arXiv:2302.00316v2 [math.OC] 2 Jan 2024

非线性约束下的加速一阶优化

Michael Muehlebach[1*]和 Michael I. Jordan[2]

[1*]马克斯·普朗克智能系统研究所学习与动力系统，Max-Planck-Ring 4，图宾根，72076，巴登-符腾堡州，德国。[2]加州大学伯克利分校电气工程与计算机科学系，387 Soda Hall，伯克利，94720，加利福尼亚州，美国。

*通讯作者。电子邮箱：michaelm@tuebingen.mpg.de；贡献作者：jordan@berkeley.edu；

摘要

我们利用约束优化一阶算法与非光滑动力系统之间的类比，设计了一类新的约束优化加速一阶算法。与 Frank-Wolfe 或投影梯度不同，这些算法在每次迭代时无需在整个可行集上进行优化。我们证明了这些算法即使在非凸情形下也会收敛到驻点，并推导出其在凸情形下连续时间和离散时间的加速收敛率。这些算法的一个重要特性是，约束以速度而非位置来表示，这自然会带来对可行集的稀疏、局部且凸的近似（即使可行集是非凸的）。因此，其复杂度随决策变量和约束数量的增长往往较为温和，这使得这些算法适用于机器学习应用。我们将这些算法应用于压缩感知和稀疏回归问题，展示了它们能够高效处理非凸 ℓ^p 约束（$p < 1$），同时在 $p = 1$ 上达到最先进的性能。

关键词：约束优化、非线性规划、基于梯度的方法、机器学习

1 引言

我们的工作致力于开发用于求解以下形式的非线性约束优化问题的一阶算法：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x), \quad \text{s.t.} \quad g(x) \geq 0, \tag{1}$$

其中，函数 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 定义目标函数，函数 $g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{n_g}$定义约束，且 n 和 n_g 为正整数。我们所设想的应用包括统计学、机器学习和控制理论中的问题，其中 n 和 n_g 通常为 10^6 量级。

我们提出了一类新的加速一阶算法，用于计算（1）的驻点。这些算法具有四个显著特征：**(i)** 它们依赖于可行集的局部线性近似，从而避免在每次迭代时都对整个可行集进行投影或优化；**(ii)** 它们在概念上易于理解，也易于实现；**(iii)** 对于凸问题，其迭代复杂度与维度无关，[1] 以及 **(iv)** 在许多重要情形下（甚至对于非凸问题），其每次迭代的复杂度大致随决策变量数量和约束数量线性增长。

我们工作中的一个重要方面，是将位置约束提升到速度层面，这自然会得到可行集的局部线性近似。这些近似有两种变体，分别在每次迭代的复杂度与所得到的收敛保证之间提供不同的权衡。更准确地说，在我们的算法中，前向增量 $(x_{k+1} - x_k)/T$（其中 $T > 0$ 为步长）将受到集合

$$V_\alpha(x) := \{v \in \mathbb{R}^n \mid \nabla g_i(x)^\mathsf{T} v + \alpha g_i(x) \geq 0, \ \forall i \in I\}, \tag{2}$$

其中，I要么采用以下形式：$I = [n_g] := \{1, 2, \ldots, n_g\}$，要么采用以下形式：$I_x := \{ i \in \mathbb{Z} \mid g_i(x) \leq 0\}$。前一种形式在每次迭代中都包含所有约束，而后一种形式仅包含当前迭代点 x处被违反的约束。我们的收敛结果涵盖连续时间和离散时间模型，概述如下（具体表述请参见相应定理）：

- 如果 f 光滑且强凸、 g 光滑且凹，并且已知 (1) 的最优乘子 λ^*的一个上界，我们的离散时间算法可达到加速线性收敛率（迭代复杂度为 $\mathcal{O}(\sqrt{\kappa_l}\log(1/\epsilon))$）。条件数 κ_l 指拉格朗日函数 $f(x) - \lambda^{*\mathsf{T}} g(x)$，而 ϵ 是容差。
- 如果未知 λ^* 的上界，相同的离散时间算法可达到加速次线性收敛率（迭代复杂度为 $\mathcal{O}(1/\sqrt{\epsilon})$）。
- 我们还针对非凸情形开发了离散时间算法；当 f 和 g 光滑时，该算法可确保收敛到驻点。

[1] 这与内点法形成对比，例如，内点法需要进行 $\mathcal{O}(\sqrt{n_g})$ 次牛顿迭代，才能将目标函数值降低一个常数倍。

- 当 f 光滑且强凸、 g 光滑且凹时，我们的连续时间算法可实现加速线性收敛率（迭代复杂度为 $\mathcal{O}(\overline{\sqrt{\kappa}}\log(1/\epsilon))$），其中 κ 表示 f的条件数。
- 如果 f 不是强凸的，我们的连续时间算法仍可达到加速次线性收敛率（迭代复杂度 $\mathcal{O}(1/\sqrt{\epsilon})$）。
- 如果 f 不是凸的，且 g 不是凹的，我们证明了我们的连续时间算法收敛到平稳点集合。

在 g 为线性的特殊情形下，条件数 κ_l 可化简为 κ，我们的算法也能达到加速投影梯度下降的收敛速率，同时无需在整个可行集上进行投影或优化。

我们的研究借鉴了近期在梯度优化中运用连续时间动力系统工具分析离散时间算法的进展 [1–9]。这方面的大量研究旨在理解加速一阶优化方法（例如 Nesterov's algorithm），揭示微分几何与辛几何、动力系统及力学之间的联系。对于没有约束的情形，这些类比导出的是光滑动力系统；而本文则阐述了约束优化与非光滑动力系统之间的类比。事实上，与现有文献联系最为紧密的概念之一，是非光滑力学中的莫罗时间步进 [10]。莫罗时间步进的一个重要特点，也是我们工作的核心，在于它同等对待光滑运动与非光滑运动；这一点是通过对某种微分包含进行离散化实现的 [例如，参见 11, 12]。

我们的方法也可以从投影梯度方法的角度来理解，事实上，它与 Wang 和 Liu [13] 以及 Birgin 等人 [14]提出的非精确投影梯度方法有一定相似之处。尽管投影梯度方法已成功应用于各种机器学习问题 [，例如 15, 16]，，近年来 Frank-Wolfe 算法也受到了广泛关注 [17]。Frank-Wolfe 算法的吸引力进一步体现在，它为许多受约束情形下的一阶机器学习算法提供了一个统一框架，其中包括支持向量机、概率密度混合的在线估计以及提升 [18]。近期的研究将 Frank-Wolfe 算法推广到了随机情形 [19, 20]，或改善了其相对较慢的收敛率 [21, 22]。

在某些情况下，使用镜像下降可以非常高效地处理约束，[23, 第 3], 章中引入了一种非欧几里得度量，它能使梯度下降适应特定类型的目标函数或当前所涉及的特定类型的约束 [24]。尽管镜像下降基于向可行集进行投影，但非欧几里得度量可以改善与具体问题相关的常数。一个重要的例子是在单位单纯形上优化线性函数，这在在线机器学习中有应用 [25]。

与投影梯度、镜像下降和 Frank-Wolfe 算法相比，我们的方法无需在每次迭代时都对整个可行集进行优化，而是依赖于稀疏、局部且凸的近似。本文重点讨论加速梯度下降，并以 Muehlebach 和 Jordan 的近期成果为基础 [26], 该成果

研究了梯度下降。将约束纳入基于动量的算法颇具挑战：为了避免出现不可行迭代点，约束的存在要求动量发生突然且大幅的变化（碰撞）。因此，我们不仅需要刻画光滑运动（约束不存在，或解沿着可行集边界滑动时），还需要刻画非光滑运动（解突然碰到可行集边界时）。

可能受益于我们方法的具体问题包括强化学习和/或最优控制中的规划问题 [例如，参见 27], 非凸矩阵流形上的优化（例如正交矩阵集合 [例如，参见 28]）、计算化学/核磁共振波谱学中出现的距离几何问题 [29], 最优传输问题 [30], ，以及涉及非线性约束的监督学习任务（例如在模仿学习框架中，闭环系统的稳定性要求会产生非线性约束）。我们还将展示如何将我们的方法应用于 ℓ^p正则化反问题，这类问题出现在压缩感知和信号处理中。对于 $p = 1$，我们不仅能够取得最先进的结果，还能无缝处理 $0 < p < 1$这一情形。

本文结构如下：第2 节总结 Muehlebach 和 Jordan 的早期工作 [26], ，该工作涵盖梯度下降，并为第3节讨论基于动量的算法奠定基础。第4节介绍了涵盖离散时间和连续时间模型的多种收敛结果；特别是在非凸情形下，我们证明算法收敛到驻点，并推导出凸情形下的加速收敛率。第5 节介绍数值实验，其中包括非凸稀疏回归和压缩感知问题。最后，第6节对全文作简短讨论。

2 约束梯度流

本工作的核心思想是根据算法的前向增量或速度来表达约束，而不是直接约束迭代点或位置。正如我们很快将看到的，这自然会导出对可行集的局部、稀疏且凸的近似。我们的处理方法建立在 Muehlebach 和 Jordan [26],的工作之上。该工作聚焦于梯度下降和梯度流，而本文则聚焦于加速梯度算法。为简化阐述，我们先简要回顾这项早期工作。本节最后将推导出相应梯度下降算法的非渐近线性收敛率；这一结果在 [26] 中尚未给出。这也将为在第4节推导加速收敛率奠定基础。

我们将优化算法建模为连续时间或离散时间动力系统，其平衡点对应于式 (1) 的驻点。在连续时间下，系统的状态由函数 $x : [0, \infty) \to \mathbb{R}^n$ 表示，并假设该函数绝对连续。当前研究的核心在于一个基本观察：对于所有 $t \geq 0$，约束 $x(t) \in C$ 等价于对于所有 $t \geq 0$， $x(0) \in C$ 时的约束 $\dot{x}(t)^+ \in T_C(x(t))$，其中 $T_C(x(t))$ 表示集合 C 在 $x(t) \in \mathbb{R}^n$ 处的切锥（按 Clarke 的定义），而 $\dot{x}(t)^+$ 表示前向速度： $\dot{x}(t)^+ := \lim_{\mathrm{d}t \downarrow 0}(x(t + \mathrm{d}t) - x(t))/\mathrm{d}t$。切锥$T_C(x)$ 定义为所有满足 $(x_k - x)/t_k \to v$ 的向量 v 的集合，其中涉及两个序列

$x_k \in C$ 和 $t_k \geq 0$，且满足 $x_k \to x, t_k \to 0$。如果满足约束资格条件（例如 Mangasarian-Fromovitz 或 Abadie约束资格条件），则切锥可表示为

$$T_C(x) = \{v \in \mathbb{R}^n \mid \nabla g_i(x)^\mathsf{T} v \geq 0, \quad \forall i \in I_x\},$$

其中，$I_x = \{i \in \mathbb{Z} \mid g_i(x) \leq 0\}$ 表示在 x 处活跃不等式约束的集合。

因此我们得出结论，约束 $x(t) \in C$对位置x施加约束，这等价于对前向速度施加约束 $\dot{x}^+$。我们注意到，速度$\dot{x}$ 允许不连续，并且不必在每个 $t \geq 0$处都存在。[2] 例如，如果轨迹 x 到达可行集的边界，为确保 x 仍处于 C中，可能需要使速度瞬间跳变。

然而，在离散时间下，位置约束与速度约束之间的这种等价关系不再成立，因为 $T_C(x)$ 只是可行集的一阶近似。因此，实施 $(x_{k+1} - x_k)/T \in T_C(x_k)$ 可能导致不可行迭代点。因此，Muehlebach 和 Jordan [26] 建议引入速度约束$V_\alpha(x)$，见含有 2 的式子，其中 $I = I_x$，该约束包含恢复系数 $\alpha > 0$。以下说明阐释了式 (2):

i) 对于 $x \in C$，集合 $V_\alpha(x)$ 化简为切锥 $T_C(x)$（假设满足约束资格条件）。ii) 对于固定的 $x \in \mathbb{R}^n$， $V_\alpha(x)$ 是一个仅涉及活跃约束 I_x 的凸多面体集。因此，集合 $V_\alpha(x)$ 相当于对可行集 C 的稀疏线性近似，即使 C 是非凸的。

iii) 在连续时间下，对于所有 $t \geq 0$，约束 $\dot{x}(t)^+ \in V_\alpha(x(t))$ 蕴含

$$g_i(x(t)) \geq \min\{g_i(x(0))e^{-\alpha t}, 0\}, \tag{3}$$

对于所有 $t \geq 0$ 和所有 $i \in \{1, \ldots, n_\mathrm{g}\}$，这一点可通过 Gr¨onwall 不等式验证。这意味着潜在的约束违反以速率 α 减少。

Muehlebach 和 Jordan [26] 研究的连续时间梯度流动力学源自以下方程:

$$\dot{x}(t)^+ + \nabla f(x(t)) = R(t), \quad -R(t) \in N_{V_\alpha(x(t))}(\dot{x}(t)^+), \tag{4}$$

对所有 $t \geq 0$，其中 $N_{V_\alpha}(x(t))(\dot{x}(t)^+)$ 表示集合 $V_\alpha(x(t))$ 在$\dot{x}(t)^+$处的法锥。因此，变量 $R(t)$ 可视为施加约束 $\dot{x}(t)^+ \in V_\alpha(x(t))$ 的约束力。此外，对于每个固定的 $t \geq 0$，我们可以消去式 (4) 中的 $R(t)$，并将所得表达式解释为关于$\dot{x}(t)^+$的驻定条件，这意味着式 (4) 等价于

$$\dot{x}(t)^+ := \operatorname*{argmin}_{v \in V_\alpha(x(t))} \frac{1}{2}|v + \nabla f(x(t))|^2. \tag{5}$$

[2]我们假设 $\dot{x}$ 是局部有界变差的，这意味着在任何紧区间上， $\dot{x}$ 都只有可数个不连续点，且这些点处存在左右极限。

只要 $V_\alpha(x(t))$ 非空，就能保证对每个$t \geq 0$， $\dot{x}(t)^+$ 的唯一性。这也提供了如下自然解释：选择前向速度 $\dot{x}(t)^+$，使其尽可能贴近无约束梯度流方程 $\dot{x}(t)^+ + \nabla f(x(t)) = 0$，同时满足速度约束 $\dot{x}(t)^+ \in V_\alpha(x(t))$。

注*1*. $V_\alpha(x)$的非空性：如果 C 是凸的，则对所有 $x \in \mathbb{R}^n$， $V_\alpha(x)$都保证非空。如果 C 是非凸的，则若对所有 $x \in C$都满足 *Mangasarian-Fromovitz* 约束资格条件，可保证对 C 的某个邻域内所有 x， $V_\alpha(x)$均非空。我们指出，*Mangasarian-Fromovitz* 约束资格条件在以下意义下是一般成立的：只要 g 是半代数的（这些情形包括优化中使用的所有常见函数），就存在 $\epsilon_0 \in \mathbb{R}^m$、$\epsilon_0 > 0$，使得集合 $C_\epsilon := \{x \in \mathbb{R}^n \mid g(x) \geq -\epsilon\}$ 对所有 $x \in C_\epsilon$ 及所有 $\epsilon \in (0, \epsilon_0)$ 都满足 *Mangasarian-Fromovitz* 约束资格条件；参见 *Bolte*等人 *[31]*。

在离散时间下，只需将 $\dot{x}(t)^+$ 替换为$(x_{k+1}-x_k)/T$并将 $x(t)$替换为 x_k，即可得到相应的受约束梯度下降动力学。条件(5)可解释为一种经过修改的投影梯度方案，其中，对整个可行集 C 的投影被替换为对稀疏凸近似 $V_\alpha(x_k)$进行优化。关于 $V_\alpha(x_k)$非空性的说明同样适用。

Muehlebach 和 Jordan 的结果 [26] 证明了（4）（和/或（5））在连续时间和离散时间下均收敛。在连续时间下，研究表明，即使 f 和 C 是非凸的，（4）（和/或（5））的轨迹也会收敛到驻点集合。此外，若 f 是强凸的，强凸常数为 μ，且 α 设为 2μ，则从任意初始条件出发，轨迹都会以线性速率收敛到（1）的极小化点：

$$|f(x(t)) - f(x^*)| \leq (|f(x(0)) - f^*| + c_1)e^{-2t/\kappa},$$

其中， κ 是 f 的条件数， $c_1 \geq 0$ 是一个显式常数，用于刻画初始条件是否可行。全文使用记号 $|\cdot|$ 表示 ℓ^2 范数。同样，若 f 是强凸的且 C 是凸的，在离散时间下（其中 $\dot{x}(t)^+$、 $x(t)$ 和 $R(t)$ 分别替换为（$x_{k+1} - x_k$）$/T$、 x_k 和 R_k），已证明轨迹会在 $T \leq 2/(L_1 + \mu)$、 $\alpha < \mu$ 条件下收敛到（1）的极小化点，其中 L_1 指相应拉格朗日函数的光滑常数。研究发现，渐近收敛以 $1/\kappa_l$ 的速率呈线性，其中 κ_l 表示拉格朗日函数的 Lipschitz 常数。然而，离散时间下尚缺乏非渐近线性收敛结果；渐近结果需要对算法动力学进行相对复杂的分析。现在我们给出这样一个非渐近结果。

定理 1。 设函数 f 是 μ-强凸的，且 g 光滑且凹。令$l(x) := f(x) - \lambda^{*\mathsf{T}} g(x)$ 表示拉格朗日函数，其中 λ^* 表示 (1)的最优乘子，并令 $T \leq 1/L_l$， $\alpha \leq \mu$。则，算法 *1* 的迭代序列满足：

$$\frac{\mu}{2}|x_k - x^*|^2 \quad \leq \quad l(x_k) - l(x^*) \quad \leq \quad (1 - T\alpha)^k \quad (l(x_0) - l(x^*)),$$

对于所有 $k \geq 0$，其中 x^* 表示 (1)的极小化点。对于 $T = 1/L_l$ 和 $\alpha = \mu$，收敛速率为 $\kappa_l = L_l/\mu$，其中 μ 和 L_l 分别表示 l的强凸性常数和光滑常数。

算法 1 带速度投影的约束梯度下降

要求： $x_0 \in \mathbb{R}^n$, L_l, μ（l 的光滑常数和强凸常数）**要求：** 最大迭代次数（最大迭代次数）

$T \leq 1/L_l$, $\alpha \leq \mu$**对于** $k = 0$, 1, ...**执行**$x_{k+1} \leftarrow \operatorname{argmin}_{v \in V_\alpha(x_k)} |v + \nabla f(x_k)|^2$（使用 $I = [n_g]$）**结束循环**

