

## 中国数学会 2023 年度华罗庚数学奖获奖人 袁亚湘院士的科学成就

袁亚湘院士主要从事非线性优化的数值方法研究，在信赖域法、序列二次规划方法、拟牛顿法、非光滑优化、共轭梯度法和子空间方法等领域做出了卓越贡献。目前他已经出版了五本书（其中一本由 Springer Verlag 出版），并在 *Mathematical Programming*, *SIAM J. Numer. Anal.*, *SIAM J. Optimization*, *Numer. Math.*, *Math. of Comp.*, *IMA J. Numer. Anal.* 等国际期刊上发表了 170 多篇研究论文。

传统的优化方法是线搜索方法，其每次迭代要先确定方向然后沿该方向寻找好点。上世纪八十年代兴起的信赖域法，其每次迭代则在一个区域内寻找好点，之后二十多年中一直是非线性优化的学科前沿和研究热点，已成为非线性优化的基本方法。

作为世界上信赖域算法领域的领先专家之一，袁亚湘院士因其对非光滑优化的信赖域算法的收敛性、非线性约束优化的信赖域算法构建以及 Celis-Dennis-Tapia 问题和其他信赖域子问题的开创性分析等系统研究而广受认可。其两个非常突出的贡献如下：

**(1) CDT 子问题最优性条件：**优化方法的核心步骤是每次迭代的计算。许多约束优化的信赖域法在每步迭代都需要求解由国际上著名优化专家所提出的 CDT 子问题 (Dennis 曾任国际数学规划协会会长、SIAM 优化杂志创始人和首任主编，Tapia 是美国工程院院士)。

深入理解该问题的理论性质对其有效求解以及构造高效的约束优化信赖域法有关键作用。袁建立了该问题的最优性条件，证明了拉格朗日函数的海色阵最多只有一个负特征值（而利用著名的 Kuhn-Tucker 定理仅能证明海色阵最多只有两个负特征值）。袁还指出了在只有一个约束起积极作用时海色阵也可能有一个负特征值，这是出乎人们意料的（对于单球问题著名的 More-Sorensen 定理能保证海色阵半正定！）。

袁的上述结果为 CDT 子问题最优性理论奠定了基础。袁在证明最优性条件时给出的一个关于矩阵对的引理，即两个二次型的最大值在任意点处非负等价于这两个二次型存在一个半正定的凸组合，后来被欧洲学者研究和推广，并被称为袁氏引理。

法国著名分析和优化专家 Hiriart-Urruty 在 2007 年 *SIAM Review* 杂志上的综述文章中把袁的结果能否推广到多矩阵情形作为第十四个公开问题中的压轴问题提出。

**(2) ST 方法下降估计：** Steihaug-Toint(ST) 方法是在球内求解二次函数极小的截断共轭梯度方法。该方法计算效果非常好，被国际上广泛应用，但是关于该方法所给出的解之好坏却一直没有理论上的估计。

袁通过计算发现该方法对二维问题 ( $N=2$ ) 能使目标函数下降至少达到最优下降的一半，并在 1997 年国际数学规划大会上给出有关的证明并猜测这一结论对一切  $N$  都成立。

由于 ST 方法有广泛应用以及该猜测叙述的简洁，此问题很快引起国际上许多著名学者的关注。美国华盛顿大学 Tseng 教授通过深入研究，证明了 ST 方法所求出解使得目标函数下降至少达到最优下降的三分之一。袁通过引入一种新的分析技巧（定义带参数的共轭梯度路径），以简洁的形式最终证明了该猜想。袁的定理和证明（包括证明定理所给出的一系列引理）全部被 2000 年国际上第一本关于信赖域法的专著（作者 Gould 是 SIAM 优化杂志前主编，Toint 是 ST 方法提出者之一）所收录。该专著中还明确写到“the conjecture made by Yuan”。

对于非线性约束优化，袁还与剑桥大学的鲍尔教授（FRS）合作，第一个提出基于光滑效用函数的信赖域算法，从而避免了之前非线性约束优化方法因为使用非光滑效用函数带来的 Maratos 效应现象（即算法的快速收敛步被截断）发生。

袁亚湘院士在拟牛顿法方面的研究也非常显著。众所周知，牛顿法是优化中最基础的方法之一，但它需要计算二阶导数，无法用于大规模的问题。拟牛顿法将牛顿法中的

二阶导数用一个拟牛顿矩阵代替，通过逐步修正拟牛顿阵，也能像牛顿法那样能达到超线性收敛，同时又避免了计算二阶导数。拟牛顿法与有限元、快速傅立叶变换、小波等并列，被英国皇家学会会员、美国工业与应用数学学会前会长、牛津大学的 Trefethen 教授认为是二十世纪最重要的计算方法之一。

