

Lecture 1 Notes

2021 年 9 月 15 日

这一节首先引入尺度变换的概念从尺度变换的角度给出了梯度下降方法与牛顿方法之间的联系，其次介绍了其他几种常用的无约束优化算法以及相应的收敛性与收敛速度的结论。在这之后引入了约束优化问题同时给出了求解约束优化问题的一些初步的方法。

1 梯度下降方法与牛顿法的联系

假设待求解的无约束优化问题为 $\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$ 这里 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$

对于梯度下降方法每步的迭代式为： $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - h_k \nabla f(\mathbf{x}^k)$ 则成立下式：

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{x}^k) + \frac{\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k}{h_k} &= 0 \\ \Leftrightarrow \mathbf{x}^{k+1} &\in \arg \min_{\mathbf{x}} \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|^2}{2h_k} \right\} \end{aligned}$$

而对于牛顿方法来说由上一节的内容每一步相当于求解一个无约束的二阶近似问题即：

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \\ \approx \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k)^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}^k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k) \end{aligned}$$

- 可以看到梯度下降算法从这种意义上也可以看成是序列地求解无约束的二阶近似问题（前提是步长序列 $\{h_k\}$ 给定）。
- 梯度算法和牛顿方法可以统一表示为如下的格式：

$$\mathbf{x}^{k+1} \in \arg \min_{\mathbf{x}} \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k)^\top H_k(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k) \right\}$$

其中牛顿方法 $H_k = \nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$ 而梯度方法 $H_k = \frac{1}{h_k} I_n$ 。

- 可以看到从每一步来看梯度方法所求解的近似二次函数相比于牛顿方法所求解的近似二次函数在近似程度上不如牛顿方法好。因此介于梯度方法和牛顿方法之间能否设计一种算法：每一步迭代格式如下

$$\mathbf{x}^{k+1} \in \arg \min_{\mathbf{x}} \left\{ f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k)^\top H_k(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k) \right\}$$

此外对于 H_k 成立： $k \rightarrow \infty$ 有 $H_k \rightarrow \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ (这里 \mathbf{x}^* 是指问题的最优解)。

1.1 尺度变换的概念

对于标准的 n 维欧氏空间 \mathbb{R}^n ，任意两个向量 \mathbf{x} 与 \mathbf{y} 它们之间的内积与范数定义如下：

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^\top \mathbf{y} = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^\top \mathbf{x}}$$

假设矩阵 A 是正定矩阵记为 $A \in S_{++}^n$ 则可以定义如下的内积，以及相应的范数：

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_A := \mathbf{x}^\top A \mathbf{y}$$

$$\|\mathbf{x}\|_A = \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_A := \mathbf{x}^\top A \mathbf{x}$$

- 尺度变换后的范数和尺度变换前的范数是等价的：利用内积的定义有下式成立

$$\sqrt{\lambda_1(A)} \|\mathbf{x}\| \leq \|\mathbf{x}\|_A \leq \sqrt{\lambda_n(A)} \|\mathbf{x}\|$$

可以看到 $\|\cdot\|$ 与 $\|\cdot\|_A$ 之间是相互控制的，因此这两个范数实际上是等价的

- 尺度变换之后 $f(\mathbf{x})$ 在 $\bar{\mathbf{x}}$ 处的梯度的定义：

$$f(\mathbf{x}) = f(\bar{\mathbf{x}}) + \langle \mathbf{g}, \mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}} \rangle_A + o(\|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}\|)$$

将 \mathbf{g} 定义为尺度变换后的梯度显然有 $\mathbf{g} = A^{-1} \nabla f(\mathbf{x})$ (尺度变换之后定义求导运算，梯度运算都要在新的尺度下定义)。

- 类似的若 $f(\mathbf{x})$ 在 $\bar{\mathbf{x}}$ 处的二阶海瑟矩阵存在，则尺度变换后的海瑟矩阵为 $A^{-1} \nabla^2 f(\bar{\mathbf{x}})$

