第五章 复合优化算法

修贤超

https://xianchaoxiu.github.io

目录

邻近算子

- 考虑如下复合优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = f(x) + h(x)$$

  - $f(x)$ 为可微函数 (可能非凸)
  - $h(x)$ 可能为不可微函数

- **定义** 对于一个凸函数 h，定义**邻近算子**为

$$\operatorname{prox}_h(x) = \arg\min_u \left\{ h(u) + \frac{1}{2}\|u-x\|_2^2 \right\}$$

- **定理** 如果 h 为闭凸函数，则对任意 x 有 $\operatorname{prox}_h(x)$ 存在且唯一

- **定理** 若 h 是适当的闭凸函数, 则

$$u = \mathrm{prox}_h(x) \quad \Leftrightarrow \quad x - u \in \partial h(u)$$

证明 若 $u = \mathrm{prox}_h(x)$, 则由最优性条件得 $0 \in \partial h(u) + (u - x)$, 因此 $x - u \in \partial h(u)$. 反之, 若 $x - u \in \partial h(u)$ 则由次梯度的定义可得到

$$h(v) \geqslant h(u) + (x-u)^\top (v-u), \quad \forall v \in \mathrm{dom}\ h$$

两边同时加 $\frac{1}{2}\|v - x\|^2$, 即有

$$\begin{aligned} h(v) + \frac{1}{2}\|v-x\|^2 &\geqslant h(u) + (x-u)^\top (v-u) + \frac{1}{2}\|(v-u)-(x-u)\|^2 \\ &\geqslant h(u) + \frac{1}{2}\|u-x\|^2, \quad \forall v \in \mathrm{dom}\ h \end{aligned}$$

根据定义可得 $u = \mathrm{prox}_h(x)$

例

- 给定 ℓ_1 范数 $h(x) = t\|x\|_1$, 则 $\mathrm{prox}_{th}(x) = \mathrm{sign}(x)\max\{|x| - t, 0\}$

  证明 邻近算子 $u = \mathrm{prox}_{th}(x)$ 的最优性条件为

$$x - u \in t\partial\|u\|_1 = \begin{cases} \{t\}, & u > 0 \\ [-t, t], & u = 0 \\ \{-t\}, & u < 0 \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$u = \begin{cases} x - t, & x > t \\ x + t, & x < -t \\ 0, & x \in [-t, t] \end{cases}$$

例

- 给定 ℓ_2 范数 $h(x)=t\|x\|_2$, 则 $\operatorname{prox}_{th}(x)=\begin{cases}(1-\frac{t}{\|x\|_2})x, & \|x\|_2 \geqslant t\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$

证明　邻近算子 $u=\operatorname{prox}_{th}(x)$ 的最优性条件为

$$x-u\in t\partial\|u\|_2=\begin{cases}\{\frac{tu}{\|u\|_2}\}, & u\neq 0\\ \{w:\|w\|_2\leqslant t\}, & u=0\end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$u=\begin{cases}x-\frac{tx}{\|x\|_2}, & \|x\|_2>t\\ 0, & \|x\|_2\leqslant t\end{cases}$$

例

- 邻近算子的计算规则
  - 变量的常数倍放缩以及平移 $(\lambda \neq 0)$

$$h(x) = g(\lambda x + a), \quad \mathrm{prox}_h(x) = \frac{1}{\lambda}\left(\mathrm{prox}_{\lambda^2 g}(\lambda x + a) - a\right)$$

  - 函数（及变量）的常数倍放缩 $(\lambda > 0)$

$$h(x) = \lambda g\left(\frac{x}{\lambda}\right), \quad \mathrm{prox}_h(x) = \lambda \mathrm{prox}_{\lambda^{-1} g}\left(\frac{x}{\lambda}\right)$$

  - 加上线性函数

$$h(x) = g(x) + a^\top x, \quad \mathrm{prox}_h(x) = \mathrm{prox}_g(x - a)$$

例

- **加上二次项** $(u > 0)$

$$h(x) = g(x) + \frac{u}{2}\|x - a\|_2^2, \quad \mathrm{prox}_h(x) = \mathrm{prox}_{\theta g}(\theta x + (1-\theta)a)$$

其中 $\theta = \frac{1}{1+u}$

- **向量函数**

$$h\left(\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right) = \varphi_1(x) + \varphi_2(y), \quad \mathrm{prox}_h\left(\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} \mathrm{prox}_{\varphi_1}(x) \\ \mathrm{prox}_{\varphi_2}(y) \end{bmatrix}$$

例

- 设 C 为闭凸集，则示性函数 I_C 的邻近算子为点 x 到 C 的投影 $\mathcal{P}_C(x)$

$$\begin{aligned}\operatorname{prox}_{I_C}(x) &= \arg\min_u \left\{ I_C(u) + \frac{1}{2}\|u-x\|^2 \right\} \\ &= \arg\min_{u \in C} \|u-x\|^2 \\ &= \mathcal{P}_C(x)\end{aligned}$$

- 几何意义

$$u = \mathcal{P}_C(x) \quad \Leftrightarrow \quad (x-u)^\top (z-u) \leqslant 0, \quad \forall z \in C$$

近似点梯度法

- 考虑复合优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = f(x) + h(x)$$

- 对于光滑部分 f 做梯度下降，对于非光滑部分 h 使用邻近算子

===========

算法 近似点梯度法

给定函数 $f(x), h(x)$，初始点 x^0
while 未达到收敛准则 **do**
　　$x^{k+1} = \mathrm{prox}_{t_k h}(x^k - t_k \nabla f(x^k))$
end while

