Report

一. 基于Wolfe条件的线搜索算法

- 算法设计思路: Wolfe条件有两个子条件：Armijo condition和 curvature condition，因此我们的算法也根据这两个条件分布设计。这个算法分为两步
  - 设置一个步长α可以取到的最大值α_{max}. 并在$(0, \alpha_{max})$中选取一个α_1作为初值（代码实现中设置为1）。使得α_1不断增加，直到满足以下两种情况之一
    - α同时满足Armijo条件与curvature条件（即满足Wolfe条件）
    - 满足Wolfe条件的α被包含在一个区间内
  - 如果是第一种情况，则直接输出；如果是第二种情况，则通过调用**zoom**函数来不断减小区间长度直到找到一个满足Wolfe条件的α值
- Pseudocode

Algorithm 3.5 (Line Search Algorithm).

Set $\alpha_0 \leftarrow 0$, choose $\alpha_{\max} > 0$ and $\alpha_1 \in (0, \alpha_{\max})$;
$i \leftarrow 1$;
repeat
  Evaluate $\phi(\alpha_i)$;
  if $\phi(\alpha_i) > \phi(0) + c_1\alpha_i\phi'(0)$ or $[\phi(\alpha_i) \geq \phi(\alpha_{i-1})$ and $i > 1]$
    $\alpha_* \leftarrow$**zoom**(α_{i-1}, α_i) and **stop**;
  Evaluate $\phi'(\alpha_i)$;
  if $|\phi'(\alpha_i)| \leq -c_2\phi'(0)$
    set $\alpha_* \leftarrow \alpha_i$ and **stop**;
  if $\phi'(\alpha_i) \geq 0$
    set $\alpha_* \leftarrow$**zoom**(α_i, α_{i-1}) and **stop**;
  Choose $\alpha_{i+1} \in (\alpha_i, \alpha_{\max})$;
  $i \leftarrow i + 1$;
end (**repeat**)

Algorithm 3.6 (zoom).

repeat
  Interpolate (using quadratic, cubic, or bisection) to find
    a trial step length α_j between $\alpha_{\rm lo}$ and $\alpha_{\rm hi}$;
  Evaluate $\phi(\alpha_j)$;
  if $\phi(\alpha_j) > \phi(0) + c_1\alpha_j\phi'(0)$ or $\phi(\alpha_j) \geq \phi(\alpha_{\rm lo})$
    $\alpha_{\rm hi} \leftarrow \alpha_j$;
  else
    Evaluate $\phi'(\alpha_j)$;
    if $|\phi'(\alpha_j)| \leq -c_2\phi'(0)$
      Set $\alpha_* \leftarrow \alpha_j$ and **stop**;
    if $\phi'(\alpha_j)(\alpha_{\rm hi} - \alpha_{\rm lo}) \geq 0$
      $\alpha_{\rm hi} \leftarrow \alpha_{\rm lo}$;
    $\alpha_{\rm lo} \leftarrow \alpha_j$;
end (**repeat**)

- Source Code
    - LineSearch.m：用于寻找合适的步长
        - 评价当前步长，判断是否满足Armijo条件和下降条件，如果不满足说明最优解在之间，调用zoom算法找到合适的α，结束。
        - 否则验证Curvature条件是否满足，如果满足则结束。
        - 如果不满足Curvature条件，并且当前梯度为正值时，与上一个步长构成区间调用zoom算法找到合适的α 结束。
        - 迭代求解下一个步长点

```
function alpha = LineSearch(x, p, method)
% The line search algorithm based on strong Wolfe condition
%
% OUTPUTS:
% alpha: the step length fits the strong Wolfe condition
%
% INPUTS:
% x: an n-d column vector(the current point)
% p: the step direction

    c1 = 1e-4;
    if strcmp(method, 'Newton')
        c2 = 1;
    else
        c2 = 0.1;

     alpha_MAX = 100;
     alpha = 1;
     alpha_0 = 0;
     alpha_1 = alpha;

     f0 = Rosenbrock(x);

     fx = f0;
     iter = 1;

     while (1)

         xc = x + alpha_1 * p;
         f = Rosenbrock(xc);


         if ((f > f0 + c1 * alpha_1 * dfunc(x)' * p) || ((f >= fx)&&(iter > 1)))
            alpha = myZoom(x, p, dfunc(x)' * p, alpha_0, alpha_1, f0, fx, c1, c2);
            break;
         end

         if (abs(dfunc(xc)' * p) <= -c2 * dfunc(x)' * p )
             alpha = alpha_1;
             break;
         end

         if (dfunc(xc)' * p >= 0)
```

```
            alpha = myZoom(x, p, dfunc(x)' * p, alpha_1, alpha_0, f0, f, c1, c2);
            break;
        end

        alpha_0 = alpha_1;
        alpha_1 = min(alpha_MAX, alpha_1 * 2);
        fx = f;
    end
end
```

