分块坐标下降法

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:本教案由朱桢源协助准备

1/100

提纲

- 1 分块坐标下降法
- 2 应用举例
- ③ 收敛性分析
- 4 HOGWILD! 异步SGD
- 5 CYCLADES

问题形式

考虑具有如下形式的问题:

$$\min_{x \in \mathcal{X}} F(x_1, x_2, \dots, x_s) = f(x_1, x_2, \dots, x_s) + \sum_{i=1}^s r_i(x_i),$$

- \mathcal{X} 是函数的可行域,自变量x拆分成s个变量块 x_1, x_2, \dots, x_s ,每个变量块 $x_i \in \mathbb{R}^{n_i}$.
- 函数f是关于x的可微函数,每个 $r_i(x_i)$ 关于 x_i 是适当的闭凸函数,但不一定可微.
- 目标函数F的性质体现在f,每个 r_i 以及自变量的分块上. 通常情况下,f对于所有变量块 x_i 不可分,但单独考虑每一块自变量时,f有简单结构; r_i 只和第i个自变量块有关,因此 r_i 在目标函数中是一个可分项.
- 求解该问题的难点在于如何利用分块结构处理不可分的函数f.

问题形式

• 分组LASSO 模型: 参数 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_G)\in\mathbb{R}^p$ 可以分成G 组,且 $\{x_i\}_{i=1}^G$ 中只有少数的非零向量.

$$\min_{x} \quad \frac{1}{2n} \|b - Ax\|_{2}^{2} + \lambda \sum_{i=1}^{G} \sqrt{p_{i}} \|x_{i}\|_{2}.$$

● K-均值聚类问题的等价形式:

$$\min_{\substack{\Phi,H}} \quad \|A - \Phi H\|_F^2,$$

s.t. $\Phi \in \mathbb{R}^{n \times k}$, 每一行只有一个元素为 $\mathbf{1}$,其余为 $\mathbf{0}$, $H \in \mathbb{R}^{k \times p}$.

• 低秩矩阵恢复: 设 $b \in \mathbb{R}^m$ 是已知的观测向量,A是线性映射.

$$\min_{X,Y} \quad \frac{1}{2} \|\mathcal{A}(XY) - b\|_2^2 + \alpha \|X\|_F^2 + \beta \|Y\|_F^2,$$

其中 $\alpha, \beta > 0$ 为正则化参数.

问题形式

● 非负矩阵分解:设M是已知张量,考虑求解如下极小化问题:

$$\min_{A_1,A_2,\dots,A_N\geq 0} \quad \frac{1}{2} \|\mathcal{M} - A_1 \circ A_2 \circ \dots \circ A_N\|_F^2 + \sum_{i=1}^N \lambda_i r_i(A_i),$$

其中"o"表示张量的外积运算.

• 字典学习:设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 为n个观测,每个观测的信号维数是m,现在我们要从A中学习出一个字典 $D \in \mathbb{R}^{m \times k}$ 和系数矩阵 $X \in \mathbb{R}^{k \times n}$:

$$\min_{D,X} \quad \frac{1}{2n} ||DX - A||_F^2 + \lambda ||X||_1,$$

s.t. $||D||_F \le 1$.

在这里自变量有两块,分别为D和X,此外对D还存在球约束 $\|D\|_F \leq 1$.

挑战和难点

- 函数f关于变量全体一般是非凸的,这使得问题求解具有挑战性
- 应用在非凸问题上的算法收敛性不易分析,很多针对凸问题设计 的算法通常会失效
- 目标函数的整体结构十分复杂,变量的更新需要很大计算量
- 目标:发展一种更新方式简单且有全局收敛性(收敛到稳定点) 的有效算法

变量划分

- 分块坐标下降法更新方式:按照x1,x2,···,xs的次序依次固定其他(s-1)块变量极小化F,完成一块变量的极小化后,它的值便立即被更新到变量空间中,更新下一块变量时将使用每个变量最新的值.
- 变量划分

$$\mathcal{X}_{i}^{k} = \{x \in \mathbb{R}^{n_{i}} \mid (x_{1}^{k}, \cdots, x_{i-1}^{k}, x, x_{i+1}^{k-1}, \cdots, x_{s}^{k-1}) \in \mathcal{X}\}.$$

• 辅助函数

$$f_i^k(x_i) = f(x_1^k, \dots, x_{i-1}^k, x_i, x_{i+1}^{k-1}, \dots, x_s^{k-1}),$$

其中 x_j^i 表示在第k次迭代中第j块自变量的值,函数 f_i^k 表示在第k次迭代更新第i块变量时所需要考虑的目标函数的光滑部分.

变量更新方式

在每一步更新中,通常使用以下三种更新格式之一:

$$x_i^k = \underset{x_i \in \mathcal{X}_i^k}{\operatorname{argmin}} \left\{ f_i^k(x_i) + r_i(x_i) \right\}, \tag{1}$$

$$x_i^k = \underset{x_i \in \mathcal{X}_i^k}{\operatorname{argmin}} \left\{ f_i^k(x_i) + \frac{L_i^{k-1}}{2} \|x_i - x_i^{k-1}\|_2^2 + r_i(x_i) \right\}, \tag{2}$$

$$x_i^k = \operatorname*{argmin}_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ \langle \hat{g}_i^k, x_i - \hat{x}_i^{k-1} \rangle + \frac{L_i^{k-1}}{2} \|x_i - \hat{x}_i^{k-1}\|_2^2 + r_i(x_i) \right\}, \quad (3)$$

- $L_i^k > 0$ 为常数
- 在更新格式(3)中, x̂₁-1采用外推定义:

$$\hat{x}_i^{k-1} = x_i^{k-1} + \omega_i^{k-1} (x_i^{k-1} - x_i^{k-2}), \tag{4}$$

其中 $\omega_i^k \geq 0$ 为外推的**权重**, $\hat{g}_i^k \stackrel{\text{def}}{=\!=\!=} \nabla f_i^k (\hat{x}_i^{k-1})$ 为外推点处的梯度.

8/100

算法格式

Algorithm 1 分块坐标下降法

```
1: 初始化: 选择两组初始点(x_1^{-1}, x_2^{-1}, \cdots, x_s^{-1}) = (x_1^0, x_2^0, \cdots, x_s^0).
```

- 2: **for** $k = 1, 2, \cdots$ **do**
- 3: **for** $i = 1, 2, \cdots$ **do**
- 4: 使用格式(1) 或(2) 或(3) 更新 x_i^k .
- 5: end for
- 6: if 满足停机条件 then
- 7: 返回 $(x_1^k, x_2^k, \dots, x_s^k)$, 算法终止.
- 8: end if
- 9: end for
 - 三种格式都有其适用的问题,特别是子问题是否可写出显式解
 - 在每一步更新中,三种迭代格式对不同自变量块可以混合使用, 不必仅仅局限于一种.

算法格式

- BCD算法的子问题可采用三种不同的更新格式,这三种格式可能 会产生不同的迭代序列,可能会收敛到不同的解,坐标下降算法 的数值表现也不相同.
- 格式(1)是最直接的更新方式,它严格保证了整个迭代过程的目标函数值是下降的.然而由于f的形式复杂,子问题求解难度较大. 在收敛性方面,格式(1)在强凸问题上可保证目标函数收敛到极小值,但在非凸问题上不一定收敛.
- 格式(2)(3)则是对格式(1)的修正,不保证迭代过程目标函数的单调性,但可以改善收敛性结果.使用格式(2)可使得算法收敛性在函数F为非严格凸时有所改善.
- 格式(3)实质上为目标函数的一阶泰勒展开近似,在一些测试问题 上有更好的表现,可能的原因是使用一阶近似可以避开一些局部 极小值点.此外,格式(3)的计算量很小,比较容易实现.

例子:二元二次函数

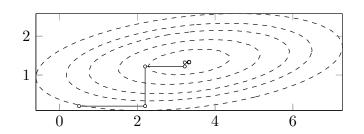
考虑二元二次函数的优化问题

min
$$f(x,y) = x^2 - 2xy + 10y^2 - 4x - 20y$$
.

故采用格式(1)的分块坐标下降法为

$$x^{k+1} = 2 + y^k$$
, $y^{k+1} = 1 + \frac{x^{k+1}}{10}$.

下图描绘了当初始点为 (x,y)=(0.5,0.2)时的迭代点轨迹,可以看到在进行了7次迭代后迭代点与最优解已充分接近.



不收敛反例

值得注意的是,对于非凸函数f(x),分块坐标下降法可能失效. Powell 在1973 年就给出了一个使用格式(1)但不收敛的例子:

$$F(x_1, x_2, x_3) = -x_1 x_2 - x_2 x_3 - x_3 x_1 + \sum_{i=1}^{3} [(x_i - 1)_+^2 + (-x_i - 1)_+^2],$$

其中 $(x_i-1)_+^2$ 的含义为先对 (x_i-1) 取正部再平方.设 $\varepsilon>0$,初始点取为

$$x^0 = \left(-1 - \varepsilon, 1 + \frac{\varepsilon}{2}, -1 - \frac{\varepsilon}{4}\right),$$

容易验证迭代序列满足

$$x^{k} = (-1)^{k} \cdot (-1, 1, -1) + (-\frac{1}{8})^{k} \cdot \left(-\varepsilon, \frac{\varepsilon}{2}, -\frac{\varepsilon}{4}\right),$$

这个迭代序列有两个聚点(-1,1,-1)与(1,-1,1),但这两个点都不是F的稳定点.

