组合优化与凸优化

第5章 无约束最优化方法(Unconstrained Optimization Methods)

刘绍辉

计算机科学与技术学院 哈尔滨工业大学

shliu@hit.edu.cn

2023年春季

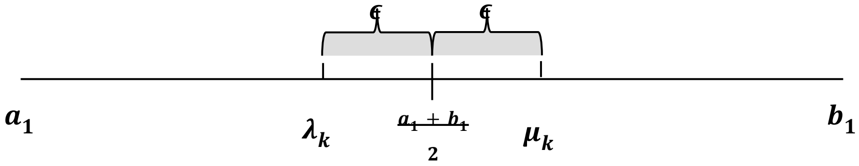
- **使用导数和不使用导数的线搜索方法**
  - **Dichotomous， Golden Section method, Fibonacci method**
  - **Bisection search, Newton's method**
- **多维搜索下使用导数和不使用导数的搜索方法**
  - **The Cyclic coordinate method, Hooke and Jeeves， Rosenbrock's method**
  - **The Steepest descent and The method of Newton**
- **牛顿方法的变种：LM和信任域方法**
  - **Levenberg-Marquardt, Trust Region Methods**
- **共轭方向法：拟牛顿法和共轭梯度法**
  - 目标函数如果是二次的，有限步内可以收敛
- **次梯度优化方法**
  - 不可微目标函数中的**Steepest Descent algorithm:**投影思想!
- **总结**

第5章 无约束最优化方法(Unconstrained)

- **实际的优化问题一般都有很多的约束，那为什么还要研究无约束最优化方法呢？**
  - 许多算法可以通过**Lagrangian**乘子法将有约束优化问题转化为一系列的无约束优化问题来求解，例如后续要介绍的**Lagrangian**对偶和鞍点最优性条件，又如后续要提到的惩罚和障碍函数法等
  - 大多数方法都是通过找到一个方向，然后沿方向最小化来推进求解，这种线搜索方法实际上是无约束或简单约束的最小化问题
  - 最后，有几种无约束最优化方法可以自然推广到有约束问题的求解上去

- 我们只介绍每种方法的基本思想，其收敛速度等的证明均略过

- Dichotomous方法

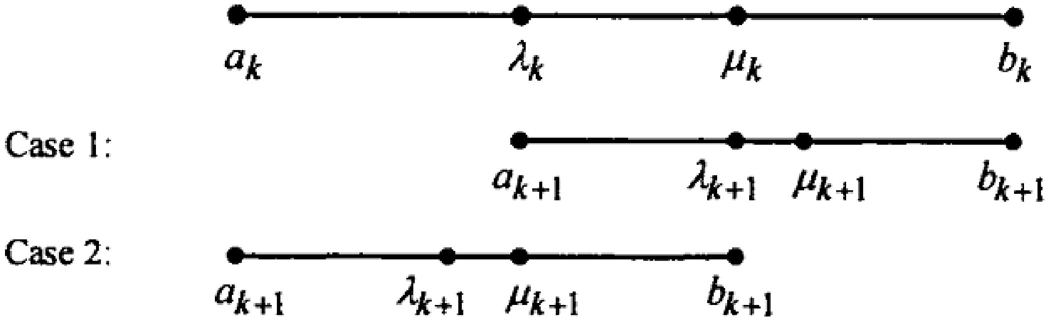


$$\lambda_k=\frac{a_k+b_k}{2}-\epsilon,\mu_k=\frac{a_k+b_k}{2}+\epsilon$$

- 若$f(\lambda_k)<f(\mu_k)$,则$a_{k+1}=a_k,b_{k+1}=\mu_k$;
- 否则，$a_{k+1}=\lambda_k,b_{k+1}=b_k$
- 易见：$b_{k+1}-a_{k+1}=\frac{1}{2^k}(b_1-a_1)+2\epsilon(1-\frac{1}{2^k})$
- 从而可以根据精度要求来确定迭代次数，编程时可以预先确定需要申请的数组数目

第5章 无约束最优化方法-线搜索回顾

◆黄金分割(Golden Section)



◆若$f(\lambda_k) > f(\mu_k)$,则$a_{k+1} = \lambda_k, b_{k+1} = b_k$,且$\mu_k = \lambda_{k+1} = a_{k+1} + (1-\alpha)(b_{k+1} - a_{k+1}) = \lambda_k + (1-\alpha)(b_k - \lambda_k)$

◆否则$a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = \mu_k, \lambda_k = \mu_{k+1} = a_{k+1} + \alpha(b_{k+1} - a_{k+1}) = a_k + \alpha(\mu_k - a_k)$

◆易见: $b_{k+1} - a_{k+1} = 0.618(b_k - a_k)$

第5章 无约束最优化方法–线搜索回顾

- 例: $Min\ \lambda^2+2\lambda, s.t. -3\le\lambda\le 5$
- 解：区间长度为8，因此采用黄金分割法求解时，其前两个观察量
- $\lambda_1=-3+0.382\cdot 8=0.056, \mu_1=-3+0.618\cdot 8=1.944$, 目标函数值$f(\lambda_1)<f(\mu_1)$,因此新区间为$[-3,1.944]$

Iteration k	a_k	b_k	λ_k	μ_k	$\theta(\lambda_k)$	$\theta(\mu_k)$
1	–3.000	5.000	0.056	1.944	0.115*	7.667*
2	–3.000	1.944	–1.112	0.056	–0.987*	0.115
3	–3.000	0.056	–1.832	–1.112	–0.308*	–0.987
4	–1.832	0.056	–1.112	–0.664	–0.987	–0.887*
5	–1.832	–0.664	–1.384	–1.112	–0.853*	–0.987
6	–1.384	–0.664	–1.112	–0.936	–0.987	–0.996*
7	–1.112	–0.664	–0.936	–0.840	–0.996	–0.974*
8	–1.112	–0.840	–1.016	–0.936	–1.000*	–0.996
9	–1.112	–0.936				

第5章 无约束最优化方法-线搜索回顾

- Fibonacci搜索(斐波那契搜索)
- $\lambda_k = a_k + \frac{F_{n-k-1}}{F_{n-k+1}}(b_k - a_k), \mu_k = a_k + \frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}}(b_k - a_k)$
- 若$f(\lambda_k) > f(\mu_k)$,则$a_{k+1} = \lambda_k, b_{k+1} = b_k$
- 否则:$a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = \mu_k$
- 计算后可验证
  - $b_{k+1} - a_{k+1} = b_k - \lambda_k = \frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}}(b_k - a_k)$
- 注意：除了第一次需要计算两次函数值外，每次迭代只需要**计算一次函数值**

- 例:$Min\ \lambda^2+2\lambda, s.t. -3\le\lambda\le 5$
- 解：区间长度为8，因此上述方法求解时，$F_n>\frac{8}{0.2}=40$，因此$n=9$. 若采用停止准则常数为0.01，其前两个观察量
- $\lambda_1=-3+\frac{F_7}{F_9}\cdot 8=0.054545$, $\mu_1=-3+\frac{F_8}{F_9}\cdot 8=1.945454$，目标函数值$f(\lambda_1)<f(\mu_1)$,因此新区间为$[-3, 1.945454]$

Iteration k	a_k	b_k	λ_k	μ_k	$\theta(\lambda_k)$	$\theta(\mu_k)$
1	–3.000000	5.000000	0.054545	1.945454	0.112065*	7.675699*
2	–3.000000	1.945454	–1.109091	0.054545	–0.988099*	0.112065
3	–3.000000	0.054545	–1.836363	–1.109091	–0.300497*	–0.988099
4	–1.836363	0.054545	–1.109091	–0.672727	–0.988099	–0.892892*
5	–1.836363	–0.672727	–1.399999	–1.109091	–0.840001*	–0.988099
6	–1.399999	–0.672727	–1.109091	–0.963636	–0.988099	–0.998677*
7	–1.109091	–0.672727	–0.963636	–0.818182	–0.998677	–0.966942*
8	–1.109091	–0.818182	–0.963636	–0.963636	–0.998677	–0.998677
9	–1.109091	–0.963636	–0.963636	–0.953636	–0.998677	–0.997850*

第5章 无约束最优化方法–线搜索回顾

- 给定最后区间长度l，这些方法所需要计算观察值的数目n的情况如下
- 一致搜索(均分分割区间)：$n \geq \frac{b_1-a_1}{l/2}-1$
- Dichotomous搜索：$\left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{n}{2}} \leq \frac{l}{b_1-a_1}$
- 黄金分割：$(0.618)^{n-1} \leq \frac{l}{b_1-a_1}$
- Fibonacci搜索：$F_n \geq \frac{b_1-a_1}{l}$
- 固定比率$\frac{b_1-a_1}{l}$,观察数目越少，算法越有效，从上面可以看出，最有效的为Fibonacci，其次为黄金分割，再次为Dichotomous搜索，最差的为一致搜索，注意$\frac{1}{F_n}$渐近于$(0.618)^{n-1}$,所以后两个方法基本等同
- 在所有无导数最小化闭区间上的严格凸函数的方法中，Fibonacci搜索方法最有效，要求最小数目的观察量
- 上述方法都是在凸函数的情况下获得，对于一般的函数，其不确定区间大，此时可以分割成小区间，找到小区间的局部极小点，然后从所有局部极小点中找到全局极小点

第5章 无约束最优化方法–线搜索回顾

- 前述方法不要求导数信息，如果假设函数可导，例如假设$f'(\lambda_k)$已知，此时可以考虑如下三种情况：
- 如果$f'(\lambda_k)=0$，则λ_k即为最小值点
- 如果$f'(\lambda_k)>0, a_{k+1}=a_k, b_{k+1}=\lambda_k$
- 否则$a_{k+1}=\lambda_k, b_{k+1}=b_k$
- λ_k的位置必须使得新的不确定区间的长度的最大可能度最小，也就是说最小化 λ_k-a_k和$b_k-\lambda_k$，显然最优位置就是中点：$\lambda_k=\frac{a_k+b_k}{2}$
- 本方法与Dichotomous搜索非常类似，不过只需要计算一次中点的导数信息，注意此时也可以看做是有限差分对导数的近似！
- 固定最终区间长度为l，计算的次数n必须满足：$\left(\frac{1}{2}\right)^n\le\frac{l}{b_1-a_1}$

第5章 无约束最优化方法-线搜索回顾

◆例如，$Min\ \lambda^2+2\lambda, s.t. -3\le\lambda\le 6$

◆设定$l\le 0.2$,此时:$\left(\frac{1}{2}\right)^n\le\frac{l}{b_1-a_1}$=0.2/9=0.0222,$n=6$,最终区间为$[-1.0313,-0.8907]$,因此极小点选为中点-0.961

Iteration k	a_k	b_k	λ_k	$\theta'(\lambda_k)$
1	–3.0000	6.0000	1.5000	5.0000
2	–3.0000	1.5000	–0.7500	0.5000
3	–3.0000	–0.7500	–1.8750	–1.7500
4	–1.8750	–0.7500	–1.3125	–0.6250
5	–1.3125	–0.7500	–1.0313	–0.0625
6	–1.0313	–0.7500	–0.8907	0.2186
7	–1.0313	–0.8907		

第5章 无约束最优化方法–线搜索回顾

◆ Newton's方法：利用二次式来逼近原函数

◆ $q(\lambda)=f(\lambda_k)+f'(\lambda_k)(\lambda-\lambda_k)+\frac{1}{2}f''(\lambda_k)(\lambda-\lambda_k)^2$

◆ 令其导数为0，得$\lambda_{k+1}=\lambda_k-\frac{f'(\lambda_k)}{f''(\lambda_k)}$

◆ 注意原函数二次可微，且$f''(\lambda_k)\neq 0$

◆ 例：$f(\lambda)=\begin{cases}4\lambda^3-3\lambda^4 & 若\lambda\geq 0\\ 4\lambda^3+3\lambda^4 & 若\lambda<0\end{cases}$，令$\lambda_1=0.4$,结果如下，若令$\lambda_1=0.6$,,则发生震荡，但若初始点离极小点足够近，则保证收敛

Iteration k	λ_k	$\theta'(\lambda_k)$	$\theta''(\lambda_k)$	λ_{k+1}
1	0.400000	1.152000	3.840000	0.100000
2	0.100000	0.108000	2.040000	0.047059
3	0.047059	0.025324	1.049692	0.022934
4	0.022934	0.006167	0.531481	0.011331
5	0.11331	0.001523	0.267322	0.005634
6	0.005634	0.000379	0.134073	0.002807

Iteration k	λ_k	$\theta'(\lambda_k)$	$\theta''(\lambda_k)$	λ_{k+1}
1	0.600	1.728	1.440	–0.600
2	–0.600	1.728	–1.440	0.600
3	0.600	1.728	1.440	–0.600
4	–0.600	1.728	–1.440	0.600

$\lambda_1=0.6$, 发生震荡

第5章 无约束最优化方法–非精确线搜索回顾

- 前述方法要求顺序求出一些函数值，并且利用函数信息也不会加速收敛过程，牛顿法不是全局收敛
- 但插值法在满足凸性和连续二次可微的前提下，可到达全局最优解
- 非精确一维搜索
- Goldstein
  - 设 $f:R^n \to R$。在x 取方向 d ，有 $\nabla f^T(x)d<0$ (即d为下降方向), 令 $s^{(k)}=x^{(k+1)}-x^{(k)}=\lambda_k d^{(k)}$求λ使

$$(1)\, f\left(x^{(k+1)}\right)-f\left(x^{(k)}\right) \le \rho \nabla f^T\left(x^{(k)}\right) s^{(k)}$$

$$(2)\, f\left(x^{(k+1)}\right)-f\left(x^{(k)}\right) \ge (1-\rho) \nabla f^T\left(x^{(k)}\right) s^{(k)}$$

◆ **设 $f:R^n \to R$。在x 取方向 d，有 $\nabla f^T(x)d<0$ (即d为下降方向), 令$s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)} = \lambda_k d^{(k)}$求λ使**

- Goldstein规则

  $(1) f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \le \rho \nabla f^T(x^{(k)}) s^{(k)}$

  $(2) f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \ge (1-\rho) \nabla f^T(x^{(k)}) s^{(k)}$

其中$\rho \in (1, \frac{1}{2})$,实际中常取 $\rho = 0.1$ 或更小

- **Armijo规则**

  $(1) f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \le \rho \nabla f^T(x^{(k)}) s^{(k)}$

  $(2) f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \ge \mu\rho \nabla f^T(x^{(k)}) s^{(k)}$

μ取5-10

- 1967年，Goldstein提出更一般的方法，把(2)式改为：

  $(1) f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \le \rho \nabla f^T(x^{(k)}) s^{(k)}$

  $(2) f(x^{(k+1)}) \ge f(x^{(k)}) + \sigma \nabla f^T(x^{(k)}) s^{(k)}$,

其中$\sigma \in (\rho, 1)$

- **Wolfe-Powell,前面Goldstein方法中规则(2)改为对导数的要求**

  (WP规则1)$f(x^{(k+1)}) \le f(x^{(k)}) + \rho \nabla f^T(x^{(k)}) s^{(k)}$

  (WP规则2)$\nabla f^T(x^{(k+1)}) s^{(k)} \ge \sigma \nabla f^T(x^{(k)}) s^{(k)}$

其中$\rho \in \left(0, \frac{1}{2}\right)$, $\sigma \in (\rho, 1)$

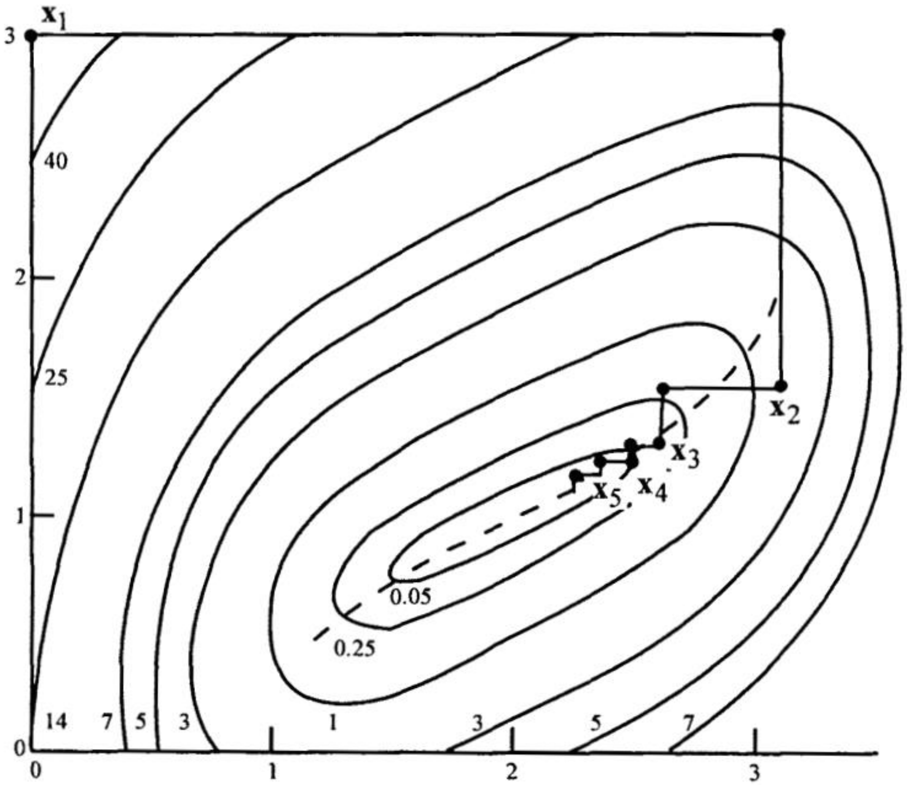
- 如果需要较高的精度时，**WP规则(2)**可进一步改为:

  (WP改进规则2)$\left|\nabla f^T(x^{(k+1)}) d^{(k)}\right| \le -\eta \nabla f^T(x^{(k)}) d^{(k)}, \eta \in (0, 1)$

◆ 坐标轮换法(Cyclic Coordinate Method)

- ➢ 坐标轴作为搜索方向,沿方向$d_1, d_2, \cdots, d_n$搜索，其中d_j是除第j个位置为1别的位置为0的向量
- ➢ 此时只改变第j个变量，其它变量保持不动
- ➢ 例： $min\ (x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$，初始点:（0,3），最优解(2,1)
- ➢ $x^{(1)}=x^{(0)}+\lambda_0(1,0) \Rightarrow \lambda_0 \in (3,4)$
- ➢ $x^{(2)}=x^{(1)}+\lambda_1(0,1) \Rightarrow \lambda_1=-1.44$

