} = \operatorname{prox}_{th}\left(x^k - t\nabla f\left(x^k\right)\right) = x^k - tG_t\left(x^k\right)$
- 根据邻近算子和次梯度的关系，我们有

$$G_t(x) - \nabla f(x) \in \partial h\left(x - tG_t(x)\right) \tag{5}$$

- 与算法的收敛性的关系：

$$G_t(x) = 0 \iff x \text{ 为 } \psi(x) = f(x) + h(x) \text{ 的最小值点}$$

定理 1(固定步长近似点梯度法的收敛性)

取定步长为 $t_k = t \in \left(0, \frac{1}{L}\right]$，设 $\left\{x^k\right\}$ 由迭代格式(1)产生，则

$$\psi\left(x^k\right) - \psi^* \leqslant \frac{1}{2kt}\left\|x^0 - x^*\right\|^2$$

定理证明

证明　根据利普希茨连续“二次上界”的性质，得到

$$f(y) \leqslant f(x) + \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(y-x) + \frac{L}{2}\|y-x\|^2, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

令 $y = x - tG_t(x)$, 有

$$\begin{aligned} f\left(x - tG_t(x)\right) &\leqslant f(x) - t\nabla f(x)^{\mathrm{T}} G_t(x) + \frac{t^2 L}{2}\left\|G_t(x)\right\|^2 \\ &\leqslant f(x) - t\nabla f(x)^{\mathrm{T}} G_t(x) + \frac{t}{2}\left\|G_t(x)\right\|^2 \end{aligned} \tag{6}$$

此外，由 $f(x), h(x)$ 为凸函数，结合(4)式我们有

$$h\left(x - tG_t(x)\right) \leqslant h(z) - \left(G_t(x) - \nabla f(x)\right)^{\mathrm{T}}\left(z - x + tG_t(x)\right) \tag{7}$$

$$f(x) \leqslant f(z) - \nabla f(x)^{\mathrm{T}}(z-x) \tag{8}$$

将(6)(7)(8)式相加可得对任意 $z \in \mathbf{dom}\ \psi$ 有

$$\psi\left(x - tG_t(x)\right) \leqslant \psi(z) + G_t(x)^{\mathrm{T}}(x-z) - \frac{t}{2}\left\|G_t(x)\right\|^2 \tag{9}$$

定理证明

由$x^i = x^{i-1} - tG_t(x^{i-1})$，在不等式(9) 中，取 $z = x^*, x = x^{i-1}$ 得到

$$\begin{aligned}
\psi(x^i) - \psi^* &\leqslant G_t(x^{i-1})^\mathrm{T}\left(x^{i-1} - x^*\right) - \frac{t}{2}\left\|G_t(x^{i-1})\right\|^2 \\
&= \frac{1}{2t}\left(\left\|x^{i-1} - x^*\right\|^2 - \left\|x^{i-1} - x^* - tG_t(x^{i-1})\right\|^2\right) \\
&= \frac{1}{2t}\left(\left\|x^{i-1} - x^*\right\|^2 - \left\|x^i - x^*\right\|^2\right)
\end{aligned} \tag{10}$$

取 $i = 1, 2, \cdots, k$ 并累加，得

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{k}\left(\psi\left(x^i\right) - \psi^*\right) &\leqslant \frac{1}{2t}\sum_{i=1}^{k}\left(\left\|x^{i-1} - x^*\right\|^2 - \left\|x^i - x^*\right\|^2\right) \\
&= \frac{1}{2t}\left(\left\|x^0 - x^*\right\|^2 - \left\|x^k - x^*\right\|^2\right) \\
&\leqslant \frac{1}{2t}\left\|x^0 - x^*\right\|^2.
\end{aligned}$$

注意到在不等式(9)中，取 $z = x^{i-1}$ 即得：

$$\psi(x^i) \leqslant \psi(x^{i-1}) - \frac{t}{2} \left\| G_t(x^{i-1}) \right\|^2$$

即 $\psi\left(x^i\right)$ 不增，因此

$$\psi\left(x^k\right) - \psi^* \leqslant \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \left(\psi\left(x^i\right) - \psi^*\right) \leqslant \frac{1}{2kt} \left\| x^0 - x^* \right\|^2$$