提纲

- 1 分块坐标下降法
- ② 应用举例
- 3 收敛性分析
- 4 HOGWILD! 异步SGD
- 5 CYCLADES

LASSO 问题求解

下面介绍如何使用分块坐标下降法来求解LASSO 问题

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

将自变量x记为 $x = \begin{bmatrix} x_i, \bar{x}_i^{\mathsf{T}} \end{bmatrix}^{\mathsf{T}}$,其中 \bar{x}_i 为x去掉第i个分量而形成的列向量。而相应地,矩阵A在第i块的更新记为 $A = \begin{bmatrix} a_i & \bar{A}_i \end{bmatrix}$,其中 \bar{A}_i 为矩阵A去掉第i列而形成的矩阵。

在第i块的更新中考虑格式(1)。做替换 $c_i = b - \bar{A}_i \bar{x}_i$,原问题等价于

$$\min_{x_i} f_i(x_i) \stackrel{\text{def}}{=} \mu |x_i| + \frac{1}{2} ||a_i||^2 x_i^2 - a_i^{\text{T}} c_i x_i.$$

可直接写出它的最小值点

$$x_i^k = \underset{x_i}{\operatorname{argmin}} f_i(x_i) = \begin{cases} \frac{a_i^T c_i - \mu_i}{\|a_i\|^2}, & a_i^T c_i > \mu, \\ \frac{a_i^T c_i + \mu_i}{\|a_i\|^2}, & a_i^T c_i < -\mu, \\ 0, & \sharp \&. \end{cases}$$

K-均值聚类算法

• 当固定H时,设 Φ 的每一行为 ϕ_i^{Γ} ,那么根据矩阵分块乘法,

$$A - \Phi H = \begin{bmatrix} a_1^{\mathsf{T}} \\ a_2^{\mathsf{T}} \\ \vdots \\ a_n^{\mathsf{T}} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \phi_1^{\mathsf{T}} \\ \phi_2^{\mathsf{T}} \\ \vdots \\ \phi_n^{\mathsf{T}} \end{bmatrix} H = \begin{bmatrix} a_1^{\mathsf{T}} - \phi_1^{\mathsf{T}} H \\ a_2^{\mathsf{T}} - \phi_2^{\mathsf{T}} H \\ \vdots \\ a_n^{\mathsf{T}} - \phi_n^{\mathsf{T}} H \end{bmatrix}.$$

注意到 ϕ_i 只有一个分量为1,其余分量为0,不妨设其第j个分量为1,此时 $\phi_i^T H$ 相当于将H 的第j行取出,因此 $\|a_i^T - \phi_i^T H\|$ 为 $a_i^T 与 H$ 的第j个行向量的距离.我们的最终目的是极小化 $\|A - \Phi H\|_F^2$,所以j应该选矩阵H中距离 a_i^T 最近的那一行,即

$$\Phi_{ij} = \begin{cases} 1, & j = \operatorname*{argmin} \|a_i - h_l\|, \\ 0, & \sharp \&. \end{cases}$$

其中 h_l^T 表示矩阵H的第l行.

K-均值聚类算法

ullet 当固定 $oldsymbol{arrho}$ 时,此时考虑 $oldsymbol{H}$ 的每一行 $oldsymbol{h_i^T}$,根据目标函数的等价性有

$$||A - \Phi H||_F^2 = \sum_{j=1}^k \sum_{a \in S_j} ||a - h_j||^2,$$

因此只需要对每个 h_j 求最小即可. 设 \bar{a}_j 是目前第j类所有点的均值,则

$$\sum_{a \in S_j} \|a - h_j\|^2 = \sum_{a \in S_j} \|a - \bar{a}_j + \bar{a}_j - h_j\|^2$$

$$= \sum_{a \in S_j} (\|a - \bar{a}_j\|^2 + \|\bar{a}_j - h_j\|^2 + 2 \langle a - \bar{a}_j, \bar{a}_j - h_j \rangle)$$

$$= \sum_{a \in S_i} (\|a - \bar{a}_j\|^2 + \|\bar{a}_j - h_j\|^2),$$

这里利用了交叉项 $\sum\limits_{a\in S_j}\langle a-\bar{a}_j,\bar{a}_j-h_j\rangle=0$ 的事实. 因此容易看出,此时 h_i 直接取为 \bar{a}_i 即可达到最小值

非负矩阵分解

考虑最基本的非负矩阵分解问题

$$\min_{X,Y \ge 0} f(X,Y) = \frac{1}{2} ||XY - M||_F^2.$$

可以计算梯度

$$\frac{\partial f}{\partial X} = (XY - M)Y^{\mathrm{T}}, \quad \frac{\partial f}{\partial Y} = X^{\mathrm{T}}(XY - M).$$

注意到在格式(3)中,当 $r_i(X)$ 为凸集示性函数时即是求解到该集合的投影,因此得到分块坐标下降法如下:

$$\begin{split} X^{k+1} &= \max\{X^k - t_k^x (X^k Y^k - M) (Y^k)^{\mathrm{T}}, 0\}, \\ Y^{k+1} &= \max\{Y^k - t_k^y (X^k)^{\mathrm{T}} (X^k Y^k - M), 0\}, \end{split}$$

其中 t_k^x, t_k^y 是步长,

字典学习

$$\label{eq:min_DX} \min_{D,X} \ \ \frac{1}{2n} \|DX - A\|_F^2 + \lambda \|X\|_1 + \frac{\mu}{2} \|D\|_F^2.$$

● 当固定变量D时,考虑函数

$$f_D(X) = \frac{1}{2n} ||DX - A||_F^2 + \lambda ||X||_1.$$

使用格式(3). 通过直接计算可得 $f_D(X)$ 中光滑部分的梯度为

$$G = \frac{1}{n}D^{\mathrm{T}}(DX - A),$$

因此格式(3)等价于

$$X^{k+1} = \operatorname{prox}_{t_k \lambda \| \cdot \|_1} \left(X^k - \frac{t_k}{n} (D^k)^{\mathrm{T}} (D^k X^k - A) \right),$$

其中4.为步长.

字典学习

$$\label{eq:min_DX} \min_{D,X} \ \frac{1}{2n} \|DX - A\|_F^2 + \lambda \|X\|_1 + \frac{\mu}{2} \|D\|_F^2.$$

● 当固定变量X时,考虑函数

$$f_X(D) = \frac{1}{2n} ||DX - A||_F^2 + \frac{\mu}{2} ||D||_F^2.$$

使用格式(1). 计算关于 D^{T} 的梯度为

$$\nabla_{D^{\mathrm{T}}} f_X(D) = \frac{1}{n} X (X^{\mathrm{T}} D^{\mathrm{T}} - A^{\mathrm{T}}) + \mu D^{\mathrm{T}},$$

令梯度为零向量,可得

$$D = AX^{\mathrm{T}}(XX^{\mathrm{T}} + n\mu I)^{-1}.$$

因为 $X \in \mathbb{R}^{k \times n}$,其中 $k \ll n$,所以 XX^T 是一个比较小的矩阵,可以方便地求出它的逆. 故格式(1)等价于

$$D^{k+1} = A(X^{k+1})^{\mathrm{T}} (X^{k+1}(X^{k+1})^{\mathrm{T}} + n\mu I)^{-1}.$$

最大割问题的非凸松弛

最大割问题

(半定松弛)
$$\min \ \langle C, X \rangle$$
, s.t. $X_{ii} = 1, i = 1, 2, \cdots, n$, $X \succeq 0$. (非凸松弛) $\min \ \langle C, V^T V \rangle$, s.t. $v_i \in \mathbb{R}^p, \ \|v_i\| = 1, \ i = 1, 2, \cdots, n$, $V = [v_1, v_2, \cdots, v_n]$.

- 比较两种松弛方式可知,非凸松弛通过引入分解 $X = V^T V$ 并限制V的每一列的 ℓ_2 范数为1,将半定松弛中的X对角线元素为1以及X半正定的约束消去了.
- 这两个问题一般不等价,当p充分大时二者等价.实际计算中通常选取一个较小的p.

