

0.1 Introdução

Será considerado o problema usual de regressão linear com ruído

$$b = Ax + \epsilon, \quad (\text{P})$$

em que $b \in \mathbb{R}^n$ é a resposta, $\epsilon \in \mathbb{R}^n$ é o ruido, $A \in \mathbb{R}^{n \times p}$ é a matriz do modelo e $x \in \mathbb{R}^p$ é o vetor de coeficientes buscado. Com o aumento da dimensão dos dados, técnicas de aprendizado esparso ganharam enfoque recentemente pela compacticidade e interpretabilidade dos modelos obtidos Hastie et al. [2015], Bhlmann and van de Geer [2011].

Assumindo essa esparsidade na solução, algo comumente desejado ou teoricamente esperado no caso $p \gg n$ Hastie et al. [2015], Bhlmann and van de Geer [2011], uma estratégia natural é considerar o problema de quadrados mínimos regularizado

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2 + \lambda_0 \|x\|_0 + \lambda_q \|x\|_q^q, \quad q \in \{1, 2\}. \quad (\text{R})$$

Aqui, a norma ℓ_0 refere-se à pseudo-norma definida como $\|x\|_0 = |\{i \mid x_i \neq 0, i = 1, \dots, p\}| \forall x \in \mathbb{R}^p$, $\lambda_0 \geq 0$ é seu parâmetro de penalização que regula o balanço entre elementos não nulos e recuperação da resposta, e $\lambda_q \geq 0$ controla a regularização ℓ_q .

Apesar da escolha $q = 1$ também induzir esparsidade, na realidade a regularização ℓ_q é necessária para evitar *overfitting* em cenários com baixa Relação Sinal-Ruído (RSR) Mazumder et al. [2017]. Esse efeito se dá pelo fenômeno de *shrinkage* induzido por essas regularizações. Denotaremos (R) com $q = 1$ de problema $\ell_0\ell_1$ e $q = 2$ de $\ell_0\ell_2$.

Alternativas de abordagem

O problema (R) é NP-difícil Natarajan [1995], tornando a solução computacional custosa. Três abordagens gerais são empregadas na prática. A primeira é utilizar *proxys* da norma ℓ_0 , como a norma ℓ_1 no modelo LASSO Tibshirani [1996], a *Minimax Concave Penalty* (MCP) Zhang [2010] e a *Smoothly Clipped Absolute Deviation* (SCAD) Fan and Li [2001]. Porém, em muitos regimes, estimadores obtidos de (R) sob parâmetros de penalização adequados exibem características estatísticas superiores (predição, estimativa e seleção de variáveis) comparado com essas alternativas menos computacionalmente desafiadoras (veja Hazimeh and Mazumder [2020] e referências ali presentes).

A segunda alternativa são algoritmos que abordam a norma ℓ_0 diretamente e buscam soluções exatas. Trabalhos como Hazimeh et al. [2021] usam *Mixed Integer Programming* (MIP) para resolver em otimalidade global problemas com $p \sim 10^7$ em tempos de minutos a horas quando soluções altamente esparsas são desejadas.

A terceira é utilizar heurísticas ou algoritmos que solucionam aproximadamente (R) (ou uma formulação com restrição de cardinalidade) com $\lambda_q = 0$. Métodos populares incluem (*greedy*) *stepwise regression* Hastie et al. [2015], *Iterative Hard Thresholding* (IHT) Blumensath and Davies [2009], **abess** Zhu et al. [2020], e *greedy* e *randomized Coordinate Descent* (CD) Beck and Eldar [2013], Patrascu and Necoara [2015].

Em Hazimeh and Mazumder [2020], é proposta uma abordagem que busca conciliar a velocidade de modelagens *proxys* dessa segunda estratégia e a otimalidade obtida pelos métodos de otimização inteira mista. O algoritmo proposto busca soluções quase ótimas que satisfaçam uma propriedade de exatidão combinatória local tal que pequenas perturbações no suporte não melhoram a função objetivo.

Os estimadores obtidos demonstraram superioridade em comparação com outros algoritmos de aprendizado esparso em quesitos como predição, estimativa e seleção de variáveis. Além disso, a implementação *open-source* dos autores, **fastselect**, provou-se significativamente mais rápida que implementações amplamente usadas como **ncvreg** Breheny and Huang [2011] e **glmnet** Friedman et al. [2010] que usam modelos *proxy*.

Notação

Para um conjunto de índices $T \subset \{1, 2, \dots, p\}$, $U_T \in \mathbb{R}^{p \times |T|}$ denota a submatriz composta pelas colunas da matriz identidade I_p correspondentes aos elementos de T . Além disso, $x_T \in \mathbb{R}^{|T|}$ denota o subvetor de $x \in \mathbb{R}^p$ composto pelos índices em T .

O conjunto das funções L -suaves, $\mathcal{C}_L^{1,1}$, contém todas as funções $\mathcal{C}^1 \ni g : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ (continuamente diferenciáveis) tais que ∇g é Lipschitz contínuo com fator L , isto é, $\|\nabla g(x) - \nabla g(y)\| \leq L\|x - y\| \forall x, y \in \mathbb{R}^k$.

Para uma matriz $B \in \mathbb{R}^{k \times k}$ com autovalores reais, $\lambda_{\max}(B)$ é o seu maior autovalor.

Denotamos por fim o conjunto $[p] := \{1, 2, \dots, p\}$.

0.2 Operador proximal e condições de otimalidade

Definindo $f(x) := \frac{1}{2}\|Ax - b\|_2^2 + \lambda_2\|x\|_2^2$ a parte suave de (R) e $h(x) := \lambda_0\|x\|_0 + \lambda_1\|x\|_1$ a parte não suave, é possível aplicar a vasta teoria de otimização compósita ao problema

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} F(x) := f(x) + h(x). \quad (\text{C})$$

Para isso, introduzimos o chamado operador proximal Moreau [1962] de $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ que, em sua formulação mais clássica, é definido como

$$\text{prox}_g(x) := \arg \min_{u \in \mathbb{R}^p} g(u) + \frac{1}{2}\|u - x\|_2^2. \quad (1)$$

Tomando $g = ch$, $c \geq 0$, o problema proximal acima é separável. Seja $h_i(u_i) := \lambda_0 \mathbf{1}_{\{0\}}(u_i) + \lambda_1 |u_i| + \frac{(u_i - x_i)^2}{2c} \forall i \in [p]$. Como no *soft-thresholding operator*, $\text{sign}(x_i)(|x_i| - c\lambda_1)$ é o minimizador não nulo de h_i quando $|x_i| > c\lambda_1$ Hastie et al. [2015]. Se $|x_i| - c\lambda_1 < \sqrt{2c\lambda_0}$, então $h_i(0) < h_i(\text{sign}(x_i)(|x_i| - c\lambda_1))$. Já se $|x_i| - c\lambda_1 = \sqrt{2c\lambda_0}$, tem-se $h_i(0) = h_i(\text{sign}(x_i)(|x_i| - c\lambda_1))$. Por fim, $h_i(0) > h_i(\text{sign}(x_i)(|x_i| - c\lambda_1))$ se $|x_i| - c\lambda_1 > \sqrt{2c\lambda_0}$. Dessa maneira, temos uma fórmula fechada para o operador proximal de ch ,

$$[\text{prox}_{ch}(x)]_i = \arg \min_{u_i \in \mathbb{R}} h_i(u_i) = \begin{cases} \{0\}, & |x_i| - c\lambda_1 < \sqrt{2c\lambda_0} \\ \{0, \text{sign}(x_i)(|x_i| - c\lambda_1)\}, & |x_i| - c\lambda_1 = \sqrt{2c\lambda_0} \\ \{\text{sign}(x_i)(|x_i| - c\lambda_1)\}, & |x_i| - c\lambda_1 > \sqrt{2c\lambda_0} \end{cases}.$$

Soluções estacionárias

Para $G : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ e $d \in \mathbb{R}^p$, definimos a derivada direcional (inferior)

$$G'(x, d) := \liminf_{\alpha \downarrow 0} \frac{G(x + \alpha d) - G(x)}{\alpha}.$$

Definição 1 (Solução estacionária) Um vetor $x^* \in \mathbb{R}^p$ é uma solução estacionária de (C) se, $\forall d \in \mathbb{R}^p$, $F'(x^*, d) \geq 0$.

Para $x \in \mathbb{R}^p$, definimos a i -ésima variável minimizadora da parte suave de F

$$\tilde{x}_i := \arg \min_{u_i \in \mathbb{R}} f(x + (u_i - x_i)e_i) = \frac{\left\langle b - \sum_{j \neq i} x_j A_j, A_i \right\rangle}{\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2} \quad \forall i \in [p], \quad (2)$$

em que A_k denota a k -ésima coluna de A .

Lema 1 Um vetor $x^* \in \mathbb{R}^p$ com suporte S é uma solução estacionária de (C) se, e somente se,

$$x_i^* = \text{sign}(\tilde{x}_i^*) \left(|\tilde{x}_i^*| - \frac{\lambda_1}{\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2} \right) \text{ e } |\tilde{x}_i^*| > \frac{\lambda_1}{\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2} \quad \forall i \in S. \quad (3)$$

Demonstração. [Hazimeh and Mazumder, 2020, Lemma 1]. \square

Mínimo coordenada a coordenada

A seguinte classe de minimizadores é inspirada em pontos estacionários de algoritmos coordenados Hazimeh and Mazumder [2020].