定理**1**中要求 $t \leq \frac{1}{L}$，而根据定理证明的过程，也可以用线搜索准则：

- 从某个 $t = \hat{t} > 0$ 开始进行回溯$(t \leftarrow \beta t)$, 直到满足不等式

$$f\left(x - tG_t(x)\right) \leqslant f(x) - t\nabla f(x)^{\mathrm{T}} G_t(x) + \frac{t}{2}\left\|G_t(x)\right\|^2 \qquad (11)$$

- 这等价于算法部分提到的线搜索准则：

$$f\left(x^{k+1}\right) \leqslant f\left(x^k\right) + \nabla f\left(x^k\right)^{\mathrm{T}}\left(x^{k+1} - x^k\right) + \frac{1}{2t_k}\left\|x^{k+1} - x^k\right\|^2$$

至此我们解释了该线搜索准则的合理性

定理 2 (非固定步长的近似点梯度法的收敛性)

从某个 $t = \hat{t} > 0$ 开始进行回溯($t \leftarrow \beta t$) 直到满足不等式(11), 设 $\{x^k\}$ 是由迭代格式(1) 产生的序列，则

$$\psi\left(x^k\right) - \psi^* \leqslant \frac{1}{2k\min\{\hat{t}, \beta/L\}} \left\|x^0 - x^*\right\|^2$$

Proof.

由定理1的证明,当$0 < t \leqslant \frac{1}{L}$ 时,不等式(11)成立,故由线搜索所得的步长 t 应满足 $t \geqslant t_{\min} = \min\left\{\hat{t}, \frac{\beta}{L}\right\}$. 同理,我们有$\psi\left(x^i\right)$单调不增,且

$$\psi\left(x^i\right) - \psi^* \leqslant \frac{1}{2t_{\min}}\left(\left\|x^{i-1} - x^*\right\|^2 - \left\|x^i - x^*\right\|^2\right)$$

取$i = 1, 2, \cdots, k$并累加，并利用$\psi\left(x^i\right)$ 不增，可得

$$\psi\left(x^k\right) - \psi^* \leqslant \frac{1}{2kt_{\min}} \left\|x^0 - x^*\right\|^2$$

□

提纲

非凸函数的近似点梯度法

(适当闭函数的邻近算子) 设 h 是适当闭函数(可以非凸)，且具有有限的下界，即满足$\inf_{x\in\textbf{dom}h} h(x) > -\infty$, 定义 h 的邻近算子为

$$\operatorname{prox}_h(x) = \mathop{\arg\min}_{u\in\textbf{dom }h}\left\{h(u) + \frac{1}{2}\|u-x\|^2\right\}.$$

- $\operatorname{prox}_h(x)$良定义，且是$\mathbb{R}^n$ 上的非空紧集
- 对$u \in \operatorname{prox}_h(x)$,有$x-u \in \partial h(u)$. ∂h表示h(包括非凸情形)的次微分

对于复合优化问题$\min\ \psi(x) = f(x) + h(x)$， f 可微, h 为适当闭函数(可非凸)。与一般的近似点梯度法类似，有迭代格式：

$$x^{k+1} = \operatorname{prox}_{t_k h}\left(x^k - t_k \nabla f\left(x^k\right)\right)$$

迭代时往往选取 $\operatorname{prox}_{t_k h}$ 中的一个元素，此时算法也具有收敛性。

镜像下降算法

考虑如下的凸优化问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & x \in C \end{aligned}$$

f 为凸函数，C 是 $\mathbf{dom}\, f$ 的凸子集，且 f 在 C 上存在次梯度

我们引入 **Bregman**距离：
令 h 是可微凸函数，则由 h 产生的 **Bregman**距离定义为：

$$D_h(y,x) = h(y) - h(x) - \nabla h(x)^T(y-x)$$

下面给出镜像(非线性)次梯度方法：

1. 取次梯度$g^{(k)} \in \partial f(x^{(k)})$
2. 更新迭代格式：
$$x^{(k+1)} = \underset{x\in C}{\operatorname{argmin}} \left\{ (g^{(k)})^T(x - x^k) + \frac{1}{\alpha_k} D_h(x, x^{(k)}) \right\}$$

