

DOI: 10.13718/j.cnki.xdzk.2017.07.014

# Wolfe 线搜索下充分下降性的 FR 型共轭梯度法<sup>①</sup>

王开荣, 徐晓光

重庆大学 数学与统计学院, 重庆 401331

**摘要:** 在 FR 共轭梯度法的基础之上, 提出了一种新的共轭梯度法. 在标准的 Wolfe 线搜索下, 证明了该算法的充分下降性和收敛性. 最后, 给出初步的数值实验结果并表明该方法是有效的.

**关键词:** 共轭梯度法; 充分下降性; 全局收敛性; Wolfe 线搜索

**中图分类号:** O221.2

**文献标志码:** A

**文章编号:** 1673-9868(2017)07-0091-06

考虑如下无约束最优化问题

$$\min\{f(\mathbf{x}): \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\} \quad (1)$$

其中:  $\mathbf{x}$  为决策变量, 目标函数  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  是连续可微函数. 共轭梯度法是解决上述无约束优化问题的常用方法. 由于其迭代简单, 储存量低, 所以常用于解决大规模优化问题. 其基本迭代格式为

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k \quad (2)$$

其中:  $\alpha_k$  是步长,  $\mathbf{d}_k$  是搜索方向.  $\mathbf{d}_k$  的基本迭代格式为

$$\mathbf{d}_k = \begin{cases} -\mathbf{g}_k & k=1 \\ -\mathbf{g}_k + \beta_k \mathbf{d}_{k-1} & k \geq 2 \end{cases} \quad (3)$$

记  $\mathbf{g}(\mathbf{x}_k) = \nabla f(\mathbf{x}_k)$ ,  $\beta_k$  为标量, 关于  $\beta_k$  的计算有多种形式, 不同的  $\beta_k$  对应着不同的共轭梯度算法. 一些著名的  $\beta_k$  公式有:

$$\begin{aligned} \beta_k^{\text{FR}} &= \frac{\|\mathbf{g}_k\|^2}{\|\mathbf{g}_{k-1}\|^2} & \beta_k^{\text{PRP}} &= \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{y}_{k-1}}{\|\mathbf{g}_{k-1}\|^2} & \beta_k^{\text{HS}} &= \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{y}_{k-1}}{\mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{y}_{k-1}} \\ \beta_k^{\text{LS}} &= \frac{-\mathbf{g}_k^T \mathbf{y}_{k-1}}{\mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}} & \beta_k^{\text{DY}} &= \frac{\|\mathbf{g}_k\|^2}{\mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{y}_{k-1}} & \beta_k^{\text{CD}} &= \frac{-\|\mathbf{g}_k\|^2}{\mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}} \end{aligned} \quad (4)$$

其中:  $\mathbf{y}_{k-1} = \mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1}$ ,  $\|\cdot\|$  表示 Euclid 范数. 关于这 6 种著名的共轭梯度法的详细内容可以参考文献 [1-7].

本文主要研究一种 FR 型共轭梯度方法. 众所周知 FR 方法是求解无约束优化问题最有效的方法之一. 文献[8]首先证明了 FR 方法在精确线搜索下对一般非线性函数是全局收敛的, 由于精确线搜索代价比较大, 所以在实际的计算中人们通常使用非精确线搜索. 例如文献[9]首先给出了在非精确线搜索下的非线性共轭梯度算法的全局收敛性结果, 并证明了在强 Wolfe 线搜索下, 当  $\sigma < \frac{1}{2}$  时 FR 方法满足充分下降性条件, 同时全局收敛. 文献[10-11]进一步将上面的收敛结果推广到  $\sigma = \frac{1}{2}$  的情形. 后来许多学者开始对

<sup>①</sup> 收稿日期: 2016-10-04

基金项目: 国家自然科学基金项目(11571055); 重庆市研究生教育教学改革研究项目(yjg143046).

作者简介: 王开荣(1965-), 男, 重庆垫江人, 教授, 主要从事最优化理、算法论和应用方面的研究.

