实用优化算法
第三章　无约束最优化方法

教师　邱松强

中国矿业大学　数学学院

September 8, 2021

目录

本章介绍无约束优化问题

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

的计算方法.

- 本章介绍的方法基本都属于下降算法;
- 本章介绍算法的区别是选取的搜索方向不同.

一元函数的最优性条件

回顾

性质1

设$\varphi(\alpha)$ 为定义在R 上的一元函数，则

(1) 若α^* 为$\varphi(\alpha)$ 的局部极小点，则$\varphi'(x^*) = 0$;

(2) 若$\varphi'(\alpha^*) = 0$, $\varphi''(\alpha^*) > 0$, 则α^* 为$\varphi(\alpha)$ 的严格局部极小点;

(3) 若α^* 为$\varphi(\alpha)$ 的严格局部极小点，则$\varphi'(\alpha^*) = 0$, $\varphi''(\alpha^*) \geq 0$.

最优性条件

定理1 (一阶必要条件)

若$\boldsymbol{x}^*$ 为$f(\boldsymbol{x})$ 的局部极小点，且在$\boldsymbol{x}^*$ 的某邻域内$f(\boldsymbol{x})$ 具有一阶连续偏导数，则

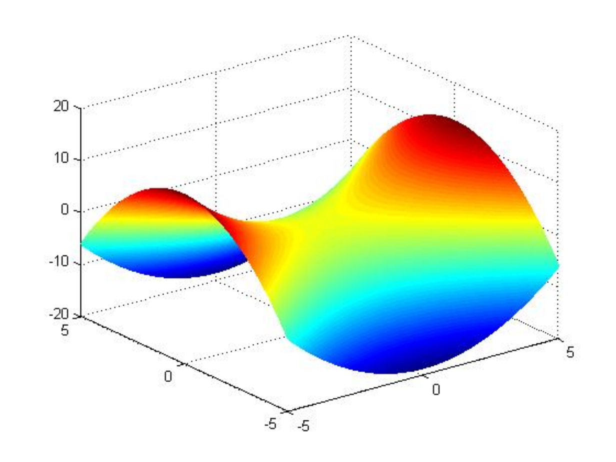
$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = 0.$$

注：

- 满足上面条件的点称为驻点．驻点有三种类型：极小点、极大点和鞍点．
- 鞍点：沿某些方向是极小点，沿另一些方向是极大点．

鞍点

如图



图：鞍点

例2.1

证明函数

$$f(\boldsymbol{x}) = 8x_1 + 12x_2 + x_1^2 - 2x_2^2$$

有唯一的稳定点，且该点既非极小点也非极大点，而是一个鞍点．画出$f(\boldsymbol{x})$ 的等高线图．

【解:】

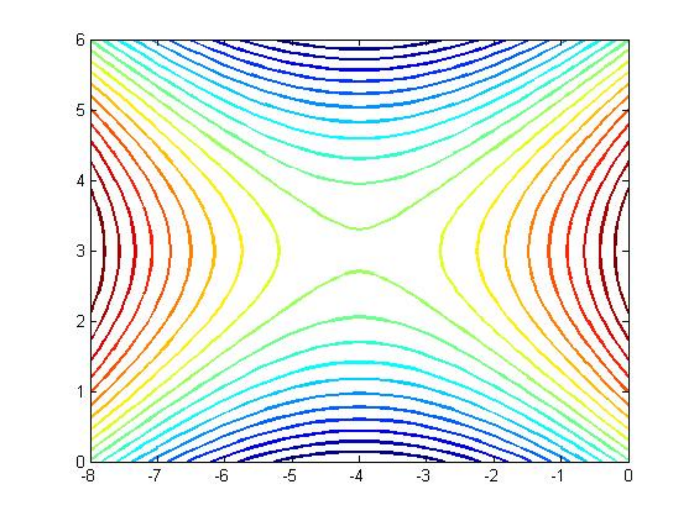
$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 8 + 2x_1 \\ 12 - 4x_2 \end{pmatrix}.$$

令$\nabla f(\boldsymbol{x}) = 0$，得唯一稳定点$\boldsymbol{x}^* = (-4, 3)^T$．又

$$G = \begin{pmatrix} 2 & \\ & -4 \end{pmatrix}.$$

故而$\boldsymbol{x}^*$ 是鞍点．

该函数的等高线图如下图所示



最优性条件

定理2 (二阶充分条件)

若$\boldsymbol{x}^*$为$f(\boldsymbol{x})$局部极小点，在$\boldsymbol{x}^*$的某邻域内$f(\boldsymbol{x})$具有二阶连续偏导数，若

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = 0,\ G^* = \nabla_{\boldsymbol{xx}} f(\boldsymbol{x}^*)\text{正定},$$

则$\boldsymbol{x}^*$为无约束优化问题的严格局部极小点.

注

- 对于驻点$\boldsymbol{x}^*$, 如果又有G^*正定, 则$\boldsymbol{x}^*$为局部极小点;
- 对于驻点$\boldsymbol{x}^*$, 如果又有G^*负定, 则$\boldsymbol{x}^*$为局部极大点;

最优性条件

定理3 (二阶必要条件)

若$\boldsymbol{x}^*$ 为$f(\boldsymbol{x})$ 的局部极小点，且在$\boldsymbol{x}^*$ 的某邻域内$f(\boldsymbol{x})$ 有二阶连续偏导数，则

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = 0,\ G^* = \nabla_{\boldsymbol{xx}} f(\boldsymbol{x}^*)\text{半正定}.$$

定理4 (凸函数的最优性条件)

设 $f(\boldsymbol{x})$ 在 R^n 上是凸函数且有一阶连续偏导数，则 $\boldsymbol{x}^*$ 为 $f(\boldsymbol{x})$ 的整体极小点的**充要条件**是 $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = 0$.

作业

P.128. 3.1,3.4

搜索方向

要点：沿下降最快的速度的方向搜索.

由Taylor 公式

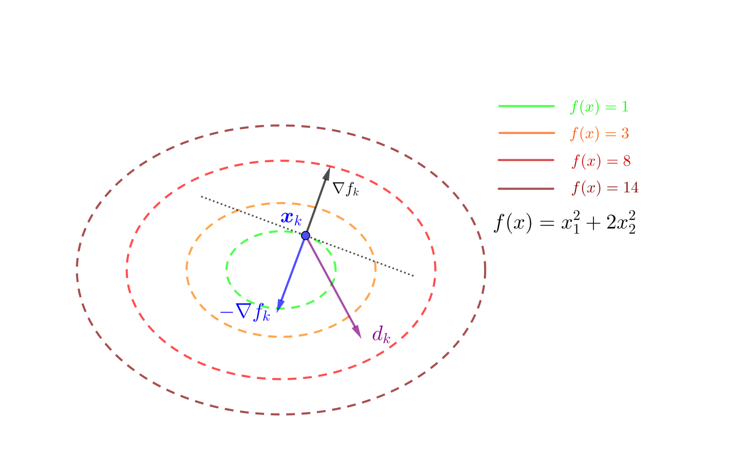
$$f(\boldsymbol{x}_k+\alpha d_k)=f(\boldsymbol{x}_k)+\alpha\nabla f_k^T d_k+o(\alpha\|d_k\|).$$

由于

$$\nabla f_k^T d_k=-\|\nabla f_k\|\|d_k\|\cos\theta,$$

其中, θ 为d_k 与$-\nabla f_k$ 的夹角. 当α, $\|d_k\|$ 固定时, $\cos\theta=1$ 使得$\nabla f_k^T d_k$ 最小. 也就是说, 当$d_k=-\nabla f_k($ $\theta=0)$ 时,即负梯度方向, $f(\boldsymbol{x})$ 下降速度最快.

如下图所示:


$f(x) = 1$
$f(x) = 3$
$f(x) = 8$
$f(x) = 14$
$f(x) = x_1^2 + 2x_2^2$
∇f_k
$\boldsymbol{x}_k$
$-\nabla f_k$
d_k

最速下降法

给定控制误差$\epsilon > 0$.

步 1 取初始点x_0, 令$k = 0$.

步 2 计算$\nabla f_k = \nabla f(\boldsymbol{x}_k)$.

步 3 若$\|\nabla f_k\| \le \epsilon$, 则令$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{x}_k$; 否则, 令$d_k = -\nabla f_k$, 由一维搜索求步长$\alpha_k$, 使得

$$f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha \ge 0} f(\boldsymbol{x}_k + \alpha d_k).$$

步 4 令$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k$, $k = k + 1$, 转步2.

例题

例3.1

用最速下降法求解

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

设初始点为$(5,3)^T$.

【解：】记$\boldsymbol{x}_0 = (5,3)^T$. 则

$$\nabla f(\boldsymbol{x}_0) = \begin{pmatrix} 2\boldsymbol{x}_0^{(1)} \\ 2\boldsymbol{x}_0^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

$$d_0 = -\nabla f(\boldsymbol{x}_0) = \begin{pmatrix} -10 \\ -6 \end{pmatrix}, \boldsymbol{x}_0 + \alpha d_0 = \begin{pmatrix} 5-10\alpha \\ 3-6\alpha \end{pmatrix}.$$

于是

例题

$$
\begin{aligned}
\varphi(\alpha) &= f(\boldsymbol{x}_0 + \alpha d_0) \\
&= (5 - 10\alpha)^2 + (3 - 6\alpha)^2 \\
&= 136\alpha^2 - 136\alpha + 34.
\end{aligned}
$$

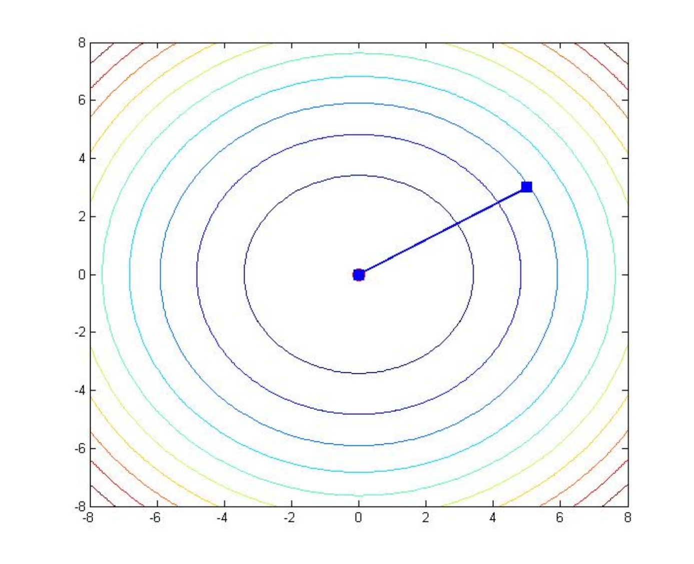
令$\varphi'(\alpha) = 0$, 得$\alpha_0 = \frac{1}{2}$. 于是

$$
\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 d_0 = (0, 0)^T.
$$

显然，$\boldsymbol{x}_1$ 是问题的解.

