数值最优化算法与理论

(第二版)

李董辉
湖南大学数学与计量经济学院

童小娇
长沙理工大学数学系

万中
中南大学数学系

2009 年 9 月 3 日

内容简介

本书较为系统地介绍最优化领域中比较成熟的基本理论与方法．基本理论包括最优化问题解的必要条件和充分条件以及各种算法的收敛性理论．介绍的算法有：无约束问题的最速下降法、 Newton 法、拟 Newton 法、共轭梯度法、信赖域算法和直接法；非线性方程组和最小二乘问题的 Newton 法和拟 Newton 法；约束问题的罚函数法、乘子法、可行方向法、序列二次规划算法和信赖域算法等．还介绍了线性规划的基本理论与单纯形算法以及求解二次规划的有效集法．并简单介绍了求解全局最优化问题的几种常用算法．

作为基本工具，本书在附录中简要介绍了求解线性方程组的常用直接法和迭代法以及 Matlab 初步知识．

本书可作为数学类各专业本科生、研究生以及工程类研究生最优化课程的教材．书中许多章节的内容相对独立．使用者可根据需要灵活取舍．本书也可作为工程技术人员的参考书．

前　言

本书在《数值最优化》的基础上经修改产生. 由于书中涉及算法的理论较多, 故将书名更改为《数值最优化算法与理论》.

《数值最优化》一书自问世以来得到了同行们的大力支持和关心，在此表示感谢.

应出版社的要求，我们对该书进行了修订. 主要增加了如下内容：有关非线性方程组和最小二乘问题的基本数值算法，即第八章；下降算法的线性收敛速度估计；下降共轭梯度算法. 信赖域 — 线性搜索型算法等. 并增加了部分练习题. 此外，我们还对《数值最优化》的部分内容进行了重新编排，如对某些定理的假设条件进行了统一安排. 使读者能更清晰地阅读有关内容.

本书既注重算法的理论基础，同时也突出对算法的直观解释. 算法的收敛性理论介绍安排在各算法例题之后. 便于不同的使用对象对内容进行取舍. 每一个算法之后都配有例题. 每章之后配备了一定数量的习题. 书中的练习题尤其是证明题经过作者精心组织和编写. 这些练习题大多数来源于相关研究论文的基本引理或定理. 另有部分习题为作者自创. 具有一定的难度. 我们将某些算法的全局收敛性定理的证明思路分为若干步骤，以习题的形式出现. 这样做的目的是为了让读者对书中的内容有更好的理解. 同时，也为有兴趣从事最优化算法研究的读者们提供必要的研究工具. 考虑到书中内容有限，我们安排了部分习题，作为对本书内容的补充.

书中部分内容属作者的研究成果. 如求解无约束问题的 Newton 法和拟 Newton 法的改进工作，下降型共轭梯度法以及求解非线性方程组的全局拟 Newton 法等. 这些内容镶嵌在相应的章节中. 内容直观，易于读者接受.

本书各章节间的联系如下. 第一章是准备工作，主要介绍有关最优化的基本概念以及以后各章需用到的数学基础知识，是全书的基础. 其它各章分别介绍求解无约束问题和约束问题的基本理论和各种常用算法. 第二章介绍无约束问题解的最优性条件和求解无约束问题的下降算法的一般步骤及其收敛性质，它是第三、四、五、八章的基础. 第九章介绍约束问题解的最优性条件，它是第十一、十二、十三和十四章的基础. 第六、七、八章相对独立. 最后，在第十五章介绍求解全局最优化问题的几种常用算法. 学习该章时需用到第十章关于线性规划的知识.

由于作者水平有限，书中难免有错误之处. 欢迎广大读者批评指正.

本书的第一章至第五章以及第七章至第十三章由李董辉撰写，第六章和第十四章由童小娇撰写. 第十五章由万中撰写. 附录由曾金平撰写. 感谢作者的学生周伟军、刘群锋、李琼、田博士、李娇等对本书的认真校对工作.

再次感谢同行们的大力支持.

作　者

2009 年 08 月于岳麓山下

目　录

第一章　引言

§1.1　最优化问题概述

设函数 f 是定义在 R^n 上的实值函数．最优化问题的数学模型如下：

$$\min f(x), \qquad x \in D \subseteq R^n \tag{1.1}$$

其中， min 是 minimizing (极小化) 的简称．我们称函数 f 为问题 (1.1) 的目标函数，集合 D 为问题的可行域，可行域中的点为可行点．如果将函数 f 视为生产过程中的某种成本，集合 D 视为生产过程中的各种可采用的方案所构成的集合，则上述最优化问题可通俗地理解为在众多可行的方案中寻求最佳方案．最优化有广泛的应用．如：在生产管理中如何最大限度地降低成本；如何合理下料最节省材料；如何设计运输方案使得运输费用最少等．在实际工作中，最优化还有另一种含义，即使获得的效益最大化．此时，相应的模型为：

$$\max f(x), \qquad x \in D \subseteq R^n, \tag{1.2}$$

其中， max 是 maximizing (极大化) 的简称， f 为某种效益函数．注意到 $\max f = -\min(-f)$. 问题 (1.2) 可转化为形如 (1.1) 的等价问题.

为了对最优化问题有一个直观的了解，我们考察几个具体问题的数学模型.

例 1.1.1 （食谱问题）

设市场上可以买到 n 种不同的食品，每种食品含有 m 种营养成分．设每单位的 j 种食品含第 i 种营养成份的数量为 a_{ij}, $i = 1, \ldots, m$, $j = 1, \ldots, n$. 第 j 种食品的单位价格为 c_j, $j = 1, \ldots, n$. 再设每人每天对第 i 种营养成份的需求量为 b_i, $i = 1, \ldots, m$. 试确定在保证营养需求条件下的经济食谱.

解 设购入第 j 种食品的数目为 x_j, $j = 1, \ldots, n$. 则总开支为：

$$f(x) \triangleq \sum_{j=1}^{n} c_j x_j.$$

所获得的第 i 种营养成分总量为

$$g_i(x) \triangleq \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j.$$

我们的目标是使得函数 f 达到最小．所满足的条件为： $g_i(x) \geq b_i$, $i = 1, \ldots, m$. 此外，购入食品的数目 x_j 不能为负数．因此，我们得问题的如下数学模型：

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \geq b_i, \quad i = 1, \ldots, m, \\ & x_j \geq 0, \qquad j = 1, \ldots, n, \end{aligned}$$

其中， s.t. 是 subject to (受约束于) 的简称.

例 1.1.2 （数据拟合问题）

设有观测数据 (x_k, y_k), $k = 1, \ldots, 5$, 其值由表 *1.1* 给出：

表 1.1　观测数据

k	1	2	3	4	5
x_k	2	4	5	8	9
y_k	2.01	2.98	3.50	5.02	5.47

试用一个简单的函数关系拟合这些数据.

解 将观测数据点在直角坐标系上标出得图 1.1.

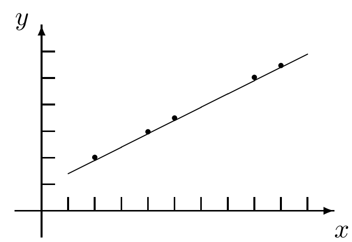

图 1.1　线性拟合问题.

由图 1.1 不难发现， (x_k, y_k) 大致位于某一条直线的附近．因此， x 与 y 之间近似于线性关系．考虑用直线

$$y = ax + b \tag{1.3}$$

对这些点进行拟合，即确定 a, b 的值，使得点 (x_k, y_k), $k = 1, 2, \ldots, 5$, 通过或靠近上面的直线．不难发现，对于上述数据点，不存在 a, b, 使得方程 (1.3) 对所有的 (x_k, y_k), $k = 1, \ldots, 5$ 都满足．因此，我们求 a, b, 使得函数

$$f(a,b) = \sum_{i=1}^{5} |y_i - (ax_i + b)|$$

或

$$f(a,b) = \sum_{i=1}^{5} [y_i - (ax_i + b)]^2$$

达到最小值，即上面的数据拟合问题可通过如下的极小值问题来描述：

$$\min f(a,b), \qquad (a,b)^T \in R^2.$$

在问题 (1.1) 中，若 $D = R^n$, 则问题称为无约束最优化问题 (简称无约束问题), 否则称为约束最优化问题 (简称约束问题). 上面的例 1.1.1 是约束问题而例 1.1.2 是无约束问题.

无约束问题通常记为:

$$\min f(x), \quad x \in R^n. \tag{1.4}$$

约束问题的一般形式为:

$$\begin{cases} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & g_i(x) \geq 0,\ i \in \mathcal{I} = \{1, \ldots, m_1\}, \\ & h_j(x) = 0,\ j \in \mathcal{E} = \{m_1+1, \ldots, m\}, \end{cases} \tag{1.5}$$

其中 $g_i, h_j : R^n \to R$, $i \in \mathcal{I}$, $j \in \mathcal{E}$. 约束问题 (1.5) 中，函数 g_i, $i \in \mathcal{I}$, h_j, $j \in \mathcal{E}$ 称为约束函数. 不等式组 $g_i(x) \geq 0$, $i \in \mathcal{I}$ 和等式组 $h_j(x) = 0$, $j \in \mathcal{E}$ 分别称为不等式约束条件和等式约束条件，统称为约束条件. 满足问题 (1.5) 的约束条件的点所构成的集合称为问题的可行域，记为 D. 即

$$D = \{x \mid g_i(x) \geq 0, i \in \mathcal{I}, h_j(x) = 0, j \in \mathcal{E}\}.$$

最优化的一个主要研究内容就是求问题 (1.1) 的解. 最优化问题的解分为局部最优解和全局 (整体) 最优解. 其定义如下.

定义 1.1.1 *设点 $x^* \in D$. 若存在 x^* 的一个邻域 $U(x^*)$, 使得如下不等式成立*

$$f(x^*) \leq f(x), \qquad \forall x \in D \cap U(x^*), \tag{1.6}$$

则称 x^* 是问题 (1.1) 的一个局部最优解，或简称为问题 (1.1) 的一个最优解. 若不等式 (1.6) 对所有 $x \in D \cap U(x^*) \backslash \{x^*\}$ 成立严格不等式，则称 x^* 是问题 (1.1) 的一个严格局部最优解. 若不等式

$$f(x^*) \leq f(x), \qquad \forall x \in D \tag{1.7}$$

成立，则称 x^* 是问题 (1.1) 的一个全局（整体）最优解. 若不等式 (1.7) 对所有 $x \in D \backslash \{x^*\}$ 成立严格不等式，则称 x^* 是问题 (1.1) 的一个严格全局（整体）最优解.

约束最优化问题中有两类重要的问题. 当目标函数 f 和约束函数 g_i, $i \in \mathcal{I}$, h_j, $j \in \mathcal{E}$ 都是线性函数时，约束问题 (1.5) 称为线性规划. 当目标函数 f 是二次函数且约束函数 g_i, $i \in \mathcal{I}$, h_j, $j \in \mathcal{E}$ 都是线性函数时，约束问题 (1.5) 称为二次规划. 此外，若函数 f 是 R^n 中的凸函数且 D 是凸集时，问题 (1.1) 称为凸规划. 凸集和凸函数的概念我们将在下一节中介绍.

在结束本节之前，我们回顾一下多元函数的 Taylor 展开式以及向量和矩阵范数.

设 $f : R^n \to R$ 二次连续可微. 我们用 $\nabla f(x)$ 和 $\nabla^2 f(x)$ 分别表示 f 在 x 处的梯度向量和 Hessian 矩阵，即

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}, \qquad \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}.$$

对 $x, y \in R^n$, 定义一元函数 $\phi : R \to R$ 如下:

$$\phi(t) = f(y + t(x - y)).$$

经直接计算可得 ϕ 的一阶、二阶导数与 f 的梯度与 Hessian 矩阵之间的如下关系：

$$\phi'(t) = \nabla f(y + t(x-y))^T (x-y), \quad \phi''(t) = (x-y)^T \nabla^2 f(y + t(x-y))(x-y).$$

利用一元函数中值定理，容易导出多元函数的一阶、二阶中值定理.

多元函数的一阶 Taylor 展开式 (一阶中值定理) 如下：

$$\begin{aligned} f(x) &= f(y) + \int_0^1 \nabla f(y + \tau(x-y))^T (x-y) d\tau \\ &= f(y) + \nabla f(y + \theta(x-y))^T (x-y) \\ &= f(y) + \nabla f(y)^T (x-y) + o(\|x-y\|), \end{aligned}$$

其中 $\theta \in (0,1)$.

