

一种新共轭梯度法的全局收敛性*

A New Conjugate Gradient Method with a Global Convergent Property

田亚娟, 马昌凤

TIAN Ya-juan, MA Chang-feng

(桂林电子科技大学计算科学与数学系, 广西桂林 541004)

(Department of Computing Science and Mathematics, Guilin University of Electronic Technology, Guilin, Guangxi, 541004, China)

摘要: 在文献[4,5]的基础上, 提出求解无约束优化问题的共轭梯度公式中 β_k 参数的一种新的计算公式: $\beta_{k+1} = \mu \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T y^k}$, $0 < \mu < 1$; 对标准 Wolf 搜索条件进行推广, 得到一种新的算法, 并证明了算法的全局收敛性。

关键词: 无约束优化 共轭梯度法 线搜索 全局收敛性

中图分类号: O241.7 文献标识码: A 文章编号: 1005-9164(2006)04-0279-03

Abstract: We propose a new formula about β_k based on the paper [4] and [5], that is $\beta_{k+1} = \mu \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T y^k}$, $0 < \mu < 1$. This paper presents a wider line search than the standard Wolf search and give a new conjugate gradient method with global convergence.

Key words: unconstrained optimization, conjugate gradient method, line search, global convergence

考虑无约束优化问题:

$$\min_{x \in R^n} f(x) \quad (1)$$

其中 $f: R^n \rightarrow R^1$ 连续可微. 共轭梯度法是求解问题

(1) 的一类重要方法^[1~3], 其迭代公式为:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad (2)$$

$$d_k = \begin{cases} -g_k, & k = 1; \\ -g_k + \beta_k d_{k-1}, & k > 1. \end{cases} \quad (3)$$

其中 $g_k = \nabla f(x_k)$, d_k 为搜索方向, α_k 为步长因子, β_k 为参数. β_k 可由以下著名公式给出:

$$\beta_{k+1} = \frac{g_{k+1}^T g_{k+1}}{d_k^T g_k} \quad (\text{Dixon 公式}),$$

$$\beta_{k+1} = \frac{g_{k+1}^T g_{k+1}}{g_k^T g_k} \quad (\text{Fletcher-Reeves 公式}), \quad (4)$$

在文献[4,5]的基础上, 本文提出一种新的 β_k 的计算公式:

$$\beta_{k+1} = \mu \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T y^k}, \quad 0 < \mu < 1, \quad (5)$$

其中 $y^k = g_{k+1} - g_k$, 且在文献[6]的基础上对标准

Wolf 搜索条件进行推广, 在一定条件下证明算法的全局收敛性.

1 推广的线搜索和新算法

我们知道, 步长因子 α_k 的选取应满足一定的下降条件. 设 d_k 为下降方向, 即满足 $g_k^T d_k < 0$. 精确线性搜索要求步长因子 α_k 满足正交条件:

$$g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k = 0;$$

非精确线性搜索的 Wolf 搜索要求步长因子 α_k 满足条件:

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq \lambda \alpha_k g_k^T d_k, \quad (6)$$

$$g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k > \sigma g_k^T d_k, \quad 0 < \lambda < \sigma < 1; \quad (7)$$

而强 Wolf 搜索要求步长因子 α_k 满足式(6)和

$$|g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq -\sigma g_k^T d_k, \quad 0 < \lambda < \sigma < 1;$$

若步长因子 α_k 满足式(6)和搜索条件:

$$\sigma_1 g_k^T d_k \leq g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \leq -\sigma_2 g_k^T d_k, \quad (8)$$

其中 $0 < \lambda < \sigma_1 < 1$, σ_2 是任意非负数, 则称为放宽了的强 Wolf 搜索.

我们将式(6),(7)换成式(8)和下式:

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq -\gamma \alpha_k^2 \|d_k\|^2, \quad 0 < \gamma < 1, \quad (9)$$

其中 $0 < \gamma \leq \sigma_1 < 1$, $0 < \sigma_2 < +\infty$. 与式(6)相比,

收稿日期: 2005-12-26

修回日期: 2006-06-15

作者简介: 田亚娟(1980-), 女, 陕西宝鸡人, 硕士研究生, 主要从事互补问题研究工作.

* 广西自然科学基金项目(0448075)资助.

当 $\alpha_k \|d_k\|$ 比较大时,式(9)能保证使 $f(x)$ 下降的更大.所以推广的搜索条件比标准 Wolf 搜索条件好.

