第七章 复合优化算法

修贤超

https://xianchaoxiu.github.io

目录

邻近算子

- 考虑如下复合优化问题

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

  - $f(x)$ 为可微函数 (可能非凸)
  - $h(x)$ 可能为不可微函数

- **定义 7.1** 对于一个凸函数 h，定义邻近算子为

$$\mathrm{prox}_h(x) = \arg\min_u \left\{ h(u) + \frac{1}{2}\|u - x\|_2^2 \right\}$$

- **定理 7.1** 如果 h 为闭凸函数，则对任意 x 有 $\mathrm{prox}_h(x)$ 存在且唯一

- 定理 7.2 若h 是适当的闭凸函数, 则

$$u = \text{prox}_h(x) \quad \Leftrightarrow \quad x - u \in \partial h(u)$$

证明 若 $u =_h (x)$, 则由最优性条件得 $0 \in \partial h(u) + (u - x)$, 因此有 $x - u \in \partial h(u)$. 反之，若 $x - u \in \partial h(u)$ 则由次梯度的定义可得到

$$h(v) \geqslant h(u) + (x-u)^\top (v-u), \quad \forall v \in \text{dom } h$$

两边同时加 $\frac{1}{2}\|v-x\|^2$, 即有

$$\begin{aligned} h(v) + \frac{1}{2}\|v-x\|^2 &\geqslant h(u) + (x-u)^\top (v-u) + \frac{1}{2}\|(v-u) - (x-u)\|^2 \\ &\geqslant h(u) + \frac{1}{2}\|u-x\|^2, \quad \forall v \in \text{dom } h \end{aligned}$$

根据定义可得 $u =_h (x)$

例 7.1

- ℓ_1 范数 $h(x) = \|x\|_1, \quad \mathrm{prox}_{th}(x) = \mathrm{sign}(x)\max\{|x| - t, 0\}$

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

$$x - u \in t\partial\|u\|_1 = \begin{cases} \{t\}, & u > 0 \\ [-t, t], & u = 0 \\ \{-t\}, & u < 0 \end{cases}$$

  当 $x > t$ 时, $u = x - t$; 当 $x < -t$ 时, $u = x + t$; 当 $x \in [-t, t]$ 时, $u = 0$
  因此 $u = \mathrm{sign}(x)\max\{|x| - t, 0\}$

例 7.1

- ℓ_2 **范数** $h(x) = \|x\|_2, \quad \mathrm{prox}_{th}(x) = \begin{cases} (1 - \frac{t}{\|x\|_2})x, & \|x\|_2 \geqslant t \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$

证明 **邻近算子** $u = \mathrm{prox}_{th}(x)$ **的最优性条件为**

$$x - u \in t\partial\|u\|_2 = \begin{cases} \{\frac{tu}{\|u\|_2}\}, & u \neq 0 \\ \{w : \|w\|_2 \leqslant t\}, & u = 0 \end{cases}$$

当 $\|x\|_2 > t$ **时**, $u = x - \frac{tx}{\|x\|_2}$; **当** $\|x\|_2 \leqslant t$ **时**, $u = 0$

例 7.2

- 邻近算子的计算规则
  - 变量的常数倍放缩以及平移 $(\lambda \neq 0)$

$$h(x) = g(\lambda x + a), \quad \mathrm{prox}_h(x) = \frac{1}{\lambda}\left(\mathrm{prox}_{\lambda^2 g}(\lambda x + a) - a\right)$$

  - 函数（及变量）的常数倍放缩 $(\lambda > 0)$

$$h(x) = \lambda g\left(\frac{x}{\lambda}\right), \quad \mathrm{prox}_h(x) = \lambda \mathrm{prox}_{\lambda^{-1} g}\left(\frac{x}{\lambda}\right)$$

  - 加上线性函数

$$h(x) = g(x) + a^\top x, \quad \mathrm{prox}_h(x) = \mathrm{prox}_g(x - a)$$

例 7.2

- 加上二次项 $(u > 0)$

$$h(x) = g(x) + \frac{u}{2}\|x - a\|_2^2, \quad \mathrm{prox}_h(x) = \mathrm{prox}_{\theta g}(\theta x + (1-\theta)a)$$

其中 $\theta = \frac{1}{1+u}$

- 向量函数

$$h\left(\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right) = \varphi_1(x) + \varphi_2(y), \quad \mathrm{prox}_h\left(\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} \mathrm{prox}_{\varphi_1}(x) \\ \mathrm{prox}_{\varphi_2}(y) \end{bmatrix}$$

例 7.3

- 设C 为闭凸集，则示性函数 I_C 的邻近算子为点 x 到 C 的投影 $\mathcal{P}_C(x)$

$$\begin{aligned}\mathrm{prox}_{I_C}(x) &= \arg\min_u \left\{ I_C(u) + \frac{1}{2}\|u-x\|^2 \right\} \\ &= \arg\min_{u\in C}\|u-x\|^2 \\ &= \mathcal{P}_C(x)\end{aligned}$$

- 几何意义

$$u = \mathcal{P}_C(x) \quad \Leftrightarrow \quad (x-u)^\top(z-u) \leqslant 0, \quad \forall z \in C$$

近似点梯度法

- 考虑复合优化问题

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

- 对于光滑部分 f 做梯度下降，对于非光滑部分 h 使用邻近算子

===========

给定函数 $f(x), h(x)$，初始点 x^0
while 未达到收敛准则 **do**
 $x^{k+1} = \mathrm{prox}_{t_k h}(x^k - t_k \nabla f(x^k))$
end while

对近似点梯度法的理解

- 把迭代公式展开

$$x^{k+1} = \mathrm{prox}_{t_k h}(x^k - t_k \nabla f(x^k))$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \arg\min_u \left\{ h(u) + \frac{1}{2t_k}\|u - x^k + t_k \nabla f(x^k)\|^2 \right\} \\ &= \arg\min_u \left\{ h(u) + f(x^k) + \nabla f(x^k)^\top (u - x^k) + \frac{1}{2t_k}\|u - x^k\|^2 \right\} \end{aligned}$$

- 根据邻近算子与次梯度的关系，可改写为

$$x^{k+1} = x^k - t_k \nabla f(x^k) - t_k g^k, \quad g^k \in \partial h(x^{k+1})$$

- 对光滑部分做显式的梯度下降，对非光滑部分做隐式的梯度下降

步长选取

- 当f 为梯度 L-利普希茨连续函数时，可取固定步长 $t_k = t \leqslant \frac{1}{L}$. 当 L 未知时可使用线搜索准则

$$f(x^{k+1}) \leqslant f(x^k) + \nabla f(x^k)^\top (x^{k+1} - x^k) + \frac{1}{2t_k}\|x^{k+1} - x^k\|^2$$

- 利用 BB 步长作为 t_k 的初始估计并用非单调线搜索进行校正

$$\alpha_{\mathrm{BB1}}^k = \frac{(s^{k-1})^\top y^{k-1}}{(y^{k-1})^\top y^{k-1}} \quad \text{或} \quad \alpha_{\mathrm{BB2}}^k = \frac{(s^{k-1})^\top s^{k-1}}{(s^{k-1})^\top y^{k-1}}$$

其中 $s^{k-1} = x^k - x^{k-1}$ 以及 $y^{k-1} = \nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})$

- 可构造如下适用于近似点梯度法的非单调线搜索准则

$$\psi(x^{k+1}) \leq C^k - \frac{c_1}{2t_k}\|x^{k+1} - x^k\|^2$$

应用举例: LASSO 问题

- 考虑用近似点梯度法求解 LASSO 问题

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

- 令 $f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2, h(x) = \mu\|x\|_1$, 则

