arXiv:2302.09734v1 [math.OC] 20 Feb 2023

实现带均衡约束的双层规划的无层级近似

李佳阳[1],于静[1],刘博一[2], 王兆然[2], 和聂宇（Marco）Nie*[1]

[1]土木与环境工程系，西北大学[2]工业工程与管理科学系，西北大学

摘要

本文提出了一种用于求解带均衡约束的双层规划的近似方案，而这类问题通常难以求解。其中，计算此类问题的一阶导数需要跨越层级进行微分；即使并非不可行，其计算成本也十分高昂。为绕开层级结构，我们提出使用两个新的无层级问题来界定这类等价于多跟随者斯塔克尔伯格博弈的双层规划： T步古诺博弈和 T步垄断模型。由于它们属于标准的均衡或优化问题，因此均可通过一阶方法高效求解。值得注意的是，我们证明，对于广泛的问题，通过增大步长参数 T，由这些问题给出的界——其中 T步古诺博弈提供上界，T步垄断模型提供下界——可以任意逼近。我们证明，在适当条件下，通常只需较小的 T，即可达到对大多数实际应用而言足够可接受的近似精度。最后，我们通过数值示例阐释了这些分析性见解。

1 引言

许多源自现实应用的双层优化问题都可以表示为数学规划问题，其可行域由一个均衡问题定义（Luo 等人，1996；Outrata等人，1998）。一个典型例子是斯塔克尔伯格博弈：领导者试图在由众多自利跟随者组成的经济或社会系统中促成理想结果；这些跟随者可以被视为参与非合作博弈，并最终达到纳什均衡（Dafermos，1973；Requate，1993；Marcotte and Marquis，1992；Labb´等人，1998；Ehtamo等人，2002）。近年来，受此类应用的推动，开发求解带有

*通讯作者；y-nie@northwestern.edu。

均衡约束的双层规划的高效算法，也已成为机器学习领域的重要课题（Mguniet al.，2019；Zheng et al.，2020；Liuetal.，2022；Maheshwari etal.，2022）。

在优化文献中，带均衡约束的双层规划通常写作（Luo等人，1996）

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{X},\ \boldsymbol{y}^*\in\mathbb{Y}} \quad & l(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}^*), \\ \text{s.t.} \quad & \langle f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}^*), \boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}^*\rangle \geq 0, \quad \forall \boldsymbol{y}\in\mathbb{Y}, \end{aligned} \tag{1.1}$$

其中，$\mathbb{X}\subseteq\mathbb{R}^m$ 和 $\mathbb{Y}\subseteq\mathbb{R}^n$ 是两个凸集；$l:\ \mathbb{X}\times\mathbb{Y}\to\mathbb{R}$ 和 $f:\ \mathbb{X}\times\mathbb{Y}\to\mathbb{R}^n$ 是两个连续可微函数。问题（1.1）中的下层问题是一个变分不等式（VI）问题，这是许多均衡问题的一般形式（Scutari 等人，2010；Nagurney，2013；Parise 和 Ozdaglar，2019）。问题（1.1）以难以求解而著称。事实上，即使上层目标函数是线性的，且下层变分不等式可以化为线性规划（LP）（Ben-Ayed 和 Blair，1990），该问题仍然是 NP难的，由此得到所谓的双层线性规划（Candler 和 Townsley，1982；Bard 和 Falk，1982）。

当下层不是线性规划时，问题 (1.1) 通常通过一阶方法求解，以努力找到良好的局部解（Colson 等人，2007）。此类经典算法包括基本的梯度下降（Friesz 等人，1990）、基于二次近似的最速下降（Luo 等人，1996）以及罚函数法（Aiyoshi 和 Shimizu，1984）。应用梯度下降法需要通过下层均衡问题进行微分，这是一项具有挑战性的计算任务。在文献中，这通常通过隐式微分 (ID) 实现，但这需要求逆一个矩阵，其大小随下层变分不等式问题的维度呈二次增长（Tobin，1986；Dafermos，1988；Parise 和 Ozdaglar，2019）。在大规模问题中，即使只是存储这样的矩阵也可能不切实际，更不用说对其求逆了。

机器学习（ML）的最新进展催生了一类基于自动微分（AD）（Griewank 等人，1989）求解双层规划的新算法。基于自动微分的方法分两个阶段计算双层规划的梯度（Franceschi 等人，2017，2018）。第一阶段先求解下层问题，同时将计算过程及中间结果存储在计算图中。第二阶段通过展开计算图来求得下层解的梯度。文献中，基于自动微分的方法最初是为机器学习应用而提出的，例如超参数优化（Maclaurin 等人，2015）和神经架构搜索（Liu 等人，2018），这些问题通常可建模为双层规划，其下层是无约束优化问题。近年来，这类方法也得到了扩展，可用于处理带均衡约束的问题（Li 等人，2020）。尽管基于自动微分的方法绕过了隐式微分，但仍可能面临另一项挑战：

由于计算图会随着求解下层均衡问题所需的迭代次数增加而不断增长，因此，当求解下层问题需要过多迭代时，即使使用自动微分（Li 等人，2022b），计算图也可能深到难以高效展开。

简而言之，无论使用隐式微分还是自动微分，为问题（1.1）求梯度仍然是实现大规模应用的潜在障碍。这些困难促使许多研究致力于加速隐式微分（Hong et al., 2020；Chen et al., 2021；Liao et al., 2018；Grazzi et al., 2020；Vicol et al., 2021；Fung et al., 2022；Liu et al., 2022）或近似自动微分（Luketina et al., 2016；Metz et al., 2016；Finn et al., 2017；Liu et al., 2018；Shaban et al., 2019；Ablin et al., 2020；Yang et al., 2021；Li et al., 2022a）。但从根本上说，困难源于问题的层级结构，或者说，为了获得梯度，必须求解下层问题并对其进行微分，而这在许多情况下计算开销很大。我们的工作由以下问题引发：能否摆脱这一要求，或者说“绕过层级”?

我们认为，无层级方法是可行的。我们的灵感来自经济学中的双寡头模型，该模型研究两家企业A和B在同一市场销售同质产品的情形。双寡头可以有三种组织形式（Shapiro，1989）。（1）斯塔克尔伯格双寡头：企业A先设定产量，企业B据此作出决策，由此形成典型的双层规划。（2）古诺双寡头：企业A和B同时优化各自产量，从而形成纳什均衡问题。（3）垄断：企业A接管企业B的业务，成为唯一的生产者，并设定两家企业的总产量。在经济学中，众所周知，企业A在斯塔克尔伯格双寡头中的最优利润低于垄断情形，但高于古诺双寡头情形。

由于问题（1.1）可解释为一个斯塔克尔伯格博弈，其中领导者和跟随者分别控制上层和下层决策变量，因此我们推断，它或许可以像斯塔克尔伯格双寡头那样通过界来约束。具体而言，我们可以不直接求解问题（1.1），而是先求解相应的“古诺博弈”和“垄断模型”——两者都是单层问题——以获得下界和上界。如果这两个界足够接近，我们就可以接受其中可行的一个作为近似解。当然，需要注意的是，这两个模型之间固有的间隙在实际应用中可能大得难以接受。因此，本研究的重点是缩小这一间隙。

我们的贡献。 本文将问题 (1.1) 视为斯塔克尔伯格博弈，并提出一种新的古诺博弈和一种新的垄断模型，可为问题 (1.1) 提供任意精确的上界和下界。这两种模型的构建均假设，下层均衡状态是动力过程的结果，在这一过程中，跟随者逐步 改进其决策，使之趋于最优（Weibull，1997）。提出的两种模型定义如下：在一个 T步古诺博弈中，领导者和跟随者同时做出决策，但领导者会预先考虑跟随者的决策

，即提前 T 步；而在一个 T 步垄断模型中，领导者对跟随者拥有完全的控制权，但在领导者首先指示跟随者做出决策后，允许跟随者沿着其动力过程继续演进 T 步，趋向均衡。

我们的贡献主要有三点。(1) 我们表明，两个模型均可通过一阶方法高效求解，并且每次迭代的计算成本随 T线性增长。(2) 我们证明，在适当的假设下，通过选择合适的 T，两个模型的解所提供的上界和下界之间的间隙可以任意缩小；对于大多数实际用途而言，一个较小的 T 即可为问题（1.1）提供高质量的近似解。(3) 我们展示了所提出的近似方案在一系列现实世界问题中的应用。

文章结构。 第 2 节概述了若干推动本研究的现实世界应用。第 3 节讨论求解问题（1.1）所面临的困难，并回顾以往研究对此类困难的处理方法。第 4 节通过类比问题（1.1）与经典斯塔克尔伯格双寡头模型，为所提出的无层级方案提供动机。第5 节为该方案奠定基础：介绍 T 步古诺博弈和 T 步垄断模型的公式，并给出求解算法，讨论该方案的解析性质。最后，第6 节展示数值结果，第 7 节总结全文。

记号。 我们用 $\mathbb{R}$、 $\mathbb{R}_+$ 和 $\mathbb{N}$ 分别表示实数集、非负实数集和非负整数集。两个向量 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ 的内积记作 $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle = a^\mathsf{T} b$。对于矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$，我们用 $\|\boldsymbol{A}\|_2$ 表示其由向量 2-范数诱导的矩阵范数。对于闭集 $\mathbb{A}$，我们用 $\operatorname{diam}(\mathbb{A}) = \max_{\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}' \in \mathbb{A}} \|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{a}'\|$ 表示其直径。对于有限集 $\mathbb{A}$，我们用 $|\mathbb{A}|$ 表示 $\mathbb{A}$ 中的元素个数，并用 $\Delta(\mathbb{A}) = \{\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}_+^{|\mathbb{A}|} : \mathbf{1}^\mathsf{T} \boldsymbol{p} = 1\}$表示。

2 背景

我们首先讨论变分不等式如何为许多均衡问题提供统一的表述（第2.1节），然后介绍一些现实世界中的应用，这些应用启发了带均衡约束的双层规划（第2.2节）

2.1 变分不等式

变分不等式为原子博弈和非原子博弈提供了统一的表述，二者根据参与者集合所具有的测度是原子测度还是非原子测度来分类（纳什，1951；施迈德勒，1973）。简而言之，每个参与者的决策都可能影响原子博弈的结果，而非原子博弈的结果则仅取决于参与者的总体行为。

例*2.1*（原子博弈）。考虑一个由 n 原子型代理参与的博弈。假设每个参与者 i 旨在选择一种策略 $\boldsymbol{z}_i \in \mathbb{Z}_i \subseteq \mathbb{R}^{m_i}$ 以使其成本最小化，而成本由一个连续可微函数 u_i 确定： $\mathbb{Z} \to \mathbb{R}$ 其中 $\mathbb{Z} = \prod_i \mathbb{Z}_i$。形式上，若联合策略 $z^* \in \mathbb{Z}$满足 $u_i(\boldsymbol{z}_i^*, \boldsymbol{z}_{-i}^*) = min_{\boldsymbol{z}_i \in \mathbb{Z}_i} u_i(\boldsymbol{z}_i, \boldsymbol{z}_{-i}^*) (i = 1, \ldots, k)$，则该策略是一个纳什均衡。记 $v(\boldsymbol{z}) = (v_i(\boldsymbol{z}))_{i=1}^k$为一个满足 $v_i(\boldsymbol{z}) = \nabla_{\boldsymbol{z}_i} u(\boldsymbol{z})$的函数。假设 $\mathbb{Z}_i$ 是凸且闭的，则任何纳什均衡$\boldsymbol{z}^* = (\boldsymbol{z}_i^*)_{i=1}^k \in \mathbb{Z}$ 也是以下变分不等式的一个解（*Scutari* 等人，*2010*）

$$\langle v(\boldsymbol{z}^*), \boldsymbol{z} - \boldsymbol{z}^* \rangle \geq 0, \quad \forall \boldsymbol{z} \in \mathbb{Z}. \tag{2.1}$$

同时，如果每个 v_i 在 $\boldsymbol{z}_i$ 中都是凸的，反向结论也成立。

例 *2.2*（非原子博弈）。考虑一个由 n 类非原子型代理参与的博弈。设 $\mathbb{A}_i$ 为第 i 类参与者的离散行动集。设 $\boldsymbol{p}_i = (p_{ia})_{a \in \mathbb{A}_i} \in \Delta(\mathbb{A}_i)$ 表示第 i 类参与者中选择各行动 $a \in \mathbb{A}_i$ 的比例。假设第 i 类中的每位参与者都希望选择行动 a，以最小化由连续函数 $c_{ia}: \Delta(\mathbb{A}) \to \mathbb{R}$ 确定的成本，其中 $\Delta(\mathbb{A}) = \prod_i \Delta(\mathbb{A}_i)$。形式上，质量分布 $\boldsymbol{p}^* = (\boldsymbol{p}_i^*)_{i=1}^k \in \Delta(\mathbb{A})$ 是纳什均衡（也称为 *Wardrop* 均衡），当且仅当 $c_{ia'}(\boldsymbol{p}^*) = min_{a \in \mathbb{A}_i} c_{ia}(\boldsymbol{p}^*)$ 对所有满足 $q_{ia'} > 0 (i = 1, \ldots, k)$ 的 $a' \in \mathbb{A}_i$ 都成立。令$c_i(\boldsymbol{p}) = (c_{ia}(\boldsymbol{p}))_{a \in \mathbb{A}_i}$ 且 $c(\boldsymbol{p}) = (c_i(\boldsymbol{p}))_{i=1}^k$，则 $\boldsymbol{p}^*$ 是纳什均衡，当且仅当（*Bernhard*，*2011*）

$$\langle c(\boldsymbol{p}^*), \boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}^* \rangle \geq 0, \quad \forall \boldsymbol{p} \in \Delta(\mathbb{A}). \tag{2.2}$$

由于大多数均衡问题都可以表示为变分不等式，问题（1.1）为含均衡约束的双层规划提供了一种标准形式（Luo等，1996）。

2.2 含均衡约束的双层规划

对 双层规划的研究可以追溯到斯塔克尔伯格双寡头模型 .

例 2.3（斯塔克尔伯格双寡头）。考虑两家企业*A*和*B*，它们销售同质产品。分别用 x 和 y表示它们的产量，并假设企业*A*先选择 x ，随后企业*B*再选择 y 。设该产品的反需求（即价格）为 $p = 1 - x - y$。那么，企业*A*和*B*的利润分别为 $l(x, y) = x(1 - x - y)$和$g(x, y) = y(1 - x - y)$。两家企业的最优决策 x^* 和 y^* 是以下双层规划的解

$$x^* = \arg\max_{x \geq 0} \ l(x, y^*), \quad s.t. \ y^* = \arg\max_{y \geq 0} \ g(x, y). \tag{2.3}$$

最优的 *s* 解为 $x^* = 1/2$ 和 $y^* = 1/4$，企业*A*获得了 $1/8$ 的最优利润 .