1.2 牛顿方法

这一部分将从尺度变换的角度重新理解牛顿方法，牛顿方法每一步实际上是考虑目标函数在迭代点 \mathbf{x}^k 处的二阶近似，如果 $\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$ 是正定矩阵那么有下式成立：

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}^k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}^k)^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}^k) (\mathbf{x} - \mathbf{x}^k)$$

$$\Leftrightarrow \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}^k) + \langle [\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k \rangle_{\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)} + \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|_{\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)}^2$$

即：引入了尺度变换，这里新的内积定义为 $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)} = \mathbf{x}^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}^k) \mathbf{y}$ 。

对于尺度变换之后的问题也就是在新的尺度之下对二次函数求极小值利用必要性条件可知：

$$\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k = -[\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}^k)$$

此外也可以看到每一步的牛顿方向其实就是尺度变换之后的梯度方法当然前提还是 $\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$ 是正定的。所以在尺度变换的意义下牛顿方法其实可以看成是步长为 1 的变尺度的梯度下降方法 (每一步都要利用 $\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$ 进行尺度变换，前提是每一步的 $\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$ 是正定矩阵)。

2 变尺度方法 (拟牛顿法)

在上一部分中可以看到牛顿方法其实是一种变换尺度之后的梯度方法，每次的尺度变换矩阵是 $\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$ 为了保证尺度变换的可行性必须要使得尺度变换矩阵是正定的！

- * 牛顿法对初值的选取要求非常高，初值的选取必须要非常靠近局部最优解，而且局部最优解处的二阶海瑟矩阵正定 (满足二阶充分性条件) 这样才能确保每一步尺度变换是合理的这样算法的收敛性才会有保证。
- * 牛顿方法中每一步都要计算海瑟矩阵的逆这是需要非常大的计算量的求逆的复杂度是 $O(n^3)$ ，这里的 n 是指问题的维数 (也就是海瑟矩阵的维数)，此外从内存角度来看如果 n 的维数很大要存储 n^2 维的矩阵也是很麻烦的。
- * 上述的问题就是牛顿法的缺点，但是牛顿法的好处在于它的二阶收敛速度也就是说如果当前迭代点与最优解的距离为 $O(10^{-3})$ 则下一步就会变成 $O(10^{-6})$ 。

从尺度变换的角度来看牛顿方法的尺度变换矩阵是选取了 $\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$ 那么能否选取其他的矩阵 B_k 来进行尺度变换，从而既可以解决牛顿法带来的问题又能够尽量保留牛顿法的优点 (二阶收敛速度变成超线性收敛速度)? 实际上这也就是拟牛顿方法。

拟牛顿方法的一般格式如下：

- Step 1. 选取初始迭代点 \mathbf{x}^0 以及初始的尺度变换矩阵 $B_0 = I_n$ ，计算 $f(\mathbf{x}^0)$ 以及 $\nabla f(\mathbf{x}^0)$ ，设 $k = 0$ 。
- Step 2. 给出拟牛顿方向 $\mathbf{p}_k = [B_k]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}^k)$ 。
- Step 3. 确定步长 h_k 从而得到下一步的迭代点 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - h_k \mathbf{p}_k$ (确定步长的方式可以参考 Lecture Notes 2 中的选取准则比如精确步长或者满足一些非精确准则确定的步长)。
- Step 4. 检验 \mathbf{x}^{k+1} 处是否满足终止准则 (比如检验 $\|\nabla f(\mathbf{x}^{k+1})\| < tol$ 是否成立，这里的 tol 是预先给定的常数) 如果终止准则不满足计算 $f(\mathbf{x}^{k+1})$ 以及 $\nabla f(\mathbf{x}^{k+1})$ ，令 $k = k + 1$ 转到 Step 2，若成立输出 \mathbf{x}^{k+1} 作为问题的数值解。

那么如何得到序列 B_k 或者很准确的说如何每次更新 B_k ，至少如果最后算法迭代到最优解 \mathbf{x}^* 那么 B_k 也要收敛到 $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ 。

