提纲

1 介绍

2 割线方程

3 拟牛顿矩阵更新方式

4 拟牛顿类算法的收敛性和收敛速度

5 有限内存BFGS方法

6 应用举例

7 拓展性研究

提出拟牛顿类(近似)算法的必要性

牛顿类算法是二阶算法，其理论完备，实践中经常被用于解决规模不大的优化问题，优势是其求解效率高.
但对于大规模问题，求出牛顿方向并非易事，原因如下:

首先，对于$x \in \mathbb{R}^n$规模的问题，单值函数$f(x)$的$Hesse$矩阵$\nabla^2 f(x)$的规模有$n \times n$之多，需要做n^2次偏导计算;

其次，即使获得了$Hesse$矩阵:
(1)经典牛顿方法由$d^k = -\nabla^2 f(x^k)^{-1} \nabla f(x^k)$得到牛顿方向;
(2)阻尼方法需确定修正矩阵E^k以及求解方程组$B^k d^k = -\nabla f(x^k)$才能得到修正牛顿方向;
(3)非精确牛顿方法需要近似求解方程组$\nabla^2 f(x^k) d^k = -\nabla f(x^k)$才能得到非精确牛顿方向.

以上计算步骤都将在数据规模较大时产生困难.

对近似方法的基本要求

我们希望提出一类新的牛顿方法，它也是通过求解牛顿方向进行寻优的，但具有以下的特点：

- 不直接计算*Hesse*矩阵，而是通过合理近似的方式提出，目的在于避免或减少计算偏导数；
- 不直接求上述近似矩阵的逆，而是通过巧妙的代数结构计算逆，目的在于避免求逆以及方程组带来的数值困难；
- 上述近似过程的计算复杂度相比牛顿方法有较大的降低；
- 近似矩阵及其逆还保有*Hesse*矩阵的性质，即使得牛顿方向d^k仍为下降方向；
- 使用近似*Hesse*矩阵以及逆时要保证算法是收敛的，而且最好只比二阶收敛慢一点，即超线性收敛.

我们接下来对其基本的构造过程和思想进行阐述.

提纲

1 介绍

2 割线方程

3 拟牛顿矩阵更新方式

4 拟牛顿类算法的收敛性和收敛速度

5 有限内存BFGS方法

6 应用举例

7 拓展性研究

回顾牛顿法的推导过程. 设$f(x) \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}^n$是二阶连续可微函数.
对$\nabla f(x)$在点x^{k+1}处一阶Taylor近似, 得

$$\nabla f(x) = \nabla f(x^{k+1}) + \nabla^2 f(x^{k+1})(x - x^{k+1}) + \mathcal{O}(\|x - x^{k+1}\|^2),$$

令$x = x^k$, 且$s^k = x^{k+1} - x^k$为点差, $y^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$为梯度差, 得

$$\nabla^2 f(x^{k+1}) s^k + \mathcal{O}(\|s^k\|^2) = y^k.$$

这是*Hesse*矩阵满足的方程.
现忽略高阶项$\|s^k\|^2$, 只希望近似*Hesse*矩阵的矩阵B^{k+1}满足方程

$$B^{k+1} s^k = y^k,$$

或其逆矩阵H^{k+1}满足

$$H^{k+1} y^k = s^k.$$

上述2个方程即称为割线方程.

割线方程的推导

由于上述割线方程是由Hesse矩阵满足的方程近似得来的，因此我们可以期待B^{k+1}以及H^{k+1}具有一些Hesse矩阵的性质.

我们还可以从另一角度理解割线方程. 既然牛顿法是对目标函数$f(x)$在迭代点x^k处做二阶近似再求解，考虑函数$f(x)$在点x^{k+1}处的二阶Taylor近似

$$m_{k+1}(d) = f(x^{k+1}) + \nabla f(x^{k+1})^{\mathrm{T}} d + \frac{d^{\mathrm{T}} B^{k+1} d}{2},$$

从迭代过程以及梯度的意义而言，我们要求$m_{k+1}(d)$在点$d = -s^k, 0$处的梯度与$f(x)$在点$x = x^k, x^{k+1}$处的梯度分别相等.
针对第一个要求，

$$\nabla m_{k+1}(-s^k) = \nabla f(x^{k+1}) - B^{k+1} s^k = \nabla f(x^k),$$

整理即得割线方程.
至于第二个要求，将$d = 0$代入即得$\nabla m_{k+1}(0) = \nabla f(x^{k+1})$，是自然满足的.

由于近似矩阵必须保证迭代收敛，正如牛顿法要求*Hesse*矩阵正定，B^k正定也是必须的，即有必要条件

$$\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} B^k s^k > 0 \Longrightarrow \left(s^k\right)^{\mathrm{T}} y^k > 0,$$

这一条件针对的是一切的B^k，因此要在迭代过程中始终满足.

定义

曲率条件　在迭代过程中满足$\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} y^k > 0, \forall k \in \mathbb{N}^+$.

Wolfe准则实现曲率条件

为实现曲率条件, 在牛顿方向上执行进行线搜索(此时不要求步长恒为1)时, 我们可以使用Wolfe准则, 因为由Wolfe条件

$$\nabla f(x^k + \alpha d^k)^{\mathrm{T}} d^k \geqslant c_2 \nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} d^k,$$

其中$c_2 \in (0, 1)$. 在本情况下, 上式即

$$\nabla f(x^{k+1})^{\mathrm{T}} s^k \geqslant c_2 \nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} s^k,$$

为了凑出y^k, 在不等式两边同时减去$\nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} s^k$, 得

$$\nabla (y^k)^{\mathrm{T}} s^k \geqslant (c_2 - 1) \nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} s^k,$$

注意到$c_2 - 1 < 0$且s^k是下降方向, 因此最终有

$$\nabla (y^k)^{\mathrm{T}} s^k \geqslant (c_2 - 1) \nabla f(x^k)^{\mathrm{T}} s^k > 0,$$

满足了曲率条件.

注意: 仅仅使用Armijo准则并不能保证曲率条件成立.

提纲

1 介绍
2 割线方程
3 拟牛顿矩阵更新方式
4 拟牛顿类算法的收敛性和收敛速度
5 有限内存BFGS方法
6 应用举例
7 拓展性研究

修正矩阵的基本思路

类似于牛顿方法, 我们在x^k处根据$f(x)$给出一个合理的下降方向, 然后执行Wolfe准则确定步长, 即可完成一步迭代.

根据割线方程, 要确定一个类似牛顿方向的下降方向, 就要确定每步迭代时的B^k或者H^k. 我们通常将拟牛顿法产生的方向称为拟牛顿方向, 而将B^k, H^k称为拟牛顿矩阵.