关于带均衡约束的双层规划的早期研究源于斯塔克尔伯格拥堵博弈（SCGs），这类博弈研究的是领导者（通常为交通规划者）如何在由许多自利的跟随者（出行者）参与的拥堵博弈中（Wardrop，1952；Roughgarden 和 Tardos，2002）诱导出理想的均衡状态。网络设计问题（LeBlanc，1975；Li 等人，2012）和拥堵定价问题（Lawphongpanich 和 Hearn，2004；Li 等人，2021）是两个经典示例。近年来，网联自动驾驶车辆（CAV）技术的引入及其持续发展（Mahmassani，2016）影响了斯塔克尔伯格拥堵博弈的研究，并催生了专用CAV设施的设计（Chen 等人，2016，2017；Bahrami 和 Roorda，2020）以及对此类设施内CAV的控制（Levin 和 Boyles，2016；Zhang 和 Nie，2018）等应用。

关于如何在非合作博弈中诱导出理想结果的问题，可以追溯到 Pigou （1920）在福利经济学方面的工作。长期以来，双层规划一直被视为运筹学中研究此类问题的标准方法，近年来在机器学习领域也同样如此（Mguni 等人，2019；Zheng 等人，2020；Liu 等人，2022；Maheshwari 等人，2022）。我们的算法侧重于与这一问题相关的应用。

我们希望澄清，并非所有双层规划（以及斯塔克尔伯格博弈）都适用于我们的算法。第一类是由一名领导者和一名跟随者进行的斯塔克尔伯格博弈，其中双方的行动集都是有限的。这类问题可以重新表述为线性规划；示例包括广义委托代理问题（Myerson，1982）和斯塔克尔伯格安全博弈（Sinha 等人，2018）。第二类是由线性规划约束的双层规划（Bracken 和 McGill，1973），它等价于一个NP难混合整数规划（Ben-Ayed 和 Blair，1990），无法通过一阶方法有效求解。

3 挑战

本节将讨论计算问题（1.1）的一阶梯度时面临的困难，其形式如下

$$\frac{\partial l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)}{\partial \boldsymbol{x}} = \nabla_{\boldsymbol{x}} l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*) + \frac{\partial \boldsymbol{y}^*}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \nabla_{\boldsymbol{y}} l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*). \tag{3.1}$$

为了得到这个梯度，我们需要求解下层变分不等式问题，并对其进行微分。

给定任意 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}$，我们将问题（1.1）中的下层变分不等式问题的解集记为$\mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$. 我们首先给出以下命题，以刻画 $\mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$。

命题 3.1 (Hartman 等人 (1966))。 假设 $\mathbb{Y}$ 是闭的。令 $h: \mathbb{X} \times \mathbb{Y} \to \mathbb{Y}$ 为满足以下条件的函数

$$h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \underset{\boldsymbol{y}' \in \mathbb{Y}}{\arg\min} \ \|\boldsymbol{y}' - r \cdot f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\|_2^2. \tag{3.2}$$

那么，对任意 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}$，有 $\boldsymbol{y}^* \in \mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$ 当且仅当 $\boldsymbol{y}^*$ 是 $h(\boldsymbol{x}, \cdot)$ 的不动点，即 $\boldsymbol{y}^* = h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)$。

为求解 $\mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$，命题3.1 启发出了一类通用算法，通常称为投影法Dafermos (1983);Pang 和 Chan(1982);Marcotte 和 Wu(1995），该方法迭代地将 $\boldsymbol{y}^t$ 投影到 $\boldsymbol{y}^{t+1} = h(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{y}^t)$，从某个 $\boldsymbol{y}^0 \in \mathbb{Y}$出发，直到找到一个不动点。

然而，要通过 $\mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$ 求导，下层变分不等式问题必须存在唯一解；否则，雅可比矩阵 $\partial \boldsymbol{y}^*/\partial \boldsymbol{x}$ 就没有良好定义。为确保唯一性，通常需要假设 $f(\boldsymbol{x}, \cdot)$ 是强单调的（Mancino 和 Stampacchia, 1972）。我们的工作沿袭了许多先前研究（Ghadimi 和 Wang，2018；Hong 等人，2020；Chen 等人，2021；Guo 等人，2021；Ji等人，2021；Liu 等人，2022），采用这一假设，但我们将在附录中讨论如何放宽该假设。以下命题刻画了当 $f(\boldsymbol{x}, \cdot)$ 为强单调时投影法的收敛速率。

命题 3.2 (Nagurney (2013))。 假设 $f(\boldsymbol{x}, \cdot)$ 是 γ-强单调且 L-*Lipschitz* 连续的，则

$$\|h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) - h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}')\|_2 \leq \eta \cdot \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}'\|_2 \tag{3.3}$$

对所有 $\boldsymbol{y}$、$\boldsymbol{y}' \in \mathbb{Y}$ 均成立，其中 $\eta = (1 - 2\gamma r/\sigma + r^2 L^2/\sigma^2)^{1/2}$。因此，从任意 $\boldsymbol{y}^0 \in \mathbb{Y}$ 出发，序列 $\boldsymbol{y}^{t+1} = h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^t)$ 以线性速率收敛到唯一点 $\boldsymbol{y}^* \in \mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$，前提是步长 $r < 2\gamma/L^2$。

在本节余下部分，我们将讨论 $\partial \boldsymbol{y}^*/\partial \boldsymbol{x}$ 的计算，这是实现任何一阶方法的主要障碍。

3.1 隐式微分（ID）方法

计算 $\partial \boldsymbol{y}^*/\partial \boldsymbol{x}$ 的第一种方法是对不动点方程 $\boldsymbol{y}^* = h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)$ 进行隐式微分，进而得到以下命题。

命题 3.3 (Dafermos (1988))。 若 $h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 连续可微，且 $f(\boldsymbol{x}, \cdot)$ 强单调，则唯一的 $\boldsymbol{y}^* \in \mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$ 关于 $\boldsymbol{x}$ 连续可微，其雅可比矩阵满足

$$\frac{\partial \boldsymbol{y}^*}{\partial \boldsymbol{x}} = \nabla_{\boldsymbol{x}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*) \cdot (\boldsymbol{I} - \nabla_{\boldsymbol{y}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*))^{-1}. \tag{3.4}$$

为了计算 $\partial \boldsymbol{y}^*/\partial \boldsymbol{x}$ 根据方程（3.4），首先需要求得 $\nabla_{\boldsymbol{x}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)$ 和$\nabla_{\boldsymbol{y}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)$，也就是对一个欧几里得投影问题进行微分，这等价于一个二次规划（QP）。一种实现方法是使用 Agrawal 等人（2019）开发的 Python 软件包`cvxpylayers`。隐式微分（ID）的计算成本较高，因为它

需要求解下层变分不等式问题，并对一个可能大得难以处理的矩阵求逆。

单循环隐式微分。 为了避免反复求解 $\boldsymbol{y}^*$，可以在单循环中每次迭代都通过一次梯度下降步更新 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 。在此类方案中，我们不再通过方程（3.1）和（3.4）计算精确的上层梯度，而是将其中的 $\boldsymbol{y}^*$ 替换为当前迭代值。该方案最初由 Hong 等人（2020）提出；Chen 等人（2021）随后将其扩展到问题（1.1），Liu 等人（2022）亦作了进一步扩展。单循环方案简化了基于隐式微分的方法的整体结构，但并未绕过大型矩阵求逆这一难题。

近似隐式微分。 为避免对（3.4）中的矩阵求逆，可以将其表示为相应的纽曼级数，再截取级数的前几项（Liao 等人，2018；Grazzi 等人，2020；Vicol 等人，2021）。Fung 等人（2022）提出的无雅可比矩阵方案也可以用纽曼级数截断来解释。该方案显著降低了时间复杂度，但需要存储 $\nabla_{\boldsymbol{y}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)$ 。

还有其他旨在改进隐式微分的方案。例如，Bertrand 等人(2020) 为套索型问题开发了一种无需矩阵的隐式微分方案；Blondel 等人(2021) 开发了一个结合隐式微分与自动微分优点的工具箱；Sow 等人(2022) 提出了一种采用类零阶估计量来近似雅可比矩阵的方法。

3.2 自动微分方法

计算 $\partial \boldsymbol{y}^*/\partial \boldsymbol{x}$ 的第二种方法，是通过自动微分将求解下层变分不等式问题的计算过程展开（Franceschi 等人，2017，2018）。例如，若采用投影法，计算过程可写为

$$\boldsymbol{y}^t = h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^{t-1}), \quad t = 1, \ldots, T, \tag{3.5}$$

其中， T 是一个足够大的数，使得 $\boldsymbol{y}^T$ 与 $\mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$ 之间的距离小于容差值。Agrawal 等人（2019）提出的`cvxpylayers` 软件包可用于将每个 $\boldsymbol{y}^t = h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^{t-1})$ 背后的计算过程封装为计算图。

由于计算图会随着求解下层均衡问题所需的迭代次数增加而增长，因此当求解均衡问题需要过多迭代时，即使使用自动微分，也可能因计算图过深而无法高效展开。特别是对于问题（1.1），$h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^{t-1})$ 等价于一个带约束二次规划，其存储成本高于大多数机器学习应用中的问题；在这些应用中，下层问题通常没有约束。

截断自动微分。 存储大型计算图的困难可以通过截断

自动微分来规避：它只展开计算图的最后一部分，因此只能得到近似梯度（Shaban 等人，2019）。

单阶段自动微分。 另一种近似方案称为单阶段自动微分，它在单循环中同时更新 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$。具体而言，每当下层的 $\boldsymbol{y}$ 更新一步时，单阶段自动微分就将其展开，以获得用于更新上层 $\boldsymbol{x}$ 的梯度。该方案在许多任务上取得了令人满意的表现（Luketina等人，2016；Metz等人，2016；Finn等人，2017；Liu 等人，2018；Xu 等人，2019）。Li 等人提出的（2022a）方法也具有类似的单循环结构。

上述近似方案的性能已得到广泛测试（Franceschi 等人，2018；Wu等人，2018）。Ablin等人（2020）讨论了自动微分的效率；Ji等人（2021）分析了自动微分和近似隐式微分的收敛速率；Yang等人（2021）和Dagr´eou等人（2022）研究了基于自动微分的方法中的方差缩减。关于机器学习应用中的其他双层规划算法，参见例如Pedregosa（2016）；Lorraine和Duvenaud（2018）；MacKay等人（2019）；Bae和Grosse（2020）；Ji等人（2021）；Grazzi 等人（2021）；Zucchet和Sacramento（2022）。读者还可参阅Liu等人（2021）的综述。

我们的方法。 我们的方法与先前工作的一个主要区别在于，我们不尝试近似由精确 ID 或自动微分返回的雅可比矩阵 $\partial \boldsymbol{y}^*/\partial \boldsymbol{x}$ 。相反，我们直接使用受经典经济竞争理论启发的两个无层级模型来近似原始双层规划；据我们所知，这一视角是新颖的，尽管由此得到的算法确实与现有的基于 ID 和基于自动微分的方法具有一些共同特征，正如我们将要看到的。

4 动机

本节通过讨论如何使用单层模型界定斯塔克尔伯格双寡头模型（参见示例 2.3），来阐述所提出方法的动机。

4.1 经典模型

我们首先基于示例 2.3介绍经典古诺双寡头模型和垄断模型的市场结构。

古诺双寡头。企业A失去了先动优势，必须与企业B同时做出决策。通过求解以下问题，可以得到两家企业的最优决策 $\bar{x}$ 和 $\bar{y}$

均衡问题

$$\begin{cases} \bar{x} = \arg\max\limits_{x \geq 0} \ l(x, \bar{y}), \\ \bar{y} = \arg\max\limits_{y \geq 0} \ g(\bar{x}, y). \end{cases} \tag{4.1}$$

最优解 为 $\bar{x} = 1/3$ 和 $\bar{y} = 1/3$，企业A获得的最优利润为 $1/9$。

垄断。 企业A接管企业B。为求得最优产量 $\widehat{x}$ 和 $\widehat{y}$，我们需要求解以下优化问题

$$\widehat{x}, \widehat{y} = \arg\max_{x, y \geq 0} \ l(x, y). \tag{4.2}$$

最优解为 $\widehat{x} = 1/2$ 和 $\widehat{y} = 0$，企业A的最优利润增至 $1/4$。

比较。 直观而言，当领导者放弃先动优势时，其市场势力会减弱；相反，当领导者接管企业B的业务时，其市场势力达到最大。事实上，比较企业A的最优利润可得 $1/4 > 1/8 > 1/9$，这表明斯塔克尔伯格双寡头的上界是垄断，下界是古诺双寡头。

4.2 我们的模型

我们的重点是缩小上界和下界之间的间隙。为此，我们将企业B针对企业A决策的最佳反应“分解”为一个动力过程。由于企业B面临一个约束优化问题，投影梯度下降法为达到最优性提供了一条自然路径。具体而言，给定 x 和步长 $r > 0$，企业B寻找其最优决策所经历的动力过程可以通过一个梯度下降步来描述，该步骤表示为

$$h(x, y) = \max\{y - r \cdot (1 - x - 2y), 0\}.$$

从 $h^{(0)}(x, \ y)$ 开始：$= y$，因此， $h^{(t+1)}(x, \ y)$ 可以递归定义为 $h(x, \ h^{(t)}(x, \ y))$（t =0，1，... ...）。

现在，我们可以介绍 T 步古诺双寡头模型和 T 步垄断模型。

T步古诺双寡头。企业A和企业B仍然同时选择 x 和 y ，但企业A做决策时，会预期企业B在给定 x 的情况下将更新其决策 T 次，即从

y到 $h^{(T)}(x,\ y)$。因此，可以通过求解以下问题找到最优决策 $\bar{x}$ 和 $\bar{y}$

$$\begin{cases} \bar{x} = \arg\max\limits_{x \geq 0}\ l(x, h^{(T)}(x, \bar{y})), \\ \bar{y} = \arg\max\limits_{y \geq 0}\ g(\bar{x}, y). \end{cases} \tag{4.3}$$

T步垄断。 企业A对企业B施加决策 y ，但允许企业B从 y开始更新其决策 T 步。为找到最优决策 $\widehat{x}$ 和 $\widehat{y}$ （$\widehat{y}$ 指的是最初由企业A规定的企业B产量），我们需要求解

$$\widehat{x}, \widehat{y} = \arg\max_{x,y \geq 0}\ l(x, h^{(T)}(x, \bar{y})). \tag{4.4}$$

我们着手回答的问题如下：在这两个新模型中，企业A的最优利润是否会更接近斯塔克尔伯格双寡头中的最优利润？直观地说，答案是肯定的，因为T步古诺双寡头在企业B的响应上对“无预期”和“完全预期”进行了插值，而 T步双寡头则在企业B的决策上对“完全指令”和“无指令”进行了插值。因此，在 T步垄断和 T步古诺模型中，企业A的市场势力将分别上升和下降，从而使其最优利润更接近斯塔克尔伯格双寡头中的最优利润。

一个关键观察。从这些公式可以看出，所提出的两个模型分别可视为经典的古诺双寡头和经典的垄断模型，其中企业A的目标函数由 $l(x,\ y)$ 改为 $l^{(T)}(x,\ y)$：$= l(x,\ h^{(T)}(x,\ y))$。基于这一观察，我们现在可以用这两个模型来近似问题（1.1）。

5 主要结果

我们将问题（1.1）视为斯塔克尔伯格博弈，并分别将其中上层和下层的决策者称为领导者和跟随者。为了扩展第4节介绍的两个模型，我们首先需要一个函数来描述跟随者迭代更新决策并趋向均衡的过程。由于下层是一个变分不等式，由方程（3.2）定义的函数 $h(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})$ 是一个自然的选择。同样地，从 $h^{(0)}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})$：$= \boldsymbol{y}$ 出发，我们可以递归地定义 $h^{(t+1)}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}) = h(\boldsymbol{x},\ h^{(t)}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}))$ 和 $l^{(T)}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}) = l(\boldsymbol{x},\ h^{(T)}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}))$.

