

最优化方法 第六讲

Weiwen Wang(王伟文)

暨南大学

2025 年 4 月 22 日

目录

- 1 带约束优化问题的最优性条件
- 2 正交投影
 - 非负象限的正交投影
 - 长方体的正交投影
 - 球体的正交投影
- 3 投影梯度下降法
 - 充分下降引理
 - Gradient Mapping
 - 回溯法
 - 收敛性分析

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

本讲考虑带约束优化问题 (P)

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t. } \mathbf{x} \in C \end{aligned}$$

其中 $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ 为连续可微函数, C 为闭凸集.

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定义 1 (带约束优化问题的驻点)

设 f 为闭凸集 C 上的连续可微函数, 称 $\mathbf{x}^* \in C$ 为优化问题 (P) 的驻点, 若 $\nabla f(\mathbf{x}^*)^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \geq 0$ 对任意 $\mathbf{x} \in C$ 成立.

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定理 2 (最优性必要条件)

若 $\mathbf{x}^* \in C$ 为优化问题 (P) 的最优解, 则 \mathbf{x}^* 为优化问题 (P) 的驻点.

证明.

若 \mathbf{x}^* 不是 P 的驻点, 则存在 $\mathbf{x}' \in C$ 使得

$$\nabla f(\mathbf{x}^*)^T (\mathbf{x}' - \mathbf{x}^*) < 0.$$

即

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{f[\mathbf{x}^* + t(\mathbf{x}' - \mathbf{x}^*)] - f(\mathbf{x}^*)}{t} = \nabla f(\mathbf{x}^*)^T (\mathbf{x}' - \mathbf{x}^*) < 0$$

故存在 $t' \in (0, 1)$ 使得

$$f[\mathbf{x}^* + t(\mathbf{x}' - \mathbf{x}^*)] < f(\mathbf{x}^*).$$

又因为 $\mathbf{x}^* + t(\mathbf{x}' - \mathbf{x}^*) \in C$, 与 \mathbf{x}^* 的最优性矛盾. □

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定理 3

设 f 为闭凸集 C 上的连续可微凸函数, $\mathbf{x}^* \in C$ 为优化问题 (P) 的最优解当且仅当 \mathbf{x}^* 为 (P) 的驻点, 即

$$\nabla f(\mathbf{x}^*)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \geq 0 \quad \forall \mathbf{x} \in C.$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定义 4 (非空闭凸集的正交投影)

给定非空闭凸集 $C \subset \mathbb{R}^d$, 任意一点 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ 到 C 上的正交投影定义为

$$\Pi_C(\mathbf{x}) = \operatorname{argmin}_{\mathbf{z} \in C} \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|^2$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定理 5 (非空闭凸集的正交投影存在性与唯一性)

给定非空闭凸集 $C \subset \mathbb{R}^d$, 对任意一点 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, 其到 C 上的正交投影定义 $\Pi_C(\mathbf{x})$ 存在且唯一.

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

证明.

定义函数 $h(\mathbf{z}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|^2$, $h(\mathbf{z})$ 为 coercive 函数, 故由 Lecture 1 定理 1.0.26 知 $\operatorname{argmin}_{\mathbf{z} \in C} h(\mathbf{z})$ 非空, 即 $\Pi_C(\mathbf{x})$ 存在.

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

证明.

定义函数 $h(\mathbf{z}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|^2$, $h(\mathbf{z})$ 为 coercive 函数, 故由 Lecture 1 定理 1.0.26 知 $\operatorname{argmin}_{\mathbf{z} \in C} h(\mathbf{z})$ 非空, 即 $\Pi_C(\mathbf{x})$ 存在.

