

# 无约束优化中的张量方法\*

魏淑云

( 东营职业学院 计算机系, 山东 东营 257091 )

摘要: 对于非线性方程组解的 Jacobian 矩阵是奇异的情况, 将非线性函数在当前迭代点的线性模型扩展成二次模型, 然后将目标函数是二次张量模型的范数优化问题转化成四次张量优化问题, 以使用适当的张量方法求解。

关键词: 张量; 超对称; 四次多项式

中图分类号: O122

文献标识码: A

文章编号: 1672-6693(2006)02-0016-04

## A Tensor Method in Unconstrained Optimization

WEI Shu-yun

( Dept. of Computer, Dongying Vocational College, Dongying Shandong 257091, China )

Abstract: For system of nonlinear equations where the Jacobian matrix at the solution is singular, we expand the linear model at the current point to the quadratic model, then convert the optimization problem whose objective function is a norm of second-order tensor model into a fourth-order tensor model so that we can solve it with the proper tensor method.

Key words: tensor; totally symmetric; quartic polynomial

定义 1<sup>[1]</sup> 称  $T \in \mathbf{R}^{n \times n \times n}$  为三阶张量, 如果, 对于  $\mu, \nu, \omega \in \mathbf{R}^n$ , 有  $T_{\mu\nu\omega} \in \mathbf{R}$ ,  $T\nu\omega \in \mathbf{R}^n$ , 其中

$$T_{\mu\nu\omega} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n T[i][j][k][\mu][\nu][\omega], T\nu\omega[i] = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n T[i][j][k][\nu][\omega],$$

其中  $i = 1, \dots, n$ 。

定义 2<sup>[1]</sup> 称  $V \in \mathbf{R}^{n \times n \times n \times n}$  为四阶张量, 如果, 对于  $\gamma, \mu, \nu, \omega \in \mathbf{R}^n$ , 有  $V_{\gamma\mu\nu\omega} \in \mathbf{R}$ ,  $V\mu\nu\omega \in \mathbf{R}^n$ , 其中

$$V_{\gamma\mu\nu\omega} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n V[i][j][k][l][\gamma][\mu][\nu][\omega], V\mu\nu\omega[i] = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n V[i][j][k][l][\mu][\nu][\omega],$$

其中  $i = 1, \dots, n$ 。

本文假设张量都是超对称的, 即交换其元素的下标, 对应的元素值不变。所讨论的张量方法主要是针对以下问题, 即对于  $F: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ , 找到  $x^* \in \mathbf{R}^n$ , 使得  $F(x^*) = 0$ , 其中  $F(x)$  至少一阶连续可微。

对于上述问题, 传统的牛顿算法<sup>[2]</sup>使得迭代的每一步都基于  $F(x)$  的当前迭代点  $x_c$  的一阶展开式, 即  $M_N(x_c + d) = F(x_c) + F'(x_c)d$ 。当  $F'(x^*)$  非奇异时, 牛顿方法具有较快的收敛速度, 而当  $F'(x^*)$  奇异时, 此时不存在牛顿方向, 所以不能采用牛顿方法。因此, 为了克服牛顿算法在收敛速度方面的缺陷, 文献[2]提出了一种新的方法, 即张量方法。该方法是将牛顿算法在当前迭代点的一次模型扩展成二次模型, 即

$$M_T(x_c + d) = F(x_c) + F'(x_c)d + \frac{1}{2}T_c dd \quad (1)$$

其中  $T_c \in \mathbf{R}^{n \times n \times n}$  为三阶张量。这样, 为求解前面所述问题, 在当前迭代点  $x_c$ , 要找到  $d \in \mathbf{R}^n$  使得  $M_T(x_c + d) = 0$ 。如果  $M_T(x_c + d) = 0$  无解, 则要找到  $d \in \mathbf{R}^n$  使得  $\|M_T(x_c + d)\|_2$  最小。综合以上两种情况, 此问题转化为