对近似点梯度法的理解

- 把迭代公式展开

$$x^{k+1} = \mathrm{prox}_{t_k h}(x^k - t_k \nabla f(x^k))$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \arg\min_u \left\{ h(u) + \frac{1}{2t_k} \|u - x^k + t_k \nabla f(x^k)\|^2 \right\} \\ &= \arg\min_u \left\{ h(u) + f(x^k) + \nabla f(x^k)^\top (u - x^k) + \frac{1}{2t_k} \|u - x^k\|^2 \right\} \end{aligned}$$

- 根据邻近算子与次梯度的关系，可改写为

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

- 对光滑部分做显式的梯度下降，对非光滑部分做隐式的梯度下降

步长选取

- 当 f 为梯度 L-利普希茨连续函数时，可取固定步长 $t_k = t \leqslant \frac{1}{L}$
- 当 L 未知时可使用线搜索准则

$$f(x^{k+1}) \leqslant f(x^k) + \nabla f(x^k)^\top (x^{k+1} - x^k) + \frac{1}{2t_k}\|x^{k+1} - x^k\|^2$$

- BB 步长
- 可构造如下适用于近似点梯度法的非单调线搜索准则

$$\psi(x^{k+1}) \leq C^k - \frac{c_1}{2t_k}\|x^{k+1} - x^k\|^2$$

- 考虑用近似点梯度法求解 LASSO 问题

$$\min_x \quad \mu\|x\|_1 + \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2$$

- 令 $f(x) = \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2, h(x) = \mu\|x\|_1$, 则

$$\nabla f(x) = A^\top(Ax-b)$$
$$\mathrm{prox}_{t_k h}(x) = \mathrm{sign}(x)\max\{|x| - t_k\mu, 0\}$$

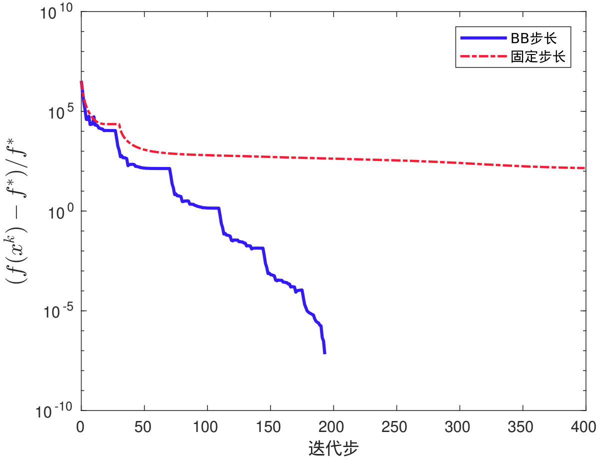
- 相应的迭代格式为

$$y^k = x^k - t_k A^\top(Ax^k - b)$$
$$x^{k+1} = \mathrm{sign}(y^k)\max\{|y^k| - t_k\mu, 0\}$$

即第一步做梯度下降，第二步做收缩

应用举例: LASSO 问题

- 使用 BB 步长加速收敛



- 考虑低秩矩阵恢复模型

$$\min_{X\in\mathbb{R}^{m\times n}} \quad \mu\|X\|_* + \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in\Omega}(X_{ij}-M_{ij})^2$$

- 令

$$f(X)=\frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in\Omega}(X_{ij}-M_{ij})^2, \quad h(X)=\mu\|X\|_*$$

- 定义矩阵

$$P_{ij}=\begin{cases}1, & (i,j)\in\Omega\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

则

$$f(X)=\frac{1}{2}\|P\odot(X-M)\|_F^2$$

应用举例: 低秩矩阵恢复

- 进一步可以得到

$$\begin{aligned}\nabla f(X) &= P \odot (X - M) \\ \mathrm{prox}_{t_k h}(X) &= U\mathrm{Diag}(\max\{|d| - t_k\mu, 0\})V^\top\end{aligned}$$

- 得到近似点梯度法的迭代格式

$$\begin{aligned}Y^k &= X^k - t_k P \odot (X^k - M) \\ X^{k+1} &= \mathrm{prox}_{t_k h}(Y^k)\end{aligned}$$

收敛性分析

- 假设 为了保证近似点梯度算法的收敛性
  - f 在 $\mathbb{R}^n$ 上是凸的; ∇f 为 L-利普希茨连续，即

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leqslant L\|x - y\|, \quad \forall x, y$$

  - h 是适当的闭凸函数
  - 函数 $\psi(x) = f(x) + h(x)$ 的最小值 ψ^* 是有限的，并且在点 x^* 处取到
- 定理 在假设下，取定步长为 $t_k = t \in (0, \frac{1}{L}]$, 设 $\{x^k\}$ 为迭代产生序列，则

$$\psi(x^k) - \psi^* \leqslant \frac{1}{2kt}\|x^0 - x^*\|^2$$

目录

典型问题形式

- 考虑如下复合优化问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = f(x) + h(x)$$

  - $f(x)$ 是连续可微的凸函数，且梯度是利普西茨连续的

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

  - $h(x)$ 是适当的闭凸函数，且邻近算子

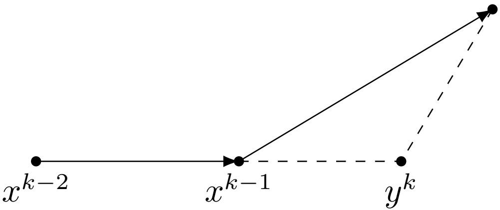
$$\mathrm{prox}_h(x) = \arg\min_{u \in \mathrm{dom} h} \{h(u) + \frac{1}{2}\|x - u\|^2\}$$

