

“现代数学基础丛书”序

在信息时代, 数学是社会发展的基石.

由于互联网的迅猛发展, 一方面, 现在人们获得数学知识和信息的途径之多和便捷性是以前难以想象的; 另一方面人们通过搜索在互联网上获得的数学知识和信息很难做到系统深入, 也很难保证在互联网上阅读到的数学知识和信息的质量.

在这样的背景下, 高品质的数学书就变得益发重要.

科学出版社组织出版的“现代数学基础丛书”旨在对重要的数学分支和研究方向或专题作系统的介绍, 注重基础性和时代性. 丛书的目标读者主要是数学专业的高年级本科生、研究生以及数学教师和科研人员, 丛书的部分卷对其他与数学联系紧密的学科的研究生和学者也是有参考价值的.

本丛书自 1981 年面世以来, 已出版 200 余卷, 介绍的主题广泛, 内容精当, 在业内享有很高的声誉, 深受尊重, 对我国的数学人才培养和数学研究发挥了非常重要的作用.

这套丛书已有四十余年的历史, 一直得到数学界各方面的大力支持, 科学出版社也十分重视, 以高专业标准编辑丛书的每一卷. 今天, 我国的数学水平不论是广度还是深度都已经远远高于四十年前, 同时, 世界数学的发展也更为迅速, 我们对跟上时代步伐的高品质数学书的需求从而更为迫切. 我们诚挚地希望, 在大家的支持下, 这套丛书能与时俱进, 越办越好, 为我国数学教育和数学研究的继续发展做出不负期望的重要贡献.

席南华

2024 年 1 月

前言

最优化方法在机器学习、数据科学、图像处理和管理科学等诸多领域应用广泛。其中,一类具有特殊结构(如带有正交约束或低秩矩阵约束)的优化问题,其可行域可自然地表示为黎曼流形。针对这类问题,科研工作者结合黎曼几何与优化方法,发展出相应的求解算法,逐步形成了黎曼流形优化这一研究方向。经过数十年发展,该方向已建立起系统的理论与方法体系。特别是2008年,Absil、Mahony和Sepulchre教授的专著*Optimization Algorithms on Matrix Manifolds*的出版,极大地促进了这一方向的快速发展。在此背景下,本书立足于国内外最新研究进展,旨在系统梳理该方向的核心理论与典型算法,为相关领域的研究人员与研究生提供一部结构清晰、内容自洽的入门参考书。

本书各章节内容安排如下。第1章是绪论部分;第2章主要介绍欧氏空间优化问题中的基本概念;第3章介绍黎曼几何领域的基础知识,主要包括微分流形、切空间、向量场、黎曼梯度、黎曼联络、黎曼Hessian算子、平行移动映射、测地线与指数映射等内容;第4章介绍黎曼流形无约束优化问题与有约束问题的最优性条件;第5章介绍收缩映射、非单调线搜索、黎曼流形上的梯度下降法、BB方法、线性共轭梯度法与非线性共轭梯度法;第6章介绍黎曼流形上的牛顿法、拟牛顿法、信赖域算法和Levenberg-Marquardt算法;第7章介绍欧氏空间的近端梯度法与黎曼流形上的近端梯度法;第8章介绍欧氏空间上的经典SQP方法与SQP类型的近端梯度法。

本书仅涉及黎曼流形优化领域的一部分内容,尚有一些重要的主题未在本书中详细介绍,例如黎曼流形优化在工程、计算机、数据科学等领域的实际应用,相关的开源软件包,传统欧氏空间中的优化算法(例如增广拉格朗日法)在黎曼流形优化问题上的应用,以及商流形等重要流形结构的相关理论与优化算法。

在编写过程中,本书参考了多本黎曼流形优化领域的教材或专著,包括刘浩洋、户将、李勇锋和文再文教授的《最优化:建模、算法与理论》,潘汉教授的《黎曼流形优化及其应用》,Absil、Mahony和Sepulchre教授的*Optimization Algorithms on Matrix Manifolds*,Boumal教授的*An Introduction to Optimization on Smooth Manifolds*和Sato教授的*Riemannian Optimization and Its Applications*。同时,本书还参考了国内学者在黎曼流形优化领域的多篇经典文献,在此向相关文献的作者致以诚挚的谢意。

特别感谢北京大学文再文教授对自适应正则化牛顿法的介绍, 厦门大学黄文教授关于黎曼流形优化的讲座, 暨南大学范旭乾教授在黎曼几何学方面的指导, 以及苏州大学张雷洪教授在多项式逼近和 Krylov 子空间算法等研究方向上的帮助.

