# 第4章 无约束优化方法

## 求解无约束优化问题 **min f(X**)

的数值迭代解法, 称为无约束优化方法。

方法的基本问题是: 选择搜索方向 不同的搜索方向,构成不同的无约束优化算法。

方法分: 导数法和模式法两类

导数法: 利用梯度和二阶导数构造搜索方向

如梯度法、牛顿法、

变尺度法、共扼梯度法等

模式法: 利用某些点上的函数值构造搜索方向

如坐标轮换法、鲍威尔法等

## 4.1 梯度法

梯度法是一种古老的优化算法,它的迭代方向是由负梯度构成的,也称最速下降法。

梯度法的迭代算式是

$$S^{k} = -\nabla f(X^{k})$$
$$X^{k+1} = X^{k} + a_{k}S^{k}$$

或

$$X^{k+1} = X^k - a_k \nabla f(X^k)$$

式中, $\alpha_k$  为最优步长因子,由一维搜索确定,即

$$\min f\left(X^k - \alpha \nabla f\left(X^k\right)\right) \rightarrow \alpha_k$$

根据极值的必要条件和复合函数的求导公式,有

$$\nabla f(X^{k+1}) = -\left[\nabla f(X^k - \alpha_k \nabla f(X^k))\right]^T \nabla f(X^k) = 0$$

$$\left[\nabla f\left(X^{k+1}\right)\right]^{T}\nabla f\left(X^{k}\right)=\mathbf{0}$$

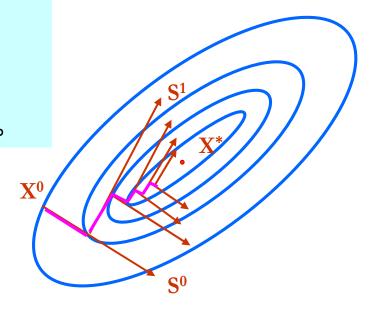
## 此式表明:

相邻两迭代点的梯度是彼此正交的,相邻的搜索方向相互垂直,如图所示。

#### 由图可以看出:

- ① 向极小点的逼近路径是一条曲折的锯齿形路线,而且越接近极小点,前进速度越慢。
  - ② 离极小点较远时,一次迭代得到的函数下降量较大。

因此,许多收敛性较好的算法,第一步迭代都采用梯度法。



## 梯度法的迭代步骤如下:

- (1) 给定初始点 $X^0$ 和收敛精度  $\varepsilon$ ,置k=0;
- (2) 计算梯度,并构造搜索方向

$$S^k = -\nabla f(X^k)$$

(3) 一维搜索,求新的迭代点

$$\min f\left(X^{k} - \alpha \nabla f\left(X^{k}\right)\right) \rightarrow \alpha_{k}$$

$$X^{k+1} = X^{k} - \alpha_{k} \nabla f\left(X^{k}\right)$$

(4) 收敛判断: 若满足

$$\left\| \nabla f \left( X^{k+1} \right) \right\| \leq \varepsilon$$

则令  $X^*=X^{k+1}$ ,  $f(X^*)=f(X^{k+1})$  终止计算;

否则,令k=k+1,转(2)继续迭代。

## 例4-1 用梯度法求解无约束最优化问题

min 
$$f(X) = x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1x_2 - 4x_1$$
  
已知  $X^0 = \begin{bmatrix} 1, 1 \end{bmatrix}^T$ ,  $\varepsilon = 0.1$ 

解(1)第一次迭代

$$\overrightarrow{X} \qquad \nabla f(X) = \begin{bmatrix} 2x_1 - 2x_2 - 4 \\ -2x_1 + 4x_2 \end{bmatrix}, \quad \nabla f(X^0) = \begin{bmatrix} -4 \\ 2 \end{bmatrix}$$

则有 
$$X^1 = X^0 + \alpha_0 S^0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \alpha_0 \begin{bmatrix} 4 \\ -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + 4\alpha_0 \\ 1 - 2\alpha_0 \end{bmatrix}$$

$$f(X^{1}) = (1+4\alpha_{0})^{2} + 2(1-2\alpha_{0})^{2} - 2(1+4\alpha_{0})(1-2\alpha_{0}) - 4(1+4\alpha_{0}) = f(\alpha_{0})$$