Definição 2 (Mínimo CW) Um ponto $x^* \in \mathbb{R}^p$ é um mínimo Coordinate-Wise (CW) de (C) se, $\forall i \in [p]$, x_i^* minimiza F com respeito à x_i mantendo as demais coordenadas fixas, ou seja,

$$x_i^* \in \arg \min_{u_i \in \mathbb{R}} F(x^* + (u_i - x_i^*)e_i) \quad \forall i \in [p].$$

Seja $x^* \in \mathbb{R}^p$ mínimo CW. É possível caracterizar mínimos CW a partir do operador proximal através da relação

$$\begin{aligned} x_i^* &\in \arg \min_{u_i \in \mathbb{R}} F(x^* + (u_i - x_i^*)e_i) \\ &= \arg \min_{u_i \in \mathbb{R}} f(x^* + (u_i - x_i^*)e_i) + h(x^* + (u_i - x_i^*)e_i) \\ &= \arg \min_{u_i \in \mathbb{R}} \frac{1}{2} \left\| b - \sum_{j \neq i} x_j^* A_j - u_i A_i \right\|_2^2 + \lambda_2 u_i^2 + \lambda_0 \mathbf{1}_{\{0\}}(u_i) + \lambda_1 |u_i| \quad (4) \\ &= \arg \min_{u_i \in \mathbb{R}} \frac{\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2}{2} (u_i - \tilde{x}_i^*)^2 + \lambda_0 \mathbf{1}_{\{0\}}(u_i) + \lambda_1 |u_i| \\ &= \text{prox}_{\frac{1}{\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2} (\lambda_0 \mathbf{1}_{\{0\}}(\cdot) + \lambda_1 |\cdot|)}(\tilde{x}_i^*) \quad \forall i \in [p], \end{aligned}$$

onde foi usado que a transladação e multiplicação por constantes não alteram o minimizador. Comparando (4) e (3), pelo Lema 1 x^* é solução estacionária.

Mínimo inescapável por troca

As próximas definições de otimalidade seguem de conceitos de análise combinatorial e refinam a ideia de mínimo CW. Dado um ponto mínimo CW x^* , podemos tentar melhorá-lo em valor objetivo performando uma operação de troca que consiste em desativar (definir como 0) algumas coordenadas do suporte de x^* e permitir que outras entrem no suporte. Após isso, é realizada uma otimização para o novo suporte com respeito as novas coordenadas inseridas (otimização parcial) ou todas as coordenadas (otimização total).

Definição 3 (Mínimo PSI) Seja $k \in \mathbb{N}^+$. Um ponto $x^* \in \mathbb{R}^p$ com suporte S é um mínimo Partial Swap Inescapable (PSI) de (C) de ordem k , denotado $\text{PSI}(k)$, se x^* é uma solução estacionária e $\forall S_1 \subset S, S_2 \subset S^c$ tais que $|S_1|, |S_2| \leq k$ vale

$$F(x^*) \leq \min_{u \in \mathbb{R}^{|S_2|}} F(x^* - U_{S_1}x_{S_1}^* + U_{S_2}u). \quad (5)$$

Seja $x^* \in \mathbb{R}^p$ mínimo $\text{PSI}(k)$ para algum $k \in \mathbb{N}^+$. De (5), $\forall i \in S$, tomado $S_1 = \{i\}$ e $S_2 = \emptyset$, tem-se

$$F(x^*) \leq F(x^* - U_{S_1}x_{S_1}^*) = F(x^* - x_i^*e_i).$$

Por (3) (estacionariedade de x^*) e a relação acima, tem-se então que x^* satisfaz (4). Assim, x^* é mínimo CW.

Definição 4 (Mínimo FSI) Seja $k \in \mathbb{N}^+$. Um ponto $x^* \in \mathbb{R}^p$ com suporte S é um mínimo Full Swap Inescapable (FSI) de (C) de ordem k , denotado $\text{FSI}(k)$, se $\forall S_1 \subset S, S_2 \subset S^c$ tais que $|S_1|, |S_2| \leq k$ vale

$$F(x^*) \leq \min_{u \in \mathbb{R}^{|(S \cup S_2) \setminus S_1|}} F(x^* - U_{S_1}x_{S_1}^* + U_{(S \cup S_2) \setminus S_1}u).$$

Seja $x^* \in \mathbb{R}^p$ mínimo $\text{FSI}(k)$ para algum $k \in \mathbb{N}^+$. Tomando $S_1 = S_2 = \emptyset$ na definição acima, temos

$$F(x^*) \leq \min_{u \in \mathbb{R}^{|S|}} F(x^* + U_S u) \leq \min_{u_i \in \mathbb{R}} F(x^* + (u_i - x_i^*)e_i) \quad \forall i \in [p],$$

logo x^* é mínimo CW, e, portanto, solução estacionária. Além disso, como $S_2 \subset (S \cup S_2) \setminus S_1$, x^* satisfaz (5). Dessa forma, x^* é $\text{PSI}(k)$.

Ponto estacionário

Os conceitos a seguir são padrão em análise variacional (consulte [Beck, 2017, Chapter 3] para mais detalhes). Seja $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ e $x \in \text{dom } g$ fixo. Então

$$\widehat{\partial}g(x) := \left\{ \eta \in \mathbb{R}^p \mid \liminf_{u \rightarrow x} \frac{g(u) - g(x) - \langle \eta, u - x \rangle}{\|u - x\|} \geq 0 \right\}$$

é denominado o subdiferencial regular (ou Fréchet) de h em x . Além disso, o conjunto $\partial g(x)$, definido pela relação

$$\eta \in \partial g(x) \iff \exists \{x^k\}, \{\eta^k\} \subset \mathbb{R}^p : x^k \rightarrow_g x, \eta^k \rightarrow \eta, \eta^k \in \widehat{\partial}g(x^k) \quad \forall k \in \mathbb{N},$$

é conhecido como o subdiferencial limite (ou de Mordukhovich) de g em x . Claramente, sempre vale que $\widehat{\partial}g(x) \subset \partial g(x)$ por construção.

Como trabalhamos com uma função descontínua, h , o subdiferencial de Mordukhovich se prova mais apropriado para a seguinte definição de estacionariedade. Como $f \in C^1$, vale a regra da soma [Mordukhovich, 2018, Proposition 1.30] $\partial F(x) = \nabla f(x) + \partial h(x)$.

Definição 5 (Ponto M-estacionário) Um ponto $x^* \in \mathbb{R}^p$ é um ponto M-estacionário de (C) se

$$0 \in \partial F(x^*) = \nabla f(x^*) + \partial h(x).$$

Note que

$$\begin{aligned} 0 \in \widehat{\partial}F(x^*) &\iff \liminf_{u \rightarrow x^*} \frac{F(u) - F(x^*)}{\|u - x^*\|} \geq 0 \\ &\iff \liminf_{\alpha \downarrow 0} \frac{F(x^* + \alpha d) - F(x^*)}{\alpha \|d\|} \geq 0 \quad \forall d \neq 0 \\ &\iff \liminf_{\alpha \downarrow 0} \frac{F(x^* + \alpha d) - F(x^*)}{\alpha} \geq 0 \quad \forall d \in \mathbb{R}^p. \end{aligned}$$

A última condição é exatamente a definição de x^* ser uma solução estacionária. Assim, como $\widehat{\partial}F(x) \subset \partial F(x)$, temos que soluções estacionárias são pontos M-estacionários.

Ponto estacionário do gradiente proximal

A seguinte definição de estacionariedade é baseada no passo do gradiente proximal.

Definição 6 (Ponto estacionário PG) Um ponto $x^* \in \mathbb{R}^p$ é um ponto estacionário Proximal Gradient (PG) de (C) se, $\forall 0 < \tau < \frac{1}{L_f}$, $f \in \mathcal{C}_{L_f}^{1,1}$,

$$x^* \in \text{prox}_{\tau h}(x^* - \tau \nabla f(x^*)).$$

Seja x^* estacionário PG de suporte S . Note que, $\forall 0 < \tau < \frac{1}{L_f}$,

$$\begin{aligned} x^* \in \text{prox}_{\tau h}(x^* - \tau \nabla f(x^*)) &\implies 0 \in \tau \widehat{\partial}h(x^*) + (x^* - (x^* - \tau \nabla f(x^*))) \\ &\iff 0 \in \tau \nabla f(x^*) + \tau \widehat{\partial}h(x^*) \\ &\iff 0 \in \nabla f(x^*) + \widehat{\partial}h(x^*) \\ &\iff 0 \in \widehat{\partial}F(x^*), \end{aligned}$$

onde na primeira implicação foi usada a regra de Fermat (condição necessária de primeira ordem). Dessa forma, x^* é solução estacionária.

