

Note of numerical optimaization

PB19000252 王梓睿

2022 年 9 月 25 日

1 introduction

1、连续优化问题通常比离散优化问题容易，因为连续性带来在特定点附近，限制条件不会变化太大。

2、有时候约束优化问题可以表示成无约束优化问题，方法是将约束添加到目标函数的惩罚项当中，从而阻止违反约束。

3、凸优化的局部最优解就是全局最优解。

证明. 设 x 为局部最优解（最小值）， $y \neq x$ 为全局最优解，连接 y 与 x ，路径与 x 的任一邻域有交，从而由凸函数性质，与 x 的局部最优性矛盾. \square

本书大部分情况下我们只关心局部最优。

4、随机最优化解出的是模型的期望表现。

5、凸优化的定义：

①是约束优化问题的一个特例；

①目标函数为凸函数；

②约束等式中右侧函数为线性函数；

③约束不等式中右侧函数为凹函数；

2 无约束最优化

2.1 关于解

- 1、孤立局部最小值一定严格局部最小，反之则不一定。
- 2、Taylor 公式（利用两种余项），由此可以推导几个结论。
 - ① f 在局部最小值点 x^* 邻域内连续可微，则 $\nabla f(x^*) = 0$;
 - ② f 在局部最小值点 x^* 邻域内，二阶导存在连续，则 $\nabla f(x^*) = 0$ 且 $\nabla^2 f(x^*)$ 半正定;
 - ③（充分性）在某点 x^* 邻域内二阶导存在连续，且 $f(x^*)=0, \nabla^2 f(x^*)$ 正定，那么 x^* 为 f 的局部最小值点;
- 3、凸函数的局部最优值为全局最优值。若还可微，则任意稳定点都是全局最优值。

2.2 算法综述

- 1、线性探测法的最速下降方向是 $-\nabla f_k$ ，但收敛速度过慢。容易证明在与 $-\nabla f_k$ 夹角小于 $\pi/2$ 的方向上目标函数总会递减，称这些方向为下降方向。
- 2、牛顿方向为 $-(\nabla^2 f_k)^{-1} \nabla f_k$ 适用于 f_k 的 Hessian 矩阵正定，且函数越光滑误差越小。它收敛速度较快，但 Hessian 矩阵计算量较大。
- 3、准牛顿方法用近似的 B_k 矩阵代替 Hessian，给出 $-(B_k)^{-1} \nabla f_k$ 并在迭代中更新 B_k ，从而减小计算量。
- 4、非线性共轭方法，采用公式 $p_k = -\nabla f_k + \beta_k p_{k-1}$ ，保留了最速下降法的计算简便性的同时提高了其收敛速度。
- 5、缩放，可以通过对角缩放等方式将变量大小拉到同一数量级。牛顿法能够比最速下降法更好地处理 poorly scaled 问题。

3 线性探测法

线性探测法先计算行进方向 p_k ，再计算步长 α_k ，迭代公式为 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ 。行进方向的选取通常要求 f_k 递降，一般令 $p_k = -(B_k)^{-1} \nabla f_k$ ，如果 B_k 正定，由 Taylor 公式，一次项可化为 $-\nabla f_k^T B_k^{-1} \nabla f_k < 0$ ，这样 f_k 能够递降。

3.1 步长

给定初值 x_k 和方向 p_k ，我们记 $f_k(x_k + \alpha_k p_k)$ 为单变量函数 $\phi(\alpha_k)$ ，想让其尽可能的小。我们引入概念“充分递降”。

3.1.1 Wolfe 条件

1、Armijo 条件： $f(x_k + \alpha_k p_k) \leq f(x_k) + c_1 \alpha_k \nabla f_k^T p_k$ 。它保证了迭代过程至少线性收敛。

2、曲率条件： $\nabla f(x_k + \alpha_k p_k)^T p_k \geq c_2 \nabla f_k^T p_k$ 。事实上就是 $\phi'(\alpha_k) \geq c_2 \phi'(0)$ ，来保证下降的梯度在某一区间内。

3、 $0 < c_1 < c_2 < 1$ 时，以上两式合称 Wolfe 条件。若 2 式改写为 $|LHS| \leq |RHS|$ ，则称为强 Wolfe 条件（进一步缩小了梯度的可能区间）。引理：任一连续可微有下界的函数，一定有满足（强）Wolfe 条件的区间。

3.1.2 其它

1、Goldenstein 条件： $f(x_k) + (1 - c_1) \alpha_k \nabla f_k^T p_k \leq f(x_k + \alpha_k p_k) \leq f(x_k) + c_1 \alpha_k \nabla f_k^T p_k$ 。

2、回溯线性搜索：仅用 Armijo 条件进行判断，但每次不满足都执行 $\alpha = \rho \alpha$ ， ρ 为收缩因子。 ρ 可以在迭代过程中发生变化。

3.2 收敛性

考虑 θ_k 为方向 p_k 与最速下降方向 $-\nabla f_k$ 的夹角。

1、Zoutendijk 条件：对满足一系列条件的 f 成立

$$\sum_0^{\infty} \cos^2 \theta_k \|\nabla f_k\|^2 < \infty$$

Theorem 3.2.

