数值优化（Numerical Optimization）学习系列-线搜索方法（LineSearch）

概述

在求解最优化问题中，线搜索是一类非常重要的迭代算法。线搜索的迭代过程是$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$。其中$\alpha_k$和$p_k$分别表示搜索步长和搜索方向，因此线搜索需要解决如何求解步长和确定搜索方向，该小结主要介绍
1. 步长α_k的选择
2. 步长的实现算法
2. 线搜索的收敛性
3. 牛顿方法的优化

步长α的选择

根据迭代算法$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$，根据之前的介绍搜索方向$p_k$需要满足，它是一个下降方向，即满足$\nabla f_k p_k \le 0$，则$p_k = -B_k^{-1} \nabla f_k$，B为对称非奇异矩阵，根据$B_k$的选择会产生以下几个方向:
1. $B_k = \mathbf{I}$时，搜索方向为负梯度方向，该方法为最速下降方向。
2. $B_k = \nabla^2 f_k$时，该方法为牛顿方法。
3. B_k需要满足对称正定矩阵，该方法为拟牛顿方法。
当搜索方向确定后，下一步就要确定步长。

问题形式

求解步长需要解决的一个最优化问题是，在确定了下降方向p_k后，求解一个一元最优化问题

$$min \phi(\alpha) = f(x_k + \alpha p_k)$$

.

精确算法

对于一个一元二次问题，最优解形式为$\nabla^T f(x_k + \alpha p_k) p_k = 0$，即$\nabla^T f_{k+1} p_k = 0$

> 性质：对于最速下降法，当选择最优步长时，每一步的搜索方向和上一步是正交的，即$p_{k+1}^T p_k = 0$

证明：由于当选择为最优步长时满足$\nabla^T f_{k+1} p_k = 0$。因此性质成立，$p_{k+1} = -\nabla f_{k+1}^T$

非精确算法

非精确算法的思路就是寻找步长α的一个区间，通过逐步二分的方法去寻找满足条件的点。当搜索结束时，需要满足该步长能够对目标函数带来充分的减少。为提高非精确算法的搜索效率，α需要满足一定的条件。

Armijo条件

Armijo是一个相对比较简单的条件，即目标函数需要充分小。

$$f(x_k + \alpha p_k) \le f(x_k) + c_1 \alpha \nabla f_k^T p_k, \quad c_1 \in (0,1)$$