Além disso, substituindo

$$\begin{aligned} [\nabla f(x^*)]_i &= \langle Ax^* - b, A_i \rangle + 2\lambda_2 x_i^* \\ &= \left\langle \sum_{j \neq i} x_j^* A_j - b, A_i \right\rangle + (\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2)x_i^* \stackrel{(2)}{=} (\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2)(x_i^* - \tilde{x}_i^*) \end{aligned}$$

e usando a separabilidade do PG, tem-se

$$\begin{aligned} x^* &\in \text{prox}_{\tau h}(x^* - \tau \nabla f(x^*)) \\ \iff x_i^* &\in \text{prox}_{\tau(\lambda_0 \mathbf{1}_{\{0\}}(\cdot) + \lambda_1 |\cdot|)}(x_i^* - \underbrace{\tau(\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2)(x_i^* - \tilde{x}_i^*)}_{:=y_i^*}) \quad \forall i \in [p] \\ \iff \begin{cases} x_i^* = \text{sign}(y_i^*)(|y_i^*| - \tau\lambda_1) \text{ e } |x_i^*| \geq \sqrt{2\tau\lambda_0}, & i \in S \\ |y_i^*| - \tau\lambda_1 \leq \sqrt{2\tau\lambda_0}, & i \notin S \end{cases} \end{aligned}$$

Se $i \in S$ e $y_i^* > 0$, tem-se

$$x_i^* = x_i^* - \tau(\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2)(x_i^* - \tilde{x}_i^*) - \tau\lambda_1 \iff x_i^* = \tilde{x}_i^* - \frac{\lambda_1}{\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2},$$

e como $\text{sign}(x_i^*) = \text{sign}(y_i^*)$ (*soft-thresholding* preserva sinal), devemos ter $\tilde{x}_i^* > 0$. Já se $y_i^* < 0$,

$$x_i^* = x_i^* - \tau(\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2)(x_i^* - \tilde{x}_i^*) + \tau\lambda_1 \iff x_i^* = \tilde{x}_i^* + \frac{\lambda_1}{\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2},$$

e pelo mesmo argumento anterior $\tilde{x}_i^* < 0$. Dessa forma

$$\begin{cases} x_i^* = \text{sign}(\tilde{x}_i^*) \left(|\tilde{x}_i^*| - \frac{\lambda_1}{\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2} \right) \text{ e } |x_i^*| \geq \sqrt{2\tau\lambda_0}, & i \in S \\ (\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2)|\tilde{x}_i^*| - \lambda_1 \leq \sqrt{\frac{2\lambda_0}{\tau}}, & i \notin S \end{cases}.$$

Comparando a relação acima com (4), conclui-se que, se $L_f \geq 1$, mínimos CW não estacionários PG.

0.3 Hierarquia das condições de otimalidade

Pelo que foi discutido na seção anterior, temos a seguinte hierarquia das condições de otimalidade:

$$\begin{aligned} \text{Mínimos FSI}(k) &\subset \text{Mínimos PSI}(k) \subset \text{Mínimos CW} \stackrel{L_f \geq 1}{\subset} \text{Estacionários PG} \\ &\subset \text{Soluções estacionárias} \subset \text{M-estacionários}. \end{aligned} \tag{6}$$

Temos que $f \in \mathcal{C}_{L_f}^{1,1}$ com $L_f = \lambda_{\max}(A^T A) + 2\lambda_2$, lembrando que $A^T A$ é simétrica e, portanto, dotada de autovalores reais. A condição $L_f \geq 1$ é garantida, por exemplo, se $\|A_i\|_2 = 1 \ \forall i \in [p]$. Nesse caso, $\lambda_{\max}(A^T A) \geq \max_{i \in [p]} e_i^T A^T A e_i = \max_{i \in [p]} (A^T A)_{ii} = \max_{i \in [p]} \|A_i\|_2^2 = 1$.

0.4 Algoritmos

Partially greedy cyclic CD

O algoritmo presente em Hazimeh and Mazumder [2020] basicamente consiste em obter x^{k+1} minimizando com respeito somente a i -ésima coordenada via

$$x_i^{k+1} \in \arg \min_{u_i \in \mathbb{R}} F(x^k + (u_i - x_i^k)e_i) = \text{prox}_{\frac{1}{\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2}(\lambda_0 \mathbf{1}_{\{0\}}(\cdot) + \lambda_1 |\cdot|)}(x_i^k).$$

O algoritmo é iniciado com x^0 e calcula $r^0 = b - Ax^0$. Antes de executado, as coordenadas são reordenadas em ordem decrescente de $|\langle r^0, A_i \rangle| = |[\nabla f(x^0)]_i - 2\lambda_2 x_i^0|$. Na prática, é usada ordenação parcial, ou seja, somente as maiores t coordenadas nesse critério (com $t \ll p$) são ordenadas enquanto as demais mantêm a ordem original, e as atualizações então usam uma ordem cíclica. Isso é mais rápido e igualmente eficaz que a ordenação completa Hazimeh and Mazumder [2020].

Desse aspecto surge a denominação de *partially greedy cyclic*. A reordenação é feita uma única vez antes da execução, diferentemente do método *greedy* CD que seleciona a melhor coordenada para cada atualização. Outras alternativas de ordem de atualização podem ser empregadas, como randômica ou cíclica convencional, embora experimentos numéricos demonstraram a superioridade da estratégia em questão Hazimeh and Mazumder [2020].

Os passos de Spacer, cuja inclusão tem o propósito de garantir convergência teórica, serão omitidos da nossa implementação. Sob hipóteses fracas, o artigo demonstrou convergência desse algoritmo para mínimos CW.

NPG

O algoritmo NPG (Algorithm 1) para solucionar problemas compósitos como (C) foi apresentado inicialmente em Kanzow and Mehlitz [2021]. A cada iteração, ele executa uma busca linear com condição de decréscimo GLL Grippo et al. [1986]. Para parâmetros $m > 1$, essa busca é não monótona, comparando o valor de função de um candidato com o maior valor de função dos últimos m iterados da sequência principal. A escolha do tamanho de passo inicial é livre com salvaguardas, o que fornece flexibilidade para implementações de passos obtidos na literatura (oriundos de problemas não compósitos ou até de minimização restrita), em especial aqueles com características espectrais Barzilai and Borwein [1988].

Algorithm 1 Nonmonotone Proximal Gradient method (NPG)

Input: $x^0 \in \mathbb{R}^p$, $\gamma_{\max} > \gamma_{\min} > 0$, $m \in \mathbb{N}$, $\delta \in (0, 1)$ and $\tau \in (0, 1)$

Output: Last x^{k+1} computed or x^{best}

- 1: Initialize $k := 0$
- 2: **repeat**
- 3: Choose $\gamma_{k,0} \in [\gamma_{\min}, \gamma_{\max}]$
- 4: Initialize $i := 0$
- 5: **while**

$$F(x^{k,i}) > \max_{0 \leq j \leq \min\{k, m-1\}} F(x^{k-j}) - \frac{\delta}{2\gamma_{k,i}} \|x^{k,i} - x^k\|^2 \quad (7)$$

where

$$x^{k,i} \in \text{prox}_{\gamma_{k,i} h}(x^k - \gamma_{k,i} \nabla f(x^k)) \quad (8)$$

do

- 6: $\gamma_{k,i+1} \leftarrow \tau \gamma_{k,i}$
 - 7: $i \leftarrow i + 1$
 - 8: **end while**
 - 9: $x^{k+1} \leftarrow x^{k,i}$
 - 10: $k \leftarrow k + 1$
 - 11: **until** A suitable termination criterion is violated at iteration k
-

Uma possível modificação simples e de amplo emprego em outros esquemas não monótonos é retornar

$$x^{best} \in \arg \min_{x^k \in \{x^k\}} F(x^k), \quad (9)$$

em que $\{x^k\}$ é a sequência gerada pelo NPG, ao invés do último iterado calculado.

A teoria de convergência presente em Kanzow and Mehlitz [2021], apesar de mais fraca que a de métodos semelhantes, garante convergência do Algorithm 1 para um ponto M-estacionário quando h é somente semicontínua inferior, como a nossa função de interesse.

NSPG

A primeira variante do Algorithm 1, o *Nonmonotone Spectral Proximal Gradient method* (NSPG), utiliza o passo espectral primal Barzilai and Borwein [1988], RAYDAN [1993]. Várias abordagens foram propostas para lidar com funções objetivo não convexas, nas quais o tamanho do passo espectral pode se tornar negativo. Para o tamanho de passo inicial em cada iteração é usada a proposta em Dai et al. [2015], que consiste em

$$\gamma_{k,0} \leftarrow \gamma_{k,+}^{BBR} := \begin{cases} \gamma_k^{BBR}, & \gamma_k^{BBR} > 0 \\ \frac{\|s^k\|}{\|r^k\|}, & \text{c.c.} \end{cases}, \quad (10)$$

em que γ_k^{BBR} é o passo espectral definido como

$$\gamma_k^{BBR} := \frac{(s^k)^T s^k}{(s^k)^T r^k},$$

sendo $s^k := x^k - x^{k-1}$ e $r^k := \nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})$.