Iteration k	$\mathbf{x}_k$ $f(\mathbf{x}_k)$	j	$\mathbf{d}_j$	$\mathbf{y}_j$	λ_j	$\mathbf{y}_{j+1}$
1	(0.00, 3.00)	1	(1.0, 0.0)	(0.00,3.00)	3.13	(3.13, 3.00)
	52.00	2	(0.0, 1.0)	(3.13,3.00)	−1.44	(3.13, 1.56)
2	(3.13, 1.56)	1	(1.0, 0.0)	(3.13, 1.56)	−0.50	(2.63, 1.56)
	1.63	2	(0.0, 1.0)	(2.63, 1.56)	−0.25	(2.63, 1.31)
3	(2.63, 1.31)	1	(1.0, 0.0)	(2.63, 1.31)	−0.19	(2.44, 1.31)
	0.16	2	(0.0, 1.0)	(2.44, 1.31)	−0.09	(2.44, 1.22)
4	(2.44, 1.22)	1	(1.0, 0.0)	(2.44, 1.22)	−0.09	(2.35, 1.22)
	0.04	2	(0.0, 1.0)	(2.35, 1.22)	−0.05	(2.35, 1.17)
5	(2.35, 1.17)	1	(1.0, 0.0)	(2.35, 1.17)	−0.06	(2.29, 1.17)
	0.015	2	(0.0, 1.0)	(2.29, 1.17)	−0.03	(2.29, 1.14)
6	(2.29, 1.14)	1	(1.0, 0.0)	(2.29, 1.14)	−0.04	(2.25, 1.14)
	0.007	2	(0.0, 1.0)	(2.25, 1.14)	−0.02	(2.25, 1.12)
7	(2.25, 1.12)	1	(1.0, 0.0)	(2.25, 1.12)	−0.03	(2.22, 1.12)
	0.004	2	(0.0, 1.0)	(2.22,1.12)	−0.01	(2.22, 1.11)



◆**问题：每一次迭代有多少步骤？**

◆**假设初始点为**$x^{(1)} = \left(x_1^{(1)}, \cdots, x_n^{(1)}\right)^T$**,则**

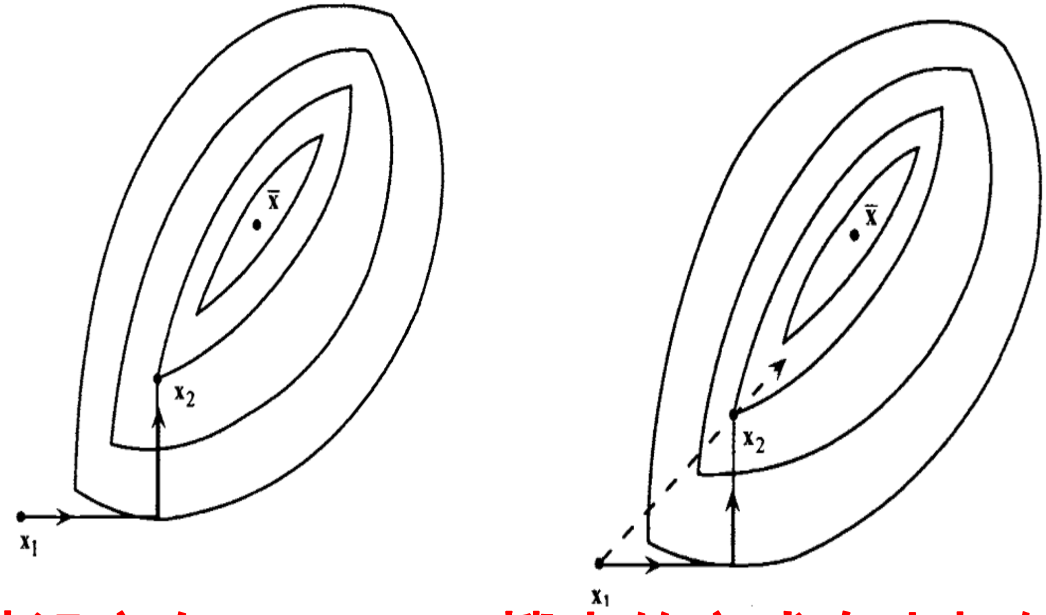
◆$x^{(2)} = argmin_{x_1} f\left(x_1, x_2^{(1)}, x_3^{(1)}, \cdots, x_n^{(1)}\right)$

◆$x^{(3)} = argmin_{x_2} f\left(x_1^{(2)}, x_2, x_3^{(2)}, \cdots, x_n^{(2)}\right)$

◆注意

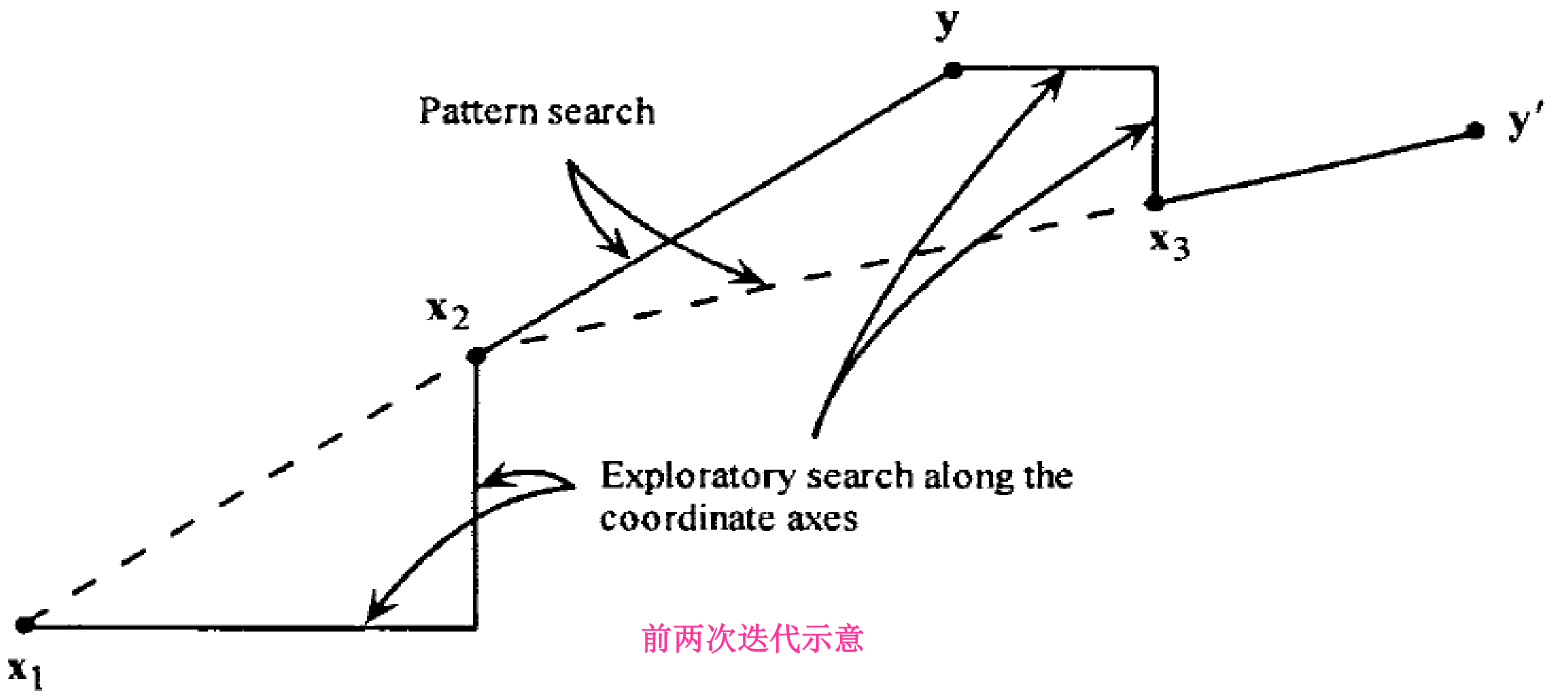
- 一次迭代在1,2，n方向上做,下次重复此过程，要求n次迭代
- 也可在返回时做: **Aitken Double Sweep Method**,此时要求$n-1$次迭代
- 如果函数可微，梯度存在，**Gauss-Southwell variant**推荐最小化坐标方向时选择偏导数成份幅度最大的方向进行最小化
- 这种顺序一维最小化有时称为**Gauss-Seidel**迭代，可用于解线性方程组
- 该方法与最速下降法的收敛速度相当

- 函数可微时，方法会收敛到梯度为0的点，但不可微时，则可能会在非最优点停止，如下左图，任何坐标方向都不会有函数值下降的点，此时可以通过搜索$x_2 - x_1$方向来克服



- 注意，这种沿方向$x_{k+1} - x_k$搜索的方式在坐标轮换方法中经常使用，有时函数可微时也这样，并且固定k次迭代后进行一次这样的搜索，通常会加速收敛，经常称为加速步(acceleration step, pattern search step)

- **Hooke and Jeeves方法，执行两种类型的搜索**
  - 试探搜索(Exploratory 搜索)
  - 模式搜索(Pattern搜索)
- **步骤：给定点$x^{(0)}$,沿坐标轴方向试探搜索到$x^{(1)}$,然后沿方向$x^{(1)}-x^{(0)}$进行模式搜索得到点y,从该点采用试探搜索得到点$x^{(2)}$,再沿方向$x^{(3)}-x^{(2)}$执行模式搜索，产生点y',该过程再次重复**

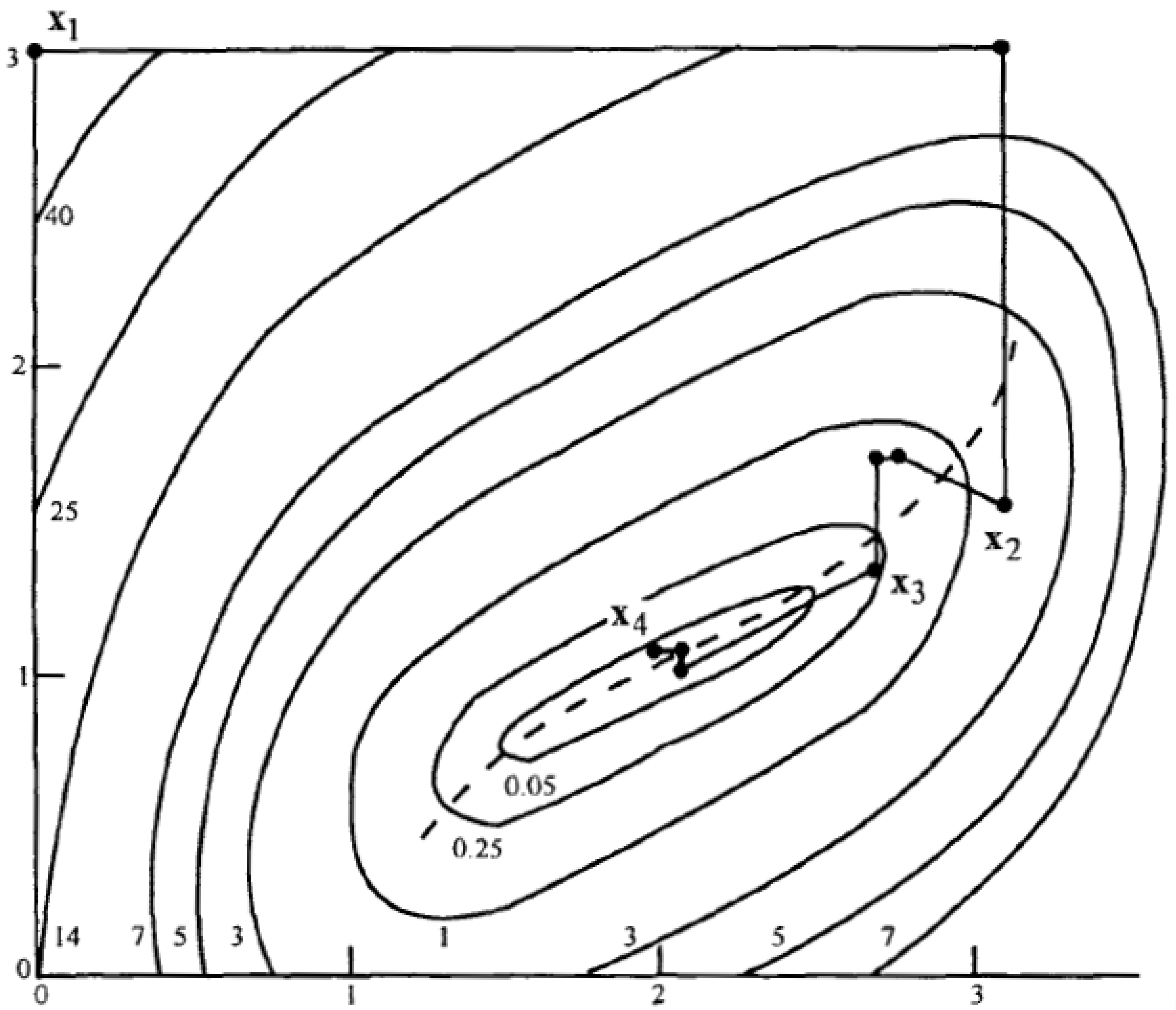


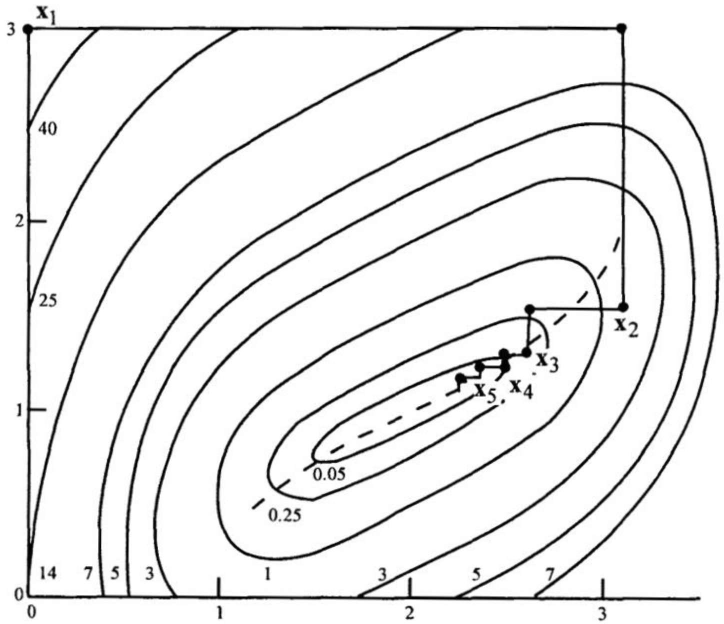
前两次迭代示意

◆例：$Min\ (x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$,初始点(0, 3)

Iteration k	$\mathbf{x}_k$ / $f(\mathbf{x}_k)$	j	$\mathbf{y}_j$	$\mathbf{d}_j$	λ_j	$\mathbf{y}_{j+1}$	$\mathbf{d}$	$\hat{\lambda}$	$\mathbf{y}_3+\hat{\lambda}\mathbf{d}$
1	(0.00, 3.00)	1	(0.00, 3.00)	(1.0, 0.0)	3.13	(3.13, 3.00)	—	—	—
	52.00	2	(3.13, 3.00)	(0.0, 1.0)	−1.44	(3.13, 1.56)	(3.13, 1.44)	−0.10	(2.82, 1.70)
2	(3.13, 1.56)	1	(2.82, 1.70)	(1.0, 0.0)	−0.12	(2.70, 1.70)	—	—	—
	1.63	2	(2.70, 1.70)	(0.0, 1.0)	−0.35	(2.70, 1.35)	(−0.43, −0.21)	1.50	(2.06, 1.04)
3	(2.70, 1.35)	1	(2.06, 1.04)	(1.0, 0.0)	−0.02	(2.04, 1.04)	—	—	—
	0.24	2	(2.04, 1.04)	(0.0, 1.0)	−0.02	(2.04, 1.02)	(−0.66, −0.33)	0.06	(2.00, 1.00)
4	(2.04, 1.02)	1	(2.00, 1.00)	(1.0, 0.0)	0.00	(2.00, 1.00)	—	—	—
	0.000003	2	(2.00, 1.00)	(0.0, 1.0)	0.00	(2.00, 1.00)			
5	(2.00, 1.00)								
	0.00								

◆图示：沿峡谷方向显著改进收敛速度





◆离散步长的Hooke和Jeeves方法

- $d_1, d_2, \cdots, d_n$为坐标轴方向，标量$\epsilon > 0$作为终止算法的参数，步长$\Delta \geq \epsilon$,加速因子$\alpha > 0$,初始点$x^{(1)}$,令$y^{(1)} = x^{(1)}, k = j = 1$

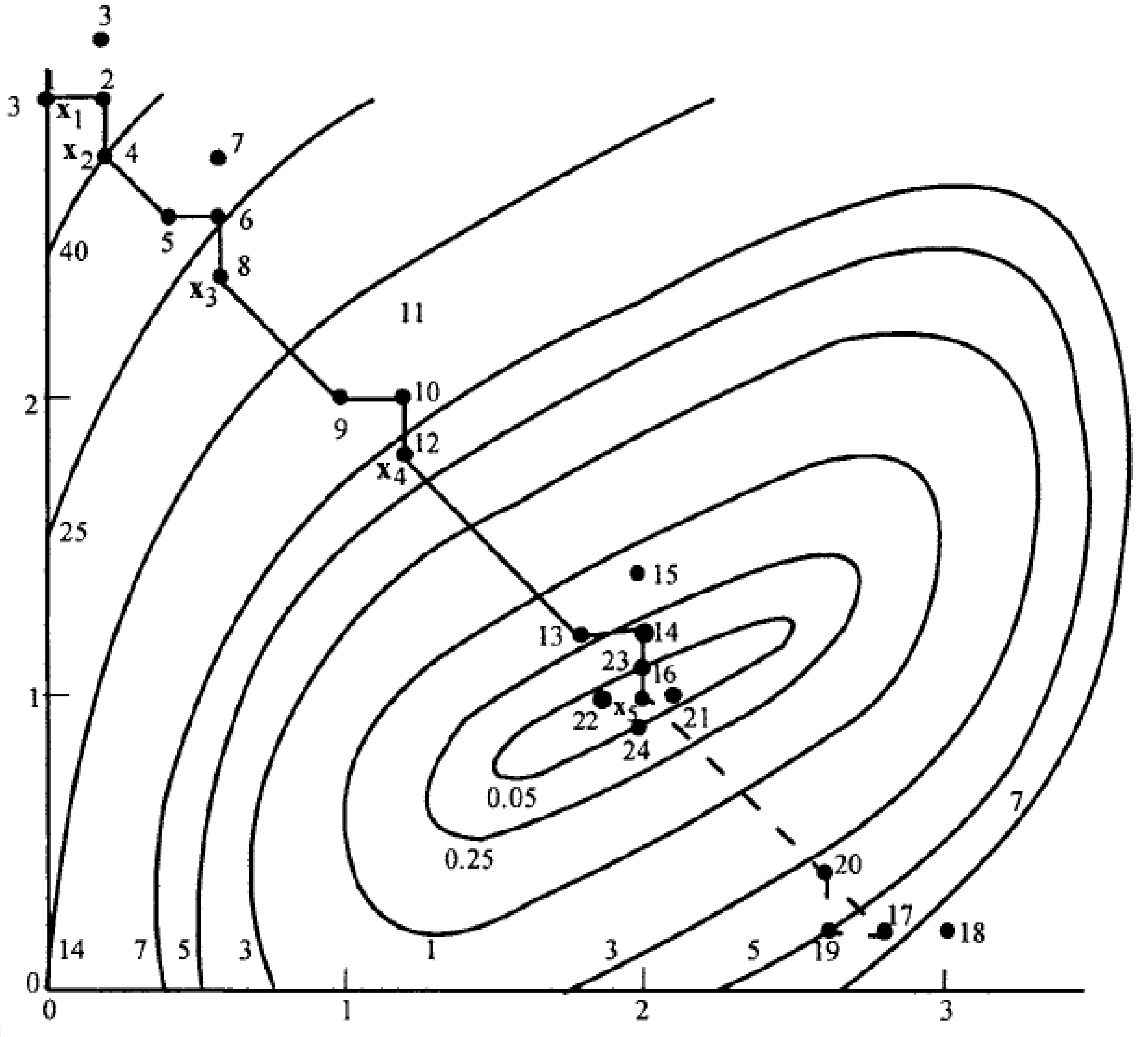
Exploratory

- **Step1.** 在$f\left(y^{(j)} + \Delta d_j\right) < f(y^{(j)})$,试验成功，令$y^{(j+1)} = y^{(j)} + \Delta d_j$, Goto **Step2**, 否则如果$f\left(y^{(j)} - \Delta d_j\right) \geq f(y^{(j)})$,试验失败。此时，如果$f\left(y^{j} - \Delta d_j\right) < f\left(y^{(j)}\right)$,令$y^{(j+1)} = y^{(j)} - \Delta d_j$， Goto **Step2**;否则$y^{(j+1)} = y^{(j)}$, **Goto Step2**;
- **Step2.** 若$j < n, j \leftarrow j + 1$ 重复**Step1** .否则，若$f(y^{(n+1)}) < f\left(x^{(k)}\right)$, Goto **step 3**;否则 Goto **Step4**

