第2章 无约束优化基础

无约束优化的一般形式：

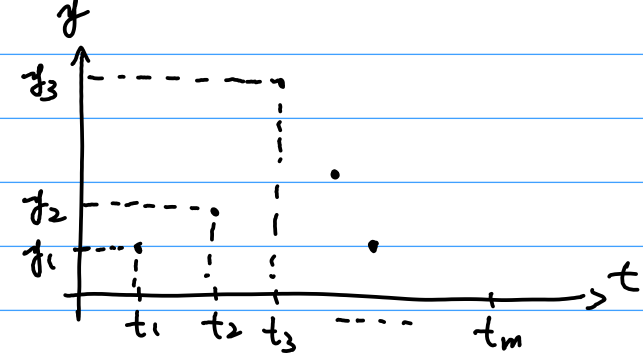
$$\min_{\vec{x}\in\mathbb{R}^n} f(\vec{x})$$

这里 $n\geq 1$，$f:\mathbb{R}^n\longrightarrow\mathbb{R}$ 是光滑函数 (smooth function)，光滑一般指 f 有至少一阶的连续导数. 在很多实际情况，我们没有 f 的全局表示形式，而只有在一些离散点上，如 $x_0, x_1, \cdots$，的值，而我们要根据这些信息来设计我们的算法.

例子：我们在测量一个关于时间 t 的值 $y=y(t)$，我们测得了一些值：

t	t_1	t_2	t_3	$\cdots$	t_m
y	y_1	y_2	y_3	$\cdots$	y_m

表 $\Longleftrightarrow$ 图



根据这些数据的形状和经验，我们猜测

$$y \approx \phi(t;\vec{x}) = x_1 + x_2 e^{-(x_3-t)^2/x_4} + x_5\cos(x_6\cdot t)$$ (这个公式的给出是没有道理讲的)

这里 ϕ 是 y 的模型近似，而 $\vec{x}=\{x_1, x_2, \cdots, x_6\}$ 是一组人为选取的参数.

现在我们试图找一组"最好"的 $\vec{x}$，使用 ϕ 来计算 y "尽可能"好. 也就是说，我们希望

$$r_j(\vec{x}) = y_j - \phi(t_j;\vec{x}),\quad j=1,2,\cdots,m$$ (这个其实是误差).

尽可能正负偏差都小. 这里有两种建模，一种是

$$\min_{\vec{x}\in\mathbb{R}^6} f(\vec{x}) = \sum_{j=1}^{m} |r_j(\vec{x})| \quad \text{或} \quad \min_{x\in\mathbb{R}^6} f(\vec{x}) = \sum_{j=1}^{m} r_j^2(\vec{x})$$

哪一种好？倾向性是明显的，后一个模型的 f 是光滑的，而前一个不是. 因此后一个求解更容易. 事实上，后一种模型是我们熟悉的，它又叫非线性最小二乘 (nonlinear least-squares).

这个模型是一个无约束优化问题的特例。它显示了即使 $\vec{x}$ 的分量很少，这里 $n=6$，但目标函数的计算仍然可以非常昂贵，比如说 m 很大（$>10^5$）时。

假设对上述这样一个较为复杂的问题，我们有了一个近似解 $x^*=(1.1, 0.01, 1.2, 1.5, 2.0, 1.5)$，而对应的 $f(x^*)=0.34$。因为 f 总是大于零的，因此在一些（往往是大多数）指标 j 上，实验观测值 y_j 和模型值 $\phi(t_j, x^*)$ 之间是有误差的。于是在这种情况下，我们如何验证 x^* 确实就是 f 的一个最优解？（或者，它是否足够接近最优解？）为此，我们有必要仔细考虑一下什么是所谓的最优解，及其性质。

解的定义. 点 $\vec{x}^*$ 是一个全局最优解，若 $\forall \vec{x}\in\mathbb{R}^n$，$f(\vec{x}^*)\leq f(\vec{x})$.