定理的证明1 见附录 A，其中我们还补充了一个推论，说明如果光滑常数 $1/k$ 未知，则可获得 L_l 速率（已知 L_l 需要对 λ^*有一个上界）。

这意味着（4）（和/或（5）实现了能够处理约束并以典型的 $1/\kappa$和$1/\kappa_l$速率线性收敛的梯度流和梯度下降动力学，前提是目标函数 f 光滑且强凸，并且已知最优乘子的上界 λ^*。集合 $V_\alpha(x)$可视为速度约束，是切锥的一种自然推广。它还降低了每次迭代的计算成本，因为无需对整个可行集进行投影。下一节中，我们将把这些思路推广到带动量的算法。这将自然导出加速算法：当f 光滑且强凸时，其线性收敛速率为 $1/\sqrt{\kappa_l}$（若f 光滑且强凸），或者在 $1/t^2$ 次线性速率下收敛（若 f 光滑且凸），这将显著提升速度。我们还将推导当 f 和 C 非凸时的收敛性。

3 加速梯度流

我们首先从连续时间的推导开始介绍，随后将给出相应的离散时间算法。一个自然的起点是 Polyak [32], Su 等人 [1], 以及 Muehlebach 和 Jordan [7],等人的研究，他们指出，在无约束情形下，加速优化算法可以视为由二阶微分方程描述的动力系统。一个典型例子如下：

$$\dot{u}(t) + 2\delta u(t) + \nabla f(x(t) + \beta u(t)) = 0, \tag{6}$$

其中，我们使用变量 $u(t) = \dot{x}(t)$ 表示速度（或动量），而 $\delta \geq 0$ 和 $\beta \geq 0$ 是阻尼参数。[3]

存在约束时，$u(t)$ 可能不连续，这与 (6) 形成鲜明对比。例如，如果轨迹 $x(t)$ 接近可行集的边界

[3]变量 δ, β 也可能随时间变化。为便于介绍，我们着重讨论 δ 和 β 为固定值的情形，同时也给出适用于时变参数的相应结果。

若轨迹接近可行集的边界，为确保 $x(t)$ 始终处于可行状态， $u(t)$ 可能需要发生瞬时跳变。因此，与 (4)（或等价地，(5)）中状态 $x(t)$ 绝对连续的情况相比，现在我们允许状态 $(x(t)\ u(t))$（其中包括速度 u）不连续。这意味着，除了描述光滑运动的 (4) 类型微分方程外，我们还规定 u 中的不连续性如何产生。如果将 $(x(t)\ u(t))$ 视为机械系统的位置和速度，那么 u 中的不连续性在力学上意味着碰撞，并由相应的碰撞定律描述。接下来将概述允许 u 不连续的数学形式体系。

我们将状态 $z := (x,\ u)$ 视为积分过程的结果：

$$z(t) = z(t_0) + \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}z, \quad \forall t \geq t_0.$$

然而，不同于通常的勒贝格密度 $\mathrm{d}z = \dot{z}(t)\mathrm{d}t$，$\mathrm{d}z$ 现在表示一种微分测度 [33], ，它既可以具有相对于勒贝格测度的密度（记为 $\mathrm{d}t$），也可以具有相对于原子测度的密度（记为 $\mathrm{d}\eta$）。与非光滑力学中的常见做法一致，我们假设 $z(t)$ 局部有界变差，且不包含任何奇异项。这意味着，$z(t)$ 可以分解为一个绝对连续函数和一个分段常数阶跃函数 [33]。在每个时刻 t， $z(t)$ 都有定义良好的左右极限， $z(t)^-$ 和$z(t)^+$，尽管 $z(t)$ 可能不存在，或并不重要。我们可以将微分测度 $\mathrm{d}z$ 表示为 $\mathrm{d}z = \dot{z}(t)\mathrm{d}t + (z(t)^+ - z(t)^-)\mathrm{d}\eta$，并且在区间 $[t_0, t]$ 上积分（该区间包含时刻 $t_{\mathrm{d}i}$, $i = 1, 2, \ldots$，此时 $z(t)$ 不连续），可得

$$z(t)^+ = z(t_0)^- + \int_{t_0}^{t} \dot{z}(t)\mathrm{d}t + \sum_{i \geq 1} z(t_{\mathrm{d}i})^+ - z(t_{\mathrm{d}i})^-.$$

由于允许状态不连续，为了充分确定状态轨迹 $z(t)$，我们需要同时描述相对于勒贝格测度 $\mathrm{d}t$ 的密度 $\dot{z}(t)$（它描述运动的光滑部分），以及密度 $z(t)^+ - z(t)^-$（它描述非光滑运动）。类比非光滑力学 [，参见例如 12], ，可通过以下测度微分包含实现这一点：

$$\mathrm{d}u + 2\delta u\mathrm{d}t + \nabla f(x + \beta u)\mathrm{d}t = \sum_{i \in I_x} \nabla g_i(x)\mathrm{d}\lambda_i, \quad \gamma_i^+ + \epsilon\gamma_i^- \in N_{\mathbb{R}_{\leq 0}}(-\mathrm{d}\lambda_i), \quad i \in I_x, \tag{7}$$

其中 $\epsilon \in [0, 1)$ 是一个常数， γ_i 是与第 i 个约束相关联的速度，其定义为

$$\gamma_i(x, u) := \nabla g_i(x)^{\mathsf{T}} u + \alpha g_i(x),$$

并且我们省略了对 t 的依赖（后文也会经常如此）。注意，集合 I_x （或者 $I_{x(t)}$ 用完整记号表示）随时间变化。（7）中的法锥包含关系如图1 所示，并将在

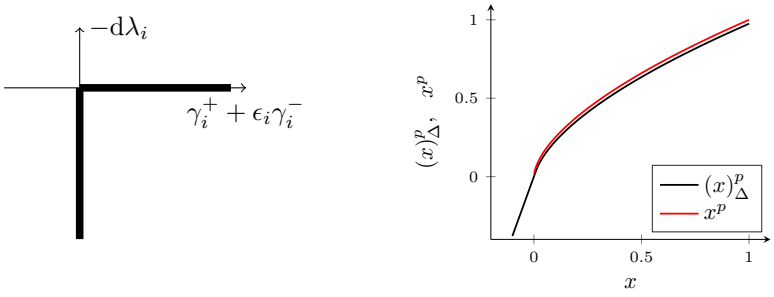


图1 左图显示了法锥包含 $\gamma_i^+ + \epsilon\gamma_i^- \in N_{\mathbb{R}_{\leq 0}}(-\mathrm{d}\lambda_i)$，它等价于互补条件 $\mathrm{d}\lambda_i \geq 0$，$\gamma_i^+ + \epsilon\gamma_i^- \geq 0$，$\mathrm{d}\lambda_i(\gamma_i^+ + \epsilon\gamma_i^-) = 0$。右图显示了 $x)_\Delta^p$ 的近似 x^p，其中 $\Delta = 0.01$ 以及 $p = 0.6$。尽管 x^p 相对较大，Δ 该近似与 x^p 之间仍具有极好的一致性。在数值实验中（见第 5节），Δ 被设为 10^{-6}。

下文进一步讨论。常数 ϵ 可解释为恢复系数，其中 $\epsilon = 0$ 会导致非弹性碰撞，而 $\epsilon = 1$ 则会产生弹性碰撞。测度微分包含常见于非光滑力学领域，针对（7）这类包含关系的各种存在性结果已得到确立；例如，参见Piazza等人 [34], Leine和van de Wouw [35] 及其中的参考文献。

我们注意到，如果 x 位于可行集的内部，I_x 为空，因此（7）退化为（6）。这意味着，（7）通过包含约束 $\gamma_i^+ + \epsilon\gamma_i^- \in N_{\mathbb{R}_{\leq 0}}(-\mathrm{d}\lambda_i)$，将（7）从无约束情形推广到了约束情形。如下文所述，该约束通过牛顿冲击定律描述 u 的不连续性，并施加速度约束 $u(t) \in V_\alpha(x(t))$，只要 $u(t)$ 存在。

需要注意的是，(7) 是按积分意义理解的：对于任意紧时间区间 $[t_0, t_1]$，(7) 定义了差值 $u(t_1)^+ - u(t_0)^-$，该差值由对 $\mathrm{d}u$ 从 t_0 到 t_1 积分得到；同样，差值 $x(t_1)^+ - x(t_0)^-$ 由对 $u(t)\mathrm{d}t$ 积分得到。这意味着 (7) 有一种非常自然的离散化方式，将在下一段讨论。最后两段将从光滑分量和非光滑分量的角度说明 (7) 的含义。第4节将推导连续时间和离散时间下的形式化收敛结果。

离散化(7)：

测度微分包含 (7) 可采用如下离散化：$\mathrm{d}u = u_{k+1} - u_k$，$\mathrm{d}t = T_k$，$\mathrm{d}\lambda_i = \Lambda_{ki}$，$\gamma_i^+ = \gamma_i(x_k, u_{k+1})$，$\gamma_i^- = \min\{0, \gamma_i(x_k, u_k)\}$，其中$T_k > 0$ 为步长。[4] 由此得到

$$u_{k+1} - u_k + \delta u_k T_k + \nabla f(x_k + \beta u_k)T_k = \sum_{i \in I_{x_k}} \nabla g_i(x_k)\Lambda_{ki},$$
$$\gamma_i(x_k, u_{k+1}) + \epsilon \min\{0, \gamma_i(x_k, u_k)\} \in N_{\mathbb{R}_{\leq 0}}(-\Lambda_{ki}), \quad i \in I_{x_k}.$$

[4]中的最小值确保 $u_{k+1} \in V_\alpha(x_k)$，而这在离散时间下并不会自动成立。

我们使用新计算出的动量来更新位置 x_k: $x_{k+1} = x_k + T_k u_{k+1}$，这一做法的动机来自与无约束优化的类比。（与标准欧拉法相比，这种离散化方案被证明更优[9]。）由此得到的 u_{k+1} 更新可解释为u_{k+1}的驻定条件，因此，所提出的算法可总结如下：

$$\begin{aligned} u_{k+1} = &\operatorname*{argmin}_{v\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}|v - u_k + 2\delta u_k T_k + \nabla f(x_k + \beta u_k)T_k|^2, \\ &\text{s.t.} \quad \gamma_i(x_k, v) \geq -\epsilon \min\{\gamma_i(x_k, u_k), 0\}, \quad i \in I_{x_k} \\ x_{k+1} = &\, x_k + T_k u_{k+1}. \end{aligned} \tag{8}$$

备注 1 在这里同样适用：若 C 是凸的，且 $\epsilon = 0$，则保证式（8）中的可行集非空，这意味着 u_{k+1} 定义良好（存在且唯一）。若 C 是非凸的，或 $\epsilon > 0$，则在满足约束资格条件（例如 Mangasarian-Fromovitz 条件）时，可保证可行集非空。这些约束资格条件具有一般性，正如备注 1中所述；只要u_{k+1} 始终处于可行集的某个邻域内，便可保证其定义良好。正如我们将在收敛性分析中所示（见第 4节），我们确实可以确保 x_k始终处于 C的某个邻域内；该邻域的大小可以由 T_k的值控制。完整算法的伪代码列于附录 B。

以下几点值得注意：

i）更新式（8可解释为选择 u_{k+1} ，使其尽可能接近无约束情形下的更新，同时满足速度约束$\gamma_i(x_k,\ u_{k+1}) \geq -\epsilon\min\{\gamma_i(x_k,\ u_k)\ 0\}$。因此，当$I_{x_k}$为空时，式（8）退化为标准的基于动量的方法；若 $\beta = 0$ ，则得到重球算法；若 $\beta \neq 0$ ，则得到 Nesterov方法。

ii) 更新式（8）仅包含I_{x_k} 在迭代 k时活跃的约束。式（8）中关于 v 的约束保证是凸的，即使底层可行集是非凸的。因此，式（8）中的约束构成了可行集的一种稀疏、局部且凸的近似。与投影梯度或 Frank-Wolfe 方法通常在位置层面进行优化不同，式（8）建议对速度 u_k、 $k = 1$、2、.....进行约束。

现在，我们继续对连续时间动力学（7）进行阐释和说明。

光滑运动：

若 $u(t)$ 恰好在区间 (t_0, t_1) 上绝对连续，则其微分测度可化为 $\dot{u}(t)\mathrm{d}t$。类似地，乘子 $\mathrm{d}\lambda_i$ 相对于勒贝格测度 $\mathrm{d}t$ 仅具有一个密度，记为 $\lambda_i(t)$，即 $\mathrm{d}\lambda_i = \lambda_i(t)\mathrm{d}t$。因此，(7) 可化为

$$\dot{u} + 2\delta u + \nabla f(x + \beta u) = \sum_{i\in I_x} \nabla g_i(x)\lambda_i, \tag{9}$$

对所有 $t \in (t_0, t_1)$（几乎处处）。此外， $u(t)$ 的绝对连续性意味着 γ_i 也绝对连续，即 $\gamma_i^+ = \gamma_i^- = \gamma_i$。在极限 $\mathrm{d}t \downarrow 0$ 下，(7) 中的包含关系因此化为

$$(1+\epsilon)\gamma_i \in N_{\mathbb{R}_{\leq 0}}(-\lambda_i) \quad \Leftrightarrow \quad \gamma_i \in N_{\mathbb{R}_{\leq 0}}(-\lambda_i),$$

对所有 $i \in I_{x(t)}$ 以及对所有 $t \in (t_0, t_1)$（几乎处处）。($N_{\mathbb{R}_{\leq 0}}$ 是一个锥；因此我们可以除以 $1+\epsilon > 0$。规定 γ_i 与λ_i 之间关系的法锥包含类似于图 1。

从物理学角度看，法锥包含 $\gamma_i \in N_{\mathbb{R}\leq 0}(-\lambda_i)$ 表示一个力定律，利用锥对偶也可以将其表示为（参见图 1）

$$-\lambda_i \in N_{\mathbb{R}\geq 0}(\gamma_i).$$

因此，($\nabla g_i(x(t))\lambda_i$ 在 $i \in I_x$ 上的和，即 (9) 右侧的项，具有约束力的物理含义：

$$-R = -\sum_{i \in I_x} \nabla g_i(x)\lambda_i, \quad -R \in N_{V_\alpha(x)}(u),$$

它施加速度约束 $u(t) \in V_\alpha(x(t))$，对所有 $t \in (t_0, t_1)$ 几乎处处成立。根据 Gr¨onwall 不等式，这确保约束违反以速率 α线性递减，如 (3) 所示。

因此我们得出结论，对于光滑运动，测度微分包含 (7) 将无约束情形下的微分方程 (6) 推广到了约束情形，其中附加的约束力 $R(t)$ 施加了速度约束 $u(t) \in V_\alpha(x(t))$（对几乎所有 t均成立）。引入力 $R(t)$ 与 (4) 类似。

由于对几乎所有 t，运动都是光滑的，(7) 中的法锥包含保证速度约束 $u(t) \in V_\alpha(x(t))$（或者等价地，$\gamma_i(x(t)\ u(t)) \geq 0$ 对所有 $i \in I_{x(t)}$）对所有 $t \geq 0$ （几乎处处）均成立。然而，当在时刻 t_0 出现新的约束时，可能会发生 $\gamma_i^-\ (x(t_0)\ u(t_0)) < 0$ 的情况。在这种情况下，需要发生碰撞，以确保 $\gamma_i^+\ (x(t_0)\ u(t_0)) \geq 0$。这将在下一段讨论。

非光滑运动：
为了推导非光滑运动，我们在 $u(t)$ 不连续的时刻 $\{t\}$ 对式 (7) 积分；也就是说， $u(t)^- \neq u(t)^+$。由于单元素集合 $\{t\}$ 的勒贝格测度为零，我们只剩下原子部分，从而得到 $\mathrm{d}u = (u(t)^+ - u(t)^-)\mathrm{d}\eta$, $\mathrm{d}\lambda_i := \Lambda_i \mathrm{d}\eta$,

$$u(t)^+ - u(t)^- = \sum_{i \in I_{x(t)}} \nabla g_i(x(t))\Lambda_i, \quad \gamma_i^+ + \epsilon\gamma_i^- \in N_{\mathbb{R}\leq 0}(-\Lambda_i), \quad i \in I_{x(t)}. \tag{10}$$

法锥包含应理解为牛顿碰撞定律的一种推广。对于 $\Lambda_i > 0$，它意味着 $\gamma_i^+ + \epsilon\gamma_i^- = 0$，即与约束 i 碰撞后相关联的速度 γ_i^+ 是 $-\epsilon\gamma_i^-$ ，其中 γ_i^- 是与约束相关联的速度

i 碰撞前的速度。由对光滑运动的讨论可知，$\gamma_i(x(t_0),\ u(t_0))^-$在时刻 t_0 只有在约束 i 于时刻 t_0变为活跃时才可能为负；也就是说，$i \notin I_{x(t)}$ 对于 $t < t_0$，而 $i \in I_{x(t)}$ 对于 $t = t_0$。这使得 u 在时刻 t_0发生不连续；根据上述法锥包含，这种不连续有两种形式：i) $\Lambda_i > 0$，这意味着 $\gamma_i^+ = -\epsilon\gamma_i^-$；ii) $\Lambda_i = 0$，这意味着 $\gamma_i^+ \geq -\epsilon\gamma_i^-$。在形式 i) 中，冲击力 Λ_i 为速度跳跃 $u(t_0)^+ - u(t_0)^-$贡献分量 $\Lambda_i \nabla g_i(x(t))$（垂直于约束 i）；而在形式 ii) 中，则没有这样的贡献。两种形式都确保 $\gamma_i(x(t_0),\ u(t_0))^+ \geq -\epsilon\gamma_i(x(t_0),\ u(t_0))^- \geq 0$。

根据 (10) 对非光滑运动的刻画，可以将其解释为以下对象的驻定条件 $u(t)^+$，由此得到

$$u(t)^+ = \underset{v\in\mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2}|v-u(t)^-|^2 \quad \text{s.t. } \gamma_i(x(t),v) \geq -\epsilon\gamma_i(x(t),u(t)^-),\ \forall i \in I_{x(t)}. \quad (11)$$

(11) 中的最小化具有如下含义：对于每个 $u(t)^-$，都存在唯一的$u(t)^+$，它在满足牛顿冲击定律 $u(t)^-$ 的条件下，尽可能接近 $\gamma_i^+ \geq -\epsilon\gamma_i^-$，对所有 $i \in I_{x(t)}$均如此。

((7)) 的平衡点：
(7) 的平衡点由以下条件得到 $x(t) \equiv x_0$，$\mathrm{d}\lambda_i \equiv \lambda_{0i}\mathrm{d}t$，$u(t) \equiv 0$，$\mathrm{d}u \equiv 0$，其中 $x_0 \in \mathbb{R}^n$ 且乘子 $\lambda_{0i} \geq 0$，$i \in I_{x_0}$ 为常数。因此，(7) 化简为

$$-\nabla f(x_0) + \sum_{i\in I_{x_0}} \nabla g_i(x_0)\lambda_{i0} = 0, \quad (1+\epsilon)\alpha g_i(x_0) \in N_{\mathbb{R}_{\leq 0}}(-\lambda_{i0}), \quad i \in I_{x_0}.$$

