第七章 复合优化算法

修贤超

https://xianchaoxiu.github.io

目录

- 7.1 近似点梯度法
- 7.2 Nesterov 加速算法
- 7.3 近似点算法
- 7.4 分块坐标下降法
- 7.5 对偶算法
- 7.6 交替方向乘子法
- 7.7 随机优化算法

对偶方法

- ■梯度法
 - □ 对偶函数可能不可微,或定义域非平凡
 - □ 对原始函数加小的强凸项,将对偶函数光滑化
- 增广拉格朗日法
 - □ 等价于对光滑化的对偶问题做梯度上升
 - □ 但是光滑化会破坏可分结构
- 近似点梯度法
 - □ 一项是梯度利普希茨连续函数
 - □ 另一项有方便计算的近似点算子

对偶问题

lacksquare 设 f, h 是闭凸函数,考虑如下形式的问题

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

■ 引入新变量 y = Ax, 考虑问题

(P)
$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = f(x) + h(y)$$
 s.t. $Ax = y$

■ 拉格朗日函数为

$$L(x, y, z) = f(x) + g(y) + z^{\top} (Ax - y)$$

■ 对偶问题

(D)
$$\max_{z} \quad \phi(z) = -f^*(-A^{\top}z) - h^*(z)$$

强凸函数共轭函数的性质

- 引理 7.1 设 f(x) 是适当且闭的强凸函数,强凸参数为 $\mu > 0$,则 $f^*(y)$ 在全空间 \mathbb{R}^n 上有定义, $f^*(y)$ 是梯度 $\frac{1}{\mu}$ -利普希茨连续的可微函数
- 考虑在对偶问题上应用近似点梯度算法,每次迭代更新如下

$$z^{k+1} = \operatorname{prox}_{th^*}(z^k + tA\nabla f^*(-A^{\top}z^k))$$

■ 引入变量 $x^{k+1} = \nabla f^*(-A^{\mathrm{T}}z^k)$, 迭代格式等价于

$$x^{k+1} = \underset{x}{\operatorname{arg\,min}} \{ f(x) + (A^{\top} z^k)^{\top} x \}, \quad z^{k+1} = \underset{x}{\operatorname{prox}}_{th^*} (z^k + tAx^{k+1})$$

- \Box 如果 f 可分, x 的计算可分解为多个独立的问题
- □ 步长 t 可取常数或采取回溯线搜索法
- □ 可使用加速近似点梯度法

Moreau 分解

■ 引理 7.2 设 f 是定义在 \mathbb{R}^n 上的适当的闭凸函数,则对任意的 $x \in \mathbb{R}^n$ 有

$$x = \operatorname{prox}_{f}(x) + \operatorname{prox}_{f^{*}}(x)$$

$$\downarrow \qquad \qquad \downarrow$$

$$x = \operatorname{prox}_{\lambda f}(x) + \lambda \operatorname{prox}_{\lambda^{-1} f^{*}} \left(\frac{x}{\lambda}\right)$$

■ 对任意的闭凸函数 f , 空间 \mathbb{R}^n 上的恒等映射总可以分解成两个函数 f 与 f^* 邻近算子的和

交替极小的解释

■ 取 $\lambda = t$, $f = h^*$, 并注意到 $h^{**} = h$, 有

$$z^{k} + tAx^{k+1} = \operatorname{prox}_{th^{*}}(z^{k} + tAx^{k+1}) + t\operatorname{prox}_{t^{-1}h}\left(\frac{z^{k}}{t} + Ax^{k+1}\right)$$
$$= z^{k+1} + t\operatorname{prox}_{t^{-1}h}(\frac{z^{k}}{t} + Ax^{k+1})$$