例题

如下图所示



例题

例3.2

用最速下降法求解

$$\min \ f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{9}{2}x_2^2,$$

设初始点为$(9,1)^T$.

例题

【解：】

$$g(\boldsymbol{x}) = \nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} x_1 \\ 9x_2 \end{pmatrix}, G(\boldsymbol{x}) = \nabla_{\boldsymbol{xx}} f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 9 \end{pmatrix}.$$

可以证明，如果$f(\boldsymbol{x})$ 是正定二次函数，则由精确一维搜索确定的步长α_k 为

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T G d_k}.$$

例题

故对正定二次目标函数，最速下降法的迭代公式为：

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \frac{g_k^T g_k}{g_k^T G g_k} g_k.$$

由于$g_0 = g(\boldsymbol{x}_0) = (9,9)^T$, 所以由上式可得

$$\boldsymbol{x}_1 = \begin{pmatrix} 9 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{(9\ 9)\begin{pmatrix} 9 \\ 9 \end{pmatrix}}{(9\ 9)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 9 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 9 \\ 9 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} 7.2 \\ -0.8 \end{pmatrix}.$$

例题

类似地计算下去，可用归纳法证明，最速下降法产生如下点列

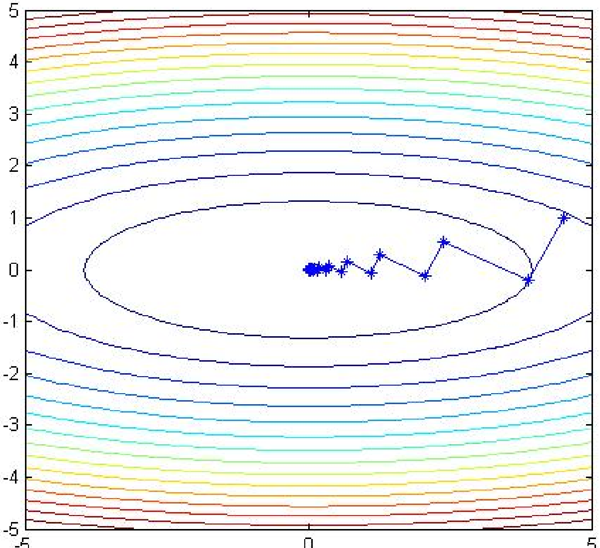
$$\boldsymbol{x}_k = \begin{pmatrix} 9 \\ (-1)^k \end{pmatrix} 0.8^k, \ k = 1, 2, \cdots$$

显然$\boldsymbol{x}_k \to \boldsymbol{x}^* = (0,0)^T$，且

$$\frac{\|\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}^*\|}{\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}^*\|} = 0.8.$$

可见对所给的目标函数，算法是收敛的，收敛速度是线性的.

迭代点序列如下图所示



收敛性

Zigzag(锯齿)现象

由步长α_k 的定义知，

$$\varphi'(\alpha_k) = \frac{d}{d\alpha}(f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k)) = \nabla f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k)^T d_k = 0.$$

在最速下降法中，$d_k = -\nabla f_k$，

$$d_{k+1} = -\nabla f(\boldsymbol{x}_{k+1}) = -\nabla f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k).$$

则$d_{k+1}^T d_k = 0$. 也就是说，最速下降法相邻的两个搜索方向互相垂直，
于是整个迭代序列产生了**Zigzag(锯齿)现象**.

收敛性

定理5 (整体收敛性或全局收敛性)

设$f(\boldsymbol{x})$ 具有一阶连续偏导数，给定$\boldsymbol{x}_0 \in R^n$, 假定水平集$L = \{\boldsymbol{x}\in R^n | f(\boldsymbol{x})\le f(\boldsymbol{x}_0)\}$有界,令$\{\boldsymbol{x}_k\}$为由最速下降法产生的点列,则或者

(i) 对某个k_0, $\nabla f(\boldsymbol{x}_{k_0}) = 0$; 或者

(ii) 当$k \to \infty$ 时, $\nabla f_k \to 0$.

收敛速度

定理6 (收敛速度)

设$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T G\boldsymbol{x}$, 其中, G 为正定矩阵. 用λ_1, λ_n 表示G 的最小与最大特征值, 则由最速下降法产生的点列$\{\boldsymbol{x}_k\}$ 满足

$$f(\boldsymbol{x}_{k+1}) \le \left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^2 f(\boldsymbol{x}_k),\ k = 0, 1, 2, \cdots,$$

$$\|\boldsymbol{x}_k\| \le \sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_1}}\left(\frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\right)^k \|\boldsymbol{x}_0\|,\ k = 0, 1, 2, \cdots$$

即：线性收敛.

定理6 说明, 对于二次函数, 最速下降法至少是线性收敛的, 其收敛比$\beta \le \frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}$. 所以当$G$ 的特征值比较分散, 即$\lambda_n \gg \lambda_1$ 时, 收敛比接近1, 收敛速度很慢; 当G 的特征值比较集中, 即$\lambda_n \approx \lambda_1$ 时, 收敛比接近于0, 从而收敛速度接近超线性收敛.

例题

例3.3

用最速下降法求$Rosenbrock$ 函数

$$f(\boldsymbol{x}) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

的最小值，初始点为$\boldsymbol{x}_0 = (0,0)^T$.

【解：】

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} -400(x_2 - x_1^2)x_1 - 2(1 - x_1) \\ 200(x_2 - x_1^2) \end{pmatrix},$$

$f_0 = f(0,0) = 1$, $\nabla f_0 = (-2,0)^T$.

例题

$d_0 = (2,0)^T$. 对于任意的$\alpha > 0$,

$$f(\boldsymbol{x}_0 + \alpha d_0) = f(2\alpha, 0) = 1600\alpha^4 + 4\alpha^2 - 4\alpha + 1.$$

令$f'(\alpha) = 0$, 得

$$6400\alpha^3 + 8\alpha - 4 = 0.$$

其近似解为$\alpha_0 \approx 0.0806$.

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 d_0 = (0.1612, 0)^T.$$

$\dots\dots$

例3.4 (思考题(固定步长梯度法))

求严格凸二次函数

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T G\boldsymbol{x} + b^T\boldsymbol{x} + c$$

的最小值点. 若以$d_k = -\nabla f_k$ 为搜索方向, 且对所有k, $\alpha_k \equiv \alpha \in (0, +\infty)$, 相应的迭代公式为

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \alpha\nabla f_k.$$

1. 找几个正定二次函数, 看能否选一个合适的α 使得$\{\boldsymbol{x}_k\}$ 收敛到f 的最小值点?
2. 和最速下降法比较一下.
3. 当α 满足什么条件时, $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 收敛到f 的最小值点?

P.129. 3.5,3.6.

引言

最速下降法的优点

- 原理简单, 容易实现;
- 每次迭代的计算量小.

缺点

- 收敛速度慢(有锯齿现象).

Newton 法：启发1

最速下降法用一次迭代就得到例3.1 的解，但即使是像例3.2 的二次函数，最速下降法的收敛速度也是非常慢.
能不能设计一个算法，使得它用一次迭代就能得到(凸)二次函数的最小值呢？

Newton 法：启发1

目标：一步求凸二次函数的最小值

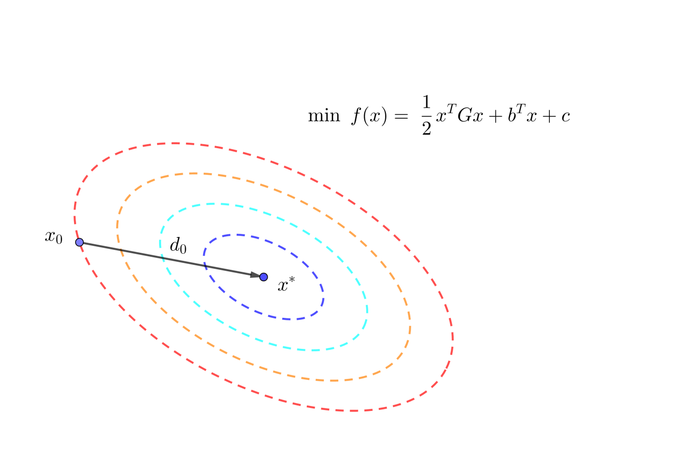
最小化凸二次函数：

$$\min \ f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T G\boldsymbol{x} + b^T\boldsymbol{x} + c,$$

其中G 是正定矩阵. 任取一个初始点$\boldsymbol{x}_0$, 找一个搜索方向d_0, 使得我们可以仅用一次线性搜索就得到问题的解（最好连线性搜索都不用）.