设计拟牛顿矩阵是有要求的. 为尽可能减少算法在迭代时的计算量, 我们希望拟牛顿矩阵的更新简单, 即是通过修正迭代更新每步矩阵的.

基于上述的思路, 我们可以写出拟牛顿算法的基本框架.

拟牛顿算法的基本框架

拟牛顿算法的基本框架为:

算法 1 拟牛顿算法框架

Require: 初始坐标$x^0 \in \mathbb{R}^n$, 初始矩阵$B^0 \in \mathbb{R}^{n\times n}$(或$H^0$), $k = 0$.
Ensure: x^K, B^K(或H^K).

1: 检查初始元素.
2: **while** 未达到停机准则 **do**
3: 计算方向$d^k = -(B^k)^{-1}\nabla f(x^k)$或$d^k = -H^k\nabla f(x^k)$.
4: 通过线搜索(Wolfe)产生步长$\alpha_k > 0$, 令$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$.
5: 更新$Hesse$矩阵的近似矩阵B^{k+1}或其逆矩阵H^{k+1}.
6: $k \leftarrow k + 1$.
7: **end while**

秩一更新是一种迭代式更新矩阵的手段，它的结构非常简单. 我们可以用秩一更新的方式更新拟牛顿矩阵.

定义

秩一更新 对于拟牛顿矩阵$B^k \in \mathbb{R}^{n\times n}$，设$0 \neq u \in \mathbb{R}^n$且$a \in \mathbb{R}$待定，则$uu^{\mathrm{T}}$是秩一矩阵，且有秩一更新

$$B^{k+1} = B^k + auu^{\mathrm{T}}.$$

进一步我们确定参量u和a. 根据割线方程$B^{k+1}s^k = y^k$，代入秩一更新的结果，得到

$$(B^k + auu^{\mathrm{T}})s^k = y^k,$$

整理得

$$auu^{\mathrm{T}}s^k = (a \cdot u^{\mathrm{T}}s^k)u = y^k - B^k s^k.$$

由于$a \cdot u^{\mathrm{T}}s^k$是标量，因此上式表明$u$和$y^k - B^k s^k$同向.

B^k的SR1更新

根据

$$auu^{\mathrm{T}}s^k=(a\cdot u^{\mathrm{T}}s^k)u=y^k-B^ks^k,$$

我们推出u和$y^k-B^ks^k$同向. 此时将会有诸多选择以确定具体的参量. 处于简单考虑, 不妨就令u和$y^k-B^ks^k$相等, 即$u=y^k-B^ks^k$, 代入上式得

$$(a\cdot(y^k-B^ks^k)^{\mathrm{T}}s^k)(y^k-B^ks^k)=y^k-B^ks^k,$$

再令$(a\cdot(y^k-B^ks^k)^{\mathrm{T}}s^k)\neq 0$, 则可以确定$a$为

$$a=\frac{1}{(y^k-B^ks^k)^{\mathrm{T}}s^k}.$$

至此, u和a均被确定.
根据以上算法, 一种B^k的秩一更新(SR1)公式为

$$B^{k+1}=B^k+\frac{uu^{\mathrm{T}}}{u^{\mathrm{T}}s^k},\quad u=y^k-B^ks^k.$$

我们推出了基于B^k的秩一更新公式. 由同样的过程(请推导), 可以推出基于H^k的秩一更新公式.

定理

拟牛顿算法的秩一更新公式　拟牛顿矩阵B^k的秩一更新公式为

$$B^{k+1} = B^k + \frac{uu^{\mathrm{T}}}{u^{\mathrm{T}}s^k}, \quad u = y^k - B^k s^k,$$

拟牛顿矩阵H^k的秩一更新公式为

$$H^{k+1} = H^k + \frac{vv^{\mathrm{T}}}{v^{\mathrm{T}}y^k}, \quad v = s^k - H^k y^k.$$

观察秩一公式, 发现基于B^k和H^k的公式在形式上互为对偶. 这并不是巧合, 实际上, 在基于B^k的公式中, 注意$H^k = (B^k)^{-1}$, 利用秩一更新的SMW公式即可推出基于H^k的公式, 反之亦然.

秩一更新公式的缺陷

秩一公式的推导很简单, 形式也很简洁, 但是由秩一公式更新的B^{k+1}无法保证正定, 即使B^k正定.

定理

秩一更新公式使B^{k+1}正定的充分条件 使用秩一更新公式从B^k更新B^{k+1}, B^{k+1}正定的充分条件可以是:
(1) B^k正定;
(2) $u^{\mathrm{T}}s^k > 0$.

证明是简单的. 设$0 \neq w \in \mathbb{R}^n$, 则

$$
\begin{aligned}
w^{\mathrm{T}}B^{k+1}w = w^{\mathrm{T}}B^k w + \frac{w^{\mathrm{T}}uu^{\mathrm{T}}w}{u^{\mathrm{T}}s^k} &= w^{\mathrm{T}}B^k w + \frac{(u^{\mathrm{T}}w)^2}{u^{\mathrm{T}}s^k} \\
> 0.
\end{aligned}
$$

同样地, 将上述定理中B换成H, $u^{\mathrm{T}}s^k$换成$v^{\mathrm{T}}y^k$, 仍然成立. 因此, 由于无法保证$u^{\mathrm{T}}s^k$或$v^{\mathrm{T}}y^k$恒大于0, 上述的秩一更新公式一般不用.

BFGS公式

由于SR1公式无法在迭代过程中始终保证B^k的正定性，因此SR1公式的迭代过程可能不收敛. 为了克服这种缺陷，我们介绍BFGS公式.
BFGS公式的核心思想是对B^k进行秩二更新，而不是秩一更新.

定义

秩二更新 对于拟牛顿矩阵$B^k \in \mathbb{R}^{n\times n}$，设$0 \neq u, v \in \mathbb{R}^n$且$a, b \in \mathbb{R}$待定，则有秩二更新形式

$$B^{k+1} = B^k + auu^{\mathrm{T}} + bvv^{\mathrm{T}}.$$

根据割线方程，将秩二更新的待定参量式代入，得

$$B^{k+1}s^k = (B^k + auu^{\mathrm{T}} + bvv^{\mathrm{T}})s^k = y^k,$$

整理可得

$$(a \cdot u^{\mathrm{T}}s^k)u + (b \cdot v^{\mathrm{T}}s^k)v = y^k - B^k s^k.$$

上式的形式和秩一更新的情形类似，不过是多加了一项.

