交替方向乘子法(ADMM)

Outline

典型问题形式

考虑如下凸问题：

$$\begin{aligned} \min_{x_1,x_2} \quad & f_1(x_1)+f_2(x_2), \\ \text{s.t.} \quad & A_1x_1+A_2x_2=b, \end{aligned} \tag{1}$$

- f_1, f_2是适当的闭凸函数，但不要求是光滑的，$x_1 \in \mathbb{R}^n, x_2 \in \mathbb{R}^m$, $A_1 \in \mathbb{R}^{p\times n}, A_2 \in \mathbb{R}^{p\times m}$, $b \in \mathbb{R}^p$.
- 问题特点：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．常见的一些无约束和带约束的优化问题都可以表示成这一形式。

问题形式举例

- 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

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

- 带线性变换的无约束优化问题

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

可以引入一个新的变量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

- 凸集$C \subset \mathbb{R}^n$上的约束优化问题

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

$I_C(z)$是集合C的示性函数，引入约束$z = Ax$，那么问题转化为

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

- 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(1)的增广拉格朗日函数

$$
\begin{aligned}
L_\rho(x_1,x_2,y) = & f_1(x_1)+f_2(x_2)+y^{\mathrm{T}}(A_1x_1+A_2x_2-b) \\
& +\frac{\rho}{2}\|A_1x_1+A_2x_2-b\|_2^2,
\end{aligned} \tag{2}
$$

其中$\rho>0$是二次罚项的系数.

- 常见的求解带约束问题的增广拉格朗日函数法为如下更新:

$$
(x_1^{k+1},x_2^{k+1}) = \operatorname*{argmin}_{x_1,x_2} L_\rho(x_1,x_2,y^k), \tag{3}
$$

$$
y^{k+1} = y^k+\tau\rho(A_1x_1^{k+1}+A_2x_2^{k+1}-b), \tag{4}
$$

其中τ为步长.

Alternating direction method of multipliers, ADMM

- 交替方向乘子法的基本思路：第一步迭代(3)同时对x_1和x_2进行优化有时候比较困难，而固定一个变量求解关于另一个变量的极小问题可能比较简单，因此我们可以考虑对x_1和x_2交替求极小
- 其迭代格式可以总结如下：

$$x_1^{k+1} = \operatorname*{argmin}_{x_1} L_\rho(x_1, x_2^k, y^k), \tag{5}$$

$$x_2^{k+1} = \operatorname*{argmin}_{x_2} L_\rho(x_1^{k+1}, x_2, y^k), \tag{6}$$

$$y^{k+1} = y^k + \tau\rho(A_1 x_1^{k+1} + A_2 x_2^{k+1} - b), \tag{7}$$

其中τ 为步长，通常取值于$\left(0, \frac{1+\sqrt{5}}{2}\right]$

原问题最优性条件

- 因为f_1,f_2均为闭凸函数，约束为线性约束，可以使用凸优化问题的KKT 条件来作为交替方向乘子法的收敛准则．问题(1)的拉格朗日函数为

$$L(x_1,x_2,y)=f_1(x_1)+f_2(x_2)+y^{\mathrm{T}}(A_1x_1+A_2x_2-b).$$

- 根据最优性条件定理，若x_1^*,x_2^*为问题(1)的最优解，y^*为对应的拉格朗日乘子，则以下条件满足：

$$0\in\partial_{x_1}L(x_1^*,x_2^*,y^*)=\partial f_1(x_1^*)+A_1^{\mathrm{T}}y^*, \tag{8a}$$

$$0\in\partial_{x_2}L(x_1^*,x_2^*,y^*)=\partial f_2(x_2^*)+A_2^{\mathrm{T}}y^*, \tag{8b}$$

$$A_1x_1^*+A_2x_2^*=b. \tag{8c}$$

  在这里条件(8c)又称为原始可行性条件，条件(8a)和条件(8b)又称为对偶可行性条件．

ADMM单步迭代最优性条件

- 由x_2的更新步骤

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

根据最优性条件不难推出

$$0 \in \partial f_2(x_2^k) + A_2^{\mathrm{T}}[y^{k-1} + \rho(A_1 x_1^k + A_2 x_2^k - b)]. \tag{9}$$