通常情况下记：

$$\phi(\alpha) = f(x_k + \alpha p_k)$$

表示原始最优化目标函数。

$$l(\alpha) = f(x_k) + c_1 \alpha \nabla f_k^T p_k$$

表示退化后的目标函数。
在实际应用中， c_1 选择为10^-4，满足Armijo条件的情况如下图所示

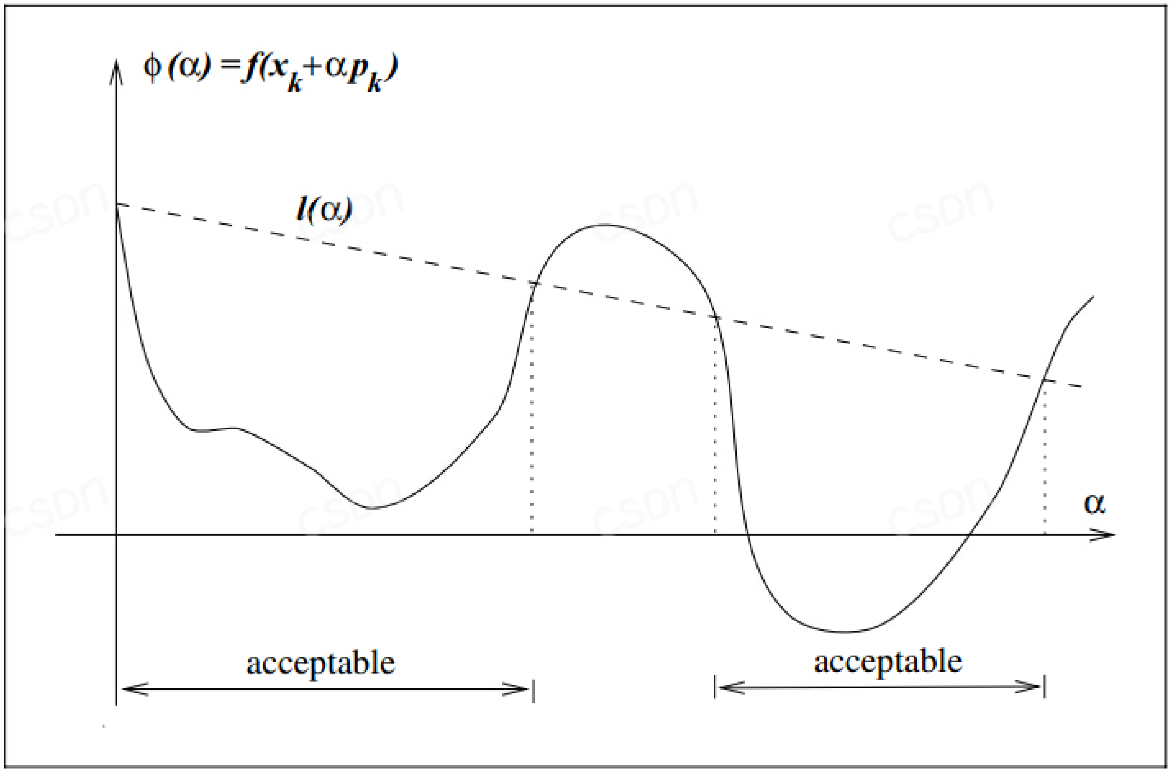


Figure 3.3 Sufficient decrease condition.

Curvature条件

Curvature条件是指:

$$\nabla f(x_k + \alpha_k p_k)^T p_k \geq c_2 \nabla f_k^T p_k, \quad c_2 \in (c_1, 1)$$

其中c1就是Armijo中的c1.

Curvature条件中的左边就是 $\phi'(\alpha_k)$，而右边是 $\phi'(0)$，或者 $l'(\alpha)$，即在第K点的曲率要比初始点的曲率要大。由于右边是负值，则左边就是一个接近0或者大于0的一个值。