■由此给出对偶近似点梯度法等价的针对原始问题的更新格式

$$x^{k+1} = \arg\min_{x} \left\{ f(x) + (z^{k})^{\top} Ax \right\}$$

$$y^{k+1} = \operatorname{prox}_{t^{-1}h} \left(\frac{z^{k}}{t} + Ax^{k+1} \right)$$

$$= \arg\min_{y} \left\{ h(y) - (z^{k})^{\top} (y - Ax^{k+1}) + \frac{t}{2} ||Ax^{k+1} - y||_{2}^{2} \right\}$$

$$z^{k+1} = z^{k} + t(Ax^{k+1} - y^{k+1})$$

交替极小方法

■ 考虑等价问题

$$\min_{x,y} f(x) + h(y)$$
 s.t. $y = Ax$

■ 定义拉格朗日函数和增广拉格朗日函数

$$L(x, y, z) = f(x) + h(y) - z^{\top}(y - Ax)$$

$$L_t(x, y, z) = f(x) + h(y) - z^{\top}(y - Ax) + \frac{t}{2}||y - Ax||^2$$

■ 等价的交替极小格式是

$$x^{k+1} = \arg\min_{x} L(x, y^{k}, z^{k})$$
$$y^{k+1} = \arg\min_{y} \frac{L_{t}}{L_{t}}(x^{k+1}, y, z^{k})$$
$$z^{k+1} = z^{k} + t(Ax^{k+1} - y^{k+1})$$

■ 对偶近似点梯度法等价于对原始约束问题使用交替极小化方法

■ 假设 f 是强凸函数, $\|\cdot\|$ 是任意一种范数, 考虑

$$\min \quad f(x) + ||Ax - b||$$

■ 对应原始问题有 h(y) = ||y - b||

$$h^*(z) = \begin{cases} b^\top z & \|z\|_* \le 1 \\ +\infty &$$
 $\mathbf{\sharp M} \end{cases} \quad \text{prox}_{th^*}(x) = \mathcal{P}_{\|z\|_* \le 1}(x - tb)$

■ 从而对偶问题为

$$\max_{\|z\|_* \le 1} \quad -f^*(-A^{\top}z) - b^{\top}z$$

应用对偶近似点梯度法, 更新如下

$$x^{k+1} = \arg\min_{x} \left\{ f(x) + (A^{\top} z^{k})^{\top} x \right\}$$
$$z^{k+1} = \mathcal{P}_{\|z\|_{*} \le 1} (z^{k} + t(Ax^{k+1} - b))$$

■ 考虑等价问题

$$\min_{x,y} \quad f(x) + ||y|| \quad \text{s.t.} \quad Ax - b = y$$

■ 交替极小化格式

$$x^{k+1} = \arg\min_{x} f(x) + ||y^{k}|| + (z^{k})^{\top} (Ax - b - y^{k})$$

$$y^{k+1} = \arg\min_{y} f(x^{k+1}) + ||y|| + (z^{k})^{\top} (Ax^{k+1} - b - y) + \frac{t}{2} ||Ax^{k+1} - b - y||_{2}^{2}$$

$$z^{k+1} = z^{k} + t(Ax^{k+1} - b - y^{k+1})$$

■ 假设 ƒ 是强凸函数,考虑

min
$$f(x) + \sum_{i=1}^{p} ||B_i x||_2$$

■ 根据 ||·||2 的共轭函数定义,对偶问题

$$\max_{\|z_i\|_2 \le 1} \quad -f^* \left(-\sum_{i=1}^p B_i^\top z_i \right)$$

lacksquare 记 C_i 是 \mathbb{R}_{m_i} 中的单位欧几里得球,对偶近似点梯度法更新如下

$$x^{k+1} = \arg\min_{x} \left\{ f(x) + (\sum_{i=1}^{p} B_i^{\top} z_i)^{\top} x \right\}$$
$$z_i^{k+1} = \mathcal{P}_{C_i}(z_i^k + tB_i x^{k+1}), i = 1, 2, \dots, p$$

■ 假设 f 是强凸函数,集合 C_i 为闭凸集,且易于计算投影,考虑

$$\min f(x)
s.t. x \in C_1 \cap C_2 \cap \cdots \cap C_m$$

- $\Leftrightarrow h(y_1, y_2, \cdots, y_m) = \sum_{i=1}^m I_{C_i}(y_i), \quad A = [I \ I \ \cdots \ I]^\top$
- 对偶问题

$$\max_{z_i \in C_i} -f^* \left(-\sum_{i=1}^m z_i \right) - \sum_{i=1}^m I_{C_i}^*(z_i),$$