BFGS公式

类似处理, 我们通过选取合适的u, v, a, b使得上式成立, 一个简单的取法是令$(a \cdot u^{\mathrm{T}} s^k)u$对应$y^k$相等, $(b \cdot v^{\mathrm{T}} s^k)v$对应$-B^k s^k$相等, 即有

$$a \cdot u^{\mathrm{T}} s^k = 1, \quad u = y^k,$$

$$b \cdot v^{\mathrm{T}} s^k = -1, \quad v = B^k s^k.$$

将上述参量代入割线方程, 即得BFGS更新公式

$$B^{k+1} = B^k + \frac{uu^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} u} - \frac{vv^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} v},$$

其中u, v如上定义.

利用SMW公式以及$H^k = (B^k)^{-1}$, 可以推出关于H^k的BFGS公式. 请读者尝试.

推导H^k的BFGS公式之提示

提示: SMW公式在$k=2$时的形式为

$$\left(A+\sum_{i=1}^{2} u_i v_i^{\mathrm{T}}\right)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}(u_1, u_2)\, C^{-1} \begin{pmatrix} v_1^{\mathrm{T}} \\ v_2^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} A^{-1},$$

其中$C = \begin{pmatrix} 1+v_1^{\mathrm{T}}A^{-1}u_1 & v_1^{\mathrm{T}}A^{-1}u_2 \\ v_2^{\mathrm{T}}A^{-1}u_1 & 1+v_2^{\mathrm{T}}A^{-1}u_2 \end{pmatrix}$. 在上式中, 我们可以令

$$u_1 = v_1 = \frac{y_k}{\sqrt{s_k^{\mathrm{T}} y_k}}, \quad v_1 = -v_2 = \frac{B_k s_k}{\sqrt{s_k^{\mathrm{T}} B_k s_k}},$$

则SMW公式中二阶矩阵的逆可以化为

$$C^{-1} = \begin{pmatrix} 1+\frac{y_k^{\mathrm{T}} H_k y_k}{s_k^{\mathrm{T}} y_k} & \frac{\sqrt{s_k^{\mathrm{T}} B_k s_k}}{\sqrt{s_k^{\mathrm{T}} y_k}} \\ -\frac{\sqrt{s_k^{\mathrm{T}} B_k s_k}}{\sqrt{s_k^{\mathrm{T}} y_k}} & 0 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{s_k^{\mathrm{T}} y_k}{s_k^{\mathrm{T}} B_k s_k} \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\sqrt{s_k^{\mathrm{T}} B_k s_k}}{\sqrt{s_k^{\mathrm{T}} y_k}} \\ \frac{\sqrt{s_k^{\mathrm{T}} B_k s_k}}{\sqrt{s_k^{\mathrm{T}} y_k}} & 1+\frac{y_k^{\mathrm{T}} H_k y_k}{s_k^{\mathrm{T}} y_k} \end{pmatrix},$$

将C^{-1}代入SMW公式即可得到基于H^k的BFGS公式.

BFGS公式

综上所述, BFGS公式的定义如下.

定义

BFGS公式 在拟牛顿类算法中, 基于B^k的*BFGS*公式为

$$B^{k+1} = B^k + \frac{y^k (y^k)^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} y^k} - \frac{B^k s^k (B^k s^k)^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} B^k s^k},$$

基于H^k的*BFGS*公式为

$$H^{k+1} = \left(I - \frac{s^k (y^k)^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} y^k}\right)^{\mathrm{T}} H^k \left(I - \frac{s^k (y^k)^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} y^k}\right) + \frac{s^k (s^k)^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} y^k}.$$

BFGS公式的有效性

BFGS公式产生的B^{k+1}或H^{k+1}是否正定呢? 我们通过一个充分性定理说明.

定理

BFGS公式使拟牛顿矩阵正定的充分条件 使用秩一更新公式从B^k或H^k更新B^{k+1}或H^{k+1}, 拟牛顿矩阵正定的充分条件可以是:

(1) B^k或H^k正定;

(2) 满足曲率条件$\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} y^k > 0, \forall k \in \mathbb{N}^+$.

证明上述定理, 只需要从基于H^k的BFGS公式分析即可, 从而得到H^{k+1}和其逆B^{k+1}均正定.

因为在确定步长时使用某一Wolfe准则线搜索即可满足曲率条件, 因此BFGS公式产生的拟牛顿矩阵有望保持正定, 是有效算法.

从优化意义理解BFGS格式

基于H^k的BFGS格式恰好是优化问题

$$\begin{aligned} \min_{H} \quad & \mathbf{OPT} = \left\|H - H^k\right\|_W, \\ s.t. \quad & H = H^{\mathrm{T}}, \\ & Hy^k = s^k. \end{aligned}$$

的解. 上式中$\|\cdot\|_W$是加权范数, 定义为

$$\|H\|_W = \left\|W^{1/2}HW^{1/2}\right\|_F,$$

且W满足割线方程, 即$Ws^k = y^k$.
注意$Hy^k = s^k$是割线方程, 因此优化问题的意义是在满足割线方程的对称矩阵中找到距离H^k最近的矩阵H作为H^{k+1}. 因此我们可以进一步认知, BFGS格式更新的拟牛顿矩阵是正定对称的, 且在满足割线方程的条件下采取的是最佳逼近策略.

DFP公式

DFP公式利用与BFGS公式类似的推导方法，不同的是其以割线方程$H^{k+1}y^k = s^k$为基础进行对H^k的秩二更新. 读者可以再练习推导.
基于H^k满足的DFP公式，利用SMW公式以及$B^k = (H^k)^{-1}$，可以推出关于B^k的DFP公式. (关键的推导步骤仍然可以参考推导BFGS公式时给出的提示)

定义

DFP公式 基于H^k的*DFP*更新公式为

$$H^{k+1} = H^k - \frac{H^k y^k (H^k y^k)^{\mathrm{T}}}{(y^k)^{\mathrm{T}} H^k y^k} + \frac{s^k (s^k)^{\mathrm{T}}}{(y^k)^{\mathrm{T}} s^k},$$

基于B^k的*DFP*更新公式为

$$B^{k+1} = (I - \frac{y^k (s^k)^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} y^k})^{\mathrm{T}} B^k (I - \frac{y^k (s^k)^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} y^k}) + \frac{y^k (y^k)^{\mathrm{T}}}{(s^k)^{\mathrm{T}} y^k}.$$

DFP公式的有效性

类似BFGS公式, DFP公式产生的B^{k+1}或H^{k+1}也正定, 且其充分条件可以与BFGS公式的相同.

定理

DFP公式使拟牛顿矩阵正定的充分条件 使用秩一更新公式从B^k或H^k更新B^{k+1}或H^{k+1}, 拟牛顿矩阵正定的充分条件可以是:
(1) B^k或H^k正定;
(2) 满足曲率条件$\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} y^k > 0, \forall k \in \mathbb{N}^+$.