2.0.1 割线方程

这一部分主要讨论如何更新尺度变换矩阵 B_k ，首先利用终止定理可知在相邻两步的迭代点 \mathbf{x}^{k+1} 与 \mathbf{x}^k 间成立下面的表达式：

$$\nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}^k) = \left[\int_0^1 \nabla^2 f(\mathbf{x}^k + \tau(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k)) d\tau \right] (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k)$$

假设 $B_{k+1} \approx \nabla^2 f(\mathbf{x}^{k+1})$ 有 $\nabla^2 f(\mathbf{x}^k + \tau(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k)) \approx B_{k+1}$ 将 \approx 改成 $=$ ，则可以导出割线方程：

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

可以看到割线方程用到的仅仅是 $f(\mathbf{x})$ 一阶信息。

下面简单地介绍几种满足割线方程的 B_k 的更新方式，引入记号：

$$\mathbf{y}^k = \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{s}^k = \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k$$

$$\text{DFP 公式 } B_{k+1} = (I - \frac{\mathbf{y}^k(\mathbf{s}^k)^\top}{(\mathbf{y}^k)^\top \mathbf{s}^k})B_k + (I - \frac{\mathbf{s}^k(\mathbf{y}^k)^\top}{(\mathbf{y}^k)^\top \mathbf{s}^k}) + \frac{\mathbf{y}^k(\mathbf{y}^k)^\top}{(\mathbf{y}^k)^\top \mathbf{s}^k}$$

$$\text{BFGS 公式 } B_{k+1} = B_k - \frac{B_k \mathbf{s}^k (\mathbf{s}^k)^\top B_k}{(\mathbf{s}^k)^\top B_k \mathbf{s}^k} + \frac{\mathbf{y}^k (\mathbf{y}^k)^\top}{(\mathbf{y}^k)^\top \mathbf{s}^k}$$

$$\text{SR1 公式 } B_{k+1} = B_k + \frac{(\mathbf{y}^k - B_k \mathbf{s}^k)(\mathbf{y}^k - B_k \mathbf{s}^k)^\top}{(\mathbf{y}^k - B_k \mathbf{s}^k)^\top \mathbf{s}^k}$$

- 近似矩阵 B_k 的设计考虑到 $B_k \approx \nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$ 因此每次迭代都要求矩阵 B_k 满足割线方程。
- 可以看到每次更新 B_k 时只用了一阶信息，此外上面三个公式计算 $[B_k]^{-1}$ 都可以利用高等代数逆矩阵的 Sherman-Morrison 公式直接计算得到表达式。
- 实际上 B_{k+1} 可以看成是利用一阶信息修正 B_k 最终在 $\mathbf{x}^k \rightarrow \mathbf{x}^*$ 时成立 $\nabla^2 f(\mathbf{x}^k) \rightarrow \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$

2.1 拟牛顿方法收敛性与收敛速度

这一部分主要罗列结论具体证明可以参考 [1]P135-160

定理 2.1. 假设函数 $f(\mathbf{x}) \in C^{2,2}(\mathbb{R}^n)$ ，局部最优解 \mathbf{x}^* 满足 $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ 正定，则对于任意的 $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ 以及 k 充分大后成立下式 (局部超线性收敛)

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq C \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\| \|\mathbf{x}^{k-n} - \mathbf{x}^*\|$$

3 共轭梯度 (CG) 方法

这一部分主要介绍共轭梯度方法首先从基本的正定二次函数开始，最后简要介绍非线性函数的共轭梯度算法，CG 方法也是经典的求解无约束优化问题的方法之一。

考虑求解线性方程组 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 这里 A 是一个正定矩阵则有：

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{x} = \arg \min_{\mathbf{x}} \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{x}^\top A \mathbf{x} - \mathbf{b}^\top \mathbf{x} \right\}$$