T步古诺博弈。领导者和跟随者同时选择 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}$ 和 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}$，但领导者会沿着跟随者的演化路径向前展望 T 步。因此，均衡状态（$\bar{\boldsymbol{x}},\ \bar{\boldsymbol{y}}$）

因此可以通过求解以下问题得到

$$\begin{cases} \bar{\boldsymbol{x}} \in \arg\min\limits_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{X}} \ l^{(T)}(\boldsymbol{x}, \bar{\boldsymbol{y}}), \\ \bar{\boldsymbol{y}} \in \mathbb{Y}^*(\bar{\boldsymbol{x}}). \end{cases} \tag{5.1}$$

这是一个纳什均衡问题：没有跟随者有动机改变其决策，因为$\bar{\boldsymbol{y}} \in \mathbb{Y}^*(\bar{\boldsymbol{x}})$；在给定 $\bar{\boldsymbol{y}}$的情况下，领导者也无法进一步降低 $l^{(T)}(\boldsymbol{x}, \bar{\boldsymbol{y}})$。

T步垄断模型。领导者为跟随者指定决策 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}$，但允许他们基于 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}$更新决策 T 步。为找到最优决策 $\widehat{\boldsymbol{x}}$ 和 $\widehat{\boldsymbol{y}}$，我们需要求解

$$\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}} \in \arg\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{X}, \boldsymbol{y}\in\mathbb{Y}.} \ l^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}). \tag{5.2}$$

这是一个单层优化问题，其中领导者和跟随者的决策被一并优化。

5.1 最优性间隙

我们首先给出以下命题，无论 $h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 的形式如何，也无论 $f(\boldsymbol{x}, \cdot)$ 具有什么性质，该命题均成立。

命题 5.1。设用于表述问题 $h: \mathbb{X} \to \mathbb{Y}$ （(5.1) 和(5.2) 的函数满足以下条件

$$\lim_{t\to\infty} h^{(t)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{X}, \ \boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}. \tag{5.3}$$

那么，对于分别求解问题(5.1) 和(5.2)的任意$(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$ 和$(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})$，以及求解问题(1.1)的$(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{y}^*)$，我们有 $l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}) \le l(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{y}^*) \le l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$。

证明。 证明见附录 A.2 。 □

我们的分析需要以下假设。

假设 5.2。 集合 $\mathbb{X}$ 是闭凸集； $l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 二阶连续可微；对于所有 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}$ 和 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}$，均有 $\|\nabla_{\boldsymbol{x}} l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\|_2 \le G_x$, $\|\nabla_{\boldsymbol{y}} l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\|_2 \le G_y$, $\|\nabla_{\boldsymbol{xy}} l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\|_2 \le G_{xy}$, 以及 $\|\nabla_{\boldsymbol{yy}} l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\|_2 \le G_{yy}$。

假设 5.3. 集合 $\mathbb{Y}$是闭凸的； $f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 连续可微；存在 $\gamma > 0$，使得对于所有 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}$， $f(\boldsymbol{x}, \cdot)$ 是 γ-强单调的；对于所有 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}$和 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}$，我们有 $\|\nabla_{\boldsymbol{y}} f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\|_2 \le L_y$且$\|\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\|_2 \le L_x$。

假设 5.4。 函数 $h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 是二阶连续可微的；内在参数$r < 2\gamma/L_y^2$；对于所有情况，我们有 $\|\nabla_{\boldsymbol{x}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\|_2 \le H_x$, $\|\nabla_{\boldsymbol{xy}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\|_2 \le H_{xy}$, 以及 $\|\nabla_{\boldsymbol{yy}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\|_2 \le H_{yy}$

$\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}$ 和 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}$。

假设5.2和5.3与 Ghadimi 和 Wang（2018）以及 Hong 等人（2020）采用的假设类似，但有一个显著区别：他们要求下层优化问题具有强凸性，而我们要求变分不等式具有强单调性。根据 Hiriart-Urruty（1982），只要 $\mathbb{Y}$ 的边界光滑，$h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$就可微；若不满足这一条件，$h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$仍几乎处处可微（Rademacher，1919年）。在假设5.3和5.4下，命题 3.2确保条件（5.3）成立。此外，根据命题 3.3，可以定义一个将 $\boldsymbol{x}$ 映射到 $\mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$的可微隐函数 $y^*(\boldsymbol{x})$。于是，问题（1.1）的目标函数可改写为 $l^*(\boldsymbol{x}) = l(\boldsymbol{x}, y^*(\boldsymbol{x}))$。在这些假设下，例2.1给出了两个模型的变分不等式表述。

命题 5.5。 假设 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$ 是 T-步古诺博弈 (5.1)的解，则对于所有 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \mathbb{X} \times \mathbb{Y}$，有

$$\langle \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}), \boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}} \rangle + \langle f(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}), \boldsymbol{y} - \bar{\boldsymbol{y}} \rangle \geq 0. \tag{5.4}$$

反之亦然，只要 $l^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 关于 $\boldsymbol{x}$ 是凸的。

命题 5.6。 假设 $(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})$ 是 T-步垄断模型 (5.2)的解，则对于所有 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \mathbb{X} \times \mathbb{Y}$，有

$$\langle \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}), \boldsymbol{x} - \widehat{\boldsymbol{x}} \rangle + \langle \nabla_{\boldsymbol{y}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}), \boldsymbol{y} - \widehat{\boldsymbol{y}} \rangle \geq 0. \tag{5.5}$$

反之亦然，只要 $l^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 关于 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 是凸的。

接下来，我们将确认 T-步古诺博弈和垄断模型分别为问题（1.1）提供上界和下界。更重要的是，我们将证明，随着 T 的增加，两个模型提供的界之间的间隙以很快的速度收敛于 0，这意味着较小的 T 将构成良好的近似。

定理 *5.7.* 在假设*5.2–5.4*下，假设 $l^*(\boldsymbol{x})$ 在 $\mathbb{X}$ 上是 μ-强凸的，并将 $\boldsymbol{x}^*$ 记为 $l^*(\boldsymbol{x})$ 在 $\mathbb{X}$ 上的唯一极小点。记 $\eta = 1 - 2\gamma r + r^2 L_y^2$、$G_l = G_x + L_x G_y$，且不失一般性地假设 $\mu = 1$ 和 $\gamma = 1$。对于任意满足问题 *(5.1)* 的 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$，记 $\bar{\delta}^T = l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}) - l^*(\boldsymbol{x}^*)$，则有

$$0 \leq \bar{\delta}^T \leq G_l \cdot G_y L_x \cdot \eta^{T/2}. \tag{5.6}$$

进一步假设 $d_{\max} =$ 的直径 $(\mathbb{Y}) < \infty$，对于任意满足问题 $(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})$ 的(5.2)，记$\widehat{\delta}^T = l^*(\boldsymbol{x}^*) - l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})$，则有

$$0 \leq \widehat{\delta}^T \leq M \cdot G_l \cdot \eta^{T/2} + G_y d_{\max} \cdot (1 + H_{xy} + L_x H_{yy}) \cdot (T+1) \cdot \eta^{T/2}, \tag{5.7}$$

其中 $M = 2G_y L_x + G_{xy} d_{\max} + 2L_x G_{yy} d_{\max} + G_y H_x$。

证明。 命题 5.1 直接保证 $\bar{\delta}^T \geq 0$ 和 $\widehat{\delta}^T \geq 0$；其余证明见附录 A.2。

□

根据定理 5.7，我们可以设计以下简单流程，以求得问题（1.1）的近似可行解。(1) 选择合适的 $T \in \mathbb{N}$。(2) 求解两个变分不等式问题（5.4）和（5.5），分别得到 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$ 和 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$，然后计算 $\delta^T = l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}) - l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})$。(3) 如果 δ^T 足够小，则接受 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$ 作为近似可行解；否则，增大T 并返回步骤 (2)。我们预计上述流程会很快收敛，因为定理 5.7 保证，随着 T 增大，间隙以指数速率递减。

5.2 求解算法

两个变分不等式问题 (5.4) 和 (5.5) 可以使用投影法求解，伪代码见算法 1和2 。

算法 1 求解 T 步古诺博弈。输入： $\boldsymbol{x}^0 \in \mathbb{X}$, $\boldsymbol{y}^0 \in \mathbb{Y}$，步长 α。产量： $\bar{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{X}$ 和$\bar{\boldsymbol{y}} \in \mathbb{Y}$。

1: **对于** $t = 0, 1, \ldots,$ **执行**2: 计算 $l_{\boldsymbol{x}} = \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\boldsymbol{x}^t, \boldsymbol{y}^t)$.3: 设置 $\boldsymbol{x}^{t+1} = \arg\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}} \alpha \cdot \langle l_{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^t \rangle + \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^t\|_2$ 和 $\boldsymbol{y}^{t+1} = h^{(T)}(\boldsymbol{x}^t, \boldsymbol{y}^t)$.4: 收敛后，跳出循环并返回 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}) = (\boldsymbol{x}^t, \boldsymbol{y}^t)$.5: **结束循环**

算法 2 求解 T 步垄断模型。输入： $\boldsymbol{x}^0 \in \mathbb{X}$, $\boldsymbol{y}^0 \in \mathbb{Y}$，步长 α 和 β。产量： $\widehat{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{X}$和 $\widehat{\boldsymbol{y}} \in \mathbb{Y}$。

1: 对于 $t = 0$**, 1, .. . 执行循环 2: 计算** $l_{\boldsymbol{x}} = \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\boldsymbol{x}^t, \boldsymbol{y}^t)$ **和** $l_{\boldsymbol{y}} = \nabla_{\boldsymbol{y}} l^{(T)}(\boldsymbol{x}^t, \boldsymbol{y}^t)$。 **3: 设置** $\boldsymbol{x}^{t+1} = \arg\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}} \alpha \cdot \langle l_{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^t \rangle + \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^t\|_2$ **和** $\boldsymbol{y}^{t+1} = \arg\min_{\boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}} \beta \cdot \langle l_{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^t \rangle + \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^t\|_2$. **4: 收敛后，退出并返回** $(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}) = (\boldsymbol{x}^t, \boldsymbol{y}^t)$。 **5: 循环结束**

在这两种算法中，领导者与跟随者共同演化，也就是说，他们在共享的演化过程中每一步都同时更新策略。因此，这些算法打破了双层级结构，将求解过程转变为单循环。在该单循环的每次迭代中，我们需要计算 $l^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = l(\boldsymbol{x}, h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}))$ 的梯度，该函数具有显式表达式。因此，我们可以直接通过自动微分计算其梯度。为此，我们首先需要将函数$h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$作为可微层接入可微编程框架，例如 TensorFlow （ Abadi 等人，2016 ）或 PyTorch （ Paszke 等人，2019 ）。如前文所述，使用 cvxpylayers 包对 $h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 进行编码始终是一种选择。然而，在许多情况下， $h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 可以直接编码为仅由初等运算构成的可微程序（不涉及可微优化求解器

）。在这种情况下，自动微分保证计算 $l^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 的梯度所需的计算复杂度，可以严格界定为计算 $l^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 本身的计算复杂度。有关更多详情，请参阅附录 B.1 。

摘要。 总而言之，我们的主要结果是，问题（1.1）可以通过两个更易处理的问题进行紧致且高效的界定，而这两个问题可由基于自动微分的一阶方法求解。因此，所提出的近似方案有望显著降低计算开销，从而获得问题（1.1）的高质量局部解。

比较。 所提出的框架衔接了在不同背景下提出的两类用于近似双层规划的通用方案。第一类包括若干求解斯塔克尔伯格拥堵博弈（SCG）的经典启发式方法（见第 2.2 节），其历史可追溯至 20 世纪 70 年代。例如，Dantzig 等人 (1979) 提出一种求解斯塔克尔伯格拥堵博弈的方法：假设跟随者与领导者合作，以实现系统最优状态，这实际上使领导者变成了“独裁者”。另一种方法是 Tan 等人 (1979) 提出的算法，该算法在彼此的决策保持为固定输入的条件下，迭代求出领导者和跟随者的最佳反应，使领导者和跟随者相互竞争，形成“`古诺式”博弈。我们的方法扩展了这两种方法所依据的行为假设。

第二类是基于 AD 的近似方案。所提出的算法与单阶段自动微分相似（见第 3.2 节），其最初的动机来自机器学习应用，例如神经架构搜索（Liu 等人，2018）。单阶段自动微分与我们的算法在结构上相似；区别在于下层解（跟随者决策）的更新方式。在我们的方案中，跟随者可以根据自身利益（ T 步古诺）或领导者的指令（T步垄断）移动 T步。前者可视为单阶段自动微分的自然扩展；而后者则代表一种新颖的行为解释。基于这种解释，我们的方案为原问题提供了可调节的上界和下界。

通过将这两类受不同学科中不同应用驱动的近似方案结合起来，我们的工作为二者都带来了新的见解。一方面，我们表明，借助机器学习领域的思想，可以在计算开销适中的情况下，显著改进双层规划的经典博弈论近似。另一方面，我们从博弈论的视角为基于自动微分的方法提供了理论依据。

扩展。 我们将若干扩展内容留待附录讨论。在附录 B.2中，我们讨论了其他形式的选择 $h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$，以构建两个拟议模型。在附录 B.3中，我们讨论如何在放宽关于$l^*(\boldsymbol{x})$ 的全局凸性假设后，高效地搜索全局解。在附录 B.4中，我们针对下层变分不等式存在多个解的情况，基于算法 1 和 2开发了一种启发式方法。

6 数值示例

为验证我们的分析见解，我们在斯塔克尔伯格双寡头模型上测试了该框架（参见例2.3）。我们分别通过算法 T步古诺双寡头模型（4.1）和 T步垄断模型（4.2），使用算法 1和 2求解，其中 $r = 0.4$和 $T = 0, \ldots\ldots, 4$。随后将企业A的利润列于表 1，结果表明，随着 T 增大，任一新模型所得的企业A最优利润都会迅速收敛至斯塔克尔伯格双寡头模型对应的利润。其递减速率也符合定理 5.7的预期。

表1：企业A的 在具有不同 T的 T步古诺双寡头和 T步垄断模型中的利润 .

