第三章 无约束优化算法

修贤超

https://xianchaoxiu.github.io

目录

引言: 无约束可微优化算法

- 考虑无约束优化问题

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

- 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 $z^k = x^k + d^k$

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

  - 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

- 考虑一维无约束优化问题

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

- 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

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

- 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

非精确线搜索

- **定义** 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

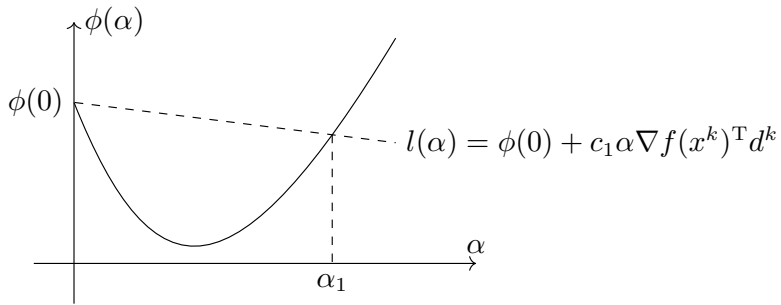
- 参数 $c_1 \in (0, 1)$ 是一个常数, 通常取 $c_1 = 10^{-3}$
- 引入 Armijo 准则保证每一步迭代充分下降
- 需要配合其他准则以保证迭代的收敛性, 反例 $\alpha = 0$

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



回退法

- 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 线搜索回退法

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

Wolfe 准则

- **定义** 设 d^k 是点 x^k 处的下降方向, 若

$$f(x^k + \alpha d^k) \leq f(x^k) + c\alpha \nabla f(x^k)^\top d^k,$$
$$f(x^k + \alpha d^k) \geq f(x^k) + (1-c)\alpha \nabla f(x^k)^\top d^k$$

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

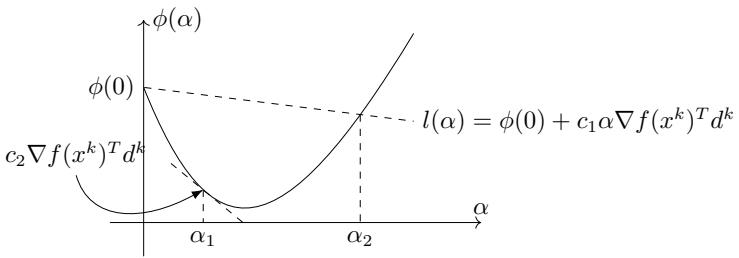
- **定义** 设 d^k 是点 x^k 处的下降方向, 若

$$f(x^k + \alpha d^k) \leq f(x^k) + c_1 \alpha \nabla f(x^k)^\top d^k,$$
$$\nabla f(x^k + \alpha d^k)^\top d^k \geq c_2 \nabla f(x^k)^\top d^k$$

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 $\phi'(\alpha^*) = \nabla f(x^k + \alpha^* d^k)^\top d^k = 0$, 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



Zoutendijk 定理

- **定理** 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** 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

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

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

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

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

目录

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

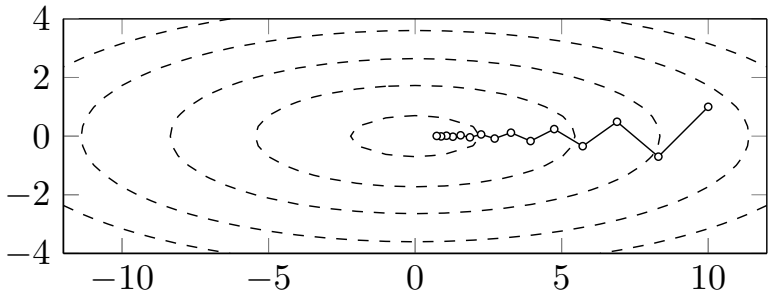
$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k \nabla f(x^k)$$

- 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** 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

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

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 $x, y \in \mathrm{dom}\ f$ 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 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** 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** 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**

