

低秩矩阵完整化问题的几种高效解法

林陈冉

2016年12月18日

1 简介

1.1 什么是低秩矩阵完整化(low-rank matrix completion)

简单来说,低秩矩阵完整化问题,就是在仅仅知道矩阵的少部分元素的情况下,恢复出这个矩阵的所有元素.这个问题在统计,图像处理,计算几何,机器学习,信号处理,模型控制等方面有广泛应用,比如著名的Netflix大奖赛问题.

1.2 数学模型

显而易见,补全一个完全随机的矩阵几乎是不可能的,也是意义不大的.一般情况下,我们认为所需要补全的矩阵是有一定规律的,也就是说,这个矩阵的秩比较小.通常我们最感兴趣的是这样的最优优化问题:

$$\begin{aligned} \min & \text{rank}(X) \\ \text{s.t. } & X_{ij} = M_{ij}, \forall (i, j) \in \Omega \end{aligned} \quad (1.1)$$

其中 $X, M \in \mathbb{R}^{p \times q}$, Ω 是已知元素的下标 (i, j) 构成的集合, $|\Omega| = m$.

在一些情况下,(1.1)等价于线性约束问题:

$$\begin{aligned} \min & \text{rank}(X) \\ \text{s.t. } & \mathcal{A}(X) = b \end{aligned} \quad (1.2)$$

其中 $b = (b_1, \dots, b_m) \in \mathbb{R}^m$, $\mathcal{A} : \mathbb{R}^{p \times q} \rightarrow \mathbb{R}^m$ 是线性算子, $\mathcal{A}(X) = (\langle A_1, X \rangle, \dots, \langle A_m, X \rangle)$, $A_i \in \mathbb{R}^{p \times q}, \forall i = 1, \dots, m$, $\langle A, X \rangle$ 是矩阵内积,

在此给出线性算子 \mathcal{A} 的共轭算子的定义: $\mathcal{A}^* : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^{p \times q}$, $\mathcal{A}^*(y) = \sum_{i=1}^m y_i A_i, \forall y = (y_1, \dots, y_m) \in \mathbb{R}^m$. 容易验证 \mathcal{A} 和 \mathcal{A}^* 是 well-defined, 即

$$\langle \mathcal{A}(X), y \rangle = \langle (\langle A_i, X \rangle), (y_i) \rangle = \sum_{i=1}^m y_i \langle A_i, X \rangle = \langle \sum_{i=1}^m y_i A_i, X \rangle = \langle \mathcal{A}^*(y), X \rangle = \langle X, \mathcal{A}^*(y) \rangle$$

但是(1.1),(1.2)都是”NP-难”的,因此需要一定的转化.这里我们用核范数来近似矩阵的秩,把(1.1)与(1.2)转化为以下形式:

$$\begin{aligned} \min & \|X\|_* \\ \text{s.t. } & \mathcal{A}(X) = b \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$\begin{aligned} \min \quad & \|X\|_* \\ \text{s.t.} \quad & X_{ij} = M_{ij}, \forall (i, j) \in \Omega \end{aligned} \quad (1.4)$$

很自然的,一个重要的问题是:(1.1)与(1.3),或者(1.2)与(1.4)什么时候等价?略过证明,直接描述以下重要的结论:

对于(1.3),Candes和陶哲轩等给出了一个证明.当在某些条件下,若已知元素个数 $|\Omega| = m = O(nr \cdot \text{polylog}(n))$,其中 $n = \max(p, q)$, polylog 是多重对数函数,则矩阵有很高概率可以通过(1.3)恢复.

对于(1.4),Recht等给出了一个证明.将线性映射 \mathcal{A} 的矩阵形式记作 A ,即 $\mathcal{A}(X) = A\text{vec}(X)$,其中 $\text{vec}(X) \in \mathbb{R}^{pq}$ 为矩阵 X 的向量化.当 A 是一个随机高斯矩阵,若向量 b 的维数 $m \geq C(r(p+q)\log(pq))$,其中 C 是一个正的常数,则矩阵有很高概率可以通过(1.4)恢复.

实际上,由线性代数知识容易知道,(1.4)要求的线性约束条件并不总能成立,因此有时需要适当松弛.考虑(1.4)的罚函数:

$$\min \quad \|X\|_* + \frac{1}{2\mu} \|\mathcal{A}(X) - b\|_2^2 \quad (1.5)$$

其中 μ 是某个给定常数.

下面,将对(1.3),(1.4),(1.5)分别给出一种高效的解法.