最大割问题的非凸松弛

矩阵V是按列分成n块的,考虑格式(1)为例,取定i,固定其余 v_i

$$\operatorname{Tr}\left(\begin{bmatrix} C_{11} & \cdots & C_{1i} & \cdots & C_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{i1} & \cdots & C_{ii} & \cdots & C_{in} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{n1} & \cdots & C_{ni} & \cdots & C_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^T v_1 & \cdots & v_1^T v_i & \cdots & v_1^T v_n \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_i^T v_1 & \cdots & v_i^T v_i & \cdots & v_i^T v_n \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_n^T v_1 & \cdots & v_n^T v_i & \cdots & v_n^T v_n \end{bmatrix} \right),$$

根据以上矩阵分块示意图可知和v;有关的部分为

$$C_{ii}v_i^{\mathrm{T}}v_i + \sum_{i \neq j} (C_{ij} + C_{ji})v_i^{\mathrm{T}}v_j.$$

由于约束 $\|v_i\|=1$,上式中第一项是常数。最终在第i步子问题是:

$$\min f_i(v_i) = \left(\sum_{j \neq i} C_{ji} v_j^{\mathrm{T}}\right) v_i, \text{s.t.} ||v_i|| = 1.$$

其解为:
$$v_i = -\left(\sum_{j \neq i} C_{ji} v_j\right) / \left\|\sum_{j \neq i} C_{ji} v_j\right\|$$
.

提纲

- 1 分块坐标下降法
- 2 应用举例
- ③ 收敛性分析
- 4 HOGWILD! 异步SGD
- 5 CYCLADES

交替线性化方法

● 我们对格式(3) 在s = 2且非凸的情况下进行收敛性分析. 定义:

$$\min$$
 $\Psi(x,y)\stackrel{\mathsf{def}}{=} f(x) + g(y) + H(x,y), \quad (x,y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ 其中 f 和 g 为适当闭函数, H 为其定义域上的连续可微函数.

对该问题,格式化为如下基本形式:

$$\begin{aligned} x^{k+1} &\in \operatorname{prox}_{c_k f}\left(x^k - c_k \nabla_x H\left(x^k, y^k\right)\right) \\ y^{k+1} &\in \operatorname{prox}_{d_k g}\left(y^k - d_k \nabla_y H\left(x^{k+1}, y^k\right)\right) \end{aligned}$$

其中 c_k,d_k 为步长参数. 由于f 和g 不是凸函数,相应地 prox_f 和 prox_g 是集合函数,在迭代过程中只要求 x_{k+1} 和 y_{k+1} 是相应集合中的一个元素即可. 由于自变量只有两块,对光滑部分H 我们采用的是线性化处理,因此该格式又称为近似点交替线性化方法.

• 为了保证 prox_f 和 prox_g 是良定义的,还需要对f 和g 提出下界有限的假设.

非凸函数的邻近算子

(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 $\inf_{x \in \mathbf{dom} h} h(x) > -\infty$, 定义 h 的邻近算子为

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

定理

设h 是适当闭函数且 $\inf_{x \in \mathbf{dom} h} h(x) > -\infty$, 则 $\forall x \in \mathbf{dom} h$, $\operatorname{prox}_h(x)$ 是 \mathbb{R}^n 上的非空紧集.

Proof.

定义 $g(u) = h(u) + \frac{1}{2} ||u - x||^2$, 设 $\inf_{x \in \text{dom}h} h(x) = l$.

取 $u_0 \in \operatorname{dom} h$, 由于 $\frac{1}{2} ||u - x||^2$ 无上界,故 $\exists R > 0$, 对 \forall 满足||u - x|| > R的u, 成立 $\frac{1}{2} ||u - x||^2 > g(u_0) - l$,即 $g(u) > g(u_0)$.

这说明下水平集 $\{u \mid g(u) \leq g(u_0)\}$ 含于球 $\|u - x\| \leq R$ 内,即g 有一个非空有界下水平集. 显然g(u) 是闭函数,由Weierstrass 定理可知,g(u) 的最小值点集合 $prox_h(x)$ 是非空紧集.

非光滑非凸问题函数的次微分

前面介绍了闭凸函数的邻近算子与次梯度的关系,而对于非凸函数有 类似的结论。首先回顾一下非光滑非凸函数的次微分。

次微分

 $\partial_{t} f: \mathbb{R}^{n} \to (-\infty, +\infty]$ 是适当下半连续函数.

● 对给定的 $x \in \text{dom } f$, 满足如下条件的所有向量 $u \in \mathbb{R}^n$ 的集合定义 为f 在点x 处的 *Fréchet* 次微分:

$$\liminf_{y \to x, y \neq x} \frac{f(y) - f(x) - \langle u, y - x \rangle}{\|y - x\|} \ge 0,$$

记为 $\partial f(x)$.当 $x \notin \text{dom } f$ 时, 将 $\partial f(x)$ 定义为空集Ø.

• f 在点 $x \in \mathbb{R}^n$ 处的极限次微分(或简称为次微分)定义为

$$\partial f(x) = \{ u \in \mathbb{R}^n : \exists x^k \to x, f(x^k) \to f(x), u^k \in \hat{\partial} f(x^k) \to u \}.$$

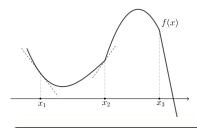
极限次微分通过对x 附近的点处的Fréchet 次微分取极限得到.

- $\hat{\partial}f(x) \subseteq \partial f(x)$, 前者是闭凸集, 后者是闭集.并非在所有的 $x \in \text{dom } f$ 处都存在 *Fréchet* 次微分.
- 凸函数的次梯度要求不等式

$$f(y) \ge f(x) + \langle g, y - x \rangle, \quad g \in \partial f(x)$$

在定义域内全局成立, 而非凸函数只要求在极限意义下成立.

• 当f 是可微函数时, Fréchet 次微分和次微分都退化成梯度.



如图, f(x) 在 x_3 处不存在Fréchet 次微分, 但存在次微分

定理

设h 是适当闭函数(可非凸)且有下界, $u \in prox_h(x)$, 则 $x - u \in \partial h(u)$

假设条件

- (1) $f: \mathbb{R}^n \to (-\infty, +\infty]$, $g: \mathbb{R}^m \to (-\infty, +\infty]$ 均为适当下半连续函数, $\inf_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m} \Psi > -\infty$, $\inf_{\mathbb{R}^n} f > -\infty$, 以及 $\inf_{\mathbb{R}^m} g > -\infty$
- (2) $H: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ 是连续可微函数,且 ∇H 在有界集上是联合利普希茨连续的.即对于任意的 $B_1 \times B_2 \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$,存在L > 0使得对于任意的 $(x_i, y_i) \in B_1 \times B_2, i = 1, 2$ 有

$$\| (\nabla_x H(x_1, y_1) - \nabla_x H(x_2, y_2), \nabla_y H(x_1, y_1) - \nabla_y H(x_2, y_2)) \|$$

 $\leq L \| (x_1 - x_2, y_1 - y_2) \|.$

假设条件

● 根据假设,在有界集上H 关于每个分量都是梯度L-利普希茨连续的,且参数与另一分量无关.即

$$\|\nabla_{x}H(x_{1}, y) - \nabla_{x}H(x_{2}, y)\| \leq L \|x_{1} - x_{2}\|, \|\nabla_{y}H(x, y_{1}) - \nabla_{y}H(x, y_{2})\| \leq L \|y_{1} - y_{2}\|.$$

● 可以直接写出Ψ(x, y) 的次微分:

$$\partial \Psi(x, y) = (\nabla_x H(x, y) + \partial f(x), \nabla_y H(x, y) + \partial g(y))$$

其中"+"表示为集合间的加法.

证明梗概

充分下降:找到一个正常数ρ1 使得

$$\rho_1 \|z^{k+1} - z^k\|^2 \le \Psi(z^k) - \Psi(z^{k+1})$$

次梯度上界:假设算法产生的迭代序列有界,找到另一个常数ρ2,使得次梯度有一个上界估计:

$$||w^{k+1}|| \le \rho_2 ||z^{k+1} - z^k||, \quad w^k \in \partial \Psi(z^k)$$

• 利用KL 性质证明全序列收敛:假设 Ψ 是一个KL函数,证明迭代序列 $\{z^k\}_{k\in \mathbb{N}}$ 是一个柯西列.

注:前两个步骤是证明多数算法的基本步骤,当这两个性质成立时,对任意的算法产生的迭代序列的聚点集合都为非空连通紧集,且这些聚点都是¥的临界点.

