

第十六讲： 优化算法

寻找优化问题的非解析解

杨 林

大 纲

1. 无约束优化算法

1.1. 下降法

1.2. 牛顿法

2. 等式约束优化算法

大 纲

1. 无约束优化算法

1.1. 下降法

1.2. 牛顿法

2. 等式约束优化算法

1 无约束优化算法

最小化 $f(x)$

1. f 凸, 二次连续可微 (因此 $\mathbf{dom} f$ 是开集)
2. 我们假设最优值 $p^* = \inf_x f(x)$ 可达到 (并且有限)

■ 迭代方法

1. 生成点序列 $x^{(k)} \in \mathbf{dom} f, k = 0, 1, \dots$, 其中
$$f(x^{(k)}) \rightarrow p^*$$
2. 可以解释为求解最优性条件的迭代方法

$$\nabla f(x^*) = 0$$

1 无约束优化算法

■ 下降方法

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t^{(k)} \Delta x^{(k)} \text{ 其中 } f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$$

1. 其他符号: $x^+ = x + t\Delta x$, $x^- := x - t\Delta x$
2. Δx 是步径或搜索方向; t 是步进或步长
3. 从凸性来看, $f(x^+) < f(x)$ 意味着 $\nabla f(x)^T \Delta x < 0$ (即, Δx 是下降方向) ($f(x^+) - f(x) \geq \nabla f(x)^T t\Delta x$)

General descent method.

given a starting point $x \in \text{dom } f$.

repeat

1. Determine a descent direction Δx .
2. *Line search.* Choose a step size $t > 0$.
3. *Update.* $x := x + t\Delta x$.

until stopping criterion is satisfied.

1 无约束优化算法

■ 直线搜索方法

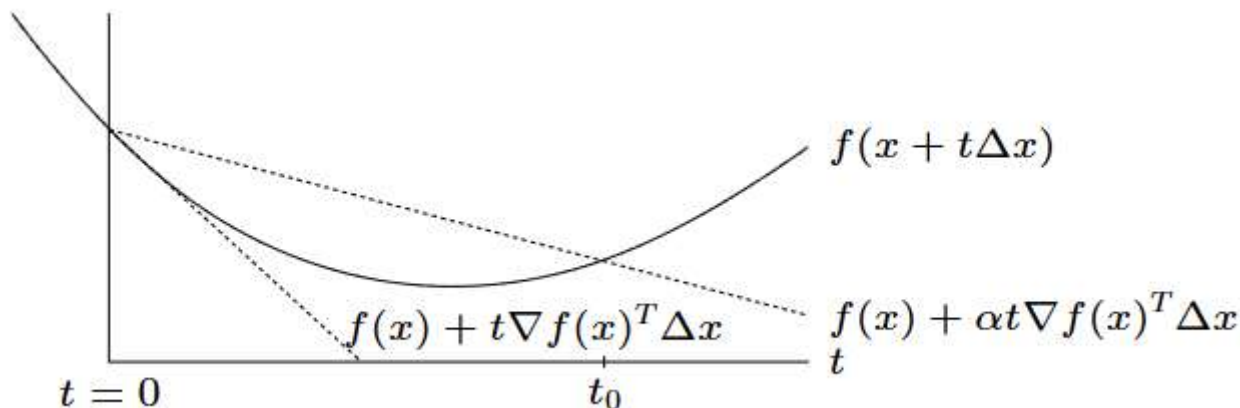
□ 精确直线搜索: $t = \arg \min_{t>0} f(x + t\Delta x)$

□ 回溯直线搜索 (参数 $\alpha \in (0, 1/2)$, $\beta \in (0, 1)$)

1. 从 $t = 1$ 开始, 重复 $t := \beta t$ 直到

$$f(x + t\Delta x) < f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T \Delta x$$

2. 图形解释: 回溯直到 $t \leq t_0$



1 无约束优化算法

□ 梯度下降方法

given a starting point $x \in \text{dom } f$.

repeat

1. $\Delta x := -\nabla f(x)$.
2. *Line search*. Choose step size t via exact or backtracking line search.
3. *Update*. $x := x + t\Delta x$.

until stopping criterion is satisfied.