- 步长取常数 $t_k = 1/L$ 时，近似点梯度法的收敛速度为 $\mathcal{O}(1/k)$

Nesterov 加速算法简史

- Nesterov 在 1983、1988、2005 提出了三种改进的一阶算法，收敛速度 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$
- Beck 和 Teboulle 在 2008 年提出了 FISTA 算法, 第一步沿着前两步的计算方向计算一个新点，第二步在该新点处做一步近似点梯度迭代

$$x^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(y^k - t_k \nabla f(y^k))$$



FISTA 算法

算法 近似点梯度法

给定函数 $f(x), h(x)$，初始点 x^0
while 未达到收敛准则 **do**
$\quad x^{k+1} = \mathrm{prox}_{t_k h}(x^k - t_k \nabla f(x^k))$
end while

===========

算法 7.2 FISTA 算法

输入$x^0 = x^{-1} \in \mathbb{R}^n, k \leftarrow 1$
while 未达到收敛准则 **do**
计算 $y^k = x^{k-1} + \frac{k-2}{k+1}(x^{k-1} - x^{k-2})$
选取 $t_k = t \in (0, 1/L]$，计算 $x^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(y^k - t_k \nabla f(y^k))$
$k \leftarrow k + 1$
end while

FISTA 的等价形式

算法 FISTA 算法的等价变形

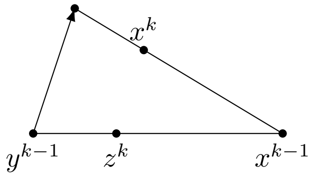
输入$v^0 = x^0 \in \mathbb{R}^n, k \leftarrow 1$
while 未达到收敛准则 **do**
计算 $y^k = (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k v^{k-1}$
选取 t_k，计算 $x^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(y^k - t_k \nabla f(y^k))$
计算 $v^k = x^{k-1} + \frac{1}{\gamma_k}(x^k - x^{k-1})$
$k \leftarrow k+1$
end while

- 第二类 Nesterov 加速算法

$$
\begin{aligned}
z^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^{k-1} \\
y^k &= \mathrm{prox}_{(t_k/\gamma_k)h}\left(y^{k-1} - \frac{t_k}{\gamma_k}\nabla f(z^k)\right) \\
x^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^k
\end{aligned}
$$

- 三个序列 $\{x^k\}$，$\{y^k\}$ 和 $\{z^k\}$ 都可以保证在定义域内

$$y^k = \mathrm{prox}_{(t_k/\gamma_k)h}(y^{k-1} - (t_k/\gamma_k)\nabla f(z^k))$$



- **第三类 Nesterov 加速算法**

$$
\begin{aligned}
z^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^{k-1} \\
y^k &= \mathrm{prox}_{(t_k \sum_{i=1}^k 1/\gamma_i)h}\left(-t_k \sum_{i=1}^k \frac{1}{\gamma_i} \nabla f(z^i)\right) \\
x^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^k
\end{aligned}
$$

- **计算 y^k 时需要利用全部已有的** $\{\nabla f(z^i)\}, i = 1, 2, \cdots, k$
- **取** $\gamma_k = \frac{2}{k+1}$，$t_k = \frac{1}{L}$ **时，也有** $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ **的收敛速度**

针对非凸问题的 Nesterov 加速算法

- 考虑 $f(x)$ 是非凸函数，但可微且梯度是利普希茨连续
- 非凸复合优化问题的加速梯度法框架

$$
\begin{aligned}
z^k &= \gamma_k y^{k-1} + (1-\gamma_k)x^{k-1} \\
y^k &= \mathrm{prox}_{\lambda_k h}(y^{k-1} - \lambda_k \nabla f(z^k)) \\
x^k &= \mathrm{prox}_{t_k h}(z^k - t_k \nabla f(z^k))
\end{aligned}
$$

- 当 λ_k 和 t_k 取特定值时，它等价于第二类 Nesterov 加速算法
- 当 f 为凸函数，收敛速度为 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$
- 当 f 为非凸函数，收敛速度为 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$

应用举例: LASSO 问题求解

- 考虑 LASSO 问题

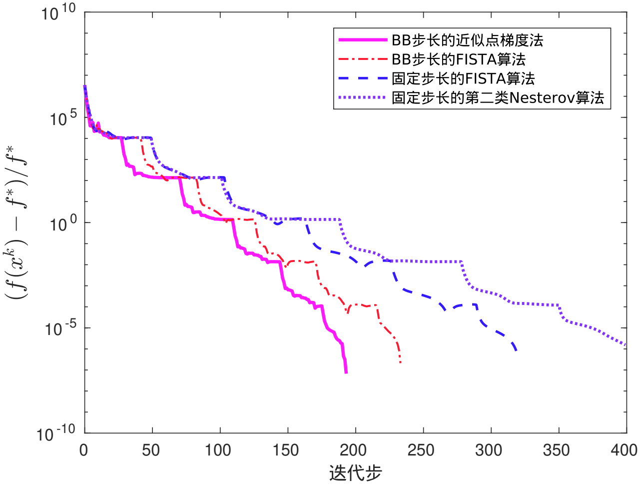
$$\min_x \quad \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2+\mu\|x\|_1$$

- FISTA 算法可以由下面的迭代格式给出

$$\begin{aligned}
y^k &= x^{k-1}+\frac{k-2}{k+1}(x^{k-1}-x^{k-2}) \\
w^k &= y^k-t_kA^\top(Ay^k-b) \\
x^k &= \operatorname{sign}(w^k)\max\{|w^k|-t_k\mu,0\}
\end{aligned}$$