Consider any iteration of the form (3.1), where p_k is a descent direction and α_k satisfies the Wolfe conditions (3.6). Suppose that f is bounded below in \mathbb{R}^n and that f is continuously differentiable in an open set \mathcal{N} containing the level set $\mathcal{L} \stackrel{\text{def}}{=} \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$, where x_0 is the starting point of the iteration. Assume also that the gradient ∇f is Lipschitz continuous on \mathcal{N} , that is, there exists a constant $L > 0$ such that

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(\tilde{x})\| \leq L\|x - \tilde{x}\|, \quad \text{for all } x, \tilde{x} \in \mathcal{N}. \quad (3.13)$$

Then

$$\sum_{k \geq 0} \cos^2 \theta_k \|\nabla f_k\|^2 < \infty. \quad (3.14)$$

2、如果上述级数收敛，说明 $\cos^2 \theta_k \|\nabla f_k\|^2 \rightarrow 0$ 。当 θ_k 有界地远离 90 度时，即存在 $\delta, \cos \theta_k \geq \delta > 0$ ，那么有 $\|\nabla f_k\| \rightarrow 0$ ，我们称为全局收敛。

3、类牛顿方法中，如果矩阵 B_k 的条件数 $\|B_k\| \|B_k^{-1}\| \leq M$ ， M 为一个常数，则可以证明全局收敛性。

3.3 收敛率

1、我们可以定义 Q 范数，并证明 $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - b^T x$ 时，有 $\frac{1}{2}\|x - x^*\|_Q^2 = f(x) - f(x^*)$ 。

2、thm3.3，可以证明对严格凸的二次函数 f ，有

$$\|x_{k+1} - x^*\|_Q^2 \leq \left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}\right)^2 \|x_k - x^*\|_Q^2.$$

其中 $0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$ 为 Q 的特征值。这意味着 f_k 至少以线性收敛到 f^* 。

3、thm3.5, 如果 f 二次可微, Hessian 在解 x^* 附近李普希兹连续, 那么 x

(i) 若起始点 x_0 离 x^* 足够近, 那么迭代序列收敛到 x^* 。

(ii) x_k 有二阶收敛速度, $\|\nabla f_k\|$ 二阶收敛到 0。

4、thm3.6, 此定理说明了在 p_k 满足一个极限式的时候, k 较大时可直接将 α_k 取 1, 且此时 x_k 超线性收敛到 x^* 。thm3.7 说明了 α_k 恒取为 1 的情况下, 3.6 的条件是充要的。而准牛顿方法满足这一条件, 因此能够超线性收敛。

3.4 Hessian 修正

我们希望能够找到方阵 E_k , 使得 $B_k = \nabla^2 f(x_k) + E_k$ 正定。要求这一修改尽量小, 以保留 Hessian 矩阵的更多信息。1、可以考虑 $\nabla^2 f_k + \tau I$, 并在迭代中不断增加 τ_k 的值。但是这样每次更新 τ 后都要重新对矩阵进行分解, 计算量太大。

2、Cholesky 分解, 可以在算法中引入两个新的变量列, 从而边分解边进行矩阵修改。(注意并不是先分解为 $L^T D L$ 再修改 D , 因为首先我们无法保证分解的存在性, 其次修改后的结果不稳定)

3、更稳定的方法是进行对称不定分解 $A = L^T B L$, 其中 A 须为对称矩阵, B 为准对角阵, 对角块大小为 1 或 2. 这一分解必定存在。

3.5 步长选择算法

3.5.1 插值算法

1、从 $\phi(0), \phi'(0)$, 及初始步长 α_0 构造出 α_1 , 随后构造出三次插值函数, 利用 $\phi(0), \phi'(0), \alpha_{k-1}, \alpha_k$ 来计算 α_{k+1} 。这一方法并没有计算在诸 α_i 处的导数值。

2、如果导数值比较好算, 我们可以用 $\phi(\alpha_{i-1}), \phi(\alpha_i), \phi'(\alpha_{i-1}), \phi'(\alpha_i)$ 来对 α_{i+1} 作三次插值。