将法锥包含两边除以 $\alpha(1+\epsilon) > 0$（法锥是锥），即可将其简化；这意味着 $g_i(x_0)$ 和 λ_{i0} 满足互补条件

$$g_i(x_0) \geq 0, \quad \lambda_{i0} \geq 0, \quad \lambda_{i0}g_i(x_0) = 0, \quad \forall i \in I_{x_0}.$$

因此，系统（7）的平衡点满足系统（1）的 Karush-Kuhn-Tucker 条件，这意味着系统（1）的驻点确实是平衡点。

4 收敛性分析

下一节讨论系统（7）和（8）的轨迹的收敛性，并刻画收敛速率。我们首先概述连续时间的结果。不失一般性，假设 f 已归一化，使梯度的 Lipschitz 常数为 1。

定理 2. 设 *(x(t), u(t))* 是满足（7）的轨迹（依据第 3 节），且$x(0) \in C$。设 f 为 *1-*光滑，g 满足 *Mangasarian-Fromovitz* 约束资格条件，并且 f 为凸函数或满足 $2\delta - \beta > 0$。则 *x(t)* 收敛到驻点集，而 *u(t)* 收敛到零。此外，每个孤立的局部极小值都对应于一个按 *Lyapunov* 意义渐近稳定的平衡点。

定理 2的证明见附录 D。

表1 该表总结了选择不同的 α、 β和 δ时得到的收敛速率。不失一般性， f 归一化为1，使梯度的 Lipschitz 常数为1。

变体	α	δ	β	速率 ρ
重球法	$\sqrt{\mu}$	$\sqrt{\mu}$	0	$e^{-\sqrt{\mu}t}$
Nesterov 常参数法	$\sqrt{\mu}-\mu/2$	$\frac{\sqrt{\mu}}{1+\sqrt{\mu}}$	$\frac{1-\sqrt{\mu}}{1+\sqrt{\mu}}$	$e^{-(\sqrt{\mu}-\mu/2)t}$
Nesterov 变参数法	$\frac{2}{t+3}$	$\frac{3}{2(t+3)}$	$\frac{t}{t+3}$	$\frac{9}{(t+3)^2}$

下述命题表明，采用动量并结合恰当选择的阻尼参数，确实能够实现加速收敛速率（光滑凸情形下为 $\mathcal{O}(1/t^2)$，光滑强凸情形下为_ $e^{-\sqrt{\mu}t}$ ）。[5]

定理3. 设 C 为凸函数，且 f 为 1-光滑函数，并且要么是凸函数，要么是强凸函数，其强凸常数为 $\mu > 0$。参数 α, β, δ, 以及 ρ 按照表 *1* 选取，并假设 *Slater* 条件成立。那么，对于任意 $x(0) \in \mathbb{R}^n$, $u(0) = 0$，以下结论成立：

$$\min\{0, g(x(0))\}^{\mathsf{T}} \lambda^* \rho(t) \leq$$

$$f(x(t)) - f(x^*) \leq \left(\frac{\alpha^2}{2} |x(0) - x^*|^2 + f(x(0)) - f(x^*) \right) \rho(t),$$

其中 x^* 是 (1) 的极小化点，且 λ^* 是满足 *Karush-Kuhn-Tucker* 条件的乘子。

我们还证明了离散算法（8）在非凸且可能具有随机性的情形下的收敛性。为简单起见，我们陈述并证明确定性结果，其中 $\epsilon = 0$ （正如证明所示，具有有界零均值梯度扰动的随机情形可由相同论证得出。）

定理*4.* 令 $T_k = T_0/k^s$, $k = 1, 2, \ldots,$ 对某个 $T_0 > 0$ 和 $s \in (1/2, 1)$ 成立，并令函数 $\min\{0, g_1(x)\}$ 具有紧水平集。设 f 为 *1*-光滑函数，且为凸函数或满足 $2\delta - \beta > 0$；令 x_k, u_k 为式（*8*）中定义的迭代序列，其中 $\epsilon = 0$，且初始值 $(x_0, u_0) \in \mathbb{R}^{2n}$ 任意；并令 g 满足 *Mangasarian-Fromovitz* 约束资格条件。若 u_k 有界，且 f 具有孤立驻点，则 x_k 收敛到（*1*）的一个驻点，而 u_k 收敛到零。

我们注意到，如果满足关于阻尼参数 δ 和 β 的额外假设，则可以放宽限制 $1/2 < s < 1$ ，将其改为 $1/2 < s \leq 1$ （这需要稍微详细一些的证明）。

我们注意到，算法 (8) 的行为较为复杂，因为它依赖于对可行集的局部近似，在优化过程中，多个约束可能变为活跃或不活跃。因此，证明定理 4 并非易事（见附录中的证明），需要融合数值分析、优化和动力系统领域的思想。

[5]在此背景下，连续时间速率确实有意义，因为 ∇f 的 Lipschitz 常数以及 ∇f 在（7）前的常数均固定为 1。这固定了时间尺度，因为任何时间重参数化，即 $t = \tau(s)$，其中 τ： $\mathbb{R}_{\geq 0} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ 是一个微分同胚，都会改变 ∇f 在（7）中的出现方式。更一般的讨论请参阅 Muehlebach 和 Jordan [8] 。

本节最后，我们将在凸情形下证明一个略作修改的 (8) 版本具有加速收敛率。我们考虑的算法如下：

$$
\begin{aligned}
&u_{k+1} = \operatorname*{argmin}_{v\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}|v - u_k + 2\delta T_k u_k + \nabla f(y_k)T_k|^2,\\
&\text{s.t.}\ \ \nabla g_i(y_k)^{\mathsf{T}} v \geq -\alpha g_i(x_k) - \frac{g_i(y_k) - g_i(x_k) - \nabla g_i(y_k)^{\mathsf{T}}\beta u_k}{T_k},\quad i\in[n_{\mathrm{g}}],\\
&\qquad y_k = x_k + \beta u_k,\\
&x_{k+1} = x_k + T_k u_{k+1}.
\end{aligned}
\tag{12}
$$

μ g x =

定理 5。设 f 是 $f\ x\ -\lambda^{*\mathsf{T}} g\ x$ λ^* 1 -强凸的，并设其光滑且凹。令 $l()\,()\,()$ 表示拉格朗日函数，其中表示 $()$ 的最优乘子。则，(12) 中满足 $T_k = 1/\sqrt{L_l}$, $\delta = \sqrt{L_l}/(\sqrt{\kappa_l}+1)$、$\beta = T_k(1-2\delta T_k)$、$\alpha = \delta$ 以及 $u_0 = \overline{0}$ 的迭代序列满足：

$$
\frac{\mu}{2}|x_k - x^*|^2 \leq l(x_k) - l(x^*) \leq \left(1 - \frac{1}{1+\sqrt{\kappa_l}}\right)^k \left(\frac{L_l}{8}|x_0 - x^*|^2 + l(x_0) - l(x^*)\right),
$$

对于所有 $k \geq 0$，其中 L_l 表示 l 和 $\kappa_l = L_l/\mu$ 的光滑常数。

（8）与（12）之间存在一些差异。不同于在 ∇g 处计算 x_k，梯度是在 $x_k + \beta u_k$ 处计算的，这将简化我们的证明（∇f 和 ∇g 均在同一点处计算）。此外，不等式约束的右侧还包含一个额外项，该项可与 g_i 的曲率建立如下关系

$$
-\frac{g_i(y_k) - g_i(x_k) - \nabla g_i(y_k)^{\mathsf{T}}\beta u_k}{T_k} = \frac{\nabla^2 g_i(\xi_k)\beta^2|u_k|^2}{2T_k},
$$

对于某个 $\xi_k \in \mathbb{R}^n$，其中第二步使用了泰勒定理。

定理 5 需要知道 l 的光滑常数，这对某些应用可能有所限制。然而，沿用附录 A 中的相同论证，我们可以得到以下推论，它证明了当 $\mathcal{O}(\log(1/\epsilon)/\sqrt{\epsilon}$ 未知时的收敛率为 L_l。

推论 6。设函数 f 为 μ-强凸且 L-光滑，设 g 为凹函数且 L_g-光滑，并设

$$
B := \max_{x\in C} |\nabla f(x)|^2/(2\mu).
$$

那么，式 x_N 的迭代点 (12) 满足 $T_k = 1/\sqrt{L_l}$，$\delta = \sqrt{L_l}/(\sqrt{\kappa_l}+1)$，$\beta = T_k(1-2\delta T_k)$，$\alpha = \delta$，且 $L_l = L + BL_g/\epsilon$ 满足 $|x_N - x^*| \leq \epsilon$，其中

$$
N \geq 2\sqrt{\frac{L+BL_g/\epsilon}{\mu}}\left(2\log(1/\epsilon) + \log\left(\frac{5L+5BL_g/\epsilon}{4\mu}\right) + 2\log(|x^* - x_0|)\right) = \mathcal{O}\left(\frac{\log(1/\epsilon)}{\sqrt{\epsilon}}\right),
$$

且 x^* 表示 $\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$ *s.t.* $g(x) \geq -\epsilon$ 的极小化点。

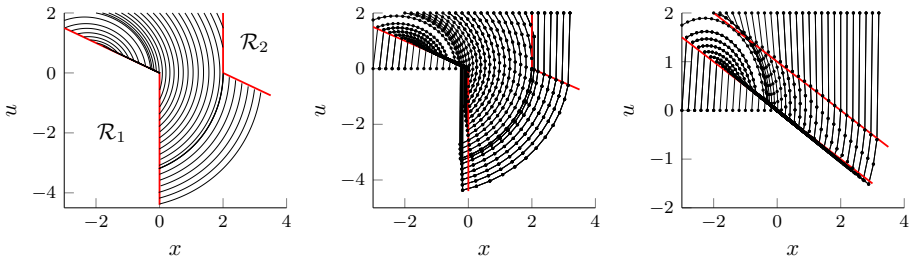


图 **2** 7 $\beta =$第 $0\ \epsilon = 0$ $\mathcal{R}_1$ $\mathcal{R}_2$ 一个面板展示了由 ( ) 得到的轨迹（参数为 $\alpha = 0.5, \delta = 0.1, ,$ ）。和的边界以红色突出显示。第二个面板展示了离散化 (8)（ $T_k = T = 0.1$）的结果，第三个面板展示了离散化 (12)（ $T_k = T = 0.1$）的结果。(8) 和 (12) 的一个重要区别在于，(8) 仅考虑违反的约束，而 (12) 则包含所有约束。红线对此作了说明：第二个面板中的红线表示 $\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2$，第三个面板中的红线表示 $\gamma_1(x,u) = 0, \gamma_2(x,u) = 0$。

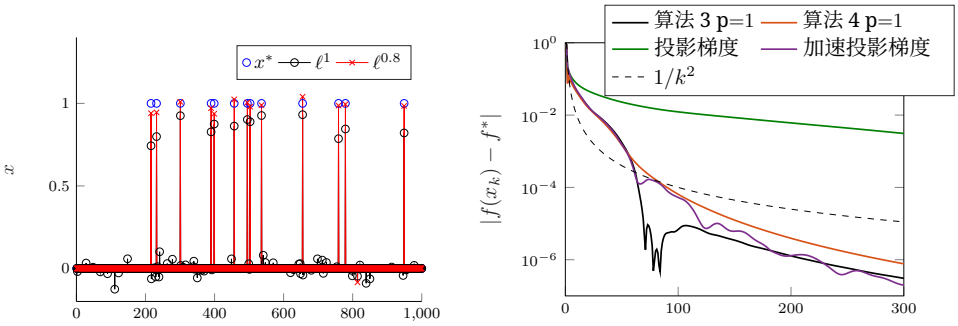


图 3 左图展示了采用 ℓ^1 和 $\ell^{0.8}$ 正则化的压缩感知问题的解向量。右图展示了不同方法的目标函数演化。我们注意到，算法 3、算法 4 和加速投影梯度以相似的速率收敛，且远快于梯度下降。算法 3 和算法 4 采用了以下设置：$\alpha_k = 2/(k+3)$、$\delta_k = 3/(2(k+3))$、$\beta_k = T(1-2\delta_k T)$（见表 1），分别搭配 $T = 1.8$ 和 $T = 2$。加速梯度下降对应于 Nesterov [36, 第 78 页中的算法，即常步长方案 I]。算法 3 和算法 4 在 $p < 1$ 下的相应轨迹与 $p = 1$ 相似，见图 4。

5 数值示例

以下部分分为两部分。第一部分通过一个一维示例说明 (7) 的动力学，以及通过 (8) 和 (12) 进行的离散化，旨在帮助理解非光滑动力学及其离散化。第二部分将 (8) 和 (12) 应用于（非凸）压缩感知和大规模稀疏回归问题。正如我们将看到的，我们的算法在凸松弛问题上达到了最先进的性能，同时也能轻松处理非凸稀疏约束（传统的基于投影的方法难以扩展到这种情形）。

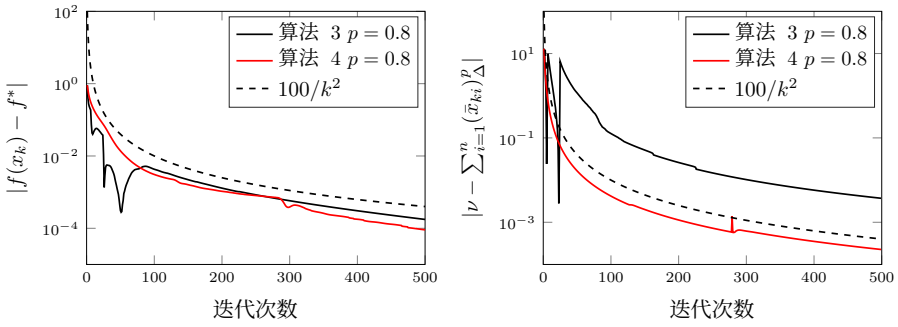


图 4 展示了将算法 3 和算法 4 应用于压缩感知问题时的轨迹，其中采用了 $\ell^{0.8}$ 正则化。左图展示了不同方法的目标函数演化，右图则展示了约束违反的数值。算法 3 和算法 4采用了以下设置： $\alpha_k = 2/(k+3)$, $\delta_k = 3/(2(k+3))$, $\beta_k = T(1-2\delta_k T)$（见表 1），其中 $T = 1$ 且 $\Delta = 1e-3$。

5.1 说明性示例

为了在相空间中绘制轨迹，我们选择 $f(x) = (x+2)^2/2$ 和$g(x) = (x, -x+2)$，其中 x 为标量。每个约束 $g_i(x) \geq 0$ 及其对应的速度约束 $\gamma_i(x) \geq 0$ 都会诱导出一个区域，

$$\mathcal{R}_i := \{(x,u) \in \mathbb{R}^2 \mid g_i(x) \leq 0, \gamma_i(x,u) \leq 0\},$$

在相空间中， $i = 1,2$，轨迹要么不光滑，要么沿着 $\mathcal{R}_i$的边界滑动。在 $\mathcal{R}_i$之外，轨迹遵循光滑运动（6）。图2的第一个面板展示了连续时间轨迹（7），以及 $\mathcal{R}_1$ 和 $\mathcal{R}_2$。对于给定的（$x(t_0)$ $u(t_0)^-$），若 $g_i(x(t_0)) \leq 0$且 $\gamma_i(x(t_0)$ $u(t_0))^- < 0$，则会发生碰撞；这确保了 $\gamma_i(x(t_0)$ $u(t_0))^+ \geq -\epsilon\gamma_i(x(t_0)$ $u(t_0))^-$。在我们的示例中，只有 $\gamma_i^+ = -\epsilon\gamma_i^-$ 这种情况会发生，因为不存在多个约束同时参与的碰撞（$\mathcal{R}_1$ 和 $\mathcal{R}_2$ 互不相交）。因此，恢复系数 ϵ 决定了碰撞后的速度。对于 $\epsilon = 0$，轨迹最终会到达集合 $\mathcal{R}_i$的边界；而对于 $\epsilon > 0$，轨迹将离开$\mathcal{R}_i$ （发生碰撞时）。若 $g_i(x(t_0)) \leq 0$， $\gamma_i(x(t_0)$ $u(t_0))^- = 0$，则不会发生碰撞（$u(t_0) = u(t_0)^- = u(t_0)^+$），轨迹要么离开 $\mathcal{R}_i$，要么沿其边界滑动。这取决于无约束动力学的作用，即向量 $v_{\text{uc}}(t_0) := ($ $u(t_0)$ $-2\delta u(t_0)$ $-\nabla f(x(t_0)$ $+\beta u(t_0)))$。若 $v_{\text{uc}}(t_0)$指向外侧，轨迹将离开 $\mathcal{R}_i$ 并遵循无约束运动（$\mathrm{d}\lambda_i = 0$）。若 $v_{\text{uc}}(t_0)$指向内侧，则会有一项来自$\mathrm{d}\lambda_i = \lambda_i(t_0)\mathrm{d}t$的作用，确保轨迹沿着 $\mathcal{R}_i$的边界滑动。

图 2 中的第二个面板展示了根据（8）进行离散化所得到的轨迹，其中 $T_k = T = 0.1$。我们可以清楚地看到，在速度层面加入约束的后果：轨迹可能变得不可行，因为只有当约束被违反时，约束才会进入（8）。尽管如此，即使时间步长 $T_k = T$很大（最大可达 $T \approx 1.8$），轨迹仍会收敛到我们问题的唯一极小化点。图 2 中的第三个面板展示了根据（12）进行离散化得到的轨迹，其中

$T = 0.1$。我们注意到，在（12）中，每个约束始终处于活跃状态（即，$I = [n_g]$在（2）中），这解释了第二个和第三个面板中轨迹的差异。在这个例子中，动力学（12）对于较大的时间步长更为稳健；事实上，对于 $T = 3$，仍然可以观察到收敛。

5.2 非凸压缩感知与图像重建

我们考虑以下 ℓ^p-正则化反问题：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}|Ax-b|^2 \quad \text{s.t.} \quad |x|_p^p \le \nu, \tag{13}$$

其中 $|x|_p$ 表示 ℓ^p “范数”（我们明确允许 $0 < p \le 1$）。这在机器学习、统计学和信号处理中有许多应用 [例如，参见37]。求解此类反问题的传统凸方法是令 $p = 1$，并利用投影到 ℓ^1 球上的投影具有闭式解这一事实。由此可得到加速和非加速的梯度下降方案；在（13）的设定下，它们也分别称为迭代收缩阈值算法（ISTA）和快速迭代收缩阈值算法（FISTA）[例如，参见 38]。然而，当$p < 1$时，投影到 ℓ^p “范数”球上的投影不再具有闭式解，因此尚不清楚如何将投影梯度算法推广到这种设定。尽管如此，我们的算法可以轻松处理 $p < 1$ 这一设定，下面将对此进行说明。

为了处理绝对值和 p次幂，我们引入松弛变量，$\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ 并将（13）重新表述为

$$\min_{(x,\bar{x})\in\mathbb{R}^{2n}} \frac{1}{2}|Ax-b|^2 \quad \text{s.t.} \quad -\bar{x} \le x \le \bar{x}, \quad \sum_{i=1}^{n}(\bar{x}_i)_\Delta^p \le \nu, \tag{14}$$