T	0	1	2	3	4
T步古诺	0.111	0.124	0.125	0.125	0.125
T步垄断	0.250	0.150	0.130	0.126	0.125

其他实验的结果见附录C。这些额外实验旨在测试所提出的方案在来自不同应用的规模更大且更具挑战性的问题上的表现，并将其与基准双层算法进行比较。

7 结论

众所周知，非合作博弈可能导致低效结果。由于自利的参与者之间缺乏合作，这种效率损失——也称为无政府代价——在交通运输领域的布雷斯悖论中得到了最好的诠释（Braess，1968）。然而，Roughgarden 和 Tardos (2002) 证明，出行者在用户均衡（UE）下经历的总旅行时间，其上限恰好是所有出行者完全合作时所达到的总旅行时间；这种状态称为系统最优（SO）。显然，UE 状态对应于古诺博弈的结果，因为每个人都平等竞争；而只有将所有出行者的选择垄断起来，才能实现 SO 状态。本文的发现表明，“古诺”状态与“垄断”状态之间的差距不仅可以设定上界，还可以通过同时赋予领导者在古诺博弈中有限的预见能力，并给予跟随者在垄断模型中有限的自主空间来缩小。此外，在适当条件下，两者都可以收敛到斯塔克尔伯格博弈的结果，从而达成一种妥协：领导者不能直接支配跟随者的选择，但可以间接影响他们；跟随者享有选择自由，但必须听从领导者的引导。

作为斯塔克尔伯格博弈（双层规划）的近似模型而提出的模型，采用基于自动微分的方法求解。这使我们的工作与许多已开发的双层规划算法相关联。

机器学习文献中（Liu 等人，2021）的研究。我们的理论结果有助于回答近期备受争议的一个问题：基于 AD 的近似方案何时以及为何能够得到令人满意的解？我们的工作通过揭示以下事实，为这一讨论作出了贡献：除了 AD 本身的强大能力（Ablin等人，2020）之外，底层的博弈论结构也对这些方法的能力有着重要影响。我们希望这一发现能推动更多来自不同领域的跨学科研究，这些领域都将双层规划纳入其工具箱。

附录 A 证明5

A.1 命题的证明5.1

命题 5.1 的证明。首先，$(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$ 是问题（1.1）的一个可行解，因为 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}) \in \{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) : \boldsymbol{x} \in \mathbb{X}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})\}$。因此，我们可以直接得出 $l(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{y}^*) \leq l(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}) = l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$。接下来，由于对于所有 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) : \boldsymbol{x} \in \mathbb{X}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})\}$，均有 $l(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = l(\boldsymbol{x}, h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})) = l^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$，我们声称 $(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{y}^*)$ 也能求解以下优化问题

$$\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{y}^* \in \underset{\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x}).}{\arg\min} l^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}). \tag{A.1}$$

最终，$\{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) : \boldsymbol{x} \in \mathbb{X}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})\} \subseteq \mathbb{X} \times \mathbb{Y}$ 意味着 $l^{(T)}(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}}) \leq l^{(T)}(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{y}^*) = l(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{y}^*)$。

□

A.2 定理5.7 的证明

我们首先给出以下引理。

Le引理 A.1. 若 $l^*(\boldsymbol{x}) = l(\boldsymbol{x}, y^*(\boldsymbol{x}))$ 在 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}$ 上是 μ-强凸的，则有

$$\mu \cdot \|\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}\|_2^2 \leq \langle \nabla l^*(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \rangle, \quad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{X}. \tag{A.2}$$

证明。 由于 $l^*(\boldsymbol{x})$ 是 μ-强凸的，因此有

$$\begin{cases} l^*(\boldsymbol{x}^*) \geq l^*(\boldsymbol{x}) + \langle \nabla l^*(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x} \rangle + \dfrac{\mu}{2} \cdot \|\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}\|_2^2, \\ l^*(\boldsymbol{x}) \geq l^*(\boldsymbol{x}^*) + \langle \nabla l^*(\boldsymbol{x}^*), \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \rangle + \dfrac{\mu}{2} \cdot \|\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}\|_2^2. \end{cases} \tag{A.3}$$

将这两个方程相加，得到

$$0 \geq \langle \nabla l^*(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x} \rangle + \langle \nabla l^*(\boldsymbol{x}^*), \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \rangle + \mu \cdot \|\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}\|_2^2 \geq \langle \nabla l^*(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x} \rangle + \mu \cdot \|\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}\|_2^2, \tag{A.4}$$

其中第二个不等式源于以下事实： $\boldsymbol{x}^*$ 使 $l^*(\boldsymbol{x})$达到最小值。 □

引理 A.2。 对于所有 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}$，有 $\|\nabla y^*(\boldsymbol{x})\|_2 \leq L_x/\gamma$.

证明。 令 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{x}'$ 为 $\mathbb{X}$ 中任意两个点。记 $\boldsymbol{y}^* = y^*(\boldsymbol{x})$ 和 $\boldsymbol{y}'^* = y^*(\boldsymbol{x}')$。于是有

$$\begin{cases} \langle f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*), \boldsymbol{y}'^* - \boldsymbol{y}^* \rangle \geq 0, \\ \langle f(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{y}'^*), \boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{y}'^* \rangle \geq 0. \end{cases} \tag{A.5}$$

将这两个不等式相加，得到

$$\langle f(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{y}'^*) - f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}'^*) + f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}'^*) - f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*), \boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{y}'^* \rangle \geq 0. \tag{A.6}$$

进一步可得

$$\langle f(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{y}'^*) - f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}'^*), \boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{y}'^* \rangle \geq \langle f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*) - f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}'^*), \boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{y}'^* \rangle \geq \gamma \cdot \|\boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{y}'^*\|_2^2, \tag{A.7}$$

其中，第一个不等式由（A.6）得出，第二个不等式则基于以下假设： f关于 $\|\cdot\|_2$ 是强单调的。注意到 $f(\cdot, \boldsymbol{y})$ 是 L_x-Lipschitz 连续，并利用柯西-施瓦茨不等式，最终得到

$$\|\boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{y}'^*\|_2 \leq \frac{1}{\gamma} \cdot \|f(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{y}'^*) - f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}'^*)\|_2 \leq \frac{L_x}{\gamma} \cdot \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'\|_2. \tag{A.8}$$

令 $\boldsymbol{x}' \to \boldsymbol{x}$，即可完成证明。 □

引理 A.3. 函数 $l^*(\boldsymbol{x})$ 关于 $\|\cdot\|_2$ 是 $(G_x + L_x G_y/\gamma)$-*Lipschitz* 连续的。

证明。 注意到 $l(\boldsymbol{x}, \cdot)$、 $l(\cdot, \boldsymbol{y})$ 和 $y^*(\boldsymbol{x})$ 分别是 G_y-、 G_x- 和 L_x/γ-Lipschitz 连续的，直接应用范数三角不等式可得：

$$\begin{aligned} \|\nabla l^*(\boldsymbol{x})\| &= \|\nabla_{\boldsymbol{x}} l(\boldsymbol{x}, y^*(\boldsymbol{x})) + \nabla y^*(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{y}} l(\boldsymbol{x}, y^*(\boldsymbol{x}))\| \\ &\leq \|\nabla_{\boldsymbol{x}} l(\boldsymbol{x}, y^*(\boldsymbol{x}))\| + \|\nabla y^*(\boldsymbol{x})\| \cdot \|\nabla_{\boldsymbol{y}} l(\boldsymbol{x}, y^*(\boldsymbol{x}))\| \leq G_x + \frac{L_x G_y}{\gamma}. \end{aligned} \tag{A.9}$$

至此，证明完成。 □

引理 A.4。 应用链式法则可直接得到以下公式

$$\nabla l^*(\boldsymbol{x}) = \nabla_{\boldsymbol{x}} l(\boldsymbol{x}, y^*(\boldsymbol{x})) + \nabla y^*(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{y}} l(\boldsymbol{x}, y^*(\boldsymbol{x})), \tag{A.10}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \nabla_{\boldsymbol{x}} l(\boldsymbol{x}, h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})) + \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{y}} l(\boldsymbol{x}, h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})), \tag{A.11}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(t)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \nabla_{\boldsymbol{x}} h(\boldsymbol{x}, h^{(t-1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})) + \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(t-1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{y}} h(\boldsymbol{x}, h^{(t-1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})), \tag{A.12}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{y}} h^{(t)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \nabla_{\boldsymbol{y}} h(\boldsymbol{x}, h^{(t-1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})) \cdot \nabla_{\boldsymbol{y}} h^{(t-1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}). \tag{A.13}$$

命题 A.5。 对于任意 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}$ 和 $\boldsymbol{y}^* = y^*(\boldsymbol{x})$，我们有

$$\|\nabla y^*(\boldsymbol{x}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)\|_2 \leq \frac{L_x}{\gamma} \cdot \eta^{T/2}. \tag{A.14}$$

证明。 通过重新表述命题3.4中的方程（3.2），我们得到

$$\nabla y^*(\boldsymbol{x}) = \nabla_{\boldsymbol{x}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*) + \nabla y^*(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{y}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*). \tag{A.15}$$

根据方程（A.12）、（A.13）和（A.15），我们可以通过迭代得到

$$\begin{aligned} \nabla y^*(\boldsymbol{x}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*) &= \left(\nabla y^*(\boldsymbol{x}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T-1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)\right) \cdot \nabla_{\boldsymbol{y}} h^{(1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*) \\ &= \left(\nabla y^*(\boldsymbol{x}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T-2)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)\right) \cdot \nabla_{\boldsymbol{y}} h^{(2)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*) \\ &= \cdots = \nabla y^*(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{y}} h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*). \end{aligned} \tag{A.16}$$

利用范数三角不等式并应用引理 A.2，我们得到

$$\|\nabla y^*(\boldsymbol{x}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)\|_2 \leq \|\nabla y^*(\boldsymbol{x})\|_2 \cdot \|\nabla_{\boldsymbol{y}} h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)\|_2 \leq \frac{L_x}{\gamma} \cdot \|\nabla_{\boldsymbol{y}} h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)\|_2. \tag{A.17}$$

最后，应用命题3.2即可完成证明。 □

剩余的证明将分为两部分，即第一部分和第二部分，分别证明给出的 $\bar{\delta}^T = l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}) - l^*(\boldsymbol{x})$ 和 $\widehat{\delta}^T = l^*(\boldsymbol{x}) - l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})$ 的上界。

A.2.1 剩余证明的第一部分

通过应用引理A.3，我们可以得到

$$l(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}) - l^*(\boldsymbol{x}^*) = l^*(\bar{\boldsymbol{x}}) - l^*(\boldsymbol{x}^*) \leq \left(G_x + \frac{L_x G_y}{\gamma}\right) \cdot \|\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*\|_2 \tag{A.18}$$

因此，我们只需要对 $\|\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*\|_2$进行界定。根据命题 5.5，我们有

$$\langle \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}), \boldsymbol{x}^* - \bar{\boldsymbol{x}} \rangle \geq 0. \tag{A.19}$$

因此，我们可以在方程（ $\boldsymbol{x} = \bar{\boldsymbol{x}}$ A.2）中代入，并与方程（A.19）结合，得到

$$\mu \cdot \|\boldsymbol{x}^* - \bar{\boldsymbol{x}}\|_2^2 \leq \langle \nabla l^*(\bar{\boldsymbol{x}}), \bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \rangle + \langle \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}), \boldsymbol{x}^* - \bar{\boldsymbol{x}} \rangle = \langle \nabla l^*(\bar{\boldsymbol{x}}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}), \bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \rangle \tag{A.20}$$

然后，利用柯西-施瓦茨不等式，我们得到

$$\|\boldsymbol{x}^* - \bar{\boldsymbol{x}}\|_2 \leq \frac{1}{\mu} \cdot \|\nabla l^*(\bar{\boldsymbol{x}}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})\|_2. \tag{A.21}$$

注意到 $\bar{\boldsymbol{y}} = y^*(\bar{\boldsymbol{x}}) = h^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$，将方程（ $\nabla l^*(\bar{\boldsymbol{x}})$ 和 $\nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$ 中的项分别用方程（A.10）和（A.11）代替，然后应用命题A.5，最终得到

$$\|\boldsymbol{x}^* - \bar{\boldsymbol{x}}\|_2 \leq \frac{1}{\mu} \cdot \|\nabla y^*(\bar{\boldsymbol{x}}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})\|_2 \cdot \|\nabla_{\boldsymbol{y}} l(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})\|_2 \leq \frac{G_y L_x}{\mu\gamma} \cdot \eta^{T/2}. \tag{A.22}$$

因此，结合方程（A.18）和（A.22），即可完成证明 .

A.2.2 剩余证明的第二部分

我们还需要一个引理来证明给定给 $\widehat{\delta}^T = l^*(\boldsymbol{x}) - l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})$ 的上界。

引理 A.6。 对于任意 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{X}$ 和 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}$，我们有

$$\|\nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) - \nabla y^*(\boldsymbol{x})\|_2 \leq \left(\|\nabla_{\boldsymbol{x}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\|_2 + \delta^0 T \left(H_{xy} + \frac{L_x}{\gamma} \cdot H_{yy} \right) \right) \eta^{T/2}, \tag{A.23}$$

其中 $\delta^0 = \|\boldsymbol{y} - y^*(\boldsymbol{x})\|_2$。

证明。下文中，我们记 $\boldsymbol{y}^t = h^{(t)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$、 $\boldsymbol{D}^{(t)} = \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(t)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^0) - \nabla y^*(\boldsymbol{x})$、 $\boldsymbol{E}^{(t)} = \nabla_{\boldsymbol{x}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^{t-1}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)$ 和 $\boldsymbol{F}(t) = \nabla_{\boldsymbol{y}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^{t-1}) - \nabla_{\boldsymbol{y}} h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^*)$、 $\boldsymbol{H}^{(t)} = \nabla_{\boldsymbol{y}} h^{(t)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}^{T-t})$ 以及 $\boldsymbol{J} = \nabla y^*(\boldsymbol{x})$。然后递归应用 (A.12) 和 (A.15)，可得

$$\begin{aligned} \boldsymbol{D}^{(T)} &= \boldsymbol{D}^{(T-1)} \cdot \boldsymbol{H}^{(1)} + \boldsymbol{E}^{(T)} + \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{F}^{(T)} \\ &= \boldsymbol{D}^{(T-2)} \cdot \boldsymbol{H}^{(2)} + \boldsymbol{E}^{(T-1)} \cdot \boldsymbol{H}^{(1)} + \boldsymbol{E}^{(T)} + \boldsymbol{J} \cdot (\boldsymbol{F}^{(T-1)} \cdot \boldsymbol{H}^{(1)} + \boldsymbol{F}^{(T)}) \\ &= \cdots = \boldsymbol{D}^{(0)} \cdot \boldsymbol{H}^{(T)} + \sum_{t=0}^{T} \boldsymbol{E}^{(T-t)} \cdot \boldsymbol{H}^{(t)} + \boldsymbol{J} \cdot \sum_{t=0}^{T} \boldsymbol{F}^{(T-t)} \cdot \boldsymbol{H}^{(t)} \end{aligned} \tag{A.24}$$

应用范数三角不等式，可得

$$\|\boldsymbol{D}^{(T)}\|_2 \leq \|\boldsymbol{D}^{(0)}\|_2 \cdot \|\boldsymbol{H}^{(T)}\|_2 + \sum_{t=0}^{T}(\|\boldsymbol{E}^{(T-t)}\|_2 + \|\boldsymbol{J}\|_2 \cdot \|\boldsymbol{F}^{(T-t)}\|_2) \cdot \|\boldsymbol{H}^{(t)}\|_2. \tag{A.25}$$