近似点交替线性化方法下降量

设 $h: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 是连续可微函数,梯度 ∇h 是利普希茨连续的,相应的常数为 L_h , $\sigma: \mathbb{R}^d \to (-\infty, +\infty]$ 是适当下半连续函数且 $\inf_{\mathbb{R}^d} \sigma > -\infty$. 固定 $t < \frac{1}{L}$,则对任意的 $u \in \operatorname{dom} \sigma$ 和 $\tilde{u} \in \operatorname{prox}_{t\sigma}(u - t\nabla h(u))$,有

$$h(\tilde{u}) + \sigma(\tilde{u}) \le h(u) + \sigma(u) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{t} - L_h \right) \|\tilde{u} - u\|^2.$$

证明:首先根据 σ 的假设, \tilde{u} 是良定义的.根据 \tilde{u} 的最优性,有

$$\langle \tilde{u} - u, \nabla h(u) \rangle + \frac{1}{2t} \|\tilde{u} - u\|^2 + \sigma(\tilde{u}) \le \sigma(u).$$

再结合二次上界,有

$$h(\tilde{u}) + \sigma(\tilde{u}) \le h(u) + \langle \tilde{u} - u, \nabla h(u) \rangle + \frac{L_h}{2} \|\tilde{u} - u\|^2 + \sigma(\tilde{u})$$

$$\le h(u) + \frac{L_h}{2} \|\tilde{u} - u\|^2 + \sigma(u) - \frac{1}{2t} \|\tilde{u} - u\|^2$$

$$= h(u) + \sigma(u) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{t} - L_h \right) \|\tilde{u} - u\|^2.$$

充分下降定理

在假设条件下,设 $\{z^k\}=\{(x^k,y^k)\}$ 为迭代格式产生的迭代序列,且假设 z^k 有界. 取步长 $c_k=d_k=\frac{1}{\gamma L}$,其中 $\gamma>1$ 是常数,L为 ∇H 的利普希茨系数,则以下结论成立:

(1) 迭代点处的函数值序列 $\{\Psi(z^k)\}$ 是单调下降的,且

$$\frac{\rho_1}{2} \|z^{k+1} - z^k\|^2 \le \Psi(z^k) - \Psi(z^{k+1}), \quad \forall \ k \ge 0,$$

其中
$$\rho_1 = (\gamma - 1)L$$
;

(2) 序列{ $||z^{k+1}-z^k||$ } $_{k=1}^{\infty}$ 平方可和,即

$$\sum_{k=1}^{\infty} (\|x^{k+1} - x^k\|^2 + \|y^{k+1} - y^k\|^2) = \sum_{k=1}^{\infty} \|z^{k+1} - z^k\|^2 < +\infty,$$

并由此推出 $\lim_{k\to\infty} ||z^{k+1} - z^k|| = 0$.

证明

(1) 根据假设条件的(2),H(x,y)关于每个分量都是利普希茨连续的,由第30页的结论可得到每一步关于 x^k 和 y^k 的下降量估计:

$$\begin{split} &H(x^{k+1},y^k) + f(x^{k+1}) \\ & \leq H(x^k,y^k) + f(x^k) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c_k} - L \right) \|x^{k+1} - x^k\|^2 \\ & = H(x^k,y^k) + f(x^k) - \frac{1}{2} (\gamma - 1) L \|x^{k+1} - x^k\|^2, \end{split}$$

以及

$$H(x^{k+1}, y^{k+1}) + g(y^{k+1})$$

$$\leq H(x^{k+1}, y^k) + g(y^k) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{d_k} - L \right) \|y^{k+1} - y^k\|^2$$

$$= H(x^{k+1}, y^k) + g(y^k) - \frac{1}{2} (\gamma - 1) L \|y^{k+1} - y^k\|^2.$$

证明

将上述两个不等式相加,消去 $H(x^{k+1}, y^k)$,得到

$$\begin{split} & \Psi(z^k) - \Psi(z^{k+1}) \\ = & H(x^k, y^k) + f(x^k) + g(y^k) - H(x^{k+1}, y^{k+1}) - f(x^{k+1}) - g(y^{k+1}) \\ \geq & \frac{1}{2} (\gamma - 1) L\left(\|x^{k+1} - x^k\|^2 + \|y^{k+1} - y^k\|^2 \right). \end{split}$$

由此立即可得

$$\frac{\rho_1}{2} \|z^{k+1} - z^k\|^2 \le \Psi(z^k) - \Psi(z^{k+1}). \tag{5}$$

此外,容易得知迭代点处的函数值 $\{\Psi(z^k)\}$ 关于k是单调递减的. 根据假设 $\inf \Psi > -\infty$ 可知 $\Psi(z^k)$ 单调下降收敛到一个有限的数 Ψ^* .

(2) 设N为任意的整数,在(5)式中对k求和,得

$$\begin{split} \sum_{k=0}^{N-1} \|z^{k+1} - z^k\|^2 & \leq \frac{2}{\rho_1} (\varPsi(z^0) - \varPsi(z^N)) \leq \frac{2}{\rho_1} (\varPsi(z^0) - \varPsi^*). \\ \diamondsuit N \to \infty \ \text{即可得} \sum_{k=0}^{\infty} \|z^{k+1} - z^k\|^2 < +\infty, \ \text{从而} \\ \lim_{k \to \infty} \|z^{k+1} - z^k\| &= 0 \end{split}$$

注:定理表明进行一轮近似点交替线性化迭代后,函数值下降量的下界可被相邻迭代点之间的距离控制.几乎所有下降类的算法在一定条件下都满足这个性质.到此我们完成了收敛性分析的第一个步骤.

次梯度上界

- ullet 在上一步中我们证明了迭代点处的函数值 ${oldsymbolarPsi}^k$ 最终会收敛到某个值
- 但是这个值和局部最优解的关系还没有明确说明
- 序列{z^k}的收敛性质在上面的定理中也没有体现
- 在这一部分我们将讨论序列{z^k}是否会趋于某个临界点,这是收敛性框架中的第二个步骤

次梯度上界

在假设条件下,设 $\{z^k\}$ 是迭代格式产生的有界序列,对任意的整数k,定义

$$A_{x}^{k} = \frac{1}{c_{k-1}}(x^{k-1} - x^{k}) + \nabla_{x}H(x^{k}, y^{k}) - \nabla_{x}H(x^{k-1}, y^{k-1}),$$

以及

$$A_{y}^{k} = \frac{1}{d_{k-1}}(y^{k-1} - y^{k}) + \nabla_{y}H(x^{k}, y^{k}) - \nabla_{y}H(x^{k}, y^{k-1}).$$

则有 $(A_x^k, A_y^k) \in \partial \Psi(x^k, y^k)$ 且

$$||(A_x^k, A_y^k)|| \le ||A_x^k|| + ||A_y^k|| \le \rho_2 ||z^k - z^{k-1}||,$$

其中
$$\rho_2 = (2\gamma + 3)L$$
.



由迭代格式中更新xk的一阶最优性条件可知

$$\nabla_x H(x^{k-1}, y^{k-1}) + \frac{1}{c_{k-1}} (x^k - x^{k-1}) + u^k = 0,$$

其中 $u^k \in \partial f(x^k)$ 为f的一个次梯度. 因此我们有

$$\nabla_x H(x^{k-1}, y^{k-1}) + u^k = \frac{1}{c_{k-1}} (x^{k-1} - x^k).$$

同理,由迭代格式中关于yk的更新可知

$$\nabla_{y}H(x^{k}, y^{k-1}) + v^{k} = \frac{1}{d_{k-1}}(y^{k-1} - y^{k}),$$

其中 $v^k \in \partial g(y^k)$ 为g的一个次梯度. 由 A^k_x, A^k_y 的定义和 $\partial \Psi$ 的表达式可得

$$A_x^k = \nabla_x H(x^k, y^k) + u^k \in \partial_x \Psi(x^k, y^k),$$

$$A_y^k = \nabla_y H(x^k, y^k) + v^k \in \partial_y \Psi(x^k, y^k).$$

即有 $(A_x^k,A_y^k)\in\partial\Psi(x^k,y^k)$,我们需要证明的第一个结论因此成立。

下面估计 A_x^k 和 A_y^k 的模长. 这里需要借助假设的(2),即 ∇H 在有界集上关于(x,y)是联合利普希茨连续的. 因此对 $\|A_x^k\|$ 我们有

$$\begin{split} \|A_x^k\| &\leq \frac{1}{c_{k-1}} \|x^{k-1} - x^k\| \ + \|\nabla_x H(x^k, y^k) - \nabla_x H(x^{k-1}, y^{k-1})\| \\ &\leq \frac{1}{c_{k-1}} \|x^{k-1} - x^k\| + L \big(\|x^{k-1} - x^k\| + \|y^{k-1} - y^k\| \big) \\ &= \bigg(L + \frac{1}{c_{k-1}} \bigg) \|x^{k-1} - x^k\| + L \|y^{k-1} - y^k\| \\ &= (\gamma + 1)L \|x^{k-1} - x^k\| + L \|y^{k-1} - y^k\| \\ &\leq (\gamma + 2)L \|z^{k-1} - z^k\|. \end{split}$$

其中,第二个不等式是根据 ∇H 的利普希茨连续性,最后一个不等式是将 $\|x^{k-1}-x^k\|$ 和 $\|y^{k-1}-y^k\|$ 统一放大为 $\|z^{k-1}-z^k\|$.