本书的编写得到了复旦大学研究生院核心课程建设经费的支持, 特此表示衷心感谢.

本书内容多次在复旦大学数学科学学院开设的黎曼流形优化课程中使用, 感谢课题组同学在书稿整理方面的支持, 如王秦思在内容简介与黎曼近端梯度法、叶智强在非线性共轭梯度法以及魏品正在 SQP 类型的近端梯度法等内容上的帮助. 限于编者水平, 书中恐有不妥之处, 欢迎广大读者批评指正.

杨卫红

2025 年 10 月于上海

目 录

“现代数学基础丛书”序

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 流形优化问题简介	1
1.2 文献综述	3
第 2 章 基础知识	6
2.1 矩阵范数	6
2.2 梯度与 Hessian 算子	8
2.3 凸函数	12
2.4 其他概念和常用结果	14
第 3 章 黎曼几何初步	17
3.1 微分流形	17
3.2 切向量与切空间	19
3.2.1 切向量与切空间的定义	20
3.2.2 光滑映射的微分	22
3.2.3 嵌入子流形的切空间	24
3.2.4 切向量场	26
3.3 黎曼流形与梯度	27
3.4 黎曼联络	32
3.5 平行移动映射与测地线	36
3.6 指数映射	41
3.6.1 与测地距离的关系	42
3.6.2 二阶近似	46
3.6.3 显式表达式	47
第 4 章 最优性条件	50
4.1 无约束问题	50
4.1.1 目标函数可微	50
4.1.2 Clarke 广义次微分	54
4.1.3 目标函数不可微	61

4.2	有约束问题	62
第 5 章	无约束算法之一	67
5.1	收缩映射	67
5.1.1	定义	68
5.1.2	基于投影的收缩映射	70
5.1.3	Stiefel 流形其他两种收缩映射	74
5.2	线搜索	77
5.3	梯度下降法	79
5.3.1	全局收敛性分析	80
5.3.2	L -光滑	82
5.3.3	局部线性收敛	86
5.4	BB 步长和向量传输	91
5.5	线性共轭梯度法	94
5.6	非线性共轭梯度法	109
5.6.1	FR 非线性共轭梯度法	110
5.6.2	充分下降方向的 RNCG 算法	113
第 6 章	无约束算法之二	126
6.1	牛顿法	126
6.1.1	优化牛顿法	126
6.1.2	求根牛顿法	137
6.1.3	半光滑牛顿法	146
6.2	拟牛顿法	159
6.2.1	欧氏空间拟牛顿法	159
6.2.2	子空间方法	169
6.2.3	黎曼流形上的拟牛顿法	174
6.3	信赖域算法	175
6.3.1	欧氏空间信赖域算法	175
6.3.2	黎曼信赖域算法	186
6.4	Levenberg-Marquardt 算法	189
第 7 章	非光滑优化	192
7.1	欧氏空间的近端梯度法	192
7.2	黎曼流形上的近端梯度法	200
第 8 章	序列二次规划	209
8.1	经典 SQP 方法	210
8.1.1	算法介绍	210

8.1.2 算法框架	215
8.1.3 收敛性分析	219
8.1.4 其他环节	225
8.2 SQP 类型的近端梯度法	226
8.2.1 SQP-PG 算法框架	227
8.2.2 收敛性分析	231
参考文献	243
索引	250
“现代数学基础丛书”已出版书目	254

第 1 章 绪 论

对于欧氏空间 $\mathcal{E}_1$ 上的优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & c(x) = 0, \end{aligned}$$

其中 $c: \mathcal{E}_1 \rightarrow \mathcal{E}_2$ 为连续可微映射, $\mathcal{E}_2$ 为另一欧氏空间, 其求解通常基于等式约束优化的标准框架, 在许多实际应用中, 可行集 $\mathcal{M} = \{x \in \mathcal{E}_1 : c(x) = 0\}$ 构成一个光滑黎曼流形. 这一几何结构启发了一个自然的优化思路: 将传统的欧氏直线搜索替换为流形上的测地线搜索, 从而使迭代点始终位于 $\mathcal{M}$ 上. 此时, 优化过程在流形 $\mathcal{M}$ 内部进行, 等式约束 $c(x) = 0$ 不再作为约束处理, 而是通过流形结构自然满足. 这类方法统称为黎曼流形优化算法.

相较于传统的等式约束优化方法, 黎曼流形算法往往具有更少的迭代次数和更低的计算成本, 因而受到优化领域研究者的广泛关注. 自 Luenberger^[75] 于 1972 年发表首篇关于流形优化的论文以来, 该方向历经数十年发展, 已涌现出大量理论与算法成果, 成为现代优化理论的重要分支. 目前, 黎曼流形优化在电子结构计算、信号处理、数据挖掘、统计分析及机器学习等领域展现出广泛的应用前景.