2 交替方向增广Lagrange法

对于问题(1.3),我们考虑它的对偶问题

$$\begin{aligned} \max_{y \in \mathbb{R}^m} \quad & b^\top y \\ \text{s.t.} \quad & \|\mathcal{A}^*(y)\|_2 \leq 1 \end{aligned} \quad (2.1)$$

引入一个形式上的变量 S ,将(2.1)变为如下的等价形式

$$\begin{aligned} \min_{y \in \mathbb{R}^m} \quad & -b^\top y \\ \text{s.t.} \quad & \mathcal{A}^*(y) - S = 0 \\ & \|S\|_2 \leq 1 \end{aligned} \quad (2.2)$$

可以考虑(2.2)的增广Lagrange函数

$$L(y, S, X, \mu) = -b^\top y + \langle X, \mathcal{A}^*(y) - S \rangle + \frac{1}{2\mu} \|\mathcal{A}^*(y) - S\|_F^2 \quad (2.3)$$

其中 $X \in \mathbb{R}^{p \times q}$ 是某个给定的矩阵(不同于原问题中的 X), $\|\cdot\|_F$ 是矩阵的 F -范数,定义为矩阵所有元素的平方和的平方根.

由此我们得到(2.1)的一个等价问题

$$\begin{aligned} \min_{y, S} \quad & L(y, S, X, \mu) \\ \text{s.t.} \quad & \|S\|_2 \leq 1 \end{aligned} \quad (2.4)$$

通过选取最佳的 μ 和 X 可以求出(2.4)的最优解.

采用如下的迭代过程以求解问题(2.4)

$$(y^{k+1}, S^{k+1}) = \arg \min_{y, S} L(y, S, X^k, \mu^k) \quad (2.5)$$

$$\mu^{k+1} \in [\alpha \mu^k, \mu^k], \alpha \in (0, 1) \quad (2.6)$$

$$X^{k+1} = X^k + \frac{\mathcal{A}^*(y^{k+1}) - S^{k+1}}{\mu^k} \quad (2.7)$$

但(2.5)并不容易解得,因此我们考虑使用交替方向法来求解这个方程,即

$$y^{k+1} = \arg \min_{y, S} L(y, S^k, X^k, \mu^k) \quad (2.8)$$

$$S^{k+1} = \arg \min_{y, S} L(y^{k+1}, S, X^k, \mu^k) \quad (2.9)$$

μ^{k+1} 和 X^{k+1} 的求法不变.

首先来求解(2.8)

$$L(y, S^k, X^k, \mu^k) = -b^\top y + \mathcal{A}(X^k)^\top y - \langle X, S^k \rangle + \frac{1}{2\mu^k} \|\mathcal{A}^*(y) - S^k\|_F^2 \quad (2.10)$$

记 $T = \mathcal{A}^*(y) - S^k$, $\mathcal{A}_{ij} = (A_{1ij}, \dots, A_{mij}) \in \mathbb{R}^m$, 考虑 $\|T\|_F^2$ 对 y 的梯度

$$\|T\|_F^2 = \sum_{i,j} \left(\left(\sum_{k=1}^m y_k A_{kij} \right) - S_{ij}^k \right)^2 = \sum_{i,j} (\mathcal{A}_{ij}^\top y - S_{ij}^k)^2$$

则

$$\begin{aligned} \frac{\partial \|T\|_F^2}{\partial y} &= \frac{\partial \sum_{i,j} (\mathcal{A}_{ij}^\top y - S_{ij}^k)^2}{\partial y} = \sum_{i,j} \frac{\partial (\mathcal{A}_{ij}^\top y - S_{ij}^k)^2}{\partial y} \\ &= 2 \sum_{i,j} (\mathcal{A}_{ij}^\top y - S_{ij}^k) \mathcal{A}_{ij} = 2 \left(\sum_{i,j} T_{ij} A_{kij} \right) = 2 \langle A_i, T \rangle \\ &= 2\mathcal{A}(\mathcal{A}^*(y) - S^k) \end{aligned} \quad (2.11)$$

由(2.11)可以给出梯度

$$\frac{\partial L(y, S^k, X^k, \mu^k)}{\partial y} = -b + \mathcal{A}(X^k) + \frac{1}{\mu^k} \mathcal{A}(\mathcal{A}^*(y) - S^k) \quad (2.12)$$

令(2.12)式等于0,可得

$$y^{k+1} = \mu^k (b - \mathcal{A}(X^k)) + \mathcal{A}(S^k) \quad (2.13)$$

再考虑(2.9).将(2.10)如下变形

$$\begin{aligned} L(y^{k+1}, S, X^k, \mu^k) &= -b^\top y^{k+1} + \mathcal{A}(X^k)^\top y^{k+1} - \langle X, S \rangle + \frac{1}{2\mu^k} \|\mathcal{A}^*(y^{k+1}) - S\|_F^2 \\ &= \frac{1}{2\mu^k} (\|S\|_F^2 - 2\langle Y, S \rangle + \|\mathcal{A}^*(y^{k+1})\|_F^2) - b^\top y^{k+1} + \mathcal{A}(X^k)^\top y^{k+1} \end{aligned} \quad (2.14)$$

其中 $Y = \mathcal{A}^*(y^{k+1}) + \mu^k X^k$.

$$\frac{\partial L(y^{k+1}, S, X^k, \mu^k)}{\partial S} = \frac{1}{2\mu^k} \left(\frac{\partial \|S\|_F^2}{\partial S} - 2 \frac{\partial \langle Y, S \rangle}{\partial S} \right) = \frac{S - Y}{\mu^k} \quad (2.15)$$