证明上述定理, 只需要从基于H^k的BFGS公式分析即可, 从而得到H^{k+1}和其逆B^{k+1}均正定.

可以看出, DFP公式与BFGS公式存在对偶的关系. 将BFGS公式中的H^k换成B^k, s^k换成y^k, 即可得到DFP公式. 这一点也不奇怪, 因为它们所基于的割线方程恰好也满足这种对偶关系.

有了BFGS公式的优化意义做铺垫，讨论DFP公式的优化意义显得十分简单. 利用对偶性质，基于B^k的DFP格式将是优化问题

$$
\begin{aligned}
\min_{B} \quad & \mathbf{OPT} = \left\| B - B^k \right\|_W , \\
s.t. \quad & B = B^{\mathrm{T}}, \\
& Bs^k = y^k .
\end{aligned}
$$

的解. 上式中$\|\cdot\|_W$是加权范数，定义为

$$
\|B\|_W = \left\| W^{1/2} B W^{1/2} \right\|_F ,
$$

且W满足另一割线方程，即$Wy^k = s^k$.
注意$Bs^k = y^k$是另一割线方程，因此优化问题的意义是在满足割线方程的对称矩阵中找到距离B^k最近的矩阵B作为B^{k+1}.

DFP公式的缺陷

遗憾的是，尽管DFP格式与BFGS对偶，但从实际效果而言，DFP格式的求解效率整体上不如BFGS格式.
M.J.D. Powell曾以问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^2} \quad f(x) = \frac{1}{2}\|x\|_2^2$$

的迭代求解体现过这一结论. 他设置初始值

$$B^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad x_1 = \begin{pmatrix} \cos\psi \\ \sin\psi \end{pmatrix},$$

其中$\tan^2\psi = \lambda$. 当误差阈$\epsilon = 10^{-4}$时，分别取λ为不同的值，使用BFGS算法与DFP算法所产生的迭代步数分别如下表(见下页)所示.
由此看出，在本问题中，BFGS算法的求解效率要远高于DFP算法.
(参考文献: Powell M J D. How bad are the BFGS and DFP methods when the objective function is quadratic?[J]. Mathematical Programming, 1986, 34(1): 34-47.)

DFP公式的缺陷

Table: BFGS方法的迭代次数

λ \ ϵ	0.1	0.01	10^{-4}	10^{-8}
10	5	6	8	10
100	7	8	10	12
10^4	12	13	15	17
10^6	17	18	20	22
10^9	24	25	27	29

Table: DFP方法的迭代次数

λ \ ϵ	0.1	0.01	10^{-4}	10^{-8}
10	10	13	16	19
30	25	32	37	40
100	80	99	107	111
300	237	290	307	313
10^3	787	958	1006	1014

提纲

1 介绍

2 割线方程

3 拟牛顿矩阵更新方式

4 拟牛顿类算法的收敛性和收敛速度

5 有限内存BFGS方法

6 应用举例

7 拓展性研究

BFGS全局收敛性

我们利用Zoutendijk条件得到基本收敛性. 需要复习的读者可参看纸质本Page 213的定理6.1.

根据对BFGS格式有效性的分析, 我们先确保初始矩阵B^0是对称正定的.

定理

BFGS全局收敛性 设初始矩阵B^0是对称正定矩阵, 目标函数$f(x)$是二阶连续可微函数, 下水平集

$$\mathcal{L} = \{x \in \mathbb{R}^n | f(x) \leqslant f(x^0)\}$$

凸, 且存在$m, M \in \mathbb{R}^+$使得对$\forall z \in \mathbb{R}^n, x \in \mathcal{L}$满足

$$m \|z\|^2 \leqslant z^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(x) z \leqslant M \|z\|^2$$

(即$z^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(x) z$被$\|z\|$控制), 那么成立:
BFGS格式结合Wolfe线搜索的拟牛顿算法全局收敛到$f(x)$的极小值点x^*.

BFGS全局收敛性的证明

既然涉及到用Wolfe准则进行线搜索，自然会希望通过Zoutendijk条件来说明收敛性. 同时，我们每步所取的拟牛顿方向也一定是下降方向，因为BFGS格式更新的拟牛顿矩阵可以在定理的条件下满足对称正定. 因此，证明收敛性，只需要证明搜索方向与负梯度的夹角不太差(Zoutendijk条件的核心思想)。这也是我们下面证明的一个基本思路.

基于B^k的BFGS格式为

$$B^{k+1} = B^k + \frac{y^k \left(y^k\right)^{\mathrm{T}}}{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} y^k} - \frac{B^k s^k \left(B^k s^k\right)^{\mathrm{T}}}{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} B^k s^k},$$

通过这一公式，我们可以说明：

- (a) $\operatorname{Tr}\left(B^{k+1}\right) = \operatorname{Tr}\left(B^k\right) - \frac{\left\|B^k s^k\right\|^2}{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} B^k s^k} + \frac{\left\|y^k\right\|^2}{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} y^k}$,
- (b) $\det\left(B^{k+1}\right) = \det\left(B^k\right) \frac{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} y^k}{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} B^k s^k}$.

关于迹的公式是显然的，因为迹的运算保和. 我们主要说明为何关于行列式的结论成立(习题6.11).

BFGS全局收敛性的证明

为说明(b)式成立，先证明一个结论.

定理

设$x, y, u, v \in \mathbb{R}^n$，则

$$\det\left(I_{n\times n} + xy^{\mathrm{T}} + uv^{\mathrm{T}}\right) = \left(1 + y^{\mathrm{T}}x\right)\left(1 + v^{\mathrm{T}}u\right) - \left(x^{\mathrm{T}}v\right)\left(y^{\mathrm{T}}u\right).$$

Proof: 只需注意到利用降阶公式成立

$$\begin{aligned}\det\left(I_{n\times n} + xy^{\mathrm{T}} + uv^{\mathrm{T}}\right) &= \det\left(I_{n\times n} + \begin{pmatrix} x & u \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y^{\mathrm{T}} \\ v^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}\right) \\ &= \det\left(I_{2\times 2} + \begin{pmatrix} x^T \\ u^T \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y & v \end{pmatrix}\right).\end{aligned}$$

利用上述定理，将BFGS公式的左右两边乘以$(B^k)^{-1}$(B^k正定)，并设$x = \frac{-s^k}{\sqrt{(s^k)^T B^k s^k}}, y = \frac{B^k s^k}{\sqrt{(s^k)^T B^k s^k}}, u = \frac{(B^k)^{-1} y^k}{\sqrt{(y^k)^T s^k}}, v = \frac{y^k}{\sqrt{(y^k)^T s^k}}$，代入即可证明结论成立.

