**求解无约束优化问题的算法综述**

牛曦辰

（长安大学 理学院 数学与应用数学，陕西 西安 710021）

摘要: 求解无约束优化问题是数值计算领域的重要研究课题，因此快速求解无约束最优化问题具有十分重要的意义。本文在求解无约束优化问题上，以最速下降法，阻尼牛顿法、共轭梯度法以及各种改进算法为代表，对这几种求解无约束优化问题的算法进行了综述，总结了各种方法的应用要点，为求解无约束优化问题寻找算法提供了有益借鉴。

关键词：无约束优化；共轭梯度法；阻尼牛顿法；最速下降法

**A Review on the Methods of Solving Unconstrained Optimization Problems**

Niu Xichen

(Department of Mathematics, College of science, Chang’ an University, Xi’an 710021,Shaan’xi)

**Abstract:** The unconstrained optimization problem is one of the most important research projects in numerical calculation studies, thus the fast solving of unconstrained optimization problems is of great significance. This paper reviews the three main methods on solving unconstrained optimization problems which are Conjugate Gradient Method, Damped Newton Method and Steepest Descent Method and other improved methods on these three, summarizing the key points of those methods and aiming to provide suggestions on choosing the appropriate method on solving unconstrained optimization problems.

**Key words:** Unconstrained Optimization；Conjugate Gradient Method; Damped Newton Method; Steepest Descent Method

# 1．引言

无约束优化问题是我们在现代科研过程或工程技术中经常遇到的一类问题，而无约束优化算法的求解效率将影响优化问题的求解，因此对无约束优化算法的比较研究具有重要的理论意义和实际价值[1]。通常无约束优化算法分为两类：一类是借助于目标函数的导数信息来构造下降的搜索方向，另一类是由目标函数值信息直接搜素求解方法。求解无约束最优化问题的方法主要有：最速下降法，阻尼牛顿法，共轭梯度法，信赖域法。本文将主要针对最速下降法和进行综述。

无约束优化命题具体形式为：

 （1）

# 2．算法综述

## 2.1最速下降法

最速下降法又称为梯度法，是1847年著名数学家Cauchy提出的，它是解析法中最古老的一种，也是最优化方法的基础。最速下降法的关键在与选取最速下降的方向，且负梯度方向为最速下降方向，即每一次迭代都是沿着最速下降的方向进行搜素。

文献[2]采用最经典的最速下降法来求解问题：

 （2）

假设已经迭代了次，第次迭代点为，且取搜索方向为：

 （3）

取步长为最优步长。令，，则

 （4）

寻找到最佳的后。得到第次迭代点

 （5）

于是得到点列，其中为初始点。如果，则是的平稳点，此时可以终止迭代[2]。

## 2.2阻尼牛顿法

为了寻找收敛速度快的无约束最优化方法，在文献[3]中考虑到了阻尼牛顿法求解问题。目标函数具有二阶连续偏导数，是的极小点的第k次近似，将在点 处作taylor展开，并取二阶近似，得

 （6）

是对称矩阵，则是二次函数，令，即

 （7）

的极小点，由极值存在的必要条件知

 （8）

则牛顿方向即搜索方向为

 （9）

每次迭代沿牛顿方向作最优一维搜索（本文采用后退法，该方法为不精确的一维搜索方法），求取最优步长因子[2]。令，，则

 （10）

寻找到最佳的后，令

[3]  （11）

## 2.3共轭梯度法

最速下降法和牛顿法是最基本的无约束最优化方法，前者计算量较大而收敛速度慢；后者虽然收敛速度快，但需要计算目标函数的Hesse矩阵及其逆矩阵，故计算量大。而无约束问题的核心是搜索方向的选取，共轭梯度法的基本思想是将共轭性与最速下降法相结合，利用已知点处的梯度构造一组共轭方向，并沿这组方向就行搜索，求出目标函数最小点。共轭梯度法是一种典型的共轭方向法，它的每一次搜索方向仅仅是负梯度方向与上一次迭代的搜索方向的组合。文献[4]中的方法为：

步1：选取初始数据。选取初始点，给定允许误差。

步2：检查是否满足终止准则。计算，若，迭代终止，并将 作为最优解的近似解。否则，转步3。

步3：构造初始的搜索方向。

步4：进行一维搜索（本文采用后退法，该方法为不精确的一维搜索方法）。求出和，即取，求和。令，使得

 （12）

则为最佳值。否则令，重返第四步。找到最佳的后，令

 （13）

步5：检查是否满足终止准则。计算，若，迭代终止，为近似最优解；否则，转步6。

步6：检查迭代次数。若，令，返回步3；否则，转步7.

