

对偶算法

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：本教案由朱桢源协助准备

提纲

1 对偶近似点梯度法

2 应用举例

3 原始-对偶混合梯度算法

4 应用举例

5 收敛性分析

对偶方法

次梯度法：速度慢，步长选择困难

梯度法：需要对偶函数可微

- 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（本讲）：对偶函数分裂成两项

- 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：

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

引入新变量 $y = Ax$ ，考虑问题：

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

拉格朗日函数为：

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

对偶问题

$$(D) \quad \max_z \phi(z) = -f^*(-A^T z) - h^*(z).$$

Dual methods

apply first-order method to dual problem

$$\max \quad -f^*(-A^T z) - h^*(z)$$

reasons why dual problem may be easier for first-order method:

- dual problem is unconstrained or has simple constraints
- dual objective is differentiable or has a simple nondifferentiable term
- decomposition: exploit separable structure

(Sub-)gradients of conjugate function

assume $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ is closed and convex with conjugate

$$f^*(y) = \sup_x (y^T x - f(x))$$

subgradient

- f^* is subdifferentiable on (at least) **int dom f^***
- maximizers in the definition of $f^*(y)$ are subgradients at y

$$y \in \partial f(x) \Leftrightarrow y^T x - f(x) = f^*(y) \Leftrightarrow x \in \partial f^*(y)$$

gradient: for strictly convex f , maximizer in definition is unique if it exists

$$\nabla f^*(y) = \operatorname{argmax}_x (y^T x - f(x)) \text{ (if maximum is attained)}$$

Equality constraints

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & Ax = b \end{array} \quad \begin{array}{ll} \min & f^*(-A^T z) + b^T z \end{array}$$

dual gradient ascent (assuming $\text{dom } f^* = \mathbb{R}^n$):

$$\hat{x} = \operatorname{argmin}_x (f(x) + z^T A x), \quad z^+ = z + t(A\hat{x} - b)$$

- \hat{x} is a subgradient of f^* at $-A^T z$ (i.e., $\hat{x} \in \partial f^*(-A^T z)$)
- $b - A\hat{x}$ is a subgradient of $f^*(-A^T z) + b^T z$ at z

of interest if calculation of \hat{x} is inexpensive (for example, f is separable)

Alternating minimization framework

The Lagrangian function is

$$L(x, z) = f(x) + z^\top (Ax - b).$$

The problem is equivalent to

$$\max_z \quad \min_x \quad L(x, z).$$

The dual gradient ascent method is equivalent to the following alternating minimization scheme:

$$\begin{aligned}x^{k+1} &= \operatorname{argmin}_x L(x, z^k) \\&= \operatorname{argmin}_x (f(x) + (z^k)^T Ax) \\z^{k+1} &= \operatorname{argmax}_z L(x^{k+1}, z) - \frac{1}{2t} \|z - z^k\|_2^2 \\&= z^k + t(Ax^{k+1} - b)\end{aligned}$$

Dual decomposition

convex problem with separable objective

$$\begin{aligned} \min \quad & f_1(x_1) + f_2(x_2) \\ \text{s.t.} \quad & A_1x_1 + A_2x_2 \leq b \end{aligned}$$

constraint is *complicating or coupling* constraint

dual problem

$$\begin{aligned} \max \quad & -f_1^*(-A_1^T z) - f_2^*(-A_2^T z) - b^T z \\ \text{s.t.} \quad & z \geq 0 \end{aligned}$$

can be solved by (sub-)gradient projection if $z \geq 0$ is the only constraint

Dual subgradient projection

subproblems: to calculate $f_j^*(-A_j^T z)$ and a (sub-) gradient for it,

$$\min \text{ (over } x_j) f_j(x_j) + z^T A_j x_j$$

optimal value is $f_j^*(-A_j^T z)$; minimizer \hat{x}_j is in $\partial f_j^*(-A_j^T z)$

dual subgradient projection method

$$\hat{x}_j = \operatorname{argmin}_{x_j} (f_j(x_j) + z^T A_j x_j), \quad j = 1, 2$$

$$z^+ = (z + t(A_1 \hat{x}_1 + A_2 \hat{x}_2 - b))_+$$

- minimization problems over x_1, x_2 are independent
- z -update is projected subgradient step ($u_+ = \max\{u, 0\}$ elementwise)

强凸函数共轭函数的性质

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.

证明：

- 对任意的 $y \in \mathbb{R}^n$, $f(x) - x^T y$ 是强凸函数，因此对任意的 $y \in \mathbb{R}^n$ ，存在唯一的 $x \in \text{dom } f$ ，使得 $f^*(y) = x^T y - f(x)$. 根据最优性条件

$$y \in \partial f(x) \Leftrightarrow f^*(y) = x^T y - f(x).$$

- 由于 $f(x)$ 是闭凸函数，二次共轭为其本身，于是对同一组 x, y 有

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

- 这说明 y 也使得 $x^T y - f^*(y)$ 取到最大值. 根据一阶最优性条件，

$$x \in \partial f^*(y).$$

- 再根据 x 的唯一性容易推出 $\partial f^*(y)$ 中只含一个元素，故 $f^*(y)$ 可微.