O passo espectral pode ser entendido como um passo quasi-Newton em que H_k , a aproximação da Hessiana em x^k , é restrita a uma estrutura simplificada com somente uma variável de decisão, $H_k := \mu_k I$, $\mu_k \in \mathbb{R}$. A equação secante,

$$H_k s^k = r^k, \quad (11)$$

então se reduz à $\mu_k s^k = r^k$. Em geral, essa equação não possui solução exata, sendo então aceita a solução de quadrados mínimos, isso é,

$$\mu_k = \arg \min_{\mu \in \mathbb{R}} \| \mu s^k - r^k \|^2 = \frac{(s^k)^T r^k}{(s^k)^T s^k} = \frac{1}{\gamma_k^{BBR}}.$$

De fato, a interpretação acima aplicada em (8) para $i = 0$ implica

$$\begin{aligned} x^{k,0} &\in \arg \min_{u \in \mathbb{R}^p} \left\{ h(u) + \langle \nabla f(x^k), u - x^k \rangle + \frac{1}{2\gamma_k^{BBR}} \|u - x^k\|^2 \right\} \\ &= \arg \min_{u \in \mathbb{R}^p} \left\{ \langle \nabla f(x^k), u - x^k \rangle + \frac{\mu_k}{2} (u - x^k)^T I (u - x^k) + h(u) \right\} \\ &= \arg \min_{u \in \mathbb{R}^p} \left\{ \langle \nabla f(x^k), u - x^k \rangle + \frac{1}{2} (u - x^k)^T H_k (u - x^k) + h(u) \right\} \\ &= \arg \min_{u \in \mathbb{R}^p} \left\{ f(x^k) + \langle \nabla f(x^k), u - x^k \rangle + \frac{1}{2} (u - x^k)^T H_k (u - x^k) + h(u) \right\}, \end{aligned}$$

ou seja, o esquema proximal com o passo espectral consiste em minimizar uma aproximação de segunda ordem de f em x^k (termos à esquerda na última equação) e h original, o que é essencialmente uma aproximação da função objetivo F completa.

Em experimentos realizados em Barbosa and Silva [2024], foi averiguado que o NSPG superou outros métodos proximais no problema (R) com $\lambda_q = 0$ tanto na velocidade de convergência quanto na qualidade das soluções obtidas em valor objetivo. Esses resultados motivaram a tentativa de empregá-lo juntamente com técnicas de otimização local combinatorial Hazimeh and Mazumder [2020].

NSPGH

Outra forma de escrever a equação secante (11) (também denominada forma primal) é na sua forma dual $B_k r^k = s^k$, na qual B_k agora aproxima localmente a inversa da Hessiana. Tomando $B_k = \mu_k I$ resulta agora no tamanho de passo espectral dual

$$\gamma_k^{BBR2} := \mu_k = \arg \min_{\mu \in \mathbb{R}} \| \mu r^k - s^k \|^2 = \frac{(s^k)^T r^k}{(r^k)^T r^k}.$$

Pela desigualdade de Cauchy-Schartz, $\gamma_k^{BBR} \geq \gamma_k^{BBR2}$. Analogamente,

$$\gamma_{k,+}^{BBR2} := \begin{cases} \gamma_k^{BBR2}, & \gamma_k^{BBR2} > 0 \\ \frac{\|r^k\|}{\|s^k\|}, & \text{c.c.} \end{cases}. \quad (12)$$

Os trabalhos Goldstein et al. [2014], Zhou et al. [2006] mostraram que o desempenho de algoritmos proximais pode ser melhorado usando uma escolha híbrida entre esses dois tamanhos de passo,

$$\gamma_{k,+}^{BBRH} = \begin{cases} \gamma_{k,+}^{BBR2}, & \gamma_{k,+}^{BBR} < \delta\gamma_{k,+}^{BBR2} \\ \gamma_{k,+}^{BBR} - \frac{1}{\delta}\gamma_{k,+}^{BBR2}, & \text{c.c.} \end{cases} \quad (13)$$

aqui, o hiperparâmetro $\delta \in \mathbb{R}$ é tipicamente escolhido como 2, como será na nossa implementação.

O Algorithm 1 tal que $\gamma_{k,0} \leftarrow \gamma_{k,+}^{BBRH}$ será chamado de NSPH, em que “H” representa *hybrid*.

VMNSPG

Com o intuito de permitir mais informação de segunda ordem, em Park et al. [2020] utiliza um operador proximal com métrica matricial. Seja $g : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$, $U \in S_{++}^p$ (simétrica positiva definida) e $\|y\|_U := \sqrt{y^T U y}$ a norma U . O operador proximal com métrica variável é definido como

$$\text{prox}_{g,U}(x) := \arg \min_{u \in \mathbb{R}^k} g(u) + \frac{1}{2} \|u - x\|_U^2. \quad (14)$$

No geral, esse subproblema proximal é de difícil solução devido ao acoplamento de variáveis causado pela multiplicação por U . Por esse motivo, a utilização desse prox é geralmente restrita a matrizes U diagonais e funções g separáveis, garantindo, assim, separabilidade de (14).

Também nesse artigo, é introduzido um esquema semelhante ao Algorithm 1 que utiliza a atualização

$$x^{k,i} \in \text{prox}_{h,U_{k,i}}(x^k - U_{k,i}^{-1} \nabla f(x^k)) \quad (15)$$

em lugar de (8) e o critério

$$F(x^{k,i}) > \max_{0 \leq j \leq \min\{k,m-1\}} F(x^{k-j}) - \frac{\delta}{2} \|x^{k,i} - x^k\|_{U_{k,i}}^2$$

em lugar de (7), em que analogamente $U_{k,i} = \tau^i U_{k,0}$ e $U_{k,0}$ é diagonal positiva definida. A teoria de convergência presente é restrita à h convexa, f L -suave e fortemente convexa e parâmetro de não monotonicidade $m = 1$. Contudo, é possível que a teoria de Kanzow and Mehlitz [2021] seja aplicável para relaxar essas hipóteses.

Seja U_{k-1} a métrica que gerou o iterado x^{k-1} por (15). Para melhor capturar a geometria Hessiana de f , os autores de Park et al. [2020] propõe a métrica diagonal dada pelo problema

$$\begin{aligned} \min_{U \in \mathbb{R}^p} & \|Us^k - y^k\|_2^2 + \mu\|U - U_{k-1}\|_F^2 \\ \text{s.a. } & \frac{1}{\gamma_{k,+}^{BBR}} I \preceq U \preceq \frac{1}{\gamma_{k,+}^{BBR2}} I, U = \text{Diag}(u). \end{aligned} \quad (16)$$

Aqui, o hiperparâmetro $\mu > 0$ controla o *trade-off* entre a satisfação da equação secante (11) e a proximidade com a métrica anterior U_{k-1} . Um μ grande é usado

se é esperado que a aproximação do Hessiano não mude muito entre iterações. Já um μ serve como salvaguarda e evita operações indefinidas. Os elementos diagonais são limitados pelos passos espetrais primal e dual, conferindo garantia de não negatividade ou passos muito grandes em uma coordenada.

O problema (16) possui solução em forma fechada dada por

$$(U_{k,+}^{DBBR})_{ii} := \max \left\{ \frac{1}{\gamma_{k,+}^{BBR}}, \min \left\{ \frac{1}{\gamma_{k,+}^{BBR2}}, \frac{(s_i^k)^2 + \mu(U_{k-1})_{ii}^2}{(s_i^k)^2 + \mu} \right\} \right\} \quad \forall i \in [p].$$

Essa versão do Algorithm 1 em que $U_{k,0} \leftarrow U_{k,+}^{DBBR}$ será denominada *Variable Metric Nonmonotone Spectral Proximal Gradient method* (VMNSPG).

Otimização local combinatorial

Um algoritmo iterativo para encontrar um mínimo PSI(k) através de perturbações no suporte é apresentado em Hazimeh and Mazumder [2020]. Em cada iteração ℓ , é executado algum dos algoritmos anteriores para obter um mínimo CW ou ponto M-estacionário x^ℓ . Esse algoritmo será chamado de interior. Após isso é buscado um movimento descendente para o problema combinatório

$$\begin{aligned} \min_{u, S_1, S_2} & F(x^\ell - U_{S_1}x^\ell + U_{S_2}u) \\ \text{s.a } & S_1 \subseteq S, S_2 \subseteq S^c, |S_1|, |S_2| \leq k, u \in \mathbb{R}^{|S_2|} \end{aligned} \tag{17}$$

onde S é o suporte de x^ℓ . Se existir solução viável \hat{x} para o problema acima com $F(\hat{x}) < F(x^\ell)$, então \hat{x} pode não ser um mínimo CW/ponto M-estacionário. Neste caso, reinicializa-se o algoritmo escolhido com \hat{x} . Caso contrário, e ademais x^ℓ é solução estacionária (por exemplo, mínimo CW, gerado pelo CD), então ele é PSI(k). O algoritmo a seguir resume o procedimento.

Algorithm 2 *Composite Partial Swap Inescapable of order k method (CPSI(k))*

Input: $\hat{x}^0 \in \mathbb{R}^p$, $k \in \mathbb{N}^+$ and an inner algorithm

Output: Last $\hat{x}^{\ell+1}$ computed (which is a PSI(k) minimum)

```

1: Initialize  $\ell := 0$ 
2: while true do
3:    $\hat{x}^{\ell+1} \leftarrow$  output of inner algorithm initialized with  $\hat{x}^\ell$ 
4:   if problem (17) has feasible solution  $\hat{x}$  with  $F(\hat{x}) < F(\hat{x}^{\ell+1})$  then
5:      $\hat{x}^{\ell+1} \leftarrow \hat{x}$ 
6:      $\ell \leftarrow \ell + 1$ 
7:   else
8:     break
9:   end if
10: end while

```

Para o caso $k = 1$, o seguinte algoritmo busca uma solução factível melhorada do problema (17).