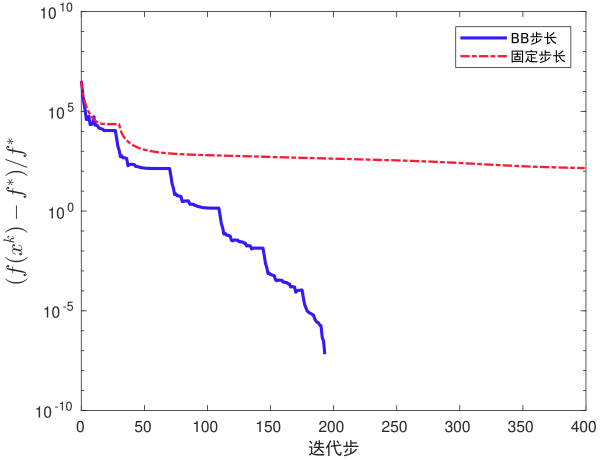
$$\nabla f(x) = A^\top(Ax - b)$$
$$\mathrm{prox}_{t_k h}(x) = \mathrm{sign}(x)\max\{|x| - t_k\mu, 0\}$$

- 相应的迭代格式为

$$y^k = x^k - t_k A^\top(Ax^k - b)$$
$$x^{k+1} = \mathrm{sign}(y^k)\max\{|y^k| - t_k\mu, 0\}$$

即第一步做梯度下降，第二步做收缩

- 使用 BB 步长加速收敛



10^{10}
10^{5}
10^{0}
10^{-5}
10^{-10}
$(f(x^k) - f^*)/f^*$
0
50
100
150
200
250
300
350
400
迭代步
BB步长
固定步长

应用举例: 低秩矩阵恢复

- 考虑低秩矩阵恢复模型

$$\min_{X\in\mathbb{R}^{m\times n}} \quad \mu\|X\|_* + \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in\Omega}(X_{ij}-M_{ij})^2$$

- 令

$$f(X)=\frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in\Omega}(X_{ij}-M_{ij})^2, \quad h(X)=\mu\|X\|_*$$

- 定义矩阵

$$P_{ij}=\begin{cases}1, & (i,j)\in\Omega\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

则

$$f(X)=\frac{1}{2}\|P\odot(X-M)\|_F^2$$

应用举例: 低秩矩阵恢复

- 进一步可以得到

$$
\begin{aligned}
\nabla f(X) &= P \odot (X - M) \\
\mathrm{prox}_{t_k h}(X) &= U\mathrm{Diag}(\max\{|d| - t_k\mu, 0\})V^\top
\end{aligned}
$$

- 得到近似点梯度法的迭代格式

$$
\begin{aligned}
Y^k &= X^k - t_k P \odot (X^k - M) \\
X^{k+1} &= \mathrm{prox}_{t_k h}(Y^k)
\end{aligned}
$$

- **假设 7.1** 为了保证近似点梯度算法的收敛性
  - f 在 $\mathbb{R}^n$ 上是凸的; ∇f 为 L-利普希茨连续，即

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leqslant L\|x - y\|, \quad \forall x, y$$

  - h 是适当的闭凸函数 (因此 $_{th}$ 的定义是合理的)
  - 函数 $\psi(x) = f(x) + h(x)$ 的最小值 ψ^* 是有限的，并且在点 x^* 处可取到 (并不要求唯一)

- **定理 7.3** 在假设 7.1 下，取定步长为 $t_k = t \in (0, \frac{1}{L}]$, 设 $\{x^k\}$ 为迭代产生序列，则

$$\psi(x^k) - \psi^* \leqslant \frac{1}{2kt}\|x^0 - x^*\|^2$$

目录

典型问题形式

- 考虑如下复合优化问题

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

- $f(x)$ 是连续可微的凸函数，且梯度是利普西茨连续的

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \le L\|x-y\|$$

- $h(x)$ 是适当的闭凸函数，且临近算子

$$\mathrm{prox}_h(x) =_{u\in\mathrm{dom}h} \left\{h(u) + \frac{1}{2}\|x-u\|^2\right\}$$

- 近似点梯度法

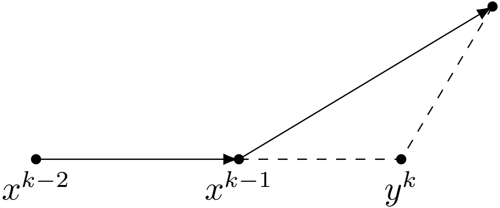
$$x^{k+1} = \mathrm{prox}_{t_k h}(x^k - t_k \nabla f(x^k))$$

在步长取常数 $t_k = 1/L$ 时，收敛速度为 $(1/k)$

Nesterov 加速算法简史

- Nesterov 分别在 1983 年、1988 年和 2005 年提出了三种改进的一阶算法，收敛速度能达到 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$
- Beck 和 Teboulle 在 2008 年提出了 FISTA 算法, 第一步沿着前两步的计算方向计算一个新点，第二步在该新点处做一步近似点梯度迭代

$$x^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(y^k - t_k \nabla f(y^k))$$



FISTA 的等价形式

输入$x^0 = x^{-1} \in \mathbb{R}^n, k \leftarrow 1$
while 未达到收敛准则 **do**
计算 $y^k = x^{k-1} + \frac{k-2}{k+1}(x^{k-1} - x^{k-2})$
选取 $t_k = t \in (0, 1/L]$，计算 $x^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(y^k - t_k \nabla f(y^k))$
$k \leftarrow k+1$
end while

===========

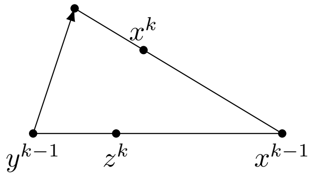
输入$x^0 = x^{-1} \in \mathbb{R}^n, k \leftarrow 1$
while 未达到收敛准则 **do**
计算 $y^k = (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k v^{k-1}$
选取 t_k，计算 $x^k = \mathrm{prox}_{t_k h}(y^k - t_k \nabla f(y^k))$
计算 $v^k = x^{k-1} + \frac{1}{\gamma_k}(x^k - x^{k-1})$
$k \leftarrow k+1$
end while

- **第二类 Nesterov 加速算法**

$$
\begin{aligned}
z^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^{k-1} \\
y^k &= \mathrm{prox}_{(t_k/\gamma_k)h}\left(y^{k-1} - \frac{t_k}{\gamma_k}\nabla f(z^k)\right) \\
x^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^k
\end{aligned}
$$

- **三个序列 $\{x^k\}$，$\{y^k\}$ 和 $\{z^k\}$ 都可以保证在定义域内**

$$y^k = \mathrm{prox}_{(t_k/\gamma_k)h}(y^{k-1} - (t_k/\gamma_k)\nabla f(z^k))$$



- **第三类 Nesterov 加速算法**

$$
\begin{aligned}
z^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^{k-1} \\
y^k &= \operatorname{prox}_{(t_k \sum_{i=1}^k 1/\gamma_i)h}\left(-t_k \sum_{i=1}^k \frac{1}{\gamma_i} \nabla f(z^i)\right) \\
x^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^k
\end{aligned}
$$

- **计算 y^k 时需要利用全部已有的 $\{\nabla f(z^i)\}, i = 1, 2, \cdots, k$**
- **取 $\gamma_k = \frac{2}{k+1}$，$t_k = \frac{1}{L}$ 时，也有 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ 的收敛速度**

针对非凸问题的 Nesterov 加速算法

- 考虑 $f(x)$ 是非凸函数，但可微且梯度是利普希茨连续
- 非凸复合优化问题的加速梯度法框架

$$
\begin{aligned}
z^k &= \gamma_k y^{k-1} + (1-\gamma_k) x^{k-1} \\
y^k &= \mathrm{prox}_{\lambda_k h}\left(y^{k-1} - \lambda_k \nabla f(z^k)\right) \\
x^k &= \mathrm{prox}_{t_k h}\left(z^k - t_k \nabla f(z^k)\right)
\end{aligned}
$$

- 当 λ_k 和 t_k 取特定值时，它等价于第二类 Nesterov 加速算法
- 当 f 为凸函数，收敛速度为 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$; 当 f 为非凸函数，收敛速度为 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$

应用举例: LASSO 问题求解

- 考虑 LASSO 问题

$$\min_{x} \quad \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2+\mu\|x\|_1$$

- FISTA 算法可以由下面的迭代格式给出

$$\begin{aligned} y^k &= x^{k-1}+\frac{k-2}{k+1}(x^{k-1}-x^{k-2}) \\ w^k &= y^k-t_kA^\top(Ay^k-b) \\ x^k &= \operatorname{sign}(w^k)\max\{|w^k|-t_k\mu,0\} \end{aligned}$$