其中 $(\cdot)_\Delta^p : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 连续可微，并在 $x > 0$时近似 x^p （x^p，$p < 1$ 在原点处不可微）。近似 $(\cdot)_\Delta^p$ 取决于近似参数 $\Delta > 0$，其定义为

$$(x)_\Delta^p := \begin{cases} x^p - \Delta^p(1-p) & x \ge \Delta, \\ p\Delta^{p-1}x, & x < \Delta. \end{cases}$$

对于 $p = 1$ 我们的近似在任意 $|x|_1 \le \nu$ 下都能精确恢复约束 $\Delta > 0$。图1 展示了 $p = 0.6$ 和 $\Delta = 0.01$ 的近似效果，并表明x^p 即使在 Δ取值不大的情况下，也能得到良好的近似。在数值示例中，Δ通常设为 10^{-6}，从而使 x^p 与 $(x)_\Delta^p$高度吻合。

尽管（14）中的约束对于 $p < 1$而言是非线性且非凸的，但（8）和（12）中的优化可以通过闭式解完成，从而得到附录C中给出的算法 Alg.3和算法 Alg.4。

非凸压缩感知示例：
在第一个示例中，$A \in \mathbb{R}^{100\times1000}$ 的每个元素均从标准正态分布中采样。向量 b 设为 $Ax^* + n/2$，其中 $n \in$的分量

$\mathbb{R}^{100}$ 均从标准正态分布中采样，而 x^* 是一个向量，除随机选取的 13 个元素设为 1 外，其余元素均为 0。这就形成了一个具有 1000 个决策变量、极具挑战性且病态的优化问题。图 3 左图比较了我们的算法在 $p = 1$ 和 $p = 0.8$上的计算结果，右图（实线）则比较了我们的方法与投影梯度下降和加速投影梯度下降在 $p = 1$上的表现。我们注意到：i）与 $p = 0.8$ 相比， $p = 1$ 的重建质量明显更差（参数 ν 通过五折交叉验证进行调优，两种情况下均得到$\nu \approx 13$ ）；ii）对于 $p = 1$，我们的算法降低目标函数的速度与加速投影梯度相近。除梯度计算外，所有算法每次迭代的复杂度均为 $\mathcal{O}$（$n$log(n)），该复杂度由排序操作决定；排序操作用于将迭代点投影到 ℓ^1球上，或分别求解式 (8) 或 (12) 中的最小化问题。值得注意的是，对于我们的两种算法，每次迭代的复杂度均与 p无关。图 4 展示了算法 3 和算法 4 在 $p = 0.8$ 上的轨迹，并表明即使在非凸情形下，函数值和约束违反的收敛率也均为 $1/k^2$ 量级。

非凸图像重建示例：
第二个示例是取自 Beck 和 Teboulle [38], 的一个图像重建问题，其中 $A = RW \in \mathbb{R}^{n\times n}, n = 65536$， R 表示高斯模糊算子， W表示三级 Haar 小波变换的逆变换，且 $\nu = 6 \cdot 10^3$。式 (14) 给出的问题规模相当大，包含 131,072 个决策变量和 131,073 个约束。与前一个示例类似，如图 5 所示，我们的方法在 $p = 1$方面与加速梯度下降的性能相当。不过，我们也能够求解具有 $p < 1$的问题，如图 6 所示。图 6 比较了加速梯度下降得到的重建结果与 $p = 1$，并与我们在迭代 100 次后得到的重建结果 $p = 0.8$ 进行比较；后者的伪影明显更少。我们发现，阻尼参数 δ_k 和 β_k 的选择会对收敛率产生显著影响。按照表 1 中的动机，我们选择 $\delta_k = 3/(2(k+3))$ $\beta_k = 1-2\delta_k$,$\alpha_k = 2/(k+3)$ 和 $T = 1$；该选择并未经过优化，采用不同的调度方案或许能进一步提升效果。

更多细节，包括由式 3 和算法 4 从式（8）和（12）推导而来，详见附录 C。

6 结论

我们介绍了一种用于约束优化问题的新型加速优化算法。通过对速度而非位置施加约束，这些算法无需在每次迭代时对整个可行集进行投影或优化。与 Frank-Wolfe 算法或投影梯度方案相比，这不仅有望缩短执行时间，更重要的是拓宽了潜在应用范围，因为约束不一定需要是凸的，也不一定需要具有简单的结构。我们指出了该算法与非光滑动力系统之间的重要相似之处，并刻画了算法在连续时间和离散时间下的行为。

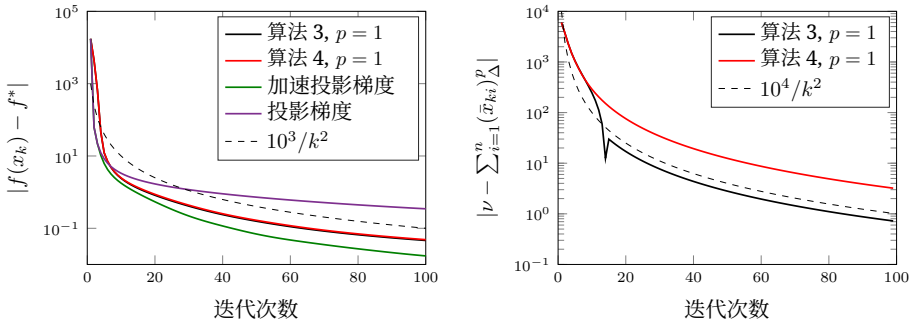


图 5 左图展示了不同算法的目标函数随迭代次数的变化情况。我们注意到，算法 3、算法 4 和加速投影梯度以相似的速率收敛，且速度显著快于梯度下降。算法 3 和算法 4 使用了以下设置： $\alpha_k = 2/(k+3)$、$\delta_k = 3/(2(k+3))$、 $\beta_k = T(1-2\delta_k T)$（见表 1），其中 $T = 1$。加速梯度下降对应于 Nesterov 的算法 [36, 第 78 页，常步长方案 I]。右图展示了约束违反随迭代次数的增加而减少的情况。黑色虚线表示速率为 $\mathcal{O}(1/k^2)$，作为参照。算法 3 和算法 4 在 $p < 1$ 下对应的轨迹与 $p = 1$相似。



图 6 从左到右：原始图像、模糊含噪图像、采用加速梯度下降迭代 100 次后的输出（$p = 1$）、采用算法 4 ($p = 0.8$) 迭代 100 次后的输出。使用 $p = 1$ 和 $p = 0.8$ 得到的结果都能合理地重建图像，但 $p = 0.8$ 伪影更少。

致谢。Michael Muehlebach 感谢德国研究基金会和由苏黎世联邦理工学院管理的 Branco Weiss 奖学金提供的支持。我们也感谢欧洲研究委员会以 ERC 协同基金的形式提供支持。

附录 A 第 2 节的补充材料

定理 1 的应用需要知道 L_l 的光滑常数 l，这可能需要对最优对偶乘子 λ^* 在 g 为非线性时给出上界。这可以视为一种定量约束资格条件，因为乘子 λ^* 可由以下式子给出上界

$$|\lambda^*| \leq \sup_{x \in C} \frac{|W(x)^\mathsf{T} \nabla f(x)|}{\underline{\sigma}(W(x))}, \quad W(x) := (\nabla g_i(x))_{i \in I_x},$$

其中，$\underline{\sigma}$ 表示最小奇异值，$W(x)$表示以$\nabla g_i(x)$、$i \in I_x$为列的矩阵。

如果无法满足这种定量约束资格条件，以下定理 1的推论仍然适用，并刻画算法 1 的收敛性：**推论 7**。设函数 f 为 μ-强凸且 L-光滑，设 g 为凹函数且 L_g-光滑，并设

$$B := \max_{x \in C} |\nabla f(x)|^2/(2\mu).$$

那么，算法 x_N*1* 的迭代点 *1*在 $T = 1/(L + BL_g/\epsilon)$，$\alpha = \mu$满足 $|x_N - x^*| \leq \epsilon$，其中

$$N \geq \frac{L + BL_g/\epsilon}{\mu} \left(2\log(1/\epsilon) + \log(\frac{L + BL_g/\epsilon}{\mu}) + 2\log(|x^* - x_0|) \right) = \mathcal{O}\left(\frac{\log(1/\epsilon)}{\epsilon} \right)$$

且 x^* 表示.....的极小化点

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad s.t. \quad g(x) \geq -\epsilon.$$

证明。我们首先证明以下命题：

命题：设 λ^* 是 $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ s.t. $g(x) \geq -\epsilon$ 的最优乘子。那么 λ^*满足 $|\lambda^*|_1 \leq B/\epsilon$。

命题证明：我们考虑稍作修改后的问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n, \xi \geq 0} f(x) + \bar{B}\xi/\epsilon \quad \text{s.t.} \quad g(x) \geq -\xi, \tag{A1}$$

¯ ¯并将其唯一极小化点记为 $x^*(B)$ $\xi^*(B)$（强凸性表明极小化点唯一）。在上述最小化问题中，变量 ξ 可以解释¯为松弛量，其中因子 B/ϵ 对 ξ的大小施加惩罚。因子¯ ¯ B/ϵ越大，所得 $x^*(B)$的约束违反程度就越小。修改后的问题（A1）的动机在于，相应的拉格朗日对偶问题为

$$\max_{\lambda \geq 0, |\lambda|_1 \leq \bar{B}/\epsilon} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) - \lambda^\mathsf{T} g(x),$$

¯这意味着极小化点 $x^*(B)$满足

$$x^*(\bar{B}) = \operatorname*{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) - \lambda^*(\bar{B})^\mathsf{T} g(x), \quad \text{with} \quad |\lambda^*(\bar{B})|_1 \leq \bar{B}/\epsilon, \tag{A2}$$

且其中 $\lambda^*(B)$ 是一个最优对偶乘子。最大值定理意味着 $x^*(B)$ 和 $\xi^*(B)$ 是关于 B 的连续函数。接下来我们将证明，对于 $B = B$，约束违反量 $g(x^*(B))$ 保证小于 ϵ。结合 $\xi^*(B)$ 的连续性，这意味着存在某个 $B' \le B$，使得相应的 $x^*(B')$ 满足 $x^*(B') = \operatorname{argmin}_{x\in\mathbb{R}^n, g(x)\ge -\epsilon} f(x)$。鉴于 (A2)，这进而证明了该命题。

为了给出约束违反量 g 的上界，我们注意到对任意 $x \in C$，以下结论成立

$$\begin{aligned} f(x^*(\bar{B})) + \bar{B}\xi^*(\bar{B})/\epsilon \le f(x) &\le f(\hat{x}) + |\nabla f(x)|^2/(2\mu) \\ &\le f(x^*(\bar{B})) + |\nabla f(x)|^2/(2\mu), \end{aligned}$$

其中，第二步用到了 f 的强凸性，且 $\hat{x}$ 表示 f 的无约束极小化点。对 $x \in C$ 上的右侧取最大值并整理各项，得到

$$\xi^*(\bar{B}) \le \epsilon B/\bar{B},$$

由此可得 $\xi^*(B) \le \epsilon$，并证明了该命题。

现在我们转而证明该推论。由该命题可知，极小化点 x^* 满足 $x^* = \operatorname{argmin}_{x\in\mathbb{R}^n} f(x) - \lambda^{*\mathsf{T}} g(x)$，其中 ℓ^1 的范数 λ^* 有如下上界：B/ϵ。根据 T 的选择以及参数 α，由定理 1 可得

$$\frac{\mu}{2}|x_N - x^*|^2 \le \left(1 - \frac{L + BL_{\mathrm{g}}/\epsilon}{\mu}\right)^N \frac{L + BL_{\mathrm{g}}/\epsilon}{2} |x_0 - x^*|^2,$$

其中，利用了 $f(x) - \lambda^{*\mathsf{T}} g(x)$ 的光滑性来为右侧设定上界。利用恒等式 $1 - (L + BL_{\mathrm{g}}/\epsilon)/\mu \le \exp(-(L + BL_{\mathrm{g}}/\epsilon)/\mu)$，即可得到该推论：

$$\begin{aligned} |x_N - x^*|^2 \le \frac{L + BL_{\mathrm{g}}/\epsilon}{\mu}|x_0 - x^*|^2 \\ \exp\left(-2\log(1/\epsilon) - \log(\frac{L + BL_{\mathrm{g}}/\epsilon}{\mu}) - 2\log(|x^* - x_0|)\right) = \epsilon^2 \end{aligned}$$

并证明了所需结果。 □

本节最后给出了定理的证明 1。

证明。 证明的关键在于 $\alpha(x^* - x_k) \in V_\alpha(x_k)$，这由 g 的凹性可得。我们定义 $v_k := (x_{k+1} - x_k)/T$ 为速度。根据 $v_k = \operatorname{argmin}_{v\in V_\alpha(x_k)} |v + \nabla f(x_k)|^2$ 这一事实，我们得出

$$|v_k + \nabla f(x_k)|^2/2 \le |\alpha(x^* - x_k) + \nabla f(x_k)|^2/2,$$

将其重新整理可得

$$\begin{aligned}|v_k|^2/2+\nabla f(x_k)^{\mathsf{T}}v_k &\le \alpha^2|x^*-x_k|^2/2+\alpha\nabla f(x_k)^{\mathsf{T}}(x^*-x_k)\\ &\le (\alpha^2-\alpha\mu)|x^*-x_k|^2/2+\alpha(f(x^*)-f(x_k))\\ &\le \alpha(f(x^*)-f(x_k)),\end{aligned}\tag{A3}$$

其中，第二步用到了 f 的强凸性，第三步用到了 $\alpha\le\mu$ 这一事实。接下来利用 l 的光滑性，得到

$$\begin{aligned}l(x_{k+1})-l(x_k) &\le T\nabla l(x_k)^{\mathsf{T}}v_k+\frac{T^2L_l}{2}|v_k|^2\\ &\le T\nabla f(x_k)^{\mathsf{T}}v_k-T\lambda^{*\mathsf{T}}\nabla g(x_k)^{\mathsf{T}}v_k+\frac{T^2L_l}{2}|v_k|^2\\ &\le \alpha T(f(x^*)-f(x_k))-T\lambda^{*\mathsf{T}}\nabla g(x_k)^{\mathsf{T}}v_k+T\frac{TL_l-1}{2}|v_k|^2,\end{aligned}$$

其中第三步用到了不等式（A3）。我们进一步注意到，根据 $V_\alpha(x_k)\ \ v_k\in V_\alpha(x_k)$ $\nabla g(x_k)^{\mathsf{T}}v_k\ge-\alpha g(x_k)$ $-\lambda^{*\mathsf{T}}\nabla g(x_k)^{\mathsf{T}}v_k\le$ 的定义，（）、（）满足（）（），$-\alpha\lambda^{*\mathsf{T}}g(x_k)$ $\lambda^{*\mathsf{T}}g(x^*)=0$ 因此（）（）。此外，互补松弛意味着（），因此

$$l(x_{k+1})-l(x_k)\le\alpha T(l(x^*)-l(x_k))+T\frac{TL_l-1}{2}|v_k|^2.$$

在左侧减去并加上 $l(x^*)$，并利用 $T\le1/L_l$，得到

$$\frac{\mu}{2}|x_k-x^*|^2\ \ \le\ \ l(x_k)-l(x^*)\ \ \le\ \ (1-\alpha T)^k\ \ (l(x_0)-l(x^*)),$$

由此证明得证。 □

附录B 算法（8）的伪代码

本节列出所得离散时间算法（8）的伪代码。

要求：参数 $\beta\ge0,\delta>0$ ▷ 通常小于 1；可以随时间变化 要求：目标函数的步长 T_k ▷ $1/T_k\sim$ 光滑性 要求：常数 $\alpha>0$，$0\le\epsilon\le1$ ▷ α，使得 $\alpha T_k\le1$要求：初始条件 $x_0\in\mathbb{R}^n$，$u_0\in\mathbb{R}^n$ ▷ 通常为 $u_0=0$要求：$\epsilon_{\text{const}}\ge0$ ▷ 约束违反容差$x_k\leftarrow x_0$, $u_k\leftarrow u_0$对于 $k=0,\ 1,\ \ldots$ do$r_k\leftarrow u_k-2\delta T_ku_k-\nabla f(x_k+\beta u_k)T_k$ ▷ 无约束更新$w\leftarrow\{\}$, $W\leftarrow\{\}$对于 $i=1,\ \ldots,n_{\text{g}}$ do▷ 检查约束违反，如果 $g_i(x_k)\ \le\epsilon_{\text{const}}$ 则 $w\leftarrow(w,-\alpha g_i(x_k)\ -\epsilon\min\{\nabla g_i(x_k)^{\mathsf{T}}u_k+\alpha g_i(x_k)\ 0\})W\leftarrow(W,\nabla g_i(x_k)^{\mathsf{T}})$▷ 添加违反的约束

end if
end for
$u_{k+1} \leftarrow \operatorname{argmin}_{v\in\mathbb{R}^n} |v - r_k|^2$ s.t. $Wv \geq w$ ▷求解（8）▷ 更新位置▷ 更新速度
$x_k \leftarrow x_k + T_k u_{k+1}$
$u_k \leftarrow u_{k+1}$
end for

附录 C 数值实验的更多细节

我们将 (8) 和 (12) 应用于 (14)，并首先定义约束函数 g as$g(x, \bar{x}) := (g_1(x, \bar{x})\ g_2(x, \bar{x}))$，其中 $g_1(x, \bar{x}) := \bar{x} + x$，且 $g_2(x, \bar{x}) := \bar{x} - x$。决策变量 $(x, \bar{x})$ 将用迭代点 $x_k \in \mathbb{R}^n$，$\bar{x}_k \in \mathbb{R}^n$ 表示，相应的速度记为 $u_k \in \mathbb{R}^n$, $\bar{u}_k \in \mathbb{R}^n$，其中 k 表示迭代次数。因此，用于确定速度 $(u_{k+1}, \bar{u}_{k+1})$ 的 (8) 中的优化问题可表示为

$$
\begin{aligned}
(u_{k+1}, \bar{u}_{k+1}) = \underset{(v,\bar{v})\in\mathbb{R}^{2n}}{\operatorname{argmin}} \ & \frac{1}{2}|v - r_k|^2 + \frac{1}{2}|\bar{v} - \bar{r}_k|^2 \quad \text{s.t.} \\
& \bar{v}_i + v_i + \tilde{g}_{1i} \geq 0, \quad \forall i \in I_{1k}, \quad \bar{v}_j - v_j + \tilde{g}_{2j} \geq 0, \quad \forall j \in I_{2k}, \\
& -\sum_{i=1}^{n} w_l \bar{v}_l + \tilde{g}_3 \geq 0,
\end{aligned}
\tag{C4}
$$

其中，只有当 $\sum_{i=1}^{n} (\bar{x}_{ki})_\Delta^p \geq \nu$ 成立时，才会包含最后一个约束； I_{ik} 表示 g_i 中在迭代次数 k时处于活跃状态的约束集合，即，

$$
I_{1k} := \{i \in \mathbb{Z} \mid g_{1i}(x_k, \bar{x}_k) \leq 0\}, \quad I_{2k} := \{i \in \mathbb{Z} \mid g_{2i}(x_k, \bar{x}_k) \leq 0\}.
$$