Algorithm 3 Search for improved solution of problem (17) with $k = 1$

Input: x^ℓ
Output: \hat{x} (improved solution) if found, otherwise x^ℓ

- 1: $S \leftarrow \text{Supp}(x^\ell)$
- 2: **for** $i \in S$ **do**
- 3: **for** $j \in S^c$ **do**
- 4: $v_j^* \leftarrow \arg \min_{v_j \in \mathbb{R}} F(x^\ell - x_i^\ell e_i + v_j e_j)$ (18)
- 5: $F_j^* \leftarrow F(x^\ell - x_i^\ell e_i + v_j^* e_j)$
- 6: **end for**
- 7: $\vartheta \leftarrow \arg \min_{j \in S^c} F_j^*$
- 8: **if** $F_\vartheta^* < F(x^\ell)$ **then**
- 9: $\hat{x} \leftarrow x^\ell - x_i^\ell e_i + v_\vartheta^* e_\vartheta$
- 10: **break**
- 11: **end if**
- 12: **end for**

A solução de (18) é dada por

$$v_j^* \in \text{prox}_{\frac{1}{\|A_i\|_2^2 + 2\lambda_2}(\lambda_0 \mathbf{1}_{\{0\}}(\cdot) + \lambda_1 |\cdot|)} \left(x_{ij}^\ell \right), \quad (19)$$

em que x_{ij}^ℓ é a j -ésima variável minimizadora da parte suave de F a partir de $x^\ell - x_i^\ell e_i$

$$x_{ij}^\ell := \arg \min_{u_j \in \mathbb{R}} f(x^\ell - x_i^\ell e_i + u_j e_j) = \frac{\langle b - \sum_{l \neq i} x_l^\ell A_l, A_j \rangle}{\|A_j\|_2^2 + 2\lambda_2} = \frac{\langle r^\ell + x_i^\ell A_i, A_j \rangle}{\|A_j\|_2^2 + 2\lambda_2}.$$

Além disso, valem as seguintes equivalências

$$\begin{aligned} \arg \min_{j \in S^c} F_j^* &\iff \arg \max_{j \in S^c} |v_j^*| \\ F_\vartheta^* < F(x^\ell) &\iff |v_\vartheta^*| > |x_i^\ell|. \end{aligned}$$

Essas propriedades dão origem a seguinte versão eficiente do Algorithm 3.

Algorithm 4 Efficient search for improved solution of problem (17) with $k = 1$

Input: x^ℓ
Output: \hat{x} (improved solution) if found, otherwise x^ℓ

- 1: $S \leftarrow \text{Supp}(x^\ell)$
- 2: **for** $i \in S$ **do**
- 3: **for** $j \in S^c$ **do**
- 4: Compute v_j^* using (19)
- 5: **end for**
- 6: $\vartheta \leftarrow \arg \max_{j \in S^c} |v_j^*|$
- 7: **if** $|v_\vartheta^*| > |x_i^\ell|$ **then**
- 8: $\hat{x} \leftarrow x^\ell - e_i x_i^\ell + e_\vartheta v_\vartheta^*$
- 9: **break**
- 10: **end if**
- 11: **end for**

0.5 Experimentos numéricos

Nessa seção serão efetuados experimentos com o intuito de comparar os algoritmos apresentados.

Setup experimental

Geração de dados

Assim como em Hazimeh and Mazumder [2020], utilizamos conjuntos de dados sintéticos para uma ampla variedade de tamanhos e configurações de problemas. A matriz de dados é gerada com distribuição gaussiana multivariada $A_{n \times p} \sim \text{MVN}(0, \Sigma)$, e então suas colunas são normalizadas tal que $\|A_i\|_2 = 1 \forall i$ para simplificar as atualizações dos algoritmos. Como verdade base, é utilizado um vetor de coeficientes esparsos $x^\dagger \in \mathbb{R}^p$ com k^\dagger entradas não nulas igualmente espaçadas e com valor 1. É escolhido também um valor aproximado para o SNR, definido como

$$\text{SNR} := \frac{\mathbb{E}[\|Ax^\dagger\|_2^2]}{\mathbb{E}[\|b - Ax^\dagger\|_2^2]},$$

e com base nessa escolha é tomado

$$\sigma = \sqrt{\frac{\|Ax^\dagger\|_2^2}{n \cdot \text{SNR}}}.$$

Em seguida, o vetor de resposta é gerado como $b = Ax^\dagger + \epsilon$, onde $\epsilon_i \stackrel{\text{iid}}{\sim} N(0, \sigma^2)$ é independente de A . Dessa forma, garantimos que

$$\frac{\|Ax^\dagger\|_2^2}{\|b - Ax^\dagger\|_2^2} = \frac{\|Ax^\dagger\|_2^2}{\|\epsilon\|_2^2} \approx \frac{\|Ax^\dagger\|_2^2}{n\sigma^2} = \text{SNR},$$

ou seja, o SNR verdadeiro seja próximo do SNR desejado.

Foram consideradas as seguintes instâncias de $\Sigma := ((\sigma_{ij}))$:

- *Correlação constante:* É definido $\sigma_{ij} = \rho \forall i \neq j$ e $\sigma_{ii} = 1 \forall i$;

- *Correlação exponencial:* É definido $\sigma_{ij} = \rho^{|i-j|}$ $\forall i, j$, com a convenção $0^0 = 1$.

Parâmetros dos algoritmos

Após experimentos iniciais de ajuste de hiperparâmetros, foram escolhidos $m = 15$, $\delta = 0.01$ e $\tau = 0.25$ para o NPG. As salvaguardas γ_{min} e γ_{max} são usualmente tomadas como valores arbitrariamente pequenos e grandes, respectivamente. Os tamanhos de passo espectral iniciais, $\gamma_{0,+}^{BBR}$ e $\gamma_{0,+}^{BBR2}$, foram tomados via (10) e (12) com a convenção de $x^{-1} = x^0 - 10^{-5}\nabla f(x^0)$. Já a métrica diagonal espectral inicial, $U_{0,+}^{DBBR}$, foi definida com esses tamanhos de passo e a convenção de $U_{-1,+}^{DBBR}$ nula. Para o VMNSPG, $\mu = 10^{-3}$ apresentou os melhores resultados dentre os valores testados. Quanto ao CDSS, somente foram ordenadas um quarto das coordenadas.

Comparação entre CDSS e NPG

Consideramos a eficiência dos algoritmos propostos para o problema (R) com $\lambda_q = 0$ (problema ℓ_0 puro). Foi utilizado um conjunto de dados com correlação exponencial, $\rho = 0.5$, $n = 500$, $p = 2000$, $k^\dagger = 100$, SNR = 10. Foi tomado $\lambda_0 = 0.5 \frac{\|A^T b\|_\infty^2}{2L_f}$ para obter uma penalização razoável (veja [Barbosa and Silva, 2024, Exemplo 3] para uma explicação dessa escolha). Foram geradas 50 inicializações com suporte de tamanho k^\dagger com índices uniformemente escolhidos de $[p]$ e valores com distribuição uniforme em $(0, 1)$. Para cada inicialização é rodado cada algoritmo. A medida de recuperação do suporte é definida como

$$\frac{|Supp(x) \cap Supp(x^\dagger)|}{\max\{|Supp(x)|, k^\dagger\}},$$

que quantifica a fração de variáveis verdadeiramente ativas recuperadas, normalizada pelo máximo entre o tamanho do suporte estimado e o verdadeiro k^\dagger . Essa medida penaliza tanto falsos positivos quanto falsos negativos e valores próximos de 1 indicam recuperação alta. O critério de parada utilizada em todos os algoritmos foi uma mudança relativa no objetivo menor que 10^{-7} .

A Subfigure 1(c) contém o *box plot* do número de iterações, em que uma passagem pelas p coordenadas corresponde a uma iteração do CD. Essa métrica não reflete precisamente a velocidade de cada algoritmo uma vez que não considera, por exemplo, o número de sub iterações na busca linear do NPG e a reordenação efetuada no CD. Mesmo assim, é possível ter uma ideia de que a convergência do CD é significativamente mais rápida que a dos métodos proximais não monótonos apresentados. O VMSPG demonstra convergência mais rápida entre os métodos NPG, provavelmente devido à sua incorporação de mais informação de segunda ordem. Seu número de iterações, com mediana em torno de 30, fica o mais próximo do CD, com mediana em torno de 20. O passo espectral híbrido do NSPGH parece acelerar levemente a convergência em comparação com o passo primal usado no NSPG, e ambos performam cerca de duas a três vezes pior que o CD.

Contudo, uma análise da qualidade das soluções obtidas através da Subfigure 1(a) e Subfigure 1(b) demonstra que, apesar de mais lentos, ambos o NSPG e NSPGH obtém melhores resultados em valor objetivo e recuperação

de suporte. Em particular nesse segundo aspecto, a diferença é bastante significativa. O VMNSPG obteve a pior desempenho em ambos os quesitos, apesar da sua convergência mais rápida.

A capacidade do NPG com estratégias de passo espectral encontrar soluções de qualidade está diretamente ligada a não monotonia da sequência de iterados e a permissão de tamanhos de passo maiores que permitem maior liberdade de movimento Barbosa and Silva [2024]. No caso do VMNSPG, é possível que uma convergência local mais rápida restrinja essa movimentação e a busca por soluções melhores. A excelente recuperação do suporte indica que o NSPG e NSPGH produzem candidatos mais adequados para a aplicação da otimização combinatorial local, como será visto nos experimentos a seguir. Esse resultado é curioso visto que esses algoritmos só possuem garantia de convergência a pontos M-estacionários, enquanto o CD busca mínimos CW, cuja definição é mais restritiva (veja (6)).