局部最优解的定义 点 $\vec{x}^*$ 是一个局部最优解，若存在 $\vec{x}^*$ 的邻域 $\mathcal{N}$，使 $f(\vec{x}^*)\leq f(\vec{x})$，$\forall \vec{x}\in\mathcal{N}$.（注意 $\mathcal{N}$ 是开集）.

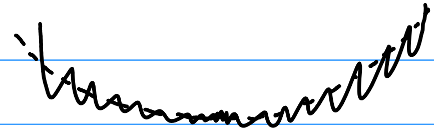
有时上述定义也被称为弱（weak）局部最优解，它区别于强（strong）局部最优解，或者又称为严格（strict）局部最优解，定义为： 点 $\vec{x}^*$ 是一个严格局部最优解，若存在 $\vec{x}^*$ 的邻域 $\mathcal{N}$，使 $f(\vec{x}^*)< f(\vec{x})$，$\forall \vec{x}\in\mathcal{N}$ 且 $\vec{x}\neq\vec{x}^*$.

例：对常（constant）函数 $f(x)=2$，任一点 x 都是它的弱局部最优点。而对 $f(x)=(x-2)^4$，$x=2$ 是它的严格局部最优点。

大家可能会有一个印象，严格局部最优点总是落在"山谷"底部，因此它们总是孤立的（isolated）.

(即邻域内有且仅有这一个局部最优点)

示意图

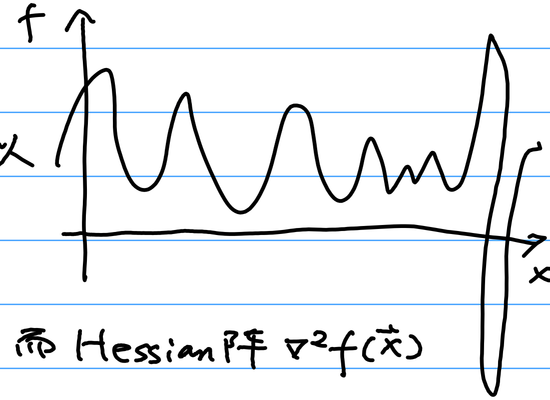


事实上，这个印象是错误的，例：

$$f(x)=x^4\cos(1/x)+2x^4,\quad f(0)=0.$$

这个函数有二次连续导数，有严格局部最优点 $x^*=0$. 但注意到 $\cos(1/x)$ 在0附近无穷振荡，因此在距0任意近的地方，都有无穷多的严格局部最优点. (可matlab绘图).

于是我们有了一个理解，多峰函数的全局极值的求解是困难的.



确定局部最小值 (minmum)

这里我们要充分利用光滑性，比如当目标函数存在二阶连续导函数时，我们可以考察最优值点 $\vec{x}^*$ 处的梯度 $\nabla f(\vec{x}^*)$ 和 Hessian 阵 $\nabla^2 f(x^*)$ 的性质.

注：多元函数的梯度 $\nabla f(\vec{x})$ 是一个向量，它对应于一元函数的一阶导函数. 而 Hessian阵 $\nabla^2 f(\vec{x})$ 是一个矩阵. 对应于一元函数的二阶导函数.

例：$f(x_1,x_2)=x_1^3+2x_1x_2+x_2^3+e^{x_1}$

$$\nabla f(x_1,x_2)=\begin{pmatrix}\frac{\partial f}{\partial x_1}\\[2mm] \frac{\partial f}{\partial x_2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3x_1^2+2x_2+e^{x_1}\\[2mm] 3x_2^2+2x_1\end{pmatrix}\qquad \nabla^2 f(x_1,x_2)=\begin{pmatrix}\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1\partial x_2}\\[2mm] \frac{\partial^2 f}{\partial x_2\partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}6x_1+e^{x_1} & 2\\[2mm] 2 & 6x_2\end{pmatrix}$$