下证唯一性, 设 \mathbf{u}, \mathbf{v} 均为 \mathbf{x} 到集合 C 上的正交投影, $h(\mathbf{z})$ 为连续可微凸函数, 故由定理 3, 有

$$2\langle \mathbf{u} - \mathbf{x}, \mathbf{v} - \mathbf{u} \rangle \geq 0$$

$$2\langle \mathbf{v} - \mathbf{x}, \mathbf{u} - \mathbf{v} \rangle \geq 0$$

综上所述得到 $\|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|^2 \leq 0$, 故 $\mathbf{u} = \mathbf{v}$. □

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定理 6

给定非空闭凸集 $C \subset \mathbb{R}^d$, 对任意一点 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, $\mathbf{u} = \Pi_C(\mathbf{x})$ 当且仅当

$$\langle \mathbf{x} - \mathbf{u}, \mathbf{z} - \mathbf{u} \rangle \leq 0$$

对任意 $\mathbf{z} \in C$ 成立.

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定理 7

设集合 C 为闭凸集, 则 $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$,

•

$$\langle \Pi_C(\mathbf{x}) - \Pi_C(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle \geq \|\Pi_C(\mathbf{x}) - \Pi_C(\mathbf{y})\|^2$$

•

$$\|\Pi_C(\mathbf{x}) - \Pi_C(\mathbf{y})\| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$$

证明.

对任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$, $\Pi_C(\mathbf{x}) \in C, \Pi_C(\mathbf{y}) \in C$, 故由定理 6,

$$\langle \mathbf{x} - \Pi_C(\mathbf{x}), \Pi_C(\mathbf{y}) - \Pi_C(\mathbf{x}) \rangle \leq 0$$

$$\langle \mathbf{y} - \Pi_C(\mathbf{y}), \Pi_C(\mathbf{x}) - \Pi_C(\mathbf{y}) \rangle \leq 0$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

证明.

对任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$, $\Pi_C(\mathbf{x}) \in C, \Pi_C(\mathbf{y}) \in C$, 故由定理 6,

$$\langle \mathbf{x} - \Pi_C(\mathbf{x}), \Pi_C(\mathbf{y}) - \Pi_C(\mathbf{x}) \rangle \leq 0$$

$$\langle \mathbf{y} - \Pi_C(\mathbf{y}), \Pi_C(\mathbf{x}) - \Pi_C(\mathbf{y}) \rangle \leq 0$$

上述两项不等式相加, 整理得到

$$\langle \mathbf{x} - \mathbf{y} + (\Pi_C(\mathbf{y}) - \Pi_C(\mathbf{x})), \Pi_C(\mathbf{y}) - \Pi_C(\mathbf{x}) \rangle \leq 0.$$

因此

$$\|\Pi_C(\mathbf{x}) - \Pi_C(\mathbf{y})\|^2 \leq \langle \mathbf{x} - \mathbf{y}, \Pi_C(\mathbf{x}) - \Pi_C(\mathbf{y}) \rangle.$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

证明.

对任意 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$, $\Pi_C(\mathbf{x}) \in C, \Pi_C(\mathbf{y}) \in C$, 故由定理 6,

$$\langle \mathbf{x} - \Pi_C(\mathbf{x}), \Pi_C(\mathbf{y}) - \Pi_C(\mathbf{x}) \rangle \leq 0$$

$$\langle \mathbf{y} - \Pi_C(\mathbf{y}), \Pi_C(\mathbf{x}) - \Pi_C(\mathbf{y}) \rangle \leq 0$$

上述两项不等式相加, 整理得到

$$\langle \mathbf{x} - \mathbf{y} + (\Pi_C(\mathbf{y}) - \Pi_C(\mathbf{x})), \Pi_C(\mathbf{y}) - \Pi_C(\mathbf{x}) \rangle \leq 0.$$

因此

$$\|\Pi_C(\mathbf{x}) - \Pi_C(\mathbf{y})\|^2 \leq \langle \mathbf{x} - \mathbf{y}, \Pi_C(\mathbf{x}) - \Pi_C(\mathbf{y}) \rangle.$$

由 Cauchy-Schwartz 不等式, 即有

$$\|\Pi_C(\mathbf{x}) - \Pi_C(\mathbf{y})\| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|.$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

设 $C = \mathbb{R}_+^d$, 计算任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ 到 C 的投影即求解优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i=1}^d (z_i - x_i)^2 \\ \text{s.t.} \quad & z_1 \geq 0, z_2 \geq 0, \dots, z_d \geq 0. \end{aligned}$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

设 $C = \mathbb{R}_+^d$, 计算任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ 到 C 的投影即求解优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i=1}^d (z_i - x_i)^2 \\ \text{s.t.} \quad & z_1 \geq 0, z_2 \geq 0, \dots, z_d \geq 0. \end{aligned}$$

因为目标函数求和项可分离, $\Pi_C(\mathbf{x})$ 的每一个坐标分量可单独求解

$$\min_{z_i} \{(z_i - x_i)^2 : z_i \geq 0\}$$

得到, 其最优解为 $z_i^* = \max(x_i, 0) \triangleq [x_i]_+$.