$$\min \|M_T(x_c + d)\|_2, \quad (2)$$

\* 收稿日期 2005-04-26 修回日期 2006-02-20

作者简介: 魏淑云(1978-), 女, 山东人, 助教, 硕士, 研究方向为数学规划。

由于(2)式等价于

$$\min M_T(x_c + d)^T M_T(x_c + d), \quad (3)$$

因此本文主要讨论(3)式的解法。

## 1 预备知识

关于(1)式中  $T_c$  的解法,对于  $T_c$ ,主要采用文献[3]中的插值法来确定。首先选择  $p$  个以前的迭代点  $x_{-1} \dots x_{-p}$ ,其中  $p \leq \sqrt{n}$ ,并且  $T_c$  的选取允许模型  $M_T(x_c + d)$  在这些点处插值函数值  $F(x_{-k})$ ,  $k=1, \dots, p$ ,那么  $T_c$  满足

$$F(x_{-k}) = F(x_c) + F'(x_c)s_k + \frac{1}{2}T_c s_k s_k, \quad (4)$$

其中  $s_k = x_{-k} - x_c$ ,  $k=1, \dots, p$ 。通常选择  $x_{-k}$  使得  $\{s_k\}$  线性无关。以下讨论如何选择满足(4)式的  $T_c$ 。

首先将(4)式等价变形为

$$T_c s_k s_k = z_k, \quad k=1, \dots, p \quad (5)$$

其中  $z_k \in \mathbf{R}^n$ ,  $z_k = 2(F(x_{-k}) - F(x_c) - F'(x_c)s_k)$ 。选择满足(6)式的 Frobenius 范数最小的  $T_c$ ,即

$$\begin{aligned} \min \|T_c\|_F \\ \text{s. t. } T_c s_k s_k = z_k, \quad k=1, \dots, p, \end{aligned} \quad (6)$$

其中 Frobenius 范数定义为  $\|T_c\|_F = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n (T_c[i, j, k])^2$ 。

(6)式的解由文献[3]中定理 3.2 确定。

定义 3<sup>[3]</sup> 令  $\mu, \nu, \omega \in \mathbf{R}^n$ , 张量  $T \in \mathbf{R}^{n \times n \times n}$ , 其中  $T[i, j, k] = \mu[i] \cdot \nu[j] \cdot \omega[k]$ ,  $1 \leq i, j, k \leq n$ , 则  $T$  称为秩一张量,并且表示为  $T = \mu\nu\omega$ 。

注意到秩一张量  $\mu\nu\omega$  的第  $i$  个水平面为  $\mu[i] (\nu\omega^T)$ , 则定理 4 表明(6)式的解是  $p$  个水平面对称的秩一张量之和。

定理 1<sup>[3]</sup> 假设  $p \leq n$ ,  $s_k \in \mathbf{R}^n$ ,  $k=1, \dots, p$ , 并且  $\{s_k\}$  线性无关,  $z_k \in \mathbf{R}^n$ ,  $k=1, \dots, p$  定义  $M \in \mathbf{R}^{p \times p}$ , 其中  $M[i, j] = (s_i^T s_j)^2$ ,  $1 \leq i, j \leq p$ ,  $Z \in \mathbf{R}^{n \times p}$ , 并且  $Z$  的第  $k$  列为  $z_k$ ,  $k=1, \dots, p$ 。则  $M$  是正定的, 并且(6)式的解为  $T_c = \sum_{k=1}^p a_k s_k s_k$ , 其中  $a_k$  为  $A \in \mathbf{R}^{n \times p}$  的第  $k$  列,  $A = ZM^{-1}$ 。

根据定理 1 (1)式转化成

$$M_T(x_c + d) = F(x_c) + F'(x_c)d + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \quad (7)$$