- 与近似点梯度算法相同，由于最后一步将 w^k 中绝对值小于 $t_k\mu$ 的分量置零，该算法能够保证迭代过程中解具有稀疏结构

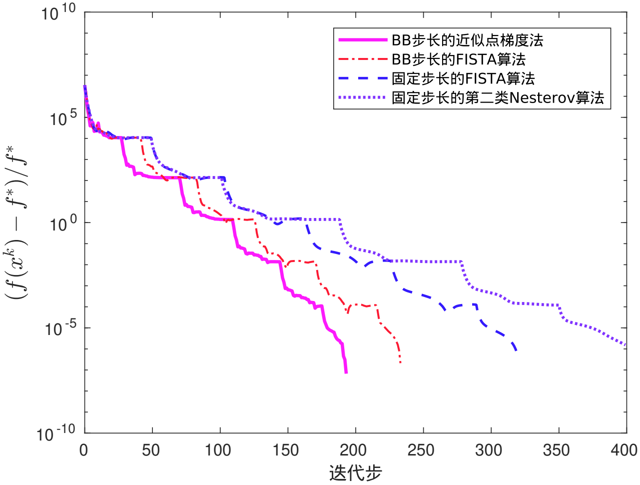
- **第二类 Nesterov 加速算法**

$$
\begin{aligned}
z^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^{k-1} \\
w^k &= y^{k-1} - \frac{t_k}{\gamma_k} A^\top (Az^k - b) \\
y^k &= \operatorname{sign}(w^k) \max\left\{ |w^k| - \frac{t_k}{\gamma_k}\mu, 0 \right\} \\
x^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^k
\end{aligned}
$$

- **第三类 Nesterov 加速算法**

$$
\begin{aligned}
z^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^{k-1} \\
w^k &= -t_k \sum_{i=1}^{k} \frac{1}{\gamma_i} A^\top (Az^i - b) \\
y^k &= \operatorname{sign}(w^k) \max\left\{ |w^k| - t_k \sum_{i=1}^{k} \frac{1}{\gamma_i}\mu, 0 \right\} \\
x^k &= (1-\gamma_k)x^{k-1} + \gamma_k y^k
\end{aligned}
$$

- 取$\mu = 10^{-3}$，步长 $t = \frac{1}{L}$，这里 $L = \lambda_{\max}(A^\top A)$



收敛性分析

- **定理 7.5** 在假设 7.1 下，取定步长 $t_k = t \in (0, 1/L]$．设 $\{x^k\}$ 是由近似点梯度法迭代产生的序列，则

$$\psi(x^k) - \psi^* \leq \frac{1}{2kt}\|x^0 - x^*\|^2$$

- **推论 7.1** 在假设 7.1 下，当用 FISTA 算法求解凸复合优化问题时，若迭代点 x^k, y^k，步长 t_k 以及组合系数 γ_k 满足一定条件，则

$$\psi(x^k) - \psi(x^*) \leq \frac{C}{k^2}$$

其中 C 仅与函数 f，初始点 x^0 的选取有关．特别地，采用线搜索的 FISTA 算法具有 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ 的收敛速度

目录

近似点算法

- 考虑一般形式的优化问题
$$\min_x \quad \psi(x)$$
- ψ 是一个适当的闭凸函数，并不要求连续或可微
- 次梯度法求解收敛较慢，且收敛条件苛刻
- 近似点梯度法做隐性的梯度下降
$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \mathrm{prox}_{t_k\psi}(x^k) \\ &= \arg\min_u \left\{ \psi(u) + \frac{1}{2t_k}\|u - x^k\|_2^2 \right\} \end{aligned}$$
  - $\psi(x)$ 的邻近算子一般需要通过迭代求解
  - 目标函数强凸，相比原问题更利于迭代法的求解

FISTA 算法加速

- 用 FISTA 算法对近似点算法进行加速，其迭代格式为

$$x^k = \operatorname{prox}_{t_k\psi}\left(x^{k-1} + \gamma_k \frac{1-\gamma_{k-1}}{\gamma_{k-1}}(x^{k-1} - x^{k-2})\right)$$

- 第二类 Nesterov 加速算法的迭代格式可以写成

$$v^k = \operatorname{prox}_{(t_k/\gamma_k)\psi}(v^{k-1}), \quad x^k = (1-\gamma_k)\, x^{k-1} + \gamma_k v^k$$

- 关于算法参数的选择有两种策略
  - 固定步长 $t_k = t$ 以及 $\gamma_k = \frac{2}{k+1}$
  - 可变步长 t_k，当 $k = 1$ 时取 $\gamma_1 = 1$；当 $k > 1$ 时，γ_k 来自 $\frac{(1-\gamma_k)t_k}{\gamma_k^2} = \frac{t_{k-1}}{\gamma_{k-1}^2}$

- 考虑具有如下形式的优化问题

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

- 例 7.4 一些常见例子
  - 当 h 是单点集 $\{b\}$ 的示性函数时，等价于线性等式约束优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad f(x) \quad \text{s.t.} \quad Ax=b$$

  - 当 h 是凸集 C 上的示性函数时，等价于凸集约束问题

$$\min \quad f(x) \quad \text{s.t.} \quad Ax\in C$$

  - 当 $h(y)=\|y-b\|$ 时，等价于正则优化问题

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

对偶问题

- **原问题的增广拉格朗日函数法**

$$
\begin{aligned}
(x^{k+1}, y^{k+1}) &= \underset{x,y}{\operatorname{argmin}} \left\{ f(x) + h(y) + \frac{t_k}{2} \|Ax - y + z^k/t_k\|_2^2 \right\} \\
z^{k+1} &= z^k + t_k(Ax^{k+1}k - y^{k+1})
\end{aligned}
$$

- **对偶问题**

$$
\max \quad \psi(z) = \inf_{x,y} L(x, y, z) = -f^*(-A^\top z) - h^*(z)
$$

近似点算法

$$
z^{k+1} = \operatorname{prox}_{t\psi}(z^k) = \arg\min_z \left\{ f^*(-A^\top z) + h^*(z) + \frac{1}{2t_k} \|z - z^k\|_2^2 \right\}
$$

- **对原问题用增广拉格朗日函数法 $\Leftrightarrow$ 对对偶问题用近似点算法**

应用举例: LASSO 问题

- 考虑 LASSO 问题

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

- 引入变量 $y = Ax - b$，等价地转化为

$$\min_{x,y} \quad f(x,y) = \mu\|x\|_1 + \frac{1}{2}\|y\|_2^2 \quad \text{s.t.} \quad Ax - y - b = 0$$

- 采用近似点算法进行求解，其第 k 步迭代为

$$(x^{k+1}, y^{k+1}) \approx \arg\min_{(x,y)\in\mathbb{D}} \left\{ f(x,y) + \frac{1}{2t_k}(\|x-x^k\|_2^2 + \|y-y^k\|_2^2) \right\}$$

其中 $\mathbb{D} = \{(x,y) \mid Ax - y = b\}$ 为可行域，t_k 为步长

应用举例: LASSO 问题

- 除了直接求解，一种比较实用的方式是通过对偶问题的解来构造 (x^{k+1}, y^{k+1})
- 引入拉格朗日乘子 z，对偶函数为

$$\begin{aligned}\Phi_k(z) = &\inf_x \left\{\mu\|x\|_1 + z^\top Ax + \frac{1}{2t_k}\|x - x^k\|_2^2\right\} \\ &+ \inf_y \left\{\frac{1}{2}\|y\|_2^2 - z^\top y + \frac{1}{2t_k}\|y - y^k\|_2^2\right\} - b^\top z \\ =&\mu\Gamma_{\mu t_k}(x^k - t_k A^\top z) - \frac{1}{2t_k}\left(\|x_k - t_k A^\top z\|_2^2 - \|x_k\|_2^2\right) \\ &- \frac{1}{2(t_k+1)}(\|z\|_2^2 + 2(y^k)^\top z - \|y^k\|_2^2) - b^\top z\end{aligned}$$

其中

$$\Gamma_{\mu t_k}(u) = \inf_x \left\{\|x\|_1 + \frac{1}{2\mu t_k}\|x - u\|_2^2\right\}$$