令(2.15)式等于0,则可得 $S^{k+1} = Y$, 但由约束条件 $\|S\|_2 \leq 1$, 需对 Y 进行修正, 即

$$S^{k+1} = U \text{Diag}(\min\{\sigma, 1\}) V^\top \quad (2.16)$$

其中 $Y = U \text{Diag}(\sigma) V^\top$. 根据 Y 的定义, 可以简化 X^{K+1} 的计算方法

$$X^{K+1} = \frac{\mu^k X^k + \mathcal{A}^*(y^{k+1}) - S^{k+1}}{\mu^k} = \frac{Y - S^{k+1}}{\mu^k} \quad (2.17)$$

重复进行上述迭代, 到目标精度停止, 下面给出相应算法

算法 1

- 步1 给出 $\mu^0, X^0, y^0, S^0, \epsilon, \alpha$, 设置计数器 $k = 0$;
- 步2 若 $\frac{\|X^{k+1} - X^k\|_F}{\max\{1, \|X^k\|_F\}} \leq \epsilon$, 则停止;
- 步3 计算 $y^{k+1} = \mu^k(b - \mathcal{A}(X^k)) + \mathcal{A}(S^k)$;
- 步4 计算 $Y = \mathcal{A}^*(y^{k+1}) + \mu^k X^k$, 并计算其 SVD: $Y = U \text{Diag}(\sigma) V^\top$;
- 步5 计算 $S^{k+1} = U \text{Diag}(\min\{\sigma, 1\}) V^\top$;
- 步6 计算 $X^{K+1} = \frac{Y - S^{k+1}}{\mu^k}$;
- 步7 计算 $\mu^{k+1} = \alpha \mu^k, k = k + 1$, 转步2;

3 RBR法

对于问题(1.4), 我们可以考虑把它转化为一个半定规划(SDP)问题.

一个标准的半定规划问题是

$$\begin{aligned} \min_{X \in S^n} \quad & \langle C, X \rangle \\ \text{s.t.} \quad & \mathcal{A}(X) = b, X \succ 0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

其中 $b \in \mathbb{R}^m, \mathcal{A}(X) = (\langle A_1, X \rangle, \dots, \langle A_m, X \rangle), C, A_i \in S^n, S^n$ 是全体对称矩阵.

对于一个对称正定矩阵 $X \in S^n$, 我们可以把它写成分块矩阵的形式

$$X = \begin{pmatrix} \xi & y^\top \\ y & B \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

其中 $\xi \in \mathbb{R}, y \in \mathbb{R}^{n-1}, B \in S^{n-1}$.

容易验证的, X 可以表示为以下形式

$$X = \begin{pmatrix} 1 & y^\top B^{-1} \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi - y^\top B^{-1}y & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ B^{-1}y & I \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

记 $(X/B) = \xi - y^\top B^{-1}y$,称为 X 对于 B 的Schur补.

显然的,

$$X \succeq 0 \Leftrightarrow B \succeq 0, (X/B) \geq 0 \quad (3.4)$$

约定以下记号

$$X_{\alpha,\beta} = \begin{cases} x_{\alpha\beta} & \alpha, \beta \in \mathbb{R} \\ (x_{\alpha\beta_1}, \dots, x_{\alpha\beta_n}) & \alpha \in \mathbb{R}, \beta = \{\beta_1, \dots, \beta_n\} \\ (x_{\alpha_1\beta}, \dots, x_{\alpha_m\beta})^\top & \alpha = \{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}, \beta \in \mathbb{R} \\ \begin{pmatrix} x_{\alpha_1\beta_1} & \cdots & x_{\alpha_1\beta_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{\alpha_m\beta_1} & \cdots & x_{\alpha_m\beta_n} \end{pmatrix} & \alpha = \{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}, \beta = \{\beta_1, \dots, \beta_n\} \end{cases} \quad (3.5)$$

$$i^c = \{1, \dots, n\} \setminus \{i\} = \{1, \dots, i-1, i+1, \dots, n\} \quad (3.6)$$

令 $X = \begin{pmatrix} \xi & y^\top \\ y & B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{i,i} & X_{i,i^c} \\ X_{i^c,i} & X_{i^c,i^c} \end{pmatrix}$, 等号在相差一个初等变化下成立.基于(3.4), 令 i 取遍 $\{1, \dots, n\}$, 逐行解如下的SOCP问题来解决SDP问题(3.1)

$$\begin{aligned} \min_{[\xi;y] \in \mathbb{R}^n} \quad & \bar{c}^\top \begin{pmatrix} \xi \\ y \end{pmatrix} \\ \text{s.t.} \quad & \bar{X} \begin{pmatrix} \xi \\ y \end{pmatrix} = \bar{b}, \\ & (X/B) \geq \delta \end{aligned} \quad (3.7)$$

其中

$$\bar{c} = \begin{pmatrix} C_{i,i} \\ 2C_{i^c,i} \end{pmatrix}, \quad \bar{X} = \begin{pmatrix} X^{(1)}_{i,i} & 2X^{(1)}_{i,i^c} \\ \cdots & \cdots \\ X^{(m)}_{i,i} & X^{(m)}_{i,i^c} \end{pmatrix}, \quad \bar{b} = \begin{pmatrix} b_1 - \langle X^{(1)}_{i^c,i^c}, B \rangle \\ \cdots \\ b_m - \langle X^{(m)}_{i^c,i^c}, B \rangle \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

若 X 是半正定的,即 $X \succeq 0$,取 $\delta = 0$;若 X 是正定的,即 $X \succ 0$,用大于零的数来限制Schur补,取 $\delta > 0$

这种逐行求解的方法就是RBR方法.