- 下证 $f^*(y)$ 为梯度 $\frac{1}{\mu}$ -利普希茨连续的. 对任意的 y_1, y_2 , 存在唯一的 $x_1, x_2 \in \text{dom } f$ 使得

$$y_1 \in \partial f(x_1), \quad y_2 \in \partial f(x_2).$$

- 根据次梯度性质以及 $f(x) - \frac{\mu}{2}\|x\|^2$ 是凸函数,

$$\begin{aligned} f(x_2) &\geq f(x_1) + (y_1 - \mu x_1)^T(x_2 - x_1), \\ f(x_1) &\geq f(x_2) + (y_2 - \mu x_2)^T(x_1 - x_2), \end{aligned}$$

- 将上述两式相加得

$$(y_1 - y_2)^T(x_1 - x_2) \geq \mu \|x_1 - x_2\|^2.$$

- 根据 x 和 y 的关系我们有 $x_1 = \nabla f^*(y_1), x_2 = \nabla f^*(y_2)$, 代入上式可得

$$(y_1 - y_2)^T(\nabla f^*(y_1) - \nabla f^*(y_2)) \geq \mu \|\nabla f^*(y_1) - \nabla f^*(y_2)\|^2.$$

这正是 $\nabla f^*(y)$ 的余强制性, 可知 $\nabla f^*(y)$ 是 $\frac{1}{\mu}$ -利普希茨连续的.

对偶问题中的复合结构

为了在对偶问题上使用近似点梯度法， $\phi(z)$ 需要满足“可微函数+凸函数”的复合形式：

- h 或 h^* 的近似点算子容易计算（有闭形式或简单算法）
- f 是闭的强凸函数

我们下面证明这意味着 $f^*(-A^T z)$ 是梯度利普希茨连续函数：

$$\|A \nabla f^*(-A^T z_1) - A \nabla f^*(-A^T z_2)\|_2 \leq \frac{\|A\|_2^2}{\mu} \|z_1 - z_2\|_2$$

对偶近似点梯度更新

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：

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

对偶问题是取最大值，因此邻近算子内部应该取上升方向。

进一步引入变量 $x^{k+1} = \nabla f^*(-A^T z^k)$ ，迭代格式等价于

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

- 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

下面我们将提供另一种角度来理解对偶近似点梯度法。

Moreau 分解

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

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

- 或更一般地,

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

其中 $\lambda > 0$ 为任意正实数.

- Moreau 分解的结论表明：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 $h^{**} = h$, 我们有

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

- 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：

$$x^{k+1} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \left\{ f(x) + (z^k)^T A x \right\},$$

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

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

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

交替极小方法

- 考虑等价问题：

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

- 定义拉格朗日函数和增广拉格朗日函数：

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

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

- 等价的交替极小格式是

$$x^{k+1} = \arg \min_x L(x, y^k, z^k)$$

$$y^{k+1} = \arg \min_y \textcolor{red}{L}_t(x^{k+1}, y, z^k)$$

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

- 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

提纲

1 对偶近似点梯度法

2 应用举例

3 原始-对偶混合梯度算法

4 应用举例

5 收敛性分析

正则化范数近似

假设 f 是强凸函数， $\|\cdot\|$ 是任意一种范数，考虑

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

对应原始问题我们有 $h(y) = \|y - b\|$

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

其中 $\|\cdot\|_*$ 表示 $\|\cdot\|$ 的对偶范数。从而对偶问题为：

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

应用对偶近似点梯度法，更新如下：

$$x^{k+1} = \operatorname{argmin}_x \{f(x) + (A^T z^k)^T x\}$$

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

正则化范数近似

考慮等价問題

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

交替极小化格式是

$$x^{k+1} = \operatorname{argmin}_x f(x) + \|y^k\| + (z^k)^T(Ax - b - y^k)$$

$$y^{k+1} = \operatorname{argmin}_y f(x^{k+1}) + \|y\| + (z^k)^T(Ax^{k+1} - b - y) + \frac{t}{2} \|Ax^{k+1} - b - y\|_2^2$$