Newton 法：启发1

如图所示



Newton 法：启发1

二次函数$f(\boldsymbol{x})$ 的梯度和Hesse 矩阵分别是

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = G\boldsymbol{x} + b,\ \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = G.$$

要使

$$\nabla f(\boldsymbol{x}_0 + d_0) = 0,$$

则必须有

$$G(\boldsymbol{x}_0 + d_0) + b = 0 \Rightarrow d_0 = -G^{-1}(G\boldsymbol{x}_0 + b).$$

也就是

$$d_0 = -(\nabla^2 f(\boldsymbol{x}_0))^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x}_0).$$

此为Newton 方向.

Newton 法：动机2

最速下降法只用到了目标函数的一阶导数（梯度）信息.

$$f(\boldsymbol{x}) \approx f_k + \nabla f_k^T(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_k) \overset{d=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_k}{=} f_k + \nabla f_k^T d$$

启发

- 如果在迭代方法中引入高阶导数，其效率可能会提高.

Newton 法

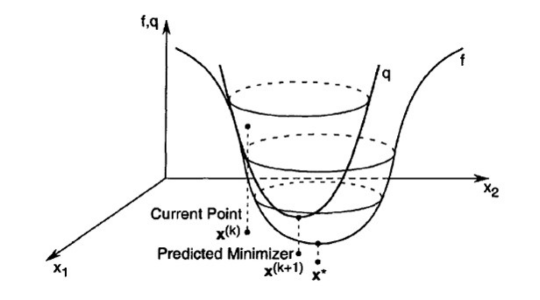
- 同时使用一阶导数和二阶导数来确定搜索方向;
- 当初始点接近目标函数的极小点时, Newton 法的效率要远高于最速下降法.

Newton 法：启发2

目标函数的二次近似

$$f(\boldsymbol{x}) \approx f_k + \nabla f_k^T(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_k) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_k)^T G_k(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_k) \triangleq q_k(\boldsymbol{x})$$

其中，G_k 为Hesse 矩阵.
如下图所示



图：目标函数的二次型近似函数

Newton 法：启发2

若G_k 正定，则$q_k(\boldsymbol{x})$ 有唯一的极小点. 由一阶必要条件知，$\boldsymbol{x}_{k+1}$ 满足

$$\nabla q_k(\boldsymbol{x}_{k+1}) = 0.$$

也就是

$$G_k(\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_k) + \nabla f_k = 0.$$

解得

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - G_k^{-1}\nabla f_k.$$

这就是Newton 迭代公式.

算法

Newton 法

给定误差控制参数$\epsilon > 0$.

步 1 取初始点x_0, 令$k = 0$.

步 2 计算∇f_k.

步 3 若$\|\nabla f_k\| \leq \epsilon$, 则令$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{x}_k$, 停; 否则计算$G_k$, 求解

$$G_k d_k = -\nabla f_k$$

得d_k.

步 4 令$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + d_k$, $k = k + 1$, 转步2.

例题

例4.1

用 $Newton$ 法求解

$$\min \ f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{9}{2}x_2^2$$

【解：】本题可取任意初始点，这里取 $\boldsymbol{x}_0 = (9,9)^T$. 由 $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} x_1 \\ 9x_2 \end{pmatrix}$, $G(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 9 \end{pmatrix}$ 有

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}_1 &= \boldsymbol{x}_0 - G_0^{-1}\nabla f_0 \\
&= \begin{pmatrix} 9 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 9 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 9 \\ 9 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{x}^*.
\end{aligned}$$

例题

例4.2

用*Newton*法求*Rosenbrock* 函数

$$f(\boldsymbol{x}) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

的最小值，初始点为$\boldsymbol{x}_0 = (0, 0)^T$.

【解：】该函数的梯度为

$$\nabla f = \begin{pmatrix} -400\left(x_2 - x_1^2\right)x_1 - 2\left(1 - x_1\right) \\ 200\left(x_2 - x_1^2\right) \end{pmatrix},$$

Hesse 矩阵为

$$G = \begin{pmatrix} 1200x_1^2 - 400x_2 + 2 & -400x_1 \\ -400x_1 & 200 \end{pmatrix}.$$

例题

在初始点处

$$\nabla f_0 = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}, \; G_0 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 200 \end{pmatrix}.$$

则

$$d_0 = -G_0^{-1}\nabla f_0 = -\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/200 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

于是

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + d_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

因$\nabla f_1 = (400, -200)^T \neq 0$, 继续迭代.

例题

在x_1处

$$\nabla f_1 = \begin{pmatrix} 400 \\ -200 \end{pmatrix}, \ G_1 = \begin{pmatrix} 1202 & -400 \\ -400 & 200 \end{pmatrix}.$$

则

$$d_1 = -G_1^{-1}\nabla f_1 = -\frac{1}{80400}\begin{pmatrix} 200 & 400 \\ 400 & 1202 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 400 \\ -200 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

于是

$$\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_1 + d_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

由于$\nabla f_2 = (0,0)^T$, 算法终止.
数值实验: Rosenbrock

例题

例4.3

问题

$$\min \ f(\boldsymbol{x}) = (x_1-2)^4 + (x_1-2)^2 x_2^2 + (x_2+1)^2$$

具有极小点$(2,-1)^T$. 若取初始点为$(1,1)^T$, 用$Newton$ 法求解此问题.

【解：】计算

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

$$G(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 12(x_1-2)^2 + 2x_2^2 & 4x_2(x_1-2) \\ 4x_2(x_1-2) & 2(x_1-2)^2 + 2 \end{pmatrix}$$

例题

在初始点$(1,1)^T$ 处,

$$f_0 = 6,\ \nabla f_0 = \begin{pmatrix} -6 \\ 6 \end{pmatrix},\ G_0 = \begin{pmatrix} 14 & -4 \\ -4 & 4 \end{pmatrix}.$$

由Newton 迭代公式知

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 - G_0^{-1} \nabla f_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ -0.5 \end{pmatrix}.$$

此时$\nabla f_1 = \begin{pmatrix} -4.5 \\ 0 \end{pmatrix}$.

例题

继续迭代，得如下迭代过程

k	$\boldsymbol{x}_k$	$\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}^*\|$
0	$(1,1)^T$	2.0
1	$(1,-0.5)^T$	1.49
2	$(1.39130,-0.69565)^T$	5.23×10^{-1}
3	$(1.74594,-0.94880)^T$	1.01×10^{-1}
4	$(1.98628,-1.04821)^T$	2.55×10^{-3}
5	$(1.99873,-1.00017)^T$	3.32×10^{-6}
6	$(1.9999996,-1.0000016)^T$	2.81×10^{-12}

数值实验: Prob2

收敛性

- 对于二次函数，Newton 法只需要一次迭代就可以得到极小点.
- 对于一般函数

定理7 (Newton 法的收敛性)

设$f(\boldsymbol{x})$ 是某一开域内的三阶连续可微函数，且它在该开域内有极小点$\boldsymbol{x}^*$，设$G^* = G(\boldsymbol{x}^*)$ 正定，则当$\boldsymbol{x}_0$ 与$\boldsymbol{x}^*$ 充分接近时，对一切k，*Newton* 法有定义，且当$\{\boldsymbol{x}_k\}$ 为无穷点列时，$\{\boldsymbol{x}_k\}$ 二阶收敛于$\boldsymbol{x}^*$，即$\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}^*\| \to 0$ 且

$$\|\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}^*\| = O(\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*\|^2).$$

例题

例4.4

考虑问题

$$\min f(\boldsymbol{x}) = 3x_1^2 + 3x_2^2 - x_1^2 x_2.$$

分别从初始点$(1.5,1.5)^T$,$(-2,4)^T$,$(0,3)^T$ 出发，用$Newton$ 法求解该问题.

【解：】$f(x)$ 的一，二阶导数分别为

$$g(\boldsymbol{x}) = \left(6x_1 - 2x_1x_2, 6x_2 - x_1^2\right)^{\mathrm{T}},$$

$$G(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 6-2x_2 & -2x_1 \\ -2x_1 & 6 \end{bmatrix}$$

例题

$f(\boldsymbol{x})$ 有三个稳定点（驻点）：极小点$(0,0)^T$, 鞍点$(3\sqrt{2},3)^T$和$(-3\sqrt{2},3)^T$.
在这三个点处的Hesse矩阵分别为

$$G_1=\begin{bmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 6 \end{bmatrix},\quad G_2=\begin{bmatrix} 0 & -6\sqrt{2} \\ -6\sqrt{2} & 6 \end{bmatrix}$$
$$G_3=\begin{bmatrix} 0 & 6\sqrt{2} \\ 6\sqrt{2} & 6 \end{bmatrix}$$

- 初始点$\boldsymbol{x}_0=(1.5,1.5)^T$, 收敛到极小点$(0,0)^T$.
- 初始点$\boldsymbol{x}_0=(-2,4)^T$, 收敛到鞍点$(-3\sqrt{2},3)^T$.
- 初始点$\boldsymbol{x}_0=(0,3)^T$, 这时$G(\boldsymbol{x}_0)$ 奇异, 方法失败.

数值实验: Prob 9.

例4.5 (课后习题3.8)

考虑函数

$$f(\boldsymbol{x}) = 2x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2 + 2x_1^3 + x_1^4.$$

找出$\boldsymbol{x}^* = 0$ 的最大开球B, 使得$G(\boldsymbol{x})$ 在其中正定. 对此球中怎样的点$\boldsymbol{x}_0$ (其中$\boldsymbol{x}_0^{(1)} = \boldsymbol{x}_0^{(2)}$), Newton 法收敛到$\boldsymbol{x}^*$.

【解: 】

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 4x_1 - 2x_2 + 6x_1^2 + 4x_1^3 \\ 2x_2 - 2x_1 \end{pmatrix},$$

$$G(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 4 + 12x_1 + 12x_1^2 & -2 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}.$$

Hesse 矩阵$G(\boldsymbol{x})$ 正定当且仅当

$$\begin{aligned}&4+12x_1+12x_1^2>0, (\text{该式恒成立})\\&\det(G(\boldsymbol{x}))=4+24x_1+24x_1^2>0.\end{aligned}$$

解得

$$x_1>\frac{-3+\sqrt{3}}{6} \text{ 或 } x_1<\frac{-3-\sqrt{3}}{6}.$$

令$r=\frac{-3+\sqrt{3}}{6}$. 则当$\boldsymbol{x}$ 位于如下开球

$$B(\boldsymbol{x}^*,r)=\{\boldsymbol{x}\mid \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\|<r\}$$

时, $G(\boldsymbol{x})$ 正定.