多元函数的二阶 Taylor 展开式 (二阶中值定理) 如下：

$$\begin{aligned} f(x) &= f(y) + \nabla f(y)^T (x-y) + \frac{1}{2}(x-y)^T \int_0^1 \nabla^2 f(y + \tau(x-y)) d\tau \, (x-y) \\ &= f(y) + \nabla f(y)^T (x-y) + \frac{1}{2}(x-y)^T \nabla^2 f(y + \theta(x-y))(x-y) \\ &= f(y) + \nabla f(y)^T (x-y) + \frac{1}{2}(x-y)^T \nabla^2 f(y)(x-y) + o(\|x-y\|^2), \end{aligned}$$

其中 $\theta \in (0,1)$.

向量值函数有类似的中值定理. 设 $F = (F_1, F_2, \ldots, F_m)^T : R^n \to R^m$ 连续可微. $F'(x)$ 表示 F 在 x 处的 Jacobi 矩阵，即

$$\begin{aligned} F'(x) &= (\nabla F_1(x), \nabla F_2(x), \cdots, \nabla F_m(x))^T \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial F_1(x)}{\partial x_2} & \ldots & \frac{\partial F_1(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial F_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial F_2(x)}{\partial x_2} & \ldots & \frac{\partial F_2(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ldots & \vdots \\ \frac{\partial F_m(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial F_m(x)}{\partial x_2} & \ldots & \frac{\partial F_m(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

则有

$$F(x) = F(y) + \int_0^1 F'(y + \tau(x-y)) d\tau (x-y) = F(y) + F'(y)(x-y) + o(\|x-y\|). \tag{1.8}$$

如无特别说明，本书所用到的向量范数均为 Euclid 范数，即对 $x \in R^n$, $\|x\| = (x^T x)^{1/2}$. 对矩阵 $A \in R^{n\times n}$, $\|A\|$ 表示由向量范数 $\|\cdot\|$ 导出的范数，即

$$\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\| = \max\{\frac{\|Ax\|}{\|x\|} \,\Big|\, x \in R^n, x \neq 0\}.$$

我们以 $\|\cdot\|_F$ 表示矩阵的 Frobenius 范数，即

$$\|A\|_F = [\mathrm{tr}(AA^T)]^{1/2} = [\mathrm{tr}(A^T A)]^{1/2} = (\sum_{i,j=1}^n a_{ij}^2)^{1/2}, \qquad \forall A = (a_{ij}) \in R^{n\times n},$$

其中， $\mathrm{tr}(A)$ 表示矩阵 A 的迹.

§1.2 凸集和凸函数

本节介绍凸集、凸函数的定义及其基本性质.

§1.2.1 凸集

定义 1.2.1 若集合 $S \subseteq R^n$ 满足

$$\alpha x + (1-\alpha)y \in S, \quad \forall x, y \in S,\ \forall \alpha \in [0,1], \tag{1.9}$$

则称 S 是 R^n 中的凸集.

从几何的角度，凸集 S 可解释为：若 S 包含点 x, y, 则它包含了 x 与 y 的连线. 如图 1.2 所示.

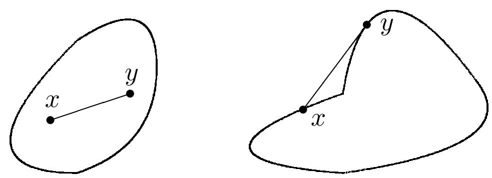

图 1.2 凸集与非凸集.

例 1.2.1 设 $r > 0$, 则 R^n 中的闭球 $S \triangleq \{x \in R^n \mid \|x\| \le r\}$ 是凸集. 设 $a \in R^n$ 是给定的向量, $b \in R$ 是一个常数. 则 R^n 中超平面 $\pi \triangleq \{x \in R^n \mid a^T x = b\}$ 是一个凸集. 设 $b = (b_1, b_2, \ldots, b_m)^T \in R^m$, $a_i \in R^n$, $i = 1, \ldots, m$ 是给定的向量, 则多面体 $\pi_1 \triangleq \{x \in R^n \mid a_i^T x \le b_i,\ i = 1, \ldots, m\}$ 和 $\pi_2 \triangleq \{x \in R^n \mid a_i^T x = b_i,\ x_i \ge 0,\ i = 1, \ldots, m\}$ 都是凸集.

容易证明， R^n 中的凸集有如下性质:

1. 若 $S \subseteq R^n$ 是凸集，则对任意 $\alpha \in R$, 集合

$$\alpha S \triangleq \{\alpha x \mid x \in S\}$$

是 R^n 中的凸集.

2. 若 $S_1, S_2 \subseteq R^n$ 是凸集，则集合 $S_1 \cap S_2$ 、

$$S_1 + S_2 \triangleq \{x = x^{(1)} + x^{(2)} \mid x^{(1)} \in S_1,\ x^{(2)} \in S_2\}$$

和

$$S_1 - S_2 \triangleq \{x = x^{(1)} - x^{(2)} \mid x^{(1)} \in S_1,\ x^{(2)} \in S_2\}$$

都是 R^n 中的凸集.

定义 1.2.2 设 $C \subseteq R^n$. 若

$$\lambda x \in C, \qquad \forall\, \lambda \in R,\ \lambda \geq 0,\ \forall x \in C,$$

则称 C 是 R^n 中的一个锥. 若 C 是锥且为凸集，则称它是一个凸锥.

R^n 中的凸锥是一种重要的凸集. 不难证明，如果在例 1.2.1 中取 $b=0$, 则例中的 π_1 和 π_2 都是凸锥.

定义 1.2.3 设 $S \subseteq R^n$ 是闭凸集， $x \in S$. 若不存在两个不同的点 $x^{(1)}, x^{(2)} \in S$ 以及数 $\alpha \in (0,1)$, 使得 $x = \alpha x^{(1)} + (1-\alpha)x^{(2)}$, 则称 x 是凸集 S 的一个顶点或极点，即 $x \in S$ 是顶点的充要条件是 x 不能表示为 S 中两个不同点的凸组合.

例 1.2.2 凸集

$$S = \{(x_1, x_2)^T \mid x_1 + 2x_2 \leq 8,\ 0 \leq x_1 \leq 4,\ 0 \leq x_2 \leq 3\}$$

中有顶点： $x^{(0)} = (0,0)^T$, $x^{(1)} = (0,3)^T$, $x^{(2)} = (4,0)^T$, $x^{(3)} = (2,3)^T$, $x^{(4)} = (4,2)^T$. 如图 *1.3* 所示.

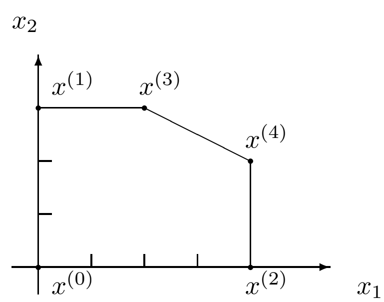

图 1.3 凸集的顶点.

凸集可以有无限个顶点. 如单位圆

$$S = \{x \in R^2 \mid \|x\| \leq 1\}$$

的边界上的任意点都是顶点.

定义 1.2.4 设 $S \subseteq R^n$ 是闭凸集， $d \in R^n$ 为非零向量. 若对任意 $x \in S$, 均有

$$\{x + \alpha d \mid \alpha \geq 0\} \subseteq S,$$

则称 d 是 S 的一个方向. 若 S 的方向 d 不能表示为 S 的其它两个不同方向的正线性组合，则称它为 S 的一个极方向.

由上面的定义易知，有界集合没有方向. 因此，例 1.2.2 中的 S 没有方向.

例 1.2.3 凸集

$$S = \{x \in R^2 \mid x_1 - 4x_2 \le 0,\ 3x_1 - x_2 \ge 0\}$$

有两个极方向

$$d^{(1)} = (4,1)^T \quad 和 \quad d^{(2)} = (1,3)^T.$$

$d^{(1)}$ 和 $d^{(2)}$ 的任何非负线性组合都是 S 的方向．如图 *1.4* 所示．

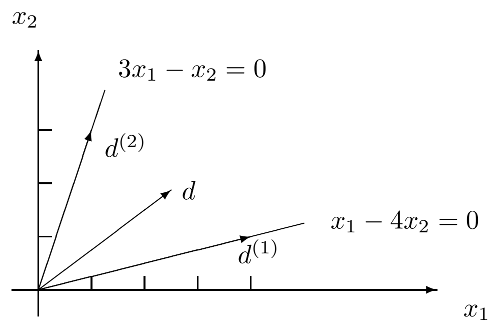

图 1.4 凸集的方向与极方向.

§1.2.2 凸函数

凸函数的定义如下.

定义 1.2.5 设 $S \subseteq R^n$ 是凸集．若函数 $f : R^n \to R$ 满足

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \le \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y), \quad \forall x, y \in S,\ \forall \alpha \in [0,1], \tag{1.10}$$

则称 f 是 S 上的凸函数．若不等式 (1.10) 对所有 $x \ne y$ 和 $\alpha \in (0,1)$ 成立严格不等式，则称 f 是 S 上的严格凸函数．若存在常数 $m > 0$, 使得不等式

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \le \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y) - m\alpha(1-\alpha)\|x-y\|^2 \tag{1.11}$$

对所有 $x, y \in S$ 以及所有 $\alpha \in [0,1]$ 成立，则称 f 是 S 上的一致凸函数 (或强凸函数)．

由定义 1.2.5 不难看出一致凸函数是严格凸函数，严格凸函数是凸函数.

凸函数的几何解释为：函数的图像上的任意两点确定的弦在其图像的上方．如图 1.5 所示.

不难证明， R^n 中的凸函数有如下性质.

1. 设 $f_1, f_2 : R^n \to R$ 是凸函数．则对任意 $\alpha_1 \ge 0$, $\alpha_2 \ge 0$, 函数 $\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2$ 是凸函数.
2. 设 $f_i : R^n \to R$, $i = 1, \ldots, m$ 是凸函数．则对任意 $\alpha_i \ge 0$, $i = 1, \ldots, m$, 函数 $\sum_{i=1}^m \alpha_i f_i$ 是凸函数.

下面的定理给出了凸函数的几个等价性条件.

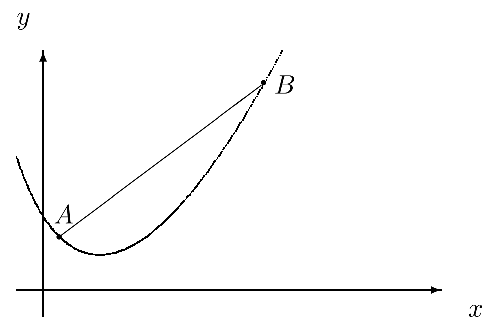

图 1.5 凸函数.

定理 1.2.1 设函数 $f: R^n \to R$ 二次连续可微. 则下面的命题等价.

(1) 函数 f 是凸函数.

(2) 对任意 $x, y \in R^n$, 一元函数 $\phi(t) \triangleq f(tx + (1-t)y)$ 是 $[0,1]$ 上的凸函数.

(3) 对任意的 $x, y \in R^n$, 下面的不等式成立.

$$f(x) - f(y) \geq \nabla f(y)^T (x - y). \tag{1.12}$$

(4) 梯度函数 ∇f 单调，即.

$$(\nabla f(x) - \nabla f(y))^T (x - y) \geq 0, \quad \forall x, y \in R^n. \tag{1.13}$$

(5) 对所有 $x \in R^n$, $\nabla^2 f(x)$ 半正定.

证明 先证明命题 (1) 与命题 (2) 等价. 设命题 (1) 成立. 对给定的 $x, y \in R^n$, $t_1, t_2 \in [0,1]$, $\alpha \in [0,1]$, 有

$$\begin{aligned}
\phi(\alpha t_1 + (1-\alpha)t_2) &= f((\alpha t_1 + (1-\alpha)t_2)x + (1 - (\alpha t_1 + (1-\alpha)t_2))y) \\
&= f(\alpha(t_1 x + (1-t_1)y) + (1-\alpha)(t_2 x + (1-t_2)y)) \\
&\leq \alpha\phi(t_1) + (1-\alpha)\phi(t_2),
\end{aligned}$$

即命题 (2) 成立.

反之，设命题 (2) 成立. 对任意 $x, y \in R^n$ 及 $\alpha \in [0,1]$, 有

$$\begin{aligned}
f(\alpha x + (1-\alpha)y) &= \phi(\alpha) = \phi(\alpha \cdot 1 + (1-\alpha) \cdot 0) \\
&\leq \alpha\phi(1) + (1-\alpha)\phi(0) = \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y),
\end{aligned}$$

即命题 (1) 成立.

下面按如下顺序证明命题 (1),(3),(4),(5) 等价：命题 (1)⇒ 命题 (3)⇒ 命题 (4) ⇒ 命题 (5)⇒ 命题 (1).

命题 (1)⇒ 命题 (3). 对任意 $x, y \in R^n$ 及 $\alpha \in (0,1]$, 由 f 的凸性，有

$$f(\alpha x+(1-\alpha)y) \le \alpha f(x)+(1-\alpha)f(y).$$

由此可得

$$f(x)-f(y) \ge \frac{f(y+\alpha(x-y))-f(y)}{\alpha}.$$

上式对 $\alpha \to 0^+$ 取极限即得 (1.12).

