期末实验 ipynb 文件

彭显哲

2024-12-26

准备

debug notes

`torch` 当中将向量、矩阵、张量统称为张量，所以下文也不再特意区分；

`xxx.data` 访问张量中的数据。如果 `xxx` 是一个 Variable，`.data` 会返回其底层的 Tensor
但是，Variable 是在 PyTorch 0.4 之前版本中使用的旧术语，现在被 Tensor 替代
对于 PyTorch 0.4 及以后的版本，`.data` 已经被弃用
如果有这种需求，可以改用 `.detach()` 方法
但是 `.detach()` 有个副作用，就是会清空这个张量已经计算好的梯度
解决方式是 `x.clone().detach()` 用新建副本绕开原张量

环境

随机种子选择：34 是我读小学期间的班内学号
保持画图内嵌显示
选择支持中文的字体
解决负号'-'显示为方块的问题

```
import torch
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
torch.manual_seed(34)
print(torch.__version__)
%matplotlib inline
plt.rcParams['font.sans-serif'] = ['Microsoft YaHei']
plt.rcParams['axes.unicode_minus'] = False
plt.rcParams['figure.figsize'] = (12, 3)
plt.rcParams['figure.dpi'] = 300
```

```
2.5.1+cpu
```

数据

$n = 1024 \quad m = 512 \quad \mu = 0.01 \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n} \quad b \in \mathbb{R}^m$

```
A = torch.randn(m,n)  随机生成 m 行 n 列的矩阵
u = torch.randn(n)*(torch.rand(n)<0.1)
b = A @ u
```

`rand` 是均匀分布，`randn` 是正态分布

`(torch.rand(n)<0.1)` 作为乘子意思是随机保留 10% 的数

前后乘起来得到 `u` 就是正态分布随机保留 10%

```
n = 1024; m = 512; mu = 0.01
A = torch.randn(m,n)
u = torch.randn(n)*(torch.rand(n)<0.1)
b = A @ u
```

规定超参

回溯线搜索

α 是我们可以接受函数每次下降至少要陡到梯度的多少倍（介于 0 到 1 之间）

如果步长导致下降不够陡，不可接受，缩减步长，新步长和旧步长之比记作 β

针对标准正态分布生成的数据，初始步长 t 设为 1 在数量级上是合理的

```
alpha = 0.05; beta = 0.7; t=1
```

停机准则

`max_iter` 是最大迭代次数，达到该次数则无条件结束迭代

ε 是用新旧点二范数之差来衡量是否已足够接近收敛的指标，低过此阈值则停机

```
max_iter=800; epsilon=1e-6
```

ADMM 参数

针对标准正态分布生成的数据，罚因子 ρ 设为 1 在数量级上是合理的

Lagrange 乘子更新的步长 τ 满足 $0 < \tau < \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ 即可收敛，为方便运算和表示，取此范围内唯一整数 1

```
rho=1; tau=1
```

规定函数

特殊形式软阈值算子
具有步长和一次惩罚项实际意义

根据 **Handout 4**，既然 $\mu > 0$ 且 $h(x) = \mu \parallel x \parallel_1$ 那么

$$\mathrm{prox}_{h,t}(x) = S_{\mu}(x)$$

但这只是步长 $t = 1$ **不变**时的情况
在步长动态变化（例如精确线搜索和回溯线搜索）时，$h(x) = \parallel \mu x \parallel_1$
从 中文辅助教材（文再文等）例 8.1 进一步推论有：

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

$$x - u \in t\partial h(u)$$
$$\text{即 } x - u \in t\partial \parallel \mu x \parallel_1$$
$$\text{即 } x - u \in t\mu\partial \parallel x \parallel_1 \begin{cases} \{t\} & u > 0 \\ [-t, t] & u = 0 \\ \{-t\} & u < 0 \end{cases}$$