直观上看，如果该值接近0时，曲率接近水平，这样就接近最优解。图示如下

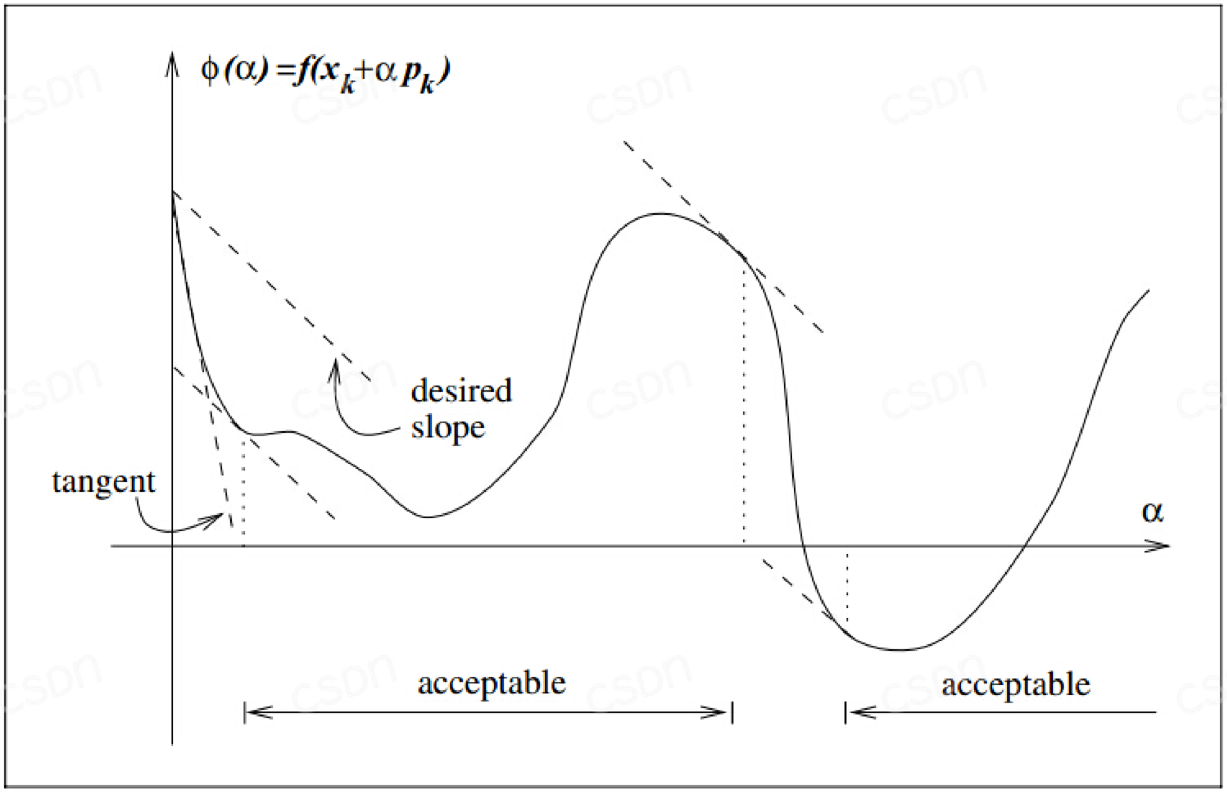


Figure 3.4 The curvature condition.

Wolfe条件

把上面两个条件组合后就是Wolfe条件，即需要满足

$$
\begin{gathered}
f(x_k+\alpha p_k) \le f(x_k) + c_1 \alpha \nabla f_k^T p_k \\
\nabla f(x_k+\alpha_k p_k)^T p_k \ge c_2 \nabla f_k^T p_k \\
0 < c_1 < c_2 < 1
\end{gathered}
$$

如果进一步进行约束， **强Wolfe条件**需要满足

$$f(x_k+\alpha p_k) \le f(x_k) + c_1 \alpha \nabla f_k^T p_k$$
$$|\nabla f(x_k+\alpha_k p_k)^T p_k| \le c_2 |\nabla f_k^T p_k|$$
$$0 < c_1 < c_2 < 1$$