1. 停止准则通常为 $\|\nabla f(x)\|_2 \leq \varepsilon$

2. 收敛结果: 对于强凸函数 f ,

$$f(x^{(k)}) - p^* \leq c^k (f(x^{(0)}) - p)$$

$c \in (0, 1)$ 取决于 $x^{(0)}$ 和搜索类型

3. 非常简单, 但通常非常慢; 在实践中很少使用

1 无约束优化算法

□ \mathbb{R}^2 中的二次问题

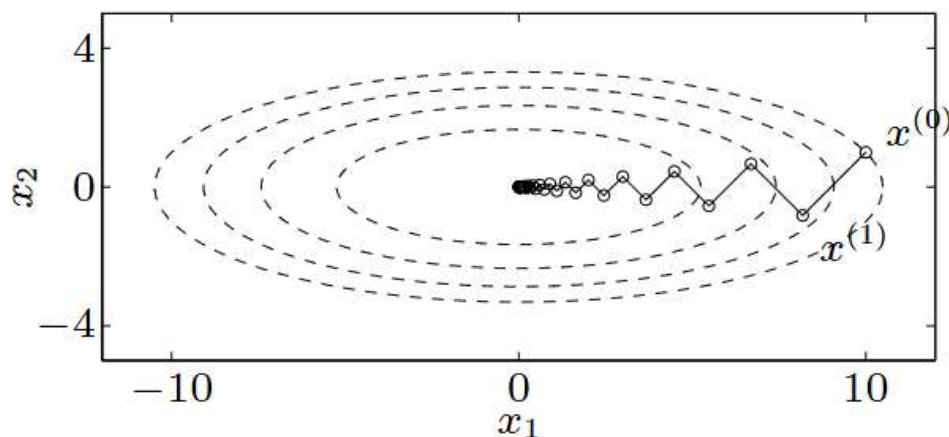
$$f(x) = (1/2)(x_1^2 + \gamma x_2^2) \quad (\gamma > 0)$$

使用精确直线搜索,从 $x^{(0)} = (\gamma, 1)$ 开始:

$$x_1^{(k)} = \gamma \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right)^k, \quad x_2^{(k)} = \left(-\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right)^k$$

如果 $\gamma \gg 1$ 或 $\gamma \ll 1$, 则非常慢

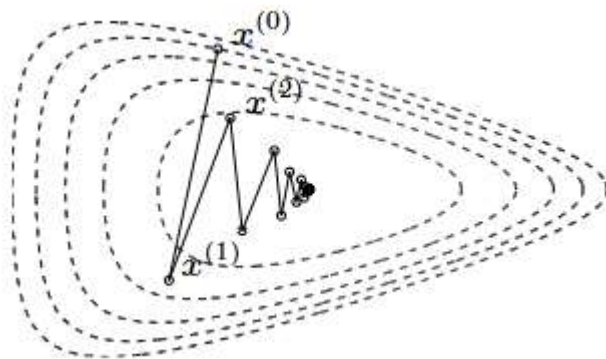
$\gamma = 10$ 的示例:



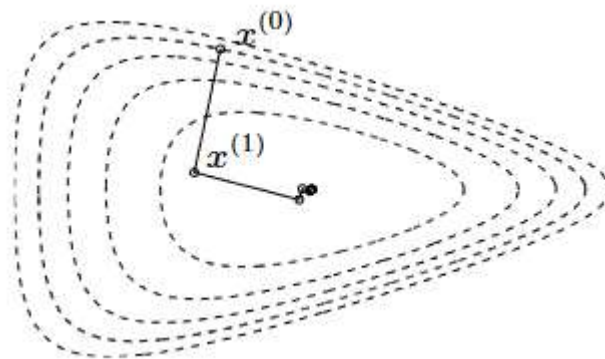
1 无约束优化算法

□ 非二次示例

$$f(x_1, x_2) = e^{x_1+3x_2-0.1} + e^{x_1-3x_2-0.1} + e^{-x_1-0.1}$$



回溯线搜索



精确线搜索

搜索类型严重影响算法收敛速度！

1 无约束优化算法

- 规范化最速下降方向 (在 x 处, 对于范数 $\|\cdot\|$):

$$\Delta x_{\text{nsd}} = \arg \min \{ \nabla f(x)^T v \mid \|v\| = 1 \}$$

解释: 对于小的 v , $f(x + v) \approx f(x) + \nabla f(x)^T v$

方向 Δx 是具有最负方向导数的单位范数步长

- (未归一化) 最速下降方向:

$$\Delta x_{\text{sd}} = \|\nabla f(x)^T\|_* \Delta x_{\text{nsd}}$$

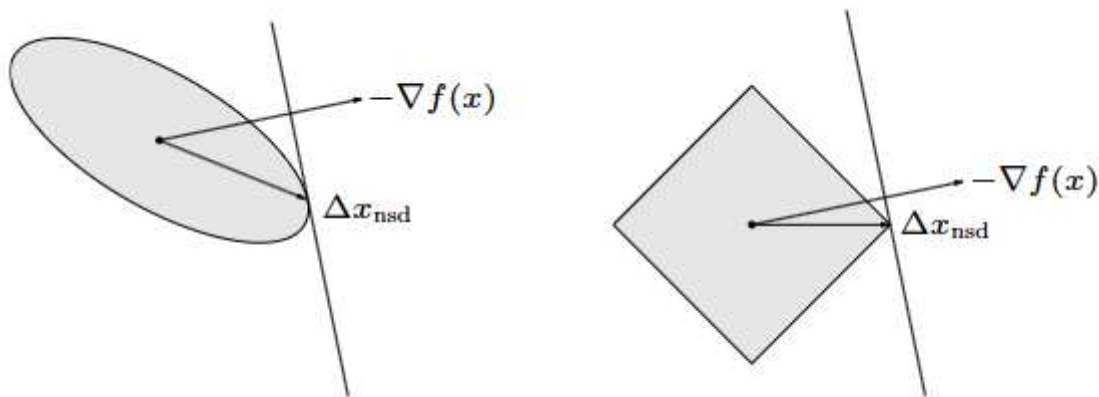
满足 $\nabla f(x)^T \Delta x_{\text{sd}} = -\|\nabla f(x)^T\|_*^2$

1 无约束优化算法

■ 例 1:

1. 欧几里得范数: $\Delta x = -\nabla f(x)$
2. 二次范数: $\|x\|_P = (x^T P x)^{1/2}$ ($P \in S_{++}^n$): $\Delta x_{\text{sd}} = -P^{-1} \nabla f(x)$
3. l_1 -范数: $\Delta x_{\text{sd}} = -\left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_i}\right) e_i$, 其中 $\left|\frac{\partial f(x)}{\partial x_i}\right| = \|\nabla f(x)\|_\infty$

□ 二次范数和 l_1 -范数的单位球与归一化最速下降方向:

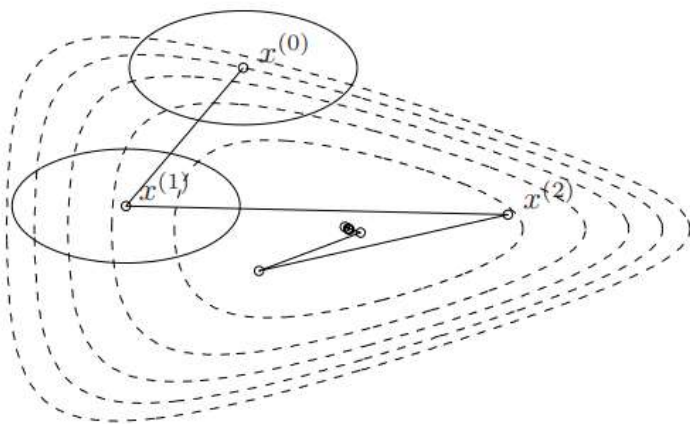


1 无约束优化算法

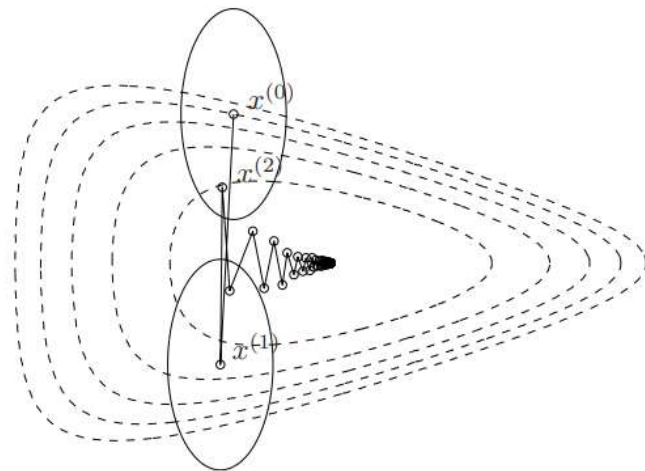
□ 非二次示例 ($\alpha = 0.1, \beta = 0.7$)

$$f(x_1, x_2) = e^{x_1+3x_2-0.1} + e^{x_1-3x_2-0.1} + e^{-x_1-0.1}$$

应用二次范数: $P_1 = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 8 \end{bmatrix}, P_2 = \begin{bmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$