另一方面,对 $||A_v^k||$ 的估计只需要用到 ∇H 关于y的利普希茨连续性:

$$||A_{y}^{k}|| \leq \frac{1}{d_{k-1}} ||y^{k} - y^{k-1}|| + ||\nabla_{y}H(x^{k}, y^{k}) - \nabla_{y}H(x^{k}, y^{k-1})||$$

$$\leq \frac{1}{d_{k-1}} ||y^{k} - y^{k-1}|| + L||y^{k} - y^{k-1}||$$

$$= \left(\frac{1}{d_{k-1}} + L\right) ||y^{k} - y^{k-1}||$$

$$\leq (\gamma + 1)L||z^{k} - z^{k-1}||.$$

结合这两个估计我们最终得到

$$\|(A_x^k, A_y^k)\| \le \|A_x^k\| + \|A_y^k\| \le (2\gamma + 3)L\|z^k - z^{k-1}\| = \rho_2\|z^k - z^{k-1}\|.$$

子列收敛性

- 上面的分析表明, $\partial \Psi(z^k)$ 将会包含一个模长不断趋于0的向量,这暗示着某种收敛性.由于有界序列 $\{z^k\}$ 一定有收敛的子列,因此猜想 $\{z^k\}$ 的极限点应该和 Ψ 的临界点有一定的关系.我们有:
- 定义ω(z⁰)为近似点交替线性化方法从点z⁰出发产生迭代序列的所有极限点集,且{z^k}是有界序列,则以下结论成立:
 - (1) $\emptyset \neq \omega(z^0) \subset \operatorname{crit} \Psi$, 其中 $\operatorname{crit} \Psi$ 定义为 Ψ 所有的临界点;
 - (2) z^k 与集合 $\omega(z^0)$ 的距离趋于0,即

$$\lim_{k\to\infty} \operatorname{dist}(z^k,\omega(z^0)) = 0;$$

- (3) $\omega(z^0)$ 是非空的连通紧集;
- (4) Ψ 在 $\omega(z^0)$ 上是一个有限的常数.

子列收敛性

- 上面的结论表明从点z⁰出发产生的点列{z^k}的极限点都是Ψ的临界点(次梯度集含有零向量).
- 至此我们已经得到了迭代序列{z^k}的子列收敛性,这至少保证了 算法在迭代过程中与临界点越来越接近.
- 一个自然的问题就是: {zk}全序列在何种条件下收敛?
- 这就要进入理论分析的第三个步骤:利用函数的KL性质.

KL 性质

- 定义 Φ_{η} 是凹连续函数 φ : $[0,\eta) \to \mathbb{R}_{+}$ 的集合且满足如下条件: (i) $\varphi(0)=0$; (ii) φ 在 $(0,\eta)$ 内连续可微,在点0处连续; (iii) 对任意的 $s\in(0,\eta)$,都有 $\varphi'(s)>0$ ·
- 设 $\sigma: \mathbb{R}^d \to (-\infty, +\infty]$ 是适当下半连续函数.
 - (1) 称函数 σ 在给定点 $\bar{u} \in \mathbf{dom} \ \partial \sigma \stackrel{\mathrm{def}}{=} \{u \mid \partial \sigma(u) \neq \emptyset\}$ 处具有KL 性质,若存在 $\eta \in (0, +\infty]$ 和 \bar{u} 的一个邻域U以及函数 $\varphi \in \Phi_{\eta}$,使得

$$\forall u \in U \cap [\sigma(\bar{u}) < \sigma < \sigma(\bar{u}) + \eta],$$

以下不等式成立:

$$\varphi'(\sigma(u) - \sigma(\bar{u})) \cdot \operatorname{dist}(0, \partial \sigma(u)) \ge 1,$$

其中dist(x, S)表示点x到集合S的距离.



KL性质的解释

- 一大类函数都具有KL性质,该性质刻画了函数本身在给定点ū处的某种行为.
- 如果点 \bar{u} 不是函数 σ 的临界点,那么KL 性质在点 \bar{u} 处自然成立.因此KL 性质成立的不平凡情形是 \bar{u} 是 σ 的临界点,即 $0\in\partial\sigma(\bar{u})$.
- ullet 这种情况下KL 性质保证了"函数 σ 可被锐化". 直观上来说,令

$$\tilde{\varphi}(u) = \varphi(\sigma(u) - \sigma(\bar{u})),$$

KL 性质在某种条件下可以改写成

$$\operatorname{dist}(0, \partial \tilde{\varphi}(u)) \geq 1$$
,

其中u的取法需要保证 $\sigma(u) > \sigma(\bar{u})$.

以上性质表明,无论u多么接近临界点ū, ç(u) 的次梯度的模长均大于1. 所以KL 性质也被称为是函数σ在重参数化子φ下的一个锐化,这种几何性质在分析一阶算法的收敛性时起到关键作用.

KL 集合与函数

半代数,次分析以及对数指数函数是KL函数

ullet 配 的子集S 是一个半代数集,如果存在有限个实多项式函数 $g_{ij},h_{ij}:\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 使得

$$S = \bigcup_{j=1}^{p} \cap_{i=1}^{q} \{ u \in \mathbb{R}^{d} : g_{ij}(u) = 0, h_{ij}(u) < 0 \}$$

- 函数 $h: \mathbb{R}^d \to (-\infty, +\infty]$ 称为半代数的,如果它的图 $\{(u,t) \in \mathbb{R}^{d+1}: h(u) = t\}$ 是 \mathbb{R}^{d+1} 的半代数子集
- 设 $\sigma(u): \mathbb{R}^d \to (-\infty, +\infty)$ 是下半连续的恰当函数. 若 σ 是半代数的,则它在 $\operatorname{dom} \sigma$ 中任一点处满足 KL 性质.

KL 集合与函数

例子:

- 实多项式函数.
- 半代数集的指示函数.
- 半代数函数的有限和与有限乘积.
- 半代数函数的复合.
- 上极限/下极限类函数. 例如,当g是半代数函数并且C 是半代数集时, $\sup\{g(u,v):v\in C\}$ 是半代数的.
- 半正定矩阵锥, Stiefel流形以及恒秩矩阵都是半代数集.
- $S \in \mathbb{R}^d$ 中的非空半代数子集,则函数 $x \to \operatorname{dist}(x,S)^2$ 是半代数的.
- ∥⋅∥₀, ∥⋅∥₂是半代数函数,其中₂是有理数.

一致KL性质

由于非凸问题有多个临界点,有时单个点ū处的KL性质是不够的,我们需要引入一致KL性质:

• 设 Ω 是紧集, $\sigma: \mathbb{R}^d \to (-\infty, +\infty]$ 是适当下半连续函数,在 Ω 上为常数且在 Ω 的每个点处都满足KL 性质,则存在 $\varepsilon>0, \eta>0, \varphi\in \Phi_\eta$ 使得对任意 $ar{u}\in\Omega$ 和所有满足以下条件的u:

$$\{u \in \mathbb{R}^d : \operatorname{dist}(u,\Omega) < \varepsilon\} \cap [\sigma(\bar{u}) < \sigma < \sigma(\bar{u}) + \eta],$$

有

$$\varphi'(\sigma(u) - \sigma(\bar{u})) \operatorname{dist}(0, \partial \sigma(u)) \ge 1.$$



- 因为 \mathbb{R}^d 上的紧集可以由有限多个开集覆盖,因此该问题可在有限个点上进行讨论·设 μ 是 σ 在 Ω 上的取值·由于 Ω 是紧集,根据有限覆盖定理,存在有限多个开球 $B(u_i, \varepsilon_i)$ (其中 $u_i \in \Omega, i=1,2,\cdots,p$)使得 $\Omega \subset \bigcup_{i=1}^p B(u_i, \varepsilon_i)$ ·
- 现在考虑这些点 u_i · 在点 u_i 上KL 性质成立,设 φ_i : $[0,\eta_i) \to \mathbb{R}_+$ 是对应的重参数化子,则对任意 $u \in B(u_i,\varepsilon_i) \cap [\mu < \sigma < \mu + \eta_i]$,有逐点的KL 性质:

$$\varphi_i'(\sigma(u) - \mu) \operatorname{dist}(0, \partial \sigma(u)) \ge 1.$$

取充分小的 $\varepsilon > 0$ 使得

$$U_{\varepsilon} \stackrel{\mathrm{def}}{=\!\!\!=\!\!\!=} \{u \in \mathbb{R}^d \mid \mathrm{dist}(u,\Omega) \leq \varepsilon\} \subset \bigcup_{i=1}^p B(u_i,\varepsilon_i).$$



• 取 $\eta = \min_i \eta_i$, 以及

$$\varphi(s) = \int_0^s \max_i \varphi_i'(t) dt, \quad s \in [0, \eta).$$

容易验证 $\varphi \in \Phi_{\eta}$.

• 对任意的 $u \in U_{\varepsilon} \cap [\mu < \sigma < \mu + \eta]$,u必定落在某个球 $B(u_{i_0}, \varepsilon_{i_0})$ 中,我们有

$$\begin{split} \varphi'(\sigma(u) - \mu) \mathrm{dist}(0, \partial \sigma(u)) &= \max_{i} \varphi'_{i}(\sigma(u) - \mu) \mathrm{dist}(0, \partial \sigma(u)) \\ &\geq \varphi'_{i_{0}}(\sigma(u) - \mu) \mathrm{dist}(0, \partial \sigma(u)) \geq 1. \end{split}$$

即一致KL 性质成立.