为简便起见，记$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0$. 当$x_1 = x_2$ 时，

$$
\nabla f = \begin{pmatrix} 2x_1 + 6x_1^2 + 4x_1^3 \\ 0 \end{pmatrix},
$$

$$
G^{-1} = \frac{1}{4 + 24x_1 + 24x_1^2} \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 4 + 12x_1 + 12x_1^2 \end{pmatrix},
$$

$$
-G^{-1}\nabla f = -\frac{1}{4 + 24x_1 + 24x_1^2} \begin{pmatrix} 4x_1 + 12x_1^2 + 8x_1^3 \\ 4x_1 + 12x_1^2 + 8x_1^3 \end{pmatrix}.
$$

所以下一个迭代点为

$$\boldsymbol{x}^{+} = \boldsymbol{x} - G^{-1}\nabla f = \begin{pmatrix} \frac{12x_1^2+16x_1^3}{4+24x_1+24x_1^2} \\ \frac{12x_1^2+16x_1^3}{4+24x_1+24x_1^2} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{12x_1+16x_1^2}{4+24x_1+24x_1^2}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_1 \end{pmatrix}$$

所以当

$$\left|\frac{12x_1+16x_1^2}{4+24x_1+24x_1^2}\right| < 1 \qquad (1)$$

时，可使迭代点列收敛到$\boldsymbol{x}^*$.

求解(1), 结合$B(\boldsymbol{x}^*, r)$ 可知当初始点$\boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{x}_0^{(1)} = \boldsymbol{x}_0^{(2)} = x_1)$ 满足

$$|\boldsymbol{x}_0^{(1)}| < \frac{-9+\sqrt{41}}{20}$$

时, 迭代点列收敛到$\boldsymbol{x}^*$.

数值实验: Prob 3.

优缺点

Newton 法的优缺点

优点

- 如果G^* 正定且初始点合适, 算法是二阶收敛的;
- 对于二次函数，迭代一次就可得到极小点.

缺点

- 对多数问题并不是整体收敛（或全局收敛）的;
- 在每次迭代中需要计算G_k;
- 每次迭代需要求解线性方程组$G_k d_k = -\nabla f_k$;
- 收敛于鞍点或极大点的可能性并不小.

定理8

设$\{\boldsymbol{x}_k\}$ 为利用$Newton$ 法求解$\min\ f(\boldsymbol{x})$ 时得到迭代点序列. 如果$G_k = \nabla_{xx} f(\boldsymbol{x}_k)$ 正定且$\nabla f_k \neq 0$, 则$Newton$ 方向

$$d_k = -G_k^{-1} \nabla f_k$$

是一个下降方向.

对Newton 法的改进

改进1: 阻尼Newton 法

当得到Newton 方向d_k 后，沿d_k 进行一维搜索求得步长α_k，例如

- 用精确搜索确定α_k，使其满足

$$f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha \geq 0} f(\boldsymbol{x}_k + \alpha d_k).$$

  或者
- 用非精确搜索α_k, 使其满足Wolfe 准则或Armijo 准则.

这种改进可以克服第一和第四个缺点.

阻尼Newton 法

阻尼Newton 法(使用精确搜索)

给定误差控制参数$\epsilon > 0$.

步 1　取初始点$\boldsymbol{x}_0$, 令$k = 0$.

步 2　计算∇f_k. 若$\|\nabla f_k\| \le \epsilon$, 则令$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{x}_k$, 停; 否则计算$G_k$, 求解

$$G_k d_k = -\nabla f_k$$

得d_k.

步 3　用精确搜索确定α_k, 使其满足

$$f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha \ge 0} f(\boldsymbol{x}_k + \alpha d_k).$$

步 4　令$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k$, $k = k + 1$, 转步2.

阻尼Newton 法

阻尼Newton 法(使用Armijo 非精确搜索)

给定误差控制参数$\epsilon > 0$.

步 1　取参数$0 < \rho, \beta < 1$ 和初始点$\boldsymbol{x}_0$, 令$k = 0$.

步 2　计算∇f_k. 若$\|\nabla f_k\| \le \epsilon$, 则令$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{x}_k$, 停; 否则计算$G_k$, 求解

$$G_k d_k = -\nabla f_k$$

得d_k. 令$m = 0$.

步 3　若

$$f(\boldsymbol{x}_k + \beta^m d_k) \le f_k + \rho\beta^m \nabla f_k^T d_k,$$

令$\alpha_k = \beta^m$; 转步4; 否则，转步5.

步 4　令$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k$, $k = k + 1$, 转步2.

步 5　令$m = m + 1$, 转步3.

例题

例4.6

求解

$$\min \ \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} + \sigma(\boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x})^2,$$

其中, $\sigma = 10^4$, $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & \frac{1}{2} \\ 2 & 4 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 3 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$.

初始点为$(\cos 70^o, \sin 70^o, \cos 70^o, \sin 70^o)$.

本题Newton法失败，阻尼Newton法可以高效求解.

数值实验: Prob 5.

对Newton 法的改进

注意到当G_k 正定时, Newton 方向$d_k = -G_k^{-1}\nabla f_k$ 是下降方向. 受此启发, 当G_k 非正定甚至奇异时:

改进2: Levenberg-Marquardt 校正

选择参数$\mu_k \geq 0$, 使得$G_k + \mu_k I$ 正定. 令

$$d_k = -(G_k + \mu_k I)^{-1}\nabla f_k,$$

再沿d_k 进行线性搜索，确定步长α_k. 令

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k.$$

算例

例4.7

求解问题

$$\min\ f(\boldsymbol{x}) = x_1^4 + x_1x_2 + (1+x_2)^2.$$

初始点为$(0,0)$.

Newton 法求解该问题失败.

例题

使用阻尼牛顿法. 在初始点处,

$$\nabla f_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix},\ G_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, d_0 = -G_0^{-1}\nabla f_0 = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

由于$\nabla f_0^T d_0 = 0$, 该Newton 方向不是下降方向. 沿方向d_0 进行线性搜索,

$$f(\boldsymbol{x}_0 + \alpha d_0) = (-2\alpha)^4 + 1,$$

其极小点为$\alpha_0 = 0$. 故而,迭代无法继续下去. 阻尼Newton法无法找到下一个迭代点.

但使用L-M 方法可以快速求解该问题. 当G 不是正定矩阵时, 取

$$\mu_k = -\lambda^{\min} + 10^{-3},$$

其中, $\lambda^{\min}$ 是G 的最小特征值.

数值实验: Prob 7.

作业

作业. P129. 3.7

思想

取最速下降法和Newton法的优点而舍它们的缺点.

对于二次函数

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T G\boldsymbol{x} + b^T\boldsymbol{x} + c, \tag{2}$$

其中, G 是正定的.

- Newton 法只需一次迭代，最速下降法一般需要迭代无穷多次;
- Newton 法每一步迭代的计算量大(需要计算Hesse 矩阵，解一个线性方程组)，最速下降法每一步迭代的计算量非常小.

折中一下, 希望算法能在有限步内找到二次函数的最小值.

共轭方向

比如，对于二维的二次函数的最优化问题

$$\min f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T G\boldsymbol{x} + b^T\boldsymbol{x} + c,$$

其中, $G \in R^{2\times 2}$ 正定, $b \in R^2$, $c \in R$. 我们希望能够在两步内找到最优解. 如下图

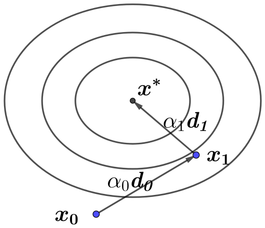


图: 两步解二次函数

思想

设有

迭代点	搜索方向	最优步长
$\boldsymbol{x}_0$	d_0	α_0
$\boldsymbol{x}_1$	d_1	α_1
$\boldsymbol{x}_2=\boldsymbol{x}^*$	-	-

其中$\boldsymbol{x}_2$ 是问题的解. 即

$$\begin{aligned}&\nabla f(\boldsymbol{x}_2)=G\boldsymbol{x}_2+b\\ =&G(\boldsymbol{x}_1+\alpha_1 d_1)+b\\ =&(G\boldsymbol{x}_1+b)+\alpha_1 G d_1=0.\end{aligned}$$

思想

$$\boxed{(G\boldsymbol{x}_1 + b) + \alpha_1 G d_1 = 0}.$$

又由精确搜索的性质

$$\nabla f(\boldsymbol{x}_{k+1})^T d_k = 0$$

知，

$$(G\boldsymbol{x}_1 + b)^T d_0 = 0.$$

所以有

$$\begin{aligned} 0 =& d_0^T((G\boldsymbol{x}_1 + b) + \alpha_1 G d_1) \\ =& d_0^T(G\boldsymbol{x}_1 + b) + \alpha_1 d_0^T G d_1 \\ =& 0 + \alpha_1 d_0^T G d_1. \end{aligned}$$

思想

得到关系式

$$d_0^T G d_1 = 0.$$

满足这个条件的两个方向称为共轭方向.
由于$d_1 \in R^2$, 故而d_1 可以表示为$-g_1$ 和d_0 的线性组合.
容易验证

$$d_1 = -g_1 + \frac{d_0^T G g_1}{d_0^T G d_0} d_0.$$

满足共轭性. 这就是共轭梯度的搜索方向格式.

共轭方向及其性质

定义1 (共轭向量)

设G 为n 阶正定矩阵, d_1, d_2, $\cdots$, d_k 为n 维向量组, 如果

$$d_i^T G d_j = 0,\ \ i, j = 1, 2, \cdots, k,\ \ i \neq j,$$

则称向量组d_1, d_2, $\cdots$, d_k 关于G 共轭.