强Wolfe条件对正负曲率都进行了约束，条件更强。

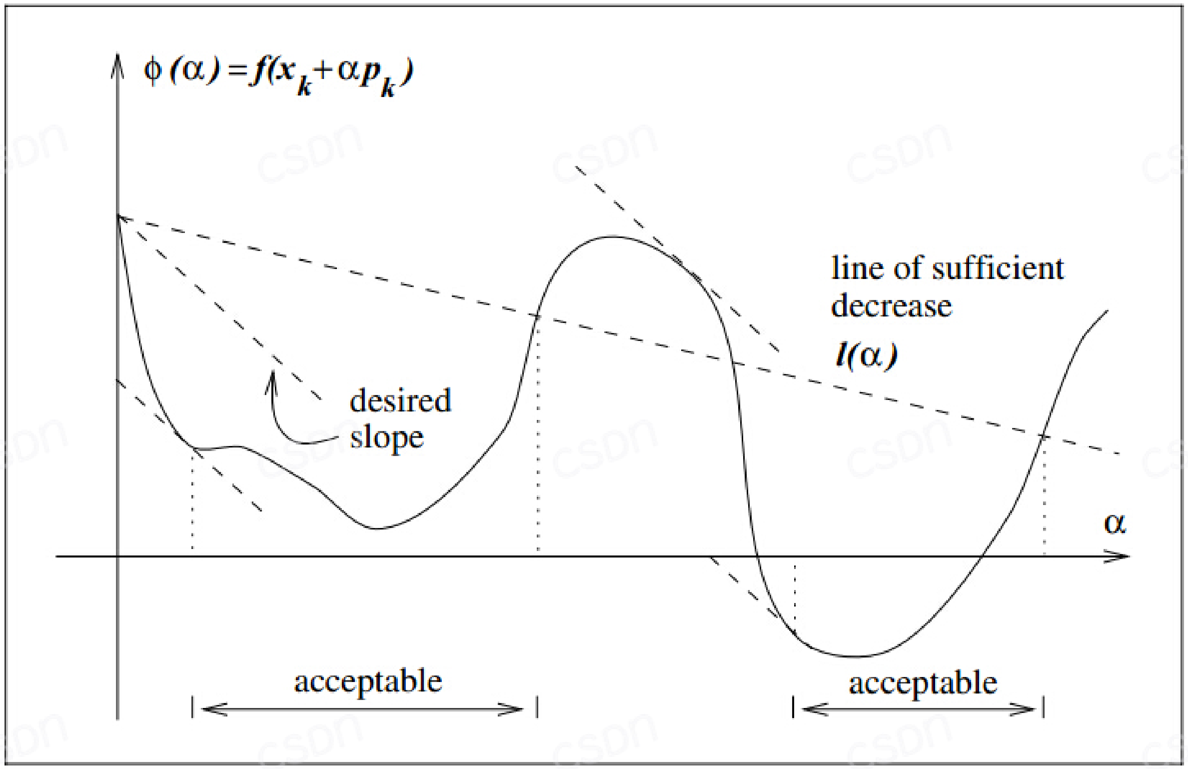
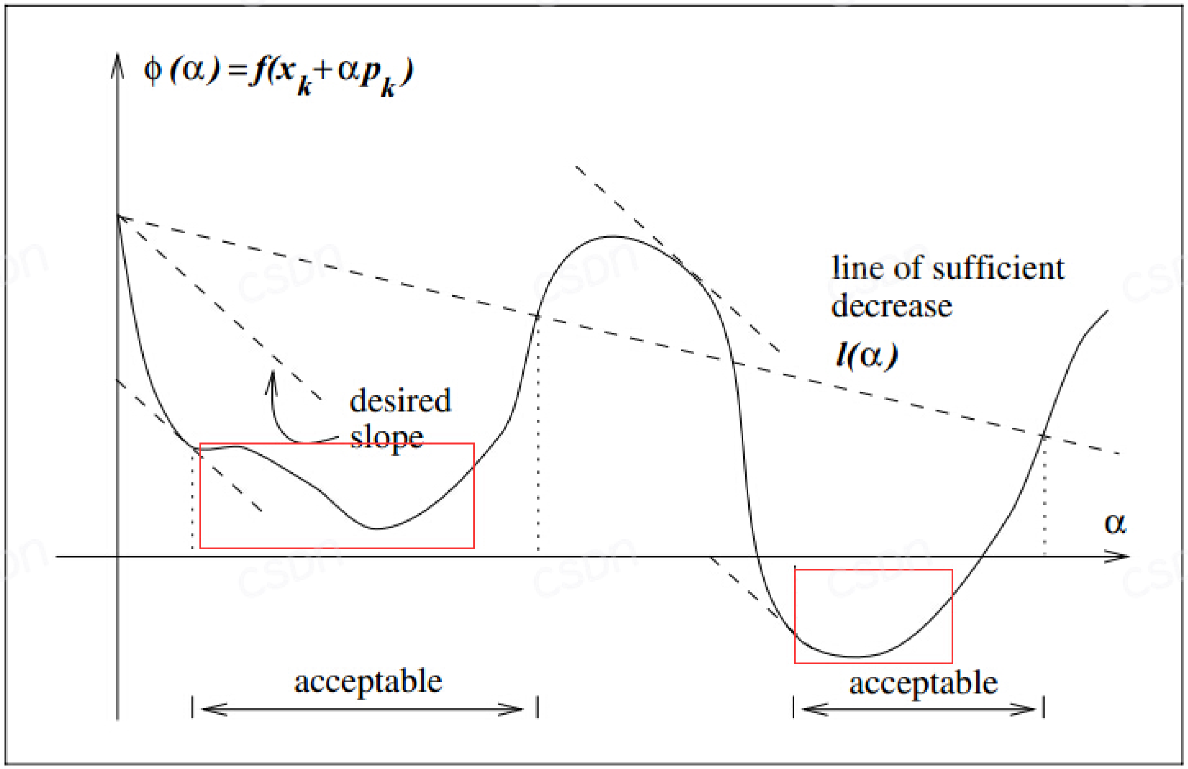