拟牛顿法在实际中已被广泛应用，气象、油田等领域中出现的大规模优化问题国际上都用有限内存拟牛顿法求解。弗莱彻和鲍尔关于拟牛顿法的第一篇文章谷歌引用已达 6687 次。欧美优化界的几位院士都在拟牛顿法方面有深入的研究。研究拟牛顿法的收敛性不仅有重要的理论意义，也有重要的应用价值。

袁在拟牛顿法方面的两个显著贡献如下。

**(1) 一簇拟牛顿法的收敛性:** 著名数学家鲍尔(剑桥大学教授、英国皇家学会会员、美国科学院外籍院士、首届优化界最高奖 Dantzig 奖获得者) 1976 年证明了 BFGS 方法收敛，被认为是拟牛顿法理论最重要的成果。但此后多年没有本质上的进展。

袁与他人合作证明了 Broyden 凸簇(除 DFP 之外)的收敛性。该凸簇的拟牛顿矩阵是 DFP 和 BFGS 的拟牛顿阵的凸组合。袁和合作者证明了对于组合系数  $\theta \in [0, 1)$ ，方法都收敛(鲍尔结果仅对应于  $\theta = 0$ )。该结果在 1988 年国际数学规划大会上被大会报告人舒纳伯(科罗拉多大学波尔德分校前副校长、曾任优化顶级杂志 *Math Program* 副主编)详细介绍，并将其列为八十年代无约束优化的两个主要工作之一。该结果被收录于 Elsevier 出版的《运筹与管理科学手册》第一卷。

**(2) 对 DFP 方法公开问题取得实质性进展:** 美国西北大学诺塞道教授(1998 年国际数学家大会 45 分钟报告人，曾任 *Math Program* 副主编)在 1992 年剑桥大学出版的著名综述论文集 *Acta Numerica* 中正式提出“DFP 法对强凸函数是否收敛?”这一公开问题，这是包括鲍尔在内许多优化界的重要人物一直关心的重要问题，且由于 DFP 是最早的拟牛顿法，这个公开问题就显得更为重要。

袁在某些特殊情形下（梯度范数单调或者步长和有界）证明了 DFP 方法的收敛性，至今仍是关于该公开问题的最好结果。袁还提出了利用拟牛顿阵之平方来分析拟牛顿法收敛性的独特技巧，为解决此难题开辟了一条新路。

袁亚湘院士在共轭梯度法方面也取得国际领先的成果。共轭梯度法是一个常用的著名计算方法，最早为求解线性方程组提出。非线性共轭梯度法在计算上具有内存小、方法简单等优点，将一个  $N$  维问题巧妙地转化成  $N$  个一维问题，从而成为求解超大规模优化问题的主要方法之一。上世纪五六十年代欧美和前苏联著名数学家提出了许多非线性共轭梯度法，最著名的有 Hestenes-Stiefel(HS) 方法，Fletcher-Reeves(FR) 方法和 Polak-Ribière-Polyak(PRP) 方法。在这些著名方法的算法设计和收敛性分析中，往往要求步长由精确线搜索得到或满足强沃尔夫搜索条件。

袁和学生戴彧虹合作提出了新的非线性共轭梯度方法，在理论上，该方法首次在标准沃尔夫线搜索下，即可保证每一步产生下降迭代方向，且可保证全局收敛性；而在计算上，该方法具有良好的自调节性质。这一方法被国际同行广泛称作戴袁方法。著名共轭梯度法专家、华盛顿大学 Nazareth 教授在综述文章中将戴袁方法与 HS、FR 以及 PRP 一起认为是四个主要的 (leading) 非线性共轭梯度法，他还写道：“戴和袁……在非线性共轭梯度法方面取得了好几个重要的进展。……这些结果为缩小前述理论与实验之差异迈进了一大步”。戴袁方法还与著名的 HS、FR 以及 PRP 一起作为主要的非线性共轭梯度法被收录进 Kluwer 出版社的《优化百科全书》。戴袁方法的提出使得共轭梯度法又兴起了新的研究高潮，后续研究者包括著名优化专家、施普林格杂志《计算优化与应用》主编黑格教授。

袁亚湘院士是非线性优化子空间技术的先驱。早在上世纪 90 年代，他就与德国的 Stoer 教授合作开展关于子空间共轭梯度法的研究。从那时起，他提出并系统研究了无约束优化、约束优化、非线性方程组和非线性最小二乘、非光滑优化和多目标优化的子空间信赖域法，挖掘了子空间信赖域法的全空间性质（即子空间中计算信赖域子问题等价于在全空间中的计算），结合子空间的巧妙选取和重新开始等技巧构造