BFGS全局收敛性的证明

定义$\cos\theta_k = \frac{(s^k)^{\mathrm{T}} B^k s^k}{\|s^k\| \|B^k s^k\|}$是欲求夹角的余弦. 这是因为

$$
\begin{aligned}
s^k &= x^{k+1} - x^k = -\alpha_k \left(B^k\right)^{-1} \nabla f\left(x^k\right), \\
B^k s^k &= -\alpha_k \nabla f\left(x^k\right).
\end{aligned}
$$

再设

$$
q_k = \frac{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} B^k s^k}{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} s^k}, \quad m_k = \frac{\left(y^k\right)^{\mathrm{T}} s^k}{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} s^k}, \quad M_k = \frac{\left(y^k\right)^{\mathrm{T}} y^k}{\left(y^k\right)^{\mathrm{T}} s^k},
$$

将上述定义代入(b)式以及余弦式, 得到

(c) $\det\left(B^{k+1}\right) = \det\left(B^k\right) \frac{m_k}{q_k}$.

(d) $\frac{\left\|B^k s^k\right\|^2}{(s^k)^{\mathrm{T}} B^k s^k} = \frac{q_k}{\cos^2\theta_k}$.

上述(a),(b),(c),(d)均是准备公式.

我们的目标是通过构造一个不等式，使得我们证明$\cos\theta_k > 0, k \to \infty$.
设

$$\Psi(B) = \mathrm{Tr}(B) - \ln(\det(B)),$$

注意上式成立$\Psi(B) > 0$.
在上式中代入$B = B^{k+1}$以及上述准备公式，成立

$$\begin{aligned}\Psi\left(B^{k+1}\right) &= \mathrm{Tr}\left(B^{k+1}\right) - \ln\left(\det\left(B^{k+1}\right)\right) \\ &\leqslant \Psi\left(B^{k}\right) + \left(M_k - \ln(m_k) - 1\right) + 2\ln(\cos\theta_k).\end{aligned}$$

(请补完上述跳步)
上述不等式的意义在于，我们找到了一个关于B^k的函数不等式的递推.
同时注意到$m_k \geqslant m, M_k \leqslant M$(想一想为何可如此假设?)，所以又有

$$\begin{aligned}\Psi\left(B^{k+1}\right) &\leqslant \Psi\left(B^{k}\right) + \left(M_k - \ln(m_k) - 1\right) + 2\ln(\cos\theta_k) \\ &\leqslant \Psi\left(B^{0}\right) + (k+1)\left(M - \ln(m) - 1\right) + 2\sum_{j=0}^{k}\ln(\cos\theta_j),\end{aligned}$$

BFGS全局收敛性的证明

从上述不等式(控制式)可以证明, 如果我们假设迭代将不会停止, 则右式若无界, 将导出矛盾.
不妨设$cos\theta_k \to 0$, 因此会有$\ln(\cos^2\theta_k) \to -\infty$. 这意味着, 存在$K \in \mathbb{N}^+$, 使得对$\forall j \geqslant K$, 均成立

$$\ln(\cos^2\theta_j) < -2(M - \ln(m) - 1) = -2C < 0,$$

初次证明, 上述不等式右侧的取法可能会引起困惑. 事实上, 右式可以随便取常数(因为只要是常数均成立), 这样取的原因是后续的证明会比较方便.
联立上述2个最近的控制式, 注意$\Psi\left(B^{k+1}\right) > 0$, 则有$k \to \infty$时

$$0 < \Psi\left(B^0\right) + (k+1)\,C + 2\sum_{j=0}^{K} \ln\left(\cos\theta_j\right) + \sum_{j=K+1}^{k}\left(-2C\right) \to -\infty,$$

这就导出了矛盾.

BFGS全局收敛性的证明

因此$\cos\theta_k \to 0$是不成立的. 换句话说, 存在子列$\{j_k\}_{k=1,2,\ldots}$, 使得$\cos\theta_{j_k} \geqslant \delta > 0$. 根据Zoutendijk条件, 又可以得到

$$\lim_{k\to\infty} \inf \left\|\nabla f\left(x^k\right)\right\| \to 0.$$

结合上述问题对$x \in \mathcal{L}$是强凸的, 所以导出$x^k \to x^*$.

(若函数的性质稍差, 即函数并非强凸的, 则全局收敛性可能将退化为局部的收敛性.)

BFGS局部收敛性与R-收敛速度

上述全局定理说明在一定假设下，使用BFGS格式确定下降方向，搭配Wolfe线搜索确定步长后是全局收敛的．下面这个定理从局部收敛性给出了其收敛速度．

定理

BFGS局部收敛性　设$f(x)$二阶连续可微，点列$\{x_k\}$是由*BFGS*格式产生的，并收敛于x^*，$\nabla^2 f(x^*)$是对称正定矩阵．设初始矩阵B^0为任意的对称正定矩阵，那么存在$0 \leqslant c < 1$，$K \in \mathbb{N}^+$，使得对$\forall k > N$，成立

$$f\left(x^{k+1}\right) - f\left(x^*\right) \leqslant c^{k-K+1}\left(f\left(x^K\right) - f\left(x^*\right)\right),$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\|x^k - x^*\right\| < \infty.$$

上述定理表明，序列$\left\{f\left(x^k\right) - f\left(x^*\right)\right\}_k$是压缩的，收敛将具有R-超线性收敛速度．

BFGS格式的Q-收敛速度

由局部收敛性定理，可以进一步推出BFGS的Q-收敛速度.

定理

BFGS的Q-超线性收敛速度　除要求*BFGS*局部收敛性的假设外，再要求f的$Hesse$矩阵在x^*处*Lip*-连续，则有

$$\lim_{k\to\infty}\frac{\left\|x^{k+1}-x^*\right\|}{\left\|x^k-x^*\right\|}=0.$$

即$\{x^k\}$为*Q*-超线性收敛到x^*.

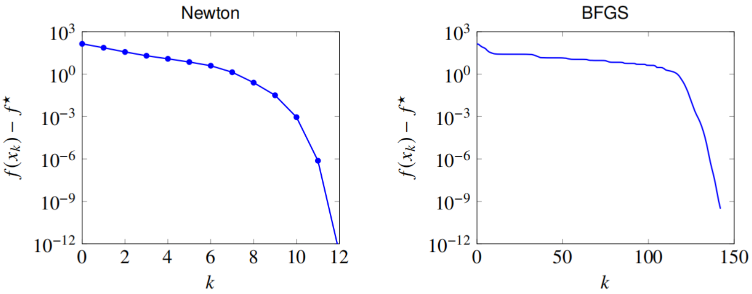
以BFGS格式为代表的拟牛顿类算法由于仅仅使用了$Hesse$矩阵的近似，因此很难达到二阶收敛速度，最多只能达到Q-超线性收敛速度. 但是，由于拟牛顿方法对近似矩阵的更新代价可能远小于牛顿方法计算$Hesse$矩阵的代价，因此它在大规模问题中的开销可能远小于牛顿算法，较为实用.

