

第五章 无约束优化算法

修贤超

<https://xianchaoxiu.github.io>

- 5.1 线搜索方法
- 5.2 梯度类算法
- 5.3 次梯度算法
- 5.4 牛顿类算法
- 5.5 拟牛顿类算法
- 5.6 信赖域算法
- 5.7 非线性最小二乘问题算法

引言: 无约束可微优化算法

■ 考虑无约束优化问题

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

■ 线搜索 $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$

- 先确定下降方向: 负梯度、牛顿方向、拟牛顿方向等
- 按某种准则搜索步长

■ 信赖域 $z^k = x^k + d^k$

$$d^k = \arg \min_d (g^k)^\top d + d^\top B d \quad \text{s.t.} \quad \|d\|_2 \leq \Delta_k$$

- 给定信赖域半径 (步长) Δ_k , 构造信赖域子问题求解方向 d^k
- 如果 z^k 满足下降性条件, 则 $x^{k+1} = z^k$, 否则 $x^{k+1} = x^k$ 更新 Δ_k

线搜索算法

- 求解 $f(x)$ 的最小值点如同盲人下山, 无法一眼望知谷底
 - 首先确定下一步该向哪一方向行走
 - 再确定沿着该方向行走多远后停下以便选取下一个下山方向
- 线搜索类算法的数学表述

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$$

- α_k 为步长
- d^k 为下降方向, 即 $(d^k)^\top \nabla f(x^k) < 0$

α_k 的选取

- 首先构造一元辅助函数

$$\phi(\alpha) = f(x^k + \alpha d^k)$$

- 线搜索的目标是选取合适的 α_k 使得 $\phi(\alpha_k)$ 尽可能减小

- α_k 应该使得 f 充分下降
- 不应在寻找 α_k 上花费过多的计算量

- 一个自然的想法是寻找 α_k 使得

$$\alpha_k = \arg \min_{\alpha > 0} \phi(\alpha)$$

- 称为**精确线搜索算法**, 在实际应用中较少使用

例 5.1

- 考虑一维无约束优化问题

$$\min_x f(x) = x^2$$

- 迭代初始点 $x^0 = 1$, 下降方向 $d^k = -\text{sign}(x^k)$

- 选取如下两种步长

$$\alpha_{k,1} = \frac{1}{3^{k+1}}, \quad \alpha_{k,2} = 1 + \frac{2}{3^{k+1}}$$

- 简单计算可以得到

$$x_1^k = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{3^k}\right), \quad x_2^k = \frac{(-1)^k}{2}\left(1 + \frac{1}{3^k}\right)$$

- 序列 $\{f(x_1^k)\}$ 和序列 $\{f(x_2^k)\}$ 均单调下降, 但序列 $\{x_1^k\}$ 收敛的点不是极小值点, 序列 $\{x_2^k\}$ 则在原点左右振荡, 不存在极限

- **定义 5.1** 设 d^k 是点 x^k 处的下降方向, 若

$$f(x^k + \alpha d^k) \leq f(x^k) + c_1 \alpha \nabla f(x^k)^\top d^k$$

则称步长 α 满足 **Armijo 准则**

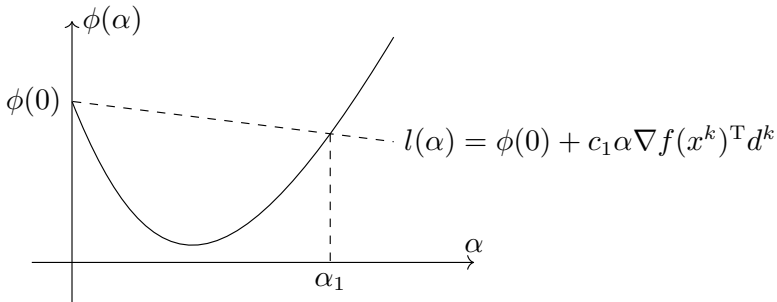
- 参数 $c_1 \in (0, 1)$ 是一个常数, 通常取 $c_1 = 10^{-3}$
- 引入 Armijo 准则保证每一步迭代充分下降
- 需要配合其他准则以保证迭代的收敛性, 反例 $\alpha = 0$

