回顾：梯度下降算法

设 $f(x)$ 是可微凸函数且 $\mathbf{dom}\, f = \mathbb{R}^n$，考虑如下问题：

$$\min_x \; f(x).$$

- 梯度下降法：选择初始点 $x^0 \in \mathbb{R}^n$，然后重复：

  $$x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f(x^k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

  其中 $\alpha_k > 0$为步长，可取为固定常数或者通过线搜索确定.

- 若 $\nabla f(x)$ 利普西茨连续，则梯度下降法的收敛速度是 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$.

如果 $f(x)$不可微呢?

提纲

非光滑优化的例子

- 极小极大问题：

$$\min_{x\in X}\max_{1\leq i\leq m} f_i(x)$$

- 求解非线性方程组：

$$f_i(x)=0,\quad i=1,\cdots,m$$

  可以把它化为一个极小化问题：

$$\min_{x\in X}\|\,(f_1(x),\cdots,f_m(x))\,\|$$

  特别地，$\|\cdot\|=\|\cdot\|_1$ 对应 L_1 极小化问题，$\|\cdot\|=\|\cdot\|_\infty$对应切比雪夫近似问题.

- LASSO问题：

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

梯度下降法失败的例子

考虑函数 $f:\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^1, x=(u,v)^{\mathrm{T}}$，

$$f(x) = \max\left[\frac{1}{2}u^2 + (v-1)^2, \frac{1}{2}u^2 + (v+1)^2\right].$$

- 假设迭代点 x^k 的形式为

$$x^k = \begin{pmatrix} 2\left(1+|\epsilon_k|\right) \\ \epsilon_k \end{pmatrix}, \quad \text{其中}\, \epsilon_k \neq 0.$$

- 可以计算迭代点 x^k 处的梯度：

$$\nabla f\left(x^k\right) = \begin{pmatrix} 2\left(1+|\epsilon_k|\right) \\ 2\left(1+|\epsilon_k|\right) t_k \end{pmatrix} = 2\left(1+|\epsilon_k|\right)\begin{pmatrix} 1 \\ t_k \end{pmatrix},$$

其中 $t_k = \operatorname{sign}\left(\epsilon_k\right)$.

梯度下降法失败的例子

下面我们考虑直接用梯度下降法进行迭代.

- 在负梯度方向$-\nabla f\left(x^k\right)$ 上做精确线搜索，可得

$$x^{k+1}=x^k+\alpha_k\left(-\nabla f\left(x^k\right)\right)=\begin{bmatrix} 2\left(1+\left|\epsilon_k\right|/3\right) \\ -\epsilon_k/3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2\left(1+\left|\epsilon_{k+1}\right|\right) \\ \epsilon_{k+1} \end{bmatrix}$$

  其中 $\epsilon_{k+1}=-\epsilon_k/3\neq 0$. 所以显然有$\epsilon_k\to 0$.
- 给定一个初始点 $x^0=(2+2|\delta|,\delta)^{\mathrm{T}}$，我们有 $x^k\to(2,0)^{\mathrm{T}}$.
- 然而 $(2,0)^{\mathrm{T}}$ 并不是稳定点.
- 这表明对非光滑问题直接使用梯度法可能会收敛到一个非稳定点.

提纲

问题设定

假设$f(x)$ 为凸函数，但不一定可微，考虑如下问题：

$$\min_x \ f(x)$$

- 一阶充要条件：

$$x^* \text{是一个全局极小点} \quad \Leftrightarrow \quad 0 \in \partial f\left(x^*\right)$$

- 因此可以通过计算凸函数的次梯度集合中包含0 的点来求解其对应的全局极小点．

次梯度算法结构

为了极小化一个不可微的凸函数f，可类似梯度法构造如下次梯度算法的迭代格式：

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k g^k, \quad g^k \in \partial f(x^k),$$

其中$\alpha_k > 0$为步长．它通常有如下四种选择：

1. 固定步长$\alpha_k = \alpha$；
2. 固定$\|x^{k+1} - x^k\|$，即$\alpha_k \|g^k\|$为常数；
3. 消失步长$\alpha_k \to 0$且$\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k = +\infty$；
4. 选取α_k使其满足某种线搜索准则．

下面我们讨论在不同步长取法下次梯度算法的收敛性质．

提纲

假设条件

(1) f为凸函数；

(2) f至少存在一个有限的极小值点x^*，且$f(x^*) > -\infty$；

(3) f为利普希茨连续的，即

$$|f(x) - f(y)| \leq G\|x - y\|, \quad \forall\, x, y \in \mathbb{R}^n,$$

其中$G > 0$为利普希茨常数.