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

因此

$$\Pi_{\mathbb{R}_+^d}(\mathbf{x}) = ([x_1]_+, [x_2]_+, \dots, [x_d]_+)^T$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

设有长方体

$$B = \{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^d : l_i \leq z_i \leq u_i\}$$

类似非负象限投影, 对任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ 有

$$[\Pi_B(\mathbf{x})]_i = \begin{cases} u_i, & x_i > u_i \\ x_i, & l_i \leq x_i \leq u_i \\ l_i, & x_i < l_i \end{cases}$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

设 $C \triangleq \{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^d : \|\mathbf{z}\| \leq r\}$, 计算任意 $\mathbf{x} \in \bar{C}$ 的投影 $\Pi_C(\mathbf{x})$ 即求解优化问题

$$\min_{\mathbf{z}} \{\|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|^2 : \|\mathbf{z}\| \leq r\}$$

等价于

$$\min_{\mathbf{z}} \{\|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|^2 : \|\mathbf{z}\| = r\}$$

展开为

$$\min_{\mathbf{z}} \{r^2 - 2\langle \mathbf{z}, \mathbf{x} \rangle + \|\mathbf{x}\|^2 : \|\mathbf{z}\| = r\}$$

又因为 $\langle \mathbf{z}, \mathbf{x} \rangle \leq \|\mathbf{z}\| \|\mathbf{x}\| = r \|\mathbf{x}\|$, 当 $\mathbf{z} = \frac{r \|\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}$ 时等号成立.

$$\Pi_C(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{x}, & \mathbf{x} \in C \\ \frac{r\|\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}, & \mathbf{x} \notin C \end{cases}$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定理 8

设 $\eta > 0$, \mathbf{x}^* 为优化问题 (P) 的驻点当且仅当

$$\mathbf{x}^* = \Pi_C(\mathbf{x}^* - \eta \nabla f(\mathbf{x}^*))$$

证明.

(\Rightarrow) 简记 $\mathbf{x}^+ = \mathbf{x}^* - \eta \nabla f(\mathbf{x}^*)$, 由定理 6,

$$\langle \mathbf{x}^* - \eta \nabla f(\mathbf{x}^*) - \Pi_C(\mathbf{x}^+), \mathbf{z} - \Pi_C(\mathbf{x}^+) \rangle \leq 0 \quad \forall \mathbf{z} \in C$$

取 $\mathbf{z} = \mathbf{x}^*$, 上式可整理为

$$\|\mathbf{x}^* - \Pi_C(\mathbf{x}^+)\|^2 - \langle \eta \nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{x}^* - \Pi_C(\mathbf{x}^+) \rangle \leq 0.$$

又因为 \mathbf{x}^* 为优化问题 (P) 的驻点, 故

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{x}^* - \Pi_C(\mathbf{x}^+) \rangle \leq 0,$$

即

$$\|\mathbf{x}^* - \Pi_C(\mathbf{x}^+)\|^2 \leq 0 \implies \mathbf{x}^* = \Pi_C(\mathbf{x}^+).$$

□

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

证明.

