基于插值模型的无导数优化方法及其应用

丁晓东

摘要

在实际应用中，许多优化问题的导数信息不易求得甚至完全不可得，无导数优化就是用来解决这类问题的。在非线性优化的早期就有大批学者从事这方面的研究，但当时的方法大多简单直观，效率不高，可解规模不大。近十几年来，插值信赖域方法的兴起，在无导数优化领域掀起了新一轮的热潮。这类方法采用插值模型有效地捕捉了函数的曲率信息，从而比早期的方法在计算效率上有明显的优势。但是无导数优化的局限性依然存在，一方面，粗糙的模型导致局部收敛速度不快；另一方面，与有导数优化方法相比，其可解规模依然不大。

本文首先对插值信赖域方法的代表作 UOBYQA 算法的框架进行了描述，并分析了其效率和收敛性的关系。通过与 DFO 算法对比我们发现，UOBYQA 算法中植入了许多朴实的启发式技巧，使它在实际计算中更高效。刻意追求收敛性会降低其计算效率。本文针对无导数优化的局限性，基于 UOBYQA 算法的框架和启发式技巧完成了以下工作：

1. 针对函数值计算耗时的问题，提出了并行求值的 PEUOBYQA 算法。为了加速收敛，它在每次迭代利用并行机求多个函数值。巧妙的构造使它很容易在并行机上实现。理论分析表明，这样的并行扩展能够有效提高模型质量。大量数值实验表明，PEUOBYQA 算法很适合并行，CPU 越多算法收敛得越快。从 CPU 利用效率来看，当 CPU 个数与问题维数相当的时候，并行资源利用得比较充分。

2. 针对大规模界约束优化问题，基于 l_∞-范数信赖域提出了计算复杂度低的 DFBOLA 算法和 DFBODA 算法，它们分别采用线性插值模型和对角二次插值模型来近似目标函数。实验结果表明，与 BOBYQA 算法相比，DFBOLA 算法对非线性程度不高的问题效果更好，缺点是当问题在解附近的非线性程度较高时表现一般，DFBODA 利用简单的对角二次模型，有效地弥补了 DFBOLA 的不足，但是和 BOBYQA 算法相比仍有差距，这激励我们利用凸二次插值模型来构造算法。

3. 针对实际应用中的坏比例函数极小化问题，基于 H-范数信赖域，提出了适时调比的 HNUOBYQA 算法，数值实验表明，它能有效地捕捉到函数在局部的几何构型，从而加速收敛。针对一类带有特殊非线性约束的问题，我们提出了 PFBF 算

法，理论分析与数值实验都表明，它与现有的可以处理非线性约束的无导数优化方法 CONDOR 相比有明显优势。

关键词：无导数优化，多项式插值，信赖域方法，并行计算，最小 F-范数更新，计算复杂度，坏比例函数。