命题 (3)⇒ 命题 (4). 对任意 $x, y \in R^n$, 由命题 (3) 有

$$f(x)-f(y) \ge \nabla f(y)^T(x-y), \qquad f(y)-f(x) \ge \nabla f(x)^T(y-x).$$

上面的两式相加即得 (1.13).

命题 (4)⇒ 命题 (5). 对任意 $x, p \in R^n$ 及 $t \in (0,1)$, 令 $y = x+tp$. 由 (1.13) 得

$$t(\nabla f(x+tp)-\nabla f(x))^T p \ge 0.$$

上式两端同除以 t^2 后再对 $t \to 0^+$ 取极限得 $p^T \nabla^2 f(x) p \ge 0$, 即命题 (5) 成立.

命题 (5)⇒ 命题 (1). 对任意 $x, y \in R^n$ 及 $\alpha \in [0,1]$, 令 $z = \alpha x+(1-\alpha)y$. 由二阶 Taylor 展开并利用命题 (5) 可得

$$f(x) \ge f(z)+\nabla f(z)^T(x-z),$$

$$f(y) \ge f(z)+\nabla f(z)^T(y-z).$$

上面两式分别乘以 α 和 $1-\alpha$ 后相加，注意到 z 的定义即得命题 (1). **证毕**

下面的定理给出了凸函数的另一个等价性命题.

定理 1.2.2 设 $S \subseteq R^n$ 是凸集. 则 $f: S \to R$ 是凸函数的充要条件是 f 的上图象

$$P(f) \stackrel{\triangle}{=} \{(x,\alpha) \mid x \in S,\ \alpha \in R,\ f(x) \le \alpha\}$$

是 R^{n+1} 中的凸集.

证明 必要性. 设 $f: S \to R$ 是凸函数. 对任意 $(x^{(1)},\alpha_1),(x^{(2)},\alpha_2) \in P(f)$, 由定义得

$$f(x^{(1)}) \le \alpha_1, \qquad f(x^{(2)}) \le \alpha_2. \tag{1.14}$$

设 $t \in [0,1]$ 任意. 由 f 的凸性得

$$f(tx^{(1)}+(1-t)x^{(2)}) \le tf(x^{(1)})+(1-t)f(x^{(2)}) \le t\alpha_1+(1-t)\alpha_2,$$

即 $t(x^{(1)},\alpha_1)+(1-t)(x^{(2)},\alpha_2) \in P(f)$. 因此， $P(f)$ 是 R^{n+1} 中的凸集.

充分性. 设 $P(f)$ 是凸集. 对任意 $x^{(1)}, x^{(2)} \in S$ 及 $t \in [0,1]$, 由于 $(x^{(1)}, f(x^{(1)})) \in P(f)$, $(x^{(2)}, f(x^{(2)})) \in P(f)$, 故有

$$(tx^{(1)}+(1-t)x^{(2)}, tf(x^{(1)})+(1-t)f(x^{(2)})) = t(x^{(1)}, f(x^{(1)}))+(1-t)(x^{(2)}, f(x^{(2)})) \in P(f).$$

从而,

$$f(tx^{(1)} + (1-t)x^{(2)}) \le tf(x^{(1)}) + (1-t)f(x^{(2)}),$$

即 f 是 S 上的凸函数. **证毕**

定义 1.2.6 若函数 $-f$ 是凸函数，则称函数 f 是凹函数.

利用定理 1.2.1 和 1.2.2, 不难建立凹函数相应的等价性定理.

定理 1.2.3 设函数 $f: R^n \to R$ 二次连续可微. 则下面的命题等价.

(1) 函数 f 是凹函数.

(2) 对任意 $x, y \in R^n$, 一元函数 $\phi(t) \triangleq f(tx + (1-t)y)$ 是 $[0,1]$ 上的凹函数.

(3) 下面的不等式成立.

$$f(x) - f(y) \le \nabla f(y)^T (x-y), \quad \forall x, y \in R^n.$$

(4) 下面的不等式成立：

$$(\nabla f(x) - \nabla f(y))^T (x-y) \le 0, \quad \forall x, y \in R^n.$$

(5) 对所有 $x \in R^n$, $\nabla^2 f(x)$ 半负定.

(6) 集合

$$\{(x, \alpha) \mid x \in S,\ \alpha \in R,\ f(x) \ge \alpha\}$$

是 R^{n+1} 中的凸集.

定理 1.2.4 设 $S \subseteq R^n$ 是凸集. 函数 $f: S \to R$ 是凸函数. 则对任何 $\alpha \in R$, 水平集

$$S_\alpha \triangleq \{x \in S \mid f(x) \le \alpha\}$$

是 R^n 中的凸集.

证明 对任意 $x^{(1)}, x^{(2)} \in S_\alpha$ 及 $\lambda \in [0,1]$, 由凸函数的定义可得

$$f(\lambda x^{(1)} + (1-\lambda)x^{(2)}) \le \lambda f(x^{(1)}) + (1-\lambda) f(x^{(2)}) \le \alpha,$$

即 $\lambda x^{(1)} + (1-\lambda)x^{(2)} \in S_\alpha$. 因此， S_α 是凸集. **证毕**

下面的定理给出了判定函数为严格凸函数的一个充分条件.

定理 1.2.5 设函数 $f: R^n \to R$ 二次连续可微. 若下面的条件之一成立，则 f 是严格凸函数.

(1) 下面的不等式成立：

$$f(x) - f(y) > \nabla f(y)^T (x-y), \quad \forall x \ne y \in R^n.$$

(2) 对任何 x, 矩阵 $\nabla^2 f(x)$ 正定.

证明 条件 (2) 是条件 (1) 的特殊情形. 事实上，若 $\nabla^2 f(x)$ 正定，则对任意的 $x, y \in R^n$, $x \neq y$, 由二阶 Taylor 展开得

$$f(x)-f(y)=\nabla f(y)^T(x-y)+\frac{1}{2}(x-y)^T\nabla^2 f(y+\theta(x-y))(x-y)>\nabla f(y)^T(x-y),$$

其中， $\theta \in (0,1)$. 因此，条件 (1) 成立. 下面证明若条件 (1) 成立，则函数 f 是严格凸函数.

对任意 $x, y \in R^n$, $x \neq y$ 及 $\alpha \in (0,1)$, 令 $z=\alpha x+(1-\alpha)y$. 由条件 (1) 得

$$f(x)>f(z)+\nabla f(z)^T(x-z),$$

$$f(y)>f(z)+\nabla f(z)^T(y-z).$$

上面的第一式乘以 α, 第二式乘以 $1-\alpha$ 后相加得

$$\begin{aligned}\alpha f(x)+(1-\alpha)f(y) &> f(z)+\alpha\nabla f(z)^T(x-z)+(1-\alpha)\nabla f(z)^T(y-z)\\ &= f(z)+\nabla f(z)^T[\alpha(x-z)+(1-\alpha)(y-z)]\\ &= f(z)=f(\alpha x+(1-\alpha)y),\end{aligned}$$

即 f 是严格凸函数. **证毕**

下面的定理给出了一致凸函数的一个等价性条件.

定理 1.2.6 设函数 $f: R^n \to R$ 二次连续可微. 则它是一致凸函数的充要条件是其 *Hessian* 阵 $\nabla^2 f(x)$ 一致正定，即存在常数 $m>0$ 使得

$$p^T\nabla^2 f(x)p \geq m\|p\|^2, \qquad \forall p \in R^n.$$

证明 对任意 $x, y \in R^n$ 及 $\alpha \in [0,1]$, 令 $z_\alpha=\alpha x+(1-\alpha)y$. 由 Taylor 展开知，存在 $\theta_1, \theta_2 \in (0,1)$, 使得

$$\begin{aligned}f(x) &= f(z_\alpha)+\nabla f(z_\alpha)^T(x-z_\alpha)+\frac{1}{2}(x-z_\alpha)^T\nabla^2 f(\xi_\alpha^{(1)})(x-z_\alpha),\\ f(y) &= f(z_\alpha)+\nabla f(z_\alpha)^T(y-z_\alpha)+\frac{1}{2}(y-z_\alpha)^T\nabla^2 f(\xi_\alpha^{(2)})(y-z_\alpha),\end{aligned}$$

其中， $\xi_\alpha^{(1)}=z_\alpha+\theta_1(x-z_\alpha)$, $\xi_\alpha^{(2)}=z_\alpha+\theta_2(y-z_\alpha)$. 上面的第一式乘以 α, 第二式乘以 $1-\alpha$ 后相加，并利用 z_α 的定义得

$$\alpha f(x)+(1-\alpha)f(y)=f(z_\alpha)+\frac{1}{2}\alpha(1-\alpha)(x-y)^T[(1-\alpha)\nabla^2 f(\xi_\alpha^{(1)})+\alpha\nabla^2 f(\xi_\alpha^{(2)})](x-y). \tag{1.15}$$

必要性. 设 f 是一致凸函数. 对任给 $p \in R^n$, $t>0$, 取 $y=x+tp$, 由 (1.11) 知，下面的不等式对所有的 $p \in R^n$ 以及所有的 $\alpha \in [0,1]$, $t>0$ 均成立.

$$\frac{1}{2}p^T[(1-\alpha)\nabla^2 f(\xi_\alpha^{(1)})+\alpha\nabla^2 f(\xi_\alpha^{(2)})]p \geq m\|p\|^2.$$

令 $t \to 0^+$ 取极限，注意到,

$$\xi_\alpha^{(1)}=z_\alpha+\theta_1(x-z_\alpha)=y+\alpha(x-y)+(1-\alpha)\theta_1(x-y)=x+tp-t\alpha p-t(1-\alpha)\theta_1 p \to x,$$

$$\xi_\alpha^{(2)} = z_\alpha + \theta_2(y - z_\alpha) = y + \alpha(x-y) - \alpha\theta_2(x-y) = x + tp - t\alpha p + t\alpha\theta_2 p \to x,$$

即得 $\nabla^2 f(x)$ 的一致正定性.

充分性. 设 $\nabla^2 f(x)$ 一致正定，即存在常数 $m > 0$ 使得 $p^T\nabla^2 f(x)p \ge m\|p\|^2, \forall x, p \in R^n$. 由 (1.15) 可得

$$\alpha f(x) + (1-\alpha)f(y) \ge f(z_\alpha) + \frac{1}{2}m\alpha(1-\alpha)\|x-y\|^2,$$

即 f 是一致凸函数. **证毕**

类似于定理 1.2.1, 一致凸函数还有如下等价性条件 (证明留作练习).

定理 1.2.7 *设 $f: R^n \to R$ 连续可微. 则下列命题等价.*

(1) *函数 f 是一致凸函数.*

(2) *存在常数 $m > 0$ 使得*

$$f(x) - f(y) \ge \nabla f(y)^T(x-y) + m\|x-y\|^2.$$

(3) *存在常数 $\bar{m} > 0$ 使得*

$$[\nabla f(x) - \nabla f(y)]^T(x-y) \ge \bar{m}\|x-y\|^2.$$

例 1.2.4 *设矩阵 $Q \in R^{n\times n}$, 向量 $q \in R^n$, 实数 $c \in R$. 则二次函数*

$$f(x) = \frac{1}{2}x^TQx + q^Tx + c$$

是凸函数的充要条件是矩阵 Q 半正定. f 是一致凸函数或严格凸函数的充要条件是矩阵 Q 正定.

证明 由计算直接得 $\nabla f(x) = \frac{1}{2}(Q+Q^T)x + q$, $\nabla^2 f(x) = \frac{1}{2}(Q+Q^T)$. 注意到矩阵 Q 的半正定性、正定性等价于矩阵 $Q+Q^T$ 的半正定性、正定性. 由定理 1.2.1 和 1.2.6 知 f 是凸函数的充要条件是 Q 半正定， f 是一致凸函数的充要条件是 Q 正定. 由定理 1.2.5 知当 Q 正定时， f 严格凸. 结论 “当 f 是严格凸函数时， Q 必正定” 的证明留作练习. **证毕**

例 1.2.5 *设 $f: R^n \to R$ 是凸函数， $g_i: R^n \to R$, $i \in \mathcal{I} = \{1, \ldots, m_1\}$ 都是凹函数， $h_j: R^n \to R$, $j \in \mathcal{E} = \{m_1+1, \ldots, m\}$ 都是线性函数. 则下面的约束问题*

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & g_i(x) \ge 0, \quad i \in \mathcal{I}, \\ & h_j(x) = 0, \quad j \in \mathcal{E} \end{array}$$

是凸规划问题.