Pattern 搜索

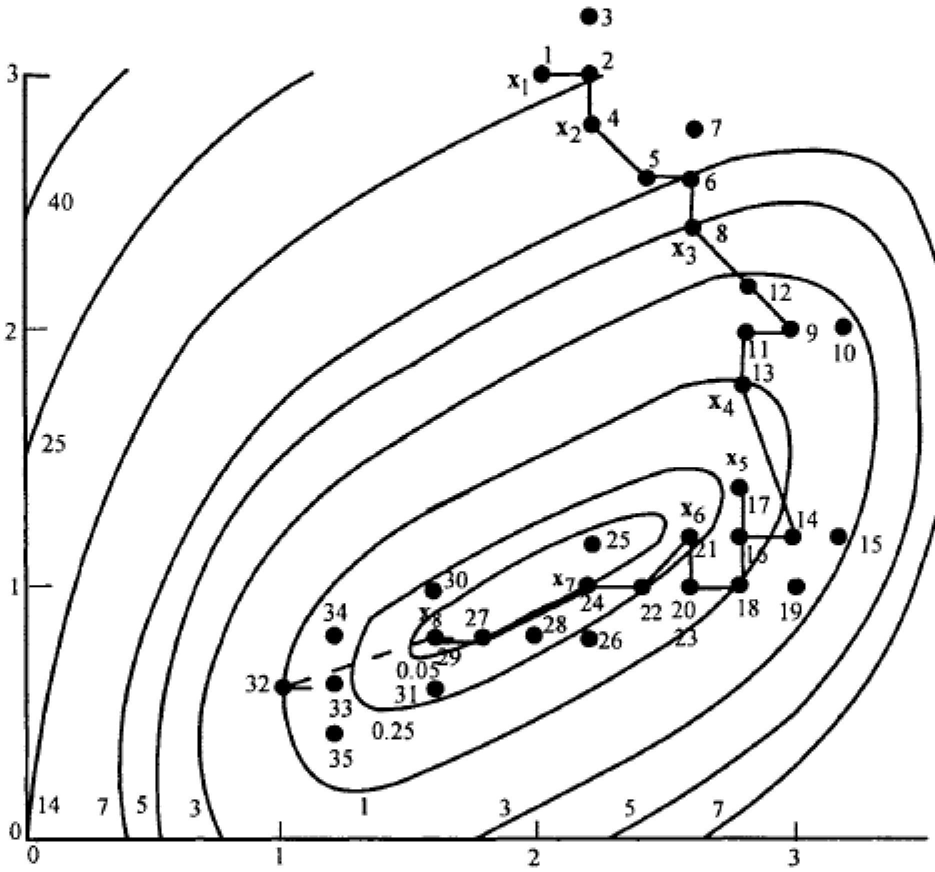
- **Step3.** 令$x^{(k+1)} = y^{(n+1)}$,令$y^{(1)} = x^{(k+1)} + \alpha\left(x^{(k+1)} - x^{(k)}\right)$.令$k \leftarrow k + 1$,令$j = 1$,Goto **Step1**
- **Step4.**如果$\Delta \leq \epsilon$,停止；$x^{(k)}$为解。否则，$\Delta \leftarrow \frac{\Delta}{2}$， 令$y^{(1)} = x^{(k)}, x^{(k+1)} = x^{(k)}, k \leftarrow k + 1$,令$j = 1$，重复**Step1.**

- 例：$Min\ (x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$,初始点$(0,3)$
- 参数$\alpha=1.0,\Delta=0.2$
- 数字表示点的顺序
- 虚线表示拒绝的加速步



例:

- 例：$Min\ (x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$, 初始点$(2,3)$
- 参数$\alpha=1.0, \Delta=0.2$，(S)表示成功，(F)表示失败



Iteration k	Δ	$\mathbf{x}_k$ $f(\mathbf{x}_k)$	j	$\mathbf{y}_j$ $f(\mathbf{y}_j)$	$\mathbf{d}_j$	$\mathbf{y}_j+\Delta\mathbf{d}_j$ $f(\mathbf{y}_j+\Delta\mathbf{d}_j)$	$\mathbf{y}_j-\Delta\mathbf{d}_j$ $f(\mathbf{y}_j-\Delta\mathbf{d}_j)$
1	0.2	(2.00, 3.00) 16.00	1	(2.00, 3.00) 16.00	(1.0, 0.0)	(2.20, 3.00) 14.44(S)	—
			2	(2.20, 3.00) 14.44	(0.0, 1.0)	(2.20, 3.20) 17.64(F)	(2.20, 2.80) 11.56(S)
2	0.2	(2.20, 2.80) 11.56	1	(2.40, 2.60) 7.87	(1.0, 0.0)	(2.60, 2.60) 6.89(S)	—
			2	(2.60, 2.60) 6.89	(0.0, 1.0)	(2.60, 2.80) 9.13(F)	(2.60, 2.40) 4.97(S)
3	0.2	(2.60, 2.40) 4.97	1	(3.00, 2.00) 2.00	(1.0, 0.0)	(3.20, 2.00) 2.71(F)	(2.80, 2.00) 1.85(S)
			2	(2.80, 2.00) 1.85	(0.0, 1.0)	(2.80, 2.20) 2.97(F)	(2.80, 1.80) 1.05(S)
4	0.2	(2.80, 1.80) 1.05	1	(3.00, 1.20) 1.36	(1.0, 0.0)	(3.20, 1.20) 2.71(F)	(2.80, 1.20) 0.57(S)
			2	(2.80, 1.20) 0.57	(0.0, 1.0)	(2.80, 1.40) 0.41(S)	—
5	0.2	(2.80, 1.40) 0.41	1	(2.80, 1.00) 1.05	(1.0, 0.0)	(3.00, 1.00) 2.00(F)	(2.60, 1.00) 0.49(S)
			2	(2.60, 1.00) 0.49	(0.0, 1.0)	(2.60, 1.20) 0.17(S)	—
6	0.2	(2.60, 1.20) 0.17	1	(2.40, 1.00) 0.19	(1.0, 0.0)	(2.60, 1.00) 0.49(F)	(2.20, 1.00) 0.04(S)
			2	(2.20, 1.00) 0.04	(0.0, 1.0)	(2.20, 1.20) 0.04(F)	(2.20, 0.80) 0.36(F)
7	0.2	(2.20, 1.00) 0.04	1	(1.80, 0.80) 0.04	(1.0, 0.0)	(2.00, 0.80 0.16(F)	(1.60, 0.80) 0.03(S)
			2	(1.60, 0.80) 0.03	(0.0, 1.0)	(1.60, 1.00) 0.19(F)	(1.60, 0.60) 0.19(F)
8	0.2	(1.60, 0.80) 0.03	1	(1.00, 0.60) 0.67	(1.0, 0.0)	(1.20, 0.60) 0.41(S)	—
			2	(1.20, 0.60) 0.41	(0.0, 1.0)	(1.20, 0.80) 0.57(F)	(1.20, 0.40) 0.57(F)
9	0.1	(1.60, 0.80) 0.03	1	(1.60, 0.80) 0.03	(1.0, 0.0)	(1.70, 0.80) 0.02(S)	—
			2	(1.70, 0.80) 0.02	(0.0, 1.0)	(1.70, 0.90) 0.02(F)	(1.70, 0.70) 0.10(F)
10	0.1	(1.70, 0.80) 0.02	1	(1.80, 0.80) 0.04	(1.0, 0.0)	(1.90, 0.80) 0.09(F)	(1.70, 0.80) 0.02(S)
			2	(1.70, 0.80) 0.02	(0.0, 1.0)	(1.70, 0.90) 0.02(F)	(1.70, 0.70) 0.10(F)

- Rosenbrock方法:原始方法并没有线索搜而是直接采取沿搜索方向的离散步长搜索，每次迭代沿n个线性无关的正交方向进行，当达到每次迭代终点时，构造一组正交向量
- 假设$d_1, d_2, \cdots, d_n$是一个组线性无关的范数为1的向量。并假设这组向量相互正交，从当前向量$x^{(k)}$开始，目标函数f沿每个方向进行最小化，得到$x^{(k+1)}$点，此时：$x^{(k+1)} - x^{(k)} = \Sigma_{j=1}^{n} \lambda_j d_j$,$\lambda_j$为该方向上移动的距离，可通过Gram-Schmidt过程来获得一组正交方向集合$\overline{d}_j, j = 1, 2, \cdots, n$，(5-1)式如下:

$$a_j = \begin{cases} d_j, & \lambda_j = 0 \\ \Sigma_{i=j}^{n} \lambda_i d_i, & \lambda_j \neq 0 \end{cases}, \quad b_j = \begin{cases} a_j, & j = 1 \\ a_j - \Sigma_{i=1}^{j-1} \left(a_j^t \overline{d}_i\right) \overline{d}_i, & j \geq 2 \end{cases}, \quad \overline{d}_j = \frac{b_j}{\|b_j\|}$$

- 可以证明：如果$d_1, d_2, \cdots, d_n$是一组线性无关相互正交的向量，则上述构造的$\overline{d}_j, j = 1, 2, \cdots, n$对任意$\lambda_j$也是线性无关相互正交的向量，且如果$\lambda_j = 0$, 则$d_j = \overline{d}_j$

第5章无约束最优化方法(Unconstrained Optimization Methods)- Rosenbrock方法

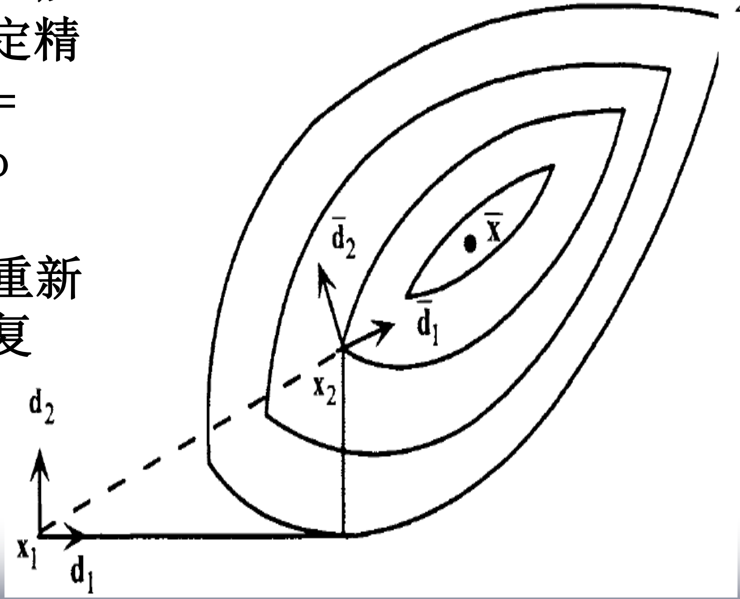
- **例：** $Min\ (x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$,**初始点(0,3)**
- **下左图是实用离散步长的Rosenbrock方法示意图，下右图是采用线搜索的Rosenbrock方法**

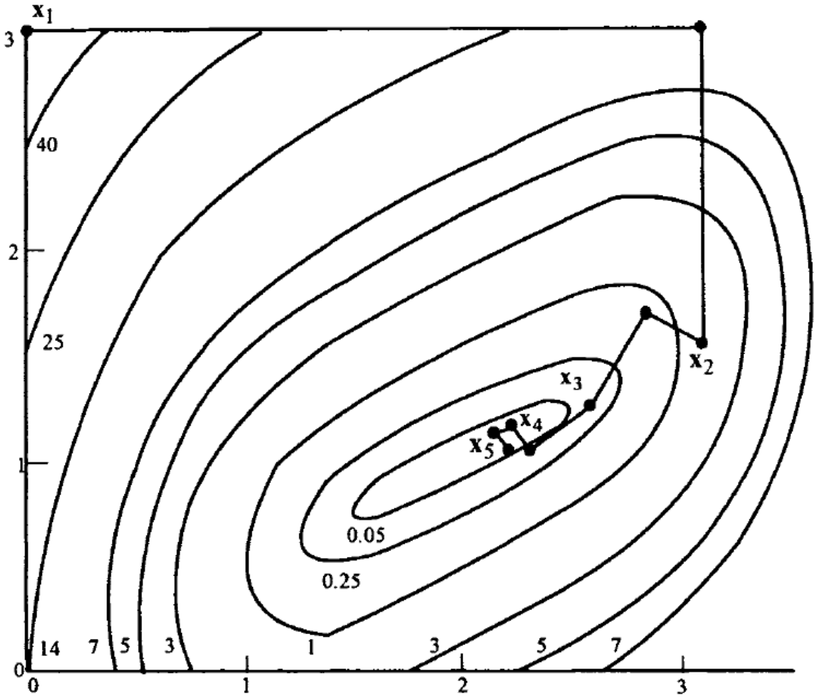
◆ Rosenbrock方法步骤:

Step1. 沿坐标方向搜索得到 $\boldsymbol{y}^{(j+1)}=\mathbf{y}^{(\mathrm{j})}+\boldsymbol{\lambda}_j\boldsymbol{d}_j$;

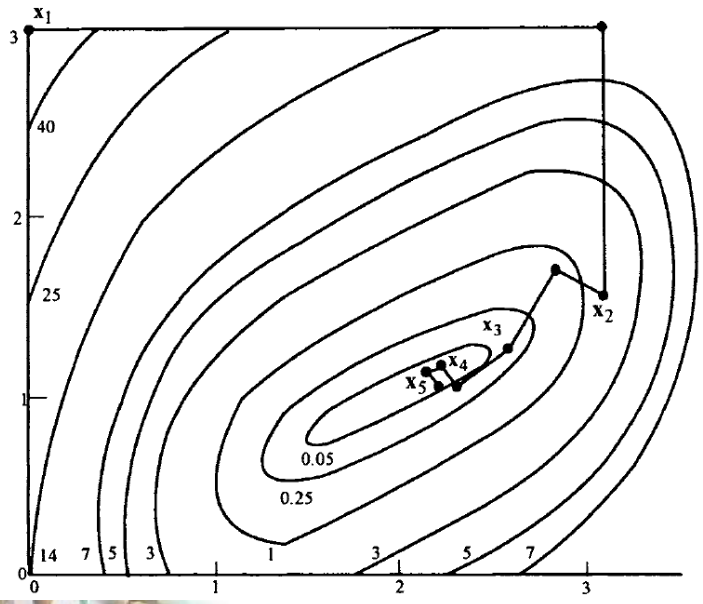
Step2. 令$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{y}^{(k+1)}$,如果两次解的距离小于预定精度，停止，否则令$\boldsymbol{y}^{(k)}=\boldsymbol{x}^{(k+1)}$, $\boldsymbol{k}\leftarrow\boldsymbol{k}+\mathbf{1}$, Goto Step3.

Step3. 根据(5-1)式，重新得到新的正交方向，重复Step1.