- myZoom
    - 判断是否满足Armijo条件，如果不满足缩减区间。
    - 否则，判断是否满足Curvature条件， 如果满足则返回
    - 判断是否是递增区间，如果是则进行调整，使其满足zoom输入条件。

```
function alpha = myZoom(x, p, slope_0, alpha_lo, alpha_hi, f0, fx, c1, c2)
% the zoom function
%
% OUTPUT:
% alpha: the step length got by successively decreasing the size of the interval
% until an acceptable step length is identified.
%
% INPUTS:
% x: an n-d column vector(the current point)
% p: the step direction
% slope_0: gradient of function at x in direction p
% alpha_lo: the lower bound for alpha
% alpha_hi: the uppper bound for alpha
% f0: the function value at x
% fx: the function value at last point
% c1: the parameter in the Armijo condition
% c2: the parameter in the curvature condition

    while (1)
        alpha = alpha_lo + (alpha_hi - alpha_lo) / 2;
        xc = x + alpha * p;
        f = Rosenbrock(xc);

        if (f > f0 + c1 * alpha * slope_0 || f > fx)
            alpha_hi = alpha;
        else
            slope_c = dfunc(xc)' * p;
            if (abs(slope_c) <= -c2 * slope_0)
                return;
            end
            if (slope_c * (alpha_hi - alpha_lo) >= 0)
                alpha_hi = alpha_lo;
                alpha_lo = alpha;
                fx = f;
            end
        end
    end
```

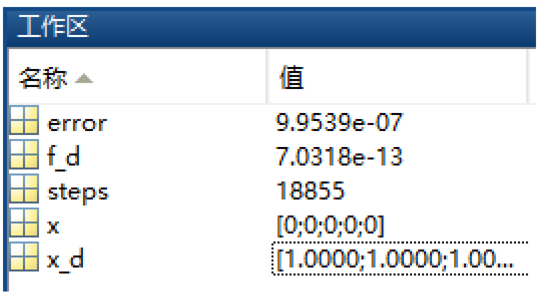
```
end
```

1. 最速下降法

- Source code

```matlab
function [x_d, f_d, error, steps] = Steepest_descend(x, MAX_IT, tol)

    error = 1.0;
    steps = 0;
    convergent = 1;
    alpha = 1;
    x_d = x;

    while (error > tol)
        f_d = Rosenbrock(x_d);
        g = dfunc(x_d);
        p = -g;

        alpha = LineSearch(x_d, p, 'Steepest_descend');

        x_d = x_d + alpha * p;
        steps = steps + 1;
        error = norm(g);

        if (steps > MAX_IT)
            convergent = 0;
            steps = -1;
            break;
        end
    end
end
```

- 计算结果
  - 初始坐标 `x=[0,0,0,0,0]';`
    - 输入 `[x_d, f_d, error, steps] = Steepest_descend(x, 1e10, 1e-6);`
    - 输出



工作区

名称	值
error	9.9539e-07
f_d	7.0318e-13
steps	18855
x	[0;0;0;0;0]
x_d	[1.0000;1.0000;1.00...

      - 迭代次数 `steps`: 18855
      - 最小值点 `x_d`: $[1.000, 1.000, 1.000, 1.000, 1.000]^T$
      - 最小值点函数值 `f_d`: 7.0318×10^{-13}
      - 误差 `error`: 9.9539×10^{-7}
  - 初始坐标 `x=[1,-1,1,-1,1,-1]';`
    - 输入 `[x_d, f_d, error, steps] = Steepest_descend(x, 1e10, 1e-6);`

- 输出

error	9.9949e-07
f_d	1.0022e-12
steps	22854
x	[1;-1;1;-1;1;-1]
x_d	[1.0000;1.0000;1.00...

