

一种无约束最优化方法

——恰当共轭方向法

张千宗 粟塔山

(系统工程与应用数学系)

摘要 本文提出了一种求解无约束最优化问题的方法,称之为“恰当共轭方向法”。与通常的共轭方向法(如共轭梯度法)相比,这种方法可以节省大量的一维搜索工作量,并且还能提高收敛速率。

关键词 收敛, 无约束最优化问题, 恰当共轭方向法, 共轭梯度法, 一维搜索

分类号 O221.224

共轭方向法是求解无约束最优化问题 $\min_{X \in E^n} f(X)$ 的一类重要的迭代算法。通常的共

轭方向法,在每一个迭代循环中,构造一组相互共轭的向量 $Z_1^{(k)}, \dots, Z_n^{(k)}$,从第 k 个近似点 X_k 出发,依次沿着上述方向(或近似于它们的方向)对 f 作一维搜索,依次得点 $X_1^{(k)}, \dots, X_n^{(k)}$,然后以 $X_n^{(k)}$ 作为第 $k+1$ 个近似点 X_{k+1} ([1]、[2])。本文提出的恰当共轭方向法,在每一个迭代循环中,构造一组特定的共轭向量,使得无需对每个方向作一维搜索,而只需沿其中一个方向进行一维搜索。此法可以节省一维搜索的工作量,还能提高收敛速率。

1 算法的基本思想

先考虑二次函数

$$f(X) = \frac{1}{2} X^T A X + b^T X + c \quad (X \in E^n) \quad (1)$$

式中 A 为对称正定矩阵。设已知 $X_0 \in E^n$, 记 $Z = X - X_0$, 则

$$f(X) = f(X_0 + Z) = \frac{1}{2} Z^T A Z + (A X_0 + b)^T Z + f(X_0) \quad (2)$$

如果 Z_1, \dots, Z_n 是一组关于 A 共轭的向量,则从 X_0 出发依次沿 Z_1, \dots, Z_n 作一维搜索,便能得出 f 的极小点。下面指出,如果取其中 $n-1$ 个方向,比如说 Z_1, \dots, Z_{n-1} 都与 $\nabla f(X_0) = A X_0 + b$ 正交,则从 X_0 出发只需沿 Z_n 作一维搜索,便可得出 f 的极小点。

定理 2 对于正定二次函数(方程(1)), 按(3)~(5)式确定的 $Z_i (i=1, \dots, n)$ 是一组关于 A 共轭的非零向量, 且满足

$$Z_i^T A f(X_0) = 0 \quad (i=1, \dots, n-1) \tag{6}$$

证明 由(4)式可知 $u_i^T \nabla f(X_0) = 0 (i=1, \dots, n-1)$, 由(5)式可知 Z_i 是 u_1, \dots, u_i 的线性组合, 因此式(6)成立。

用数学归纳法容易验证 Z_1, \dots, Z_{n-1} 关于 A 两两共轭。又有

$$Z_i^T A Z_n = Z_i^T A \left[-\nabla f(X_0) + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\nabla f(X_0)^T A Z_j}{Z_j^T A Z_j} Z_j \right] = 0 \quad (i=1, \dots, n-1)$$

所以 Z_1, \dots, Z_n 是一组关于 A 共轭的向量。

最后证明 $Z_i \neq 0 (i=1, \dots, n)$ 。对于 $1 \leq i \leq n-1$, 若有 $Z_i = 0$, 由 Z_i 是 u_1, \dots, u_i 的线性组合且组合系数不全为零可知, 这时 u_1, \dots, u_{n-1} 必线性相关。但由(4)式可知, 这是不可能的。若 $Z_n = 0$, 则有

$$\nabla f(X_0) = \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\nabla f(X_0)^T A Z_j}{Z_j^T A Z_j} Z_j$$

上式两端与 $\nabla f(X_0)$ 作内积, 由(6)式可得 $\nabla f(X_0)^T \nabla f(X_0) = 0$, 此与前提 $\nabla f(X_0) \neq 0$ 相矛盾。

一般目标函数在其极小点附近可以用正定二次函数来近似。

$$f(X) \approx f(X_k) + \nabla f(X_k)^T (X - X_k) + \frac{1}{2} (X - X_k)^T \nabla^2 f(X_k) (X - X_k)$$