【注: 】如果$G = I$, 则$d_i^T G d_j = 0$ 变成$d_i^T d_j = 0$. 所以, 共轭概念是正交概念的推广.

例题

例5.1

设$f(x) = x^T G x + b^T x$, 其中$G = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$, $b = \begin{pmatrix} -3 \\ -3 \end{pmatrix}$.

(1) 证明$d_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 与$d_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$ 关于G 共轭;

(2) 设$x_0 = (0,0)^T$, 以d_0 和d_1 为搜索方向, 用精确搜索求f 的极小点.

【解: 】(1) 验证

$$
\begin{aligned}
d_0^\top G d_1 &= (1,0)\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\
&= (2,1)\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\
&= 0
\end{aligned}
$$

例题

(2) $x_0 + \alpha d_0 = (\alpha, 0)^T$. 则

$$\varphi(x) = f(x_0 + \alpha d_0) = (\alpha, 0)\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix} - 3\alpha$$
$$= 2\alpha^2 - 3\alpha$$

令$\varphi'(\alpha) = 4\alpha - 3 = 0$ 得步长$\alpha_0 = \frac{3}{4}$. 故

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 = \left(\frac{3}{4}, 0\right)^T.$$

定义$\varphi(\alpha) = f(x_1 + \alpha d_1) = 6\alpha^2 - 3\alpha - \frac{9}{8}$.

令$\varphi'(\alpha) = 12\alpha - 3 = 0$ 得步长$\alpha_1 = \frac{1}{4}$.

于是$x_2 = x_1 + \alpha_1 d_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)^T$. 这是问题的解.

定理9

设G 为n 阶正定矩阵, 非零向量组$p_1, p_2, \cdots, p_k$ 关于G 共轭, 则此向量组线性无关.

推论1

设G 为n 阶正定矩阵，非零向量组$p_1, p_2, \cdots, p_n$ 关于G 共轭，则此向量组构成n 维向量空间R^n 的一组基.

推论2

设G 为n 阶正定矩阵，非零向量组$p_1, p_2, \cdots, p_n$ 关于G 共轭. 若向量v 与$p_1, p_2, \cdots, p_n$ 关于G 共轭，则$v = 0$.

二次函数的共轭方向法框架

设目标函数为二次函数(2)，其中，G 是正定的，给定$\epsilon > 0$.

【步 1】 给定初始点x_0 及初始下降方向d_0，令$k = 0$.

【步 2】 进行精确一维搜索，求步长α_k，

$$f(x_k + \alpha d_k) = \min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha d_k).$$

【步 3】 令$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

【步 4】 若$\|g_{k+1}\| \le \epsilon$，则令$x^* = x_{k+1}$，否则，转步5.

【步 5】 取共轭方向d_{k+1} （有无穷多种取法）使得

$$d_{k+1}^T G d_i = 0,\ \ i = 0, 1, \cdots, k.$$

【步 6】 令$k = k + 1$，转步2.

定义2

设n 维向量组p_1, p_2, p_k 线性无关, $\boldsymbol{x}_1 \in R^n$. 称向量集合

$$H_k = \{\boldsymbol{x}_1 + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i p_i \mid \alpha_i \in R^1, i = 1, 2, \cdots, k\}$$

为由点$\boldsymbol{x}_1$ 和p_1, p_2, p_k 生成的k 为超平面.

引理1

设$f(\boldsymbol{x})$ 为连续可微的严格凸函数，又p_1，p_2，p_k 为线性无关的n 维向量组，$\boldsymbol{x}_1 \in R^n$. 则

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_1 + \sum_{i=1}^{k} \bar{\alpha}_i p_i$$

是$f(\boldsymbol{x})$ 在$\boldsymbol{x}_1$ 和p_1，p_2，p_k 生成的k 为超平面H_k 上的唯一极小点的充分必要条件是

$$\nabla f_{k+1}^T p_i = 0,\ \ i = 1, 2, \cdots, k. \tag{3}$$

共轭方向法

定理10

设G 为n 阶正定矩阵，向量组$p_1, p_2, \cdots, p_k$ 关于G 共轭，对正定二次函数

$$f(x) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T G\boldsymbol{x} + b^T\boldsymbol{x} + c, \tag{4}$$

由任意初始点$\boldsymbol{x}_1$ 开始，依次进行k 次精确一维搜索

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i p_i,\ \ i = 1, 2, \cdots, k, \tag{5}$$

则

(i) $\nabla f_{k+1}^T p_i = 0,\ \ i = 1, 2, \cdots, k;$

(ii) $\boldsymbol{x}_{k+1}$ 是二次函数(4) 在k 维超平面H_k 上的极小点.

共轭梯度法

推论3 (共轭方向法的有限终止性)

在上述定理中，当$k=n$ 时，$\boldsymbol{x}_{n+1}$ 为正定二次函数(4) 在R^n 上的极小点.

共轭方向法

分析：

- 共轭方向法的计算效率很高;
- 在应用该算法时，应当给出具体的计算共轭方向的方法.

共轭梯度法

共轭梯度法-共轭方向的构造

思想：利用负梯度方向$-g_k$ 与上一次迭代的搜索方向d_{k-1}构造搜索方向.

- $d_0 = -g_0$;
- $d_k = -g_k + \beta_{k-1} d_{k-1}$.
- 由于$d_k^T G d_{k-1} = 0$, 可得

$$\beta_{k-1} = \frac{g_k^T G d_{k-1}}{d_{k-1}^T G d_{k-1}}, \quad \text{Hestenes-Stiefel 公式.}$$

共轭梯度法

共轭梯度法的一般框架

给定误差$\epsilon > 0$.

【步 1】 给出$\boldsymbol{x}_0 \in R^n$, $k := 0$;

【步 2】 若$\|g_k\| \leq \epsilon$, 则停止迭代;

【步 3】 若$k = 0$, 则$\beta_{-1} = 0$, 否则计算β_{k-1}, $d_k = -g_k + \beta_{k-1} d_{k-1}$,

【步 4】 做一维线性搜索求α_k;

【步 5】 计算$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k$;

【步 6】 令$k := k + 1$. 转步2.

共轭梯度法

定理11 (共轭梯度法的有限终止性)

对正定二次函数(2)采用共轭梯度法确定共轭方向，并采用精确一维搜索得到步长，在m $(m \le n)$ 次迭代后可求得(2) 的极小点，并对所有i, $(1 \le i \le m)$，有

(i) $d_i^T G d_j = 0,\ j = 1, 2, \cdots, i-1;$（共轭性）

(ii) $g_i^T g_j = 0,\ j = 1, 2, \cdots, i-1;$（正交性）

(iii) $g_i^T d_j = 0,\ j = 1, 2, \cdots, i-1;$

(iv) $d_i^T g_i = -g_i^T g_i.$（下降性）

共轭梯度法

系数β_{k-1} 的其它形式

- Fletcher-Reeves (FR) 公式:

$$\beta_{k-1} = \frac{g_k^T g_k}{g_{k-1}^T g_{k-1}} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}.$$

- Polak-Ribiere-Polyak (PRP) 公式

$$\beta_{k-1} = \frac{g_k^T (g_k - g_{k-1})}{g_{k-1}^T g_{k-1}}.$$

FR共轭梯度法

在共轭梯度法中采用FR 公式即得FR 共轭梯度法

FR 共轭梯度法

给定误差ϵ.

步 1 给定初始点$\boldsymbol{x}_0$, $k=0$.

步 2 计算$g_k = g(\boldsymbol{x}_k)$.

步 3 若$\|g_k\| \le \epsilon$, 则令$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{x}_k$, 停; 否则令

$$d_k = -g_k + \beta_{k-1} d_{k-1}, \beta_{k-1} = \begin{cases} \dfrac{g_k^T g_k}{g_{k-1}^T g_{k-1}}, & \text{当} k > 0 \text{时}, \\ 0, & \text{当} k = 0 \text{时}. \end{cases}$$

步 4 由精确一维搜索确定步长α_k, 满足

$$f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha > 0} f(\boldsymbol{x}_k + \alpha d_k).$$

步 5 令$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k d_k$, $k = k+1$, 转步2.

FR 共轭梯度法

例5.2

用FR 共轭梯度法求解

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

取初始点$\boldsymbol{x}_0 = (0,0)^T$.

【解：】$g(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 3x_1 - x_2 - 2 \\ x_2 - x_1 \end{pmatrix}$, $G = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$.

因$g_0 = (-2,0)^T \neq 0$, 故取$d_0 = (2,0)^T$, 从$\boldsymbol{x}_0$ 出发, 沿d_0 进行一维搜索, 即求

$$\min \ f(\boldsymbol{x}_0 + \alpha d_0) = 6\alpha^2 - 4\alpha$$

的极小点, 得步长$\alpha = \frac{1}{3}$.

FR共轭梯度法

于是得到$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 d_0 = \left(\frac{2}{3}, 0\right)^T$, 则$g_1 = \left(0, -\frac{2}{3}\right)^T$. 由FR公式得

$$\beta_0 = \frac{g_1^T g_1}{g_0^T g_0} = \frac{1}{9},$$

故$d_1 = -g_1 + \beta_0 d_0 = \left(\frac{2}{9}, \frac{2}{3}\right)^T$.
从$\boldsymbol{x}_1$ 出发, 沿d_1 进行一维搜索, 求

$$\min \ f(\boldsymbol{x}_1 + \alpha d_1) = \frac{4}{27}\alpha^2 - \frac{4}{9}\alpha + \frac{2}{3}$$

的极小点. 解之得$\alpha_1 = \frac{3}{2}$, 于是$\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_1 + \alpha_1 d_1 = (1,1)^T$. 此时$g_2 = (0,0)^T$, 故$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{x}_2 = (1,1)^T$, $f^* = -1$.