变量 $\tilde{g}_1$、 $\tilde{g}_2$、 $\tilde{g}_3$ 和 w 定义如下： $\tilde{g}_1 := \alpha g_1(x_k, \bar{x}_k)$， $\tilde{g}_2 :=\alpha g_2(x_k, \bar{x}_k)$， $\tilde{g}_3 := \alpha(\nu - \sum_{i=1}^{n} (\bar{x}_{ki})_\Delta^p)$，以及 $w_i := \mathrm{d}(x)_\Delta^p / \mathrm{d}x|_{x=\bar{x}_{ki}}$。为简化表述，我们在推导 (C4) 时进一步设定了常数 $\epsilon = 0$。此外，$r_k \in \mathbb{R}^n$ 和 $\bar{r}_k \in \mathbb{R}^n$ 定义为

$$
r_k := u_k - 2\delta T u_k - A^\mathsf{T}(A(x_k + \beta u_k) - b)T, \qquad \bar{r}_k := \bar{u}_k - 2\delta T \bar{u}_k,
$$

其中 $\delta > 0$和 $\beta \geq 0$是阻尼参数，而 $T > 0$ 表示步长。事实上，式（12）中的优化与式（C4）具有相同的形式，只是 $\tilde{g}_1$、 $\tilde{g}_2$、和 $\tilde{g}_3$ 的定义略有不同，并且所有约束始终处于活跃状态；这尤其意味着 $I_{1k} = \{1, \ldots, n\}$ 和 $I_{2k} = \{1, \ldots, n\}$。在这两种情况下，我们都应用¯以下变量替换（$v$、 $\bar{v}$） $\rightarrow$ （ξ、 ξ），

$$
v = \xi - \bar{\xi} - \frac{\tilde{g}_1 - \tilde{g}_2}{2}, \qquad \bar{v} = \xi + \bar{\xi} - \frac{\tilde{g}_1 + \tilde{g}_2}{2},
$$

它将式（C4）转换为投影到加权单纯形上。投影到加权单纯形有闭式解，其形式为

$$\underset{(\xi,\bar{\xi})\in\mathbb{R}^{2n}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2}|\xi - q_1|^2 + \frac{1}{2}|\bar{\xi} - q_2|^2 \quad \text{s.t.} \tag{C5}$$
$$\xi_i \geq 0,\ \forall i \in I_{1k}, \quad \bar{\xi}_j \geq 0,\ \forall j \in I_{2k}, \quad \sum_{i=1}^{n} w_i\xi_i + \sum_{i=1}^{n} w_i\bar{\xi}_i \leq \bar{\nu},$$

其中，只有在 $\sum_{i=1}^{n}(\bar{x}_{ki})_{\Delta}^{p} \geq \nu$ 时，最后一个约束才会起作用；而 q_1、q_2 和 $\bar{\nu}$ 则由变量替换得到。权重 w_i 定义为 $\mathrm{d}(x)_{\Delta}^{p}/\mathrm{d}x$，因此根据 $(\cdot)_{\Delta}^{p}$ 的构造，它们均为非负数。(C5) 的闭式解总结如下方的算法 2。该解的关键在于，可以借助一个对偶乘子将约束$\sum_{i=1}^{n} w_i\xi_i + \sum_{i=1}^{n} w_i\bar{\xi}_i \leq \bar{\nu}$纳入目标函数；此时，所得的最小化问题对应于对每个 $i \in I_{1k}$ 和 $i \in I_{2k}$ 在 $\mathbb{R}_{\geq 0}$ 上进行简单投影。最优乘子通过一种基于排序操作的迭代过程计算。因此，算法 2 的最坏情况复杂度为 $\mathcal{O}(n\log(n))$。

用于求解（8）和（12）中最小化问题的算法总结于算法3 和算法4中。

算法 2 投影到加权单纯形：
$\operatorname{argmin}_{\xi\in\mathbb{R}^n} |\xi - q|^2$ s.t. $\xi_i \geq 0,\ \forall i \in I,\ w^{\mathsf{T}}\xi \leq \bar{\nu}$

要求： $q \in \mathbb{R}^n$、索引集 I、权重 $w \in \mathbb{R}^n$ 和上界 $\bar{\nu} \in \mathbb{R}$
要求： $w \geq 0$ 和 $\bar{\nu} \geq 0$
$\xi_i \leftarrow \begin{cases} 0, & \text{如果 } i \in I \text{ 和 } q_i < 0, \\ q_i, & \text{否则。} \end{cases}$ ▷ 假设约束 $w^{\mathsf{T}}\xi \leq \bar{\nu}$ 未活跃
如果 $w^{\mathsf{T}}\xi > \bar{\nu}$ **则** ▷ 约束 $w^{\mathsf{T}}\xi \leq \bar{\nu}$ 处于活跃状态
$q_{\mathrm{s}}/w_{\mathrm{s}} \leftarrow$ 排序（$\{q_i/w_i\}_{i\in I}$，降序） ▷排序，使得 $q_{\mathrm{s}1}/w_{\mathrm{s}1} \geq q_{\mathrm{s}2}/w_{\mathrm{s}2} \geq \ldots$
$m \leftarrow 1$ ▷ 为 $w^{\mathsf{T}}\xi \leq \bar{\nu}$计算乘子 λ
当 $m \leq |I|$ **时执行**
如果 $\sum_{i\notin I} w_i q_i + \sum_{j<m} w_{\mathrm{s}j} q_{\mathrm{s}j} - (\sum_{i\notin I} w_i^2 + \sum_{j<m} w_{\mathrm{s}j}^2) q_{\mathrm{s}m}/w_{\mathrm{s}m} > \bar{\nu}$，**则**
跳出
结束如果
$m \leftarrow m + 1$
结束循环
$\lambda \leftarrow (\sum_{i\notin I} w_i q_i + \sum_{j<m} w_{\mathrm{s}j} q_{\mathrm{s}j} - \bar{\nu})/(\sum_{i\notin I} w_i^2 + \sum_{j<m} w_{\mathrm{s}j}^2)$
$\xi \leftarrow q - w\lambda$ ▷ 给定 λ，对 $\mathbb{R}_{\geq 0}$ 中的每个 $i \in I$执行投影
$\xi_i \leftarrow 0$ 如果 $i \in I$ 且 $\xi_i < 0$
结束条件判断
返回 ξ

算法3 算法（8）应用于（13）。

要求： 阻尼参数 $\beta_k \geq 0, \delta_k > 0$；步长 T_k； $L = |A|^2$； $\alpha_k > 0$

要求： 初始条件 $x_0 \in \mathbb{R}^n$；近似参数 $\Delta > 0$

$x_k \leftarrow x_0$， $\bar{x}_k \leftarrow \mathsf{abs}(x_0)$ $u_k \leftarrow 0$， $\bar{u}_k \leftarrow 0$ ▷ 也可以采用不同的初始化

对于 $k = 0, 1, \cdots$ **执行**

$r_k \leftarrow u_k - 2\delta_k T_k u_k - T_k A^{\mathsf{T}}(A(x_k + \beta_k u_k) - b)/L$ ▷ 无约束更新

$\bar{r}_k \leftarrow \bar{u}_k - 2\delta T_k \bar{u}_k$

$\tilde{g}_1 \leftarrow \alpha_k(x_k + \bar{x}_k)$ ▷评估约束

$\tilde{g}_2 \leftarrow \alpha_k(-x_k + \bar{x}_k)$

$\tilde{g}_3 \leftarrow \alpha_k(\nu - \sum_{i=1}^n (\bar{x}_{ki})_\Delta^p)$

如果 $\tilde{g}_3 > 0$ **，则** ▷ 计算 ℓ^p 约束的梯度

$w \leftarrow 0$

else

$w_i \leftarrow \mathsf{d}(x)_\Delta^p / \mathsf{d}x|_{x=\bar{x}_{ki}}$， $i = 1,\ 2,\ \ldots\ldots,\ n,$

结束如果

$q \leftarrow (\tilde{g}_1/2 + (r_k + \bar{r}_k)/2,\ \ \tilde{g}_2/2 + (-r_k + \bar{r}_k)/2)$ ▷ 变量替换

$\bar{\nu} \leftarrow \tilde{g}_3 + w^{\mathsf{T}}(\tilde{g}_1 + \tilde{g}_2)/2$

$I \leftarrow \{i \in \mathbb{Z} : (\tilde{g}_1, \tilde{g}_2)_i \leq 0\}$ ▷活跃约束

$(\xi, \bar{\xi}) \leftarrow$ 加权单纯形投影$(q,\ I,\ (w,\ w)\ \bar{\nu})$ ▷ 应用算法 2

$u_k \leftarrow \xi - \bar{\xi} - (\tilde{g}_1 - \tilde{g}_2)/2$ ▷ 更新速度

$\bar{u}_k \leftarrow \xi + \bar{\xi} - (\tilde{g}_1 + \tilde{g}_2)/2$

$x_k \leftarrow x_k + T_k u_k$ ▷ 更新位置

$\bar{x}_k \leftarrow \bar{x}_k + T_k \bar{u}_k$

结束循环

算法4 算法（12）应用于（13）。

要求： 阻尼参数 $\beta_k \geq 0$, $\delta_k > 0$; 步长 T_k; $L = |A|^2$; $\alpha_k > 0$

要求： 初始条件 $x_0 \in \mathbb{R}^n$; 近似参数 $\Delta > 0$

$x_k \leftarrow x_0$, $\bar{x}_k \leftarrow \mathsf{abs}(x_0)$ $u_k \leftarrow 0$, $\bar{u}_k \leftarrow 0$ ▷ 也可以采用不同的初始化

对于 $k = 0, 1, \cdots$ **执行**

$r_k \leftarrow u_k - 2\delta_k T_k u_k - T_k A^{\mathsf{T}}(A(x_k + \beta_k u_k) - b)/L$ ▷ 无约束更新

$\bar{r}_k \leftarrow \bar{u}_k - 2\delta T_k \bar{u}_k$

$w_i \leftarrow \mathsf{d}(x)^p_\Delta / \mathsf{d}x|_{x=\bar{x}_{ki}+\beta_k \bar{u}_{ki}}, \quad i = 1, 2, \ldots, n,$ ▷ ℓ^p 约束的梯度

$g_1 \leftarrow x_k + \bar{x}_k$ ▷ 在 x_k 处评估约束

$g_2 \leftarrow -x_k + \bar{x}_k$

$g_3 \leftarrow \nu - \sum_{i=1}^n (\bar{x}_{ki})^p_\Delta$

$g_{y1} \leftarrow x_k + \beta_k u_k + \bar{x}_k + \beta_k \bar{u}_k$ ▷ 在 $x_k + \beta_k u_k$ 处评估约束

$g_{y2} \leftarrow -(x_k + \beta_k u_k) + \bar{x}_k + \beta_k \bar{u}_k$

$g_{y3} \leftarrow \nu - \sum_{i=1}^n (\bar{x}_{ki} + \beta_k \bar{u}_{ki})^p_\Delta$

$\tilde{g}_1 \leftarrow \alpha_k g_1 + (g_{y1} - g_1 - \beta_k(u_k + \bar{u}_k))/T_k$ ▷ 约束右端（12）

$\tilde{g}_2 \leftarrow \alpha_k g_2 + (g_{y2} - g_2 - \beta_k(-u_k + \bar{u}_k))/T_k$

$\tilde{g}_3 \leftarrow \alpha_k g_3 + (g_{y3} - g_3 + \beta_k w^{\mathsf{T}} \bar{u}_k)/T_k$

$q \leftarrow (\tilde{g}_1/2 + (r_k + \bar{r}_k)/2, \quad \tilde{g}_2/2 + (-r_k + \bar{r}_k)/2)$ ▷ 变量替换

$\bar{\nu} \leftarrow \tilde{g}_3 + w^{\mathsf{T}}(\tilde{g}_1 + \tilde{g}_2)/2$

$(\xi, \bar{\xi}) \leftarrow$ 加权单纯形投影$(q, \{1, \ldots, 2n\}, (w, w)\ \bar{\nu})$ ▷ 应用算法 2

$u_k \leftarrow \xi - \bar{\xi} - (\tilde{g}_1 - \tilde{g}_2)/2$ ▷ 更新速度

$\bar{u}_k \leftarrow \xi + \bar{\xi} - (\tilde{g}_1 + \tilde{g}_2)/2$

$x_k \leftarrow x_k + T_k u_k$ ▷ 更新位置

$\bar{x}_k \leftarrow \bar{x}_k + T_k \bar{u}_k$

结束循环

附录D 定理的证明2

根据第 3 节对光滑运动的分析，我们推断出 $\gamma_i(x(t)\ u(t)) \geq 0$ 对所有满足 t 的 $i \in I_{x(t)}$（几乎处处）成立。由 Gr¨onwall 不等式可知，这意味着 $g(x(t)) \geq 0$ 对所有$t \geq 0$ 均成立，因此 $x(t) \in C$ 对所有 $t \in [0, \infty$均成立。

我们考虑以下李雅普诺夫函数

$$V(x,u) = \frac{1}{2}|u|^2 + f(x), \tag{D6}$$

根据假设，该函数有下界。我们研究 $V(x(t)\ u(t))$ 沿着（7）的轨迹如何演化。对应于 $V(x(t)\ u(t))$ 的微分测度可表示为 [33]:

$$\begin{aligned}\mathrm{d}V &= \frac{1}{2}(u^+ + u^-)^\mathsf{T}\mathrm{d}u + \nabla f(x)^\mathsf{T} u\ \mathrm{d}t \\ &= -2\delta|u|^2\ \mathrm{d}t - (\nabla f(x+\beta u) - \nabla f(x))^\mathsf{T} u\ \mathrm{d}t + \sum_{i\in I_x}\left(\frac{1}{2}(\gamma_i^+ + \gamma_i^-) - \alpha g_i\right)\mathrm{d}\lambda_i.\end{aligned}$$

第二行是通过将 $\mathrm{d}u$ 替换为（7），并利用勒贝格测度仅捕捉光滑运动这一事实得到的，例如，$(u^+)^\mathsf{T} u\ \mathrm{d}t = (u^-)^\mathsf{T} u\ \mathrm{d}t = |u|^2\mathrm{d}t$，然后加上并减去 $\alpha g_i \mathrm{d}\lambda_i$。根据假设 $2\delta - \beta > 0$（或者等价地，由于 f 的凸性），我们可以将 $\mathrm{d}V$ 上界估计为

$$\mathrm{d}V \leq -c_2|u|^2\mathrm{d}t + \sum_{i\in I_x}\left(\frac{1}{2}(\gamma_i^+ + \gamma_i^-) - \alpha g_i\right)\mathrm{d}\lambda_i,$$

其中，$c_2 > 0$ 为常数。该表达式第二部分中的被加数可改写为

$$-\alpha g_i \mathrm{d}\lambda_i + \frac{1}{2}(\gamma_i^+ + \epsilon\gamma_i^-)\mathrm{d}\lambda_i + \frac{1-\epsilon}{2}(\gamma_i^-)\mathrm{d}\lambda_i.$$

事实上，$g_i(x(t)) = 0$ 对所有 $i \in I_{x(t)}$ ($x(t)$ 都保持可行）意味着第一项为零。第二项由于（7）中的互补条件而为零。第三项必定非正，因为一方面 $\mathrm{d}\lambda_i \geq 0$（见（7）），另一方面，$\gamma_i^- \leq 0$ 在发生碰撞时，而 $\gamma_i^-\ \mathrm{d}\lambda_i = \gamma_i \mathrm{d}\lambda_i = 0$ 在光滑运动情况下（再次见（7））。因此我们得到

$$\mathrm{d}V \leq -c_2|u|^2\mathrm{d}t, \tag{D7}$$

这意味着，$V(x(t)\ u(t))$ 关于 t 单调递减。

为证明收敛到驻点，我们注意到，由于 $u(t)$ 具有局部有界变差且没有奇异部分（根据假设），因此可以将其分解为一个绝对连续函数和一个分段常数函数 [（勒贝格分解，参见例如第 3 章的 33]）。因此，$\dot{u}(t)$（只要其存在）就是一致局部可积的 [（参见 39]）。结合 u 是平方可积的这一事实（由（D7）以及 V 有下界这一观察可知），我们得出

$u(t) \to 0$ 当 $t \to \infty$ 时，根据 Barbalat 引理的一种变体可得 [（参见 39]）。回顾一下， $x(t)$ 是有界的（C 是紧的），并考虑 $\bar{x}$ 的任意一个聚点。也就是说，存在一个序列 $x(t)$，使得 $t_k \to \infty$ 满足 $x(t_k) \to \bar{x}$。我们任取 $\tau > 0$ 并考虑

$$u(t_k+\tau)^+ - u(t_k)^- = \int_{t_k}^{t_k+\tau} \mathrm{d}u = \int_{t_k}^{t_k+\tau} -2\delta u - \nabla f(x+\beta u)\mathrm{d}t + \sum_{i=1}^{n_\mathrm{g}} \int_{t_k}^{t_k+\tau} \nabla g_i(x)\mathrm{d}\lambda_i,$$

其中我们令 $\mathrm{d}\lambda_i = 0$ whenever $i \notin I_{x(t)}$，以简化记号。前一个表达式在 $k \to \infty$ 时必为零；根据 ∇g_i 和 ∇f 的连续性，这意味着

$$-\nabla f(\bar{x})\tau + \sum_{i=1}^{n_\mathrm{g}} \nabla g_i(\bar{x}) \int_{t_k}^{t_k+\tau} \mathrm{d}\lambda_i \to 0 \tag{D8}$$

当 $k \to \infty$ 时。我们注意到，由于 g 的连续性，存在常数 $k_0 > 0$ 和 $c_{\mathrm{lg}} > 0$，使得对于所有 $k > k_0$ 和所有 $i \notin I_{\bar{x}}$， $g_i(x(t_k)) > c_{\mathrm{lg}}$。根据 $u(t) \to 0$ 这一事实，我们推知，当 k 足够大时，对于所有 $t \in [t_k, t_k+\tau]$ 和 $i \notin I_{\bar{x}}$， $g_i(x(t)) > c_{\mathrm{lg}}/2$。我们引入记号

$$\int_{t_k}^{t_k+\tau} \mathrm{d}\lambda_i := \lambda_k^i \tau,$$

对于所有 $k > 0$ 和所有 $i \in \{1, 2, \ldots, n_\mathrm{g}\}$，由此得出 $\lambda_k^i \geq 0$；并且对于所有足够大的 k，若 $i \notin I_{\bar{x}}$，则 $\lambda_k^i = 0$。