应用举例: LASSO 问题求解

- 取 $\mu = 10^{-3}$，步长 $t = \frac{1}{L}$，其中 $L = \lambda_{\max}(A^\top A)$



收敛性分析

- **定理** 在假设 7.1 下，当用 FISTA 算法求解凸复合优化问题时，若取固定步长 $t_k = 1/L$，则

$$\psi(x^k) - \psi(x^*) \le \frac{2L}{(k+1)^2}\|x^0 - x^*\|^2$$

- **推论** 在假设下，当用 FISTA 算法求解凸复合优化问题时，若迭代点 x^k, y^k，步长 t_k 以及组合系数 γ_k 满足一定条件，则

$$\psi(x^k) - \psi(x^*) \le \frac{C}{k^2}$$

  其中 C 仅与函数 f 和初始点 x^0 的选取有关

- 采用线搜索的 FISTA 算法具有 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ 的收敛速度

目录

问题形式

- 考虑具有如下形式的问题

$$\min_{x\in\mathcal{X}} \quad F(x_1, x_2, \cdots, x_s) = f(x_1, x_2, \cdots, x_s) + \sum_{i=1}^{s} r_i(x_i)$$

  - f 是关于 x 的可微函数，但不一定凸
  - $r_i(x_i)$ 关于 x_i 是适当的闭凸函数，但不一定可微
- 挑战和难点
  - 在非凸问题上，很多针对凸问题设计的算法通常会失效
  - 目标函数的整体结构十分复杂，变量的更新需要很大计算量

问题形式

- **例** 设参数 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_G)\in\mathbb{R}^p$，分组 LASSO 模型

$$\min_x \quad \frac{1}{2n}\|b-Ax\|_2^2+\lambda\sum_{i=1}^{G}\sqrt{p_i}\|x_i\|_2$$

- **例** 设 $b\in\mathbb{R}^m$ 是已知的观测向量，低秩矩阵恢复模型

$$\min_{X,Y} \quad \frac{1}{2}\|\mathcal{A}(XY)-b\|_2^2+\alpha\|X\|_F^2+\beta\|Y\|_F^2$$

- **例** 设 $M\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 是已知的矩阵，非负矩阵分解模型

$$\min_{X,Y\geq 0} \quad \frac{1}{2}\|XY-M\|_F^2+\alpha r_1(X)+\beta r_2(Y)$$

变量更新方式

- 按照 $x_1, x_2, \cdots, x_s$ 的次序依次固定其他 $(s-1)$ 块变量极小化 F
- 辅助函数

$$f_i^k(x_i) = f(x_1^k, \cdots, x_{i-1}^k, x_i, x_{i+1}^{k-1}, \cdots, x_s^{k-1})$$

- 在每一步更新中，通常使用以下三种更新格式之一

$$x_i^k = \arg\min_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ f_i^k(x_i) + r_i(x_i) \right\} \tag{1}$$

$$x_i^k = \arg\min_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ f_i^k(x_i) + \frac{L_i^{k-1}}{2} \|x_i - x_i^{k-1}\|_2^2 + r_i(x_i) \right\} \tag{2}$$

$$x_i^k = \arg\min_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ \langle \hat{g}_i^k, x_i - \hat{x}_i^{k-1} \rangle + \frac{L_i^{k-1}}{2} \|x_i - \hat{x}_i^{k-1}\|_2^2 + r_i(x_i) \right\} \tag{3}$$

算法格式

算法　分块坐标下降法

选择两组初始点 $(x_1^{-1}, x_2^{-1}, \cdots, x_s^{-1}) = (x_1^0, x_2^0, \cdots, x_s^0)$
for $k = 1, 2, \cdots$ **do**
for $i = 1, 2, \cdots$ **do**
使用格式 (1)、(2)、(3) 更新 x_i^k
end for
if 满足停机条件 **then**
返回 $(x_1^k, x_2^k, \cdots, x_s^k)$，算法终止
end if
end for

算法格式

- BCD 算法的子问题可采用三种不同的更新格式，这三种格式可能会产生不同的迭代序列，可能会收敛到不同的解，数值表现也不相同
- 格式 (1) 是最直接的更新方式，保证整个迭代过程的目标函数值是下降的. 然而由于 f 的形式复杂，子问题求解难度较大
- 在收敛性方面，格式 (1) 在强凸问题上可保证目标函数收敛到极小值，但在非凸问题上不一定收敛

$$x_i^k = \mathop{\arg\min}_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ f_i^k(x_i) + r_i(x_i) \right\}$$

算法格式

- 格式 (2) (3) 是对格式 (1) 的修正，不保证迭代过程目标函数的单调性，但可以改善收敛性结果.
- 格式 (3) 实质上为目标函数的一阶泰勒展开近似，在一些测试问题上有更好的表现，可能的原因是使用一阶近似可以避开一些局部极小值点
- 格式 (3) 的计算量很小，比较容易实现

$$x_i^k = \arg\min_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ f_i^k(x_i) + r_i(x_i) \right\}$$

$$x_i^k = \arg\min_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ f_i^k(x_i) + \frac{L_i^{k-1}}{2} \|x_i - x_i^{k-1}\|_2^2 + r_i(x_i) \right\}$$

$$x_i^k = \arg\min_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ \langle \hat{g}_i^k, x_i - \hat{x}_i^{k-1} \rangle + \frac{L_i^{k-1}}{2} \|x_i - \hat{x}_i^{k-1}\|_2^2 + r_i(x_i) \right\}$$