所有一阶偏导数形式　　　　所有二阶偏导数形式

Taylor定理 令 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 连续可微(continuously differentiable)，$\vec{p} \in \mathbb{R}^n$，则存在 $t \in (0,1)$，使

$$f(\vec{x}+\vec{p}) = f(\vec{x}) + \nabla f(\vec{x}+t\vec{p})^T \vec{p} .$$

特别地，对于 f 二阶连续可微(twice continuously differentiable)，存在 $t \in (0,1)$，使

$$\nabla f(\vec{x}+\vec{p}) = \nabla f(\vec{x}) + \int_0^1 \nabla^2 f(\vec{x}+t\vec{p})\vec{p}\, dt.$$

且

$$f(\vec{x}+\vec{p}) = f(\vec{x}) + \nabla f(\vec{x})^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(\vec{x}+t\vec{p})\vec{p} .$$

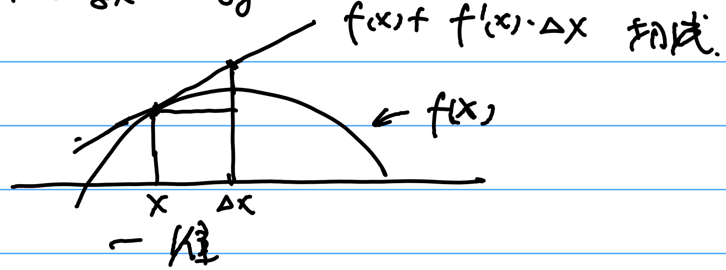
注记：上述其实就是中值定理，且可以很快从一元中值定理导出，只需令

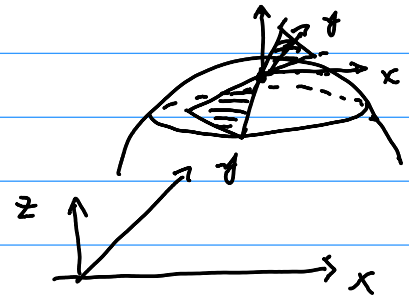
$$\varphi(t) = f(\vec{x}+t\vec{p}), \quad \varphi(0) = f(\vec{x}), \quad \varphi(1) = f(\vec{x}+\vec{p})$$

则有

$$\varphi'(t) = \nabla f(\vec{x}+t\vec{p})^T \cdot \vec{p}, \quad \varphi''(t) = \vec{p}^T \nabla^2 f(\vec{x}+t\vec{p})\vec{p}$$

注记：在开始进一步讨论之前，让我们先回顾一下可微这个概念。在一维的时候，函数在 x 点可微意味着在该点附近，函数的变化 Δf 和自变量的变化 Δx 是一个线性变化，比率为 $f'(x)$，误差为 $o(\Delta x)$。也就是说函数在 x 点附近的改变大致是一个关于 Δx 的线性函数。因此当我们知道了 f 在 x 点可微，我们可以容易地通过 $f(x)$ 求得 x 附近所有函数值的近似。而二维的时候，函数的变化可以近似地看作在 xoz 平面和 yoz 平面上两个斜率为 $\frac{\partial f}{\partial x}$ 和 $\frac{\partial f}{\partial y}$ 向量张成的线性空间。





$f(x) + \frac{\partial f}{\partial x}\cdot\Delta x + \frac{\partial f}{\partial y}\cdot\Delta y$ 切平面.

于是我们同样可以根据 $f(x)$ 的值估计 $f(x)$ 附近的值. 可微的本质含义就在于此. 进一步, 若二次可微, 则在 x 点附近, 当我们知道 $f(x)$ 值之后, 估值可以做得更准确. 因为我们知道在 x 点附近, $f(x)$ 的变化总是关于 Δx 的一个二次函数.

以上论述对于学过微积分的同学应该不是新内容. 但对它的正确理解恰好构成了我们优化算法的理论基础. 而正由于它的简单, 因此也格外地基本和重要.