Para melhor analisar as características dos limites das sequências dos algoritmos NPG, também foi executado o CD a partir desses pontos para determinar se eles também eram mínimos CW. Consideramos que caso o suporte não seja alterado durante essa passagem pelo CD e o número de iterações seja pequeno (2 ou menos) antes do critério de parada, então o ponto pode razoavelmente ser considerado (numericamente) CW. Para o NSPG, 60% das inicializações resultaram em pontos CW, enquanto essa porcentagem foi 44% para o NSPGH. O VMNSPG não resultou em nenhum ponto CW seguindo essa definição.

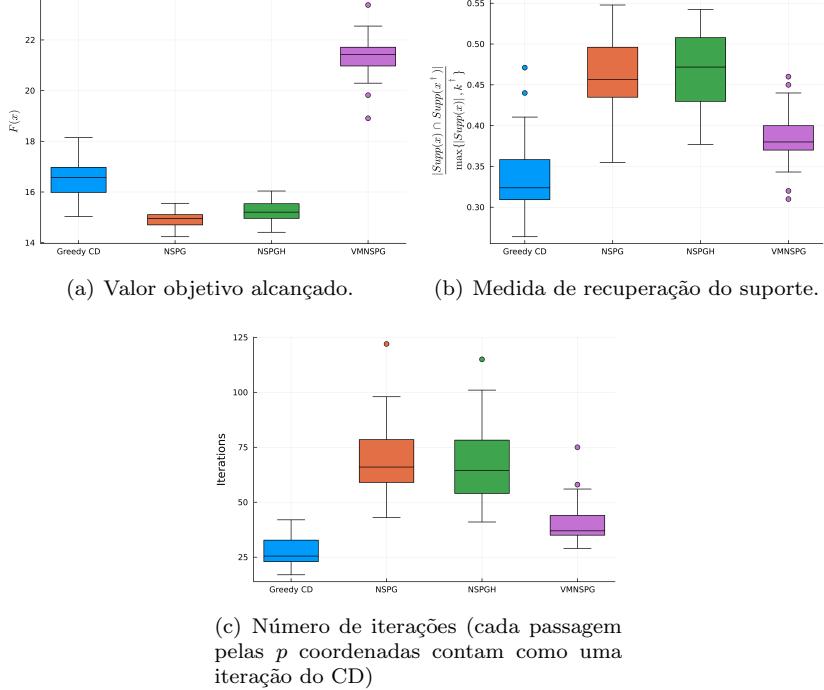


Figura 1: *Box plots* dos resultados dos algoritmos testados para 50 iniciizações. Correlação exponencial, $\rho = 0.5$, $n = 500$, $p = 2000$, $k^\dagger = 100$, SNR = 10.

Comparação com otimização combinatorial

Nesse experimento, visamos identificar o efeito que cada algoritmo tem quando empregado como *inner solver* do CDPsi(1) (Algorithm 2). Serão testados o CD, o NSPG e o NSPG seguido do CD. Como comparação da qualidade das soluções, também foi incluído o NSPG sem estratégia combinatorial.

O setup experimental é idêntico ao da seção anterior. Além das medidas apresentadas ali, incluímos o número de iterações externas (iterações do Algorithm 2). O número de iterações total se refere ao somatório de iterações de todas as chamadas do *inner solver* durante a execução.

A Subfigure 2(c) mostra que a diferença de iterações entre o CD e o NSPG se tornou menos pronunciada que na Subfigure 1(c). Isso se deve ao fato de que o CD executa mais iterações externas em média, ou seja, precisa de mais perturbações para melhorar suas soluções, como visto na Subfigure 2(d). A otimização combinatorial causa um grande aumento no número de iterações do NSPG.

A qualidade das soluções obtidas por métodos NSPG (incluindo sem otimização combinatorial) continua bastante superior àquelas do CD nos critérios analisados (Subfigure 2(a) e Subfigure 2(b)). De fato, a otimização combinatorial melhora as soluções do NSPG, mas o ganho é relativamente pequeno nesse experimento.

A utilização conjunta do NSPG e CD se mostrou vantajosa em todos os aspectos se comparado com o NSPG puro.

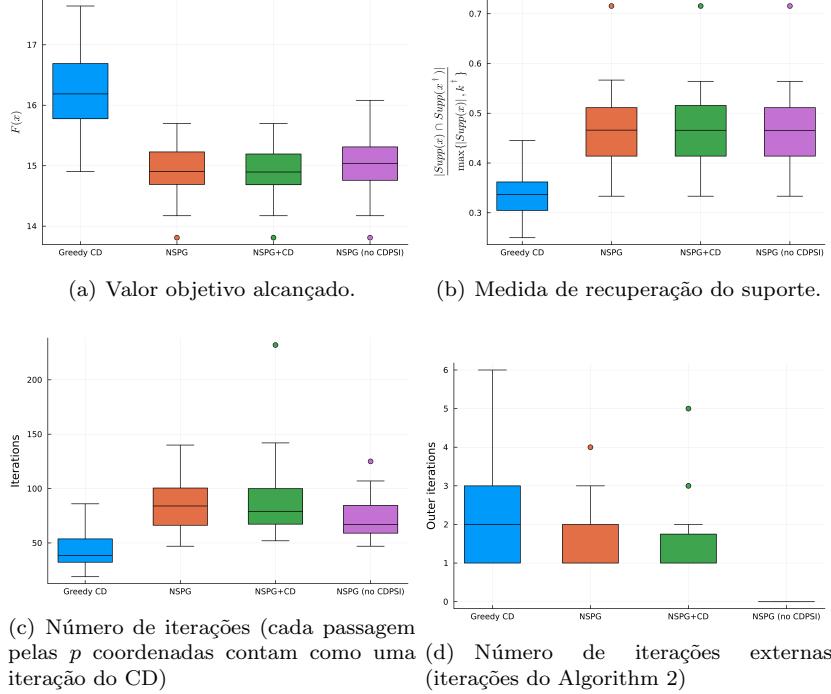


Figura 2: *Box plots* dos resultados dos algoritmos testados para 50 iniciizações. Correlação exponencial, $\rho = 0.5$, $n = 500$, $p = 2000$, $k^\dagger = 100$, SNR = 10.

Aumentando o SNR para 300 para permitir recuperação completa do suporte, vemos uma diferença drástica na qualidade das soluções, com somente um aumento pequeno no número de iterações (Figura 3). A estratégia NSPG+ CD continua sendo a mais atrativa, com menos soluções *outliers* com um custo levemente superior em iterações, porém todas as estratégias NSPG apresentam recuperação perfeita da solução verdadeira com probabilidade alta.

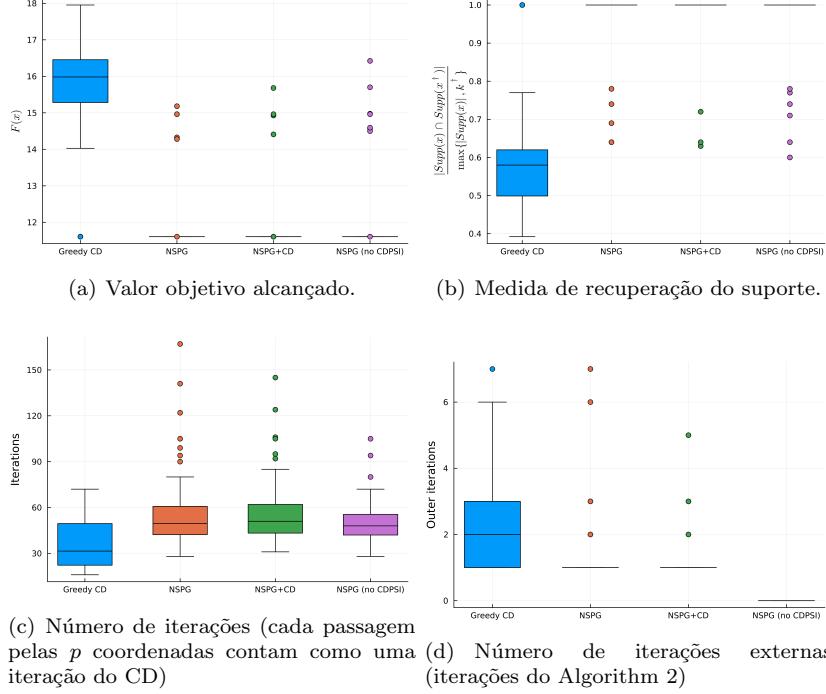


Figura 3: *Box plots* dos resultados dos algoritmos testados para 50 iniciizações. Correlação exponencial, $\rho = 0.5$, $n = 500$, $p = 2000$, $k^\dagger = 100$, SNR = 300.

Para o próximo experimento, mantivemos os parâmetros anteriores e trocando o tipo de correlação por constante, um cenário significativamente mais difícil. A Figura 4 apresenta resultados bastante drásticos em favor de estratégias NSPG com busca combinatorial. Em comparação com o CD, o ganho em iterações (tanto internas quanto externas) é substancial. Já em comparação com o NSPG sem busca combinatorial, a qualidade das soluções é muito superior. Entre o NSPG puro e o NSPG+CD, esse primeiro se provou quase tão bom em qualidade de soluções, mas com mais iterações externas, as quais são a parte mais expressiva no tempo de execução total.