接下来我们论证 λ_k^i 对所有 $i \in \{1, 2, \ldots, n_\mathrm{g}\}$均有界。我们通过反证法进行论证，并考虑序列 $(\lambda_k^1, \ldots, \lambda_k^{n_\mathrm{g}})/|(\lambda_k^1, \ldots, \lambda_k^{n_\mathrm{g}})|$，尽管 $|(\lambda_k^1, \ldots, \lambda_k^{n_\mathrm{g}})| \to \infty$，该序列仍可保证有界。将 (D8) 除以 $|(\lambda_k^1, \ldots, \lambda_k^{n_\mathrm{g}})|$，我们得到

$$\sum_{i=1}^{n_\mathrm{g}} \nabla g_i(\bar{x})\xi_i = 0,$$

其中， ξ 表示 $(\lambda_k^1, \ldots, \lambda_k^{n_\mathrm{g}})/|(\lambda_k^1, \ldots, \lambda_k^{n_\mathrm{g}})|$的一个聚点，该聚点满足$\xi_i \geq 0$、 $\xi_i = 0$ 对所有 $i \notin I_{\bar{x}}$均成立，并且满足 $|\xi| = 1$。然而， $\xi \neq 0$ 这一事实与约束资格条件相矛盾，因为它排除了存在向量 w 使得$w^\mathsf{T}\nabla g_i(\bar{x}) > 0$ 对所有 $i \in I_{\bar{x}}$ 均成立的可能性（这意味着 $\sum_{i=1}^{n_\mathrm{g}} w^\mathsf{T}\nabla g_i(\bar{x})\xi_i > 0$）。这意味着 λ_k^i 对所有 $i \in \{1, 2, \ldots, n_\mathrm{g}\}$均有界。

我们取 $(\bar{\lambda}_k^1, \ldots, \bar{\lambda}_k^{n_\mathrm{g}})$的任意一个聚点，将其记为 $\bar{\lambda}$。对所有 $i \notin I_{\bar{x}}$（互补松弛），并根据（D8）， $-\nabla f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^{n_\mathrm{g}} \nabla g_i(\bar{x})\bar{\lambda}_i = 0$。因此， $\bar{x}$ 和 $\bar{\lambda}$ 满足（1）的 Karush-Kuhn-Tucker 条件，并且 $\bar{x}$ 是平稳的。

本节最后，我们证明孤立局部极小值的渐近稳定性（按 Lyapunov 的意义）。因此，我们任取一个孤立局部极小值 x^*，并注意到函数 $|u|^2/2 + f(x) - f(x^*)$ 在 $(x^*, 0)$ 的某个邻域内是正定的。由 (D7) 可得， x^* 因此按 Lyapunov 的意义是稳定的。我们已证明其具有吸引性（见前文），因此得出 x^* 按 Lyapunov 的意义是渐近稳定的。 □

附录E 定理 3 的证明

i) 重球法 **(**$\alpha = \sqrt{\mu}$**)**:
我们考察函数的演化

$$W(x,u) = \frac{1}{2}|\alpha(x-x^*)+u|^2 + f(x) - f(x^*),$$

沿着轨迹 $(x(t)\ u(t))$。相应的微分测度 $\mathrm{d}W$ 由 [33] 给出:

$$(\alpha(x-x^*) + (u^+ + u^-)/2)^\mathsf{T}(\alpha u\ \mathrm{d}t + \mathrm{d}u) + \nabla f(x)^\mathsf{T} u\ \mathrm{d}t.$$

按照定理 2 证明中的相同步骤，我们得到

$$(u^+ + u^-)/2^\mathsf{T}\mathrm{d}u + \nabla f(x)^\mathsf{T} u\ \mathrm{d}t \le -2\delta|u|^2\ \mathrm{d}t + \sum_{i\in I_x} -\alpha g_i(x)\mathrm{d}\lambda_i.$$

然而，与定理 2不同，我们也允许不可行初始条件，因此项 $-\alpha g_i(x)\mathrm{d}\lambda_i$ 仍然保留。这给出了 $\mathrm{d}W$ 的如下上界:

$$\begin{aligned}\mathrm{d}W \le -(2\delta-\alpha)|u|^2\mathrm{d}t - \alpha(x-x^*)^\mathsf{T}\nabla f(x)\mathrm{d}t + (\alpha^2 - 2\alpha\delta)(x-x^*)^\mathsf{T}u\mathrm{d}t \\ + \sum_{i\in I_x}(\alpha\nabla g_i(x)^\mathsf{T}(x-x^*) - \alpha g_i(x))\mathrm{d}\lambda_i. \quad \text{(E9)}\end{aligned}$$

事实是 f 强凸意味着以下关系成立:

$$-(x-x^*)^\mathsf{T}\nabla f(x) \le -\left(f(x) - f(x^*)\right) - \frac{\mu}{2}|x-x^*|^2.$$

此外， C 的凸性意味着每个 g_i 都是凹函数，因此

$$\nabla g_i(x)^\mathsf{T}(x^*-x) \ge g_i(x^*) - g_i(x) \ge -g_i(x),$$

其中我们用到了以下事实： x^* 在最后一个不等式中是可行的。这说明（E9）中的被加项非正，因为 $\mathrm{d}\lambda_i \ge 0$。因此，经过一些简单的推导，我们得到 $\mathrm{d}W$的如下上界:

$$\mathrm{d}W \le -\alpha W\mathrm{d}t - (2\delta - 3\alpha/2)|u|^2\mathrm{d}t \le -\alpha W\mathrm{d}t.$$

应用 Gr¨onwall 不等式后，即可得到所需的 $f(x(t)) - f(x^*)$ 上界。

下界通过扰动分析得到，所用论证与 Muehlebach 和 Jordan [26] 类似。我们定义

$$f^*(t) := \min_{\xi\in\mathbb{R}^n} f(\xi), \quad \text{s.t.} \quad g(\xi) \ge \min\{0, g(x(0))\}e^{-\alpha t},$$

其形式与（1）相同，但约束的右端项经过了修改。轨迹 $x(t)$ 满足 $g(x(t)) \geq \min\{0, g(x(0))\}e^{-\alpha t}$，因此是上述最小化问题的一个可行候选解，这意味着 $f(x(t)) \geq f^*(t)$。显然，最小值可以达到，因为 f 有下界，$f(x) \to \infty$ 对于 $|x| \to \infty$ 成立，并且修改后的可行点集合是闭集。满足（1）的 Karush-Kuhn-Tucker 条件的乘子 λ^* 刻画了代价函数对约束扰动的敏感性。这意味着 $-\lambda^*$ 保证满足以下不等式 [，例如参见第 40 条，第 277] 页：

$$f^*(t) - f^* \geq \min\{0, g(x(0))\}^\mathsf{T}\lambda^* e^{-\alpha t},$$

结合 $f(x(t)) \geq f^*(t)$，可得所需的下界。

***ii*）Nesterov -** 常参数（$\alpha = \sqrt{\mu} - \mu/2$）：
我们再次考虑函数的演化

$$W(x,u) = \frac{1}{2}|a(x-x^*) + u|^2 + f(x),$$

沿着轨迹（$x(t)$ $u(t)$），其中 $a := \alpha$。相应的微分测度为

$$\mathrm{d}W = (a(x-x^*) + (u^+ + u^-)/2)^\mathsf{T}(au\mathrm{d}t + \mathrm{d}u) + \nabla f(x)^\mathsf{T} u\mathrm{d}t.$$

根据定理的证明 2 我们得到

$$\begin{aligned}(u^+ + u^-)/2^\mathsf{T}\mathrm{d}u + \nabla f(x)u\mathrm{d}t \leq -(2\delta + \mu\beta)|u|^2\mathrm{d}t \\ + u^\mathsf{T}(\nabla f(x+\beta u) - \nabla f(x))\mathrm{d}t + \sum_{i\in I_x} -\alpha g_i \mathrm{d}\lambda_i. \quad \text{(E10)}\end{aligned}$$

加入其余项后，可得关于 $\mathrm{d}W$ 的以下上界：

$$\begin{aligned}-(2\delta - a)|u|^2\mathrm{d}t + (a^2 - 2\delta a)(x-x^*)^\mathsf{T}u\mathrm{d}t - (\nabla f(y) - \nabla f(x))^\mathsf{T}u\mathrm{d}t - a(x-x^*)^\mathsf{T}\nabla f(y)\mathrm{d}t \\ + \sum_{i\in I_x}(a\nabla g_i(x)^\mathsf{T}(x-x^*) - \alpha g_i)\mathrm{d}\lambda_i, \quad \text{(E11)}\end{aligned}$$

其中我们引入变量 $y := x + \beta u$ 以简化记号。f 是强凸的这一事实意味着以下结论成立：

$$\begin{aligned}-(x-x^*)^\mathsf{T}\nabla f(y) \leq -(f(x) - f(x^*)) - \beta(\nabla f(x) - \nabla f(y))^\mathsf{T}u - \mu\beta^2|u|^2 \\ - \mu\beta u^\mathsf{T}(x-x^*) - \frac{\mu}{2}|x-x^*|^2. \quad \text{(E12)}\end{aligned}$$

此外，C 是凸的，这意味着每个 g_i 都是凹的。因此，

$$\nabla g_i(x)^\mathsf{T}(x^* - x) \geq g_i(x^*) - g_i(x) \geq -g_i(x),$$

其中我们在最后一个不等式中使用了 x^* 是可行的这一事实。(E11) 中的被加项因此可以被上界为

$$\big(a\nabla g_i(x)^\mathsf{T}(x-x^*) - \alpha g_i(x)\big)\,\mathrm{d}\lambda_i \le (a-\alpha)g_i(x)\mathrm{d}\lambda_i,$$

根据定义 $\mathrm{d}\lambda_i \ge 0$。上界消失，因为 $a=\alpha$。结合式（E12），经过一些初等变形，可得 $\mathrm{d}W$的如下上界:

$$\mathrm{d}W \le -aW\mathrm{d}t - (2\delta - 3a/2 + \mu\beta)|u|^2\mathrm{d}t - \frac{1}{2}(a\mu - a^3)|x-x^*|^2\mathrm{d}t \\ + (2a^2 - 2\delta a - a\mu\beta)(x-x^*)^\mathsf{T}u\mathrm{d}t,$$

这里我们用到了 $1-\beta a \ge 0$。注意，项 $2a^2-2\delta a - a\mu\beta$消失了，$a(\mu-a^2) \ge 0$，且对于所有 $\mu\in[0,1]$，$2\delta - 3a/2 + \mu\beta \ge 0$。因此我们得到 $\mathrm{d}W \le -aW\mathrm{d}t$，由 Gr¨onwall 不等式可知，这意味着所需结果成立。

iii) Nesterov - 变化参数（$\alpha = 2/(t+3)$）：
证明步骤相同。我们考虑函数沿下列轨迹的演化

$$\tilde{W}(x,u,t) = \frac{1}{2}|\tilde{a}(t)(x-x^*) + u|^2 + f(x),$$

沿着轨迹（$x(t)$ $u(t)$），其中我们选择 $\tilde{a}(t) := \alpha(t) = 2/(t+3)$。微分测度 $\mathrm{d}W$ 为

$$\mathrm{d}\tilde{W} = (\tilde{a}(x-x^*) + (u^+ + u^-)/2)^\mathsf{T}(\tilde{a}u\mathrm{d}t + \dot{\tilde{a}}(x-x^*)\mathrm{d}t + \mathrm{d}u) + \nabla f(x)^\mathsf{T}u\mathrm{d}t,$$

其中根据链式法则，会涉及 $\tilde{a}$ 对 t 的导数。这会产生另外两个如下类型的二次项

$$\tilde{a}\dot{\tilde{a}}|x-x^*|^2\mathrm{d}t \quad \text{and} \quad \dot{\tilde{a}}u^\mathsf{T}(x-x^*)\mathrm{d}t.$$

因此，按照变体 ii) 中的相同步骤（见上一节），我们得到

$$\mathrm{d}\tilde{W} \le -\tilde{a}\tilde{W}\mathrm{d}t - (2\delta - 3\tilde{a}/2 + \mu\beta)|u|^2\mathrm{d}t - \frac{1}{2}(\tilde{a}\mu - \tilde{a}^3 - 2\tilde{a}\dot{\tilde{a}})|x-x^*|^2\mathrm{d}t \\ + (2\tilde{a}^2 - 2\delta\tilde{a} - \tilde{a}\mu\beta + \dot{\tilde{a}})(x-x^*)^\mathsf{T}u\mathrm{d}t.$$

注意到 $2\tilde{a}^2 - 2\delta\tilde{a} + \dot{\tilde{a}}$ 消失了（事实上，$\alpha = \tilde{a}$ 正是有意如此构造的）。$2\delta - 3\tilde{a}/2$ 和 $\tilde{a}^3 - 2\tilde{a}\dot{\tilde{a}}$ 也同样如此，这使得上述不等式简化为

$$\mathrm{d}\tilde{W} \le -\tilde{a}\tilde{W}\mathrm{d}t - \mu\beta|u|^2\mathrm{d}t - \frac{1}{2}\tilde{a}\mu|x-x^*|^2\mathrm{d}t - \tilde{a}\mu\beta(x-x^*)^\mathsf{T}u\mathrm{d}t.$$

对交叉项 $(x-x^*)^\mathsf{T}u$ 应用杨氏不等式可得 $\mathrm{d}\,\tilde{W} \le -\tilde{a}\tilde{W}\mathrm{d}t$，其中任意 $\mu \in [0,1]$ 均成立。最后，我们应用 Gr¨onwall 不等式，得到

$$\tilde{W}(x(t),u(t),t) \le \tilde{W}(x(0),u(0),0)\exp\left(-\int_0^t \tilde{a}(s)\mathrm{d}s\right) = \tilde{W}(x(0),u(0),0)\frac{9}{(t+3)^2},$$

并得出证明。 □

附录 F 收敛性分析（8）

我们仅考虑 $\epsilon = 0$ 的情形，此时可以将算法改写如下：

$$\begin{aligned} u_{k+1} &= \operatorname*{argmin}_{v\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}|v - u_k + 2\delta u_k T_k + \nabla f(x_k+\beta u_k)T_k|^2 \ \text{ s.t. } \ \gamma_i(x_k,v)\ge 0, \ \ i\in I_{x_k}, \\ x_{k+1} &= x_k + T_k u_{k+1}. \end{aligned} \tag{F13}$$

我们注意到，只要梯度扰动具有零均值且二阶矩有界，以下论证仍适用于随机梯度。

我们先给出以下三个引理：

引理 8. 设定理 4 的假设成立，并设 $\mathit{dist}(x,C)$ 表示 $x\in\mathbb{R}^n$ 到集合 C的距离，即 $\mathit{dist}(x,C) = \min_{y\in C}|y-x|$。则迭代序列$x_k$ 有界，$\mathit{dist}(x_k,C)\to 0$，并且存在常数 $c_g>0$ 和 $k_0>0$ 使得

$$g_i(x_k) \ge -c_g T_k,$$

对所有 $k\ge k_0$ 和所有 $i\in\{1,\dots,n_g\}$均成立。

证明。 我们先考虑第一个约束 g_1，因为 $\min\{g_1(x)\ 0\}$ 具有紧水平集。我们区分以下两种情况。

i) $g_1(x_k) < 0$：由光滑性可知，$g_1(x_{k+1}) \ge g_1(x_k) + T_k\nabla g_1(x_k)^\mathsf{T}u_{k+1} - T_k^2 L_{\mathrm{g}1}|u_{k+1}|^2/2$，其中 $L_{\mathrm{g}1}$ 是 g_1的光滑常数。由于 $g_1(x_k) < 0$，我们有 $1\in I_{x_k}$ 且 $\nabla g_1(x_k)^\mathsf{T}u_{k+1}T_k \ge -\alpha T_k g_1(x_k)$。这意味着

$$g_1(x_{k+1}) \ge g_1(x_k)(1-\alpha T_k) - T_k^2 L_{\mathrm{g}1}c_{\mathrm{u}}^2/2,$$

其中我们使用了关于 u_{k+1}的上界 c_{u}。根据序列 $T_k = T_0/k^s$ 的性质，这意味着 $g_1(x_{k+1})$ 有下界，并且

$$g_1(x_j) \ge -c_{\mathrm{g}1}T_j,$$

对于某个常数 $c_{\mathrm{g}1}$ 和 $j = k+1,\ k+2$、.....，只要 $1\in I_{x_j}$，[例如参见 41、第 2 章、引理 4 以及引理 5]。

ii) $g_1(x_k)\ge 0$ 和 $g_1(x_{k+1}) < 0$（约束 g_1 在 $k+1$处变为活跃）。由于g_1 的光滑性以及 u_{k+1} 的有界性，我们再次得到 $g_1(x_{k+1}) \ge \nabla g_1(x_k)^\mathsf{T}T_k u_{k+1} - T_k^2 L_{\mathrm{g}1}c_{\mathrm{u}}^2/2$。由于 $g_1(x_k)\ge 0$，我们得出结论： x_k

有界（$\min\{g_1(x)\ 0\}$ 具有紧水平集），这意味着对于某个常数 $\bar{c}_{\mathrm{g}1}>0$，$|\nabla g_1(x_k)|\le \bar{c}_{\mathrm{g}1}$。因此，我们得出结论

$$g_1(x_{k+1})\ge -T_k(\bar{c}_{\mathrm{g}1}c_{\mathrm{u}}+T_kL_{\mathrm{g}1}c_{\mathrm{u}}^2/2).$$

结合这两种情况可知，对于所有 $k\ge 0$，$g_1(x_k)$都有下界，这意味着 x_k 有界。现在，我们可以对其余所有约束采用类似的推理，从而得到：对于某个常数 $c_{\mathrm{g}}>0$，所有 $i=1,2,\dots,n_{\mathrm{g}}$以及足够大的所有 k，均有 $\mathrm{dist}(x_k,C)\to 0$ 且 $g_i(x_k)\ge -c_{\mathrm{g}}T_k$。□

引理 9. 设 C 为一个紧集。那么，存在一个常数 c_λ，使得对于所有满足 $x\in C$ 的 x，以及满足 $\lambda_i\ge 0\ \forall i\in I_x$ 和 $\lambda_i=0\ \forall i\notin I_x$的 $\lambda\in\mathbb{R}^{n_g}$，

$$|\sum_{i=1}^{n_g}\nabla g_i(x)\lambda_i|\ge c_\lambda|\lambda|.$$

证明。</style>当 $\lambda=0$时，不等式成立。因此，我们考虑 $\lambda\neq 0$ 的情形，并且不失一般性地假设 $|\lambda|=1$。我们用反证法，假设存在两个收敛序列 λ^j 和 x_j，使得对于所有 $i\in I_{x_j}$，均有 $|\lambda^j|=1,\lambda_i^j\ge 0$；对于所有 $i\notin I_{x_j}$，均有 $\lambda_i^j=0$；且 $x_j\in C$，并满足 $\sum_{i=1}^{n_{\mathrm{g}}}\nabla g_i(x_j)\lambda_i^j\to 0$。将 x_j 的极限点记为 x，将 λ^j 的极限点记为 λ。根据约束资格条件，存在一个向量 $w\in\mathbb{R}^n$，使得对于所有 $i\in I_x$，均有 $w^{\mathsf{T}}\nabla g_i(x)\lambda_i>0$。注意到，对于足够大的 j，$g_i(x)>0$ 意味着 $g_i(x_j)>0$。这表明 $I_{x_j}\subset I_x$，因此

$$\sum_{i\in I_{x_j}} w^{\mathsf{T}}\nabla g_i(x)\lambda_i>c_1$$

对所有充分大的 j 和充分小的 $c_1>0$均成立。然而，根据 ∇g 的连续性，我们有

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{n_{\mathrm{g}}} w^{\mathsf{T}}\nabla g_i(x_j)\lambda_i^j=\sum_{i\in I_{x_j}} w^{\mathsf{T}}\nabla g_i(x)\lambda_i+\sum_{i\in I_{x_j}} w^{\mathsf{T}}\nabla g_i(x)(\lambda_i^j-\lambda_i)\\ +\sum_{i\in I_{x_j}} w^{\mathsf{T}}(\nabla g_i(x_j)-\nabla g_i(x))\lambda_i^j>c_1/2,\end{aligned}$$

