

最优化方法及其 Matlab 程序设计

马昌凤

2010 年 3 月 22 日

目 录

第七章 非线性最小二乘问题	1
7.1 Gauss-Newton 法	1
7.2 Levenberg-Marquardt 方法	11
7.3 L-M 算法的 Matlab 程序	27

第七章 非线性最小二乘问题

非线性最小二乘问题是科学与工程计算中十分常见的一类问题, 并在经济学等领域有广泛的应用背景. 不但如此, 约束优化问题还可以通过 KKT 条件与非线性方程组建立起重要的关系. 本章, 我们主要讨论非线性最小二乘问题的一些求解算法及其收敛性质.

7.1 Gauss-Newton 法

非线性最小二乘问题是求向量任 $x \in R^n$ 使 $\|F(x)\|^2$ 最小, 其中, 映射 $F : R^n \rightarrow R^m$ 是连续可微函数. 非线性最小二乘问题在工程设计、财政金融等方面的实际问题中有着广泛的应用.

记 $F(x) = (F_1(x), F_2(x), \dots, F_m(x))^T$. 则非线性最小乘问题可以表示为

$$\min_{x \in R^n} f(x) = \frac{1}{2} \|F(x)\|^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m F_i^2(x). \quad (7.1)$$

显然, 该问题本身就是一个无约束优化问题, 因此可以套用无约束优化问题的数值方法如牛顿法、拟牛顿法等方法求解. 基于问题 (7.1) 的特殊性, 我们在这些优化算法的基础上, 建立更适合本类问题的求解算法.

对于问题 (7.1), 目标函数 f 的梯度和 Hesse 阵分别为:

$$g(x) \triangleq \nabla f(x) = \nabla \left(\frac{1}{2} \|F(x)\|^2 \right) = J(x)^T F(x) = \sum_{i=1}^m F_i(x) \nabla F_i(x),$$

$$\begin{aligned}
 G(x) &\triangleq \nabla^2 f(x) = \sum_{i=1}^m \nabla F_i(x) (\nabla F_i(x))^T + \sum_{i=1}^m F_i(x) \nabla^2 F_i(x) \\
 &= J(x)^T J(x) + \sum_{i=1}^m F_i(x) \nabla^2 F_i(x) \\
 &\triangleq J(x)^T J(x) + S(x),
 \end{aligned}$$

其中

$$J(x) = F'(x) = (\nabla F_1(x), \dots, \nabla F_m(x))^T, \quad S(x) = \sum_{i=1}^m F_i(x) \nabla^2 F_i(x).$$

利用牛顿型迭代算法, 我们便得到求解非线性最小二乘问题的迭代算法:

$$x_{k+1} = x_k - (J_k^T J_k + S_k)^{-1} J_k^T F(x_k).$$

在标准假设下, 容易得到该算法的收敛性质. 缺点是 $S(x)$ 中 $\nabla^2 F_i(x)$ 的计算量较大. 如果忽略这一项, 便得到求解非线性最小二乘问题的 Gauss-Newton 迭代算法:

$$x_{k+1} = x_k + d_k^{GN},$$

其中

$$d_k^{GN} = -[J_k^T J_k]^{-1} J_k^T F(x_k)$$

称为 Gauss-Newton 方向. 容易验证 d_k^{GN} 是优化问题

$$\min_{d \in R^n} \frac{1}{2} \|F(x_k) + J_k d\|^2$$

的最优解. 若向量函数 $F(x)$ 的 Jacobian 矩阵是列满秩的, 则可以保证 Gauss-Newton 方向是下降方向. 如同牛顿法一样, 若采取单位步长, 算法的收敛性难以保证. 但如果在算法中引入线搜索步长规则, 则可以得到如下的收敛性定理.

定理 7.1 设水平集 $\mathcal{L}(x_0)$ 有界, $J(x) = F'(x)$ 在 $\mathcal{L}(x_0)$ 上 Lipschitz 连续且满足一致性条件

$$\|J(x)y\| \geq \alpha \|y\|, \quad \forall y \in R^n, \quad (7.2)$$

其中, $\alpha > 0$ 为一常数. 则在 Wolfe 步长规则下

$$\begin{cases} f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f_k + \sigma_1 \alpha_k g_k^T d_k, \\ g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \sigma_2 g_k^T d_k, \end{cases} \quad (7.3)$$