取 $h(x) = \frac{1}{2}||x||_2^2$ 时，这就是投影次梯度法。因此也可以把镜像下降算法看成次梯度算法的推广

收敛性分析

函数 h 需要满足的性质:在范数$||\cdot||$ 的意义下强凸，即

$$h(y) \geq h(x) + \nabla h(x)^T(y-x) + \frac{1}{2}||x-y||^2$$

考虑计算与任意点(包括最优点)处函数值的距离：对于任意的 $x^* \in C$,

$$\begin{aligned} f(x^{(k)}) - f(x^*) &\leq (g^{(k)})^T(x^{(k)} - x^*) \\ &= (g^{(k)})^T(x^{(k+1)} - x^*) + (g^{(k)})^T(x^{(k)} - x^{(k+1)}) \end{aligned}$$

根据 $x^{(k+1)}$ 点处最优性的必要条件:

$$(\alpha_k g^{(k)} + \nabla h(x^{(k+1)}) - \nabla h(x^{(k)}))^T(y - x^{(k+1)}) \geq 0, \forall y \in C$$

因此，我们取 $y = x^*$，得

$$g^{(k)T}(x^{(k+1)} - x^*) \leq \frac{1}{\alpha_k}(\nabla h(x^{(k+1)}) - \nabla h(x^{(k)}))^T(x^* - x^{(k+1)})$$

收敛性分析(续)

进一步，

$$
\begin{aligned}
&(\nabla h(x^{(k+1)}) - \nabla h(x^{(k)}))^T(x^* - x^{(k+1)}) \\
&= D_h(x^*, x^{(k)}) - D_h(x^*, x^{(k+1)}) - D_h(x^{(k)}, x^{(k+1)})
\end{aligned}
$$

综合以上各式，对任意 $x^* \in C$,

$$
\begin{aligned}
f(x^{(k)}) - f(x^*) &\le g^{(k)T}(x^{(k+1)} - x^*) + g^{(k)T}(x^{(k)} - x^{(k+1)}) \\
&\le \frac{1}{\alpha_k}\left[D_h(x^*, x^{(k)}) - D_h(x^*, x^{(k+1)})\right] - \frac{1}{\alpha_k} D_h(x^{(k)}, x^{(k+1)}) \\
&\quad + g^{(k)T}(x^{(k)} - x^{(k+1)})
\end{aligned}
$$

应用Fenchel-Young不等式 ($x^T y \le \frac{1}{2\alpha}||x||^2 + \frac{\alpha}{2}||y||_*^2$)

$$
\begin{aligned}
&\le \frac{1}{\alpha_k}\left[D_h(x^*, x^{(k)}) - D_h(x^*, x^{(k+1)})\right] - \frac{1}{\alpha_k} D_h(x^{(k)}, x^{(k+1)}) \\
&\quad + \frac{\alpha_k}{2}||g^{(k)}||_*^2 + \frac{1}{2\alpha_k}||x^{(k)} - x^{(k+1)}||^2 \\
&\le \frac{1}{\alpha_k}\left[D_h(x^*, x^{(k)}) - D_h(x^*, x^{(k+1)})\right] + \frac{\alpha_k}{2}||g^{(k)}||_*^2
\end{aligned}
$$

保证收敛的条件

取固定步长 $\alpha_k=\alpha$,并在上面的不等式中对$1,\ldots,k$求和，得

$$\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}f(x^{(i)})-f(x^*)\le\frac{1}{\alpha k}D_h(x^*,x^{(1)})+\frac{\alpha}{2}\max_i||g^{(i)}||_*^2$$

一般而言，

$$f^{\text{best},k}-f^*\le\frac{D_h\left(x^*,x^{(1)}\right)+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k}\alpha_i^2\max_i||g^{(i)}||_*^2}{\sum_{i=1}^{k}\alpha_i}$$

当以下条件满足时，算法可以保证收敛

- $D_h(x^*,x^{(1)})<\infty$
- $\sum_k\alpha_k=\infty$ 且$\alpha_k\to 0$ (消失步长)
- 对于任意$g\in\partial f(x)$ 和$x\in C$, 有$||g||_*\le G$恒成立，其中$G<\infty$

