第五章 无约束优化算法

修贤超

https://xianchaoxiu.github.io

目录

梯度法的困难

- 考虑无约束优化问题

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

- 梯度下降法

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

- 当 $\nabla^2 f(x)$ 的条件数较大时，收敛速度比较缓慢
- 如果 $f(x)$ 足够光滑，可利用 $f(x)$ 的二阶信息改进下降方向以加速迭代

经典牛顿法

- 对于可微二次函数 $f(x)$, 考虑在点 x^k 的二阶泰勒近似

$$f(x^k + d^k) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^\top d^k + \frac{1}{2}(d^k)^\top \nabla^2 f(x^k) d^k + o(\|d^k\|^2)$$

- 将等式右边视作 d^k 的函数并极小化, 得到牛顿方程

$$\nabla^2 f(x^k) d^k = -\nabla f(x^k)$$

- 若 $\nabla^2 f(x^k)$ 非奇异, 可构造迭代格式

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla^2 f(x^k)^{-1} \nabla f(x^k)$$

- 当步长 $\alpha_k = 1$ 时, 称为经典牛顿法

经典牛顿法的收敛性

- **定理 5.6** 假设目标函数 f 是二阶连续可微函数，且海瑟矩阵在最优值点 x^* 的一个邻域 $N_\delta(x^*)$ 内是利普希茨连续的，即存在常数 $L > 0$ 使得

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leqslant L\|x - y\|, \quad \forall x, y \in N_\delta(x^*)$$

如果 $f(x)$ 在点 x^* 处满足

$$\nabla f(x^*) = 0, \nabla^2 f(x^*) \succ 0$$

则对于经典牛顿法有

  - 如果初始点离 x^* 足够近，则迭代点列 $\{x^k\}$ 收敛到 x^*
  - $\{x^k\}$ 是 Q-二次收敛到 x^*
  - $\{\|\nabla f(x^k)\|\}$ 是 Q-二次收敛到 0

收敛速度分析

- 经典牛顿法说明
  - 初始点 x^0 需要距离最优解充分近，即只有**局部收敛性**
  - $\nabla^2 f(x^*)$ 需正定，半正定条件下可能退化到 Q-线性收敛
  - $\nabla^2 f$ 的条件数较高时，将对初值的选择作出较严苛的要求
- 解决方案
  - 先以梯度类算法求得较低精度的解，然后用牛顿法加速
  - 修正牛顿法
  - 非精确牛顿法
  - 拟牛顿类算法

修正牛顿法

算法 5.3　带线搜索的修正牛顿法

```
给定初始点 x^0
for k = 0, 1, 2, ··· do
    确定矩阵 E^k 使得矩阵 B^k = ∇²f(x^k) + E^k 正定且条件数较小
    求解修正的牛顿方程 B^k d^k = −∇f(x^k) 得方向 d^k
    使用任意一种线搜索准则确定步长 α_k
    更新 x^{k+1} = x^k + α_k d^k
end for
```

===========

- B^k **应具有较低的条件数**
- **对** $\nabla^2 f(x)$ **的改动较小, 以保存二阶信息**

非精确牛顿法

- 当变量维数很大时，海瑟矩阵 $\nabla^2 f(x)$ 计算存在困难，且求逆代价很高
- 使用迭代法求解牛顿方程，在一定的精度下提前停机, 以提高求解效率
- 引入向量 r^k 来表示残差, 将上述方程记为

$$\nabla^2 f(x^k)d^k = -\nabla f(x^k) + r^k$$

因此终止条件可设置为

$$\|r^k\| \leqslant \eta_k \|\nabla f(x^k)\|$$

- 不同的 $\{\eta_k\}$ 将导致不同的精度要求, 使算法有不同的收敛速度

应用举例: 逻辑回归模型

- 考虑二分类的逻辑回归模型

$$\min_x \quad \ell(x) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^m \ln(1+\exp(-b_i a_i^\top x)) + \lambda\|x\|_2^2$$

- 计算目标函数的梯度与海瑟矩阵

$$\begin{aligned}\nabla \ell(x) &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^m \frac{1}{1+\exp(-b_i a_i^\top x)} \cdot \exp(-b_i a_i^\top x) \cdot (-b_i a_i) + 2\lambda x \\ &= -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^m (1-p_i(x)) b_i a_i + 2\lambda x\end{aligned}$$