## 2 四次多项式的形成

本节主要讨论(3)式的解法。为叙述方便,以下将给出有关四次多项式的假设。设  $f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ , 且  $f(d) = Vd^4 + Td^3 + Pd^2 + pd + p_0$ , 其中  $pd$  代表  $p^T d$ ,  $Pd^2$  代表  $d^T P d$ ,  $V$  和  $T$  分别为四阶张量和三阶张量,  $d^4$  和  $d^3$  分别为  $dddd$  和  $ddd$  的简化。以下结合(7)式,给出(4)式的目标函数的等价变形。

定理 2 存在四阶张量  $V \in \mathbf{R}^{n \times n \times n \times n}$ , 三阶张量  $T \in \mathbf{R}^{n \times n \times n}$ , 二阶对称阵  $P \in \mathbf{R}^{n \times n}$ ,  $n$  维向量  $p \in \mathbf{R}^n$ , 常量  $p_0 \in \mathbf{R}$ , 使得  $M_T(x_c + d)^T M_T(x_c + d) = Vd^4 + Td^3 + Pd^2 + pd + p_0$ , 并且  $Vd^4 \geq 0$ 。

证明 令  $F = F(x_c)$ ,  $J = F'(x_c)$ , 由于

$$\begin{aligned} M_T(x_c + d)^T M_T(x_c + d) &= \left[ F + Jd + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right]^T \left[ F + Jd + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right] = \\ &= \frac{1}{4} \left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right]^T \left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right] + \left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right]^T Jd + \left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right]^T F + d^T J^T Jd + 2F^T Jd + F^T F, \end{aligned}$$

其中

$$\frac{1}{4} \left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right]^T \left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right] = \frac{1}{4} (d^T s_1 s_1^T d \dots d^T s_p s_p^T d) \begin{pmatrix} a_1^T \\ \vdots \\ a_p^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d^T s_1 s_1^T d \\ \vdots \\ d^T s_p s_p^T d \end{pmatrix} =$$

$$\frac{1}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r \left( \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n s_{mi} s_{mj} d_i d_j \right) \left( \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n s_{rk} s_{rl} d_k d_l \right) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n \left( \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mi} s_{mj} s_{rk} s_{rl} \right) d_i d_j d_k d_l,$$

其中  $\frac{1}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mi} s_{mj} s_{rk} s_{rl}$  为任意一项的系数。当  $i \neq j \neq k \neq l$  时,因为在  $i, j, k, l$  确定之后,若不考虑  $i, j, k, l$  的先后次序,则  $d_i d_j d_k d_l$  共有  $P_4^4$  项,故令  $V$  中任意一项

$$\mathcal{V}[i, j, k, l] = \frac{1}{24} \left( \frac{4}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mi} s_{mj} s_{rk} s_{rl} + \frac{4}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mk} s_{ml} s_{ri} s_{rj} + \frac{4}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mk} s_{mi} s_{rl} s_{rj} + \right.$$

$$\left. \frac{4}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mk} s_{mj} s_{ri} s_{rl} + \frac{4}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mi} s_{ml} s_{rk} s_{rj} + \frac{4}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mj} s_{ml} s_{rk} s_{ri} \right);$$

当  $i \neq j \neq k, k = l$  时,同理令  $V$  中任意一项

$$\mathcal{V}[i, j, k, l] = \frac{1}{12} \left( \frac{2}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mi} s_{mj} s_{rl} s_{rk} + \frac{4}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mk} s_{mi} s_{rj} s_{rk} + \right.$$

$$\left. \frac{4}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mk} s_{mj} s_{ri} s_{rk} + \frac{2}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mk} s_{mk} s_{ri} s_{rj} \right);$$

当  $i = j, k = l, i \neq k$  时,同理令  $V$  中任意一项

$$\mathcal{V}[i, j, k, l] = \frac{1}{6} \left( \frac{4}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mk} s_{mi} s_{ri} s_{rk} + \frac{2}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mk} s_{mk} s_{ri} s_{ri} \right);$$