解得 
$$\alpha_0 = \frac{1}{4} = 0.25$$
,  $X^1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 0.5 \end{bmatrix}$ ,  $f(X^1) = -5.5$ 

因 
$$|\nabla f(X^1)| = \sqrt{5} > \varepsilon$$
 还需继续迭代

#### (2) 第二次迭代

同理有

$$\nabla f(X^{1}) = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix}, S^{1} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$X^{2} = X^{1} + \alpha_{1} S^{1} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0.5 \end{bmatrix} + \alpha_{1} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 + \alpha_{1} \\ 0.5 + 2\alpha_{1} \end{bmatrix}$$

$$f(X^{2}) = (2 + \alpha_{1})^{2} + 2(0.5 + 2\alpha_{1})^{2} - 2(2 + \alpha_{1})(0.5 + 2\alpha_{1}) - 4(2 + \alpha_{1}) = f(\alpha_{1})$$

$$f'(\alpha_{1}) = 2(2 + \alpha_{1}) + 8(0.5 + 2\alpha_{1}) - 2(0.5 + 2\alpha_{1}) - 4(2 + \alpha_{1}) - 4 = 0$$

解得 
$$\alpha_1 = 0.5$$

$$X^{2} = \begin{bmatrix} 2.5 \\ 1.5 \end{bmatrix}, \quad f(X^{2}) = -6.75$$

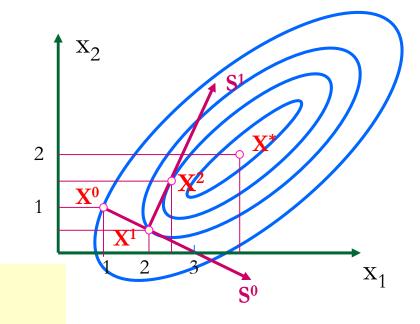
$$\nabla f(X^{2}) = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\left\|\nabla f\left(X^2\right)\right\| = \sqrt{5} > \varepsilon$$

可知 $X^2$ 也不是极小点,还应继续进行迭代。

此问题的最优解是

$$X^* = [4, 2]^T, f(X^*) = -8$$



用梯度法求解时,需要经过相当多次迭代才能得到一个近似的最优解。其中前两次的迭代路线如图所示。

## 4.2 牛顿法

牛顿法的搜索方向由目标函数的负梯度和二阶导数矩阵构造。

#### 4. 2.1 基本牛顿法

将函数 f(X)在点Xk处展成泰勒二次式:

$$f(X) \approx f\left(X^{(k)}\right) + \left[\nabla f\left(X^{(k)}\right)\right]^{T} \left[X - X^{k}\right] + \frac{1}{2} \left[X - X^{k}\right]^{T} \nabla^{2} f\left(X^{k}\right) \left[X - X^{k}\right]$$

对上式求梯度,并设 X (k+1) 是函数的极小点,则有

$$\nabla f(X^{k+1}) = \nabla f(X^k) + \nabla^2 f(X^k) [X^{k+1} - X^k] = 0$$

由此解得

$$X^{k+1} = X^k - \left[\nabla^2 f(X^k)\right]^{-1} \nabla f(X^k)$$

$$S^{k} = - \left[ \nabla^{2} f(X^{k}) \right]^{-1} \nabla f(X^{k})$$

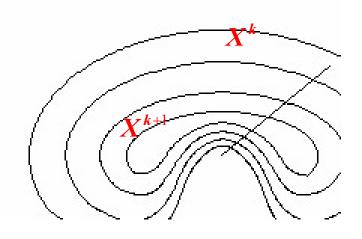
则有

$$X^{k+1} = X^k + S^k$$

由此构成的算法称基本牛顿法,Sk称牛顿方向。

## 分析可知:

- (1) 对于正定二次函数,**X**<sup>k+1</sup>是精确极小点,方向 **S**<sup>k</sup> 是 直指函数的极小点。
- (2) 用基本牛顿法求解正定二次函数时,无论从哪个初始点出发,计算所得牛顿方向直指极小点,而且步长等于1。
- (3) 对于一般非线性函数,点**X**<sup>k+1</sup>只是原函数的一个近似极小点。故将此点作为下一个迭代**X**<sup>k+1</sup>。
- (4) 但是对于非正定函数,由上式得到的点**X**<sup>k+1</sup>,不能始终保持函数的下降性,基本牛顿法有可能失败。如图所示,