其中 $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$. Gauss-Newton 算法产生的迭代点列 $\{x_k\}$ 收敛到 (7.1) 的一个稳定点. 即

$$\lim_{k \rightarrow \infty} J(x_k)^T F(x_k) = 0.$$

证明 由 $J(x)$ 在 $\mathcal{L}(x_0)$ 上 Lipschitz 连续可知 $J(x)$ 连续. 由于水平集 $\mathcal{L}(x_0)$ 有界, 故存在 $\beta > 0$ 使得对任意 $x \in \mathcal{L}(x_0)$, $\|J(x)\| \leq \beta$ 成立. 记 θ_k 为 Gauss-Newton 方向 d_k^{GN} 与负梯度方向 $-g_k$ 的夹角. 利用一致性条件

(7.2), 我们有

$$\begin{aligned}\cos \theta_k &= -\frac{g_k^T d_k^{GN}}{\|g_k\| \|d_k^{GN}\|} = -\frac{F_k^T J_k d_k^{GN}}{\|d_k^{GN}\| \|J_k^T F_k\|} \\ &= \frac{\|J_k d_k^{GN}\|^2}{\|d_k^{GN}\| \|J_k^T J_k d_k^{GN}\|} \geq \frac{\alpha^2 \|d_k^{GN}\|^2}{\beta^2 \|d_k^{GN}\|^2} = \frac{\alpha^2}{\beta^2} > 0.\end{aligned}$$

由于 $g(x)$ 在 $\mathcal{L}(x_0)$ 上 Lipschitz 连续, 则由 (7.3) 的第二式得

$$(\sigma_2 - 1)g_k^T d_k \leq [g(x_k + \alpha_k d_k) - g_k]^T d_k \leq \alpha_k L \|d_k\|^2.$$

故

$$\alpha_k \geq \frac{\sigma_2 - 1}{L} \frac{g_k^T d_k}{\|d_k\|^2}.$$

将其代入 (7.3) 的第一式得

$$\begin{aligned}f_k - f_{k+1} &\geq -\sigma_1 \alpha_k g_k^T d_k \geq \sigma_1 \frac{1 - \sigma_2}{L} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \\ &= \sigma_1 \frac{1 - \sigma_2}{L} \|g_k\|^2 \cos^2 \theta_k.\end{aligned}$$

两边对 k 求级数, 利用 $\{f_k\}$ 单调不增有下界, 得到

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|g_k\|^2 \cos^2 \theta_k < \infty.$$

由此可得

$$\lim_{k \rightarrow \infty} g_k = \lim_{k \rightarrow \infty} J(x_k)^T F(x_k) = 0.$$

证毕. □

定理 7.2 设单位步长的 Gauss-Newton 算法产生的迭代点列 $\{x_k\}$ 收敛到 (7.1) 的局部极小点 x^* , 而且 $J(x^*)^T J(x^*)$ 正定. 则当 $J(x)^T J(x)$, $S(x)$, $[J(x)^T J(x)]^{-1}$ 在 x^* 的邻域内 Lipschitz 连续时, 对充分大的 k , 有

$$\|x_{k+1} - x_k\| \leq \| [J(x^*)^T J(x^*)]^{-1} \| \|S(x^*)\| \|x_k - x^*\| + O(\|x_k - x^*\|^2).$$

证明 由于 $J(x)^T J(x)$, $S(x)$, $[J(x)^T J(x)]^{-1}$ 在 x^* 的邻域内 Lipschitz

连续, 故存在 $\delta > 0$ 及正数 α, β, γ 使得对任意 $x, y \in N(x^*, \delta)$ 有,

$$\begin{cases} \|S(x) - S(y)\| \leq \alpha \|x - y\| \\ \|J(x)^T J(x) - J(y)^T J(y)\| \leq \beta \|x - y\|, \\ \|[J(x)^T J(x)]^{-1} - [J(y)^T J(y)]^{-1}\| \leq \gamma \|x - y\|. \end{cases} \quad (7.4)$$

由于 $f(x)$ 二阶连续可微, $G(x) = J(x)^T J(x) + S(x)$ 在 $N(x^*, \delta)$ 上 Lipschitz 连续, 故对充分大的 k 和模充分小的 $h \in R^n$, 有 $x_k + h \in N(x^*, \delta)$, 且

$$g(x_k + h) = g(x_k) + G(x_k)h + O(\|h\|^2). \quad (7.5)$$

由于 $x_k \rightarrow x^*$, 对充分大的 k , 有 $x_k, x_{k+1} \in N(x^*, \delta)$. 令 $e_k = x_k - x^*$, $h_k = x_{k+1} - x_k$, 则