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

例

假设 f 是强凸函数，考虑

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

即 $h(y_1, y_2, \dots, y_p) = \sum_{i=1}^p \|y_i\|_2$, 且

$$A = [B_1^T \quad B_2^T \quad \cdots \quad B_p^T]^T.$$

根据 $\|\cdot\|_2$ 的共轭函数定义，对偶问题形式如下：

$$\max_{\|z_i\|_2 \leq 1} -f^* \left(-\sum_{i=1}^p B_i^T z_i \right),$$

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：

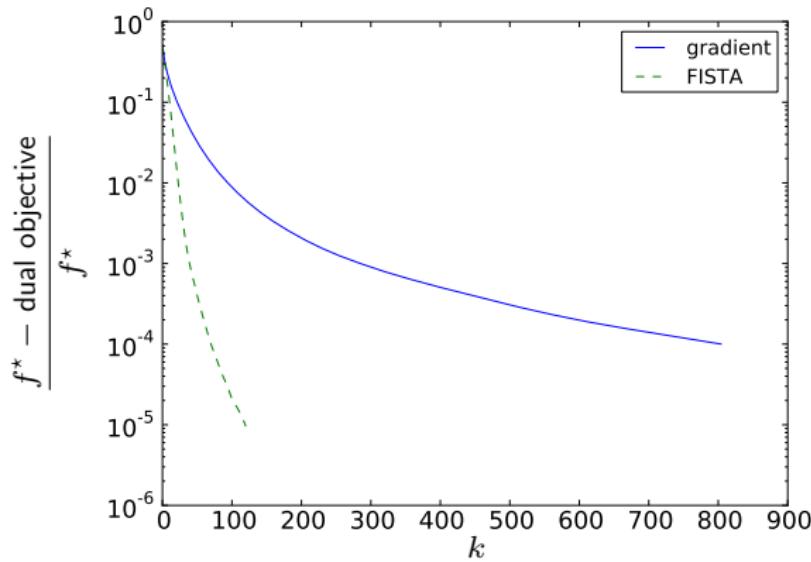
$$x^{k+1} = \operatorname{argmin}_x \left\{ f(x) + \left(\sum_{i=1}^p B_i^T z_i \right)^T x \right\},$$

$$z_i^{k+1} = \mathcal{P}_{C_i}(z_i^k + t B_i x^{k+1}), i = 1, 2, \dots, p.$$

数值实验

$$f(x) = \frac{1}{2} \|Cx - d\|_2^2$$

随机生成 $C \in \mathbb{R}^{2000 \times 1000}$, $B_i \in \mathbb{R}^{10 \times 1000}$, $p = 500$



在凸集交上的极小化

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

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

我们有 $h(y_1, y_2, \dots, y_m) = \sum_{i=1}^m I_{C_i}(y_i)$, $A = [I \quad I \quad \cdots \quad I]^T$, 对偶问题为

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

$I_{C_i}^*(z_i)$ 是集合 C_i 的支撑函数，其显式表达式不易求出。因此我们利用Moreau 分解将迭代格式写成交替极小化方法的形式：

$$x^{k+1} = \operatorname{argmin}_x \left\{ f(x) + \left(\sum_{i=1}^m z_i \right)^T x \right\},$$

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

$$z_i^{k+1} = z_i^k + t(x^{k+1} - y_i^{k+1}), \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

可分问题的拆分

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：

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

对偶近似点梯度法更新如下：

$$x_j^{k+1} = \operatorname{argmin}_{x_j} \left\{ f_j(x_j) + \left(\sum_{i=1}^m A_{ij} z_i^k \right)^T x_j \right\}, \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

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

提纲

1 对偶近似点梯度法

2 应用举例

3 原始-对偶混合梯度算法

4 应用举例

5 收敛性分析

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, 我们将问题变形为

$$(\text{L}_{\text{PD}}) \quad \min_x \max_z \psi_{\text{PD}}(x, z) \stackrel{\text{def}}{=} f(x) - h^*(z) + z^T Ax. \quad (1)$$

可以看到此时问题变成了一个极小- 极大问题, 即关于变量 x 求极小, 关于变量 z 求极大, 这是一个典型的鞍点问题.

- 另一种常用的鞍点问题定义方式构造拉格朗日函数. 问题

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

相应的鞍点问题形式如下:

$$(\text{L}_P) \quad \min_{x, y} \max_z f(x) + h(y) + z^T (Ax - y). \quad (2)$$

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(1) 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:

$$\begin{aligned} z^{k+1} &= \operatorname{argmax}_z \left\{ -h^*(z) + \langle Ax^k, z - z^k \rangle - \frac{1}{2\delta_k} \|z - z^k\|_2^2 \right\} \\ &= \operatorname{prox}_{\delta_k h^*}(z^k + \delta_k Ax^k), \\ x^{k+1} &= \operatorname{argmin}_x \left\{ f(x) + (z^{k+1})^T A(x - x^k) + \frac{1}{2\alpha_k} \|x - x^k\|_2^2 \right\} \\ &= \operatorname{prox}_{\alpha_k f}(x^k - \alpha_k A^T z^{k+1}), \end{aligned}$$

其中 α_k, δ_k 分别为原始变量和对偶变量的更新步长.

- 它在第一步固定原始变量 x^k 针对对偶变量做梯度上升, 在第二步固定更新后的对偶变量 z^{k+1} 针对原始变量做梯度下降. 在这里注意, 原始变量和对偶变量的更新顺序是无关紧要的, 若先更新原始变量, 其等价于在另一初值下先更新对偶变量.