(\Leftarrow) 因为 $\mathbf{x}^* = \Pi_C(\mathbf{x}^* - \eta \nabla f(\mathbf{x}^*))$, 由定理 6,

$$\langle \mathbf{x}^* - \eta \nabla f(\mathbf{x}^*) - \mathbf{x}^*, \mathbf{z} - \mathbf{x}^* \rangle \leq 0 \quad \forall \mathbf{z} \in C.$$

即

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}^*), \mathbf{z} - \mathbf{x}^* \rangle \geq 0 \quad \forall \mathbf{z} \in C.$$

故 \mathbf{x}^* 为优化问题 (P) 的驻点. □

迭代格式

- 线搜索确定步长 η_k (回溯法或常数步长)
- $\mathbf{x}_{k+1} = \Pi_C(\mathbf{x}_k - \eta_k \nabla f(\mathbf{x}_k))$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定理 9

若 f 为 L -smooth, 则对任意 $\mathbf{x} \in C$ 及 $\eta \in (0, \frac{2}{L})$, 有不等式

$$f(\mathbf{x}) - f(\Pi_C(\mathbf{x} - \eta \nabla f(\mathbf{x}))) \geq \eta \left(1 - \frac{L\eta}{2}\right) \left\| \frac{1}{\eta}(\mathbf{x} - \Pi_C(\mathbf{x} - \eta \nabla f(\mathbf{x}))) \right\|^2$$

成立.

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

证明.

简记 $\mathbf{x}^+ = \Pi_C(\mathbf{x} - \eta \nabla f(\mathbf{x}))$, 由 L -smooth 性质

$$f(\mathbf{x}^+) \leq f(\mathbf{x}) + \langle \nabla f(\mathbf{x}), \mathbf{x}^+ - \mathbf{x} \rangle + \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^+\|^2.$$

由定理 6

$$\langle \mathbf{x} - \eta \nabla f(\mathbf{x}) - \mathbf{x}^+, \mathbf{x} - \mathbf{x}^+ \rangle \leq 0.$$

整理得到

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}), \mathbf{x} - \mathbf{x}^+ \rangle \geq \frac{1}{\eta} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^+\|^2$$

□

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

续.

整理得到

$$\langle \nabla f(\mathbf{x}), \mathbf{x} - \mathbf{x}^+ \rangle \geq \frac{1}{\eta} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^+\|^2$$

因此

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^+) &\geq \langle \nabla f(\mathbf{x}), \mathbf{x} - \mathbf{x}^+ \rangle - \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^+\|^2 \\ &\geq \eta \left\| \frac{1}{\eta} (\mathbf{x} - \mathbf{x}^+) \right\|^2 - \frac{L\eta^2}{2} \left\| \frac{1}{\eta} (\mathbf{x} - \mathbf{x}^+) \right\|^2 \\ &\geq \eta \left(1 - \frac{L\eta}{2} \right) \left\| \frac{1}{\eta} (\mathbf{x} - \mathbf{x}^+) \right\|^2 \end{aligned}$$

□

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定义 10 (Gradient Mapping)

定义 Gradient Mapping 为

$$G_{\eta}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\eta} \left[\mathbf{x} - \Pi_C(\mathbf{x} - \eta \nabla f(\mathbf{x})) \right]$$

- 若 $\Pi_C(\mathbf{x} - \eta \nabla f(\mathbf{x})) = \mathbf{x} - \eta \nabla f(\mathbf{x})$, $G_{\eta}(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x})$.
- 定理 8 表明, 若 $G_{\eta}(\mathbf{x}) = 0$, 则 \mathbf{x} 为优化问题 (P) 的最优解.

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

引理 11

设 $\eta_1 \leq \eta_2$, 则对任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$

$$\|G_{\eta_1}(\mathbf{x})\| \geq \|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|,$$

且

$$\eta_1 \|G_{\eta_1}(\mathbf{x})\| \leq \eta_2 \|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|.$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

证明.

简记 $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \eta_1 \nabla f(\mathbf{x})$, $\mathbf{v} = \mathbf{x} - \eta_2 \nabla f(\mathbf{x})$ 由定理 6

$$\langle \mathbf{u} - \Pi_C(\mathbf{u}), \Pi_C(\mathbf{u}) - \Pi_C(\mathbf{v}) \rangle \geq 0$$

即

$$\langle \eta_1 G_{\eta_1}(\mathbf{x}) - \eta_1 \nabla f(\mathbf{x}), \eta_1 G_{\eta_1}(\mathbf{x}) - \eta_2 G_{\eta_2}(\mathbf{x}) \rangle \geq 0. \quad (\circ)$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

证明.