$$g(x^*) = g(x_k - e_k) = 0.$$

利用 (7.5),

$$g(x_k) - G(x_k)e_k + O(\|e_k\|^2) = 0.$$

即

$$J_k^T F_k - (J_k^T J_k + S_k)e_k + O(\|e_k\|^2) = 0.$$

注意到 $J_k^T F_k = -(J_k^T J_k)(x_{k+1} - x_k) = -J_k^T J_k h_k$. 两边同乘 $(J_k^T J_k)^{-1}$,

$$-h_k - e_k - (J_k^T J_k)^{-1} S_k e_k + (J_k^T J_k)^{-1} O(\|e_k\|^2) = 0.$$

所以

$$x_{k+1} - x^* = h_k + e_k = -(J_k^T J_k)^{-1} S_k e_k + (J_k^T J_k)^{-1} O(\|e_k\|^2).$$

两边取 2 范数,

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \|(J_k^T J_k)^{-1} S_k\| \|e_k\| + \|(J_k^T J_k)^{-1}\| \cdot O(\|e_k\|^2).$$

由于 $[J(x)^T J(x)]^{-1}$ 在 x^* 处连续, 故在 k 充分大时,

$$\|(J_k^T J_k)^{-1}\| \leq 2\|[J(x^*)^T J(x^*)]^{-1}\|. \quad (7.6)$$

从而

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \|(J_k^T J_k)^{-1} S_k\| \|x_k - x^*\| + O(\|x_k - x^*\|^2). \quad (7.7)$$

由 (7.4), (7.6) 得

$$\begin{aligned}
 & \| (J_k^T J_k)^{-1} S_k - [J(x^*)^T J(x^*)]^{-1} S(x^*) \| \\
 & \leq \| (J_k^T J_k)^{-1} \| \| S_k - S(x^*) \| \\
 & + \| (J_k^T J_k)^{-1} - [J(x^*)^T J(x^*)]^{-1} \| \| S(x^*) \| \\
 & \leq 2\alpha \| [J(x^*)^T J(x^*)]^{-1} \| \| x_k - x^* \| + \gamma \| S(x^*) \| \| x_k - x^* \| \\
 & = O(\| x_k - x^* \|).
 \end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned}
 \| (J_k^T J_k)^{-1} S_k \| & \leq \| [J(x^*)^T J(x^*)]^{-1} S(x^*) \| \\
 & + \| (J_k^T J_k)^{-1} S_k - [J(x^*)^T J(x^*)]^{-1} S(x^*) \| \\
 & = \| [J(x^*)^T J(x^*)]^{-1} S(x^*) \| + O(\| x_k - x^* \|). \quad (7.8)
 \end{aligned}$$

将 (7.8) 代入 (7.7) 即得本定立的结论. 证毕. \square

注 7.1 若问题 (7.1) 满足定理 7.2 的条件且最优解 x^* 使得目标函数值取零, 则 $S(x^*) = 0$, 上面的结论表明迭代点列二阶收敛到 x^* . 但当

$F(x)$ 在最优解点的函数值不为 0 时, 由于 $\nabla^2 f(x)$ 略去了不容忽视的项 $S(x)$, 因而难于期待 Gauss-Newton 算法会有好的数值效果.

7.2 Levenberg-Marquardt 方法

Gauss-Newton 算法在迭代过程中要求矩阵 $J(x_k)$ 列满秩, 而这一条件限制了它的应用. 为克服这个困难, Levenberg-Marquardt 方法通过求解下述优化模型来获取搜索方向

$$d_k = \arg \min_{d \in R^n} \|J_k d + F_k\|^2 + \mu_k \|d\|^2,$$

其中 $\mu_k > 0$. 由最优性条件知 d_k 满足

$$\nabla(\|J_k d + F_k\|^2 + \mu_k \|d\|^2) = 2[(J_k^T J_k + \mu_k I)d + J_k^T F_k] = 0.$$

求得

$$d_k = -(J_k^T J_k + \mu_k I)^{-1} J_k^T F_k. \quad (7.9)$$

若 $g_k = J_k^T F_k \neq 0$, 则对任意 $\mu_k > 0$,

$$g_k^T d_k = -(J_k^T F_k)^T (J_k^T J_k + \mu_k I)^{-1} (J_k^T F_k) < 0.$$

所以 d_k 是 $f(x)$ 在 x_k 点的下降方向. 这样, 我们便得到求解非线性最小乘问题的 L-M 方法:

算法 7.1 (全局收敛的 L-M 方法)

步 1 取 $\rho, \sigma \in (0, 1)$ 和 $\mu_0 > 0, x_0 \in \mathbb{R}^n$. 置 $k := 0$.

