MATH 3011 运筹学 **秋季 2023**

Lecture 20: 交替方向乘子法

Lecturer: 陈士祥 *Scribes:* 陈士祥

1 问题形式

交替方向乘子法 (ADMM) 是一种常用的优化算法，适用于解决具有特定结构的优化问题，特别是可以分解为多个子问题的情况。主要可以处理如下可分的凸问题：

$$\begin{aligned} \min_{x_1,x_2} \quad & f_1(x_1)+f_2(x_2), \\ \text{s.t.} \quad & A_1x_1+A_2x_2=b, \end{aligned} \tag{20.1}$$

- f_1, f_2 是适当的闭凸函数，不需要是光滑的，$x_1\in\mathbb{R}^n, x_2\in\mathbb{R}^m$, $A_1\in\mathbb{R}^{p\times n}, A_2\in\mathbb{R}^{p\times m}$, $b\in\mathbb{R}^p$.
- 可分：目标函数可以分成两个变量独占的函数，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。

2 交替方向乘子法

Example 20.1 例

- 考虑如下问题
$$\min_x \quad f_1(x)+f_2(x).$$
若 f_1,f_2 都是非光滑函数，之前学过的算法，例如近似点梯度法，则无法处理。
引入一个新的变量 z 并令 $x=z$，将问题转化为 (20.1)的形式：
$$\begin{aligned} \min_{x,z} \quad & f_1(x)+f_2(z), \\ \text{s.t.} \quad & x-z=0. \end{aligned}$$
- 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

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

同样转化为 (20.1)的形式。

- 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

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

2.1 回顾：增广拉格朗日函数法

- 首先写出问题(20.1)的增广拉格朗日函数

$$\begin{aligned} L_\rho(x_1, x_2, y) =& f_1(x_1) + f_2(x_2) + y^{\mathrm{T}}(A_1x_1 + A_2x_2 - b) \\ &+ \frac{\rho}{2}\|A_1x_1 + A_2x_2 - b\|_2^2, \end{aligned} \tag{20.2}$$

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 (ALM) 为如下更新：

$$(x_1^{k+1}, x_2^{k+1}) = \arg\min_{x_1,x_2} L_\rho(x_1, x_2, y^k), \tag{20.3}$$

$$y^{k+1} = y^k + \tau\rho(A_1x_1^{k+1} + A_2x_2^{k+1} - b), \tag{20.4}$$

其中 τ 为步长.

ALM 的缺点：子问题(20.3)不易求解。

2.2 交替乘子方向法

英文名：Alternating direction method of multipliers, 简称 ADMM

- 交替方向乘子法的基本思路: 第一步迭代(20.3)同时对 x_1 和 x_2 进行求解有时候比较困难，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：

$$x_1^{k+1} = \arg\min_{x_1} L_\rho(x_1, x_2^k, y^k), \tag{20.5}$$

$$x_2^{k+1} = \arg\min_{x_2} L_\rho(x_1^{k+1}, x_2, y^k), \tag{20.6}$$

$$y^{k+1} = y^k + \tau\rho(A_1 x_1^{k+1} + A_2 x_2^{k+1} - b), \tag{20.7}$$

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

2.3 应用举例

Example 20.2 (基追踪问题) 对于基追踪问题. 设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}(m \leqslant n)$, $b \in \mathbb{R}^m$, $x \in \mathbb{R}^n$, 基追踪问题被描述为

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \|x\|_1, \quad s.t. \quad Ax = b. \tag{20.8}$$

ALM 迭代更新格式为

$$\begin{cases} x^{k+1} = \arg\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n}\left\{\|x\|_1 + \frac{\sigma}{2}\left\|Ax - b + \frac{\lambda^k}{\sigma}\right\|_2^2\right\}, \\ \lambda^{k+1} = \lambda^k + \sigma\left(Ax^{k+1} - b\right). \end{cases} \tag{20.9}$$

引入 $y = x$, 问题变为

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n, y\in\mathbb{R}^m} \quad \|y\|_1, \quad s.t. \quad Ax = b, \quad x = y. \tag{20.10}$$