当$\tau = 1$时，根据(7)可知上式方括号中的表达式就是y^k，最终有

$$0 \in \partial f_2(x_2^k) + A_2^{\mathrm{T}} y^k,$$

- 由x_1的更新公式

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

假设子问题能精确求解，根据最优性条件

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

ADMM单步迭代最优性条件

- 根据ADMM 的第三式(7)取$\tau = 1$有

$$0 \in \partial f_1(x_1^k) + A_1^{\mathrm{T}}(y^k + A_2(x_2^{k-1} - x_2^k)). \tag{10}$$

对比条件(8a)可知多出来的项为$A_1^{\mathrm{T}}A_2(x_2^{k-1} - x_2^k)$。因此要检测对偶可行性只需要检测残差

$$s^k = A_1^{\mathrm{T}}A_2(x_2^{k-1} - x_2^k)$$

- 综上当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前述两个残差r^k, s^k是否充分小：

$$\begin{aligned} 0 &\approx \|r^k\| = \|A_1x_1^k + A_2x_2^k - b\| \quad &\text{（原始可行性）}, \\ 0 &\approx \|s^k\| = \|A_1^{\mathrm{T}}A_2(x_2^{k-1} - x_2^k)\| \quad &\text{（对偶可行性）}. \end{aligned} \tag{11}$$

Outline

线性化

- 线性化技巧使用近似点项对子问题目标函数进行二次近似.
- 不失一般性，我们考虑第一个子问题，即

$$\min_{x_1} \quad f_1(x_1) + \frac{\rho}{2}\|A_1x_1 - v^k\|^2, \tag{12}$$

其中$v^k = b - A_2x_2^k - \frac{1}{\rho}y^k$.

- 当子问题目标函数可微时，线性化将问题(12)变为

$$x_1^{k+1} = \mathop{\mathrm{argmin}}_{x_1} \left\{ \left(\nabla f_1(x_1^k) + \rho A_1^{\mathrm{T}} \left(A_1x_1^k - v^k\right)\right)^{\mathrm{T}} x_1 + \frac{1}{2\eta_k}\|x_1 - x^k\|_2^2 \right\},$$

其中η_k是步长参数，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，即

$$x_1^{k+1} = \mathop{\mathrm{argmin}}_{x_1} \left\{ f(x_1) + \rho \left(A_1^{\mathrm{T}}(A_1x_1^k - v^k)\right)^{\mathrm{T}} x_1 + \frac{1}{2\eta_k}\|x_1 - x^k\|_2^2 \right\},$$

这等价于做一步近似点梯度步.

缓存分解

- 如果目标函数中含二次函数，例如$f_1(x_1)=\frac{1}{2}\|Cx_1-d\|_2^2$，那么针对$x_1$的更新(12)等价于求解线性方程组

$$(C^\mathrm{T}C+\rho A_1^\mathrm{T}A_1)x_1=C^\mathrm{T}d+\rho A_1^\mathrm{T}v^k.$$

- 虽然子问题有显式解，但是每步求解的复杂度仍然比较高，这时候可以考虑用**缓存分解**的方法．首先对$C^\mathrm{T}C+\rho A_1^\mathrm{T}A_1$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ρ发生更新时，就要重新进行分解．特别地，当$C^\mathrm{T}C+\rho A_1^\mathrm{T}A_1$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

- 有时候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$A_1^\mathrm{T}A_1$，此时子问题(12)替换为

$$
\begin{aligned}
x_1^{k+1} = & \mathop{\mathrm{argmin}}_{x_1} \left\{ f_1(x_1) + \frac{\rho}{2}\|A_1x_1 - v^k\|_2^2 \right. \\
& \left. + \frac{\rho}{2}(x_1 - x^k)^\mathrm{T}(D - A_1^\mathrm{T}A_1)(x_1 - x^k) \right\}.
\end{aligned}
$$

这种方法也称为**优化转移**.