步 2 若 $g(x_k) = 0$, 停算.

步 3 求解下面的方程组

$$(J_k^T J_k + \mu_k I) d = -J_k^T F_k, \quad (7.10)$$

得 d_k .

步 4 由 Armijio 搜索求步长. 令 m_k 是满足下面不等式的最小非负整数 m :

$$f(x_k + \rho^m d_k) \leq f_k + \sigma \rho^m g_k^T d_k. \quad (7.11)$$

令 $\alpha_k = \rho^{m_k}$.

步 5 置 $x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k$, $k := k + 1$, 按某种方式更新 μ_k 的值, 转步 2.

下面我们来讨论 L-M 算法的收敛性. 注意到算法 7.1 中搜索方向 d_k 的取值其实是与 μ_k 有关的, 严格意义上讲, d_k 应记为 $d_k(\mu_k)$. 因此 L-M 方法的关键是在迭代过程中如何调整参数 μ_k . 为此我们先给出如下结论.

引理 7.1 $\|d_k(\mu)\|$ 关于 $\mu > 0$ 单调不增, 且当 $\mu \rightarrow \infty$ 时, $\|d_k(\mu)\| \rightarrow 0$.

证明 注意到

$$\frac{\partial \|d_k(\mu)\|^2}{\partial \mu} = 2d_k(\mu)^T \frac{\partial d_k(\mu)}{\partial \mu}.$$

由 (7.10) 知

$$(J_k^T J_k + \mu I) d_k(\mu) = -J_k^T F_k.$$

对上式两边关于 μ 求导,

$$d_k(\mu) + (J_k^T J_k + \mu I) \frac{\partial d_k(\mu)}{\partial \mu} = 0.$$

故

$$\frac{\partial d_k(\mu)}{\partial \mu} = -(J_k^T J_k + \mu I)^{-1} d_k(\mu). \quad (7.12)$$

于是,

$$\frac{\partial \|d_k(\mu)\|^2}{\partial \mu} = -2d_k(\mu)^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-1} d_k(\mu) \leq 0. \quad (7.13)$$

从而 $\|d_k(\mu)\|^2$ 关于 μ 单调不增. 由 (7.9) 式可以得到命题的第二个结论. 证毕. \square

从几何直观来看, 当矩阵 $J_k^T J_k$ 接近奇异时, 由 Gauss-Newton 算法得到的搜索方向的模 $\|d_k^{GN}\|$ 相当地大. 而在 L-M 方法中, 通过引入正参数 μ 就避免了这种情形出现. 下面讨论参数 μ 对搜索方向角度的影响.

引理 7.2 $d_k(\mu)$ 与 $-g_k$ 的夹角 θ 关于 $\mu > 0$ 单调不增.

证明 由

$$\cos \theta = \frac{-g_k^T d_k(\mu)}{\|g_k\| \|d_k(\mu)\|}$$

知

$$\begin{aligned} \frac{\partial \cos \theta}{\partial \mu} &= \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{-g_k^T d_k(\mu)}{\|g_k\| \|d_k(\mu)\|} \right) \\ &= \frac{-g_k^T \frac{\partial d_k(\mu)}{\partial \mu} \|g_k\| \|d_k(\mu)\| + g_k^T d_k(\mu) \|g_k\| \frac{\partial \|d_k(\mu)\|}{\partial \mu}}{\|g_k\|^2 \|d_k(\mu)\|^2}. \quad (7.14) \end{aligned}$$

利用 (7.12)-(7.13), 将上式中的分子展开

$$\begin{aligned}
& -g_k^T \frac{\partial d_k(\mu)}{\partial \mu} \|g_k\| \|d_k(\mu)\| + g_k^T d_k(\mu) \|g_k\| \frac{\partial \|d_k(\mu)\|}{\partial \mu} \\
&= \|d_k(\mu)\| \|g_k\| g_k^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-1} d_k(\mu) \\
&\quad - g_k^T d_k(\mu) \|g_k\| d_k(\mu)^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-1} d_k(\mu) / \|d_k(\mu)\| \\
&= \|g_k\| g_k^T [\|d_k(\mu)\| (J_k^T J_k + \mu I)^{-1} d_k(\mu) \\
&\quad - d_k(\mu) d_k(\mu)^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-1} d_k(\mu) / \|d_k(\mu)\|] \\
&= \frac{\|g_k\|}{\|d_k(\mu)\|} g_k^T [\|d_k(\mu)\|^2 I - d_k(\mu) d_k(\mu)^T] (J_k^T J_k + \mu I)^{-1} d_k(\mu) \\
&= -\frac{\|g_k\|}{\|d_k(\mu)\|} g_k^T [\|d_k(\mu)\|^2 I - d_k(\mu) d_k(\mu)^T] (J_k^T J_k + \mu I)^{-2} g_k
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\|g_k\| \|d_k(\mu)\| g_k^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-2} g_k \\
&\quad + \|g_k\| g_k^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-1} g_k g_k^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-3} g_k / \|d_k(\mu)\| \\
&= \frac{\|g_k\|}{\|d_k(\mu)\|} \left\{ \left[-g_k^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-2} g_k g_k^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-2} g_k \right] \right. \\
&\quad \left. + g_k^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-1} g_k g_k^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-3} g_k \right\}.
\end{aligned}$$