◆采用线搜索的Rosenbrock方法计算实例



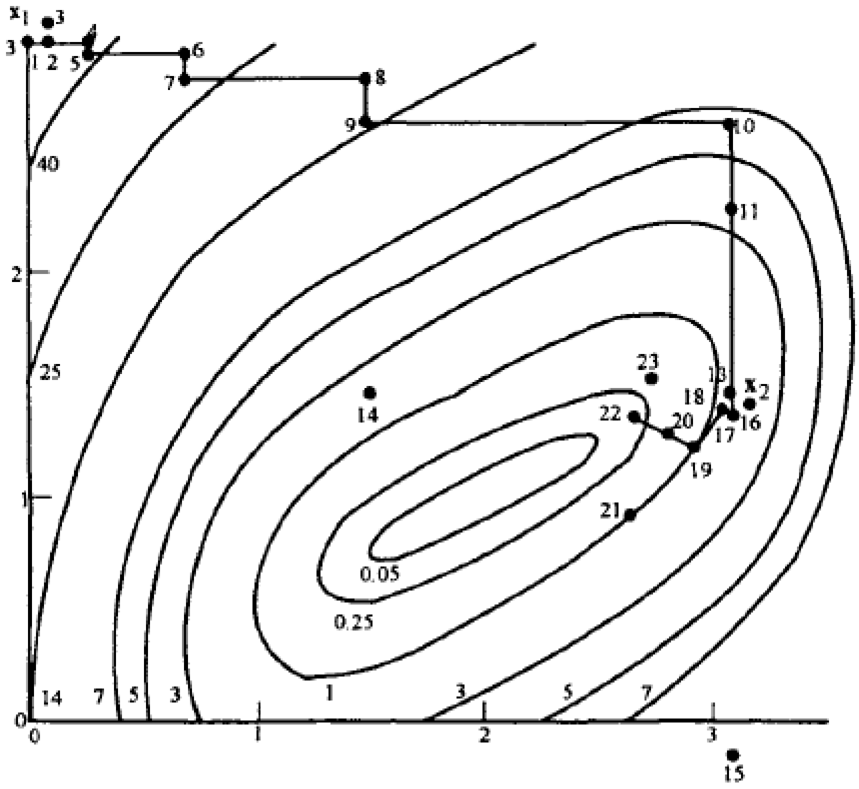
Iteration k	$\mathbf{x}_k$ $f(\mathbf{x}_k)$	j	$\mathbf{y}_j$ $f(\mathbf{y}_j)$	$\mathbf{d}_j$	λ_j	$\mathbf{y}_{j+1}$ $f(\mathbf{y}_{j+1})$
1	(0.00, 3.00) 52.00	1	(0.00, 3.00) 52.00	(1.00, 0.00)	3.13	(3.13, 3.00) 9.87
		2	(3.13, 3.00) 9.87	(0.00, 1.00)	−1.44	(3.13, 1.56) 1.63
2	(3.13, 1.56) 1.63	1	(3.13, 1.56) 1.63	(0.91, −0.42)	−0.34	(2.82, 1.70) 0.79
		2	(2.82, 1.70) 0.79	(−0.42, −0.91)	0.51	(2.16, 1.24) 0.16
3	(2.61, 1.24) 0.16	1	(2.61, 1.24) 0.16	(−0.85, −0.52)	0.38	(2.29, 1.04) 0.05
		2	(2.29, 1.04) 0.05	(0.52, −0.85)	−0.10	(2.24, 1.13) 0.004
4	(2.24, 1.13) 0.004	1	(2.24, 1.13) 0.004	(−0.96, −0.28)	0.04	(2.20, 1.12) 0.003
		2	(2.20, 1.12) 0.003	(0.28, −0.96)	0.02	(2.21, 1.10) 0.002

◆ 带离散步长的Rosenbrock方法

➢ 避免线搜索，函数值在具体的点上进行计算，可通过适当增加或减少步长来加速收敛，与以前的离散Jeeves方法类似，这里不再介绍

◆ $Min\ (x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$,初始点$(0,3)$,方向步长=$(0.1,0.1)$,增加步长因子$\alpha=2$,减少步长因子$\beta=-0.5$

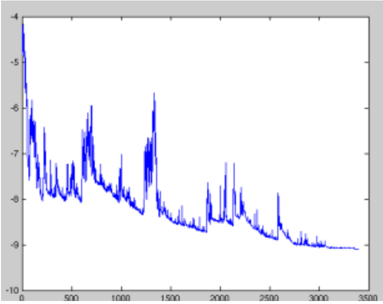
Iteration k	$\mathbf{x}_k$ $f(\mathbf{x}_k)$	j	$\mathbf{y}_j$ $f(\mathbf{y}_j)$	Δ_j	$\mathbf{d}_j$	$\mathbf{y}_j+\Delta_j\mathbf{d}_j$ $f(\mathbf{y}_j+\Delta_j\mathbf{d}_j)$
1	(0.00, 3.00) 52.00	1	(0.00, 3.00) 52.00	0.10	(1.00, 0.00)	(0.10, 3.00) 47.84(S)
		2	(0.10, 3.00) 47.84	0.10	(0.00, 1.00)	(0.10, 3.10) 50.24(F)
		1	(0.10, 3.00) 47.84	0.20	(1.00, 0.00)	(0.30, 3.00) 40.84(S)
		2	(0.30, 3.00) 40.84	−0.05	(0.00, 1.00)	(0.30, 2.95) 39.71(S)
		1	(0.30, 2.95) 39.71	0.40	(1.00, 0.00)	(0.70, 2.95) 29.90(S)
		2	(0.70, 2.95) 29.90	−0.10	(0.00, 1.00)	(0.70, 2.85) 27.86(S)
		1	(0.70, 2.85) 27.86	0.80	(1.00, 0.00)	(1.50, 2.85) 17.70(S)
		2	(1.50, 2.85) 17.70	−0.20	(0.00, 1.00)	(1.50, 2.65) 14.50(S)
		1	(1.50, 2.65) 14.50	1.60	(1.00, 0.00)	(3.10, 2.65) 6.30(S)
		2	(3.10, 2.65) 6.30	−0.40	(0.00, 1.00)	(3.10, 2.25) 3.42(S)
		1	(3.10, 2.25) 3.42	3.20	(1.00, 0.00)	(6.30, 2.25) 345.12(F)
		2	(3.10, 2.25) 3.42	−0.80	(0.00, 1.00)	(3.10, 1.45) 1.50(S)



带离散步长的Rosenbrock方法数值例子

Iteration k	$\mathbf{x}_k$ $f(\mathbf{x}_k)$	j	$\mathbf{y}_j$ $f(\mathbf{y}_j)$	Δ_j	$\mathbf{d}_j$	$\mathbf{y}_j+\Delta_j\mathbf{d}_j$ $f(\mathbf{y}_j+\Delta_j\mathbf{d}_j)$
1	(0.00, 3.00) 52.00	1	(0.00, 3.00) 52.00	0.10	(1.00, 0.00)	(0.10, 3.00) 47.84(S)
		2	(0.10, 3.00) 47.84	0.10	(0.00, 1.00)	(0.10, 3.10) 50.24(F)
		1	(0.10, 3.00) 47.84	0.20	(1.00, 0.00)	(0.30, 3.00) 40.84(S)
		2	(0.30, 3.00) 40.84	−0.05	(0.00, 1.00)	(0.30, 2.95) 39.71(S)
		1	(0.30, 2.95) 39.71	0.40	(1.00, 0.00)	(0.70, 2.95) 29.90(S)
		2	(0.70, 2.95) 29.90	−0.10	(0.00, 1.00)	(0.70, 2.85) 27.86(S)
		1	(0.70, 2.85) 27.86	0.80	(1.00, 0.00)	(1.50, 2.85) 17.70(S)
		2	(1.50, 2.85) 17.70	−0.20	(0.00, 1.00)	(1.50, 2.65) 14.50(S)
		1	(1.50, 2.65) 14.50	1.60	(1.00, 0.00)	(3.10, 2.65) 6.30(S)
		2	(3.10, 2.65) 6.30	−0.40	(0.00, 1.00)	(3.10, 2.25) 3.42(S)
		1	(3.10, 2.25) 3.42	3.20	(1.00, 0.00)	(6.30, 2.25) 345.12(F)
		2	(3.10, 2.25) 3.42	−0.80	(0.00, 1.00)	(3.10, 1.45) 1.50(S)
		1	(3.10, 1.45) 1.50	−1.60	(1.00, 0.00)	(1.50, 1.45) 2.02(F)
		2	(3.10, 1.45) 1.50	−1.60	(0.00, 1.00)	(3.10, −0.15) 13.02(F)
2	(3.10, 1.45) 1.50	1	(3.10, 1.45) 1.50	0.10	(0.89, −0.45)	(3.19, 1.41) 2.14(F)
		2	(3.10, 1.45) 1.50	0.10	(−0.45, −0.89)	(3.06, 1.36) 1.38(S)
		1	(3.06, 1.36) 1.38	−0.05	(0.89, −0.45)	(3.02, 1.38) 1.15(S)
		2	(3.02, 1.38) 1.15	0.20	(−0.45, −0.89)	(2.93, 1.20) 1.03(S)
		1	(2.93, 1.20) 1.03	−0.10	(0.89, −0.45)	(2.84, 1.25) 0.61(S)
		2	(2.84, 1.25) 0.61	0.40	(−0.45, −0.89)	(2.66, 0.89) 0.96(F)
		1	(2.84, 1.25) 0.61	−0.20	(0.89, −0.45)	(2.66, 1.34) 0.19(S)
		2	(2.66, 1.34) 0.19	−0.20	(−0.45, −0.89)	(2.75, 1.52) 0.40(F)

- **根据计算目标函数所使用数据的多少，有很多变种**
  - **Batch GD: Vanilla GD:** $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \boldsymbol{J}(\boldsymbol{\theta})$,所有训练数据集来计算梯度
  - **SGD：** $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \boldsymbol{J}(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{x}^{(i)}; \boldsymbol{y}^{(i)})$,
  - **Mini-Batch GD:**$\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \boldsymbol{J}(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{x}^{(i:i+n)}; \boldsymbol{y}^{(i:i+n)})$,
- **Mini-Batch GD**



  - 不保证收敛
  - 学习率很难选
  - 预定义规则，但阈值能无法动态适应不同数据集
  - 同一学习率用于所有参数，无法自适应只更新很少发生的特征
  - 鞍点给其带来很大困难

第5章无约束最优化方法(Unconstrained Optimization Methods)－ **Steepest Descent 方法**

- **最速下降法(Steepest Descent Method):1847年Cauchy提出，因此也称为Cauchy方法**
- **方向d为下降方向,则在非零梯度x处,$d = -\nabla f(x)/\|\nabla f(x)\|$,为最速下降方向，因此也称为梯度方法**
- **例：$Min\ (x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$,初始点$(0,3)$**
- **经过7次迭代后得$x_8 = (2.28, 1.15)^T$**
- **此时$\|\nabla f(x_8)\| = 0.09$,终止**

为什么？

引理：$f: R^n \to R$在x处可微，假设$\nabla f(x) \neq 0$.

则问题$min\ f'(x;d) = lim_{\lambda\to 0^+}\frac{f(x+\lambda d)-f(x)}{\lambda} = \nabla f(x)^t d$,

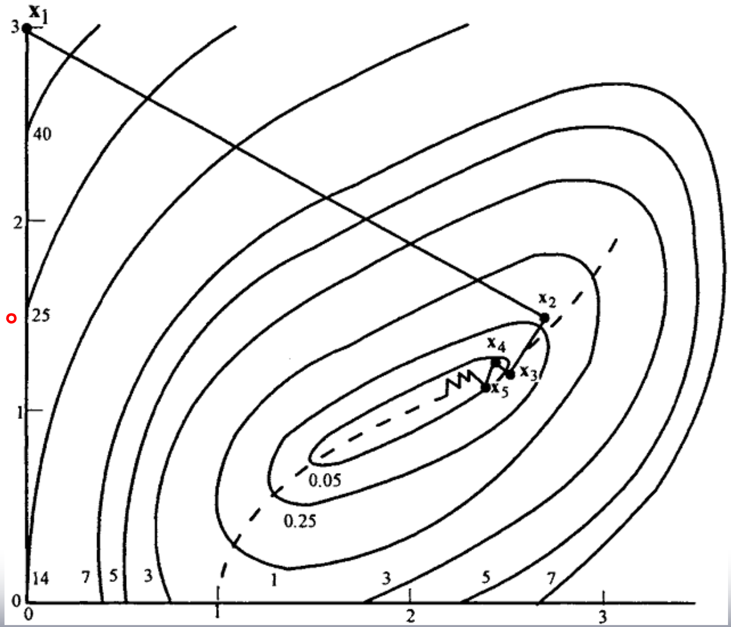
$s.t. ||d|| \le 1$的解为$\bar{d} = -\frac{\nabla f(x)}{||\nabla f(x)||}$, 即为$f$在$x$处的最速下降方向。

初始化, 令$\epsilon > 0$，初始点$x^{(1)}$，$k=1$

IF $||\nabla f(x^{(k)})|| < \epsilon$，stop;

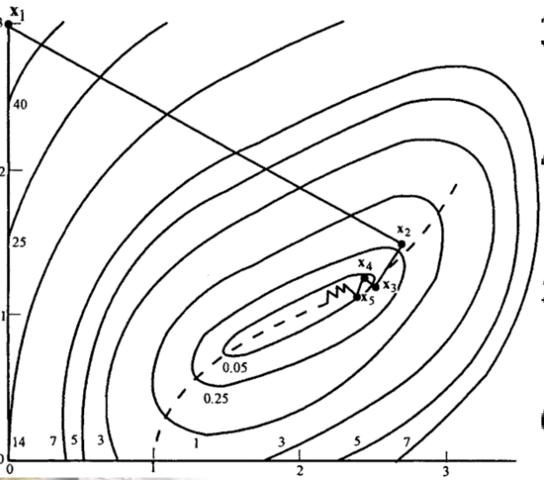
ELSE $d_k = -\nabla f(x^{(k)})$，解得$\lambda_k = argmin\ f(x^{(k)}+\lambda d_k), \lambda \ge 0$,

令$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d_k$, $k = k+1$;



◆最速下降法

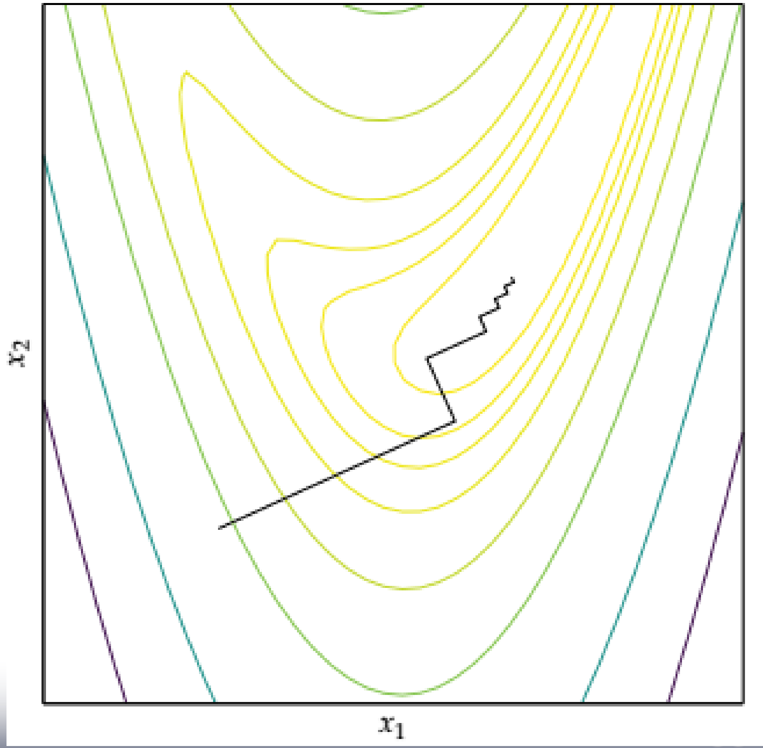
Iteration k	$\mathbf{x}_k$ / $f(\mathbf{x}_k)$	$\nabla f(\mathbf{x}_k)$	$\lVert\nabla f(\mathbf{x}_k)\rVert$	$\mathbf{d}_k = -\nabla f(\mathbf{x}_k)$	λ_k	$\mathbf{x}_{k+1}$
1	(0.00, 3.00) 52.00	(–44.00, 24.00)	50.12	(44.00, –24.00)	0.062	(2.70, 1.51)
2	(2.70, 1.51) 0.34	(0.73, 1.28)	1.47	(–0.73, –1.28)	0.24	(2.52, 1.20)
3	(2.52, 1.20) 0.09	(0.80, –0.48)	0.93	(–0.80, 0.48)	0.11	(2.43, 1.25)
4	(2.43, 1.25) 0.04	(0.18, 0.28)	0.33	(–0.18, –0.28)	0.31	(2.37, 1.16)
5	(2.37, 1.16) 0.02	(0.30, –0.20)	0.36	(–0.30, 0.20)	0.12	(2.33, 1.18)
6	(2.33, 1.18) 0.01	(0.08, 0.12)	0.14	(–0.08, –0.12)	0.36	(2.30, 1.14)
7	(2.30, 1.14) 0.009	(0.15, –0.08)	0.17	(–0.15, 0.08)	0.13	(2.28, 1.15)
8	(2.28, 1.15) 0.007	(0.05, 0.08)	0.09			



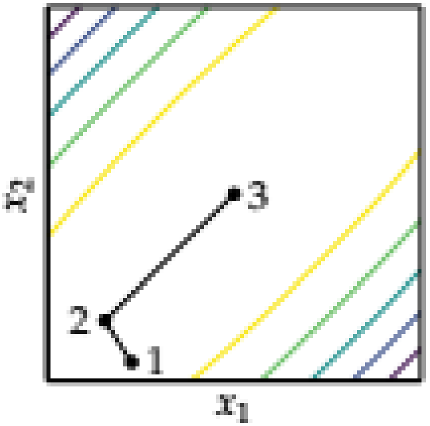
- 练习：假设$f(x)=x_1x_2^2$,则其梯度为∇f =?若$x^{(k)}=[1,2]^T$,则该点处的归一化最速下降方向$d^{(k)}$为多少？
- 若$\alpha_k=argmin_\alpha f(x^{(k)}+\alpha d^{(k)})$，则有
- $\nabla f\left(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}\right)^T d^{(k)}=0$(为什么)

$$\alpha=-\frac{d^T(Ax+b)}{d^TAd}$$

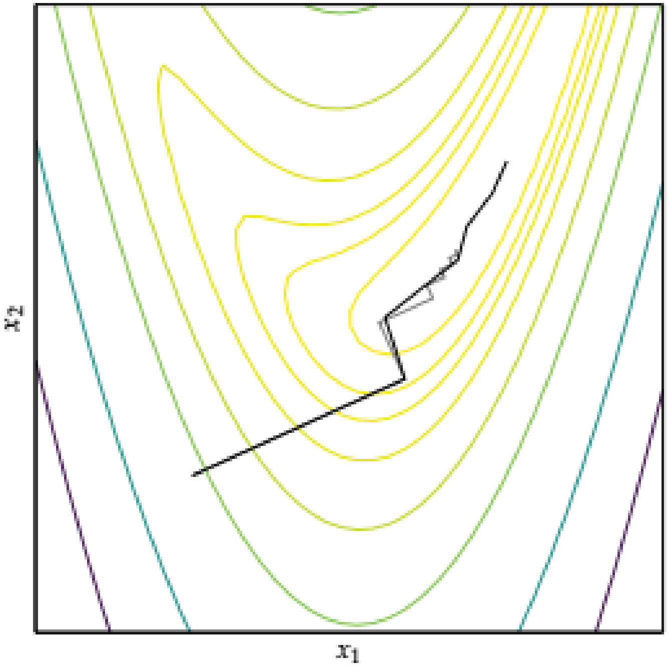
- 则必有：$d^{(k+1)^T}d^{(k)}=0$
- 若$f=\frac{1}{2}x^TAx+bx+c$,请计算
- $min_\alpha f(x+\alpha d)$中的α =?
- 若$d^{(k+1)}=-g^{(k+1)}+\beta_k d^{(k)}$
- 根据共轭⇒ $\beta_k=\frac{g^{(k+1)^T}Ad^{(k)}}{d^{(k)^T}Ad^{(k)}}$



第5章无约束最优化方法(Unconstrained Optimization Methods)－Steepest Descent 方



- 根据共轭⇒ $\beta_k = \dfrac{{g^{(k+1)}}^T A d^{(k)}}{{d^{(k)}}^T A d^{(k)}}$
- 显然每次计算都需要知道共轭矩阵A，这比较困难，因此将β_k放松
  - Dai-Yuan： $\beta_k = \dfrac{||\nabla f(x_{k+1})||^2}{<\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k), d_k>}$
  - Fletcher-Reeves: $\beta_k = \dfrac{{g^{(k)}}^T g^{(k)}}{{g^{(k-1)}}^T g^{(k-1)}}$
  - Polak-Ribiere: $\beta_k = \dfrac{{g^{(k)}}^T \left(g^{(k)} - g^{(k-1)}\right)}{{g^{(k-1)}}^T g^{(k-1)}}$
  - PR方法中，若令β可自动重设$\beta \leftarrow max(\beta, 0)$则确保其收敛



- $\min_{x\in R^n} f(x)$,满足如下假设
  - $f \in C_M^{2,2}(R^n)$
  - f有一个局部极小值点$x^* \in R^n$,该点处的Hessian矩阵正定
  - 该点处的Hessian矩阵，知道其上下界$0 < \mu \leq L < \infty$,即
$$\mu I_n \leq \nabla^2 f(x^*) \leq L I_n$$
  - 初始点x_0足够接近x^*
- 定理：令$f \in C_M^{2,2}(R^n), \forall x, y \in R^n$,我们有
  - $||\nabla f(y) - \nabla f(x) - \nabla^2 f(x)(y-x)|| \leq \frac{M}{2}||y-x||^2$
  - $|f(y) - f(x) - < \nabla f(x), y-x > -\frac{1}{2} < \nabla^2 f(x)(y-x), y-x > | \leq \frac{M}{6}||y-x||^3$
- 推论：令$f \in C_M^{2,2}(R^n)$和$x, y \in R^n$,满足$||y-x|| = r$,则有
  - $\nabla^2 f(x) - MrI_n \leq \nabla^2 f(y) \leq \nabla^2 f(x) + MrI_n$

第5章无约束最优化方法(Unconstrained Optimization Methods)- Steepest Descent 方法

◆梯度法及其收敛性分析

- $x_0 \in R^n$
- $x_{k+1} = x_k - h_k \nabla f(x_k), k = 0, 1, \cdots$,步长$h_k > 0$

◆h_k的选取有很多变形

- $\{\mathrm{h_k}\}_{k=0}^{\infty}$:如$h_k = h > 0, h_k = \frac{h}{\sqrt{k+1}}$
- 全松弛（精确步长）：$h_k = argmin_{h \geq 0} f(x_k - h\nabla f(x_k))$
- Armijo规则：对$h > 0$,确定$x_{k+1} = x_k - h\nabla f(x_k)$,满足
  - ✓$\alpha < \nabla f(x_k), x_k - x_{k+1} > \leq f(x_k) - f(x_{k+1})$
  - ✓$\beta < \nabla f(x_k), x_k - x_{k+1} > \geq f(x_k) - f(x_{k+1})$
  - ✓其中,$0 < \alpha < \beta < 1$是一些固定参数.