了很多高效的子空间算法。在优化数值方法的构建中，子空间技术变得越来越重要，特别是对于大规模优化问题。

除了信赖域法、拟牛顿法、共轭梯度法和子空间方法等，袁亚湘院士还在许多其他方向有着高屋建瓴的见解，进行了卓越的研究，并培养了大量优秀的学生。目前，他已经指导了 50 名博士生和 18 名硕士生，其中 20 人已在著名大学晋升为教授。下面扼要介绍袁亚湘院士在这些方面的部分优秀成果和培养学生。

**(1) 将信赖域法应用于图像重建和反问题：**证明了用于非线性不适定反问题的信赖域法也是一种正则化方法，并获得了比传统的 Tikhonov 正则化方法更好的结果，这回答了 Engl、Hanke 和 Neubauer 在 1996 年提出的一个重要的未解问题，为应用信赖域优化算法求解反问题奠定了理论基础。他在这个方向上培养的博士生王彦飞进而在地震数据压缩感知与成像反演、全波形反演、页岩微纳米孔隙微结构分析等领域取得了一系列重要应用性成果。王彦飞 2013 年同时获国家杰出青年科学基金和中国青年科技奖。

**(2) 非线性方程组和非线性最小二乘问题：**针对非线性方程组，构造了 Levenberg-Marquardt (LM) 参数的多种选择方法，在弱于非奇异性的局部误差界下，揭示了 LM 方法中 LM 参数对收敛速度的影响规律；首次提出了基于罚函数的信赖域法及信赖域半径趋于零的信赖域法，并建立了相关的收敛性理论；合作出版专著《非线性方程组数值方法》。针对非线性最小二乘问题，提出了子空间方法和基于概率雅可比模型的无导数 LM 方法及相关的数学理论。这些研究成果为材料科学、无线通讯、自动控制等领域的非线性方程组和非线性最小二乘问题提供了全新的计算方法。他在这个方向上培养的博士生范金燕 2017 年获中国青年女科学家奖，2020 年入选国家高层次人才计划。

**(3) 流形优化：**针对 Stiefel 流形优化问题，利用最优性条件的结构，开创性地提出了一系列基于罚函数的新方法，建立了算法的收敛性理论，进而组织开发了 Stiefel 流形优化软件包 STOP（已于 2021 年 10 月 18 日已正式上线）。该软件包内



含乘子校正算法框架、罚函数算法框架、序列邻近点梯度算法框架等多种 Stiefel 流形上的高效优化算法，可以实现具有高可扩展性的并行计算以及处理目标函数含有非光滑项的复杂问题，在电子结构计算、稀疏主成分分析等众多领域有广泛应用。该软件开放源代码供用户使用，获得了广泛的关注和好评。从事该方向研究的刘歆、高斌和肖纳川等是他培养的博士，文再文是其硕士。刘歆 2016 年和 2021 年分别获国家优秀青年基金和国家杰出青年基金。文再文 2013 年获国家优秀青年基金，2020 年入选国家高层次人才计划。高斌 2021 年获中国数学会钟家庆数学奖，2022 年获批国家人才计划青年项目。

**(4) 二次指派问题：**这是一个由 Koopmans (1975 年诺贝尔经济学奖得主) 和 Beckmann 在 1957 年提出的经典非线性组合优化问题。通过引入新的线性化技术，提出了二次指派问题新的混合整数规划模型。该线性化技术后来被美、加、德、意、西班牙等国际同行称为夏袁线性化，相应的松弛线性规划被称为夏袁界。他在这个方向培养的博士生夏勇 2018 年获国家优秀青年基金。

**(5) 无导数优化：**提出了可高效求解大规模无导数优化问题的子空间信赖域方法，这类优化问题的求解在国际上被认为是数值优化的一个公开难题；通过深入分析无导数优化算法的插值模型和信赖域迭代的关系，提出了新的欠定插值模型和效果更好的无导数信赖域算法，从而改进了著名的鲍尔模型和 NEWUOA 算法，后者是无导数优化领域里程碑式的工作；提出并分析了在并行场景具有显著优势的并行无导数算法；对目标函数带有变换的无导数优化问题，首次提出了相应求解方法，这对求解带有噪声和隐私保护需求的优化问题具有重要意义。他在这个方向指导了丁晓东、张在坤、谢鹏程等多位博士生。张在坤 2023 年获批国家人才计划青年项目。谢鹏程曾获中国科学院数学与系统科学研究院华罗庚奖学金、国家奖学金以及全国勤学上进好青年等称号。