3.5.2 Wolfe 条件下的线性搜索算法

先利用两个不等式确定一个目标值存在的区间，再调用 Zoom 函数不断缩小区间的范围，以得到满足 Wolfe 条件的值。

4 置信区域法

基本思想是先在迭代中更新置信区域及其半径，再在该区域内寻找步长和方向。

我们定义 $m_k(p) = f_k + g_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p$, B_k 只限定对称和一致有界，来考虑 $\|p\| \leq \Delta_k$ 时的 m_k 最小值。

4.1 Overview

1、Algo4.1 描述了置信区域法的一般算法。记 $\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + p_k)}{m_k(0) - m_k(p_k)}$ ，如果 ρ_k 为负，说明 f 增加，必须拒绝。若 ρ_k 接近 1，说明预测模型很好，可以扩大置信半径；反之若 ρ_k 接近 0 说明模型不好，需要缩小置信半径。

2、thm 4.1 刻画了求 $m_k(p)$ 取最小值的条件，即 $\exists \lambda \geq 0, s.t.$

$$(B + \lambda I)p^* = -g,$$

$$\lambda(\Delta - \|p^*\|) = 0,$$

$$(B + \lambda I) \text{ 正定}.$$

4.2 柯西点

1、设 $p_k^s = \operatorname{argmin} f_k + g_k^T p, \|p\| \leq \Delta_k$ ，再计算 τ_k 使得 $m_k(\tau p_k^s)$ 最小且 $\|\tau p_k^s\| \leq \Delta_k$ ，我们把求得的 $p_k^c = \tau_k p_k^s$ 称为柯西点。柯西点计算比较容易，但由于不太依赖矩阵 B_k 的值，也注定了收敛速度不会太快。

（接下来考察单步迭代内部的求解过程，暂时忽略下标 k ）

2、Dogleg Method (折线法), 当仅 B 正定时可以使用。思想是用两条线段组成的折线代替解曲线, 分别是起始点到 $p^U // g$, 和 $p^B // -B^{-1}g$ 。thm4.2 证明了这一折线段 $\tilde{p}(\tau)$ 上 $\|\tilde{p}(\tau)\|$ 单增, 且 $m(\tilde{p}(\tau))$ 单减。

3、二维子空间法, 是 dogleg 的推广, 代替了 p^U, p^B 两个方向, 而在 $\text{span}[p^U, p^B]$ 中找。这一方法可以进一步改为在 $\text{span}[g, (B + \alpha I)^{-1}g]$ 中找, 从而不再需要 B 的正定性。

4.3 全局收敛

1、lemma4.3 给出了 m_k 下降的一个估计, 式子形式类似 Wolfe 第一个条件。

2、thm4.4 说明了只要近似解 p_k 能够满足使 m_k 下降柯西点处减少值的一个固定倍数即可满足 lemma4.3。

3、thm4.5, thm4.6 给出了 Algo4.1 中 η 分别取 0 和大于 0 的某一正数时, 梯度序列 g_k 的下极限和极限为 0。

4.4 子问题的迭代解

1、先介绍了如何处理 $\|p(\lambda)\| = \Delta$ 问题的解。利用奇异值分解可以写出

$$\|p(\lambda)\|^2 = \sum_{j=1}^n \frac{(q_j^T g)^2}{(\lambda_i + \lambda)^2}$$

。作出图像 (P_{104}), 可以看出, 当 $q_1^T g \neq 0$ 时, 函数在 $-\lambda_1$ 处取 ∞ , 在无穷远处取 0, 从而必存在目标解。随后可以利用 Newton 迭代法进行求解 (可以通过取倒数等定义新函数使迭代过程更加稳定)。而当 $q_1^T g = 0$ 时, 定义新的函数 p 。

2、Lemma4.7 给出了 $m(p) = g^T p + \frac{1}{2} p^T B p$ 能取到最小值的充要条件和解满足的性质。并以此证明了 thm4.1。

4.5 Newton 法的局部收敛

thm4.9 证明了, 在一定的条件下, 置信区域 Δ_k 会逐渐减小, 序列 $\{x_k\}$ 会超线性收敛到一点。

4.6 其它改进方法

1、第二章提过, 优化问题的 Scaling 可能会很糟糕, 即在某些方向, 目标函数变化得过于剧烈。因此我们考虑椭圆置信区间, 可以描述为 $\|Dp\| \leq \Delta$, 其中 D 是一个对角矩阵, 在对变化比较敏感的方向取较大的对角元。

然后提出了 Scaling 过的柯西点计算算法。

2、使用其它范数, 比如 $\|\cdot\|_\infty$, 这在一些约束问题和一些数据比较大的问题中可以应用。