近似点算法

文再文

北京大学北京国际数学研究中心

教材《最优化：建模、算法与理论》配套电子教案

http://bicmr.pku.edu.cn/~wenzw/optbook.html

致谢：本教案由陈乐恒、邓展望协助准备

提纲

近似点算法

考虑一般形式的优化问题：

$$\min_{x} \quad \psi(x) \tag{1}$$

其中ψ是一个适当的闭凸函数，并不要求连续或可微。

对于不可微的情形，可以使用次梯度法求解，但这种方式收敛较慢，且收敛条件苛刻。我们考虑用近似点梯度法做隐性的梯度下降：

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \operatorname{prox}_{t_k \psi}\left(x^k\right) \\ &= \arg\min_{u} \left\{ \psi(u) + \frac{1}{2t_k} \left\| u - x^k \right\|_2^2 \right\} \end{aligned} \tag{2}$$

- $\psi(x)$的邻近算子一般需要通过迭代求解
- 迭代格式(2)的目标函数强凸，相比原问题更利于迭代法的求解

FISTA算法加速

可以用FISTA算法对近似点算法进行加速，其迭代格式为：

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

第二类Nesterov加速算法的迭代格式可以写成：

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

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 来自下面的方程

$$\frac{(1-\gamma_k)\, t_k}{\gamma_k^2} = \frac{t_{k-1}}{\gamma_{k-1}^2}$$

提纲

考虑具有如下形式的优化问题：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad f(x)+h(Ax) \tag{3}$$

其中 f,h 为适当的闭凸函数, $A\in\mathbb{R}^{m\times n}$

下面给出了优化问题(3)的一些常见例子：

- 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

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

- 当h 是凸集C 上的示性函数时，等价于凸集约束问题

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

- 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

写出上述优化问题的拉格朗日函数：

$$L(x,y,z) = f(x) + h(y) + z^T(Ax - y)$$

则对偶问题为：

$$\max \quad \psi(z) = \inf_{x,y} L(x,y,z) = -f^*(-A^T z) - h^*(z) \tag{4}$$

我们有以下结论：

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

对偶函数的邻近算子

对于对偶问题(4)，近似点算法迭代格式如下

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

事实上也可以写成：$z^{k+1} = \mathrm{prox}_{t\psi}(z^k) = z^k + t^k(A\hat{x}^k - \hat{y})$, 其中

$$(\hat{x}, \hat{y}) = \underset{x,y}{\mathrm{argmin}} \left(f(x) + g(y) + z^T(Ax - y) + \frac{t}{2}||Ax - y||_2^2 \right)$$

也就是说，$\hat{x}, \hat{y}$ 最小化增广拉格朗日函数，近似点算法迭代格式对应增广拉格朗日函数法中的乘子更新。

共轭函数性质

引理

设 $f(x)$ 是适当的闭凸函数，$f^*(y)$ 是其共轭函数，则对任意的 $y \in \mathrm{dom} f^*$ 和 $x \in \mathrm{dom} f$ 有

$$y \in \partial f(x) \Leftrightarrow x \in \partial f^*(y) \tag{5}$$

Proof.

由于 f 是适当闭函数，因此有$f^{**} = f$.
根据 $f^*(y)$ 的定义，$y \in \partial f(x)$ 即表明 x 满足最优性条件，因此

$$x^{\mathrm{T}} y - f(x) = f^*(y)$$

由自共轭性得

$$f^{**}(x) = f(x) = x^{\mathrm{T}} y - f^*(y)$$

这说明 y 满足最优性条件，即 $x \in \partial f^*(y)$.
另一方向结论同理可得. □

Proof.

首先写出最小化增广拉格朗日函数的优化问题:

$$\begin{aligned} \min_{x,y,w} \quad & f(x)+h(y)+\frac{t}{2}||w||_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & Ax-y+z/t=w \end{aligned}$$

对约束$Ax-y+\frac{z}{t}=w$ 引入乘子 u, 由最优性条件有:

$$A\hat{x}-\hat{y}+\frac{z}{t}=w, \quad -A^{\mathrm{T}}u\in\partial f(\hat{x}), \quad u\in\partial h(\hat{y}), \quad tw=u$$

消去 w 得 $u=z+t(Ax-y)$. 又根据引理(5)得:

$$\hat{x}\in\partial f^*\left(-A^{\mathrm{T}}u\right), \quad \hat{y}\in\partial h^*(u)$$

代入 u 的表达式可得$0\in -A\partial f^*(-A^Tu)+\partial h^*(u)+\frac{1}{t}(u-z)$, 这正是 $u=\text{prox}_{t\psi}(z)$ 的最优性条件.