采用二次范数 $\|\cdot\|_{P_1}$ 的最速下降法.
椭圆表示球体 $\{x \mid \|x - x^{(k)}\|_{P_1} \leq 1\}$
在 $x^{(0)}$ 和 $x^{(1)}$ 处的边界



采用二次范数 $\|\cdot\|_{P_2}$ 的最速下降法.
椭圆表示球体 $\{x \mid \|x - x^{(k)}\|_{P_2} \leq 1\}$
在 $x^{(0)}$ 和 $x^{(1)}$ 处的边界

1 无约束优化算法

■ 牛顿法

牛顿步径: $\Delta x_{\text{nt}} = -\nabla^2 f(x)^{-1} \nabla f(x)$

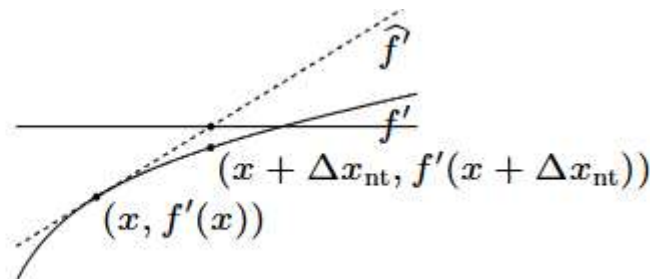
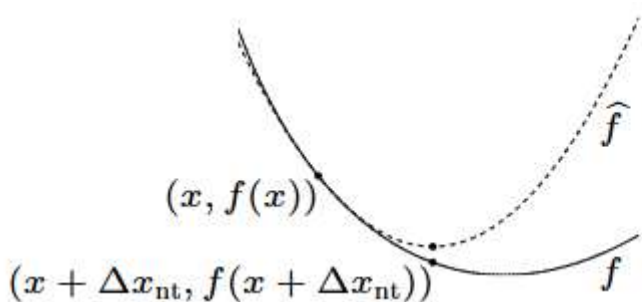
□ 解释

1. $x + \Delta x_{\text{nt}}$ 最大限度地减少二阶近似

$$\hat{f}(x + v) = f(x) + \nabla f(x)^T v + \frac{1}{2} v^T \nabla^2 f(x) v$$

2. $x + \Delta x_{\text{nt}}$ 极小化二阶近似

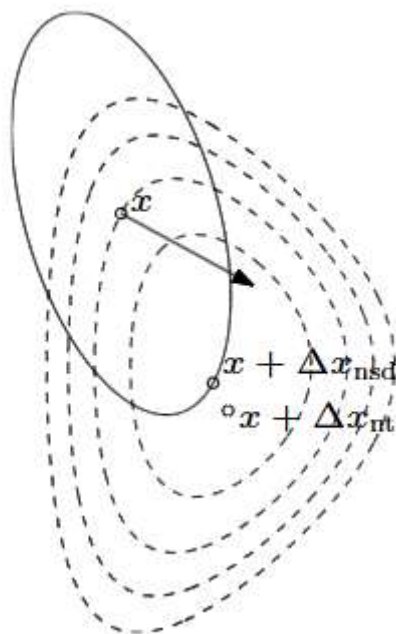
$$\nabla f(x + v) \approx \nabla \hat{f}(x + v) = \nabla f(x) + \nabla^2 f(x) v = 0$$



1 无约束优化算法

Δx_{nt} 是 x 处沿局部 Hessian 范数的最速下降方向

$$\|u\|_{\nabla^2 f(x)} = (u^T \nabla^2 f(x) u)^{1/2}$$



虚线是函数 f 的等高线; 椭圆是 $\{x + v \mid v^T \nabla^2 f(x) v = 1\}$

大 纲

1. 无约束优化算法

1.1. 下降法

1.2. 牛顿法

2. 等式约束优化算法

2 等式约束优化算法*

$$\begin{array}{ll} \text{最大化} & f(x) \\ \text{约束条件} & Ax = b \end{array}$$

1. f 凸, 两次连续可微 (因此 $\mathbf{dom} f$ 是开集)
2. $A \in \mathbb{R}^{p \times n}$, $\mathbf{rank} A = p < n$
3. 我们假设存在一个最优解 x^* 最优值, 并用 $p^* = \inf_x \{f(x) \mid Ax = b\} = f(x^*)$