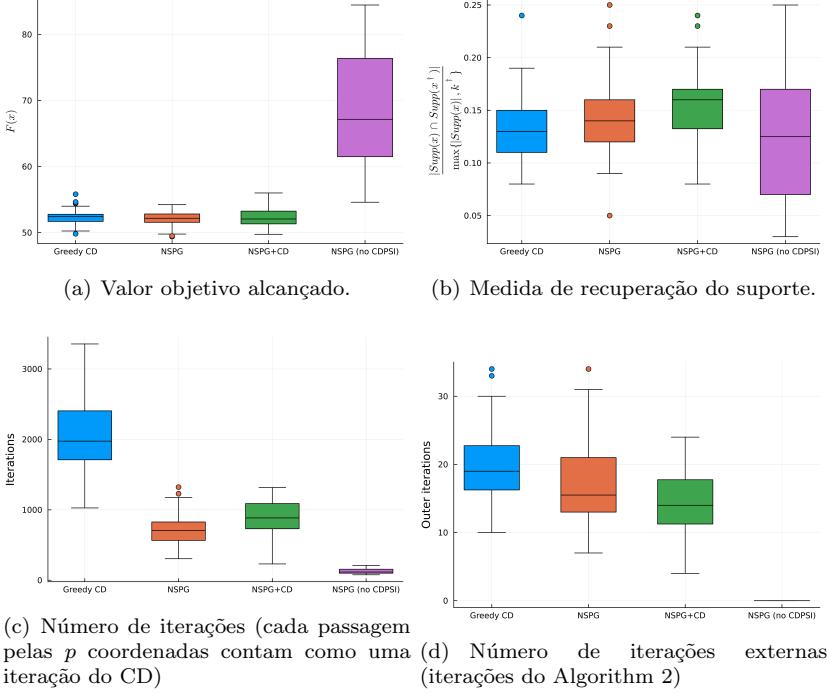


Figura 4: *Box plots* dos resultados dos algoritmos testados para 50 inicializações. Correlação constante, $\rho = 0.5$, $n = 500$, $p = 2000$, $k^\dagger = 100$, SNR = 300.

Por fim, com correlação exponencial, dividimos todas as dimensões por 2, tomamos $k^\dagger = 25$, e aumentamos a correlação para $\rho = 0.9$ (Figura 5). Todos os métodos com otimização combinatorial obtiveram 100% de recuperação do suporte original, enquanto o NSPG sem essa estratégia não. O número de iterações (internas e externas) do CD foi muito mais alto, indicando novamente que as soluções obtidas desse método exigem mais perturbações do suporte antes de estabilizar.

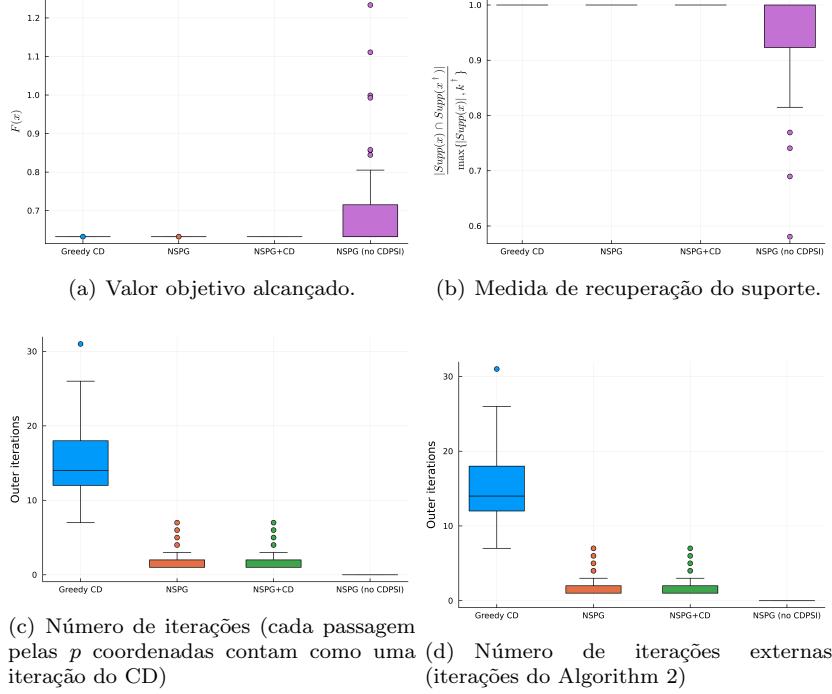


Figura 5: *Box plots* dos resultados dos algoritmos testados para 50 inicializações. Correlação exponencial, $\rho = 0.9$, $n = 250$, $p = 1000$, $k^\dagger = 25$, SNR = 300.

Considerações sobre a regularização e estratégias de validação cruzada

Para a seleção do parâmetro de regularização λ , implementamos e comparamos três estratégias de validação cruzada (CV):

1. *Validação Cruzada Padrão (Decrescente)*: Segue a ordem proposta em Hazimeh and Mazumder [2020], iniciando com um λ grande e decrescendo. Utiliza $\lambda_{novo} = 0.9 \cdot \min(\lambda_{ant}, \lambda_{calc})$;
2. *Validação Cruzada Inversa (Crescente)*: Percorre o caminho na direção oposta, iniciando com λ pequeno. Utiliza $\lambda_{novo} = 0.9^{-1} \cdot \max(\lambda_{ant}, \lambda_{calc})$;
3. *Validação Cruzada Adaptativa*: Sonda os extremos e escolhe a direção inicial de varredura baseada no menor erro de validação, permitindo reversão.

Para métodos inicializados com passo espectral (como o SPG), o cálculo de λ_{calc} foi ajustado para compensar a escala introduzida pelo passo $\gamma^{0,0}$. Adicionalmente, um refinamento final seleciona a melhor solução entre o *warm-start* do caminho e um *cold-start* (vetor nulo).

A escolha da estratégia de validação cruzada para cada algoritmo foi baseada em testes preliminares de desempenho. A Figura 6 ilustra a comparação

de recuperação de suporte para as diferentes estratégias. Resultados adicionais para outros cenários de correlação e dimensionalidade podem ser encontrados no Apêndice A (Figuras 1, 2 e 3). Observa-se que métodos baseados em SPG beneficiam-se significativamente da abordagem adaptativa, que evita mínimos locais inadequados explorando ambas as direções. O SPGpCDSS demonstra comportamento análogo ao SPG, obtendo melhores resultados com a validação cruzada adaptativa. Já para o CDSS, a abordagem padrão mostrou-se robusta e eficiente. A abordagem inversa falha para o CDSS em cenários de correlação constante pois a primeira coordenada é ativada e as demais componentes do gradiente ficam menores que o *threshold* do operador proximal e depois o λ cresce, impossibilitando a expansão do suporte, que fica preso em 1. Assim, os resultados reportados nas seções anteriores utilizam CV Adaptativa para SPG/NSPG/SPGpCDSS e CV Padrão para CDSS.

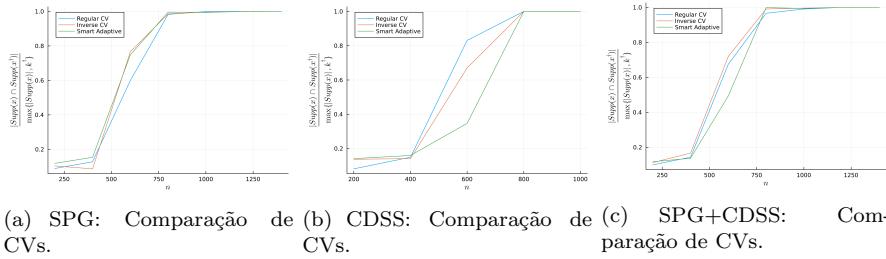


Figura 6: Comparaçao das estratégias de validação cruzada para SPG, CDSS e SPG+CDSS (Correlação exponencial, $\rho = 0.5$, $p = 2000$, $k^\dagger = 100$, SNR = 10, $T = 10$ repetições).

Detalhes de implementação do CDSS

O algoritmo CDSS emprega a estratégia de *Active Set* conforme descrito em Hazimeh and Mazumder [2020]. O método executa ciclos completos de desida coordenada até que o suporte da solução se mantenha inalterado por 10 iterações consecutivas (**ActiveSetNum=10**). A partir desse ponto, as iterações são restritas apenas às variáveis não-nulas (conjunto ativo) até a convergência. Por fim, uma verificação de otimalidade é realizada em todas as variáveis para garantir que nenhuma coordenada fora do suporte viola as condições de mínimo local. Adicionalmente, para reduzir o custo computacional nas fases iniciais, utilizamos uma estratégia de ordenação parcial (*partial greedy sort*), onde apenas os 25% das variáveis com maior correlação com o resíduo são ordenadas para a varredura gulosa.

Apêndice A

Comparação adicional de estratégias de validação cruzada

Neste apêndice, apresentamos comparações adicionais das estratégias de validação cruzada para diferentes cenários de correlação e dimensionalidade, complementando a discussão da Figura 6.