简记 $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \eta_1 \nabla f(\mathbf{x})$, $\mathbf{v} = \mathbf{x} - \eta_2 \nabla f(\mathbf{x})$ 由定理 6

$$\langle \mathbf{u} - \Pi_C(\mathbf{u}), \Pi_C(\mathbf{u}) - \Pi_C(\mathbf{v}) \rangle \geq 0$$

即

$$\langle \eta_1 G_{\eta_1}(\mathbf{x}) - \eta_1 \nabla f(\mathbf{x}), \eta_1 G_{\eta_1}(\mathbf{x}) - \eta_2 G_{\eta_2}(\mathbf{x}) \rangle \geq 0. \quad (\circ)$$

同理,

$$\langle \mathbf{v} - \Pi_C(\mathbf{v}), \Pi_C(\mathbf{v}) - \Pi_C(\mathbf{u}) \rangle \geq 0$$

$$\langle \eta_2 G_{\eta_2}(\mathbf{x}) - \eta_2 \nabla f(\mathbf{x}), \eta_2 G_{\eta_2}(\mathbf{x}) - \eta_1 G_{\eta_1}(\mathbf{x}) \rangle \geq 0. \quad (\square)$$



带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

续.

$[\eta_2 \cdot (\circ) + \eta_1 \cdot (\square)] / (\eta_1 \eta_2)$ 得到

$$\langle G_{\eta_1}(\mathbf{x}) - G_{\eta_2}(\mathbf{x}), \eta_1 G_{\eta_1}(\mathbf{x}) - \eta_2 G_{\eta_2}(\mathbf{x}) \rangle \geq 0$$

将内积展开

$$\eta_1 \|G_{\eta_1}(\mathbf{x})\|^2 + \eta_2 \|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|^2 \leq (\eta_1 + \eta_2) G_{\eta_1}(\mathbf{x})^T G_{\eta_2}(\mathbf{x})$$

应用 Cauchy-Schwartz 不等式

$$\eta_1 \|G_{\eta_1}(\mathbf{x})\|^2 + \eta_2 \|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|^2 \leq (\eta_1 + \eta_2) \|G_{\eta_1}(\mathbf{x})\| \|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|$$

□

续.

若 $G_{\eta_2}(\mathbf{x}) = 0$, 引理的结论显然成立, 考虑 $G_{\eta_2}(\mathbf{x}) \neq 0$. 不等式

$$\eta_1 \|G_{\eta_1}(\mathbf{x})\|^2 + \eta_2 \|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|^2 \leq (\eta_1 + \eta_2) \|G_{\eta_1}(\mathbf{x})\| \|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|$$

左右两端同时除去 $\|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|^2$, 整理得到

$$\eta_1 \frac{\|G_{\eta_1}(\mathbf{x})\|^2}{\|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|^2} - (\eta_1 + \eta_2) \frac{\|G_{\eta_1}(\mathbf{x})\|}{\|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|} + \eta_2 \leq 0.$$

记 $t = \frac{\|G_{\eta_1}(\mathbf{x})\|}{\|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|}$, 有二次不等式

$$\eta_1 t^2 - (\eta_1 + \eta_2)t + \eta_2 \leq 0,$$

解得 $1 \leq t \leq \frac{\eta_2}{\eta_1}$, 即 $1 \leq \frac{\|G_{\eta_1}(\mathbf{x})\|}{\|G_{\eta_2}(\mathbf{x})\|} \leq \frac{\eta_2}{\eta_1}$. □

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

回溯法

给定参数 (s, α, β) , 其中 $s > 0$, $\alpha \in (0, 1)$, $\beta \in (0, 1)$.

- η_k 初始化为 s .
- 若

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\Pi_C(\mathbf{x}_k - \eta_k \nabla f(\mathbf{x}_k))) < \alpha \eta_k \|G_{\eta_k}(\mathbf{x}_k)\|^2,$$

取 $\eta_k = \beta \eta_k$.