- 通过选取合适的D，当计算$\mathop{\mathrm{argmin}}_{x_1} \left\{ f_1(x_1) + \frac{\rho}{2}x_1^\mathrm{T}Dx_1 \right\}$明显比计算$\mathop{\mathrm{argmin}}_{x_1}\{f_1(x_1) + \frac{\rho}{2}x_1^\mathrm{T}A_1^\mathrm{T}A_1x_1\}$要容易时，优化转移可以极大地简化子问题的计算．特别地，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

- 原始可行性和对偶可行性分别用$\|r^k\|$和$\|s^k\|$度量.
- 求解过程中二次罚项系数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；二次罚项系数太小，则会有相反的效果．这样都会导致收敛比较慢或得到的解的可行性很差．
- 一个自然的想法是在每次迭代时动态调节惩罚系数ρ的大小，从而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零．一个简单有效的方式是令

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

其中$\mu > 1, \gamma_p > 1, \gamma_d > 1$是参数．常见的选择为$\mu = 10, \gamma_p = \gamma_d = 2$．在迭代过程中将原始可行性$\|r^k\|$和对偶可行性$\|s^k\|$保持在彼此的$\mu$倍内．如果发现$\|r^k\|$或$\|s^k\|$下降过慢就应该相应增大或减小二次罚项系数$\rho^k$．

超松弛

- 在(6)式与(7)式中，$A_1x_1^{k+1}$可以被替换为
$$\alpha_k A_1 x_1^{k+1} + (1-\alpha_k)(A_2x_2^k - b),$$
其中$\alpha_k \in (0,2)$是一个松弛参数.
- 当$\alpha_k > 1$时，这种技巧称为超松弛；当$\alpha_k < 1$时，这种技巧称为欠松弛. 实验表明$\alpha_k \in [1.5, 1.8]$的超松弛可以提高收敛速度.

多块问题的ADMM

- 考虑有多块变量的情形

$$\begin{aligned} \min_{x_1,x_2,\cdots,x_N} \quad & f_1(x_1)+f_2(x_2)+\cdots+f_N(x_N), \\ \text{s.t.} \quad & A_1x_1+A_2x_2+\cdots+A_Nx_N=b. \end{aligned} \tag{13}$$

这里$f_i(x_i)$是闭凸函数，$x_i \in \mathbb{R}^{n_i}, A_i \in \mathbb{R}^{m\times n_i}$.

- 同样写出增广拉格朗日函数$L_\rho(x_1,x_2,\cdots,x_N,y)$，相应的多块ADMM 迭代格式为

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

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

Outline

LASSO 问题的Primal 形式

- 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

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

LASSO 问题的Primal 形式

- 注意，因为$\rho > 0$，所以$A^\mathrm{T}A + \rho I$总是可逆的．x迭代本质上是计算一个岭回归问题（ℓ_2范数平方正则化的最小二乘问题）；而对z的更新为ℓ_1范数的邻近算子，同样有显式解．在求解x迭代时，若使用固定的罚因子ρ，我们可以缓存矩阵$A^\mathrm{T}A + \rho I$的初始分解，从而减小后续迭代中的计算量．

- 需要注意的是，在LASSO 问题中，矩阵$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$通常有较多的列（即$m \ll n$），因此$A^\mathrm{T}A \in \mathbb{R}^{n\times n}$是一个低秩矩阵，二次罚项的作用就是将$A^\mathrm{T}A$增加了一个正定项．该ADMM 主要运算量来自更新$x$变量时求解线性方程组，复杂度为$O(n^3)$（若使用缓存分解技术或SMW 公式则可进一步降低每次迭代的运算量）

LASSO 问题的对偶形式

- 考虑LASSO 问题的对偶问题

$$\begin{aligned} \min \quad & b^{\mathrm{T}} y + \tfrac{1}{2}\|y\|^2, \\ \text{s.t.} \quad & \|A^{\mathrm{T}} y\|_\infty \le \mu. \end{aligned} \tag{14}$$