原因: 步长因子总是等于1,

改进方法:引入步长因子和一维搜索。

由此构成如下阻尼牛顿法。

#### 4.2.2 阻尼牛顿法

由此建立的算法就是阻尼牛顿法,ax和阻尼因子

## 牛顿法的特点:

- (1) 构造搜索方向利用了函数的所有的一阶导数和二阶导数,产生的搜索方向直指极小点;
- (2) 对于正定二次函数,从任意初始点出发,一次迭代即可得 到极小点。对于一般函数,迭代的次数比其它算法都要少。
- (3) 每次迭代都需要计算函数的二阶导数矩阵及其逆矩阵。 计算量大,计算时间长,计算速度较慢。
- (4) 计算中,用**差分代替微分**。所得梯度和二阶导数矩阵, 以及求得的牛顿方向都存在<mark>较大误差</mark>。

## 例4-2 用牛顿法求解例4-1

$$\min f(X) = x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1x_2 - 4x_1$$

已知 
$$X^0 = \begin{bmatrix} 1, 1 \end{bmatrix}^T, \quad \varepsilon = 0.1$$

## 解 1) 用基本牛顿法

计算 
$$\nabla f(X) = \begin{bmatrix} 2x_1 - 2x_2 - 4 \\ -2x_1 + 4x_2 \end{bmatrix}$$

$$abla^2 f(X) = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix}, \quad \nabla f(X^0) = \begin{bmatrix} -4 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(X) \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{bmatrix}$$

$$S^{0} = -\left[\nabla^{2} f\left(X^{0}\right)\right]^{-1} \nabla f\left(X^{0}\right) = -\left[\begin{matrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{matrix}\right] \begin{bmatrix} -4 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$X^{1} = X^{0} + S^{0} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad f(X^{1}) = -8$$

故最优解是: 
$$X^* = X^1 = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix}$$
,  $f(X^*) = -8$ 

#### 2) 用阻尼牛顿法

$$X^{1} = X^{0} + \alpha_{0} S^{0} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \alpha_{0} \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + 3\alpha_{0} \\ 1 + \alpha_{0} \end{bmatrix}$$

代入原函数

$$f(X^{1}) = (1+3\alpha_{0})^{2} + 2(1+\alpha_{0})^{2} - 2(1+3\alpha_{0})(1+\alpha_{0}) - 4(1+3\alpha_{0}) = f(\alpha_{0})$$

对α求导

$$f'(\alpha_0) = 6(1+3\alpha_0) + 4(1+\alpha_0) - 6(1+\alpha_0) - 2(1+3\alpha_0) - 12 = 0$$

解得 
$$\alpha_0 = 1$$

$$X^{1} = X^{0} + \alpha_{0} S^{0} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$f\left(X^{1}\right) = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \left\|\nabla f\left(X^{1}\right)\right\| = \mathbf{0}$$

最优解为 
$$X^* = X^1 = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix}, f(X^*) = -8$$

可以看出:

此解与基本牛顿法的计算结果完全相同。

两种方法都只进行了一次迭代,这是因为标函数是正定

二次函数,基本牛顿法的局限性还没有显露出来的缘故。

基本牛顿法不需一维搜索, 因此计算速度较快。

## 4.2.3 变尺度法

基本思想:

(1) 用简单矩阵代替二阶导数矩阵的逆矩阵  $\left[\nabla^2 f(X^k)\right]^{-1}$ 

$$\left[
abla^2 fig(X^kig)
ight]^{\!-1}$$

(2) 用坐标变换简化目标函数

引入矩阵变换**U**,令  $X-X^k=UY$ 

代入式泰勒展开式得

$$\phi(Y) = \frac{1}{2}Y^{T}U^{T}\nabla^{2}f(X^{k})UY + \left[\nabla f(X^{k})\right]^{T}UY + f(X^{k})$$

若  $\nabla f(X^k)$  正定,必存在矩阵U

使 
$$U^T \nabla^2 f(X^k) U = I$$
 (4-12)