因为 $J_k^T J_k$ 半正定, 故存在正交阵 Q 使得

$$Q^T J_k^T J_k Q = \text{diag}\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}.$$

记 $v_i := (Q^T g_k)_i$, 则有

$$\begin{aligned}
Q^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-1} Q &= \text{diag}\left\{ \frac{1}{\lambda_1 + \mu}, \dots, \frac{1}{\lambda_n + \mu} \right\}, \\
g_k^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-1} g_k &= (Q^T g_k)^T \text{diag}\left\{ \frac{1}{\lambda_1 + \mu}, \dots, \frac{1}{\lambda_n + \mu} \right\} (Q^T g_k) \\
&= \sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i + \mu} v_i^2.
\end{aligned}$$

所以

$$g_k^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-2} g_k = \sum_{i=1}^n \frac{1}{(\lambda_i + \mu)^2} v_i^2,$$

$$g_k^T (J_k^T J_k + \mu I)^{-3} g_k = \sum_{i=1}^n \frac{1}{(\lambda_i + \mu)^3} v_i^2.$$

这样 (7.14) 式的分子等于

$$\begin{aligned} & \frac{\|g_k\|}{\|d_k(\mu)\|} \left[- \left(\sum_{i=1}^n \frac{v_i^2}{(\lambda_i + \mu)^2} \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^n \frac{v_i^2}{\lambda_i + \mu} \right) \left(\sum_{i=1}^n \frac{v_i^2}{(\lambda_i + \mu)^3} \right) \right] \\ &= \frac{\|g_k\|}{\|d_k(\mu)\|} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left[\frac{-v_i^2 v_j^2}{(\lambda_i + \mu)^2 (\lambda_j + \mu)^2} + \frac{v_i^2 v_j^2}{(\lambda_i + \mu) (\lambda_j + \mu)^3} \right] \\ &= \frac{\|g_k\|}{\|d_k(\mu)\|} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{v_i^2 v_j^2}{(\lambda_i + \mu)^3 (\lambda_j + \mu)^3} \left[-2(\lambda_i + \mu)(\lambda_j + \mu) \right. \\ & \quad \left. + (\lambda_i + \mu)^2 + (\lambda_j + \mu)^2 \right] \geq 0. \end{aligned}$$

从而 d_k 与 $-g_k$ 的夹角 θ 关于 $\mu > 0$ 单调不减. 证毕. \square

可以设想, 当参数 $\mu > 0$ 充分大时, $d_k(\mu)$ 的方向与目标函数的负梯度方向一致.

引理 7.3 $(J_k^T J_k + \mu I)$ 的条件数关于 $\mu > 0$ 单调不减.

证明 由 $J_k^T J_k$ 为对称半正定矩阵可知, 存在正交阵 Q , 使

$$Q^T J_k^T J_k Q = \text{diag}\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}, \quad \text{其中 } \lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0.$$

所以 $(J_k^T J_k + \mu I)$ 的条件数为

$$\|(J_k^T J_k + \mu I)\| \|(J_k^T J_k + \mu I)^{-1}\| = \frac{\lambda_1 + \mu}{\lambda_n + \mu}.$$

而

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{\lambda_1 + \mu}{\lambda_n + \mu} \right) = \frac{\lambda_n - \lambda_1}{(\lambda_n + \mu)^2} \leq 0,$$