  - 迭代次数`steps`：22854
  - 最小值点`x_d`：$[1.000, 1.000, 1.000, 1.000, 1.000, 1.000]^T$
  - 最小值点函数值`f_d`：1.0022×10^{-12}
  - 误差`error`：9.9949×10^{-7}

2. Newton法

- Source code

```
function [x_d, f_d, error, steps] = Newton(x, MAX_ITER, tol)
% Newton method
% OUTPUTS:
% x_d: the search result;
% f_d: the value at the result point;
%error: the difference between the search result and the minimizer;
% steps: the interation times.
% INPUTS:
% x: an n-d column vector;
% MAX_ITER: the maximum iteration;
% tol: the allowed tolerance

    error = 1.0;
    steps = 0;
    convergent = 1;
    alpha = 1;
    x_d = x;

    while (error > tol)
        f_d = Rosenbrock(x_d);
        g = dfunc(x_d);
        G = d2func(x_d);

        p = -G\g;

        alpha = LineSearch(x_d, p, 'Newton');

        x_d = x_d + alpha * p;

        steps =  steps + 1;
        error = norm(g);

        if(steps > MAX_ITER)
            invergent = 0;
            steps = -1;
            break;
        end

    end
end
```

- 计算结果
  - 初始坐标`x = [0,0,0,0,0]';`
    - 输入`[x_d, f_d, error, steps] = Newton(x, 1e10, 1e-6);`
    - 输出

名称 ▲	值
error	1.4522e-08
f_d	1.3857e-19
steps	11
x	[0;0;0;0;0]
x_d	[1;1;1;1;1]

      - 迭代次数`steps`：11
      - 最小值点`x_d`：$[1, 1, 1, 1, 1, 1]^T$
      - 最小值点函数值`f_d`：1.3857×10^{-19}
      - 误差`error`：1.4522×10^{-8}
  - 初始坐标`x = [2,-2,2,-2,2,-2]';`
    - 输入`[x_d, f_d, error, steps] = Newton(x, 1e10, 1e-6);`
    - 输出

名称 ▲	值
error	2.7474e-08
f_d	4.2025e-16
steps	19
x	[2;-2;2;-2;2;-2]
x_d	[1;1;1;1.0000;1.0000...

      - 迭代次数`steps`：19
      - 最小值点`x_d`：$[1, 1, 1, 1.000, 1.000, 1.000]^T$
      - 最小值点函数值`f_d`：4.2025×10^{-18}
      - 误差`error`：2.7474×10^{-8}
  - 当初始坐标离全局最小值点较远时，寻找次数会很多，找最小值点较慢
    - 输入`x=[10,-10,10,-10,10]';`
    - 输出

名称 ▲	值
error	3.0581e-12
f_d	1.4125e-24
steps	98
x	[10;-10;10;-10;10]
x_d	[1;1;1;1;1]

    - 迭代次数`step`：98

二. 基于单位增量的修正线搜索Newton法

- 算法思路：

  因为当x距离最小值点较远时，$\nabla^2 f(x_k)$不能保证充分正定，使得通过$\nabla^2 f(x_k) \cdot p = \nabla f(x_k)$解得的方向向$p$不一定充分下降。因此我们可以通过寻找一个常量$\tau > 0$，使得$\nabla^2 f(x_k) + \tau I$充分正定，让它来代替$\nabla^2 f(x_k)$计算下降方向。

先设置一个τ的初值，如果$\nabla^2 f(x_k)$主对角线上的最小值为正，则$\tau_0 = 0$，否则$\tau_0 = -min(a_{ii}) + \beta$（其中$\beta$是一个正常量，这样可以保证$\tau_0 > 0$）之后通过循环不断增大$\tau$的值，直到能对$\nabla^2 f(x_k) + \tau_k I$进行完全的Cholesky分解。

这样，我们就找到了一个合适的相对较小的τ. 算法的伪代码如下：

Algorithm 3.3 (Cholesky with Added Multiple of the Identity).

Choose $\beta > 0$;
if $\min_i a_{ii} > 0$
  set $\tau_0 \leftarrow 0$;
else
  $\tau_0 = -\min(a_{ii}) + \beta$;
end (if)
for $k = 0, 1, 2, \ldots$
  Attempt to apply the Cholesky algorithm to obtain $LL^T = A + \tau_k I$;
  if the factorization is completed successfully
    stop and return L;
  else
    $\tau_{k+1} \leftarrow \max(2\tau_k, \beta)$;
  end (if)
end (for)

