第九章 一维搜索(line search)

$$(LS) \quad \min_{\lambda} f(x^{(k)} + \lambda d^{(k)})$$

如果求得的 λ_k ,使得

$$f\left(x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}\right) = \min_{\lambda} f\left(x^{(k)} + \lambda d^{(k)}\right)$$

如果存在礼, 使得

$$f\left(x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}\right) < f\left(x^{(k)}\right)$$

则称该一维搜索为非精确一维搜索(Inexact Line Search).

• 一元函数的极值问题,全局最优步长难求. 通常只能求得局部(近似)最优步长。

- 精确一维搜索通常有两种实现方式:
- (1) 试探法:按某种方式找试探点,通过一系列试探点来确定极小点。
- (2)函数逼近法(插值法):用某种较简单的曲线逼近原来的函数曲线,通过求逼近函数的极小点来估计目标函数的极小点。

基本性质 $f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k + \alpha d_k), \quad \forall \ \alpha > 0$

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

一维搜索的闭性

定义: 算法映射 $M: E^n \times E^n \to 2^{E^n}$ 定义为: $M(x,d) = \{y \mid y = x + \overline{\lambda}d,$ $\overline{\lambda}$ 满足 $f(x + \overline{\lambda}d) = \min_{\lambda \geq 0} f(x + \lambda d)\}.$

定理: 设f(x)是定义在 E^n 上的连续函数, $d \neq 0$,则算法映射M在(x,d)处是闭的。

证明: 设 $\{x^{(k)}\}$ 和 $\{d^{(k)}\}$ 是两个序列,且 $\{x^{(k)},d^{(k)}\}$ $\to (x,d)$,又设 $y^{(k)} \in M(x^{(k)},d^{(k)})$,且 $y^{(k)} \to y$ 。 以下证明 $y \in M(x,d)$ 。

对每个
$$k$$
, 存在 $\lambda_k \ge 0$, 使得 $y^{(k)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$ (1)

$$\lambda_k = \frac{\|y^{(k)} - x^{(k)}\|}{\|d^{(k)}\|}$$

$$\Rightarrow \lim_{k \to \infty} \lambda_k = \overline{\lambda} = \frac{\|y - x\|}{\|d\|}$$

(1) 中令
$$k \to \infty$$
, 得 $y = x + \overline{\lambda}d$

根据M的定义,对每个k及 $\lambda \geq 0$,有 $f\left(y^{(k)}\right) \leq f\left(x^{(k)} + \lambda d^{(k)}\right)$

由于f连续, $\diamondsuit k \to \infty$,得 $f(y) \le f(x + \lambda d)$

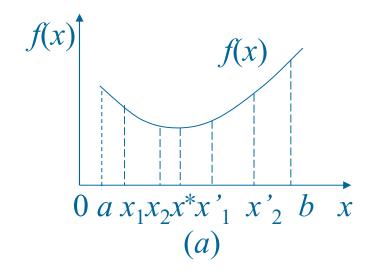
$$\Rightarrow f(x + \overline{\lambda}d) = \min_{\lambda \ge 0} f(x + \lambda d)$$

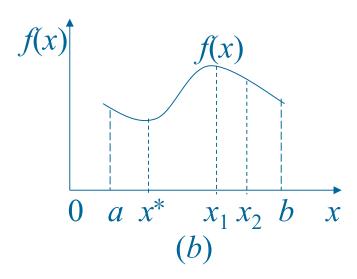
$$\Rightarrow$$
 $y \in M(x,d)$.

试探法

0.618法(黄金分割法)(Golden Section Method)

定义: 称f(x)在闭区间[a,b]上是单峰 (unimodal) 的,是指f(x) 在[a,b]内有唯一的一点x*,使得对任意的 $x_1, x_2 \in [a,b]$, $x_1 < x_2$,有 当 $x_2 \le x*$ 时, $f(x_1) > f(x_2)$, 当 $x* \le x_1$ 时, $f(x_2) > f(x_1)$ 。





性质:通过计算区间[a,b]内两个不同点处的函数值,就能确定一个包含极小点的子区间。

定理: 设f(x)是[a,b]上的单峰函数, $x_1, x_2 \in [a,b]$ 且 $x_1 < x_2$,若 $f(x_1) > f(x_2)$,则对任意 $x \in [a,x_1]$,有 $f(x) > f(x_2)$,若 $f(x_1) \le f(x_2)$,则对任意 $x \in [x_2,b]$,有 $f(x) \ge f(x_1)$ 。

