

类 Broyden 族非拟牛顿算法对一般目标函数的全局收敛性

陈兰平, 焦宝聪, 王万良
(首都师范大学数学系, 北京 100037)
(E-mail: chenlanp@mail.cnu.edu.cn)

摘 要: 应用双参数的类 Broyden 族校正公式, 为研究求解无约束最优化问题的拟牛顿类算法对一般目标函数的收敛性这个开问题提供了一种新的方法.

关键词: 无约束最优化; 类 Broyden 族校正公式; 非拟牛顿算法; 全局收敛性.

MSC(2000): 90C30; 65K05

中图分类号: O174.13

1 引言

考虑无约束最优化问题

$$\min f(x), \quad x \in R^n \quad (1.1)$$

其中目标函数 $f(x)$ 二阶连续可微, 记

$$f_k = f(x_k), \quad g_k = \nabla f(x_k), \quad \gamma_k = g_{k+1} - g_k, \quad G_k = \nabla^2 f(x_k), \quad \delta_k = x_{k+1} - x_k.$$

当 $\|\delta_k\|$ 充分小时, 有近似关系: $G_k \delta_k \approx \gamma_k$, 且对二次函数上式等号严格成立. 考虑迭代

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k, \quad d_k = -B_k^{-1} g_k, \quad (1.2)$$

其中 B_k 为 G_k 的近似矩阵, λ_k 为某种线搜索确定的步长. 令由 B_k 产生的修正矩阵 B_{k+1} 满足拟牛顿方程

$$B_{k+1} \delta_k = \gamma_k. \quad (1.3)$$

则由此可以导出许多著名的拟牛顿算法.

拟牛顿法是目前最成熟, 应用最广泛的解法之一. 近二十多年来, 对拟牛顿法收敛性质的研究一直是非线性最优化算法理论研究的热点. 带非精确搜索的拟牛顿算法的研究是从 1976 年 Powell^[1] 开始, 他证明了带 Wolfe 搜索 BFGS 算法的全局收敛性和超线性收敛性. 1978 年 Byrd, Nocedal, Yuan Ya-xiang^[3] 成功地将 Powell 的结果推广到限制的 Broyden 凸族 ($\Phi \in [0, 1)$). 1989 年, Nocedal^[4] 在目标函数一致凸的条件下, 证明了带回追搜索的 BFGS 算法的全局收敛性和超线性收敛性. 1996 年, 刘光辉、韩继业^[5] 采用一种比 Wolfe 搜索更广泛的搜索技术, 并将它与 Broyden 凸族结合, 对凸函数证明了 Broyden 凸族具有全局收敛性. 近年来, 基于修正拟牛顿方程的非拟牛顿算法的研究亦吸引了不少国内外学者. 1991 年, Yuan Ya-xiang^[6] 1995 年,

收稿日期: 2005-01-17; 修订日期: 2005-11-08; 接受日期: 2006-01-20

基金项目: 国家自然科学基金 (60472071); 北京市教委科研基金 (KM200510028019).

Yuan Ya-xiang, Richard, H.Byrd^[7] 又给出了一类非拟牛顿校正算法. 1997年, 陈兰平、焦宝聪^[8] 提出了一种非拟牛顿算法, 使 Broyden 族拟牛顿法成为该算法的一个特例. 2000年, Chen Lan-ping, Jiao Bao-cong^[9] 采用一种比 Wolfe 搜索更广泛的搜索技术, 在一定条件下证明了非拟牛顿非凸族对凸目标函数的全局收敛性. 1999年, 邓乃扬、薛毅等^[12] 研究了基于新拟牛顿方程的拟牛顿法的全局收敛性.