因此对于正定二次函数来说优化方法和求解线性方程组是一致的，所以 CG 方法也可以用来求解正定情形的线性方程组。

3.1 求解正定二次函数的 CG 方法

对于优化的目标函数为正定二次函数情形观察以下的两张图片

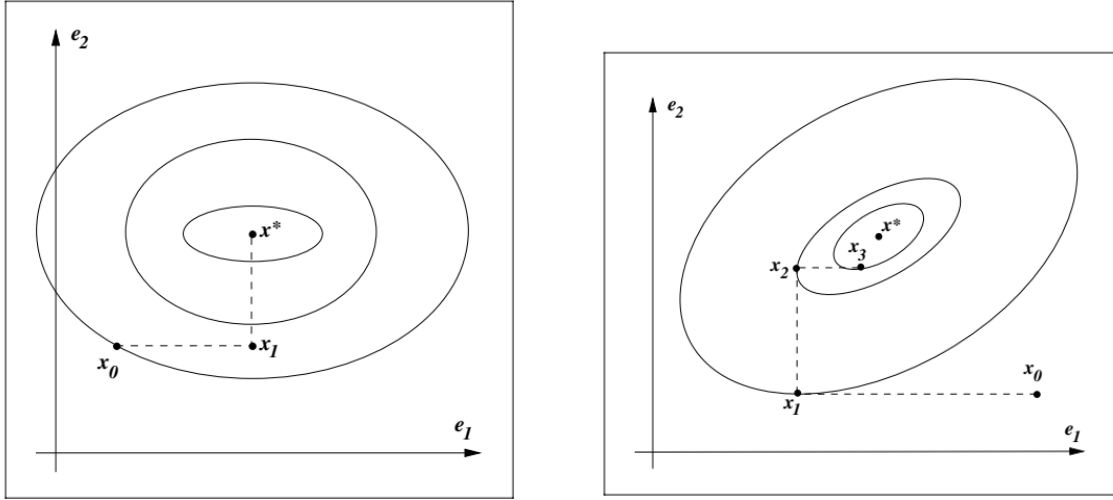


图 1: 按坐标顺序极小化即先 $\min x$ 得到一个点 图 2: 按坐标顺序极小化即先 $\min x$ 得到一个点
然后再 $\min y$ 然后再 $\min y$

上面的两张图都是对正定二次函数极小化的情形，但是很明显图 1 中按坐标取极小的操作只两步就到达了 x^* ，但是图 2 显然两步内如果和图一样的迭代方式无法到达 x^* 但是要注意到如果图二我们将坐标系旋转以下也可以得到类似与图 1 的情形然后在旋转过的坐标轴上再进行先 $\min x$ 再 $\min y$ 的操作也是两步到达最优解 x^* ，实际上这种变换坐标轴的操作就是之前定义的尺度变换，如果按照当前的坐标轴我们可以观察到图 1 的正定二次函数 $A = c \cdot I_2$ 但是图二 $A \neq c \cdot I_2$ ，此外另一点就是旋转坐标轴 (尺度变换) 之后在新的轴上 2 步到达最优解，因此这就会想到是否进行尺度变换之后在新的尺度下依次 minimize 每个坐标最后至多经历 n 步 (如果是 n 维的问题) 可以到达最优解 x^* ？实际上这也就是共轭梯度方法主要的设计思路。

定义 3.1. 由正定矩阵 A 导出的共轭关系 (正交性): 给定正定矩阵 A ，设向量 $x, y \in \mathbb{R}^n$ ，若有 $\langle x, y \rangle_A = x^T A y = 0$ 则定义向量 x 与 y 关于正定矩阵 A 共轭

实际上共轭梯度方法的主要思路就是首先找到一组共轭方向 $\{p^1, p^2, \dots, p^n\}$ 然后每一步的步长 $\lambda_k = \arg \min_{\lambda} f(x^0 + \sum_{i=1}^{k-1} \lambda_i p^i + \lambda p^k)$ 也就是图 1 表现的形式分别沿着坐标极小化。

3.1.1 CG 方法的分析

不失一般性这一部分假设 $x^* = 0$ 即 $b = 0$ 目标函数为 $f(x) = \frac{1}{2} x^T A x$ 这里的 A 是一个正定矩阵。对于一般的正定二次函数情形注意到：

$$\min_x \frac{1}{2} x^T A x - b^T x \Leftrightarrow \min_x \frac{1}{2} (x^T - x^{*T}) A (x^T - x^{*T}), \quad (x^* = A^{-1} b)$$