考虑(3.7)的Powell罚函数

$$F(X, \theta, \mu) = \bar{c}^\top \begin{pmatrix} \xi \\ y \end{pmatrix} + \frac{1}{2\mu} \|\bar{X}[\xi; y] - \bar{b} - \theta\|_2^2 \quad (3.9)$$

其中 $\theta \in \mathbb{R}^m, \mu > 0$ 是给定常数.记 $\lambda = \theta + \bar{b}$

(3.7)等价于以下问题

$$\begin{aligned} \min_X \quad & F(X, \lambda, \mu) = \bar{c}^\top \begin{pmatrix} \xi \\ y \end{pmatrix} + \frac{1}{2\mu} \|\bar{X}[\xi; y] - \lambda\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & X \succeq 0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

回头考虑(1.4).当 $X \in S^n$ 对称正定,有 $\|X\|_* = \text{tr}(X)$, (1.4)等价于下面的SDP问题

$$\begin{aligned} \min_X \quad & \text{tr}(X) = \langle E, X \rangle \\ \text{s.t.} \quad & X_{ij} = M_{ij}, \forall (i, j) \in \Omega \end{aligned} \quad (3.11)$$

当 $X \in \mathbb{R}^{p \times q}$ 不是对称正定的,可以一个更大的对称正定矩阵 W .当补全了 W ,则 X 自然被补全了(当然,当 X 是对称正定矩阵时,我们也可以这么做)

$$\begin{aligned} \min_X \quad & \text{tr}(X) \\ \text{s.t.} \quad & X = \begin{pmatrix} X_1 & W \\ W^\top & X_2 \end{pmatrix} \succ 0 \\ & W_{ij} = M_{ij}, \forall (i, j) \in \Omega \end{aligned} \quad (3.12)$$

其中 $X \in S^n, n = p + q, W_1 \in S^p, W_2 \in S^q, X, W_1, W_2 \succ \delta$.

我们主要讨论一般的情况,即问题(3.12).采用RBR法,对于某个 i ,我们把向量 y 分为两个部分,即

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}, \quad y_1 = X_{\alpha_i, i}, y_2 = X_{\beta_i, i} \quad (3.13)$$

其中 $\alpha_i = \begin{cases} \{j + p | (i, j \in \Omega)\}, i \leq p \\ \{j | (j, i - p) \in \Omega\}, p < i \leq n \end{cases}$, $\beta_i = \{1, \dots, p\} \setminus (\alpha_i \cup \{i\})$, y_1 是 X 第 i 列除去第 i 行后所有已知元素构成的列向量, y_2 是 X 第 i 列除去第 i 行后所有未知元素构成的列向量.

相应的, $B = \begin{pmatrix} X_{\alpha_i, \alpha_i} & X_{\alpha_i, \beta_i} \\ X_{\beta_i, \alpha_i} & X_{\beta_i, \beta_i} \end{pmatrix}$, $\xi = X_{i, i}$.同时,可以给出 $\bar{X} \begin{pmatrix} \xi \\ y \end{pmatrix}$, λ 和 \bar{c} 的显式表达

$$\lambda = \begin{cases} (M_{i, \alpha_i - p})^\top, & i \leq p \\ M_{\alpha_i, i - p}, & p < i \leq n \end{cases}, \quad \bar{X} \begin{pmatrix} \xi \\ y \end{pmatrix} = y_1, \bar{c} = (1, \overbrace{0, \dots, 0}^{n-1}) \quad (3.14)$$

故(3.10)化为以下形式

$$\begin{aligned} \min \quad & \xi + \frac{1}{2\mu} \|y_1 - \lambda\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & \xi - y^\top B^{-1} y \geq \delta \end{aligned} \quad (3.15)$$

容易发现, 当 $\xi = y^\top B^{-1} y + \delta$ 时, 才可能取到最小值, 则这个问题等价于

$$\min_y y^\top B^{-1} y + \frac{1}{2\mu} \|y_1 - \lambda\|_2^2 \quad (3.16)$$

显示表达为

$$\begin{pmatrix} X_{\alpha,\alpha} & X_{\alpha,\beta} \\ X_{\beta,\alpha} & X_{\beta,\beta} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2\mu} \begin{pmatrix} y_1 - \lambda \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (3.17)$$