ADMM 迭代更新格式为

$$\begin{cases} x^{k+1} = \arg\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n}\left\{\langle\lambda_{1,k}, Ax - b\rangle + \frac{\sigma}{2}\|Ax - b\|_2^2 + \langle\lambda_{2,k}, x - y_k\rangle + \frac{\sigma}{2}\|x - y_k\|_2^2\right\}, \\ y^{k+1} = \arg\min\limits_{y\in\mathbb{R}^m}\left\{\|y\|_1 + \langle\lambda_{2,k}, y - x_{k+1}\rangle + \frac{\sigma}{2}\|y - x_{k+1}\|_2^2\right\}, \\ \lambda_{1,k+1} = \lambda_{1,k} + \sigma\left(Ax^{k+1} - b\right), \\ \lambda_{2,k+1} = \lambda_{2,k} + \sigma\left(y_{k+1} - x_{k+1}\right) \end{cases} \tag{20.11}$$

Example 20.3 (LASSO 问题) *LASSO* 问题

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

转换为标准问题形式：

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

ADMM 迭代格式为

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

对于 x_k 的子问题，有如下方式减少每个迭代步的计算量：

- 因为 $\rho > 0$，所以 $A^{\mathrm{T}}A + \rho I$ 总是可逆的. 若使用固定的罚因子 ρ，我们使用例如 *Cholesky* 分解得到 $A^{\mathrm{T}}A + \rho I$ 的初始分解，从而减小后续迭代中的计算量.

- 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 $O(n^3)$

- 可以利用 *SMW* 公式减少矩阵求逆计算量：

$$
(A^{\mathrm{T}}A + \rho I_n)^{-1} = \rho^{-1}I - \rho^{-1}A^{\mathrm{T}}(\rho I_m + AA^{\mathrm{T}})^{-1}A
$$

Example 20.4 (Fused 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*:*

$$
\min_{x} \quad \mu\|Dx\|_1 + \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2. \tag{20.12}
$$

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

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

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模型.

通过引入约束 $Dx = z$*:*

$$
\begin{aligned}
\min_{x,z} \quad & \frac{1}{2}\|Ax-b\|^2 + \mu\|z\|_1, \\
\text{s.t.} \quad & Dx - z = 0,
\end{aligned} \tag{20.13}
$$

引入乘子 y，其增广拉格朗日函数为

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

此问题的 x 迭代是求解方程组

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

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

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

- 对于全变差去噪问题，$A^{\mathrm{T}}A + \rho D^{\mathrm{T}}D$ 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 $O(n\log n)$.

2.3.1 图像去噪模型

图像去噪是图像处理领域的一个重要任务，旨在从损坏的或嘈杂的图像中恢复出清晰的图像。去噪模型的目标是在尽可能保留图像细节和结构的同时，移除噪声。其数学模型如下：

$$b = Kx_t + w$$

- x_t 为未知图像
- b 为观察到的图像，模糊且有噪声; w 为噪声
- $N \times N$ 的像素点按列储存为长为 N^2 的向量

模糊矩阵 K

- 表示一个 2 维的卷积，是有空间不动点的扩散函数
- 满足周期边界条件，有循环块 (circulant blocks)