- 引入约束$A^{\mathrm{T}}y + z = 0$，可以得到如下等价问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & \underbrace{b^{\mathrm{T}} y + \frac{1}{2}\|y\|^2}_{f(y)} + \underbrace{I_{\|z\|_\infty \le \mu}(z)}_{h(z)}, \\ \text{s.t.} \quad & A^{\mathrm{T}} y + z = 0. \end{aligned} \tag{15}$$

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

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

LASSO 问题的对偶形式

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

$$(I + \rho A A^{\mathrm{T}}) y = A(x^k - \rho z^{k+1}) - b.$$

- 因此得到ADMM 迭代格式为

$$\begin{aligned}
z^{k+1} &= \mathcal{P}_{\|z\|_\infty \le \mu}\left(\frac{x^k}{\rho} - A^{\mathrm{T}} y^k \right), \\
y^{k+1} &= (I + \rho A A^{\mathrm{T}})^{-1} \left(A(x^k - \rho z^{k+1}) - b \right), \\
x^{k+1} &= x^k - \tau \rho (A^{\mathrm{T}} y^{k+1} + z^{k+1}).
\end{aligned}$$

- 虽然ADMM 应用于对偶问题也需要求解一个线性方程组，但由于LASSO 问题的特殊性（$m \ll n$），求解y更新的线性方程组需要的计算量是$O(m^3)$，使用缓存分解技巧后可进一步降低至$O(m^2)$，这大大小于针对原始问题的ADMM．

广义LASSO 问题

- 对许多问题x 本身不稀疏，但在某种变换下是稀疏的:

$$\min_x \quad \mu\|Fx\|_1 + \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2. \tag{16}$$

- 一个重要的例子是当$F \in \mathbb{R}^{(n-1)\times n}$ 是一阶差分矩阵

$$F_{ij} = \begin{cases} 1, & j = i+1, \\ -1, & j = i, \\ 0, & \text{其他}, \end{cases}$$

且$A = I$时，广义LASSO问题为

$$\min_x \quad \frac{1}{2}\|x - b\|^2 + \mu \sum_{i=1}^{n-1} |x_{i+1} - x_i|,$$

这个问题就是图像去噪问题的TV 模型；当$A = I$且F是二阶差分矩阵时，问题(16)被称为一范数趋势滤波.

广义LASSO问题

- 通过引入约束$Fx = z$:

$$\begin{aligned} \min_{x,z} \quad & \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2 + \mu\|z\|_1, \\ \text{s.t.} \quad & Fx - z = 0, \end{aligned} \tag{17}$$

- 引入乘子y，其增广拉格朗日函数为

$$L_\rho(x,z,y) = \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2 + \mu\|z\|_1 + y^{\mathrm{T}}(Fx-z) + \frac{\rho}{2}\|Fx-z\|^2.$$

- 此问题的x迭代是求解方程组

$$(A^{\mathrm{T}}A + \rho F^{\mathrm{T}}F)x = A^{\mathrm{T}}b + \rho F^{\mathrm{T}}\left(z^k - \frac{y^k}{\rho}\right),$$

而z迭代依然通过ℓ_1范数的邻近算子.

- 因此交替方向乘子法所产生的迭代为

$$
\begin{aligned}
x^{k+1} &= (A^{\mathrm{T}}A + \rho F^{\mathrm{T}}F)^{-1}\left(A^{\mathrm{T}}b + \rho F^{\mathrm{T}}\left(z^k - \frac{y^k}{\rho}\right)\right), \\
z^{k+1} &= \operatorname{prox}_{(\mu/\rho)\|\cdot\|_1}\left(Fx^{k+1} + \frac{y^k}{\rho}\right), \\
y^{k+1} &= y^k + \tau\rho(Fx^{k+1} - z^{k+1}).
\end{aligned}
$$

- 对于全变差去噪问题，$A^{\mathrm{T}}A + \rho F^{\mathrm{T}}F$是三对角矩阵，所以此时$x$迭代可以在$\mathcal{O}(n)$的时间复杂度内解决；对于图像去模糊问题，$A$是卷积算子，则利用傅里叶变换可将求解方程组的复杂度降低至$O(n\log n)$；对于一范数趋势滤波问题，$A^{\mathrm{T}}A + \rho F^{\mathrm{T}}F$是五对角矩阵，所以$x$迭代仍可以在$\mathcal{O}(n)$的时间复杂度内解决

