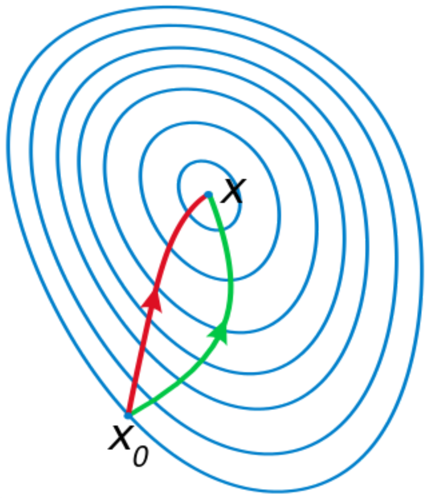
WIKIPEDIA

应用于最优化的牛顿法

维基百科，自由的百科全书

牛顿法是微积分学中, 通过迭代以求解可微函数f的零点的一种算法 (即求x使得$f(x)=0$). 而在最优化中, 牛顿法通常被运用于求解一个二次可微函数f的一阶导数f'的零点 (即求x使得$f'(x)=0$), 同时也是f的驻点. 因此从另一个角度而言，**应用于最优化的牛顿法**是搜索函数$f(x)$的最小值或最大值的一种算法。



最速下降法 (绿色) 与牛顿法 (红色) 在求最小值问题上的比较 (带有步长). 可见牛顿法根据曲率选择了一条"快捷方式".

一维问题的牛顿法主要步骤如下: 取一个点x_0为**初值**, 依如下公式**迭代**:

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f'(x_n)}{f''(x_n)},$$

直至满足一定条件 (如$f'(x_n)=0$或$x_{n+1}-x_n<\varepsilon$, 其中ε为一个给定的足够小的常量) 后, 算法终止。

目录

方法描述

在一维问题中, 牛顿法将构造一个以x_0为首项, 收敛到x^*的数列$\{x_n\}$, 其中x^*使得$f'(x^*)=0$成立.

$f(x)$在$x=x_n$处的二阶泰勒展开式$f_T(x)$为:

$$f_T(x)=f_T(x_n+\Delta x)\approx f(x_n)+f'(x_n)\Delta x+\frac{1}{2}f''(x_n)\Delta x^2.$$

我们希望找到Δx使$x_n+\Delta x$为$f_T(x)$的一个驻点。则将上式对Δx进行求导:

$$0=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\Delta x}(f(x_n)+f'(x_n)\Delta x+\frac{1}{2}f''(x_n)\Delta x^2)=f'(x_n)+f''(x_n)\Delta x.$$

上述方程的解$\Delta x=-\frac{f'(x_n)}{f''(x_n)}$满足

$$x_{n+1}=x_n+\Delta x=x_n-\frac{f'(x_n)}{f''(x_n)}$$

收敛于$f_T(x)$的驻点x^*.

几何意义

牛顿法的几何意义为: 在每一次迭代中，均以一个二次函数去逼近$f(x)$. 具体而言: 在一维问题中，已知x_n, $f(x_n)$, $f'(x_n)$及$f''(x_n)$, 设二次函数表达式为ax^2+bx+c, 依下列方程求解未知数$a,\ b,\ c$,

$$\begin{aligned}&ax_n^2+bx_n+c=f(x_n),\\&2ax_n+b=f'(x_n),\\&2a=f''(x_n).\end{aligned}$$

然后二次函数ax^2+bx+c的极值点即为下一个迭代点,

$$x_{n+1}=-\frac{b}{2a}.$$

而在高维问题中, 上述的极值点也可以是鞍点. 值得一提的是, 如果$f(x)$恰为一个二次函数, 则其极值点只需一次迭代中即可找到.

高维问题求解

上述的一维问题的迭代法可以被推广至多维问题. 只需将导数替换为梯度 ($\nabla f(x)$), 并将二阶导数的倒数替换为Hessian矩阵的逆矩阵 ($\mathbf{H}f(x)$), 即:

$$x_{n+1}=x_n-[\mathbf{H}f(x_n)]^{-1}\nabla f(x_n),n\geq 0.$$

通常, 使用牛顿法时会加入一个步长变量$\gamma\in(0,1)$作微调以使每一步迭代都满足Wolfe条件, 即,

$$x_{n+1}=x_n-\gamma[\mathbf{H}f(x_n)]^{-1}\nabla f(x_n).$$

这个方法被称为**无约束牛顿法**, 通常用于第一步之后的迭代.