◆梯度法及其收敛性分析

- $min_{x\in R^n} f(x)$,满足如下假设
  - $f\in C_M^{2,2}(R^n)$
  - f有一个局部极小值点$x^*\in R^n$,该点处的Hessian矩阵正定
  - 该点处的Hessian矩阵，知道其上下界$0<\mu\le L<\infty$,即

$$\mu I_n \le \nabla^2 f(x^*) \le L I_n$$

  - 初始点x_0足够接近x^*
- 定理：令$f\in C_M^{2,2}(R^n), \forall x,y\in R^n$,我们有
  - $||\nabla f(y)-\nabla f(x)-\nabla^2 f(x)(y-x)|| \le \frac{M}{2}||y-x||^2$
  - $|f(y)-f(x)-<\nabla f(x),y-x>-\frac{1}{2}<\nabla^2 f(x)(y-x),y-x>| \le \frac{M}{6}||y-x||^3$
- 推论：令$f\in C_M^{2,2}(R^n)$和$x,y\in R^n$,满足$||y-x||=r$,则有
  - $\nabla^2 f(x)-MrI_n \le \nabla^2 f(y) \le \nabla^2 f(x)+MrI_n$

◆梯度法及其收敛性分析

◆定理：设函数$f(\cdot)$满足我们的假设，且初始点x_0足够接近一个严格局部极小点x^*,即

$$r_0 = ||x_0 - x^*|| < \bar{r} = \frac{2\mu}{M}$$

则步长为$h_k^* = \frac{2}{L+\mu}$的梯度法收敛如下：

◆$||x_k - x^*|| \le \frac{\bar{r}r_0}{\bar{r}-r_0}\left(1 - \frac{2\mu}{L+3\mu}\right)^k$,这种收敛速度称为线性收敛

- 靠近终点的之字形现象(Zigzagging)：收敛慢？

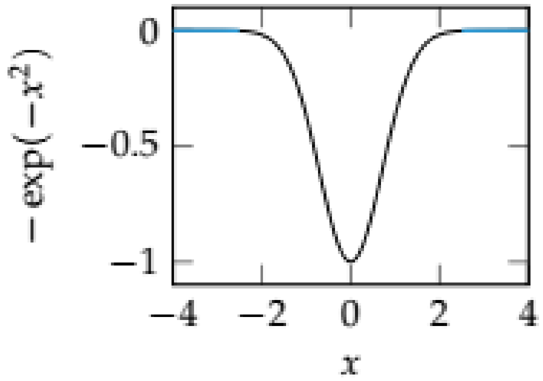
$$(5-2)\, f(x_k+\lambda d) = f(x_k)+\lambda\nabla f(x_k)^T d+\lambda\|d\|\alpha(x_k;\lambda d)$$

- 这里当$\lambda d \to 0$时,$\alpha(x_k;\lambda d)\to 0$,且$\|d\|=1$,显然靠近最优点时$\|\nabla f(x_k)\|$很小，使得(5-2)式右边第二项很小，也即此时只用f的线性逼近来寻找移动方向，可以预见，后面的可忽略项对函数f的描述起到重要作用

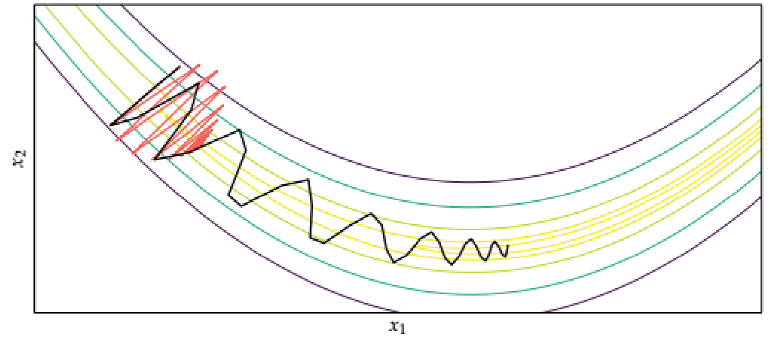
- 一般来说，可通过偏转梯度方向来避免Zigzagging.

- 例如$d=-\nabla f(x) \to d=-D\nabla f(x)$或者$d=-\nabla f(x)+g$,这里$D$是一个合适的矩阵，$g$是一个合适的向量

- 一般来说，一阶方法收敛慢，尤其是一些特殊的平坦曲面，下降慢

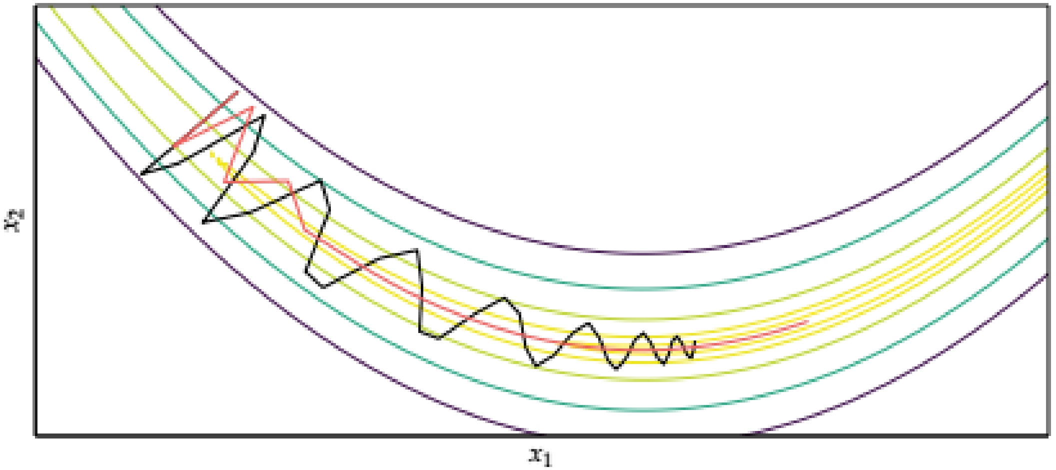


- 显然上述方法都是一阶方法，实际上对一阶方法还有很多变种
  - Momentum更新：$v^{(k+1)} = \beta v^{(k)} - \alpha g^{(k)}; x^{(k+1)} = x^{(k)} + v^{(k+1)}$
  - Rosenbrock函数$b = 100$



◆显然上述方法都是一阶方法，实际上对一阶方法还有很多变种

- Momentum更新：$v^{(k+1)} = \beta v^{(k)} - \alpha g^{(k)}; x^{(k+1)} = x^{(k)} + v^{(k+1)}$
  - ✓动量法在底部不会减缓步长
- Nesterov Momentum使用将来位置梯度
  - ✓$v^{(k+1)} = \beta v^{(k)} - \alpha \nabla f\left(x^{(k)} + \beta v^{(k)}\right); x^{(k+1)} = x^{(k)} + v^{(k+1)}$



◆显然上述方法都是一阶方法，实际上对一阶方法还有很多变种

- Momentum更新：$v^{(k+1)}=\beta v^{(k)}-\alpha g^{(k)};x^{(k+1)}=x^{(k)}+v^{(k+1)}$

动量法和N-动量法对所有分量统一参数

- Nesterov Momentum使用将来位置梯度
  - ✓$v^{(k+1)}=\beta v^{(k)}-\alpha\nabla f\left(x^{(k)}+\beta v^{(k)}\right);x^{(k+1)}=x^{(k)}+v^{(k+1)}$
- Adagrad方法(自适应子梯度方法)：为每个变量维度更新学习率
  - ✓$x_i^{(k+1)}=x_i^{(k)}-\frac{\alpha}{\epsilon+\sqrt{s_i^{(k)}}}g_i^{(k)}$,其中$s_i^{(k)}=\sum_{j=1}^{k}\left(g_i^{(j)}\right)^2$,$\epsilon\sim 1\times 10^{-8}$,防止被0除
  - ✓Adagrad对学习率不敏感，一般设置为0.1
  - ✓缺陷是s非下降，导致学习率会下降，影响收敛

◆ **显然上述方法都是一阶方法，实际上对一阶方法还有很多变种**

- **Momentum更新：** $v^{(k+1)}=\beta v^{(k)}-\alpha g^{(k)};x^{(k+1)}=x^{(k)}+v^{(k+1)}$
- **Nesterov Momentum使用将来位置梯度**
  - ✓ $v^{(k+1)}=\beta v^{(k)}-\alpha\nabla f\left(x^{(k)}+\beta v^{(k)}\right);x^{(k+1)}=x^{(k)}+v^{(k+1)}$
- Adagrad方法(自适应子梯度方法)：$x_i^{(k+1)}=x_i^{(k)}-\frac{\alpha}{\epsilon+\sqrt{s_i^{(k)}}}g_i^{(k)}$,其中$s_i^{(k)}=\sum_{j=1}^{k}\left(g_i^{(j)}\right)^2$,$\epsilon\sim1\times10^{-8}$,防止被0除
- **RMSProp：在adagrad上避免学习率下降：**
- $\hat{s}^{(k+1)}=\gamma\hat{s}^{(k)}+(1-\gamma)\left(g^{(k)}\odot g^{(k)}\right)$,衰减率$\gamma\in[0,1]$设定靠近0.9
- **Update：** $x_i^{(k+1)}=x_i^{(k)}-\frac{\alpha}{\epsilon+\sqrt{\hat{s}_i^{(k)}}}g_i^{(k)}=x_i^{(k)}-\frac{\alpha}{\epsilon+RMS(g_i)}g_i^{(k)}$
- **Adadelta:另一种避免Adagrad单调递减学习率的方法**
- $x_i^{(k+1)}=x_i^{(k)}-\frac{RMS(\Delta x_i)}{\epsilon+RMS(g_i)}g_i^{(k)}$,完全消除学习率的影响

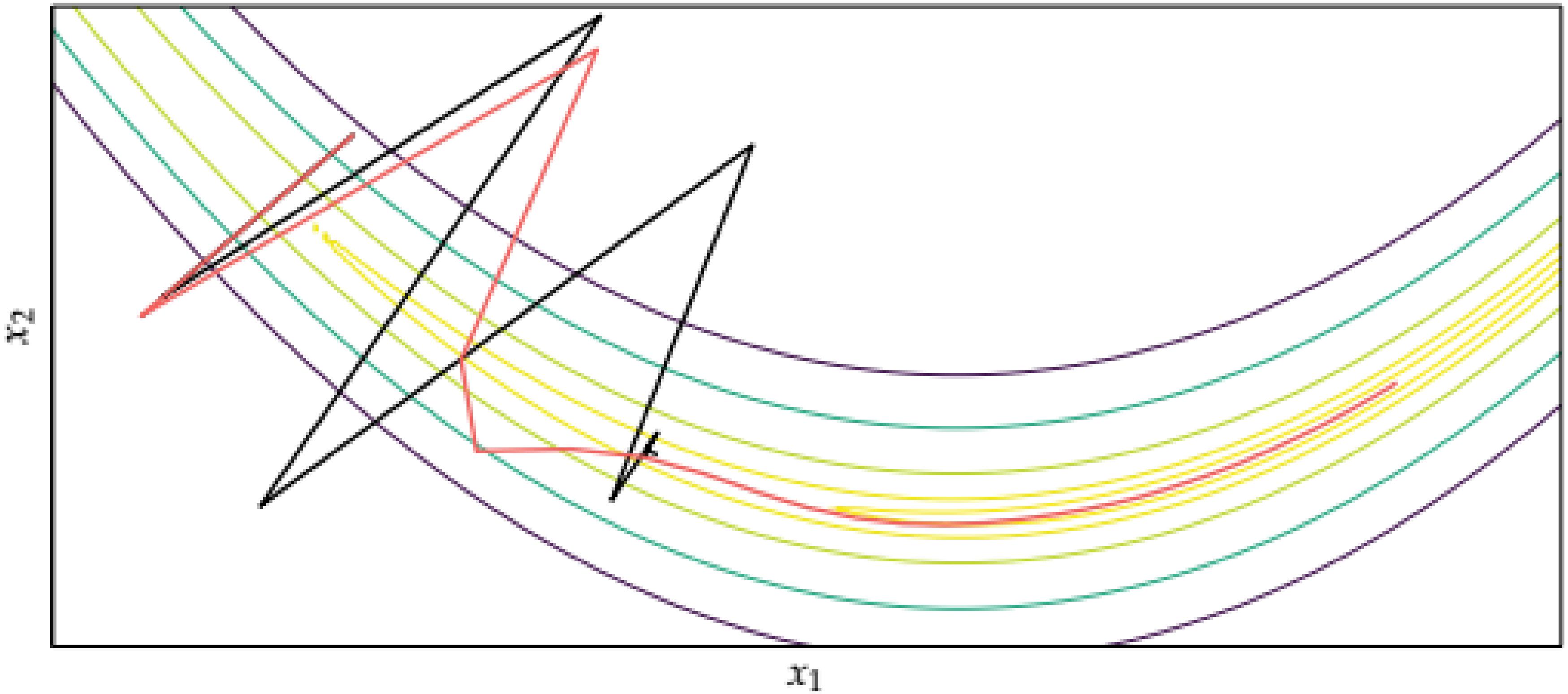
- **显然上述方法都是一阶方法，实际上对一阶方法还有很多变种**
  - **Momentum更新；Nesterov Momentum；**Adagrad方法**(自适应子梯度方法)**
  - **RMSProp；Adadelta**
  - **Adam(Adaptive moment estimation)-2015**
  - 修改每一个参数的学习率，存储指数衰减平方梯度，如**RMSProp,Adadelta,**以及指数衰减梯度，如**Momentum**
  - 初始化梯度和平方梯度为0时会引入偏差，因此需要专门的偏差校正来减轻这个问题（$\alpha = 0.01, \gamma_v = 0.9, \gamma_s = 0.999, \epsilon = 1 \times 10^{-8}$）
  - 带偏差的衰减**momentum:**$v^{(k+1)} = \gamma_v v^{(k)} + (1-\gamma_v) g^{(k)}$
  - 带偏差的衰减**sq. gradient:**$s^{(k+1)} = \gamma_s s^{(k)} + (1-\gamma_s)\left(g^{(k)} \odot g^{(k)}\right)$
  - 校正的衰减**momentum：** $\hat{v}^{(k+1)} = \dfrac{\hat{v}^{(k+1)}}{1-\gamma_v^k}$
  - 校正的衰减**sq. gradient：** $\hat{s}^{(k+1)} = \dfrac{s^{(k+1)}}{1-\gamma_s^k}$
  - 迭代：$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \dfrac{\alpha\, \hat{v}^{(k+1)}}{\epsilon + \sqrt{\hat{s}^{(k+1)}}}$

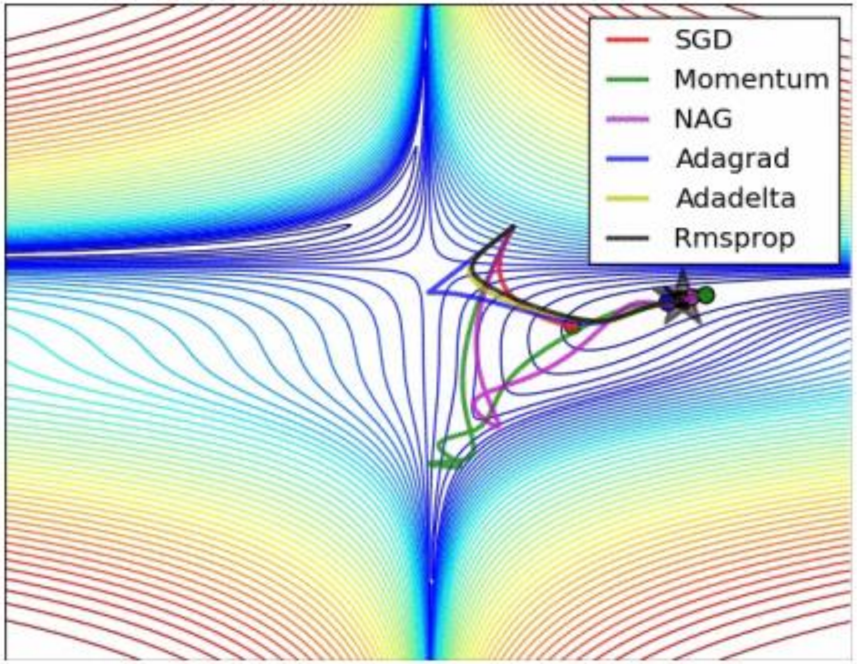
- 梯度加速方法一般要么对学习率特别敏感，要么需要在执行过程中浪费很长时间来修改学习率
- 而学习率表明方法对梯度信号到底有多敏感！学习率太高或太低都会显著影响算法的性能
- 2018年ICML提出Hypergradient descent方法，认为学习率的的导数应该对改进优化器的性能有用
- 超梯度是对超参数的导数，超梯度算法降低了对超参数的敏感性，允许更快速的自适应
- 超梯度下降将梯度下降应用到隐含下降方法的学习率上，要求目标函数对学习率求偏导数。对于梯度下降，其偏导数为：
- $\frac{\partial f\left(x^{(k)}\right)}{\partial \alpha}=\left(g^{(k)}\right)^{T}\frac{\partial}{\partial \alpha}\left(x^{(k-1)}-\alpha g^{(k-1)}\right)=\left(g^{(k)}\right)^{T}\left(-g^{(k-1)}\right)$
- 超梯度的计算要求上一次的梯度，最终的更新规则为：
- $\alpha^{(k+1)}=\alpha^{(k)}-\mu\frac{\partial f\left(x^{(k)}\right)}{\partial \alpha}=\alpha^{(k)}+\mu\left(g^{(k)}\right)^{T}g^{(k-1)}$,为超参数学习率

A. G. Baydin, R. Cornish, D. M. Rubio, M. Schmidt, and F. Wood, ‘‘Online Learning Rate Adaptation with Hypergradient Descent,’’ in *International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2018.