0.618法的基本思想:

通过取试探点使包含极小点的区间不断缩短,当区间长度小到一定程度时,区间上各点的函数值均接近极小值,因此任意一点都可以作为极小点的近似。

0.618法的计算公式:

设f在[a,b]上单峰,极小点 $\overline{x} \in [a,b]$,设进行第k次迭代时,有 $\overline{x} \in [a_k,b_k]$,取试探点 $\lambda_k,\mu_k \in [a_k,b_k]$,规定 $\lambda_k < \mu_k$,计算 $f(\lambda_k),f(\mu_k)$ 。

- 1. 若 $f(\lambda_k) > f(\mu_k)$,则有 $\overline{x} \in [\lambda_k, b_k]$,令 $a_{k+1} = \lambda_k, b_{k+1} = b_k$.
- 2. 若 $f(\lambda_k) \le f(\mu_k)$, 则有 $\overline{x} \in [a_k, \mu_k]$, 令 $a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = \mu_k$.

确定 λ_k, μ_k ,使它们满足:

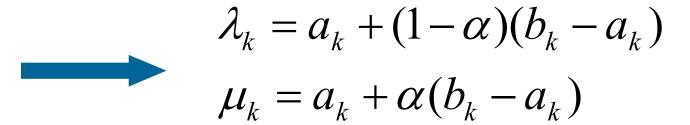
- (1) λ_k, μ_k 在[a_k, b_k]中的位置是对称的,即 $b_k \mu_k = \lambda_k a_k$.
- (2) 每次迭代区间长度缩短比例相同,即 $b_{k+1} a_{k+1} = \alpha(b_k a_k)$.

$$\begin{cases} b_k - \mu_k = \lambda_k - a_k \\ b_{k+1} - a_{k+1} = \alpha(b_k - a_k) \end{cases} \tag{1}$$

$$b_{k+1} - a_{k+1} = \alpha(b_k - a_k) \tag{2}$$

当
$$f(\lambda_k) > f(\mu_k)$$
时, $a_{k+1} = \lambda_k$, $b_{k+1} = b_k$,
代入(2)得 $b_k - \lambda_k = \alpha(b_k - a_k)$

当
$$f(\lambda_k) \le f(\mu_k)$$
时, $a_{k+1} = a_k$, $b_{k+1} = \mu_k$,代入(2)得 $\mu_k - a_k = \alpha(b_k - a_k)$



设在第k次迭代得出 $f(\lambda_k) \leq f(\mu_k)$,则

$$[a_{k+1},b_{k+1}] = [a_k,\mu_k]$$

在第k+1次迭代中,需要取试探点 λ_{k+1} , μ_{k+1}

$$\mu_{k+1} = a_{k+1} + \alpha(b_{k+1} - a_{k+1}) = a_k + \alpha(\mu_k - a_k)$$
$$= a_k + \alpha(a_k + \alpha(b_k - a_k) - a_k)$$

$$= a_k + \alpha^2 (b_k - a_k).$$

$$\lambda_k = a_k + (1 - \alpha)(b_k - a_k)$$

$$\mu_k = a_k + \alpha(b_k - a_k)$$

若令
$$\alpha^2 = 1 - \alpha$$
,则 $\mu_{k+1} = \lambda_k$,

$$\Rightarrow \mu_{k+1}$$
 不必重新计算,减少计算量。

设在第k次迭代得出 $f(\lambda_k) > f(\mu_k)$,则 $[a_{k+1},b_{k+1}] = [\lambda_k,b_k]$

在第k+1次迭代中,需要取试探点 λ_{k+1} , μ_{k+1}

$$\lambda_{k+1} = a_{k+1} + (1-\alpha)(b_{k+1} - a_{k+1}) = \lambda_k + (1-\alpha)(b_k - \lambda_k)$$

$$= a_k + (1-\alpha)(b_k - a_k) + (1-\alpha)(b_k - a_k - (1-\alpha)(b_k - a_k))$$

$$= a_k + (1-\alpha)(b_k - a_k) + (1-\alpha)\alpha(b_k - a_k)$$

$$= a_k + (1-\alpha^2)(b_k - a_k).$$

 $\lambda_k = a_k + (1 - \alpha)(b_k - a_k)$ $\mu_k = a_k + \alpha(b_k - a_k)$

若令 $\alpha = 1 - \alpha^2$,即 $\alpha^2 = 1 - \alpha$,则 $\lambda_{k+1} = \mu_k$, $\Rightarrow \lambda_{k+1}$ 不必重新计算,减少计算量。

