

# Wolfe 线搜索下两种修正 DY 共轭梯度法的全局收敛性\*

周雪琴, 卢琳璋

(贵州师范大学 数学与计算机科学学院, 贵阳 550001)

**摘要:**提出了两个修正的 DY(Dai-Yuan)共轭梯度法(ZDY1 算法和 ZDY2 算法),并证明这两个修正的共轭梯度法公式  $\beta_k^{(1)}$  和  $\beta_k^{(2)}$  在 Wolfe 下都是全局收敛的,其中一个在 Wolfe 线搜索下是下降的,另一个在不依赖于任何线搜索下充分下降。在求解大规模的非线性优化问题的过程中,这些结果对加快算法的收敛速度和增强算法的收敛性提供了理论依据。

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

中图分类号:O224

文献标志码:A

文章编号:1672-6693(2016)03-0006-05

## 1 预备知识

共轭梯度法是求解大规模非线性无约束优化问题的有效方法之一。考虑下面的无约束优化问题<sup>[1]</sup>:

$$\min_{x \in \mathbf{R}^n} f(x), \tag{1}$$

其中  $f(x): \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$  是连续可微的函数,用  $\nabla f(x)$  表示目标函数  $f(x)$  在  $x$  处的梯度,记为  $g(x)$ 。共轭梯度法的一般迭代格式如下:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, k = 1, 2, 3 \dots \tag{2}$$

其中  $\alpha_k$  是某种线搜索产生的迭代步长且  $\alpha_k > 0$ ,  $d_k$  是搜索方向,  $x_{k+1}$  是当前迭代点。搜索方向  $d_k$  由下面的公式确定:

$$d_k = \begin{cases} -g_1, & k=1, \\ -g_k + \beta_k d_{k-1}, & k \geq 2. \end{cases} \tag{3}$$

其中  $\beta_k$  是方向调控参数,  $g_k$  表示  $g(x_k)$ 。

通常根据  $\beta_k$  的选取方式不同,将其分为不同的共轭梯度法。两种比较著名的参数  $\beta_k$  选取方式<sup>[2-3]</sup>分别为:

$$\beta_k^{\text{HS}} = \frac{g_k^T (g_k - g_{k-1})}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})}, \beta_k^{\text{DY}} = \frac{\|g_k\|^2}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})}.$$

其中  $\|\cdot\|$  表示欧式范数。对应的共轭梯度法分别称为 Hestenes-Stiefel(HS)共轭梯度法<sup>[2]</sup>和 Dai-Yuan(DY)共轭梯度法<sup>[3]</sup>。

在以上的两个共轭梯度法公式中,HS 方法具有良好的数值表现,而 DY 方法有较好的收敛性质。近年来许多学者在此基础上进行研究,得出了大量修正的共轭梯度法公式。Huang 和 Dai 两人提出了如下两个新的改进的共轭梯度法参数计算公式<sup>[4-5]</sup>:

$$\beta_k^{\text{MDY}} = \frac{\|g_k\|^2 - \frac{(g_k^T d_{k-1})^2}{\|d_{k-1}\|^2}}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})} \tag{4}$$

和

$$\beta_k^{\text{DHS}} = \frac{\|g_k\|^2 - \frac{\|g_k\| \|g_{k-1}\| |g_k^T g_{k-1}|}{\|g_{k-1}\|^2}}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1}) + \mu |g_k^T d_{k-1}|}. \tag{5}$$

\* 收稿日期:2015-07-30 修回日期:2015-11-10 网络出版时间:2016-04-29 18:34

资助项目:国家自然科学基金(No. 11261012)

作者简介:周雪琴,女,研究方向为数值线性代数,E-mail:960500827@qq.com;通信作者:卢琳璋,教授,E-mail:llz@gznu.edu.cn

网络出版地址:http://www.cnki.net/kcms/detail/50.1165.n.20160429.1834.014.html

Huang 提出的  $\beta_k^{\text{MDY}}$  在 Wolfe 线搜索下满足下降性和全局收敛性,并在精确的线搜索下等价于 DY 共轭梯度法公式。而 Dai 的  $\beta_k^{\text{DHS}}$  中参数  $\mu > 1$ ,当目标函数严格凸,线搜索精确时简化为 DY 方法,并证明了该方法在 Wolfe 下充分下降和全局收敛。

受文献[4-6]的启发,结合(4),(5)式的特点,提出如下两个新的  $\beta_k$  修正共轭梯度法公式:

$$\beta_k^{(1)} = \frac{g_k^T \left( g_k - \frac{g_k^T g_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2} g_{k-1} \right)}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})} \quad (6)$$