引理 A.2 和命题 3.2 进而推出 $\|\boldsymbol{J}\|_2 \leq L_x/\gamma$，$\|\boldsymbol{E}^{(t)}\|_2 \leq H_{xy} \cdot \|\boldsymbol{y}^{t-1} - \boldsymbol{y}^*\| \leq H_{xy}\delta^0\eta^{t/2}$，$\|\boldsymbol{F}^{(t)}\|_2 \leq H_{yy} \cdot \|\boldsymbol{y}^{t-1} - \boldsymbol{y}^*\| \leq H_{yy}\delta^0\eta^{t/2}$，并且还有 $\|\boldsymbol{H}\|^t \leq \eta^{t/2}$。因此，最终得到

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{D}^{(T)}\|_2 &\leq \eta^{t/2}\|\boldsymbol{D}^{(0)}\|_2 + \sum_{t=0}^{T}(H_{xy}\delta^0\eta^{(T-t)/2} + \frac{L_x}{\gamma} \cdot H_{yy}\delta^0\eta^{(T-t)/2}) \cdot \eta^{t/2} \\ &= \left(\|\boldsymbol{D}^{(0)}\|_2 + \delta^0(T+1)\left(H_{xy} + \frac{L_x}{\gamma} \cdot H_{yy}\right)\right)\eta^{T/2}.\end{aligned} \tag{A.26}$$

□

现在我们可以完成证明了。利用三角不等式并应用引理 A.3，可得

$$\begin{aligned}l^*(\boldsymbol{x}^*) - l(\widehat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})) &\leq |l^*(\boldsymbol{x}^*) - l^*(\widehat{\boldsymbol{x}})| + |l(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - l(\widehat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}))|_2 \\ &\leq \left(G_x + \frac{L_x G_y}{\gamma}\right) \cdot \|\widehat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*\|_2 + G_y \cdot \|y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}) - h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})\|_2\end{aligned} \tag{A.27}$$

我们首先对 $\|y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}) - h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})\|_2$ 进行界定。我们可以得到

$$\|y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}) - h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})\|_2 \leq \eta^{T/2} \cdot \|\widehat{\boldsymbol{y}} - y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})\|_2 \leq d_{\max} \cdot \eta^{T/2}, \tag{A.28}$$

其中 $d_{\max} = \text{直径}(\mathbb{Y}) < \infty$。

然后我们对 $\|\widehat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*\|$进行界定。根据命题 5.6，我们有

$$\langle \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}), \boldsymbol{x}^* - \widehat{\boldsymbol{x}} \rangle \geq 0. \tag{A.29}$$

将其与公式（A.2）结合，令 $\boldsymbol{x} = \widehat{\boldsymbol{x}}$ 并使用柯西-施瓦茨不等式，可得

$$\begin{aligned}&\mu \cdot \|\boldsymbol{x}^* - \widehat{\boldsymbol{x}}\|_2^2 \\ &\leq \langle \nabla l^*(\widehat{\boldsymbol{x}}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}), \widehat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \rangle \\ &= \langle \nabla l^*(\widehat{\boldsymbol{x}}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) + \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}), \widehat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \rangle \\ &\leq (\|\nabla l^*(\widehat{\boldsymbol{x}}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}))\|_2 + \|\nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})\|_2) \cdot \|\widehat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*\|_2.\end{aligned} \tag{A.30}$$

因此，我们有

$$\|\widehat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*\|_2 \leq \frac{1}{\mu} \cdot (\|\nabla l^*(\widehat{\boldsymbol{x}}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}))\|_2 + \|\nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})\|_2). \quad \text{(A.31)}$$

应用命题 A.5，我们便有

$$\|\nabla l^*(\widehat{\boldsymbol{x}}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}))\|_2 \leq \|\nabla y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}))\|_2 \cdot \|\nabla_{\boldsymbol{y}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}))\|_2 \leq \frac{G_y L_x \eta^{T/2}}{\gamma}. \quad \text{(A.32)}$$

同时，利用范数三角不等式，我们有

$$\begin{aligned} \|\nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})\|_2 &= \|\nabla_{\boldsymbol{x}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}))\|_2 \\ &+ \|\nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}))\|_2 \cdot \|\nabla_{\boldsymbol{y}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{y}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}))\|_2 \\ &+ \|\nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})\|_2 \cdot \|\nabla_{\boldsymbol{y}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}))\|_2. \end{aligned} \quad \text{(A.33)}$$

首先，注意到 $\nabla_{\boldsymbol{x}} l(\boldsymbol{x}, \cdot)$ 是 G_{xy}-Lipschitz 连续的，我们有

$$\|\nabla_{\boldsymbol{x}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{x}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}))\|_2 \leq G_{xy} \cdot \|y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}) - h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})\|_2 \leq G_{xy} d_{\max} \eta^{T/2}, \quad \text{(A.34)}$$

其中，第二个不等式由等式（A.28）得出。

其次，应用三角不等式，我们可以得到

$$\|\nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}))\|_2 \leq \|\nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{x}} y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})\|_2 + \|\nabla y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})\|_2 \leq \frac{L_x}{\gamma}(1 + \eta^{T/2}). \quad \text{(A.35)}$$

其中，第二个不等式由引理 A.2 和 3.2得出。注意到 $\nabla_{\boldsymbol{y}} l(\boldsymbol{x}, \cdot)$ 是 G_{yy}-Lipschitz 连续的，我们也有

$$\|\nabla_{\boldsymbol{y}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{y}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})\|_2 \leq G_{yy} \cdot \|y^*(\widehat{\boldsymbol{x}}) - h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})\|_2 \leq G_{yy} d_{\max} \eta^{T/2}, \quad \text{(A.36)}$$

其中，第二个不等式也由（A.28）得出。

第三，我们有 $\|\nabla_{\boldsymbol{y}} l(\widehat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}))\|_2 \leq G_y$。同时，我们还有

$$\begin{aligned} &\|\nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})\|_2 \\ &\qquad \leq \|\nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})) - \nabla_{\boldsymbol{x}} y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})\|_2 + \|\nabla_{\boldsymbol{x}} h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} y^*(\widehat{\boldsymbol{x}})\|_2 \\ &\qquad \leq \frac{L_x \eta^{T/2}}{\gamma} + \left(H_x + T d_{\max}\left(H_{xy} + \frac{L_x}{\gamma} \cdot H_{yy}\right)\right)\eta^{T/2}, \end{aligned} \quad \text{(A.37)}$$

其中第二个不等式由引理A.6得出。

综合这些结果，我们得到

$$\mu\|\widehat{\boldsymbol{x}}^* - \boldsymbol{x}^*\|_2 \leq \frac{G_y L_x \eta^{T/2}}{\gamma} + G_{xy} d_{\max} \cdot \eta^{T/2} + \frac{L_x}{\gamma}(1+\eta^{T/2}) G_{yy} d_{\max} \cdot \eta^{T/2} + G_y \left(\frac{L_x \eta^{T/2}}{\gamma} + \left(H_x + T d_{\max} \left(H_{xy} + \frac{L_x}{\gamma} \cdot H_{yy} \right) \right) \cdot \eta^{T/2} \right). \tag{A.38}$$

不失一般性，假设 $\gamma = 1$ 和 $\mu = 1$。那么我们有

$$\begin{aligned} \|\widehat{\boldsymbol{x}}^* - \boldsymbol{x}^*\|_2 &\leq G_y L_x \cdot \eta^{T/2} + G_{xy} d_{\max} \cdot \eta^{T/2} + L_x (1+\eta^{T/2}) G_{yy} d_{\max} \cdot \eta^{T/2} \\ &\quad + G_y \left(L_x \cdot \eta^{T/2} + (H_x + T d_{\max} (H_{xy} + L_x \cdot H_{yy})) \cdot \eta^{T/2} \right) \\ &\leq (2 G_y L_x + G_{xy} d_{\max} + 2 L_x G_{yy} d_{\max} + G_y H_x) \cdot \eta^{T/2} \\ &\quad + G_y (H_{xy} + L_x H_y y) \cdot (T+1) \cdot \eta^{T/2}. \end{aligned} \tag{A.39}$$

最终，我们得到

$$l^*(\boldsymbol{x}^*) - l(\widehat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\widehat{\boldsymbol{x}}, \widehat{\boldsymbol{y}})) \leq G_y (H_{xy} + L_x H_y y) \cdot (T+1) \cdot \eta^{T/2} + M \cdot \eta^{T/2}, \tag{A.40}$$

其中 $M = (G_x + L_x G_y) \cdot (2 G_y L_x + G_{xy} d_{\max} + 2 L_x G_{yy} d_{\max} + G_y H_x) + G_y d_{\max}$。

B 第 5 节结果的进一步讨论

B.1 算法 1 和 2 中的梯度计算

下面简要讨论如何对 $h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 进行编码，使其能够输入可微编程框架。为简单起见，我们记 $g(\boldsymbol{z}) = \arg\min_{\boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{z}\|_2$，则 $h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = g(\boldsymbol{y} - r \cdot f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}))$，其中 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y} - r \cdot f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$。因此，问题归结为如何对 $g(\boldsymbol{z})$ 进行编码。由于 $g(\boldsymbol{z})$ 等价于一个欧几里得投影问题，因此始终可以通过 cvxpylayers 对其进行编码（Agrawal 等人，2019），如前文所述。这里我们考虑其他一些编码策略。例如，当 $g(\boldsymbol{z})$ 为解析形式时，有三种情形，此时我们可以根据其解析表达式直接对 $g(\boldsymbol{z})$ 进行编码。

- (i) 当 $\mathbb{Y} = \mathbb{R}^n$ （全空间）时，我们总有 $g(\boldsymbol{z}) = \boldsymbol{z}$。
- (ii) 当 $\mathbb{Y} = \{\boldsymbol{y} : \boldsymbol{a} \leq \boldsymbol{y} \leq \boldsymbol{b}\}$ （盒约束）时，我们有 $g(\boldsymbol{z}) = \min\{\max\{\boldsymbol{z}, \boldsymbol{a}\}, \boldsymbol{b}\}$。
- (iii) 当 $\mathbb{Y} = \{\boldsymbol{y} : \mathbf{1}^\top \boldsymbol{y} = 1\}$ （公平性约束）时，我们有 $g(\boldsymbol{z}) = \boldsymbol{z} - (\mathbf{1}^\top \boldsymbol{z} - 1)/n$。

现在，我们可以处理一种更复杂的情况：在许多实际应用中，$\mathbb{Y}$ 是概率单纯形。

• (iv) 当 $\mathbb{Y} = \{\boldsymbol{y} \geq \mathbf{0} : \mathbf{1}^\intercal \boldsymbol{y} = 1\}$ (a 概率单纯形约束）时，我们可以将 $\mathbb{Y} = \{\boldsymbol{y} : \boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}\} \cap \{\boldsymbol{y} : \mathbf{1}^\intercal \boldsymbol{y} = 1\}$ 改写为盒约束与公平性约束的交集。因此，我们可以使用 Dykstra 投影算法（Boyle 和 Dykstra，1986）求解 $g(\boldsymbol{z})$，该算法通过将 $\boldsymbol{z}$ 交替投影到两个集合上，直到找到不动点。这个交替投影过程是可微的，因为对这两个集合的投影分别对应情形 (ii) 和 (iii)，且二者都是解析的。

随后，我们可以进一步考虑一种更复杂的情形：将 $\mathbb{Y}$改写为 $\mathbb{Y} = \mathbb{Y}_1 \times \cdots \times \mathbb{Y}_n$，即若干其他集合的笛卡尔积。此时，可以分别在 $\mathbb{Y}_i (i = 1, \ldots\ldots, n)$ 上进行投影。因此，只要每个 $\mathbb{Y}_i$ 都属于上述讨论的四种情形之一，函数$g(\boldsymbol{z})$ 仍然可以轻松地编写为可微程序。将投影问题 $g(\boldsymbol{z})$ 分解为 n 个并行子问题，也可以加速自动微分。

备注 B.1. 这里需要说明，“可微程序”并不一定处处可微，而是仅指该程序可以输入到可微编程框架中。例如，在情形 (ii) 中，运算 $\min\{\max\{\boldsymbol{z}, \boldsymbol{a}\}, \boldsymbol{b}\}$ 在 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{b}$处不可微；在这些点上，可以使用次梯度来运行自动微分。

B.2 用于构造两个模型的其他函数

为了构造所提出的两个模型，对 $h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 的选择并非绝对。事实上，我们已经证明，只要 $h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 能够为问题（1.1）中的下层变分不等式绘制出一条可证明收敛的路径，那么所得的 T 步古诺博弈和垄断模型将分别为问题（1.1）提供上界和下界。例如，镜像下降法（Nemirovskij 和 Yudin，1983）给出

$$h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \underset{\boldsymbol{y}' \in \mathbb{Y}}{\arg\min}\ r \cdot \langle f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}), \boldsymbol{y}' - \boldsymbol{y} \rangle + D_\phi(\boldsymbol{y}', \boldsymbol{y}), \tag{B.1}$$

其中，$D_\phi(\boldsymbol{y}', \boldsymbol{y}) = \phi(\boldsymbol{y}') - \phi(\boldsymbol{y}) - \langle \nabla\phi(\boldsymbol{y})\ \boldsymbol{y}' - \boldsymbol{y} \rangle$ 是由强凸函数 $\phi : \mathbb{Y} \to \mathbb{R}$诱导的 $\boldsymbol{y}'$ 与 $\boldsymbol{y}$之间的 Bregman 散度。关于镜像下降算法收敛到变分不等式（VI）解的充分条件，请参阅 Mertikopoulos 和 Zhou（2019）。当 $\mathbb{Y}$ 是概率单纯形（或若干概率单纯形的笛卡尔积），且 $D_\phi(\boldsymbol{y}', \boldsymbol{y})$定义为 KL 散度时，$h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$具有解析形式（Beck 和 Teboulle，2003），因此更容易通过自动微分（AD）进行微分。

B.3 全局优化策略

在定理 5.7中，我们假设 $l^*(\boldsymbol{x})$ 是全局凸的；一般而言，对于大多数实际应用，这一假设并不成立。本节简要讨论如何搜索问题（1.1）的全局极小值点。通常，当优化问题不是凸问题时，我们别无选择，只能使用适当的一阶方法，以不同的初始解多次运行，然后接受其中最好的局部解。但对于双层规划，反复搜索局部解并不容易。尽管如此，利用我们的框架，我们可以先将 T 设为一个较小的值（例如 0 或 1），然后多次运行算法 1 和/或算法 2，每次使用随机生成的初始解。这一步可以视为对整体问题几何结构进行快速粗略的“扫描”。之后，T步古诺博弈或垄断模型的最佳局部解，可用于粗略估计问题（1.1）的全局最优解可能位于何处。随后，我们可以按照第 5.1节末尾设计的流程，在该区域内搜索问题（1.1）的最优解。

B.4 扩展至具有多个下层解的双层规划

接下来，我们讨论 $\mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$ 不是单元素集合的情形，此时需要制定一条原则性规则来选择 a$\boldsymbol{y}^* \in \mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$，以评估 $l(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}^*)$。为此，乐观原则和悲观原则分别根据领导者目标函数，选择最佳解和最差解。换言之，它们分别求解

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{X}} \min_{\boldsymbol{y}^*\in\mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})} l(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}^*) \quad \text{and} \quad \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{X}} \max_{\boldsymbol{y}^*\in\mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})} l(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}^*). \tag{B.2}$$