这里用 u 是为了和书上的 notation 一致，和实验题目中的 u 没有关系

$$\text{所以 } \left[S_{t\mu}(x)\right]_i = \begin{cases} x_i - t\mu & \text{if} \quad x_i > t\mu \\ 0 & \text{if} \quad -t\mu \le x_i \le t\mu \\ x_i + t\mu & \text{if} \quad x_i < -t\mu \end{cases}$$

$$G_t(x) = \frac{x - \mathrm{prox}_{h,t}(x - t\nabla g(x))}{t} = \frac{x - S_{t\mu}[x - t\nabla g(x)]_i^{\text{用分量表示向量}}}{t}$$

```
def S(x,t):
    return torch.sign(x) * torch.clamp(torch.abs(x) - t*mu, min=0)
def G(x,t):
    return ( x-S(x-t*x.grad,t) )/t
```

这个通过符号函数和设置下限来实现软阈值逻辑的想法**可从**中文辅助教材（文再文等）例 8.1 **找到**

`torch.sign(z)` 返回输入张量 z 中每个元素的符号

如果 z_i 是正数，返回 1；如果是负数，返回 -1；如果是 0，则返回 0

`torch.abs(z)` 返回输入张量 z 中每个元素的绝对值，这样用 `torch.abs(z) - mu` 就可以保证得到的差值肯定是个正的数值，差值是 z_i 和 μ_i 的绝对值之差的绝对值

`torch.clamp` 函数将输入张量中的元素限制在指定的范围内。在这里，它将所有小于 0 的值设置为 0，所以它是以 0 为下限的非负值

再乘以符号函数，实现了 x_i 正归正，负归负

一般形式软阈值算子

对于 $S_\lambda(\beta) = \text{argmin}_z \frac{1}{2} \parallel \beta - z \parallel_2^2 + \lambda \parallel z \parallel_1$ 有

$$[S_\lambda(\beta)]_i = \begin{cases} \beta_i - \lambda \text{ if } & \beta_i > \lambda \\ 0 \quad\quad\ \text{ if } & -\lambda \le \beta_i \le \lambda \\ \beta_i + \lambda \text{ if } & \beta_i < -\lambda \end{cases}$$

以下代码解释参考上文《特殊形式软阈值算子》

```
def SS(beta,lmbd):
    return torch.sign(beta) * torch.clamp(torch.abs(beta) - lmbd, min=0)
```

目标函数

$$\min_x \mu \parallel x \parallel_1 + \parallel Ax - b \parallel_2^2$$

`x.requires_grad_(True)` 以免求解时遭遇各种各样意想不到的「无梯度」报错

```
def g(x):  # 可微的项
    x.requires_grad_(True)
    return torch.norm(A@x-b,p=2)**2
def h(x):  # 不可微的项
    return mu*torch.norm(x, p=1)
def f(x):  # 完整的损失函数
    return g(x)+h(x)
```

余弦相似度

```
def cosine_similarity(a, b):
    dot_product = np.dot(a, b)
    norm_a = np.linalg.norm(a)
    norm_b = np.linalg.norm(b)
    return dot_product / (norm_a * norm_b)
```

画图模块

```
def draw(flist):
     # 将列表中的每个张量转换为 NumPy 数组
    flist_numpy = np.array([t.detach().numpy() for t in flist])
```

```
    # 对数组中的每个元素取自然对数
    log_flist = np.log(flist_numpy)
    plt.figure()
    plt.plot(log_flist)
    plt.xlabel('迭代次数')
    plt.ylabel('目标函数值的自然对数')
    plt.title('Log Scale 上的收敛速度')
```

求解模块

近端梯度下降

也即 **ISTA**

```
def PGD(x,max_iter=max_iter,alpha=alpha,beta=beta,eps=epsilon,t=t):
    f_all=[]
    x_all=[]
    x_all.append( x.clone().detach().numpy() )
    for i in range( int(max_iter) ):
        gg=g(x); ff=f(x)
        f_all.append(ff)
        gg.backward()

        while True:
            with torch.no_grad():
             # 这是个上下文管理器，表示在这个缩进块内不需要计算梯度
             # 更新参数不需要梯度
                x_new = x - t*G(x,t) #S(x,t)
            if g(x_new) <= (
                    gg - t * torch.sum( x.grad*G(x,t) ) + alpha*t*(
                    torch.norm( G(x,t), p=2, dim=0 )
                )**2    ):
                 # 一旦满足回溯线搜索想要的条件，就接受这个新的参数作为更新，并退出
                x_old = x.clone().detach()
                x = x_new
                break
             # 如果不满足（免于退出），就缩减步长，然后又看需不需要再缩减
            t=t*beta

        x_all.append(x.clone().detach().numpy())

        iter_norm = torch.abs(torch.norm(x) - torch.norm(x_old))
        if iter_norm < eps:
            return x, f_all, x_all

    return x, f_all, x_all
```