BFGS方法的收敛速度之例

例 考虑极小化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^{100}} \quad c^{\mathrm{T}}x - \sum_{i=1}^{500} \ln\left(b_i - a_i^{\mathrm{T}}x\right),$$

下图展示了误差$f(x_k)-f^*$与迭代次数k之间的关系(k是迭代次数). 虽然BFGS方法的迭代次数显著得多, 但由于牛顿法每次迭代的计算代价为$\mathcal{O}(n^3)$加上计算Hesse矩阵的代价, 而BFGS方法的每步计算代价仅为$\mathcal{O}(n^2)$, 因此BFGS算法可能更快取得优势解.



提纲

1. 介绍
2. 割线方程
3. 拟牛顿矩阵更新方式
4. 拟牛顿类算法的收敛性和收敛速度
5. 有限内存BFGS方法
6. 应用举例
7. 拓展性研究

有限内存方法的基本思路

牛顿算法在大规模问题中的困难主要体现在计算$Hesse$矩阵的不易，然而就算是得到了$Hesse$矩阵或近似矩阵(一般是稠密矩阵)，要存储它就需要给出$\mathcal{O}(n^2)$规模的存储空间，这或许是极为困难的. 因此，我们需要研究一类不必在每次迭代中存储近似矩阵的策略.

基本思路　我们先回顾拟牛顿法. 对于标准的拟牛顿法，近似矩阵的更新公式可以记为

$$B^{k+1} = g(B^k, s^k, y^k),$$

其中s^k, y^k如本节定义. 拟牛顿法的基本思路是，通过给定以上的参量，我们希望迭代产生B^{k+1}.
类似地，既然算法要求限制空间迭代，那么可被利用的信息一定会受限. 也就是说，如果我们以迭代的方式将上述更新公式重写，只保存最近的m组数据，那么迭代公式可以写成

$$B^{k+1} = g(g(\cdots g(B^{k-m+1}, s^{k-m+1}, y^{k-m+1}))).$$

有限内存方法的基本思路

为什么只保存最近的m组数据是可行的呢? 其实, 我们在分析算法的收敛性与收敛速度时, 对绝大多数问题, 都是在最优点x^*的局部讨论的. 而在算法的迭代过程中, 起始点一般都会偏离x^*较远, 所以丢弃一些历史较远的数据是可以的.

丢弃数据之后, 必然会产生一个问题: B^{k-m+1}的形式几何?

一个简单的做法是我们自己找一个已知的矩阵代替它. 讨论如何给出B^{k-m+1}的过程, 其实就是有限内存拟牛顿类算法的一般思路.

先回顾BFGS方法，它使用BFGS更新公式对拟牛顿矩阵进行迭代更新，同时利用Wolfe准则执行线搜索确定步长. 我们依然考虑基于这个框架进行改进，所以我们要选取的搜索方向其实还是

$$d^k = -(B^k)^{-1}\nabla f(x^k) = -H^k\nabla f(x^k).$$

下面我们以基于H^k的BFGS更新公式为基础推导算法. 重写BFGS更新公式为

$$H^{k+1} = (V^k)^{\mathrm{T}} H^k V^k + \rho_k s^k (s^k)^{\mathrm{T}},$$

其中

$$\rho_k = \frac{1}{(y^k)^{\mathrm{T}} s^k}, \qquad V^k = I_{n\times n} - \rho_k y^k (s^k)^{\mathrm{T}}.$$

有了上述写迭代公式的思路，我们将上式递归地展开m次，即

$$
\begin{aligned}
H^k = & \left(\prod_{j=k-m}^{k-1} V^j\right)^{\mathrm{T}} H^{k-m} \left(\prod_{j=k-m}^{k-1} V^j\right) + \\
& \rho_{k-m} \left(\prod_{j=k-m+1}^{k-1} V^j\right)^{\mathrm{T}} s^{k-m} \left(s^{k-m}\right)^{\mathrm{T}} \left(\prod_{j=k-m}^{k-1} V^j\right) + \cdots + \\
& \rho_{k-1} s^{k-1} \left(s^{k-1}\right)^{\mathrm{T}}.
\end{aligned}
$$

为了节省内存，我们只展开m次，利用H^{k-m}进行计算，即可求出H^{k+1}. 虽然H^{k-m}还是无法直接显式求出，但我们可以类似拟牛顿方法，用一个结构简单且性质与H^{k-m}基本一致的近似矩阵代替计算.
下面我们介绍一种不计算H^k，只利用展开式计算$d^k = -H^k \nabla f(x^k)$的巧妙算法：双循环递归算法. 它利用迭代式的结构尽量节省计算d^k的开销.

我们现在给出双循环递归算法的执行过程. 在上述递归式中, 将等式两边同时右乘$\nabla f(x^k)$, 则等式左侧为$-d^k$. 若观察等式右侧, 需要计算

$$V^{k-1}\nabla f(x^k), \cdots, V^{k-m}\cdots V^{k-1}\nabla f(x^k).$$

这些计算可以递归地进行, 而无需重复计算.
同时, 在计算$V^{k-l}\cdots V^{k-1}\nabla f(x^k)$的过程中, 恰好可以计算上一步的$\rho_{k-l}(s^{k-l})^{\mathrm{T}}[V^{k-l+1}\cdots V^{k-1}\nabla f(x^k)]$, 这是一个标量. 我们可以记

$$q = V^{k-m}\cdots V^{k-1}\nabla f(x^k),$$

$$\alpha_i = \rho_{k-l}(s^{k-l})^{\mathrm{T}}[V^{k-l+1}\cdots V^{k-1}\nabla f(x^k)],$$

因此递归公式可化为如下的形式:

$$H^k = \left(\prod_{j=k-m}^{k-1} V^j\right)^{\mathrm{T}} H^{k-m} q + \left(\prod_{j=k-m+1}^{k-1} V^j\right)^{\mathrm{T}} s^{k-m}\alpha_{k-m} + \cdots + s^{k-1}\alpha_{k-1}.$$

上述递归公式相比于原来的形式已经简化了不少，因为$\{\alpha_j\}_{j=k-m}^{k-1}$和$q$都是递归计算的结果.