解方程
$$\alpha^2 = 1 - \alpha$$
 得
$$\alpha = \frac{-1 \pm \sqrt{5}}{2}$$

$$\therefore \alpha > 0, \quad \therefore \alpha = \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} \approx 0.618$$

$$\lambda_{k} = a_{k} + 0.382(b_{k} - a_{k})$$

$$\mu_{k} = a_{k} + 0.618(b_{k} - a_{k})$$

步骤:

1.置初始区间[a_1,b_1]及精度要求L>0,计算

$$\lambda_1 = a_1 + 0.382(b_1 - a_1), \mu_1 = a_1 + 0.618(b_1 - a_1),$$

计算 $f(\lambda_1)$ 和 $f(\mu_1)$ 。 令 $k = 1$ 。

- 2.若 $b_k a_k < L$,则停止计算;否则当 $f(\lambda_k) > f(\mu_k)$ 时,转3;当 $f(\lambda_k) \le f(\mu_k)$ 时,转4。
- 3.置 $a_{k+1} = \lambda_k, b_{k+1} = b_k, \lambda_{k+1} = \mu_k,$ $\mu_{k+1} = a_{k+1} + 0.618(b_{k+1} a_{k+1}), 计算f(\mu_{k+1}), 转5.$
- 4.置 $a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = \mu_k, \mu_{k+1} = \lambda_k,$
- $\lambda_{k+1} = a_{k+1} + 0.382(b_{k+1} a_{k+1})$, 计算 $f(\lambda_{k+1})$,转5。
 - 5.置k = k + 1,返回2。

优点:不要求函数可微,甚至当函数不连续时, 0.618法仍可应用。

缺点:收敛比较慢, 0. 618法只适用于单峰函数, 所以需要先确定单峰区间, 再使用0. 618法的计算公式。

例: $\min e^x - 5x$ $(1 \le x \le 2), L \le 0.04.$

函数逼近法

一. 牛顿法

基本思想: 在极小点附近用二阶**Taylor**多项式近似。 $\min f(x)$

得 $\varphi(x)$ 的驻点,记作 $x^{(k+1)}$,则

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

算法收敛定理

定理:设A为X上的一个算法, Ω 为解集合,给定

初点 $x^{(1)} \in X$,进行如下迭代:

如果下面的条件成立:

- 1. 序列 $\{x^{(k)}\}$ 含于X的某个紧子集中;
- 2. 存在一个连续函数 α , 它是关于 Ω 和 Δ 的下降函数;
- 3. 映射A在 Ω 的补集上是闭的。

则序列 $\{x^{(k)}\}$ 的任一收敛子序列的极限属于 Ω 。

定理: 设f(x)存在连续三阶导数, \bar{x} 满足 $f'(\bar{x}) = 0$, $f''(\bar{x}) \neq 0$,初点 $x^{(1)}$ 充分接近 \bar{x} ,则牛顿法产生的 序列 $\{x^{(k)}\}$ 至少以二级收敛速度收敛于 \bar{x} 。

证明: 牛顿法可定义为算法映射

$$A(x) = x - \frac{f'(x)}{f''(x)}$$

设解集合为 $\Omega = \{\bar{x}\}$

定义函数
$$\alpha(x) = |x - \overline{x}|$$

读
$$x^{(k)} \neq \overline{x}, x^{(k+1)} \in A(x^{(k)})$$

$$\alpha(x^{(k+1)}) = |x^{(k+1)} - \overline{x}| \qquad x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f'(x^{(k)})}{f''(x^{(k)})}$$

$$= |x^{(k)} - \frac{f'(x^{(k)})}{f''(x^{(k)})} - \overline{x}| = \frac{1}{|f''(x^{(k)})|} |x^{(k)} f''(x^{(k)}) - f'(x^{(k)}) - \overline{x} f''(x^{(k)})|$$

$$= \frac{1}{|f''(x^{(k)})|} |f'(\overline{x}) - [f'(x^{(k)}) + (\overline{x} - x^{(k)}) f''(x^{(k)})]$$

$$= \frac{1}{|f''(x^{(k)})|} \times \frac{1}{2} (\overline{x} - x^{(k)})^2 |f'''(\xi)| \quad \sharp \oplus \xi \text{ at } x \text{ at } x$$