步7：构造共轭方向。用FR公式取

 （14）

令，返回步4[4]。

# 3．算法比较

通过文献[5]到[10]的实验知最速下降法、阻尼牛顿法、共轭梯度法这类经典的求解无约束优化问题的算法具有以下特点：

最速下降法程序设计简单，存储小，对初始点没有特定的要求，即使从一个不理想的初始点出发也可收敛到局部最小点[5]。最速下降法逼近极小点的路线是锯齿形的，当迭代点越靠近极小点时，则其搜索步长就越小，因而其收敛速度越慢[6]。

阻尼牛顿法每次迭代都在牛顿方向上进行一维搜索，避免了迭代后函数值上升的现象，保持了牛顿法的二次收敛的特性，但其对目标函数要求极高，函数必须具有一阶和二阶的偏导数，同时Hesse矩阵正定且非奇异[7]。所以牛顿法迭代次数较小，精确度较高，收敛速度最快，较为精确的达到最优解[8]。

当采用共轭梯度法时，在每一轮迭代中第一步探索方向采用负梯度方向，后面的探索方向对负梯度方向进行修正，全局收敛性比最速下降法快得多，具有二次收敛性[11]。共轭梯度法收敛速度相较于最速下降法快但比阻尼牛顿法速度慢。FR共轭梯度法迭代次数在三种方法中最少，且无需计算二阶导数，该方法的效果好一些。收敛速度相对较慢是他的一个缺点。

# 4．算法改进

## 1)最速下降法的改进

最速下降法是以负梯度方向作为搜索方向，一维搜索得到步长因子；但从全局来看，最速下降法并不是收敛最快的方法。而阻尼牛顿法的收敛速度较快，在充分靠近极小点时，有二次收敛速度，因此在文献[12]中将两种算法结合起来，用最速下降法在大范围内找到一个好的初始点，然后在最优点附近改用阻尼牛顿法，用最速下降法找到的点作为阻尼牛顿法的初始点，提高逼近速度和精度。

不论是最速下降法还是阻尼牛顿法都依赖与一维搜索求，但这会耗费大量时间，在文献[13]中提出了使用追踪法来寻找最优的，这种新的方法具有强的收敛性，且计算速度较于以前也被大大提高。

## 2）共轭梯度法的改进

在文献[14]中，通过及共轭方向来改进该算法。用弱Wolf-Powell线搜索要求新步长满足：

 （15）

新共轭方向满足：

 （16）

在文献[14]中，通过以上改进发现该算法的数值表现最好，且能确保充分下降条件成立，具有全局收敛性，适用于大规模的优化问题求解。

在文献[15]中通过构建混合共轭梯度法，将文献[16]至[18]的算法进行结合，构造出新的算法，结果表明该算法的劳动力指数和CPU时间都有所提高，因此计算效率提高，且可以实现全局收敛[13]，适用于大型实际生活和最优化控制问题上。

由于共轭梯度法搜索步长较小，收敛速度较慢，所以在文献[19]中构造新方法，该方法将修正的Armijo线搜索技术与拟牛顿法中对海森矩阵的近似方法结合起来构建共轭梯度法的方向[19]。经过测试该算法具有很好的收敛性，且不论在迭代次数还是迭代时间都优于经典的共轭梯度法。

## 3）阻尼牛顿法的改进

在文献[20]中通过改变牛顿方向来改进该算法。令

 （17）

则

 （18）

其中

 （19）

为单位矩阵，为正常数，为矩阵，其中



（20）

这种方法可以避免阻尼牛顿法中的非正定和奇异，同时也避免了二阶矩阵的计算，且这种方法具有很好的收敛性。

# 5.算法发展展望

通过对上述公开发表的文献的分析归纳知：最速下降法仅具有线性收敛速度，阻尼牛顿法具有全局收敛性，共轭梯度法是二阶收敛的，而改进的三种算法使其收敛速度变快，收敛性加强。总的来看，各篇文献中的仿真结果显示：在求解无约束优化问题的过程中，改进之后的算法在计算量、收敛速度、鲁棒性等方面均明显优于原先经典的算法。由于上述的各类算法各具特点，所以对于不同的优化问题并没有一种统一求出最优解的方法，这也是各类方法在不断融合改进的原因。例如将最速下降法与阻尼牛顿法相结合等，这种将两种方法的优势均结合起来的方法，使其性能进一步提高，这也是求解无约束优化问题后续发展的重要趋势之一。展望未来，无约束优化算法还需在以下方面进行改进：