- 可对角化，即存在酉的 2 维离散傅立叶变换矩阵 W，使得

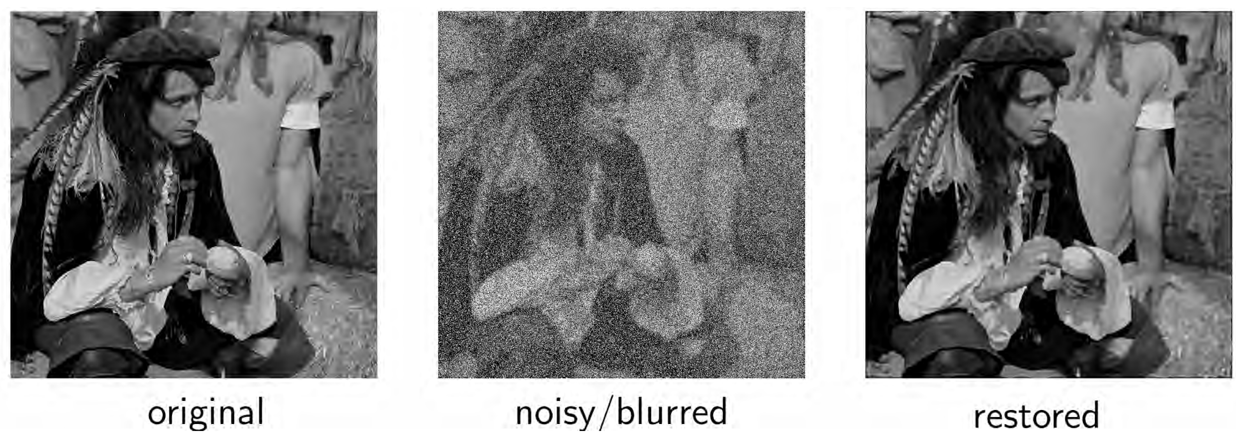
$$K = W^H \mathbf{diag}(\lambda) W.$$

  系数矩阵为 $I + K^T K$ 的线性方程组可在 $O(N^2 \log N)$ 的时间内求解。

我们有如下图像添加噪声和去噪声例子：求解下面问题，以恢复出带噪声/模糊的图片，

$$\min_x \frac{1}{2}\|Kx - b\|^2 + \|Dx\|_1.$$

- b 为给定的带噪声的图像，如下图中间的图片，1024×1024 的图像，满足周期边界条件
- 高斯模糊算子 K
- 椒盐噪声 (salt-and-pepper noise) w：50% 的像素点被随机替换为 0/1



2.3.2 鲁棒主成分分析

在经典的 PCA 中，数据被分解为几个主成分，这些主成分捕获了数据中的主要变异性。然而，当数据中存在离群点或异常值时，PCA 的性能可能会大大下降，因为它试图捕获所有数据点的变异性，包括异常值。

RPCA 解决了这个问题。它将数据矩阵分解为两部分：一个低秩矩阵和一个稀疏矩阵。低秩矩阵捕获数据的主要结构，而稀疏矩阵则包含异常值或离群点。通过这种方式，RPCA 能够在保持数据主要结构的同时，有效地处理异常值。

其数学模型如下

$$\begin{aligned} \min_{X,S} \quad & \|X\|_* + \mu\|S\|_1, \\ & X + S = M, \end{aligned} \tag{20.14}$$

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

$$L_\rho(X,S,Y) = \|X\|_* + \mu\|S\|_1 + \langle Y, X+S-M\rangle + \frac{\rho}{2}\|X+S-M\|_F^2. \tag{20.15}$$

- 对于 X 子问题，

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

  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.

- 对于 S 子问题，

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

- 那么交替方向乘子法的迭代格式为

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

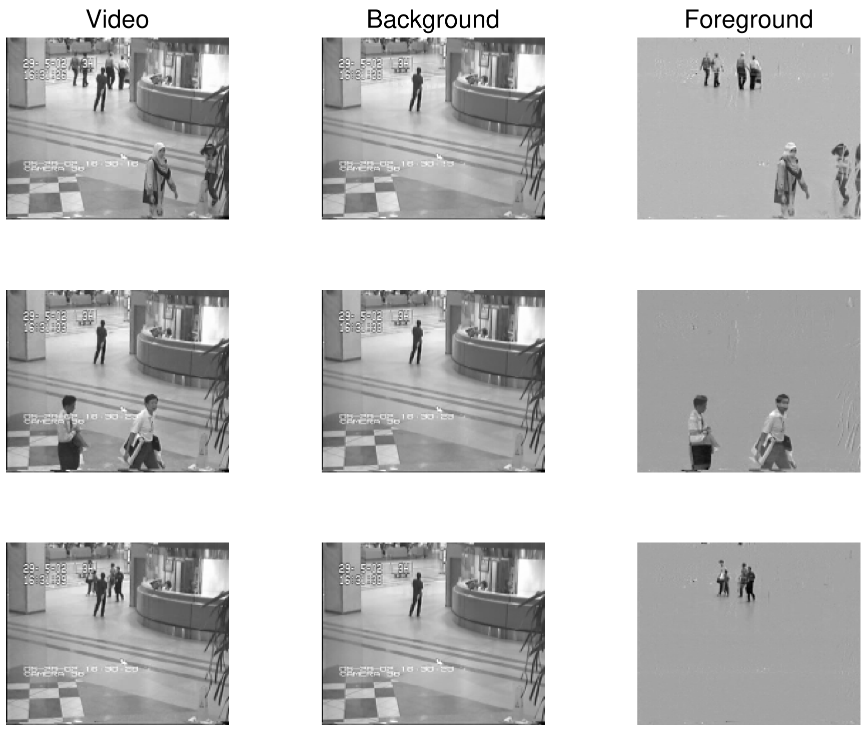


图 20.1: 通过 RPCA，将视频图片分为背景（低秩）和前景（稀疏）两个部分。

2.4 ADMM 收敛结果

我们先引入一些必要的假设.