Figure 3.5 Step lengths satisfying the Wolfe conditions.

满足Wolfe条件的区间如下图



满足强Wolfe条件的区间如下图

Wolfe条件存在性证明

> 定理:假设目标函数f是一个连续可导的，并且搜索方向p_k为下降方向，同时函数f是有界的，在射线$x_k+\alpha p_k$之下，则如果$0<c_1<c_2<1$，存在步长α满足Wolfe条件和强Wolfe条件。

证明：由于f在被限定在射线$x_k+\alpha p_k$之下，则函数$\phi(\alpha)=f(x_k+\alpha p_k)$和函数$l(\alpha)=f_k+\alpha c_1\nabla f_k^T p_k$存在交点。
1. 记最小的交点为α'，则小于α'的区间都满足Wolfe的第一个条件。交点满足

$$f(x_k+\alpha')=f(x_k)+\alpha' c_1\nabla f_k^T p_k$$

2. 随机选择 $\alpha''\in(0,\alpha')$，根据中值定理有

$$f(x_k+\alpha')-f(x_k)=\alpha'\nabla f(x_k+\alpha'' p_k)^T p_k$$

3. 根据上面两个等式有

$$c_1 \nabla f_k^T p_k = \nabla f(x_k + \alpha'' p_k)^T p_k \le c_2 \nabla f_k^T p_k$$

此时 α'' 满足Wolfe的第二个条件

Goldstein条件

该条件类似于Wolfe条件，但是需要步长减少的不能太少。该条件为

$$f_k + (1-c)\alpha_k \nabla f_k^T p_k \le f(x_k + \alpha_k p_k) \neq f_k + (c)\alpha_k \nabla f_k^T p_k$$