## 代入前式得

$$\phi(Y) = \frac{1}{2}Y^{T}Y + \nabla^{2} f(X^{k})^{T} UY + f(X^{k})$$

上式中只包含Y的二次项和一次项,采用坐标平移可消去一次项,使其等值线变为同心椭圆(球)。

用 U 和 U-1 分别左乘和右乘式(4-12),有

$$UU^{T}\nabla^{2} f(X^{k}) = I$$
$$\left[\nabla^{2} f(X^{k})\right]^{-1} = UU^{T}$$

$$\overline{U^T \nabla^2 f(X^k) U} = I$$

## 将上式代入牛顿法的迭代算式得

$$S^{k} = -UU^{T}\nabla f(X^{k})$$

$$X^{k+1} = X^{k} - \alpha_{k}UU^{T}\nabla f(X^{k})$$

记矩阵 $A = -UU^T$ ,称变尺度矩阵,则有

$$S^{k} = -A^{k} \nabla f \left( X^{k} \right)$$
$$X^{k+1} = X^{k} - \alpha_{k} A^{k} \nabla f \left( X^{k} \right)$$

由以上两式构成的下降迭代解法称变尺度法。

其中 
$$S^k = -A^k \nabla f(X^k)$$
 称变尺度方向。

经推导,变尺度矩阵可由以下递推公式得到:

$$\boldsymbol{A}^{k+1} = \boldsymbol{A}^k + \boldsymbol{E}^k$$

其中, A0=I(单位矩阵); Ek称校正矩阵

$$E^{k} = \frac{\Delta X^{k} \left[ \Delta X^{k} \right]^{T}}{\left[ \Delta g^{k} \right]^{T} \Delta X^{k}} - \frac{A^{k} \Delta g^{k} \left[ \Delta g^{k} \right]^{T} A^{k}}{\left[ \Delta g^{k} \right]^{T} A^{k} \Delta g^{k}}$$

式中

$$\Delta X^{k} = X^{k+1} - X^{k}$$
$$\Delta g^{k} = \nabla f(X^{k+1}) - \nabla f(X^{k})$$

## 4.2.4 共轭梯度法

## 4.2.4.1 共轭方向

设H为正定对称矩阵,有一组非零向量  $S_1, S_2, \dots, S_n$  满足

$$S_i^T H S_j = 0 \quad (i \neq j)$$

则称这组向量关于矩阵H共轭,或是H的一组共轭向量。

当H为单位矩阵时,即有

$$S_i^T S_j = 0 \quad (i \neq j)$$

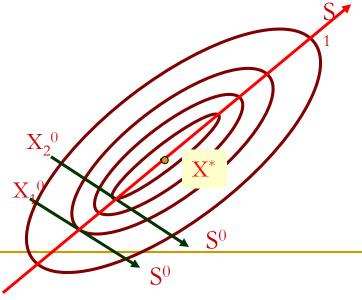
此时称向量  $S_n$  (i=1, 2, ..., n) 相互正交。

## 共轭方向具有以下性质:

- (1)对于正定二次函数,从任意初始点**X**<sup>0</sup>出发,依次沿一组 (n个)共轭方向一维搜索,最多n次即可以达到极小点。
- (2) 从任意两点 X<sub>1</sub><sup>0</sup> 和 X<sub>2</sub><sup>0</sup> 出发,分别沿同一方向 S<sup>0</sup> 进行一维搜索,得到两个一维极小点 X<sub>1</sub><sup>1</sup> 和 X<sub>2</sub><sup>1</sup>,则连接此两点所形成的向量

$$S^1 = X_1^1 - X_2^1$$

与原方向**S<sup>0</sup>**关于该函数的二阶 导数矩阵相共轭。



#### 4.2.4.2 共轭方向的产生

平行搜索法 向量组合法。

## 1.平行搜索法

见后面的鲍威尔法

## 2. 向量组合法

## (1) 基向量组合法

取n个基向量 $e^{i}$ (i=0,1,…,n-1)和另一个独立向量 $S^{0}$ ,

**\$** 

$$S^1 = e^0 + \beta_0 S^0 \tag{4-26}$$

式中, $\beta_0$ 为待定常数。称 $S^0$  是 $e^0$  和 $S^1$  的线性组合。

欲使 S<sup>0</sup> 和 S<sup>1</sup> 关于函数的二阶导数矩阵相共轭,则必须使

$$\left[S^{0}\right]^{T} \nabla^{2} f\left(X^{k}\right) S^{1} = \mathbf{0}$$
 (4-27)