- $f_1(x), f_2(x)$ 均为闭凸函数，且每个 ADMM 迭代子问题存在唯一解；
- 原始问题的解集非空，且 Slater 条件满足.

注：假设给出的条件是很基本的.

- f_1 和 f_2 的凸性保证了要求解的问题是凸问题，每个子问题存在唯一解是为了保证迭代的良定义
- 在 Slater 条件满足的情况下，原始问题的 KKT 对和最优解是对应的，因此可以很方便地使用 KKT 条件来讨论收敛性.

Theorem 20.1 在假设的条件下,进一步假定 A_1, A_2 列满秩.如果 $\tau \in \left(0, \frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)$,则序列 $\{(x_1^k, x_2^k, y^k)\}$ 收敛到原始问题的一个 KKT 对.

2.5 多块问题的 ADMM

考虑有多块变量的情形

$$\begin{aligned} \min_{x_1, x_2, \cdots, x_N} \quad & f_1(x_1) + f_2(x_2) + \cdots + f_N(x_N), \\ \text{s.t.} \quad & A_1 x_1 + A_2 x_2 + \cdots + A_N x_N = b. \end{aligned} \tag{20.16}$$

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

$$\begin{aligned} x_1^{k+1} &= \operatorname*{argmin}_x L_\rho(x, x_2^k, \cdots, x_N^k, y^k), \\ x_2^{k+1} &= \operatorname*{argmin}_x L_\rho(x_1^{k+1}, x, \cdots, x_N^k, y^k), \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots \\ x_N^{k+1} &= \operatorname*{argmin}_x L_\rho(x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \cdots, x, y^k), \\ y^{k+1} &= y^k + \tau\rho(A_1 x_1^{k+1} + A_2 x_2^{k+1} + \cdots + A_N x_N^{k+1} - b), \end{aligned}$$

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

需要说明的是，多块 ADMM 有时候未必收敛。有如下例子。

Example 20.5 (多块 ADMM 收敛性反例) 考虑最优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & 0, \\ \text{s.t.} \quad & A_1 x_1 + A_2 x_2 + A_3 x_3 = 0, \end{aligned} \tag{20.17}$$

其中 $A_i \in \mathbb{R}^3$, $i = 1, 2, 3$ 为三维空间中的非零向量，$x_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, 2, 3$ 是自变量. 该问题实际上就是求解三维空间中的线性方程组，若 A_1, A_2, A_3 之间线性无关，则问题(20.17) 只有零解. 此时容易计算出最优解对应的乘子为 $y = (0, 0, 0)^{\mathrm{T}}$.

(20.17)的增广拉格朗日函数为

$$L_\rho(x, y) = 0 + y^{\mathrm{T}}(A_1 x_1 + A_2 x_2 + A_3 x_3) + \frac{\rho}{2}\|A_1 x_1 + A_2 x_2 + A_3 x_3\|^2.$$

- 当固定 x_2, x_3, y 时，对 x_1 求最小可推出

  $$A_1^{\mathrm{T}} y + \rho A_1^{\mathrm{T}}(A_1 x_1 + A_2 x_2 + A_3 x_3) = 0,$$

  整理可得

  $$x_1 = -\frac{1}{\|A_1\|^2}\left(A_1^{\mathrm{T}}\left(\frac{y}{\rho} + A_2 x_2 + A_3 x_3\right)\right).$$