基于上述讨论,我们提出新算法.

算法 1

步骤 1 取初始点 $x_1 \in R^n, k=1$ 时, $d_1 = -g_1$, 若 $g_1 = 0$, 则停止;

步骤 2 计算 $\alpha_k > 0$ 满足式(8),(9);

步骤 3 计算 $g_{k+1} = \nabla f(x_k + \alpha_k d_k)$, 若 $g_{k+1} = 0$, 则停; 其中 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$;

步骤 4 计算 $\beta_k = \mu \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T y^k}, 0 < \mu < 1$, 由式(3)得 d_{k+1} , 置 $k := k + 1$, 转步骤 2.

2 新算法的全局收敛性

我们提出 2 个基本假设:

① f 在水平集 $\Omega = \{x \in R^n | f(x) \leq f(x_1)\}$ 上有下界;

② $g(x)$ 是 Lipschitz 连续的, 即存在 $L > 0$, 使 $\|g(x) - g(y)\| \leq L \|x - y\|, \forall x, y \in R^n$.

引理 1 若满足假设条件 ①, ②, 则在上述新的搜索条件在式(8)和(9)下 α_k 总是存在的.

证明 设 $\omega(\alpha) = f(x_k + \alpha_k d_k) + \gamma \alpha_k^2 \|d_k\|^2$ 在水平集 Ω 上有下界, 即在整个空间有下界:

$$\lim_{u \rightarrow 0^+} \frac{\omega(u) - \omega(0)}{u} = g_k^T d_k < 0,$$

则存在 $\lambda_1 > 0$, 使 $\lambda \in (0, 1]$, $\frac{\omega(\alpha) - \omega(0)}{\alpha} < 0$. 假设

$$\lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \frac{\omega(\alpha) - \omega(0)}{\alpha} = +\infty,$$

存在 $\bar{\alpha}_k$, 使得

$$\frac{\omega(\bar{\alpha}_k) - \omega(0)}{\bar{\alpha}_k} = 0, \quad (10)$$

且对 $\forall \alpha \in (0, \bar{\alpha}_k]$ 都有

$$\frac{\omega(\alpha) - \omega(0)}{\alpha} \leq 0. \quad (11)$$

由式(10)利用中值定理得 $\omega'(\theta_k \bar{\alpha}_k) = 0$ 及

$$\omega'(\theta_k \bar{\alpha}_k) = g(x_k + \theta_k \bar{\alpha}_k d_k)^T d_k + 2\gamma \theta_k \bar{\alpha}_k \|d_k\|^2 = 0, \quad (0 < \theta_k < 1),$$

所以

$$g(x_k + \theta_k \bar{\alpha}_k d_k)^T d_k = -2\gamma \theta_k \bar{\alpha}_k \|d_k\|^2 \geq -2\sigma_1 \alpha_k \|d_k\|^2 < 0. \quad (12)$$

令 $\alpha_k = \theta_k \bar{\alpha}_k$, 由式(12)易得 α_k 满足式(8), 由式(11)知, α_k 满足式(9). 证毕.

引理 2 若假设条件 ①, ② 成立, α_k 满足式(8), (9), 则 $g_k^T d_k < 0$ 对所有 k 成立.

证明 当 $k=1$ 时, 由式(3)得 $d_1 = -g_1$, 故 $g_1^T d_1 = -g_1^T g_1 = -\|g_1\|^2 < 0$; 假设在第 k 步 ($k >$

1), $g_k^T d_k < 0$ 成立, 下面证明该不等式对 $k+1$ 也成立, 事实上,

$$g_{k+1}^T d_{k+1} = -\|g_{k+1}\|^2 + \beta_k g_{k+1}^T d_k = -\|g_{k+1}\|^2 + \mu \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\delta_k} g_{k+1}^T d_k = -\frac{\|g_{k+1}\|^2}{\delta_k} (\delta_k - \mu g_{k+1}^T d_k) = -\frac{\|g_{k+1}\|^2}{\delta_k} (d_k^T g_{k+1} - d_k^T g_k - \mu g_{k+1}^T d_k) = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\delta_k} g_k^T d_k. \quad (13)$$

由

$$d_k^T g_k < 0, \sigma_1 g_k^T d_k \leq g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \leq -\sigma_2 g_k^T d_k,$$