另一方面，若有$u=\text{prox}_{t\psi}(z)$, 则选取 $\hat{x}\in\partial f^*\left(-A^{\mathrm{T}}u\right)$ 及 $\hat{y}\in\partial h^*(u)$, 即可恢复出增广拉格朗日函数法中的变量 □

增广拉格朗日函数法

选择初始点 $z^{(0)}$ 并迭代以下步骤:

1. 最小化增广拉格朗日函数

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

2. 乘子更新

$$z^{k+1} = z^k + t_k (A\hat{x} - \hat{y})$$

- 这等价于对对偶问题使用近似点算法
- (对偶问题)可以使用加速版本的近似点算法来加快收敛速度
- 通常第一步先求解一个较不精确的最优值

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

- 等式约束 (h 是$\{b\}$点处的示性函数)

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \underset{x}{\operatorname{argmin}} \left(f(x) + z^T(Ax - b) + \frac{t}{2}\|Ax - b\|_2^2 \right) \\ u &= z + t(A\hat{x} - b) \end{aligned}$$

- 凸集约束 (h 是凸集 C 上示性函数):

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \underset{x}{\operatorname{argmin}} \left(f(x) + \frac{t}{2} d(Ax + z/t)^2 \right) \\ u &= z + t(A\hat{x} - P(A\hat{x} + z/t)) \end{aligned}$$

其中， $P(u)$ 是 u 在C 上的投影, $d(u) = \|u - P(u)\|_2$ 是欧式距离

提纲

考虑LASSO问题：

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \quad \psi(x) = \mu\|x\|_1 + \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2. \tag{6}$$

引入变量$y = Ax - b$，问题(6)可以等价地转化为

$$\min_{x,y} \quad f(x,y) = \mu\|x\|_1 + \frac{1}{2}\|y\|_2^2, \qquad \text{s.t.} \quad Ax - y - b = 0. \tag{7}$$

对于问题(7)，我们采用近似点算法进行求解，其第k步迭代为

$$(x^{k+1}, y^{k+1}) \approx \mathop{\mathrm{argmin}}_{(x,y)\in\mathcal{D}} \quad \left\{ f(x,y) + \frac{1}{2t_k}\left(\|x-x^k\|_2^2 + \|y-y^k\|_2^2\right) \right\}, \tag{8}$$

其中$\mathcal{D} = \{(x,y) \mid Ax - y = b\}$为可行域，$t_k$ 为步长。由于问题(8)没有显式解，我们需要采用迭代算法来进行求解，比如罚函数法，增广拉格朗日方法等等。

除了直接求解问题(8)，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，问题(8)的对偶函数为：

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

这里，

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

通过简单地计算，并记函数$q_{\mu t_k}:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ 为

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

我们有$\Gamma_{\mu t_k}(u)=\sum_{i=1}^n q_{\mu t_k}(u_i)$, 其为极小点$x=\mathrm{prox}_{\mu t_k\|x\|_1}(u)$ 处的目标函数值。易知$\Gamma_{\mu t_k}(u)$ 是关于u 的连续可微函数且导数为：

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

那么，问题(8)的对偶问题为

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

设对偶问题的逼近最优解为z^{k+1}，那么根据问题(8)的最优性条件，我们有

$$\begin{cases}x^{k+1}=\mathrm{prox}_{\mu t_k\|x\|_1}\left(x^k-t_kA^Tz^{k+1}\right),\\ y^{k+1}=\frac{1}{t_k+1}(y^k+t_kz^{k+1}).\end{cases}$$

在第k步迭代，LASSO (6) 问题的近似点算法的迭代格式写为：

$$\begin{cases} z^{k+1} \approx \underset{z}{\operatorname{argmax}} \quad \Phi_k(z), \\ x^{k+1} = \operatorname{prox}_{\mu t_k \|x\|_1}\left(x^k - t_k A^T z^{k+1}\right), \\ y^{k+1} = \dfrac{1}{t_k+1}(y^k + t_k z^{k+1}). \end{cases} \tag{9}$$