例

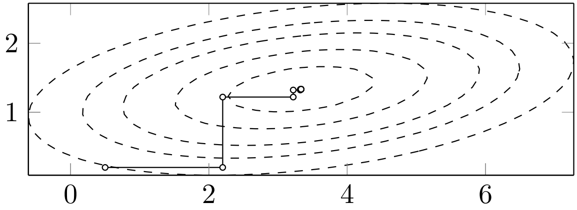
- 考虑二元二次函数的优化问题

$$\min \quad f(x,y) = x^2 - 2xy + 10y^2 - 4x - 20y$$

- 采用格式 (1) 的分块坐标下降法

$$x^{k+1} = 2 + y^k \quad y^{k+1} = 1 + \frac{x^{k+1}}{10}$$

- 初始点为 $(x,y) = (0.5, 0.2)$ 时的迭代点轨迹



不收敛反例

- 考虑

$$F(x_1,x_2,x_3) = -x_1x_2 - x_2x_3 - x_3x_1 + \sum_{i=1}^{3}[(x_i-1)_+^2 + (-x_i-1)_+^2]$$

- 设 $\varepsilon > 0$，初始点取为

$$x^0 = \left(-1-\varepsilon, 1+\frac{\varepsilon}{2}, -1-\frac{\varepsilon}{4}\right)$$

容易验证迭代序列满足

$$x^k = (-1)^k \cdot (-1,1,-1) + (-\frac{1}{8})^k \cdot \left(-\varepsilon, \frac{\varepsilon}{2}, -\frac{\varepsilon}{4}\right)$$

- 迭代序列有两个聚点 $(-1,1,-1)$ 与 $(1,-1,1)$，但都不是 F 的稳定点

- 使用分块坐标下降法来求解 LASSO 问题

$$\min_x \quad \mu\|x\|_1 + \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2$$

- 将自变量 x 记为 $x = [x_i \quad \bar{x}_i^\top]^\top$, 矩阵 A 记为 $A = [a_i \quad \bar{A}_i]$
- 应用格式 (1), 替换 $c_i = b - \bar{A}_i\bar{x}_i$, 原问题等价于

$$\min_{x_i} \quad f_i(x_i) = \mu|x_i| + \frac{1}{2}\|a_i\|^2 {x_i}^2 - a_i^\top c_i x_i$$

- 可直接写出最小值点

$$x_i^k = \arg\min_{x_i} f_i(x_i) = \begin{cases} \frac{a_i^\top c_i - \mu_i}{\|a_i\|^2}, & a_i^\top c_i > \mu \\ \frac{a_i^\top c_i + \mu_i}{\|a_i\|^2}, & a_i^\top c_i < -\mu \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

应用举例: 非负矩阵分解

- 考虑最基本的非负矩阵分解问题

$$\min_{X,Y\geq 0} \quad f(X,Y)=\frac{1}{2}\|XY-M\|_F^2$$

- 计算梯度

$$\frac{\partial f}{\partial X}=(XY-M)Y^\top, \quad \frac{\partial f}{\partial Y}=X^\top(XY-M)$$

- 应用格式 (3)，当 $r_i(X)$ 为凸集示性函数时，得到

$$\begin{aligned} X^{k+1} &= \max\{X^k - t_k^x(X^kY^k-M)(Y^k)^\top, 0\} \\ Y^{k+1} &= \max\{Y^k - t_k^y(X^k)^\top(X^kY^k-M), 0\} \end{aligned}$$

目录

典型问题形式

- 考虑如下凸问题

$$\begin{aligned} \min_{x_1,x_2} \quad & f_1(x_1) + f_2(x_2) \\ \text{s.t.} \quad & A_1x_1 + A_2x_2 = b \end{aligned} \tag{4}$$

- f_1, f_2 是适当的闭凸函数，但不要求是光滑的
- 目标函数可以分成彼此分离的两块，但是变量被线性约束结合在一起

问题形式举例

- **例** 可以分成两块的无约束优化问题

$$\min_{x} \quad f_1(x) + f_2(x)$$

引入一个新的变量 z 并令 $x = z$，将问题转化为

$$\begin{aligned} \min_{x,z} \quad & f_1(x) + f_2(z) \\ \text{s.t.} \quad & x - z = 0 \end{aligned}$$

- **例** 带线性变换的无约束优化问题

$$\min_{x} \quad f_1(x) + f_2(Ax)$$

引入一个新的变量 z，令 $z = Ax$，则问题变为

$$\begin{aligned} \min_{x,z} \quad & f_1(x) + f_2(z) \\ \text{s.t.} \quad & Ax - z = 0 \end{aligned}$$

问题形式举例

- **例** **凸集 $C \subset \mathbb{R}^n$ 上的约束优化问题**

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

引入约束 $z = Ax$，那么问题转化为

$$
\begin{aligned}
\min_{x,z} \quad & f(x) + I_C(z) \\
\text{s.t.} \quad & Ax - z = 0
\end{aligned}
$$

问题形式举例

- **例** 全局一致性问题

$$\min_{x} \quad \sum_{i=1}^{N} \phi_i(x)$$

令 $x = z$，并将 x 复制 N 份，分别为 x_i，那么问题转化为

$$\begin{aligned} \min_{x_i, z} \quad & \sum_{i=1}^{N} \phi_i(x_i) \\ \text{s.t.} \quad & x_i - z = 0, \ i = 1, 2, \cdots, N \end{aligned}$$