证明 记问题的可行域为

$$D = \{x \mid g_i(x) \ge 0,\ i \in \mathcal{I},\ h_j(x) = 0,\ j \in \mathcal{E}\}.$$

只需证明 D 是凸集. 事实上，对任意的 $x^{(1)}, x^{(2)} \in D$ 及 $t \in [0,1]$, 由凹函数的定义，我们有

$$g_i(tx^{(1)} + (1-t)x^{(2)}) \ge tg_i(x^{(1)}) + (1-t)g_i(x^{(2)}) \ge 0, \quad i \in \mathcal{I}.$$

又由线性函数的性质，有

$$h_j(tx^{(1)} + (1-t)x^{(2)}) = th_j(x^{(1)}) + (1-t)h_j(x^{(2)}) = 0, \quad j \in \mathcal{E}.$$

因此，

$$tx^{(1)} + (1-t)x^{(2)} \in D,$$

即 D 是凸集. **证毕**

在结束本章之前，我们引入几个关于收敛性的概念.

所谓算法的局部收敛性指的是：存在点 x^* 的邻域 $U(x^*)$, 使得当初始点 $x^{(0)} \in U(x^*)$ 时，算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^*.

算法的全局收敛性指的是: 当初始点 $x^{(0)}$ 是某个较大的集合中的任意点时, 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于某个点 x^*.

定义 1.2.7 设序列 $\{x^{(k)}\} \subset R^n$ 收敛于点 x^*.

(1) 若存在常数 $\rho \in (0,1)$ 使得当 k 充分大时，

$$\|x^{(k+1)} - x^*\| \le \rho \|x^{(k)} - x^*\|,$$

则称 $\{x^{(k)}\}$ 线性收敛于 x^*, 或称 $\{x^{(k)}\}$ 的收敛速度是线性的.

(2) 若

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x^{(k+1)} - x^*\|}{\|x^{(k)} - x^*\|} = 0,$$

则称 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 x^*, 或称 $\{x^{(k)}\}$ 的收敛速度是超线性的.

(3) 若存在常数 $M > 0$ 使得当 k 充分大时，

$$\|x^{(k+1)} - x^*\| \le M \|x^{(k)} - x^*\|^2,$$

则称 $\{x^{(k)}\}$ 二次收敛于 x^*, 或称 $\{x^{(k)}\}$ 的收敛速度是二次的.

显然，二次收敛必超线性收敛，超线性收敛必线性收敛.

下面的公式 (1.16) 称为 Sherman-Morrison 公式. 该公式可直接验证 (证明留作练习).

定理 1.2.8 设矩阵 $A \in R^{n\times n}$ 非奇异. 向量 $u, v \in R^n$ 满足

$$1 + v^T A^{-1} u \ne 0.$$

则矩阵 $A + uv^T$ 非奇异，且其逆由下式给出

$$(A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^T A^{-1}}{1 + v^T A^{-1} u}. \tag{1.16}$$

我们再给出如下引理.

引理 1.2.1 设 $I\in R^{n\times n}$ 表示单位矩阵，则对任何 $u_i,v_i\in R^n$, $i=1,2$,

$$\det(I+u_1v_1^T)=1+u_1^Tv_1, \tag{1.17}$$

$$\det(I+u_1v_1^T+u_2v_2^T)=(1+u_1^Tv_1)(1+u_2^Tv_2)-(u_1^Tv_2)(v_1^Tu_2). \tag{1.18}$$

证明 令 $A=I+u_1v_1^T$. 则 A 有 $n-1$ 个特征值为 1, 而另一个特征值为 $1+u_1^Tv_1$. 因此，利用矩阵的行列式的值等于其特征值的乘积这一性质即得 (1.17).

若 $1+u_1^Tv_1\neq 0$, 由定理 1.2.8 知矩阵 $I+u_1v_1^T$ 非奇异. 由公式 (1.17) 可得

$$\begin{aligned}\det(I+u_1^Tv_1+u_2v_2^T) &= \det(I+u_1v_1^T)\cdot\det[I+(I+u_1v_1^T)^{-1}u_2v_2^T]\\ &= (1+u_1^Tv_1)[1+v_2^T(I+u_1v_1^T)^{-1}u_2]\\ &= (1+u_1^Tv_1)\Big[1+v_2^T(I-\frac{u_1v_1^T}{1+u_1^Tv_1})u_2\Big]\\ &= (1+u_1^Tv_1)(1+u_2^Tv_2)-(v_2^Tu_1)(v_1^Tu_2),\end{aligned}$$

即 (1.18) 成立. 若 $1+u_1^Tv_1=0$, 不难构造 $\{u_1^{(k)}\}\to u_1$, $\{v_1^{(k)}\}\to v_1$, 使得 $1+u_1^{(k)}v_1^{(k)}\neq 0$. 由上面的证明，有

$$\det(I+u_1^{(k)}v_1^{(k)T}+u_2v_2^T)=(1+u_1^{(k)T}v_1^{(k)})(1+u_2^Tv_2)-(u_1^{(k)T}v_2)(v_1^{(k)T}u_2).$$

两端取极限即得 (1.18). **证毕**

习题 1

1. 设某工厂有 m 种资源 A_i, $i=1,\dots,m$, 数量分别为 b_i, $i=1,\dots,m$. 现用这些资源生产 n 种产品 B_j, $j=1,\dots,n$. 假设每生产一个单位 B_j 产品需要消耗资源 A_i 的数量为 a_{ij}. 并设每生产一单位产品 B_j 可获利 c_j. 试建立数学模型，使得总利益最大化.

2. 设 $f:R^n\to R$ 二次连续可微.

   (i) 令 $\bar f(z)=f(Az+b)$, 其中, $A\in R^{n\times n}$, $b\in R^n$. 证明：

   $$\nabla\bar f(z)=A^T\nabla f(Az+b),\qquad \nabla^2\bar f(z)=A^T\nabla^2 f(Az+b)A.$$

   (ii) 对给定的 $x,p\in R^n$, 定义一元函数 $\phi=f(x+tp)$. 证明：

   $$\phi'(x)=\nabla f(x+tp)^Tp,\qquad \phi''(x)=p^T\nabla^2 f(x+tp)p.$$

3. 计算下面函数的梯度与 Hessian 阵：

   (i)

   $$f(x)=10(x_2-x_1^2)^2-(1-x_1)^2.$$

   (ii)

   $$f(x)=(g_1(x),g_2(x))\begin{pmatrix}2&1\\1&4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}g_1(x)\\g_2(x)\end{pmatrix},$$

   其中,

   $$g_1(x)=(x_1-x_2)^2-x_1^2+x_2^2,\quad g_2(x)=x_1+x_2.$$

4. 判断下面的集合是否是凸集：

$$S_1 = \{x = (x_1, x_2)^T \mid \|x\| \le 1, x_1 \ge 0\}, \quad S_2 = \{x = (x_1, x_2)^T \mid |x_1| + |x_2| \le 1\},$$

$$S_3 = \{(x_1, x_2, x_3)^T \mid \|x\| \le 1,\ x_1 + x_2 + 2x_3 \le 1.5\}, \quad S_4 = \{(x_1, x_2, x_3)^T \mid \|x\| \ge 1\}.$$

5. 证明： $S \subset R^n$ 为凸锥的充要条件是：对任意 $k(k \ge 2$ 是整数) 个 $x^{(i)} \in S$, $i = 1, \ldots, k$, 以及 $\alpha_i \in R$, $\alpha_i \ge 0$, $i = 1, \ldots, k$, 均有

$$\sum_{i=1}^{k} \alpha_i x^{(i)} \in S.$$

6. 设 $D \subset R^n$ 是闭凸集， $x \notin D$.

   (i) 证明： x 到 D 的投影存在. 即存在 $\bar{x} \in D$ 使得

   $$\|x - \bar{x}\| \le \|x - y\|, \qquad \forall y \in D.$$

   (ii) 证明： $\bar{x}$ 是 x 到 D 的投影的充要条件是

   $$(x - \bar{x})^T (y - \bar{x}) \le 0, \qquad \forall y \in D$$

   (iii) 证明： x 到 D 的投影惟一.

7. 证明凸集的严格分离定理.

   (i) 设 $D \subset R^n$ 是非空闭凸集. $\bar{x} \notin D$. 则存在超平面严格分离 x 和 D. 即存在 $a \in R^n$, $b \in R$ 使得

   $$a^T x - b \le 0 < a^T \bar{x} - b, \qquad \forall x \in D.$$

   (ii) 设 D_1 和 D_2 是 R^n 中两个不相交的闭凸集. 则存在超平面严格分离 D_1 和 D_2. 即存在 $a \in R^n$ 使得

   $$a^T x \le 0 < a^T y, \qquad \forall x \in D_1, \forall y \in D_2.$$

8. 证明凸集的分离定理.

   (i) 设 $D \subset R^n$ 是非空凸集， $\bar{x} \notin D$. 则存在超平面分离 x 和 D. 即存在 $a \in R^n$, $b \in R$ 使得

   $$a^T x - b \le 0 \le a^T \bar{x} - b, \qquad \forall x \in \bar{D},$$

   其中 $\bar{D}$ 表示 D 的闭包.

   (ii) 设 D_1 和 D_2 是 R^n 中两个不相交的凸集. 则存在超平面分离 D_1 和 D_2. 即存在 $a \in R^n$ 使得

   $$a^T x \le 0 \le a^T y, \qquad \forall x \in \bar{D}_1, \forall y \in \bar{D}_2.$$

9. 证明：如果 $f_i, i = 1, \ldots, m$ 是 $S \subseteq R^n$ 上的凸函数，则下面的函数都是 S 上的凸函数：

$$\max_{1 \le i \le m} f_i(x), \qquad \sum_{i=1}^{m} f_i(x) \qquad \text{和} \qquad \sum_{i=1}^{m} \max\{f_i(x), 0\}.$$

10. 设 $S \subseteq R^n$ 是凸集. 如果函数 $f : S \to R$ 连续且满足：.

$$f(\frac{x+y}{2}) \le \frac{1}{2}[f(x) + f(y)], \qquad \forall x, y \in S.$$

证明： f 是 S 上的凸函数.

11. 设 f 是凸集 $S \subseteq R^n$ 上的凸函数. 则问题

$$\min_{x\in S} f(x)$$

的局部最优解必定是其整体最优解. 若再假设 f 连续可微, 则 $\bar{x} \in S$ 是上面问题的解的充要条件是

$$\nabla f(\bar{x})^T(x-\bar{x}) \geq 0, \quad \forall x \in S.$$

12. 设 $f: R^n \to R$ 二次连续可微, $x^* \in R^n$ 使得 $\nabla^2 f(x^*)$ 正定. 证明: 存在 x^* 的邻域 $U(x^*)$ 以及常数 $M \geq m > 0$ 使得下面的不等式对任何 $x \in U(x^*)$, 任何 $d \in R^n$ 成立:

$$m\|d\|^2 \leq d^T\nabla^2 f(x)d \leq M\|d\|^2,$$

$$m\|d\| \leq \|\nabla^2 f(x)d\| \leq M\|d\|,$$

$$m\|x-x^*\| \leq \|\nabla f(x) - \nabla f(x^*)\| \leq M\|x-x^*\|.$$

若进一步假设 $\nabla f(x^*) = 0$, 证明: 存在常数 $\bar{M} \geq \bar{m} > 0$ 使得

$$\bar{m}\|x-x^*\|^2 \leq f(x) - f(x^*) \leq \bar{M}\|x-x^*\|^2, \quad \forall x \in U(x^*),$$

$$\bar{m}\|\nabla f(x)\|^2 \leq f(x) - f(x^*) \leq \bar{M}\|\nabla f(x)\|^2, \quad \forall x \in U(x^*).$$

13. 证明严格凸二次函数必定是一致凸函数.

14. 证明 R^n 中的严格凸函数最多只有一个极小值点.

15. 证明一致凸函数的等价性命题, 即定理 1.2.7.

16. 设函数 $f: R^n \to R$ 是连续可微的一致凸函数.

   (i) 证明: 对任何 $\alpha \in R$, 水平集

   $$\Omega = \{x \in R^n \mid f(x) \leq \alpha\}$$

   是有界闭凸集.

   (ii) 证明 f 在 R^n 中存在惟一的极小值点.

17. 设 $S \subseteq R^n$ 是凸集. 如果函数 $f: S \to R$ 连续且存在常数 $\gamma > 0$ 使得

$$f\left(\frac{x+y}{2}\right) \leq \frac{1}{2}[f(x)+f(y)] - \gamma\|x-y\|^2, \qquad \forall x, y \in S,$$

证明: f 是 S 上的一致凸函数.