几何含义

- 点 $(\alpha, \phi(\alpha))$ 必须在直线

$$l(\alpha) = \phi(0) + c_1 \alpha \nabla f(x^k)^\top d^k$$

的下方, 图中区间 $[0, \alpha_1]$ 中的点均满足 Armijo 准则



- 给定初值 $\hat{\alpha}$, 以指数方式缩小试探步长, 找到第一个满足 Armijo 准则的点

$$\alpha_k = \gamma^{j_0} \hat{\alpha}$$

其中 $j_0 = \min\{j \mid f(x^k + \gamma^j \hat{\alpha} d^k) \leq f(x^k) + c_1 \gamma^j \hat{\alpha} \nabla f(x^k)^\top d^k\}, \gamma \in (0, 1)$

=====

算法 5.1 线搜索回退法

- 1 选择初始步长 $\hat{\alpha}$, 参数 $\gamma, c \in (0, 1)$. 初始化 $\alpha \leftarrow \hat{\alpha}$
- 2 **while** $f(x^k + \alpha d^k) > f(x^k) + c\alpha \nabla f(x^k)^\top d^k$ **do**
- 3 令 $\alpha \leftarrow \gamma\alpha$
- 4 **end while**
- 5 输出 $\alpha_k = \alpha$

■ **定义 5.2** 设 d^k 是点 x^k 处的下降方向, 若

$$\begin{aligned}f(x^k + \alpha d^k) &\leq f(x^k) + c\alpha \nabla f(x^k)^\top d^k, \\f(x^k + \alpha d^k) &\geq f(x^k) + (1 - c)\alpha \nabla f(x^k)^\top d^k\end{aligned}$$

则称步长 α 满足 **Goldstein 准则**, 其中 $c \in (0, \frac{1}{2})$

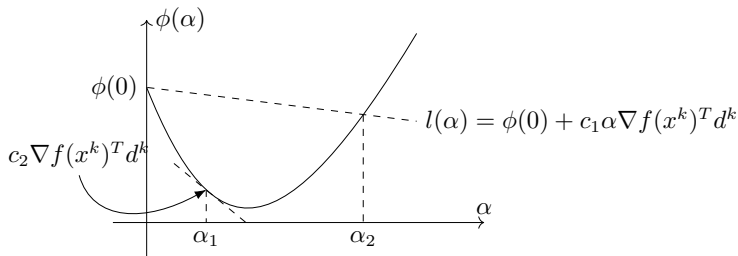
■ **定义 5.3** 设 d^k 是点 x^k 处的下降方向, 若

$$\begin{aligned}f(x^k + \alpha d^k) &\leq f(x^k) + c_1\alpha \nabla f(x^k)^\top d^k, \\ \nabla f(x^k + \alpha d^k)^\top d^k &\geq c_2 \nabla f(x^k)^\top d^k\end{aligned}$$

则称步长 α 满足 **Wolfe 准则**, 其中 $c_1, c_2 \in (0, 1)$ 为给定的常数且 $c_1 < c_2$

Wolfe 准则

- Wolfe 准则实际要求 $\phi(\alpha)$ 在点 α 处切线的斜率不能小于 $\phi'(0)$ 的 c_2 倍
- $\phi(\alpha)$ 的极小值点 α^* 处有 $\phi'(\alpha^*) = \nabla f(x^k + \alpha^* d^k)^T d^k = 0$, 因此 α^* 永远满足条件二. 而选择较小的 c_1 可使得 α^* 同时满足条件一, 即 Wolfe 准则在绝大多数情况下会包含线搜索子问题的精确解



- **定理 5.1** 考虑一般的迭代格式 $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$, 其中 d^k 是搜索方向, α_k 是步长, 且在迭代过程中 Wolfe 准则满足. 假设目标函数 f 下有界、连续可微且梯度 L -利普希茨连续, 即

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\|, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