稀疏逆协方差矩阵估计

- 该问题的基本形式是

$$\min_X \quad \langle S, X\rangle - \ln\det X + \mu\|X\|_1, \tag{18}$$

其中S是已知的对称矩阵，通常由样本协方差矩阵得到． 变量$X \in \mathcal{S}^n_{++}$，$\|\cdot\|_1$定义为矩阵所有元素绝对值的和．

- 目标函数由光滑项和非光滑项组成，因此引入约束$X = Z$将问题的两部分分离：

$$\begin{aligned} \min \quad & \underbrace{\langle S, X\rangle - \ln\det X}_{f(X)} + \underbrace{\mu\|Z\|_1}_{h(Z)}, \\ \text{s.t.} \quad & X = Z. \end{aligned}$$

引入乘子U作用在约束$X - Z = 0$上，可得增广拉格朗日函数为

$$L_\rho(X, Z, U) = \langle S, X\rangle - \ln\det X + \mu\|Z\|_1 + \langle U, X - Z\rangle + \frac{\rho}{2}\|X - Z\|_F^2.$$

稀疏逆协方差矩阵估计

- 首先，固定Z^k, U^k，则X子问题是凸光滑问题，对X求矩阵导数并令其为零，
  $$S - X^{-1} + U^k + \rho(X - Z^k) = 0.$$
  这是一个关于X的矩阵方程，可以求出满足上述矩阵方程的唯一正定的X为
  $$X^{k+1} = Q\mathrm{Diag}(x_1, x_2, \cdots, x_n)Q^{\mathrm{T}},$$
  其中Q包含矩阵$S - \rho Z^k + U^k$的所有特征向量，x_i的表达式为
  $$x_i = \frac{-d_i + \sqrt{d_i^2 + 4\rho}}{2\rho},$$
  d_i为矩阵$S - \rho Z^k + U^k$的第i个特征值.
- 固定X^{k+1}, U^k，则Z的更新为矩阵ℓ_1 范数的邻近算子.
- 最后是常规的乘子更新.

矩阵分离问题

- 考虑矩阵分离问题：

$$\begin{aligned} \min_{X,S} \quad & \|X\|_* + \mu\|S\|_1, \\ \text{s.t.} \quad & X + S = M, \end{aligned} \tag{19}$$

  其中$\|\cdot\|_1$与$\|\cdot\|_*$分别表示矩阵ℓ_1范数与核范数.

- 引入乘子Y作用在约束$X+S=M$上，我们可以得到此问题的增广拉格朗日函数

$$L_\rho(X,S,Y) = \|X\|_* + \mu\|S\|_1 + \langle Y, X+S-M\rangle + \frac{\rho}{2}\|X+S-M\|_F^2. \tag{20}$$

- 对于X子问题，

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

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$U\mathrm{Diag}(\sigma(A))V^{\mathrm{T}}$为$A$的约化奇异值分解．

矩阵分离问题

- 对于S子问题，

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

- 那么交替方向乘子法的迭代格式为

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

Image blurring model

$$b = Kx_t + w$$

- x_t is unknown image
- b is observed (blurred and noisy) image; w is noise
- $N \times N$-images are stored in column-major order as vectors of length N^2

blurring matrix K

- represents 2D convolution with space-invariant point spread function
- with periodic boundary conditions, block-circulant with circulant blocks
- can be diagonalized by multiplication with unitary 2D DFT matrix W:

$$K = W^H \mathbf{diag}(\lambda) W$$

  equations with coefficient $I + K^T K$ can be solved in $O(N^2 \log N)$ time

Total variation deblurring with 1-norm

$$\begin{array}{ll} \min & \|Kx - b\|_1 + \gamma \|Dx\|_{tv} \\ \text{s.t.} & 0 \leq x \leq 1 \end{array}$$

second term in objective is **total variation penalty**

- Dx is discretized first derivative in vertical and horizontal direction

$$\left(\begin{array}{c} I \otimes D_1 \\ D_1 \otimes I \end{array} \right), \qquad \left(\begin{array}{ccccccc} -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -1 \end{array} \right)$$