1)还需进一步加强各类求解无约束优化问题的算法间的性能对比分析。目前，大多数的文献仅开展了对最经典的几种无约束优化问题算法间的性能对比，以及将经典的求解无约束优化问题的算法与其改进的算法进行对比等，很少有将几种不同的已改进的经典的求解无约束优化问题的算法进行对比。只有经过大量的对比实验，才能确定哪种算法更加具有普适性。

2)各类求解无约束优化问题算法的规模大小以及适应性还需进一步验证。目前上述文献所求解的无约束优化问题的规模都比较小，但在实际中，有一些无约束优化问题的规模是非常大的，所以各类求解无约束优化问题的算法在大规模的问题中的适用性还需要进一步的确认。

# 6.结束语

本文综合介绍了最速下降法、阻尼牛顿法、共轭梯度法以及各种改进算法，讨论了各种算法的思路和优缺点。大量的研究表明，这些算法均是有效的，对求解无约束的优化问题具有很大帮助，对其进行更加深入的研究具有一定的价值。据了解，目前并没有一种通用的算法对所有问题的任意初始值均具有很高的效率，所以在求解具体无约束优化问题时，应多次实验，确定合适有效的算法或者几种算法结合会使得求解无约束优化问题的效率提高。

# 参考文献

1. 李志军.非线性最优化方法研究[J].数学学习与研究,2013(5):61-63.

谢政，李建平，陈挚.非线性最优化理论与方法.高等教育出版社,2010.1

袁亚湘，孙文瑜.最优化理论与方法[M].北京:科学出版社， 1997:89-124.

最优化方法与程序设计[M]. 科学出版社 , 倪勤, 2009

李欣. 求解无约束优化问题的算法研究[D].西安电子科技大学,2009.

1. 毛巍,兰恒友.无约束优化算法比较及其极值点研究[J].四川理工学院学报(自然科

学版),2015,28(04):89-94.

高蒙.求解无约束最优化问题算法比较[J].市场周刊(理论研究)，2014（05）： 2014(05):155-156+126.

于琛.关于牛頓法与最速下降法的注記[J].东北师大学报(自然科学版),1964(01):11-22.

曹建胜, 武周. 牛顿法及带阻尼牛顿法的收敛定理[J]. 南京师大学报:自然科学版, 1989, 12(2):24-27.

[10]叶峰, 邵之江, 梁昔明, et al. 四种无约束优化算法的比较研究[J]. 数学的实践与认识, 2004(05):109-113.

[11]李娟,焦宝聪.一类共轭梯度算法的收敛性[J].首都师范大学学报(自然科学版),2005(04):6-11.

[12]赵静文.无约束问题的一种混合优化算法[J].中国证券期货,2012(02):171-172.

[13]付文军.求解无约束最优化问题的最速下降法的修正[J].内蒙古大学学报(自然科学版),1995(01):28-33.

[14]黎勇, 韦增欣. 一种自动充分下降的共轭梯度法[J]. 西南师范大学学报：自然科

学版, 2016(5):36-40.

[15]Touati-Ahmed, C., [Efficient hybrid conjugate gradient techniques](https://kns.cnki.net/kcms/detail/detail.aspx?filename=SSJD00001256358&dbcode=SSJD)[J].D. Storey. Journal of Optimization Theory and Applications. 1990 (2)

[16]POWELL，M.J.D., Convergence Properties of Algithms for Nonlinear Optimization, Report No. DAMTP 1985/NA1, Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, University of Cambridge, Cambridge, England, 1985.

[17]SHANNO,D.F., Globally Convergent Conjugate Gradient Algorithms, Mathematical Programming, Vot.33, pp. 61-67,1985.

[18]TOUATI-AHMED,D., and STOREY,C., Globally Convergent Hybrid Conjugate Gradient Methods, Mathematics Research Report No.196, Department of Mathematics, Loughborough University of Technology, Loughborough, Leicestershire, England, 1986. 11

[19]吴素芹,於建华,李先锋.改进的混合共轭梯度法求解无约束优化算法[J].计算机工程与设计,2017,38(08):2155-2160.

[20]庞军彦,李秦.一类修正的阻尼牛顿法[J].洛阳理工学院学报(自然科学版),2015,25(01):75-78.