无约束优化问题1

翟卫欣 副教授

zhaiweixin@cau.edu.cn

中国农业大学信息与电气工程学院

目录

目录

无约束最优化问题

$$\min_{x \in \boldsymbol{R}^n} f(\boldsymbol{x})$$

无约束最优化问题

局部最优解

- 设$\boldsymbol{x}^* \in \boldsymbol{R}^n$，若存在$\boldsymbol{x}^*$的$\delta(\delta > 0)$邻域 $N_\delta(\boldsymbol{x}^*) = \{\boldsymbol{x} | \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*\| \leqslant \delta\}$，
  使得 $f(\boldsymbol{x}) \geqslant f(\boldsymbol{x}^*), \forall \boldsymbol{x} \in N_\delta(\boldsymbol{x}^*)$，
  则称$\boldsymbol{x}^*$是$f(\boldsymbol{x})$的局部最优解（局部解）;
- 若$f(\boldsymbol{x}) > f(\boldsymbol{x}^*), \forall \boldsymbol{x} \in N_\delta(\boldsymbol{x}^*)$，
  则称$\boldsymbol{x}^*$是$f(\boldsymbol{x})$的严格局部最优解（严格局部解）。

全局最优解

- 若对任意$x \in \boldsymbol{R}^n$，有 $f(\boldsymbol{x}) \geqslant f(\boldsymbol{x}^*)$，
  则称$\boldsymbol{x}^*$是$f(\boldsymbol{x})$的全局最优解（全局解）;
- 若$f(\boldsymbol{x}) > f(\boldsymbol{x}^*)$，
  则称$\boldsymbol{x}^*$是$f(\boldsymbol{x})$的严格全局最优解（严格全局解）。
  求全局解较复杂，无约束最优化方法通常只求局部解。

目录

一阶必要条件

- 设$f(\boldsymbol{x})$一阶连续可微，若$\boldsymbol{x}^*$是无约束问题的局部解，则$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$

- 证明：对任意的$\boldsymbol{d} \neq \mathbf{0}, \boldsymbol{d} \in \boldsymbol{R}^n$，构造单变量函数$\varphi(\alpha) = f(\boldsymbol{x}^* + \alpha \boldsymbol{d})$，因为$\boldsymbol{x}$是约束问题的局部解，所以$\alpha = 0$是一元函数$\varphi(\alpha)$的局部极小点，由一元函数极小点的必要条件，有：
  $0 = \varphi'(0) =< \nabla f(\boldsymbol{x}^*), \boldsymbol{d} >= \boldsymbol{d}^T \nabla f(\boldsymbol{x}^*), \forall \boldsymbol{d} \neq \mathbf{0}, \boldsymbol{d} \in \boldsymbol{R}^n$
  因为$\boldsymbol{d}$的任意性，所以$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$，即在$\boldsymbol{x}^*$位置上的任何方向上的导数均为0。此处$< \nabla f(\boldsymbol{x}^*), \boldsymbol{d} >$代表内积。

一阶必要条件举例

一阶必要条件不是充分条件，例如：

$$min\{f(\boldsymbol{x}) = x_1^2 + x_2^3\}, \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^2$$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 3x_2^2 \end{bmatrix}$$

目录

二阶必要条件

- 设$f(\boldsymbol{x})$二阶连续可微，若$\boldsymbol{x}^*$是无约束问题的局部解，则$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$，$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$为半正定。

- 证明：对任意的$\boldsymbol{d} \neq \mathbf{0}, \boldsymbol{d} \in \boldsymbol{R}^n$，由于$\boldsymbol{x}$是约束问题的局部解，所以存在$\varepsilon > 0$，使得$0 < \alpha < \epsilon$时，有
  $f(\boldsymbol{x}^* + \alpha \boldsymbol{d}) \geqslant f(\boldsymbol{x}^*)$，另一方面，二阶Taylor展开式 $f(\boldsymbol{x}^* + \alpha \boldsymbol{d}) = f(\boldsymbol{x}^*) + \alpha \boldsymbol{d}^T \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \frac{1}{2}\alpha^2 \boldsymbol{d}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} + o(\alpha^2)$
  由于$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$，所以$\frac{1}{2}\alpha^2 \boldsymbol{d}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} + o(\alpha^2) \geqslant 0$，
  令$\alpha \to 0^+$，得到$\boldsymbol{d}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} + \frac{o(\alpha^2)}{\alpha^2} \geqslant 0, \forall \boldsymbol{d} \in \boldsymbol{R}^n$，
  即$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$为半正定。