Nesterov 加速

也即 FISTA

将书上的 notation 改成本题使用的，中文教材 条件 (8.2.2) 可写成
（同时也是参考课件《06-近端梯度下降与加速》第 26 页的写法）

$$g(x^{+}) \geq g(v) + \nabla g(v)^{T}(x^{+} - v) + \frac{1}{2t} \parallel x^{+} - v \parallel_{2}^{2}$$

若转换成代码，其中 x^{+} 写作 x_new，v 写作 x_v， 即转换为

```
g(x_new) <= ( gg +  torch.sum( x_v.grad * (x_new - x_v) )
            + ( 1/(2*t) ) * ( torch.norm( x_new - x_v,ord=2,dim=0 ) )**2
            )
```

相应地，$x^{(x-1)}$ 写作 x_old，

$$v = x^{(x-1)} + \frac{k-2}{k+1}\left(x^{(k-1)} - x^{(k-2)}\right)$$

$$x^{(k)} = \mathrm{prox}_{t_k}(v - t_k \nabla g(v))$$

写作

```
x_v = ( x + (i-2)/(i+1)*(x-x_old) )
x_new = S(x_v-t*x_v.grad,t)
```

```
def FISTA(x,max_iter=max_iter,beta=beta,eps=epsilon,t=t):
    f_all=[]
    x_all=[]
    x_all.append( x.clone().detach().numpy() )
    x_old = x.clone().detach()
    x_old.requires_grad = True; x_old.requires_grad_(True)
    for i in range(1,int(max_iter)+1):  # 不能从 0 开始
        #  FISTA 两阶段法的第一阶段，沿前两步方向找一个新的点
        x_v = ( x + (i-2)/(i+1)*(x-x_old) )
        x_v = x_v.clone().detach().requires_grad_(True)

        gg=g(x_v); ff=f(x)
        f_all.append(ff)
        gg.backward()
        x_old.requires_grad = True; x_old.requires_grad_(True)

        while True:
            with torch.no_grad():
             # 这是个上下文管理器，表示在这个缩进块内不需要计算梯度
```

```
             # 更新参数不需要梯度
                x_new = S(x_v-t*x_v.grad,t)
            if g(x_new) <= (
                    gg + torch.sum( x_v.grad * (x_new - x_v) )
                    + ( 1/(2*t) ) * ( torch.norm( x_new - x_v,p=2,dim=0 ) )**2
                ):
                #  一旦满足回溯线搜索想要的条件，就接受这个新的参数作为更新，并退出
                x_old = x.clone().detach()
                x = x_new
                break
             # 如果不满足（免于退出），就缩减步长，然后又看需不需要再缩减
            t=t*beta

        x_all.append(x.clone().detach().numpy())

        iter_norm = torch.abs(torch.norm(x) - torch.norm(x_old))
        if iter_norm < eps:
            return x, f_all, x_all

    return x, f_all, x_all
```

交替方向乘子法

从 Stephen P. Boyd 等人的 Slides（September 2010）第 17 页得知，在 ADMM 算法迭代中，对于 $\frac{1}{2} \| Ax - b \|_2^2 + \lambda \| x \|_1$ 有

$$
\begin{aligned}
x^{(k+1)} &:= \left(A^T A + \rho I\right)^{-1}\left(A^T b + \rho z^{(k)} - y^{(k)}\right) \\
z^{(k+1)} &:= S_{\lambda/\rho}\left(x^{(k+1)} + y^{(k)}/\rho\right) \\
y^{(k+1)} &:= y^{(k)} + \rho\left(x^{k+1} - z^{(k+1)}\right)
\end{aligned}
$$