- $\| \cdot \|_{tv}$ is a sum of Euclidean norms: $\|(u, v)\|_{tv} = \sum_{i=1}^{n} \sqrt{u_i^2 + v_i^2}$

Image blurring model by ADMM

Consider an equivalent model by splitting:

$$\min \ \|u\|_1 + \gamma\|v\|_{tv}, \ \text{ s.t. } u = Kx - b, \ v = Dx, y = x, 0 \le y \le 1$$

ADMM requires:

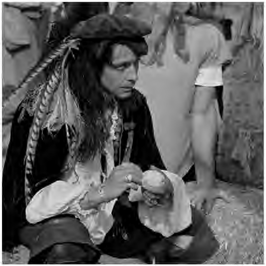
- decoupled prox-evaluations of $\|u\|_1$ and $\|v\|_{tv}$, and projections on C
- solution of linear equations with coefficient matrix

$$I + K^T K + D^T D$$

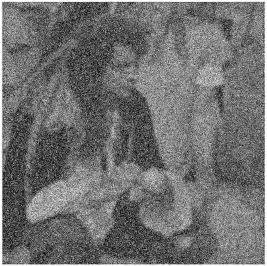
solvable in $O(N^2 \log N)$ time

Image blurring: Example

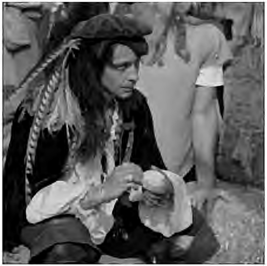
- 1024 $\times$ 1024 image, periodic boundary conditions
- Gaussian blur
- salt-and-pepper noise (50% pixels randomly changed to 0/1)



original



noisy/blurred



restored

全局一致性优化问题

- 增广拉格朗日函数为

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

- 固定z^k, y_i^k，更新x_i的公式为

$$x_i^{k+1}=\operatorname*{argmin}_x \left\{\phi_i(x)+\frac{\rho}{2}\left\|x-z^k+\frac{y_i^k}{\rho}\right\|^2\right\}. \tag{21}$$

- 注意，虽然表面上看增广拉格朗日函数有（$N+1$）个变量块，但本质上还是两个变量块. 这是因为在更新某x_i时并没有利用其他x_i的信息，所有x_i可以看成一个整体. 相应地，所有乘子y_i也可以看成一个整体.

- 迭代式(21)的具体计算依赖于ϕ_i的形式，在一般情况下更新x_i的表达式为

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

全局一致性优化问题

- 固定x_i^{k+1}, y_i^k，问题关于z是二次函数，因此可以直接写出显式解：

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

- 综上，该问题的交替方向乘子法迭代格式为

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

非凸约束问题

一般来说，这种投影很难计算，但是在下面列出的这些特殊情形中可以精确求解。

- 基数：如果$\mathcal{S}=\{\boldsymbol{x}|\boldsymbol{card}(\boldsymbol{x})\le c\}$，其中$\boldsymbol{card}(\boldsymbol{v})$表示非零元素的数目，那么$\Pi_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{v})$保持前$c$大的元素不变，其他元素变为0。
  例如回归选择（也叫特征选择）问题：

$$
\begin{aligned}
\min_{\boldsymbol{x}} \quad & \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2^2,\\
s.t. \quad & \boldsymbol{card}(\boldsymbol{x})\le c.
\end{aligned}
$$

- 秩：如果$\mathcal{S}$是秩为c的矩阵的集合，那么$\boldsymbol{card}(\boldsymbol{V})$可以通过对$\boldsymbol{V}$做奇异值分解，$\boldsymbol{V}=\sum_i \sigma_i \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^T$，然后保留前$c$大的奇异值及奇异向量，即$\Pi_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{V})=\sum_{i=1}^{c}\sigma_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^T$。
- 布尔约束：如果$\mathcal{S}=\{\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_i\in\{0,1\}\}$，那么$\Pi_{\mathcal{S}}(\boldsymbol{v})$就是简单地把每个元素变为0和1中离它更近的数。