应用举例: LASSO 问题

- 记函数 $q_{\mu t_k}:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ 为

$$q_{\mu t_k}(v)=\begin{cases}\frac{v^2}{2\mu t_k}, & |v|\le t\\ |v|-\frac{\mu t_k}{2}, & |v|>t\end{cases}$$

- 易知 $\Gamma_{\mu t_k}(u)$ 是关于 u 的连续可微函数且导数为

$$\nabla_u\Gamma_{\mu t_k}(u)=u-\mathrm{prox}_{\mu t_k\|x\|_1}(u)$$

- 对偶问题为

$$\min_z \quad \Phi_k(z)$$

应用举例: LASSO 问题

- 设对偶问题的逼近最优解为 z^{k+1}，根据最优性条件有

$$\begin{cases} x^{k+1} = \mathrm{prox}_{\mu t_k \|x\|_1}(x^k - t_k A^T z^{k+1}) \\ y^{k+1} = \dfrac{1}{t_k+1}(y^k + t_k z^{k+1}) \end{cases}$$

- 在第 k 步迭代，LASSO 问题的近似点算法的迭代格式写为

$$\begin{cases} z^{k+1} \approx \arg\max_z \quad \Phi_k(z) \\ x^{k+1} = \mathrm{prox}_{\mu t_k \|x\|_1}(x^k - t_k A^\top z^{k+1}) \\ y^{k+1} = \dfrac{1}{t_k+1}(y^k + t_k z^{k+1}) \end{cases}$$

- 根据 $\Phi_k(z)$ 的连续可微性，可以调用梯度法进行求解

收敛性分析

- **定理 7.6** 设ψ 是闭凸函数 (从而 $\mathrm{prox}_{t\psi}(x)$ 对任意 x 存在且唯一), 最优值 ψ^* 有限且在 x^* 取到, 则对近似点算法有

$$\psi(x^{(k)}) - \psi^* \le \frac{\|x^{(0)} - x^*\|_2^2}{2\sum_{i=1}^k t_i} \qquad \forall\ k \ge 1$$

  - 若 $\sum_i t_i \to \infty$，则算法收敛
  - 若 t_i 固定或在一个正下界以上变化，则收敛速率为 $1/k$
  - t_i 可以任意选取，然而邻近算子的计算代价依赖于 t_i

加速版本的近似点算法

- **FISTA** 取$x^{(0)} = x^{(-1)}$ 且对于 $k > 1$ 有

$$x^{(k)} = \mathrm{prox}_{t_k f}\left(x^{(k-1)} + \theta_k \frac{1-\theta_{k-1}}{\theta_{k-1}}(x^{(k-1)} - x^{(k-2)})\right)$$

- **第二类 Nesterov 加速算法** 取 $x^{(0)} = v^{(0)}$ 且对于 $k \geq 1$

$$v^{(k)} = \mathrm{prox}_{(t_k/\theta_k)f}(v^{(k-1)}), \quad x^{(k)} = (1-\theta_k)x^{(k-1)} + \theta_k v^{(k)}$$

- **固定步长** $t_k = t$ 以及 $\theta_k = 2/(k+1)$
- **变化步长** 选择任意的 $t_k > 0, \theta_1 = 1$，对于任意 $k > 1$，θ_k 满足

$$\frac{(1-\theta_k)t_k}{\theta_k^2} = \frac{t_{k-1}}{\theta_{k-1}^2}$$

收敛性分析

- **定理 7.7** 设ψ 是闭凸函数, 最优值 ψ^* 有限且在 x^* 处取到. 假设参数 t_k, γ_k 按照加速策略选取，那么

$$\psi(x^{(k)}) - \psi^*) \leq \frac{2\|x^{(0)} - x^*\|_2^2}{(2\sqrt{t_1} + \sum_{i=2}^{k}\sqrt{t_i})^2}, \quad k \geq 1$$

  - 若 $\sum_i \sqrt{t_i} \to \infty$，则保证收敛
  - 步长 t_i 取固定值或有正下界时，其收敛速度可达到 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$

目录

问题形式

- 考虑具有如下形式的问题

$$\min_{x \in \mathcal{X}} \quad F(x_1, x_2, \cdots, x_s) = f(x_1, x_2, \cdots, x_s) + \sum_{i=1}^{s} r_i(x_i)$$

  - f 是关于 x 的可微函数，但不一定凸
  - $r_i(x_i)$ 关于 x_i 是适当的闭凸函数，但不一定可微

- 挑战和难点
  - 在非凸问题上，很多针对凸问题设计的算法通常会失效
  - 目标函数的整体结构十分复杂，变量的更新需要很大计算量

问题形式

- 例 7.5 设参数 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_G)\in\mathbb{R}^p$，分组 LASSO 模型

$$\min_x \quad \frac{1}{2n}\|b-Ax\|_2^2+\lambda\sum_{i=1}^{G}\sqrt{p_i}\|x_i\|_2$$

- 例 7.6 设 $b\in\mathbb{R}^m$ 是已知的观测向量，低秩矩阵恢复模型

$$\min_{X,Y} \quad \frac{1}{2}\|\mathcal{A}(XY)-b\|_2^2+\alpha\|X\|_F^2+\beta\|Y\|_F^2$$

- 例 7.7 设 M 是已知的矩阵，非负矩阵分解模型

$$\min_{XY\geq 0} \quad \frac{1}{2}\|XY-M\|_F^2+\alpha r_1(X)+\beta r_2(Y)$$

变量更新方式

- 按照$x_1, x_2, \cdots, x_s$ 的次序依次固定其他 $(s-1)$ 块变量极小化 F
- 辅助函数

$$f_i^k(x_i) = f(x_1^k, \cdots, x_{i-1}^k, x_i, x_{i+1}^{k-1}, \cdots, x_s^{k-1}),$$

- 在每一步更新中，通常使用以下三种更新格式之一

$$x_i^k = \mathop{\arg\min}_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ f_i^k(x_i) + r_i(x_i) \right\} \tag{1}$$

$$x_i^k = \mathop{\arg\min}_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ f_i^k(x_i) + \frac{L_i^{k-1}}{2} \|x_i - x_i^{k-1}\|_2^2 + r_i(x_i) \right\} \tag{2}$$

$$x_i^k = \mathop{\arg\min}_{x_i \in \mathcal{X}_i^k} \left\{ \langle \hat{g}_i^k, x_i - \hat{x}_i^{k-1} \rangle + \frac{L_i^{k-1}}{2} \|x_i - \hat{x}_i^{k-1}\|_2^2 + r_i(x_i) \right\} \tag{3}$$

算法格式

选择两组初始点 $(x_1^{-1}, x_2^{-1}, \cdots, x_s^{-1}) = (x_1^0, x_2^0, \cdots, x_s^0)$
for $k = 1, 2, \cdots$ **do**
for $k = 1, 2, \cdots$ **do**
更新 x_i^k
end for
if 满足停机条件 **then**
返回 $(x_1^k, x_2^k, \cdots, x_s^k)$，算法终止
end if
end for
===========

- 三种格式都有其适用的问题，特别是子问题是否可写出显式解
- 在每一步更新中，三种迭代格式对不同自变量块可以混合使用

算法格式

- BCD 算法的子问题可采用三种不同的更新格式，这三种格式可能会产生不同的迭代序列，可能会收敛到不同的解，坐标下降算法的数值表现也不相同
- 格式(1)是最直接的更新方式，保证整个迭代过程的目标函数值是下降的．然而由于 f 的形式复杂，子问题求解难度较大．在收敛性方面，格式(1)在强凸问题上可保证目标函数收敛到极小值，但在非凸问题上不一定收敛
- 格式(2) (3) 则是对格式(1)的修正，不保证迭代过程目标函数的单调性，但可以改善收敛性结果．使用格式(2)可使得算法收敛性在函数 F 为非严格凸时有所改善
- 格式(3)实质上为目标函数的一阶泰勒展开近似，在一些测试问题上有更好的表现，可能的原因是使用一阶近似可以避开一些局部极小值点．此外，格式(3)的计算量很小，比较容易实现