FR 方法产生了兴趣, 做出了对 FR 方法的修正以及变形, 得到了比较好的结果. 例如文献[12]推广了 FR 方法, 得到了一种修正的 FR 型共轭梯度方法, 其中  $\beta_k$  为

$$\beta_k^{\text{MFR}} = \frac{\|\mathbf{g}_k\|^2}{\max\{\|\mathbf{g}_{k-1}\|^2, u|\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1}|\}}$$

本文在文献[12]的基础之上, 进一步研究 FR 型方法, 提出了另外一种修正的 FR 型共轭梯度方法, 改进的修正 FR 型公式记为  $\beta_k^{\text{XMFR}}$ ,

$$\beta_k^{\text{XMFR}} = \frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_k - \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1}}{\|\mathbf{d}_{k-1}\|_2} \mathbf{d}_{k-1})}{\max\{\|\mathbf{g}_{k-1}\|^2, u|\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1}|\}} \quad (5)$$

其中  $u > 1$ . 在 Wolfe 线搜索下证明了其全局收敛性.

在证明算法的全局收敛性时, 一般采用 Wolfe 线搜索来计算步长  $\alpha_k$ , 即典型的 Wolfe 非精确线搜索为:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k) &\leq f(\mathbf{x}_k) + \delta \alpha_k \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k)^T \mathbf{d}_k &\geq \sigma \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k \end{aligned} \quad (6)$$

其中  $\delta$  和  $\sigma$  是满足  $0 < \delta < \sigma < 1$  的常数.

## 1 新算法及其充分下降性

### 算法 1

步骤 1 初始化. 给定初始点  $\mathbf{x}_1 \in \mathbb{R}^n$ ,  $u > 1$ , 令  $\mathbf{d}_1 = -\mathbf{g}_1$ ,  $k := 1$ , 设  $\alpha_1 = \frac{1}{\|\mathbf{g}_1\|}$ , 如果  $\|\mathbf{g}_1\| \leq \varepsilon$ , 则停止.

步骤 2 线搜索. 计算步长  $\alpha_k$ , 使得  $\alpha_k$  满足 Wolfe 非精确线搜索(6).

步骤 3 令  $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$ ,  $\mathbf{g}_{k+1} = \mathbf{g}(\mathbf{x}_{k+1})$ . 如果  $\|\mathbf{g}_{k+1}\| \leq \varepsilon$ , 则停止.

步骤 4 计算  $\mathbf{d}_k$ ,  $\mathbf{d}_k$  满足(3)和(5)式. 如果 Powell 重新开始条件

$$|\mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{g}_k| \geq 0.2 \|\mathbf{g}_{k+1}\|^2$$

成立, 则重新开始, 令

$$\mathbf{d}_{k+1} = -\mathbf{g}_{k+1}$$

计算

$$\alpha_k = \alpha_{k-1} \frac{\|\mathbf{d}_{k-1}\|}{\|\mathbf{d}_k\|}$$

步骤 5 令  $k := k + 1$ , 转步骤 2.

首先, 在无任何线搜索条件下证明由(3)和(5)式所确定的方向满足充分下降条件

$$\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k \leq -\left(1 - \frac{1}{u}\right) \|\mathbf{g}_k\|^2$$

**定理 1** 考虑(2)和(3)式的迭代方法,  $\beta_k$  由(5)式产生,  $u > 1$ , 对任意  $k \geq 1$ , 总有下式成立

$$\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k \leq -\left(1 - \frac{1}{u}\right) \|\mathbf{g}_k\|^2 \quad (7)$$

**证** 若  $\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} = 0$ , 则由  $\mathbf{g}_k$  与(3)式两端作内积得:

$$\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k = -\|\mathbf{g}_k\|^2 + \beta_k^{\text{XMFR}} \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} = -\|\mathbf{g}_k\|^2 < -\left(1 - \frac{1}{u}\right) \|\mathbf{g}_k\|^2$$

则(7)式显然成立.

若  $\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} \neq 0$ , 则有

$$\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k = -\|\mathbf{g}_k\|^2 + \beta_k \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} \leq$$

$$\begin{aligned}
& - \| \mathbf{g}_k \|^2 + \beta_k | \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} | = \\
& - \| \mathbf{g}_k \|^2 + \frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_k - \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1}}{\| \mathbf{d}_{k-1} \|^2} \mathbf{d}_{k-1})}{\max\{ \| \mathbf{g}_{k-1} \|^2, u | \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} | \}} | \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} | \leq \\
& - \| \mathbf{g}_k \|^2 + \frac{\| \mathbf{g}_k \|^2}{u | \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} |} | \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} | = \\
& - \left( 1 - \frac{1}{u} \right) \| \mathbf{g}_k \|^2
\end{aligned}$$

因此, 对所有的  $k \geq 1$ , (7) 式总是成立的.