故

$$0 < (\sigma_1 - 1) g_k^T d_k \leq \delta_k \leq -(1 + \sigma_2) g_k^T d_k, \\ 0 < -\frac{1}{(1 + \sigma_2) g_k^T d_k} \leq \frac{1}{\delta_k} \leq \frac{1}{(\sigma_1 - 1) g_k^T d_k}. \quad (14)$$

上述不等式同乘以 $\|g_{k+1}\|^2 g_k^T d_k$ 得

$$\frac{1}{\sigma_1 - 1} \|g_{k+1}\|^2 \leq \frac{\|g_{k+1}\|^2 g_k^T d_k}{\delta_k} \leq -\frac{1}{1 + \sigma_2} \|g_{k+1}\|^2 < 0. \quad (15)$$

故 $g_{k+1}^T d_{k+1} < 0$. 证毕.

根据引理 2, 算法 1 所给的搜索方向总是 $f(x)$ 在 x_k 处的下降方向.

引理 3 若假设条件 ①, ② 成立, α_k 满足式(8)和(9), 则

$$\sum_{k \geq 1} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < \infty.$$

证明 由引理 2 得 $g_k^T d_k < 0$, 所以 $\{f(x_k)\}$ 为单调下降有下界数列, 即 $\{f(x_k)\}$ 为收敛数列. 由式(9)得

$$0 < (\sigma_1 - 1) g_k^T d_k \leq d_k^T (g_{k+1} - g_k) \leq -(1 + \sigma_2) g_k^T d_k. \quad (16)$$

利用假设条件 ② 得

$$d_k^T (g_{k+1} - g_k) \leq L \alpha_k \|d_k\|^2. \quad (17)$$

故由式(16),(17)知

$$\alpha_k \geq \frac{(\sigma_1 - 1) g_k^T d_k}{L \|d_k\|^2}.$$

再利用式(9)得

$$f_k - f_{k+1} \geq \gamma \alpha_k^2 \|d_k\|^2 = \frac{\gamma (\sigma_1 - 1)^2 (g_k^T d_k)^2}{L^2 \|d_k\|^2} = c \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \forall k \in \{1, 2, \dots\}, \quad (18)$$

其中 $c = \frac{\gamma (\sigma_1 - 1)^2}{L^2}$. 再由 $f(x_k)$ 的收敛性得

$$\sum_{k \geq 1} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < \infty. \quad (19)$$

定理 设 $\{x_k\}_{k \geq 1}$ 是由算法 1 产生的序列, 且假设条件 ①, ② 成立, 则算法或终止于稳定点, 或

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0.$$

证明 考虑无限序列的情形. 用反证法. 若结论

不成立,则存在 $\rho > 0$,使

$$\|g_k\| \geq \rho, \forall k. \quad (20)$$

由引理 2 知

$$g_{k+1}^T d_{k+1} = \frac{\|g_{k+1}\|^2 g_k^T d_k}{\delta_k} = \frac{1}{\mu} \beta_k g_k^T d_k, \quad (21)$$

则

$$\beta_k = \mu \frac{g_{k+1}^T d_{k+1}}{g_k^T d_k}. \quad (22)$$

将式(3)写成

$$d_{k+1} + g_{k+1} = \beta_k d_k,$$

故

$$\|d_{k+1}\|^2 = \beta_k^2 \|d_k\|^2 - 2g_{k+1}^T d_{k+1} - \|g_{k+1}\|^2.$$

上式两端同除以 $(g_{k+1}^T d_{k+1})^2$, 利用式(21)得

$$\begin{aligned} \frac{\|d_{k+1}\|^2}{(g_{k+1}^T d_{k+1})^2} &= \mu^2 \frac{(g_{k+1}^T d_{k+1})^2 \|d_k\|^2}{(g_k^T d_k)^2 (g_{k+1}^T d_{k+1})^2} - \frac{2}{g_{k+1}^T d_{k+1}} \\ &- \frac{\|g_{k+1}\|^2}{(g_{k+1}^T d_{k+1})^2} = \mu^2 \frac{\|d_k\|^2}{(g_k^T d_k)^2} - \left(\frac{1}{\|g_{k+1}\|} + \frac{\|g_{k+1}\|}{g_{k+1}^T d_{k+1}} \right)^2 + \frac{1}{\|g_{k+1}\|^2} \leq \mu^2 \frac{\|d_k\|^2}{(g_k^T d_k)^2} + \frac{1}{\|g_{k+1}\|^2}. \end{aligned}$$