当  $i = j = k, k \neq l$  时,同理令  $V$  中任意一项

$$\mathcal{V}[i, j, k, l] = \frac{1}{4} \left( \frac{2}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mi} s_{mj} s_{rj} s_{rj} + \frac{2}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mj} s_{mj} s_{rj} s_{rl} \right);$$

当  $i = j = k = l$  时,有  $\mathcal{V}[i, j, k, l] = \frac{1}{4} \sum_{m=1}^p \sum_{r=1}^p a_m^T a_r s_{mi} s_{mi} s_{ri} s_{ri}$ 。

则  $\frac{1}{4} \left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right]^T \left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right] = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n \mathcal{V}[i, j, k, l] d_i d_j d_k d_l$ ,  $\mathcal{V} \in \mathbf{R}^{n \times n \times n \times n}$  是超对称的。

令  $J = (b_1, \dots, b_n)$ , 其中  $b_i$  是  $n$  维向量, 则

$$\left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right]^T J d = (d^T s_1 s_1^T d \dots d^T s_p s_p^T d) \begin{pmatrix} a_1^T \\ \vdots \\ a_p^T \end{pmatrix} (b_1, \dots, b_n) d =$$

$$\left( \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n s_{1i} s_{1j} d_i d_j \dots \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n s_{pi} s_{pj} d_i d_j \right) \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^n a_1^T b_k d_k \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^n a_p^T b_k d_k \end{pmatrix} =$$

$$\sum_{m=1}^p \left[ \left( \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n s_{mi} s_{mj} d_i d_j \right) \left( \sum_{k=1}^n a_m^T b_k d_k \right) \right] = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \sum_{m=1}^p \left[ \sum_{l=1}^n (a_m^T b_l) s_{mi} s_{mj} \right] d_i d_j d_k,$$

当  $i \neq j \neq k$  时,令  $\mathcal{T}[i, j, k] = \mathcal{T}[i, k, j] = \mathcal{T}[k, j, i] = \mathcal{T}[k, i, j] = \mathcal{T}[j, k, i] = \mathcal{T}[j, i, k] =$

$$\frac{1}{6} \left[ 2 \sum_{m=1}^p (a_m^T b_k) s_{mi} s_{mj} + 2 \sum_{m=1}^p (a_m^T b_i) s_{mk} s_{mj} + 2 \sum_{m=1}^p (a_m^T b_j) s_{mi} s_{mk} \right];$$

当  $i = j, i \neq k$  时,令  $\mathcal{T}[i, i, k] = \mathcal{T}[i, k, i] = \mathcal{T}[k, i, i] = \frac{1}{3} \left[ \sum_{m=1}^p (a_m^T b_k) s_{mi} s_{mi} + 2 \sum_{m=1}^p (a_m^T b_i) s_{mi} s_{mk} \right];$

当  $i = j = k$  时,令  $\mathcal{T}[i, i, i] = \sum_{m=1}^p (a_m^T b_i) s_{mi} s_{mi}$ 。

因此  $\left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right]^T J d = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \mathcal{T}[i, j, k] d_i d_j d_k$ , 并且  $T \in \mathbf{R}^{n \times n \times n}$  是超对称的。

$$\text{令 } F = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}, \text{ 则 } \left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right]^T F = (d^T s_1 s_1^T d \dots d^T s_p s_p^T d) \begin{pmatrix} a_1^T \\ \vdots \\ a_p^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} =$$

$$\left( \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n s_{1i} s_{1j} d_i d_j \dots \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n s_{pi} s_{pj} d_i d_j \right) \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^n c_k a_{1k} \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^n c_k a_{pk} \end{pmatrix} =$$

$$\sum_{m=1}^p \left( \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n s_{mi} s_{mj} c_k a_{mk} d_i d_j \right) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left( \sum_{k=1}^p \sum_{m=1}^p s_{mi} s_{mj} c_k a_{mk} \right) d_i d_j = d^T N d,$$