二阶必要条件举例

- $min\{f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 - 4x_2 - x_2^3\}, \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^2$

  $$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} x_1 + x_2 - 4 \\ x_1 + 4x_2 - 4 - 3x_2^2 \end{bmatrix}$$

- Hesse矩阵为

  $$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 4 - 6x_2 \end{bmatrix}$$

- 令$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$可得$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \end{bmatrix}$或者$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix}$。

- 但是当$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix}$时，$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix}$

  不是半正定矩阵，仅有$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \end{bmatrix}$可能为解。

二阶必要条件举例

- 满足$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$的点$\boldsymbol{x}^*$称为$f$的平稳点或驻点，该$\boldsymbol{x}^*$可能是极大点、极小值点或既不极大又不极小的点（鞍点）。

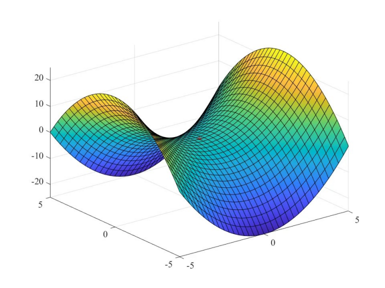


图 1: 鞍点示例

目录

二阶充分条件

- 设$f(x)$二阶连续可微，且$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$，$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$正定，则$\boldsymbol{x}^*$是无约束问题的严格局部解。

- 证明：令$\boldsymbol{d}$为任意方向，其中$\|\boldsymbol{d}\| = 1$，再令$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^* + \lambda \boldsymbol{d}$，$f(\boldsymbol{x})$在$\boldsymbol{x}^*$处的泰勒展开为:
  $f(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}^* + \lambda \boldsymbol{d}) = f(\boldsymbol{x}^*) + \lambda \boldsymbol{d}^T \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \frac{1}{2}\lambda^2 \boldsymbol{d}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} + o(\lambda^2)$，
  其中$\lambda > 0$
  因为$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$，所以
  $f(\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{x}^*) = \frac{1}{2}\lambda^2 \boldsymbol{d}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} + o(\lambda^2)$
  由于$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$正定，所以 $\frac{f(\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{x}^*)}{\lambda^2} = \frac{1}{2}\boldsymbol{d}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} + \frac{o(\lambda^2)}{\lambda^2} > 0$
  所以$f(x)$在以$\boldsymbol{x}^*$为球心、λ为半径的空间内的局部最小值为$f(\boldsymbol{x}^*)$。

一阶充分条件的反例

对于如下问题$min\{f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 - 4x_2 - x_2^3\}, \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^2$

在$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \end{bmatrix}$时，Hesse矩阵为

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} \text{正定}$$

该点是局部最优解。

目录

凸充分性定理

- 设$f(x)$是一阶连续可微的凸函数，则$\nabla f(x^*) = \mathbf{0}$是$x^*$为全局解的充分必要条件。

  证明： $f(\boldsymbol{x}) \geqslant f(\boldsymbol{x}^*) + \nabla f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*) = f(\boldsymbol{x}^*)$

  (参考lecture note 2的”凸函数的判别定理2”章节)

无约束最优化问题的求解

$\min\limits_{x \in \boldsymbol{R}^n} f(\boldsymbol{x})$

- 常用方法是构造序列$\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$，使其满足：$\lim\limits_{k\to\infty} f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = f(\boldsymbol{x}^*) = \min\limits_{x\in\boldsymbol{R}^n} f(\boldsymbol{x})$，$\lim\limits_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$ 称x^*是问题的解，$\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$是极小化点列。极小化点列的构造方法通常采取逐步构造法，即取 $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{d}^{(k)}, k = 1, 2, \cdots$
- 其中，$\boldsymbol{d}^{(k)}$为$\boldsymbol{x}^{(k)}$处的搜索方向，α_k为沿$\boldsymbol{d}^{(k)}$方向的步长。采用不同的方法构造$\boldsymbol{d}^{(k)}$和确定α_k对应不同的算法。