例 7.8

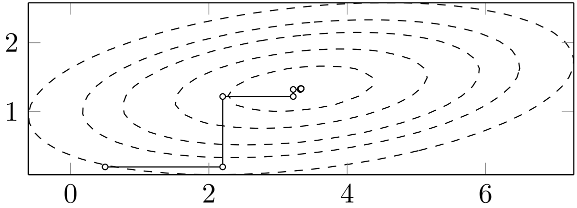
- 考虑二元二次函数的优化问题

$$\min \quad f(x,y) = x^2 - 2xy + 10y^2 - 4x - 20y$$

- 采用格式(1)的分块坐标下降法

$$x^{k+1} = 2 + y^k \quad y^{k+1} = 1 + \frac{x^{k+1}}{10}$$

- 当初始点为 $(x,y) = (0.5, 0.2)$ 时的迭代点轨迹



不收敛反例

- 对于非凸函数$f(x)$，分块坐标下降法可能失效. 考虑

$$F(x_1,x_2,x_3) = -x_1x_2 - x_2x_3 - x_3x_1 + \sum_{i=1}^{3}[(x_i-1)_+^2 + (-x_i-1)_+^2]$$

- 设 $\varepsilon > 0$，初始点取为

$$x^0 = \left(-1-\varepsilon, 1+\frac{\varepsilon}{2}, -1-\frac{\varepsilon}{4}\right)$$

容易验证迭代序列满足

$$x^k = (-1)^k \cdot (-1,1,-1) + (-\frac{1}{8})^k \cdot \left(-\varepsilon, \frac{\varepsilon}{2}, -\frac{\varepsilon}{4}\right)$$

- 迭代序列有两个聚点 $(-1,1,-1)$ 与 $(1,-1,1)$，但都不是 F 的稳定点

应用举例: LASSO 问题求解

- 使用分块坐标下降法来求解 LASSO 问题

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

- 将自变量 x 记为 $x = [x_i, \bar{x}_i^\top]^\top$, 矩阵 A 在第 i 块的更新记为 $A = [a_i \bar{A}_i]$
- 应用格式(1), 替换 $c_i = b - \bar{A}_i \bar{x}_i$, 原问题等价于

$$\min_{x_i} \quad f_i(x_i) = \mu|x_i| + \frac{1}{2}\|a_i\|^2 {x_i}^2 - a_i^\top c_i x_i$$

- 可直接写出最小值点

$$x_i^k =_{x_i} f_i(x_i) = \begin{cases} \frac{a_i^\top c_i - \mu_i}{\|a_i\|^2}, & a_i^\top c_i > \mu \\ \frac{a_i^\top c_i + \mu_i}{\|a_i\|^2}, & a_i^\top c_i < -\mu \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

应用举例: 非负矩阵分解

- 考虑最基本的非负矩阵分解问题

$$\min_{X,Y\geq 0} \quad f(X,Y)=\frac{1}{2}\|XY-M\|_F^2$$

- 计算梯度

$$\frac{\partial f}{\partial X}=(XY-M)Y^\top, \quad \frac{\partial f}{\partial Y}=X^\top(XY-M)$$

- 应用格式(3)，当 $r_i(X)$ 为凸集示性函数时即是求解到该集合的投影，因此得到分块坐标下降法如下

$$\begin{aligned} X^{k+1} &= \max\{X^k - t_k^x(X^kY^k-M)(Y^k)^\top, 0\} \\ Y^{k+1} &= \max\{Y^k - t_k^y(X^k)^\top(X^kY^k-M), 0\} \end{aligned}$$

目录

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

- 设f，h 是闭凸函数，考虑如下形式的问题

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

- 引入新变量 $y = Ax$，考虑问题

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

- 拉格朗日函数为

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

- 对偶问题

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

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

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

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

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

  - 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

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

- 或更一般地，

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

- 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

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

- 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

$$
\begin{aligned}
x^{k+1} &= \arg\min_x \left\{ f(x) + (z^k)^\top Ax \right\} \\
y^{k+1} &= \mathrm{prox}_{t^{-1}h}\left(\frac{z^k}{t} + Ax^{k+1}\right) \\
&=_y \left\{ h(y) - (z^k)^\top (y - Ax^{k+1}) + \frac{t}{2}\|Ax^{k+1} - y\|_2^2 \right\} \\
z^{k+1} &= z^k + t(Ax^{k+1} - y^{k+1})
\end{aligned}
$$

交替极小方法

- 考虑等价问题

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

- 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

$$x^{k+1}=\arg\min_x L(x,y^k,z^k)$$
$$y^{k+1}=\arg\min_y {\color{red}L_t}(x^{k+1},y,z^k)$$
$$z^{k+1}=z^k+t(Ax^{k+1}-y^{k+1})$$

- 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

例 7.9

- 假设f 是强凸函数，$\|\cdot\|$ 是任意一种范数，考虑

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

- 对应原始问题我们有 $h(y) = \|y - b\|$

$$h^*(z) = \begin{cases} b^\top z & \|z\|_* \leq 1 \\ +\infty & \text{其他} \end{cases} \qquad \mathrm{prox}_{th^*}(x) = \mathcal{P}_{\|z\|_* \leq 1}(x - tb)$$

- 从而对偶问题为

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

应用对偶近似点梯度法，更新如下

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

$$z^{k+1} = \mathcal{P}_{\|z\|_* \leq 1}(z^k + t(Ax^{k+1} - b))$$

例 7.9

- **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**

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

$$y^{k+1} = \arg\min_{y} \; f(x^{k+1}) + \|y\| + (z^k)^\top (Ax^{k+1} - b - y) + \frac{t}{2}\|Ax^{k+1} - b - y\|_2^2$$

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

例 7.10

- 假设f 是强凸函数，考虑

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

- 根据 $\|\cdot\|_2$ 的共轭函数定义，对偶问题形式如下

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

- 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

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \arg\min_x \left\{ f(x) + (\sum_{i=1}^{p} B_i^\top z_i)^\top x \right\} \\ z_i^{k+1} &= \mathcal{P}_{C_i}(z_i^k + tB_i x^{k+1}), i = 1, 2, \cdots, p \end{aligned}$$

例 7.11

- 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

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & x \in C_1 \cap C_2 \cap \cdots \cap C_m \end{array}$$

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

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

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

例 7.11

- 利用 Moreau 分解将迭代格式写成交替极小化方法的形式

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

例 7.12

- 假设f_i 是强凸函数，h_i^* 有易于计算的邻近算子．考虑

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

- 其对偶问题形式如下

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

- 对偶近似点梯度法更新如下

$$x_j^{k+1} = \arg\min_{x_j} \left\{ f_j(x_j) + (\sum_{i=1}^{m} A_{ij} z_i^k)^\top x_j \right\}, \quad j = 1, 2, \cdots, n$$

$$z_i^{k+1} = \mathrm{prox}_{th_i^*} \left(z_i + t \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j^{k+1} \right), \quad i = 1, 2, \cdots, m$$

鞍点问题

- 令 f, h 是适当的闭凸函数. 考虑原始问题

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

- 由于 h 有自共轭性，将问题变形为

$$(\mathrm{L_{PD}}) \quad \min_x \ \max_z \quad \psi_{PD}(x,z) = f(x) - h^*(z) + z^\top Ax$$

- 另一种常用的鞍点问题定义方式构造拉格朗日函数．问题

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

- 相应的鞍点问题形式如下

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

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
- 以求解问题 $(\mathrm{L_{PD}})$ 为例，PDHG 算法交替更新原始变量以及对偶变量，其迭代格式如下

$$
\begin{aligned}
z^{k+1} &= \arg\max_{z} \left\{ -h^*(z) + \langle Ax^k, z - z^k \rangle - \frac{1}{2\delta_k}\|z - z^k\|_2^2 \right\} \\
&= \mathrm{prox}_{\delta_k h^*}(z^k + \delta_k A x^k) \\
x^{k+1} &= \arg\min_{x} \left\{ f(x) + (z^{k+1})^\top A(x - x^k) + \frac{1}{2\alpha_k}\|x - x^k\|_2^2 \right\} \\
&= \mathrm{prox}_{\alpha_k f}(x^k - \alpha_k A^\top z^{k+1})
\end{aligned}
$$