然而上述各种算法当 $n > 2$ 时, 对一般目标函数的收敛性迄今仍是一个没有解决的问题. 1996年, 赵云彬等^[10,11] 提出了一种伪 Newton- δ 方法, 并在一定条件下证明了算法对一般目标函数的全局收敛性. 本文通过综合利用信息 δ_k, γ_k 与 f_k , 提出一种非拟牛顿校正公式, 并适当选取校正公式中的参数 θ_k , 由此导出一类新算法, 我们称之为类 Broyden 族非拟牛顿算法. 我们将在第 2 节建立类 Broyden 族非拟牛顿算法, 在第 3 节证明类 Broyden 族非拟牛顿算法在 Goldstein 非精确线搜索下对一般目标函数的全局收敛性. 为检验算法的实算效果, 在第 4 节我们对算法进行了一定的数值试验, 数值结果表明算法是有效的.

2 类 Broyden 族非拟牛顿算法的导出

考虑基本关系式: 当 δ_k 充分小时有如下近似关系:

$$G_k \delta_k \approx \gamma_k, \quad 2R_k \approx \delta_k^T G_k \delta_k.$$

因此有 $\delta_k^T G_k \delta_k \approx Q_k$, 其中 $Q_k = \theta_k \delta_k^T \gamma_k + 2(1 - \theta_k)R_k$, $R_k = f_{k+1} - f_k - g_k^T \delta_k, \forall \theta_k \in R$.

为使算法有快速收敛特征, 自然要求 B_{k+1} 在某种程度上近似 Hesse 矩阵. 这里要求 B_{k+1} 满足

$$\delta_k^T B_{k+1} \delta_k = Q_k, \quad \forall \theta_k \in R. \quad (2.1)$$

称 (2.1) 式为含参数 θ_k 的非拟牛顿方程. 本节由此出发导出类 Broyden 族非拟牛顿算法.

为使推导简洁方便, 我们记 $\bar{x} = x_{k+1}, x = x_k, \delta = \bar{x} - x, \bar{B} = B_{k+1}, B = B_k, R = R_k, \gamma = \gamma_k, \theta = \theta_k, Q = Q_k$. 先考虑秩 1 校正

$$\bar{B} = B + uv^T, \quad (2.2)$$

待定向量 $u, v \in R^n$. 由于满足 (2.2) 式的矩阵有很大的自由度, 进一步要求 \bar{B} 还满足如下性质:

$$\bar{B}\delta = \alpha\delta, \quad (2.3)$$

其中数 $\alpha \neq 0$, 由 (2.1) 及 (2.3) 式知

$$\alpha = Q/\delta^T \delta, \quad (2.4)$$

从而

$$\bar{B}\delta = Q\delta/\delta^T \delta. \quad (2.5)$$

当 $v^T \delta \neq 0$ 时, 由 (2.2) 及 (2.5) 式有 $u = \frac{1}{v^T \delta} (\frac{\delta}{\delta^T \delta} Q - B\delta)$, 再由 (2.4) 式, u 可记为

$$u = (\alpha I - B)\delta/v^T \delta, \quad (2.6)$$

代入 (2.2) 式得到秩 1 校正公式

$$\bar{B} = B + \frac{1}{v^T \delta} (\alpha I - B)\delta v^T, \quad (2.7)$$

其中 I 为 n 阶单位矩阵. 由于 Hesse 矩阵是对称的, 很自然地, 也要求 \bar{B} 对称. 因此希望校正公式 (2.7) 式能保持对称性. 为此, v 必须与 u 平行. 于是当 $\alpha\delta^T\delta - \delta^TB\delta \neq 0$ 时, 可以得到对称秩 1 校正公式

$$\bar{B} = B + \frac{(\alpha I - B)\delta\delta^T(\alpha I - B)^T}{\alpha\delta^T\delta - \delta^TB\delta}. \quad (2.8)$$

以下结论证明了校正公式 (2.8) 式的某种优越性.

引理 2.1 设 $B \in L(R^n)$, $u, \delta \in R^n$, 且 $v^T\delta \neq 0$, 则由 (2.8) 式定义的 \bar{B} 是极值问题 $\min\{\bar{B} - B\|_F | \bar{B}\delta = \alpha\delta\}$ 的唯一最优解, 这里 $\|\cdot\|$ 表示 Frobenius 范数.