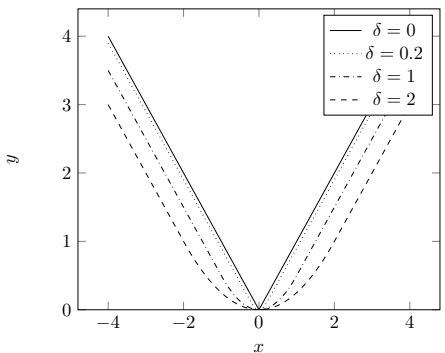
应用举例: LASSO 问题求解

- 考虑

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

- 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

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

- $f_\delta(x)$ 的梯度为

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

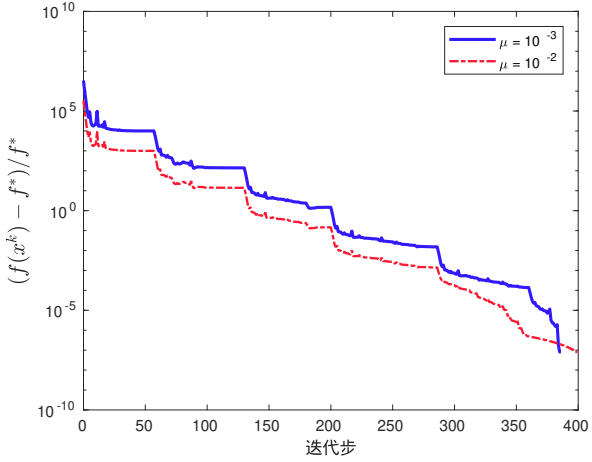
其中

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

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

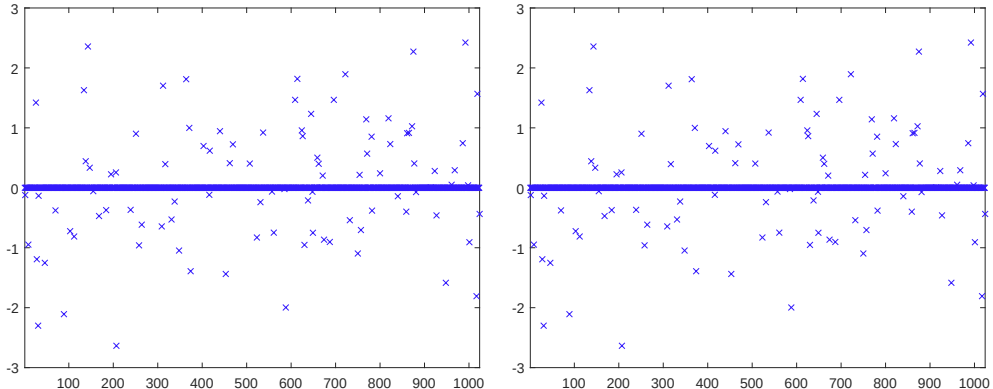
应用举例: LASSO 问题求解

- 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)



目录

次梯度算法结构

- 回顾一阶充要条件

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

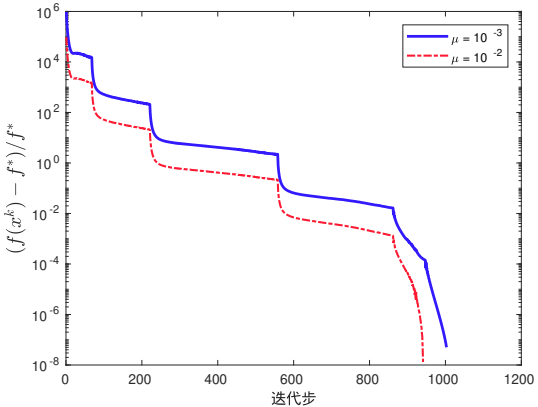
- 类似梯度法构造如下次梯度算法的迭代格式

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

  - 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 $\alpha_k \to 0$ 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 $\min \quad f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 + \mu\|x\|_1$
- 次梯度算法 $x^{k+1} = x^k - \alpha_k(A^\top(Ax^k - b) + \mu \text{sign}(x^k))$