本书旨在系统介绍黎曼流形优化的基本理论, 探讨该领域的主要算法设计思想, 并对其收敛性进行深入分析.

1.1 流形优化问题简介

黎曼流形上的优化问题通常可表述为如下形式:

$$\begin{aligned} \min_{p \in \mathcal{M}} \quad & f(p) \\ \text{s.t.} \quad & c_i(p) = 0, \quad i \in \mathcal{I}_E = \{1, \dots, m\}, \\ & \hat{c}_j(p) \geq 0, \quad j \in \mathcal{I}_I = \{1, \dots, l\}, \end{aligned} \tag{1.1.1}$$

其中 $\mathcal{M}$ 是一个黎曼流形, f , c_i 和 $\hat{c}_j$ 均为定义在 $\mathcal{M}$ 上的实值函数.

可仿照欧氏空间中的分类方式, 对上述问题进行划分. 若 $\mathcal{I}_E$ 与 $\mathcal{I}_I$ 均为空集, 则称问题 (1.1.1) 为无约束黎曼优化问题; 否则, 称为有约束黎曼优化问题. 若目标函数 f 及所有约束函数 $c_i, \hat{c}_j$ 均为光滑函数, 则称其为光滑黎曼优化问题; 否则, 称为非光滑黎曼优化问题.

下文将介绍若干常见的黎曼流形. 更多流形示例及其几何性质, 可参考文献 [12, 20, 96].

- Stiefel 流形 $\text{St}(n, r)$, 其中 $n \geq r$ 均为正整数, 为所有满足下式的 $n \times r$ 阶矩阵构成的集合:

$$\text{St}(n, r) := \{X \in \mathbb{R}^{n \times r} : X^T X = I_r\}, \quad (1.1.2)$$

其中, I_r 表示 $r \times r$ 阶单位阵. 当 $r = 1$ 时, Stiefel 流形就是 $\mathbb{R}^n$ 空间中的单位球面 $\mathbb{S}^{n-1}$; 当 $r = n$ 时, Stiefel 流形还可以赋予群结构, 称之为正交群, 记为 $\mathcal{O}_n$.

- 定秩矩阵流形记为 $\text{Fr}(n, m, r) := \{X \in \mathbb{R}^{n \times m} : \text{rank}(X) = r\}$, 表示所有秩为 r 的 $n \times m$ 阶矩阵. 利用 X 的奇异值分解, 可得定秩流形具有如下等价形式:

$$\text{Fr}(n, m, r) = \{U \Sigma V^T : U \in \text{St}(n, r), V \in \text{St}(m, r), \Sigma = \text{diag}(\sigma_i)\},$$

其中, $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$, $\text{diag}(\sigma_i)$ 表示以向量 $(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$ 为对角线的对角矩阵.

- Grassmann 流形, 记 $\text{Grass}(n, r)$ 为 $\mathbb{R}^n$ 的所有 r 维线性子空间组成的集合. 该集合可赋予光滑流形结构, 此时称为 Grassmann 流形. 严格构造详见文献 [71, Example 1.24]. 作为光滑流形, $\text{Grass}(n, r)$ 微分同胚于如下商流形:

$$\text{Grass}(n, r) \simeq \text{St}(n, r) / \sim, \text{ 其中 } X \sim Y \Leftrightarrow \text{span}(X) = \text{span}(Y).$$

有关商流形的知识本书不再介绍, 读者可以参考文献 [12, 20, 71].

设 f 是定义在欧氏空间 $\mathcal{E}_1$ 上的光滑函数. 若问题 (1.1.1) 中的流形 $\mathcal{M}$ 可表示为如下形式:

$$\mathcal{M} = \{x \in \mathcal{E}_1 : c(x) = 0\}, \quad (1.1.3)$$

其中 $c: \mathcal{E}_1 \rightarrow \mathcal{E}_2$ 为光滑映射, $\mathcal{E}_2$ 为另一欧氏空间, 则该黎曼优化问题等价于欧氏空间中的经典等式与不等式约束优化问题:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & c(x) = 0, \\ & c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{I}_E, \\ & \hat{c}_j(x) \geq 0, \quad j \in \mathcal{I}_I. \end{aligned}$$

此类问题可通过序列二次规划 (SQP) 等经典算法求解. 鉴于 SQP 方法在处理此类结构化约束问题中的重要性, 本书也将系统介绍欧氏空间中的 SQP 框架及其收敛性理论.

