机器学习中的优化算法

Lecture09: 复合优化算法–分块坐标下降法

张立平

清华大学数学科学系

办公室：理科楼#A302, Tel: 62798531

E-mail: lipingzhang@tsinghua.edu.cn

Contents and Acknowledgement

- 教材：最优化：建模、算法与理论

  http://bicmr.pku.edu.cn/ wenzw/bigdata2021.html

- 致谢：北京大学文再文教授

Outline of BCD

- 问题描述
- 分块坐标下降法
- 应用举例
- 收敛性分析

BCD针对的问题描述

►典型优化问题形式:

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

- $\mathcal{X}$是函数的可行域, 自变量x拆分成s个变量块$x_1,x_2,\cdots,x_s$, 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.

典型问题举例

- 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

$$\begin{aligned} \min_{\Phi, H} \quad & \|A - \Phi H\|_F^2, \\ \text{s.t.} \quad & \Phi \in \mathbb{R}^{n\times k}, \text{每一行只有一个元素为1, 其余为0,} \\ & H \in \mathbb{R}^{k\times p}. \end{aligned}$$

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

$$\min_{X,Y} \quad \frac{1}{2}\|\mathcal{A}(XY) - b\|_2^2 + \alpha\|X\|_F^2 + \beta\|Y\|_F^2, \quad (\alpha, \beta > 0\text{为正则化参数}).$$

- 非负矩阵分解

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

其中$\mathcal{M}$是已知张量, “$\circ$”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$X\in\mathbb{R}^{k\times n}$:

$$\begin{aligned}\min_{D,X} \quad & \frac{1}{2n}\|DX-A\|_F^2+\lambda\|X\|_1,\\ \text{s.t.} \quad & \|D\|_F\leq 1.\end{aligned}$$

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$x_1, x_2, \cdots, x_s$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

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

其中x_j^k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. 考虑第i块变量时前$(i-1)$块变量已经完成更新, 因此上标为k; 而后面下标从$(i+1)$起的变量仍为旧的值, 因此上标为$(k-1)$.

变量更新方式

- 固定其他分量然后对单一变量求极小:

$$x_i^k = \arg\min_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ f_i^k(x_i) + r_i(x_i) \right\}. \tag{1}$$

- 增加了一个近似点项$\frac{L_i^{k-1}}{2}\|x_i - x_i^{k-1}\|_2^2$来限制下一步迭代不应该与当前位置相距过远, 增加近似点项的作用是使得算法能够收敛($L_i^k > 0$为常数):

$$x_i^k = \arg\min_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ f_i^k(x_i) + \frac{L_i^{k-1}}{2}\|x_i - x_i^{k-1}\|_2^2 + r_i(x_i) \right\}. \tag{2}$$

- 对$f_i^k(x)$进行线性化以简化子问题的求解, 并引入了Nesterov 加速算法的技巧加快收敛:

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

其中$\hat{x}_i^{k-1}$采用外推定义:

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

$\omega_i^k \geq 0$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. 取权重$\omega_i^k = 0$即可得到不带外推的更新格式, 此时等价于进行一次近似点梯度法的更新.

▶分块坐标下降法

初始化： 选择两组初始点$(x_1^{-1}, x_2^{-1}, \cdots, x_s^{-1}) = (x_1^0, x_2^0, \cdots, x_s^0)$.
for $k = 1, 2, \cdots$ **do**
  for $i = 1, 2, \cdots$ **do**
    使用格式(1) 或(2) 或(3) 更新x_i^k.
  end for
  if 满足停机条件 **then**
    返回$(x_1^k, x_2^k, \cdots, x_s^k)$，算法终止.
  end if
end for