镜像下降算法的例子

- 通常的(投影)次梯度法:取 $h(x) = \frac{1}{2}||x||_2^2$
- 使用单纯形约束，$C = \{x \in R_+^n | \mathbf{1}^T x = 1\}$，并使用负熵函数

$$h(x) = \sum_{i=1}^{n} x_i \log x_i$$

1. l_1范数意义下为强凸函数
2. 对于初始点$x^{(1)} = 1/n$, 有$D_h(x^*, x^{(1)}) \leq \log n$ 对任意$x^* \in C$ 成立
3. 若$G_\infty \geq ||g||_\infty$ 对任意$g \in \partial f(x)$，$x \in C$成立, 即存在有限上界，则

$$f_{best}^{(k)} - f^* \leq \frac{\log n}{\alpha k} + \frac{\alpha}{2k} G_\infty$$

4. 比通常的次梯度算法表现好很多

考虑复合优化问题：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = f(x) + h(x)$$

其中 $f(x)$ 为可微函数且 $\nabla f(x)$ 是L-利普希茨连续的；$h(x)$ 为凸函数

- 选取初始点x^0，令$x^{-1}=x^0$，取$\beta\in[0,1]$，令$\alpha<2(1-\beta)/L$，则惯性近似点梯度法的迭代格式为:

$$x^{k+1} = \mathrm{prox}_{\alpha h}\left(x^k - \alpha\nabla g\left(x^k\right) + \beta\left(x^k - x^{k-1}\right)\right)$$

- $\beta\left(x^k - x^{k-1}\right)$表示惯性项
- 对于 $h(x)=0$ 情形，该算法也被称为重球法(Heavy-ball)

条件梯度法: Motivation

设 X 为紧集，考虑优化问题

$$\min_{x \in X} \quad f(x)$$

- 如果使用近似点梯度法，则

$$x_{k+1} = \operatorname*{argmin}_{x \in X} \left\{ f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \frac{1}{2\alpha_k} \|x - x_k\|^2 \right\}.$$

  这等价于投影梯度法：

$$x_{k+1} = \mathcal{P}_X \left(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \right)$$

- 困难：$\mathcal{P}_X(\cdot)$可能具有昂贵的计算代价

条件梯度法 (CndG or Frank-Wolfe Method)

- 给定 $y_0 = x_0$，以及 $\alpha_k \in (0,1]$. 条件梯度法的迭代格式为：

$$\begin{aligned} x_k &= \operatorname{argmin}_{x \in X} \langle \nabla f(y_{k-1}), x \rangle, \\ y_k &= (1-\alpha_k) y_{k-1} + \alpha_k x_k \end{aligned}$$

- 考虑步长参数 α_k 的选取

  消失步长：

$$\alpha_k = \frac{2}{k+1}$$

  或通过精确线搜索：

$$\alpha_k = \operatorname*{argmin}_{\alpha \in [0,1]} f\left((1-\alpha) y_{k-1} + \alpha x_k\right)$$

例子

考虑带某一范数$\|\cdot\|$ 约束的凸优化问题，

$$\min_x \quad f(x) \quad \text{s.t.} \quad \|x\| \le t.$$

用条件梯度法求解该问题时，需要计算子问题，

$$\begin{aligned} x_k &\in \operatorname*{argmin}_{\|x\|\le t} \langle \nabla f(y_{k-1}), x\rangle \\ &= -t\cdot\left(\operatorname*{arg\,max}_{\|x\|\le 1} \langle \nabla f(y_{k-1}), x\rangle\right) \\ &= -t\cdot\partial\|\nabla f(y_{k-1})\|_*. \end{aligned} \tag{12}$$

其中$\|z\|_* = \sup\{z^T x, \|x\| \le 1\}$ 是$\|\cdot\|$ 的对偶范数。注意到(12) 条件梯度法的子问题相当于计算一个对偶范数的次梯度。如果计算$\|\cdot\|$ 范数的次梯度比计算在约束集合$X = \{x\in\mathbb{R}^n: \ \|x\|\le t\}$ 上的投影要简单，条件梯度法比投影梯度法效率更高。

