无约束优化的 Broyden 族信赖域算法

耿玲玲 贺祖国
北京邮电大学理学院，北京（100876）
E-mail：genglingling511@gmail.com

摘 要：信赖域方法是近二十年发展起来的一类重要的数值计算方法，它与传统的线搜索方法并列为求非线性规划的两类重要的方法。基于信赖域方法的很好的可靠性，强适应性和收敛性，本文提出了一种修正的信赖域方法，即把拟牛顿法 DFP 和 BFGS 加权组合构成的无约束优化的 Broyden 族与信赖域方法相结合的一种方法。

关键词：信赖域，线搜索，DFP，BFGS，Broyden

1. 引言

最优化理论和方法是一门应用性很强的学科，它是用来研究某些数学问题的最优化解。在航空航天、生命科学、水利科学工程技术等自然学科领域和金融等社会科学领域也发挥着越来越重要的作用。

对于求解优化问题，已经提出很多有效的数值计算方法，如线搜索类型的方法和信赖域方法等。线搜索方法，即每次迭代产生一个搜索方向，然后在这个搜索方向上进行精确的或不精确的一维搜索，以得到下一个迭代点。信赖域方法是近几十年发展起来的数值计算方法，具有很好的可靠性、强适应性，以及很强的收敛性。目前它与传统的线搜索方法并列为求解非线性规划的两类重要的数值计算方法。信赖域方法思想新颖，算法可靠，它不仅能很快的解决良态问题，还能有效的解决病态问题，因而对信赖域方法的研究是非线性规划的一个重要的研究方向。

2. 信赖域算法的研究

信赖域方法最早是由 Powell 提出的，早在 1970 年他提出了一个求解无约束优化的问题的算法，该算法在每次迭代时强制性的要求新的迭代点与当前的迭代点之间的距离不超过某一控制量。控制步长实质上等价于以当前迭代点为中心的一个领域内对一个近似于原问题的简单模型求解，此领域叫做信赖域，这就是信赖域方法的模型。一般地，如果在当前模型内能够很好的逼近原问题，则信赖域可扩大，否则信赖域应缩小。1975 年 Powell 给出了信赖域法的第一个收敛性结果，1986 年，袁亚湘和 Powell 合作，构造了利用 Fletcher R 光滑罚函数作为价值函数的信赖域方法。1991 年，袁亚湘和 Nocedal J 合作，首创性地提出了用信赖域方法和传统的线搜索方法相结合来构造新的计算方法。

3. 信赖域算法的描述

考虑无约束优化问题

$$\text{Min} \quad f(x) \tag{3.1}$$

其中 $f: R^n \to R$ 是一个二次连续可微函数。

对于求解无约束非线性优化问题的信赖域方法，其主要计算量是求解信赖域子问题，而信赖域半径的选取起着关键作用，决定着当前迭代的方向和步长。信赖域法是一种迭代方法，每次迭代解信赖域子问题

$$\min_{x\in R^n} \quad Q_k(x)=g_k{}^T d+\frac{1}{2}d^T B_k d \tag{3.2}$$

$$\text{s. t.} \qquad \| d \| \le \Delta_k$$

其中 $g_k=\nabla f(x_k)$；$B_k\in R^{n\times n}$ 是近似于 Hessian 阵 $\nabla^2 f(x_k)$ 的对称矩阵，Δ_k 是信赖域半径。

在当前迭代点 x_k，通过求解信赖域子问题得到试探步 d_k，则

$$\Pr ed_k=Q_k(0)-Q_k(d_k)$$

是目标函数的预估下降量，函数 $f(x)$ 的真实下降量为

$$Ared_k=f(x_k)-f(x_k+d_k)$$

真实下降量与预估下降量的比值

$$r_k=\frac{Ared_k}{\Pr ed_k} \tag{3.3}$$

对 x_{k+1} 的选取以及 Δ_{k+1} 的产生起关键的作用。粗略的说，r_k 越大说明目标函数下降越多，新的点 x_k+d_k 也就越好，故 x_{k+1} 也可取为 x_k+d_k，而且 Δ_{k+1} 也可考虑扩大。否则 r_k 越小，例如 $r_k<0$，这时 $f(x_k+d_k)>f(x_k)$，故 x_{k+1} 应取为 x_k，Δ_{k+1} 也应该小于 Δ_k。

4 新的信赖域法

对于无约束优化问题

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

其中 $f(x)$ 是连续函数可微函数，众所周知 DFP 和 BFGS 是拟牛顿法中解决解无约束优化问题的重要方法，文献[1~5]给出了 DFP 和 BFGS 这两种方法的收敛性证明。DFP 的修正公式为

$$B_{k+1}=B_k+\left(1+\frac{q^{(k)T}B_k q^{(k)}}{P^{(k)T}q^{(k)}}\right)\frac{p^{(k)}p^{(k)T}}{p^{(k)T}p^{(k)}}-\frac{p^{(k)}q^{(k)T}B_k+B_k q^{(k)}p^{(k)T}}{p^{(k)T}q^{(k)}} \tag{4.1}$$

BFGS 的修正公式为

$$B_{k+1}=B_k+\frac{q^{(k)}q^{(k)T}}{q^{(k)T}p^{(k)}}-\frac{B_k p^{(k)}p^{(k)T}B_k}{p^{(k)T}B_k p^{(k)}} \tag{4.2}$$