目录

线性搜索问题

- 假定在$\boldsymbol{x}^{(k)}$处的方向$\boldsymbol{d}^{(k)}$已确定，如何沿着$\boldsymbol{d}^{(k)}$选取合适的步长α_k以确定$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\boldsymbol{d}^{(k)}, k=1,2,\cdots$且满足$f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})<f(\boldsymbol{x}^{(k)})$的问题称为线性搜索问题。
- 线性搜索问题常分为精确线性搜索、非精确线性搜索问题。
- 以一维函数为例介绍二分法、黄金分割法、斐波那契数列法、牛顿法、割线法等精确线性搜索方法以及Armijo方法、Goldstein方法、Wolfe-Powell方法等非精确线性搜索方法。

二分法

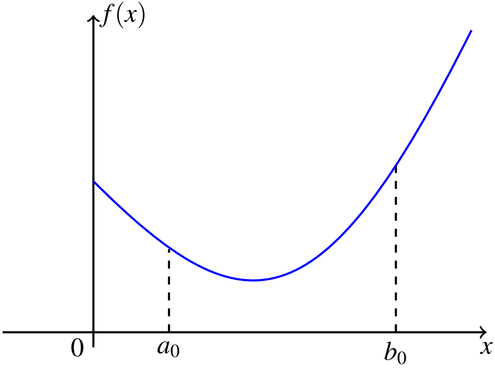
- 针对一元单值函数$f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$，求$[a_0,b_0]$上的极小点。
- 前提：f在$[a_0,b_0]$上是单峰的，并且是连续可微的，一阶导数为f'
- 步骤（令x^*为极小值）：
  取$x^{(k)}=\frac{a_k+b_k}{2}$，$f$在$x^{(k)}$处的导数为$f'(x^{(k)})$，

$$\begin{cases} f'(x^{(k)})>0\Rightarrow x^*\in[a_k,x^{(k)}]\Rightarrow[a_{k+1},b_{k+1}]=[a_k,x^{(k)}] \\ f'(x^{(k)})<0\Rightarrow x^*\in[x^{(k)},b_k]\Rightarrow[a_{k+1},b_{k+1}]=[x^{(k)},b_k] \\ f'(x^{(k)})=0\Rightarrow x^*=x^{(k)} \end{cases}$$

黄金分割法

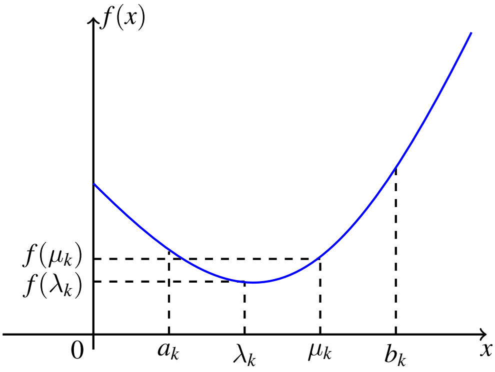
针对一元单值函数$f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$，求$[a_0,b_0]$上的极小点。

前提：f在$[a_0,b_0]$上是单峰的。



可否尽可能减少计算次数？

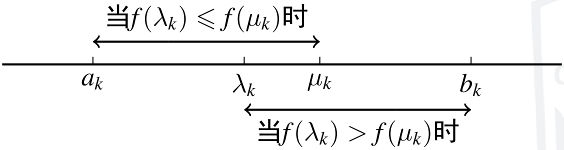
黄金分割法



$|\lambda_k - a_k| = |b_k - \mu_k| = \rho|b_k - a_k|$其中$0 < \rho < \frac{1}{2}$。

- 由于函数值先单调下降，后单调上升，所以如果$f(\lambda_k) \leqslant f(\mu_k)$，则极小值在$[a_k, \mu_k]$可取到；否则，极小值在$[\lambda_k, b_k]$可取到，$k = 0, 1, 2, \cdots$