根据$\Phi_k(z)$的连续可微性，我们可以调用梯度法进行求解。另外可以证明$\Phi_k(z)$是半光滑的，从而调用半光滑牛顿法来更有效地求解。为了保证算法(9)的收敛性，我们采用以下z^{k+1}满足以下不精确收敛准则：

$$\begin{aligned} &\|\nabla\Phi_k(z^{k+1})\|_2 \le \sqrt{\alpha/t_k}\epsilon_k,\ \epsilon_k \ge 0, \sum_k^{\infty} \epsilon_k < \infty, \\ &\|\nabla\Phi_k(z^{k+1})\|_2 \le \sqrt{\alpha/t_k}\delta_k \|(x^{k+1}, y^{k+1}) - (x^k, y^k)\|^2,\ \delta_k \ge 0, \sum_k^{\infty} \delta_k < \infty, \end{aligned} \tag{10}$$

其中ϵ_k, δ_k是人为设定的参数,α为Φ_k的强凹参数(即$-\Phi_k$的强凸参数)。

提纲

收敛性分析

基本假设：

- ψ 是闭凸函数 (因此, $\text{prox}_{t\psi}(x)$ 唯一确定,$\forall x$)
- 最优值 ψ^* 有限且在 x^* 取到

结论：

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

- 这表明，$\sum_i t_i \to \infty$ 时收敛
- 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

收敛性分析

Proof.

对原问题应用近似点梯度法(即 $f(x)=0$ 的情形)，则下式在$t>0$的情形下自然满足：

$$f\left(x-tG_t(x)\right)\leqslant f(x)+t\nabla f(x)^{\mathrm{T}}G_t(x)+\frac{t}{2}\left\|G_t(x)\right\|_2^2$$

根据近似点梯度法中定理**1**的证明，我们有

$$t_i\left(\psi\left(x^i\right)-\psi^*\right)\leqslant\frac{1}{2}\left(\left\|x^{i-1}-x^*\right\|_2^2-\left\|x^i-x^*\right\|_2^2\right)$$

且$\left\{\psi\left(x^i\right)\right\}$ 是单调下降的序列. 因此

$$\left(\sum_{i=1}^k t_i\right)\left(\psi\left(x^k\right)-\psi^*\right)\leqslant\sum_{i=1}^k t_i\left(\psi\left(x^i\right)-\psi^*\right)\leqslant\frac{1}{2}\left\|x^0-x^*\right\|_2^2$$

□

FISTA (令$f(x)=0$): 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$k\geq 1$

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

参数选择策略

- 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$k>1$，从下面的方程中解出θ_k

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

收敛性分析

基本假设：

- ψ 是闭凸函数 (因此，$\mathrm{prox}_{t\psi}(x)$ 对于所有的 x 存在且唯一)
- 最优值 ψ^* 有限且在 x^* 取到

结论：

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

- 这表明，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$\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^2}\right)$ (实际上也需控制 t_i 上界以便子问题可快速求解)

收敛性分析

Proof.

在 $f(x)=0$ 的情况下使用Nesterov加速算法中的证明:
由于 $f(x)=0$, 对任意的$t>0$,

$$f(x) \leqslant f(y)+\nabla f(y)^{\mathrm{T}}(x-y)+\frac{1}{2t}\|x-y\|_2^2, \quad \forall x, y$$

于是$\psi\left(x^k\right)-\psi^* \leqslant \frac{\gamma_k^2}{2t_k}\left\|x^0-x^*\right\|_2^2$ 成立，取固定步长$t_k=t$ 和$\gamma_k=\frac{2}{k+1}$,

$$\frac{\gamma_k^2}{2t_k}=\frac{2}{(k+1)^2 t}$$

对于变步长,

$$\frac{\gamma_k^2}{2t_k} \leqslant \frac{2}{\left(2\sqrt{t_1}+\sum_{i=2}^k \sqrt{t_i}\right)^2}$$

分别将对应不等式代入 (23) 式就得到定理中的结论. □

提纲

闭凸函数 f 的Moreau-Yosida正则化(又称为Moreau envelope) 定义为

$$
\begin{aligned}
f_{(t)}(x) &= \inf_u \left(f(u) + \frac{1}{2t}||u - x||_2^2) \quad (t > 0) \right) \\
&= f(\mathrm{prox}_{tf}(x)) + \frac{1}{2t}||\mathrm{prox}_{tf}(x) - x||_2^2
\end{aligned} \tag{11}
$$

根据定义我们可以立刻得到：

- $f_{(t)}$ 是凸函数 (一个以x, u为自变量的凸函数对u取下确界)
- $f_{(t)}$ 的定义域为$\mathbb{R}^n$ (回忆 $\mathrm{prox}_{tf}(x)$ 对于任意的x存在且唯一)