但是，这里的二次可微项系数是 $\frac{1}{2}$，我们求解问题的二次可微项系数是 1，不可直接照搬

以下从原问题出发重新推导所求问题

记 $g(x) = \| Ax - b \|_2^2 \quad h(x) = \mu \| x \|_1 \quad f(x) = g(x) + h(x)$

则原问题写作 $\min_x f(x)$

现改写为 $\min_{x,z} g(x) + h(z) \quad \text{s. t.} x - z = 0$

若 $x - z = 0$ 化为 $A_1 x + A_2 z = b$ 的标准形式，则 $\begin{cases} A_1 = 1 \\ A_2 = -1 \\ b \;\; = 0 \end{cases}$

记 Lagrange 乘子为 y　罚因子为 ρ　固定步长为 τ

对改写形式构造增广 Lagrange 函数

$$
L_\rho = g(x) + h(z) + y^T(x - z) + \frac{\rho}{2} \| x - z \|_2^2
$$

对于每次迭代

第一步

$$
\begin{aligned}
x^{(k+1)} &= \operatorname{argmin}_x L_\rho\left(x, z^{(k)}, y^{(k)}\right) \\
&= \operatorname{argmin}_x \left\{ \| Ax - b \|_2^2 + \mu \| z \|_1 + \left(y^{(k)}\right)^T\left(x - z^{(k)}\right) + \frac{\rho}{2} \| x - z^{(k)} \|_2^2 \right\}
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial x} = 2A^T(Ax - b) + y^{(k)} + \rho\left(x - z^{(k)}\right)
$$

令 $\frac{\partial L}{\partial x} = 0$ 则 $2A^T Ax - 2A^T b + y^{(k)} + \rho x - \rho z^{(k)} = 0$

$$
\begin{aligned}
&\Rightarrow \quad (2A^T A + \rho I)x - 2A^T b + y^{(k)} - \rho z^{(k)} = 0 \\
&\Rightarrow \quad (2A^T A + \rho I)x = 2A^T b + \rho z^{(k)} - y^{(k)} \\
&\Rightarrow \quad x^{(k+1)} = \left(2A^T A + \rho I\right)^{-1}\left(2A^T b + \rho z^{(k)} - y^{(k)}\right)
\end{aligned}
$$

第二步

$$
\begin{aligned}
z^{(k+1)} &= \operatorname{argmin}_z L_\rho\left(x^{(k+1)}, z, y^{(k)}\right) \\
&= \operatorname{argmin}_z \left\{ \| Ax^{(k+1)} - b \|_2^2 + \mu \| z \|_1 + \left(y^{(k)}\right)^T \left(x^{(k+1)} - z\right) + \frac{\rho}{2} \| x^{(k+1)} - z \|_2^2 \right\} \\
&= \operatorname{argmin}_z \left\{ \mu \| z \|_1 + \left(y^{(k)}\right)^T \left(x^{(k+1)} - z\right) + \frac{\rho}{2} \| x^{(k+1)} - z \|_2^2 \right\}
\end{aligned}
$$

对要找最值点的目标乘以常数 $\frac{2}{\rho}$

$$
\begin{aligned}
&= \operatorname{argmin}_z \left\{ \frac{2\mu}{\rho} \| z \|_1 + \frac{2}{\rho}\left(y^{(k)}\right)^T \left(x^{(k+1)} - z\right) + \| x^{(k+1)} - z \|_2^2 \right\} \\
&= \operatorname{argmin}_z \left\{ \frac{2\mu}{\rho} \| z \|_1 + 2\left(\frac{y^{(k)}}{\rho}\right)^T \left(x^{(k+1)} - z\right) + \| x^{(k+1)} - z \|_2^2 \right\}
\end{aligned}
$$