:: f''(x)和f'''(x)连续, $f''(\bar{x}) \neq 0$, :: 当 $x^{(k)}$ 接近 \bar{x} 时,存在 $k_1, k_2 > 0$ 使得在包含 \bar{x} 和 $x^{(k)}$ 的闭区间上的每一点x处,有 $|f''(x)| \geq k_1, |f'''(x)| \leq k_2$

$$\left| |x^{(k+1)} - \overline{x}| \le \frac{k_2}{2k_1} (\overline{x} - x^{(k)})^2 \right|$$

取初点x(1)充分接近x, 使得

$$\frac{k_2}{2k_1} |\bar{x} - x^{(1)}| < 1$$

$$\therefore \{x^{(k)}\} \subset X = \{x \mid |x - \overline{x}| \le |x^{(1)} - \overline{x}|\}$$

且有 $|x^{(k+1)} - \overline{x}| < |x^{(k)} - \overline{x}|$

 $\therefore \alpha$ 是下降函数,且X为紧集,A(x)在X上连续

$$\therefore \{x^{(k)}\} \to \overline{x}$$
 (由算法收敛定理)。

步骤:

- 1.给定初点 $x^{(0)}$,允许误差 $\varepsilon > 0$,置k = 0。
- 2.若 $|f'(x^{(k)})| < \varepsilon$,则停止计算,得点 $x^{(k)}$;否则转3.
- 3.计算点*x*^(k+1)

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

置k = k + 1,返回2。

缺点:初点选择十分重要。如果初始点靠近极小点,则可能很快收敛;如果初始点远离极小点,迭代产生的点列可能不收敛于极小点。

例: $\min e^x - 5x$ $(1 \le x \le 2), \varepsilon < 0.01$.

解: 取初始点 $x^{(0)} = 2$

k	$\chi^{(k)}$	$f'(x^{(k)})$	$f''(x^{(k)})$
0	2	2.388	7.388
1	1.677	0.349	5.349
2	1.612	0.012	5.012
3	1.6096	-0.00002	

x = 1.6096为近似解。

例:
$$f(x) = \min_{0}^{x} \int_{0}^{x} \operatorname{arctg} t \, dt$$
 最优解 $x^* = 0$.

用Newton法求解:
$$f'(x) = arctg x$$
, $f''(x) = \frac{1}{1+x^2}$

k	\mathcal{X}_k	$f'(x_k)$	$1/f''(x_k)$
1	1	0.7854	2
2	-0.5708	-0.5178	1.3258
3	0.1169	0.1163	1.0137
4	-0.001061		

k	\mathcal{X}_k	$f'(x_k)$	$1/f''(x_k)$
1	2	1.1071	5
2	-3.5357	-1.2952	13.50
3	13.95		

二. 抛物线法

基本思想: 在极小点附近用二次三项式 $\varphi(x)$ 逼近目标函数,

令
$$\varphi(x)$$
与 $f(x)$ 在三点 $x^{(1)} < x^{(0)} < x^{(2)}$ 处有相同的函数值,并假设 $f(x^{(1)}) > f(x^{(0)}), \quad f(x^{(0)}) < f(x^{(2)}).$