从而 $(J_k^T J_k + \mu I)$ 的条件数关于 $\mu > 0$ 单调不减. 证毕. \square

在具体的 L-M 算法中, 我们用类似于调整信赖域半径的策略来调整参数 μ . 首先, 在当前迭代点定义一个二次函数

$$q(d) = f(x_k) + (J_k^T F_k)^T d + \frac{1}{2} d^T (J_k^T J_k) d.$$

基于当前给出的 μ , 根据 (7.9) 计算 d_k , 然后考虑 $q(d)$ 和目标函数的增量

$$\Delta q(d_k) = q(d_k) - q(0) = (J_k^T F_k)^T d_k + \frac{1}{2} d_k^T (J_k^T J_k) d_k,$$

$$\Delta f(d_k) = f(x_k + d_k) - f(x_k) = f(x_{k+1}) - f(x_k).$$

用 η_k 表示两增量之比

$$\eta_k = \frac{\Delta f(d_k)}{\Delta q(d_k)} = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{(J_k^T F_k)^T d_k + \frac{1}{2} d_k^T (J_k^T J_k) d_k}.$$

在 L-M 算法的每一步, 先给 μ_k 一个初始值, 如取为上一次迭代步的值, 计算 d_k . 然后根据 η_k 的值调整 μ_k , 最后根据调整后的 μ_k 计算 d_k , 并进行线搜索, 进而完成 L-M 算法的一个迭代步. 显然, 当 η_k 接近 1 时, 二次函数 $q(d)$ 在 x_k 点拟合目标函数比较好, 用 L-M 方法求解非线性最小乘问题时,

参数 μ 应取得小一些. 换言之, 此时用 Gauss-Newton 法求解更为有效. 反过来, 当 η_k 接近 0 时, 二次函数 $q(d)$ 在 x_k 点拟合目标函数比较差, 需要减小 d_k 的模长. 根据引理 7.1, 应增大参数 μ 的取值来限制 d_k 的模长. 而当比值 η_k 既不接近于 0 也不接近于 1, 则认为参数 μ_k 选取得当, 不做调整. 通常 η 的临界值为 0.25 和 0.75. 据此, 得到算法 7.1 中参数 μ_k 的一个更新规则如下

$$\mu_{k+1} := \begin{cases} 0.1\mu_k, & \text{当 } \eta_k > 0.75, \\ \mu_k, & \text{当 } 0.25 \leq \eta_k \leq 0.75, \\ 10\mu_k, & \text{当 } \eta_k < 0.25. \end{cases} \quad (7.15)$$

下面是 Levenberg-Marquardt 方法的收敛性定理.

定理 7.3 设 $\{x_k\}$ 是由算法 7.1 产生无穷迭代序列, 若 $\{x_k, \mu_k\}$ 的某一聚点 (x^*, μ^*) 满足 $J(x^*)^T J(x^*) + \mu^* I$ 正定, 则 $\nabla f(x^*) = J(x^*)^T F(x^*) = 0$.

证明 由于 $\mu_k > 0$, d_k 为下降方向, 存在收敛于 x^* 的子列 x_{k_j} , 满足

$$J_{k_j}^T J_{k_j} \rightarrow J(x^*)^T J(x^*), \quad \mu_{k_j} \rightarrow \mu^*.$$

由于 $J(x^*)^T J(x^*) + \mu^* I$ 是正定矩阵, 若 $\nabla f(x^*) \neq 0$, 则

$$d_{k_j} \rightarrow d^* = -[J(x^*)^T J(x^*) + \mu^* I]^{-1} J(x^*)^T \nabla f(x^*),$$

而且 d^* 是 x^* 点的下降方向. 所以对 $\rho \in (0, 1)$, 存在非负整数 m^* 使得

$$f(x^* + \rho^{m^*} d^*) < f(x^*) + \sigma \rho^{m^*} \nabla f(x^*)^T d^*.$$

注意到 $x_{k_j} \rightarrow x^*$, 当 j 充分大时, 由连续性知

$$f(x_{k_j} + \rho^{m^*} d_{k_j}) < f(x_{k_j}) + \sigma \rho^{m^*} \nabla f(x_{k_j})^T d_{k_j}.$$

由 Armijo 步长规则知 $m^* \geq m_{k_j}$, 所以

$$\begin{aligned} f(x_{k_j+1}) &= f(x_{k_j} + \rho^{m_{k_j}} d_{k_j}) \\ &\leq f(x_{k_j}) + \sigma \rho^{m_{k_j}} \nabla f(x_{k_j})^T d_{k_j} \\ &\leq f(x_{k_j}) + \sigma \rho^{m^*} \nabla f(x_{k_j})^T d_{k_j}, \end{aligned}$$

即对充分大的 j ,

$$f(x_{k_j+1}) \leq f(x_{k_j}) + \sigma \rho^{m^*} \nabla f(x_{k_j})^T d_{k_j}. \quad (7.16)$$

又

$$\lim_{j \rightarrow \infty} f(x_{k_j+1}) = \lim_{j \rightarrow \infty} f(x_{k_j}) = f(x^*).$$

从而对 (7.16) 两边求极限得

$$f(x^*) \leq f(x^*) + \sigma \rho^{m^*} \nabla f(x^*)^T d^*.$$

这与 $\nabla f(x^*)^T d^* < 0$ 矛盾. 所以 $\nabla f(x^*) = 0$. 证毕. \square

下面分析算法 7.1 的收敛速度.