在代码实现时(Cholesky.m)，我在对矩阵进行Cholesky分解时对无法正常分解的情况输出了零矩阵，方便主函数进行判断

- Source Code
  - 代码分为两部分：modified_Newton.m和Cholesky.m
  - Cholesky.m
    - 对矩阵进行Cholesky分解($LL^T = M$)，若分解完全则输出分解得到的矩阵L；否则输出零矩阵

```
function L = Cholesky(M)
% M: n*n spd. matrix
% L: the Cholesky factorization matrix

    n = length(M);
    L = zeros(n, n);
    for i = 1 : n
        if (M(i, i) - L(i, :) * L(i, :)') < 0
            L = zeros(n, n);
            break;
        else
            L(i, i) = sqrt(M(i, i) - L(i, :) * L(i, :)');
        end
        for j = (i + 1) : n
            L(j, i) = (M(j, i) - L(i, :) * L(j, :)') / L(i, i);
        end
    end
end
```

  - modified_Newton.m

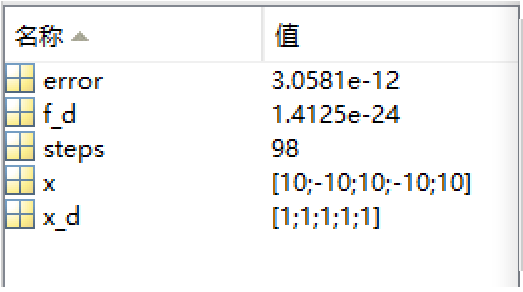
- 与传统Newton法不同之处就在于计算下降方向p时对不一定正定的$\nabla^2 f(x_k)$做了修正，使之一定充分正定。

```
function [x_d, f_d, error, steps] = modified_Newton(x, MAX_ITER, tol)
% Newton method
% OUTPUTS:
% x_d: the search result;
% f_d: the value at the result point;
%error: the difference between the search result and the minimizer;
% steps: the interation times.
% INPUTS:
% x: an n-d column vector;
% MAX_ITER: the maximum iteration;
% tol: the allowed tolerance

    error = 1.0;
    steps = 0;
    convergent = 1;
    alpha = 1;
    x_d = x;
    beta = 1e-3;
    tau = 0;


    while (error > tol)
        f_d = Rosenbrock(x_d);
        g = dfunc(x_d);
        G = d2func(x_d);

 %       p = -G\g;
        min_aii = min(diag(G));
        n = length(G);
        L = zeros(n, n);

        if  min_aii > 0
            tau = 0;
        else tau = -min_aii + beta;
        end

        while 1
            L = Cholesky(G + tau * eye(n));
            if L == zeros(n)
                tau = max(2 * tau, beta);
            else
                break;
            end
        end

        p = -(L * L')\g;

        x_d = x_d + alpha * p;

        steps =  steps + 1;
        error = norm(g);

        if(steps > MAX_ITER)
            invergent = 0;
```

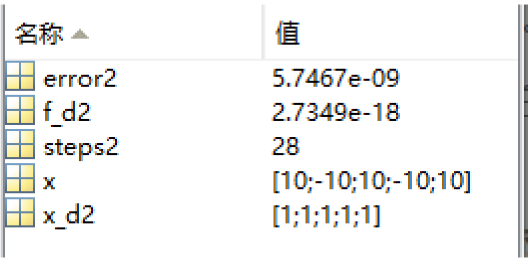
```
            steps = -1;
            break;
        end

    end
end
```

- 初值依赖性

  传统牛顿法对初值依赖性较高，当处理远离最小值点时迭代次数会显著增加，且不一定能收敛到最小值点上。而修正后的牛顿法则对初值依赖性较低，与之前传统牛顿法同样输入`x=[10,-10,10,-10,10]'`，传统牛顿法用了98次迭代，而修正后的牛顿法只用了28次迭代就找到了最小值点。



名称	值
error	3.0581e-12
f_d	1.4125e-24
steps	98
x	[10;-10;10;-10;10]
x_d	[1;1;1;1;1]



名称	值
error2	5.7467e-09
f_d2	2.7349e-18
steps2	28
x	[10;-10;10;-10;10]
x_d2	[1;1;1;1;1]

传统牛顿法　　　　　　　　修正后的牛顿法

- 实际收敛阶

  基于单位增量的修正线搜索牛顿法与拟牛顿法相似，都是用一个充分正定的矩阵代替$\nabla^2 f(x_k)$来计算下降方向。基于单位增量的修正牛顿法用$\nabla^2 f(x_k)+\tau I$来替代海森阵。

  $$\text{因为} lim_{k\to\infty}\frac{||((\nabla^2 f(x_k)+\tau I)-\nabla^2 f(x^*))p_k||}{||p_k||}=0$$

  由线搜索拟牛顿法超线性收敛的充要性知，基于单位增量的修正牛顿法也是超线性收敛。