不难看出, 校正公式 (2.8) 式存在明显的不足, 一是不能保证矩阵的正定传递性, 二是可能在迭代过程中出现 $\alpha\delta^T\delta - \delta^TB\delta = 0$ 或其绝对值很小, 导致数值计算不稳定. 为此, 我们现在导出对称秩 2 校正公式.

由 (2.7) 式, 有 $B_1 = B_0 + \frac{1}{v^T\delta}(\alpha I - B_0)\delta v^T$, $v^T\delta \neq 0$. 将 B_1 对称化, 得

$$B_2 = \frac{1}{2}(B_1 + B_1^T).$$

如此反复利用 (2.7) 式可生成校正矩阵序列

$$\begin{aligned} B_{2j+1} &= B_{2j} + \frac{1}{v^T\delta}(\alpha I - B_{2j})\delta v^T, \quad v^T\delta \neq 0, \\ B_{2j+2} &= \frac{1}{2}(B_{2j+1} + B_{2j+1}^T), \quad j = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (2.9)$$

由此关系, 可以证明由 (2.9) 式定义的 $\{B_j\}$ 有一极限 \bar{B} :

$$\bar{B} = B + \frac{1}{v^T\delta}[(\alpha I - B)\delta v^T + v\delta^T(\alpha I - B)^T] - \frac{1}{(v^T\delta)^2}v\delta^T(\alpha I - B)^T\delta v^T \quad (2.10)$$

且满足 (2.1) 及 (2.5) 式. (2.10) 式为对称秩 2 校正公式.

令 $v = \delta$, 并由 (2.4) 式, (2.10) 式可以写成

$$\bar{B} = B + Q \frac{\delta\delta^T}{(\delta^T\delta)^2} + \frac{\delta^TB\delta}{(\delta^T\delta)^2}\delta\delta^T - \frac{B\delta\delta^T}{\delta^T\delta} - \frac{\delta\delta^TB}{\delta^T\delta}. \quad (2.11)$$

若记 $z = \frac{1}{\delta^T\delta}\delta - \frac{1}{\delta^TB\delta}B\delta$, 则 (2.11) 式可表示为

$$\bar{B} = B + Q \frac{\delta\delta^T}{(\delta^T\delta)^2} - \frac{B\delta\delta^TB}{\delta^TB\delta} + (\delta^TB\delta)zz^T.$$

由于 $z^T\delta = 0$, 故上式最后一项乘以常数 Φ 后所得公式仍满足 (2.1) 及 (2.5) 式. 由此我们得到一族具有双参数 θ_k, Φ_k 的对称秩 2 校正公式

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k\delta_k\delta_k^TB_k}{\delta_k^TB_k\delta_k} + \frac{Q_k}{(\delta_k^T\delta_k)^2}\delta_k\delta_k^T + \Phi_k(\delta_k^TB_k\delta)z_kz_k^T, \quad (2.12)$$

其中 $\forall \theta_k \in R$, $\Phi_k \geq 0$, $z_k = \frac{\delta_k}{\delta_k^T\delta_k} - \frac{B_k\delta_k}{\delta_k^TB_k\delta_k}$. 称 (2.12) 式为类 Broyden 族非拟牛顿校正公式.

引理 2.2 设 B_k 对称正定, $\Phi_k \geq 0$. 若 $Q_k > 0$, ($k = 0, 1, 2, \dots$), 则校正公式 (2.12) 使 B_{k+1} 保持对称正定.

证明 由于 $\Phi_k(\delta_k^T B_k \delta_k) \geq 0$, 它使矩阵的特征值增加, 故只需证明公式 (2.12) 中 $\bar{B}_{k+1} = B_k + Q_k \delta_k \delta_k^T / (\delta_k^T \delta_k)^2 - B_k \delta_k \delta_k^T B_k / (\delta_k^T B_k \delta_k)$ 使 \bar{B}_{k+1} 保持正定即可.