BCD算法格式解释

- 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．

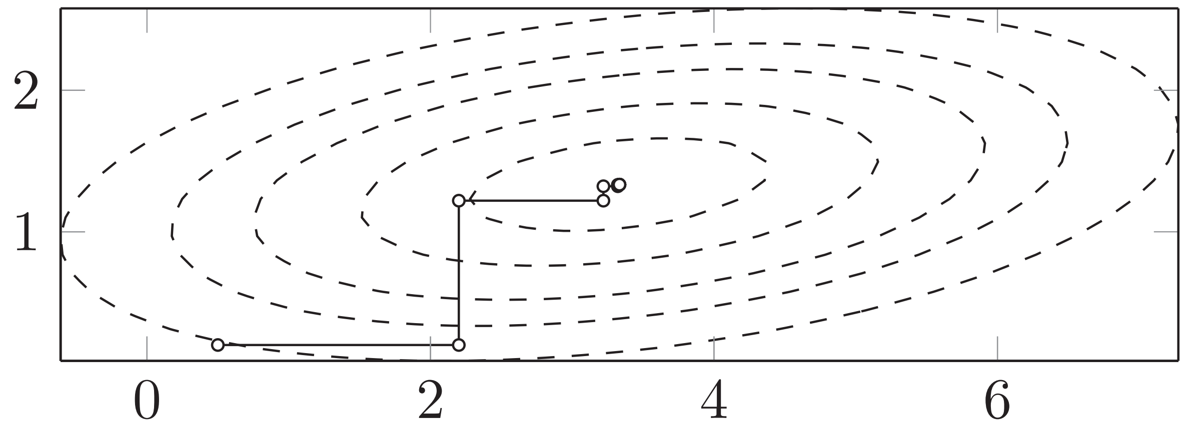
▶【例】 $\min \quad f(x,y) = x^2 - 2xy + 10y^2 - 4x - 20y$

- 采用格式(1)的分块坐标下降法:

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

- 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.

- 对于比较病态的问题, 由于分块坐标下降法是对逐个分量处理, 它能较好地捕捉目标函数的各向异性, 而梯度法则会受到很大影响.



▶**不收敛反例** 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:

$$F(x_1,x_2,x_3) = -x_1x_2 - x_2x_3 - x_3x_1 + \sum_{i=1}^{3}[(x_i-1)_+^2 + (-x_i-1)_+^2],$$

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.

BCD应用举例

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

- 将自变量x记为$x = [x_i, \bar{x}_i^\top]^\top$, 其中$\bar{x}_i$为$x$去掉第$i$个分量而形成的列向量．相应地, 矩阵$A$在第$i$块的更新记为$A = [a_i\ \bar{A}_i]$, 其中$\bar{A}_i$为矩阵$A$去掉第$i$列而形成的矩阵．LASSO问题可以写为

$$\min_{x_i} \quad \mu|x_i| + \mu\|\bar{x}_i\|_1 + \frac{1}{2}\|a_i x_i - (b - \bar{A}_i\bar{x}_i)\|^2.$$

- 利用格式(1)更新第i块, 令$c_i = b - \bar{A}_i\bar{x}_i$, 则求解

$$\min_{x_i} \quad f_i(x_i) \overset{\text{def}}{=\!=} \mu|x_i| + \frac{1}{2}\|a_i\|^2 {x_i}^2 - a_i^{\mathrm{T}} c_i x_i. \tag{5}$$

- (5)的最小值点

$$x_i^k = \arg\min_{x_i} f_i(x_i) = \begin{cases} \dfrac{a_i^{\mathrm{T}} c_i - \mu}{\|a_i\|^2}, & a_i^{\mathrm{T}} c_i > \mu, \\ \dfrac{a_i^{\mathrm{T}} c_i + \mu}{\|a_i\|^2}, & a_i^{\mathrm{T}} c_i < -\mu, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

►K-均值聚类问题

$$\begin{aligned} \min_{\Phi, H} \quad & \|A - \Phi H\|_F^2, \\ \text{s.t.} \quad & \Phi \in \mathbb{R}^{n \times k}, \text{每一行只有一个元素为1, 其余为0}, \\ & H \in \mathbb{R}^{k \times p}. \end{aligned}$$

- 当固定H时, 设Φ的每一行为ϕ_i^{T}, 则

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

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$\phi_i^{\mathrm{T}} H$ 相当于将H 的第j行取出, 因此$\|a_i^{\mathrm{T}}-\phi_i^{\mathrm{T}} H\|$为$a_i^{\mathrm{T}}$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$a_i^{\mathrm{T}}$最近的那一行:

$$\Phi_{ij}=\begin{cases} 1, & j=\arg\min\limits_{l}\|a_i-h_l\|, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

其中h_l^{T}表示矩阵H的第l行.