加上与 z 无关的项 $\| \frac{y^{(k)}}{\rho} \|_2^2$

$$
\begin{aligned}
&= \operatorname{argmin}_z \left\{ \frac{2\mu}{\rho} \| z \|_1 + \| \frac{y^{(k)}}{\rho} \|_2^2 + 2\left(\frac{y^{(k)}}{\rho}\right)^T \left(x^{(k+1)} - z\right) + \| x^{(k+1)} - z \|_2^2 \right\} \\
&= \operatorname{argmin}_z \left\{ \frac{2\mu}{\rho} \| z \|_1 + \| \frac{y^{(k)}}{\rho} + x^{(k+1)} - z \|_2^2 \right\} \\
&= \operatorname{argmin}_z \left\{ \frac{1}{2} \| z - \left(x^{(k+1)} + \frac{y^{(k)}}{\rho}\right) \|_2^2 + \frac{\mu}{\rho} \| z \|_1 \right\} \\
&= S_{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)}\left(x^{(k+1)} + \frac{y^{(k)}}{\rho}\right) \qquad \text{其中 } S_{(\cdot)}(\cdot) \text{ 表示软阈值算子}
\end{aligned}
$$

第三步

$$
y^{(k+1)} = y^{(k)} + \tau\rho\left(x^{(k+1)} - z^{(k+1)}\right)
$$

总结

$$x^{(k+1)} = \left(2A^TA + \rho I\right)^{-1}\left(2A^Tb + \rho z^{(k)} - y^{(k)}\right)$$

$$z^{(k+1)} = S_{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)}\left(x^{(k+1)} + \frac{y^{(k)}}{\rho}\right)$$

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + \tau\rho\left(x^{(k+1)} - z^{(k+1)}\right)$$

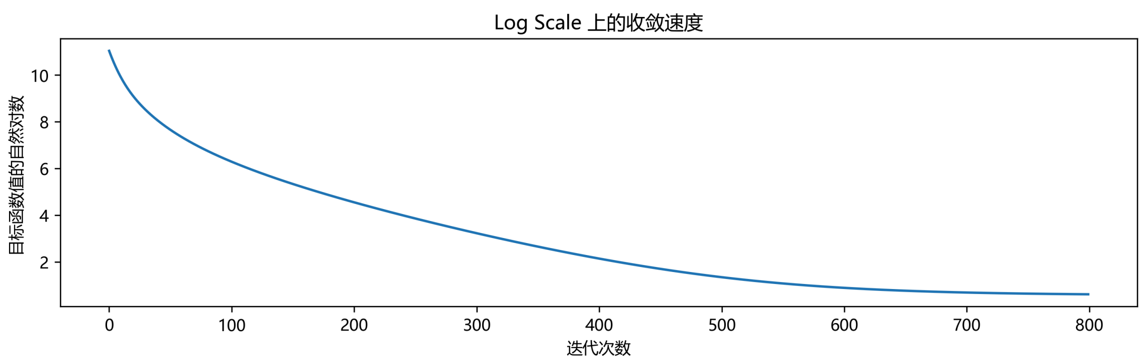
```
def ADMM(x,max_iter=max_iter,eps=epsilon,t=t,rho=rho):
    f_all=[]
    x_all=[]
    x_all.append( x.clone().detach().numpy() )
    z = x.clone().detach()
    z.requires_grad = True; z.requires_grad_(True)
    y = torch.zeros_like(x)  # 初始的 Lagrange 乘子设为零, 形状和 x 对齐
    for i in range(1,int(max_iter)+1):
        #  calculate the loss
        ff = g(x) + h(z)
        f_all.append(ff)
        x_old = x.clone().detach()
       x = torch.linalg.inv(2* A.T @ A + rho*torch.eye(n)) @ (2*A.T @ b + rho*z
-y)
        z = SS(x+y/rho,mu/rho)
        y = y + tau * rho * (x-z)
        iter_norm = torch.abs(torch.norm(x) - torch.norm(x_old))
        if iter_norm < eps:
            return x, f_all, x_all
        x_all.append(x.data.cpu().numpy())

    return x, f_all, x_all
```