因此可考虑用 $\nabla^2 f(X_k)$ 代替(5)式中的矩阵 A 。但是, 如在迭代过程中直接计算二阶导数矩阵, 其计算量很大。由于, 当 $\|Z\|$ 充分小时, 有

$$\nabla^2 f(X_k) Z \approx \nabla f(X_k + Z) - \nabla f(X_k)$$

于是, 对充分大的正数 γ , 有

$$\nabla^2 f(X_k) Z_j \approx \gamma \|Z_j\| \left[\nabla f\left(X_k + \frac{Z_j}{\gamma \|Z_j\|}\right) - \nabla f(X_k) \right] \tag{7}$$

因此, 对于一般目标函数 f , 可按如下方法确定在 X_k 处的搜索方向 Z_k 。设

$$\left. \begin{aligned} \nabla f(X_k) &= \langle y_1^{(k)}, y_2^{(k)}, \dots, y_n^{(k)} \rangle \neq 0 \\ \text{取 } y_{i_0}^{(k)} &\text{ 满足} \\ |y_{i_0}^{(k)}| &= \max_{1 \leq i \leq n} \{ |y_i^{(k)}| \} \end{aligned} \right\} \tag{8}$$

令

$$\left. \begin{aligned} u_1^{(k)} &= \langle 1, 0, \dots, -y_1^{(k)}/y_{i_0}^{(k)}, 0, \dots, 0 \rangle \\ u_2^{(k)} &= \langle 0, 1, \dots, -y_2^{(k)}/y_{i_0}^{(k)}, 0, \dots, 0 \rangle \\ &\dots\dots\dots \\ u_{i_0}^{(k)} &= \langle 0, 0, \dots, -y_{i_0}^{(k)}/y_{i_0}^{(k)}, 1, \dots, 0 \rangle \\ &\dots\dots\dots \\ u_{n-1}^{(k)} &= \langle 0, 0, \dots, -y_n^{(k)}/y_{i_0}^{(k)}, 0, \dots, 1 \rangle \end{aligned} \right\} \tag{9}$$

$$\left. \begin{aligned} Z_1^{(k)} &= u_1^{(k)} \\ Z_i^{(k)} &= u_i^{(k)} - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij}^{(k)} Z_j^{(k)} \quad (i=2, \dots, n-1) \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

式中

$$\alpha_{ij}^{(k)} = \frac{(u_i^{(k)})^T \nabla^2 f(X_k) Z_j^{(k)}}{(Z_j^{(k)})^T \nabla^2 f(X_k) Z_j^{(k)}} \quad \left(\begin{array}{l} i=2, \dots, n-1; \\ j=1, \dots, i-1 \end{array} \right) \quad (11)$$

利用式(7)，并注意到 $u_j^{(k)}$ 和 $Z_j^{(k)}$ ($j=1, \dots, n-1$)均与 $\nabla f(X_k)$ 正交，实际计算时按如下公式确定(10)式中的系数：

$$\alpha_{ij}^{(k)} = \frac{(u_i^{(k)})^T \nabla f\left(X_k + \frac{Z_j^{(k)}}{\gamma \|Z_j^{(k)}\|}\right)}{(Z_j^{(k)})^T \nabla f\left(X_k + \frac{Z_j^{(k)}}{\gamma \|Z_j^{(k)}\|}\right)} \quad \left(\begin{array}{l} i=2, \dots, n-1; \\ j=1, \dots, i-1 \end{array} \right) \quad (12)$$

最后令

$$Z_k = Z_n^{(k)} = -\nabla f(X_k) + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\nabla f(X_k)^T \nabla^2 f(X_k) Z_j^{(k)}}{(Z_j^{(k)})^T \nabla^2 f(X_k) Z_j^{(k)}} Z_j^{(k)} \quad (13)$$