事实上, 可将 B_k 分解为 $B_k = L_k L_k^T$, 对 $\forall y \in R^n, y \neq 0$, 令 $c_k = L_k^T y$, $d_k = L_k^T \delta_k$, 则有下面两个不等式成立

$$y^T \left(B_k - \frac{B_k \delta_k \delta_k^T B_k}{\delta_k^T B_k \delta_k} \right) y = c_k^T c_k - \frac{(c_k^T d_k)^2}{d_k^T d_k} \geq 0,$$

$$y^T \left(Q_k \frac{\delta_k \delta_k^T}{(\delta_k^T \delta_k)^2} \right) y = Q_k \frac{(y^T \delta_k)^2}{(\delta_k^T \delta_k)^2} \geq 0,$$

且等号不同时成立. 故 $y^T \bar{B}_{k+1} y > 0$, 即 \bar{B}_{k+1} 为正定矩阵.

若 f 是一致凸函数, 则对 $\theta_k \in [0, 1]$, 总有 $Q_k > 0$.

注意到, 讨论的目标函数是一般函数, 因此约定

步长 λ_k 由 Goldstein 原则确定, 即固定 $\beta \in (0, 1/2), \alpha \in (1/2, 1)$, 选择 λ_k , 使之满足

$$\alpha \lambda_k g_k^T d_k \leq f(x_k + \lambda_k d_k) - f_k \leq \beta \lambda_k g_k^T d_k, \quad (2.13)$$

或等价地

$$\alpha g_k^T \delta_k \leq f_{k+1} - f_k \leq \beta g_k^T \delta_k. \quad (2.14)$$

事实上, Goldstein 原则 (2.14) 式总能保证 $R_k > 0$. 因为若 $g_k^T d_k < 0$, 由 (2.14) 式可看出

$$-(1 - \alpha) g_k^T \delta_k \leq R_k = f_{k+1} - f_k - g_k^T \delta_k \leq -(1 - \beta) g_k^T \delta_k. \quad (2.15)$$

由于 $\alpha \in (1/2, 1)$, 从上式可知 $R_k > 0$.

然而, 即使采用 Goldstein 线搜索也只能保证 $R_k > 0$ 而不能保证 $Q_k > 0$. 进一步的分析表明: 要使 $Q_k > 0$ 成立, 只需

$$\theta_k (\delta_k^T \gamma_k - 2R_k) > -2R_k \quad (2.16)$$

可以 θ_k 看成 δ_k, R_k, γ_k 的函数, 记 $t_k = \frac{-2R_k}{\delta_k^T \gamma_k - 2R_k}$, 解 (2.16) 式得到下列确定 θ_k 的规则 B.

规则 B:

- 1) 若 $\delta_k^T \gamma_k - 2R_k > 0$, 则 $\theta_k > t_k$. 此时取 $\theta_k \in (t_k, +\infty)$.
- 2) 若 $\delta_k^T \gamma_k - 2R_k < 0$, 则 $\theta_k < t_k$. 此时取 $\theta_k \in (-\infty, t_k)$.
- 3) 若 $\delta_k^T \gamma_k - 2R_k = 0$, 则取 $\theta_k \in (-\infty, +\infty)$.

由引理 2.2 的结论, 若 B_0 对称正定, 且 θ_k 按上述规则选取, 则由类 Broyden 族非拟牛顿校正公式产生的矩阵序列 $\{B_k\}$ 是正定对称的. 因此只要 $g_k \neq 0$, 则 $g_k^T \delta_k < 0$, 从 (2.14) 式可以看出算法产生的序列 $\{f_k\}$ 总是单调下降的.

由此导出求解问题 (1.1) 式的类 Broyden 族非拟牛顿算法:

步 0. 选择初始点 $x_0 \in R^n$, 初始对称正定矩阵 $B_0 \in R^{n \times n}$ 和正常数 ε , 令 $k := 0$.

步 1. 若 $\|g_k\| \leq \varepsilon$, 停止迭代, 输出 x_k ; 否则, 进行步 2.

步 2. 解线性方程组 $B_k d = -g_k$, 求得 d_k .

步 3. 依 Goldstein 原则 (2.14) 确定线搜索步长 $\lambda_k > 0$.

步 4. 计算 $x_{k+1} = x_k + \lambda_k d_k$.