1.2 文献综述

流形优化的相关研究可追溯至 20 世纪 70 年代, 以 Luenberger 等^[45, 75] 的工作为开端. 在文献 [75] 中, 作者在研究等式约束优化问题时提出: 若将约束流形视为黎曼流形, 并沿其测地线进行线搜索, 则原本欧氏空间中的约束优化问题可转化为流形上的无约束优化问题. 基于这一几何视角, 作者将欧氏空间中的最速下降法推广至黎曼流形.

Gabay^[44] 继承并发展了 Luenberger 的思想, 同样采用测地线搜索, 系统地建立了流形上最速下降法、牛顿法与拟牛顿法的收敛性理论. 为提升算法的可实现性, Gabay 提出一种对测地线搜索的近似方法, 称为切向恢复, 为后续算法设计提供了重要思路.

测地线通常通过指数映射计算, 但其计算代价较高, 导致基于测地线的线搜索在实际应用中往往难以高效实施. 因此, 如何降低线搜索的计算成本成为流形优化中的核心课题之一. 后续研究主要沿着两个方向展开, 形成了两类方法.

第一类方法采用计算代价更低的映射替代指数映射. 这类映射将流形的切空间中的点映射回流形本身, 同时保留指数映射的关键几何性质: (i) 切空间中的任意直线被映射为流形上的光滑曲线; (ii) 映射后的曲线在起点处保持原始切方向. 此类映射显著降低了计算开销, 同时保留了必要的几何结构. 文献 [12] 将此类映射统称为收缩映射, 并对其理论发展进行了系统总结. 对于 Stiefel 流形, 常见的收缩映射包括基于 QR 分解和 SVD 的实现; 文献 [113] 提出了一种基于 Cayley 变换的收缩映射. 对于欧氏空间中的黎曼子流形, 文献 [14] 证明了如下结论: 向该流形的正交投影映射即为一种收缩映射. 然而, 此类投影通常计算代价较高, 在多数实际场景中成为限制算法效率的关键因素.

第二类方法则聚焦于减少线搜索过程中的试探次数. 一种经典策略是引入非单调线搜索技术^[52, 120]. 数值实验表明, 在流形优化中采用非单调线搜索可显著减少试探次数, 从而降低总体计算量^[106]. 另一种有效策略是使用高质量的初始步长. 在欧氏优化中, 梯度下降法采用 BB 步长可显著减少迭代次数; 在流形优化中, BB 步长同样表现出优异性能. 文献 [113] 首次将 BB 步长引入流形优化框架, 其收敛性随后在文献 [67] 中给出. 需要指出的是, 尽管 BB 方法显著提升了梯度类算法的效率, 但仍存在若干局限: 其一, 解的精度通常低于二阶方法; 其二, 对于病态问题, 其数值表现往往不够稳健.

针对 Stiefel 流形, 文献 [46] 提出了三种特殊处理方法: 梯度反射、梯度投影与逐列块坐标下降法. 这些方法无需显式线搜索, 因而在实际计算中表现出优异的效率与稳定性.

众多欧氏空间中的二阶优化算法, 包括牛顿法、拟牛顿法与信赖域算法, 已成功推广至黎曼流形, 并催生了大量理论与应用成果. 专著 [12] 在 6.6 节对黎曼流形上的牛顿法进行了系统综述, 此处不再赘述.

牛顿法本质上是一种局部收敛算法, 通常需结合全局化策略以确保整体收敛性, 其中一种经典途径是正则化方法. 文献 [58] 首次将欧氏空间中的正则化牛顿法推广至黎曼流形. 数值实验表明, 相较于一阶方法, 该算法不仅显著提升了求解精度, 且收敛速度亦具有可比性.

另一种主流的全局化策略是信赖域算法. 最早将信赖域框架拓展至黎曼流形的工作见于文献 [11]. 流形信赖域算法不仅能获得更高精度的解, 还表现出良好的算法稳定性. 其理论基础与实现细节在专著 [12, Chapter 7] 中有详尽论述.

对于拟牛顿法, 将其从欧氏空间推广至黎曼流形所面临的核心挑战在于: 如何对两个不同切空间中的梯度向量进行相减运算. 文献 [44] 率先提出了一种流形上的拟牛顿方法, 该方法通过平行移动映射将前后迭代点处的梯度向量移至同一切空间后再执行相减操作. 然而, 平行移动的计算代价较高, 限制了其实际应用.