增广拉格朗日函数法

- 首先写出问题 (4) 的增广拉格朗日函数

$$
\begin{aligned}
L_\rho(x_1, x_2, y) = & f_1(x_1) + f_2(x_2) + y^\top (A_1 x_1 + A_2 x_2 - b) \\
& + \frac{\rho}{2} \|A_1 x_1 + A_2 x_2 - b\|_2^2
\end{aligned}
$$

- 增广拉格朗日函数法为如下更新

$$
\begin{aligned}
(x_1^{k+1}, x_2^{k+1}) &= \arg\min_{x_1, x_2} L_\rho(x_1, x_2, y^k) \\
y^{k+1} &= y^k + \tau\rho(A_1 x_1^{k+1} + A_2 x_2^{k+1} - b)
\end{aligned}
$$

交替方向乘子法

- Alternating direction method of multipliers, ADMM
- 迭代格式如下

$$
\begin{aligned}
(x_1^{k+1}, x_2^{k+1}) &= \arg\min_{x_1, x_2} L_\rho(x_1, x_2, y^k) \\
y^{k+1} &= y^k + \tau\rho(A_1 x_1^{k+1} + A_2 x_2^{k+1} - b)
\end{aligned}
$$

$$
\Downarrow
$$

$$
\begin{aligned}
x_1^{k+1} &= \arg\min_{x_1} L_\rho(x_1, x_2^k, y^k) \\
x_2^{k+1} &= \arg\min_{x_2} L_\rho(x_1^{k+1}, x_2, y^k) \\
y^{k+1} &= y^k + \tau\rho(A_1 x_1^{k+1} + A_2 x_2^{k+1} - b)
\end{aligned}
$$

原问题最优性条件

- 问题 (4) 的拉格朗日函数为

$$L(x_1, x_2, y) = f_1(x_1) + f_2(x_2) + y^\top(A_1x_1 + A_2x_2 - b)$$

- 若 x_1^*, x_2^* 为问题 (4) 的最优解，y^* 为对应的拉格朗日乘子，则满足

$$0 \in \partial_{x_1} L(x_1^*, x_2^*, y^*) = \partial f_1(x_1^*) + A_1^\top y^* \tag{5a}$$

$$0 \in \partial_{x_2} L(x_1^*, x_2^*, y^*) = \partial f_2(x_2^*) + A_2^\top y^* \tag{5b}$$

$$A_1x_1^* + A_2x_2^* = b \tag{5c}$$

- 条件 (5c) 称为原始可行性条件
- 条件 (5a) 和条件 (5b) 称为对偶可行性条件

ADMM 单步迭代最优性条件

- 关于 x_2 的更新步骤

$$x_2^k = \arg\min_x \left\{ f_2(x) + \frac{\rho}{2} \|A_1 x_1^k + A_2 x - b + \frac{y^{k-1}}{\rho}\|^2 \right\}$$

- 根据最优性条件推出

$$0 \in \partial f_2(x_2^k) + A_2^\top [y^{k-1} + \rho(A_1 x_1^k + A_2 x_2^k - b)]$$

- 当 $\tau = 1$ 时知

$$0 \in \partial f_2(x_2^k) + A_2^\top y^k$$

ADMM 单步迭代最优性条件

- 关于 x_1 的更新公式

$$x_1^k = \arg\min_x \left\{ f_1(x) + \frac{\rho}{2}\|A_1 x + A_2 x_2^{k-1} - b + \frac{y^{k-1}}{\rho}\|^2 \right\}$$

- 假设子问题能精确求解，根据最优性条件

$$0 \in \partial f_1(x_1^k) + A_1^\top [\rho(A_1 x_1^k + A_2 x_2^{k-1} - b) + y^{k-1}]$$

- 当 $\tau = 1$ 时知

$$0 \in \partial f_1(x_1^k) + A_1^\top (y^k + \rho A_2(x_2^{k-1} - x_2^k))$$

ADMM 单步迭代最优性条件

- 对比条件 (5a)

$$0 \in \partial f_1(x_1^*) + A_1^\top y^*$$

$$\Downarrow$$

$$0 \in \partial f_1(x_1^k) + A_1^\top (y^k + \rho A_2(x_2^{k-1} - x_2^k))$$

- 当 x_2 更新取到精确解且 $\tau = 1$ 时，判断 ADMM 是否收敛只需要检测
  - 原始可行性

$$0 \approx \|r^k\| = \|A_1 x_1^k + A_2 x_2^k - b\|$$

  - 对偶可行性

$$0 \approx \|s^k\| = \|A_1^\top A_2(x_2^{k-1} - x_2^k)\|$$

线性化

- 考虑第一个子问题

$$\min_{x_1} \quad f_1(x_1) + \frac{\rho}{2}\|A_1x_1 - v^k\|^2$$

- 当子问题目标函数可微时，线性化为

$$x_1^{k+1} = \arg\min_{x_1} \left\{ (\nabla f_1(x_1^k) + \rho A_1^\top (A_1x_1^k - v^k))^\top x_1 + \frac{1}{2\eta_k}\|x_1 - x^k\|_2^2 \right\}$$

  这等价于做一步梯度下降

- 当目标函数不可微时，可以考虑只将二次项线性化

$$x_1^{k+1} = \arg\min_{x_1} \left\{ f_1(x_1) + \rho(A_1^\top (A_1x_1^k - v^k))^\top x_1 + \frac{1}{2\eta_k}\|x_1 - x^k\|_2^2 \right\}$$