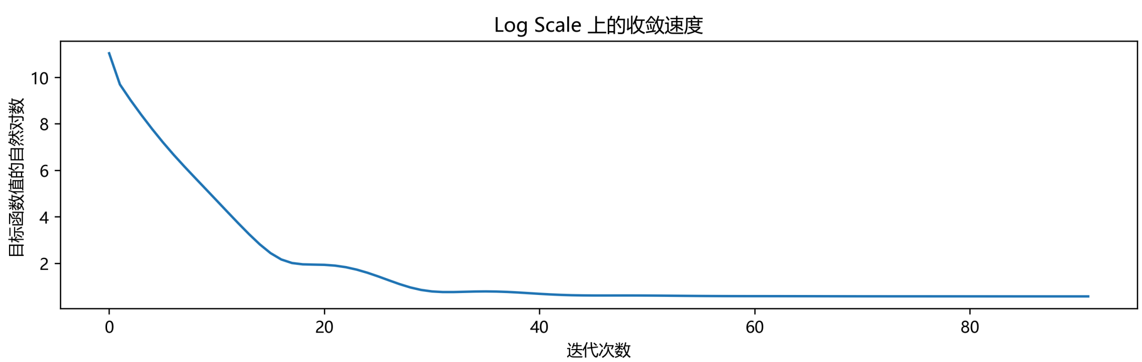
运行 & 分开画图

选分量全是零的向量作初始的 x

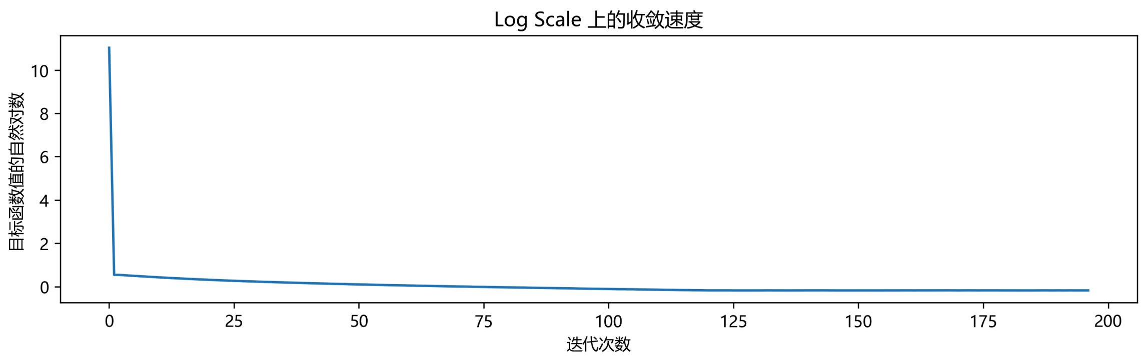
```
x=torch.zeros(n).requires_grad_(True)
x_star_PGD, f_all_PGD, x_all_PGD = PGD(x)
draw(f_all_PGD)
plt.savefig('PGD',dpi=500,bbox_inches='tight')
plt.show()
```




```
x=torch.zeros(n).requires_grad_(True)
x_star_FISTA, f_all_FISTA, x_all_FISTA = FISTA(x)
draw(f_all_FISTA)
plt.savefig('FISTA',dpi=500,bbox_inches='tight')
plt.show()
```



```
x=torch.zeros(n).requires_grad_(True)
x_star_ADMM, f_all_ADMM, x_all_ADMM = ADMM(x)
draw(f_all_ADMM)
plt.savefig('ADMM',dpi=500,bbox_inches='tight')
plt.show()
```