变形可得

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2\mu} \begin{pmatrix} X_{\alpha,\alpha} \\ X_{\beta,\alpha} \end{pmatrix} (y_1 - \lambda) = 0 \quad (3.18)$$

则

$$\begin{aligned} y_1 &= (2\mu I + X_{\alpha,\alpha})^{-1} X_{\alpha,\alpha} \\ y_2 &= \frac{1}{2\mu} X_{\beta,\alpha} (y_1 - \lambda) \end{aligned} \quad (3.19)$$

那么由(3.17)和(3.19), 有

$$\xi = y^\top B^{-1} y + \delta = -\frac{1}{2\mu} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} y_1 - \lambda \\ 0 \end{pmatrix} + \delta = \frac{1}{2\mu} y_1^\top (\lambda - y_1) + \delta \quad (3.20)$$

即我们证明了, (3.15)的最优解为:

$$\begin{aligned} y_1 &= (2\mu I + X_{\alpha,\alpha})^{-1} X_{\alpha,\alpha} \tilde{b} \\ y_2 &= \frac{1}{2\mu} X_{\beta,\alpha} (\lambda - y_1) \\ \xi &= \frac{1}{2\mu} y_1^\top (\lambda - y_1) + \delta \end{aligned} \quad (3.21)$$

我们可以让 i 循环取遍 $\{1, \dots, n\}$, 逐行求解(3.15), 最终解决问题(1.4). 给出算法

算法 2

- 步1 给出 $\delta \geq 0$, $X^1 \succ 0$, $F^0 = \text{tr}(X^1)$, $F^1 = +\infty$, $\epsilon > 0$, 设置计数器 $k = 1$, $i = 1$;
- 步2 若 $\frac{|F^{k-1} - F^k|}{\max\{1, |F^{k-1}|\}} \leq \epsilon$, 则停止;
- 步3 若 $i > n$, 则令 $i = 1$, $X^{k+1} = X^k$, $k = k + 1$, $F^k = \text{tr}(X^k)$, 转步2;
- 步4 求出 i 对应的 α_i, β_i ;
- 步5 若 $|\alpha_i| = 0$, 令 $X_{\alpha,\alpha}^k = x_{\alpha,\beta}^l = X_{\beta,\alpha}^k = 0$, $X_{\beta,\beta}^k = X^k$, 否则按通常定义求出以上几个量.
- 步6 按(3.21), 计算当前最优解 ξ, y_1, y_2 , 以及 $y = [y_1, y_2]$;
- 步7 令 $X_{i,i}^k = \xi$, $X_{i,ic}^k = y$, $X_{ic,i}^k = y^\top$;
- 步7 $i = i + 1$, 转步3;

4 FPCA法

FPCA法是一种基于不动点定理的算法, 可以解决问题(1.5).

$\|X\|_* + \frac{1}{2\mu} \|\mathcal{A}(X) - b\|_2^2$ 是一个凸函数, 那么只要求梯度为0的点. 但 $\|X\|_*$ 是不可微的, 故考虑次梯度, 即要求

$$0 \in \mu \partial \|X\|_* + g(X) \quad (4.1)$$

其中 $g(X) = \mathcal{A}^*(\mathcal{A}(X) - b)$

设 $Y = X - \psi g(X)$, $\psi > 0$ 是给定常数, 则(4.1)等价于

$$0 \in \psi \mu \partial \|X\|_* + X - (X - \psi g(X)) = \psi \mu \partial \|X\|_* + X - Y \quad (4.2)$$

(4.2)恰好是 $\|X\|_* + \frac{1}{2}\|X - Y\|_F^2$ 的次梯度, 即(1.4)等价于

$$\min \psi \mu \|X\|_* + \frac{1}{2}\|X - Y\|_F^2 \quad (4.3)$$

当认为 Y 是给定的情况下, 该问题的解为 $S_{\psi\mu}(Y)$, 其中 $S_{\psi\mu}(Y)$ 是Shinkage算子, 定义如下

对 $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 做奇异值分解, $X = U \text{Diag}(\sigma) V^\top$, $r = \text{rank}(X)$, $U \in \mathbb{R}^{m \times r}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times r}$, 对 $\forall \nu > 0$, 定义向量 $\bar{\sigma} = (\bar{\sigma}_1, \dots, \bar{\sigma}_r)$, 其中 $\bar{\sigma}_i = \max\{\sigma_i - \nu, 0\}$, 那么Shinkage算子定义为 $S_\nu(X) = U \text{Diag}(\bar{\sigma}) V^\top$

不失一般性, 设 $m \leq n$, 记 $\nu = \psi\mu$, $X = U \text{Diag}(\sigma) V^\top$, $Y = U_Y \text{Diag}(\gamma) V_Y^\top$ 是 X, Y 的SVD, $\text{rank} X = r, \text{rank} Y = t$.