例题

例5.3

利用例*5.2* 的结果验证定理*11* 的各个结论.

【解：】由例5.2 得

$$G = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad g_0 = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad d_0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$g_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix} \quad d_1 = \begin{pmatrix} \frac{2}{9} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

验证

$$d_0^T G d_1 = 0, \ g_1^T d_0 = 0, g_0^T g_1 = 0,$$
$$g_1^T d_1 = -g_1^T g_1, g_0^T d_0 = -g_0^T g_0.$$

算法的下降性

- 对于正定二次函数, FR 共轭梯度法与PRP共轭梯度法等价.
- 对于一般函数
  - 二者是不同的;
  - 且由于目标函数的Hesse 矩阵不是常数矩阵, 因而迭代过程中产生的方向不再是共轭方向;
  - 在解$\boldsymbol{x}^*$ 的附近, Hesse 矩阵的近似于$G(\boldsymbol{x}^*)$, 因此方向接近共轭方向;
  - 算法产生的方向都满足

$$g_k^T d_k = (-g_k + \beta_{k-1} d_{k-1})^T g_k = -g_k^T g_k < 0,$$

故d_k 都是下降方向.

问题：如果初始方向不是负梯度方向，那么按FR 或PRP 方法产生的方向还是共轭梯度方向吗？

例题

例5.4

问题

$$\min f(x,y) = x^2 + y^2.$$

初始点为$x_0 = (1,0)^T$, $g_0 = (2,0)^T$, 取$d_0 = (-1,-1)^T$. 用FR共轭梯度公式计算d_1, 并验证d_0, d_1 是否共轭.

【解：】记

$$G = \begin{pmatrix} 2 & \\ & 2 \end{pmatrix}.$$

由于$g_0^T d_0 = -2 < 0$, 故而d_0 是下降方向. 按精确一维搜索

$$\alpha_0 = \arg\min f(x_0 + \alpha d_0) = \frac{1}{2}.$$

从而, $x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)^T$.

例题

计算

$$g_1 = (1, -1)^T,\ \beta_0 = \frac{1}{2},\ d_1 = -g_1 + \beta_0 d_0 = \left(-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right)^T.$$

但是

$$d_1^T G d_0 = 2 \neq 0,$$

即d_0, d_1 不是关于G 共轭的.

本题说明：若$d_0 \neq -g_0$, 那么用FR (或PRP) 共轭梯度公式得到的搜索方向不具有共轭性.

PRP 共轭梯度法

将FR 共轭梯度法步3 中, 用PRP 公式

$$\beta_{k-1} = \begin{cases} \frac{g_k^T(g_k - g_{k-1})}{g_{k-1}^T g_{k-1}}, & \text{当} k > 0\text{时}, \\ 0, & \text{当} k = 0\text{时}. \end{cases}$$

就得到PRP 共轭梯度法.

非二次函数的共轭梯度法

对正定二次函数, FR 共轭梯度法和PRP 共轭梯度法是等价的. 对于一般函数, 二者是不相同的.

对一般函数, 迭代过程中所产生的方向不再是共轭方向. 使用精确搜索时, 有

$$g_k^T d_k = g_k^T(-g_k + \beta_{k-1} d_{k-1}) = -g_k^T g_k < 0,$$

故二者都是下降算法.

非二次函数的共轭梯度法

若采用非精确搜索，则FR 方法和PRP 方法都可能产生上升方向. 对于FR 方法，只有使用如下的强Wolfe 搜索

- $f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k) \geq -\mu \alpha_k \nabla f_k^T d_k, \quad \text{(sw.a)}$
- $|\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq -\sigma \nabla f_k^T d_k \quad \text{(sw.b)}$
- $\mu \in \left(0, \frac{1}{2}\right), \sigma \in (\mu, 1),$

且保证$0 < \sigma < 1/2$ 时，得到的方向是下降方向.
实际计算表明，PRP 算法一般优于FR 算法.

例题

例5.5

分别用FR、PRP共轭梯度法求$Rosenbrock$ 函数

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

的最小值，初始点为$x_0 = (0,0)^T$.

【解：】第一步与例3.3 相同.

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} -400(x_2 - x_1^2)x_1 - 2(1 - x_1) \\ 200(x_2 - x_1^2) \end{pmatrix},$$

$f_0 = f(0,0) = 1$, $\nabla f_0 = (-2,0)^T$.

例题

$d_0 = (2,0)^T$. 对于任意的$\alpha > 0$,

$$f(x_0 + \alpha d_0) = f(2\alpha, 0) = 1600\alpha^4 + 4\alpha^2 - 4\alpha + 1.$$

令$f'(\alpha) = 0$, 得

$$6400\alpha^3 + 8\alpha - 4 = 0.$$

其近似解为$\alpha_0 \approx 0.0806$.

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 = (0.1612, 0)^T.$$

例题

【FR方法】则$\nabla f_1 = (0.0007, -5.2024)^T$,

$$\beta_0 = \frac{\|g_1\|^2}{\|g_0\|^2} = 6.7662.$$

$$d_1 = -\nabla f_1 + \beta_0 d_0 = \begin{pmatrix} 13.5317 \\ 5.2024 \end{pmatrix}.$$

做精确搜索得$\alpha_1 = 0.0097$. 故

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 d_1 = (0.2927, 0.0505)^T.$$

例题

$\nabla f_2 = (2.7021, -7.0312)^T,$

$$\beta_1 = \frac{\|g_2\|^2}{\|g_1\|^2} = 2.0964.$$

$$d_2 = -\nabla f_2 + \beta_1 d_1 = \begin{pmatrix} 25.6664 \\ 17.9378 \end{pmatrix}.$$

做精确搜索得$\alpha_2 = 0.0052$. 故

$$x_3 = x_2 + \alpha_2 d_2 = (0.4252, 0.1431)^T, \ \nabla f_3 = \begin{pmatrix} 5.2576 \\ -7.5351 \end{pmatrix}$$

$$\cdots\cdots$$

例题

【PRP方法】则$\nabla f_1 = (0.0007, -5.2024)^T$,

$$\beta_0 = \frac{g_1^T(g_1 - g_0)}{\|g_0\|^2} = 6.7662.$$

$$d_1 = -\nabla f_1 + \beta_0 d_0 = \begin{pmatrix} 13.5317 \\ 5.2024 \end{pmatrix}.$$

做精确搜索得$\alpha_1 = 0.0097$. 故

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 d_1 = (0.2927, 0.0505)^T.$$

例题

$$\nabla f_2 = (2.7021, -7.0312)^T,$$

$$\beta_1 = \frac{g_2^T(g_2 - g_1)}{\|g_1\|^2} = 0.7449.$$

$$d_2 = -\nabla f_2 + \beta_1 d_1 = \begin{pmatrix} 7.3776 \\ 10.9064 \end{pmatrix}.$$

做精确搜索得$\alpha_2 = 0.1151$. 故

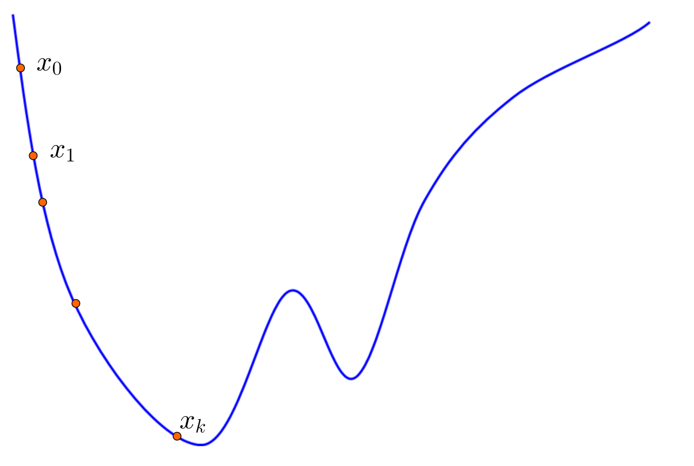
$$x_3 = x_2 + \alpha_2 d_2 = (1.1420, 1.3061)^T. \ \nabla f_3 = \begin{pmatrix} -0.5491 \\ 0.3648 \end{pmatrix}.$$

重开始的共轭梯度法

改进思路

- 共轭梯度法对正定二次函数可以有限终止;
- 在最优解的附近, 目标函数与一个正定二次函数很接近;
- 初始方向如果不取负梯度方向, 即便应用于二次函数, 也往往不能产生n 个共轭方向;
- 当迭代点接近解时, 重新取负梯度方向, 则接下来将产生近似共轭方向, 从而提高算法的效率.

重开始的共轭梯度法



重开始的共轭梯度法

对共轭梯度法进行修改:
每迭代n 次或$n+1$ 次, 就重新取共轭梯度方向为搜索方向.
改进后的算法称为n 步重新开始的共轭梯度法.

重开始的共轭梯度法

n 步重开始的FR 共轭梯度法

给定误差ϵ

【步 1】 给定初始点x_0, $k=0$.

【步 2】 计算$g_k=g(x_k)$, 若$\|g_k\|\le\epsilon$, 则令$x^*=x_k$, 停; 否则, 转步3.

【步 3】 若k 是n 的倍数, 则$d_k=-g_k$, 否则, 令

$$d_k=-g_k+\frac{g_k^Tg_k}{g_{k-1}^Tg_{k-1}}d_{k-1}.$$

【步 4】 由精确一维搜索确定步长α_k, 满足

$$f(x_k+\alpha_kd_k)=\min_{\alpha>0}f(x_k+\alpha d_k).$$

【步 5】 令$x_{k+1}=x_k+\alpha_kd_k$, $k=k+1$, 转步2.