定理 7.4 设由算法 7.1 产生的迭代序列 $\{x_k\}$ 收敛到 (7.1) 的一个局部最优解 x^* . 若 $J(x^*)^T J(x^*)$ 非奇异, $\left(\frac{1}{2} - \sigma\right) J(x^*)^T J(x^*) - \frac{1}{2} S(x^*)$ 正定, 且 $G(x) = J(x)^T J(x) + S(x)$ 在 x^* 附近一致连续, $\mu_k \rightarrow 0$. 则当 k 充分大时, $\alpha_k = 1$, 且

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} \leq \|[J(x^*)^T J(x^*)]^{-1}\| \|S(x^*)\|. \quad (7.17)$$

证明 要证 $\alpha_k = 1$, 只需证对充分大的 k ,

$$f(x_k + d_k) - f(x_k) \leq \sigma g_k^T d_k.$$

对任意 $k > 0$, 由中值定理知存在 $\zeta_k \in (0, 1)$, 使得

$$f(x_k + d_k) - f(x_k) = g_k^T d_k + \frac{1}{2} d_k^T G(x_k + \zeta_k d_k) d_k.$$

由 (7.9) 式,

$$\begin{aligned} & -(1 - \sigma) g_k^T d_k - \frac{1}{2} d_k^T G(x_k + \zeta_k d_k) d_k \\ &= (1 - \sigma) d_k^T (J_k^T J_k + \mu_k I) d_k - \frac{1}{2} d_k^T G(x_k + \zeta_k d_k) d_k \\ &= (1 - \sigma) d_k^T J_k^T J_k d_k + (1 - \sigma) \mu_k \|d_k\|^2 - \frac{1}{2} d_k^T (J_k^T J_k + S_k) d_k \\ & \quad + \frac{1}{2} d_k^T [G(x_k) - G(x_k + \zeta_k d_k)] d_k \\ &= \left(\frac{1}{2} - \sigma\right) d_k^T J_k^T J_k d_k + (1 - \sigma) \mu_k \|d_k\|^2 - \frac{1}{2} d_k^T S_k d_k \\ & \quad + \frac{1}{2} d_k^T [G(x_k) - G(x_k + \zeta_k d_k)] d_k. \end{aligned}$$

由 $x_k \rightarrow x^*$ 知 $g_k \rightarrow 0$, 从而 $d_k \rightarrow 0$. 又 $\mu_k \rightarrow 0$, 所以利用 $G(x)$ 的一致连续性知

$$V_k := (1 - \sigma)\mu_k I + \frac{1}{2}[G(x_k) - G(x_k + \zeta_k d_k)] \rightarrow 0.$$

由题设, k 充分大时,

$$\begin{aligned} & -(1 - \sigma)g_k^T d_k - \frac{1}{2}d_k^T G(x_k + \zeta_k d_k)d_k \\ &= d_k^T \left[\left(\frac{1}{2} - \sigma \right) J_k^T J_k - \frac{1}{2} S_k \right] d_k + d_k^T V_k d_k > 0. \end{aligned}$$

从而 $\alpha_k = 1$ 成立. 这样,

$$\begin{aligned}
 x_{k+1} - x^* &= x_k - x^* - (J_k^T J_k + \mu_k I)^{-1} g_k \\
 &= -(J_k^T J_k + \mu_k I)^{-1} \{ [g_k - G_k(x_k - x^*)] \\
 &\quad - [(J_k^T J_k + \mu_k I)(x_k - x^*) - G_k(x_k - x^*)] \} \\
 &= -(J_k^T J_k + \mu_k I)^{-1} [g_k - g(x^*) - G_k(x_k - x^*)] \\
 &\quad + (J_k^T J_k + \mu_k I)^{-1} (\mu_k I - S_k)(x_k - x^*) \\
 &= -(J_k^T J_k + \mu_k I)^{-1} \int_0^1 [G(x^* + t(x_k - x^*)) - G(x_k)](x_k - x^*) dt \\
 &\quad + (J_k^T J_k + \mu_k I)^{-1} (\mu_k I - S_k)(x_k - x^*).
 \end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned}
 \|x_{k+1} - x^*\| &\leq \|(J_k^T J_k + \mu_k I)^{-1}\| \left[\int_0^1 \|G(x^* + t(x_k - x^*)) - G(x_k)\| dt \right. \\
 &\quad \left. + \|\mu_k I - S_k\| \right] \|x_k - x^*\|.
 \end{aligned}$$