因为 $\partial \|X\|_* = \{UV^\top + W | U^\top W = 0, WV = 0, \|W\|_2 \leq 1\}$, 找到矩阵 $\bar{U} \in \mathbb{R}^{m \times (m-r)}$, $\bar{V} \in \mathbb{R}^{n \times (n-r)}$, 使得 $\tilde{U} = [U, \bar{U}]$, $\tilde{V} = [V, \bar{V}]$ 分别是 m, n 阶正交矩阵. 那么易验证, 当 $\bar{\sigma} \in \mathbb{R}_+^{m-r}$, $\|\sigma\|_\infty \leq 1$, 形如 $W = \bar{U}[\text{Diag}(\bar{\sigma}), 0] \bar{V}^\top$ 的矩阵 $W \in \partial \|X\|_*$.

若 $0 \in \nu \partial \|X\|_* + X - Y$, 则说明 $\exists W \in \partial \|X\|_*$ 使 $\nu(UV^\top + W) + X - Y = 0$. 那么可以看到当 $W = \bar{U}[\text{Diag}(\bar{\sigma}), 0] \bar{V}^\top$, 则要求

$$\begin{aligned} & \nu(UV^\top + W) + X - Y \\ &= (\nu UIV^\top + \bar{U}[\text{Diag}(\bar{\sigma}), 0] \bar{V}^\top + U \text{Diag}(\sigma) V^\top) - Y \\ &= \begin{pmatrix} U \\ \bar{U} \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} \nu I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \nu \text{Diag}(\bar{\sigma}) & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \text{Diag}(\sigma) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} V \\ \bar{V} \end{pmatrix}^\top - U_Y \text{Diag}(\gamma) V_Y^\top \quad (4.4) \\ &= \begin{pmatrix} U \\ \bar{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu I + \text{Diag}(\sigma) & 0 & 0 \\ 0 & \nu \text{Diag}(\bar{\sigma}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V \\ \bar{V} \end{pmatrix}^\top - U_Y \text{Diag}(\gamma) V_Y^\top = 0 \end{aligned}$$

当 $\gamma_1 \geq \dots \geq \gamma_t \geq \nu$, 那我们令 $X = S_\nu(Y)$, 则 $r = t$, $U = U_Y$, $V = V_Y$, $\sigma = (\gamma_1 - \nu, \dots, \gamma_t - \nu)$, 对于这样的 X , 取 $\bar{\sigma} = 0$ 即 $W = 0$, (4.4)成立.

当 $\gamma_1 \geq \dots \geq \gamma_k \geq \nu \geq \gamma_{k+1} \geq \dots \geq \gamma_t$, 那我们令 $X = S_\nu(Y)$, 则 $r = k$, $\sigma = (\gamma_1 - \nu, \dots, \gamma_k - \nu, 0, \dots, 0)$, 对这样的 X , 取 $\bar{\sigma} = (\gamma_{k+1}/\nu, \dots, \gamma_t/\nu, 0, \dots, 0)$, 同时令 \bar{U} 的前 $t-k$ 行依次为 U_Y 的 $k+1$ 至 t 行, \bar{V} 的前 $t-k$ 行依次为 V_Y 的 $k+1$ 至 t 行, 即 $\begin{pmatrix} U \\ \bar{U} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_Y \\ \bar{U}' \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} V \\ \bar{V} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_Y \\ \bar{V}' \end{pmatrix}$, 其中 \bar{U}' 是 \bar{U} 的后 $m-t$ 行, \bar{V}' 是 \bar{V} 的后 $n-t$ 行, 此时(4.4)也成立.

故 $S_{\psi\mu}(Y)$ 是(4.3)的解.

也就是说, 我们只需求出合适的 Y , $S_{\psi\mu}(Y)$ 就是(1.5)的解. 由 X 与 Y 的关系可以看出, 若 X^* 是(1.5)的解, 则

$$X^* = S_{\psi\mu}(X^* - \mu g(X^*)) = S_{\psi\mu}(X^* - \mu \mathcal{A}^*(\mathcal{A}(X^*) - b)) \quad (4.5)$$

即 X^* 是映射 $S_{\psi\mu} \circ h$ 的不动点, 其中 $h(X) = X - \mu g(X)$.

我们有如下的结论

$$\|S_\nu(Y_1) - S_\nu(Y_2)\|_F \leq \|Y_1 - Y_2\|_F \quad (4.6)$$

以及, 当 $\mu \in (0, 2/\lambda_{\max}(A^\top A))$, 其中 A 满足 $\mathcal{A}(X) = \text{Avec}(X)$

$$\|h(X_1) - h(X_2)\|_F \leq \|X_1 - X_2\|_F \quad (4.7)$$

那么当 $\mu \in (0, 2/\lambda_{\max}(A^\top A))$

$$\|S_{\psi\mu}(h(X_1)) - S_{\psi\mu}(h(X_2))\|_F \leq \|X_1 - X_2\|_F \quad (4.8)$$

即 $S_{\psi\mu} \circ h$ 是一个非扩张的映射, 由Brouwer不动点定理可知, 对任意 X 进行迭代, 都能收敛到某个不动点.