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：

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

三项函数拆分

考虑

$$\min_x f_1(x) + f_2(Bx) + f_3(x),$$

其中 f_1, f_2, f_3 是三个下半连续的凸函数，且 f_1 具有 Lipschitz 连续常数 $\frac{1}{\beta}$, $\beta \in [0, \infty)$, $B \in R^{m \times n}$ 。

Saddle point 问题形式：

$$\min_x \max_z f_1(x) + \langle z, Bx \rangle - f_2^*(z) + f_3(x)$$

PDFP 算法更新如下：

$$\begin{cases} y_{k+1} = \mathbf{prox}_{\gamma f_3}(x_k - \gamma \nabla f_1(x_k) - \lambda B^T z_k), \\ z_{k+1} = (I - \mathbf{prox}_{\frac{\gamma}{\lambda} f_2})(By_{k+1} + z_k), \\ x_{k+1} = \mathbf{prox}_{\gamma f_3}(x_k - \gamma \nabla f_1(x_k) - \lambda B^T z_{k+1}). \end{cases}$$

其中 $0 < \lambda < \frac{1}{\lambda_{\max}(BB^T)}$, $0 < \gamma < 2\beta$ 。

提纲

1 对偶近似点梯度法

2 应用举例

3 原始-对偶混合梯度算法

4 应用举例

5 收敛性分析

LASSO问题求解

考虑LASSO问题

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

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

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

根据共轭函数的定义,

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

应用PDHG算法, x^{k+1} 和 z^{k+1} 的更新格式分别为

$$z^{k+1} = \text{prox}_{\delta_k h^*}(z^k + \delta_k A x^k) = \frac{1}{\delta_k + 1} (z^k + \delta_k A x^k - \delta_k b),$$

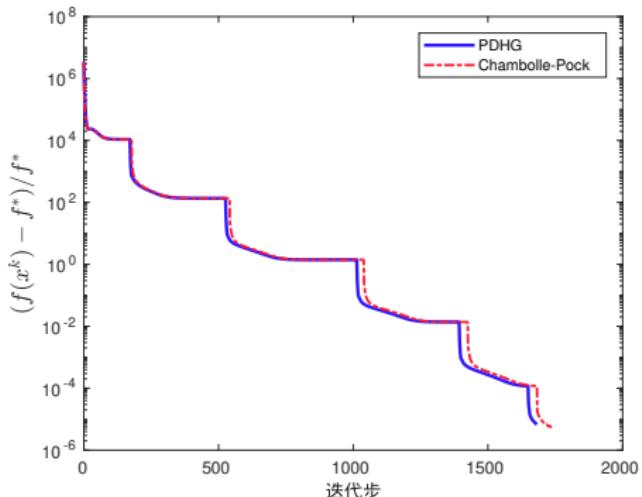
$$x^{k+1} = \text{prox}_{\alpha_k \mu \|\cdot\|_1}(x^k - \alpha_k A^T z^{k+1}).$$

这里 δ_k, α_k 为步长.

LASSO问题求解

Chambolle-Pock算法格式为

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



TV-L¹模型

考慮去噪情形下的TV-L¹模型（即 A 为矩阵空间的恒等算子）：

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

其中 $\|U\|_{TV}$ 为全变差，即可以用离散的梯度（线性）算子 $D : \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n \times 2}$ 表示为

$$\|U\|_{TV} = \sum_{1 \leq i, j \leq n} \|(DU)_{ij}\|_2.$$

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

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

其中 $w_{ij} \in \mathbb{R}^2$ 且 $\|\cdot\|$ 定义了 $\mathbb{R}^{n \times n \times 2}$ 上的一种范数。利用 $\|\cdot\|$ 的定义，有

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

TV-L¹模型

我们取 D 为相应的线性算子，并取

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

相应的鞍点问题(1) 如下：

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

根据共轭函数的定义，

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

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

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

TV-L¹模型

应用PDHG算法，则 V^{k+1} 的更新为

$$V^{k+1} = \text{prox}_{sI_{\mathcal{V}}}(V^k + sDU^k) = \mathcal{P}_{\mathcal{V}}(V^k + sDU^k), \quad (3)$$

即 $V^k + sDU^k$ 在 \mathcal{V} 上的投影，而 U^{k+1} 的更新如下：

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

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

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

若应用Chambolle-Pock算法，那么 U^{k+1} 的更新保持不变，仅需调整 V^{k+1} 的更新为 $V^k + sD(2U^{k+1} - U^k)$ 在 \mathcal{V} 上的投影。

图像填充模型

考虑问题

$$\min_{U \in \mathbb{R}^{n \times n}} \|U\|_{TV} + \frac{\lambda}{2} \|U - B\|_F^2.$$

类似于上一个例子中的分析，我们取 D 为相应的线性算子，并取

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

一般的鞍点问题叙述如下：

$$(LPD) \quad \min_U \max_V f(U) + \langle V, DU \rangle - I_V(V),$$

其中 \mathcal{V} 与 TV-L¹ 模型中的定义一致。应用 PDHG 算法，则 V^{k+1} 的更新为(3) 式。引入离散的散度算子 G ， U^{k+1} 的更新如下：