对所有充分大的 j均成立，这就产生了矛盾。□

引理 10. 假设定理 4 的条件成立。若 $x_{k(j)}\to\bar{x}\in C,\quad u_{k(j)}\to 0,$ 且 $R_{k(j)}/T_{k(j)}\to R$对于子序列 $k(j)\ j=1,\ 2,\dots,$ 则 $\bar{x}$且 R 满足

$$-\nabla f(\bar{x})+\bar{R}=0,\quad -\bar{R}\in N_{V_\alpha(\bar{x})}(0).$$

证明。由 g_i 的连续性可得，$g_i(\bar{x})>0$ 意味着，对于所有足够大的 j 以及所有 $i\in\{1,2,\dots,n_{\mathrm{g}}\}$，$g_i(x_{k(j)})>0$。这意味着，对于所有 j

足够大。我们将 $V_\alpha(x)$稍作修改，定义如下

$$\tilde{V}_\alpha(x) := \{u \in \mathbb{R}^n \mid \nabla g_i(x)^\mathsf{T} u \geq -\alpha g_i(x), \quad \forall i \in I_{\bar{x}}\},$$

˜这确保当 j 足够大时， $V_\alpha(x_{k(j)}) \supset V_\alpha(x_{k(j)})$。因此，相应的法锥满足

$$N_{V_\alpha(x_{k(j)})}(u) \subset N_{\tilde{V}_\alpha(x_{k(j)})}(u),$$

˜对所有 $u \in V_\alpha(x_{k(j)})$ ，根据算法（8）的更新规则可得，

$$-\frac{R_{k(j)}}{T_{k(j)}} \in N_{V_\alpha(x_{k(j)})}(u_{k(j)+1}) \subset N_{\tilde{V}_\alpha(x_{k(j)})}(u_{k(j)+1}),$$

这里我们用到了法锥是锥这一事实。现在我们证明，这¯意味着 $-R \in N_{\tilde{V}_\alpha(\bar{x})}(0)$，并通过反证法进行论证。这意味着存在一个 $\hat{u} \in \tilde{V}_\alpha(\bar{x})$，使得对于一个较小的 $c_1 > 0$， $-\bar{R}^\mathsf{T}\hat{u} > c_1$。根据约束资格条件，我们˜推断存在一个 $w \in \mathbb{R}^n$ 和一个 $\varepsilon > 0$，使得对于所有j 充分大的情况，$\hat{u} + \varepsilon w \in V_\alpha(x_{k(j)})$，且 $-\bar{R}^\mathsf{T}(\hat{u} + \varepsilon w) > c_1/2$。然而，这导致矛盾，因为

$$0 \geq -\frac{R_{k(j)}}{T_{k(j)}}^\mathsf{T} (\hat{u} + \varepsilon w - u_{k(j)+1}) =$$
$$\underbrace{-\bar{R}^\mathsf{T}(\hat{u} + \varepsilon w)}_{>c_1/2>0} + \underbrace{\bar{R}^\mathsf{T} u_{k(j)+1} - \left(\frac{R_{k(j)}}{T_{k(j)}} - \bar{R}\right)^\mathsf{T} (\hat{u} + \varepsilon w - u_{k(j)+1})}_{\to 0}.$$

¯这表明 $-R \in N_{\tilde{V}_\alpha(\bar{x})}(0)$，所需结果由以下事实可得：˜$V_\alpha(\bar{x}) = V_\alpha(\bar{x})$。

□

下面的命题将基于把更新（8）分为以下两个步骤

$$\begin{aligned} \bar{x}_k &= x_k, & x_{k+1} &= \bar{x}_k + u_{k+1} T_k, \\ \bar{u}_k &= u_k - T_k f_\mathrm{d}(x_k, u_k) + R_k, & u_{k+1} &= \bar{u}_k - T_k \nabla f(\bar{x}_k), \end{aligned} \tag{F14}$$

其中， $f_\mathrm{d}(x_k, u_k) := 2\delta u_k + \nabla f(x_k + \beta u_k) - \nabla f(x_k)$包含耗散项。第一步将 (x_k, u_k) 映射为 $(\bar{x}_k, \bar{u}_k)$，即使用耗散项和约束力 R_k 更新速度；而第二步将 $(\bar{x}_k, \bar{u}_k)$ 映射为 (x_{k+1}, u_{k+1})，即采用辛欧拉离散化来捕捉底层动力学的守恒部分。下文将利用第二步是辛映射这一事实。更多详细信息请参阅 [9] 和 [7] 。

现在我们证明以下引理，它将成为离散时间收敛性证明的核心。

引理 11. 假设定理 4 的条件成立。那么，存在一个函数$V_k(x,u)$，它有下界（关于 k一致），使得

$$V_{k+1}(x_{k+1},u_{k+1})-V_k(x_k,u_k)\le -c_{V1}T_k|u_k|^2-c_{V2}|R_k-T_k\nabla f(x_k)|^2-c_{V3}T_k|R_k|^2 \\ +c_{V4}T_k^2|u_{k+1}|+c_{V5}T_k^3-\alpha\sum_{i\in I_{x_k}}\lambda_k^i g_i(x_k),$$

对所有足够大的 k，其中 c_{V1}、c_{V2}、c_{V3}、c_{V4}、$c_{V5}>0$ 为常数。

证明。由引理 8 可推知，x_k 有界，因此包含在一个紧¯集内，我们将其记为 C。不失一般性，假设 f 在¯上解析 C（注意，根据 Stone-Weierstrass 定理，我们可以找到一个多项式，以任意精度逼近 f 和 ∇f，详见 [9]）。现在我们可以应用 Muehlebach 和 Jordan [的命题 9，该命题 9], 构造了函数 $F_k(x,\ u)$（关于 x 和 u 连续），使得

$$|\tilde H_k(x_{k+1},u_{k+1})-\tilde H_k(\bar x_k,\bar u_k)|\le c_{\mathrm{E}}T_k^4 \tag{F15}$$

当 k 充分大时，其中

$$\tilde H_k(x,u):=\frac{1}{2}|u|^2+f(x)-\frac{T_k}{2}\nabla f(x)^{\mathsf T}u+T_k^2F_k(x,u),$$

¯和 c_{E} 为常数。函数 $F_k(x,\ u)$ 保证在 $x\in C$，˜ $|u|\le c_{\mathrm{u}}$ 上有界（关于 k一致）。注意，（F15）意味着，应用（H）中的辛步时，F14几乎守恒（事实上，对于任意大的˜，右侧可以替换为（T_k）^{q}）。因此，函数 $q>0$通常称为修正哈密顿量；这是因为（F14）中的第二步是一个辛映射。

我们提出命题：该函数

$$V_k(x,u):=\tilde H_k(x,u)+\frac{T_k d_k}{2}\nabla f(x)^{\mathsf T}u$$

¯ ¯满足所需性质，其中 $d_k:=1-dT_k>0$（$d>0$ 有界，并将¯随后选定）。选择 $d_k=1-dT_k$ 的动机在于，由于 $V_{k+1}(x,\ u)-V_k(x,\ u)$ 的阶为 T_k^2 对于 $x_k\in\bar C$ 以及 $|u_k|\le c_{\mathrm{u}}$。我们首先考虑（F14）中的步骤 1，此时注意到

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}|\bar u_k|^2-\frac{1}{2}|u_k|^2&=\frac{1}{2}(\bar u_k-u_k)^{\mathsf T}(\bar u_k+u_k)\\ &=-T_kf_{\mathrm{d}}^{\mathsf T}u_k+\frac{1}{2}u_k^{\mathsf T}R_k+\frac{1}{2}T_k^2|f_{\mathrm{d}}|^2-\frac{3}{4}T_kf_{\mathrm{d}}^{\mathsf T}R_k+\frac{1}{4}|R_k|^2\\ &=-T_kf_{\mathrm{d}}^{\mathsf T}u_k+\frac{1}{2}u_{k+1}^{\mathsf T}R_k+\frac{1}{2}T_k^2|f_{\mathrm{d}}|^2-\frac{1}{4}T_kf_{\mathrm{d}}^{\mathsf T}R_k-\frac{1}{4}|R_k|^2+\frac{1}{2}T_kR_k^{\mathsf T}\nabla f(x_k),\end{aligned}$$

其中，最后一步中我们将 u_k 替换为 u_{k+1}，并省略了 $f_{\mathrm{d}}(x_k,\ u_k)$ 的参数。进一步有

$$-\frac{T_k}{2}(1-d_k)\nabla f(x_k)^{\mathsf{T}}(\bar{u}_k-u_k)=-\frac{T_k}{2}(1-d_k)\nabla f(x_k)^{\mathsf{T}}(-T_k f_{\mathrm{d}}+R_k),$$

这意味着，在（F14）中的第 1 步，函数 V_k 的变化量为

$$\begin{aligned}V_k(\bar{x}_k,\bar{u}_k)-V_k(x_k,u_k)\le&-T_k f_{\mathrm{d}}^{\mathsf{T}}u_k+\frac{1}{2}u_{k+1}^{\mathsf{T}}R_k+\frac{1}{2}T_k^2|f_{\mathrm{d}}|^2-\frac{1}{4}T_k f_{\mathrm{d}}^{\mathsf{T}}R_k-\frac{1}{4}|R_k|^2\\&+\frac{d_k}{2}T_k R_k^{\mathsf{T}}\nabla f(x_k)+\frac{T_k^2(1-d_k)}{2}\nabla f(x_k)^{\mathsf{T}}f_{\mathrm{d}}\\&+T_k^2\nabla_u F_k(x_k,u_k)^{\mathsf{T}}(-T_k f_{\mathrm{d}}+R_k)+T_k^2 c_{\mathrm{F}}|-T_k f_{\mathrm{d}}+R_k|^2,\end{aligned}$$

其中，$c_{\mathrm{F}}>0$ 是 F_k的光滑常数上界。现在我们继续讨论˜（F14）的第二步，在这一步中，我们利用 H_k 在误差为 T_k^4的项范围内保持不变这一事实。因此，我们只需分析项 $T_k d_k\nabla f$（x）$^{\mathsf{T}}u$，可得

$$\begin{aligned}V_k(x_{k+1},u_{k+1})-V_k(\bar{x}_k,\bar{u}_k)\le&\frac{T_k d_k}{2}(\nabla f(x_{k+1})-\nabla f(x_k))^{\mathsf{T}}u_{k+1}-\frac{T_k^2 d_1}{2}|\nabla f(x_k)|^2+c_{\mathrm{E}}T_k^4\\\le&\frac{T_k^2 d_k}{2}|u_{k+1}|^2-\frac{T_k^2 d_k}{2}|\nabla f(x_k)|^2+c_{\mathrm{E}}T_k^4,\end{aligned}$$

这里，在第二步中我们利用了 ∇f 是 1-光滑的这一事实。因此得到

$$\begin{aligned}V_k(x_{k+1},u_{k+1})-V_k(x_k,u_k)\le&-T_k f_{\mathrm{d}}^{\mathsf{T}}u_k+\frac{1}{2}u_{k+1}^{\mathsf{T}}R_k-\frac{1}{4}T_k f_{\mathrm{d}}^{\mathsf{T}}R_k+\frac{1}{2}T_k^2|f_{\mathrm{d}}|^2\\&+\frac{T_k^2 d_k}{2}|u_{k+1}|^2-\frac{T_k\bar{d}}{4}|R_k|^2-\frac{d_k}{4}|R_k-T_k\nabla f(x_k)|^2-\frac{d_k}{4}T_k^2|\nabla f(x_k)|^2\\&+c_{\mathrm{E}4}T_k^4+T_k^2\nabla_u F_k(x_k,u_k)^{\mathsf{T}}(-T_k f_{\mathrm{d}}+R_k)+T_k^2 c_{\mathrm{F}}|-T_k f_{\mathrm{d}}+R_k|^2.\end{aligned}$$

此外，我们可以对 $f_{\mathrm{d}}^{\mathsf{T}}u_k$ 和 $|f_{\mathrm{d}}|^2$ 作如下上界估计：

$$-f_{\mathrm{d}}^{\mathsf{T}}u_k\le-\bar{\delta}|u_k|^2,\quad |f_{\mathrm{d}}|^2\le(2\delta+\beta)^2|u_k|^2,$$

其中，凸情形下为 $\delta=2\delta$，非凸情形下为 $\delta=2\delta-\beta$。因此，我们可以对项 $f_{\mathrm{d}}^{\mathsf{T}}R_k$应用杨氏不等式，得到

$$-\frac{1}{4}T_k f_{\mathrm{d}}^{\mathsf{T}}R_k\le\frac{1}{2}T_k\bar{\delta}|u_k|^2+T_k\frac{|2\delta+\beta|^2}{32\bar{\delta}}|R_k|^2.$$

我们进一步注意到 $|\nabla_u F_k(x_k,\ u_k)|\ \le\ c_{\mathrm{F}2}(|u_k|+|\nabla f(x_k)|)$，并对所有交叉项应用杨氏不等式。这得出

$$V_k(x_{k+1},u_{k+1})-V_k(x_k,u_k)\le-\frac{1}{2}T_k\bar{\delta}|u_k|^2-\frac{T_k\bar{d}}{8}|R_k|^2-\frac{d_k}{4}|R_k-T_k\nabla f(x_k)|^2$$

$$+\frac{T_k^2 d_k}{2}|u_{k+1}|^2+\frac{1}{2}u_{k+1}^{\mathsf{T}}R_k+c_{\mathrm{E}}T_k^4,$$

¯对于足够大的 k ，以及足够大的常数 d 。此外，可以证明$V_{k+1}(x_{k+1},\ u_{k+1})-V_k(x_{k+1},\ u_{k+1})$的变化量为 $\mathcal{O}(T_k^2|u_{k+1}|+T_k^3$ u_{k+1} $u_{k+1}^{\mathsf{T}}R_k$ $=)$ 阶。我们 $-\alpha\sum_{i\in I_{x_k}}\lambda_k^i g_i\ x_k$ 进一步根据 的更新方程推得 ( )，由此得到所需结果。

□

命题 12. 假设定理 *4* 中的条件成立。则 x_k 收敛到 (1) 的驻点集合，且 u_k 收敛到零。

证明。 由引理 11 可知存在一个函数 $V_k(x,u)$（有下界，且该下界关于 k一致），使得

$$V_{k+1}(x_{k+1},u_{k+1})-V_k(x_k,u_k)\le -c_{\mathrm{V}1}T_k|u_k|^2-c_{\mathrm{V}2}|R_k|^2+c_{\mathrm{V}3}T_k^2-\alpha\sum_{i\in I_{x_k}}\lambda_k^i g_i(x_k)$$

对于 $k\ge k_0$ ，以及某些常数 $k_0>0,\ c_{\mathrm{V}1},c_{\mathrm{V}2},c_{\mathrm{V}3}>0$，这里用到了 x_k 和 u_k 有界这一事实。（这里滥用了记号，重复使用了 $c_{\mathrm{V}1},c_{\mathrm{V}2},c_{\mathrm{V}3}$。 ）现在我们调用引理 8和引理 9 来对项进行上界估计 $\lambda_k^i g_i(x_k)$

$$|-\alpha\sum_{i\in I_{x_k}}\lambda_k^i g_i(x_k)|\le\frac{\alpha}{c_\lambda}c_{\mathrm{g}}T_k|R_k|n_{\mathrm{g}}\le\frac{c_{\mathrm{V}2}}{2}|R_k|^2+\frac{1}{2c_{\mathrm{V}2}}(n_{\mathrm{g}}c_{\mathrm{g}}\frac{\alpha}{c_\lambda})^2T_k^2,\tag{F16}$$

第二步中我们使用了杨氏不等式。因此得到

$$V_{k+1}(x_{k+1},u_{k+1})-V_k(x_k,u_k)\le -c_{\mathrm{V}1}T_k|u_k|^2-\frac{c_{\mathrm{V}2}}{2}|R_k|^2+\bar{c}_{\mathrm{V}3}T_k^2,\tag{F17}$$

当 k 足够大时，取修正后的常数 $\bar{c}_{\mathrm{V}3}>0$。我们进一步引入常数

$$-c_{\mathrm{V}0}=\inf_k V_k(x_k,u_k),\qquad c_{\mathrm{T}1}=\sum_{k=k_0}^{\infty}T_k^2,$$

并作出如下命题：存在一个子序列 $k(j)\ j=1,2,\dots,$ 使得

$$-c_{\mathrm{V}1}T_{k(j)}|u_{k(j)}|^2-\frac{c_{\mathrm{V}2}}{2}|R_{k(j)}|^2\ge\underbrace{\left(-\bar{c}_{\mathrm{V}3}-\frac{V_{k_0}(x_{k_0},u_{k_0})+c_{\mathrm{V}0}}{c_{\mathrm{T}1}}-\frac{1}{c_{\mathrm{T}1}}\right)}_{:=-c_{\mathrm{V}4}}T_{k(j)}^2,$$

其中 $c_{\mathrm{V}4}>0$。为了导出矛盾，我们假设命题不成立，这意味着

$$-c_{\mathrm{V}1}T_k|u_k|^2-\frac{c_{\mathrm{V}2}}{2}|R_k|^2\le -c_{\mathrm{V}4}T_k^2$$

对于所有 $k>0$。然而，我们特意选择常数 $c_{\mathrm{V}4}$，使得对 $V_{k+1}(x_{k+1},\ u_{k+1})-V_k(x_k,\ u_k)$ 求和时能够导出矛盾。更确切地说，

$$-c_{\mathrm{V}0}-V_{k_0}(x_{k_0},u_{k_0})\le V_N(x_N,u_N)-V_{k_0}(x_{k_0},u_{k_0})\le\sum_{k=k_0}^{N}(-c_{\mathrm{V}4}+\bar{c}_{\mathrm{V}3})T_k^2$$
$$\le\frac{-c_{\mathrm{V}0}-V_{k_0}(x_{k_0},u_{k_0})-1}{c_{\mathrm{T}1}}\sum_{k=k_0}^{N}T_k^2.$$