那么

$$\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2 \theta_k \|\nabla f(x^k)\|^2 < +\infty$$

其中 $\cos \theta_k$ 为负梯度 $-\nabla f(x^k)$ 和下降方向 d^k 夹角的余弦, 即

$$\cos \theta_k = \frac{-\nabla f(x^k)^\top d^k}{\|\nabla f(x^k)\| \|d^k\|}$$

这个不等式也被称为 Zoutendijk 条件

线搜索算法的收敛性

- **推论 5.1** 对于迭代法 $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$, 设 θ_k 为每一步负梯度 $-\nabla f(x^k)$ 与下降方向 d^k 的夹角, 并假设对任意的 k , 存在常数 $\gamma > 0$, 使得

$$\theta_k < \frac{\pi}{2} - \gamma$$

则在 Zoutendijk 定理成立的条件下, 有

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \nabla f(x^k) = 0$$

线搜索算法收敛性的证明

证明 假设结论不成立, 即存在子列 $\{k_l\}$ 和正常数 $\delta > 0$, 使得

$$\|\nabla f(x^{k_l})\| \geq \delta, \quad l = 1, 2, \dots$$

根据 θ_k 的假设, 对任意的 k 有

$$\cos \theta_k > \sin \gamma > 0$$

仅考虑 Zoutendijk 条件中第 k_l 项的和满足

$$\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2 \theta_k \|\nabla f(x^k)\|^2 \geq \sum_{l=1}^{\infty} \cos^2 \theta_{k_l} \|\nabla f(x^{k_l})\|^2$$

这显然和 Zoutendijk 定理矛盾

- 5.1 线搜索方法
- 5.2 梯度类算法
- 5.3 次梯度算法
- 5.4 牛顿类算法
- 5.5 拟牛顿类算法
- 5.6 信赖域算法
- 5.7 非线性最小二乘问题算法

梯度下降法

- 注意到 $\phi(\alpha) = f(x^k + \alpha d^k)$ 有泰勒展开

$$\phi(\alpha) = f(x^k) + \alpha \nabla f(x^k)^\top d^k + \mathcal{O}(\alpha^2 \|d^k\|^2)$$

- 由柯西不等式, 当 α 足够小时取 $d^k = -\nabla f(x^k)$ 会使函数下降最快

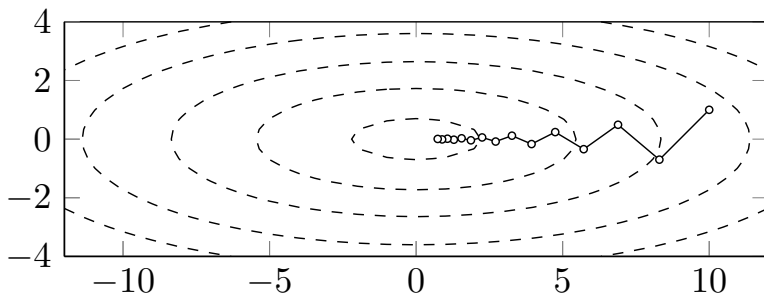
$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f(x^k)$$

- 另一种理解方式

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \arg \min_x f(x^k) + \nabla f(x^k)^\top (x - x^k) + \frac{1}{\alpha_k} \|x - x^k\|_2^2 \\ &= \arg \min_x \|x - (x^k - \alpha_k \nabla f(x^k))\|_2^2 \\ &= x^k - \alpha_k \nabla f(x^k) \end{aligned}$$

二次函数的梯度法

- 设二次函数 $f(x, y) = x^2 + 10y^2$, 初始点 (x^0, y^0) 取为 $(10, 1)$, 取固定步长 $\alpha_k = 0.085$, 使用梯度法 $x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f(x^k)$ 进行 15 次迭代