18. 设 f 是 $S \subseteq R^n$ 上的凸函数, $\alpha \notin [0,1]$, $x^{(1)}, x^{(2)} \in S$ 使得 $z_\alpha = \alpha x^{(1)} + (1-\alpha)x^{(2)} \in S$. 则

$$f(\alpha x^{(1)} + (1-\alpha)x^{(2)}) \geq \alpha f(x^{(1)}) + (1-\alpha)f(x^{(2)}).$$

19. 设 f 是 $S \subseteq R^n$ 上的严格凸函数, $\alpha \notin [0,1]$, $x^{(1)}, x^{(2)} \in S$, $x^{(1)} \neq x^{(2)}$ 使得 $z_\alpha = \alpha x^{(1)} + (1-\alpha)x^{(2)} \in S$. 则

$$f(\alpha x^{(1)} + (1-\alpha)x^{(2)}) > \alpha f(x^{(1)}) + (1-\alpha)f(x^{(2)}).$$

20. 设 f 是 $S \subseteq R^n$ 上的一致凸函数, $\alpha \notin [0,1]$, $x^{(1)}, x^{(2)} \in S$ 使得 $z_\alpha = \alpha x^{(1)} + (1-\alpha)x^{(2)} \in S$. 则

$$f(\alpha x^{(1)} + (1-\alpha)x^{(2)}) > \alpha f(x^{(1)}) + (1-\alpha)f(x^{(2)}) - \alpha(1-\alpha)m\|x^{(1)} - x^{(2)}\|^2.$$

21. 设点列 $\{x^{(k)}\} \subset R^n$ 有界且 $\{\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|\} \to 0$. 证明：若 $\{x^{(k)}\}$ 有孤立极限点 $\bar{x}$, 即在 $\bar{x}$ 的某个邻域内没有 $\{x^{(k)}\}$ 的其它极限点，则 $\{x^{(k)}\}$ 本身收敛于 $\bar{x}$.

22. 设点列 $\{x^{k)}\} \subset R^2$ 由下面定义：

$$x^{(k)} = (1 + e^{-k^2},\ 0.5^{2^k})^T, \quad k = 0, 1, \ldots .$$

证明：$\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 $(1,0)^T$.

23. 证明 Sherman-Morrison 公式 (1.16).

24. 证明关于矩阵的 Frobenius 范数的如下关系式：

(i) 对任何 $u, v \in R^n$, 有

$$\|uv^T\|_F^2 = \|u\|^2 \|v\|^2,$$

其中向量的范数为 Euclid 范数.

(ii) 设 $A \in R^{n\times n}$. 对任何 $s \in R^n$, 有

$$\left\| A\Big(I - \frac{ss^T}{\|s\|^2}\Big) \right\|_F^2 = \|A\|_F^2 - \frac{\|As\|^2}{\|s\|^2}.$$

25. (i) 证明 Von Neumann 定理：若矩阵 $A \in R^{n\times n}$ 非奇异且 $\|A\| < 1$, 则矩阵 $(I - A)$ 非奇异，而且，

$$(I - A)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} A^k, \qquad \|(I - A)^{-1}\| \le \frac{1}{1 - \|A\|}.$$

(ii) 证明：若矩阵 $A \in R^{n\times n}$ 非奇异且矩阵 $B \in R^{n\times n}$ 满足 $\|A^{-1}(B - A)\| < 1$, 则矩阵 B 非奇异，而且，

$$B^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (I - A^{-1}B)^k A^{-1}, \qquad \|B^{-1}\| \le \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}(B - A)\|}.$$

第二章　无约束问题的下降算法与线性搜索

§2.1　无约束问题解的最优性条件

设 $f: R^n \to R$ 连续可微. 考察如下无约束最优化问题:

$$\min f(x), \qquad x \in R^n. \tag{2.1}$$

为了导出无约束问题 (2.1) 的解的最优性条件，我们先引入下降方向的概念.

定义 2.1.1 设 $x, d \in R^n$. 若存在数 $\bar{\alpha} > 0$ 使得

$$f(x + \alpha d) < f(x), \qquad \forall \alpha \in (0, \bar{\alpha}),$$

则称 d 是函数 f 在点 x 处的一个下降方向. 若 $-d$ 是函数 f 在 x 处的下降方向，则称 d 是函数 f 在 x 处的一个上升方向.

下降方向 d 从几何上可解释为：当点从 x 出发，沿方向 d 移动时，函数 f 的值的变化呈单调递减的趋势. 若令

$$\phi(\alpha) = f(x + \alpha d),$$

则方向 d 是 f 在 x 处的下降方向等价于一元函数 ϕ 在原点处单调递减.

由一元函数微分学知识可知，若 $\phi'(0) < 0$, 则 ϕ 在原点单调递减. 因此，我们有如下定理.

定理 2.1.1 设 f 连续可微且 $\nabla f(x) \neq 0$.

(1) 若向量 d 满足 $\nabla f(x)^T d < 0$, 则它是 f 在 x 处的一个下降方向.

(2) 若矩阵 $H \in R^{n \times n}$ 对称正定，则向量 $d = -H\nabla f(x)$ 是 f 在 x 处的一个下降方向. 特别，向量 $d = -\nabla f(x)$ 是 f 在 x 处的一个下降方向.

证明 显然，结论 (2) 是结论 (1) 的一种特殊情形，故只需证明结论 (1). 设 $\nabla f(x)^T d < 0$. 利用 Taylor 展开，不难得到：当 $\alpha > 0$ 充分小时,

$$f(x + \alpha d) = f(x) + \alpha \nabla f(x)^T d + o(\alpha) < f(x),$$

即 d 是 f 在 x 处的一个下降方向. **证毕**

众所周知，当 $n = 1$ 时，若 x^* 是问题 (2.1) 的解，则 $f'(x^*) = 0$ 且 $f''(x^*) \geq 0$. 另一方面，若 x^* 满足 $f'(x^*) = 0$ 且 $f''(x^*) > 0$, 则 x^* 是问题 (2.1) 的一个严格局部极小值点. 当 $n > 1$ 时，无约束问题解的最优性条件可看成上述条件的推广.

下面的定理给出了点 x^* 是无约束问题 (2.1) 的局部最优解的必要条件.

定理 2.1.2 （ **无约束问题解的一阶必要条件** ）

设 $f: R^n \to R$ 连续可微， x^* 是无约束问题 (2.1) 的一个局部最优解. 则 x^* 满足

$$\nabla f(x^*) = 0. \tag{2.2}$$

证明 任给 $p \in R^n$, 由局部最优解的定义，对任意充分小的数 $t > 0$, 有

$$f(x^*) \le f(x^* + tp) = f(x^*) + t\nabla f(x^*)^T p + o(t).$$

不等式的两端同时减去 $f(x^*)$ 后除以 t, 并令 $t \to 0^+$ 可得 $\nabla f(x^*)^T p \ge 0, \forall p \in R^n$. 特别令 $p = -\nabla f(x^*)$ 得

$$-\|\nabla f(x^*)\|^2 = -\nabla f(x^*)^T \nabla f(x^*) \ge 0.$$

从而， $\nabla f(x^*) = 0$. **证毕**

我们称满足 (2.2) 的点 x^* 为函数 f 的稳定点. 定理 2.1.2 表明，无约束问题 (2.1) 的局部最优解必是目标函数的稳定点.

无约束问题解的二阶必要条件由下面的定理给出.

定理 2.1.3 （ **无约束问题解的二阶必要条件** ）

设 $f : R^n \to R$ 二次连续可微， x^* 是无约束问题 (2.1) 的一个局部最优解. 则 x^* 满足 (2.2) 且 $\nabla^2 f(x^*)$ 半正定.

证明 由定理 2.1.2, 只需证明 $\nabla^2 f(x^*)$ 半正定. 任给 $p \in R^n$, 由最优解的定义，对任意充分小的数 t, 有

$$f(x^*) \le f(x^* + tp) = f(x^*) + \frac{1}{2}t^2 p^T \nabla^2 f(x^*) p + o(t^2).$$

由 t 和 p 的任意性即得 $\nabla^2 f(x^*)$ 是半正定的. **证毕**

定理 2.1.3 的条件不是充分条件. 事实上，函数 $f(x) = x^3$ 在 $x^* = 0$ 处满足定理 2.1.3 的条件. 但 x^* 显然不是 f 的极小值点.

定理 2.1.4 （ **无约束问题解的二阶充分条件** ）

设 $f : R^n \to R$ 二次连续可微. 若 x^* 满足 $\nabla f(x^*) = 0$ 且 $\nabla^2 f(x^*)$ 正定，则 x^* 是无约束问题 (2.1) 的一个严格局部最优解.

证明 由于 $\nabla^2 f(x^*)$ 正定，故存在常数 $\delta > 0$, 使得对所有 $y \in U_\delta(x^*) \triangleq \{y \in R^n \mid \|y - x^*\| < \delta\}$, $\nabla^2 f(y)$ 正定. 由此，对任意 $y \in U_\delta(x^*)$, $y \ne x^*$, 由 Taylor 展开知，存在 $\theta \in (0,1)$ 使得

$$f(y) = f(x^*) + \frac{1}{2}(y - x^*)^T \nabla^2 f(x^* + \theta(y - x^*))(y - x^*) > f(x^*),$$

即 x^* 是问题 (2.1) 的一个严格局部最优解. **证毕**

由定理 1.2.5, $\nabla^2 f(x^*)$ 的正定性保证了函数 f 在 x^* 处附近是严格凸的. 另一方面，由于 $\nabla f(x)$ 表示 f 在 x 处的切平面的法方向，因此， $\nabla f(x^*) = 0$ 表明， f 在 x^* 处的切平面是水平的. 定理 2.1.4 从几何上可解释为，若函数 f 在 x^* 处具有水平的切平面，且在该点附近是严格凸的，则 x^* 是 f 的一个严格局部极小值点.

定理 2.1.4 的条件不是必要条件. 例如， $x^* = (0,0)^T$ 是函数 $f(x) = x_1^4 + x_2^4$ 的一个严格局部极小值点. 但 $\nabla^2 f(x^*)$ 不正定.

例 2.1.1 *利用极值条件求解下列问题：*

$$\min f(x) = \frac{1}{3}x_1^3 + \frac{1}{3}x_2^3 - x_1^2 - x_2.$$

解 直接计算得：

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} x_1^2 - 2x_1 \\ x_2^2 - 1 \end{pmatrix}, \quad \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 - 2 & 0 \\ 0 & 2x_2 \end{pmatrix}.$$

由一阶必要条件 $\nabla f(x) = 0$ 得稳定点：

$$x^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad x^{(3)} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x^{(4)} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

相应的 Hessian 阵分别为

$$\nabla^2 f(x^{(1)}) = \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \nabla^2 f(x^{(2)}) = \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix},$$

$$\nabla^2 f(x^{(3)}) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \nabla^2 f(x^{(4)}) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

易知，$\nabla^2 f(x^{(3)})$ 正定．故 $x^{(3)}$ 是问题的一个严格局部最优解． $\nabla^2 f(x^{(1)}), \nabla^2 f(x^{(2)})$ 和 $\nabla^2 f(x^{(4)})$ 都不是半正定的．因而 $x^{(1)}, x^{(2)}$ 和 $x^{(4)}$ 都不是问题的极小值点．

下面的定理说明，若 f 是凸函数，则 f 的任何局部极小值点也是其全局最小值点．而且，极值的一阶必要条件也是充分条件．

定理 2.1.5 *设 $f : R^n \to R$ 是连续可微的凸函数．则 f 的局部极小值点也是其全局最小值点．而且，x^* 是问题 (2.1) 的解的充要条件是 x^* 满足 (2.2).*

证明 先证明 f 的局部极小值点也是其全局最小值点．设 x^* 是 f 的一个局部极小值点．则存在 x^* 的一个邻域 $U(x^*)$, 使得

$$f(x) \geq f(x^*), \qquad \forall x \in U(x^*).$$

对任意的 $x \in R^n$, 当 $\alpha > 0$ 充分小时，$x^* + \alpha(x - x^*) \in U(x^*)$. 由 f 的凸性得

$$f(x^*) \leq f(x^* + \alpha(x - x^*)) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(x^*).$$

由此得 $f(x) \geq f(x^*)$, 即 x^* 是 f 的全局最小值点．

下面证明 x^* 是问题 (2.1) 的解的充要条件是 x^* 满足 (2.2).

由定理 2.1.2 知必要性成立．故只需证明充分性．设 x^* 满足 (2.2). 对任何 $x \in R^n$, 由定理 1.2.1 得

$$f(x) - f(x^*) \geq \nabla f(x^*)^T (x - x^*) = 0,$$

即 x^* 是问题 (2.1) 的一个全局最优解． **证毕**

§2.2 下降算法的一般步骤

定理 2.1.1 给出了函数 f 在点 x 处的下降方向满足的条件，并给出了确定下降方向的一种方式. 在此基础上，可以构造求解无约束问题 (2.1) 的下降算法. 我们将在接下来的几章中分别介绍求解 (2.1) 的几种常用算法. 本节，先介绍求解 (2.1) 的下降算法的一般步骤.