实际计算中, 上述迭代过程中, 每步都要求做奇异值分解, 这并不是一件容易的事. 我们认为问题(1.5)中的原矩阵 X 是一个低秩矩阵, 那么其奇异值大多都是 0, 故可以考虑只求很少的几个奇异值.

$A \in \mathbb{R}^{p \times q}$, 取整数 c, d , $1 \leq d \leq c \leq q$, (P_1, \dots, P_q) , $P_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^q P_i = 1$. 构造随机向量 (i_1, \dots, i_c) , $P(i_t = j) = P_j$, $t \in \{1, \dots, c\}$, $j \in \{1, \dots, q\}$. 再令随机矩阵

$$C = \begin{pmatrix} C^{(1)} \\ \dots \\ C^{(c)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{(i_1)}/\sqrt{cP_{i_1}} \\ \dots \\ A^{(i_c)}/\sqrt{cP_{i_c}} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{p \times c} \quad (4.9)$$

求 $C^\top C$ 的特征值分解

$$C^\top C = \sum_{i=1}^c \sigma_i^2(C) y_i y_i^\top \quad (4.10)$$

其中 $\sigma_i(C) \geq 0$, 为 C 的奇异值, 再构造矩阵

$$H = \begin{pmatrix} H^{(1)} \\ \dots \\ H^{(d)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C y_1 / \sigma_1(C) \\ \dots \\ C y_d / \sigma_d(C) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{p \times d} \quad (4.11)$$

令

$$A_d = H \text{Diag}(\sigma(C)) (A^\top H \text{Diag}(1/\sigma(C)))^\top \quad (4.12)$$

可以证明 A_d 是 A 的一个比较好的近似

$$\|A - A_d\|_\xi^2 \leq \min_{\text{rank}(D) \leq d} \|A - D\|_\xi^2 + \text{polylog}(d, 1/c) \|A\|_\xi^2 \quad (4.13)$$

其中 $\xi = 2$ 或 F , polylog 是多重对数函数. 用这种近似的方法改进的FPC算法就是FPCA法, 给出算法

算法 3

步1 给出 X^1 , $\mu^0 > 0$, $1 > \theta > 0$, $\epsilon > 0$, 设置计数器 $k = 1$;

步2 若 $\mu^k = \mu^{k-1}\theta \leq \epsilon$, 则停止;

步3 选取合适的 $\psi > 0$;

步4 计算 $Y^k = X^k - \psi \mathcal{A}^*(\mathcal{A}(X^k) - b)$;

步5 选取合适的 d , $\{P_i\}$, 按(4.9)至(4.12), 计算近似的奇异值分解 $Y_d = H \text{Diag}(\sigma(C)) (Y^\top H \text{Diag}(1/\sigma(C)))^\top$

步6 计算 $X^{k+1} = S_{\psi\mu^k}(Y_d)$;

步7 $k = k + 1$, 转步2;

5 补充知识

此部分会给出一些阅读本文必备的结论,许多结论将略过证明.

5.1 奇异值分解

$\forall X \in \mathbb{R}^{p \times q}, X = UDV^\top$, 其中 $U \in \mathbb{R}^{p \times p}, V \in \mathbb{R}^{q \times q}$ 是正交矩阵, $D = \text{Diag}(\sigma) \in \mathbb{R}^{p \times q}$ 对角线上为非负实数,其他位置为0的矩阵.

这个分解称为**奇异值分解(SVD)**, 对角矩阵 $\text{Diag}(\sigma)$ 的每个对角元素 σ_i 都是非负的, 称为矩阵的**奇异值**, 正交矩阵 U 的列向量称为矩阵的**左奇异向量**, 正交矩阵 V 的列向量称为矩阵的**右奇异向量**.

有时也认为 $X = UDV^\top$, 其中 $U \in \mathbb{R}^{p \times r}, V \in \mathbb{R}^{q \times r}$ 是列正交矩阵, $D \in \mathbb{R}^{r \times r}$ 是非负实对角矩阵, $r = \text{rank}(X)$.

5.2 罚函数

对于约束优化问题:

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f(x), \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m_e; \\ & c_i(x) \geq 0, \quad i = m_e + 1, \dots, m \end{aligned} \quad (5.1)$$

我们可以通过把约束条件平方后, 乘上一个很大的常数 μ , 再加入到目标函数上, 转化为**罚函数**:

$$P(x, \mu) = f(x) + \mu \|\bar{c}(x)\|_2^2 \quad (5.2)$$

其中 $\bar{c}(x) = (\bar{c}_1(x), \dots, \bar{c}_m(x)) \in \mathbb{R}^m$, $\bar{c}_i(x)$ 如下定义: $\bar{c}_i(x) = \begin{cases} c_i(x), & i \leq m_e \\ \max\{0, c_i(x)\}, & i > m_e \end{cases}$.