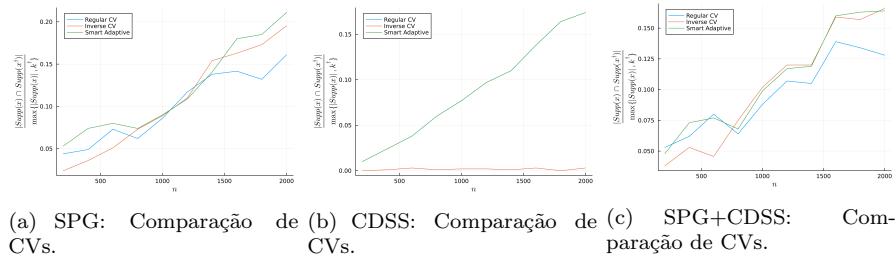


Figura 1: Comparação das estratégias de validação cruzada (Correlação constante, $\rho = 0.5$, $p = 2000$, $k^\dagger = 100$, SNR = 10).

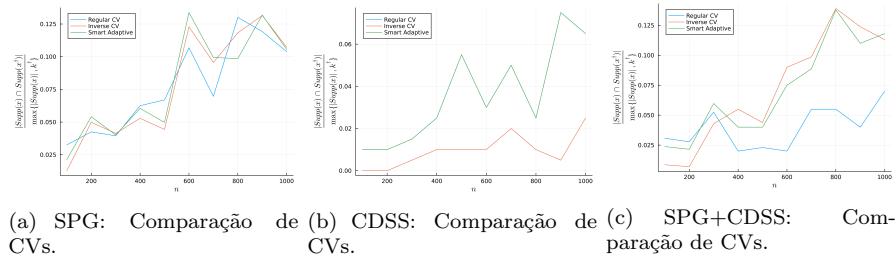
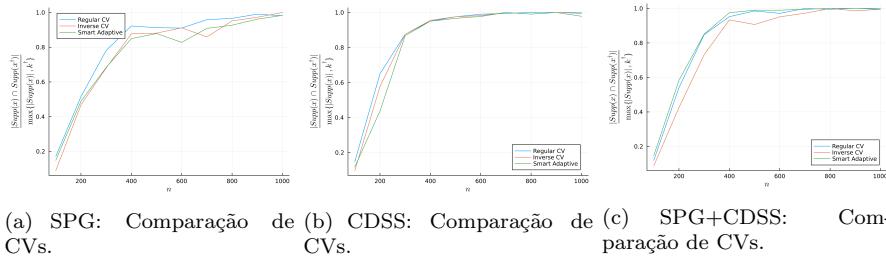


Figura 2: Comparação das estratégias de validação cruzada (Correlação constante, $\rho = 0.9$, $p = 1000$, $k^\dagger = 20$, SNR = 5).



(a) SPG: Comparação de CVs. (b) CDSS: Comparação de CVs. (c) SPG+CDSS: Comparação de CVs.

Figura 3: Comparação das estratégias de validação cruzada (Correlação exponencial, $\rho = 0.9$, $p = 1000$, $k^\dagger = 20$, SNR = 5).

Referências Bibliográficas

- Gabriel Belém Barbosa and Paulo José da Silva Silva. Relaxing smoothness conditions for non-monotone optimization methods applied to discontinuous composite problems. Manuscript in progress, 2024.
- Jonathan Barzilai and Jonathan M. Borwein. Two-Point Step Size Gradient Methods. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 8(1):141–148, 01 1988. ISSN 0272-4979. doi: 10.1093/imanum/8.1.141. URL <https://doi.org/10.1093/imanum/8.1.141>.
- Amir Beck. *First-Order Methods in Optimization*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 2017. doi: 10.1137/1.9781611974997. URL <https://pubs.siam.org/doi/abs/10.1137/1.9781611974997>.
- Amir Beck and Yonina C. Eldar. Sparsity constrained nonlinear optimization: Optimality conditions and algorithms. *SIAM Journal on Optimization*, 23(3):1480–1509, 2013. doi: 10.1137/120869778. URL <https://doi.org/10.1137/120869778>.
- Peter Bühlmann and Sara van de Geer. *Statistics for High-Dimensional Data: Methods, Theory and Applications*. Springer Publishing Company, Incorporated, 1st edition, 2011. ISBN 3642201911.
- Thomas Blumensath and Mike E. Davies. Iterative hard thresholding for compressed sensing. *Applied and Computational Harmonic Analysis*, 27(3):265–274, 2009. ISSN 1063-5203. doi: <https://doi.org/10.1016/j.acha.2009.04.002>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1063520309000384>.
- Patrick Breheny and Jian Huang. Coordinate descent algorithms for nonconvex penalized regression, with applications to biological feature selection. *Annals of Applied Statistics*, 5(1):232–253, 2011. doi: 10.1214/10-AOAS388. URL <https://doi.org/10.1214/10-AOAS388>.
- Yu-Hong Dai, Mehiddin Al-Baali, and Xiaoqi Yang. *A Positive Barzilai–Borwein-Like Stepsize and an Extension for Symmetric Linear Systems*, pages 59–75. na, 01 2015. ISBN 978-3-319-17688-8. doi: 10.1007/978-3-319-17689-5_3.
- Jianqing Fan and Runze Li. Variable selection via nonconcave penalized likelihood and its oracle properties. *Journal of the American Statistical Association*, 96(456):1348–1360, 2001. ISSN 01621459. URL <http://www.jstor.org/stable/3085904>.

- Jerome H. Friedman, Trevor Hastie, and Rob Tibshirani. Regularization paths for generalized linear models via coordinate descent. *Journal of Statistical Software*, 33(1):1–22, 2010. doi: 10.18637/jss.v033.i01. URL <https://www.jstatsoft.org/index.php/jss/article/view/v033i01>.
- Tom Goldstein, Christoph Studer, and Richard Baraniuk. A field guide to forward-backward splitting with a fasta implementation. *ArXiv*, abs/1411.3406, 2014. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:9037325>.
- L. Grippo, F. Lampariello, and S. Lucidi. A nonmonotone line search technique for newton’s method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 23(4):707–716, 1986. ISSN 00361429. URL <http://www.jstor.org/stable/2157617>.
- Trevor Hastie, Robert Tibshirani, and Martin Wainwright. *Statistical Learning with Sparsity: The Lasso and Generalizations*. Chapman & Hall/CRC, 2015. ISBN 1498712169.
- Hussein Hazimeh and Rahul Mazumder. Fast best subset selection: Coordinate descent and local combinatorial optimization algorithms. *Operations Research*, 68(5):1517–1537, September 2020. ISSN 0030-364X. doi: 10.1287/opre.2019.1919. URL <https://doi.org/10.1287/opre.2019.1919>.
- Hussein Hazimeh, Rahul Mazumder, and Ali Saab. Sparse regression at scale: branch-and-bound rooted in first-order optimization. *Mathematical Programming*, 196:1–42, 10 2021. doi: 10.1007/s10107-021-01712-4.
- Christian Kanzow and Patrick Mehlitz. Convergence properties of monotone and nonmonotone proximal gradient methods revisited. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 195:624 – 646, 2021. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:244896538>.
- Rahul Mazumder, Peter Radchenko, and Antoine Dedieu. Subset selection with shrinkage: Sparse linear modeling when the snr is low. *Operations Research*, 71, 08 2017. doi: 10.1287/opre.2022.2276.
- B.S. Mordukhovich. *Variational analysis and applications*. Springer, Berlin, 2018. doi: 10.1007/978-3-319-92775-6.
- Jean Jacques Moreau. Fonctions convexes duales et points proximaux dans un espace hilbertien. *Comptes rendus hebdomadaires des séances de l’Académie des sciences*, 255:2897–2899, 1962. URL <https://hal.science/hal-01867195>.
- B. K. Natarajan. Sparse approximate solutions to linear systems. *SIAM Journal on Computing*, 24(2):227–234, 1995. doi: 10.1137/S0097539792240406. URL <https://doi.org/10.1137/S0097539792240406>.
- Youngsuk Park, Sauptik Dhar, Stephen Boyd, and Mohak Shah. Variable metric proximal gradient method with diagonal barzilai-borwein stepsize. In *ICASSP 2020 - 2020 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*, pages 3597–3601, 05 2020. doi: 10.1109/ICASSP40776.2020.9054193.

- Andrei Patrascu and Ion Necoara. Random coordinate descent methods for ℓ_0 regularized convex optimization. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 60(7):1811–1824, 2015. doi: 10.1109/TAC.2015.2390551.
- MARCOS RAYDAN. On the barzilai and borwein choice of steplength for the gradient method. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 13(3):321–326, 1993. ISSN 1464-3642. doi: 10.1093/imanum/13.3.321. URL <http://dx.doi.org/10.1093/imanum/13.3.321>.
- R. Tibshirani. Regression shrinkage and selection via the lasso. *Journal of the Royal Statistical Society (Series B)*, 58:267–288, 1996.
- Cun-Hui Zhang. Nearly unbiased variable selection under minimax concave penalty. *The Annals of Statistics*, 38(2), April 2010. ISSN 0090-5364. doi: 10.1214/09-aos729. URL <http://dx.doi.org/10.1214/09-AOS729>.
- Bin Zhou, Li Gao, and Yu-Hong Dai. Gradient methods with adaptive step-sizes. *Computational Optimization and Applications*, 35:69–86, 09 2006. doi: 10.1007/s10589-006-6446-0.
- Junxian Zhu, Canhong Wen, Jin Zhu, Heping Zhang, and Xueqin Wang. A polynomial algorithm for best-subset selection problem. *Proceedings of the National Academy of Science*, 117(52):33117–33123, December 2020. doi: 10.1073/pnas.2014241117.