- 当固定Φ时, 考虑H的每一行h_j^{T}, 则有

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

因此只需对每个h_j求最小．设$\bar{a}_j$是目前第j类所有点的均值,
则$\sum\limits_{a \in S_j} \langle a - \bar{a}_j, \bar{a}_j - h_j \rangle = 0$且

$$\begin{aligned}
\sum_{a \in S_j} \|a - h_j\|^2 &= \sum_{a \in S_j} \|a - \bar{a}_j + \bar{a}_j - h_j\|^2 \\
&= \sum_{a \in S_j} \left(\|a - \bar{a}_j\|^2 + \|\bar{a}_j - h_j\|^2 + 2 \langle a - \bar{a}_j, \bar{a}_j - h_j \rangle \right) \\
&= \sum_{a \in S_j} \left(\|a - \bar{a}_j\|^2 + \|\bar{a}_j - h_j\|^2 \right).
\end{aligned}$$

故$h_j = \bar{a}_j$可达到最小值.

▶**非负矩阵分解问题** $\min_{X,Y\geq 0} \quad f(X,Y)=\frac{1}{2}\|XY-M\|_F^2$

- $f(X,Y)$的梯度

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

- 利用格式(3), 注意到当$r_i(X)$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:

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

其中t_k^x, t_k^y是步长.

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

- 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). 计算$f_D(X)$中光滑部分的梯度:

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

因此格式(3)的BCD:

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

其中t_k为步长.

- 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:

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

于是可得

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

因为$X \in \mathbb{R}^{k\times n}$, $k \ll n$, 故可方便地求出XX^{T}的逆．故格式(1)的BCD:

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

- 若先更新X再更新D, 则最终可以得到如下的分块坐标下降法:

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

BCD收敛性分析: 近似点交替线性化方法

考虑优化问题

$$\min \quad \Psi(x,y) \stackrel{\text{def}}{=} f(x)+g(y)+H(x,y), \quad (x,y)\in\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m$$

其中f 和g 为适当(非凸)闭函数, H 为连续可微函数.

- 基于BCD格式(3), 其分块坐标下降法迭代如下:

$$\begin{aligned} x^{k+1} &\in \operatorname{prox}_{c_k f}\left(x^k - c_k\nabla_x H\left(x^k, y^k\right)\right), \\ y^{k+1} &\in \operatorname{prox}_{d_k g}\left(y^k - d_k\nabla_y H\left(x^{k+1}, y^k\right)\right), \end{aligned} \tag{6}$$

其中c_k, d_k 为步长参数. 由于自变量只有两块, 对光滑部分H采用线性化处理, 因此该BCD又称为近似点交替线性化方法.

▶**非凸函数的邻近算子** 设 h 是适当闭函数(可以非凸), 且具有有限的下界, $\inf\limits_{x\in\mathbf{dom} h} h(x) > -\infty$, 定义 h 的邻近算子为

$$\mathrm{prox}_h(x) = \underset{u\in\mathbf{dom}\ h}{\arg\min}\left\{h(u) + \frac{1}{2}\|u-x\|^2\right\}.$$

▶**非凸函数的次微分**设$f:\mathbb{R}^n \to (-\infty, +\infty]$ 是适当下半连续函数.

① 对给定的$x \in \mathbf{dom}\ f$, 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:

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

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

② 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.

- 设h 是适当闭函数且$\inf_{x\in\mathbf{dom} h} h(x) > -\infty$, 则$\forall x \in \mathbf{dom}\ h$, $\mathrm{prox}_h(x)$ 是$\mathbb{R}^n$ 上的非空紧集.
- $\hat{\partial} f(x) \subseteq \partial f(x)$, 前者是闭凸集, 后者是闭集. 并非在所有的$x \in \mathbf{dom}\ f$ 处都存在*Fréchet* 次微分.
- 设h 是适当闭函数(可非凸)且有下界, $u \in \mathrm{prox}_h(x)$, 则$x - u \in \partial h(u)$

▶近似点交替线性化方法(6)收敛的假设条件: 假设A

(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$\nabla H$在有界集上是联合利普希茨连续的: 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$(x_1, y_1), (x_2, y_2) \in B_1 \times B_2$有

$$\begin{aligned}&\|(\nabla_x H(x_1, y_1) - \nabla_x H(x_2, y_2), \nabla_y H(x_1, y_1) - \nabla_y H(x_2, y_2))\| \\ \le & L\|(x_1 - x_2, y_1 - y_2)\|.\end{aligned}$$

由假设A可得:

- 在有界集上H 关于每个分量都是梯度L-利普希茨连续的

$$\begin{aligned}\|\nabla_x H(x_1, y) - \nabla_x H(x_2, y)\| &\leqslant L\|x_1 - x_2\|, \\ \|\nabla_y H(x, y_1) - \nabla_y H(x, y_2)\| &\leqslant L\|y_1 - y_2\|.\end{aligned} \tag{7}$$

- $\Psi(x, y)$ 的次微分:

$$\partial\Psi(x, y) = (\nabla_x H(x, y) + \partial f(x), \nabla_y H(x, y) + \partial g(y)). \tag{8}$$

Kurdyka-Łojasiewicz (KL) 性质

非凸的情况下进行收敛性分析的主要工具是Kurdyka-Łojasiewicz (KL) 性质.

- 设$\sigma : \mathbb{R}^d \to (-\infty, +\infty]$是适当下半连续函数且$\inf_{\mathbb{R}^d} \sigma > -\infty$. 给定实数$\alpha \le \beta$, 定义$[\alpha, \beta]$关于函数$\sigma$ 的原像为
$$[\alpha \le \sigma \le \beta] = \{x \in \mathbb{R}^d \,|\, \alpha \le \sigma(x) \le \beta\}.$$

- Φ_η函数类: 定义Φ_η是凹连续函数$\varphi : [0, \eta) \to \mathbb{R}_+$的集合且满足:
(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$\varphi'(s) > 0$.

- KL性质 设σ: $\mathbb{R}^d \to (-\infty, +\infty]$是适当下半连续函数.
  (1) 称函数σ在给定点$\bar{u} \in \mathbf{dom}\, \partial\sigma \overset{\text{def}}{=\!=} \{u \,|\, \partial\sigma(u) \ne \emptyset\}$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
$$\varphi'(\sigma(u) - \sigma(\bar{u})) \cdot \mathrm{dist}(0, \partial\sigma(u)) \ge 1, \quad \forall\, u \in U \cap [\sigma(\bar{u}) < \sigma < \sigma(\bar{u}) + \eta],$$
  其中$\mathrm{dist}(x, S)$表示点x到集合S的距离.

(2) 若σ在$\mathbf{dom}\,\partial\sigma$上处处满足**KL 性质**, 则称$\sigma$是一个KL 函数.

▶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$\bar{u}$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$0 \in \partial\sigma(\bar{u})$.
- 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

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

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$\bar{u}$，$\tilde{\varphi}(u)$ 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.

半代数与KL函数

半代数, 对数指数函数是KL函数

- $\mathbb{R}^d$ 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

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

- 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$\sigma(u) : \mathbb{R}^d \to (-\infty, +\infty)$ 是适当的下半连续函数. 若σ 是半代数的, 则它在$\mathbf{dom}\,\sigma$中任一点处满足KL性质.

▶半代数函数举例:

- 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 是$\mathbb{R}^d$ 中的非空半代数子集, 则函数dist$(x,S)^2$ 是半代数的.
- $\|\cdot\|_0, \|\cdot\|_p$是半代数函数, 其中p 是有理数.

Lemma 1 (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$\Omega$上为常数且在$\Omega$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$\bar{u} \in \Omega$和所有满足以下条件的$u$:*

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

有

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

Proof. 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$\varphi_i:\ [0,\eta_i)\to\mathbb{R}_+$ 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:

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

取充分小的$\varepsilon>0$使得

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

- 取$\eta=\min_i\eta_i$, 以及

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

容易验证$\varphi\in\varPhi_\eta$.

- 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, 于是我们有

$$\begin{aligned}\varphi'(\sigma(u)-\mu)\mathrm{dist}(0,\partial\sigma(u)) &= \max_i\varphi_i'(\sigma(u)-\mu)\mathrm{dist}(0,\partial\sigma(u))\\ &\geq\varphi_{i_0}'(\sigma(u)-\mu)\mathrm{dist}(0,\partial\sigma(u))\geq 1.\end{aligned}$$

即一致KL 性质成立.

$\square$

近似点交替线性化方法的收敛性

分析近似点交替线性化方法(6)的收敛性, 主要分为三个步骤:

① 充分下降: 找到一个正常数ρ_1 使得

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

② 次梯度上界: 假设算法产生的迭代序列有界, 找到一个常数ρ_2, 使得次梯度有一个上界估计:

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

③ 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$\{z^k\}$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Ψ 的临界点.