 $I_{C_i}^*(z_i)$ 是集合 C_i 的支撑函数,其显式表达式不易求出

■ 利用 Moreau 分解将迭代格式写成交替极小化方法的形式

$$x^{k+1} =_x \left\{ f(x) + \left(\sum_{i=1}^m z_i \right)^\top x \right\}$$
$$y_i^{k+1} = \mathcal{P}_{C_i} \left(\frac{z_i^k}{t} + x^{k+1} \right), \quad i = 1, 2, \dots, m$$
$$z_i^{k+1} = z_i^k + t(x^{k+1} - y_i^{k+1}), \quad i = 1, 2, \dots, m$$

■ 假设 f_i 是强凸函数, h_i^* 有易于计算的邻近算子.考虑

$$\min \sum_{j=1}^{n} f_j(x_j) + \sum_{i=1}^{m} h_i (A_{i1}x_1 + A_{i2}x_2 + \dots + A_{in}x_N)$$

■ 对偶问题

$$\max \quad -\sum_{i=1}^{m} h_i^*(z_i) - \sum_{j=1}^{n} f_j^*(-A_{1j}^{\top} z_1 - A_{2j}^{\top} z_2 - \dots - A_{mj}^{\top} z_m)$$

■ 对偶近似点梯度法更新如下

$$x_j^{k+1} = \arg\min_{x_j} \left\{ f_j(x_j) + (\sum_{i=1}^m A_{ij} z_i^k)^\top x_j \right\}, \quad j = 1, 2, \dots, n$$
$$z_i^{k+1} = \operatorname{prox}_{th_i^*} \left(z_i + t \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j^{k+1} \right), \quad i = 1, 2, \dots, m$$

鞍点问题

● 令 f,h 是适当的闭凸函数. 考虑原始问题

$$\min f(x) + h(Ax)$$

■ 由于 h 有自共轭性,将问题变形为

$$(L_{PD}) \quad \min_{x} \quad \max_{z} \quad \psi_{PD}(x, z) = f(x) - h^{*}(z) + z^{\top} A x$$

■ 另一种常用的鞍点问题定义方式构造拉格朗日函数

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}^m} \quad f(x) + h(y) \quad \text{s.t.} \quad y = Ax$$

■ 相应的鞍点问题形式如下

(L_P)
$$\min_{x,y} \max_{z} f(x) + h(y) + z^{\top}(Ax - y)$$

PDHG 算法

- PDHG 算法的思想就是分别对两类变量应用近似点梯度算法
- 交替更新原始变量以及对偶变量, 迭代格式如下

$$z^{k+1} = \arg\max_{z} \left\{ -h^*(z) + \langle Ax^k, z - z^k \rangle - \frac{1}{2\delta_k} \|z - z^k\|_2^2 \right\}$$

$$= \operatorname{prox}_{\delta_k h^*} (z^k + \delta_k Ax^k)$$

$$x^{k+1} = \arg\min_{x} \left\{ f(x) + (z^{k+1})^\top A(x - x^k) + \frac{1}{2\alpha_k} \|x - x^k\|_2^2 \right\}$$

$$= \operatorname{prox}_{\alpha_k f} (x^k - \alpha_k A^\top z^{k+1})$$

■ 原始变量和对偶变量的更新顺序是无关紧要的

Chambolle-Pock 算法

- PDHG 算法的收敛性需要比较强的条件,有些情形下未必收敛
- Chambolle-Pock 算法与 PDHG 算法的区别在于多了一个外推步
- 具体的迭代格式如下

$$z^{k+1} = \text{prox}_{\delta_k h^*} (z^k + \delta_k A y^k)$$

$$x^{k+1} = \text{prox}_{\alpha_k f} (x^k - \alpha_k A^\top z^{k+1})$$

$$y^{k+1} = 2x^{k+1} - x^k$$

应用举例: LASSO 问题求解

■ 考虑 LASSO 问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = \mu \|x\|_1 + \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2$$

取 $f(x) = \mu ||x||_1$ 和 $h(x) = \frac{1}{2} ||x - b||_2^2$, 相应的鞍点问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \max_{z \in \mathbb{R}^m} f(x) - h^*(z) + z^{\top} A x$$