因此考虑 $x^* = 0$ 的结论对于一般的情形也可以得到相应的结论。

为了构造出共轭方向首先证明以下的子空间扩张定理：设初始迭代点为 x^0 定义子空间 \mathcal{L}_k 如下：

$$\mathcal{L}_k = \text{span}\{\nabla f(x^0), \dots, \nabla f(x^{k-1})\} = \text{span}\{A x^0, A^2 x^0, \dots, A^k x^0\}$$

若每一步的迭代点 $\mathbf{x}^k = \arg \min\{f(\mathbf{x})|\mathbf{x} \in \mathbf{x}^0 + \mathcal{L}_k\}$

引理 3.1. 对于子空间 \mathcal{L}_k 成立 $\mathcal{L}_k = \text{span}\{A\mathbf{x}^0, A\mathbf{x}^1, \dots, A\mathbf{x}^{k-1}\}$

证明. 利用数学归纳法显然 □

引理 3.2. 对于任意 $k \neq i$ 成立 $\langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \nabla f(\mathbf{x}^i) \rangle = \nabla f(\mathbf{x}^k)^\top \nabla f(\mathbf{x}^i) = 0$

证明. 不妨假设 $k > i$ 由于迭代式 $\mathbf{x}^k = \arg \min\{f(\mathbf{x})|\mathbf{x} \in \mathbf{x}^0 + \mathcal{L}_k\}$ 再由引理 3.1. 可知

$$\mathbf{x}^k = \arg \min\{f(\mathbf{x})|\mathbf{x} \in \mathbf{x}^0 + \text{span}\{\nabla f(\mathbf{x}^0), \dots, \nabla f(\mathbf{x}^{k-1})\}\}$$

因此成立: 存在 $(\lambda_0^*, \dots, \lambda_{k-1}^*)$ 使得 $\mathbf{x}^k = \mathbf{x}^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i^* \nabla f(\mathbf{x}^i)$ 且成立:

$$(\lambda_0^*, \dots, \lambda_{k-1}^*) = \arg \min\{\phi(\boldsymbol{\lambda}) = \phi(\mathbf{x}^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i \nabla f(\mathbf{x}^i)) | \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^k\}$$

由此问题转化为了一个 \mathbb{R}^k 上的优化问题利用一阶必要性条件得证 □

* 对于任意的 $\mathbf{p} \in \mathcal{L}_k$ 成立 $\langle \mathbf{p}, \nabla f(\mathbf{x}^k) \rangle = 0$

* CG 方法处理正定二次函数是至多 n 步必定到达最优解, 这是根据引理 3.2 可知到了 n 步的时候 \mathcal{L}_n 扩张为全空间, 根据迭代点 $\mathbf{x}^n = \arg \min\{f(\mathbf{x})|\mathbf{x} \in \mathbf{x}^0 + \mathcal{L}_n\}$ 因此至多 n 步到达最优解, 也就是有穷终止性。

接下来证明每一步的迭代方向是关于 A 共轭的, 引入记号 $\boldsymbol{\delta}^i = \mathbf{x}^{i+1} - \mathbf{x}^i$

引理 3.3. $\{\boldsymbol{\delta}^i\}_{i=1}^{i=n}$ 是关于 A 共轭的即: $\langle \boldsymbol{\delta}^i, \boldsymbol{\delta}^k \rangle_A = 0$

证明. 由于每一步的迭代点 $\mathbf{x}^k \in \mathbf{x}^0 + \mathcal{L}_k$ 因此 $\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^0 \in \mathcal{L}_k$ 成立 $\mathcal{L}_k = \text{span}\{\boldsymbol{\delta}^0, \dots, \boldsymbol{\delta}^{k-1}\}$