和

$$\beta_k^{(2)} = \frac{g_k^T \left( g_k - \frac{\|g_k\|}{\|g_{k-1}\|} g_{k-1} \right)}{\mu d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})}. \quad (7)$$

其中参数  $\mu$  满足  $\mu > 2$ 。易见,若  $\mu = 1$  则(7)式变成文献[6]的  $\beta_k^{\text{DHS}}$  公式。下面将看到这两个新的公式有更好的收敛性(从线搜索准则可以看出)和收敛速度(经过少量实验已证明)。因本文着重于理论研究所以并未给这两种算法关于收敛速度的大规模数值实验<sup>[8]</sup>,这将是以后研究工作的重点。

为了分析算法的全局收敛性,本文采用标准的 Wolfe 非精确线搜索准则求步长  $\alpha_k$ ,它要求  $\alpha_k$  满足下面的两个条件:

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \delta \alpha_k g_k^T d_k, \quad (8)$$

$$g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \sigma g_k^T d_k. \quad (9)$$

这里  $0 < \delta \leq \sigma < 1$ 。下面将称基于(6),(8),(9)式的共轭梯度法为 ZDY1 方法,基于(7),(8),(9)式的共轭梯度法为 ZDY2 方法。

本文下面第 2 部分将给出 ZDY1 方法在 Wolfe 线搜索下的性质及其全局收敛性分析;第 3 部分证明 ZDY2 方法两个重要性质及其全局收敛性。

## 2 ZDY1 方法性质及其全局收敛性

上面基于  $\beta_k^{(1)}$  求解无约束问题(1)的算法可总结为如下算法 1(ZDY1 算法)。

**算法 1** (采用 Wolfe 搜索准则的 ZDY1 算法)

步 0,给定初始值  $x_1 \in \mathbf{R}^n, d_1 = -g_1, k=1$ 。如果  $\|g\| = 0$  则停止;

步 1,计算满足 Wolfe 线搜索(8),(9)式的步长  $\alpha_k$ ;

步 2,计算  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ ,如果  $\|g_{k+1}\| = 0$  则停止;

步 3,用(6),(3)式分别计算  $\beta_k$  和  $d_{k+1}$ ;

步 4,置  $k = k + 1$ ,转步 1。

若迭代序列  $\{x_k\}$  和搜索方向  $d_k$  满足条件:  $g_k^T d_k < 0$ ,则称搜索方向下降。

关于(6)式所对应的新的共轭梯度法 ZDY1 的性质,下面的引理说明算法 1 产生的搜索方向  $d_k$  保持下降方向。

**引理 1** 考虑具有(2),(3)式形式的共轭梯度法,其中  $\beta_k$  由(6)式中的  $\beta_k^{(1)}$  产生,则在 Wolfe 线搜索(8),(9)式下有:

$$g_k^T d_k < 0, \forall k \geq 1. \quad (10)$$

**证明** 记  $\varphi_k$  为向量  $g_{k+1}$  与  $d_k$  的夹角。用数学归纳法证明:显然当  $k=1, g_1^T d_1 = -\|g_1\|^2 < 0$ ;假设对  $\forall k, g_k^T d_k < 0$  成立,则由(9)式知

$$d_k^T (g_{k+1} - g_k) \geq (\sigma - 1) g_k^T d_k > 0, \quad (11)$$

将(3)式两边同乘  $g_{k+1}$ ,由(6),(9)式及  $\varphi_k$  的定义得

$$\begin{aligned} g_{k+1}^T d_{k+1} &= -\|g_{k+1}\|^2 + \beta_{k+1}^{(1)} g_{k+1}^T d_k = -\|g_{k+1}\|^2 + \frac{\|g_{k+1}\|^2 - \frac{(g_{k+1}^T g_k)^2}{\|g_k\|^2}}{d_k^T (g_{k+1} - g_k)} g_{k+1}^T d_k = \\ &= -\|g_{k+1}\|^2 + \frac{\|g_{k+1}\|^2 (1 - \cos^2 \varphi_k)}{d_k^T (g_{k+1} - g_k)} g_{k+1}^T d_k = \frac{-\|g_{k+1}\|^2 d_k^T (g_{k+1} - g_k) + \|g_{k+1}\|^2 (1 - \cos^2 \varphi_k) g_{k+1}^T d_k}{d_k^T (g_{k+1} - g_k)} \end{aligned}$$

$$\frac{\|g_{k+1}\|^2 (g_k^T d_k - \cos^2 \varphi_k g_{k+1}^T d_k)}{d_k^T (g_{k+1} - g_k)} \leq \frac{\|g_{k+1}\|^2 (1 - \sigma \cos^2 \varphi_k) g_k^T d_k}{d_k^T (g_{k+1} - g_k)} < 0.$$