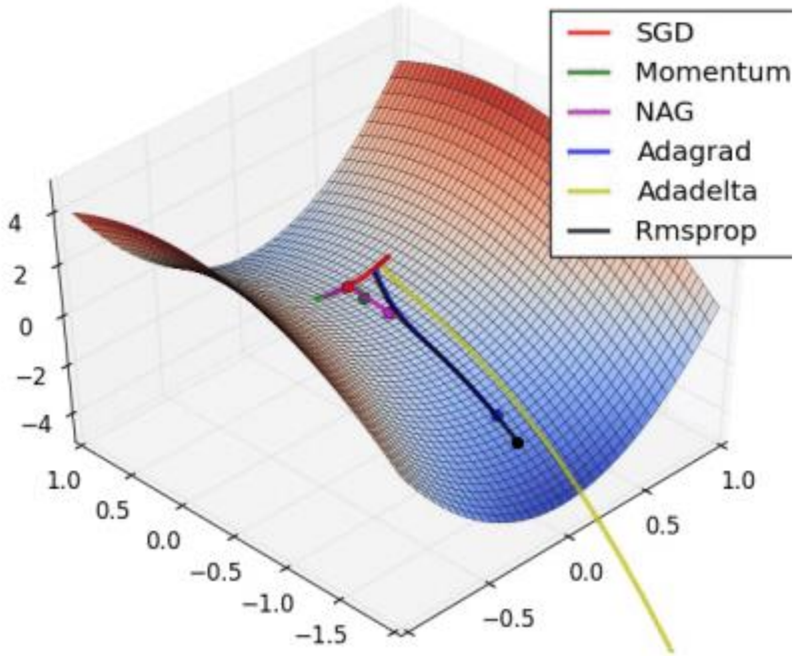
◆超梯度下降可以应用到任何类似梯度下降算法中

- 黑线表示Hypermomentum
- 红线表示Hyper-Nesterov





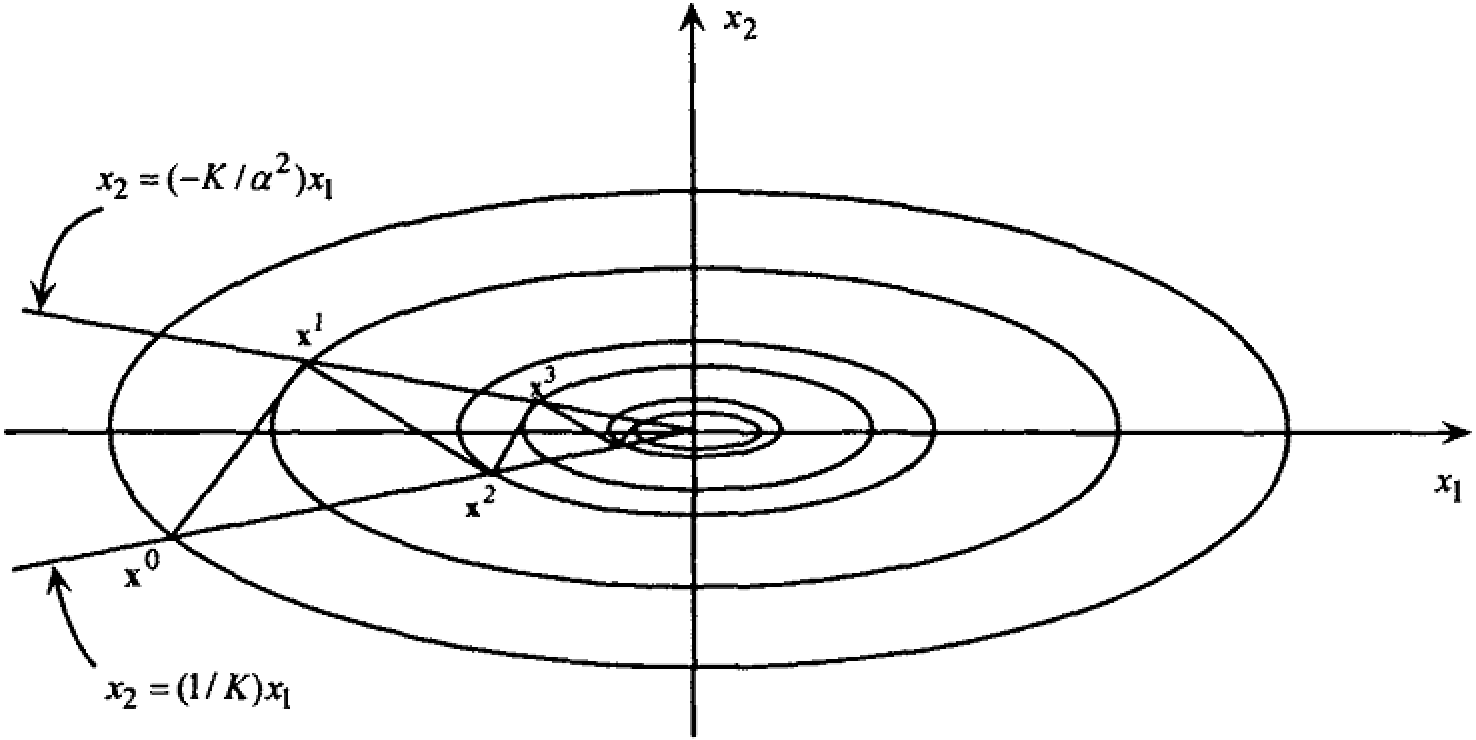
(a) SGD optimization on loss surface contours



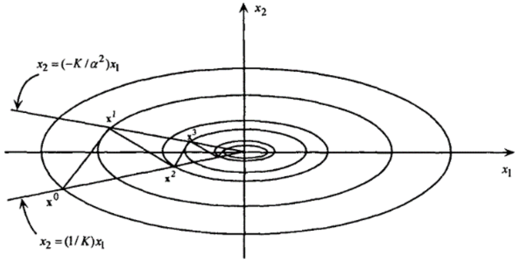
(b) SGD optimization on saddle point

◆最速下降法的收敛速率分析示例

◆考虑双变量函数$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}(x_1^2 + \alpha x_2^2), \alpha > 1$,其Hessian矩阵$H = diag\{1, \alpha\}$,定义其条件数为其最大特征值与最小特征值之比



第5章无约束最优化方法(Unconstrained Optimization Methods)- Steepest Descent



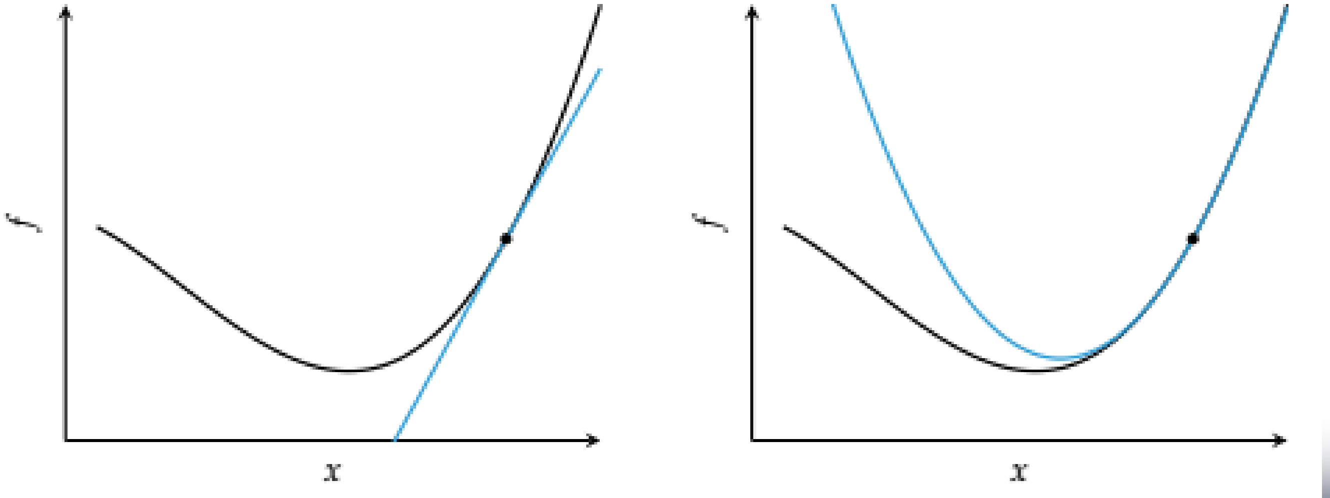
- 设初始点$x=(x_1,x_2)^T$,最速下降法得$x_{new}=x+\lambda d$,
- $d=-\nabla f(x)$=$-(x_1,\alpha x_2)^T$,注意$x_1\neq 0, x_2\neq 0, \lambda>0$
- 线搜索可得$\min f(\lambda)\Rightarrow \lambda=\frac{x_1^2+\alpha^2x_2^2}{x_1^2+\alpha^3x_2^2}$,从而$x_{new}=[\frac{\alpha^2x_1x_2^2(\alpha-1)}{x_1^2+\alpha^3x_2^2},\frac{x_1^2x_2(1-\alpha)}{x_1^2+\alpha^3x_2^2}]$,显然 $\frac{x_{1new}}{x_{2new}}=-\alpha^2\frac{x_2}{x_1}$
- 因此，从初始解$\frac{x_1}{x_2}=K\neq 0$,SD方法产生迭代序列$\{x^{(k)}\},k=1,2,\cdots$,且其两个元素之比$\{\frac{x_1^{(k)}}{x_2^{(k)}}\}$总是在$K,-\frac{\alpha^2}{K}$之间，并且序列收敛到最优点$x^*=(0,0)^T$
- 注意：α越大，这种Zigzagging现象越明显，为1时一次迭代收敛
- 此时考察$\{f(x^{(k)})\}$的收敛情况，易得
- (5-3) $\frac{f(x^{(k+1)})}{f(x^{(k)})}=\frac{K_k^2\alpha(\alpha-1)^2}{(K_k^2+\alpha^3)(K_k^2+\alpha)}, K_k\overset{\text{def}}{=}\frac{x_1^k}{x_2^k}$, (5-3)式当$K_k^2=\alpha^2$时最大化，因此可得

$\frac{f(x^{(k+1)})}{f(x^{(k)})}\leq\frac{(\alpha-1)^2}{(\alpha+1)^2}$,因此逐渐$\rightarrow 1$，且速度越来越慢

- 扩展到一般的二次函数$f(x)=\frac{1}{2}x^THx+c^Tx+b$, H为对称正定，显然最优解$x^*: Hx^*=-c$,令$g_k=\nabla f(x_k)=c+Hx_k$, $x_{k+1}=x_k+\lambda d_k \Rightarrow$
- $\lambda=\frac{g_k^t g_k}{g_k^T H g_k}$, $x_{k+1}=x_k-\lambda g_k$
- 看看它的收敛速度如何？
- 设误差函数为$e(x)=\frac{1}{2}(x-x^*)^TH(x-x^*)=f(x)+\frac{1}{2}x^{*T}Hx^*$,可以看出其与$f(x)$仅差一常数项
- $e(x_{k+1})=\left[1-\frac{(g_k^Tg_k)^2}{(g_k^THg_k)(g_k^TH^{-1}g_k)}\right]e(x_k)\le\frac{(\alpha-1)^2}{(\alpha+1)^2}e(x_k)$,这里$\alpha$为$H$的条件数
- 因此，$\{e(x_k)\}\to 0$的速度以$(\alpha-1)^2/(\alpha+1)^2$为上界线性或几何收敛，与前面的例子一样，随$\alpha$增加，收敛速率持续减慢，并且与初始值相关
- 对于二次可微的非二次函数也有类似的结果，这里不再赘述
- 如果使用不精确Armijo规则线搜索，来进行最速下降法求解，则只需梯度函数是$G>0$Lipschitz连续的，$\|\nabla f(x)-\nabla f(y)\|\le G\|x-y\|, \forall\, x,y\in S(x_0)\overset{\text{def}}{=}$
- $\{x: f(x)\le f(x_0)\}$,则获得的序列$\{x^{(k)}\}$要么K次后达到梯度为0的点，要么达到其极限为梯度为0的点

第5章无约束最优化方法(Unconstrained Optimization Methods)- Newton方法-二阶方法

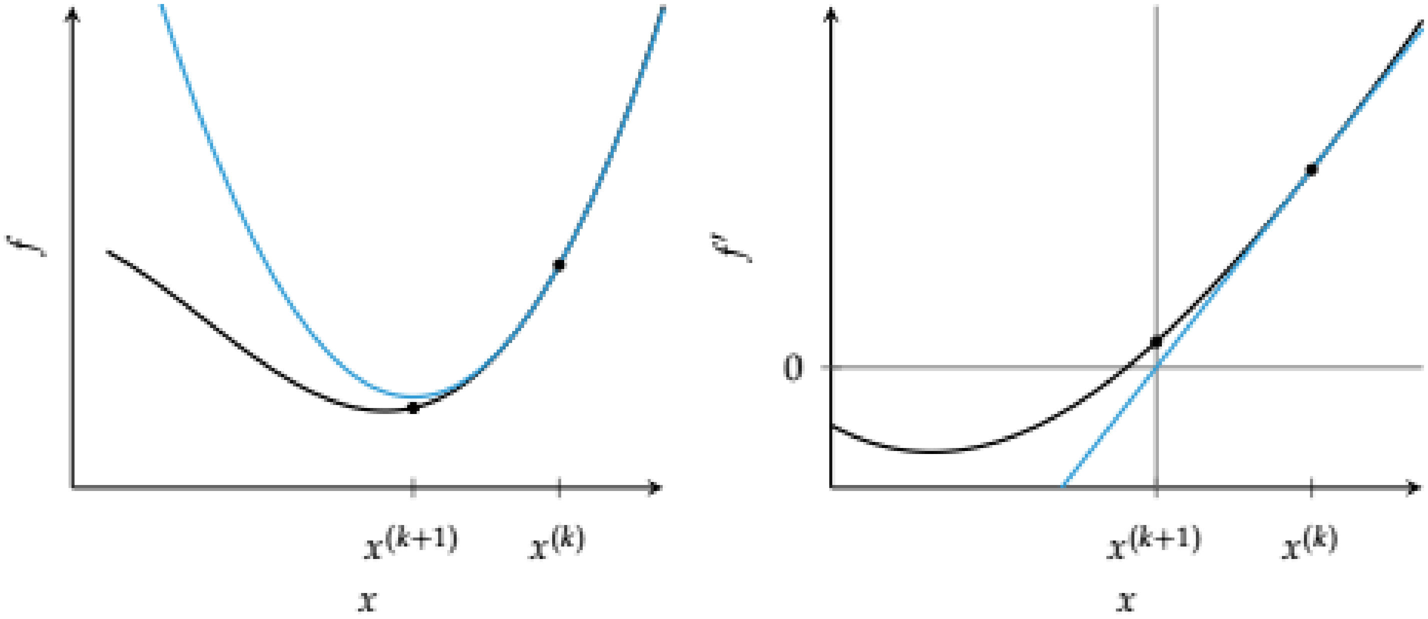
- 利用目标函数的一阶导数信息来近似目标函数，求解优化问题的方法，统称为一阶方法
- 利用目标函数的二阶信息来近似目标函数，求解优化问题的方法，称为二阶方法
  - 最典型的就是牛顿法
  - 一阶方法实际上并没有告诉应该沿该方向走多远



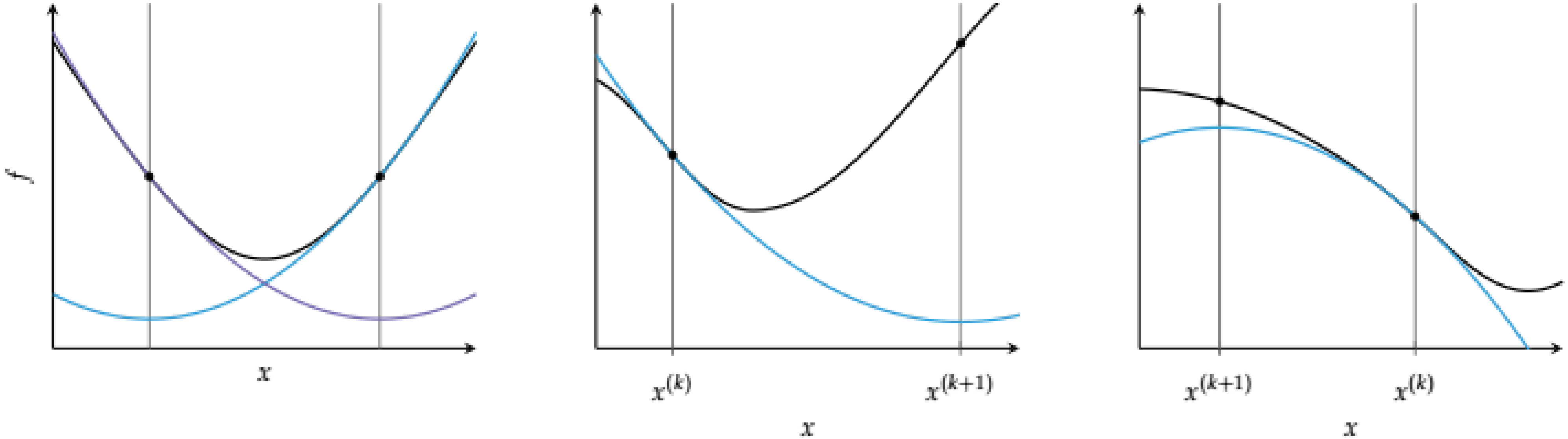
◆局部二阶近似

- ➢$q(x) = f\left(x^{(k)}\right) + \left(x - x^{(k)}\right)f'\left(x^{(k)}\right) + \frac{\left(x-x^{(k)}\right)^2}{2} f''\left(x^{(k)}\right)$
- ➢令其导数为0，得递推公式：$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{1}{f''\left(x^{(k)}\right)} f'\left(x^{(k)}\right)$