其中：B_k 是 f 在 x_k 出的 Hessian 举证的近似矩阵；$p^{(k)}=x_{k+1}-x_k$；$q^{(k)}=g_{k+1}-g_k$，g_{k+1} 和 g_k 分别是 $f(x)$ 在 x_{k+1} 和 x_k 处的梯度值，用 $q^{(k)^*}=\frac{q^{(k)T}p^{(k)}}{|q^{(k)T}p^{(k)}|}q^{(k)}$，代替 $q^{(k)}$ 相应的可得到新的 DFP 和 BFGS 公式

$$B_{k+1}^{DFP}=B_k+\left(1+\frac{q^{(k)^*T}B_k q^{(k)*}}{P^{(k)T}q^{(k)*}}\right)\frac{p^{(k)}p^{(k)T}}{p^{(k)T}p^{(k)}}-\frac{p^{(k)}q^{(k)*T}B_k+B_k q^{(k)*}p^{(k)T}}{p^{(k)T}q^{(k)*}} \tag{4.3}$$

$$B_{k+1}^{BFGS}=B_k+\frac{q^{(k)*}q^{(k)*T}}{q^{(k)*T}p^{(k)}}-\frac{B_k p^{(k)}p^{(k)T}B_k}{p^{(k)T}B_k p^{(k)}} \tag{4.4}$$

DFP 和 BFGS 公式都是对称秩二校正，因此这两个公式的加权组合仍具有同样的形式，考虑所有这类修正公式的集合，于是定义 Broyden 族

$$B_{k+1}^{\phi}=(1-\phi)B_{k+1}^{DFP}+\phi B_{k+1}^{BFGS} \tag{4.5}$$

其中ϕ是一个参数，可以任意取，显然，当$\phi=0$和$\phi=1$时，分别是 DFP 和 BFGS 的修正。

新的信赖域算法的描述

步骤 0：给定$x_0\in R^n$，对称矩阵$B_0\in R^{n\times n}$，$\eta_0>0$；

步骤 1：计算g_k，如果满足终止条件，则终止；否则转步骤 2；

步骤 2：解子问题(3.2）得试探步d_k；

步骤 3：计算r_k 的值；

步骤 4：如果$r_k<0.25$，则令$\eta_{k+1}=\|p^{(k)}\|/4$；如果$r_k>0.75$和$\|p^{(k)}\|=\eta_k$，令$\eta_{k+1}=2\eta_k$；否则置$\eta_{k+1}=\eta_k$；

步骤 5：若$r_k\le 0$，置$x_{k+1}=x_k+p^{(k)}$，利用校正公式（4.5）产生B_{k+1}，令$k:=k+1$，转步骤 1。

注：用（4.5）式校正，当$q^{(k)T}p^{(k)}>0$，B_k保持正定性，当B_k正定时，有

$$q^{(k)^{*}T}p^{(k)}=\frac{q^{(k)T}p^{(k)}}{|q^{(k)T}p^{(k)}|}q^{(k)T}p^{(k)}=\frac{(q^{(k)T}p^{(k)})^2}{|q^{(k)T}p^{(k)}|}=|p^{(k)T}B_kp^{(k)}+ \tag{4.6}$$
$$o(\|p^{(k)}\|^2)|\ge|\lambda_k+o(1)|\|p^{(k)}\|^2>0$$

其中$p^{(k)}=x_{k+1}-x_k$，$q^{(k)}=g_{k+1}-g_k$，λ_k是B_k是最小特征值，所以B_k是正定矩阵。当B_0是对称正定矩阵时，可用数学归纳法证得修正公式（4.5）产生的B_k是正定的。

收敛性分析见文献[6]。这里就不再论证。

4. 结束语

本文给出了一个修改了的信赖域法，即将 DFP 和 BFGS 加权组合后的 Broyden 族来修正信赖域法中的B_k，从而得到了一个与 DFP 和 BFGS 方法同样的性质的修正了的信赖域法，特别是保证了B_k的正定性。可将此方法推广至其它方面做进一步研究。

参考文献

[1] Broyden C G,Dennis J E,More J J. On the local and super linear convergence of Quasi-Newton methods[J]. J Inest Math Appl,1973,12:223—246.

[2]Byrd R,Nocedal J,yuan Y. Global convergence of a class of Quasi-Newton methods on convex problem[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis,1978,24:1 171—1 189.

[3]Dennis J E,Jr MoreJ J. A characterization of super linear convergence and its application to Qusai-Newton methods[J]. Math Comp,1974,28:1 171—1190.

[4] Dennis J E,Jr MoreJ J.Quasi-Newton methods motivation and theory. SIAM Rev,1977,(19):46—89.

[5]Wei Z,Qi L, Chen X. A SQP-typemethod and its application in stochastic programming. Journal of Optimization Theory and Applications,20003,(116):205—228.

[6]袁功林,韦增新.一个新的 BFGS 信赖域算法.广西科学，2004，11（3）：195--196,200.

[7]Yuan Y, Sun W. Therory and Methods of Optimization. Beijing：Science Press of china,1999.

A Broyden-Trust Region algorithm on Unconstrained Optimization

Geng Lingling , He Zuguo
Department of Science, Beijing University of posts and telecommunications, Beijing, (100876)

Abstract

Trust region method is an important Numerical calculation method in recent two decades. Both of Trust region method and line search method are two major methods for the sake of non-linear programming. According to the Trust region method's good reliability, Strong adaptability, and convergence, a Ways to amend the Trust region method, which weighted combination of DFP and BFGS method, called Broyden combine with trust region.

Keywords : *Trust Region, line search, DFP, BFGS, Broyden*