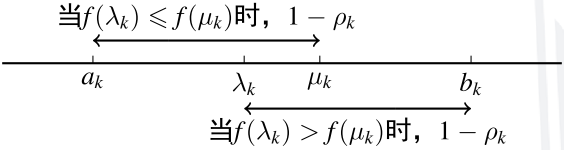
黄金分割法



- 当$f(\lambda_k) \leqslant f(\mu_k)$时，$[a_{k+1}, b_{k+1}] = [a_k, \mu_k]$；
- 当$f(\lambda_k) > f(\mu_k)$时，$[a_{k+1}, b_{k+1}] = [\lambda_k, b_k]$。
- 在迭代过程中，我们希望能尽量少地减少对于f函数的计算，所以希望在进行第$k+1$次分割时，第k次分割点的数值也能用上。
- 当$[a_{k+1}, b_{k+1}] = [a_k, \mu_k]$时，我们希望$\mu_{k+1} = \lambda_k$；
- 当$[a_{k+1}, b_{k+1}] = [\lambda_k, b_k]$时，我们希望$\lambda_{k+1} = \mu_k$。
- 令$\overline{a_k, b_k} = 1$，第k次分割时，$\overline{\lambda_k, \mu_k} = 1 - 2\rho$；第$k+1$次分割时，$\overline{\lambda_k, \mu_k} = \rho(1-\rho)$。解得$\rho = \frac{3-\sqrt{5}}{2}$，为黄金比例分割。

斐波那契数列法

利用黄金分割法进行区间压缩的过程中，ρ保持不变。如果不限制ρ保持不变，对于第k次迭代需确定一个参数ρ_k。



$|\lambda_k - a_k| = |b_k - \mu_k| = \rho_k |b_k - a_k|$其中$0 < \rho_k < \frac{1}{2}$。

- 在迭代过程中，我们希望能尽量减少对于f函数的计算，所以希望在进行第$k+1$次分割时，第k次分割点的数值也能用上。
- 当$[a_{k+1}, b_{k+1}] = [a_k, \mu_k]$时，我们希望$\mu_{k+1} = \lambda_k$；
- 当$[a_{k+1}, b_{k+1}] = [\lambda_k, b_k]$时，我们希望$\lambda_{k+1} = \mu_k$。
- 令$\overline{a_k, b_k} = 1$，第k次分割时，$\overline{\lambda_k, \mu_k} = 1 - 2\rho_k$；第$k+1$次分割时，$\overline{\lambda_k, \mu_k} = \rho_{k+1}(1-\rho_k)$。

斐波那契数列法

$$\rho_{k+1} = 1 - \frac{\rho_k}{1-\rho_k}$$

- 存在多个序列能满足该条件，例如$\rho_k = \frac{3-\sqrt{5}}{2}$，再例如$\rho_k = 1 - \frac{F_{N-k+1}}{F_{N-k+2}}$，其中$F_i$是斐波那契数列，$N$是总迭代次数。
- 斐波那契数列： $F_{i+1} = F_i + F_{i-1}, i \geqslant 0$。
  $F_{-1} = 0, F_0 = 1, F_1 = 1, F_2 = 2, F_3 = 3, F_4 = 5, F_5 = 8, F_6 = 13, F_7 = 21, F_8 = 34, \cdots$
- 证明斐波那契数列满足该条件：
  $\rho_{k+1} = 1 - \frac{F_{N-k}}{F_{N-k+1}} = 1 - (1 - \frac{F_{N-k+1}}{F_{N-k+2}})/(1-(1-\frac{F_{N-k+1}}{F_{N-k+2}}))$
  $\Leftrightarrow F_{N-k+2} = F_{N-k} + F_{N-k+1}$，其中$F_i > 0, i = 1, 2, 3, \cdots$。

斐波那契数列法

- 斐波那契数列数列法N次压缩的总压缩比为:
$(1-\rho_1)(1-\rho_2)(1-\rho_3)\cdots(1-\rho_N)=\frac{F_N}{F_{N+1}}\frac{F_{N-1}}{F_N}\cdots\frac{F_1}{F_2}=\frac{1}{F_{N+1}}$

- 但是由于$\rho_N=\frac{1}{2}$，两个中间点重合，无法压缩，所以常令$\rho_N=\frac{1}{2}-\varepsilon$，其中$\varepsilon$是很小的正实数。则$1-\rho_N=\frac{1+2\varepsilon}{2}$，总压缩比为$\frac{1+2\varepsilon}{F_{N+1}}$。