有限长度性质

设业是KL 函数,且满足假设条件,则以下结论成立:

● 序列{z^k}的长度有限,即

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|z^{k+1} - z^k\| < +\infty.$$

② 序列 $\{z^k\}$ 收敛到 Ψ 的一个临界点 $z^* = (x^*, y^*)$.

注:上述定理的(1) 有别于第一个步骤中充分下降定理的(2):后者只得到了 $\|z^{k+1}-z^k\|$ 平方可和的结论,而前者则说明从 z^0 出发,迭代序列的轨迹长度是有限的.这个结论显然比充分下降定理要强,也是推导全序列收敛的关键.

• 由于 $\{z^k\}$ 是有界序列,存在收敛子列 $\{z^{kq}\}$ \to $\overline{z},q \to \infty$. 和之前的推导类似,不管全序列 $\{z^k\}$ 收敛性如何,对应的函数值列 $\{\Psi(z^k)\}$ 总是收敛的,且

$$\lim_{k \to \infty} \Psi(z^k) = \Psi(\bar{z}). \tag{6}$$

以下不妨设 $\Psi(\bar{z}) < \Psi(z^k)$. 这是因为若存在 \bar{k} 使得 $\Psi(z^{\bar{k}}) = \Psi(\bar{z})$,由充分下降性可知 $z^{\bar{k}+1} = z^{\bar{k}}$,进而有 $z^k = z^{\bar{k}}$,举 $k > \bar{k}$. 结论自然成立.

• 由极限(6) 和极限点集 $\omega(z^0)$ 的性质 $\lim_{k\to\infty} \operatorname{dist}(z^k,\omega(z^0))=0$ 可知对任意的 $\varepsilon,\eta>0$,存在充分大的正整数l,使得对任意的k>l,

$$\varPsi(\boldsymbol{z}^k) < \varPsi(\bar{\boldsymbol{z}}) + \eta, \quad \operatorname{dist}(\boldsymbol{z}^k, \omega(\boldsymbol{z}^0)) < \varepsilon.$$

● 以上的分析说明当k充分大时,迭代点序列最终会满足一致 KL 性质的前提.下面就在这个结论下分别证明定理的两个结论.

(1) 根据临界点的性质, $\omega(z^0)$ 是非空紧集,且 Ψ 在 $\omega(z^0)$ 上是常数. 在一致KL性质中令 $\Omega=\omega(z^0)$,对任意的k>l,

$$\varphi'(\Psi(z^k) - \Psi(\bar{z})) \mathrm{dist}(0, \partial \Psi(z^k)) \geq 1.$$

根据第二个步骤中次梯度上界的引理可知

$$dist(0, \partial \Psi(z^k)) \le \|(A_x^k, A_y^k)\| \le \rho_2 \|z^k - z^{k-1}\|.$$

代入KL 性质有

$$\varphi'(\Psi(z^k) - \Psi(\bar{z})) \ge \frac{1}{\rho_2} \|z^k - z^{k-1}\|^{-1}. \tag{7}$$

 $另外, 由 <math>\varphi$ 的凹性, 有

$$\varphi(\Psi(z^k) - \Psi(\bar{z})) - \varphi(\Psi(z^{k+1}) - \Psi(\bar{z}))$$

$$> \varphi'(\Psi(z^k) - \Psi(\bar{z}))(\Psi(z^k) - \Psi(z^{k+1})).$$
(8)

为了表示方便, 定义

$$\Delta_{p,q} = \varphi(\Psi(z^p) - \Psi(\bar{z})) - \varphi(\Psi(z^q) - \Psi(\bar{z})),$$

其中p,q为任意正整数. 定义常数

$$C = \frac{2\rho_2}{\rho_1} > 0.$$

根据不等式(8),使用(7)式和第一个步骤中的充分下降定理分别估计不等号右边的两项,有

$$\Delta_{k,k+1} \ge \varphi'(\Psi(z^k) - \Psi(\bar{z}))(\Psi(z^k) - \Psi(z^{k+1}))$$

$$\ge \frac{1}{\rho_2} \|z^k - z^{k-1}\|^{-1} \cdot \frac{\rho_1}{2} \|z^{k+1} - z^k\|^2$$

$$= \frac{\|z^{k+1} - z^k\|^2}{C\|z^k - z^{k-1}\|},$$

等价于

$$||z^{k+1} - z^k|| \le \sqrt{C\Delta_{k,k+1}||z^k - z^{k-1}||}.$$

根据基本不等式 $2\sqrt{ab} \le a+b, \ \forall \ a,b>0$,我们取 $a=\|z^k-z^{k-1}\|,$ $b=C\Delta_{k,k+1}$,则

$$2\|z^{k+1} - z^k\| \le \|z^k - z^{k-1}\| + C\Delta_{k,k+1}.$$

对任意的k > l, 在上式中把k替换成i并对 $i = l + 1, l + 2, \dots, k$ 求和, 得

$$2\sum_{i=l+1}^{k} \|z^{i+1} - z^{i}\| \le \sum_{i=l+1}^{k} \|z^{i} - z^{i-1}\| + C\sum_{i=l+1}^{k} \Delta_{i,i+1}$$
$$\le \sum_{i=l+1}^{k} \|z^{i+1} - z^{i}\| + \|z^{l+1} - z^{l}\| + C\Delta_{l+1,k+1}.$$

最后一个不等式是因为 $\Delta_{p,q} + \Delta_{q,r} = \Delta_{p,r}$.

注意到上式不等号右边刚好可以和左边部分抵消,我们有

$$\begin{split} & \sum_{i=l+1}^{k} \|z^{i+1} - z^{i}\| \\ & \leq \|z^{l+1} - z^{l}\| + C\Big(\varphi(\Psi(z^{l+1}) - \Psi(\bar{z})) - \varphi(\Psi(z^{k+1}) - \Psi(\bar{z}))\Big) \\ & \leq \|z^{l+1} - z^{l}\| + C\varphi(\Psi(z^{l+1}) - \Psi(\bar{z})). \end{split}$$

不等式右边是有界的数且与k无关,由级数收敛的定义立即可得

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|z^{k+1} - z^k\| < +\infty.$$

(2) 在 $\sum_{k=1}^{\infty} \|z^{k+1}-z^k\|<+\infty$ 的前提下 $\{z^k\}$ 全序列收敛是显然的. 这等价于证明 $\{z^k\}$ 是柯西列. 对任意q>p>l,

$$z^{q} - z^{p} = \sum_{k=p}^{q-1} (z^{k+1} - z^{k}),$$

根据三角不等式,

$$||z^{q} - z^{p}|| = \left| \left| \sum_{k=p}^{q-1} (z^{k+1} - z^{k}) \right| \right| \le \sum_{k=p}^{q-1} ||z^{k+1} - z^{k}||,$$

而 $\|z^{k+1}-z^k\|$ 的可和性意味着 $\sum_{k=l+1}^{\infty}\|z^{k+1}-z^k\|$ 趋于0. 因此 $\{z^k\}$ 是一个柯西列,算法产生的迭代序列有全序列收敛性.

提纲

- 1 分块坐标下降法
- 2 应用举例
- 3 收敛性分析
- ◆ HOGWILD! 异步SGD
- 5 CYCLADES

随机梯度下降

考虑优化问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \sum_{e \in E} f_e(x_e)$$

- e 表示{1,2,...,n} 的一个子集.
- 在许多机器学习问题中, n 和|E| 都很大. 注意: "集合" E 可以包含相同元素e 的多个拷贝.
- f_e 只在x的几个分量上起作用,即 x_e .
- f_e 可简单地看作 \mathbb{R}^n 上的函数,只需要忽略那些 \overline{A} 工在子集e 中的分量.

问题定义

例子: 机器学习中的应用

• 最小化经验风险

$$\min_{x} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} l_i(a_i^T x)$$

- a_i 表示第i 个数据点, x 是模型. l_i 是一个损失函数.
- 逻辑回归,最小二乘, SVM ...
- 如果每个a_i 都是稀疏的,那它就是我们讨论的问题.

问题定义

例子:一般最小化问题

• 最小化如下的问题

$$\min_{x_1, \dots, x_{m_1}} \min_{y_1, \dots, y_{m_2}} \sum_{i=1}^{m_1} \sum_{j=1}^{m_2} \phi_{i,j}(x_i, y_j)$$

- $\phi_{i,j}$ 是凸的标量函数. x_i 和 y_i 是向量.
- 矩阵补全和矩阵分解问题:

$$\phi_{i,j} = (A_{i,j} - x_i^T y_j)^2$$

- n = m₁m₂ 个函数,每个函数只涉及两个变量.
- 一个变量最多被m₁+m₂个函数共享.

随机梯度下降

• 梯度法格式为

$$x_{k+1} = x_k - \gamma_k \nabla f(x_k)$$

其中 $\nabla f(x_k) = \sum_{e \in E} \nabla f_e(x_k)$.

● 随机梯度下降(SGD)

$$x_{k+1} = x_k - \gamma_k \nabla f_{s_k}(x_k)$$

其中 S_k 从E 中随机采样得到.