上述两个问题通常分别称为强斯塔克尔伯格博弈和弱斯塔克尔伯格博弈（Loridan 和 Morgan, 1996）。将这两个问题的解记为 $(\boldsymbol{x}^*_{\text{opt}},\boldsymbol{y}^*_{\text{opt}})$ 和 $(\boldsymbol{x}^*_{\text{pes}},\boldsymbol{y}^*_{\text{pes}})$，则有 $l(\boldsymbol{x}^*_{\text{opt}},\boldsymbol{y}^*_{\text{opt}}) \le l(\boldsymbol{x}^*_{\text{pes}},\boldsymbol{y}^*_{\text{pes}})$。在文献中，强斯塔克尔伯格博弈更常被视为“标准”形式（Luo 等人，1996）。原始形式（1.1）确实是一个强斯塔克尔伯格博弈，因为它允许领导者选择任意$\boldsymbol{y}^* \in \mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$。因此，领导者总能选择最有利的（即乐观的）解。根据命题 5.1，T步古诺博弈和垄断模型给出的解始终分别为 $l(\boldsymbol{x}^*_{\text{opt}},\boldsymbol{y}^*_{\text{opt}})$ 的上界和下界。因此，我们希望探究，当 $T\to\infty$ 时，我们的模型是否仍能为 $l(\boldsymbol{x}^*_{\text{opt}},\boldsymbol{y}^*_{\text{opt}})$ 提供任意紧的界。

遗憾的是，我们无法对此问题给出肯定的回答。事实上，在一个 T 阶古诺博弈中，跟随者决策 $\bar{\boldsymbol{y}}$ 不一定是在所有 $\boldsymbol{y}^* \in \mathbb{Y}^*(\bar{\boldsymbol{x}})$ 中使 $l(\bar{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{y}^*)$ 最小的决策。换言之，T 阶古诺博弈本身并非乐观型；相反，它必须让跟随者

自行选择一个均衡。因此，即使 T 足够大， T 阶古诺博弈仍可能存在多个解。如果某个解 $(\bar{x}, \bar{y})$ 恰好满足 $\bar{y} \in \arg\min_{y^*} l(\bar{x}, y^*)$，那么我们预期 $l(\bar{x}, \bar{y})$ 可能接近 $l(x^*_{\text{opt}}, y^*_{\text{opt}})$。否则，如果 $\bar{y}$ 是在 $\mathbb{Y}^*(\bar{x})$ 中违背领导者利益的解，那么间隙仍可能大得令人无法接受。下面给出一个例子。

例 B.2. 考虑以下问题

$$\begin{aligned} &\min_{1\geq x\geq 0.5} \quad (x+y^*-1)^2 \\ &s.t. \quad y^* \in \arg\min_{y\in\mathbb{R}} \; g(x,y) = \begin{cases} (y-x-0.25)^2, & if\ y \geq x+0.25, \\ 0, & if\ y \in (x-0.25, x+0.25), \\ (y-x+0.25)^2, & if\ y \leq x-0.25, \end{cases} \end{aligned} \tag{B.3}$$

它等价于以下问题

$$\begin{aligned} &\min_{1\geq x\geq 0.5} \quad (x+y^*-1)^2 \\ &s.t. \quad y^* \in [x-0.25, x+0.25]. \end{aligned} \tag{B.4}$$

在此设定下，(B.4) 的最优解集为 $\mathbb{Z}^* = \{(x,y)\colon x \in [0.5,1], y = 1-x\}$，相应的 0 步古诺博弈的解集为 $\mathbb{Z}^{(0)} = \mathbb{Z}^* \cup \{(x,y)\colon x = 0.5, y \in [0.5, 0.75]\}$。接下来我们证明，对于所有 T 步古诺模型，其解集仍然是 $\mathbb{Z}^{(0)}$，对所有 $T > 0$。

$$\nabla_y g(x,y) = \begin{cases} 2(y-x-0.25), & if\ y \geq x+0.25, \\ 0, & if\ y \in (x-0.25, x+0.25), \\ 2(y-x+0.25), & if\ y \leq x-0.25. \end{cases} \tag{B.5}$$

接下来我们可以定义

$$h(x,y) = \arg\min_{1\geq x\geq 0.5} \quad y - r\cdot\nabla_y g(x,y) \tag{B.6}$$

用于描述动力学，其满足 $h(x,y) = y$，对任意 $x \in [0.5,1]$ 和 $y \in [x-0.25, x+0.25]$ 均成立。因此，对于任意 $\bar{y} \in [0.5, 0.75]$，以下问题的最优解为

$$\min_{1\geq x\geq 0.5} \quad (x + h^{(T)}(x,\bar{y}) - 1)^2 = (x+\bar{y}-1)^2 \tag{B.7}$$

对所有 $T > 0$，仍然是 $\bar{x} = 0.5$。因此，对于所有 $T \in \mathbb{N}$，我们有 $\mathbb{Z}^{(T)} = \mathbb{Z}^* \cup \{(x,y)\colon x = 0.5, y \in [0.5, 0.75]\}$。在这些解中，最差的一个是 $(\bar{x}, \bar{y}) = (0.5, 0.75)$，其对应的目标值为 $0.0625 > 0$。

相比之下， T步垄断模型在某种程度上本质上是乐观的。直观而言，如果 $(\hat{x}, \hat{y})$

通过足够大的 T 求解 T步垄断模型，我们可以预期， $h^{(T)}(\hat{\boldsymbol{x}},\ \hat{\boldsymbol{y}})$ 接近于所有 $\boldsymbol{y}^* \in \mathbb{Y}^*(\hat{\boldsymbol{x}})$ 中使 $l(\hat{\boldsymbol{x}},\ \boldsymbol{y}^*)$ 最小的那个，因为领导者有权通过操纵跟随者的初始策略来引导其演化路径。

受上述讨论的启发，我们设计了一种启发式方法，通过迭代求解 T-步古诺博弈和垄断模型来近似求解问题（1.1）。具体而言，将 T 设为一个较小的数，并以任意的 $(\boldsymbol{x}^0, \boldsymbol{y}^0) \in \mathbb{X} \times \mathbb{Y}$作为起点后，我们可以先运行算法 1 和 2，分别得到 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$ 和 $(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}})$。如果 $l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$ 与 $l^{(T)}(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}})$ 之间的间隙足够小，那么我们便可接受 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$ 作为问题（1.1）的近似解。否则，可以增大 T 并重复上述过程。但在下一次迭代中，我们可以使用热启动初始解，而不是原始的 $(\boldsymbol{x}^0, \boldsymbol{y}^0)$，来运行算法 1 和 2，从而减少达到收敛所需的迭代次数。具体而言，该初始解可设为 $(\hat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}}))$，其中 $(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}})$ 是上一次迭代中算法 2 的输出。如前所述，$(\hat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}}))$ 这一对具有内在的乐观性。因此，如果在下一次迭代中，我们从 $(\hat{\boldsymbol{x}}, h^{(T)}(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}}))$ 开始运行算法 1，那么新的输出 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$ 更有可能落在 $(\boldsymbol{x}^*_{\text{opt}}, \boldsymbol{y}^*_{\text{opt}})$ 的邻域内。伪代码见算法 B.1。我们不确定算法 B.1 中的间隙 $\delta^{(T)}$ 最终是否会收敛至 0，或至少在实际应用中足够小；关于该算法的理论分析留待未来工作。不过，后文将对其进行数值测试。

算法 B.1 用于近似问题（1.1）的自适应初始化策略

1: **输入：** $(\boldsymbol{x}^0, \boldsymbol{y}^0) \in \mathbb{X} \times \mathbb{Y}$, T为一个较小的整数
2: **当真时执行**
3: 从 $(\boldsymbol{x}^0, \boldsymbol{y}^0)$ 开始，运行算法 1 以得到 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$，然后运行算法 2 以得到 $(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}})$。
4: 如果 $l^{(T)}(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}}) - l^{(T)}(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}})$ 足够小，则退出并返回 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{y}})$；否则，增大 T并设置 $(\boldsymbol{x}^0,\ \boldsymbol{y}^0) = (\hat{\boldsymbol{x}},\ h^{(T)}(\hat{\boldsymbol{x}},\ \hat{\boldsymbol{y}}))$】【。
5: **结束循环**

C 数值实验

在实验 I（附录 C.1）中，我们将研究一个下层问题不具有唯一解的双层规划。我们将对算法 B.1 进行数值测试。在实验 II（附录C.2）中，我们研究布雷斯网络（布雷斯，1968）上的网络设计问题。我们将比较由以下两类 T 步古诺博弈和垄断模型所得到的解：采用两种 $h(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})$：投影法和镜像下降法（参见附录 B.2）。最后，在实验 III（附录 C.3）中，我们研究真实交通网络上的网络问题，并将所提出的方案与许多现有的双层规划算法进行比较。

C.1 实验 I

我们首先考虑以下形式的双层规划

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{a}+\boldsymbol{x}\geq 0} \ & \|\boldsymbol{x}\|_2 + \langle \boldsymbol{D}^\mathsf{T}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{v}), \boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{y}^*\rangle, \\ \text{s.t. } & x_4 = 0, \quad \boldsymbol{v} = \boldsymbol{D}\boldsymbol{y}, \\ & \boldsymbol{y}^* \in \underset{\boldsymbol{y}\geq 0,\ \mathbf{1}^\mathsf{T}\boldsymbol{y}=1}{\arg\min} \ \langle \mathbf{1}^\mathsf{T}, (\boldsymbol{a}+\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{v} + \frac{1}{2}\cdot\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{v}^2\rangle, \end{aligned} \tag{C.1}$$

其中 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^4$, $\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^4$, $\boldsymbol{w}=[2,1.1,0.9,0.01]^\mathsf{T}$, $\boldsymbol{b}=[15,2,8,5]^\mathsf{T}$, $\boldsymbol{a}=[2,3,4,5]^\mathsf{T}$, $\boldsymbol{D}=[\boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_3, \boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_4, \boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_4, \boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_3]$。因此，下层是凸但非强凸的优化问题，其最优解集包含多个解。我们首先针对 1 和 2 运行算法，取值范围为 $T=0,\ldots,5$。每一轮中，$\boldsymbol{x}^0$ 从高斯分布中随机采样，而 $\boldsymbol{y}^0$ 则先从均匀分布中随机采样，再重新加权以满足约束。结果（见图C.1）展示了从不同初始点得到的目标函数值箱线图。这验证了我们的结论：T步古诺博弈可能存在目标函数值不同的多个解，而 T步垄断模型始终具有唯一的最优目标函数值。

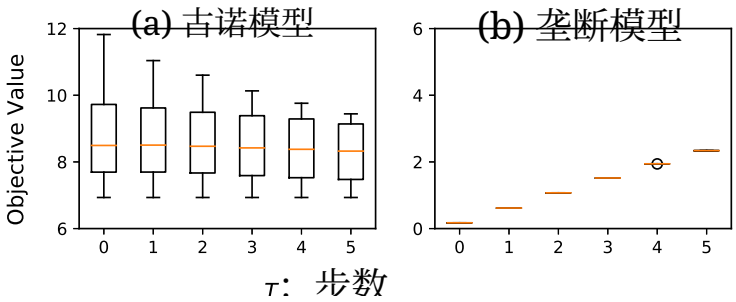

图 C.1：从不同初始点出发时，算法 1 和2 的比较。

接下来，我们比较两种初始化策略。(a) 固定初始化策略：我们遵循第 5.2 节末尾制定的流程；每当调用算法 1 和 2 时，初始解均设为 $\boldsymbol{x}^0=[0,0,0,0]^\mathsf{T}$ 和$\boldsymbol{y}^0=[0.4,0.3,0.2,0.1]$。(b) 自适应初始化策略：我们直接运行算法 B.1，并以 $\boldsymbol{x}^0=[0,0,0,0]^\mathsf{T}$ 和 $\boldsymbol{y}^0=[0.4,0.3,0.2,0.1]$ 作为初始输入。测试这两种策略时，我们逐步将 T增加为 0、1、2、3、4、5、7、10、20、30、40、50、60、70。结果（见图 C.2）表明，使用固定初始化策略时，当 $T=70$时，上界和下界之间的间隙仍不满足要求。相反，使用自适应初始化策略时，仅当 T 为 1 时，就能找到近似最优可行解，因为先前的垄断模型确定了“乐观”解的一个邻域。同时，两个模型之间的间隙逐渐减小至 0，最终收敛到精确最优解。

未来，我们将测试算法 B.1 在更复杂的示例上的表现。但在这个特殊示例中，

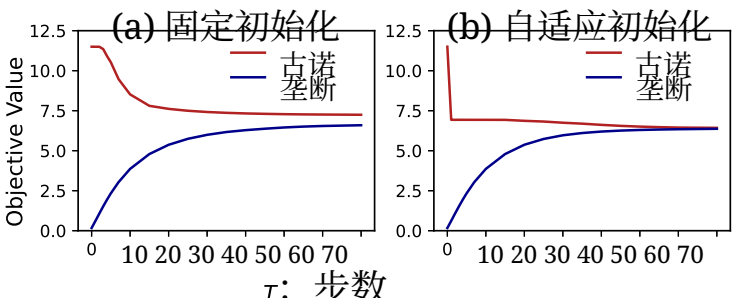

图 C.2：C　　固定与自适应初始化策略（算法B.1　　）.