综上,结论得证。

证毕

引理 2 若步长  $\alpha_k$  满足 Wolfe 线搜索条件(8),(9)式,则

$$0 \leq \beta_k^{(1)} \leq \frac{g_{k+1}^T d_{k+1}}{g_k^T d_k}. \tag{12}$$

证明 由(6)式和  $\varphi_k$  的定义可知

$$\beta_{k+1}^{(1)} = \frac{\|g_{k+1}\|^2 - \frac{(g_{k+1}^T g_k)^2}{\|g_k\|^2}}{d_k^T (g_{k+1} - g_k)} = \frac{\|g_{k+1}\|^2 (1 - \cos^2 \varphi_k)}{d_k^T (g_{k+1} - g_k)} \geq 0,$$

所以不等式(12)式左边得证,下证不等式右边也成立。由引理 1 的证明过程有

$$\beta_{k+1}^{(1)} = \frac{\|g_{k+1}\|^2 (1 - \cos^2 \varphi_k)}{d_k^T (g_{k+1} - g_k)} \leq \frac{\|g_{k+1}\|^2 (1 - \sigma \cos^2 \varphi_k)}{d_k^T (g_{k+1} - g_k)} \leq \frac{g_{k+1}^T d_{k+1}}{g_k^T d_k}.$$

综上,结论得证。

证毕

为了说明算法的全局收敛性,给出下面的常规假设:(H1)水平集  $\Omega = \{x \in \mathbf{R}^n \mid f(x) \leq f(x_1)\}$  有下界,  $x_1$  是初始点;(H2)  $f$  在  $\Omega$  的一个邻域  $N$  内是连续可微的,且它的梯度  $g$  是 Lipschitz 连续的,即存在一个常数  $L > 0$  使得  $\|g(x) - g(y)\| \leq L \|x - y\|, \forall x, y \in N$ 。

引理 3 假设(H1)(H2)成立,考虑具有(2),(3)式形式的共轭梯度法,其中  $\beta_k$  由(6)式中的  $\beta_k^{(1)}$  产生,则

$$\sum_{k \geq 1} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < \infty. \tag{13}$$

证明 由(9)式和假设(H1)知  $(\sigma - 1)g_k^T d_k \leq (g_{k+1} - g_k)^T d_k \leq L\alpha_k \|d_k\|^2$ 。于是  $\alpha_k \geq \frac{(\sigma - 1)g_k^T d_k}{L \|d_k\|^2}$ ,由(8)式

$$\text{有 } f_k - f_{k+1} \geq -\delta \alpha_k g_k^T d_k \geq \frac{\delta(1 - \sigma)(g_k^T d_k)^2}{L \|d_k\|^2}.$$

又假设(H1)成立,所以序列  $\{f_k\}$  收敛。将上式对  $k$  从 1 到  $\infty$  进行累加,可得(13)式成立。

综上,结论得证。

证毕

定理 1 假设(H1)(H2)成立,考虑具有(2),(3)式形式的共轭梯度法,其中  $\beta_k$  由(6)式中的  $\beta_k^{(1)}$  产生,则

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0. \tag{14}$$

证明 若假设定理 1 不成立,则存在常数  $\gamma > 0$  使得对任意的  $k$  有  $\|g_k\| \geq \gamma$ 。由(3)式得,  $d_k + g_k = \beta_k d_{k-1}$  两边平方,移项得  $\|d_k\|^2 = \beta_k^2 \|d_{k-1}\|^2 - 2g_k^T d_k - \|g_k\|^2$ 。由(12)式可知:

$$\|d_k\|^2 \leq \frac{(g_k^T d_k)^2}{(g_{k-1}^T d_{k-1})} \|d_{k-1}\|^2 - 2g_k^T d_k - \|g_k\|^2.$$

将上式两端同时除以  $(g_k^T d_k)^2$  有

$$\frac{\|d_k\|^2}{(g_k^T d_k)^2} \leq \frac{\|d_{k-1}\|^2}{(g_{k-1}^T d_{k-1})} - \left( \frac{2}{g_k^T d_k} + \frac{\|g_k\|^2}{(g_k^T d_k)^2} \right) = \frac{\|d_{k-1}\|^2}{(g_{k-1}^T d_{k-1})} - \left( \frac{\|g_k\|}{g_k^T d_k} + \frac{1}{\|g_k\|} \right)^2 + \frac{1}{\|g_k\|^2} \leq \frac{\|d_{k-1}\|^2}{(g_{k-1}^T d_{k-1})} + \frac{1}{\|g_k\|^2}.$$