步 5. 根据规则 B 确定 θ_k , 由校正公式 (2.12) 确定 B_{k+1} .

步 6. 令 $k := k + 1$, 返回步 1.

3 算法的全局收敛性

定理 3.1 若 $f(x)$ 在 R^n 上二阶连续可微且有下界, 水平集 $L = \{x | f(x) \leq f(x_0)\}$ 有界, 则类 Broyden 族非拟牛顿算法或者对某个 k 有 $g_k = 0$, 或者有

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0. \quad (3.1)$$

证明 记下标集 $K = \{1, 2, \dots\}$, 若对所有的 k 有 $g_k \neq 0$, 以下证明 (3.1) 式必成立.

用反证法证明: 假设 (3.1) 式不成立, 则存在正数 $\varepsilon > 0$, 使得对所有的 k , 有 $\|g_k\| \geq \varepsilon > 0$. 在此条件下, 由算法不难看出, $g_k^T \delta_k < 0$ 总成立, 从而算法产生的函数序列 $\{f_k\}$ 单调下降, 又由 $f(x)$ 有下界, 因此推出当 $k \rightarrow \infty$ 时, 有 $f_{k+1} - f_k \rightarrow 0$.

设 L^* 是包含水平集 L 的最小闭凸集, 由于类 Broyden 族非拟牛顿算法是下降算法, 故极小化序列 $\{x_k\} \subset L^*$. 因此存在收敛子列 $\{x_k\}$, ($k \in K_1 \subset K$), 当 $k \rightarrow \infty$ 时, 有 $\|\delta_k\| = \|x_{k+1} - x_k\| \rightarrow 0$.

由 $f(x)$ 的连续性可知, 对与之相应的函数子列 $\{f_k\}_{K_1}$, 亦有 $f_{k+1} - f_k \rightarrow 0$ ($k \rightarrow \infty, k \in K_1$). 由泰勒展开式可得 $f_{k+1} = f_k + g_k^T \delta_k + o(\|\delta_k\|)$, 于是, 当 $k \rightarrow \infty$ 时,

$$\frac{f_{k+1} - f_k}{g_k^T \delta_k} \rightarrow 1. \quad (3.2)$$

另一方面, 对 $\forall k \in K$, 由 Goldstein 原则 (2.14) 式有 $f_{k+1} - f_k \geq \alpha g_k^T \delta_k$, 即

$$\frac{f_{k+1} - f_k}{g_k^T \delta_k} \leq \alpha < 1. \quad (3.3)$$

此式与 (3.2) 式矛盾! 从而 (3.1) 式成立.

4 数值算例

为检验算法的实算效果, 我们对算法进行了一定的数值试验, 数值结果表明算法是有效的. 以下算例中均取参数 $\Phi_k = 0$. 计算结果见表 4.1.

- 1.^[10] $\min f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 + 2x_3^2 - x_1x_3 - x_1x_2 + 3x_1 + 2x_2 + x_3$.
- 2.^[11] $\min f(x) = 5x_1^2 + 7.5x_2^2 + 10x_3^2 + 2x_1x_2 + 4x_2x_3 + x_1x_3 + e^{x_1+x_2+x_3}$.
3. $\min f(x) = x_1^4 + x_1x_2 + (1+x_2)^2$.

表 4.1

算例	x_0	k_1	k_2	x_k	f_k
1.	(-1.0, -1.0, -1.0)	13	5	(-1.307692, -1.653846, -0.576923)	-3.903846
	(-1.5, -2.0, 1.0)	11	9		
2.	(-1.0, 1.5, -0.5)	13	3	(-0.075419, -0.039118, -0.031607)	0.927170
	(1.0, -1.0, -1.0)	4	3		
3.	(0.0, 0.0)	8	5	(0.695884, -1.347942)	-0.582445
	(-10.0, -10.0)	17	14		

其中 x_0 是初始迭代点且 k_1 是伪 Newton- δ 算法的迭代次数, k_2 则表示按本文提出的类 Broyden 族非拟牛顿算法迭代次数. 数值计算表明了算法的有效性.