这就得到了所需的矛盾，因为右侧趋于 $-c_{\mathrm{V}_0}-V_{k_0}(x_{k_0},\ u_{k_0})-1$，当 $N\to\infty$ 时。

再取一个子序列，我们推知 $u_{k(j)}\to 0$，$R_{k(j)}/T_{k(j)}\to R$，并且 $x_{k(j)}\to\bar{x}\in C$ 10 $\bar{x}$ $\bar{x}$。根据引理，我们得出其为平稳的，且 和 R 满足 Karush-Kuhn-Tucker 条件。

现在证明整个序列收敛。由式 (F17) 可知，对于任意$\varepsilon>0$，我们可以找到一个 $m>0$，使得 $V_N(x_N,\ u_N)\le V_m(x_m,\ u_m)+\varepsilon$对所有 $N>m$均成立。更确切地说，

$$\sum_{k=m}^{N-1}V_{k+1}(x_{k+1},u_{k+1})-V_k(x_k,u_k)\le\bar{c}_{\mathrm{V}3}T_m^q\sum_{k=m}^{N-1}\left(\frac{T_k}{T_m}\right)^q T_k^{2-q}\le\bar{c}_{\mathrm{V}3}T_m^q\sum_{k=m}^{\infty}T_k^{2-q},\tag{F18}$$

由于当 $q>0$ 足够小时，T_k^{2-q} 可求和，因此右侧的阶为 T_m^q。这意味着 x_k,u_k 的所有聚点都必须包含在函数 $|u|^2/2+f(x)=\lim_{k\to\infty}V_k(x,\ u)$ 的同一个水平集中。因此，序列$V_k(x_k,\ u_k)$ 收敛，并且满足

$$\lim_{k\to\infty}V_k(x_k,u_k)=\lim_{k\to\infty}\left(\frac{1}{2}|u_k|^2+f(x_k)\right)=f(\bar{x}),$$

其中，$\bar{x}$ 是$x_{k(j)}$ 的极限（见上文）。我们进一步引入 x_k,u_k所有聚点的集合，即

$$\omega:=\bigcap_{m\ge 0}\mathrm{cl}\{(x_k,u_k):k>m\},$$

其中，cl 表示闭包。注意，$\omega\subset C\times\mathbb{R}^n$ 是连通的（因为 $|x_{k+1}-x_k|\to 0$和 $|u_{k+1}-u_k|\to 0$），并且对于任意(x,u)，$\in\omega$、$|u|^2/2+f(x)=f(\bar{x})$。

我们断言 $\omega=\{(\bar{x},0)\}$。为导出矛盾，假设存在一个序列 $(\tilde{x}_k,\tilde{u}_k)\to(\bar{x},0),(\tilde{x}_k,\tilde{u}_k)\in\omega$，且满足 $(\tilde{x}_k,\tilde{u}_k)\ne(\bar{x},0)$ (ω 是连通的)。我们先考虑 $\bar{x}$ 位于 C 内部的情形（约束未激活）。此时，当 k足够大时，$\tilde{x}_k$ 同样位于 C 内部。然而，在没有约束的情况下，式 (8) 中的动力学是光滑的，这意味着 $\tilde{x}_k$ 和 $\tilde{u}_k$必定是平衡点，因此满足 $\tilde{u}_k=0$ 和 $\nabla f(\tilde{x}_k)=0$。然而，这与 f 具有孤立驻点这一事实矛盾。接下来，我们考虑

在 $\bar{x}$ 位于 C边界上的情形。根据 $(\tilde{x}_k,\ \tilde{u}_k) \in \omega$，我们推知 $f(\tilde{x}_k) = f(\bar{x}) - |\tilde{u}_k|^2/2$。因此，对于所有 $k > 0$，$f(\tilde{x}_k) \leq f(\bar{x})$，$\tilde{x}_k \in C$，这也与 $\bar{x}$ 是一个孤立驻点这一事实矛盾。

因此，我们得出 $\omega = \{(\bar{x},0)\}$，结论随之成立。 □

附录G 定理 5的证明

为简化表述，我们假设 $L_l = T = 1$，这不失一般性。证明的关键在于以下李雅普诺夫函数：

$$V(x_k, u_k) := \frac{1}{2}|\delta(x_k - x^*) + (1-\delta)u_k|^2 + l(x_k) - l(x^*),$$

容易验证，对于所有 $\kappa_l \geq 1$，该函数都是正定的。此外，沿着迭代序列（12）的 V 演化为

$$\begin{aligned} V_{k+1} - V_k \leq -\delta(1 - \frac{3\delta}{2})|u_k|^2 - \beta u_k^\mathsf{T}\nabla\bar{l}(y_k) + \delta(x^* - x_k)^\mathsf{T}\nabla\bar{l}(y_k) \\ +\delta^2 u_k^\mathsf{T}(x^* - x_k) + \frac{1}{2}|\nabla\bar{l}(y_k)|^2 + l(x_{k+1}) - l(x_k), \end{aligned} \tag{G19}$$

其中，我们将 $V(x_k, u_k)$ 简记为 V_k。此外，我们还利用了以下事实：$x_{k+1} - y_k = -\nabla f(y_k) + \nabla g(y_k)\lambda_k := -\nabla l(y_k)$，其中 λ_k 是（12）的一组最优乘子（另见下文的（G20））。

接下来，我们将 $l(x_{k+1})$ 与 $l(y_k)$ 联系起来。为此，我们先通过变量替换 $x = x_k + Tv$，对（12）中的最小化问题稍作改写，得到

$$\begin{aligned} x_{k+1} = \operatorname*{argmin}_{x\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}|x - y_k + \nabla f(y_k)/L_l|^2 \\ \text{s.t. } \nabla g_i(y_k)^\mathsf{T}(x - y_k) \geq (1-\alpha T)(g_i(x_k) - g_i(y_k)) - \alpha T g_i(y_k),\quad i \in [n_\mathrm{g}], \end{aligned} \tag{G20}$$

其中我们利用了这一事实：$T(1 - 2\delta T) = \beta$，从而简化目标函数。我们注意到，$x = \alpha(x^* - x_k) + x_k$ 是最小化问题（G20）的一个可行候选解。推理如下：

$$\begin{aligned} \nabla g_i(y_k)(\alpha(x^* - x_k) + x_k - y_k) &= (1-\alpha)\nabla g_i(y_k)^\mathsf{T}(x_k - y_k) + \alpha\nabla g_i(y_k)^\mathsf{T}(x^* - y_k) \\ &\geq (1-\alpha)(g_i(x_k) - g_i(y_k)) + \alpha(g_i(x^*) - g(y_k)), \end{aligned}$$

第二步中利用了 g 的凹性，以及这一事实：$T = 1$ 和$g_i(x^*) \geq 0$。因此，（G20）的驻定条件意味着

$$(x_{k+1} - y_k + \nabla f(y_k))^\mathsf{T}(\alpha(x^* - x_k) + x_k - x_{k+1}) \geq 0.$$

该不等式可重述如下：

$$(x_{k+1} - y_k + \nabla f(y_k))^\mathsf{T}(\alpha(x^* - x_k) - \beta u_k - (x_{k+1} - y_k))$$

$$= -|\nabla \bar{l}(y_k)|^2 - \nabla \bar{l}(y_k)^\mathsf{T}(\alpha(x^* - x_k) - \beta u_k) \\ + \nabla f(y_k)^\mathsf{T}(\alpha(x^* - x_k) - \beta u_k) - \nabla f(y_k)^\mathsf{T}(x_{k+1} - y_k) \geq 0.$$

重新整理该不等式，可得以下上界：

$$\nabla l(y_k)^\mathsf{T}(x_{k+1} - y_k) \leq -|\nabla \bar{l}(y_k)|^2 - \nabla \bar{l}(y_k)^\mathsf{T}(\alpha(x^* - x_k) - \beta u_k) \\ + \nabla f(y_k)^\mathsf{T}(\alpha(x^* - x_k) - \beta u_k) - {\lambda^*}^\mathsf{T} \nabla g(y_k)^\mathsf{T}(x_{k+1} - y_k).$$

根据这个不等式以及 l 的光滑性，我们可以对 $l(x_{k+1})$ 的演化进行如下界定：

$$\begin{aligned} l(x_{k+1}) &\leq l(y_k) + \nabla l(y_k)^\mathsf{T}(x_{k+1} - y_k) + \frac{1}{2}|\nabla \bar{l}(y_k)|^2 \\ &\leq l(y_k) - \frac{1}{2}|\nabla \bar{l}(y_k)|^2 - \nabla \bar{l}(y_k)^\mathsf{T}(\alpha(x^* - x_k) - \beta u_k) \\ &\quad + \nabla f(y_k)^\mathsf{T}(\alpha(x^* - x_k) - \beta u_k) - {\lambda^*}^\mathsf{T} \nabla g(y_k)^\mathsf{T}(x_{k+1} - y_k). \end{aligned} \tag{G21}$$

将 (G21) 与 (G19) 结合可得

$$V_{k+1} - V_k \leq -\delta(1 - \frac{3\delta}{2})|u_k|^2 + \nabla f(y_k)^\mathsf{T}(\alpha(x^* - x_k) - \beta u_k) + l(y_k) - l(x_k) \\ -{\lambda^*}^\mathsf{T} \nabla g_i(y_k)^\mathsf{T}(x_{k+1} - y_k) + \delta^2 u_k^\mathsf{T}(x^* - x_k), \tag{G22}$$

¯这里我们利用了 $\alpha = \delta$ 以及所有包含 $\nabla l(y_k)$ 的项都会相互抵消这一事实（事实上，李雅普诺夫函数和算法 (12) 正是为此而专门设计的）。 的强凸性意味着

$$\nabla f(y_k)^\mathsf{T}(\delta(x^* - x_k) - \beta u_k) \leq -\delta(f(x_k) - f(x^*)) - \frac{\delta\mu}{2}|x^* - x_k|^2 - \delta\beta\mu(x_k - x^*)^\mathsf{T} u_k \\ - \frac{\mu}{2}\beta^2|u_k|^2 + f(x_k) - f(y_k);$$

参见 Muehlebach 和 Jordan [7, 附录 A6], 结合 (G22) 可得,

$$V_{k+1} - V_k \leq -\delta(1 - \frac{3\delta}{2} + \frac{\beta^2\mu}{2\delta})|u_k|^2 - \frac{\delta\mu}{2}|x^* - x_k|^2 + \delta(\beta\mu + \delta)(x^* - x_k)^\mathsf{T} u_k \\ - \delta(f(x_k) - f(x^*)) - \lambda^* g(y_k) + {\lambda^*}^\mathsf{T} g(x_k) - {\lambda^*}^\mathsf{T} \nabla g_i(y_k)^\mathsf{T}(x_{k+1} - y_k).$$

这可以重新整理如下：

$$V_{k+1} - V_k \leq -\delta V_k - \frac{1}{2}(\delta - \delta^2 - \delta^3 + \beta^2\mu)|u_k|^2 - \frac{\delta\mu - \delta^3}{2}|x^* - x_k|^2 + \delta(\beta\mu + \delta^2)(x^* - x_k)^\mathsf{T} u_k \\ + (1 - \delta){\lambda^*}^\mathsf{T} g(x_k) - {\lambda^*}^\mathsf{T} g(y_k) - {\lambda^*}^\mathsf{T} \nabla g_i(y_k)^\mathsf{T}(x_{k+1} - y_k).$$

我们进一步注意到，（G20）中的不等式约束意味着

$$-\nabla g_i(y_k)^\mathsf{T}(x_{k+1}-y_k)+(1-\delta)g(x_k)-g(y_k)\le 0,$$

因此我们得到

$$V_{k+1}-V_k \le -\delta V_k-\frac{1}{2}(\delta-\delta^2-\delta^3+\beta^2\mu)|u_k|^2-\frac{\delta\mu-\delta^3}{2}|x^*-x_k|^2+\delta(\beta\mu+\delta^2)(x^*-x_k)^\mathsf{T}u_k.$$

注意到 $\beta\mu=(1-\mu)\delta^2$，因此 $\beta\mu+\delta^2=\delta^2(2-\mu)$。现在对项 $(x^*-x_k)^\mathsf{T}u_k$ 应用杨氏不等式，得到

$$-\frac{1}{2}(\delta-\delta^2-\delta^3+\beta^2\mu)|u_k|^2-\frac{\delta\mu-\delta^3}{2}|x^*-x_k|^2+\delta^3(2-\mu)(x^*-x_k)^\mathsf{T}u_k\le 0,$$

对所有 $\kappa_l\ge 1$、x^*-x_k 和 u_k均成立。由此得到 $V_{k+1}-V_k\le -\delta V_k$，并完成证明。□

参考文献

[1] Su, W., Boyd, S., Cand`es, E.J.：用于建模 Nesterov 加速梯度法的微分方程：理论与见解。机器学习研究杂志 **17(153)**，1–43（2016）[2] Wibisono, A., Wilson, A.C., Jordan, M.I.：优化中加速方法的变分视角。美国国家科学院院刊 **113(47)**，7351–7358（2016）[3] Diakonikolas, J., Jordan, M.I.：广义动量方法：哈密顿视角。SIAM Journal on Optimization **31(1)**，915–944（2021）[4] Krichene, W., Bayen, A.M., Bartlett, P.L.：连续时间与离散时间下的加速镜像下降。Advances in Neural Information Processing Systems 28，2845–2853（2015）[5] Fran¸ca, G., Sulam, J., Robinson, D.P., Vidal, R.：共形辛优化与相对论优化。统计力学杂志：理论与实验**2020(12)**，1–30（2020）[6]Betancourt, M., Jordan, M.I., Wilson, A.C.：论辛优化。arXiv:1802.03653v2，1–20（2018）[7] Muehlebach, M., Jordan, M.I.：Nesterov 加速的动力系统视角。Proceedings of Machine Learning Research **97**，4656–4662（2019）[8] Muehlebach, M., Jordan, M.I.：基于梯度算法的连续时间下界。Proceedings of Machine Learning Research **119**，7088–7096（2020）

[9]Muehlebach, M., Jordan, M.I.：动量优化：动力学、控制理论与辛视角。机器学习研究杂志 **22**(73)，1–50（2021）[10] Moreau, J.J.：有限自由度动力学中的单边接触与干摩擦。载于：非光滑力学及其应用，第1–82页。Springer，维也纳（1988）[11] Glocker, C.：集值力定律。Springer，柏林（2001）[12] Studer, C.：单边接触与摩擦的数值方法。Springer，柏林（2009）[13] Wang,C., Liu, Q.：非精确投影梯度方法的收敛性质。优化**55**(3)，301–310（2006）[14] Birgin, E.G., Mart´ınez, J.M., Raydan, M.：凸集上的非精确谱投影梯度方法。IMA 数值分析杂志**23**，539–559（2003）[15] Beck, A., Teboulle, M.：基于梯度的算法及其在信号恢复问题中的应用。载于：信号处理与通信中的凸优化，第42–88页。剑桥大学出版社，剑桥（2011）[16] Bloom, V., Griva, I., Quijada, F.：用于支持向量机的快速投影梯度法。优化与工程**17**(4)，651–662（2016）[17] Jaggi, M.：重新审视 Frank-Wolfe：无投影稀疏凸优化。Proceedings of Machine Learning Research**28**(1)，427–435（2013）[18]Clarkson, K.L.：核心集、稀疏贪心近似与 Frank-Wolfe 算法。ACM 算法汇刊**6**(4)，1–30（2010）[19] Hazan, E., Kale, S.：无投影在线学习。国际机器学习会议论文集，1–8（2012）[20] Zhang, M., Shen, Z., Mokhtari, A., Hassani, H., Karbasi, A.：单样本随机 Frank-Wolfe。Proceedings of Machine Learning Research**108**，4012–4023（2020）[21] Garber, D., Hazan, E.：强凸集上的 Frank-Wolfe 方法获得更快的收敛速率。Proceedings of Machine Learning Research **37**，541–549（2015）[22]Combettes, C.W., Pokutta, S.：通过追踪梯度提升 Frank-Wolfe 算法。Proceedings of Machine Learning Research**119**，2111–2121（2020）[23] Nemirovski, A.S., Yudin, D.B.：优化中的问题复杂度与方法效率。约翰·威立父子出版公司，奇切斯特（1983）[24]Beck, A., Teboulle, M.：凸优化的镜像下降与非线性投影次梯度方法。运筹学快报**31**(3)，167–175

（2003）

[25] Bubeck, S., Cesa-Bianchi, N.：随机和非随机多臂老虎机问题的遗憾分析。Foundation and Trends in Machine Learning **5**(1), 1–122 (2012)[26] Muehlebach, M., Jordan, M.I.：一阶优化中的约束：非光滑动力系统视角。机器学习研究杂志**23**(256), 1–47 (2022)[27] Kolev, P., Martius, G., Muehlebach, M.：对抗性非线性约束下的在线学习。Advances in Neural Information Processing Systems **36**, 1–26 (2023)[28] Schechtman, S., Tiapkin, D., Muehlebach, M., Moulines, ´E.：正交方向约束梯度法：从非线性等式约束到斯蒂费尔流形。Proceedings of Machine Learning Research **195**, 1228–1258 (2023)[29] Gon、calves, D.S., Mucherino, A., Lavor, C., Liberti, L.：区间距离几何问题的最新进展。Journal of Global Optimization **69**(3), 525–545 (2017)[30] Ibrahim,A.A., Muehlebach, M., Bacco,C.D.：带约束的最优传输：从镜像下降到经典力学。arXiv:2309.04727, 1–14 (2023)[31]Bolte, J., Hochart, A., Pauwels, E.：半代数规划中的资格条件。SIAM Journal on Optimization **28**(2), 1867–1891 (2018)[32] Polyak, B.T.：加快迭代方法收敛的一些方法。USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics **4**(5), 1–17 (1964)[33] Leine, R.I., Wouw, N.：带单边约束机械系统的稳定性与收敛性。Springer, 柏林 (2008)[34] Piazza, L.D., Marraffa, V., Satco, B.：测度微分包含：存在性结果与最小值问题。Set-Valued and Variational Analysis**29**(2), 361–382 (2021)[35] Leine, R.I., Wouw, N.：单调测度微分包含的一致收敛：及其在带单边约束机械系统控制中的应用。International Journal of Bifurcation and Chaos **18**(5), 1435–1457 (2008)[36] Nesterov, Y.：凸优化导论——基础课程。Springer, 纽约 (2004)[37] Hastie, T., Tibshirani, R., Friedman, J.：统计学习的要素，第2版。Springer, 纽约 (2009)

[38] Beck, A., Teboulle, M.：用于线性逆问题的快速迭代收缩阈值算法。SIAM《成像科学杂志》**2**(1), 183–202 (2009)[39]Teel, A.R.：从稳定性到渐近收敛。IEEE《自动控制汇刊》**44**(11), 2169–2170 (1999)[40] Rockafellar, R.T.：凸分析。普林斯顿大学出版社，普林斯顿，新泽西州 (1970)[41] Polyak, B.T.：优化导论。Optimization Software, Inc., 纽约 (1987)