由(3)式和假设,将上式递推可得

$$\frac{\|d_k\|^2}{(g_k^T d_k)^2} \leq \dots \leq \sum_{i=1}^k \frac{1}{\|g_i\|^2} \leq \frac{k}{\gamma^2}.$$

于是  $\frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \geq \frac{\gamma^2}{k}$ ,因此可得  $\sum_{k \geq 1} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \geq \gamma^2 \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k} = \infty$ 。这与(13)式矛盾,定理得证。

证毕

### 3 ZDY2 方法性质及其全局收敛性

上面基于  $\beta_k^{(2)}$  求解无约束问题(1)的算法可总结为如下算法 2(ZDY2)。

算法 2 (采用 Wolfe 搜索准则的 ZDY2 算法)

步 0,给定初始值  $x_1 \in \mathbf{R}^n, d_1 = -g_1, k=1$ 。如果  $\|g\| = 0$  则停止;

- 步 1, 计算满足 Wolfe 线搜索(8),(9)式的步长  $\alpha_k$ ;  
 步 2, 计算  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ . 如果  $\|g_{k+1}\| = 0$  则停止;  
 步 3, 用(7),(3)式分别计算  $\beta_k$  和  $d_{k+1}$ ;  
 步 4, 置  $k = k + 1$ , 转步 1.

根据定义, 若  $g_k^T d_k \leq -c \|g_k\|^2$ ,  $c$  为常数且大于 0, 则称搜索方向满足充分下降条件. 下面将证明, ZDY2 方法无需任何线搜索条件搜索方向满足充分下降条件.

**引理 4** 考虑具有(2),(3)式形式的共轭梯度法, 其中  $\beta_k$  由(7)式中的  $\beta_k^{(2)}$  产生, 参数  $\mu > 2$ , 则对任意的  $k \geq 1$ , 有

$$g_k^T d_k \leq -\left(1 - \frac{2}{\mu}\right) \|g_k\|^2, \mu > 2. \quad (15)$$

**证明** 用数学归纳法证明. 显然当  $k=1$  时,  $g_1^T d_1 = -\|g_1\|^2 \leq -\left(1 - \frac{2}{\mu}\right) \|g_1\|^2$ . 假设对  $k-1$ ,  $g_{k-1}^T d_{k-1} \leq -\left(1 - \frac{2}{\mu}\right) \|g_{k-1}\|^2$  成立. 下面分两种情况对  $k$  的情形进行讨论:

若  $d_{k-1}^T g_k \neq 0$ , 设  $\theta_k$  为向量  $g_{k-1}$  与  $g_k$  的夹角. 由(7)式及  $\theta_k$  的定义有

$$\beta_{k+1}^{(2)} = \frac{\|g_k\|^2 (1 - \cos \theta_k)}{\mu d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})} \leq \frac{2 \|g_k\|^2}{\mu d_{k-1}^T g_k - \mu d_{k-1}^T g_{k-1}} \leq \frac{2 \|g_k\|^2}{\mu d_{k-1}^T g_k}.$$

进而

$$g_k^T d_k = -\|g_k\|^2 + \beta_k^{(2)} g_k^T d_{k-1} \leq -\|g_k\|^2 + \frac{2 \|g_k\|^2}{\mu d_{k-1}^T g_k} g_k^T d_{k-1} = -\left(1 - \frac{2}{\mu}\right) \|g_k\|^2.$$

若  $d_{k-1}^T g_k = 0$ , 由(3)式可得

$$g_k^T d_k = -\|g_k\|^2 + \beta_k^{(2)} g_k^T d_{k-1} = -\|g_k\|^2 \leq -\left(1 - \frac{2}{\mu}\right) \|g_k\|^2.$$

综上, 结论得证. 证毕

**引理 5** 性质(\*): 考虑具有(2),(3)式迭代格式的方法, 假设

$$0 < \gamma_1 \leq \|g_k\| \leq \gamma_2, \quad (16)$$

如果存在常数  $b > 1, \lambda > 0$ , 使得当  $|\beta_k| \leq b, \|x_k - x_{k-1}\| = \|s_{k-1}\| \leq \lambda$  时,  $|\beta_k| \leq \frac{1}{2b}$  成立, 则称迭代方法具有性质(\*).