自然地, 下面我们考虑连续可微函数在某局部最优点附近会有什么性质. 这个很容易想到, 如果 x^* 是一个局部最小点, 那么在 x^* 点出发的任何方向上, 不能有负的方向导数, 否则沿那个方向我们有更小的值, 也不能有正的方向导数, 否则沿这个方向的反方向我们会有更小的值 (这一点体现连续性本质). 于是过这一点的任何方向, 我们只能有零导数. 严格归纳可得下面定理:

定理 (一阶必要条件) (First-Order Necessary Conditions) 若 x^* 是一个局部最优, 且 f 在 x^* 的开邻域内连续可微, 则 $\nabla f(x^*)=0$. [P.15 Thm 2.2]

证明: 反证, 假设 (suppose for contradiction) $\nabla f(x^*)\neq 0$. 令 $\vec{p}=-\nabla f(x^*)$, 则

(这个是套路) $\rightarrow$ $$p^T\nabla f(x^*) = -\|\nabla f(x^*)\|^2 < 0$$

由于 ∇f 在 x^* 附近连续可微, 故存在 $T>0$, 使得

$$p^T\nabla f(x^*+t\vec{p})<0, \quad \forall\, t\in[0,T]$$ (还是连续性本质).

故对任意 $\bar{t}\in(0,T]$, 由 Taylor 定理知, 存在 $t\in(0,\bar{t})$, 使

$$f(x^*+\bar{t}\vec{p}) = f(x^*) + \bar{t}\vec{p}^T\nabla f(x^*+t\vec{p}),$$ (中值定理直接给方向变化定性)

于是 $f(x^*+\bar{t}\vec{p}) < f(x^*)$，对 $\forall\ \bar{t}\in(0,T)$ 成立。于是我们找到 x^* 的一个 f 下降方向 ($\vec{p}=-\nabla f$)，这与 x^* 是局部最小值矛盾 (contradiction).

注记：很容易把 $\vec{p}$ 变成任意方向.

我们称 x^* 是一个稳定点 (stationary point)，若 $\nabla f(x^*)=0$. 一个局部最小点必然是稳定点.

回顾一下，矩阵 (matrix) B 是正定的 (positive definite)，若 $\vec{p}^T B\vec{p}>0$，$\forall\ \vec{p}\neq 0$；而半正定 (positive semidefinite) 指 $p^T B p\geq 0$，对所有 $\vec{p}$ 成立.

定理 (二阶 (second-order) 必要性条件)

若 x^* 是 f 的一个局部极小点，且 f 在 x^* 的开邻域二次连续可微，则 $\nabla f(x^*)=0$ 且 $\nabla^2 f(x^*)$ 半正定.
[P16, Thm 2.3]

有了二次连续可微，使我们可以考虑上一个定理剩下的东西. 因为上一个定理只是必要条件. 也就是 $\nabla f(x^*)=0$ 不能保证 x^* 是 f 的局部极小点，但若我们有更多的信息 (二次连续可微) 则我们可以做进一步的判断 ($\nabla^2 f(x^*)$ 正定?) 证明的思路其实基本一致.

证明：显然 $\nabla f(x^*)=0$. 反证，假设 $\nabla^2 f(x)$ 不正定，也即存在 $\vec{p}$ 使 $\vec{p}^T\nabla^2 f(x)\vec{p}<0$. 于是由连续性，存在 $T>0$ 使

$$\vec{p}^T\nabla^2 f(x^*+t\vec{p})\vec{p}<0,\quad \forall\ t\in[0,T].$$

于是对 $\forall\ \bar{t}\in(0,T]$ 总有 $t\in(0,\bar{t})$，使

$$f(x^*+\bar{t}\vec{p})=f(x^*)+\bar{t}\vec{p}^T\nabla f(x^*)+\frac{1}{2}\bar{t}^2\vec{p}^T\nabla^2 f(x^*+t\vec{p})\vec{p}<f(x^*).$$

矛盾.

下面我们考虑 f 在 x^* 点是局部极小点的充分条件（sufficient condition）.（书上定理 P16. Thm 2.4 之前一行，x^* 应该是 x^*）.