其处理具有非唯一下层解的双层规划的有效性得到了验证。

C.2 实验 II

随后，我们在一个经典的网络设计问题上测试我们的算法。该问题研究如何在交通网络中增加容量以减少拥堵。我们将网络建模为有向图 $\mathcal{G}(\mathbb{N},\mathbb{A})$，其中$\mathbb{N}$ 和 $\mathbb{A}$ 分别为节点集和弧集。我们将起讫点（OD）对集合记为 $\mathbb{W}\subseteq\mathbb{N}\times\mathbb{N}$，将连接各 OD 对的路径集合记为 $\mathbb{K}\subseteq 2^{\mathbb{A}}$。假设每个 OD 对 $w\in\mathbb{W}$对应 q_w 辆车。令 $\mathbb{K}_w\subseteq\mathbb{K}$ 为连接 w的所有路径所构成的集合。我们假设交通规划者的目标是容量增强所涉及的总货币成本与车辆经历的总旅行时间的加权和。将原始弧容量记为 $\boldsymbol{s}\in\mathbb{R}_+^{|\mathbb{A}|}$，将规划主体增加的容量记为 $\boldsymbol{x}$。我们假设~容量只能增加到选定的弧上，这些弧记为 $\mathbb{A}\subseteq\mathbb{A}$。于是， $\boldsymbol{x}$的可行域变为 $\mathbb{X}=\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}_+^{|\mathbb{A}|}:\ x_a=0,\ a\in\mathbb{A}\setminus\widetilde{\mathbb{A}}\}$。我们将容量增强所涉及的总货币成本记为 $m(\boldsymbol{x})=\langle\boldsymbol{b},\boldsymbol{x}^2\rangle$，其中 $\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}_+^{|\mathbb{A}|}$ 为成本参数。假设弧行程时间由 $u(\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})=\boldsymbol{u}_0\cdot\big(1+0.15\cdot(\boldsymbol{v}/(\boldsymbol{s}+\boldsymbol{x}))^4\big)$给出，其中 $\boldsymbol{v}$、$\boldsymbol{u}_0\in\mathbb{R}_+^{|\mathbb{A}|}$ 分别表示弧车辆流量和自由流行程时间。同时，将车辆的路径选择写成向量 $\boldsymbol{y}=(y_k)_{k\in\mathbb{K}}$，其中 y_k 等于在 w 之间选择路径$k\in\mathbb{K}_w$的车辆比例，并将使用各条路径的行程时间记为 $\boldsymbol{c}=(c_k)_{k\in\mathbb{K}}$。记 $\Sigma_{w,k}$ 为起讫点—路径关联矩阵；若路径 $k\in\mathbb{K}_w$，则$\Sigma_{w,k}$ 等于 1，否则为 0。同时，记 $\Lambda_{a,k}$ 为弧—路径关联矩阵；若 $a\in\mathbb{A}_k$，则$\Lambda_{a,k}$ 等于 1，否则为 0。为方便记号，我们写作 $\boldsymbol{\Lambda}=(\Lambda_{a,k})_{a\in\mathbb{A},k\in\mathbb{K}}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}=(\Sigma_{w,k})_{w\in\mathbb{W},k\in\mathbb{K}}$。令 $\boldsymbol{d}=(d_k)_{k\in\mathbb{K}}$ 为一个向量，若$k\in\mathbb{K}_w$，则 $d_k=q_w$。于是， $\boldsymbol{y}$ 的可行域可写为 $\mathbb{Y}=\{\boldsymbol{y}\geq 0:\ \boldsymbol{\Sigma y}=\boldsymbol{1}\}$. 。同时，我们还有 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{y})$ 和 $\boldsymbol{c}=\boldsymbol{\Lambda}^{\top}u(\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})$。例 2.2 的结果表明，Wardrop 均衡集合 $\mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x})$是以下变分不等式问题的解集：

$$\langle\boldsymbol{\Lambda}^{\top}u(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{y}^*)),\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}^*\rangle\geq 0,\quad\forall\boldsymbol{y}\in\mathbb{Y}. \tag{C.2}$$

因此，网络设计问题可写为以下形式

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{X}} \quad & \langle u(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}^*)), \boldsymbol{v}^*)\rangle + \gamma \cdot m(\boldsymbol{x}), \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{v}^* = \boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{y}^*), \quad \boldsymbol{y}^* \in \mathbb{Y}^*(\boldsymbol{x}). \end{aligned} \tag{C.3}$$

我们首先求解布雷斯网络（布雷斯，1968）上的网络设计问题，如图C.3所示。该网络有三条路径连接起点（节点 1）和终点（节点 4）：路径 1 使用链路 1 和 3，路径 2 使用链路 1、4 和 5，路径 3 使用链路 2 和 5。布雷斯悖论（布雷斯，1968）表明，不应增加链路 4（桥接链路）的容量。否则，均衡状态下出行者经历的总旅行时间会增加。

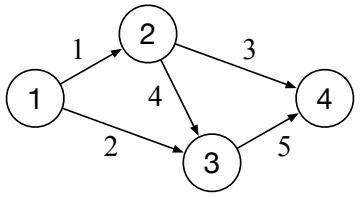

图 C.3：布雷斯网络。

我们设定 $m(\boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{w}, \boldsymbol{x}^2 \rangle$, $\boldsymbol{d} = 6$, $\boldsymbol{u}_0 = [1, 3, 3, 0.5, 1]^\mathsf{T}$, $\boldsymbol{v}_0 = [2, 4, 4, 1, 2]^\mathsf{T}$, $\boldsymbol{w} = [1, 3, 3, 0.5, 1]^\mathsf{T}$, 以及$\gamma = 1$。首先，采用 Li 等人（2020）和 Li 等人（2022b）提出的两种现有基于自动微分的方法求解该问题；这两种方法都会展开求解下层变分不等式问题的完整计算过程。它们的区别在于所展开的算法：第一种展开投影法，第二种展开镜像下降法（见 B.2 节）。在以下实验中，Li 等人（2020）和 Li 等人（2022b）的方法所返回的解将作为基准。测试我们的方案时，我们还针对两种类型的 $h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$构建 T步古诺博弈和垄断模型：投影法和镜像下降法。为了探究这些模型的解能否较好地近似基准解，我们在实验中逐步增加 T，直至间隙消失。我们使用算法 1 和 2 求解模型；所有受测算法（包括基准方法和我们的算法）均采用相同的超参数，但学习率 r除外：投影法版本的学习率设为 0.1，镜像下降版本的学习率设为 0.25。表 C.1 报告了解（上层：容量增强；下层：路径选择）、相应的目标函数值、总中央处理器（2.9 GHz 四核 Intel Core i7）时间，以及求得这些解所需的迭代次数（为简化记法，我们用“S”表示基准方法，用“C-”和“M-”表示具有不同Ts 的 T 步古诺博弈和垄断模型）。

两种基准算法返回的解完全相同；链路上没有增加容量

表 C.1：求解布雷斯网络上的连续网络设计问题时， T 步古诺博弈和 T 步垄断模型的性能。

(i) 设置 A：使用投影法对下层求解过程进行建模。

方法	时间（秒）	迭代次数	值	容量增强					路径选择		
				$a=1$	$a=2$	$a=3$	$a=4$	$a=5$	$k=1$	$k=2$	$k=3$
C-0	1.06	80	38.786	2.075	0	0	2.826	2.075	0.000	1.000	0.000
C-1	6.68	109	28.920	0.936	0.016	0.016	0	0.936	0.339	0.321	0.339
S	12.5	92	28.920	0.928	0.016	0.016	0	0.928	0.333	0.333	0.333
M-4	8.22	46	28.920	0.928	0.016	0.016	0	0.928	0.329	0.343	0.329
M-3	35.1	339	26.745	0.867	0.027	0.027	0.192	0.867	0.156	0.688	0.156
M-2	2.16	43	26.789	0.744	0.039	0.039	0.009	0.744	0.217	0.565	0.217
M-1	0.31	40	27.142	0.603	0.066	0.066	0.000	0.603	0.225	0.549	0.225
M-0	0.03	70	26.722	0.821	0.030	0.030	0.113	0.821	0.424	0.151	0.424

(ii) 设定B：使用镜像下降方法对下层求解过程建模 d.

方法	时间（秒）	迭代次数	值	容量增强					路径选择		
				$a=1$	$a=2$	$a=3$	$a=4$	$a=5$	$k=1$	$k=2$	$k=3$
C-0	0.103	264	38.786	2.075	0	0	2.830	2.075	0.000	1.000	0.000
C-1	0.148	254	28.925	0.966	0.015	0.015	0	0.966	0.339	0.322	0.339
C-2	0.208	270	28.920	0.939	0.016	0.016	0	0.939	0.339	0.321	0.339
S	0.393	232	28.920	0.928	0.016	0.016	0	0.928	0.333	0.333	0.333
M-5	0.292	232	28.920	0.928	0.016	0.016	0	0.928	0.319	0.363	0.319
M-4	0.562	512	26.722	0.821	0.03	0.03	0.083	0.821	0.169	0.663	0.169
M-3	0.459	440	26.722	0.821	0.03	0.03	0.084	0.821	0.179	0.642	0.179
M-2	0.323	381	26.722	0.821	0.03	0.03	0.085	0.821	0.190	0.620	0.190
M-1	0.235	341	26.722	0.82	0.03	0.03	0.088	0.82	0.202	0.596	0.202
M-0	0.151	447	26.722	0.821	0.03	0.03	0.095	0.821	0.425	0.151	0.425

4，这与布雷斯悖论所示的情况一致。然而，如果我们采用 T步古诺博弈和垄断模型来近似原问题，那么当 T 过小时，链路4上就会增加容量，从而陷入这一陷阱。然而，稍微增大 T，就能在两种模型中解决这一问题，无论采用哪种方法对下层求解过程建模。值得注意的是，当 T 相同时，采用投影法构建的模型所得解质量更好。然而，解质量的些许提升几乎无法抵消计算成本的增加。以 C-1 为例，与镜像下降法相比，采用投影法只能使目标值降低（$28.92-28.925$）$/28.925=0.170$ %，但所需 CPU 时间却增加了（$6.68-0.148$）$/0.148=4410$%。最后，我们指出一个经典结果：C-0 和 M-0 在许多网络上都能得到令人满意的解（Marcotte，1986）；而在此，我们特意选择布雷斯网络作为反例。我们的目的是说明，如果我们的模型能够在布雷斯网络上实现良好的近似，那么我们就能更有信心地将其应用于其他问题。

C.3 实验 III

接下来，我们转向南达科他州苏福尔斯市的网络；该网络的数据（拓扑结构、出行需求、弧段旅行时间函数）下载自交通网络GitHub 代码库[1]。对于该网络，我们有 $|\mathbb{N}| = 24$， $|\mathbb{A}| = 76$，$|\mathbb{K}| = 638$。我们选取 10 条弧来扩展容量（见表C.2）。

表 C.2：所选的扩容弧及其对应的成本参数。

a	16	19	17	20	25	26	29	48	39	74
b_a	26.0	26.0	40.0	40.0	25.0	25.0	48.0	48.0	34.0	34.0

在实验中，我们设定 $\gamma = 0.01$。根据实验 II 的结果（见附录C.2），我们采用镜像下降法来构建所提出的模型。我们将自己的方法与优化和机器学习文献中研究过的一些既有双层规划方法进行比较。

- “c0”：算法1 ，其中 $T = 0$。该方法求解一个零步古诺博弈。（Tan 等人，1979 年）提出的经典单层近似方案本质上求解的是同一个模型，但采用了不同的算法。

- “c1”：算法 1 ，其中 $T = 1$。它求解一个 1 步古诺博弈。可以将其视为单阶段自动微分的直接扩展（Liu 等人，2018）。

- “c10”：算法 1 ，其中 $T = 10$。它求解一个 10 步古诺博弈。

- “m0”：算法 2 ，其中 $T = 0$。它求解一个 0 步垄断模型。由（Dantzig 等人，1979 年）提出的经典单层近似方案本质上求解的是同一个模型。

- “m45”：算法 2 ，其中 $T = 45$。它求解一个 45 步垄断模型。

- “ad”：由 Li 等人（2022b）提出的算法。

- “tad”：截断自动微分的扩展（Shaban 等人，2019）。它与“ad”类似；区别在于，我们只对求解下层问题的动力过程的最后 10 次迭代进行展开。

- “隐式微分”：由Li 等人（2020）提出的隐式微分方案。

- “aid”：近似隐式微分的扩展。它与“id”具有相同的整体结构；不同之处在于，我们仅保留用于矩阵求逆的纽曼级数中的前 10 项。

[1] https://github.com/bstabler/TransportationNetworks/tree/master/SiouxFalls

- “sid”：我们 ex 采用以下方法提出的双时间尺度单循环方法Hong 等人(2020)。

我们为所有这些算法恰当地设计了超参数，并依据类似的终止条件停止运行算法。结果如图C.4所示，其中报告了总 CPU（2.9 GHz 四核 Intel Core i7）时间、最终最优性间隙、总迭代次数以及每次迭代的 CPU 时间。

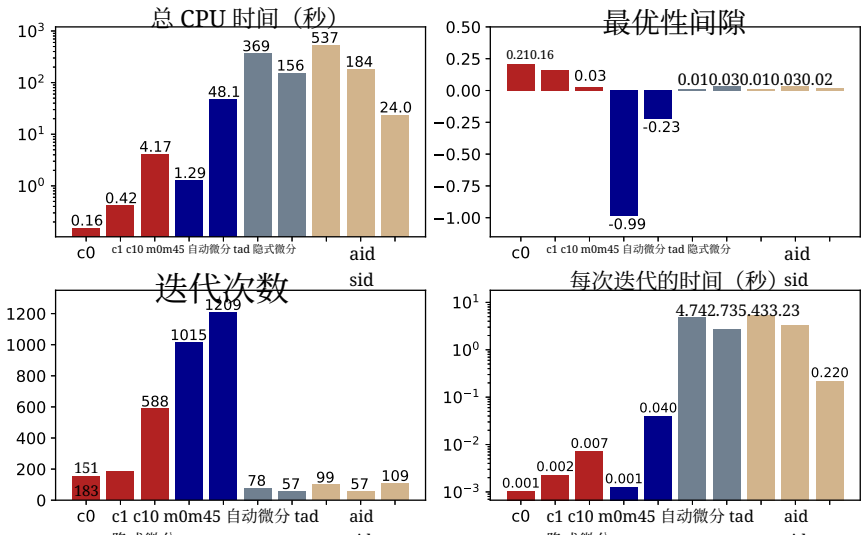

图 C.4：我们的方法与先前方法的比较。

观察 1。 首先注意到，“c0”和 Tan 等人 (1979 年) 实质上求解的是相同的模型。与先前的方法相比，我们的方法能够提供更准确的解（见“c1”和“c10”）。尤其是，“c10”产生的最优性间隙几乎与机器学习文献中提出的两种近似方案“tad”和“aid”相同。同时，它仅略大于两种精确方法“id”和“ad”。

观察 2。 “c10”所需的总 CPU 时间显著低于“ad”、“tad”、“id”和“aid”。具体而言，迭代总次数增加了 5–6 倍，但每次迭代的 CPU 时间从 2.5–5.5 秒缩短至仅 0.007 秒（约快 400 倍）。因此，“c10”的效率更高。

观察 3。 单循环方案“sid”更为特殊。它的每次迭代的 CPU 时间明显低于“ad”、“tad”、“id”和“aid”，因为它也绕开了反复求解下层解的难题。然而，它仍比我们的方法慢 30 倍，主要是因为它仍基于隐式微分，而这需要存储并求逆大型矩阵。

观察 4。 与“c10”给出的上界相比，“m45”给出的下界不够准确。尽管如此，它回答了上界有多好这一问题。具体而言，

“（上界 - 下界）/ 下界”可以合理地估计准确度。如果它小于容差，那么我们就能确信已经找到了足够好的解。据我们所知，机器学习文献中以往没有任何方法能为双层规划提供这样的下界。优化文献中的经典方案（Dantzig 等人，1979 年）可以提供这样的界（见“m0”）。然而，准确解与这个下界之间的间隙太大。如果我们用这个下界来评估上界，可能会过于悲观。