求a, b, c

$$x^{(3)} = \overline{x}^{(k)} = \frac{B_1 + B_2 + B_3}{2(C_1 + C_2 + C_3)}.$$

收敛准则:
$$|x^{(3)} - x^{(0)}| < \varepsilon$$

学院定
$$x_0, x_1, x_2, x_1 < x_0 < x_2, \varepsilon > 0$$

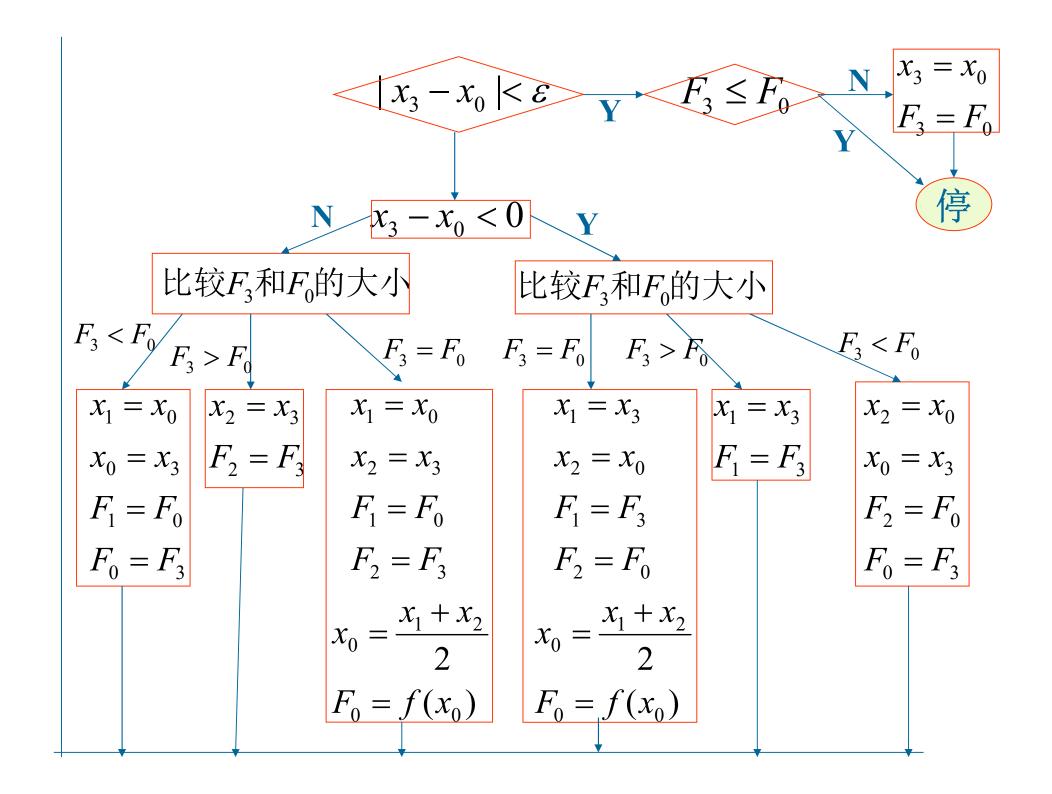
$$F_0 = f(x_0), F_1 = f(x_1), F_2 = f(x_2)$$

$$F_0 \le F_1, \quad F_0 \le F_2$$

$$A = 2[(x_0 - x_2)F_1 + (x_2 - x_1)F_0 + (x_1 - x_0)F_2]$$

$$x_3 = \frac{1}{A}[(x_0^2 - x_2^2)F_1 + (x_2^2 - x_1^2)F_0 + (x_1^2 - x_0^2)F_2]$$

$$F_3 = f(x_3)$$



例: $\min e^x - 5x$ $(1 \le x \le 2), \varepsilon = 0.04.$

解: 取初始点 $x_1 = 1, x_0 = 1.5, x_2 = 2$

$$k$$
 x_1 x_0 x_2 F_1 F_0 F_2 A x_3 F_3
 0 1 1.5 2 -2.282 -3.019 -2.612 0.569 1.573 -3.044
 1 $1.51.573$ 2 -3.019 -3.044 -2.612 0.084 1.608 -3.048

x = 1.608为近似解。

三次插值法

选取两个初始点
$$x_1$$
和 $x_2(x_1 < x_2)$,使得 $f'(x_1) < 0$ 及 $f'(x_2) > 0$.
令 $\varphi(x) = a(x - x_1)^3 + b(x - x_1)^2 + c(x - x_1) + d$ 使得
 $\varphi(x_1) = f(x_1)$, $\varphi'(x_1) = f'(x_1)$
 $\varphi(x_2) = f(x_2)$, $\varphi'(x_2) = f'(x_2)$
得
$$\begin{cases} d = f(x_1) \\ c = f'(x_1) < 0 \\ a(x_2 - x_1)^3 + b(x_2 - x_1)^2 + c(x_2 - x_1) + d = f(x_2) \\ 3a(x_2 - x_1)^2 + 2b(x_2 - x_1) + c = f'(x_2) \end{cases}$$