思考：可能会出现什么问题？



◆牛顿法的问题



◆收敛条件

- 初始点$x^{(1)} \in I = \{x|x \in [x^* - \delta, x^* + \delta]\}, f''(x) \neq 0$,
- $f'''(x)$在I上连续
- $\frac{1}{2}\left|\frac{f'''(x^{(1)})}{f''(x^{(1)})}\right| < c\left|\frac{f'''(x^*)}{f''(x^*)}\right|, c < \infty$

用到多维情况，二阶导数用Hessian矩阵替换

◆实际使用中，可以使用一阶导数来近似二阶导数

- $f''\left(x^{(k)}\right) \approx \dfrac{\left(f'\left(x^{(k)}\right)-f'\left(x^{(k-1)}\right)\right)}{x^{(k)}-x^{(k-1)}}$
- $x^{(k+1)} \leftarrow x^{(k)} - \dfrac{x^{(k)}-x^{(k-1)}}{f'\left(x^{(k)}\right)-f'\left(x^{(k-1)}\right)} f'\left(x^{(k)}\right)$---割法(secant)

用到多维情况，二阶导数用Hessian矩阵替换

- **牛顿法(Newton):通过左乘上Hessian矩阵的逆来偏离最速下降法方向来完成求解，本质上是通过找到函数的一个二次逼近的合适的方向而驱动的**
- $q(x)=f(x_k)+\nabla f(x_k)^T(x-x_k)+\frac{1}{2}(x-x_k)^T H(x_k)(x-x_k)$
- 令$q'(x)=0 \Rightarrow$迭代解：$x_{k+1}=x_k-H(x_k)^{-1}\nabla f(x_k)$
- **注意：Newton法可解释为带仿射缩放的最速下降法**
  - 给定迭代点x_k,假设$H(x_k)$对称正定，因而可以进行Cholesky分解,其逆矩阵表示为$H(x_k)^{-1}=LL^T$,L为下三角矩阵，且对角元素为正，现考虑仿射缩放变换$x=Ly$,变换后函数$F(y)\overset{\text{def}}{=}f(Ly)$,当前点$y_k=L^{-1}x_k$,因此有$\nabla F(y_k)=L^T\nabla f(ly_k)=L^T\nabla f(x_k)$,然后沿负梯度方向进行单位步长搜索可得新点

$$y_{k+1}=y_k-L^T\nabla f(x_k)$$

  - 这与最速下降法比较，发现只是在方向上左乘了L.
  - 从这里看到使用合适的伸缩变换的好处。实际上，如果函数f是二次的，则上述沿最速下降方向上的单位步长也是该方向上的最优步长，可直接从任意给定解一次迭代到最优解
- **需要注意的是，这些方法里面都有各自缺陷，把最速下降，牛顿，修正牛顿计算公式统一：$x_{k+1}=x_k-\lambda_k H_k\nabla f(x_k)$, $H_k=I$; $H_k=\left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1}$; $H_k=\left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1}$, λ_k用一维搜索则为修正牛顿法；如果利用一阶导数信息来逼近二阶Hessian矩阵信息，则称为拟牛顿法，例如变尺度法中采用近似矩阵来逼近$H_k=H_{k-1}+C_k$,则称为变尺度法，例如$C_k=t_k\alpha\alpha^T$, $\alpha=(a_1,a_2,\cdots,a_n)^T$,此时$C_k$秩为1，称为秩1校正，若$C_k=t_k\alpha\alpha^T+s_k\beta\beta^T$,则称为秩2校正，例如后续的DFP方法**

- 牛顿法(Newton）： $x_{k+1} = x_k - H(x_k)^{-1}\nabla f(x_k)$
- 实际上根据一维情况的推导，有如下近似关系：

$$\nabla^2 f(x_{k+1})(x_{k+1} - x_k) \approx \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$$

- 令$s_k = x_{k+1} - x_k, y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$,新的Hessian近似矩阵$B_{k+1}$满足如下的割方程（secant equation)

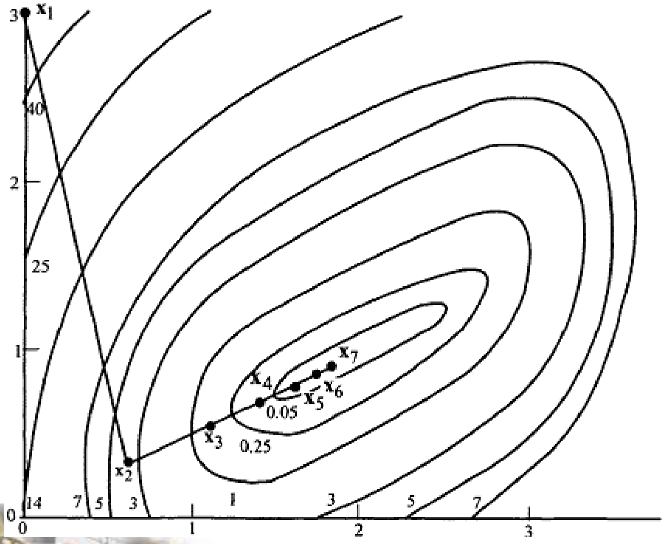
$$B_{k+1}s_k = y_k$$

- 一般要求矩阵B_{k+1}有一些比较好的性质，例如
  - 对称
  - $B_{k+1} - B_k$的秩很低，一般为1或2（BFGS）
- DFP： $B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k}$
- BFGS： $B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k}$, 只要初始$B_0$正定，且$s_k^T y_k > 0$,BFGS产生正定近似

曲率条件

第5章无约束最优化方法(Unconstrained Optimization Methods)- Newton方法

- 例：$Min\ (x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$,初始点$(0,3)$
- 七次迭代后终止



Iteration k	$\mathbf{x}_k$ $f(\mathbf{x}_k)$	$\nabla f(\mathbf{x}_k)$	$\mathbf{H}(\mathbf{x}_k)$	$\mathbf{H}(\mathbf{x}_k)^{-1}$	$-\mathbf{H}(\mathbf{x}_k)^{-1}\nabla f(\mathbf{x}_k)$	$\mathbf{x}_{k+1}$
1	(0.00, 3.00) 52.00	(–44.0, 24.0)	$\begin{bmatrix}50.0 & -4.0\\ -4.0 & 8.0\end{bmatrix}$	$\frac{1}{384}\begin{bmatrix}8.0 & 4.0\\ 4.0 & 50.0\end{bmatrix}$	(0.67, –2.67)	(0.67, 0.33)
2	(0.67, 0.33) 3.13	(–9.39, –0.04)	$\begin{bmatrix}23.23 & -4.0\\ -4.0 & 8.0\end{bmatrix}$	$\frac{1}{169.84}\begin{bmatrix}8.0 & 4.0\\ 4.0 & 23.23\end{bmatrix}$	(0.44, 0.23)	(1.11, 0.56)
3	(1.11, 0.56) 0.63	(–2.84, –0.04)	$\begin{bmatrix}11.50 & -4.0\\ -4.0 & 8.0\end{bmatrix}$	$\frac{1}{76}\begin{bmatrix}8.0 & 4.0\\ 4.0 & 11.50\end{bmatrix}$	(0.30, 0.14)	(1.41, 0.70)
4	(1.41, 0.70) 0.12	(–0.80, –0.04)	$\begin{bmatrix}6.18 & -4.0\\ -4.0 & 8.0\end{bmatrix}$	$\frac{1}{33.44}\begin{bmatrix}8.0 & 4.0\\ 4.0 & 6.18\end{bmatrix}$	(0.20, 0.10)	(1.61, 0.80)
5	(1.61, 0.80) 0.02	(–0.22, –0.04)	$\begin{bmatrix}3.83 & -4.0\\ -4.0 & 8.0\end{bmatrix}$	$\frac{1}{14.64}\begin{bmatrix}8.0 & 4.0\\ 4.0 & 3.83\end{bmatrix}$	(0.13, 0.07)	(1.74, 0.87)
6	(1.74, 0.87) 0.005	(–0.07, 0.00)	$\begin{bmatrix}2.81 & -4.0\\ -4.0 & 8.0\end{bmatrix}$	$\frac{1}{6.48}\begin{bmatrix}8.0 & 4.0\\ 4.0 & 2.81\end{bmatrix}$	(0.09, 0.04)	(1.83, 0.91)
7	(1.83, 0.91) 0.0009	(0.0003, –0.04)				

- 从中看到目标函数值每次都下降，但实际上并不一定，函数f并不能用为下降函数，但如果初始点足够靠近最优点，则Newton法可达二次收敛

- 不收敛的原因是$H(x_k)$可能是奇异的，这时x_{k+1}并未很好的定义。甚至即使$H(x_k)^{-1}$存在，$f(x_{k+1})$也不必定小于$f(x_k)$
- 但如果初始点足够接近最优解，则$H(\bar{x})$满秩，此时牛顿法符合定义并收敛到最优点
- 定理：令函数$f: R^n \to R$连续二次可微.牛顿法中令$\bar{x}$是梯度为0的点，且$H(\bar{x})^{-1}$存在。令初始点x_1足够接近$\bar{x}$:存在$k_1, k_2 > 0$, 且$k_1 k_2 \|x_1 - \bar{x}\| < 1$,使得
  - $\left\|H(\bar{x})^{-1}\right\| \leq k_1$
  - $\left\|\nabla f(\bar{x}) - \nabla f(x) - H(x)(\bar{x} - x)\right\| \leq k_2 \|\bar{x} - x\|^2$

  对任意满足$\|x - \bar{x}\| \leq \|x_1 - \bar{x}\|$的$x$都成立。则Newton算法至少以二次速率超线性收敛到$\bar{x}$

◆Levenberg-Marquardt 法

◆前面提到Newton由于初始点造成Hessian矩阵奇异，或者方向不是下降方向，或者是下降方向但单位步长不保证下降，对于最后的情况，可以通过线搜索达到下降。但更关键的问题是是否有定义好的算法不考虑初始点的情况，可以收敛到0梯度点呢，也就是全局收敛性，看下面的变化！

◆考虑$x, d = -B\nabla f(x), B$是后面要确定的对称正定矩阵，$y = x + \hat{\lambda} d$为线搜索最优解对应的迭代点

◆$B = (\epsilon I + H)^{-1}, H = H(x), \epsilon > 0$要求满足：

◆给定$\delta > 0$，ϵ是满足$(\epsilon I + H)$的特征值都大于等于δ的最小的标量

- **首先验证是否是下降方向:$\nabla f(x)^T d = -\nabla f(x)^T B \nabla f(x) < 0$，因此$f(y) < f(x)$**
- **因此f确实是下降函数**
- **注意如果$H(\bar{x})$的最小特征值大于等于δ，则算法生成收敛到$\bar{x}$的点列，且$\epsilon_k = 0$,因此$d_k = -H(x_k)^{-1}\nabla f(x_k)$,**
- **算法化为Newton法，因此方法具有二阶收敛速率**
- **注意δ性质的影响**
  - 太小，可确保算法渐进二次收敛速率，但在接近**Hessian**奇异处的点可能发生病态性
  - 太大，B对角占优，算法行为与最速下降法类似，仅具有线性收敛速率
- **用如下迭代：$[\epsilon_k I + H(x_k)](x_{k+1} - x_k) = -\nabla f(x_k)$替代Newton法，称为LM方法，参数0.25，0.75,2,4运行较好**

- 给定迭代和参数$x_k, \epsilon_k > 0$,首先确认$\epsilon_k I + H(x_k)$的正定性,构造其Cholesky分解LL^T.如果不成功，则用$\epsilon_k \leftarrow 4\epsilon_k$重复
- 然后解$LL^T(x_{k+1} - x_k) = -\nabla f(x_k)$得$x_{k+1}$,计算$R_k = \frac{f(x_k)-f(x_{k+1})}{q(x_k)-q(x_{k+1})}$作为二次式$q$对$f$的近似程度的预测，$R_k$越接近1，近似越好，$\epsilon_k$可以越小，据此

➢ $\begin{cases} \epsilon_{k+1} = 4\epsilon_k, R_k < 0.25 \\ \epsilon_{k+1} = \frac{\epsilon_k}{2}, R_k > 0.75 \\ \epsilon_{k+1} = \epsilon_k, otherwise \end{cases}$,而且若$R_k \leq 0$,说明没有改进，重设$x_{k+1} = x_k$,否则保留计算的x_{k+1}

➢ $k \leftarrow k + 1$ 直至结束

- 上面的方法与信任域方法非常类似，信任域方法又称为受限制步长方法
  - 牛顿法的主要困难就是信任域内并没有包含解，虽然该区域内的二次逼近函数在点x_k认为是足够可靠的
  - 为了克服这问题，考虑如下信任域子问题
  - $Min\ \{q(x): x \in \Omega_k\}$,$q$为$f$在点$x_k$的二次逼近，$\Omega_k = \{x: \|x - x_k\| \le \Delta_k\}$为带信任参数$\Delta_k > 0$的信任区域，注意这里的范数为$l_2$范数，若为$l_\infty$,则称为Box-step,Hypercube方法）
  - 跟前述一样，定义R_k为实际与预期下降的比率。如果R_k相对于1太小，则需要减小信任域，否则可以扩展信任域.下次迭代设定Δ_{k+1}
  - $\begin{cases} \Delta_{k+1} = \frac{\|x_{k+1} - x_k\|}{4}, R_k < 0.25 \\ \Delta_{k+1} = 2\Delta_k, \quad R_k > 0.75 \\ \Delta_{k+1} = \Delta_k, \text{otherwise} \end{cases}$,若$R_k \le 0$,$f$在本次迭代中并没有改进，重设$x_{k+1} = x_k$,然后$k \leftarrow k + 1$,直至达到0梯度点。如果$H(\bar{x})$正定，则对足够大的$k$,信任域界无效，方法退化为Newton方法，具有二阶收敛速率

◆上述讨论提及两点

- 无论上述f的二次表示中什么地方使用**Hessian**矩阵，实际操作中都可以使用**Hessian**的近似矩阵来替换，如后面的拟牛顿法
- 将$\delta = x - x_k$,信任域子问题可写为
- （**5－4**） $Min\ \{\nabla f(x_k)^T\delta + \frac{1}{2}\delta^T H(x_k)\delta : \frac{1}{2}||\delta||^2 \le \frac{1}{2}\Delta_k^2\}$
- 上述问题的**KKT**条件要求非负**Lagrange**乘子，以及主可行解δ满足除互补松弛性条件外的下列条件

$$[H(x_k) + \lambda I]\delta = -\nabla f(x_k)$$

- 这与**LM**方法类似。尤其如果$\Delta_k = -[H(x_k) + \epsilon_k I]^{-1}\nabla f(x_k)$, 这里$H(x_k) + \epsilon_k I$正定,容易验证$\delta = x_{k+1} - x_k, \lambda = \epsilon_k$满足（**5-4**）的最优性条件

◆因此，LM方法可以看做是一种信任域方法

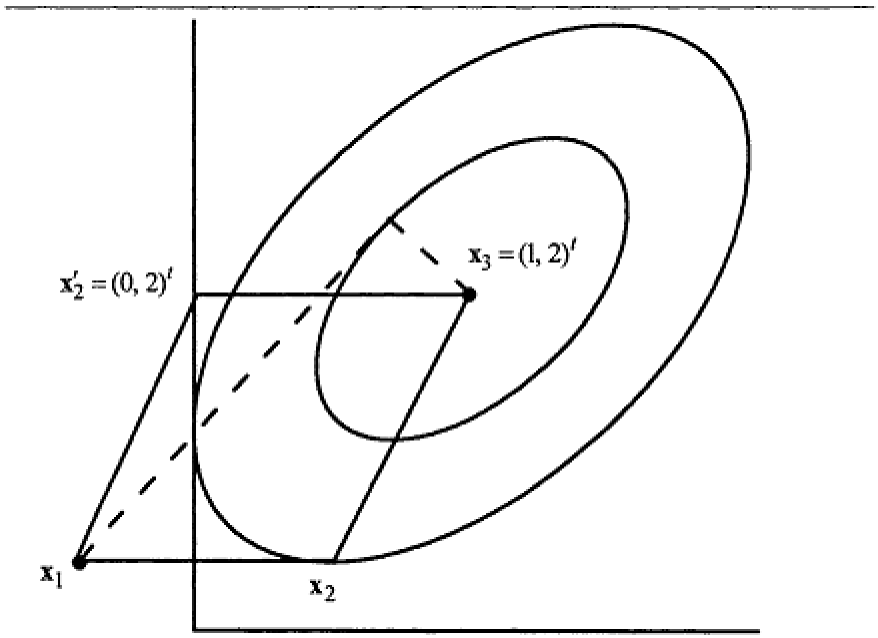
- 如果目标函数是二次的，则从任何共轭方向搜索，可在n步之内达到极小点

- $f(x)=c^Tx+\frac{1}{2}x^THx$, H对称正定,假设$d_1,d_2,\cdots,d_n$关于H共轭，则给定初始点x_1，任意点x可唯一表示为$x=x_1+\Sigma_{j=1}^{n}\lambda_jd_j$,从而$f(x)$表示为$\lambda$的函数，最后化简为$F(\lambda)=\Sigma_{j=1}^{n}\left[c^T\left(x_1+\lambda_jd_j\right)+\frac{1}{2}\left(x_1+\lambda_jd_j\right)^TH\left(x_1+\lambda_jd_j\right)\right]$

- 对每个求和项求导数得:$\lambda_j^*=-\frac{[c^Td_j+x_1^THd_j]}{d_j^THd_j}$,$j=1,\ldots,n$,因此由任何方向开始都可得最优解

- 例：$Min\ -12x_2+4x_1^2+4x_2^2+4x_1x_2$, $H=[8\ -4;-4\ 8]$,假设$d_1^T=(1,0)$, 求得共轭方向$d_2^T=(k,2k)$, 不妨令为$(1,2)$,此时从初始点$x_1^T=(-\frac{1}{2},1)$沿方向d_1最小化目标函数得$x_2^T=(\frac{1}{2},1)$,然后从该点沿d_2最小化目标函数得$x_3^T=(1,2)$,为最小点

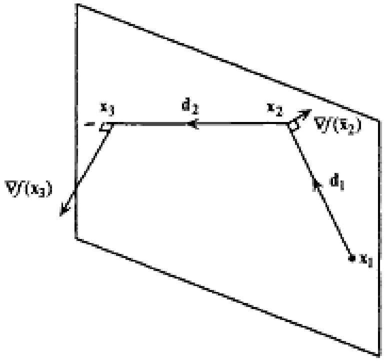
◆从图中可以看出沿任何方向都可以在2步之内达到最优点



◆这个结果对二次函数一般都正确。事实就是一般函数在最优点附近可以由二次函数很好的逼近，从而使得共轭在二次和非二次函数中非常有用

- 下面的定理表明，如果我们从x_1开始，在每步中x_{k+1}由在包含x_1,由向量$d_1, d_2, \cdots, d_k$张成的线性子空间上最小化f得到。而且梯度$\nabla f(x_{k+1})$若不为0，则与这个子空间正交.这有时称为扩张子空间属性