参考文献

Abadi, M., Agarwal, A., Barham, P., Brevdo, E., Chen, Z., Citro, C., Corrado, G. S., Davis,A., Dean, J., Devin, M. et al. (2016). TensorFlow：异构分布式系统上的大规模机器学习。arXiv 预印本 arXiv:1603.04467。Ablin, P., Peyré, G. 和 Moreau, T. (2020). 自动微分在最小值定义函数中的超高效性。载于《国际机器学习会议》。PMLR。Agrawal, A., Amos, B., Barratt, S., Boyd, S., Diamond, S. 和 Kolter, J. Z. (2019). 可微凸优化层。载于《神经信息处理系统进展》。Aiyoshi, E. 和 Shimizu, K. (1984). 一种通过罚函数法求解静态约束斯塔克尔伯格问题的方法。IEEE 自动控制汇刊 29 1111–1114。Bae, J.和 Grosse, R. B. (2020). Delta-stn：利用结构化响应雅可比矩阵实现神经网络的高效双层优化。《神经信息处理系统进展》33 21725–21737。Bahrami, S.和 Roorda, M. J. (2020). 人类与自动驾驶混合交通流的最优交通管理策略。《交通研究 A 部分：政策与实践》135 130–143。Bard, J. F. 和 Falk, J. E. (1982). 多层规划问题的显式解。《计算机与运筹学》9 77–100。Beck, A. 和 Teboulle, M. (2003). 凸优化的镜像下降与非线性投影次梯度法。运筹研究快报 31 167–175。Ben-Ayed, O. 和 Blair, C. E.(1990). 双层线性规划的计算困难。《运筹学》38 556–560。Bernhard, P. (2011). ESS、群体博弈、复制子动力学：如果不是动态博弈，便是动力学与博弈。载于《动态博弈进展》。Springer，291–311。Bertrand, Q., Klopfenstein, Q., Blondel, M., Vaiter, S., Gramfort, A. 和 Salmon, J.(2020). 用于超参数优化的 Lasso 型模型隐式微分。载于《国际机器学习会议》。PMLR。Blondel, M., Berthet, Q., Cuturi, M., Frostig, R., Hoyer, S., Llinares-López, F., Pedregosa, F.和 Vert, J.-P. (2021). 高效模块化隐式微分。arXiv 预印本 arXiv:2105.15183。Boyle, J. P. 和 Dykstra, R. L. (1986). 一种求取希尔伯特空间中凸集

交集上投影的方法。载于《序约束统计推断进展》。Springer，28–47。Bracken, J. 和 McGill, J．T．(1973). 约束中含优化问题的数学规划。《运筹学》21 37–44。.Braess, D. (1968). 关于交通规划中的一个悖论。《企业研究》12 258–268。Candler, W. 和 Townsley, R. (1982). 线性双层规划问题。《计算机与运筹学》9 59–76。Chen, T., Sun, Y. 和 Yin, W.(2021). 单时间尺度随机双层优化方法。arXiv 预印本 arXiv:2102.04671。Chen, Z., He, F., Yin, Y. 和 Du, Y. (2017). 交通网络中自动驾驶汽车区域的最优设计。《交通研究B辑：方法论》99 44–61。Chen, Z., He, F., Zhang, L.和 Yin, Y. (2016). 考虑内生市场渗透率的自动驾驶汽车车道最优部署。《交通研究C辑：新兴技术》72 143–156。Colson, B., Marcotte, P. 和 Savard, G. (2007). 双层优化综述。《运筹学年鉴》153 235–256。Dafermos, S. (1983). 一种求解变分不等式的迭代方案。《数学规划》26 40–47。Dafermos, S. (1988). 变分不等式中的灵敏度分析。《运筹学数学》13 421–434。Dafermos, S. C. (1973). 多类别用户交通网络的收费模式。《交通科学》7 211–223。Dagréou, M., Ablin, P., Vaiter, S. 和 Moreau, T. (2022). 一种支持随机与全局方差缩减算法的双层优化框架。arXiv 预印本 arXiv:2201.13409。Dantzig, G．B., Harvey, R．P., Lansdowne, Z．F., Robinson, D．W．和 Maier, S．F．(1979). 通过分解法构建并求解网络设计问题。《交通研究B辑：方法论》13 5–17。Ehtamo, H., Kitti, M. 和 Hämäläinen, R．P.(2002). 博弈论与管理科学中的激励设计问题最新研究。载于《最优控制与微分博弈》。Springer，121–134。Finn, C., Abbeel, P. 和 Levine, S. (2017). 用于深度网络快速适应的模型无关元学习。载于《国际机器学习会议》。PMLR。Franceschi, L., Donini, M., Frasconi, P.和 Pontil, M. (2017). 基于梯度的超参数前向与反向优化。载于《国际机器学习会议》。PMLR。Franceschi, L., Frasconi, P., Salzo, S., Grazzi, R. 和 Pontil, M. (2018). 用于超参数优化和元学习的双层规划。载于《国际机器学习会议》。PMLR。Friesz, T．L., Tobin, R．L., Cho, H.-J. 和 Mehta, N．J．(1990). 基于灵敏度分析的含变分不等式约束数学规划启发式算法。《数学规划》48 265–284。

Fung, S. W., Heaton, H., Li, Q., McKenzie, D., Osher, S. 和 Yin, W. （2022）。Jfb：用于隐式网络的无雅可比反向传播。载于AAAI人工智能会议论文集。Ghadimi, S. 和 Wang, M. （2018）。双层规划的近似方法。arXiv预印本，arXiv:1802.02246。Grazzi, R., Franceschi, L., Pontil, M. 和 Salzo, S.（2020）。关于超梯度计算的迭代复杂度。载于国际机器学习会议。PMLR。Grazzi, R., Pontil, M.和 Salzo, S. （2021）。随机超梯度的收敛性质。载于国际人工智能与统计会议。PMLR。Griewank, A. et al.（1989）。关于自动微分。《数学规划：最新发展与应用》6：83–107。Guo, Z., Hu, Q., Zhang, L.和 Yang, T. （2021）。多任务随机双层优化的随机化随机方差缩减方法。arXiv预印本，arXiv:2105.02266。Hartman, P., Stampacchia, G. et al. （1966）。关于一些非线性椭圆微分泛函方程。《数学学报》115：271–310。Hiriart-Urruty, J.-B. （1982）。投影映射在哪些点可微？《美国数学月刊》89：456–458。Hong, M., Wai, H.-T., Wang, Z. 和 Yang, Z.（2020）。双层优化的双时间尺度框架：复杂度分析及其在行动者-评论家中的应用。arXiv预印本，arXiv:2007.05170。Ji, K., Yang, J. 和 Liang, Y. （2021）。双层优化：收敛性分析与增强设计。载于国际机器学习会议。PMLR。Labbé, M., Marcotte, P. 和 Savard, G. （1998）。税收的双层模型及其在最优公路定价中的应用。《管理科学》44：1608–1622。Lawphongpanich, S. 和 Hearn, D. W.（2004）。次优收费定价的数学规划问题与均衡约束方法。《数学规划》101：33–55。LeBlanc, L. J. （1975）。离散网络设计问题的一个算法。《交通科学》9：183–199。Levin, M. W.和 Boyles, S. D. （2016）。用于自动驾驶车辆动态车道反转的元胞传输模型。《交通研究C辑：新兴技术》68：126–143。Li, C., Yang, H., Zhu, D. 和 Meng, Q. （2012）。连续网络设计问题的全局优化方法。《交通研究B辑：方法论》46：1144–1158。Li, J., Gu, B. 和 Huang, H. （2022a）。一种无需海森矩阵逆的完全单循环双层优化算法。载于AAAI人工智能会议论文集。Li, J., Yu, J., Nie, Y. M. 和 Wang, Z. （2020）。博弈中的端到端学习与干预。《神经信息处理系统进展》33。Li, J., Yu, J., Wang, Q., Liu, B., Wang, Z. 和 Nie, Y. M.（2022b）。用于斯塔克尔伯格拥堵博弈的可微双层规划。arXiv预印本，arXiv:2209.07618。

Li, W., Kockelman, K. M. 和 Huang, Y.（2021）。基于信用的拥堵收费应用对交通与福利的影响：奥斯汀案例研究。《交通研究记录》2675：10–24。Liao, R., Xiong, Y., Fetaya, E., Zhang, L., Yoon, K., Pitkow, X., Urtasun, R.和 Zemel, R.（2018）。复兴并改进循环反向传播。载于国际机器学习会议。PMLR。Liu, B., Li, J., Yang, Z., Wai, H. T., Hong, M., Nie, Y. 和 Wang, Z.（2022）。通过激励诱导均衡：同步设计与博弈确保全局收敛。载于神经信息处理系统进展。Liu, H., Simonyan, K. 和 Yang, Y.（2018）。可微架构搜索。arXiv预印本，arXiv:1806.09055。Liu, R., Gao, J., Zhang, J., Meng, D. 和 Lin, Z.（2021）。从统一视角研究用于学习与视觉的双层优化：综述与展望。《IEEE模式分析与机器智能汇刊》。Loridan, P. 和 Morgan, J.（1996）。弱领导者—强跟随者斯塔克尔伯格问题：新结果。《全球优化杂志》8：263–287。Lorraine, J. 和 Duvenaud, D.（2018）。通过超网络进行随机超参数优化。arXiv预印本，arXiv:1802.09419。Luketina, J., Berglund, M., Greff, K. 和 Raiko, T.（2016）。可扩展的基于梯度的连续正则化超参数调优。载于国际机器学习会议。PMLR。Luo, Z.-Q., Pang, J.-S. 和 Ralph, D.（1996）。带均衡约束的数学规划。剑桥大学出版社。MacKay, M., Vicol, P., Lorraine, J., Duvenaud, D. 和 Grosse, R.（2019）。自调节网络：使用结构化最佳响应函数进行超参数双层优化。arXiv预印本，arXiv:1903.03088。Maclaurin, D., Duvenaud, D.和 Adams, R.（2015）。通过可逆学习进行基于梯度的超参数优化。载于国际机器学习会议。PMLR。Maheshwari, C., Kulkarni, K., Wu, M. 和 Sastry, S. S.（2022）。通过自适应激励设计诱导博弈中的社会最优性。载于2022年IEEE第61届决策与控制会议（CDC）。IEEE。Mahmassani, H. S.（2016）。50周年特邀文章——自动驾驶车辆与网联车辆系统：交通流与运营考量。《交通科学》50：1140–1162。Mancino, O. 和 Stampacchia, G.（1972）。凸规划与变分不等式。《优化理论与应用杂志》9：3–23。Marcotte, P.（1986）。考虑拥堵效应的网络设计问题：双层规划案例。《数学规划》34：142–162。Marcotte, P. 和 Marquis, G.（1992）。连续网络设计问题启发式算法的高效实现。《运筹学年鉴》34：163–176。Marcotte, P. 和 Wu, J. H.（1995）。关于投影方法的收敛性：应用于

仿射变分不等式的分解。《优化理论与应用杂志》85 347–362。Mertikopoulos, P. 和 Zhou, Z.（2019）。连续行动集和未知收益函数博弈中的学习。《数学规划》173 465–507。Metz, L., Poole, B., Pfau, D. 和 Sohl-Dickstein, J.（2016）。展开式生成对抗网络。arXiv 预印本 arXiv:1611.02163。Mguni, D., Jennings, J., Sison, E., Valcarcel Macua, S., Ceppi, S. 和 Munoz de Cote, E.（2019）。协调人群：在非合作系统中诱导理想均衡。载于第18届自主智能体与多智能体系统国际会议论文集。Myerson, R. B.（1982）。广义委托代理问题中的最优协调机制。《数理经济学杂志》10 67–81。Nagurney, A.（2013）。网络经济学：一种变分不等式方法，第10卷。施普林格科学与商业媒体。Nash, J.（1951）。非合作博弈。《数学年刊》286–295。Nemirovskij, A. S. 和 Yudin, D. B.（1983）。优化中的问题复杂度与方法效率。Wiley-Interscience 出版物，Wiley。Outrata, J., Kocvara, M., Zowe, J. 和 Zowe, J.（1998）。带均衡约束优化问题的非光滑方法：理论、应用与数值结果，第28卷。施普林格科学与商业媒体。Pang, J.-S. 和 Chan, D.（1982）。变分问题和互补问题的迭代方法。《数学规划》24 284–313。Parise, F. 和 Ozdaglar, A.（2019）。网络博弈的变分不等式框架：存在性、唯一性、收敛性与灵敏度分析。《博弈与经济行为》114 47–82。Paszke, A., Gross, S., Massa, F., Lerer, A., Bradbury, J., Chanan, G., Killeen, T., Lin, Z.,Gimelshein, N., Antiga, L. et al.（2019）。PyTorch：一种命令式风格的高性能深度学习库。《神经信息处理系统进展》32。Pedregosa, F.（2016）。利用近似梯度进行超参数优化。载于国际机器学习会议。PMLR。Pigou, A. C.（1920）。《福利经济学》。帕尔格雷夫·麦克米伦。.Rademacher, H.（1919）。关于多变量函数的偏微分与全微分，以及关于二重积分的变换。《数学年刊》79 340–359。Requate, T.（1993）。通过税收或许可证控制古诺双寡头中的污染。《经济学杂志》58 255–291。Roughgarden, T. 和 Tardos, É.（2002）。自利路由的危害有多大？《美国计算机学会杂志》49 236–259。Schmeidler, D.（1973）。非原子博弈的均衡点。《统计物理学杂志》7 295–300。Scutari, G., Palomar, D. P., Facchinei, F. 和 Pang, J.-S.（2010）。凸优化、博弈论，

以及变分不等式理论。IEEE 信号处理杂志27 35–49。Shaban, A., Cheng, C.-A., Hatch, N. 和 Boots, B. （2019）。用于双层优化的截断反向传播。载于第22届人工智能与统计国际会议。PMLR。Shapiro, C. （1989）。寡头行为理论。《产业组织手册》1 329–414。Sinha, A., Fang, F., An, B., Kiekintveld, C. 和 Tambe, M. （2018）。斯塔克尔伯格安全博弈：回顾十余年的成功。载于第二十七届国际人工智能联合会议论文集，IJCAI-18。国际人工智能联合会议组织。Sow, D., Ji, K. 和 Liang, Y. （2022）。论无海森矩阵双层算法的收敛理论。载于《神经信息处理系统进展》。Tan, H.-N., Gershwin, S. B. 和 Athans, M. （1979）。城市交通网络中的混合优化。技术报告，麻省理工学院。Tobin, R. L. （1986）。变分不等式的灵敏度分析。《优化理论与应用杂志》48 191–204。Vicol, P., Lorraine, J., Duvenaud, D. 和 Grosse, R. （2021）。过参数化双层优化中的隐式正则化。载于2021年ICML超越一阶方法研讨会。Wardrop, J. G. （1952）。道路交通研究的若干理论方面。载于土木工程师学会论文集，第1卷。Weibull, J. W.（1997）。演化博弈论。麻省理工学院出版社。Wu, Y., Ren, M., Liao, R. 和 Grosse, R. （2018）。理解随机元优化中的短时域偏差。arXiv 预印本 arXiv:1803.02021。Xu, Y., Xie, L., Zhang, X., Chen, X., Qi, G.-J., Tian, Q. 和 Xiong, H.（2019）。PC-DARTS：用于内存高效架构搜索的部分通道连接。arXiv 预印本 arXiv:1907.05737。Yang, J., Ji, K. 和 Liang, Y. （2021）。双层优化的可证明更快算法。《神经信息处理系统进展》34 13670–13682。Zhang, K. 和 Nie, Y. M.（2018）。缓解自利路由的影响：一种受自动驾驶启发的最优比率控制方案（ORCS）。《交通研究C辑：新兴技术》87 75–90。Zheng, S., Trott, A., Srinivasa, S., Naik, N., Gruesbeck, M., Parkes, D. C.和 Socher, R.（2020）。AI经济学家：利用人工智能驱动的税收政策提升平等与生产力。arXiv 预印本 arXiv:2004.13332。Zucchet, N. 和 Sacramento, J. （2022）。超越反向传播：用于双层优化的隐式梯度。arXiv 预印本 arXiv:2205.03076。