设 $k > i$ 则成立:

$$\begin{aligned} \langle A\boldsymbol{\delta}^k, \boldsymbol{\delta}^i \rangle &= \langle A(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k), \boldsymbol{\delta}^i \rangle \\ &= \langle \nabla f(\mathbf{x}^{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}^k), \mathbf{x}^{i+1} - \mathbf{x}^i \rangle = 0 \quad (\text{利用引理 3.2, 3.1 可得}) \end{aligned}$$

□

共轭方向的构造: 利用 $\mathcal{L}_k = \text{span}\{\boldsymbol{\delta}^0, \dots, \boldsymbol{\delta}^{k-1}\}$, 因此 \mathbf{x}^{k+1} 可以被表示为下式:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{k+1} &= \mathbf{x}^k - h_k \nabla f(\mathbf{x}^k) + \sum_{j=0}^{k-1} \lambda_j \boldsymbol{\delta}^j \\ \boldsymbol{\delta}^k &= -h_k \nabla f(\mathbf{x}^k) + \sum_{j=0}^{k-1} \lambda_j \boldsymbol{\delta}^j \end{aligned}$$

两端同时和 $\delta_i, 0 \leq i \leq k-1$ 做由 A 导出的尺度变换的内积则成立:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle A\delta^k, \delta^i \rangle = -h_k \langle A\nabla f(\mathbf{x}_k), \delta^i \rangle + \sum_{j=0}^{k-1} \lambda_j \langle A\delta^j, \delta^i \rangle \\ &= -h_k \langle A\nabla f(\mathbf{x}^k), \delta^i \rangle + \lambda_i \langle A\delta^i, \delta^i \rangle \\ &= -h_k \langle \nabla f(\mathbf{x}^k), \nabla f(\mathbf{x}^{i+1}) - \nabla f(\mathbf{x}^i) \rangle + \lambda_i \langle A\delta^i, \delta^i \rangle \end{aligned}$$

利用引理 3.2, 可知 $\lambda_i = 0 (i = 1, 2, \dots, k-2)$, 当 $i = k-1$ 时

$$\lambda_{k-1} = \frac{h_k \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|^2}{\langle A\delta^{k-1}, \delta^{k-1} \rangle} = \frac{h_k \|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|^2}{\langle \nabla f(\mathbf{x}^k) - \nabla f(\mathbf{x}^{k-1}), \delta^{k-1} \rangle}$$

因此成立 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - h_k \mathbf{p}^k$ 方向 \mathbf{p}^k 可以被表示为

$$\mathbf{p}^k = \nabla f(\mathbf{x}^k) - \frac{\|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|^2 \cdot \delta^{k-1}}{\langle \nabla f(\mathbf{x}^k) - \nabla f(\mathbf{x}^{k-1}), \delta^{k-1} \rangle} = \nabla f(\mathbf{x}^k) - \frac{\|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|^2 \cdot \mathbf{p}^{k-1}}{\langle \nabla f(\mathbf{x}^k) - \nabla f(\mathbf{x}^{k-1}), \mathbf{p}^{k-1} \rangle}$$

从上式中其实也可以看到共轭方向的构造方法即利用当前迭代点的梯度以及上一步的方向构造得到即:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^k &= \nabla f(\mathbf{x}^k) - \beta_k \mathbf{p}^{k-1} \\ \beta_k &= \frac{\|\nabla f(\mathbf{x}^k)\|^2}{\langle \nabla f(\mathbf{x}^k) - \nabla f(\mathbf{x}^{k-1}), \mathbf{p}^{k-1} \rangle} \end{aligned}$$

至此可以给出 CG 方法的一般迭代格式:

- Step 1. 选取初始迭代点 $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ 计算 $\nabla f(\mathbf{x}^0)$ 以及 $f(\mathbf{x}^0)$ 选取初始的搜索方向 $\mathbf{p}^0 = -\nabla f(\mathbf{x}^0)$ (目标函数值下降的最快的方向)
- Step 2. 更新迭代点 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - h_k \mathbf{p}^k$ 这里的步长 h_k 使用精确线搜索即: $h_k = \arg \min_h \{f(\mathbf{x}^k - h\mathbf{p}^k)\}$
- Step 3. 计算 $\nabla f(\mathbf{x}^{k+1})$ 以及 $f(\mathbf{x}^{k+1})$ 若 $\|\nabla f(\mathbf{x}^{k+1})\| < tol$ 终止迭代否则转 Step 4.
- Step 4. 计算系数 β_k 利用 $\nabla f(\mathbf{x}^{k+1})$ 以及 \mathbf{p}^k 更新搜索方向 \mathbf{p}^{k+1} 令 $k = k+1$ 转 Step 2.