将式(4-26)代入上式解得

解得

$$\beta_0 = -\frac{\left[S^0\right]^T \nabla^2 f\left(X^k\right) e^0}{\left[S^0\right]^T \nabla^2 f\left(X^k\right) S^0}$$

代入式(4-26)得到与 S<sup>0</sup> 共轭的向量

$$S^{1} = e^{0} - \frac{\left[S^{0}\right]^{T} \nabla^{2} f\left(X^{k}\right) e^{0}}{\left[S^{0}\right]^{T} \nabla^{2} f\left(X^{k}\right) S^{0}} \cdot S^{0}$$

同理,若已求得 k+1 个共轭向量 S<sup>0</sup>, S<sup>1</sup>, ..., S<sup>k</sup>, 令新的向量

$$S^{k+1} = e^k + \sum_{i=0}^k \beta_i S^i$$

解得

$$\beta_{i} = -\frac{\left[S^{i}\right]^{T} \nabla^{2} f\left(X^{k}\right) e^{i}}{\left[S^{i}\right]^{T} \nabla^{2} f\left(X^{k}\right) S^{i}}$$

于是,有 
$$S^{k+1} = e^k - \sum_{i=0}^k \frac{\left[S^i\right]^T \nabla^2 f\left(X^k\right) e^i}{\left[S^i\right]^T \nabla^2 f\left(X^k\right) S^i}$$

此向量就是与原 k+1 个向量相共轭的新向量。

## 4.2.5 梯度组合法

将函数f(X)展开为如下二次函数

$$f(X) = \frac{1}{2}X^T H X + B^T X + c$$

从任意点 Xk 出发,沿函数的负梯度方向作一次一维搜索

得 
$$X^{k+1} = X^k + \alpha_k S^k$$
 (4-35)

$$\nabla \diamondsuit \qquad S^{k+1} = -\nabla f(X^{k+1}) + \beta_k S^k \qquad (4-36)$$

把式(4-34)和式(4-36)代入共轭条件

$$\left[S^{k+1}\right]^T HS^k = 0 \tag{4-37}$$

$$-\left[\nabla f\left(X^{k}\right)\right]^{T}H\left[-\nabla f\left(X^{k+1}\right)+\beta_{k}S^{k}\right]=0$$

由此解得

$$\beta_k = \frac{\left[\nabla f(X^k)\right]^T H \nabla f(X^{k+1})}{\left[\nabla f(X^k)\right]^T H \nabla f(X^k)}$$

由于

$$\nabla f(X^{k}) = HX^{k} + B$$

$$\nabla f(X^{k+1}) = HX^{k+1} + B$$

两式相减并将式(4-35)代入得

$$a_k HS^k = \nabla f(X^{k+1}) - \nabla f(X^k)$$

将式(4-36)和上式的两边分别相乘,并注意式(4-37)得

$$\left[ -\nabla f\left(X^{k+1}\right) + \beta_k \nabla f\left(X^k\right) \right]^T \left[ \nabla f\left(X^{k+1}\right) - \nabla f\left(X^k\right) \right] = \mathbf{0}$$

将上式展开,并注意到相邻两点梯度间的正交关系,整理后得

$$\beta_{k} = \frac{\left[\nabla f\left(X^{k+1}\right)\right]^{T} \nabla f\left(X^{k+1}\right)}{\left[\nabla f\left(X^{k}\right)\right]^{T} \nabla f\left(X^{k}\right)} = \frac{\left\|\nabla f\left(X^{k+1}\right)\right\|^{2}}{\left\|\nabla f\left(X^{k}\right)\right\|^{2}}$$

#### 4.3 共轭梯度法

把上式代入式(4-36)得

$$S^{k+1} = -\nabla f(X^{k+1}) + \frac{\|\nabla f(X^{k+1})\|^2}{\|\nabla f(X^k)\|^2} S^k$$

$$X^{k+2} = X^{k+1} + \alpha_{k+1} S^{k+1}$$

可见,只需利用相邻两点的梯度就可以构造一个共轭方向。

以这种方式产生共轭方向并进行迭代运算的算法称共轭梯度法。

## 例4-4 用共轭梯度法求解例4-1。

解(1) 第一次迭代沿负梯度方向搜索。由例4-1得

$$X^{0} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \nabla f(X^{0}) = \begin{bmatrix} -4 \\ 2 \end{bmatrix}, S^{0} = \begin{bmatrix} 4 \\ -2 \end{bmatrix}$$
$$X^{1} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0.5 \end{bmatrix}, \nabla f(X^{1}) = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