为此, 一个可行的替代方案是采用计算更高效的映射代替平行移动映射. 文献 [12] 称此类映射为向量传输映射. 博士学位论文 [60] 对多种向量传输映射的设计与性质进行了深入研究. 关于黎曼流形上拟牛顿法的最新进展, 可进一步参考 [61] 及其中引用的相关文献.

类似地, 黎曼流形上的非线性共轭梯度法也依赖于切向量的平移操作. 文献 [101, 102] 提出了适用于流形的共轭梯度框架, 其中采用平行移动映射实现搜索方向的更新. 此后, 相关研究逐渐转向使用向量传输映射以降低计算开销. 本书不再一一详述此类工作, 感兴趣的读者可参阅 [96, 97, 126] 及其引用文献.

非光滑流形优化问题同样受到研究者的广泛关注. 假设目标函数非光滑而约束函数光滑, 问题 (1.1.1) 的一阶最优性条件已在文献 [118] 中给出. 在算法方面, 文献 [26] 提出了适用于 Stiefel 流形的近端梯度法, 该方法在理论上具有局部线性收敛速率, 相关证明见 [106]. 另一类黎曼近端梯度法由文献 [63] 提出, 其对应的近端牛顿法在理论上可达到局部超线性收敛^[107]. 文献 [64, 100] 将欧氏空间中定义在黎曼子流形上的稀疏优化问题转化为流形上的半光滑方程求解问题, 所提算法可实现超线性收敛.

若 $\{x \in \mathcal{E}_1 : c(x) = 0\}$ 构成一个黎曼流形, 则欧氏空间中的该等式约束优化问题可自然转化为黎曼流形上的无约束优化问题. 需要指出的是, 这两类方法并非相互替代, 而是在实际计算中各有其适用场景. 对于欧氏空间的约束优化问题,

经典求解技术包括罚函数法、增广拉格朗日法和序列二次规划 (SQP) 等, 这些方法在特定问题结构或计算环境下仍具有不可替代的优势.

例如, 对称矩阵最小 k 个特征值的计算可转化为 Stiefel 流形上的二次优化问题. 文献 [112] 利用罚函数法设计了高效算法, 取得了良好的数值表现. 针对 Stiefel 流形上的光滑优化问题, 文献 [48] 提出了一种基于增广拉格朗日法的并行算法. 对于非光滑流形优化, 增广拉格朗日方法同样适用, 详见 [125]. 此外, 文献 [110, 111] 提出了一种基于序列二次规划的近端梯度法, 用于求解含有等式与不等式约束的复合优化问题.

在理论与算法综述方面, 已有若干英文专著系统地介绍了黎曼流形优化, 包括 [12, 20, 96]. 文献 [59] 对该领域的发展脉络、关键文献与最新进展进行了精彩综述. 国内也出版了相关中文专著: 文献 [4] 的第二版第七章系统介绍了流形优化的一阶与二阶算法; 专著 [6] 不仅涵盖了流形优化的基本理论与常用算法, 还在鉴别性结构化学字典学习、多源多波段图像融合等应用方面做出了深入阐述.

近年来, 优化工作者开发了多个黎曼流形优化算法的开源软件包, 显著推动了该领域的工具化与应用普及. 例如, Boumal 等^[24] 在 MATLAB 环境中开发了 **Manopt**, 该工具包后续还推出了 Python 和 Julia 版本, 极大提升了其可访问性. 其他代表性求解器包括: Townsend 等^[103] 基于 Python 开发的 **PyManopt**, 黄文等^[62] 在 C++ 中实现的 **ROPTLIB**. 刘歆及其合作者^[74] 针对 Stiefel 流形设计了多个高效求解器, 如 **FOForth**、**PCAL** 和 **STOP**, 并进一步开发了分布式算法框架 **FAPS**、**DSSAL1** 与 **DESTINY**. 文再文实现了 Stiefel 流形专用的 **OptM** 软件包, 以及用于黎曼流形正则化牛顿法的 **ARNT**^[115]. 针对由欧氏空间等式约束 $c(x) = 0$ 定义的黎曼子流形, 肖纳川等^[117] 开发了 **CDOpt**, 用于高效求解此类结构化问题.

此外, 多个基于深度学习框架的黎曼流形优化工具也相继涌现. 例如, **McTorch**^[76], **Geoopt**^[68] 与 **GeoTorch**^[72] 均基于 PyTorch 框架实现了黎曼流形优化算法, 使用户能够无缝利用 PyTorch 的自动微分、GPU 加速和动态计算图等特性, 解决流形上的优化问题.

