拟牛顿型方法求解大规模问题

程明厚

摘要

随着科学技术的发展和计算机的广泛应用，非线性方程组问题和无约束优化问题越来越多的被提出来。由于实际应用和工程计算中的问题的规模一般都很大，而且传统的数值计算方法对于存储空间的要求非常大。因此随着问题维数的增大，计算量增长地很快，这就可能导致求解过程需要很长的时间。如何高效地存储和求解大规模问题就成为了亟待解决的问题。

通过大量的研究发现，很多实际工程计算问题一般都是有特殊结构的，比如在微分方程的数值求解过程中，通过有限元或者有限差分离散之后得到的非线性系统，它的雅可比矩阵一般都具有某种稀疏结构。因此，如果在算法设计过程中有效利用问题的特殊结构，从而设计出一些高效、精确、鲁棒的计算方法，往往可以取得事半功倍的效果。

在本论文中，我们首先对于无导数信息的大规模非线性方程组的求根问题，提出了一类自适应地非单调算法。由于没有导数信息，我们只能利用函数值的信息以及算法迭代过程中隐含的信息来设计一些有效的算法。Cruz 和 Raydan 提出了一种简单、有效、消耗内存少而且易于实现的方法，称为谱方法。但是该方法用到了一些函数的导数信息。后来经由 Cruz，Matínez 和 Raydan 推广到一般无导数情形。我们对该方法进行了数值分析，研究发现该方法的数值表现依赖于算法中非单调线搜索策略中的一个参数的选取。因此，我们在 Dai 和 Zhang 提出的求解大规模无约束优化问题的自适应非单调线搜索策略的基础上，提出了我们的自适应非单调线搜索策略，进一步与谱方法相结合，提出了求解非线性方程组的自适应非单调谱方法。在数值计算方面，我们的算法取得了不错的数值效果。在理论上，我们也给出了相关的收敛性分析。

其次，我们研究了一类具有稀疏结构的非线性方程组的求根问题。对于非线性方程组的求解，Griewank 提出了双边秩一拟牛顿校正方法。该方法的数值表现要优于 Broyden 秩一校正方法。由于该算法每一步的迭代矩阵都是稠密的，所以不能用来求解大规模问题。研究发现，很多大规模问题都是有特殊结构的，比如用有限元方法或者差分方法离散微分方程时，一般会得到具有特殊稀疏结构的非线性方程组。对于这类特殊的问题，我们从三种不同的角度出发，推导出了不同的稀疏双边秩一拟牛顿校正公式，从而保证迭代矩阵与问题本身的稀疏结构相同。数值结果表明，新的算法比 Griewank 的算法有更好的数值结果，并且新的拟牛顿校正公式采用稀疏格式存储，节省了存储开销和计算开销。我们还对算法的收敛性进行了分析。

最后，针对一类具有特殊结构的无约束优化问题，我们提出了一类有效求解该问题的算法。该类问题的海色矩阵具有一种特殊的稀疏结构，即海色矩阵的非零元位置诱导出来的图是一个弦图。Yamashita 根据问题的特殊结构，并且结合正定矩阵完备的相关理论结果，提出了一类比较有效的算法。我们的方法是对 Yamashita 算法做了进一步的改进。Yamashita 的算法要求满足不精确的拟牛顿关系式，从而利用极大行列式正定矩阵完备得到迭代矩阵的稀疏表示。我们的算法则要求精确满足拟牛顿关系式。因为在计算大规模问题的时候，我们希望尽可能地利用前面迭代得到的二阶信息。通过分析我们知道，新的算法跟 Yamashita 的算法在每步迭代的计算量几乎是一样的。数值实验表明，我们的算法需要更少的迭代步数。我们还证明了新算法的局部和超线性收敛性。

关键词：非线性方程组，无约束优化，牛顿法，拟牛顿方法，谱方法，非单调线搜索，自适应，双边秩一校正，伴随切线秩一校正，正定矩阵完备，弦图.