- * 对于目标函数为正定二次函数情形算法至多 n 步终止.
- * 对于非线性函数情形系数 β_k 的选取不唯一有 FR 系数, PR 系数等等选取方式.
- * 对于非线性函数的情形往往需要对程序设置重启机制因为随着迭代的进行可能利用上述的构造方法得到的搜索方向之间的正交性会越来越弱.

3.2 CG 方法的性质

- CG 方法对于正定二次函数具有有穷终止性，在某些条件下它对于非线性的问题表现出全局收敛性.
- 可以看到相比于拟牛顿方法，它的迭代过程中并没有涉及到矩阵的更新都只是向量更新，所以它对内存的消耗是比较少的这也就是它的优势.
- 在求解非线性问题确保全局收敛的条件下收敛速度可能会不如梯度下降方法.

进一步的内容以及相应证明可以参考 [1]P102-130.

4 约束优化问题

一般的光滑的约束优化问题可以表示如下：

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & f_0(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & f_i(\mathbf{x}) \leq 0 (i = 1, 2, \dots, m) \end{aligned} \tag{1}$$

这里函数 $f_i(\mathbf{x})$ 都是光滑函数。(注意到 $f(\mathbf{x}) = 0 \Leftrightarrow f(\mathbf{x}) \leq 0$ 而且 $-f(\mathbf{x}) \leq 0$)

4.1 求解方法

这里介绍两种方法：罚函数方法与内点方法，它们的主要思路都是将带约束的优化问题转化为一序列的无约束优化问题从而解决原来的约束优化问题。

定义 4.1. 函数 $\Phi(\mathbf{x})$ 定义为闭集 $Q \subseteq \mathbb{R}^n$ 的罚函数，若成立

$$\Phi(\mathbf{x}) = 0 (\forall \mathbf{x} \in Q)$$

$$\Phi(\mathbf{x}) > 0 (\forall \mathbf{x} \notin Q)$$

此外注意到若 $\Phi_1(\mathbf{x})$ 作为集合 Q_1 的罚函数， $\Phi_2(\mathbf{x})$ 作为集合 Q_2 的罚函数那么 $\Phi_1 + \Phi_2$ 实际上就是集合 $Q_1 \cap Q_2$ 的罚函数.

- 对于集合 $\{\mathbf{x} | f(\mathbf{x}) = 0\}$ 它的罚函数可以定义为 $\|f(\mathbf{x})\|^2$.
- 对于集合 $\{\mathbf{x} | f(\mathbf{x}) \leq 0\}$ 它的罚函数可以定义为 $\max\{f(\mathbf{x}), 0\}$.

罚函数方法的计算格式：首先对约束优化问题 (1) 定义具体的罚函数 $\Phi(\mathbf{x})$ 使得若 \mathbf{x} 不在可行域内就有 $\Phi(\mathbf{x}) > 0$ ，在可行域内有 $\Phi(\mathbf{x}) = 0$

Step 1. 选定一个数列 $\{t_k\}_{k=1}^{\infty}$ 满足 $k \rightarrow \infty$ 时有 $t_k \rightarrow +\infty$ (比如取 $\{10^k\}$)

Step 2. 求解如下的无约束优化问题:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x}} \{f_0(\mathbf{x}) + t_k \Phi(\mathbf{x})\}$$

在用数值方法求解时使用 \mathbf{x}^k 作为数值方法的初始迭代点.