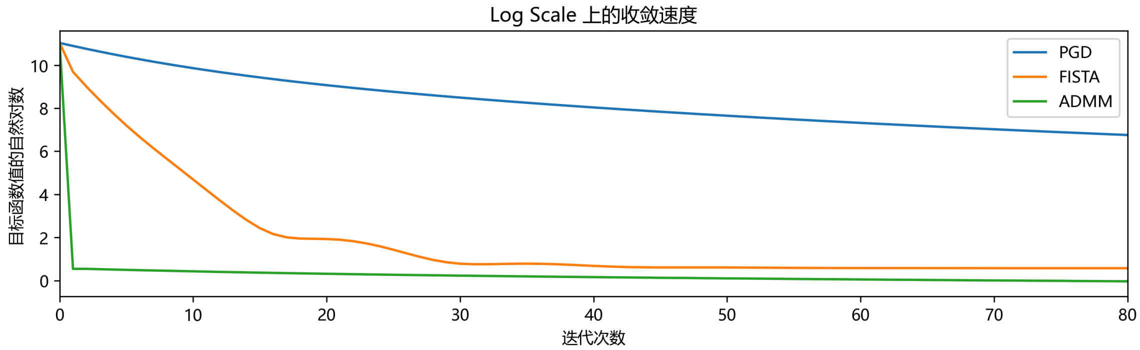


合并画图

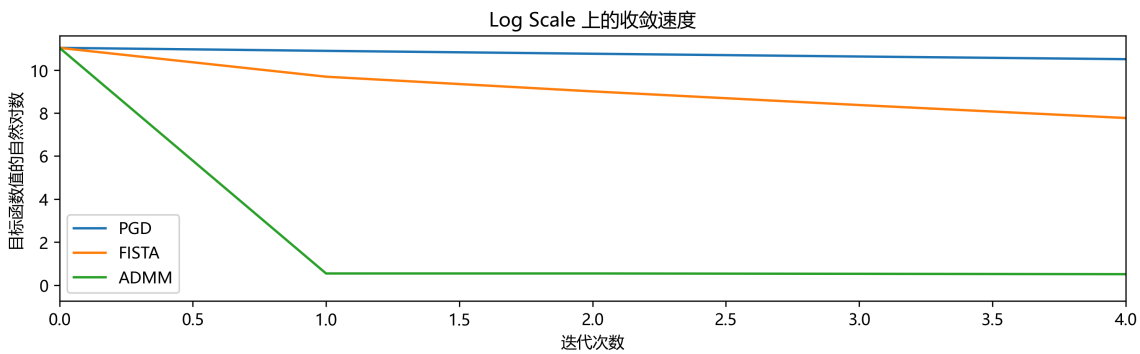
```
def trans(flist):
    # 将列表中的每个张量转换为 NumPy 数组
    flist_numpy = np.array([t.detach().numpy() for t in flist])
    # 对数组中的每个元素取自然对数
    log_flist = np.log(flist_numpy)
    return log_flist

def alldraw(num):
    plt.figure()
    plt.xlim(0, num)
    plt.plot(trans(f_all_PGD), label='PGD')
    plt.plot(trans(f_all_FISTA), label='FISTA')
    plt.plot(trans(f_all_ADMM), label='ADMM')
    plt.xlabel('迭代次数')
    plt.ylabel('目标函数值的自然对数')
    plt.title('Log Scale 上的收敛速度')
    plt.legend()
```

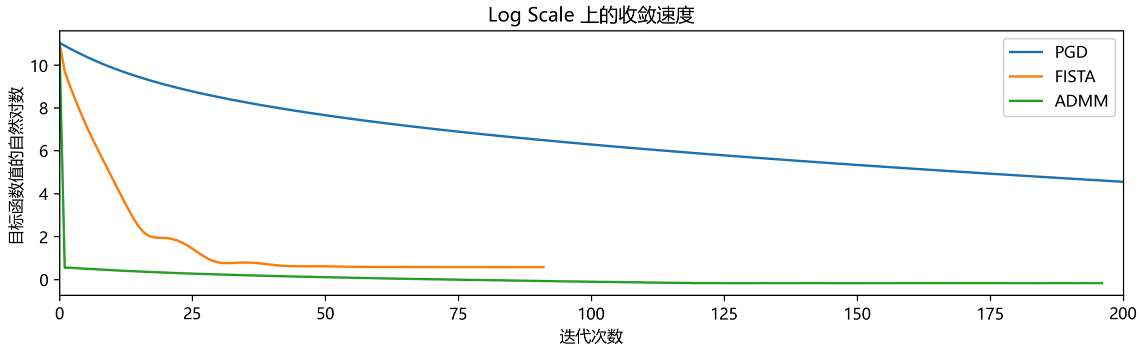
```
alldraw(80)
plt.savefig('80',dpi=500,bbox_inches='tight')
plt.show()
```