求解无约束问题 (2.1) 的下降算法的基本思想是从某个初始点 $x^{(0)}$ 出发，按照使目标函数值下降的原则构造点列 $\{x^{(k)}\}$, 即点列 $\{x^{(k)}\}$ 满足条件 $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)}), \forall k = 0, 1, \ldots$. 算法的最终目标是使得点列 $\{x^{(k)}\}$ 中的某个点或某个极限点是问题 (2.1) 的解或稳定点.

设 $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向且满足

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < 0.$$

从而，当 $\alpha > 0$ 充分小时， $f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) < f(x^{(k)})$. 因此，可取 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, 其中， $\alpha_k > 0$ 使得 $f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) < f(x^{(k)})$. 在此基础上，我们给出求解无约束问题 (2.1) 下降算法的步骤如下：

算法 2.1 （求解无约束问题的下降算法）

步 *1 给定初始点* $x^{(0)} \in R^n$, *精度* $\epsilon > 0$. *令* $k := 0$.

步 *2 若* $\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \epsilon$, *则终止算法，得解* $x^{(k)}$. *否则，转步 3.*

步 *3 确定下降方向* $d^{(k)}$, *使得*

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < 0.$$

步 *4 确定步长* $\alpha_k > 0$ *使得*

$$f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) < f(x^{(k)}).$$

步 *5 令* $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k := k+1$. *转步 2.*

注： 算法 2.1 的步 2 中的不等式 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \epsilon$ 称为算法的终止准则. 其中精度 ϵ 根据实际问题的需要确定. 但在进行理论分析时，我们均设 $\epsilon = 0$. 步 4 中的数 α_k 称为步长. 确定步长的方法有很多. 我们将在下一节中介绍确定步长 α_k 的几种常用的线性搜索算法.

§2.3 线性搜索

本节介绍确定算法 2.1 中步长 α_k 的几种常用的线性搜索方法. 线性搜索有两种方式，即精确线性搜索和非精确线性搜索. 设 $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向且满足 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < 0$.

精确线性搜索确定的步长 α_k 是如下一维最优化问题的解：

$$\min_{\alpha > 0} f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) \overset{\triangle}{=} \phi(\alpha). \tag{2.3}$$

由精确线性搜索的条件易知，精确线性搜索确定的步长 α_k 满足

$$\phi'(\alpha_k) = \nabla f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)})^T d^{(k)} = 0.$$

对于二次函数极小化问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2}x^TQx + q^Tx,$$

其中 $Q \in R^{n\times n}$ 对称正定. 利用条件 $\nabla f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)})^T d^{(k)} = 0$, 容易得到精确线性搜索步长 α_k 的表达式:

$$\alpha_k = -\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{d^{(k)T}Qd^{(k)}}. \tag{2.4}$$

§2.3.1 精确线性搜索 — 黄金分割法 (0.618 法)

公式 (2.4) 给出了极小化二次函数时精确线性搜索的步长公式. 对于一般非线性函数极小化问题, 难以得到精确线性搜索步长的解析表达式. 此时可采用数值方法确定步长.

黄金分割法是确定精确线性搜索步长的一种算法. 该算法适用于求一元单峰函数的极小值问题.

定义 2.3.1 设 ϕ 是定义在闭区间 $[a,b]$ 上的实值函数, $\bar{\alpha}$ 是 ϕ 在 $[a,b]$ 上的极小值. 若对任意的 $\alpha_1, \alpha_2 \in [a,b]$, $\alpha_1 < \alpha_2$, 有

$$\text{当}\alpha_2 \le \bar{\alpha}\text{时,}\ \phi(\alpha_1) > \phi(\alpha_2),$$
$$\text{当}\bar{\alpha} \le \alpha_1\text{时,}\ \phi(\alpha_2) > \phi(\alpha_1),$$

则称函数 ϕ 是 $[a,b]$ 上的单峰函数.

几何上, 单峰函数可解释为在极值点左边单调递减、右边单调递增的函数. 如图 2.1 所示.

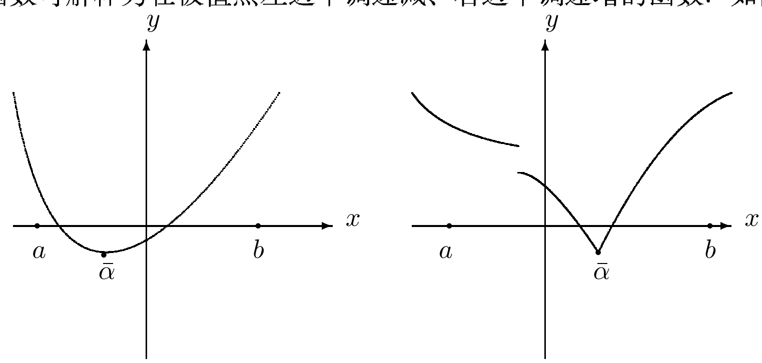

图 2.1 单峰函数.

黄金分割法的基本思想是构造闭区间序列 $\{[a_k,b_k]\}$ 满足 $\bar{\alpha} \in [a_{k+1},b_{k+1}] \subset [a_k,b_k]$ 且区间的长度 $b_k - a_k$ 按比例缩小, 即 $b_{k+1} - a_{k+1} = \lambda(b_k - a_k)$, $\lambda \in (0,1)$. 从而, $b_k - a_k \to 0$. 由此可得 $a_k \to \bar{\alpha}$, $b_k \to \bar{\alpha}$. 该算法的实现过程如下:

在区间 $[a_k,b_k]$ 上对称地取两点 $u_k < v_k$, 即有

$$\frac{v_k - a_k}{b_k - a_k} = \frac{b_k - u_k}{b_k - a_k} = \lambda, \tag{2.5}$$

或等价地

$$u_k = b_k - \lambda(b_k - a_k), \quad v_k = a_k + \lambda(b_k - a_k).$$

比较函数值 $\phi(u_k)$ 与 $\phi(v_k)$ 的大小，有下列三种情形：

情形 (1). $\phi(u_k) < \phi(v_k)$. 此时必有 $\bar{\alpha} \in [a_k, v_k]$. 故令 $[a_{k+1}, b_{k+1}] = [a_k, v_k]$.

情形 (2). $\phi(u_k) > \phi(v_k)$. 此时必有 $\bar{\alpha} \in [u_k, b_k]$. 故令 $[a_{k+1}, b_{k+1}] = [u_k, b_k]$.

情形 (3). $\phi(u_k) = \phi(v_k)$. 此时可取 $[a_{k+1}, b_{k+1}] = [a_k, v_k]$ 或 $[a_{k+1}, b_{k+1}] = [u_k, b_k]$. 但是，注意到区间 $[u_k, v_k] \subset [a_k, b_k]$ 包含了 $\bar{\alpha}$. 因此，我们可取 $[a_{k+1}, b_{k+1}] = [u_k, v_k]$ 以提高算法的收敛速度.

在情形 (1), 有 $u_k \in [a_{k+1}, b_{k+1}]$. 我们希望点 u_k 作为区间 $[a_{k+1}, b_{k+1}]$ 的一个分点，即 $u_k = u_{k+1}$ 或 $u_k = v_{k+1}$. 若 $u_k = u_{k+1}$, 则有

$$\begin{aligned} b_k - \lambda(b_k - a_k) &= u_k = u_{k+1} = b_{k+1} - \lambda(b_{k+1} - a_{k+1}) \\ &= v_k - \lambda^2(b_k - a_k) = a_k + \lambda(b_k - a_k) - \lambda^2(b_k - a_k), \end{aligned}$$

即

$$(1 - 2\lambda + \lambda^2)(b_k - a_k) = 0.$$

由此得 $\lambda = 1$. 注意到 λ 表示区间长度缩小因子. 必有 $\lambda < 1$. 因此， $u_k = u_{k+1}$ 不能实现. 从而，我们有 $u_k = v_{k+1}$. 由 u_k, v_k 和 v_{k+1} 的定义得

$$b_k - \lambda(b_k - a_k) = u_k = v_{k+1} = a_{k+1} + \lambda(b_{k+1} - a_{k+1}) = a_k + \lambda^2(b_k - a_k).$$

由此可得

$$\lambda^2 + \lambda - 1 = 0.$$

此方程的正数根为 $\lambda = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0.618$.

同样地，在情形 (2), 有 $v_k \in [a_{k+1}, b_{k+1}]$. 我们希望点 v_k 作为区间 $[a_{k+1}, b_{k+1}]$ 的一个分点，即有 $b_{k+1} - v_{k+1} = \lambda(b_{k+1} - a_{k+1}) = \lambda(b_k - u_k)$. 由此及 (2.5) 亦得 $\lambda = 1/\lambda - 1$, 即 $\lambda = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0.618$.

对于情形 (3), 需重新选取两个分点 u_{k+1} 和 v_{k+1}.

综合上面的讨论，我们将黄金分割法的步骤总结如下.

算法 2.2 （黄金分割法）

步 *0* 确定包含极小值点的初始单峰区间 $[a_0, b_0]$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $\lambda = 0.618$. 取 $u_0 = b_0 - \lambda(b_0 - a_0)$, $v_0 = a_0 + \lambda(b_0 - a_0)$. 令 $k := 0$.

步 *1* 若 $b_k - a_k \le \epsilon$, 则得 $\bar{\alpha} = (a_k + b_k)/2$. 停止计算.

步 *2* 若 $\phi(u_k) = \phi(v_k)$, 则令 $a_{k+1} = u_k$, $b_{k+1} = v_k$, $k := 0$. 转步 *0*.

步 *3* 若 $\phi(u_k) < \phi(v_k)$, 则令 $a_{k+1} = a_k$, $b_{k+1} = v_k$, $v_{k+1} = u_k$. 计算 $u_{k+1} = b_{k+1} - \lambda(b_{k+1} - a_{k+1})$. 令 $k := k + 1$. 转步 *1*.

步 *4* 若 $\phi(u_k) > \phi(v_k)$, 则令 $a_{k+1} = u_k$, $b_{k+1} = b_k$, $u_{k+1} = v_k$. 计算 $v_{k+1} = a_{k+1} + \lambda(b_{k+1} - a_{k+1})$. 令 $k := k + 1$. 转步 *1*.

例 2.3.1 用黄金分割法求函数

$$\phi(\alpha) = 3\alpha^4 - 16\alpha^3 + 30\alpha^2 - 24\alpha + 8$$

在 $[0, 3]$ 中的极小值.

解 令 $[a_0, b_0] = [0, 3]$. 计算结果如表 2.1.

表 2.1 黄金分割法的计算结果

k	$[a_k, b_k]$	u_k	v_k	$\phi(u_k)$	$\phi(v_k)$	$\phi(u_k) > \phi(v_k)$?
0	[0.000, 3.000]	1.146	1.852	0.989	0.104	$>$
1	[1.146, 3.000]	1.852	2.292	0.104	0.731	$<$
2	[1.146, 2.292]	1.584	1.852	0.552	0.104	$>$
3	[1.582, 2.292]	1.852	2.022	0.104	0.003	$>$
4	[1.852, 2.292]	2.022	2.125	0.003	0.111	$<$
5	[1.852, 2.125]	……				

§2.3.2 非精确线性搜索

精确线性搜索要求步长 α_k 取到一元函数 $\phi(\alpha) = f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)})$ 的最小值. 计算量较大. 非精确线性搜索只要求步长 α_k 使得函数 ϕ 在点 α_k 处的值 $\phi(\alpha_k)$ (即 $f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)})$) 较 $\phi(0)$ (即 $f(x^{(k)})$) 有一定的下降量. 因此, 在计算上容易实现. 下面介绍几种常用的非精确线性搜索.

Armijo 型线性搜索：给定 $\sigma_1 \in (0, 1/2)$, 取 $\alpha_k > 0$ 使得

$$f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) \le f(x^{(k)}) + \sigma_1 \alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}. \tag{2.6}$$

利用函数 $\phi(\alpha) = f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)})$, 上式可等价地写为

$$\phi(\alpha_k) \le \phi(0) + \sigma_1 \alpha_k \phi'(0).$$

由于 $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向且满足 $\phi'(0) = \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < 0$, 容易证明：不等式 (2.6) 对充分小的正数 α_k 均成立. 而在计算上，希望步长 α_k 尽可能大. 通常，可通过如下方式获得. 给定 $\beta > 0$, $\rho \in (0, 1)$. 取步长 α_k 为集合 $\{\beta\rho^i,\ i = 0, 1, \ldots\}$ 中使得不等式 (2.6) 成立的最大者. Armijo 型线性搜索可通过下面的算法实现.

算法 2.3 （ **Armijo 型线性搜索**）

步 *0* 若 $\alpha_k = 1$ 满足 (2.6), 则取 $\alpha_k = 1$. 否则转下一步.

步 *1* 给定常数 $\beta > 0$, $\rho \in (0, 1)$. 令 $\alpha_k = \beta$.