**证明** 由(9),(15),(16)式知

$$(g_k - g_{k-1})^T d_{k-1} \geq (1 - \sigma) \left(1 - \frac{2}{\mu}\right) \gamma_1^2. \quad (17)$$

又由(7),(17)式和  $\theta_k$  的定义, 有

$$0 \leq \beta_k^{(2)} = \frac{\|g_k\|^2 (1 - \cos \theta_k)}{\mu d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})} \leq \frac{2 \|g_k\|^2}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})} \leq \frac{2\mu\gamma_2^2}{(1 - \sigma)(\mu - 2)\gamma_1^2}.$$

令  $b = \frac{2\mu\gamma_2^2}{(1 - \sigma)(\mu - 2)\gamma_1^2} > 1, \lambda = \frac{(1 - \sigma)^2 (\mu - 2)^2 \gamma_1^4}{8L\mu^2 \gamma_2^3} > 0$ , 若  $\|s_{k-1}\| \leq \lambda$ , 则

$$\begin{aligned} \beta_k^{(2)} &\leq \frac{g_k^T \left(g_k - \frac{\|g_k\|}{\|g_{k-1}\|} g_{k-1}\right)}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})} \leq \frac{\|g_k\| \left\|g_k - g_{k-1} + g_{k-1} - \frac{\|g_k\|}{\|g_{k-1}\|} g_{k-1}\right\|}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})} \\ &\leq \frac{2 \|g_k\| \|g_k - g_{k-1}\|}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})} \leq \frac{2L\mu\lambda\gamma_2}{(1 - \sigma)(\mu - 2)\gamma_1^2} = \frac{1}{2b}. \end{aligned}$$

综上, 结论得证. 证毕

由引理 4、引理 5 和文献[7]中的定理 3.3.3, 立即可得以下全局收敛定理成立.

**定理 2** 设假设(H1)(H2)成立,  $\{x_k\}$  是由算法 2 产生的序列,  $\alpha_k$  满足 Wolfe 线搜索条件(8),(9)式,  $\beta_k$  由(7)式产生, 则

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0. \quad (18)$$

即 ZDY2 方法是全局收敛的。

#### 参考文献:

- [1] 张静. 无约束非线性规划的共轭梯度法研究综述[J]. 北京联合大学学报:自然科学版, 2008, 22(2): 72-76.  
Zhang J. A summarizer of conjugate gradient methods for solving unconstrained nonlinear programming problem[J]. Journal of Beijing Union University: Natural Science, 2008, 22(2): 72-76.
- [2] Hestenes M R, Stiefel E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems[J]. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 1952, 49(6): 99-147.
- [3] Fletcher R. Practical methods of optimization [J]. Perth Meridien Observations, 1987, 22(5): 296-305.
- [4] 黄海. 非线性无约束优化问题的新共轭梯度法[J]. 河南大学学报:自然科学版, 2014, 44(2): 141-145.  
Huang H. A new conjugate gradient method for nonlinear unconstrained optimization problems[J]. Journal of Henan University: Natural Science, 2014, 44(2): 141-145.
- [5] Dai Z, Wen F. Another improved Wei-Yao-Liu nonlinear conjugate gradient method with sufficient descent property [J]. Applied Mathematics and Computation, 2012, 218(14): 7421-7430.
- [6] Yao S, Wei Z, Huang H. A note about WYL's conjugate gradient method and its applications [J]. Applied Mathematics & Computation, 2007, 191(2): 381-388.
- [7] 戴彧虹, 袁亚湘. 非线性共轭梯度法[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 2000.  
Dai Y H, Yuan Y X. Nonlinear conjugate gradient methods [M]. Shanghai: Shanghai Scientific and Technical Publishers, 2000.
- [8] Moré J J, Garbow B S, Hillstom K E. Testing unconstrained optimization software [J]. Acm Transactions on Mathematical Software, 1981, 7(1): 17-41.

## Operations Research and Cybernetics

### The Global Convergence of Modified DY Conjugate Gradient Methods under the Wolfe Line Search

ZHOU Xueqin, LU Linzhang

(School of Mathematics and Computer Science, Guizhou Normal University, Guiyang 550001, China)

**Abstract:** Two modified DY conjugate gradient methods (Algorithm ZDY1 and Algorithm ZDY2) based on the Dai-Yuan method are proposed for unconstrained optimization problems. We prove the global convergence of the two modified DY conjugate gradient methods under the standard Wolfe line search. One of the two modified methods provides a descent direction with the Wolfe line search, the other keeps a sufficient descent direction without any line search. In the process of solving large-scale nonlinear optimization problems, these results provide theory bases to accelerate the convergence speed and enhance the convergence of the algorithm.

**Key words:** conjugate gradient method; decent property; sufficient decent property; Wolfe line search; global convergence

(责任编辑 黄颖)