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

同样地，Chambolle-Pock 算法的更新表达式也可类似地推出。

图像反卷积模型

考虑问题

$$\min_{U \in \mathbb{R}^{n \times n}} \|U\|_{TV} + \frac{\lambda}{2} \|\mathcal{A}U - B\|_F^2,$$

其中 $\mathcal{A}U = K_{\mathcal{A}} * U$ 为卷积算子，且 $K_{\mathcal{A}}$ 是 \mathcal{A} 的卷积核对应的矩阵。
类似于 TV-L¹ 模型中的分析，取 D 为相应的线性算子，并取

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

类似地，一般的鞍点问题叙述如下：

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

其中 \mathcal{V} 与 TV-L¹ 模型中的定义一致。

图像反卷积模型

应用PDHG算法，则 V^{k+1} 的更新仍为(3)式，而 U^{k+1} 的更新为：

$$\begin{aligned} U^{k+1} &= \text{prox}_{tf}(U^k + tGV^{k+1}) \\ &= \underset{U}{\operatorname{argmin}} \left\{ \frac{\lambda}{2} \|\mathcal{A}U - B\|_F^2 + \frac{1}{2t} \|U - (U^k + tGV^{k+1})\|_F^2 \right\}, \end{aligned}$$

其中 G 为离散的散度算子。可知 U^{k+1} 满足如下方程：

$$\lambda \mathcal{A}^*(\mathcal{A}U^{k+1} - B) + \frac{1}{t}(U^{k+1} - (U^k + tGV^{k+1})) = 0,$$

其中 \mathcal{A}^* 是 \mathcal{A} 的共轭算子，且其卷积核对应的矩阵为 $K_{\mathcal{A}^*}$ 。由于 $\mathcal{A}U = K_{\mathcal{A}} * U$ 具有卷积的形式，我们可以利用快速傅里叶变换 \mathcal{F} 和其逆变换 \mathcal{F}^{-1} 来快速求解上面的线性方程组。

图像反卷积模型

根据

$$\mathcal{F}(AU) = \mathcal{F}(K_{\mathcal{A}} * U) = \mathcal{F}(K_{\mathcal{A}}) \odot \mathcal{F}(U),$$

其中 \odot 表示逐分量相乘，我们有

$$\begin{aligned} & \mathcal{F}(K_{\mathcal{A}^*}) \odot \left(\mathcal{F}(K_{\mathcal{A}}) \odot \mathcal{F}(U^{k+1}) - \mathcal{F}(B) \right) + \\ & \frac{1}{t\lambda} \mathcal{F}(U^{k+1} - (U^k + tGV^{k+1})) = 0. \end{aligned}$$

利用关系式 $\mathcal{F}(K_{\mathcal{A}^*}) = \overline{\mathcal{F}(K_{\mathcal{A}})}$ ，可得 U^{k+1} 的显式表达式

$$U^{k+1} = \mathcal{F}^{-1} \left(\frac{\mathcal{F}(U^k + tGV^{k+1}) + t\lambda \mathcal{F}(B) \odot \overline{\mathcal{F}(K_{\mathcal{A}})}}{1 + t\lambda |\mathcal{F}(K_{\mathcal{A}})|^2} \right),$$

以上表达式中除 $\mathcal{F}, \mathcal{F}^{-1}, G$ 外，其余均为逐分量的运算

三项函数拆分例子

- Fused Lasso:

$$\min_x \frac{1}{2} \|Ax - b\|^2 + \mu_1 \|Bx\|_1 + \mu_2 \|x\|_1$$

即 $f_1(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|^2$, $f_2 = \mu_1 \|\cdot\|_1$, $f_3 = \mu_2 \|\cdot\|_1$ 。

- 图像恢复：

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

即 $f_1(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|^2$, $f_2 = \mu \|\cdot\|_1$, $f_3 = 1_C(\cdot)$. 在医学核共振图像重建问题中, $A = (A_1^T, \dots, A_N^T)$, 其中 A_j 由一个对角下采样算子 D , 傅里叶变换 F , 对角的圈灵敏度映射 S_j 构成, 即 $A_j = DFS_j$, 通常 S_j 是事先估计好的。

提纲

1 对偶近似点梯度法

2 应用举例

3 原始-对偶混合梯度算法

4 应用举例

5 收敛性分析

Chambolle-Pock 算法的收敛性

- 设 X, Z 分别为变量 x, z 的取值空间，若点 (\hat{x}, \hat{z}) 满足

$$\psi_{\text{PD}}(x, \hat{z}) \geq \psi_{\text{PD}}(\hat{x}, \hat{z}) \geq \psi_{\text{PD}}(\hat{x}, z), \quad \forall x \in X, z \in Z,$$

称 (\hat{x}, \hat{z}) 是问题(1)的一个鞍点，其中 ψ_{PD} 的定义见该问题。

- 对任意子集 $B_1 \times B_2 \subset X \times Z$ ，定义部分原始-对偶间隙为

$$\mathcal{G}_{B_1 \times B_2}(x, z) = \max_{z' \in B_2} \psi_{\text{PD}}(x, z') - \min_{x' \in B_1} \psi_{\text{PD}}(x', z).$$