其中 $p_i(x) = \frac{1}{1+\exp(-b_i a_i^\top x)}$

应用举例: 逻辑回归模型

- 进一步对 $\nabla \ell(x)$ 求导

$$
\begin{aligned}
\nabla^2 \ell(x) &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} b_i \cdot \nabla p_i(x) a_i^\top + 2\lambda I \\
&= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} b_i \frac{-1}{(1+\exp(-b_i a_i^\top x))^2} \cdot \exp(-b_i a_i^\top x) \cdot (-b_i a_i a_i^\top) + 2\lambda I \\
&= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} (1-p_i(x)) p_i(x) a_i a_i^\top + 2\lambda I \quad (b_i^2 = 1)
\end{aligned}
$$

应用举例: 逻辑回归模型

- 引入矩阵 $A = [a_1, a_2, \cdots, a_m]^\top \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 向量 $b = (b_1, b_2, \cdots, b_m)^\top$, 以及

$$p(x) = (p_1(x), p_2(x), \cdots, p_m(x))^\top$$

- 重写梯度和海瑟矩阵为

$$\nabla \ell(x) = -\frac{1}{m} A^\top (b - b \odot p(x)) + 2\lambda x$$
$$\nabla^2 \ell(x) = \frac{1}{m} A^\top W(x) A + 2\lambda I$$

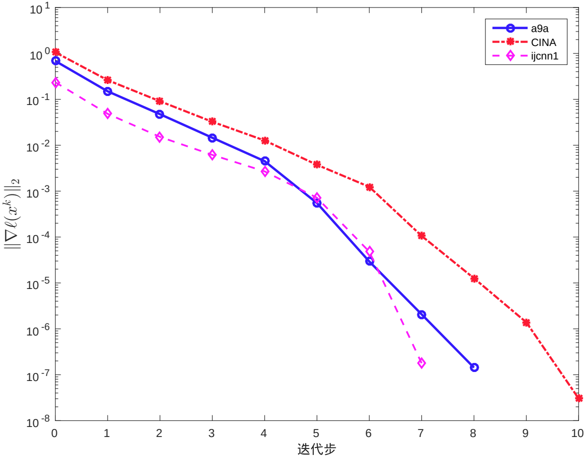
- 最终牛顿法迭代格式为

$$x^{k+1} = x^k + (\frac{1}{m} A^\top W(x^k) A + 2\lambda I)^{-1} (\frac{1}{m} A^\top (b - b \odot p(x^k)) - 2\lambda x^k)$$

应用举例: 逻辑回归模型

- 设置精度条件为

$$\|\nabla^2\ell(x^k)d^k+\nabla\ell(x^k)\|_2\leqslant\min\{\|\nabla\ell(x^k)\|_2^2,0.1\|\nabla\ell(x^k)\|_2\}$$



目录

割线方程的推导

- 设 $f(x)$ 是二阶连续可微函数. 对 $\nabla f(x)$ 在点 x^{k+1} 处一阶泰勒近似

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

- 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

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

- 忽略高阶项 $\|s^k\|^2$, 近似海瑟矩阵的矩阵 B^{k+1} 满足方程

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

  或其逆矩阵 H^{k+1} 满足

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

- 上述两个方程称为**割线方程**

曲率条件

- 近似矩阵 B^k 正定, 即有必要条件

$$(s^k)^\top B^{k+1} s^k > 0 \quad \Rightarrow \quad (s^k)^\top y^k > 0$$

- 如果线搜索使用 Wolfe 准则

$$\nabla f(x^k + \alpha d^k)^\top d^k \geqslant c_2 \nabla f(x^k)^\top d^k$$

$$\Downarrow$$

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

- 两边同时减去 $\nabla f(x^k)^\top s^k$, 由于 $c_2 - 1 < 0$ 且 s^k 是下降方向得到

$$(y^k)^\top s^k \geqslant (c_2 - 1) \nabla f(x^k)^\top s^k > 0$$

拟牛顿算法的基本框架

算法 5.4 拟牛顿算法框架

给定初始坐标 $x^0 \in \mathbb{R}^n$，初始矩阵 $B^0 \in \mathbb{R}^{n\times n}$(或 H^0)，$k=0$

while 未达到停机准则 **do**

计算方向 $d^k = -(B^k)^{-1}\nabla f(x^k)$ 或 $d^k = -H^k\nabla f(x^k)$

通过线搜索 (Wolfe) 产生步长 $\alpha_k > 0$，令 $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$

更新海瑟矩阵的近似矩阵 B^{k+1} 或其逆矩阵 H^{k+1}

$k \leftarrow k+1$

end while

===========

- **基于 H^k 的拟牛顿算法更实用**
- **基于 B^k 的拟牛顿算法有较好的理论性质**

秩一更新 (SR1)