则  $M[i, j] = \sum_{k=1}^p \sum_{m=1}^p s_{mi} s_{mj} c_k a_{mk}$ , 容易验证  $M[i, j] = M[j, i]$ , 故  $N \in \mathbb{R}^{n \times n}$  是对称的, 令  $P = N + J^T J$ , 则  $P$  也是对称的。

另外, 令  $p = 2F^T J$ ,  $p_0 = F^T F$ , 则  $M_T(x_c + d)^T M_T(x_c + d) = Vd^4 + Td^3 + Pd^2 + pd + p_0$ 。以下证明  $Vd^4 \geq 0$ 。

$$\text{令 } \begin{pmatrix} d^T s_1 s_1^T d \\ \vdots \\ d^T s_p s_p^T d \end{pmatrix} = x, \text{ 故}$$

$$\frac{1}{4} \left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right]^T \left[ \sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \right] = \frac{1}{4} (d^T s_1 s_1^T d \dots d^T s_p s_p^T d) \begin{pmatrix} a_1^T \\ \vdots \\ a_p^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d^T s_1 s_1^T d \\ \vdots \\ d^T s_p s_p^T d \end{pmatrix} = \quad (8)$$

$$\frac{1}{4} x^T \begin{pmatrix} a_1^T \\ \vdots \\ a_p^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix} x = \frac{1}{4} (x_1 a_1^T + \dots + x_p a_p^T) (x_1 a_1 + \dots + x_p a_p) \geq 0,$$

由(8)式知,  $Vd^4 \geq 0$ 。

证毕

**定理 3** 若存在  $d \neq 0$  使得  $d^T S \neq 0$  其中  $S = (s_1 \dots s_p)$  且  $A = (a_1 \dots a_p)$  列满秩, 则  $M_T(x_c + d)^T M_T(x_c + d)$  中的  $Vd^4 > 0$ 。

**证明** 因为  $d^T S \neq 0$ , 故存在  $1 \leq i \leq p$  使得  $s_i^T d \neq 0$ 。令  $d^T \begin{pmatrix} s_1 s_1^T \\ \vdots \\ s_p s_p^T \end{pmatrix} d = x$ , 则  $x \neq 0$ 。因此  $(a_1 \dots a_p)x \neq 0$ 。

否则  $(a_1 \dots a_p)x = 0$ , 由  $A$  列满秩, 则  $x = 0$ , 与  $x \neq 0$  矛盾, 即  $(a_1 \dots a_p)x \neq 0$ 。又由(8)式知,  $Vd^4 > 0$ 。

证毕

若  $d$  满足  $d^T S \neq 0$ , 并且  $A$  列满秩, 可以利用文献[4]中的方法求解最优步长, 得到下一个迭代点;

若  $d$  满足  $d^T S \neq 0$ , 并且  $A$  不是列满秩的,  $\sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 \neq 0$ , 根据(8)式, 有  $Vd^4 > 0$ , 因此也可以利用文献[4]中的方法求解最优步长, 得到下一个迭代点;

若  $d$  满足  $d^T S \neq 0$ , 并且  $A$  不是列满秩的,  $\sum_{k=1}^p a_k (d^T s_k)^2 = 0$ , 则(7)式将退化成一阶展开式;

若  $d$  满足  $d^T S = 0$ , 则(7)式将退化成一阶展开式。

## 参考文献:

- [1] BOUARICHA A. Tensor Methods for Large Sparse Unconstrained Optimization [J]. SIAM J Optimization, 1997, 7(3): 732-756.
- [2] 袁亚湘, 孙文瑜. 最优化理论与方法[M]. 北京: 科学出版社, 2001.
- [3] SCHNABEL R B, FRANK P D. Tensor Methods for Nonlinear Equations [J]. SIAM J Numer Anal, 1984, 21: 815-843.
- [4] QI L, WAN Z, YANG Y. Globally Descent Directions of a Normal Quartic Polynomial [J]. SIAM J Optim, 2005, 15(1): 275-