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** 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 带线搜索的修正牛顿法

1 给定初始点 x^0
2 **for** $k = 0, 1, 2, \cdots$ **do**
3 确定矩阵 E^k 使得矩阵 $B^k = \nabla^2 f(x^k) + E^k$ 正定且条件数较小
4 求解修正的牛顿方程 $B^k d^k = -\nabla f(x^k)$ 得方向 d^k
5 使用任意一种线搜索准则确定步长 α_k
6 更新 $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$
7 **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

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

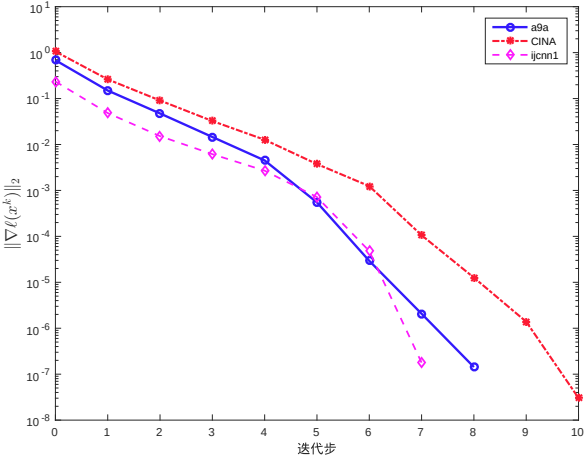
- 最终牛顿法迭代格式为

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

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 拟牛顿算法框架

1 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)，$k = 0$
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 更新海瑟矩阵的近似矩阵 B^{k+1} 或其逆矩阵 H^{k+1}
6 $k \leftarrow k + 1$
7 **end while**
==========

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

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

拟牛顿矩阵 H^k 的秩一更新公式为

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

- 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

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

拟牛顿法的全局收敛性

- **定理** 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^*

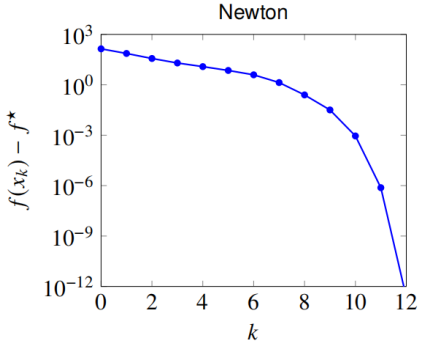
- 如果海瑟矩阵在 x^* 处 Lip-连续, 则迭代点列 $\{x^k\}$ 为 Q-超线性收敛到 x^*

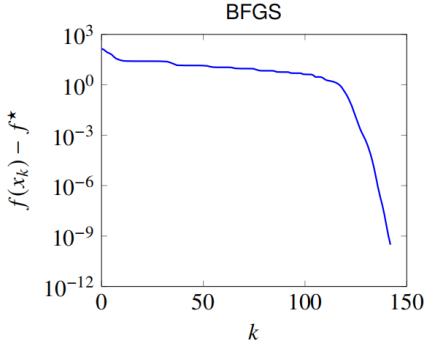
例

- 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





目录

信赖域算法框架

- 在当前迭代点 x^k 建立局部模型, 求出最优解

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

- 更新模型信赖域的半径
  - 模型足够好 $\Rightarrow$ 增大半径
  - 模型比较差 $\Rightarrow$ 缩小半径
  - 否则半径不变
- 对模型进行评价
  - 好 $\Rightarrow$ 子问题的解即下一个迭代点
  - 差 $\Rightarrow$ 迭代点不改变