定理（二阶充分条件）

设 f 在 x^* 的开邻域二次连续可微，$\nabla f(x^*)=0$ 且 $\nabla^2 f(x^*)$ 正定，则 x^* 是一个严格局部最小点.

前一定理留下了一条空隙，半正定，意味着 Taylor 展开的第二项和第三项可以同时为零. 这样一来 f 的性质必须交由第四项去判断，这一点很麻烦. 于是干脆给一个让第三项永远大于零的条件. 因此定理的出现和证明都是显然的.

证明：由条件，存在 $r>0$，使对开球 $\mathcal{D}=\{x \mid \|x-x^*\|<r\}$，有 $\forall x\in\mathcal{D}$，$\nabla^2 f(x)$ 正定.（连续性）

于是 $\forall \vec{p}\neq 0$，且 $x^*+\vec{p}\in\mathcal{D}$，有

$$f(x^*+\vec{p}) = f(x^*)+\vec{p}^T\nabla f(x^*)+\frac{1}{2}\vec{p}^T\nabla^2 f(x)\vec{p}$$

$$= f(x^*)+\frac{1}{2}\vec{p}^T\nabla^2 f(x)\vec{p}.$$

$$\Rightarrow\quad f(x^*+\vec{p}) > f(x^*).$$

注意以上定理不是必要条件. 例如 $f(x)=x^4$，对 $x^*=0$，显然是其严格最小值. 但 $\nabla^2 f(x^*)$ 是零阵，不满足条件.

若 f 是凸函数，则局部极小值和全局极小值都变得容易刻画.

定理 若 f 是凸函数，任何局部极小值点 x^* 都是其全局极小值点. 进而若 f 可微，则任何稳定点 x^* 都是 f 的全局极小值点.

证明：假设 x^* 是局部但不是全局极小值点，也即存在 $z\in\mathbb{R}^n$，使 $f(z)<f(x^*)$. 则在线段（line segment）x^*z 上的点 x 可表为

$$x=\lambda z+(1-\lambda)x^*,\quad \lambda\in(0,1].\qquad (\text{注意 } x \text{ 过 } x^* \text{ 的邻域}).$$

由于f是凸的，故

$$f(x) \le \lambda f(z) + (1-\lambda) f(x^*) < f(x^*). \quad (与x^*局部极小矛盾).$$

第二部分书上的证明过于技术化。直观上理解是若有一点z比x^*还小，那么由于凸函数，可以把凸从z一直划到x^*，从而使x^*的梯度"有点斜"。

以上定理是无约束优化问题的基础。几乎所有算法都寻找▽f的退化(vanish)点。

不光滑问题(nonsmooth)。(困难的且不在本书讨论范围)。

本书只考虑，通常目标函数存在二阶连续导数的光滑情形。

2.2 算法概览

两个基本策略(stratge)：线搜索(line search)和信任域(trust region)

所谓线搜索，算法要在一个已选定的方向p_k上检查这个方向，从当前的点x_k开始，寻找一个新的更低的函数值做为新的迭代值。这个问题，即在p_k方向上走多长距离的问题，可以看作是一个一维优化问题，即找步长α：

$$\min_{\alpha>0} f(x_k+\alpha p_k) \qquad (2.9)$$

尽管精确地求解(2.9)能够在p_k方向上获得最大的收益，但是一个精确的搜索不仅过于昂贵，而且没有必要。作为替代，线搜索算法应该产生一系列有限数量的尝试步长，直到找到一个(2.9)问题的一个低精度(但够用)的逼近。

而第二个策略，即信任域。我们对问题目标函数f的信息的获取是通过f的一个在x_k附近的近似模型m_k获取的。(直接计算f代价巨大)。于是当x远离x_k时，m_k就不再是f的一个良好的逼近。

我们在 x_k 的附近求 m_k 的最小值，也即寻找 p，满足

$$\min_p m_k(x_k+p), \quad x_k+p \text{ 离 } x_k \text{ 不可太远（在信任域内）}. \tag{2.10}$$