(2) 第二次迭代。求

$$\beta_{0} = \frac{\left\|\nabla f\left(X^{1}\right)\right\|^{2}}{\left\|\nabla f\left(X^{0}\right)\right\|^{2}} = \frac{5}{20} = 0.25$$

$$S^{1} = -\nabla f\left(X^{1}\right) + \beta_{0}S^{0} = -\begin{bmatrix} -1\\ -2 \end{bmatrix} + 0.25 \begin{bmatrix} 4\\ -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\\ 1.5 \end{bmatrix}$$

$$X^{2} = X^{1} + \alpha_{1}S^{1} = \begin{bmatrix} 2\\ 0.5 \end{bmatrix} + \alpha_{1}\begin{bmatrix} 2\\ 1.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2+2\alpha_{1}\\ 0.5+1.5\alpha_{1} \end{bmatrix}$$

$$f(X^{2}) = (2 + 2\alpha_{1})^{2} + 2(0.5 + 1.5\alpha_{1})^{2} - 2(2 + 2\alpha_{1})(0.5 + 1.5\alpha_{1}) - 4(2 + 2\alpha_{1}) = f(\alpha_{1})$$
$$f'(\alpha_{1}) = 4(2 + 2\alpha_{1}) + 6(0.5 + 1.5\alpha_{1}) - 4(0.5 + 1.5\alpha_{1}) - 3(2 + 2\alpha_{1}) - 8 = 0$$

解得 
$$\alpha_1 = 1$$

$$X^2 = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad f(X^2) = -8$$

$$\nabla f(X^2) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

因 
$$\left\|\nabla f\left(X^2\right)\right\| = 0$$

所以  $X^2 = [4,2]^T$  和  $f(X^2) = -8$  就是所求最优解。

## 4.4 鲍威尔(Powell)法

利用平行搜索构造共轭方向,并沿共轭方向一维搜索的算法。由于方向的产生不需要计算导数,因此属于模式法。 鲍威尔法是模式法中最好的,具有超线性收敛速度。

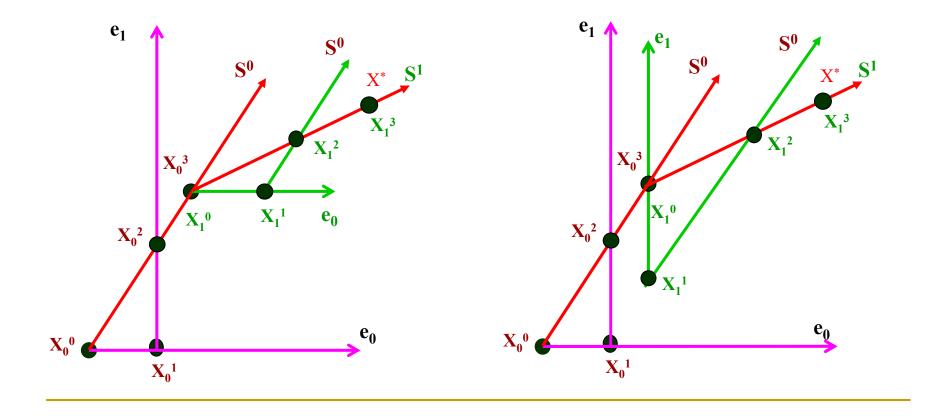
#### 4.4.1 基本思想

从两个初始点出发,沿同一个方向,分别进行两次一 維搜索,就可产生一个与原方向共轭的方向。

但算法只能给定一个初始点 X<sup>0</sup>。

故实现平行搜索的第二个初始点和一个任意方向,只能借助坐标方向在搜索中逐渐产生。

## 4.4.2 迭代过程



## 4.4.3 算法特点

(1)对于正定二元二次函数,经过两轮迭代,**6**次一維搜索即可达到极小点。

对正定 n 元二次函数,最多经过 n 轮迭代, n (n+1) 次一維搜索就可达到极小点。

- (2) 不需计算函数的导数。
- (3)一维搜索的次数较多,但构成搜索方向的计算极其简单。