步 *2* 若 α_k 满足 (2.6), 则终止计算，得步长 α_k. 否则，转步 *3*.

步 *3* 令 $\alpha_k := \rho\alpha_k$. 转步 *2*.

注：(i) Armijo 型线性搜索 (2.6) 中的参数 σ_1 可取为 $(0,1)$ 中的任何实数．但在后面的第三章和第四章中我们将看到，当 $\sigma_1 \in (0,1/2)$ 时，可保证 Newton 法和拟 Newton 法的超线性收敛性．(ii) 单位步长 $\alpha_k = 1$ 是很重要的步长．在第三章和第四章中我们将会看到，它在算法的收敛速度分析中起到十分重要的作用．

例 2.3.2 给定无约束问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2.$$

设 $x^{(0)} = (1,1)^T$．验证 $d^{(0)} = (1,-1)^T$ 是 f 在 $x^{(0)}$ 处的下降方向．并用 *Armijo* 型线性搜索确定步长 $\alpha_0 = 0.5^i$ 使得

$$f(x^{(0)} + \alpha_0 d^{(0)}) \le f(x^{(0)}) + 0.9\alpha_0 \nabla f(x^{(0)})^T d^{(0)}.$$

解 直接计算得 $\nabla f(x) = (x_1, 2x_2)^T$, $\nabla f(x^{(0)}) = (1,2)^T$, $\nabla f(x^{(0)})^T d^{(0)} = -1 < 0$, 故 $d^{(0)}$ 是 f 在 $x^{(0)}$ 处的下降方向．

$$x^{(0)} + \alpha d^{(0)} = (1+\alpha, 1-\alpha)^T.$$

$$f(x^{(0)} + \alpha d^{(0)}) - f(x^{(0)}) = \frac{1}{2}(1+\alpha)^2 + (1-\alpha)^2 - \frac{3}{2} = \frac{3}{2}\alpha^2 - \alpha.$$

Armijo 型线性搜索满足的条件为

$$\frac{3}{2}\alpha^2 - \alpha \le 0.9\alpha \nabla f(x^{(0)})^T d^{(0)} = -0.9\alpha.$$

等价地

$$\alpha \le \frac{1}{15} \approx 0.066666.$$

故得 $\alpha_0 = 0.5^4 = 0.0625$.

在上面的 Armijo 型线性搜索中，试探步按比例 ρ 缩小．若 $\rho \in (0,1)$ 较大 (如 ρ 接近于 1)，则相邻两次试探步的改变相对较小．此时，需要经过较多次搜索才能得到 α_k. 若 $\rho \in (0,1)$ 较小 (如 ρ 接近于 0)，则相邻两次试探步的改变相对较大．此时，可经过相对较少的试探步得到 α_k. 但获得的步长 α_k 可能很小．为了克服 Armijo 型线性搜索的这一缺陷，可采用下面的 Wolfe-Powell 型非精确线性搜索．

Wolfe-Powell 型线性搜索：给定常数 σ_1, σ_2 满足 $0 < \sigma_1 < 1/2$, $\sigma_1 < \sigma_2 < 1$. 取 $\alpha_k > 0$ 使得

$$\begin{cases} f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) & \le & f(x^{(k)}) + \sigma_1 \alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}, \\ \nabla f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)})^T d^{(k)} & \ge & \sigma_2 \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}. \end{cases} \tag{2.7}$$

利用函数 $\phi(\alpha) = f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)})$, 上式可等价地写为

$$\begin{cases} \phi(\alpha_k) & \le & \phi(0) + \sigma_1 \alpha_k \phi'(0). \\ \phi'(\alpha_k) & \ge & \sigma_2 \phi'(0). \end{cases}$$

可以证明，若 $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向且 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < 0$. 再设 f 在射线 $\{x^{(k)} + \alpha d^{(k)} \mid \alpha > 0\}$ 上有下界．则存在区间 $[a,b]$, 使得 $[a,b]$ 中的任何点都满足 Wolfe-Powell 型线性搜索条件 (2.7). 我们将此留作练习．

比较条件 (2.6) 和 (2.7) 不难看出： Armijo 型线性搜索的条件是 Wolfe-Powell 型线性搜索中的第一个条件. Wolfe-Powell 型线性搜索 (2.7) 中的第二个条件的作用在于限制过小的步长. Wolfe-Powell 型线性搜索可通过下面的过程实现. 首先，按 Armijo 型搜索确定初始点 $\alpha_k^{(0)}=\beta\rho^i$ (i 是某个正的或负的整数) 使得 $\alpha_k^{(0)}$ 满足 (2.7) 中的第一个不等式. 此时， $\rho^{-1}\alpha_k^{(0)}\triangleq\beta_k^{(0)}$ 不满足 (2.7) 中的第一个不等式. 若 $\alpha_k^{(0)}$ 满足 (2.7) 中的第二个不等式，则令 $\alpha_k=\alpha_k^{(0)}$. 否则，取 $\rho_1\in(0,1)$. 令 $\alpha_k^{(1)}$ 为集合 $\{\alpha_k^{(0)}+\rho_1^i(\beta_k^{(0)}-\alpha_k^{(0)}),\ i=0,1,\dots\}$ 中使得 (2.7) 中第一个不等式成立的最大者. 若 $\alpha_k^{(1)}$ 满足 (2.7) 中的第二个不等式，则令 $\alpha_k=\alpha_k^{(1)}$. 否则，令 $\beta_k^{(1)}=\rho_1^{-1}\alpha_k^{(1)}$. 重复此过程，直至得到某个 $\alpha_k^{(i_k)}$ 同时满足 (2.7) 中的两个不等式. 上面的过程可总结为如下算法.

算法 2.4 （ **Wolfe-Powell 型线性搜索**）

步 *0* *若 $\alpha_k=1$ 满足 (2.7), 则取 $\alpha_k=1$. 否则转下一步.*

步 *1* *给定常数 $\beta>0$, $\rho,\rho_1\in(0,1)$. 令 $\alpha_k^{(0)}$ 是集合 $\{\beta\rho^i\mid i=0,\pm1,\pm2,\dots\}$ 中使得 (2.7) 中第一个不等式成立的最大者. 令 $i:=0$.*

步 *2* *若 $\alpha_k^{(i)}$ 满足 (2.7) 中的第二个不等式, 则终止计算, 并得步长 $\alpha_k=\alpha_k^{(i)}$. 否则, 令 $\beta_k^{(i)}=\rho^{-1}\alpha_k^{(i)}$. 转步 3.*

步 *3* *令 $\alpha_k^{(i+1)}$ 是集合 $\{\alpha_k^{(i)}+\rho_1^j(\beta_k^{(i)}-\alpha_k^{(i)}),\ j=0,1,\dots\}$ 中使得 (2.7) 中第一个不等式成立的最大者. 令 $i:=i+1$. 转步 2.*

除了前面介绍的 Armijo 型线性搜索和 Wolfe-Powell 型线性搜索以外，还有下面的 Goldstein 型和强 Wolfe 型非精确线性搜索.

Goldstein 型线性搜索的条件为：求 $\alpha_k>0$ 使得

$$f(x^{(k)})+\delta_1\alpha_k\nabla f(x^{(k)})^Td^{(k)}\le f(x^{(k)}+\alpha_kd^{(k)})\le f(x^{(k)})+\delta_2\alpha_k\nabla f(x^{(k)})^Td^{(k)},\tag{2.8}$$

其中常数 δ_1 和 δ_2 满足 $0<\delta_2<1/2$, $\delta_2<\delta_1<1$.

强 Wolfe 型线性搜索的条件为：求 $\alpha_k>0$ 满足

$$\left\{\begin{array}{rcl} f(x^{(k)}+\alpha_kd^{(k)}) & \le & f(x^{(k)})+\sigma_1\alpha_k\nabla f(x^{(k)})^Td^{(k)},\\ |\nabla f(x^{(k)}+\alpha_kd^{(k)})^Td^{(k)}| & \le & \sigma_2|\nabla f(x^{(k)})^Td^{(k)}|,\end{array}\right.\tag{2.9}$$

其中，参数 σ_1,σ_2 满足 $0<\sigma_1<1/2$, $\sigma_1<\sigma_2<1$. 易知，若取 $\sigma_2=0$, 则有 $\nabla f(x^{(k)}+\alpha_kd^{(k)})^Td^{(k)}=0$. 因此, 强 Wolfe 线性搜索可看成是精确线性搜索的一种推广. 可以证明, 若 f 连续可微且 $f(x^{(k)}+\alpha d^{(k)})$ 当 $\alpha>0$ 时有下界，则存在区间 $[a,b]$ 使得当 $\alpha_k\in[a,b]$ 时，不等式组 (2.8) 或 (2.9) 成立. Goldstein 型和强 Wolfe 型线性搜索可通过类似于 Wolfe-Powell 型线性搜索的方式实现.

§2.3.3 * 非单调线性搜索

前面介绍的精确线性搜索和非精确线性搜索的一个共同特点是：线性搜索产生的步长 α_k 满足 $f(x^{(k)}+\alpha_kd^{(k)})<f(x^{(k)})$. 即算法产生的函数值序列 $\{f(x^{(k)})\}$ 单调递减. 我们称这种线性搜索为单调

线性搜索. 单调线性搜索要求函数 f 在点 $x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}$ 处的函数值较点 $x^{(k)}$ 处的函数值有一定的下降量. 特别, 对前面介绍的所有线性搜索, 我们都有

$$f(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}) \le f(x^{(k)}) + \sigma_1 \alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}.$$

单调线性搜索的一个缺点是获得的步长有时会很小,特别,当算法产生的方向 $d^{(k)}$ 与负梯度方向 $-\nabla f(x^{(k)})$ 接近垂直时, 这种现象尤为明显. 为了克服单调线性搜索的这种缺陷, 可采用非单调线性搜索.

$$f(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}) \le \max_{0\le i\le M} f(x^{(k-i)}) + \sigma_1 \alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}, \tag{2.10}$$

其中, $M \ge 0$ 是整数. 对 $k=0,1,\dots M$, 取 $M=k$. 上面的非单调线性搜索由 [9] 提出. 当 $M=0$ 时, 非单调线性搜索条件 (2.10) 还原为 Armijo 型线性搜索条件 (2.6). 因此, 上面的非单调线性搜索是单调线性搜索 — Armijo 型线性搜索的一种推广.

采用非单调线性搜索时, 算法产生的函数值序列 $\{f(x^{(k)})\}$ 不再保证单调递减. 但可以证明 (留作练习), 此时, 存在 $\{f(x^{(k)})\}$ 的一个单调递减子序列.

下面介绍另一种非单调线性搜索. 记

$$C_k = \frac{1}{k-1}\sum_{i=0}^{k-1} f(x^{(i)})$$

为前 k 次迭代点处函数值的平均值. 取步长 α_k 满足

$$f(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}) \le C_k + \sigma_1 \alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}. \tag{2.11}$$

上式中的 C_k 也可以用下面方式确定的 C_k 替代: 取常数 $0 \le \eta_{min} \le \eta_{max} \le 1$. 令 $C_0 = f(x^{(0)})$, $Q_0 = 1$, $\eta_k \in [\eta_{\min}, \eta_{\max}]$,

$$C_{k+1} = \frac{(\eta_k Q_k C_k + f(x^{(k+1)}))}{Q_{k+1}}, \qquad Q_{k+1} = \eta_k Q_k + 1.$$

有关线性搜索 (2.11) 及其性质详见 [29].

§2.4 下降算法的全局收敛性

本节建立算法 2.1 的全局收敛性定理. 用 θ_k 表示向量 $d^{(k)}$ 与 f 的负梯度方向 $-\nabla f(x^{(k)})$ 的夹角, 即

$$\cos\theta_k = \frac{-\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|\nabla f(x^{(k)})\|\, \|d^{(k)}\|}. \tag{2.12}$$

为了证明算法 2.1 的全局收敛性, 我们需要如下的假设条件.

假设 2.4.1 *函数 f 连续可微有下界且 ∇f Lipschitz 连续, 即存在常数 $L>0$ 使得*

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \le L\|x-y\|, \quad \forall\ x, y \in R^n.$$

下面的几个定理给出了下降算法 2.1 的全局收敛性. 首先, 我们给出采用精确线性搜索时算法 2.1 的如下收敛性定理.

定理 2.4.1 *设假设 2.4.1 的条件成立, $\{x^{(k)}\}$ 由算法 2.1 产生, 其中步长 α_k 由精确线性搜索确定, 即 α_k 是一维最优化问题 (2.3) 的解. 则*

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\|^2 \cos^2\theta_k < \infty. \tag{2.13}$$

特别, 若存在常数 $\delta > 0$ 使得 $\cos\theta_k \ge \delta$, 则

$$\lim_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0. \tag{2.14}$$

证明 结论 (2.14) 可由结论 (2.13) 直接推得. 故只需证明 (2.13) 成立.