**定理 2** 对于所有的  $k \geq 1$ , 参数  $\beta_k^{\text{XMFR}}$  满足  $0 \leq \beta_k^{\text{XMFR}} \leq \frac{\| \mathbf{g}_k \|^2}{\| \mathbf{g}_{k-1} \|^2}$ .

**证** 根据  $\beta_k^{\text{XMFR}}$  的定义, 有

$$\begin{aligned}
\beta_k^{\text{XMFR}} &= \frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_k - \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1}}{\| \mathbf{d}_{k-1} \|^2} \mathbf{d}_{k-1})}{\max\{ \| \mathbf{g}_{k-1} \|^2, u | \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} | \}} = \\
& \frac{\| \mathbf{g}_k \|^2 - \frac{(\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1})^2}{\| \mathbf{d}_{k-1} \|^2}}{\max\{ \| \mathbf{g}_{k-1} \|^2, u | \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} | \}} = \\
& \frac{\| \mathbf{g}_k \|^2 (1 - \cos^2 \theta_k)}{\max\{ \| \mathbf{g}_{k-1} \|^2, u | \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} | \}} \geq 0
\end{aligned}$$

其中  $\theta_k$  是  $\mathbf{g}_k$  和  $\mathbf{d}_{k-1}$  的夹角.

另一方面, 由于

$$\| \mathbf{g}_k \|^2 (1 - \cos^2 \theta_k) \leq \| \mathbf{g}_k \|^2$$

所以有

$$\begin{aligned}
\beta_k^{\text{XMFR}} &= \frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_k - \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1}}{\| \mathbf{d}_{k-1} \|^2} \mathbf{d}_{k-1})}{\max\{ \| \mathbf{g}_{k-1} \|^2, u | \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} | \}} = \\
& \frac{\| \mathbf{g}_k \|^2 - \frac{(\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1})^2}{\| \mathbf{d}_{k-1} \|^2}}{\max\{ \| \mathbf{g}_{k-1} \|^2, u | \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} | \}} = \\
& \frac{\| \mathbf{g}_k \|^2 (1 - \cos^2 \theta_k)}{\max\{ \| \mathbf{g}_{k-1} \|^2, u | \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} | \}} \leq \\
& \frac{\| \mathbf{g}_k \|^2}{\| \mathbf{g}_{k-1} \|^2}
\end{aligned}$$

因此, 结论是成立的.

## 2 新算法的全局收敛性

为了获得算法 1 的全局收敛性, 需要下面两个常用的假设:

(H1) 假设目标函数  $f(\mathbf{x})$  在水平集  $E = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_1) \}$  上有界, 其中  $\mathbf{x}_1$  为算法初始点.

(H2) 在  $E$  的某个邻域  $N$  内, 目标函数  $f(\mathbf{x})$  连续可微且梯度函数  $g(\mathbf{x})$  满足 Lipschitz 条件, 即存在常数  $L > 0$ , 使得

$$\| g(\mathbf{x}) - g(\mathbf{y}) \| \leq L \| \mathbf{x} - \mathbf{y} \| \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in N$$

**引理 1**<sup>[13]</sup> 设目标函数  $f(\mathbf{x})$  满足 (H<sub>1</sub>) 和 (H<sub>2</sub>),  $\{ \mathbf{x}_k \}$  由 (2) 和 (3) 式产生,  $\mathbf{d}_k$  满足下降方向,  $\alpha_k$  满足 Wolfe 线搜索, 则有

$$\sum_{k \geq 1} \frac{(\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k)^2}{\|\mathbf{d}_k\|^2} < \infty$$

根据(7)式可得

$$\sum_{k \geq 1} \frac{\|\mathbf{g}_k\|^4}{\|\mathbf{d}_k\|^2} < \infty \quad (8)$$

假设(H1), (H2)成立, 迭代序列 $\{\mathbf{x}_k\}$ 由(2)和(3)式产生,  $\{\mathbf{g}_k\}$ 为算法产生的序列, 则有