非负矩阵分解和补全

非负矩阵分解和补全问题可以写成如下形式：

$$\begin{aligned} \min_{X,Y} \quad & \|\mathcal{P}_\Omega(XY - M)\|_F^2, \\ s.t. \quad & X_{ij} \geq 0, Y_{ij} \geq 0, \forall i,j, \end{aligned}$$

其中，Ω表示矩阵M中的已知元素的下标集合，$\mathcal{P}_\Omega(A)$表示得到一个新的矩阵A'，其下标在集合Ω中的所对应的元素等于矩阵A的对应元素，其下标不在集合Ω中的所对应的元素为0。注意到，这个问题是非凸的。

为了利用交替方向乘子法的优势，我们考虑如下的等价形式：

$$\begin{aligned} \min_{U,V,X,Y,Z} \quad & \frac{1}{2}\|XY - Z\|_F^2, \\ s.t. \quad & X = U, Y = V, \\ & U \geq 0, V \geq 0, \\ & \mathcal{P}_\Omega(Z - M) = 0. \end{aligned}$$

$$L_{\alpha,\beta}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y},\boldsymbol{Z},\boldsymbol{U},\boldsymbol{V},\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\Pi}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{Z}\|_F^2 + \boldsymbol{\Lambda}\bullet(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{U}) + \boldsymbol{\Pi}\bullet(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{V}) + \frac{\alpha}{2}\|\boldsymbol{X}-\boldsymbol{U}\|_F^2 + \frac{\beta}{2}\|\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{V}\|_F^2,$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{X}^{k+1} &= \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{X}} \; L_{\alpha,\beta}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}^k,\boldsymbol{Z}^k,\boldsymbol{U}^k,\boldsymbol{V}^k,\boldsymbol{\Lambda}^k,\boldsymbol{\Pi}^k),\\
\boldsymbol{Y}^{k+1} &= \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{Y}} \; L_{\alpha,\beta}(\boldsymbol{X}^{k+1},\boldsymbol{Y},\boldsymbol{Z}^k,\boldsymbol{U}^k,\boldsymbol{V}^k,\boldsymbol{\Lambda}^k,\boldsymbol{\Pi}^k),\\
\boldsymbol{Z}^{k+1} &= \operatorname*{argmin}_{\mathcal{P}_\Omega(\boldsymbol{Z}-\boldsymbol{M})=0} \; L_{\alpha,\beta}(\boldsymbol{X}^{k+1},\boldsymbol{Y}^{k+1},\boldsymbol{Z},\boldsymbol{U}^k,\boldsymbol{V}^k,\boldsymbol{\Lambda}^k,\boldsymbol{\Pi}^k),\\
\boldsymbol{U}^{k+1} &= \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{U}\geq 0} \; L_{\alpha,\beta}(\boldsymbol{X}^{k+1},\boldsymbol{Y}^{k+1},\boldsymbol{Z}^{k+1},\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}^k,\boldsymbol{\Lambda}^k,\boldsymbol{\Pi}^k),\\
\boldsymbol{V}^{k+1} &= \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{V}\geq 0} \; L_{\alpha,\beta}(\boldsymbol{X}^{k+1},\boldsymbol{Y}^{k+1},\boldsymbol{Z}^{k+1},\boldsymbol{U}^{k+1},\boldsymbol{V},\boldsymbol{\Lambda}^k,\boldsymbol{\Pi}^k),\\
\Lambda^{k+1} &= \Lambda^k + \tau\alpha(\boldsymbol{X}^{k+1}-\boldsymbol{U}^{k+1}),\\
\Pi^{k+1} &= \Pi^k + \tau\beta(\boldsymbol{Y}^{k+1}-\boldsymbol{V}^{k+1}).
\end{aligned}$$