例子

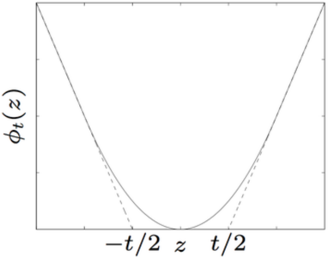
- **示性函数:** 光滑化后的f 是欧式距离的平方

$$f(x) = I_C(x), \qquad f_{(t)}(x) = \frac{1}{2t} d(x)^2$$

- ℓ_1 **范数:** 光滑化后的函数为Huber损失函数

$$f(x) = ||x||_1, \qquad f_{(t)}(x) = \sum_{k=1}^{n} \phi_t(x_k)$$

$$\phi_t(z) = \begin{cases} z^2/(2t) & |z| \le t \\ |z| - t/2 & |z| \ge t \end{cases}$$



Moreau envelope的共轭函数

$$f_{(t)}(x) = \inf_u \left(f(u) + \frac{1}{2t}||u - x||_2^2 \right)$$

- $f_{(t)}$ 是 $f(u)$ 与 $||v||_2^2/(2t)$ 的卷积下确界:

$$f_{(t)}(x) = \inf_{u+v=x} \left(f(u) + \frac{1}{2t}||v||_2^2 \right)$$

- $f_{(t)}$ 的共轭是 $f(u)$ 的共轭与 $||v||_2^2/(2t)$ 的和:

$$(f_{(t)})^*(y) = f^*(y) + \frac{t}{2}||y||_2^2$$

- 因此，$f_{(t)}$ 的共轭是 t-强凸的

Moreau envelope的梯度

$$f_{(t)}(x) = \sup_y (x^T y - (f_{(t)})^*(y)) = \sup_y (x^T y - f^*(y) - \frac{t}{2}\|y\|_2^2)$$

- 最大值点 y 唯一且满足：

$$\frac{x}{t} - \partial \frac{f^*(y)}{t} - y = 0 \iff y = \underset{u}{\operatorname{argmin}} \left(\frac{f^*(u)}{t} + \frac{1}{2}\|u - \frac{x}{t}\|^2 \right)$$

- 同时有 $x \in \partial (f_{(t)})^*(y) \iff y \in \partial f_{(t)}(x)$, 根据唯一性，最大值点 y 即是 $f_{(t)}$ 的梯度:

$$\nabla f_{(t)}(x) = \operatorname{prox}_{(1/t)f^*}(x/t) = \frac{1}{t}(x - \operatorname{prox}_{tf}(x))$$

- 梯度 $\nabla f_{(t)}$ 为 $(1/t)$-利普希茨连续
(根据邻近算子性质：$\|\operatorname{prox}_h(\boldsymbol{x}_1) - \operatorname{prox}_h(\boldsymbol{x}_2)\|_2 \le \|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2\|_2$)

近似点算法的解释

使用梯度法来最小化Moreau envelope

$$\min \quad f_{(t)}(x) = \inf_u \left(f(u) + \frac{1}{2t} ||u - x||_2^2 \right) \tag{12}$$

这是最小化 $f(x)$ 优化问题的光滑化形式，且满足:

- 问题(12)的最优值点 x 同时也是原问题 f 的最小值点
- $f_{(t)}$ 可微且梯度利普希茨连续 $(L = 1/t)$

我们可以使用固定步长：$t_k = 1/L = t$

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - t\nabla f_{(t)}(x^{(k-1)}) = \mathrm{prox}_{tf}(x^{(k-1)})$$

这就是固定步长近似点算法的迭代格式

增广拉格朗日函数法的解释

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

- 固定步长 t，对偶乘子更新即为对光滑化的对偶问题使用梯度下降
- 如果我们消去 y，关键变量 x 的更新可以理解为光滑化 g：

$$
\hat{x} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \left(f(x) + g_{(1/t)}(Ax + (1/t)z) \right)
$$

例子: 最小化 $f(x) + \|Ax - b\|_1$

$$
\hat{x} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \left(f(x) + \phi_{1/t}(Ax - b + (1/t)z) \right)
$$

其中 $\phi_{1/t}$ 表示将Huber损失函数应用到各分量

proximal point algorithm and fast proximal point algorithm

- O. Güler, *On the convergence of the proximal point algorithm for convex minimization*, SIAM J. Control and Optimization (1991)
- O. Güler, *New proximal point algorithms for convex minimization*, SIOPT (1992)
- O. Güler, *Augmented Lagrangian algorithm for linear programming*, JOTA (1992)

augmented Lagrangian algorithm

- D.P. Bertsekas, *Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods* (1982)