黄金分割法和斐波那契数列法举例

- 求目标函数在$[0,2]$上的极小点，要求极小点所在区间的长度压缩到0.3以内

$$f(x)=x^4-14x^3+60x^2-70x$$

黄金分割法举例

经过N次压缩可以在$[0,2]$上取得极小点$(\frac{\sqrt{5}-1}{2})^N \leqslant 0.3/2 \Rightarrow N \geqslant 4$

第1次迭代：

- $\lambda_1 = a_1 + \rho(b_1 - a_1) = 0.7639;$
  $\mu_1 = a_1 + (1-\rho)(b_1 - a_1) = 1.236$
  $\Rightarrow f(\lambda_1) = -24.36 < f(\mu_1) = -18.96$
- 因此，区间被压缩为$[a_2, b_2] = [a_1, \mu_1] = [0, 1.236]$

第2次迭代：

- $\lambda_2 = a_2 + \rho(b_2 - a_2) = 0.4721$
  $\Rightarrow f(\lambda_2) = -21.10 > f(\mu_2) = f(\lambda_1) = -24.36$
- 因此，区间被压缩为$[a_3, b_3] = [\lambda_2, b_2] = [0.4721, 1.236]$

黄金分割法举例

第3次迭代：

- $\mu_3 = a_3 + (1-\rho)(b_3 - a_3) = 0.9443;$
  $\Rightarrow f(\lambda_3) = f(\mu_2) = -24.36 < f(\mu_3) = -23.59$

- 因此，区间被压缩为$[a_4, b_4] = [a_3, \mu_3] = [0.4721, 0.9443]$

第4次迭代：

- $\lambda_4 = a_4 + \rho(b_4 - a_4) = 0.6525$
  $\Rightarrow f(\lambda_4) = -23.84 > f(\mu_4) = f(\lambda_3) = -24.36$

- 因此，区间被压缩为$[\lambda_4, b_4] = [0.6525, 0.9443]$

斐波那契数列法举例

经过N次压缩可以在$[0,2]$上取得极小点$\frac{1+2\varepsilon}{F_{N+1}} \leqslant 0.3/2 \Rightarrow N \geqslant 4$

第1次迭代：

- $\rho_1 = 1 - \frac{F_4}{F_5} = \frac{3}{8}$
  $\lambda_1 = a_1 + \rho_1(b_1 - a_1) = \frac{3}{4}$
  $\mu_1 = a_1 + (1-\rho_1)(b_1 - a_1) = \frac{5}{4}$
  $\Rightarrow f(\lambda_1) = -24.34 < f(\mu_1) = -18.65$
- 因此，区间被压缩为$[a_2, b_2] = [a_1, \mu_1] = [0, \frac{5}{4}]$

第2次迭代：

- $\rho_2 = 1 - \frac{F_3}{F_4} = \frac{2}{5}$
  $\lambda_2 = a_2 + \rho_2(b_2 - a_2) = \frac{1}{2}$
  $\mu_2 = \lambda_1 = \frac{3}{4}$
  $\Rightarrow f(\lambda_2) = -21.69 > f(\mu_2) = -24.34$
- 因此，区间被压缩为$[a_3, b_3] = [\lambda_2, b_2] = [\frac{1}{2}, \frac{5}{4}]$

斐波那契数列法举例

第3次迭代：

- $\rho_3 = 1 - \frac{F_2}{F_3} = \frac{1}{3}$
  $\lambda_3 = \mu_2 = \frac{3}{4}$
  $\mu_3 = a_3 + (1-\rho_3)(b_3 - a_3) = 1$
  $\Rightarrow f(\lambda_3) = -24.34 < f(\mu_3) = -23$
- 因此，区间被压缩为$[a_4, b_4] = [a_3, \mu_3] = [\frac{1}{2}, 1]$

第4次迭代：

- $\rho_4 = 1 - \frac{F_1}{F_2} - \varepsilon = \frac{1}{2} - \varepsilon$
  $\lambda_4 = a_4 + \rho_4(b_4 - a_4) = \frac{3}{4} - \frac{1}{2}\varepsilon$
  $\mu_4 = \lambda_3 = \frac{3}{4} + \frac{1}{2}\varepsilon$
  令$\varepsilon = 0.05 \Rightarrow f(\lambda_4) = -24.27 > f(\mu_4) = 24.34$
- 因此，区间被压缩为$[a_5, b_5] = [\lambda_4, b_4] = [0.725, 1]$