这些开源工作的出现, 不仅加速了黎曼流形优化理论与算法的传播, 也促进了其在机器学习、信号处理、科学计算等领域的跨学科应用. 越来越多的研究者和工程师得以便捷地使用流形优化工具, 应对复杂几何结构下的建模与求解挑战, 推动了科学发现与技术创新的进程.

第 2 章 基础知识

这一章简要介绍本书所需的基本概念、数学符号以及一些常见理论结果. 更详细的讨论可以参考 [4, 第二章].

2.1 矩阵范数

本书所有的线性空间都是实数域上的有限维线性空间, 用 $\mathcal{V}$ 表示. 下面给出 $\mathcal{V}$ 上的范数的定义.

定义 2.1.1 (范数) 若一个从 $\mathcal{V}$ 到 $\mathbb{R}$ 的函数 $\|\cdot\|$ 满足如下三条性质:

- (1) 对所有 $x \in \mathcal{V}$ 都有 $\|x\| \geq 0$, 且 $\|x\| = 0$ 当且仅当 $x = 0$;
- (2) 对所有 $x \in \mathcal{V}$ 和 $\lambda \in \mathbb{R}$, 都有 $\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\|$;
- (3) 对所有 $x, y \in \mathcal{V}$, 都有 $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$,

则称 $\|\cdot\|$ 为线性空间 $\mathcal{V}$ 上的范数.

线性空间 $\mathbb{R}^n$ 中的向量均默认为列向量, 用小写字母 x 表示, 其上的常见范数为 l_p 范数 ($p \geq 1$):

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}.$$

当 $p = 2$ 时, 称为 **l_2 范数** (或 2 范数). 本书默认省略其下标, 即用 $\|\cdot\|$ 表示 $\mathbb{R}^n$ 上的 l_2 范数. 当 $p = 1$ 时, 得到 **l_1 范数**, 记为 $\|\cdot\|_1$; 当 $p = \infty$ 时, 向量 x 的 **l_∞ 范数** 定义为 $\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$.

矩阵线性空间中的元素用大写字母 X 表示. 矩阵范数的定义稍微复杂一些. 因为矩阵有乘法运算, 矩阵的范数除了满足定义 2.1.1 中的三条性质之外, 还要求满足下面的相容性:

$$\|XY\| \leq \|X\| \cdot \|Y\|, \quad (2.1.1)$$

其中 X, Y 是两个维数匹配的矩阵.

注意到 $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 可以看成是一个从 $\mathbb{R}^n$ 到 $\mathbb{R}^m$ 的线性映射, 其算子范数定义为

$$\|X\|_p = \max_{\|y\|_p=1} \|Xy\|_p.$$

当 $p = 2$ 时, 上式定义了矩阵 **2 范数**. 我们有等式, $\|X\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(X^T X)}$. 根据定义, 还可知

$$\|Xy\|_2 \leq \|X\|_2 \|y\|_2. \quad (2.1.2)$$

上式称为矩阵范数和向量范数的**相容性**.

定义 2.1.2 (内积) 设 $\mathcal{V}$ 是一个线性空间, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 是定义在其上的双线性型. 若该映射满足以下性质:

(1) 对称性: 对任意 $x, y \in \mathcal{V}$, 有 $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$;

(2) 正定性: 对任意 $x \in \mathcal{V}$, 有 $\langle x, x \rangle \geq 0$, 且 $\langle x, x \rangle = 0$ 当且仅当 $x = 0$,

则称 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 为 $\mathcal{V}$ 上的**内积**, 此时 $\mathcal{V}$ 称为**内积空间**. 有限维内积空间也称为**欧氏空间**, 本书中统一用 $\mathcal{E}$ 表示.

最常见的欧氏空间除了 $\mathbb{R}^n$ 和 $\mathbb{R}^{m \times n}$, 还有 n 阶对称矩阵所构成的线性空间, 用 $\mathbb{S}^n$ 表示. 对于 $\mathbb{R}^n$ 中的两个向量 x 和 y , 本书用 $\langle x, y \rangle$ 或者 $x^T y$ 这两种方式表示它们的内积. 欧氏空间 $\mathcal{E}$ 上的内积诱导出的范数记为 $\|\cdot\|$, 即 $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$.

定理 2.1.3 如下不等式称为**柯西不等式**:

$$|\langle x, y \rangle| \leq \|x\| \cdot \|y\|, \quad \forall x, y \in \mathcal{E},$$

等号成立当且仅当 x 与 y 线性相关.