参考文献:

- [1] POWELL M J D. *Some Global Convergence Properties of a Variable Metric Algorithm for Minimization without Exact Line Searches* [M]. Nonlinear Programming (Proc. Sympos., New York, 1975), pp. 53–72. SIAM-AMS Proc., Vol. IX, Amer. Math. Soc., Providence, R. I., 1976.
- [2] WERNER J. *Über die global konvergenz von variable-metric nichtexakter schrittweit-enbestimmung* [J]. Numer. Math., 1978, **31**: 321–334.
- [3] BYRD R H, NOCEDAL J, YUAN Y. *Global convergence of a class of quasi-Newton methods on convex problems* [J]. SIAM J. Numer. Anal., 1987, **24**: 1171–1189.
- [4] BYRD R H, NOCEDAL J. *A tool for the methods with application to unconstrained minimization* [J]. SIAM J. Numer. Anal., 1989, **26**: 727–739.
- [5] 刘光辉, 韩继业. 带一类非精确搜索的 Broyden 族的全局收敛性 [J]. 计算数学, 1996, **18**(3): 233–240. LIU Guang-hui, HAN Ji-ye. *Global convergence of the Broyden's family with a class inexact linesearches* [J]. Math. Numer. Sin., 1996, **18**(3): 233–240. (in Chinese)
- [6] YUAN Ya-xiang. *A modified BFGS algorithm for unconstrained optimization* [J]. IMA J. Numer. Anal., 1991, **11**: 325–332.
- [7] YUAN Ya-xiang, BYRD R H. *Non-quasi-Newton updates for unconstrained optimization* [J]. J. Comput. Math., 1995, **13**: 95–107.
- [8] 陈兰平, 焦宝聪. 一类非拟 Newton 算法及其收敛性 [J]. 应用数学与计算数学学报, 1997, **2**: 9–17. CHEN Lan-ping, JIAO Bao-cong. *A class of Non-quasi-Newton methods and its convergence* [J]. Comm. Appl. Math. Comput., 1997, **2**: 9–17. (in Chinese)
- [9] CHEN Lan-ping, JIAO Bao-cong. *Convergence properties of the pre-convex part of non-quasi-newton's family* [J]. Numerical Mathematics and Applications, 2000, **4**: 25–36.
- [10] 赵云彬, 段虞荣. 伪 Newton- δ 族算法对一般目标函数的收敛性 [J]. 数值计算与计算机应用, 1996, **1**: 36–47. ZHAO Yun-bin, DUAN Yu-rong. *Convergence of the pseudo-Newton- δ class methods for general object function* [J]. J. Numer. Methods Comput. Appl., 1996, **1**: 36–47. (in Chinese)
- [11] 赵云彬, 易正俊. 伪 Newton- δ 族算法的导出和全局收敛性 [J]. 数值计算与计算机应用, 1995, **1**: 53–62. ZHAO Yun-bin, YI Zheng-jun. *Derivation and global Convergence for pseudo-Newton- δ class* [J]. J. Numer. Methods Comput. Appl., 1995, **1**: 53–62. (in Chinese)
- [12] 邓乃扬, 薛毅, 张海斌. 基于新拟牛顿方程的拟牛顿法的全局收敛性分析 [J]. 北京工业大学学报, 1999, **4**: 6–12. DENG Nai-yang, XUE Yi, ZHANG Hai-bin. *The global onvergence of the quasi-Newton method based on the new quasi-Newton equation* [J]. J. of Beijing Polytechnic University, 1999, **4**: 6–12. (in Chinese)

Global Convergence of Similar Quasi-Newton Method for Nonconvex Unconstrained Optimization Problems

CHEN Lan-ping, JIAO Bao-cong, WANG Wan-liang
(Department of Mathematics, Capital Normal University, Beijing 100037, China)

Abstract: In this paper, we propose a similar quasi-Newton update with two parameters for nonconvex unconstrained optimization problems, and prove that the method with Goldstein line search converges globally.

Key words: unconstrained optimization; similar quasi-Newton methods; global convergence.