若上述问题的解不能在 f 上形成一个令人满意的下降，我们则认为信任域取得过大，于是缩小其范围，并重解问题(2.10)。通常，信任域是一个球，定义为 $\|p\|_2 \le \Delta$，这里数值 $\Delta > 0$ 被称为信任域的半径（radius）。当然椭圆或矩形的信任域也可以被考虑。

问题(2.10)中模型 m_k 一般定义为一个二次函数形式：

$$m_k(x_k+p) = f_k + p^T \nabla f_k + \frac{1}{2} p^T B_k p, \tag{2.11}$$

这里 f_k，∇f_k，和 B_k 相应地（respectively）是数值，向量，和矩阵。这里下标 k 表示 f_k 和 ∇f_k 是 x_k 点的函数值和梯度值（下同），于是 m_k 和 f 在当前迭代值 x_k 的导数值相等。矩阵 B_k 一般是 Hessian 阵 $\nabla^2 f_k$ 或者它的某种近似。

信任域和线搜索分别决定了下一个迭代步中的搜索方向和步长。线搜索在 p_k 方向上寻找一个令人满意的步长 α_k，而信任域则是先规定一个最大范围 Δ_k，然后在这个范围内寻找一个有最大改进的方向（根据 m_k 而非 f）。若之后在 f 中发现实际效果不好，则减少 Δ_k，然后重试。

线搜索和信任域分别在第3章和第4章详细讨论。我们先预览两个主要问题：为线搜索选择搜索方向 p_k，和在信任域方法中选择 Hessian 阵 B_k。这是两个密切相关的问题。

为线搜索决定搜索方向

最速下降方向 $-\nabla f_k$ 对线搜索的方向来说是一个最显然的选择。在从 x_k 出发的所有方向中，它是 f 下降最快的方向，这个只要从 Taylor 定理 (Thm 2.1) 中不难看出。

$$f(x_k+\alpha p) = f(x_k) + \alpha p^T \nabla f_k + \frac{1}{2}\alpha^2 p^T \nabla^2 f(x_k+tp)p, \quad t\in(0,1).$$

于是从 x_k 出发沿 p 方向下降率由 α 的系数，$p^T\nabla f_k$ 决定，因此，将 p 单位化后，下降最快的方向由下面问题决定

$$\min_p p^T\nabla f_k, \quad \|p\|=1.$$

而 $p^T\nabla f_k = \|p\|\cdot\|\nabla f_k\|\cdot\cos\theta$，这里 θ 是 p 和 ∇f_k 之间的夹角。于是显然有当 $\theta=\pi$ 时，有最小值 -1。所以方向为和等高线 (contours) 正交 (orthogonal) 的方向。

最速下降法就是线搜索每次都沿 $p_k=-\nabla f_k$ 搜索的方法，有多种方法可以选择步长 α_k，留待第3章解决。这个方法的优点是最速下降方向的选择只需计算 ∇f_k 而不用二阶导数，但它对于复杂问题而言非常的慢。

除了最速下降方向，线搜索还可以用很多其它方向。事实上，任何下降方向，一个方向和 $-\nabla f_k$ 之间夹角小于 $\frac{\pi}{2}$ 的方向，这样就能保证在该方向上 f 下降。这一点也可以用 Taylor 定理验证：

$$f(x_k+\varepsilon p_k) = \varepsilon p_k^T\nabla f_k + O(\varepsilon^2)$$

当 p_k 是下降方向，p_k 和 ∇f_k 之间的夹角满足 $\cos\theta_k<0$，因此

$$p_k^T\nabla f_k = \|p_k\|\|\nabla f_k\|\cos\theta_k < 0,$$

于是 $f(x_k+\varepsilon p_k) < f(x_k)$，对任何足够小的 $\varepsilon>0$.