信赖域子问题

- 根据带拉格朗日余项的泰勒展开

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

- 利用 $f(x)$ 的二阶近似来刻画 $f(x)$ 在点 x^k 处的性质

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

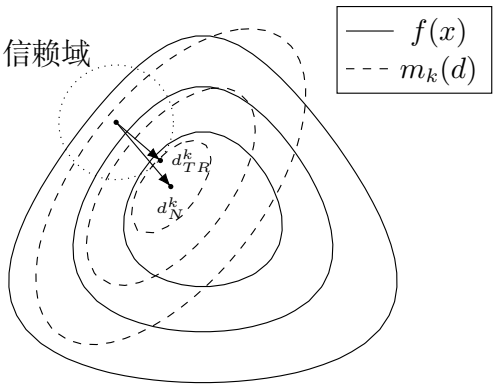
- 由于泰勒展开的局部性, 需对上述模型添加信赖域约束

$$\Omega_k = \{x^k + d \mid \|d\| \leqslant \Delta_k\}$$

信赖域子问题

- 信赖域算法每一步都需要求解如下子问题

$$\min_{d\in\mathbb{R}^n} \quad m_k(d) \quad \text{s.t.} \quad \|d\| \le \Delta_k \tag{3}$$



模型近似程度好坏的的衡量

- 引入

$$\rho_k = \frac{f(x^k) - f(x^k + d^k)}{m_k(0) - m_k(d^k)} \tag{4}$$

- 函数值实际下降量与预估下降量（即二阶近似模型下降量）的比值
- 如果 ρ_k 接近 1, 说明 $m_k(d)$ 来近似 $f(x)$ 是比较成功的, 则扩大 Δ_k
- 如果 ρ_k 非常小甚至为负, 说明过分地相信了二阶模型 $m_k(d)$, 则缩小 Δ_k

算法: 信赖域算法

1 给定最大半径 $\Delta_{\max}$，初始半径 Δ_0，初始点 $x^0, k \leftarrow 0$

2 给定参数 $0 \le \eta < \bar{\rho}_1 < \bar{\rho}_2 < 1, \gamma_1 < 1 < \gamma_2$

3 **while** 未达到停机准则 **do**

4 计算子问题 (3) 得到迭代方向 d^k

5 根据 (4) 计算下降率 ρ_k

6 更新信赖域半径

$$\Delta_{k+1} = \begin{cases} \gamma_1 \Delta_k, & \rho_k < \bar{\rho}_1 \\ \min\{\gamma_2 \Delta_k, \Delta_{\max}\}, & \rho_k > \bar{\rho}_2 \text{ 以及 } \|d^k\| = \Delta_k \\ \Delta_k, & \text{其他} \end{cases}$$

7 更新自变量

$$x^{k+1} = \begin{cases} x^k + d^k, & \rho_k > \eta \\ x^k, & \text{其他} \end{cases} \qquad \texttt{/* 只有下降比例足够大才更新 */}$$

8 $k \leftarrow k + 1$

9 **end while**

目录

非线性最小二乘问题

- 考虑最小二乘问题

$$\min_x \quad f(x) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{m} r_j^2(x)$$

- 记 $r(x) = (r_1(x), r_2(x), ..., r_m(x))^\top$, 问题可以表述为

$$\min \quad f(x) = \frac{1}{2}\|r(x)\|_2^2$$

- 记 $J(x) \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 是向量值函数 $r(x)$ 在点 x 处的雅可比矩阵

$$J(x) = \begin{bmatrix} \nabla r_1(x)^\top \\ \nabla r_2(x)^\top \\ \vdots \\ \nabla r_m(x)^\top \end{bmatrix}$$

最小二乘问题

- $f(x)$ 的梯度和海瑟矩阵

$$\nabla f(x) = \sum_{j=1}^{m} r_j(x) \nabla r_j(x) = J(x)^\top r(x)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 f(x) &= \sum_{j=1}^{m} \nabla r_j(x) \nabla r_j(x) + \sum_{i=1}^{m} r_i(x) \nabla^2 r_i(x) \\ &= J(x)^\top J(x) + \sum_{i=1}^{m} r_i(x) \nabla^2 r_i(x) \end{aligned}$$

- 小残差 $\Rightarrow$ 高斯-牛顿方法和 Levenberg-Marquardt 方法
- 大残差 $\Rightarrow$ 引入带结构的拟牛顿方法