只要牛顿法适用, 其收敛于最小值或最大值的速度均颇快于最速下降法. 事实上, 对于每一个极小值, 都存在一个邻域N使得, 只要Hessian矩阵是可逆的且是一个关于$x\in N$的Lipschitz连续函数, 以$x_0\in N$为初值, 步长$\gamma=1$的牛顿法是**二次收敛**的.

求一个高维问题的Hessian矩阵的逆矩阵是一件颇费工夫的事情. 在实际应用中, 通常会用向量$\Delta x=x_{n+1}-x_n$作为线性方程组

$$[\mathbf{H}f(x_n)]\Delta x=-\nabla f(x_n)$$

的解. 这个求解过程中, 透过使用各种矩阵分解方法同近似求解方法, 求解速度可以大大提升. 然而, 这些矩阵分解方法或近似求解方法的使用需要满足一定条件; 例如, Cholesky分解同共轭梯度法只有在$\mathbf{H}f(x)$是正定矩阵时才适用. 这看似是一个限制, 但有时也能充当检验答案的工具; 例如, 在一个最小化问题 ($\min f(x)$) 中, 求出一个x'使得$\nabla f(x')=0$但$\mathbf{H}f(x)$不是正定矩阵, 那么$(x',f(x'))$只是$f(x)$的一个鞍点而非极小值点.

另一方面, 一个有约束的问题的求解过程可能会遇到**当前解**陷入一个鞍点的情况, 这时的Hessian矩阵是对称不定的; 此时则要使用其他方法, 例如Cholesky分解的$\mathbf{LDL^T}$变形或共轭梯度法等的方法, 来迭代得出x_{n+1}.

此外, 为规避求Hessian矩阵的繁琐, 也存在多种拟牛顿法, 通过调整梯度以求出Hessian矩阵的近似.

如果Hessian矩阵$\mathbf{H}f(x)$接近一个奇异矩阵, 则其逆矩阵会变得数值不稳定且迭代不会收敛. 此种情形下, 前人探索出了很多成功的方法来解决问题. 目标之一是通过引入**修正矩阵**B_n使得$\mathbf{H}f(x_n) := \mathbf{H}f(x_n) + B_n$是对称正定的. 其中一种方法是将$\mathbf{H}f(x_n)$对角化, 选择$B_n$使$\mathbf{H}f(x_n) + B_n$有相同的特征向量, 但每一个$\mathbf{H}f(x_n)$的负特征值都被替换成$\epsilon > 0$.

一个应用于莱文贝格－马夸特方法 (其中用到了近似的Hessian矩阵) 的方法是引入一个带系数的单位矩阵$\mu\mathbf{I}$, 系数在每一步迭代中调整. 对于较大的μ及较小的Hessian矩阵, 迭代将变得与以μ^{-1}为步长的最速下降法相似, 这将使得迭代收敛变慢, 但在Hessian矩阵不定或半定的情况下, 收敛更稳定.

参阅

- 拟牛顿法
- 最速下降法
- 高斯–牛顿算法
- 莱文贝格－马夸特方法
- 置信域方法
- 最优化
- Nelder–Mead方法

引用文献

- Avriel, Mordecai. Nonlinear Programming: Analysis and Methods. Dover Publishing. 2003. ISBN 0-486-43227-0.
- Bonnans, J. Frédéric; Gilbert, J. Charles; Lemaréchal, Claude; Sagastizábal, Claudia A. Numerical optimization: Theoretical and practical aspects. Universitext Second revised ed. of translation of 1997 French. Berlin: Springer-Verlag. 2006: xiv+490. ISBN 3-540-35445-X. MR 2265882. doi:10.1007/978-3-540-35447-5.
- Fletcher, Roger. Practical methods of optimization 2nd. New York: John Wiley & Sons. 1987. ISBN 978-0-471-91547-8.
- Nocedal, Jorge; Wright, Stephen J. Numerical Optimization. Springer-Verlag. 1999. ISBN 0-387-98793-2.

外部链接

- Korenblum, Daniel. Newton-Raphson visualization (1D). Bl.ocks. Aug 29, 2015. ffe9653768cb80dfc0da.