参数 $c \in (0, 0.5)$
满足该条件的步长被两个射线包围着，使用该方法可能会错过最优解，图示如下

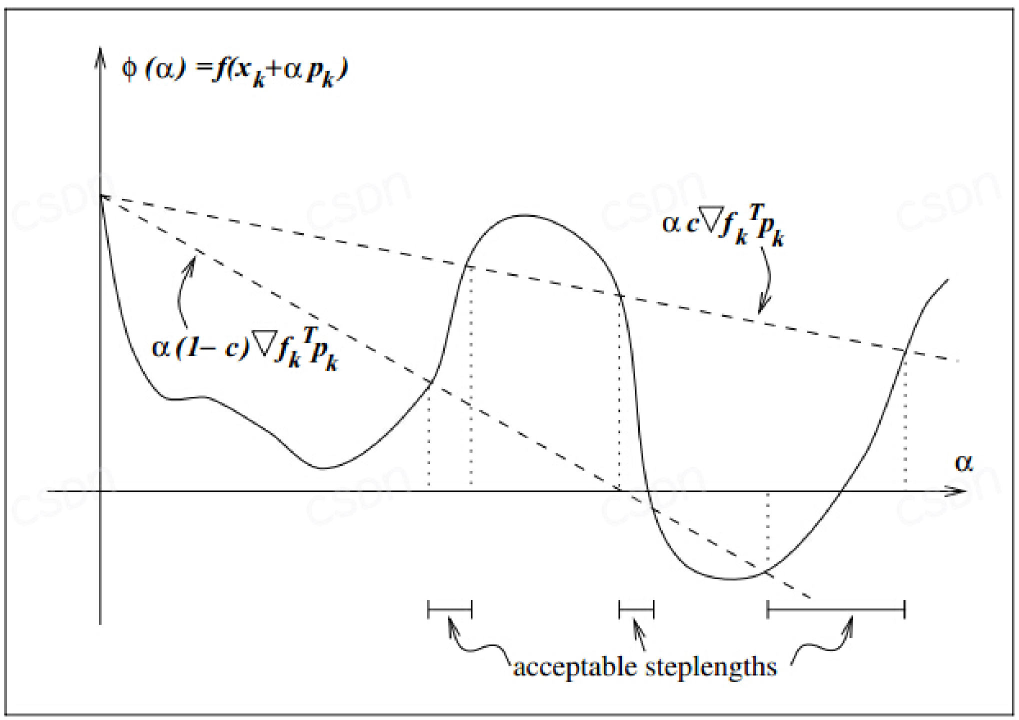


Figure 3.6 The Goldstein conditions.

步长α求解算法

根据上面的介绍，我们可以知道求解步长，需要解决的问题是

$$\alpha_k = arg\,min\phi(\alpha) = arg\,min f(x_k + \alpha p_k)$$

分两类问题进行讨论：

1. 如果目标函数是凸函数，并且 $f(x) = \frac{1}{2}x^TQx - b^Tx$，则步长的最优解为 $\alpha = -\frac{\nabla f_k^T p_k}{p_k^T Q p_k}$
2. 如果目标函数是一个非线性问题，就需要用到迭代算法求解，寻找最优步长或者满足上述必要条件的步长。本节主要讨论 **目标函数的梯度存在**，如果不存在还会有其他算法。求解步骤一般分为两步，一是寻找一个包含解的区间，二是逐渐放大该步长，直到满足条件。

插值法

使用插值法的目标是寻找一个**步长的递减序列**，直到找到一个满足约束的步长。

二次插值

根据Armijo条件，步长的选择应该满足使得目标函数充分减小，该条件为

$$f(x_k + \alpha p_k) \le f(x_k) + c_1\alpha\nabla f_k^T p_k$$

对于第K步的 α应该满足：

$$\phi(\alpha_k) \le \phi(0) + c_1\alpha_k\phi'(0)$$

对于初始值α_0满足上述约束，则结束。否则减小步长值，即 $\alpha_1 \in (0, \alpha_0)$。
此时运用二次插值法，寻找插值函数 $\phi_q(\alpha)$满足一下条件

$$\phi_q(0) = \phi(0), \phi_q'(0) = \phi'(0), \phi_q(\alpha_0) = \phi(\alpha_0)$$

，根据上述条件，求得 $\phi_q(\alpha)$为：

$$\phi_q(\alpha) = (\frac{\phi(\alpha_0) - \phi(0) - \alpha_0\phi'(0)}{\alpha_0^2})\alpha^2 + \phi'(0)\alpha + \phi(0)$$

求解该一元二次最优化问题可以得到

$$\alpha_1 = \frac{\phi'(0)\alpha_0^2}{2(\phi(\alpha_0) - \phi(0) - \alpha_0\phi'(0))}$$

三次插值

如果上述\alpha_1满足约束条件则结束，否则需要进行三次插值，即寻找插值函数$\phi_c(\alpha)$满足一下值相等，$\phi(0),\phi'(0),\phi(\alpha_0),\phi(\alpha_1)$。假设求得$\phi_c(\alpha)$为

$$\phi_c(\alpha)=a\alpha^3+b\alpha^2+a\phi'(0)+\phi(0)$$

可以根据代入法求解参数值，此时下一个步长 α_2 为

$$\alpha_2=\frac{-b+\sqrt{b^2-3a\phi'(0)}}{3a}$$

如果满足约束则结束，否则继续利用最近的两个步长值和初始值继续进行三次插值，直到结束。如果两次的步长比较相近，则 $\alpha_k=\frac{\alpha_{k-1}}{2}$