二次函数的收敛定理

■ 定理 5.2 考虑正定二次函数

$$f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x$$

设最优值点为 x^* . 若使用梯度法 $x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f(x^k)$ 并选取 α_k 为精确线搜索步长, 即

$$\alpha_k = \frac{\|\nabla f(x^k)\|^2}{\nabla f(x^k)^\top A \nabla f(x^k)}$$

则梯度法关于迭代点列 $\{x^k\}$ 是 **Q-线性收敛**, 即

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

梯度法在凸函数上的收敛性

- 对于可微函数 f , 若存在 $L > 0$, 对任意的 $x, y \in \text{dom } f$ 有

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\|$$

则称 f 是**梯度利普希茨连续的**, 相应利普希茨常数为 L

- **定理 5.3** 设 $f(x)$ 为 **凸的梯度 L -利普希茨连续函数**, $f^* = f(x^*) = \inf_x f(x)$ 存在且可达, 如果步长 α_k 取为常数 α 且满足 $0 < \alpha < \frac{1}{L}$, 那么点列 $\{x^k\}$ 的函数值收敛到最优值, 且在函数值的意义下收敛速度为 $\mathcal{O}(\frac{1}{k})$

梯度法在强凸函数上的收敛性

■ **引理 5.1** 设函数 $f(x)$ 是 \mathbb{R}^n 上的凸可微函数, 则以下结论等价

- f 的梯度为 L -利普希茨连续的
- 函数 $g(x) = \frac{L}{2}x^\top x - f(x)$ 是凸函数
- $\nabla f(x)$ 有**余强制性**, 即对任意的 $x, y \in \mathbb{R}^n$, 有

$$(\nabla f(x) - \nabla f(y))^\top (x - y) \geq \frac{1}{L} \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|^2$$

■ **定理 5.4** 设 $f(x)$ 为 m -强凸的梯度 L -利普希茨连续函数, $f(x^*) = \inf_x f(x)$ 存在且可达. 如果步长 α 满足 $0 < \alpha < \frac{2}{m+L}$, 那么由梯度下降法迭代得到的点列 $\{x^k\}$ 收敛到 x^* , 且为**Q-线性收敛**

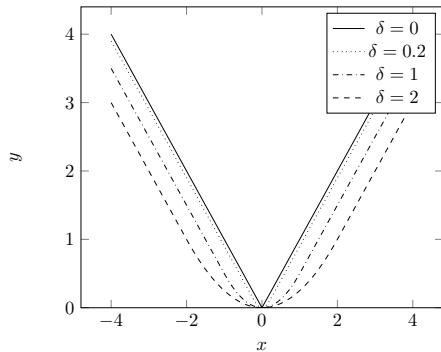
应用举例: LASSO 问题求解

■ 考虑

$$\min f(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|^2 + \mu \|x\|_1$$

■ 由于 $\|x\|_1$ 不光滑, 考虑 Huber 光滑函数

$$l_\delta(x) = \begin{cases} \frac{1}{2\delta} x^2, & |x| < \delta \\ |x| - \frac{\delta}{2}, & \text{其他} \end{cases}$$



应用举例: LASSO 问题求解

■ 光滑化 LASSO 问题为

$$\min f_{\delta}(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|^2 + \mu L_{\delta}(x), \quad \text{其中} \quad L_{\delta}(x) = \sum_{i=1}^n l_{\delta}(x_i),$$

■ $f_{\delta}(x)$ 的梯度为

$$\nabla f_{\delta}(x) = A^{\top}(Ax - b) + \mu \nabla L_{\delta}(x),$$

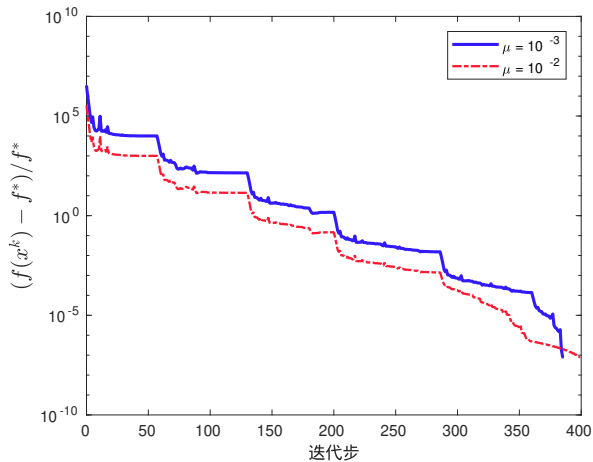
其中

$$(\nabla L_{\delta}(x))_i = \begin{cases} \text{sign}(x_i), & |x_i| > \delta \\ \frac{x_i}{\delta}, & |x_i| \leq \delta \end{cases}$$