当 $\mu \rightarrow \infty$, (5.3) 和原问题(5.1)等价.

$$\min_x P(x, \mu) \quad (5.3)$$

但在实际中, μ 无法取到无穷大, 为了克服这一缺点, 可以定义**增广Lagrange函数**(以下叙述仅考虑等值约束的情况, 即 $m_e = m$):

$$P(x, \lambda, \mu) = f(x) - \lambda^\top c(x) + \frac{1}{2} \mu \|c(x)\|_2^2 \quad (5.4)$$

其中 $\lambda, c(x) \in \mathbb{R}^m$, λ, μ 给定.

(5.4) 等价于以下的**Powell罚函数**:

$$P(x, \theta, \mu) = f(x) + \frac{1}{2} \mu \|c(x) - \theta\|_2^2 \quad (5.5)$$

其中 $c(x), \theta \in \mathbb{R}^m$, (5.4) 与 (5.5) 只相差一个与 x 无关的常数 $\frac{1}{2} \mu \|\theta\|_2^2$

5.3 对偶问题

对于约束优化问题(5.1),它的Langrange函数为:

$$L(x, \mu, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^{m_e} \mu_i c_i(x) + \sum_{i=m_e+1}^m \lambda_i c_i(x) \quad (5.6)$$

定义 $g(\mu, \lambda) = \inf_x L(x, \mu, \lambda)$, 通过这个函数我们可以把(5.1)转化为它的对偶问题:

$$\begin{aligned} \max_{\mu, \lambda} \quad & g(\mu, \lambda) \\ \text{s.t.} \quad & \mu \succeq 0 \end{aligned} \quad (5.7)$$

当满足一定条件(KKT条件)时,(5.7)和(5.1)是等价的.

5.4 次梯度

$f: E \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个定义在 \mathbb{R}^n 的凸子集 E 上的实值函数,则所有满足

$$f(y) - f(x) \geq u(y - x), \forall y \in E \quad (5.8)$$

的向量 u 称为 f 在 x 点的次梯度, 所有这样的 u 构成的集合称为 f 在 x 点的次梯度集.

次梯度集通常用 $\partial f(x)$ 表示

$$\partial f(x) = \{u \in \mathbb{R}^m | f(y) - f(x) \geq u(y - x), \forall y \in E\} \quad (5.9)$$

当函数在 x 点可微, $\partial f(x) = \{f'(x)\}$;当函数在 x 点不可微, $\partial f(x)$ 是一个非空的紧凸集.

对于不可微函数或者不可微点,我们可以采用次梯度替代梯度进行分析.众所周知,一个点是最优解的必要条件是该点梯度为0.相应的,有如下结论:

定理 5.1 x^* 是(5.1)问题的最优解的一个必要条件是: $0 \in \partial f(x^*)$. 特别的,若 f 是凸函数,则是充要条件.

5.5 矩阵范数

以下默认 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $x \in \mathbb{R}^n$, $k = \max\{m, n\}$, $\lambda(A) = (\lambda_1(A), \dots, \lambda_k(A)) \in \mathbb{R}^k$ 是矩阵 A 的奇异值向量, $\lambda_i(A)$ 是矩阵 A 的第 i 个奇异值.

5.5.1 诱导-p范数

矩阵的诱导-p范数是将矩阵看作线性算子,由向量的p-范数诱导而来.

$$\|A\|_p = \sup_{\|x\|_p \leq 1} \|Ax\|_p$$

常见的有2-范数:

$$\|A\|_2 = \max_i \lambda_i(A)$$

1-范数,又称列范数:

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|$$

∞ -范数,又称行范数:

$$\|A\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$

5.5.2 F-范数

矩阵的**F-范数**定义类似于向量的2-范数:

$$\|A\|_F = \left(\sum_{i,j} a_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

定义矩阵内积 $\langle A, X \rangle = \text{tr}(A^T X)$, F-范数与矩阵内积是相容的, 可以看作内积诱导的范数, 即 $\|A\|_F = \langle A, A \rangle^{\frac{1}{2}}$.

5.5.3 Schatten-p范数

矩阵的**Schatten-p范数**是p-范数应用与矩阵奇异值向量所得的:

$$\|A\|_p = \left(\sum_i \lambda_i(A)^p \right)^{\frac{1}{p}} = \|\lambda(A)\|_p$$

矩阵的**核范数**, 又称**迹范数**, 是在 $p = 1$ 时 Schatten-p 范数:

$$\|A\|_* = \sum_i \lambda_i(X) = \text{tr}(\sqrt{AA^T}) = \|A\|_{tr}$$

特别的, 当 A 是对称正定的方阵, 则有 $A = \sqrt{AA^T}$, 即

$$\|A\|_* = \text{tr}(A)$$

核范数 $\|A\|_* = \|\lambda(A)\|_1$, 而矩阵的秩 $\text{rank}(A) = \|\lambda(A)\|_0$, 由此可以看出, 核范数与秩的关系就是1-范数与0-范数的关系, 故采用核范数来近似秩.

核范数是非光滑函数的, 次梯度集如下

$$\partial\|X\|_* = \{UV^T + W | U^T W = 0, WV = 0, \|W\|_2 \leq 1\} \quad (5.10)$$

其中 $X = UDV^T$