

第一章

共轭梯度法

1.1. 引言

定义 1.1.1. 数值方法, 即是一种特定迭代方法, 首先, 按某种方法给出目标函数 $f(x)$ 极小点 x^* 的一个初始估计 $x_0 \in \mathbb{R}^n$, 称 x_0 为初始点, 然后按照某种特定的迭代规则产生一个点列 $\{x_k\}$, 使得 $\{x_k\}$ 是有穷点列时, 其最后一个点是所研究问题的某种意义下的最优解, 当 $\{x_k\}$ 是无穷点列时, 它有极限点, 其极限点是问题的某种意义下的最优解(此时称该方法是收敛的)。一般地, 已知 x_k , 则产生下一个迭代点 x_{k+1} 的公式为

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

其中 $d_k \in \mathbb{R}^n$ 为第 k 轮搜索方向, $\alpha_k > 0$ 为第 k 轮沿 d_k 方向的步长。由(1-1)式知, 使用数值方法求解问题的关键在于, 如何构造每一轮的搜索方向和确定步长。

注: 一般情况下, 根据搜索方向的 d_k 的不同, 可分为不同的方法。

现在给出用数值方法求解问题的一般算法步骤:

第 1 步: 选取初始点 x_0 , $k := 0$;

第 2 步: 构造搜索方向 d_k ;

第 3 步：根据 d_k ，确定步长 α_k ；

第 4 步：令 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ ；

第 5 步：若 x_{k+1} 已满足某种终止条件，停止迭代，输出近似最优解 x_{k+1} 。否则，令 $k := k + 1$ ，转回第 2 步。

1.2. 几个线性搜索技术

求解无约束优化问题

$$\min \{f(x) \mid x \in \mathbb{R}^n\}, \quad (1-2)$$

其中 $f(x): x \in \mathbb{R}^n$ 是连续可微的。下面我们给出在理论分析和实际应用中经常用到的几种产生步长 α_k 的方法：

(i) 精确线搜索，寻找 $\alpha_k > 0$ 满足

$$f(x_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha d_k). \quad (1-3)$$

(ii) 弱 Wolfe-Powell (WWP) 非精确线搜索技术， $\alpha_k > 0$ 满足

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f_k + \sigma_1 \alpha_k g_k^T d_k \quad (1-4)$$

和

$$g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \sigma_2 g_k^T d_k, \quad (1-5)$$

其中 $0 < \sigma_1 < \frac{1}{2}$, $\sigma_1 < \sigma_2 < 1$ 。

(iii) 强 Wolfe-Powell (SWP)非精确线搜索技术, $\alpha_k > 0$ 满足(1-4)和

$$\left| g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \right| \leq \sigma_2 \left| g_k^T d_k \right|. \quad (1-6)$$

(iv) Goldstein 非精确线搜索技术, $\alpha_k > 0$ 满足(1-4)和

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \geq f_k + \sigma_2 \alpha_k g_k^T d_k. \quad (1-7)$$

(v) Armijo 非精确线搜索技术。 $s > 0$ 是给定的常数, $\alpha_k = \max\{\alpha \mid \alpha = s, s/2, s/2^2, \dots\}$ 满足

$$f_k - f(x_k + \alpha d_k) \geq -\sigma_1 \alpha g_k^T d_k. \quad (1-8)$$

上述几种线搜索技术可参见文献[4]-[7]等。

就搜索方向 d_k 而言,可以有多种产生方法:最速下降法、共轭梯度法、牛顿法、拟牛顿法、信赖域法等。搜索方向通常要求是下降方向,即

$$d_k^T \nabla f(x_k) < 0. \quad (1-9)$$

上式可以保证从 x_k 沿 d_k 方向能找到一个“更好”的点作为下一个迭代点,使得 $f(x_k + \alpha_k d_k) < f(x_k)$ 记 $g_k = \nabla f(x_k)$ 。

我们此处介绍最速下降法和共轭梯度法,第三、四章讨论拟牛顿法。首先介绍最速下降法。

1.3. 最速下降法

最速下降法以负梯度方向作为极小化算法的下降方向,又称梯度法,是无约束最