同理，实际计算时按下述公式确定搜索方向：

$$Z_k = -\nabla f(X_k) + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\nabla f(X_k)^T \left[\nabla f\left(X_k + \frac{Z_j^{(k)}}{\gamma \|Z_j^{(k)}\|}\right) - \nabla f(X_k) \right]}{(Z_j^{(k)})^T \nabla f\left(X_k + \frac{Z_j^{(k)}}{\gamma \|Z_j^{(k)}\|}\right)} Z_j^{(k)} \quad (14)$$

如果 $\nabla^2 f(X_k)$ 正定，取 γ 充分大，可以保证

$$(Z_j^{(k)})^T \nabla f\left(X_k + \frac{Z_j^{(k)}}{\gamma \|Z_j^{(k)}\|}\right) > 0$$

这由下式可知：

$$\begin{aligned} (Z_j^{(k)})^T \nabla f\left(X_k + \frac{Z_j^{(k)}}{\gamma \|Z_j^{(k)}\|}\right) &= (Z_j^{(k)})^T \left[\nabla f(X_k) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\gamma \|Z_j^{(k)}\|} \nabla^2 f(X_k) Z_j^{(k)} + o\left(\frac{1}{\gamma}\right) \frac{Z_j^{(k)}}{\|Z_j^{(k)}\|} \right] \\ &= \frac{(Z_j^{(k)})^T \nabla^2 f(X_k) Z_j^{(k)}}{\gamma \|Z_j^{(k)}\|} + o\left(\frac{1}{\gamma}\right) \frac{\|Z_j^{(k)}\|}{\gamma} \end{aligned}$$

对一般的连续可微函数，按上述方法得出的向量 $Z_1^{(k)}, \dots, Z_{n-1}^{(k)}$ 仍与 $\nabla f(X_k)$ 正交，但 $Z_1^{(k)}, \dots, Z_{n-1}^{(k)}, Z_n^{(k)}$ 一般不再具有共轭的性质。从 X_k 出发，沿 $Z_k = Z_n^{(k)}$ 对 f 作一维搜索，得点 X_{k+1} 。若 $\nabla f(X_{k+1}) \neq 0$ ，便再从 X_{k+1} 出发重复上述做法。如此形成一个迭代算法，我们称它为恰当共轭方向法。

在实际应用上述方法时应取 γ 适当大。因为，从式(7)考虑， γ 取得越大越好；但考虑到计算机的精度限制和误差的影响， γ 又不能取得太大。为了提高收敛速率，应当针对不同的 X_k 和 Z_j 分别选取 γ 的值。为此在计算(12)和(14)式之前，可插入一个子程序去确定参数 γ 的值。但这样又会增加计算量。从实算情况来看，把 γ 的值固定影响不大。根据实算经验，取 $\gamma=10$ ，效果就很好（在IBM—PC机上计算）。

2 算法步骤与收敛性

设 $f(X)$ ($X \in E^n$) 连续可微。求解问题 $\min_{X \in E^n} f(X)$ 的恰当共轭方向法的步骤如下:

(1) 选定初始点 X_0 和精度要求 ε . 并置 $k:=0$.

(2) 计算 $\nabla f(X_k) = \langle y_1^{(k)}, y_2^{(k)}, \dots, y_n^{(k)} \rangle$, 并检验 $\|\nabla f(X_k)\| \leq \varepsilon$ 是否满足 (也可改用其他停止准则)。若满足, 停止计算, 得近似解 X_k ; 否则, 转(3)。

(3) 按 $|y_{i_0}^{(k)}| = \max_{1 \leq i \leq n} \{|y_i^{(k)}|\}$ 确定 i_0 (如有多个分量的绝对值同时达到最大, 约定取其中下标最小者)。然后按(9)、(10)、(12)和(14)式算出 $Z_i^{(k)}$ ($i=1, \dots, n$), 并令 $Z_k = Z_{i_0}^{(k)}$ 。

(4) 从 X_k 出发, 沿 Z_k 进行一维搜索, 求得 λ_k , 使

$$f(X_k + \lambda_k Z_k) = \min_{\lambda > 0} f(X_k + \lambda Z_k)$$

并令 $X_{k+1} = X_k + \lambda_k Z_k$. 然后置 $k := k+1$, 返回(2)。

定理 3 设 $f: E^n \rightarrow R$ 具有一阶连续偏导数, 给定 $X_0 \in E^n$, 并设水平集 $\{X | f(X) \leq f(X_0), X \in E^n\}$ 有界。令 $\{X_k\}$ 是由上述恰当共轭方向法产生的点列, 则 $\{f(X_k)\}$ 为严格单调下降数列, 且 $\lim_{k \rightarrow \infty} f(X_k)$ 存在。并且, $\{X_k\}$ 的任意聚点 X^* 都满足 $\nabla f(X^*) = 0$ 。