- 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：

$$
\begin{aligned}
z^{k+1} &= \mathrm{prox}_{\delta_k h^*}(z^k + \delta_k A y^k) \\
x^{k+1} &= \mathrm{prox}_{\alpha_k f}(x^k - \alpha_k A^\top z^{k+1}) \\
y^{k+1} &= 2x^{k+1} - x^k
\end{aligned}
$$

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

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

- 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

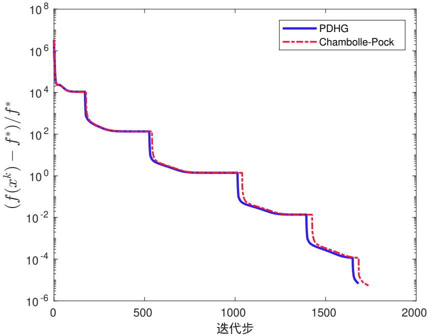
$$z^{k+1} = \mathrm{prox}_{\delta_k h^*}(z^k + \delta_k Ax^k) = \frac{1}{\delta_k + 1}\left(z^k + \delta_k Ax^k - \delta_k b\right)$$

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

LASSO 问题求解

- Chambolle-Pock 算法格式为

$$
\begin{aligned}
z^{k+1} &= \frac{1}{\delta_k + 1}(z^k + \delta_k A y^k - \delta_k b) \\
x^{k+1} &= \operatorname{prox}_{\alpha_k \mu \|\cdot\|_1}(x^k - \alpha_k A^\top z^{k+1}) \\
y^{k+1} &= 2x^{k+1} - x^k
\end{aligned}
$$



TV-L^1 模型

- 考虑去噪情形下的 TV-L^1 模型（即 $\mathcal{A}$ 为矩阵空间的恒等算子）

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

- 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 $\|\cdot\|$ 的定义，有

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

- 取 D 为相应的线性算子，并取

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

- 相应的鞍点问题如下

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

- 根据共轭函数的定义

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

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

$$\min_U \max_V \quad f(U) + \langle V, DU\rangle - I_{\mathcal{V}}(V)$$

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

$$\begin{aligned} U^{k+1} &= \operatorname{prox}_{tf}(U^k + tGV^{k+1}) \\ &= \arg\min_U \left\{ \lambda \|U - B\|_1 + \langle V^{k+1}, DU \rangle + \frac{1}{2t} \|U - U^k\|_F^2 \right\} \end{aligned}$$

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

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

目录

典型问题形式

- 考虑如下凸问题

$$\begin{aligned} \min_{x_1,x_2} \quad & f_1(x_1) + f_2(x_2) \\ \text{s.t.} \quad & A_1x_1 + A_2x_2 = b \end{aligned} \tag{4}$$

- f_1，f_2 是适当的闭凸函数，但不要求是光滑的
- 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

问题形式举例

- 例 7.13 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

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

- 例 7.14 带线性变换的无约束优化问题

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

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

- 例 7.15 凸集$C \subset \mathbb{R}^n$ 上的约束优化问题

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

引入约束 $z = Ax$，那么问题转化为

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

- 例 7.16 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(4)的增广拉格朗日函数

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

- 增广拉格朗日函数法为如下更新

$$\begin{aligned} (x_1^{k+1}, x_2^{k+1}) &= \arg\min_{x_1, x_2} L_\rho(x_1, x_2, y^k) \\ y^{k+1} &= y^k + \tau\rho(A_1x_1^{k+1} + A_2x_2^{k+1} - b) \end{aligned}$$

- Alternating direction method of multipliers, ADMM
- 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
- 其迭代格式可以总结如下

$$
\begin{aligned}
x_1^{k+1} &=_{x_1} L_\rho(x_1, x_2^k, y^k) \\
x_2^{k+1} &= \arg\min_{x_2} L_\rho(x_1^{k+1}, x_2, y^k) \\
y^{k+1} &= y^k + \tau\rho(A_1 x_1^{k+1} + A_2 x_2^{k+1} - b)
\end{aligned}
$$

原问题最优性条件

- 问题(4)的拉格朗日函数为

$$L(x_1, x_2, y) = f_1(x_1) + f_2(x_2) + y^\top(A_1x_1 + A_2x_2 - b)$$

- 根据最优性条件定理，若 x_1^*, x_2^* 为问题(4)的最优解，y^* 为对应的拉格朗日乘子，则以下条件满足

$$0 \in \partial_{x_1} L(x_1^*, x_2^*, y^*) = \partial f_1(x_1^*) + A_1^\top y^* \tag{5a}$$

$$0 \in \partial_{x_2} L(x_1^*, x_2^*, y^*) = \partial f_2(x_2^*) + A_2^\top y^* \tag{5b}$$

$$A_1x_1^* + A_2x_2^* = b \tag{5c}$$

- 条件(5c)又称为原始可行性条件，条件(5a)和条件(5b)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

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

- 根据最优性条件推出

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

- 当 $\tau = 1$ 时知

$$0 \in \partial f_2(x_2^k) + A_2^\top y^k$$

ADMM 单步迭代最优性条件

- 由x_1 的更新公式

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

- 假设子问题能精确求解，根据最优性条件

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

- 当 $\tau = 1$ 时知

$$0 \in \partial f_1(x_1^k) + A_1^\top (y^k + \rho A_2(x_2^{k-1} - x_2^k))$$

ADMM 单步迭代最优性条件

- 对比条件(5a)可知多出来的项为 $A_1^\top A_2(x_2^{k-1}-x_2^k)$，因此要检测对偶可行性只需要检测残差

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

- 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

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

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
- 考虑第一个子问题

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

- 当子问题目标函数可微时，线性化为

$$x_1^{k+1} = \arg\min_{x_1} \left\{ (\nabla f_1(x_1^k) + \rho A_1^\top (A_1 x_1^k - v^k))^\top x_1 + \frac{1}{2\eta_k}\|x_1 - x^k\|_2^2 \right\}$$

  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

$$x_1^{k+1} =_{x_1} \left\{ f_1(x_1) + \rho(A_1^\top (A_1 x_1^k - v^k))^\top x_1 + \frac{1}{2\eta_k}\|x_1 - x^k\|_2^2 \right\}$$

  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 的更新等价于求解线性方程组

$$(C^\top C + \rho A_1^\top A_1)x_1 = C^\top d + \rho A_1^\top v^k$$

- 虽然子问题有显式解，但是每步求解的复杂度仍然比较高
- 首先对 $C^\top C + \rho A_1^\top A_1$ 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 $C^\top C + \rho A_1^\top A_1$ 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

- 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 $A_1^\top A_1$，此时子问题可替换为

$$x_1^{k+1} = \arg\min_{x_1} \left\{ f_1(x_1) + \frac{\rho}{2}\|A_1x_1 - v^k\|_2^2 + \frac{\rho}{2}(x_1 - x^k)^\top (D - A_1^\top A_1)(x_1 - x^k) \right\}.$$

这种方法也称为**优化转移**

- 通过选取合适的 D，当计算 $\arg\min_{x_1} \left\{ f_1(x_1) + \frac{\rho}{2} x_1^\top D x_1 \right\}$ 明显比计算 $\arg\min_{x_1}\{f_1(x_1) + \frac{\rho}{2} x_1^\top A_1^\top A_1 x_1\}$ 要容易时，优化转移简化子问题的计算
- 特别地，当 $D = \dfrac{\eta_k}{\rho} I$ 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．
- 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

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

- 常见的选择为 $\mu = 10, \gamma_p = \gamma_d = 2$

多块问题的 ADMM

- 考虑有多块变量的情形

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

- 多块 ADMM 迭代格式为

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

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

应用举例: LASSO 问题

- 考虑 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

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \arg\min_x \left\{ \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 + \frac{\rho}{2}\|x - z^k + y^k/\rho\|_2^2 \right\} \\ &= (A^\top A + \rho I)^{-1}(A^\top b + \rho z^k - y^k) \end{aligned} \tag{6}$$