又因

$$\frac{\|d_1\|^2}{(g_1^T d_1)^2} = \frac{1}{\|g_1\|^2}, \|g_k\| \geq \rho, 0 < \mu < 1,$$

故

$$\frac{\|d_k\|^2}{(g_k^T d_k)^2} \leq \sum_{i=0}^{k-1} \mu^{2i} \frac{1}{\|g_{k+i}\|^2} \leq \frac{1}{\rho^2} \sum_{i=0}^{k-1} \mu^{2i} \approx \frac{1}{\rho^2}$$

$$\frac{1}{1 - \mu^2}.$$

上式表明

$$\sum_{k \geq 1} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} = \infty, \quad (23)$$

这与引理 2 矛盾,故定理成立. 证毕.

参考文献:

- [1] SHI ZHEN JUN. A class of descent methods and its global convergence [J]. Journal of Qufu Normal University, 2000, 26(3): 4-6.
- [2] DU XUE WU. Global convergence of a class of unconstrained minimization methods including the FR method [J]. OR Transactions, 2004, 8(4): 1-9.
- [3] 袁亚湘, 孙文瑜. 最优化理论与方法[M]. 北京: 科学出版社, 1997: 98-106.
- [4] 时贞军. 基于共轭梯度法的下降算法[J]. 曲阜师范大学学报, 1999, 25(1): 5-6.
- [5] 颜世建. 共轭下降法[J]. 南京师大学报, 1996, 19(2): 12-14.
- [6] 陈元媛, 曹兴涛, 杜守强. 一种新的非线性共轭梯度法的全局收敛性[J]. 青岛大学学报, 2004, 17(2): 22-24.

(责任编辑: 邓大玉 凌汉恩)

(上接第 278 页 Continue from page 278)

所以, 文献[14]提出的杂交共轭梯度公式是本文所给一类新的 DY-型共轭梯度公式的特例.

参考文献:

- [1] CHEN Y, CAO X, DU S. A nonlinear conjugate gradient methods with a global convergence property[J]. Journal of Qingdao University: Natural Science Edition, 2004, 17(2): 22-24.
- [2] HESTENESAND M R, STIEFEL E. Method of conjugate gradient for solving linear equations[J]. J Res Nat Bur Stand, 1952, 49: 409-436.
- [3] FLETCHER R, REEVES C. Function minimization by conjugate gradients[J]. Compute J, 1964, 7: 149-154.
- [4] POLAK E, RIBIERE G. Note Sur la convergence de directions conjugees [J]. Rev Francaise Informat Recherche Operationelle, 3e Année, 1969, 16: 35-43.
- [5] POLYAK B T. The conjugate gradient method in extreme problems [J]. USSR Comp Math and Math Phys, 1969, 9: 94-112.
- [6] FLETCHER R. Practical method of optimization, vol 1: unconstrained optimization[M]. 2nd edition. New York: Wiley, 1987.
- [7] LIU Y, STOREY C. Efficient generalized conjugate gradient algorithms, part 1: theory [J]. Journal of Optimization Theory and Application, 1991, 69: 129-137.
- [8] DAI Y, YUAN Y. A nonlinear conjugate gradient with a

strong global convergence properties[J]. SIAM Journal of Optimization, 1999, 10: 177-182.

- [9] POWELL M J D. Nonconvex minimization calculations and the conjugate gradient methods, in: Lecture notes in Mathematics vol J[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1984: 122-141.
- [10] M AI-BAALI. Descent property and global convergence of the Fletcher-Reeves method with inexact line search [J]. IMA J Numer Anal, 1985, 5: 121-124.
- [11] TOUATI-AHAMED D, STOREY C. Globally convergence hybrid conjugate gradient methods [J]. Joual of Optimization Theory and Applications, 1990, 64(2): 379-397.
- [12] HAN JIYE, LIU GUANGHUI, YIN HONGXIA. Convergence properties of conjugate gradient methods with strong Wolfe line search[J]. J Systems Science and Mathematics Science, 1998, 11(2): 112-116.
- [13] GILBERT J C, NOCEDAL J. Global convergence of conjugate gradient methods for optimization[J]. SIAM J Optimization, 1992, 2: 21-42.
- [14] DAI Y H, YUAN Y. An efficient hybrid conjugate gradient method for unconstrained optimization [J]. Annals of OR, 2001, 103: 33-47.

(责任编辑: 韦廷宗 邓大玉)