▶充分下降

Lemma 2. *设$h:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$是连续可微函数, 梯度$\nabla h$是$L_h$-利普希茨连续的, $\sigma:\mathbb{R}^d\to(-\infty,+\infty]$是适当下半连续函数且$\inf_{\mathbb{R}^d}\sigma>-\infty$. 固定$t<\frac{1}{L_h}$, 则对任意的$u\in\mathbf{dom}\,\sigma$ 和$\tilde{u}\in\mathrm{prox}_{t\sigma}(u-t\nabla h(u))$, 有*

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

Proof. 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

$$\begin{aligned}h(\tilde{u})+\sigma(\tilde{u})&\le h(u)+\langle\tilde{u}-u,\nabla h(u)\rangle+\frac{L_h}{2}\|\tilde{u}-u\|^2+\sigma(\tilde{u})\\&\le h(u)+\frac{L_h}{2}\|\tilde{u}-u\|^2+\sigma(u)-\frac{1}{2t}\|\tilde{u}-u\|^2\\&=h(u)+\sigma(u)-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{t}-L_h\right)\|\tilde{u}-u\|^2.\end{aligned}$$

□

Theorem 1 (充分下降). 设假设A成立, $\{z^k\}=\{(x^k,y^k)\}$为BCD(6) 产生的迭代序列, 且假设$\{z^k\}$有界. 取步长$c_k=d_k=\dfrac{1}{\gamma L}$, 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) 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:

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

且$\lim\limits_{k\to\infty}\|z^{k+1}-z^k\|=0$.

Proof. (1) 根据假设A (2), (7) 和引理2可知, 每一步关于x^k和y^k的下降量估计:

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

$$
\Rightarrow \quad \Psi(z^k) - \Psi(z^{k+1}) \ge \frac{1}{2}(\gamma - 1)L\left(\|x^{k+1} - x^k\|^2 + \|y^{k+1} - y^k\|^2\right).
$$

由此可得

$$
\frac{\rho_1}{2}\|z^{k+1} - z^k\|^2 \le \Psi(z^k) - \Psi(z^{k+1}). \tag{9}
$$

因此, 根据假设$\inf \Psi > -\infty$ 可知, 函数值序列$\{\Psi(z^k)\}$ 单调下降收敛到一个有限的数Ψ^*.

(2) 设N为任意的整数, 在(9) 中对k求和, 得

$$\sum_{k=0}^{N-1} \|z^{k+1} - z^k\|^2 \leq \frac{2}{\rho_1}(\Psi(z^0) - \Psi(z^N)) \leq \frac{2}{\rho_1}(\Psi(z^0) - \Psi^*).$$

令$N \to \infty$, 可得$\sum_{k=0}^{\infty} \|z^{k+1} - z^k\|^2 < +\infty$, 从而$\lim_{k\to\infty} \|z^{k+1} - z^k\| = 0$. □

▶次梯度上界 讨论序列$\{z^k\}$是否会趋于某个临界点.

Lemma 3 (次梯度上界). *设定理1中的假设条件成立, 且$\{z^k\}$是BCD(6)产生的有界序列. 对任意的整数k, 定义*

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

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

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

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

其中$\rho_2 = (2\gamma + 3)L$.

Proof. 由(6)中更新x^k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,

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

同理, 由(6)中y^k的更新可知

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

其中$v^k \in \partial g(y^k)$为g的一个次梯度．由A_x^k, A_y^k的定义, 及(8)可得

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

故有$(A_x^k, A_y^k) \in \partial \Psi(x^k, y^k)$.

下面估计A_x^k和A_y^k的模长. 由假设A (2)知, 对$\|A_x^k\|$有

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

由(7)知, 对$\|A_y^k\|$有

$$\begin{aligned}\|A_y^k\| &\leq \frac{1}{d_{k-1}}\|y^k - y^{k-1}\| + \|\nabla_y H(x^k, y^k) - \nabla_y H(x^k, y^{k-1})\| \\ &\leq \frac{1}{d_{k-1}}\|y^k - y^{k-1}\| + L\|y^k - y^{k-1}\| \\ &= \left(\frac{1}{d_{k-1}} + L\right)\|y^k - y^{k-1}\| \\ &\leq (\gamma+1)L\|z^k - z^{k-1}\|.\end{aligned}$$

由此可得

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

▶子列收敛性

- 由引理3知, $\partial\Psi(z^k)$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, 故可猜想$\{z^k\}$的极限点应和Ψ的临界点有一定的关系.