应用举例: LASSO 问题

- 交替方向乘子法迭代格式为

$$
\begin{aligned}
z^{k+1} &= \arg\min_z \left\{ \mu\|z\|_1 + \frac{\rho}{2}\|x^{k+1} - z + y^k/\rho\|^2 \right\} \\
&= \operatorname{prox}_{(\mu/\rho)\|\cdot\|_1}\left(x^{k+1} + y^k/\rho\right) \\
y^{k+1} &= y^k + \tau\rho(x^{k+1} - z^{k+1})
\end{aligned}
$$

- 在求解 x 迭代时，可以使用固定的罚因子 ρ，缓存矩阵 $A^\top A + \rho I$ 的初始分解
- 主要运算量来自更新 x 变量时求解线性方程组，复杂度为 $O(n^3)$

应用举例: LASSO 问题

- 考虑 LASSO 问题的对偶问题

$$\begin{array}{ll} \min & b^\top y + \frac{1}{2}\|y\|^2 \\ \text{s.t.} & \|A^\top y\|_\infty \le \mu \end{array}$$

- 引入约束 $A^\top y + z = 0$，可以得到如下等价问题

$$\begin{array}{ll} \min & \underbrace{b^\top y + \frac{1}{2}\|y\|^2}_{f(y)} + \underbrace{I_{\|z\|_\infty \le \mu}(z)}_{h(z)} \\ \text{s.t.} & A^\top y + z = 0 \end{array}$$

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

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

应用举例: LASSO 问题

- 当固定 y, x 时，对 z 的更新即向无穷范数球 $\{z \mid \|z\|_\infty \le \mu\}$ 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

$$(I + \rho AA^\top)y = A(x^k - \rho z^{k+1}) - b$$

- ADMM 迭代格式为

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

- 由于 $m \ll n$，求解 y 更新的线性方程组需要的计算量是 $O(m^3)$

应用举例: 矩阵分离问题

- 考虑矩阵分离问题

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

- 引入乘子 Y 作用在约束 $X+S=M$ 上，得到增广拉格朗日函数

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

- 对于X 子问题

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

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

应用举例: 矩阵分离问题

- 对于S 子问题

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

- 交替方向乘子法的迭代格式为

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

应用举例: 全局一致性优化问题

- 考虑全局一致性优化问题

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

- 增广拉格朗日函数为

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

- 固定 z^k, y_i^k，更新 x_i 的公式为

$$
x_i^{k+1} = \arg\min_x \left\{ \phi_i(x) + \frac{\rho}{2} \|x - z^k + y_i^k / \rho\|^2 \right\}
$$

应用举例: 全局一致性优化问题

- 在一般情况下更新 x_i 的表达式为
$$x_i^{k+1} = \mathrm{prox}_{\phi_i/\rho}(z^k - y_i^k/\rho)$$
- 固定 x_i^{k+1}, y_i^k，关于 z 可以直接写出显式解
$$z^{k+1} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}({x_i}^{k+1} + y_i^k/\rho)$$
- 交替方向乘子法迭代格式为
$$\begin{aligned}
x_i^{k+1} &= \mathrm{prox}_{\phi_i/\rho}(z^k - y_i^k/\rho),\ i = 1, 2, \cdots, N \\
z^{k+1} &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i^{k+1} + y_i^k/\rho) \\
y_i^{k+1} &= {y_i}^k + \tau\rho({x_i}^{k+1} - z^{k+1}),\ i = 1, 2, \cdots, N
\end{aligned}$$

目录

监督学习模型

- 假定(a,b) 服从概率分布 P，其中 a 为输入，b 为标签
- 例如在自动邮件分类任务中，a 表示邮件内容，b 表示邮件为正常邮件或垃圾邮件
- 又例如人脸识别任务中，a 表示人脸的图像信息，b 表示该人脸属于何人
- 实际问题中我们不知道真实的概率分布 P，而是随机采样得到一个数据集 $\mathcal{D}=\{(a_1,b_1),(a_2,b_2),\cdots,(a_N,b_N)\}$。数据集 $\mathcal{D}$ 对应经验分布

$$\hat{P}=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\delta_{a_i,b_i}$$

监督学习模型

- 任务是要给定输入 a 预测标签 b，即决定一个最优的函数 ϕ 使得期望风险 $\mathbb{E}[L(\phi(a), b)]$ 最小，其中 $L(\cdot,\cdot)$ 表示损失函数，函数 ϕ 为某个函数空间中的预测函数

- ℓ_2 损失函数

$$L(x, y) = \frac{1}{2}\|x - y\|_2^2$$

- 若 $x, y \in \mathbb{R}^d$ 为概率分布（即各分量和为 1 的向量），则可定义互熵损失函数

$$L(x, y) = \sum_{i=1}^{d} x_i \log \frac{x_i}{y_i}$$

监督学习模型

- 为了缩小 目标函数的范围，需要将 $\phi(\cdot)$ 参数化为 $\phi(\cdot;x)$
- 线性函数

$$\phi(a) = pa + q$$

- 深度神经网络

$$\begin{aligned}
\phi_0(a) &= a \\
\hat{\phi}_l(a) &= W_l \phi_{l-1}(a) + b_h, \quad \phi_l(a) = \sigma(\phi_l(a)) \\
\phi(a) &= \hat{\phi}_L(a)
\end{aligned}$$

监督学习模型

- 用经验风险来近似期望风险，即要求解下面的极小化问题

$$\min_{x} \quad \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L(\phi(a_i;x),b_i) = \mathbb{E}_{(a,b)\sim\hat{P}}[L(\phi(a;x),b)]$$

- 记 $f_i(x) = L(\phi(a_i;x),b_i)$，则只需考虑如下随机优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad f(x) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f_i(x)$$

- 由于数据规模巨大，通过采样的方式只计算部分样本的梯度来进行梯度下降

梯度下降算法

- 用假设每一个 $f_i(x)$ 是凸的、可微的
- 可以运用梯度下降算法

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f(x^k)$$

$$\nabla f(x^k) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \nabla f_i(x^k)$$

- 计算 $\nabla f(x^k)$ 需要非常大的计算量

随机梯度下降算法 (SGD)

- SGD 的基本迭代格式为

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f_{s_k}(x^k)$$

其中 s_k 是从 $\{1, 2, \cdots, N\}$ 中随机等可能地抽取的一个样本，α_k 称为步长. 在机器学习和深度学习领域中，更多的时候被称为学习率 (learning rate)

- 随机梯度算法不去计算全梯度 $\nabla f(x^k)$，而是从众多样本中随机抽出一个样本 s_i，然后仅仅计算这个样本处的梯度 $\nabla f_{s_k}(x^k)$，以此作为 $\nabla f(x^k)$ 的近似

- 要保证随机梯度的条件期望恰好是全梯度，即

$$\mathcal{E}_{s_k}[\nabla f_{s_k}(x^k)|x^k] = \nabla f(x^k)$$

小批量随机梯度法

- 实际计算中每次只抽取一个样本 s_k 的做法比较极端，常用的形式是小批量（mini-batch）随机梯度法
- 每次迭代中，随机选择一个元素个数很少的集合 ${}_k \subset \{1, 2, \cdots, N\}$，然后执行迭代格式

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\alpha_k}{|\mathcal{I}_k|} \sum_{s \in \mathcal{I}_k} \nabla f_s(x^k)$$

其中 $|\mathcal{I}_k|$ 表示 ${}_k$ 中的元素个数

随机次梯度法

- 当$f_i(x)$ 是凸函数但不一定可微时，可以用 $f_i(x)$ 的次梯度代替梯度进行迭代，这就是随机次梯度算法.
- 迭代格式为
$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k g^k$$
其中 α_k 为步长，$g^k \in \partial f_{s_k}(x^k)$ 为随机次梯度，其期望为真实的次梯度

动量方法

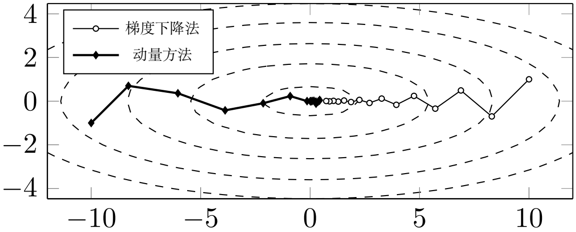
- 在算法迭代时一定程度上保留之前更新的方向，同时利用当前计算的梯度调整最终的更新方向
- 动量方法的具体迭代格式如下

$$
\begin{aligned}
v^{k+1} &= \mu_k v^k - \alpha_k \nabla f_{s_k}(x^k) \\
x^{k+1} &= x^k + v^{k+1}
\end{aligned}
$$