牛顿法

- 针对一元单值函数$f:\mathbb{R}\rightarrow\mathbb{R}$，求$[a_0,b_0]$上的极小点。
- 前提：f在$[a_0,b_0]$上是单峰的，并且是连续二阶可微的，一阶导数为$f^{'}$，二阶导数为$f^{''}$。
- 步骤：构造经过$(x^{(k)},f(x^{(k)}))$的函数

$$q(x)=f(x^{(k)})+f^{'}(x^{(k)})(x-x^{(k)})+\frac{1}{2}f^{''}(x^{(k)})(x-x^{(k)})^2$$

  此时满足$q(x^{(k)})=f(x^{(k)}),q^{'}(x^{(k)})=f^{'}(x^{(k)}),q^{''}(x^{(k)})=f^{''}(x^{(k)})$。$q(x)$可认为是$f(x)$的近似，所以求$f(x)$的极小值点可近似于求解$q(x)$的极小值点。
- 求极小点应满足一阶必要条件，即$0=q^{'}(x)=f^{'}(x^{(k)})+f^{''}(x^{(k)})(x-x^{(k)})$，解得 $x^{(k+1)}=x^{(k)}-f^{'}(x^{(k)})/f^{''}(x^{(k)})$。

牛顿法举例

求目标函数$f(x)$的极小点，初始值为$x^{(0)}=0.5$，要求精度为$\varepsilon=10^{-5}$

$$f(x)=\frac{1}{2}x^2-sinx$$

求得其一阶导数和二阶导数为

$$f^{'}(x)=x-cosx;f^{''}(x)=1+sinx$$

$$\begin{aligned}x^{(1)}&=0.5-\frac{0.5-cos0.5}{1+sin0.5}\\&=0.5-\frac{-0.3775}{1.479}\\&=0.7552\end{aligned}$$

牛顿法举例

$$x^{(2)} = x^{(1)} - \frac{x^{(1)} - cosx^{(1)}}{1 + sinx^{(1)}} = 0.7391$$

$$x^{(3)} = x^{(2)} - \frac{x^{(2)} - cosx^{(2)}}{1 + sinx^{(2)}} = 0.7390$$

$$x^{(4)} = x^{(3)} - \frac{x^{(3)} - cosx^{(3)}}{1 + sinx^{(3)}} = 0.7390$$

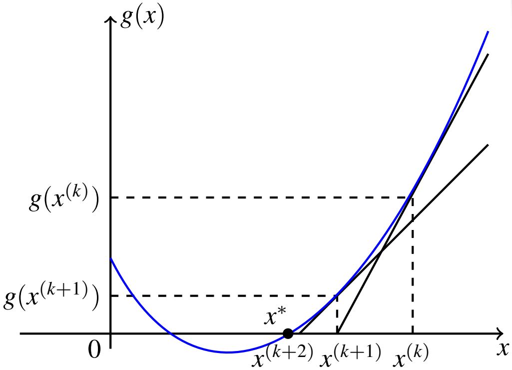
$|x^{(3)} - x^{(4)}| < \varepsilon$ 此时，$f'(x^{(4)}) \approx 0; f''(x^{(4)}) = 1.673 > 0$

所以，$x^{(4)} = 0.7390$是极小点。

牛顿法举例

用牛顿法求解时常令$g(x) = f'(x)$，可以得到一个迭代公式，求解方程$g(x) = 0$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{g(x^{(k)})}{g'(x^{(k)})}$$