  这等价于做一步近似点梯度步

缓存分解

- 考虑目标函数中含二次函数

$$f_1(x_1) = \frac{1}{2}\|Cx_1 - d\|_2^2$$

$$\Downarrow$$

$$(C^\top C + \rho A_1^\top A_1)x_1 = C^\top d + \rho A_1^\top v^k$$

- 首先对 $C^\top C + \rho A_1^\top A_1$ 进行 Cholesky 分解并缓存分解的结果，在每步迭代中只需要求解简单的三角形方程组
- 当 $C^\top C + \rho A_1^\top A_1$ 一部分容易求逆，另一部分是低秩的情形时，可以用SMW公式来求逆

优化转移

- 为了方便求解子问题，可以用一个性质好的矩阵 D 近似二次项 $A_1^\top A_1$，即

$$x_1^{k+1} = \arg\min_{x_1} \left\{ f_1(x_1) + \frac{\rho}{2}\|A_1x_1 - v^k\|_2^2 \right\}$$

$$\Downarrow$$

$$x_1^{k+1} = \arg\min_{x_1} \left\{ f_1(x_1) + \frac{\rho}{2}\|A_1x_1 - v^k\|_2^2 + \frac{\rho}{2}(x_1 - x^k)^\top (D - A_1^\top A_1)(x_1 - x^k) \right\}$$

- 通过选取合适的 D，优化转移简化子问题更容易计算
- 当 $D = \frac{\eta_k}{\rho} I$ 时，优化转移等价于做单步的近似点梯度步

二次罚项系数的动态调节

- 二次罚项系数 ρ 太大会导致原始可行性 $\|r^k\|$ 下降很快，但是对偶可行性 $\|s^k\|$ 下降很慢. 二次罚项系数 ρ 太小，则会有相反的效果
- 动态调节惩罚系数 ρ 的大小，使得原始可行性和对偶可行性能够以比较一致的速度下降到零

$$\rho^{k+1} = \begin{cases} \gamma_p \rho^k, & \|r^k\| > \mu \|s^k\| \\ \rho^k / \gamma_d & \|s^k\| > \mu \|r^k\| \\ \rho^k, & \text{其他} \end{cases}$$

- 常见的选择为 $\mu = 10, \gamma_p = \gamma_d = 2$

多块问题的 ADMM

- 考虑有多块变量的情形

$$\begin{aligned} \min_{x_1,x_2,\cdots,x_N} \quad & f_1(x_1)+f_2(x_2)+\cdots+f_N(x_N) \\ \text{s.t.} \quad & A_1x_1+A_2x_2+\cdots+A_Nx_N=b \end{aligned}$$

- 多块 ADMM 迭代格式为

$$\begin{aligned} x_1^{k+1} &= \arg\min_x L_\rho(x, x_2^k, \cdots, x_N^k, y^k) \\ x_2^{k+1} &= \arg\min_x L_\rho(x_1^{k+1}, x, \cdots, x_N^k, y^k) \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ x_N^{k+1} &= \arg\min_x L_\rho(x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \cdots, x, y^k) \\ y^{k+1} &= y^k + \tau\rho(A_1x_1^{k+1}+A_2x_2^{k+1}+\cdots+A_Nx_N^{k+1}-b) \end{aligned}$$

其中 $\tau \in (0, (\sqrt{5}+1)/2)$ 为步长参数

应用举例: LASSO 问题

- 考虑 LASSO 问题

$$\min \quad \mu\|x\|_1 + \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2$$

- 转换为标准问题形式

$$\begin{aligned} \min_{x,z} \quad & \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 + \mu\|z\|_1 \\ \text{s.t.} \quad & x = z \end{aligned}$$

- 交替方向乘子法迭代格式为

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \arg\min_x \left\{ \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 + \frac{\rho}{2}\|x - z^k + y^k/\rho\|_2^2 \right\} \\ &= (A^\top A + \rho I)^{-1}(A^\top b + \rho z^k - y^k) \end{aligned}$$

应用举例: LASSO 问题

- 交替方向乘子法迭代格式为

$$
\begin{aligned}
z^{k+1} &= \arg\min_{z} \left\{ \mu\|z\|_1 + \frac{\rho}{2}\|x^{k+1} - z + y^k/\rho\|^2 \right\} \\
&= \mathrm{prox}_{(\mu/\rho)\|\cdot\|_1}(x^{k+1} + y^k/\rho) \\
y^{k+1} &= y^k + \tau\rho(x^{k+1} - z^{k+1})
\end{aligned}
$$

- 在求解 x 迭代时，可以使用固定的罚因子 ρ，缓存矩阵 $A^\top A + \rho I$ 的初始分解
- 主要运算量来自更新 x 变量时求解线性方程组，复杂度为 $O(n^3)$

应用举例: LASSO 问题

- 考虑 LASSO 问题的对偶问题

$$\begin{array}{ll} \min & b^\top y + \frac{1}{2}\|y\|^2 \\ \text{s.t.} & \|A^\top y\|_\infty \le \mu \end{array}$$

- 引入约束 $A^\top y + z = 0$，可以得到如下等价问题

$$\begin{array}{ll} \min & \underbrace{b^\top y + \frac{1}{2}\|y\|^2}_{f(y)} + \underbrace{I_{\|z\|_\infty \le \mu}(z)}_{h(z)} \\ \text{s.t.} & A^\top y + z = 0 \end{array}$$

- 对约束 $A^\top y + z = 0$ 引入乘子 x，对偶问题的增广拉格朗日函数

$$L_\rho(y, z, x) = b^\top y + \frac{1}{2}\|y\|^2 + I_{\|z\|_\infty \le \mu}(z) - x^\top (A^\top y + z) + \frac{\rho}{2}\|A^\top y + z\|^2$$