证明 由 $Z_i^{(k)}$ 的构造可知

$$\nabla f(X_k)^T Z_i^{(k)} = 0 \quad (i=1, \dots, n-1)$$

从而可得

$$\nabla f(X_k)^T Z_n^{(k)} = -\|\nabla f(X_k)\|^2$$

故知, 当 $\nabla f(X_k) \neq 0$ 时, 必有 $\nabla f(X_k)^T Z_n^{(k)} < 0$ 。从而有 (用 δ 表充分小正数)

$$\begin{aligned} f(X_{k+1}) &= f(X_k + \lambda_k Z_k) = \min_{\lambda} f(X_k + \lambda Z_k) \leq f(X_k + \delta Z_k) \\ &= f(X_k) + \delta \nabla f(X_k)^T Z_k + o(\delta \|Z_k\|) < f(X_k) \end{aligned}$$

所以 $\{f(X_k)\}$ 是严格单调下降数列。由定理的条件可知数列 $\{f(X_k)\}$ 有下界。因此 $\lim_{k \rightarrow \infty} f(X_k)$ 存在。记 $\lim_{k \rightarrow \infty} f(X_k) = f^*$ 。因 $\{X_k\}$ 为有界点列, 故必有收敛子列。设子列 $\{X_k: k \in \mathcal{K}\}$ 收敛于 X^* 。下证 $\nabla f(X^*) = 0$ 。

假如 $\nabla f(X^*) \neq 0$, 则可按恰当共轭方向法产生 f 在 X^* 处的下降搜索方向 Z^* 。即

$$Z^* = -\nabla f(X^*) + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\nabla f(X^*)^T \left[\nabla f\left(X^* + \frac{Z_j^*}{\gamma \|Z_j^*\|}\right) - \nabla f(X^*) \right]}{(Z_j^*)^T \nabla f\left(X^* + \frac{Z_j^*}{\gamma \|Z_j^*\|}\right)} Z_j^*$$

式中 Z_j^* ($j=1, \dots, n-1$) 的计算公式可相应列出。于是, 对充分小的正数 λ , 有

$$f(X^* + \lambda Z^*) < f(X^*)$$

同时, 又有

$$f(X_{k+1}) = f(X_k + \lambda_k Z_k) \leq f(X_k + \lambda Z_k)$$

再注意到 $\{X_{k+1}: k \in \mathcal{K}\}$ 也是有界点列, 设其子列 $\{X_{k+1}: k \in \mathcal{K}'\}$ 收敛于 \bar{X} , 这里 $\mathcal{K}' \subset \mathcal{K}$ 。在上述不等式两端, 令 $k \in \mathcal{K}'$, $k \rightarrow \infty$, 取极限。由 $\nabla f(X)$ 连续和 Z_k 的构造可知

$\lim_{k \rightarrow \infty} Z_k = Z^*$. 因此可得

$$f(\bar{X}) \leq f(X^* + \lambda Z^*) < f(X^*)$$

但是, 由 f 的连续性,

$$f(\bar{X}) = \lim_{\substack{k \rightarrow \infty \\ k \in \mathcal{K}'} } f(X_{k+1}) = f^* = \lim_{\substack{k \rightarrow \infty \\ k \in \mathcal{K}'} } f(X_k) = f(X^*)$$

至此得出矛盾. 所以 $\nabla f(X^*) = 0$.

推论 若 $f: E^n \rightarrow R$ 是满足定理3条件的凸函数, 则由恰当共轭方向法产生的点列 $\{X_k\}$ 的任意聚点都是问题 $\min_{X \in E^n} f(X)$ 的最优解.

由上节的论述可知, 恰当共轭方向法具有二次终止性. 关于此法的收敛速率, 以下述结论可得到初略了解.