我们下面证明这等价于$f(x)$的次梯度是有界的，即

$$\|g\| \leq G, \quad \forall\, g \in \partial f(x), x \in \mathbb{R}^n.$$

证明：

- 充分性：假设$\|g\|_2 \le G, \forall\, g \in \partial f(x)$；取$g_y \in \partial f(y), g_x \in \partial f(x)$:

$$g_x^{\mathrm{T}}(x-y) \ge f(x) - f(y) \ge g_y^{\mathrm{T}}(x-y)$$

再由柯西不等式

$$G\|x-y\|_2 \ge f(x) - f(y) \ge -G\|x-y\|_2$$

- 必要性：反设存在x和$g \in \partial f(x)$，使得$\|g\|_2 > G$；取$y = x + \frac{g}{\|g\|_2}$

$$\begin{aligned} f(y) &\ge f(x) + g^{\mathrm{T}}(y-x) \\ &= f(x) + \|g\|_2 \\ &> f(x) + G \end{aligned}$$

这与$f(x)$是G-利普希茨连续的矛盾.

收敛性分析

- 次梯度方法不是一个下降方法，即无法保证$f(x^{k+1}) < f(x^k)$；
- 收敛性分析的关键是分析$f(x)$历史迭代的最优点所满足的性质.
- 设x^*是$f(x)$的一个全局极小值点，$f^* = f(x^*)$，根据迭代格式,

$$
\begin{aligned}
\left\|x^{i+1} - x^*\right\|^2 &= \left\|x^i - \alpha_i g^i - x^*\right\|^2 \\
&= \left\|x^i - x^*\right\|^2 - 2\alpha_i \left\langle g^i, x^i - x^* \right\rangle + \alpha_i^2 \left\|g^i\right\|^2 \\
&\leqslant \left\|x^i - x^*\right\|^2 - 2\alpha_i \left(f\left(x^i\right) - f^*\right) + \alpha_i^2 G^2
\end{aligned}
$$

- 结合$i = 0, \cdots, k$时相应的不等式，并定义$\hat{f}^k = \min_{0 \leqslant i \leqslant k} f\left(x^i\right)$：

$$
\begin{aligned}
2\left(\sum_{i=0}^{k} \alpha_i\right)\left(\hat{f}^k - f^*\right) &\leqslant \left\|x^0 - x^*\right\|^2 - \left\|x^{k+1} - x^*\right\|^2 + G^2 \sum_{i=0}^{k} \alpha_i^2 \\
&\leqslant \left\|x^0 - x^*\right\|^2 + G^2 \sum_{i=0}^{k} \alpha_i^2
\end{aligned}
$$

不同步长下的收敛性

(1) 取$\alpha_i = t$为固定步长，则

$$\hat{f}^k - f^* \leq \frac{\|x^0 - x^*\|^2}{2kt} + \frac{G^2 t}{2};$$

- $\hat{f}^k$ 无法保证收敛性
- 当k 足够大时，$\hat{f}^k$ 近似为$G^2 t/2$-次优的

(2) 取α_i使得$\|x^{i+1} - x^i\|$固定，即$\alpha_i \|g^i\| = s$为常数，则

$$\hat{f}^k - f^* \leq \frac{G\|x^0 - x^*\|^2}{2ks} + \frac{Gs}{2};$$

- $\hat{f}^k$ 无法保证收敛性
- 当k 足够大时，$\hat{f}^k$ 近似为$Gs/2$-次优的

(3) 取α_i为消失步长，即$\alpha_i \to 0$且$\sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i = +\infty$，则

$$\hat{f}^k - f^* \le \frac{\|x^0 - x^*\|^2 + G^2 \sum_{i=0}^{k} \alpha_i^2}{2 \sum_{i=0}^{k} \alpha_i};$$

进一步可得$\hat{f}^k$收敛到f^*.

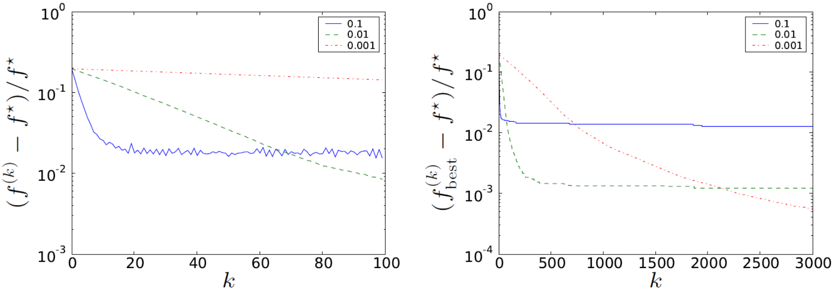
- 和梯度法不同，只有当α_k取消失步长时$\hat{f}^k$才具有收敛性.
- 一个常用的步长取法是$\alpha_k = \frac{1}{k}$.

例：ℓ_1-范数极小化问题

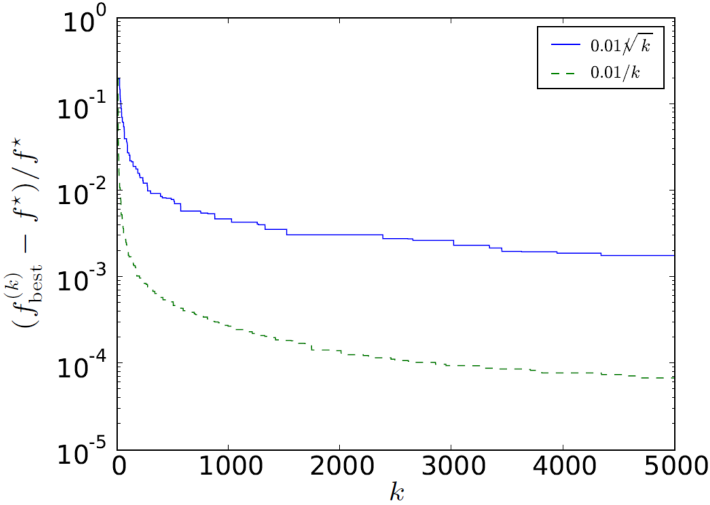
$$\min \quad \|Ax-b\|_1 \quad (A\in\mathbb{R}^{500\times 100},\ b\in\mathbb{R}^{500})$$