另一个重要的搜索方向，也许是最重要的，是Newton方向。这个方向可以从 $f(x_k+p)$ 的二阶Taylor逼近，即

$$f(x_k+p) \approx f_k + p^T \nabla f_k + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f_k p \stackrel{def}{=} m_k(p)$$

得到。

假设 $\nabla^2 f_k$ 对称正定，我们可以通过求解使 $m_k(p)$ 最小的 p 得到Newton方向，只要求 $m_k(p)$ 的导数零点，就有

$$p_k^N = -\nabla^2 f_k^{-1} \nabla f_k.$$

当函数 $f(x_k+p)$ 和二次模型 $m_k(p)$ 区别不大时Newton方向是合理的。当 $\|p\|$ 不大时，$f(x_k+p)$ 和 $m_k(p)$ 非常接近。

Newton方向用于线搜索时要求 $\nabla^2 f_k$ 是对称正定的，此时

$$\nabla f_k^T p_k^N = -(p_k^N)^T \nabla^2 f_k p_k^N \leq -\sigma_k \|p_k^N\|^2, \quad \sigma_k > 0.$$

只要 $\nabla f_k \neq 0$，我们就有Newton方向是下降方向。不像最速下降方向，Newton方向上有一个自然的步长是 $\alpha=1$。只有当这个步长不能令人满意时，我们才会调整步长。

当 $\nabla^2 f_k$ 不正定时，Newton方向可能连定义都没有，即使有，可能也不是下降方向。在这些情况下，需要对 p_k 做一些基于 $\nabla^2 f_k$ 信息的调整。这些技巧我们在第6章讨论。

使用Newton方向的方法收敛率很高，一般是二阶。也意味着通常只需几步就可以收敛。但缺点是Hessian阵的计算有很多实际困难。

拟Newton方向（Quasi-Newton）提供了一个不需要计算Hessian阵但能保持超收敛率的迭代方法。

这里 $\nabla^2 f_k$ 被它的一个近似 B_k 取代，B_k 在迭代的每步都用来自新步长的新信息加以更新（也即有一个 $B_{k+1}=\phi(B_k)$ 的迭代公式）。比如从中值定理

$$\nabla f(x+p)=\nabla f(x)+\nabla^2 f(x)p+\int_0^1\left[\nabla^2 f(x+tp)-\nabla^2 f(x)\right]p\,dt,$$

由 ∇f 连续，令 $x=x_k$，$p=x_{k+1}-x_k$（注意这里是向量减法），

$$\nabla f_{k+1}=\nabla f_k+\nabla^2 f_{k+1}(x_{k+1}-x_k)+o(\|x_{k+1}-x_k\|).$$

当 x_k 和 x_{k+1} 都和真解 x^* 很近时，且 $\nabla^2 f$ 足够稳定（书上这里误写成 ∇f，P24 公式 (2.15) 之上倒数两行）于是有

$$\nabla^2 f_{k+1}(x_{k+1}-x_k)\approx\nabla f_{k+1}-\nabla f_k. \tag{2.15}$$

因此当我们构造 B_{k+1}（从 B_k），要考虑这一点：

$$B_{k+1}s_k=y_k \tag{2.16}$$

这里

$$s_k=x_{k+1}-x_k,\quad y_k=\nabla f_{k+1}-\nabla f_k$$

我们一般还要对 B_{k+1} 施加额外要求，比如对称，同时要求 B_k 和 B_{k+1} 之差是一个低秩的矩阵（为了容易构造），而 B_0 则由用户选取。

两类流行的 Hessian 阵近似 B_k 更新的方法是对称秩 1（symmetric-rank-one，SR1）公式

$$B_{k+1}=B_k+\frac{(y_k-B_ks_k)(y_k-B_ks_k)^T}{(y_k-B_ks_k)^Ts_k} \tag{2.17}$$

和BFGS公式 (Broyden, Fletcher, Goldfarb 和 Shanno)

$$B_{k+1}=B_k-\frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k}+\frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k}. \qquad (2.18)$$

注意这里B_k和B_{k+1}之间的差，(2.17)是秩为1的矩阵，(2.18)是秩为2的矩阵. 可以证明(2.18)只要B_0是正定的和$s_k^T y_k>0$，则B_k总是正定的. 这些在第8章讨论.