定理4 对于二阶连续可微函数 f , 设 $\nabla f(X_k) \neq 0$, 且 $\nabla^2 f(X_k)$ 正定, 则按(8)、(9)、(10)、(11)和(13)式确定的搜索方向 Z_k 与牛顿方向一致. 即有下式成立 (α 为某一正数):

$$-[\nabla^2 f(X_k)]^{-1} \nabla f(X_k) = \alpha Z_k$$

证明 由定理2可知, 按(8)~(11)和(13)式确定的 $Z_1^{(k)}, \dots, Z_{n-1}^{(k)}, Z_n^{(k)}$ 是一组关于 $\nabla^2 f(X_k)$ 共轭的非零向量, 且 $Z_1^{(k)}, \dots, Z_{n-1}^{(k)}$ 均与 $\nabla f(X_k)$ 正交. 于是向量 $-\nabla f(X_k)$ 可由 $Z_1^{(k)}, \dots, Z_n^{(k)}$ 线性表出:

$$-\nabla f(X_k) = \alpha_1 Z_1^{(k)} + \dots + \alpha_{n-1} Z_{n-1}^{(k)} + \alpha_n Z_n^{(k)}$$

上式两端同乘 $\nabla^2 f(X_k)$, 然后与 $Z_i^{(k)}$ ($i=1, \dots, n-1$) 作内积, 便可得知 $\alpha_i = 0$ ($i=1, \dots, n-1$). 因此

$$-\nabla f(X_k) = \alpha_n Z_n^{(k)}$$

式中

$$\alpha_n = \frac{-(Z_n^{(k)})^T \nabla f(X_k)}{(Z_n^{(k)})^T \nabla^2 f(X_k) Z_n^{(k)}} = \frac{\|\nabla f(X_k)\|^2}{(Z_n^{(k)})^T \nabla^2 f(X_k) Z_n^{(k)}} > 0$$

由此可知, 在极小点附近, 由(8)、(9)、(10)、(12)和(14)式所产生的恰当共轭方向法的搜索方向近似于牛顿方向. 但恰当共轭方向法的搜索方向并不等同于牛顿方向. 它只用到目标函数的梯度, 而无需计算Hesse矩阵.

3 实算举例

本文用恰当共轭方向法在 IBM—PC/XT 计算机上解算了大量题目. 一维搜索采用进退法. 实算结果表明, 恰当共轭方向法的收敛速率明显优于共轭梯度法. 从迭代次数看, 也明显优于DFP变尺度法([3]、[4]). 下面列举几个计算结果(参数 ν 都取为10).

例1 目标函数是香蕉函数

$$f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

求最小值. 问题的准确最优解为 $X^* = \langle 1, 1 \rangle$, 最优值为 $f^* = 0$. 取初始点 $X^0 = \langle -1.2, 1 \rangle$. 用恰当共轭方向法迭代16次得

$$x_1 = 1.0000692510, x_2 = 1.0001453045$$

$$f(x_1, x_2) = 9.4166899682 \times 10^{-9}$$

用DFP变尺度法计算, 达到同级精度的结果, 需迭代32次。

例2 $\min f(x_1, x_2) = -x_1^2 \exp[1 - x_1^2 - 2.25(x_1 - x_2)^2]$. 此问题有两个最优解: $X_1^* = \langle 1, 1 \rangle$, $X_2^* = \langle -1, -1 \rangle$. 最优值 $f^* = -1$. 取初始点 $X_1^0 = \langle 0.1, 0.1 \rangle$. 用恰当共轭方向法迭代6次得

$$x_1 = 0.99927266533, x_2 = 0.99917796979$$

$$f(x_1, x_2) = -0.99999892153$$

用DFP变尺度计算, 达到同级精度的结果, 需迭代10次。取初始点 $X_2^0 = \langle 0.1, -0.2 \rangle$. 用恰当共轭方向法迭代6次得

$$x_1 = -0.99948567980, x_2 = -0.99984578714$$

$$f(x_1, x_2) = -0.99999917908$$

用DFP变尺度法计算, 达到同级精度的结果, 需迭代12次。

例3 $\min f(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4$. 此问题的最优解为 $X^* = \langle 0, 0, 0, 0 \rangle$, 最优值 $f^* = 0$. 取初始点 $X^0 = \langle -3, -1, 0, 1 \rangle$. 用恰当共轭方向法迭代12次得:

$$x_1 = 5.6136169394 \times 10^{-3}, x_2 = -5.5550429290 \times 10^{-4}$$

$$x_3 = 3.0748492971 \times 10^{-3}, x_4 = 3.0687649197 \times 10^{-3}$$

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = 6.0568126517 \times 10^{-9}$$