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\mathbf{g}_k\| = 0$$

证 利用反证法来证, 假设结论不成立, 则存在常数 $\gamma > 0$ , 使得

$$\|\mathbf{g}_k\|^2 \geq \gamma \quad \forall k \geq 1$$

对(3)式两端取模平方得:

$$\|\mathbf{d}_k\|^2 = \|\mathbf{g}_k\|^2 + (\beta_k^{\text{XMFR}})^2 \|\mathbf{d}_{k-1}\|^2 - 2\beta_k^{\text{XMFR}} \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1}$$

由于

$$0 \leq \beta_k^{\text{XMFR}} = \frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_k - \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1}}{\|\mathbf{d}_{k-1}\|^2} \mathbf{d}_{k-1})}{\max\{\|\mathbf{g}_{k-1}\|^2, u |\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1}|\}} \leq \frac{\|\mathbf{g}_k\|^2}{u |\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1}|}$$

可得

$$-2\beta_k^{\text{XMFR}} \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1} \leq 2\beta_k^{\text{XMFR}} |\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_{k-1}| \leq \frac{2\|\mathbf{g}_k\|^2}{u}$$

从而有

$$\begin{aligned} \|\mathbf{d}_k\|^2 &\leq \|\mathbf{g}_k\|^2 + \frac{\|\mathbf{g}_k\|^4}{\|\mathbf{g}_{k-1}\|^4} \|\mathbf{d}_{k-1}\|^2 + \frac{2\|\mathbf{g}_k\|^2}{u} = \\ &\frac{\|\mathbf{g}_k\|^4}{\|\mathbf{g}_{k-1}\|^4} \|\mathbf{d}_{k-1}\|^2 + \left(1 + \frac{2}{u}\right) \|\mathbf{g}_k\|^2 \end{aligned} \quad (9)$$

(9)式两端都除以 $\|\mathbf{g}_k\|^4$ 得

$$\frac{\|\mathbf{d}_k\|^2}{\|\mathbf{g}_k\|^4} \leq \frac{\|\mathbf{d}_{k-1}\|^2}{\|\mathbf{g}_{k-1}\|^4} + \left(1 + \frac{2}{u}\right) \frac{1}{\|\mathbf{g}_k\|^2}$$

进而有

$$\frac{\|\mathbf{d}_k\|^2}{\|\mathbf{g}_k\|^4} \leq \left(1 + \frac{2}{u}\right) \sum_{j=1}^k \frac{1}{\|\mathbf{g}_j\|^2}$$

因此

$$\frac{\|\mathbf{g}_k\|^4}{\|\mathbf{d}_k\|^2} \geq \frac{u}{u+2} \frac{\gamma}{k}$$

由此可知

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\|\mathbf{g}_k\|^4}{\|\mathbf{d}_k\|^2} \geq \frac{u\gamma}{u+2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \rightarrow +\infty$$

这与(8)式矛盾, 因此结论成立.

### 3 数值实验

为了验证提出的新共轭梯度算法的有效性, 从文献[14]中选取几个测试函数测试, 并与FR方法和MFR方法做比较, 程序代码用Matlab编写. 测试的环境为Matlab7.10.0, Win7.0操作系统, Intel(R) Core(TM) i5-2450M CPU @ 2.50 GHz 2.00 GB内存. 参数的选取为:  $\delta=0.001$ ,  $\sigma=0.1$ ,  $u=1.1$ . 算法的终止条件为:

$$\|\mathbf{g}_k\| \leq 10^{-6}$$

3 种算法的实验结果见表 1, 其中  $Dim$  为测试函数的维数;  $NI$  为迭代次数;  $NF$  为函数值计算的次数;  $NG$  为函数梯度计算的次数.