对于 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 上的两个矩阵 X 和 Y , 其 **Frobenius 内积**定义为

$$\langle X, Y \rangle_F = \sum_{i,j} X_{ij} Y_{ij} = \text{tr}(X^T Y), \quad (2.1.3)$$

其中 $\text{tr}(\cdot)$ 为自变量矩阵的迹, 定义为其对角线元素的和. 由 Frobenius 内积诱导的范数称为**F 范数**, 也就是 $\|X\|_F = \sqrt{\langle X, X \rangle}$. 容易看出 $\|X\|_F = \sqrt{\sum_i \lambda_i(X^T X)}$, 其中 $\lambda_i(X^T X)$ 表示矩阵 $X^T X$ 的第 i 个特征值. 上述定义的 F 范数和 2 范数都满足矩阵范数的相容性不等式 (2.1.1), 且对任意矩阵 X , 都有 $\|X\|_2 \leq \|X\|_F$.

对于线性空间 $\mathbb{S}^n$, 同样可以按照公式 (2.1.3) 定义内积, 其诱导的 F 范数满足

$$\|X\|_F = \sqrt{\sum_i \lambda_i^2(X)},$$

其中 $\lambda_i(X)$ 为 X 的第 i 个特征值. 而 $X \in \mathbb{S}^n$ 的 2 范数则满足 $\|X\|_2 = \max_i |\lambda_i(X)|$. 对于对称矩阵 X , 我们用 $X \succeq 0$ 表示 X 是一个半正定矩阵, $X \succ 0$ 表示 X 是一个正定矩阵.

定义 2.1.4 (QR 分解) 设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 其中 $m \geq n$. 则存在一个正交矩阵 $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 和一个上三角矩阵 $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 使得

$$A = Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix},$$

其中 $0 \in \mathbb{R}^{(m-n) \times n}$ 是零矩阵. 将 Q 按列分块为 $Q = [Q_1 \ Q_2]$, 其中 $Q_1 \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $Q_2 \in \mathbb{R}^{m \times (m-n)}$. 则 $Q_1^T Q_1 = I_n$. 此时, 上式可写为

$$A = Q_1 R,$$

称为约化的 QR 分解.

定义 2.1.5 (Cholesky 分解) 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是一个对称正定矩阵. 则存在唯一的下三角矩阵 $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 其对角元素均为正数, 使得 ([8, 定理 1.3.1])

$$A = LL^T.$$

此分解称为矩阵 A 的 Cholesky 分解.

定义 2.1.6 (LDL^T 分解) 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是一个对称且所有顺序主子式非奇异的矩阵 (例如对称正定或对称负定矩阵). 则 A 可唯一分解为^[8]

$$A = LDL^T,$$

其中, $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是单位下三角矩阵 (即下三角矩阵, 且对角线元素全为 1), $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是对角矩阵. 此分解称为矩阵 A 的 LDL^T 分解.

定义 2.1.7 (上 Hessenberg 矩阵) 设矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 的第 i 行第 j 列元素为 a_{ij} . 若对于所有的 $i > j$, 都有 $a_{ij} = 0$, 则称 A 是上三角阵; 若对于所有的 $i > j + 1$, 都有 $a_{ij} = 0$, 则称 A 是上 Hessenberg 矩阵.

2.2 梯度与 Hessian 算子

在优化问题中, 求函数的梯度是最基本的运算. 在 $\mathbb{R}^n$ 中, 可微函数 f 的梯度通常定义为

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right)^T, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n. \quad (2.2.1)$$

然而, 上述定义依赖于坐标系的选择, 难以直接推广到一般的欧氏空间 $\mathcal{E}$. 为此, 我们采用基于内积的线性逼近方式, 给出更具一般性的梯度定义.

定义 2.2.1 (梯度) 设 $x \in \mathcal{E}$, 函数 f 在 x 的某个邻域内有定义. 若存在向量 $g \in \mathcal{E}$, 使得对任意 $d \in \mathcal{E}$ 满足

$$f(x+d) = f(x) + \langle g, d \rangle + o(\|d\|), \quad (2.2.2)$$

则称 f 在点 x 处可微, 并称 g 为 f 在 x 处的梯度, 记为 $\nabla f(x)$. 若 $\nabla f(x)$ 在某个开集 V 上存在且连续, 则称 f 在 V 上连续可微.

若 $\mathcal{E}$ 是一个矩阵线性空间, 则利用式 (2.2.2) 可简洁地求得函数 f 在 X 处的梯度.