初始化步长选择

对于牛顿或者拟牛顿法，初始化步长可以选择为1，对于其他非scaled的方法，初始化比较重要。

1. 方法一假设在x_k和x_{k-1}处一阶梯度改变相同，即满足$\alpha_0\nabla f_k^Tp_k=\alpha_{k-1}\nabla f_{k-1}^Tp_{k-1}$
2. 在$f(x_{k-1}),f(x_k),\nabla f_{k-1}^Tp_{k-1}$处进行二次插值，此时$\alpha_0=\frac{2(f_k-f_{k-1})}{\phi'(0)}$

步长求解算法

寻找满足强Wolfe条件的步长，该条件为

$$\begin{gathered}f(x_k+\alpha p_k)\le f(x_k)+c_1\alpha\nabla f_k^Tp_k\\ |\nabla f(x_k+\alpha_kp_k)^Tp_k|\le c_2|\nabla f_k^Tp_k|\\ 0<c_1<c_2<1\end{gathered}$$

该算法分为两步，一是寻找一个包含解的区间；二是运用zoom算法寻找满足约束条件的解。

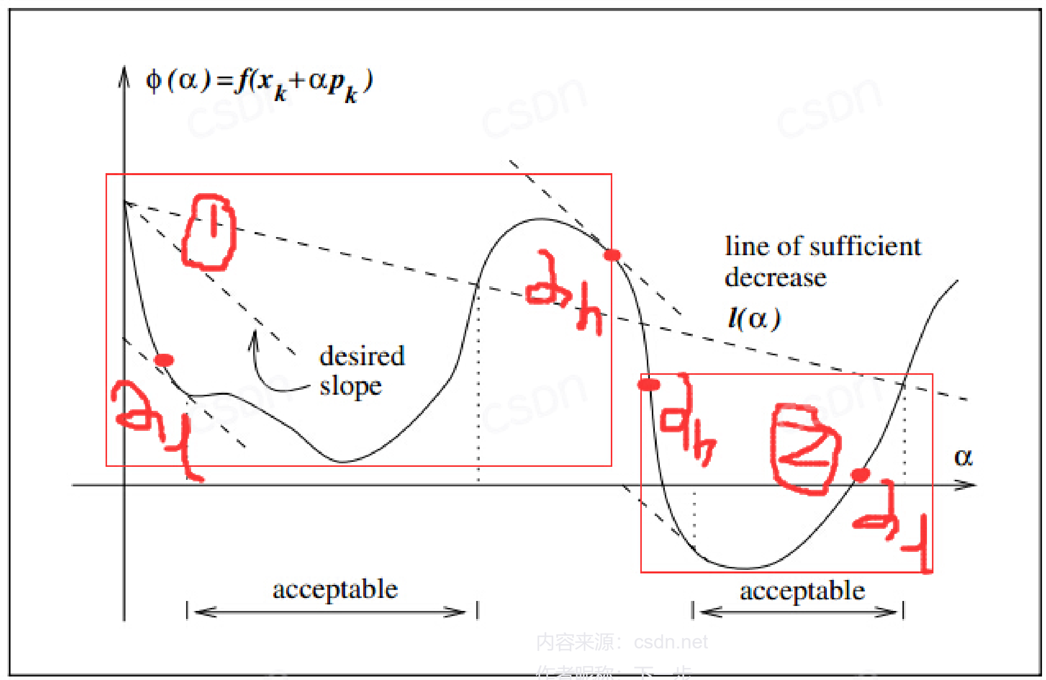
算法框架

Algorithm 3.2 (Line Search Algorithm).

