流形优化期末报告

张晨

2024年9月23日

1 Question 1

2 Question 2

编程实现教材上的 Algorithm 3 和 Algorithm 4, 随机生成 Stiefel 流形的一个二次函数, 用 Algorithm 4 极小化这个二次函数, 比较两个算法的计算效果, 探索非单调的作用, 或者交替使用 BB 步长两个公式的作用.

2.1 随机二次函数的生成

首先考虑实现二次函数的随机生成问题. 对于整数 $n \geq p > 0$, 欧氏空间 $\mathbb{R}^{n \times p}$ 上的 Stiefel 流形为

$$St(n,p) = \{ X \in \mathbb{R}^{n \times p} | X^T X = I_p \}.$$

对于矩阵 $B \in \mathbb{R}^{n \times p}$ 和对称正定矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, St(n,p) 上的二次函数定义为

$$f(X; A, B) = \operatorname{tr}(X^T A X + X^T B).$$

故二次函数 f 的生成问题等价于矩阵 A,B 的生成问题. 在 MATLAB 中, 可以使用 \mathbf{randn} 函数 随机生成矩阵, 因此, 可以取

$$B \leftarrow \text{randn}(n, p)$$
.

但 MATLAB 中并没有直接生成对称正定矩阵的函数. 为了随机生成 A, 先考虑一个简单的引理:

引理 2.1 记集合 A 为对称正定矩阵全体, 定义集合

$$\mathcal{B} = \{ R^T R + D | R \in \mathbb{R}^{n \times n}, D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n), 0 < d_1, \dots, d_n < 1 \},$$

则 $\mathcal{A} = \mathcal{B}$.

证明: 首先证明 $\mathcal{B} \subseteq \mathcal{A}$. 对于任意的 $B = R^T R + D \in \mathcal{B}$, 有

$$B^{T} = (R^{T}R + D)^{T} = R^{T}R + D^{T} = R^{T}R + D = B,$$

2 QUESTION 2

故 B 是对称的. 对于任意的 $x \in \mathbb{R}_*^n$, 有

$$x^T B x = (Rx)^T (Rx) + x^T D x \ge x^T D x \ge d_1 ||x||_2^2 > 0.$$

因此, $B \in \mathcal{A}$.

再证明 $A \subseteq \mathcal{B}$. 对于任意的 $A \in \mathcal{A}$, 记 $\lambda > 0$ 为 A 的最小特征值, 取 $d = \min(\lambda/2, 1/2)$, 则矩阵 $A - dI_n$ 仍为对称正定矩阵. 注意到, 根据对称正定矩阵的 Cholesky 分解, 存在矩阵 $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 使得

$$A = (A - dI_n) + dI_n = R^T R + dI_n \in \mathcal{B}.$$

综上, $A = \mathcal{B}$.

根据这个引理, 结合 MATLAB 中取值在 (0,1) 上的随机函数 \mathbf{rand} , 可以得到对称正定矩阵的随机生成方法:

$$R \leftarrow \text{randn}(n, n),$$

 $A \leftarrow R^T R + \text{diag}(\text{rand}(n)).$

详细的代码实现可以参考附录. 在下文中, 我们考虑 n = 500, p = 50 时各算法的表现, 取 MATLAB 中随机函数的种子为 99, 生成的矩阵对 (A, B) 同样可见附录.

2.2 梯度下降算法与 BB 算法的比较

本小节中, 我们使用基于单调线搜索的梯度下降算法与基于非单调线搜索的 BB 算法对二次 函数 $f(X) = \operatorname{tr}(X^TAX + X^TB)$ 进行优化. 在参数选择上, 我们使用以下参数:

人 1. 并以多效		
参数	具体数值	参数描述
t_0	1	回退法的初始步长
ρ	0.5	回退幅度
c	0.001	Armijo 条件的系数
M	5	非单调线搜索的前项个数
$\alpha_{\rm max}$	100	BB 步长的上界
α_{\min}	0.01	BB 步长的上界

表 1: 算法参数

对于两个算法, 随机选取初始点 X_0 , 均使用基于 QR 算法的收缩映射.

首先, 观察一下梯度值 gradf 随迭代次数的变化情况.