求
$$\varphi(x)$$
的极小点,

 $\Rightarrow \overline{x}$ 为极小点。

$$\varphi'(x) = 3a(x - x_1)^2 + 2b(x - x_1) + c$$

$$\varphi''(x) = 6a(x - x_1) + 2b.$$

若
$$a = 0$$
,则有 $\overline{x} - x_1 = -\frac{c}{2b}$, $\varphi''(\overline{x}) = 2b$,
由于 $c = f(x') < 0$, $2b(x_2 - x_1) + c = f'(x_2) > 0$
 $\therefore 2b = \frac{f'(x_2) - c}{x_2 - x_1} > 0$,

求 $\varphi(x)$ 的极小点,

$$\varphi'(x) = 3a(x - x_1)^2 + 2b(x - x_1) + c$$

$$\varphi''(x) = 6a(x - x_1) + 2b.$$

若
$$a \neq 0$$
,则有 $\overline{x} - x_1 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 3ac}}{3a}, \varphi''(\overline{x}) = \pm 2\sqrt{b^2 - 3ac},$

为使 $\varphi''(\bar{x}) > 0$,应取

$$\overline{x} - x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 3ac}}{3a} = \frac{-c}{b + \sqrt{b^2 - 3ac}}.$$

 $\Rightarrow \bar{x}$ 为极小点。

$$\overline{x} - x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 3ac}}{3a} = \frac{-c}{b + \sqrt{b^2 - 3ac}}.$$

步骤:

1.给定初始点 $x^{(1)}, x^{(2)}$,计算 $f(x^{(1)}), f(x^{(2)}), f'(x^{(1)}), f'(x^{(2)})$ 要求满足条件:

$$x^{(2)} > x^{(1)}, f'(x^{(1)}) < 0, f'(x^{(2)}) > 0,$$

给定允许误差 $\delta > 0$.

2.计算
$$s = \frac{3[f(x^{(2)}) - f(x^{(1)})]}{x^{(2)} - x^{(1)}}, \quad z = s - f'(x^{(1)}) - f'(x^{(2)}),$$

$$w^{2} = z^{2} - f'(x^{(1)})f'(x^{(2)}),$$

$$\bar{x} = x^{(1)} + (x^{(2)} - x^{(1)}) \left(1 - \frac{f'(x^{(2)}) + w + z}{f'(x^{(2)}) - f'(x^{(1)}) + 2w}\right).$$

3. $|x^{(2)} - x^{(1)}| \le \delta$,则停止计算,得点 \bar{x} ;否则转4。

4.计算 $f(\overline{x})$, $f'(\overline{x})$ 。 若 $f'(\overline{x}) = 0$,则停止计算,得点 \overline{x} 。 若 $f'(\overline{x}) < 0$,则令 $x^{(1)} = \overline{x}$, $f(x^{(1)}) = f(\overline{x})$, $f'(x^{(1)}) = f'(\overline{x})$,转2。 若 $f'(\overline{x}) > 0$,则令 $x^{(2)} = \overline{x}$, $f(x^{(2)}) = f(\overline{x})$, $f'(x^{(2)}) = f'(\overline{x})$,转2。

例: $\min e^x - 5x$ $(1 \le x \le 2), \varepsilon = 0.01.$

解: 取初始点 $x_1 = 1, x_2 = 2, \delta = 0.01$.

$$k$$
 x_1 x_2 $f(x_1)$ $f(x_2)$ $f'(x_1)$ $f'(x_2)$ \overline{x} $f(\overline{x})$ $f'(\overline{x})$
0 1 2 -2.282 -2.612 -2.282 2.388 1.606 -3.048 -0.018
1 1.606 2 -3.048 -2.612 -0.018 2.388 1.6096 -3.048 -0.00002

$$\therefore |f'(\overline{x})| < \delta$$

x = 1.6096为近似解。

最优步长小结

$$\alpha_k = \arg\min_{\alpha \ge 0} f(x_k + \alpha d_k)$$

→ 目标函数沿搜索方向下降量达到最大

理想化策略,计算量大,很难取到

- 便于算法理论分析(如二次终止性、收敛速率等)
- 该步长搜索对全局最优解的帮助不大

非精确线搜索方法

最优步长规则的初衷是在每一迭代步使目标函数的下降量达到最大. 尽管最优步长的计算是一单元函数的极值问题,但计算量太大,而且不好求.

最优化关注目标函数在整个可行域上的最优值点. 集中于某个方向上的线搜索似乎没有必要. 这就引出了非精确线搜索步长规则.

常见的线搜索步长规则

Armijo步长规则、 Goldstein步长规则、 Wolfe步长规则