表 1 3 种算法测试实验结果

测试函数	$Dim$ / 维	FR/次			MFR/次			XMFR/次		
		$NI$	$NF$	$NG$	$NI$	$NF$	$NG$	$NI$	$NF$	$NG$
Almost Perturbed Quadratic	200	215	430	1 078	215	430	1 078	170	340	853
ARWHEAD	100	75	150	378	75	150	378	78	156	393
Diagonal 1	20	42	84	213	42	84	213	41	82	208
Diagonal 2	200	81	162	408	120	240	603	89	178	448
Diagonal 3	20	64	128	323	64	128	323	63	126	318
Diagonal 4	100	156	312	783	156	312	783	101	202	508
Diagonal 4	200	148	296	743	148	296	743	101	202	508
Diagonal 4	1000	157	314	788	157	314	788	103	206	518
Diagonal 7	100	32	64	163	32	64	163	32	64	163
Diagonal 8	100	34	68	173	34	68	173	34	68	173
DQDRTRIC	100	186	372	933	186	372	933	90	180	453
FULL Hessian FH2	50	1118	2 236	5 593	1 103	2 206	5 518	968	1936	4843
Hager	100	31	62	158	31	62	158	36	72	183
HIMMELBG	100	4	8	23	4	8	23	4	8	23
LIARWHD	100	171	342	858	171	342	858	181	362	908
NONDIA	100	280	560	1 403	280	560	1 403	229	458	1148
Quadratic QF1	100	148	296	743	148	296	743	115	230	578
QUARTC	100	4	8	23	4	8	23	4	8	23
Raydan 1	100	13	26	68	13	26	68	13	26	68
Raydan 1	300	93	186	468	93	186	468	93	186	468
Raydan 2	100	5	10	28	5	10	28	5	10	28
Raydan 2	300	6	12	33	6	12	33	6	12	33

从表 1 可知, 本文算法数值性能最好.

#### 参考文献:

- [1] FLETCHER R, REEVES C M. Function Minimization by Conjugate Gradients [J]. The Computer Journal, 1964, 7(2): 149-154.
- [2] POLYAK B T. The Conjugate Gradient Method in Extremal Problems [J]. Ussr Computational Mathematics and Mathematical Physics, 1969, 9(4): 94-112.
- [3] POLAK E, RIBIÈRE G. Note Surla Convergence de Méthodes de Directions Conjuguées. [J]. Rev. française Informat. recherche Opérationnelle, 1968, 16(16): 35-43.
- [4] HESTENES M R, STIEFEL E L. Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems [J]. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 1952, 49(6): 409-436.
- [5] LIU Y, STOREY C. Efficient Generalized Conjugate Gradient Algorithms, Part 1: Theory [J]. Journal of Optimization Theory and Applications, 1991, 69(1): 129-137.
- [6] DAI Y H, YUAN Y. A Nonlinear Conjugate Gradient Method with a Strong Global Convergence Property [J]. Siam Journal on Optimization, 1999, 10(1): 177-182.
- [7] FLETCHER R. Practical Methods of Optimization, Vol I: Unconstrained Optimization [M]. New York: Wiley and Sons, 1987.

- [8] ZOUTENDIJK G. Nonlinear Programming, Computational Methods [J]. Integer and Nonlinear Programming, 1970.
- [9] AL-BAALI M. Descent Property and Global Convergence of the Fletcher-Reeves Method with Inexact Line Search [C]. IMA Journal of Numerical Analysis, 2010: 121–124.
- [10] DAI Y H, YUAN Y. A Nonlinear Conjugate Gradient Method with a Strong Global Convergence Property [J]. Siam Journal on Optimization, 1999, 10(1): 177–182.
- [11] LIU G, HAN J, YIN H. Global Convergence of the Fletcher-Reeves Algorithm with Inexact Line Search [J]. APPL Math J China Univ, 1995, 10(1): 75–82.
- [12] JIANG X Z, JIAN J B. A Sufficient Descent Dai - Yuan Type Nonlinear Conjugate Gradient Method for Unconstrained Optimization Problems [J]. Nonlinear Dynamics, 2013, 72(72): 101–112.
- [13] 戴或虹. 非线性共轭梯度法 [M]. 上海: 上海科学技术出版社, 2000.
- [14] ANDREI N. An Unconstrained Optimization Test Functions Collection [J]. Adv Model Optim, 2008, 10(1): 147–161.

## A Sufficient Descent FR Type Conjugate Gradient Method Under the Wolfe Line Search

WANG Kai-rong, XU Xiao-guang

*College of Mathematics and Statistics, Chongqing University, Chongqing 401331, China*

**Abstract:** In this paper, based on the FR conjugate gradient method, a new conjugate gradient method is proposed. Under the standard Wolfe line search, the sufficient descent property and the global convergence are proved. Finally, preliminary numerical results are reported, which show that the proposed method is valid.

**Key words:** conjugate gradient algorithm; sufficient descent property; global convergence; Wolfe line search

责任编辑 张 枸