不难验证，只要鞍点 $(\hat{x}, \hat{z}) \in B_1 \times B_2$ ，就有

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{B_1 \times B_2}(x, z) &\geq \psi_{\text{PD}}(x, \hat{z}) - \psi_{\text{PD}}(\hat{x}, z) \\ &= (\psi_{\text{PD}}(x, \hat{z}) - \psi_{\text{PD}}(\hat{x}, \hat{z})) + (\psi_{\text{PD}}(\hat{x}, \hat{z}) - \psi_{\text{PD}}(\hat{x}, z)) \geq 0,\end{aligned}$$

并且在鞍点处 $\mathcal{G}_{B_1 \times B_2}(\hat{x}, \hat{z}) = 0$. 此外，容易验证当点 $(\hat{x}, \hat{z}) \in \text{int}(B_1 \times B_2)$ 且满足 $\mathcal{G}_{B_1 \times B_2}(\hat{x}, \hat{z}) = 0$ 时， (\hat{x}, \hat{z}) 是一个鞍点。

Chambolle-Pock 算法的收敛性

设 f, h 为闭凸函数，原问题存在鞍点 (\hat{x}, \hat{z}) 。在 Chambolle-Pock 迭代格式中取步长 $\alpha_k = t, \delta_k = s$ ，且满足 $st < \frac{1}{L}$ ($L = \|A\|_2^2$)，则序列 $\{(x^k, z^k)\}$ 具有：

(a) 令常数 $C \leq (1 - Lst)^{-1}$. $\forall k$, (x^k, z^k) 有界，且满足

$$\frac{\|x^k - \hat{x}\|^2}{2t} + \frac{\|z^k - \hat{z}\|^2}{2s} \leq C \left(\frac{\|x^0 - \hat{x}\|^2}{2t} + \frac{\|z^0 - \hat{z}\|^2}{2s} \right),$$

(b) 记 $\bar{x}_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x^k$, $\bar{z}_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N z^k$, 则对 $B_1 \times B_2 \subset X \times Z$, 有

$$\mathcal{G}_{B_1 \times B_2}(\bar{x}_N, \bar{z}_N) \leq \frac{D(B_1, B_2)}{N}, \quad (4)$$

其中 $D(B_1, B_2) = \sup_{(x,z) \in B_1 \times B_2} \left\{ \frac{\|x - x^0\|^2}{2t} + \frac{\|z - z^0\|^2}{2s} \right\}$;

进一步地，序列 $\{(\bar{x}_N, \bar{z}_N)\}_{N=1}^\infty$ 的聚点为问题(1)的一个鞍点；

(c) 存在问题(1)一个鞍点 (x^*, z^*) 使得 $x^k \rightarrow x^*$, $z^k \rightarrow z^*$.

收敛性分析

为了方便推导，首先考虑算法的一般格式：

$$z^{k+1} = \text{prox}_{sh^*}(z^k + sA\bar{x}),$$

$$x^{k+1} = \text{prox}_{tf}(x^k - tA^T\bar{z}).$$

这里和Chambolle-Pock 算法不同的是，我们使用 \bar{x}, \bar{z} 来表示更新 x, z 时的参考点。当它们取特定值时，以上格式可以为PDHG 算法或Chambolle-Pock 算法。根据邻近算子的性质，

$$-A^T\bar{z} + \frac{x^k - x^{k+1}}{t} \in \partial f(x^{k+1}),$$

$$A\bar{x} + \frac{z^k - z^{k+1}}{s} \in \partial h^*(z^{k+1}).$$

根据次梯度的定义，对于任意的 $(x, z) \in X \times Z$ 有

$$f(x) \geq f(x^{k+1}) + \frac{1}{t}(x - x^{k+1})^T(x^k - x^{k+1}) - (x - x^{k+1})^TA^T\bar{z},$$

$$h^*(z) \geq h^*(z^{k+1}) + \frac{1}{s}(z - z^{k+1})^T(z^k - z^{k+1}) + (z - z^{k+1})^TA\bar{x}.$$

收敛性分析

将上述两个不等式相加，并引入二次项可整理得到

$$\begin{aligned} & \frac{\|x - x^k\|^2}{2t} + \frac{\|z - z^k\|^2}{2s} - \frac{\|x - x^{k+1}\|^2}{2t} - \frac{\|z - z^{k+1}\|^2}{2s} \\ & \geq [f(x^{k+1}) - h^*(z) + (x^{k+1})^T A^T z] - [f(x) - h^*(z^{k+1}) + x^T A^T z^{k+1}] \\ & \quad + \frac{\|x^k - x^{k+1}\|^2}{2t} + \frac{\|z^k - z^{k+1}\|^2}{2s} \\ & \quad + (x^{k+1} - \bar{x})^T A^T (z^{k+1} - z) - (x^{k+1} - x)^T A^T (z^{k+1} - \bar{z}). \end{aligned} \tag{5}$$