- 定理：$f(x) = c^T x + \frac{1}{2} x^T H x$, H对称正定, $d_1, d_2, \cdots, d_n$关于H共轭,x_1为任意开始点，λ_k为$min\, f(x_k + \lambda d_k)$的最优解,$\lambda \in R$,令$x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k$,则必定有



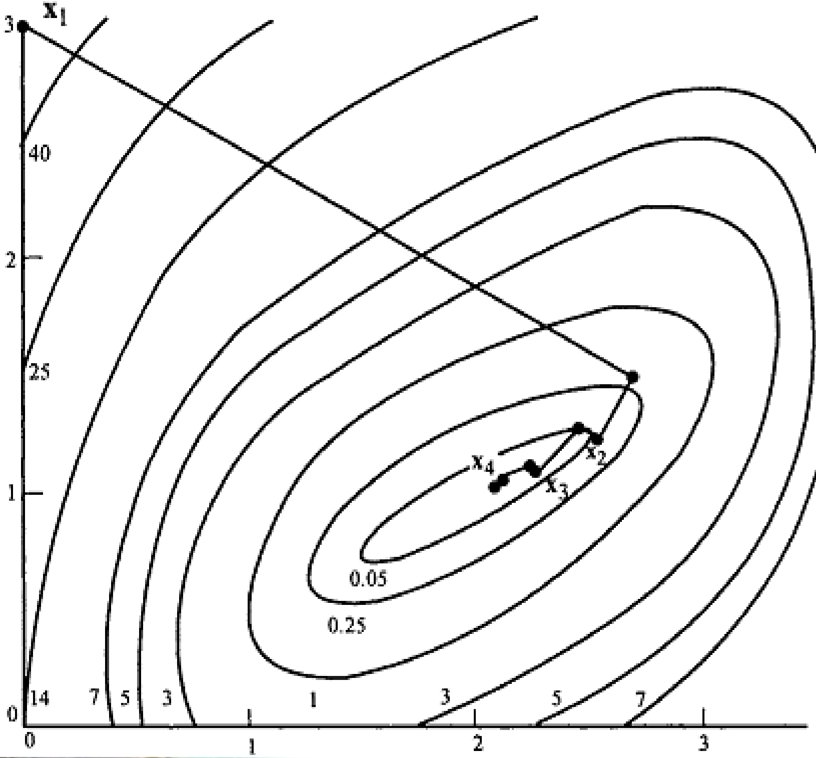
  - $\nabla f(x_{k+1})^T d_j = 0, j = 1, \ldots, k$
  - $\nabla f(x_1)^T d_k = \nabla f(x_k)^T d_k$
  - x_{k+1}是$Min\, f(x), s.t.\, x - x_1 \in L(d_1, \cdots, d_k)$,表示线性子空间，即$L(d_1, \cdots, d_k) = \{\sum_{j=1}^{k} \mu_j d_j : \mu_j \in R\}$, x_{n+1}是f在R^n上的最小点

- 怎么来生成二次型的共轭方向：这些方法很自然就导致了各种最小化二次函数和非二次函数的算法
- Quasi-Newton:拟牛顿法，Davidon-Fletcher-Powell 1959年Davidon提出，后来1963年由Fletcher和Powell开发，DFP方法搜索方向为：
- $d_j = -D_j \nabla f(y)$, 来代替牛顿法中的 $-H^{-1}(y)\nabla f(y)$
- 即负梯度方向左乘D_j,这里D_j为Hessian矩阵的逆矩阵的逼近矩阵，对称正定。正定型确保d_j是下降方向，只要$\nabla f(y) \neq 0, d_j^T \nabla f(y) < 0$,下一步$D_{j+1}$通过给$D_j$增加两个秩为1的对称矩阵来形成，这个过程有时称为秩2校正过程(Rank-two correction procedure)

- 对于二次函数，这种更新过程在n步之内产生实际Hessian逆矩阵的精确表示；如果拟牛顿方法中允许二次逼近为不定的，则称为割法(Secant Method)
- DFP方法过程与以前类似，这里只写出更新D_{j+1}的步骤
- $D_{j+1} = D_j + \frac{p_j p_j^T}{p_j^T q_j} - \frac{D_j q_j q_j^T D_j}{q_j^T D_j q_j}$，这里$p_j = \lambda_j d_j = y_{j+1} - y_j, q_j = \nabla f(y_{j+1}) - \nabla f(y_j)$
- 如果上述过程中内部每n步重置算法，如果重置间隔n'小于n，则称为部分拟牛顿算法，若$n' \ll n$,可减少存储，因为这是只需存储p_j, q_j

第5章无约束最优化方法(Unconstrained Optimization Methods)-拟牛顿和共轭方向法

◆**例DFP求解：**$Min\ (x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$**,初始点(0, 3)**



$\mathbf{x}_k$ $f(\mathbf{x}_k)$	j	$\mathbf{y}_j$ $f(\mathbf{y}_j)$	$\nabla f(\mathbf{y}_j)$	$\lVert\nabla f(\mathbf{y}_j)\rVert$	$\mathbf{D}_j$	$\mathbf{d}_j$	λ_j	$\mathbf{y}_{j+1}$
(0.00, 3.00) 52.00	1	(0.00, 3.00) 52.00	(−44.00, 24.00)	50.12	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$	(44.00, −24.00)	0.062	(2.70, 1.51)
	2	(2.70, 1.51) 0.34	(0.73, 1.28)	1.47	$\begin{bmatrix}0.25 & 0.38\\0.38 & 0.81\end{bmatrix}$	(−0.67, −1.31)	0.22	(2.55, 1.22)
(2.55, 1.22) 0.1036	1	(2.55, 1.22) 0.1036	(0.89, −0.44)	0.99	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$	(−0.89, 0.44)	0.11	(2.45, 1.27)
	2	(2.45, 1.27) 0.0490	(0.18, 0.36)	0.40	$\begin{bmatrix}0.65 & 0.45\\0.45 & 0.46\end{bmatrix}$	(−0.28, −0.25)	0.64	(2.27, 1.11)
(2.27, 1.11) 0.008	1	(2.27, 1.11) 0.008	(0.18, −0.20)	0.27	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$	(−0.18, 0.20)	0.10	(2.25, 1.13)
	2	(2.25, 1.13) 0.004	(0.04, 0.04)	0.06	$\begin{bmatrix}0.80 & 0.38\\0.38 & 0.31\end{bmatrix}$	(−0.05, −0.03)	2.64	(2.12, 1.05)
(2.12, 1.05) 0.0005	1	(2.12, 1.05) 0.0005	(0.05, −0.08)	0.09	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$	(−0.05, 0.08)	0.10	(2.115, 1.058)
	2	(2.115, 1.058) 0.0002	(0.004, 0.004)	0.006				

- 上述方法形成的方向都是下降方向。对于二次目标函数而言，DFP生成的方向都是共轭的，一次完整迭代即可达到最优点，并且其迭代最终矩阵D_{n+1}正好是Hessian矩阵H的逆矩阵
- 注意到DFP方法中只是采用D_j来近似Hessian矩阵的逆矩阵，并用其来左乘牛顿法中的梯度方向，然后执行线搜索
- 此外可以思考$D_{n+1} = H^{-1}$，每一步中 $D_{j+1}H$都有为1的特征值，因此方法的每一步修改的逼近累积附加的一个线性独立的特征向量，其特征值对应$D_{j+1}H$的单位特征值
- 实际上对于D_{j+1}的生成，有很多方法，只需要保证对称正定，不同的方式对应不同的方法，例如Broyden族，BFGS更新方法等，请参考相关文献

- 问题$P: \min f(x), x \in X, f: R^n \to R$为凸函数**但不必是可微的函数**，$X$为$R^n$中的非空闭凸集.假设存在最优解.

- 次梯度优化算法看作是最速下降法的一个直接推广，其负梯度方向用负的基于次梯度的方向进行替换!

- 但这方向不必是下降方向，但如果步长足够小，确实将使新的迭代点更靠近最优解，因此也不执行线搜索!而是在每次迭代时规定一个步长，保证生成的点列最终收敛到最优解.

- $f: R^n \to (-\infty, \infty], g \in R^n$为函数$f$在点$x \in dom(f)$的次梯度：$f(z) \geq f(x) + g' \cdot (z - x), \forall z \in R^n$,次梯度集合称为**次微分**：$\partial f(x)$

- 问题$P: min\ f(x), x \in X, f: R^n \to R$为凸函数但不必是可微的函数，$X$为$R^n$中的非空闭凸集.假设存在最优解.
- 给定迭代$x^{(k)} \in X$,步长λ_k,方向$d_k = -\frac{g_k}{||g_k||}$,方向$g_k \in \partial f(x^{(k)})$,新的点$\overline{x^{(k+1)}} = x^{(k)} + \lambda_k \cdot d_k \notin X$!不可行!
- 投影法(projecting):投影$\overline{x^{(k+1)}}$到凸集X上，也就是找到X中与$\overline{x^{(k+1)}}$最近的点$x^{(k+1)} = P_X(x^{(k)} + \lambda_k \cdot d_k)$,其中$P_X(\overline{x}) = argmin\{||x - \overline{x}||: x \in X\}$
- 投影定理：$C \in R^n$为非空闭凸集，$z \in R^n$，则存在唯一向量$\min_{x \in C}||z - x||$,称该向量为z在集合C上的投影.而且向量x^*为z在集合C上的投影$\Leftrightarrow (z - x^*)'(x - x^*) \le 0, \forall x \in C$

◆实际上这些投影当X很简单时，投影的计算也非常简单

- 例.若$X \geq 0$,则$x_i^{(k+1)} = max\left\{0, \left(\overline{x^{(k+1)}}\right)_i\right\}$
- 若$X = \{x: l_i \leq x_i \leq u_i, i = 1, 2, \cdots, n\}$,则
- $$x_i^{(k+1)} = \begin{cases} \left(\overline{x^{(k+1)}}\right)_i & l_i \leq \left(\overline{x^{(k+1)}}\right)_i \leq u_i \\ l_i & \left(\overline{x^{(k+1)}}\right)_i < l_i \\ u_i & \left(\overline{x^{(k+1)}}\right)_i > u_i \end{cases}, i = 1, 2, \cdots, n$$

◆次梯度算法

- ➢初始化：选择初始点$x^{(1)} \in X, x^* = x^{(1)}, k = 1$，$UB^{(1)} = f(x^{(1)})$;
- ➢迭代求解：给定$x^{(k)}$,计算$g_k \in \partial f\left(x^{(k)}\right)$.
  - ✓IF $g_k = 0$, Stop;$x^{(k)}$求解问题$P: min\ f(x), x \in X$.得x^*.
  - ✓ELSE 令$d_k = -\frac{g_k}{||g_k||}$,选择步长$\lambda_k > 0$,计算$x^{(k+1)} = P_X\left(\overline{x^{(k+1)}}\right), \overline{x^{(k+1)}} = x^{(k)} + \lambda_k \cdot d_k$.
    - IF $f\left(x^{(k+1)}\right) < UB^{(k)}$，令$UB^{(k+1)} = f\left(x^{(k+1)}\right), x^* = x^{(k+1)}$.
    - ELSE 令$UB^{(k+1)} = UB^{(k)}$.
  - ✓$k = k + 1$，迭代!

◆注意停止准则$g_k = 0$可能从来不会实现，即使存在一个内部最优点，并且我们对于$0 \in \partial f\left(x^{(k)}\right)$也确实找到了一个解$x^{(k)}$，因为算法任意选择次梯度$g_k$。因此也需要最大迭代次数的限制!

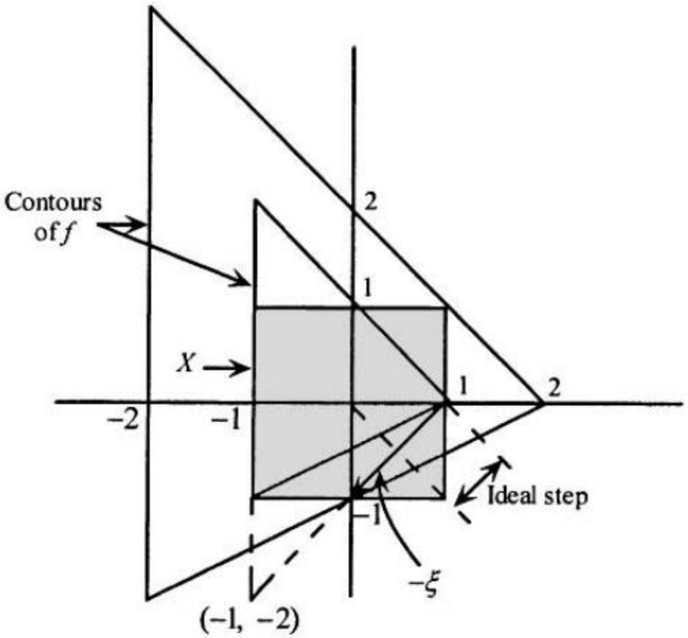
- **注意，当$x^{(k+1)} = x^{(k)}$时，也能终止迭代.如果最优目标函数值f^*已知，则$UB^{(k)} \le f^* + \epsilon$也可以作为停止准则.**
- **例：$min\{f(x,y): -1 \le x \le 1, -1 \le y \le 1\}, f(x,y) = max\{-x, x+y, x-2y\}$**
- **解：考虑$f(x,y) \le c$,c为常数，然后检查约束区域$\{-x \le c, x+y \le c, x-2y \le c\}$,画出$f$的轮廓如图所示.注意不可微点都是$(t,0),(-t,2t),(-t,-t), t \ge 0$这样的点。最优解解为$(x,y)=(0,0)$.因此尽管$(0,0)^t \in \partial f(0)$,显然也有$(-1,0)^t,(1,1)^t,(1,-2)^t \in \partial f(0)$.**

- 考虑点$(x,y) = (1,0)$，$f(1,0) = 1$, 由$x+y$与$x-2y$确定。因此$g = \xi = (1,1)^t \in \partial f(1,0)$, 考虑$-g = -\xi = (-1,-1)^t$, 这不是下降方向
- 但沿这个方向移动，确实接近最优解$(0,0)^t$.

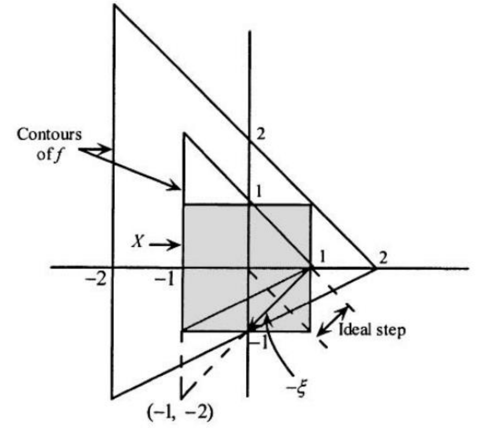
如图所示，沿方向$d = -g = -\xi$，达到离最优解最近的点

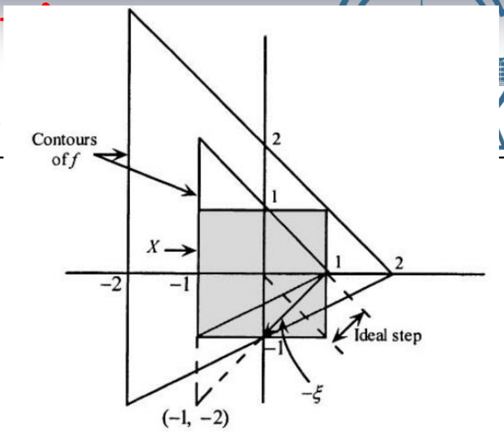
- 但若选步长为$\lambda = 2$，导致$(1,0) - 2 \cdot (1,1) = (-1,-2)$

投影$P_X(-1,-2) = (-1,-1)$. 这构成上述算法的一次迭代.



- **定理：** 问题P: $min\ f(x), x \in X$如前所述，假设存在最优解。考虑前述的次梯度优化算法来求解问题P。假设前述非负步长$\{\lambda_k\}$满足条件：$\{\lambda_k\} \to 0^+, \sum_{k=0}^{\infty} \lambda_k = \infty$.则要么**算法有限步终止于最优解**，或者**生成的无穷序列极限为最优解**，即满足：$\{UB^{(k)}\} \to f^* = min\{f(x): x \in X\}$
- 定理理论上为真，但实际实行并没那么好。例如选择$\lambda_k = \frac{1}{k}$，显然满足条件，但几千步以后仍然远离最优解。
- 如何选择步长为好？？？





- 观察例子中的图
- 理想步长满足新的点与方向d_k正交
- 即：$d_k^t \cdot \left[x^{(k)} + \lambda_k \cdot d_k - x^*\right] = 0$,求出理想步长为
- $\lambda_k^* = \left(x^* - x^{(k)}\right)^t d_k = \frac{\left(x^{(k)} - x^*\right)^t g_k}{||g_k||}$, 但此时最优点$x^*$未知，如何办？逼近思想！
- f是凸的，$f^* = f(x^*) \ge f\left(x^{(k)}\right) + \left(x^* - x^{(k)}\right)^t g_k$,从而有$\lambda_k^* \ge \frac{f\left(x^{(k)}\right) - f^*}{||g_k||}$,但这是$f^*$也未知，因此推荐使用$f^*$的一个低估值$\bar{f}$来代替$f^*$,从而步长选择为：$\lambda_k = \frac{\beta_k\left(f\left(x^{(k)}\right) - \bar{f}\right)}{||g_k||}$,一般选$\beta_k \in (\epsilon_1, 2 - \epsilon_2]$.一般可达线性收敛!

第5章无约束最优化方法(Unconstrained Optimization Methods

- **使用导数和不使用导数的线搜索方法**
  - **Dichotomous， Golden Section method, Fibonacci method**
  - **Bisection search, Newton's method**
- **多维搜索下使用导数和不使用导数的搜索方法**
  - **The Cyclic coordinate method, Hooke and Jeeves， Rosenbrock's method**
  - **The Steepest descent and The method of Newton**
- **牛顿方法的变种：LM和信任域方法**
  - **Levenberg-Marquardt, Trust Region Methods**
- **共轭方向法：拟牛顿法和共轭梯度法**
  - 目标函数如果是二次的，有限步内可以收敛
- **次梯度优化方法**
  - 不可微目标函数中的**Steepest Descent algorithm:**投影思想!
- **主要掌握其基本思想：** $m_k(p) = f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p,$

方向： $p_k = -B_k^{-1} \nabla f_k,\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p_k$