割线法

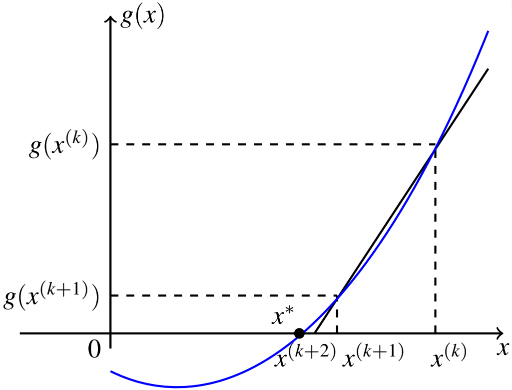
- 已知牛顿法要求$x^{(k+1)}=x^{(k)}-f'(x^{(k)})/f''(x^{(k)})$。如果二阶导数不存在，则可以采用不同点处一阶导数对其近似得到。
- 例如：
  $$f''(x^{(k)})=\frac{f'(x^{(k)})-f'(x^{(k-1)})}{x^{(k)}-x^{(k-1)}}$$
  代入牛顿公式中，得到新的迭代公式：
  $$x^{(k+1)}=x^{(k)}-f'(x^{(k)})\frac{x^{(k)}-x^{(k-1)}}{f'(x^{(k)})-f'(x^{(k-1)})}$$
- 整理后即为：
  $$x^{(k+1)}=\frac{f'(x^{(k)})x^{(k-1)}-f'(x^{(k-1)})x^{(k)}}{f'(x^{(k)})-f'(x^{(k-1)})}$$
- 该方法需要两个起始点$x^{(-1)}$、$x^{(0)}$。

割线法

令$g(x)=f^{'}(x)$，可以得到一个迭代公式，求解方程$g(x)=0$

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}-g(x^{(k)})\frac{x^{(k)}-x^{(k-1)}}{g(x^{(k)})-g(x^{(k-1)})}$$

或$x^{(k+1)}=\frac{g(x^{(k)})x^{(k-1)}-g(x^{(k-1)})x^{(k)}}{g(x^{(k)})-g(x^{(k-1)})}$



目录

非精确线性搜索方法

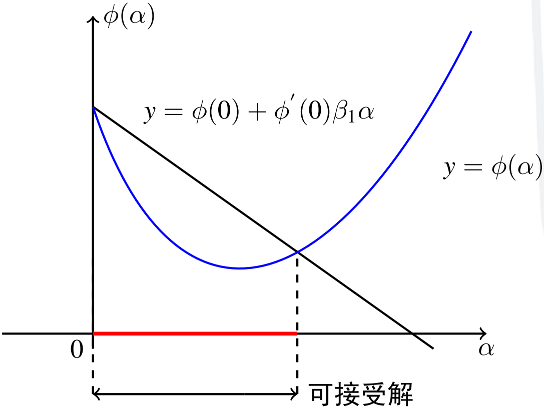
- 用精确线性搜索方法求得的$\phi(\alpha) = f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)})$是精确（或近似）极小点，迭代过程中尽管每次下降比较多，但计算量相对较大。

- 许多时候在求解$f(\boldsymbol{x})$的最优解时，无需十分精确，特别是在迭代的最初阶段。过分追求精确度会降低整个方法的运算速度。因此，我们可以适当放宽对α_k的要求，只需目标函数每次迭代都有充分下降即可，这样就可减少每次迭代的时间，使整体效果更好。

- 常见的方法包括Armijo方法、Goldstein方法、Wolfe-Powell方法。

Armijo方法

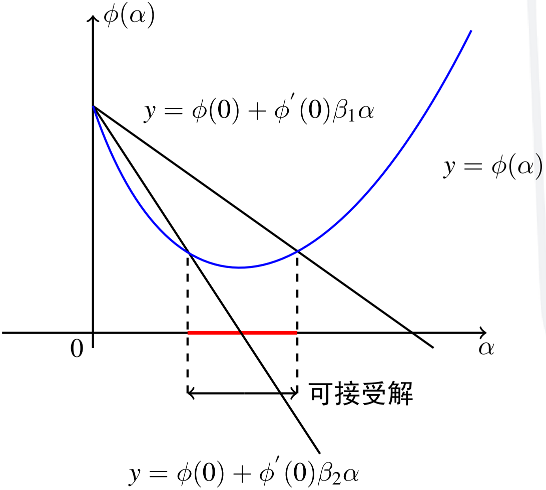
- 预先指定一个参数β_1，满足$0 < \beta_1 < 1$，需要满足 $0 < \phi(\alpha) \leqslant \phi(0) + \phi^{'}(0)\beta_1\alpha$；