应用举例: LASSO 问题

- 当固定 y, x 时，对 z 的更新即向无穷范数球 $\{z \mid \|z\|_\infty \le \mu\}$ 做欧几里得投影，即将每个分量截断在区间 $[-\mu, \mu]$
- 当固定 z, x 时，对 y 的更新即求解线性方程组

$$(I + \rho AA^\top)y = A(x^k - \rho z^{k+1}) - b$$

- ADMM 迭代格式为

$$\begin{aligned} z^{k+1} &= \mathcal{P}_{\|z\|_\infty \le \mu}(x^k/\rho - A^\top y^k) \\ y^{k+1} &= (I + \rho AA^\top)^{-1}(A(x^k - \rho z^{k+1}) - b) \\ x^{k+1} &= x^k - \tau\rho(A^\top y^{k+1} + z^{k+1}) \end{aligned}$$

- 由于 $m \ll n$，求解 y 更新的线性方程组需要的计算量是 $O(m^3)$

应用举例: 矩阵分离问题

- 考虑矩阵分离问题

$$\begin{aligned} \min_{X,S} \quad & \|X\|_* + \mu\|S\|_1 \\ \text{s.t.} \quad & X + S = M \end{aligned}$$

- 引入乘子 Y 得到增广拉格朗日函数

$$L_\rho(X, S, Y) = \|X\|_* + \mu\|S\|_1 + \langle Y, X + S - M\rangle + \frac{\rho}{2}\|X + S - M\|_F^2$$

应用举例: 矩阵分离问题

- 对于 X 子问题

$$
\begin{aligned}
X^{k+1} &= \arg\min_X \; L_\rho(X, S^k, Y^k) \\
&= \arg\min_X \left\{ \|X\|_* + \frac{\rho}{2}\|X + S^k - M + \frac{Y^k}{\rho}\|_F^2 \right\} \\
&= \arg\min_X \left\{ \frac{1}{\rho}\|X\|_* + \frac{1}{2}\|X + S^k - M + \frac{Y^k}{\rho}\|_F^2 \right\} \\
&= U\mathrm{Diag}(\mathrm{prox}_{(1/\rho)\|\cdot\|_1}(\sigma(A)))V^\top
\end{aligned}
$$

其中 $A = M - S^k - \frac{Y^k}{\rho}$，$\sigma(A)$ 为 A 的所有非零奇异值构成的向量并且 $U\mathrm{Diag}(\sigma(A))V^\top$ 为 A 的约化奇异值分解

应用举例: 矩阵分离问题

- 对于 S 子问题

$$
\begin{aligned}
S^{k+1} &= \arg\min_{S} \ L_\rho(X^{k+1}, S, Y^k) \\
&= \arg\min_{S} \left\{ \mu\|S\|_1 + \frac{\rho}{2}\|X^{k+1} + S - M + \frac{Y^k}{\rho}\|_F^2 \right\} \\
&= \mathrm{prox}_{(\mu/\rho)\|\cdot\|_1}(M - X^{k+1} - \frac{Y^k}{\rho})
\end{aligned}
$$

- 交替方向乘子法的迭代格式为

$$
\begin{aligned}
X^{k+1} &= U\mathrm{Diag}(\mathrm{prox}_{(1/\rho)\|\cdot\|_1}(\sigma(A)))V^\top \\
S^{k+1} &= \mathrm{prox}_{(\mu/\rho)\|\cdot\|_1}(M - L^{k+1} - \frac{Y^k}{\rho}) \\
Y^{k+1} &= Y^k + \tau\rho(X^{k+1} + S^{k+1} - M)
\end{aligned}
$$

应用举例：全局一致性优化问题

- 考虑全局一致性优化问题

$$
\begin{aligned}
\min_{x_i,z} \quad & \sum_{i=1}^{N} \phi_i(x_i) \\
\text{s.t.} \quad & x_i - z = 0, \ i = 1, 2, \cdots, N
\end{aligned}
$$

- 增广拉格朗日函数为

$$
L_\rho(x_1, \cdots, x_N, z, y_1, \cdots, y_N) = \sum_{i=1}^{N} \phi_i(x_i) + \sum_{i=1}^{N} y_i^\top (x_i - z) + \frac{\rho}{2} \sum_{i=1}^{N} \|x_i - z\|^2
$$

- 固定 z^k, y_i^k，更新 x_i 的公式为

$$
x_i^{k+1} = \arg\min_x \left\{ \phi_i(x) + \frac{\rho}{2} \|x - z^k + y_i^k / \rho\|^2 \right\}
$$

应用举例: 全局一致性优化问题

- 在一般情况下更新 x_i 的表达式为

$$x_i^{k+1} = \mathrm{prox}_{\phi_i/\rho}(z^k - y_i^k/\rho)$$

- 固定 x_i^{k+1}, y_i^k，关于 z 可以直接写出显式解

$$z^{k+1} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}({x_i}^{k+1} + y_i^k/\rho)$$

- 交替方向乘子法迭代格式为

$$\begin{aligned}
x_i^{k+1} &= \mathrm{prox}_{\phi_i/\rho}(z^k - y_i^k/\rho),\ i = 1, 2, \cdots, N \\
z^{k+1} &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i^{k+1} + y_i^k/\rho) \\
y_i^{k+1} &= {y_i}^k + \tau\rho({x_i}^{k+1} - z^{k+1}),\ i = 1, 2, \cdots, N
\end{aligned}$$

Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