  可类似地计算 x_2, x_3 的表达式

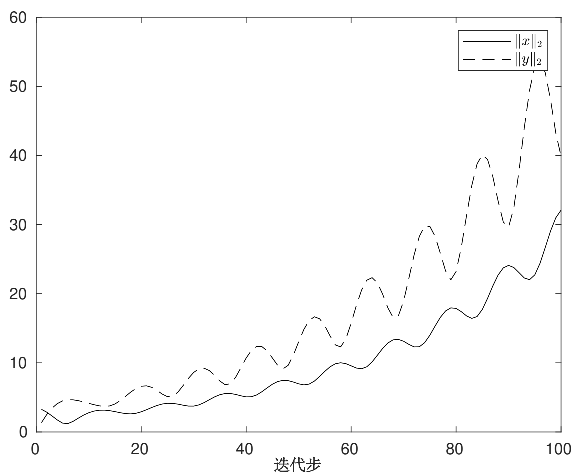
- 因此多块交替方向乘子法的迭代格式可以写为

$$
\begin{aligned}
x_1^{k+1} &= -\frac{1}{\|A_1\|^2} A_1^{\mathrm{T}} \left(\frac{y^k}{\rho} + A_2 x_2^k + A_3 x_3^k \right), \\
x_2^{k+1} &= -\frac{1}{\|A_2\|^2} A_2^{\mathrm{T}} \left(\frac{y^k}{\rho} + A_1 x_1^{k+1} + A_3 x_3^k \right), \\
x_3^{k+1} &= -\frac{1}{\|A_3\|^2} A_3^{\mathrm{T}} \left(\frac{y^k}{\rho} + A_1 x_1^{k+1} + A_2 x_2^{k+1} \right), \\
y^{k+1} &= y^k + \rho(A_1 x_1^{k+1} + A_2 x_2^{k+1} + A_3 x_3^{k+1}).
\end{aligned} \tag{20.18}
$$

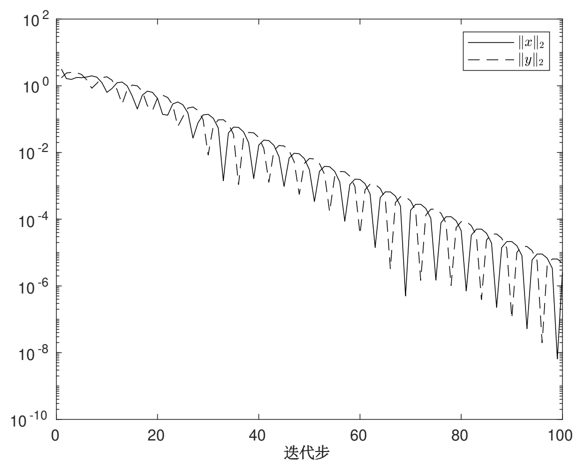
- 自变量初值初值选为 $(1,1,1)$，乘子选为 $(0,0,0)$. 选取 A 为

$$
\widetilde{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{或} \quad \widehat{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 2 \end{bmatrix}.
$$

- 下图记录了在不同 A 下 x 和 y 的 ℓ_2 范数随迭代的变化过程.



(a) 系数矩阵为 $\widetilde{A}$，ADMM 不收敛。



(b) 系数矩阵为 $\widehat{A}$

图 20.2: 选取不同 A 时的数值结果

作业 20.1 *1.* 给出 *ADMM* 求解线性规划标准形式，以及其对偶问题的迭代形式，要求写出子问题的求解公式。

2. 考虑如下问题

$$
\min \sum_{i=1}^{n} f_i(x_i), \quad \text{s.t.} \quad x_1 = x_2 = \ldots = x_n.
$$

其中，f_i 均为闭凸函数，且其近似点映射有显式解。写出多块 *ADMM* 求解该问题的迭代形式，要求每个 x_i 的子问题均有显式解。

3. 考虑如下 *Sparse Inverse Covariance Selection* 问题：给定对称正定矩阵 $C \in \mathbb{R}^{n\times n}$，$\lambda > 0$ 为给定的实数，求解

$$\min_X \operatorname{Tr}(CX) - \log\det X + \lambda\|X\|_1,$$

这里，$\|X\|_1 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |X_{ij}|$。使用 *ADMM* 求解该问题，并给出子问题的显式解。(提示：该问题为凸问题，默认 X 的定义域为对称正定矩阵集合，即无需添加正定矩阵约束，直接考虑无约束问题，$\log\det X$ 的梯度为 X^{-1}）．