高斯-牛顿方法

- 使用近似 $\nabla^2 f_k \approx J_k^\top J_k$, 省略 $\nabla^2 r_j$ 的计算, 减少了计算量
- 高斯-牛顿法的迭代方向 d_k^{GN} 满足

$$J_k^\top J_k d_k^{GN} = -J_k^\top r_k$$

- 另一种理解: 在点 x_k 处, 考虑近似 $r(x_k + d) \approx r_k + J_k d$ 得到

$$\min_d \quad f(x_k + d) = \frac{1}{2}\|r(x_k + d)\|^2 \approx \frac{1}{2}\|r_k + J_k d\|^2$$

- 然后更新 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

算法: 高斯-牛顿方法

1 给定始值 $x_0, k \leftarrow 0$
2 **while** 未达到停机准则 **do**
3 计算残差向量 r_k，雅可比矩阵 J_k
4 求解线性最小二乘问题 $\min_d \quad \frac{1}{2}\|r_k + J_k d\|^2$ 确定下降方向 d_k
5 使用线搜索准则计算步长 α_k
6 更新 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
7 $k \leftarrow k + 1$
8 **end while**

Levenberg-Marquardt (LM) 方法

- LM 方法本质为信赖域方法, 更新方向为如下问题的解

$$\min_{d} \quad \frac{1}{2}\|J^k d + r^k\|^2 \quad \text{s.t.} \quad \|d\| \leq \Delta_k \tag{5}$$

- 将如下近似当作信赖域方法中的 m_k

$$m_k(d) = \frac{1}{2}\|r^k\|^2 + d^\top (J^k)^\top r^k + \frac{1}{2} d^\top (J^k)^\top J^k d$$

Levenberg-Marquardt 方法

1 给定最大半径 $\Delta_{\max}$，初始半径 Δ_0，初始点 $x^0, k \leftarrow 0$

2 给定参数 $0 \le \eta < \bar{\rho}_1 < \bar{\rho}_2 < 1, \gamma_1 < 1 < \gamma_2$

3 **while** 未达到停机准则 **do**

4 计算子问题 (5) 得到迭代方向 d^k

5 根据 (4) 计算下降率 ρ_k

6 更新信赖域半径

$$\Delta_{k+1} = \begin{cases} \gamma_1 \Delta_k, & \rho_k < \bar{\rho}_1 \\ \min\{\gamma_2 \Delta_k, \Delta_{\max}\}, & \rho_k > \bar{\rho}_2 \text{ 以及 } \|d^k\| = \Delta_k \\ \Delta_k, & \text{其他} \end{cases}$$

7 更新自变量

$$x^{k+1} = \begin{cases} x^k + d^k, & \rho_k > \eta \\ x^k, & \text{其他} \end{cases} \qquad \texttt{/* 只有下降比例足够大才更新 */}$$

8 $k \leftarrow k + 1$

9 **end while**

子问题 (5) 求解

- **推论** 向量 d^* 是信赖域子问题

$$\min_d \quad \frac{1}{2}\|Jd+r\|^2 \quad \text{s.t.} \quad \|d\| \le \Delta$$

的解当且仅当 d^* 是可行解并且存在数 $\lambda \ge 0$ 使得

$$\begin{aligned}(J^\top J+\lambda I)d^* &= -J^\top r\\ \lambda(\Delta-\|d^*\|) &= 0\end{aligned}$$

- 实际上, $(J^\top J+\lambda I)d^* = -J^\top r$ 是最小二乘问题的最优性条件

$$\min_d \quad \frac{1}{2}\left\|\begin{bmatrix}J\\ \sqrt{\lambda}I\end{bmatrix}p+\begin{bmatrix}r\\ 0\end{bmatrix}\right\|^2$$