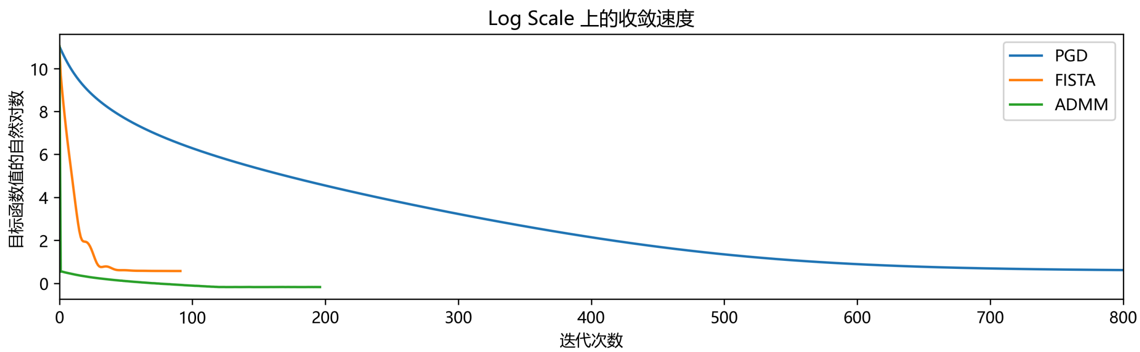

```
alldraw(4)
plt.savefig('4',dpi=500,bbox_inches='tight')
plt.show()
```



```
alldraw(200)
plt.savefig('200',dpi=500,bbox_inches='tight')
plt.show()
```




```
alldraw(800)
plt.savefig('800',dpi=500,bbox_inches='tight')
plt.show()
```



检查找到的自变量有多优

用 CVXPY 的结果比较

找到 CVXPY 结果

```
import cvxpy as cp
# 将数据转换为 NumPy 数组, 因为 CVXPY 使用 NumPy
A_np = A.numpy(); b_np = b.numpy()
x = cp.Variable(n) # 定义变量
# 定义目标函数
obj = cp.Minimize(
    cp.norm(A_np@x - b_np, 2)**2 + mu*cp.norm(x, 1)
    )
problem = cp.Problem(obj) # 定义问题
problem.solve() # 解决问题
print("最终找到的 x\n", x.value)
print("最终向下找到的目标函数自然对数值", np.log(problem.value))
```

```
最终找到的 x
 [-2.03295226e-10 -2.35416950e-10  5.29574432e-10 ...  7.08918339e-10
  8.83934837e-11 -4.95711989e-11]
最终向下找到的目标函数自然对数值 -0.19062034860889124
```

比较找到的 x 的方向和位置

用余弦相似度比较方向，用欧几里得距离比较位置

ISTA 和 CVXPY

```
x_star_PGD = x_star_PGD.cpu()
similarity = cosine_similarity(x.value, x_star_PGD.detach().numpy())
print("余弦相似度:", similarity)
distance = np.linalg.norm(x.value - x_star_PGD.detach().numpy())
print("欧几里得距离:", distance)
```

```
余弦相似度: 0.6960036213820899
欧几里得距离: 8.263830775789481
```

FISTA 和 CVXPY

```
x_star_FISTA = x_star_FISTA.cpu()
similarity = cosine_similarity(x.value, x_star_FISTA.detach().numpy())
print("余弦相似度:", similarity)
distance = np.linalg.norm(x.value - x_star_FISTA.detach().numpy())
print("欧几里得距离:", distance)
```

```
余弦相似度: 0.6981356313569587
欧几里得距离: 8.240015587019371
```

ADMM 和 CVXPY

```
x_star_ADMM = x_star_ADMM.cpu()
similarity = cosine_similarity(x.value, x_star_ADMM.detach().numpy())
print("余弦相似度:", similarity)
distance = np.linalg.norm(x.value - x_star_ADMM.detach().numpy())
print("欧几里得距离:", distance)
```

```
余弦相似度: 0.9999999198404822
欧几里得距离: 0.005486678363559426
```