次梯度取为$A^{\mathrm{T}}\mathbf{sign}(Ax-b)$

- 第二类步长策略：$t_k = s/\|g^{(k-1)}\|_2$，$s=0.1, 0.01, 0.001$



- 第三类步长策略：$t_k = 0.01/\sqrt{k}, t_k = 0.01/k$



固定迭代步数下的最优步长

- 假设$\|x^0 - x^*\| \leqslant R$，并且总迭代步数$k$是给定的，在固定步长下，

$$\hat{f}^k - f^* \leq \frac{\|x^0 - x^*\|^2}{2kt} + \frac{G^2 t}{2} \leq \frac{R^2}{2kt} + \frac{G^2 t}{2}.$$

- 由平均值不等式知当t满足$\frac{R^2}{2kt} = \frac{G^2 t}{2}$, 即 $t = \frac{R}{G\sqrt{k}}$时，右端达到最小.
- k 步后得到的上界是

$$\hat{f}^k - f^* \leqslant \frac{GR}{\sqrt{k}}$$

- 这表明在$k = O(1/\epsilon^2)$ 步迭代后可以得到$\hat{f}^k - f^* \leq \epsilon$ 的精度
- 类似地可证明第二类步长选取策略下，取$s = \frac{R}{\sqrt{k}}$，可得到估计

$$\hat{f}^k - f^* \leq \frac{GR}{\sqrt{k}}.$$

f^* 已知时的最优步长

- 第13页第一个不等式右端在

$$\alpha_i = \frac{f(x^i) - f^*}{\|g^i\|^2}$$

时取到极小.

- 这等价于

$$\frac{(f(x^i) - f^*)^2}{\|g^i\|^2} \le \|x^i - x^*\|^2 - \|x^{i+1} - x^*\|^2.$$

- 递归地利用上式并结合$\|x^0 - x^*\| \le R$和$\|g^i\| \le G$，可以得到

$$\hat{f}^k - f^* \le \frac{GR}{\sqrt{k}}.$$

提纲

例：LASSO 问题求解

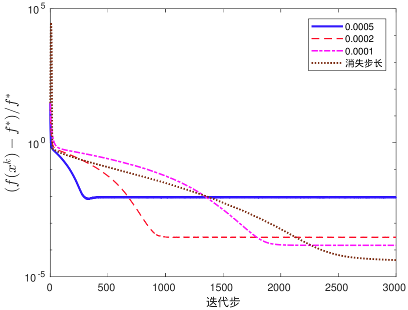
考虑LASSO 问题

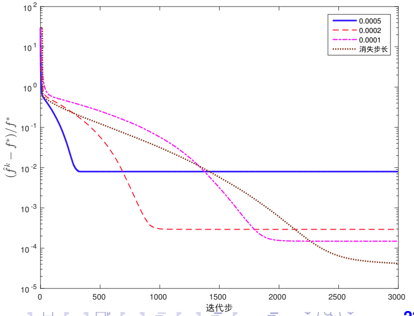
$$\min \quad f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 + \mu\|x\|_1,$$

$f(x)$的一个次梯度为$g = A^\mathrm{T}(Ax - b) + \mu\mathrm{sign}(x)$, 其中$\mathrm{sign}(x)$是关于$x$逐分量的符号函数. 因此的次梯度算法为

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k(A^\mathrm{T}(Ax^k - b) + \mu\mathrm{sign}(x^k)),$$

步长α_k可选为固定步长或消失步长.





例：LASSO 问题求解

对于$\mu = 10^{-2}, 10^{-3}$，采用连续化次梯度算法进行求解．若$\mu_t > \mu$，则取固定步长$\frac{1}{\lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}}A)}$；若$\mu_t = \mu$，则取步长

$$\frac{1}{\lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}}A) \cdot (\max\{k, 100\} - 99)},$$

其中k为迭代步数

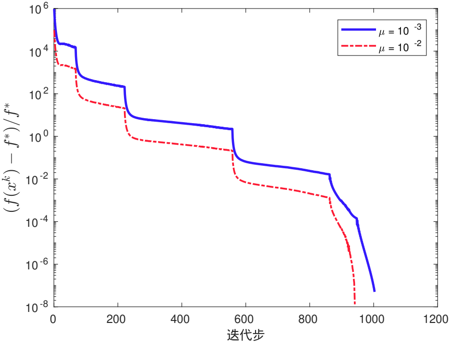


Figure: LASSO 问题在不同正则化参数下的求解结果