将Chambolle-Pock格式代入(5)，即取 $\bar{x} = 2x^k - x^{k-1}$, $\bar{z} = z^{k+1}$, 那么

$$\begin{aligned} & (x^{k+1} - \bar{x})^T A^T (z^{k+1} - z) - (x^{k+1} - x)^T A^T (z^{k+1} - \bar{z}) \\ & = (x^{k+1} - x^k - (x^k - x^{k-1}))^T A^T (z^{k+1} - z) \\ & = (x^{k+1} - x^k)^T A^T (z^{k+1} - z) - (x^k - x^{k-1})^T A^T (z^k - z) \\ & \quad - (x^k - x^{k-1})^T A^T (z^{k+1} - z^k) \\ & \geq (x^{k+1} - x^k)^T A^T (z^{k+1} - z) - (x^k - x^{k-1})^T A^T (z^k - z) \\ & \quad - \sqrt{L} \|x^k - x^{k-1}\| \|z^{k+1} - z^k\|, \end{aligned} \tag{6}$$

应用柯西不等式即得到最后的不等号

收敛性分析

又利用 $2ab \leq \alpha a^2 + \frac{b^2}{\alpha}$ 对任意的 $\alpha > 0$ 均成立，有

$$\begin{aligned} & \sqrt{L} \|x^k - x^{k-1}\| \|z^{k+1} - z^k\| \\ & \leq \frac{\sqrt{Lat}}{2t} \|x^k - x^{k-1}\|^2 + \frac{\sqrt{Ls}}{2\alpha s} \|z^{k+1} - z^k\|^2, \end{aligned}$$

取 $\alpha = \sqrt{\frac{s}{t}}$, 则

$$\sqrt{Lat} = \sqrt{L} \frac{s}{\alpha} = \sqrt{Lst} < 1,$$

从而合并(5) 式和(6) 式得到，对于任意的 $(x, z) \in X \times Z$,

$$\begin{aligned} & \frac{\|x - x^k\|^2}{2t} + \frac{\|z - z^k\|^2}{2s} - \frac{\|x - x^{k+1}\|^2}{2t} - \frac{\|z - z^{k+1}\|^2}{2s} \\ & \geq [f(x^{k+1}) - h^*(z) + (x^{k+1})^T A^T z] - [f(x) - h^*(z^{k+1}) + x^T A^T z^{k+1}] \\ & \quad + (1 - \sqrt{Lst}) \frac{\|z^k - z^{k+1}\|^2}{2s} + \frac{\|x^k - x^{k+1}\|^2}{2t} - \sqrt{Lst} \frac{\|x^{k-1} - x^k\|^2}{2t} \\ & \quad + (x^{k+1} - x^k)^T A^T (z^{k+1} - z) - (x^k - x^{k-1})^T A^T (z^k - z). \end{aligned} \tag{7}$$

收敛性分析

将上述不等式中的 k 从0遍历至 $N - 1$ 并求和，消掉不等式两边共同项后有

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^N \left\{ [f(x^k) - h^*(z) + (x^k)^T A^T z] - [f(x) - h^*(z^k) + x^T A^T z^k] \right\} \\ & + \frac{\|x - x^N\|^2}{2t} + \frac{\|z - z^N\|^2}{2s} + (1 - \sqrt{Lst}) \sum_{k=1}^N \frac{\|z^k - z^{k-1}\|^2}{2s} \\ & + (1 - \sqrt{Lst}) \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\|x^k - x^{k-1}\|^2}{2t} + \frac{\|x^N - x^{N-1}\|^2}{2t} \\ & \leq \frac{\|x - x^0\|^2}{2t} + \frac{\|z - z^0\|^2}{2s} + (x^N - x^{N-1})^T A^T (z^N - z), \end{aligned} \tag{8}$$

其中约定 $x^{-1} = x^0$. 再一次应用柯西不等式，以及 $2ab \leq \alpha a^2 + \frac{b^2}{\alpha}$ 对任意的 $\alpha > 0$ 均成立，可以得到

$$\begin{aligned} (x^N - x^{N-1})^T A^T (z^N - z) & \leq \|x^N - x^{N-1}\| (\sqrt{L} \|z^N - z\|) \\ & \leq \frac{\|x^N - x^{N-1}\|^2}{2t} + \frac{Lst \|z - z^N\|^2}{2s}. \end{aligned}$$

收敛性分析

不等式(8)可进一步整理为

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^N \left\{ [f(x^k) - h^*(z) + (x^k)^T A^T z] - [f(x) - h^*(z^k) + x^T A^T z^k] \right\} \\ & + \frac{\|x - x^N\|^2}{2t} + (1 - Lst) \frac{\|z - z^N\|^2}{2s} + (1 - \sqrt{Lst}) \sum_{k=1}^N \frac{\|z^k - z^{k-1}\|^2}{2s} \\ & + (1 - \sqrt{Lst}) \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\|x^k - x^{k-1}\|^2}{2t} \\ & \leq \frac{\|x - x^0\|^2}{2t} + \frac{\|z - z^0\|^2}{2s}. \end{aligned} \tag{9}$$