- 直到 η_k 首次 满足

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\Pi_C(\mathbf{x}_k - \eta_k \nabla f(\mathbf{x}_k))) \geq \alpha \eta_k \|G_{\eta_k}(\mathbf{x}_k)\|^2.$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

引理 12

设 f 为 L -smooth, 在投影梯度下降法中, 以 (s, α, β) 参数的回溯法能在有限步内结束, 且得到的步长 η_k 满足

$$\eta_k \geq \min \left\{ s, \frac{2(1-\alpha)}{\beta} \right\}.$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

证明.

由充分下降引理, $\forall \eta \in (0, \frac{2}{L})$

$$f(\mathbf{x}) - f(\Pi_C(\mathbf{x} - \eta \nabla f(\mathbf{x}))) \geq \eta \left(1 - \frac{L\eta}{2}\right) \|G_\eta(\mathbf{x})\|^2$$

若

$$\eta \left(1 - \frac{L\eta}{2}\right) \|G_\eta(\mathbf{x})\|^2 \geq \alpha \eta \|G_\eta(\mathbf{x})\|^2$$

即 $\eta \leq \frac{2(1-\alpha)}{L}$, 此时回溯法停止. □

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

续.

若 $\eta_k < s$,

$$\frac{\eta_k}{\beta} \left(1 - \frac{L\eta_k}{2\beta} \right) \leq f(\mathbf{x}_k) - f \left(\Pi_C \left(\mathbf{x}_k - \frac{\eta_k}{\beta} \nabla f(\mathbf{x}_k) \right) \right) < \alpha \frac{\eta_k}{\beta} \left\| G_{\frac{\eta_k}{\beta}}(\mathbf{x}_k) \right\|^2$$

解得

$$\eta_k > \frac{2(1-\alpha)\beta}{L}.$$

或 $\eta_k = s$.

综上有

$$\eta_k \geq \min \left\{ s, \frac{2(1-\alpha)}{\beta} \right\}$$



带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

引理 13

设 f 为 L -smooth, 在投影梯度下降法中, 使用常数步长 $\eta \in (0, \frac{2}{L})$, 或使用以 (s, α, β) 参数的回溯法确定步长 η_k , 迭代过程中产生的序列 $\{\mathbf{x}_k\}$ 满足

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_{k+1}) \geq M \|G_d(\mathbf{x}_k)\|^2,$$

其中

$$M = \begin{cases} \eta(1 - \frac{L\eta}{2}), & \eta \in (0, \frac{2}{L}) \\ \alpha \min \left\{ s, \frac{2(1-\alpha)}{\beta} \right\}, & \text{回溯法} \end{cases}$$

$$d = \begin{cases} \eta, & \eta \in (0, \frac{2}{L}) \\ s, & \text{回溯法} \end{cases}$$

定理 14

设 f 为 L -smooth, f 在非空闭凸集上 C 有最小值点 \mathbf{x}^* . 在投影梯度下降法中, 使用常数步长 $\eta \in (0, \frac{2}{L})$, 或使用以 (s, α, β) 参数的回溯法确定步长 η_k , $\{\mathbf{x}_k\}$ 为投影梯度法产生的序列, 则有

$$\min_{k \in \{0, 1, \dots, K\}} \|G_d(\mathbf{x}_k)\| \leq \sqrt{\frac{f(\mathbf{x}_0) - f(\mathbf{x}^*)}{M(K+1)}}$$

其中

$$M = \begin{cases} \eta(1 - \frac{L\eta}{2}), & \eta \in (0, \frac{2}{L}) \\ \alpha \min \left\{ s, \frac{2(1-\alpha)}{\beta} \right\}, & \text{回溯法} \end{cases}$$

$$d = \begin{cases} \eta, & \eta \in (0, \frac{2}{L}) \\ s, & \text{回溯法} \end{cases}$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定理 15

设 f 为 L -smooth 且为凸函数, f 在非空闭凸集上 C 有最小值点 \mathbf{x}^* . 在投影梯度下降法中, 使用常数步长 $\eta \in (0, \frac{1}{L}]$, $\{\mathbf{x}_k\}$ 为产生的序列, 则

$$(1) \quad 2\eta(f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}^*)) \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 - \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2, \quad \forall k \geq 0.$$

$$(2) \quad f(\mathbf{x}_K) - f(\mathbf{x}^*) \leq \frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2}{2K\eta}, \quad \forall K \geq 0.$$

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

证明.