- 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 $uu^\top$ 是秩一矩阵, 且有秩一更新

$$B^{k+1} = B^k + auu^\top$$

- 根据割线方程 $B^{k+1}s^k = y^k$, 代入秩一更新得到

$$(B^k + auu^\top)s^k = y^k$$

$$\Downarrow$$

$$auu^\top s^k = (a \cdot u^\top s^k)u = y^k - B^k s^k$$

- 令 $u = y^k - B^k s^k$，代入上式有

$$(a \cdot (y^k - B^k s^k)^\top s^k)(y^k - B^k s^k) = y^k - B^k s^k$$

秩一更新公式

- 假设 $(a\cdot(y^k-B^ks^k)^\top s^k)\neq 0$, 则 $a=\frac{1}{(y^k-B^ks^k)^\top s^k}$
- 拟牛顿矩阵 B^k 的秩一更新公式为

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

拟牛顿矩阵 H^k 的秩一更新公式为

$$H^{k+1}=H^k+\frac{vv^\top}{v^\top y^k},\quad v=s^k-H^ky^k$$

- B^k 和 H^k 的公式在形式上互为对偶

BFGS 公式

- 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

$$B^{k+1} = B^k + auu^\top + bvv^\top$$

- 根据割线方程 $B^{k+1}s^k = y^k$, 将秩二更新的待定参量式代入得到

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

$$\Downarrow$$

$$(a \cdot u^\top s^k)u + (b \cdot v^\top s^k)v = y^k - B^k s^k.$$

- 令 $(a \cdot u^\top s^k)u$ 对应 y^k 相等, $(b \cdot v^\top s^k)v$ 对应 $-B^k s^k$ 相等, 即有

$$a \cdot u^\top s^k = 1, \quad u = y^k, \quad b \cdot v^\top s^k = -1, \quad v = B^k s^k$$

BFGS 公式

- 将上述参量代入割线方程, 即得 BFGS 更新公式

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

- 在拟牛顿类算法中, 基于 B^k 的 BFGS 公式为

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

利用 Sherman-Morrison-Woodbury (SMW) 公式，基于 H^k 的 BFGS 公式为

$$H^{k+1} = (I - \frac{s^k(y^k)^\top}{(s^k)^\top y^k})^\top H^k (I - \frac{s^k(y^k)^\top}{(s^k)^\top y^k}) + \frac{s^k(s^k)^\top}{(s^k)^\top y^k}$$

拟牛顿法的全局收敛性

- 定理 5.8 假设初始矩阵 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

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

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

$$m \|z\|^2 \leqslant z^\top \nabla^2 f(x) z \leqslant M \|z\|^2$$

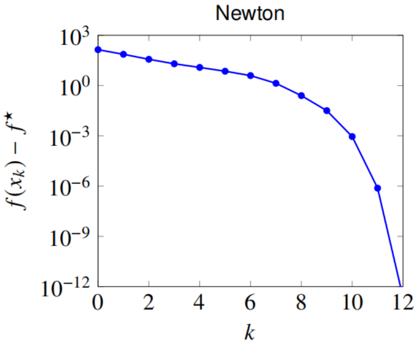
那么 BFGS 结合 Wolfe 线搜索的拟牛顿算法全局收敛到 $f(x)$ 的极小值点 x^*

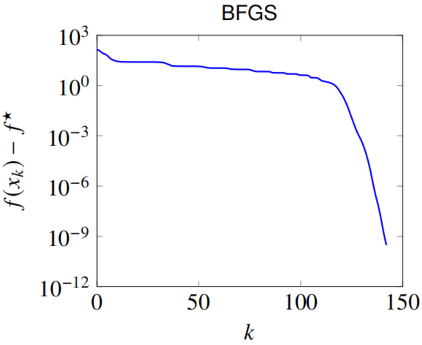
- 如果海瑟矩阵在 x^* 处 Lip-连续，则迭代点列 $\{x^k\}$ 为 Q-超线性收敛到 x^*

例子

- 考虑极小化问题
$$\min_{x\in\mathbb{R}^{100}} \quad c^\top x - \sum_{i=1}^{500} \ln(b_i - a_i^\top x)$$

- 牛顿法每次迭代的计算代价为 $\mathcal{O}(n^3)$ 加上计算海瑟矩阵, 而 BFGS 方法的每步计算代价仅为 $\mathcal{O}(n^2)$, 因此 BFGS 算法可能更快取得最优解





Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