LMF 方法

- 信赖域型 LM 方法本质上是固定信赖域半径 Δ, 通过迭代寻找满足条件的乘子 λ, 每一步迭代需要求解线性方程组

$$(J^\top J + \lambda I)d = -J^\top r$$

- LM 的更新基于 Δ, LMF 的更新直接基于 λ, 每一步求解子问题

$$\min_d \quad \frac{1}{2}\|J^k d + r^k\|^2 \quad \text{s.t.} \quad \|d\| \le \Delta$$

$$\Downarrow$$

$$\min_d \quad \|Jd + r\|_2^2 + \lambda\|d\|_2^2$$

- 调整 λ 的原则可以参考信赖域半径的调整原则

算法　LMF 方法

1 给定初始点 x_0，初始乘子 $\lambda_0, k \leftarrow 0$

2 给定参数 $0 \leq \eta < \bar{\rho}_1 < \bar{\rho}_2 < 1, \gamma_1 < 1 < \gamma_2$

3 **while** 未达到停机准则 **do**

4 求解 LM 方程 $((J_k)^\top J_k + \lambda I)d = -(J_k)^\top r_k$ 得到迭代方向 d_k

5 根据 (4) 式计算下降率 ρ_k

6 更新信赖域半径

$$\lambda_{k+1} = \begin{cases} \gamma_2 \lambda_k, & \rho_k < \bar{\rho}_1 \\ \gamma_1 \lambda_k, & \rho_k > \bar{\rho}_2 \\ \lambda_k, & \text{其他} \end{cases} \quad \begin{array}{l} \texttt{/* 扩大乘子（缩小信赖域半径）*/} \\ \texttt{/* 缩小乘子（扩大信赖域半径）*/} \\ \texttt{/* 乘子不变 */} \end{array}$$

7 更新自变量

$$x_{k+1} = \begin{cases} x_k + d_k, & \rho_k > \eta \\ x_k, & \text{其他} \end{cases} \quad \texttt{/* 只有下降比例足够大才更新 */}$$

8 $k \leftarrow k + 1$

9 **end while**

大残量问题的拟牛顿算法

- 大残量问题中, 海瑟矩阵的第二部分不可忽视, 此时高斯 – 牛顿法和 LM 方法可能只有线性的收敛速度

$$\nabla^2 f(x) = J(x)^\top J(x) + \sum_{i=1}^{m} r_i(x) \nabla^2 r_i(x)$$

- 记 $s_k = x_{k+1} - x_k$, T_{k+1} 应保留原海瑟矩阵的性质

$$\begin{aligned} T_{k+1} s_k &\approx \sum_{j=1}^{m} r_j(x_{k+1}) (\nabla^2 r_j(x_{k+1})) s_k \\ &\approx \sum_{j=1}^{m} r_j(x_{k+1}) (\nabla r_j(x_{k+1}) - \nabla r_j(x_k)) \\ &= (J_{k+1})^\top r_{k+1} - (J_k)^\top r_{k+1} \end{aligned}$$

大残量问题的拟牛顿算法

- 拟牛顿条件为

$$T_{k+1}s_k = (J_{k+1})^\top r_{k+1} - (J_k)^\top r_{k+1}$$

- Dennis, Gay 和 Welsch 给出的一种更新格式

$$T_{k+1} = T_k + \frac{(y^\# - T_k s_k)y^\top + y(y^\# - T_k s_k)^\top}{y^\top s_k} - \frac{(y^\# - T_k s_k)^\top s_k}{(y^\top s)^2} yy^\top$$

其中

$$\begin{aligned} s_k &= x_{k+1} - x_k \\ y &= J_{k+1}^\top r_{k+1} - J_k^\top r_k \\ y^\# &= J_{k+1}^\top r_{k+1} - J_k^\top r_{k+1} \end{aligned}$$

应用实例: 相位恢复

- 相位恢复是最小二乘法的重要应用, 原始模型为

$$\min_{z\in\mathbb{C}^n} \quad f(z)=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{m}(|\bar{a}_j^\top z|^2-b_j)^2$$

其中 $a_j\in\mathbb{C}^n$ 是已知的采样向量, $b_j\in\mathbb{R}$ 是观测的模长

- 根据 Wirtinger 导数知

$$\nabla f(\mathbf{z})=\left[\frac{\partial f}{\partial z},\frac{\partial f}{\partial \bar{z}}\right]^*$$