■ $f_{\delta}(x)$ 的梯度是利普希茨连续的, 且相应常数为 $L = \|A^{\top}A\|_2 + \frac{\mu}{\delta}$

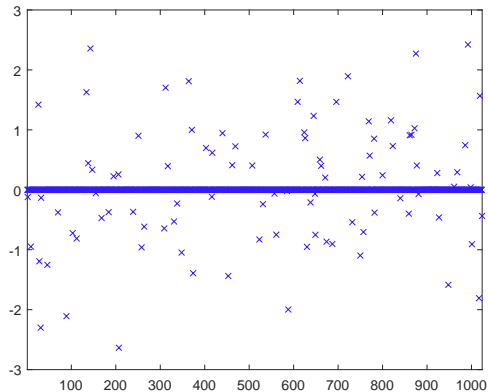
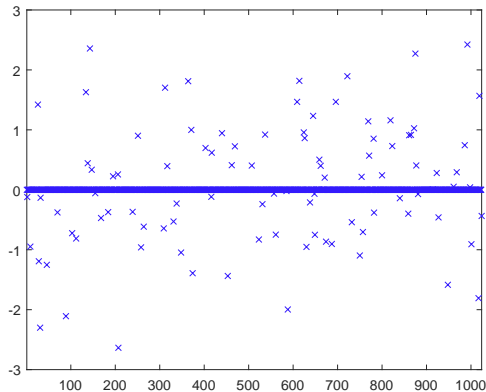
应用举例: LASSO 问题求解

■ 光滑化 LASSO 问题求解迭代过程



应用举例: LASSO 问题求解

■ 精确解 (左) v.s. 梯度法解 (右)



- 5.1 线搜索方法
- 5.2 梯度类算法
- 5.3 次梯度算法
- 5.4 牛顿类算法
- 5.5 拟牛顿类算法
- 5.6 信赖域算法
- 5.7 非线性最小二乘问题算法

次梯度算法结构

■ 回顾一阶充要条件

$$x^* \text{ 是一个全局极小点} \quad \Leftrightarrow \quad 0 \in \partial f(x^*)$$

■ 类似梯度法构造如下次梯度算法的迭代格式

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k g^k, \quad g^k \in \partial f(x^k)$$

- 固定步长 $\alpha_k = \alpha$
- 固定 $\|x^{k+1} - x^k\|$, 即 $\alpha_k \|g^k\|$ 为常数
- 消失步长 $\alpha_k \rightarrow 0$ 且 $\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k = +\infty$
- 选取 α_k 使其满足某种线搜索准则

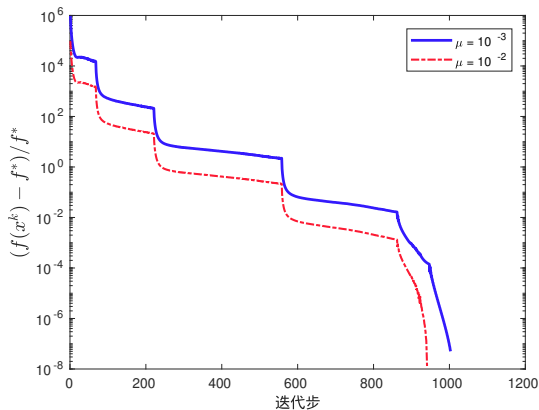
应用举例: LASSO 问题求解

■ 考虑 LASSO 问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|^2 + \mu \|x\|_1$$

■ 次梯度算法

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k (A^\top (Ax^k - b) + \mu \text{sign}(x^k))$$



Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