若取 $(x, z) = (\hat{x}, \hat{z})$, 则由鞍点性质可知

$$[f(x^k) - h^*(\hat{z}) + (x^k)^T A^T \hat{z}] - [f(\hat{x}) - h^*(z^k) + \hat{x}^T A^T z^k] \geq 0.$$

进而(9)左边每一项都是正的, 结论(a)成立:

收敛性分析

从(9)出发，利用 f, h^* 的凸性，以及 \bar{x}_N, \bar{z}_N 的定义，有

$$\begin{aligned} & [f(\bar{x}_N) - h^*(z) + (\bar{x}_N)^T A^T z] - [f(x) - h^*(\bar{z}_N) + x^T A^T \bar{z}_N] \\ & \leq \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \{ [f(x^k) - h^*(z) + (x^k)^T A^T z] - [f(x) - h^*(z^k) + x^T A^T z^k] \} \quad (10) \\ & \leq \frac{1}{N} \left(\frac{\|x - x^0\|^2}{2t} + \frac{\|z - z^0\|^2}{2s} \right). \end{aligned}$$

从而结论(b)中(4)式成立。由(1)知 $\{(x^k, z^k)\}$ 是有界序列，因此其均值列 $\{(\bar{x}_N, \bar{z}_N)\}$ 也为有界序列。记 (x^\sharp, z^\sharp) 为序列 $\{(\bar{x}_N, \bar{z}_N)\}$ 的聚点，利用 f, h^* 的凸性以及闭性（下半连续性），对(10)式左右同时取下极限，可知对任意的 $(x, z) \in X \times Z$ ，

$$[f(x^\sharp) - h^*(z) + (x^\sharp)^T A^T z] - [f(x) - h^*(z^\sharp) + x^T A^T z^\sharp] \leq 0.$$

从而 (x^\sharp, z^\sharp) 也是问题(1)的一个鞍点。

收敛性分析

为了证明 $\{(x^k, z^k)\}$ 全序列收敛到问题(1)的鞍点，我们采用的大致思路为：先说明其子列收敛，然后再利用(7)式估计序列中其他点到子列极限点的误差（进而证明全序列收敛），最后说明该极限点是鞍点。根据结论(1)， $\{(x^k, z^k)\}$ 是有界点列，因此存在子列 $\{(x^{k_l}, z^{k_l})\}$ 收敛于 (x^*, z^*) 。在(7)式中令 $(x, z) = (x^*, z^*)$ ，并将 k 从 k_l 取至 $N - 1, N > k_l$ 并求和，有

$$\begin{aligned} & \frac{\|x^* - x^N\|^2}{2t} + \frac{\|z^* - z^N\|^2}{2s} \\ & + (1 - \sqrt{Lst}) \sum_{k=k_l+1}^N \frac{\|z^k - z^{k-1}\|^2}{2s} - \frac{\|x^{k_l} - x^{k_l-1}\|^2}{2t} \\ & + (1 - \sqrt{Lst}) \sum_{k=k_l}^{N-1} \frac{\|x^k - x^{k-1}\|^2}{2t} + \frac{\|x^N - x^{N-1}\|^2}{2t} \\ & + (x^N - x^{N-1})^T A^T (z^N - z^*) - (x^{k_l} - x^{k_l-1})^T A^T (z^{k_l} - z^*) \\ & \leq \frac{\|x^* - x^{k_l}\|^2}{2t} + \frac{\|z^* - z^{k_l}\|^2}{2s}. \end{aligned}$$

收敛性分析

去掉上式中不等式左边的求和项（正项），我们有如下估计：

$$\begin{aligned} & \frac{\|x^* - x^N\|^2}{2t} + \frac{\|z^* - z^N\|^2}{2s} \\ & \leq \frac{\|x^* - x^{k_l}\|^2}{2t} + \frac{\|z^* - z^{k_l}\|^2}{2s} + \frac{\|x^{k_l} - x^{k_l-1}\|^2}{2t} - \frac{\|x^N - x^{N-1}\|^2}{2t} \\ & \quad + (x^{k_l} - x^{k_l-1})^T A^T (z^{k_l} - z^*) - (x^N - x^{N-1})^T A^T (z^N - z^*). \end{aligned}$$

注意到

$$x^{k_l} \rightarrow x^*, \quad (x^{k_l} \text{ 的定义})$$

$$x^N - x^{N-1} \rightarrow 0, \quad (\text{由(9) 式推出})$$

$$\{z^k\} \text{ 有界}, \quad (\text{本定理中(a) 的结论})$$

所以当 $N \rightarrow \infty$ 时有， $x^N \rightarrow x^*$, $z^N \rightarrow z^*$, 全序列收敛性得证. 最后，由全序列收敛可知均值 (\bar{x}_N, \bar{z}_N) 也收敛到 (x^*, z^*) ，根据(a) 的结论和极限的唯一性立即得到 $(x^\#, z^\#) = (x^*, z^*)$ ，即收敛到问题(1)的一个鞍点