在双循环递归算法中，除了上述第一个循环递归过程(自下而上)外，还有以下第二个循环递归过程. 我们需要在公式中自上而下合并每一项. 以前2项为例，它们有公共的因子$(V^{k-m+1}\cdots V^{k-1})^{\mathrm{T}}$，提取后可以将前2项写为(注意将$V^{k-m}$的定义回代)

$$
\begin{aligned}
&\left(V^{k-m+1}\cdots V^{k-1}\right)^{\mathrm{T}}\left[\left(V^{k-m}\right)^{\mathrm{T}} r+\alpha_{k-m} s^{k-m}\right] \\
=&\left(V^{k-m+1}\cdots V^{k-1}\right)^{\mathrm{T}}\left(r+\left(\alpha_{k-m}-\beta\right) s^{k-m}\right),
\end{aligned}
$$

这正是第二个循环的迭代格式. 注意合并后原递归式的结构仍不变，因此可以递归地计算下去. 最后，变量r就是我们期望的结果$H^k\nabla f(x^k)$.

L-BFGS双循环递归算法

拟牛顿算法的基本框架为:

算法 2 L-BFGS双循环递归

Require: 初始化$q \leftarrow \nabla f(x^k)$.

Ensure: r, 即$H^k \nabla f(x^k)$.

1: 检查初始元素.
2: **for** $i = k-1, \cdots, k-m$ **do**
3: 计算并保存$\alpha_i \leftarrow \rho_i (s^i)^{\mathrm{T}} q$.
4: 更新$q \leftarrow q - \alpha_i y^i$.
5: **end for**
6: 初始化$r \leftarrow \hat{H}^{k-m} q$, 其中$\hat{H}^{k-m}$是$H^{k-m}$的近似矩阵.
7: **for** $i = k-m, \cdots, k-1$ **do**
8: 计算$\beta \leftarrow \rho_i (y^i)^{\mathrm{T}} r$.
9: 更新$r \leftarrow r + (\alpha_i - \beta) s^i$.
10: **end for**

请读者自己手动进行一次双循环递归算法的执行过程. 例如, 可以从$m=4$开始执行, $\hat{H}^{k-m}$假设已知.

L-BFGS双循环递归算法约需要$4mn$次乘法运算, $2mn$次加法运算; 若近似矩阵$\hat{H}^{k-m}$是对角矩阵, 则额外需要n次乘法运算. 由于m不会很大, 因此算法的复杂度是$\mathcal{O}(mn)$. 算法需要的额外存储为临时变量α_i, 其大小是$\mathcal{O}(m)$.
综上所述, L-BFGS双循环算法是非常高效的.

现在的问题就是, $\hat{H}^{k-m}$如何设置. 一种取法可以是取对角矩阵

$$\hat{H}^{k-m} = \gamma_k I_{n\times n} \triangleq \frac{\left(s^{k-1}\right)^{\mathrm{T}} y^{k-1}}{\left(y^{k-1}\right)^{\mathrm{T}} y^{k-1}} I_{n\times n}.$$

这恰好是BB方法的第一个步长.

综上所述, L-BFGS双循环递归算法的完整过程如下.

L-BFGS方法

Algorithm 3 L-BFGS方法

Input: 选择初始点x^0, 参数$m > 0$, $k \leftarrow 0$.

Output: 达到收敛准则后的x^{k+1}.

```
检查初始元素 while 未达到收敛准则 do
    选取近似矩阵$\hat{H}^{k-m}$ 使用算法2(L-BFGS双循环递归算法)计算$d^k = -H^k \nabla f(x^k)$ 使用满足Wolfe准则的线搜索算法确定步长$\alpha_k$ 更新$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$.
    if $k > m$ then
        从内存空间中删除$s^{k-m}, y^{k-m}$.
    计算并保存$s^k = x^{k+1} - x^k, y^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$  $k \leftarrow k+1$.
```

BFGS块迭代格式

实际上，L-BFGS格式下的拟牛顿矩阵的形式可以直接给出，这为我们分析L-BFGS方法提供了很大的便利. 我们称这类方法为块迭代.
引入记号

$$S^k = \left[s^0, \cdots, s^{k-1}\right], \quad Y^k = \left[y^0, \cdots, y^{k-1}\right],$$

则成立如下定理.

定理

块迭代格式 设H^0为BFGS格式的初始矩阵，它对称正定；向量对$\{s^i, y^i\}_{i=0}^{k-1}$满足$(s^i)^{\mathrm{T}} y^i > 0$，$H^k$是由BFGS格式产生的拟牛顿矩阵，则

$$H^k = H^0 + \begin{bmatrix} S^k & H^0 Y^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W^k & -\left(\left(R^k\right)^{-1}\right)^{\mathrm{T}} \\ -\left(R^k\right)^{-1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left(S^k\right)^{\mathrm{T}} \\ \left(Y^k\right)^{\mathrm{T}} H^0 \end{bmatrix},$$

在上述定理中,

$$
\begin{aligned}
W^k &= \left(\left(R^k\right)^{-1}\right)^{\mathrm{T}} \left(D^k + \left(Y^k\right)^{\mathrm{T}} H^0 Y^k\right) \left(R^k\right)^{-1}, \\
\left(R^k\right)_{ij} &= \begin{cases} \left(s^{i-1}\right)^{\mathrm{T}} y^{i-1} & , i \leqslant j, \\ 0, & i > j, \end{cases} \\
D^k &= \mathrm{Diag}\left(\left(s^0\right)^{\mathrm{T}} y^0, \left(s^1\right)^{\mathrm{T}} y^1, \cdots, \left(s^{k-1}\right)^{\mathrm{T}} y^{k-1}\right).
\end{aligned}
$$

上述公式的重要意义在于,如果给定了H^0, S^k, Y^k,可以直接计算出BFGS迭代矩阵H^k. 如果H^0是一个近似矩阵,那么以上定理将给出L-BFGS迭代矩阵的显式格式,进而求出d^k.

BFGS块迭代格式

既然上述格式和L-BFGS双循环递归算法都可以计算d^k, 使用谁更好呢? 我们有如下的分析.

- 双循环递归算法的复杂度较上述块迭代格式低一个常数量级;
- 块迭代格式更紧凑, 且只涉及矩阵运算, 因此实现更直观;
- 由于进行矩阵操作时可以使用BLAS2/3高效执行, 因此使用块迭代格式的速度可能反而更快.

BFGS块迭代格式

使用块迭代格式还有一个优势，那就是可以利用SMW公式(几乎是直接代入即可得)，由H^k所满足的迭代格式直接推出B^k所满足的迭代格式，依据的还是割线方程以及$B^k = (H^k)^{-1}$.