由凸优化问题的最有条件与凸问题KKT条件知: $x^* \in \mathbf{dom} f$ 是上述优化问题的最优解的充要条件是, 存在 $v^* \in \mathbb{R}^p$ 满足

$$Ax^* = b, \quad \nabla f(x^*) + A^T v^* = 0$$

第一组方程称为**原可行方程**, 第二组方程称为**对偶可行方程**

2 等式约束优化算法*

■ 方法一：消除等式约束

我们首先确定矩阵 $F \in \mathbb{R}^{n \times (n-p)}$ 和向量 $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$, 以参数化可行集

$$\{x \mid Ax = b\} = \{Fz + \hat{x} \mid z \in \mathbb{R}^{(n-p)}\}$$

这里 \hat{x} 可以选用 $Ax = b$ 的任何特殊解, 矩阵 F 满足 $\mathcal{R}(F) = \mathcal{N}(A)$, 其中 $\mathcal{R}(F) = \{Fz \mid z \in \mathbb{R}^{(n-p)}\}$, $\mathcal{N}(A) = \{x \mid Ax = 0\}$, 分别称为 F 的**值域(像)**和 A 的**零空间(核)**、

消除等式约束后的优化问题为

$$\text{最小化} \quad \tilde{f}(z) = f(Fz + \hat{x})$$

利用它的解 z^* 可以求得等式约束问题的解 $x^* = Fz^* + \hat{x}$

- **关于 F 的选择(仿射不变性)**: 矩阵 F 满足 $\mathcal{R}(F) = \mathcal{N}(A)$, 并且 $T \in \mathbb{R}^{(n-p) \times (n-p)}$ 是非奇异的, 则 $\tilde{F} = FT$ 也是合适的, 即对 z 做坐标变换 $z' = Tz$

2 等式约束优化算法*

■ 方法二：用对偶方法求解

优化问题的对偶函数为

$$g(v) = -b^T v + \inf_x (f(x) + v^T Ax) = -b^T v - f^*(-A^T v)$$

这里 f^* 是 f 的共轭, 因此对偶问题为

$$\text{最大化} \quad -b^T v - f^*(-A^T v)$$

既然根据定义存在最优解, 该问题是严格可行的, 因此 Slater 条件成立, 即强对偶性成立, 即存在 v^* 满足 $g(v^*) = p^*$

2 等式约束优化算法*

■ 等式约束的牛顿法

为了导出等式约束问题在可行点 x 处的 Newton 方向 Δx_{nt} , 我们将目标函数换成其在 x 附件的二阶 Taylor 近似

$$\text{最小化} \quad \hat{f}(x + v) = f(x) + \nabla f(x)^T v + (1/2)v^T \nabla^2 f(x)v$$

$$\text{约束条件} \quad A(x + v) = b$$

该问题的变量为 v . 由原可行方程和对偶可行方程得, Newton 方向 Δx_{nt} 由以下方程决定

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_{nt} \\ \omega \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla f(x) \\ 0 \end{bmatrix}$$

其中 ω 是该二次问题的最优对偶变量, Newton方向 Δx_{nt} 只在矩阵 $\begin{bmatrix} \nabla^2 f(x) & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix}$ 非奇异的点有定义.

2 等式约束优化算法*

■ 等式约束的牛顿法

我们将等式约束的 Newton 减量定义为

$$\lambda(x) = (\Delta x_{nt}^T \nabla^2 f(x) \Delta x_{nt})^{1/2}$$

这和之前的无约束条件 Newton 法完全一样, 我们可以进行同样的解释. 我们可以设计出算法:

等式约束优化的 Newton 方法

给定 满足 $Ax = b$ 的初始点 $x \in \mathbf{dom} f$, 误差阈值 $\epsilon > 0$

重复进行

1. 计算 Newton 方向和 Newton 减量 $\Delta x_{nt}, \lambda(x)$
 2. 停止准则. 如果 $\lambda^2/2 \leq \epsilon$ 则退出
 3. 直线搜索. 通过回溯直线搜索确定步长 t
 4. 修改. $x := x + t\Delta x_{nt}$
-

谢谢！