Goldstein方法

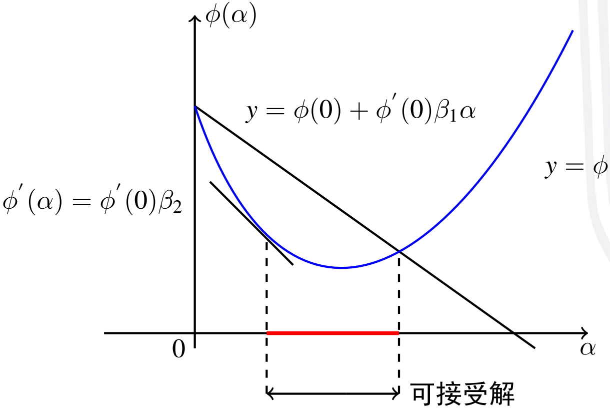
- 预先指定两个参数β_1和β_2，满足$0 < \beta_1 < \beta_2 < 1$，$\alpha$需要满足$\phi(0) + \phi^{'}(0)\beta_2\alpha \leqslant \phi(\alpha) \leqslant \phi(0) + \phi^{'}(0)\beta_1\alpha$；
- 两个系数β_1和β_2控制α既不过大又不过小。

Goldstein方法



Wolfe-Powell方法

- 预先指定两个参数β_1和β_2，满足$0 < \beta_1 < \beta_2 < 1$，$\alpha$需要满足$\phi(\alpha) \leqslant \phi(0) + \phi'(0)\beta_1\alpha$且$\phi'(0)\beta_2 \leqslant \phi'(\alpha)$；
- 两个系数β_1和β_2控制α既不过大又不过小。



目录

下降算法的全局收敛性与收敛速率

下降算法的一般迭代格式如下：

1. 给定初始点$\boldsymbol{x}^{(1)}$，$k=1$；
2. 确定局部下降方向$\boldsymbol{d}^{(k)}$，使得$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T\boldsymbol{d}^{(k)}<0$
3. 确定步长$\alpha_k>0$使得$f(\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\boldsymbol{d}^{(k)})<f(\boldsymbol{x}^{(k)})$
4. 令$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\boldsymbol{d}^{(k)}$
5. 若$\boldsymbol{x}^{(k+1)}$满足终止准则，则停；否则，$k=k+1$，转至步骤(1)

下降算法的全局收敛性与收敛速率

三个问题：

1. 如何确定某点处的搜索方向？
2. 如何进行一维搜索以确定步长？
3. 如何确定当前点的终止准则？

解决方法：

- 对第(1)个问题，今后讨论；
- 对第(2)个问题，本节之前已讨论；
- 终止准则一般与算法相关，常定为$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = \mathbf{0}$

下降算法的全局收敛性与收敛速率

- 设$\nabla f(\boldsymbol{x})$在水平集$L(\boldsymbol{x}^0) = \{\boldsymbol{x}|f(\boldsymbol{x}) \leqslant f(\boldsymbol{x}^0)\}$上存在且一直连续，下降算法的搜索方向$\boldsymbol{d}^{(k)}$与$-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$之间的夹角为$\theta_k = arccos(\frac{-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)}}{\|\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\|\|\boldsymbol{d}^{(k)}\|})$，满足条件：
  存在$\overline{u} > 0$，使得$\theta_k \leqslant \frac{\pi}{2} - \overline{u}, \forall k$

- 步长α_k由以下3种方法：
  (1)精确线性搜索，(2)Goldstein方法，(3)Wolfe-Powell方法之一确定，则
  对某个k，有$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = \boldsymbol{0}$，或者有$f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \to -\infty(k \to \infty)$，或者有$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \to \boldsymbol{0}(k \to \infty)$

下降算法的全局收敛性与收敛速率

- 设序列$\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$收敛到$\boldsymbol{x}^*$，若极限

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^*\|}{\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\|} = \beta$$

存在，则当$0 < \beta < 1$时，则称$\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$为线性收敛；当$\beta = 0$时，则称$\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$为超线性收敛；当$\beta = 1$时，则称$\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$为次线性收敛，因为次线性收敛的收敛速度太慢，一般不予以考虑。

- 若存在某个$p \geqslant 1$，有

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^*\|}{\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\|^p} = \beta < +\infty$$

则称$\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$为p阶收敛。当$p > 1$时，p阶收敛必为超线性收敛，反之不一定成立。

Thank you for your attention!

翟卫欣　副教授

zhaiweixin@cau.edu.cn

中国农业大学信息与电气工程学院