Step 3. 检验得到的点 \mathbf{x}^{k+1} 是否满足 $\|\Phi(\mathbf{x}^{k+1})\| < tol$ (tol 是预先给定的常数) 若满足输出 \mathbf{x}^{k+1} 作为数值解, 若不满足令 $k = k + 1$ 转 Step 2.

定理 4.1. 罚函数方法的收敛性定理: 假设存在常数 $\bar{t} > 0$ 使得下水平集 S 是有界的 (这里的 f^* 表示约束优化问题的最优值)

$$S = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n | f_0(\mathbf{x}) + \bar{t} \Phi(\mathbf{x}) \leq f^*\}$$

则成立: $\lim_{k \rightarrow \infty} f(\mathbf{x}^k) = f^*$ 以及 $\lim_{k \rightarrow \infty} \Phi(\mathbf{x}^k) = 0$

- 罚函数的思想就是如果不在可行域内就加大惩罚使得最终落在可行域内, 但是值得注意的是 $t_k \rightarrow +\infty$ 这种操作在计算机计算是很容易产生数值不稳定性。

内点算法与罚函数算法思路相同, 内点算法主要思路就是找一个可行域的内点然后每次迭代都在可行域内进行, 从而找到最优解。

定义 4.2. 函数 $F(\mathbf{x})$ 定义为闭集 $Q \subseteq \mathbb{R}^n$ 的障碍函数, 若成立

$$\text{int } Q \neq \emptyset$$

$$F(\mathbf{x}) \rightarrow +\infty \text{ 随着 } \mathbf{x} \rightarrow \partial Q$$

此外注意到若 $F_1(\mathbf{x})$ 作为集合 Q_1 的障碍函数, $F_2(\mathbf{x})$ 作为集合 Q_2 的障碍函数那么 $F_1 + F_2$ 实际上就是集合 $Q_1 \cap Q_2$ 的障碍函数。

- 对于集合 $\{\mathbf{x} | f_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1, \dots, m\}$ 可以定义它的如下的一些障碍函数:

$$\text{Power - function barrier : } F(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \frac{1}{(-f_i(\mathbf{x}))^p}, \quad p \geq 1$$

$$\text{Logarithmic barrier : } F(\mathbf{x}) = - \sum_{i=1}^m \ln(-f_i(\mathbf{x})).$$

$$\text{Exponential barrier : } F(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \exp\left(\frac{1}{-f_i(\mathbf{x})}\right).$$

内点方法的计算格式: 首先对约束优化问题 (1) 定义具体的障碍函数 $F(\mathbf{x})$ 使得每一步的迭代都能被限制在可行域的内部

Step 1. 选定一个严格单调递增的数列 $\{t_k\}_{k=1}^{\infty}$ 满足 $k \rightarrow \infty$ 时有 $t_k \rightarrow +\infty$ (比如取 $\{10^k\}$)

Step 2. 求解如下的无约束优化问题:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg \min_{\mathbf{x} \in Q} \{f_0(\mathbf{x}) + \frac{1}{t_k} F(\mathbf{x})\}$$

在用数值方法求解时使用 \mathbf{x}^k 作为数值方法的初始迭代点.

Step 3. 检验得到的点 \mathbf{x}^{k+1} 是否满足 $\|\Phi(\mathbf{x}^{k+1})\| < tol$ (tol 是预先给定的常数) 若满足输出 \mathbf{x}^{k+1} 作为数值解, 若不满足令 $k = k + 1$ 转 Step 2.

定理 4.2. 内点法的收敛性定理: 假设存在常数 F^* 使得 $F(\mathbf{x}) \geq F^*$ 对任意的 $\mathbf{x} \in Q$ 都成立则

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \Psi_k^* = f^*, (\Psi_k(x) = f_0(x) + \frac{1}{t_k} F(x), \quad \Psi_k^* = \min_{x \in Q} \Psi_k(x))$$

这里 f^* 是指约束优化问题 (1) 的最优值

参考文献

- [1] Jorge Nocedal and Stephen J. Wright. Numerical optimization. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer, New York, second edition, 2006.