定理

块迭代格式　设B^0为*BFGS*格式的初始矩阵，它对称正定；向量对$\{s^i, y^i\}_{i=0}^{k-1}$满足$(s^i)^\mathrm{T} y^i > 0$, B^k是由*BFGS*格式产生的拟牛顿矩阵，则

$$B^k = B^0 + \begin{bmatrix} B^0 S^k & Y^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left(S^k\right)^\mathrm{T} B^0 S^k & L^k \\ \left(L^k\right)^\mathrm{T} & -D^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left(S^k\right)^\mathrm{T} B^0 \\ \left(Y^k\right)^\mathrm{T} \end{bmatrix},$$

$$\left(L^k\right)_{ij} = \begin{cases} \left(s^{i-1}\right)^\mathrm{T} y^{i-1}, & i > j, \\ 0, & i \leqslant j, \end{cases}$$

其他符号的含义同基于H^k的块迭代格式.

L-BFGS方法的优势

正如我们一开始所希望的, L-BFGS方法确实为大规模问题节省了内存开销, 同时它是具有超线性局部收敛性的算法, 因此可以在大规模优化问题中将效率极大提升, 以至于迅速成为了应用最为广泛的拟牛顿类算法之一.

有趣的是, 尽管DFP方法与BFGS方法是互为对偶的, 但很少有人专门研究L-DFP方法. 这可能是因为DFP方法本身的数值表现不如BFGS方法所致.

如有兴趣, 读者可将其作为拓展研究, 尝试写出L-DFP的算法流程, 并对比在某些实际问题中它与L-BFGS的求解结果和效率.

逻辑回归问题

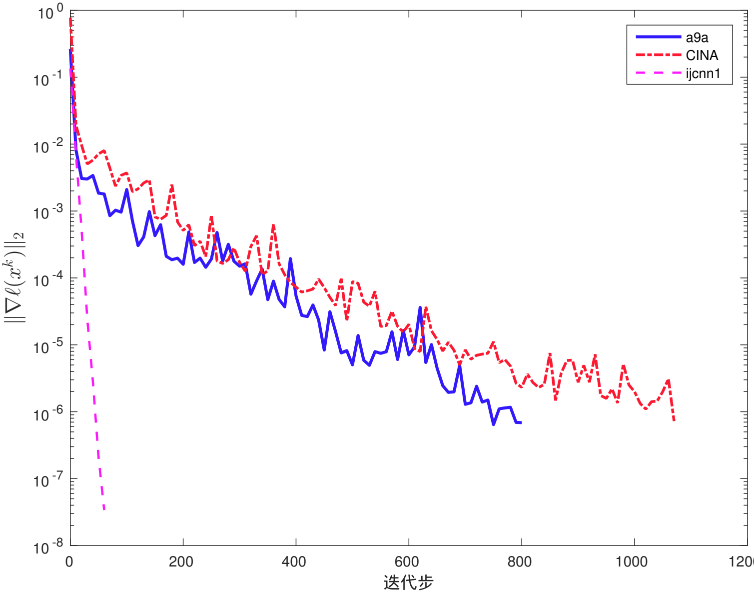
在解决基追踪问题时，我们已经提到了正则化的手段. 下面要考虑的逻辑回归问题也要用到正则化技术.
考虑逻辑回归问题

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad \ell(x) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \ln\left(1 + \exp\left(-b_i a_i^{\mathrm{T}} x\right)\right) + \lambda \|x\|_2^2,$$

并取$\lambda = \frac{1}{100m}$. 由于

$$\nabla \ell(x) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \frac{-b_i a_i}{1 + \exp\left(b_i a_i^{\mathrm{T}} x\right)} + 2\lambda x,$$

对合适的数据集调用L-BFGS算法即可求解上述逻辑回归问题，内存长度不妨为$m = 5$.
下图(见下页)展示了上述问题及L-BFGS算法在LIBSVM上的三个数据集中的表现结果. 请读者分析不同数据集中L-BFGS算法表现的异同，并说明这些异同产生的原因.



10^{0}
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
10^{-6}
10^{-7}
10^{-8}
0
200
400
600
800
1000
1200
$\|\nabla \ell(x^k)\|_2$
迭代步
a9a
CINA
ijcnn1

提纲

1 介绍

2 割线方程

3 拟牛顿矩阵更新方式

4 拟牛顿类算法的收敛性和收敛速度

5 有限内存BFGS方法

6 应用举例

7 拓展性研究

BFGS方法的使用细节

我们在讨论BFGS方法的全局收敛性时, 给出了一个目标函数和Hesse矩阵凸的条件, 要求问题是一个凸问题. 事实上, 如果目标函数是非凸函数, 则BFGS方法或许无法收敛. 令人沮丧的是, 这种情况将占我们遇到的绝大多数.
为此, 在为一般问题设计BFGS算法时, 我们需要对标准算法进行一些修正. 我们下面介绍1种最常用的修正策略, 其余的修正策略可以参见参考文献[3-4].

定义

局部BFGS公式 我们将*BFGS*的迭代公式改写成

$$B^{k+1} = \begin{cases} B^{k+1} = B^k + \dfrac{y^k\left(y^k\right)^{\mathrm{T}}}{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} y^k} - \dfrac{B^k s^k\left(B^k s^k\right)^{\mathrm{T}}}{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} B^k s^k}, & \dfrac{\left(y^k\right)^{\mathrm{T}} s^k}{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} s^k} \geqslant \epsilon \left\|\nabla f\left(x^k\right)\right\|^{\kappa}, \\ B^k, & \text{otherwise}. \end{cases}$$

BFGS方法的使用细节

上述迭代公式的意义是，我们并不要求每一步都更新当前的B^k，其好处是，在迭代初期，我们可以确保每次的更新步足够保守，以从而降低算法不收敛的可能性.

另一方面，我们认为靠近x^*时的更新几乎都是好的，因此需要尽可能使这部分的更新有效，而当靠近迭代点的时候，由于局部问题的凸性(这只需要局部的收敛定理得以保证)，

$$0 < \frac{\left(y^k\right)^{\mathrm{T}} s^k}{\left(s^k\right)^{\mathrm{T}} s^k} \geqslant \epsilon \left\|\nabla f\left(x^k\right)\right\|^{\kappa} \to 0$$

成立，所以靠近x^*时的更新将保持有效，使得算法的效率不受太大影响.

总而言之，我们在求解一些具体问题时，可以按上述局部公式的形式进行对拟牛顿矩阵的更新，它将使算法的收敛性更能得到实际的保证.