用DFP变尺度法计算, 达得同级精度的结果, 需迭代34次。

$$\text{例4 } \min f(x_1, \dots, x_{10}) = \sum_{i=1}^9 (x_i - x_{i+1}^2)^2 + (1 - x_1)^2 + (1 - x_{10})^2$$

此问题的最优解为 $X^* = \langle 1, 1, \dots, 1 \rangle$, 最优值 $f^* = 0$. 取初始点 $X^0 = \langle 1.5, 0.5, 2, \dots, 2 \rangle$. 用恰当共轭方向法迭代9次得

$$x_1 = 1.0000009403, x_2 = 1.0000014903, x_3 = 1.0000037625$$

$$x_4 = 1.0000071435, x_5 = 1.0000016902, x_6 = 1.0000002067$$

$$x_7 = 0.99999975829, x_8 = 0.99999972949, x_9 = 1.0000001349$$

$$x_{10} = 1.0000004028, f(x_1, \dots, x_{10}) = 1.6949465213 \times 10^{-10}$$

运算时间41秒。用DFP变尺度法计算, 达到同级精度的结果, 需迭代57次, 运算时间87秒。

其他计算实例不一一列举。总之, 从实算情况看, 恰当共轭方向法的收敛速率和计算稳定性都是良好的。关于此法的收敛速率的确切估计有待进一步研究。

参 考 文 献

- [1] Bazaraa M S, Shetty C M 著; 王化存, 张春柏译. 非线性规划——理论与算法. 贵州人民出版社, 1986; 382~407
- [2] 邓乃扬, 诸梅芳. 最优化方法. 辽宁教育出版社, 1987
- [3] 魏权龄等编著. 数学规划与优化设计. 国防工业出版社, 1984; 299~307
- [4] Himmelblau D M 著; 张义荣等译. 实用非线性规划. 科学出版社, 1981

一类集值映射的高阶微分

吴孟达

(系统工程与应用数学系)

摘要 在文[1]中, H. T. Banks与M. Q. Jacobs讨论了集映 $\Omega: R^m \rightarrow \mathcal{S}(R^n)$ 的一阶微分, 分别给出了 Ω 可微的充分条件与必要条件。本文改进了文[1]的工作, 证明了[1]中条件(3.2)的限制是不必要的, 从而得到了 Ω 可微的充分必要条件, 及较为简洁的 Ω 微分解析表达式。在文中也讨论了 Ω 的 k 阶微分, 得到了 Ω k 阶可微的充分必要条件及 k 阶微分的解析表达式。

关键词 集值映射, Hausdorff距离, 集映微分, 集映高阶微分

分类号 O172.1

1 预备知识

R^n 上的范数取作 $\|x\| = \max_{1 \leq j \leq n} |x_j|$, R^n 中非空紧凸集全体按 Hausdorff 距离 d_H 所成的度量空间记作 $\mathcal{S}(R^n)$, $(d_H(A, B) \triangleq \max\{\sup_{x \in A} d(x, B), \sup_{y \in B} d(y, A)\})$, 根据Radstrom嵌入

研究简报 1988年6月6日收稿

An Unconstrained Optimization Technique —Proper Conjugate Direction Method

Zhang Ganzong Su Tashan

(Department of Applied Mathematics and System Engineering)

Abstract

In this paper, a method for solving unconstrained optimization problems, which is called "proper conjugate direction method", is developed. Compared with general conjugate direction method, such as the conjugate gradient method, this method will save a great deal of one-dimensional search work and raise the rate of convergence.

Key words: convergence, unconstrained optimization problem, proper conjugate direction method, conjugate gradient method, one-dimensional search