例题

例5.6

分别用PRP 和重开始PRP 共轭梯度法求四维$Rosenbrock$ 函数

$$\begin{aligned} f(x) = & 100\left(x_1^2 - x_2\right)^2 + (1-x_1)^2 + 90\left(x_3^2 - x_4\right)^2 + (1-x_3)^2 \\ & + 10.1\left[(x_2-1)^2 + (x_4-1)^2\right] + 19.8\,(x_2-1)(x_4-1) \end{aligned}$$

的最小值，初始点为$x_0 = (-3, -1, -3, -1)^T$.

引言

引入拟Newton 法的目的:

- 克服Newton 法的以下两个缺点:
  - 计算量大的问题(计算Hesse 矩阵);
  - Hesse 矩阵可能不正定
- 保持Newton法收敛速度快的优点.

解决方案: Davidon(1959): 近似Hesse 矩阵.

拟Newton 法的基本思想

统一公式

最速下降法和阻尼Newton 法的迭代公式可以统一写成

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k H_k g_k,$$

其中, α_k 为步长, $g_k = \nabla f_k$, H_k 为n 阶对称矩阵.

- 最速下降法: $H_k = I$;
- 阻尼Newton 法: $H_k = G_k^{-1}$;
- L-M 方法: $H_k = (G_k + \mu_k I)^{-1}$.

启发：

若H_k 的选取既能逐步逼近G_k^{-1} 又不需要计算二阶导数，则算法有可能

- 比最速下降法快;
- 比Newton 法计算简单，且整体（全局）收敛性好.

拟Newton 方程

模拟Newton 方向生成的途径. 将$f(x)$ 在x_{k+1} 处展开为二次函数

$$\begin{aligned} f(x) \approx & f\left(x_{k+1}\right)+g_{k+1}^{\mathrm{T}}\left(x-x_{k+1}\right) \\ & +\frac{1}{2}\left(x-x_{k+1}\right)^{\mathrm{T}} G_{k+1}\left(x-x_{k+1}\right). \end{aligned}$$

对两边求导, 得

$$g(x) \approx g_{k+1}+G_{k+1}^{-1}\left(x-x_{k+1}\right).$$

令$x=x_k, s_k=x_{k+1}-x_k, y_k=g_{k+1}-g_k$, 得

$$G_{k+1}^{-1} y_k \approx s_k.$$

于是要求Hesse 矩阵的逆矩阵H_{k+1} 满足关系式

$$H_{k+1}y_k = s_k. \quad (\text{拟Newton 方程})$$

令$B_{k+1} = H_{k+1}^{-1}$, 则得到

$$B_{k+1}s_k = y_k,$$

其中, B_{k+1} 为Hesse 矩阵的近似.

H_k 须满足的条件

(1) $\{H_k\}$ 都是对称正定矩阵;

(2) H_{k+1} 由H_k 经简单形式修正而得,

$$H_{k+1} = H_k + E_k, \quad (\text{修正公式})$$

其中E_k 称为修正矩阵.

(3) H_{k+1} 满足拟Newton 方程

$$H_{k+1} y_k = s_k,$$

其中, $s_k = \alpha_k d_k = x_{k+1} - x_k$, $y_k = g_{k+1} - g_k$.

显然，拟Newton 方程有无穷多个解.

秩1 校正

- 一般形式

$$H_{k+1} = H_k + \sigma v v^T.$$

- 将它代入拟Newton 方程，有

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(s_k - H_k y_k)(s_k - H_k y_k)^T}{(s_k - H_k y_k)^T y_k}$$

- 对于B_{k+1} 有校正公式

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k}$$

秩1 校正算法

算法描述

给定控制误差$\epsilon > 0$.

步 1 给定初始点x_0, 初始矩阵H_0(通常取单位矩阵), 计算g_0, 令$k = 0$.

步 2 令$d_k = -H_k g_k$.

步 3 由精确一维搜索确定步长α_k,

$$f(x_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha d_k),$$

步 4 令$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

步 5 若$\|g_{k+1}\| \leq \epsilon$, 则令$x^* = x_{k+1}$, 停; 否则, 令

$$s_k = x_{k+1} - x_k, \; y_k = g_{k+1} - g_k.$$

步 6 由秩1 校正公式得H_{k+1}. 令$k = k + 1$, 转步2.

秩1 校正

秩1 校正不能保证H_{k+1} 的正定性, (即使H_k 正定). 这是它的主要缺点. 但是它与信赖域方法结合有较好的数值表现. 对Hesse 矩阵及其逆矩阵的逼近程度较好.

例题

例6.1

用秩1 校正算法求

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + 3$$

的极小点. 初始点为 $x_0 = (1, 2)^T$, $H_0 = I_2$.

f 可写为

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} x + 3.$$

则 $G = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. $g_k = \nabla f(x_k) = Gx_k = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} x_k$.

例题

第一次迭代.

$$d_0 = -g_0 = \begin{pmatrix} -2 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

由于f 是二次函数, 故而

$$\alpha_0 = -\frac{g_0^T d_0}{d_0^T G d_0} = \frac{(2,2)\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}}{(2,2)\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}} = \frac{2}{3}.$$

则$x_1 = x_0 + \alpha d_0 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}$.

例题

秩1 校正.

$$s_0 = \alpha_0 d_0 = \begin{pmatrix} -\frac{4}{3} \\ -\frac{4}{3} \end{pmatrix}, g_1 = Gx_1 = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

$$y_0 = g_1 - g_0 = \begin{pmatrix} -\frac{8}{3} \\ -\frac{4}{3} \end{pmatrix},$$

$$H_1 = H_0 + \frac{(s_0 - H_0 y_0)(s_0 - H_0 y_0)^T}{(s_0 - H_0 y_0)^T y_0} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \\ & 1 \end{pmatrix} (= G^{-1}).$$

例题

第二次迭代. 搜索方向为

$$d_1 = -H_1 g_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

步长为

$$\alpha_1 = -\frac{g_1^T d_1}{d_1^T G d_1} = 1.$$

新的迭代点

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 d_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

此时$g_2 = (0,0)^T$, 也就是说$x^* = x_2$.

例题

例6.2

考虑目标函数

$$f(x) = (x_2 - x_1)^4 + 12x_1x_2 - x_1 + x_2 - 3.$$

取初始点$x_0 = (-0.5262, 0.6014)^T$, 初始矩阵为

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0.1186 & -0.0376 \\ -0.0376 & 0.1191 \end{pmatrix}.$$

用秩*1* 校正计算H_1.

【解：】搜索方向

$$d_0 = -H_0 g_0 = \begin{pmatrix} -0.0413 \\ -0.0320 \end{pmatrix}$$

最优步长为

$$\alpha_0 = \arg\min_{\alpha \geq 0} f(x_0 + \alpha d_0) = 1.009.$$

新的迭代点

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 = \begin{pmatrix} -0.5679 \\ 0.5679 \end{pmatrix}, g_1 = \nabla f(x_1) = \begin{pmatrix} -0.0507 \\ 0.0656 \end{pmatrix}.$$

例题

秩1 校正

$$s_0 = \alpha_0 d_0 = \begin{pmatrix} -0.0417 \\ -0.0322 \end{pmatrix}, y_0 = \begin{pmatrix} -0.5326 \\ -0.3549 \end{pmatrix}.$$

$$H_1 = H_0 + \frac{(s_0 - H_0 y_0)(s_0 - H_0 y_0)^T}{(s_0 - H_0 y_0)^T y_0} = \begin{pmatrix} 0.0331 & 0.0679 \\ 0.0679 & -0.0110 \end{pmatrix}.$$

由于H_1 的$(2,2)$ 元素为负数-0.0110, 故H_1 不是正定的.

DFP 算法

DFP 是Davidon(1959)提出，后来Fletcher 和Powell(1963) 年做出改进，形成了Davidon-Fletcher-Powell 算法，简称DFP 算法．它是第一个被提出的拟Newton 法，也是无约束最优化问题的最有效的算法之一．

算法

DFP 修正公式

思想：

- H_k 满足条件(1),(2),(3)
- 修正项E_k 应有简单的形式. 考虑

$$E_k = \alpha u u^T + \beta v v^T.$$

其中, u, v 为待定向量.

- 代入拟Newton 方程有

$$s_k = H_k y_k + \alpha u u^T y_k + \beta v v^T y_k.$$

DFP 算法

DFP 修正公式

- 取$u = s_k$, $v = H_k y_k$, $\alpha u^T y_k = 1$, $\beta v^T y_k = -1$, 则导出公式

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k}, \quad (\text{DFP修正公式})$$

DFP 算法

算法描述

给定控制误差$\epsilon > 0$.

步 1　给定初始点x_0, 初始矩阵H_0(通常取单位矩阵), 计算g_0, 令$k = 0$.

步 2　令$d_k = -H_k g_k$.

步 3　由精确一维搜索确定步长α_k,

$$f(x_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha d_k),$$

步 4　令$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

步 5　若$\|g_{k+1}\| \leq \epsilon$, 则令$x^* = x_{k+1}$, 停; 否则, 令

$$s_k = x_{k+1} - x_k,\ y_k = g_{k+1} - g_k.$$

步 6　由DFP 修正公式得H_{k+1}. 令$k = k + 1$, 转步2.