由于 ℓ_1 范数的对偶范数是 ℓ_∞ 范数，因此用条件梯度法求解该问题时子问题为：

$$x_k \in -t \cdot \partial \|\nabla f(y_{k-1})\|_\infty.$$

考虑到 ℓ_∞ 范数的次梯度为$\partial\|x\|_\infty = \{v : \langle v, x\rangle = \|x\|_\infty, \|v\|_1 \le 1\}$，子问题等价于，

$$\begin{aligned} i_k &\in \underset{i=1,\ldots,n}{\operatorname{argmax}} \; |\nabla_i f(y_{k-1})| \\ x_k &= -t \cdot \operatorname{sgn}\left[\nabla_{i_k} f(y_{k-1})\right] \cdot e_{i_k}. \end{aligned}$$

其中$\nabla_i f(y_{k-1})$ 表示向量$\nabla f(y_{k-1})$ 的第i 个元素，e_i 表示第i 个元素为1 的单位向量。可以看到计算$\|\cdot\|_\infty$ 的次梯度和计算集合$X := \{x \in \mathbb{R}^n : \|x\|_1 \le t\}$ 上的投影都需要$\mathcal{O}(n)$ 的计算复杂度，但是条件梯度法子问题计算明显要更简单直接。

例子: ℓ_p 范数约束问题, $1 \leq p \leq \infty$

由于ℓ_p 范数的对偶范数是ℓ_q 范数，其中$1/p + 1/q = 1$，因此用条件梯度法求解该问题时子问题为，

$$x_k \ \in \ -t \cdot \partial \|\nabla f(y_{k-1})\|_q.$$

注意到ℓ_q 范数的次梯度为$\partial\|x\|_q = \{v : \langle v, x\rangle = \|x\|_q, \|v\|_p \leq 1\}$，子问题等价于，

$$x_k^{(i)} \ = \ -\beta \cdot \mathrm{sgn}\left[\nabla_i f(y_{k-1})\right] \cdot |\nabla_i f(y_{k-1})|^{p/q}.$$

其中β 是使得$\|x_k\|_q = t$ 的归一化常数。可以看到，除过$p = 1, 2, \infty$ 这些特殊情形，条件梯度法的子问题计算复杂度比直接计算点在集合$X = \{x \in \mathbb{R}^n : \ \|x\|_p \leq t\}$ 上的投影要简单，后者投影计算需要单独解一个优化问题。

例子: 矩阵核范数约束优化问题

矩阵核范数$\|\cdot\|_*$ 的对偶范数是其谱范数$\|\cdot\|_2$:

$$\|X\|_* = \sum_{i=1}^{\min\{m,n\}} \sigma_i(X), \qquad \|X\|_2 = \max_{i=1,\ldots,\min\{m,n\}} \sigma_i(X).$$

因此条件梯度法的子问题为$X_k \in -t\cdot\partial\|\nabla f(Y_{k-1})\|_2$. 对矩阵范数的次梯度: $\partial\|X\| = \{Y : \langle Y, X\rangle = \|X\|, \|Y\|_* \leq 1\}$，设$u, v$ 分别是矩阵$\nabla f(Y_{k-1})$ 最大奇异值对应的左、右奇异向量，注意到，

$$\langle uv^T, \nabla f(Y_{k-1})\rangle = u^T\nabla f(Y_{k-1})v = \sigma_{\max}(\nabla f(Y_{k-1})) = \|\nabla f(Y_{k-1})\|_2.$$

且$\|uv^T\|_* = 1$，因此矩阵$uv^T \in \partial\|\nabla f(Y_{k-1})\|_2$。则条件梯度法子问题等价于，

$$X_k \in -t\cdot uv^T. \tag{13}$$

可以看到，条件梯度法计算子问题时只需要计算矩阵最大的奇异值对应的左、右奇异向量。如果采用投影梯度法，其子问题是计算X 到集合$\{X \in \mathbb{R}^{m\times n} : \|X\|_* \leq t\}$ 的投影，需要对矩阵做全奇异值分解，计算量比条件梯度法复杂很多。