- 在计算当前点的随机梯度 $\nabla f_{s_i}(x^k)$ 后，并不是直接将其更新到变量 x^k 上，而是将其和上一步更新方向 v^k 做线性组合来得到新的更新方向 v^{k+1}

动量方法

- 由动量方法迭代格式立即得出当 $\mu_k = 0$ 时该方法退化成随机梯度下降法. 在动量方法中，参数 μ_k 的范围是 $[0, 1)$，通常取 $\mu_k \geq 0.5$，其含义为迭代点带有较大惯性，每次迭代会在原始迭代方向的基础上做一个小的修正
- 在普通的梯度法中，每一步迭代只用到了当前点的梯度估计，动量方法的更新方向还使用了之前的梯度信息
- 当许多连续的梯度指向相同的方向时，步长就会很大，这从直观上看也是非常合理的



Nesterov 加速算法

- 假设 $f(x)$ 为光滑的凸函数．针对凸问题的 Nesterov 加速算法为

$$
\begin{aligned}
y^{k+1} &= x^k + \mu_k(x^k - x^{k-1}) \\
x^{k+1} &= y^k - \alpha_k \nabla f(y^k)
\end{aligned}
$$

- 针对光滑问题的 Nesterov 加速算法迭代的随机版本为

$$
\begin{aligned}
y^{k+1} &= x^k + \mu_k(x^k - x^{k-1}) \\
x^{k+1} &= y^{k+1} - \alpha_k \nabla f_{s_k}(y^{k+1})
\end{aligned}
$$

  其中 $\mu_k = \frac{k-1}{k+2}$，步长 α_k 是一个固定值或者由线搜索确定

- 二者的唯一区别为随即版本将全梯度 $\nabla f(y^k)$ 替换为随机梯度 $\nabla f_{s_k}(y^{k+1})$

Nesterov 加速算法与动量方法的联系

- 若在第 k 步迭代引入速度变量 $v^k = x^k - x^{k-1}$，再合并原始 Nesterov 加速算法的两步迭代可以得到

$$x^{k+1} = x^k + \mu_k(x^k - x^{k-1}) - \alpha_k \nabla f_k(x^k + \mu_k(x^k - x^{k-1}))$$

- 定义有关 v^{k+1} 的迭代式

$$v^{k+1} = \mu_k v^k - \alpha_k \nabla f_k(x^k + \mu_k v^k)$$

- 于是得到关于 x^k 和 v^k 的等价迭代

$$\begin{aligned} v^{k+1} &= \mu_k v^k - \alpha_k \nabla f_{s_k}(x^k + \mu_k v^k) \\ x^{k+1} &= x^k + v^{k+1} \end{aligned}$$

- 二者的主要差别在梯度的计算上，Nesterov 加速算法先对点施加速度的作用，再求梯度，可以理解为对标准动量方法做了校正

AdaGrad

- 在一般的随机梯度法中，调参是一个很大的难点．我们希望算法能在运行的过程中，根据当前情况自发地调整参数．
- 对无约束光滑凸优化问题，点 x 是问题的解等价于该点处梯度为零向量．但梯度的每个分量收敛到零的速度是不同的．传统梯度算法只有一个统一的步长 α_k 来调节每一步迭代，它没有针对每一个分量考虑
- 当梯度的某个分量较大时，可以推断出在该方向上函数变化比较剧烈，要用小步长；当梯度的某个分量较小时，在该方向上函数比较平缓，要用大步长．AdaGrad 就是根据这个思想设计的

AdaGrad

- 令$g^k = \nabla f_{s_k}(x^k)$，为了记录整个迭代过程中梯度各个分量的累积情况，引入

$$G^k = \sum_{i=1}^{k} g^i \odot g^i$$

从 G^k 的定义可知 G^k 的每个分量表示在迭代过程中，梯度在该分量处的累积平方和．当 G^k 的某分量较大时，我们认为该分量变化比较剧烈，因此应采用小步长，反之亦然．

- AdaGrad 的迭代格式为

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\alpha}{\sqrt{G^k + \varepsilon 1_n}} \odot g^k$$
$$G^{k+1} = G^k + g^{k+1} \odot g^{k+1}$$

- 这里 $\frac{\alpha}{\sqrt{G^k+\varepsilon 1_n}}$ 中的除法和求根运算都是对向量每个分量分别操作的（下同），α 为初始步长，引入 $\varepsilon 1_n$ 这一项是为了防止除零运算

AdaGrad 的收敛阶

- 如果在 AdaGrad 中使用真实梯度 $\nabla f(x^k)$，那么 AdaGrad 也可以看成是一种介于一阶和二阶的优化算法
- 考虑 $f(x)$ 在点 x^k 处的二阶泰勒展开

$$f(x) \approx f(x^k) + \nabla f(x^k)^\top (x - x^k) + \frac{1}{2}(x - x^k)^\top B^k (x - x^k)$$

- 选取不同的 B^k 可以导出不同的优化算法．AdaGrad 是使用一个对角矩阵来作为 B^k．具体地，取

$$B^k = \frac{1}{\alpha}\mathrm{Diag}(\sqrt{G^k + \varepsilon 1_n})$$

时导出的算法就是 AdaGrad

RMSProp

- RMSProp（root mean square propagation）是对 AdaGrad 的一个改进，该方法在非凸问题上可能表现更好．AdaGrad 会累加之前所有的梯度分量平方，这就导致步长是单调递减的，因此在训练后期步长会非常小，计算的开销较大
- RMSProp 提出只需使用离当前迭代点比较近的项，同时引入衰减参数 ρ．具体地，令

$$M^{k+1} = \rho M^k + (1-\rho) g^{k+1} \odot g^{k+1}$$

再对其每个分量分别求根，就得到均方根 (root mean square)

$$R^k = \sqrt{M^k + \varepsilon 1_n}$$

最后将均方根的倒数作为每个分量步长的修正

RMSProp

- RMSProp 迭代格式为

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\alpha}{R^k} \odot g^k$$
$$M^{k+1} = \rho M^k + (1-\rho) g^{k+1} \odot g^{k+1}$$

- 引入参数 ε 同样是为了防止分母为 0 的情况发生．一般取 $\rho = 0.9$, $\alpha = 0.001$
- 可以看到 RMSProp 和 AdaGrad 的唯一区别是将 G^k 替换成了 M^k.

AdaDelta

- AdaDelta 在 RMSProp 的基础上，对历史的 Δx^k 也同样累积平方并求均方根

$$
\begin{aligned}
D^k &= \rho D^{k-1} + (1-\rho)\Delta x^k \odot \Delta x^k \\
T^k &= \sqrt{D^k + \varepsilon 1_n}
\end{aligned}
$$

  然后使用 T^{k-1} 和 R^k 的商对梯度进行校正

$$
\begin{aligned}
\Delta x^k &= -\frac{T^{k-1}}{R^k} \odot g^k \\
x^{k+1} &= x^k + \Delta x^k
\end{aligned}
$$

- AdaDelta 的特点是步长选择较为保守，同时也改善了 AdaGrad 步长单调下降的缺陷

Adam

- Adam 选择了一个动量项进行更新

$$S^k = \rho_1 S^{k-1} + (1-\rho_1) g^k$$

- 类似 RMSProp，Adam 也会记录梯度的二阶矩

$$M^k = \rho_2 M^{k-1} + (1-\rho_2) g^k \odot g^k$$

- 与原始动量方法和 RMSProp 的区别是，由于 S^k 和 M^k 本身带有偏差，Adam 在更新前先对其进行修正

$$\hat{S}^k = \frac{S^k}{1-\rho_1^k}, \quad \hat{M}^k = \frac{M^k}{1-\rho_2^k}$$

- Adam 最终使用修正后的一阶矩和二阶矩进行迭代点的更新

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\alpha}{\sqrt{\hat{M}^k + \varepsilon 1_n}} \odot \hat{S}^k$$

$Q\&A$

$Thank\ you!$

感谢您的聆听和反馈