1. 因为 $\mathbf{x}_{k+1} = \Pi_C(\mathbf{x}_k - \eta \nabla f(\mathbf{x}_k))$, 由定理 6

$$\langle \mathbf{x}_k - \eta \nabla f(\mathbf{x}_k) - \mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{k+1} \rangle \leq 0$$

即

$$\langle \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{k+1} \rangle - \langle \eta \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{k+1} \rangle \leq 0$$

$$\langle \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{k+1} \rangle - \langle \eta \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k + \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1} \rangle \leq 0$$

整理得到

$$\langle \eta \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}_k - \mathbf{x}^* \rangle \leq \langle \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^* \rangle + \langle \eta \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1} \rangle$$

□

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

续.

由 L -smooth 有

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq f(\mathbf{x}_k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k \rangle + \frac{L}{2} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\|^2$$

故

$$\langle \eta \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1} \rangle \leq \eta (f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_{k+1})) + \frac{L\eta}{2} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\|^2$$

因为 f 为凸函数

$$f(\mathbf{x}^*) \geq f(\mathbf{x}_k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k \rangle$$

即

$$\langle \eta \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1} \rangle \geq \eta (f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*))$$

□

续.

故不等式

$$\langle \eta \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}_k - \mathbf{x}^* \rangle \leq \langle \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^* \rangle + \langle \eta \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k+1} \rangle$$

可约化为

$$\begin{aligned} \eta(f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*)) &\leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{1}{2} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 - \frac{1}{2} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\|^2 \\ &\quad + \eta(f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_{k+1})) + \frac{L\eta}{2} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\|^2 \end{aligned}$$

整理得到

$$\begin{aligned} 2\eta(f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)) &\leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 - \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 - (1 - L\eta) \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\|^2 \\ &\leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 - \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|^2 \end{aligned}$$

□

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

续.

2. 由结论 (1) K 项求和, 及 $\{f(\mathbf{x}_k)\}$ 单调非增得到. □

定理 16

在定理 15 的条件下, 投影梯度法产生的序列 $\{\mathbf{x}_k\}$ 收敛到优化问题 (P) 的最优解.

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析

定理 16

在定理 15 的条件下, 投影梯度法产生的序列 $\{\mathbf{x}_k\}$ 收敛到优化问题 (P) 的最优解.

证明.

由定理 15 结论 (1) 及 $f(\mathbf{x}_{k+1}) \geq f(\mathbf{x}^*)$ 有

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\| \quad \forall k \geq 0.$$

即序列 $\{\mathbf{x}_k\}$ 满足 Fejér 单调性. 因为

$$\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\| \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\| \quad \forall k \geq 1,$$

序列 $\{\mathbf{x}_k\}$ 有界, 故存在收敛子列 $\{\mathbf{x}_{k_j}\}_{j=0}^{\infty}$ □

续.

设收敛子列 $\{\mathbf{x}_{k_j}\}_{j=0}^{\infty}$ 的极限为 $\hat{\mathbf{x}}$, 因为 f 为连续函数,

$$\lim_{k_j \rightarrow \infty} f(\mathbf{x}_{k_j}) = f(\hat{\mathbf{x}}) = f(\mathbf{x}^*)$$

这表明 $\hat{\mathbf{x}}$ 为优化问题 (P) 的最优解.

再次利用 Fejér 单调性.

$$\|\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}\| \leq \|\mathbf{x}_{k_j} - \hat{\mathbf{x}}\| \quad \forall k \geq k_j$$

令 $k_j \rightarrow \infty$, 因而 $k \rightarrow \infty$, 故

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}\| = 0 \implies \mathbf{x}_k \rightarrow \hat{\mathbf{x}} (k \rightarrow \infty).$$

□

带约束优化问题的最优性条件

正交投影

非负象限的正交投影

长方体的正交投影

球体的正交投影

投影梯度下降法

充分下降引理

Gradient Mapping

回溯法

收敛性分析