由 $\mu_k \rightarrow 0$, $x_k \rightarrow x^*$ 和 $G(x)$ 的一致连续性,

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} \leq \|[J(x^*)^T J(x^*)]^{-1}\| \|S(x^*)\|.$$

证毕. □

注 7.2 若 (7.1) 的目标函数的最优值为 0 时, 若取

$$\mu_k = \|F(x_k)\|^{1+\sigma}, \quad \sigma \in [0, 1],$$

或

$$\mu_k = \theta \|F_k\| + (1 - \theta) \|J_k^T F_k\|, \quad \theta \in [0, 1],$$

则可以建立 Levenberg-Marquardt 算法的二阶收敛性质.

7.3 L-M 算法的 Matlab 程序

本节我们给出 L-M 算法 7.1 的 Matlab 程序, 在某种意义上该程序是通用的.

程序 7.1 利用 LM 方法求解非线性方程组 $F(x) = 0$, 可适用于未知数的个数与方程的个数不相等的情形.

```
function [x,val,k]=lmm(Fk,JFk,x0)
%功能: 用L-M方法求解非线性方程组:  $F(x)=0$ 
%输入: x0是初始点, Fk, JFk 分别是求 $F(x_k)$ 及 $F'(x_k)$ 的函数.
%输出: x, val分别是近似解及 $\|F(x_k)\|$ 的值, k是迭代次数.
maxk=100; %给出最大迭代次数
rho=0.55;sigma=0.4; muk=norm(feval(Fk,x0));
k=0; epsilon=1e-6; n=length(x0);
while(k<maxk)
    fk=feval(Fk,x0); %计算函数值
    jfk=feval(JFk,x0); %计算Jacobi阵
    gk=jfk'*fk;
    dk=-(jfk'*jfk+muk*eye(n))\gk; %解方程组 $G_k*dk=-g_k$ , 计算搜索方向
    if(norm(gk)<epsilon), break; end %检验终止准则
    m=0; mk=0;
    while(m<20) % 用Armijo搜索求步长
        newf=0.5*norm(feval(Fk,x0+rho^m*dk))^2;
        oldf=0.5*norm(feval(Fk,x0))^2;
        if(newf<oldf+sigma*rho^m*gk'*dk)
            mk=m; break;
        end
        m=m+1;
    end
    x0=x0+rho^mk*dk;
```

```
muk=norm(feval(Fk,x0));  
k=k+1;  
end  
x=x0;  
val=0.5*muk^2;
```

我们利用上面的程序来求解一个非线性方程组.

例 7.1 用 LM 方法求解非线性方程组求解下列方程组

$$\begin{cases} x_1 - 0.7 \sin x_1 - 0.2 \cos x_2 = 0, \\ x_2 - 0.7 \cos x_1 + 0.2 \sin x_2 = 0. \end{cases}$$

解 先编制两个函数程序, 并将它们作为 m 文件与程序 7.1 一起存放于当前工作目录下.

```
%Fk.m  
function y=Fk(x)  
y(1)=x(1)-0.7*sin(x(1))-0.2*cos(x(2));  
y(2)=x(2)-0.7*cos(x(1))+0.2*sin(x(2));
```

```

y=y(:);
%JFk.m
function JF=JFk(x)
JF=[1-0.7*cos(x(1)), 0.2*sin(x(2));
    0.7*sin(x(1)), 1+0.2*cos(x(2))];

```

该问题有解 $x^* \approx (0.52652, 0.50792)^T$. 我们利用程序 7.1, 终止准则取为 $\|\nabla f(x_k)\| \leq 10^{-6}$. 取不同的初始点, 数值结果如下表.

表 7.1 L-M 方法的数值结果.

初始点 (x_0)	迭代次数 (k)	目标函数值 $\ F(x_k)\ ^2/2$
$(0.0, 0.0)^T$	7	9.4380×10^{-16}
$(1.0, 1.0)^T$	6	7.4433×10^{-19}
$(1.0, -1.0)^T$	9	4.6783×10^{-19}
$(-1.0, 1.0)^T$	10	7.6358×10^{-22}
$(5.0, 5.0)^T$	14	3.2383×10^{-20}
$(-5.0, -5.0)^T$	20	2.1319×10^{-19}