- γ_k 是步长(或学习率). 它可以是一个常数或逐渐减小.
- SGD的想法:对于很大的|E|和n,计算全梯度 $\nabla f(x)$ 的代价可能相当大.是否可以只计算 $\nabla f(x)$ 的一小部分同时保证算法收敛性?

随机梯度下降

一步SGD:

 f_{e_1} f_{e_2} x_3 f_{e_3} f_{e_3}

数据点

读取x

 x_6

模型

SGD的优势

SGD 的流行有下列几个原因:

- 相对经典的梯度下降更少的计算量.
- 对噪声更加鲁棒.
- 实现简单.
- 接近最优的学习表现.
- 内存资源占用少.
- 稳定.

- 在大数据集上,SGD可能需要更新非常多步.
- 目标: SGD 的并行版本.
- 如何并行化SGD?
 - 并行化一步更新 即使是深度网络, 计算 $\nabla f_{s_k}(x_k)$ 也是廉价的. 因此写可并行的计算代码可能并不值得.
 - 并行化更新 SGD 是串行的, 所以并行化几乎不可能实现.
 - 我们是否可以并行化一个串行算法呢?

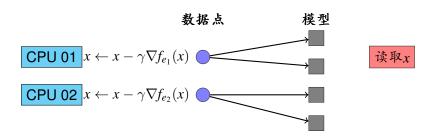
如何并行化一个串行算法?

- No 几乎所有情形.
- Almost yes 有稀疏结构的问题.
- 对于我们的问题:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \sum_{e \in E} f_e(x_e)$$

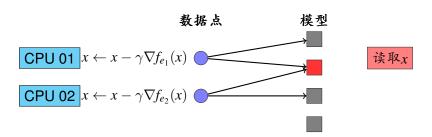
如果大多数 f_e 都不涉及x 的相同分量,那么我们可以利用稀疏性来并行化SGD.

理想情形::



- fe, 和fe, 涉及的分量没有重叠.
- 两个并行和两个串行更新等价.
- 没有冲突 意味着可以加速!

非理想情形:



- fe, 和fe, 都涉及x2.
- 冲突意味着更少的并行化.
- 如何解决这类冲突?

为什么冲突影响那么大?

- CPU 不能直接访问内存.
- 计算只能在CPU 缓存上完成.
- 数据从内存读取到CPU 缓存. 计算完成后, 计算结果又被传回内存.
- CPU并不知道是否有其他CPU的本地更新尚未传回内存。

如何解决冲突问题?

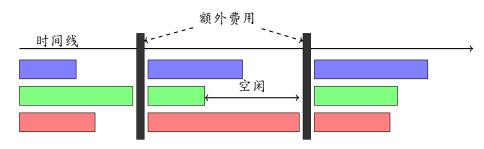
- 通过"坐标"或"内存锁定"的方法.
- 锁定类型: 排他锁.
- 告诉其他CPU: 我现在正在更新变量,在我完成之前请不要做任何修改.
- 确保执行并行SGD时的正确性.
- 仅能提供有限的加速. 当冲突过于频繁时,情况会更糟——甚至 比SGD 的顺序版本还要慢!

异步更新

Q: 如何解决冲突问题?

A: 在异步编程中可以直接忽略它.

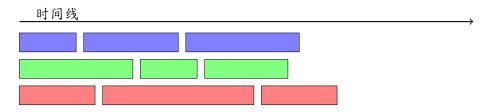
同步算法:



- 负载不均衡导致空闲.
- 正确但速度慢.

异步更新

异步算法:



- 处理器之间不需要同步.
- 没有空闲时间-每个处理器始终在工作.
- 高可扩展性.
- 有噪声但速度快.

Hogwild! 异步SGD

如果我们删除并行SGD 中的所有锁定和同步进程,就可以得到Hogwild! 算法.

Algorithm 2 Hogwild! 异步SGD

- 1: 每个处理器异步做
- 2: loop
- 3: 从E 中随机采样e.
- 4: 从内存中读取数据xe.
- 5: 计算 $G_e(x) := |E|\nabla f_e(x)$.
- 6: for $v \in e$ do
- 7: $x_v \leftarrow x_v \gamma b_v^T G_e(x)$.
- 8: end for
- 9: end loop

Hogwild! 异步SGD

Hogwild! 的一种变体:

Algorithm 3 Hogwild! 异步SGD(变体1)

```
1: 每个处理器异步做
```

- 2: loop
- 3: 从E 中随机采样e.
- 4: 从内存中读取数据x。.
- 5: 计算 $G_e(x) := |E|\nabla f_e(x)$.
- 6: $\Re v \in e$, $\Re f(x_v) \leftarrow x_v \gamma |e| b_v^T G_e(x)$.
- 7: end loop

注意:

- 计算了 f_e 的全梯度,但只更新一个分量.
- 因子|e| 保证了 $\mathbb{E}[|e|b_v^TG_e(x)] = \nabla f(x)$.
- 看起来浪费计算量,但是更容易分析.

异步更新的问题

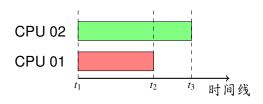
- CPU 缓存和内存的不一致导致结果不正确.
- 较旧的更新可能被较新的更新覆盖.
- 假设我们想用两个线程执行两次更新

$$x_3 = x_2 - \gamma \nabla f_{e_2}(x_2)$$

= $x_1 - \gamma (\nabla f_{e_2}(x_2) + \nabla f_{e_1}(x_1))$

• $\nabla f_{e_1}(x_1)$ 和 $\nabla f_{e_2}(x_2)$ 的计算被分别分配到CPU1 和CPU2.

异步更新的问题



时间	∇f 的 x		内存中的x	缓存中的 ∇f		执行的操作	
t_1	x_1	x_1	x_1	_	_	从内存中读取 x_1	
t_2	<i>x</i> ₂	x_1	$x_1 - \gamma \nabla f_{e_1}(x_1)$	$\nabla f_{e_1}(x_1)$	_	更新内存	计算
<i>t</i> ₃	x_2	x_2	$x_2 - \gamma \nabla f_{e_2}(x_1)$	$\nabla f_{e_1}(x_1)$	$\nabla f_{e_2}(x_1)$	空闲	更新内存

- 我们希望 得到: $x_1 \gamma(\nabla f_{e_1}(x_1) + \nabla f_{e_2}(x_2))$.
- $\xi \in \{1, 1\}$ ξ

Hogwild!的分析

假设条件

● ∇f 是利普西茨连续的.

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \le L\|x - y\|$$

• f 是强凸函数. 每个 f_e 都是凸函数.

$$f(y) \ge f(x) + (y - x)^T \nabla f(x) + \frac{c}{2} ||y - x||^2$$

• f_e 的梯度有界. 由于 $G_e(x) = |E|\nabla f_e(x)$,

$$||G_e(x)|| \leq M, \ \forall \ x$$

- $\gamma c < 1$, 否则即使是梯度下降法也有可能失败.
- 基于Hogwild!(变体1) 算法.

主要结果

Proposition 4.1 (主要结果).

假设从计算梯度到在步骤j中使用它之间的延迟,即j-k(j),总是小于等于 τ ,并且 γ 定义为

$$\gamma = \frac{\theta \varepsilon c}{2LM^2 \Omega (1 + 6\rho \tau + 4\tau^2 \Omega \Delta^{1/2})} \tag{9}$$

其中 $\varepsilon > 0$ 且 $\theta \in (0,1)$. 定义 $D_0 = ||x_0 - x_\star||^2$ 并设整数k 满足

$$k \geqslant \frac{2LM^2\Omega(1 + 6\tau\rho + 6\tau^2\Omega\Delta^{1/2})\log(LD_0/\varepsilon)}{c^2\theta\varepsilon}$$
 (10)

那么在x 的k 步分量更新后, 我们有 $\mathbb{E}[f(x_k) - f_{\star}] \leq \varepsilon$.

主要结果

Remarks on Prop 4.1

• 将Hogwild! 算法看作带有滞后的SGD.

$$x_{j+1} \leftarrow x_j - \gamma |e| \mathcal{P}_v G_e(x_{k(j)})$$

- 滞后的时间需要能被τ控制住.也就是说,在第j步更新,用于计算梯度的点在之前τ步内.
- ← 正比于线程数.
- 步长 γ 应该是 $\mathcal{O}(\varepsilon)$ 以确保收敛.
- 为了达到 ε 的精度, 我们需要进行至少 $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ 步更新.

提纲

- 1 分块坐标下降法
- 2 应用举例
- 3 收敛性分析
- 4 HOGWILD! 异步SGD
- **5** CYCLADES

问题定义

考虑优化问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \sum_{e \in E} f_e(x_e)$$

- e 表示{1,2,...,n} 的一个子集.
- 在许多机器学习问题中, n 和|E| 都很大. 注意: "集合" E 可以包含相同元素e 的多个拷贝.
- f_e 只在x的几个分量上起作用,即 x_e .
- \bullet f_e 可简单地看作 \mathbb{R}^n 上的函数,只需要忽略那些 $\mathbf{7}$ 在子集e 中的分量.