令$\gamma_t \in (0,1]$， $t = 1, 2, \ldots$， 构造序列

$$\Gamma_t = \begin{cases} 1 & t = 1 \\ (1-\gamma_t)\Gamma_{t-1} & t \geq 2 \end{cases}.$$

如果序列$\{\Delta_t\}_{t\geq 0}$ 满足

$$\Delta_t \leq (1-\gamma_t)\Delta_{t-1} + B_t \quad t = 1, 2, \ldots.$$

则对任意的k 我们对Δ_k 有估计

$$\Delta_k \leq \Gamma_k(1-\gamma_1)\Delta_0 + \Gamma_k \sum_{t=1}^{k} \frac{B_t}{\Gamma_t}.$$

收敛性分析

令 $f(x)$ 是凸函数, $\nabla f(x)$ 是L-利普希茨的, $D_X = \sup_{x,y\in X}\|x-y\|$. 则

$$f(y_k)-f(x^*) \;\leq\; \frac{2L}{k(k+1)}\sum_{i=1}^{k}\|x_i-y_{i-1}\|^2 \;\leq\; \frac{2L}{k+1}D_X^2.$$

证明： 令$\gamma_k=\frac{2}{k+1}$，记$\bar{y}_k=(1-\gamma_k)y_{k-1}+\gamma_k x_k$，则不管

$$\alpha_k=\frac{2}{k+1} \quad 或 \quad \alpha_k=\operatorname*{argmin}_{\alpha\in[0,1]} f((1-\alpha)y_{k-1}+\alpha x_k).$$

对$y_k=(1-\alpha_k)y_{k-1}+\alpha_k x_k$，我们都有$f(y_k)\leq f(\bar{y}_k)$。注意到$\bar{y}_k-y_{k-1}=\gamma_k(x_k-y_{k-1})$，由$f(x)\in C_L^{1,1}(X)$有

$$f(y_k)\leq f(\bar{y}_k) \;\leq\; f(y_{k-1})+\langle\nabla f(y_{k-1}),\bar{y}_k-y_{k-1}\rangle+\frac{L}{2}\|\bar{y}_k-y_{k-1}\|^2 \tag{14}$$

$$\leq\; (1-\gamma_k)[f(y_{k-1})+\gamma_k[f(y_{k-1})+\langle\nabla f(y_{k-1}),x-y_{k-1}\rangle]+\frac{L\gamma_k^2}{2}\|x_k-y_{k-1}\|^2 \tag{15}$$

$$\leq\; (1-\gamma_k)f(y_{k-1})+\gamma_k f(x)+\frac{L\gamma_k^2}{2}\|x_k-y_{k-1}\|^2, \qquad 对任意\ x\in X. \tag{16}$$

收敛性分析

其中不等式(15) 是因为$x_k \in \min_{x\in X}\langle \nabla f(y_{k-1}), x\rangle$，由最优性条件我们可以得到对任意$x \in X$ 有$\langle x - x_k, \nabla f(y_{k-1})\rangle \geq 0$。将不等式(16) 稍做变换，对任意$x \in X$，

$$f(y_k) - f(x) \leq (1-\gamma_k)[f(y_{k-1}) - f(x)] + \frac{L}{2}\gamma_k^2\|x_k - y_{k-1}\|^2. \tag{17}$$

由引理可知，

$$f(y_k) - f(x) \leq \Gamma_k(1-\gamma_1)[f(y_0) - f(x)] + \frac{\Gamma_k L}{2}\sum_{i=1}^{k}\frac{\gamma_i^2}{\Gamma_i}\|x_i - y_{i-1}\|^2.$$

由$\gamma_k = \frac{2}{k+1}$，$\gamma_1 = 1$ 得到$\Gamma_k = \frac{2}{k(k+1)}$，我们可以得到收敛性不等式，

$$f(y_k) - f^* \ \leq \ \frac{2L}{k(k+1)}\sum_{i=1}^{k}\|x_i - y_{i-1}\|^2 \ \leq \ \frac{2L}{k+1}D_X^2.$$

令$\frac{2L}{k+1}D_X^2 \leq \epsilon$，可以得到分析复杂度结论。