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

在调用zoom算法前，寻找一个步长的下界使得在该区间内包含最优解α^*，算法描述如下
算法主要包含以下4步

1. 评价当前步长，判断是否满足充分小条件，如果不满足说明最优解在(α_{i-1}, α_i)之间。
2. 否则满足强Wolfe的条件1，验证条件2是否满足，如果满足则结束。
3. 如果不满足条件2，并且当前梯度为正值时，交互上一个步长调用zoom算法结束（**为什么调换，看zoom算法介绍**）
4. 求解下一个步长点，可以采用插值法。



下图描述了需要调用zoom算法的两类条件，分别对应1和3：

zoom算法

zoom算法的输入比较特殊，输入需要满足(α_l, α_h)

1. 该区间内包含满足强Wolfe条件的步长
2. 步长α_l是两个值中目标函数值较小的一个
3. 选择α_h如果该点满足$\phi'(\alpha_l)(\alpha_h - \alpha_l) < 0$，表明该区间是一个连续下降的区间

Algorithm 3.6 (zoom).

repeat

Interpolate (using quadratic, cubic, or bisection) to find a trial step length α_j between α_{lo} and α_{hi};

1

Evaluate $\phi(\alpha_j)$;

if $\phi(\alpha_j) > \phi(0) + c_1\alpha_j\phi'(0)$ or $\phi(\alpha_j) \ge \phi(\alpha_{\text{lo}})$

$\alpha_{\text{hi}} \leftarrow \alpha_j$;

else

2

Evaluate $\phi'(\alpha_j)$;

if $|\phi'(\alpha_j)| \le -c_2\phi'(0)$

Set $\alpha_* \leftarrow \alpha_j$ and **stop**;

3

if $\phi'(\alpha_j)(\alpha_{\text{hi}} - \alpha_{\text{lo}}) \ge 0$

$\alpha_{\text{hi}} \leftarrow \alpha_{\text{lo}}$;

$\alpha_{\text{lo}} \leftarrow \alpha_j$;

end (repeat)

zoom算法描述如下

算法流程为

1. 检查是否满足Wolfe的条件一，如果不满足缩减区间。
2. 检查是否满足条件2 ，如果满足则返回
3. 检查是否是递增区间，如果是进行调整，使其满足zoom输入条件。

线搜索的收敛性

1. 如果搜索方向选择为“最速下降方向”即负梯度方向，则能达到一个“全局收敛”状态，此时满足$\lim_{k\to\infty} ||\nabla fk|| = 0$
2. 对于牛顿方法或者伪牛顿方法$(p_k^N = -B_k^{-1}\nabla f_k)$只要满足Bk的条件数有界限并且正定则也能达到全局收敛。
3. 对于共轭梯度方法，只要满足$lim_{k\to\infty} inf||\nabla f_k|| = 0$，即只要一个子序列收敛即可。

4. 对于任何搜索方向，只要满足1）每一个步目标值都在下降2）每隔一定步数都能达到一个最优下降方向，都能收敛。即不要求每一步都下降，可以周期性下降。

收敛速度

1. 当搜索方向为最优下降方向是，为线性收敛速度。
2. 当搜索方向为牛顿方向，即$p_k^N=-\nabla^2 f_k^{-1}\nabla f_k$，如果$\nabla^2 f_k$正定，则牛顿法为二次收敛。（但是牛顿方向不总是为正定，因此Hessian在使用时需要进一步调整）
3. 当搜索方向为伪牛顿方向时，收敛速度为超线性。

牛顿方法–Hessian矩阵替代品

1. 牛顿方法中，搜索方向需要满足$\nabla^2 f_k p_k^N=-\nabla f_k$，如果$\nabla^2 f_k$正定，可以得到搜索方向
2. 牛顿方法中，Hessian矩阵不总是正定的，会导致搜索方向不总是下降方向，从而导致牛顿方法不总能找到最优解。
3. 但是可以找到一些替代方法，例如
    - 通过特征值修改：$\nabla^2 f_k=Q\Lambda Q$
    - 添加常数因子，$B_k=\nabla^2f_k+λI\$
    - 修改Cholesky算法

总结

通过该章的学习，能够了解
1. 线搜索的基本形式以及需要解决的问题
2. 常见步长α需要满足的条件以及实现算法
3. 线搜索的收敛速度
4. 牛顿方法的优化