HOGWILD!

• HOGWILD! (异步SGD):

$$x_{k+1} \leftarrow x_k - \gamma_k \nabla f_{s_k}(x_k)$$

- 所有内核异步执行更新,没有内存锁定.
- 忽略冲突的变量.
- 在一些情形下没有收敛性保证(失去了SGD 的一些性质)
- 复杂的理论分析|>_<|

其他方式?

为了解决冲突:

- 传统并行
 - 更新时锁定冲突变量.
 - 保证更新的正确性,但只能获得有限的加速.

HOGWILD!

- 更新时忽略冲突.
- 更快的加速,但有更高的风险不收敛.

CYCLADES

- 通过重新排列更新顺序来避免冲突.
- 更快的加速.
- 以高概率保留SGD的性质.

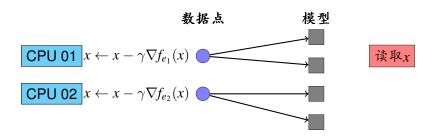
关于冲突

为什么冲突影响那么大?

- CPU 不能直接访问内存.
- 计算只能在CPU 缓存上完成.
- 数据从内存读取到CPU 缓存. 计算完成后, 计算结果又被传回内存.
- CPU 并不知道是否有其他CPU的本地更新尚未传回内存.

关于冲突

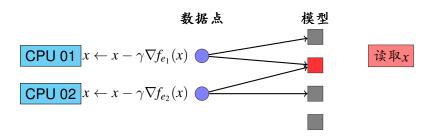
理想情形::



- fe1 和fe5 涉及的分量没有重叠.
- 两个并行和两个串行更新等价.
- 没有冲突 意味着可以加速!

关于冲突

非理想情形:



- fe₁ 和fe₂ 都涉及x₂.
- 冲突意味着更少的并行化.
- 如何解决这类冲突? HOGWILD! 忽略了冲突. CYCLADES避免了冲突.

更新冲突图

Definition 1 (二部更新变量图).

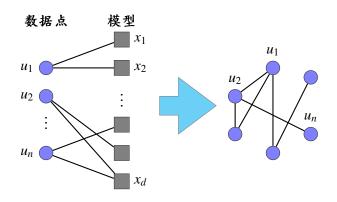
定义 G_u 为更新 u_1,\ldots,u_n 与d 个变量之间的二部更新变量图 (bipartite update-variable graph). 如果 u_i 需要读取和写入 x_j ,则在 G_u 中将更新 u_i 链接到变量 x_j . E_u 表示二部图中的边数. Δ_L 表示 G_u 的左侧最大顶点度. $\overline{\Delta}_L$ 表示左侧平均度.

Definition 2 (冲突图).

定义 G_c 为n 个顶点上的冲突图,每个顶点对应一个更新 u_i . G_c 的两个顶点与一条边相连,当且仅当相应的更新在二部更新图 G_u 中共享至少一个变量. Δ 表示 G_c 的最大顶点度.

更新冲突图

从二部更新变量图到冲突图



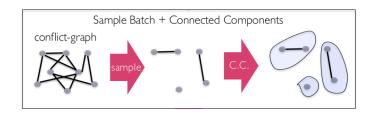
更新冲突图

Remarks

- 在冲突图中,如果两个顶点由一条边相连,那么它们对应的更新相互冲突.
- G_c 的作用是用于分析 CYCLADES 算法,实际中并不会构建它.
- 假设相连的元素有N_{cc} 块,那么可以使用N_{cc} 个处理器来进行异步 更新,避免冲突发生. 但是, 在大多数问题中N_{cc} 等于1!

CYCLADES 的想法

- 需要更多的连接块来实现并行.
- 只采样部分的更新.



如果进行采样,可以获得多少连接块?

连接块的个数

Theorem 1.

G 是由n 个顶点构成的图,最大顶点度是 Δ . 以概率 $p=\frac{1-\varepsilon}{\Delta}$ 独立采样每个顶点,并定义G' 为采样的顶点诱导的子图. 那么在大概率意义上,G' 的最大连接块个数至多为 $\frac{4}{2}\log n$ 个.

Theorem 2.

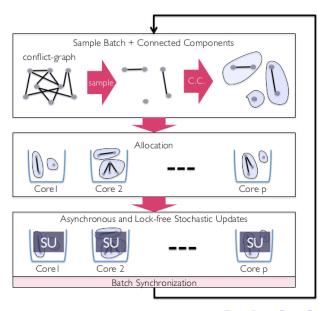
G 是由n 个顶点构成的图,最大顶点度是 Δ . 以概率 $B=(1-\varepsilon)\frac{n}{\Delta}$ 有效回或无效回地进行采样,并定义G' 为采样的顶点诱导的子图. 那么在大概率的意义上,G' 的最大连接块个数至多为 $\mathcal{O}\left(\frac{\log n}{\varepsilon^2}\right)$ 个.

连接块个数

Remarks

- 定理2 可以看作是定理1 的一个推论(并不显然). 之后将给出定理1的简要证明.
- 根据定理2,如果采样 $B = (1 \varepsilon) \frac{n}{\Delta}$ 个顶点,那么至少会有 $\mathcal{O}(\varepsilon^2 B/\log n)$ 个连接块,每块的大小最大为 $\mathcal{O}(\log n/\varepsilon^2)$.
- 连接块的个数增加了很多- 适合并行化

CYCLADES 的想法



CYCLADES 的想法

- 采样后,使用某个算法并行查找所有连接块(待续).
- 确定所有连接块后,将它们分配给处理器(考虑负载均衡).
- 每个处理器异步、独立地执行随机更新,不会出现冲突或错误共享问题.
- 重复这三个阶段直到完成.

CYCLADES 框架

Algorithm 4 CYCLADES

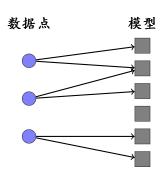
```
1: Input: G_u, T, B.
```

- 2: 从 G_u 中采样 $n_b = T/B$ 个子图.
- 3: for $i = 1 : n_b$ do
- 将子图中的连接块分配到P个核上。
- 5: for 每个核(异步) do
- 6: 在分配的连接块上执行本地更新.
- 7: end for
- 8: end for
 - T表示需要运行的所有更新个数.
 - 每批结束时进行一次同步.
 - Gu 由问题的结构决定.

并行计算批中的连接块

- 如果我们使用冲突图 G_c 来计算连接块...
- 计算代价将正比于采样边的个数.
- 然而,构建 G_c 需要 n^2 次计算. 计算代价高.
- 所以只使用二部更新变量图来计算连接块!

并行计算批中的连接块



简单的信息传输想法

- 数据点发送标签.
- 变量计算min并发回.
- 数据点计算min.
- 迭代直至结束.

并行计算批中的连接块

Remarks

- 所需的迭代次数可以被最长最短路径的长度(即 G_c 的直径)控制住.
- 总体复杂度: $\mathcal{O}(E_u \log n/P)$, P 是核数. 注意: 当P 很大时很有用.
- 只需要二部图 G_u , 不需要冲突图 G_c .

分配连接块

计算得到批中的连接块后,就可以将这些连接块分配给P个核了.

- w; 表示用第i个数据点进行更新的代价.
- $W_{C(i)} = \sum_{j \in C(i)} w_j$ 是执行第i个连接块中更新的代价.
- 对每个批处理, 我们需要

$\min \max W_{C(i)}$

来获取最好的负载均衡.

● 这是一个NP困难问题. 可以利用近似算法来获得次优方案.

分配连接块

Algorithm 5 贪婪分配

- 1: 估计每个连接块的计算代价 W_1, \ldots, W_m .
- 2: 按降序对Wi 进行排序.
- 3: for i = 1 : m do
- 4: 选择当前最大的Wi.
- 5: 将W,添加到当前代价总和最少的核中.
- 6: end for
 - 4/3-近似算法.
 - w_i 与该更新的out-degree 成正比.

主要结果

Theorem 3 (主要结果).

假设给定的更新变量图 G_u 的左侧平均度和最大度分别为 $\bar{\Delta}_L$ 和 Δ_L ,并且满足 $\Delta_L/\bar{\Delta}_L \leqslant \sqrt{n}$,诱导的最大冲突度为 Δ . 那么,在 $P = \mathcal{O}(n/\Delta\Delta_L)$ 个核上,取批大小为 $B = (1-\varepsilon)\frac{n}{\Delta}$,对任意的c > 1,CYCLADES 算法执行T = cn次更新的时间大概率为

$$\mathcal{O}(\frac{E_u \cdot \kappa}{P} \log^2 n)$$

- κ 是更新E_u中一条边的代价.
- CYCLADES 可以以大概率获得与串行算法相同的结果. 因此,它需要目标函数f 及f。的相似属性。

主要结果

Remarks of Thm 3

- 每批的采样可以有放回或无放回.
- 核心数是有限的. 因为如果P太大,就很难均衡地分配连接块.
- 批大小是有限的. 较小的B 可以诱导带有很多连接块的子图.
- 定理1是证明这个主要结果的关键基础.