**(6) 多项式优化：**对于无界约束集上的多项式优化问题，经典的矩 - 平方和松弛算法通常不具有收敛性。如何构造求解该问题具有收敛性的松弛算法一直是一个难点。利用齐次化技巧，将无界集上的问题巧妙地转化成了一个等价的有界集上的齐



次化问题，提出了求解无界约束集多项式优化的齐次化矩 - 平方和松弛算法。在一个近乎充分且必要的假设下（即经典的最优性条件），证明了该算法的有限收敛性，并且给出了最优性条件在各种情形下的有效刻画。进一步地，结合去齐次化技术，解决了著名优化学者 Lasserre 等提出的关于带分母形式的矩 - 平方和松弛的有限收敛性的一个猜想。从事该方向研究的聂家旺是他培养的硕士生，黄磊是其博士。聂家旺曾获美国国家科学基金会 CAREER Award，2018 年入选国家高层次人才计划，2021 年获冯康科学计算奖。黄磊 2023 年获中国科学院院长奖特别奖。

**(7) 机器学习：**提出了基于带宽的随机优化算法通用步长框架，为机器学习常用的循环步长和重启余弦步长提供了收敛性保证，并为实践中设计灵活高效的步长提供了指导。针对具有挑战性的非凸约束问题，提出了基于随机近似的罚函数方法，这是非凸约束优化的首个具有复杂性理论的随机近似算法。与此同时，将拟牛顿的思想应用于复合随机优化，为探索二阶非光滑随机优化算法提供了理论保证。他在这个方向指导了王晓、王小玉等多位博士生。王晓 2023 年入选国家人才计划青年项目。王小玉获中国科学院院长奖学金。

**(8) 非线性优化 worst-case 复杂性：**对无约束非凸优化的非线性步长控制方法（包含信赖域方法和正则化方法为特例），给出了一阶和二阶最优性的迭代复杂性界的估计，并分别针对凸与强凸目标函数改进了迭代复杂性界的估计；针对复合非光滑优化，第一个提出了全局收敛的无导数信赖域方法并给出了 worst-case 函数值计算复杂性界的估计，该结果也适用于等式约束优化的无导数方法；给出了一般非凸优化的非精确增广拉格朗日方法在罚参数有界和无界情况下近似一阶最优性的外迭代复杂性界的估计，以及线性约束优化非精确增广拉格朗日方法在该情况下的近似复杂性结果。他在这个方向指导的格拉皮利亚·乔瓦尼博士，目前在比利时著名的鲁汶大学担任助理教授。

**(9) 加速算法：**提出了具有二维二次终止性的袁步长，显著改善了柯西梯度法的计算效果；发展与完善了基于微分方程的凸优化加速梯度法分析框架，建立了完整

的收敛速度分析；通过构造新的常微分方程，结合辛离散算法构造出一系列加速格式算法，包括辛 - 增广拉格朗日法和辛 - 交替方向乘子法等，扩展了加速梯度法的应用范围。针对复合凸优化问题，提出了一类无论在理论上还是数值上均有明显加速效果的加速随机镜像下降算法。该方向他正在指导一位博士生陈硕。

袁亚湘院士曾受邀在许多国际大会做邀请报告，包括国际工业与应用数学大会大会报告（爱丁堡，1999 年）、亚洲数学大会特邀报告（马林纳，2000 年）、INFORMS 国际大会主题演讲（香港，2006 年）、国际数学家大会 45 分钟邀请报告（韩国首尔，2014 年）以及国际数学规划大会半大会报告（匹兹堡，2015 年）。

他曾获许多重要奖项，包括 L. Fox 奖（二等奖，1985 年）、冯康科学计算奖（1995 年）、中国国家青年科学家奖（1996 年）、国家自然科学基金（二等奖，2006 年）、中国数学会陈省身数学奖（2011 年）、TWAS 数学奖（2014 年）、中国工业与应用数学学会苏步青奖（2016 年）、何梁何利科技进步奖（2016 年）和美国工业与应用数学学会杰出贡献奖（2017 年）。

袁亚湘于 2011 年当选为美国工业与应用数学学会（SIAM）会士、中国科学院院士，2012 年当选为美国数学会会士，2014 年当选为巴西科学院通讯院士，2015 年当选为第三世界科学院（TWAS）院士。

他为全球数学与运筹学的服务做出了杰出贡献。他曾担任中国运筹学会理事长（2004-2012 年）、亚太运筹学会联合会主席（2009-2012 年）和国际运筹学会联合会副会长（2013-2015 年）。曾担任中国数学会理事长（2016-2019 年）以及国际工业与应用数学学会主席（2019-2023 年）。

关于袁亚湘院士更多的介绍，请见其个人网页：<http://lsec.cc.ac.cn/~yyx/>

戴或虹供稿