例题

例6.3

用 DFP 算法求解

$$\min \quad f(x) = x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1x_2 - 4x_1,$$

取 $x_0 = (1,1)^T$, $H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

【解：】 $g(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 - 2x_2 - 4 \\ -2x_1 + 4x_2 \end{pmatrix}$, $g_0 = \begin{pmatrix} -4 \\ 2 \end{pmatrix}$.

$$d_0 = -H_0 g_0 = \begin{pmatrix} 4 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

例题

(i) 求迭代点x_1, 令

$$\varphi_0(\alpha) = f(x_0 + \alpha d_0) = 40\alpha^2 - 20\alpha - 3,$$

得$\varphi_0(\alpha)$ 的极小点为$\alpha_0 = \frac{1}{4}$(令$\varphi_0'(\alpha)$=0 即可),所以

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 = (2, 0.5)^T, g_1 = (-1, -2)^T,$$
$$s_0 = x_1 - x_0 = (1, -0.5)^T, y_0 = g_1 - g_0 = (3, -4)^T.$$

于是，有DFP 修正公式有

$$H_1 = H_0 - \frac{H_0 y_0 y_0^T H_0}{y_0^T H_0 y_0} + \frac{s_0 s_0^T}{y_0^T s_0} = \frac{1}{100}\begin{pmatrix} 84 & 38 \\ 38 & 41 \end{pmatrix}.$$

例题

下一个搜索方向为

$$d_1 = -H_1 g_1 = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 8 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

求迭代点x_2, 令

$$\varphi_1(\alpha) = f(x_1 + \alpha d_1) = \frac{8}{5}\alpha^2 - 4\alpha - 5.5,$$

其极小点为$\alpha_1 = \frac{5}{4}$, 于是

$$x_2 = x_1 + \alpha_1 d_1 = (4, 2)^T \ g_2 = (0, 0)^T.$$

所以, $x^* = x_2 = (4, 2)^T$, 此时$f^* = -8$.

例题

因$Hesse$ 阵

$$G(x) = G = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}$$

为正定矩阵, $f(x)$ 为严格凸函数, 所以x^* 为整体（全局）极小点.

可以验证，如果再用一次DFP 修正公式, 则

$$H_2 = G^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}^{-1}.$$

算法

据例题可知

- 在更新H_k 的过程中，只需用到矩阵、向量之间的乘法，很容易计算;
- 计算搜索方向时，不需要像Newton 法一样求解线性方程组.

所以DFP 算法(或拟Newton 法)相比Newton 法，每次迭代的计算量显著降低了.

又由于H_k 逐渐逼近G_k^{-1}，从而在解的附近，算法的效率也近似于Newton 法

DFP 算法

DFP 算法的性质

(1) 对于正定二次函数

- 至多经过n 次迭代即终止, 且$H_n = G^{-1}$;
- 保持拟Newton 方程

$$H_i y_j = s_j, \ j = 0, 1, \cdots, i-1$$

对于一般函数

- 保持H_k 的正定性;
- 算法为超线性收敛的;
- 对于凸函数是整体(全局)收敛的;
- 计算量小.

正定继承性

引理2

设

$$H_+ = H - \frac{Hyy^T H}{y^T Hy} + \frac{ss^T}{y^T s},$$

H 为正定矩阵，则H_+ 正定的充分必要条件是

$$y^T s > 0.$$

定理12 (DFP 修正公式的正定继承性)

在DFP 算法中，如果初始矩阵H_0 正定，则整个矩阵列$\{H_k\}$ 都是正定的.

二次终止性：DFP 的共轭性

定理13

将DFP 算法应用与二次函数

$$f(x)=\frac{1}{2}x^TGx+b^Tx+c.$$

并设初始矩阵H_0 是正定的，产生的迭代点是互异的，并设搜索方向为$d_0, d_1, \cdots, d_k$，则

(i) $d_i^TGd_j=0,\ 0\le i<j\le k$;(共轭)

(ii) $H_ky_i=s_i,\ 0\le i\le k-1.$

二次终止性

推论4 (二次终止性)

在上述定理的条件下，我们有

(i) 对于正定二次函数，*DFP* 算法至多迭代n 次就可得到极小点，即存在k_0, $(0 \le k_0 \le n)$, 使得$x_{k_0} = x^*$;

(ii) 若$x_k \neq x^*$, $0 \le k \le n-1$, 则$H_n = G^{-1}$.

例题

例6.4

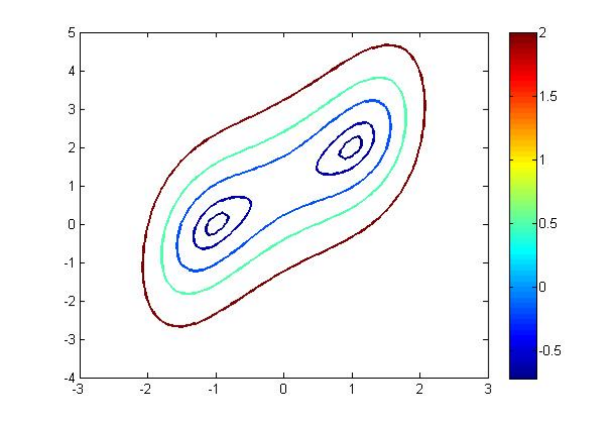
目标函数为

$$f(x) = \frac{x_1^4}{4} + \frac{x_2^2}{2} - x_1x_2 + x_1 - x_2.$$

a. 利用$matlab$ 绘制函数f 在-0.72、-0.6、-0.2、0.5 和2 处的等高线图，根据图确定函数f 的极小点;
b. 用解析方法求$f(x)$ 的极小点;
c. 令起始点分别为$x^{(0)} = [0,0]^T$ 和$x^{(0)} = [1.5,1]^T$，$H_0 = I_2$，利用DFP 算法求函数f 的极小点. 观察在这两个起始点下，算法是否收敛到同一个点. 如果不是，试分析原因.

例题

【解：】 a. 如下图



例题

b. 令

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} x_1^3 - x_2 + 1 \\ x_2 - x_1 - 1 \end{pmatrix} = 0,$$

即

$$\begin{cases} x_1^3 - x_2 + 1 = 0, \\ x_2 - x_1 - 1 = 0 \end{cases}$$

解得

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \text{ 或 } \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

例题

f 的Hesse 矩阵为

$$H = \begin{pmatrix} 3x_1^2 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

在这三点处, Hesse 矩阵分别为

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \text{ 和 } \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

第一个矩阵不是正定的，后两者为正定矩阵，从而f 的极小点为

$$(1,2)^T \text{ 和 } (-1,0)^T.$$

而$(0,1)^T$ 为鞍点.

例题

c. （计算机演示）.

Broyden 族, BFGS 算法

Broyden 族修正公式(1967年)

$$H_{k+1}^{\varphi} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k} + \varphi w_k w_k^T,$$

其中, φ 为实数,

$$w_k = (y_k^T H_k y_k)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{s_k}{y_k^T s_k} - \frac{H_k y_k}{y_k^T H_k y_k} \right).$$

Broyden 族, BFGS 算法

- 显然, 取$\varphi = 0$ 时, 就是DFP 公式

$$H_{k+1}^{\varphi} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k}.$$

- 取$\varphi = y_k^T s_k/(s_k - H_k y_k)^T y_k$, 得

$$H_{k+1} = H_k - \frac{(s_k - H_k y_k)(s_k - H_k y_k)^T}{y_k^T (s_k - H_k y_k)} \quad \text{(秩1 修正公式)}.$$

BFGS 公式

取 $\varphi = 1$ 时, 得

$$
\begin{aligned}
H_{k+1}^{\varphi} &= H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k} + w_k w_k^T \\
&= \left(I - \frac{s_k y_k^T}{s_k^T y_k}\right) H_k \left(I - \frac{y_k s_k^T}{s_k^T y_k}\right) + \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k}.
\end{aligned}
$$

称为BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) 公式.
BFGS 算法是目前公认的最好的拟Newton 算法.

算例

例6.5

分别用DFP 方法，$BFGS$ 方法求$Rosenbrock$ 函数的极小点，初始点为$x_0 = (0,0)^T$. 分别使用精确搜索和非精确搜索.

算例

例6.6

分别用*BFGS* 拟*Newton* 法，*Newton* 法，*FR*共轭梯度法，负梯度方向搜索极小化*Rosenbrock* 函数. 使用*Armijo* 非精确搜索，初始点为$x_0 = (-1.2, 1)^T$，终止条件为$\|g(x_k)\| \leq 10^{-12}$.

【比较：】四种方法分别需要35，22，249，1334 次迭代.

表：最后十次迭代$\|x_k - x^*\|$

BFGS	Newton	FR(非精确)	负梯度方向
0.017634843	0.598721237	1.03E-10	2.42E-12
0.040317145	0.463495124	9.97E-11	2.42E-12
0.021832856	0.251812805	4.37E-11	2.42E-12
0.001541412	0.175828541	8.75E-12	2.42E-12
0.000432563	0.034279629	8.69E-12	2.42E-12
4.46E-06	0.014422311	8.68E-12	2.42E-12
1.64E-08	1.82E-04	6.70E-12	2.41E-12
5.20E-11	1.17E-06	2.21E-12	2.41E-12
1.06E-13	1.22E-12	1.09E-12	2.41E-12
3.51E-16	1.11E-16	1.16E-12	2.41E-12

算例

例6.7

求问题$f(x) = \frac{1}{2}x^T x + \frac{\sigma}{4}(x^T A x)^2$ 的极小值，其中$\sigma = 10^4$，

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 1 & 0 & 0.5 \\ 1 & 4 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0.5 & 3 & 0 \\ 0.5 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

初始点为$x_0 = (\cos 70°, \sin 70°, \cos 70°, \sin 70°)^T$.

一个神奇的性质

定理14 (Dixon 定理)

设$f(\boldsymbol{x})$ 为R^n 上连续可微函数, 给定x_0, H_0, 则由$Broyden$ 族算法产生的点列$\{\boldsymbol{x}_k\}$ 于参数φ 无关, 即$Broyden$ 族产生相同的点列.

利用Dixon 定理, 我们可以把DFP 算法的性质推广到整个Broyden族算法. 比如具有二次终止性、整体收敛性和超线性收敛性等性质.

对Hesse 矩阵的近似B

- 将对H 的BFGS 校正公式中的s 和y 互换，并将H 换成B，得对Hesse 矩阵的DFP校正公式

$$B_{k+1} = \left(I - \frac{y_k s_k^T}{y_k^T s_k}\right) B_k \left(I - \frac{s_k y_k^T}{y_k^T s_k}\right) + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k}$$

- 将对H 的DFP 校正公式中的s 和y 互换，并将H 换成B，得对Hesse 矩阵的BFGS 校正公式

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{y_k y_k^T}{s_k^T y_k}.$$