B_k在构造拟Newton方向时，用来替代精确的Hessian阵，也即

$$p_k=-B_k^{-1}\nabla f_k.$$

在一些实际使用的拟Newton法用一系列B_k^{-1}的更新来替代B_k的更新，比如对应(2.17)和(2.18)的逆阵逼近为 ($H_k:=B_k^{-1}$)

$$H_{k+1}=(I-\rho_k s_k y_k^T)H_k(I-\rho_k y_k s_k^T)+\rho_k s_k s_k^T, \quad \rho_k=\frac{1}{y_k^T s_k}.$$

于是p_k的计算为：

$$p_k=-H_k\nabla f_k.$$

两个用拟Newton方法求解大规模问题时的主要因素：不完全分离 (partially separable) 和更新中的内存限制将在第9章讨论.

我们预览的最后一类搜索方向是通过非线性共轭梯度法产生的 (nonlinear conjugate gradient methods). 形式为：

$$p_k=-\nabla f(x_k)+\beta_k p_{k-1}$$

这里β_k是一个数值，用来确保p_k和p_{k-1}共轭．这个概念我们将在第5章讨论．共轭梯度法原本是用来计算系数矩阵对称正定的线性方程组 $Ax=b$，这个问题可等价地转为

$$\min \ \phi(x)=\frac{1}{2}x^TAx+b^Tx .$$

这个方法没有 Newton 或拟 Newton 法快，但好处是不用存储矩阵．

我们上面讨论的所有方法，除了共轭梯度法以外，都可纳入信任域法的框架．

信任域方法的模型．

若在公式(2.11)

$$m_k(x_k+p)=f_k+p^T\nabla f_k+\frac{1}{2}p^TB_kp ,$$

中令$B_k=0$，则得信任域框架导出的最速下降法

$$\min_p \ f_k+p^T\nabla f_k \quad , \ \|p_k\|_2\le\Delta_k .$$

于是有

$$p_k=-\frac{\Delta_k\nabla f_k}{\|\nabla f_k\|}$$ (一切计算信息具备，因此称为 closed form)

若B_k取精确的Hessian阵，则为 Newton法．由于有限制$\|p\|_2<\Delta_k$，因此即使$\nabla^2 f_k$不对称正定时，p_k也不会无效．因此信任域框架下的 Newton 方保证了实际操作中的高效率．若B_k的取法是某种拟 Newton 方法的取法，则成为信任域拟Newton法．

规模比例（scaling，自己看）

收敛率（rates of convergence）

令 $\{x_k\}$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中的序列，收敛至 x^*. 我们称收敛是 Q-线性的，若存在 $r\in(0,1)$，使

$$\frac{\|x_{k+1}-x^*\|}{\|x_k-x^*\|}\leq r\quad，对 k 充分大成立.$$

若收敛被称为 Q-超线性，若

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

特别地，Q-平方收敛，指

$$\frac{\|x_{k+1}-x^*\|}{\|x_k-x^*\|^2}\leq M,\quad 对 k 充分大成立.$$

Q-P阶收敛指

$$\frac{\|x_{k+1}-x^*\|}{\|x_k-x^*\|^p}\leq M，对 k 充分大成立.$$

R收敛率（r-rates of convergence）

我们称收敛是 R-线性的，若有非负数量序列 $\{v_k\}$，使

$$\|x_k-x^*\|\leq v_k$$

对全部 k 成立，且 $\{v_k\}$ Q-线性收敛至 0.

类似地，若$\{v_k\}$ Q-超线性收敛至0，则称$\{x_n\}$ R-超线性收敛．若$\{v_k\}$ Q-p阶收敛，则称$\{x_n\}$ R-p阶收敛．