例 2.2.2 设 n, r 是两个正整数. 函数 $f: \mathbb{R}^{n \times r} \rightarrow \mathbb{R}$ 定义为

$$f(X) = \text{tr}(X^T A X + 2X^T B),$$

其中 $A \in \mathbb{S}^n$, $B \in \mathbb{R}^{n \times r}$. 对任意 $V \in \mathbb{R}^{n \times r}$, 有

$$f(X+V) = \text{tr}(X^T A X + 2X^T B) + \text{tr}(X^T A V + V^T A X) + 2\text{tr}(V^T B) + \text{tr}(V^T A V).$$

利用 $\text{tr}(X^T A V) = \text{tr}(V^T A X)$, 由上式可以推出

$$f(X+V) = f(X) + \langle 2(AX + B), V \rangle + O(\|V\|^2).$$

由此知 $\nabla f(X) = 2(AX + B)$. □

定义 2.2.3 (L -光滑) 给定可微函数 $f: \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}$ 和开凸集 $U \subset \mathcal{E}$, 若存在 $L > 0$, 使得对任意的 $x, y \in U$ 都有

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\|, \quad (2.2.3)$$

则称 f 在 U 上是梯度 Lipschitz 连续的, 也可称 f 在 U 上 L -光滑, 其中的 L 称为 Lipschitz 常数.

若函数 f 是梯度 Lipschitz 连续的, 则 f 满足一个重要的不等式, 这个不等式称为二次上界不等式. 为了完整性, 我们给出其证明.

引理 2.2.4 设 f 是欧氏空间 $\mathcal{E}$ 上的可微函数, 且是 L -光滑的, 则函数 $f(x)$ 满足

$$-\frac{L}{2}\|y-x\|^2 \leq f(y) - [f(x) + \langle \nabla f(x), y-x \rangle] \leq \frac{L}{2}\|y-x\|^2, \quad \forall x, y \in \mathcal{E}. \quad (2.2.4)$$

证明 只需证 (2.2.4) 右边的不等式, 左边的不等式同理可得. 我们有

$$\begin{aligned}
 & f(y) - f(x) - \langle \nabla f(x), y - x \rangle \\
 &= \int_0^1 \langle \nabla f(x + t(y - x)) - \nabla f(x), y - x \rangle dt \\
 &\leq \int_0^1 \|\nabla f(x + t(y - x)) - \nabla f(x)\| \cdot \|y - x\| dt \\
 &\leq \int_0^1 tL\|y - x\|^2 dt = \frac{L}{2}\|y - x\|^2,
 \end{aligned}$$

其中最后一行的不等式利用了 (2.2.3). 整理可知 (2.2.4) 成立. $\square$

设 $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$ 是两个欧氏空间. 从 $\mathcal{E}_1$ 到 $\mathcal{E}_2$ 的线性映射所构成的线性空间记为 $L(\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2)$.

定义 2.2.5 (映射的导数) 设 U 是 $x \in \mathcal{E}_1$ 的一个邻域, $F: U \rightarrow \mathcal{E}_2$ 是一个映射. 若存在一个 $G \in L(\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2)$ 使得

$$F(x + d) = F(x) + G(d) + o(\|d\|),$$

则称 F 在点 x 可微, 同时称 G 为 F 在 x 处的导数, 记为 $DF(x)$.

如果 $\mathcal{E}_1$ 和 $\mathcal{E}_2$ 是两个矩阵线性空间, 可微映射 F 在 X 处的导数 $DF(X)$ 的显式表达式写起来比较复杂. 在实际应用中, 常见的做法是给出 $DF(X)$ 沿某一方向 $V \in \mathcal{E}_1$ 的作用结果, 即计算 $DF(X)[V]$.

例 2.2.6 设 n, r 是两个正整数, 且 $n \geq r$. 映射 $F: \mathbb{R}^{n \times r} \rightarrow \mathbb{S}^r$ 定义为

$$F(X) = X^T X.$$

对于任意 $V \in \mathbb{R}^{n \times r}$, 由上式可以推出 $F(X + V) = F(X) + (X^T V + V^T X) + V^T V$. 根据定义 2.2.5, 可以得到

$$DF(X)[V] = X^T V + V^T X, \quad \forall V \in \mathbb{R}^{n \times r}. \quad (2.2.5)$$

$\square$

若 $\mathcal{E}_1 = \mathbb{R}^n, \mathcal{E}_2 = \mathbb{R}^m$, 则 $F(x)$ 可以写为 $(F_1(x), \dots, F_m(x))^T$, 其中 $F_1, \dots, F_m$ 都是 $\mathbb{R}^n$ 上的数值函数. 此时, 定义 2.2.5 中的 $DF(x)$ 是一个从 $\mathbb{R}^n$ 到 $\mathbb{R}^m$ 的线性映射, 因此可以写成一个 $m \times n$ 的矩阵. 这个矩阵就是熟知的雅可比矩阵, 即