其中

$$\frac{\partial f}{\partial z}=\sum_{j=1}^{m}(|\bar{a}_j^\top x|^2-b_j)\bar{z}^\top a_j\bar{a}_j^\top,\quad \frac{\partial f}{\partial \bar{z}}=\sum_{j=1}^{m}(|\bar{a}_j^\top x|^2-b_j)z^\top\bar{a}_j a_j^\top$$

应用实例: 相位恢复

- 雅可比矩阵和高斯 – 牛顿矩阵分别为

$$J(\mathbf{z}) = \overline{\begin{bmatrix} a_1(\bar{a}_1^\top z), & a_2(\bar{a}_2^\top z), & \cdots, & a_m(\bar{a}_m^\top z) \\ \bar{a}_1(a_1^\top \bar{z}), & \bar{a}_2(a_2^\top \bar{z}), & \cdots, & \bar{a}_m(a_m^\top \bar{z}) \end{bmatrix}}^\top$$

$$\Psi(\mathbf{z})\overline{J(\mathbf{z})}^\top J(\mathbf{z}) = \sum_{j=1}^{m} \begin{bmatrix} |\bar{a}_j^\top z|^2 a_j \bar{a}_j^\top & (\bar{a}_j^\top z)^2 a_j a_j^\top \\ \overline{(\bar{a}_j^\top z)^2}\bar{a}_j \bar{a}_j^\top & |\bar{a}_j^\top z|^2 \bar{a}_j a_j^\top \end{bmatrix}$$

- 在第 k 步, 高斯 – 牛顿法求解方程

$$\Psi(\mathbf{z}^k) d^k = -\nabla f(\mathbf{z}^k)$$

应用实例: 相位恢复

- LM 方法求解正则化方程

$$(\Psi(\mathbf{z}^k) + \lambda_k)d^k = -\nabla f(\mathbf{z}^k) \tag{6}$$

- 选取

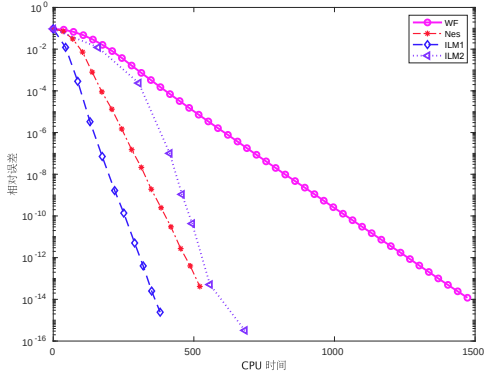
$$\lambda_k = \begin{cases} 70000n\sqrt{nf(z^k)}, & f(z^k) \geq \frac{1}{900n}\|z^k\|_2^2 \\ \sqrt{f(z^k)}, & \text{其他} \end{cases}$$

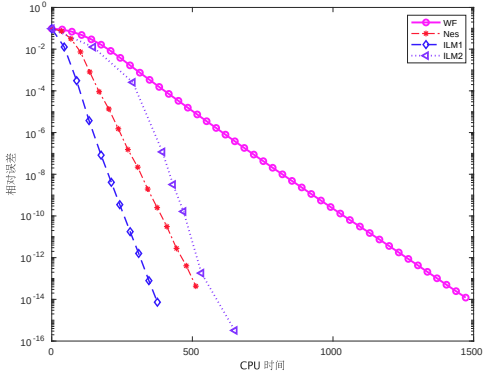
- 利用共轭梯度法求解线性方程 (6), 使得

$$\|(\Psi(\mathbf{z}^k) + \lambda_k)d^k + \nabla f(\mathbf{z}^k)\| \leq \eta_k\|\nabla f(\mathbf{z}^k)\|$$

应用实例: 相位恢复

- WF 求解 Wirtinger 梯度下降方法
- LM ILM1 ($\eta_k = 0.1$), ILM2 ($\eta_k = \min\{0.1, \|\nabla f(\mathbf{z}^k)\|\}$), Nes (Nesterov 加速)





Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