- 极限点集的性质: 定义$\omega(z^0)$为近似点交替线性化方法(6)从点z^0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) $\emptyset \neq \omega(z^0) \subset \mathrm{crit}\,\Psi$, 其中$\mathrm{crit}\,\Psi$定义为$\Psi$所有的临界点.

(2) z^k与集合$\omega(z^0)$的距离趋于0,

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

(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.

Ref: BOLTE J, SABACH S, TEBOULLE M. *Proximal alternating linearized minimization for nonconvex and nonsmooth problems*. Mathematical Programming, 2014, 146(1): 459-494.

▶利用KL 性质证明全序列收敛

Theorem 2 (有限长度性质). *设Ψ是KL 函数, 假设A满足, $\{z^k\}$是有界序列, 则以下结论成立:*

(1) 序列$\{z^k\}$的长度有限,

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|z^{k+1} - z^k\| < +\infty. \tag{10}$$

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

Proof. 由于$\{z^k\}$是有界序列, 故存在收敛子列$\{z^{k_q}\} \to \bar{z} \ (q \to \infty)$. 由充分下降定理1(1)知, 函数值序列$\{\Psi(z^k)\}$ 总是收敛的, 且

$$\lim_{k\to\infty} \Psi(z^k) = \Psi(\bar{z}). \tag{11}$$

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$z^k = z^{\bar{k}}, \forall\, k > \bar{k}$. 结论自然成立.

由极限(11) 和极限点集$\omega(z^0)$的性质(2): $\lim_{k\to\infty} \mathrm{dist}(z^k, \omega(z^0)) = 0$ 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$k>l$,

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

因此, 由假设Ψ是KL 函数, 和极限点集$\omega(z^0)$的性质(4): Ψ在$\omega(z^0)$上是一个有限的常数 可知, 一致KL性质成立.

(1) 根据极限点集$\omega(z^0)$的性质, $\omega(z^0)$是非空紧集, 且Ψ在$\omega(z^0)$上是常数. 故由一致KL性质引理1知, 对任意的$k>l$有

$$\varphi'(\Psi(z^k)-\Psi(\bar{z}))\mathrm{dist}(0,\partial\Psi(z^k))\geq 1. \tag{12}$$

根据次梯度上界引理3可知

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

又由(12)得

$$\varphi'(\Psi(z^k)-\Psi(\bar{z}))\geq\frac{1}{\rho_2}\|z^k-z^{k-1}\|^{-1}. \tag{13}$$

由φ的凹性知,

$$\varphi(\Psi(z^k)-\Psi(\bar{z}))-\varphi(\Psi(z^{k+1})-\Psi(\bar{z}))\geq\varphi'(\Psi(z^k)-\Psi(\bar{z}))(\Psi(z^k)-\Psi(z^{k+1})). \tag{14}$$

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. 显然$\Delta_{p,q} + \Delta_{q,r} = \Delta_{p,r}$. 定义常数

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

根据不等式(14), (13) 和充分下降定理1, 可知

$$\begin{aligned}
\Delta_{k,k+1} &\geq \varphi'(\Psi(z^k) - \Psi(\bar{z}))(\Psi(z^k) - \Psi(z^{k+1})) \\
&\geq \frac{1}{\rho_2}\|z^k - z^{k-1}\|^{-1} \cdot \frac{\rho_1}{2}\|z^{k+1} - z^k\|^2 \\
&= \frac{\|z^{k+1} - z^k\|^2}{C\|z^k - z^{k-1}\|} \\
\Rightarrow \quad & \|z^{k+1} - z^k\| \leq \sqrt{C\Delta_{k,k+1}\|z^k - z^{k-1}\|}.
\end{aligned}$$

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

$$2\|z^{k+1} - z^k\| \leq \|z^k - z^{k-1}\| + C\Delta_{k,k+1}. \tag{15}$$

对任意的$k > l$, 在(15)中把k替换成i并对$i = l+1, l+2, \cdots, k$求和, 得

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

故有

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

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

(2) 由(10)知, 要证$\{z^k\}$收敛, 只需证明$\{z^k\}$是柯西列.

对任意的$q > p > l$,

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

根据三角不等式,

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

因此, 由(10)知, $\{z^k\}$是一个柯西列, 故收敛. $\square$