■ 根据共轭函数的定义

$$h^*(z) = \sup_{y \in \mathbb{R}^m} \quad \left\{ y^\top z - \frac{1}{2} \|y - b\|_2^2 \right\} = \frac{1}{2} \|z\|_2^2 + b^\top z$$

■ 应用 PDHG 算法, x^{k+1} 和 z^{k+1} 的更新格式分别为

$$z^{k+1} = \text{prox}_{\delta_k h^*}(z^k + \delta_k A x^k) = \frac{1}{\delta_k + 1} \left(z^k + \delta_k A x^k - \delta_k b \right)$$
$$x^{k+1} = \text{prox}_{\alpha_k \mu \| \cdot \|_1} (x^k - \alpha_k A^\top z^{k+1})$$

LASSO 问题求解

■ Chambolle-Pock 算法格式为

$$z^{k+1} = \frac{1}{\delta_k + 1} (z^k + \delta_k A y^k - \delta_k b)$$

$$x^{k+1} = \operatorname{prox}_{\alpha_k \mu \| \cdot \|_1} (x^k - \alpha_k A^\top z^{k+1})$$

$$y^{k+1} = 2x^{k+1} - x^k$$

$$y^{k+1} = 2x^{k+1} - x^k$$

$$y^{k+1} = 2x^{k+1} - x^k$$

$TV-L^1$ 模型

■ 考虑去噪情形下的 $TV-L^1$ 模型

$$\min_{U \in \mathbb{R}^{n \times n}} \quad \|U\|_{TV} + \lambda \|U - B\|_1$$

■ 对任意的 $W, V \in \mathbb{R}^{n \times n \times 2}$, 记

$$\|W\| = \sum_{1 \le i,j \le n} \|w_{ij}\|_2, \quad \langle W, V \rangle = \sum_{1 \le i,j \le n, 1 \le k \le 2} w_{i,j,k} v_{i,j,k}$$

■ 利用 ||·|| 的定义, 有

$$||U||_{TV} = ||DU||$$

 \blacksquare 取 D 为相应的线性算子,并取

$$f(U) = \lambda ||U - B||_1, \quad U \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad h(W) = ||W||, \quad W \in \mathbb{R}^{n \times n \times 2}$$

$|\mathsf{TV} ext{-}L^1$ 模型

■ 相应的鞍点问题如下

(L_{PD})
$$\min_{U \in \mathbb{R}^{n \times n}} \max_{V \in \mathbb{R}^{n \times n \times 2}} f(U) - h^*(V) + \langle V, DU \rangle$$

■ 根据共轭函数的定义

$$h^*(V) = \sup_{U \in \mathbb{R}^{n \times n \times 2}} \{ \langle U, V \rangle - ||U|| \} = \begin{cases} 0, & \max_{i,j} ||v_{ij}||_2 \le 1 \\ +\infty, & \sharp \text{ i.i.} \end{cases}$$

■ 记 $\mathcal{V}=\{V\in\mathbb{R}^{n\times n\times 2}\mid\max_{ij}\|v_{ij}\|_2\leq 1\}$,其示性函数记为 $I_{\mathcal{V}}(V)$,则问题 $(\mathrm{L_{PD}})$ 可以整理为

$$\min_{U} \max_{V} f(U) + \langle V, DU \rangle - I_{\mathcal{V}}(V)$$

$TV-L^1$ 模型

■ 应用 PDHG 算法,则 V^{k+1} 的更新为

$$V^{k+1} = \operatorname{prox}_{sI_{\mathcal{V}}}(V^k + sDU^k) = \mathcal{P}_{\mathcal{V}}(V^k + sDU^k)$$

 U^{k+1} 的更新如下

$$U^{k+1} = \operatorname{prox}_{tf}(U^k + tGV^{k+1})$$

= $\operatorname{arg\,min}_{U} \left\{ \lambda \|U - B\|_1 + \langle V^{k+1}, DU \rangle + \frac{1}{2t} \|U - U^k\|_F^2 \right\}$

其中 $G: \mathbb{R}^{n \times n \times 2} \to \mathbb{R}^{n \times n}$ 为离散的散度算子,其满足

$$\langle V, DU \rangle = -\langle GV, U \rangle, \quad \forall \ U \in \mathbb{R}^{n \times n}, \ V \in \mathbb{R}^{n \times n \times 2}$$

Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