由中值定理得, 对任何 $\alpha > 0$ 均有

$$\begin{aligned} f(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}) &= f(x^{(k)}) + \alpha\nabla f(x^{(k)}+t_k\alpha d^{(k)})^T d^{(k)} \\ &= f(x^{(k)}) + \alpha\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} + \alpha[\nabla f(x^{(k)}+t_k\alpha d^{(k)}) - \nabla f(x^{(k)})]^T d^{(k)} \\ &\le f(x^{(k)}) + \alpha\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} + \alpha\|\nabla f(x^{(k)}+t_k\alpha d^{(k)}) - \nabla f(x^{(k)})\|\cdot\|d^{(k)}\| \\ &\le f(x^{(k)}) + \alpha\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} + L\alpha^2\|d^{(k)}\|^2, \end{aligned}$$

其中, $t_k \in (0,1)$. 特别, 上式对

$$\bar\alpha_k = -\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{2L\|d^{(k)}\|^2}$$

成立, 即有

$$f(x^{(k)}+\bar\alpha_k d^{(k)}) - f(x^{(k)}) \le \bar\alpha_k\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} + L\bar\alpha_k^2\|d^{(k)}\|^2 = -\frac{1}{4L}\frac{(\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)})^2}{\|d^{(k)}\|^2}.$$

由精确线性搜索条件, 步长 α_k 满足

$$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}) \le f(x^{(k)}+\bar\alpha_k d^{(k)}).$$

因此,

$$f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \le f(x^{(k)}+\bar\alpha_k d^{(k)}) - f(x^{(k)}) \le -\frac{1}{4L}\frac{(\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)})^2}{\|d^{(k)}\|^2}.$$

上式可等价地写成

$$\frac{1}{4L}\|\nabla f(x^{(k)})\|^2\cos^2\theta_k \le f(x^{(k)}) - f(x^{(k+1)}).$$

对上面的不等式求和, 注意到函数 f 有下界, 容易推得 (2.13). **证毕**

下面的定理 2.4.2 给出了采用 Wolfe-Powell 型线性搜索时算法 2.1 的收敛性.

定理 2.4.2 *设假设 2.4.1 的条件成立, $\{x^{(k)}\}$ 由采用 Wolfe-Powell 型线性搜索的算法 2.1 产生, 即 α_k 满足 (2.7). 则定理 2.4.1 的结论成立.*

证明 由 (2.7) 中的第二个不等式及 ∇f 的 Lipschitz 连续性得

$$-(1-\sigma_2)\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \le (\nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}))^T d^{(k)} \le \alpha_k L \|d^{(k)}\|^2.$$

故得

$$\alpha_k \ge -\frac{1-\sigma_2}{L}\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|d^{(k)}\|^2} \triangleq -c_1 \frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|d^{(k)}\|^2}, \tag{2.15}$$

其中， $c_1 = (1-\sigma_2)L^{-1}$. 从而，由 (2.7) 的第一个不等式得

$$f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \le -\sigma_1 c_1 \frac{(\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)})^2}{\|d^{(k)}\|^2} = -\sigma_1 c_1 \|\nabla f(x^{(k)})\|^2 \cos^2\theta_k. \tag{2.16}$$

类似于定理 2.4.1 的推导可得 (2.13). **证毕**

采用 Armijo 型线性搜索时，算法 2.1 的全局收敛性定理如下.

定理 2.4.3 *设假设 2.4.1 的条件成立， $\{x^{(k)}\}$ 由采用 Armijo 型线性搜索的算法 2.1 产生，即 α_k 由算法 2.3 产生. 再假设存在常数 $C > 0$, 使得*

$$\|\nabla f(x^{(k)})\| \le C \|d^{(k)}\|, \tag{2.17}$$

则定理 2.4.1 的结论成立.

证明 由 Armijo 型线性搜索准则知，若 $\alpha_k \ne 1$ 且 $\alpha_k \ne \beta$, 则 $\rho^{-1}\alpha_k$ 不满足 (2.6), 即有

$$f(x^{(k)} + \rho^{-1}\alpha_k d^{(k)}) > f(x^{(k)}) + \sigma_1 \rho^{-1}\alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}.$$

利用中值定理，存在 $\mu_k \in (0,1)$ 使得

$$f(x^{(k)} + \rho^{-1}\alpha_k d^{(k)}) = f(x^{(k)}) + \rho^{-1}\alpha_k \nabla f(x^{(k)} + \mu_k \rho^{-1}\alpha_k d^{(k)})^T d^{(k)}.$$

由上面二式得

$$(\nabla f(x^{(k)} + \mu_k\rho^{-1}\alpha_k d^{(k)}) - \nabla f(x^{(k)}))^T d^{(k)} \ge -(1-\sigma_1)\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}.$$

上式结合 ∇f 的 Lipschitz 连续性及 $\mu_k \in (0,1)$ 可推得,

$$\alpha_k \ge -\frac{(1-\sigma_1)\rho}{L}\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|d^{(k)}\|^2}.$$

令 $c_1 = (1-\sigma_1)\rho L^{-1}$, 则 (2.15) 也成立. 进而 (2.16) 成立. 若 $\alpha_k = 1$ 或 $\alpha_k = \beta$, 令 $\bar\beta = \min\{1, \beta\}$. 由 (2.6) 和 (2.17) 得

$$\begin{array}{rcl} f(x^{(k+1)}) & \le & f(x^{(k)}) + \sigma_1\bar\beta \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \\ & = & f(x^{(k)}) - \sigma_1\bar\beta \|\nabla f(x^{(k)})\| \|d^{(k)}\| \cos\theta_k \\ & \le & f(x^{(k)}) - \sigma_1\bar\beta C^{-1} \|\nabla f(x^{(k)})\|^2 \cos\theta_k \\ & \le & f(x^{(k)}) - \sigma_1\bar\beta C^{-1} \|\nabla f(x^{(k)})\|^2 \cos^2\theta_k. \end{array}$$

令 $c_2 = \sigma_1\bar\beta C^{-1}$, 也得 (2.16).

类似于定理 2.4.1 的推导，不难证明 (2.13). **证毕**

在定理 2.4.1 — 2.4.3 的基础上，我们给出下降算法 2.1 全局收敛的一个充分条件.

定理 2.4.4 设假设 *2.4.1* 的条件成立, $\{x^{(k)}\}$ 由算法 *2.1* 产生, 其中步长 α_k 由精确线性搜索确定、或由 *Wolfe-Powell* 型线性搜索确定或由 *Armijo* 型线性搜索确定且 (2.17) 成立. 若

$$\limsup_{k\to\infty} \cos^2\theta_k > 0, \tag{2.18}$$

则

$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0. \tag{2.19}$$

特别, 若存在常数 $\eta > 0$, 使得

$$\prod_{i=0}^{k-1} \cos\theta_i \geq \eta^k, \tag{2.20}$$

则 (2.19) 成立.

证明 若 (2.18) 成立, 则存在无限指标集 K 以及常数 $\epsilon > 0$ 使得 $\cos^2\theta_k \geq \epsilon$, $\forall k \in K$. 于是, 由 (2.13) 即得 (2.19). 特别, 若 (2.20) 成立, 则必有 (2.18) 成立. **证毕**

定理 2.4.4 表明, 若不等式 (2.18) 成立且算法 2.1 产生的序列 $\{x^{(k)}\}$ 有界, 则 $\{x^{(k)}\}$ 一定有极限点 x^* 是 f 的稳定点, 即满足局部最优解的一阶必要条件 (2.2).

§2.5 下降算法的收敛速度

本节, 我们分析下降算法的收敛速度. 设 $x^{(k)}$ 是由采用精确线性搜索或 Wolfe-Powell 型线性搜索或 Armijo 型线性搜索的下降算法 2.1 产生的点列, $\{d^{(k)}\}$ 是相应的下降方向序列且满足 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < 0$. 再设若采用 Armijo 型线性搜索时, (2.17) 成立. 由定理 2.4.1 — 2.4.3 的证明知, 存在常数 $C > 0$ 使得

$$f(x^{(k+1)}) \leq f(x^{(k)}) - c_1\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 \cos^2\theta_k, \tag{2.21}$$

其中, θ_k 是负梯度方向 $-\nabla f(x^{(k)})$ 与 $d^{(k)}$ 之间的夹角.

假设 2.5.1 (1) 函数 $f : R^n \to R$ 二次连续可微. (2) 由算法 *2.1* 产生的点列 $\{x^{(k)}\} \to x^*$, 且 $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*)$ 正定.

由假设 2.5.1 不难推得 (见第一章练习题), 存在常数 $M \geq m > 0$, $\bar{M} \geq \bar{m} > 0$ 使得当 k 充分大时,

$$\bar{m}\|x^{(k)} - x^*\|^2 \leq m\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 \leq f(x^{(k)}) - f(x^*) \leq M\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 \leq \bar{M}\|x^{(k)} - x^*\|^2. \tag{2.22}$$

由此及 (2.21), 我们有

$$\begin{aligned} f(x^{(k+1)}) - f(x^*) &\leq (f(x^{(k)}) - f(x^*)) - c_1\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 \cos^2\theta_k \\ &\leq (1 - c_2 M^{-1}\cos^2\theta_k)(f(x^{(k)}) - f(x^*)) \end{aligned} \tag{2.23}$$

在上面的基础上, 我们有关于算法 2.1 收敛速度的如下定理.

定理 2.5.1 设假设 *2.5.1* 的条件成立, $\{x^{(k)}\}$ 是由采用精确线性搜索或 *Wolfe-Powell* 型线性搜索或 *Armijo* 型线性搜索（且 (2.17) 成立）的下降算法 *2.1* 产生的点列. 若存在常数 $\eta > 0$, 使得 (2.20) 成立, 则存在常数 $b > 0$, $r \in (0, 1)$ 使得当 k 充分大时,

$$\|x^{(k+1)} - x^*\| \le br^k. \tag{2.24}$$

证明 不妨假设 (2.23) 对所有的 $k \ge 0$ 均成立. 由 (2.23) 以及几何不等式可得

$$\begin{aligned}
f(x^{(k+1)}) - f(x^*) &\le (1 - c_2 M^{-1}\cos^2\theta_k)(f(x^{(k)}) - f(x^*)) \\
&\le (1 - c_2 M^{-1}\cos^2\theta_k)(1 - c_2 M^{-1}\cos^2\theta_{k-1})(f(x^{(k-1)}) - f(x^*)) \\
&\vdots \\
&\le (f(x^{(0)}) - f(x^*))\prod_{i=0}^{k}(1 - c_2 M^{-1}\cos^2\theta_i) \\
&\le (f(x^{(0)}) - f(x^*))\Big(\frac{1}{k+1}\sum_{i=0}^{k}(1 - c_2 M^{-1}\cos^2\theta_i)\Big)^{k+1} \\
&= (f(x^{(0)}) - f(x^*))\Big(1 - c_2 M^{-1}\frac{1}{k+1}\sum_{i=0}^{k}\cos^2\theta_i\Big)^{k+1} \\
&\le (f(x^{(0)}) - f(x^*))\Big(1 - c_2 M^{-1}\Big(\prod_{i=0}^{k}\cos^2\theta_i\Big)^{1/(k+1)}\Big)^{k+1} \\
&\le (f(x^{(0)}) - f(x^*))(1 - c_2 M^{-1}\eta^2)^{k+1}.
\end{aligned}$$

由上式以及 (2.22) 即可推得 (2.24). **证毕**

关于下降算法的超线性收敛性, 我们有如下定理.

定理 2.5.2 设函数 $f : R^n \to R$ 二次连续可微. 点列 $\{x^{(k)}\}$ 由算法 *2.1* 产生, 其中 α_k 由 *Armijo* 型线性搜索或 *Wolfe-Powell* 型线性搜索确定. 设 $\{x^{(k)}\} \to x^*$, 且 $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*)$ 正定. 记

$$\delta_k = \frac{\|\nabla f(x^{(k)}) + \nabla^2 f(x^{(k)}) d^{(k)}\|}{\|d^{(k)}\|}.$$

若

$$\lim_{k\to\infty} \delta_k = 0, \tag{2.25}$$

则下面的结论成立:

(1) 当 k 充分大时, $\alpha_k = 1$.

(2) 序列 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 x^*.

(3) 若 $\delta_k = O(\|x^{(k)} - x^*\|)$, 且 $\nabla^2 f$ 在 x^* 处 *Lipschitz* 连续, 即存在常数 $L > 0$ 以及 x^* 的邻域 $U(x^*)$ 使得

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(x^*)\| \le L\|x - x^*\|, \qquad \forall x \in U(x^*),$$

则 $\{x^{(k)}\}$ 二次收敛于 x^*.

证明 由于 $\{x^{(k)}\} \to x^*$ 且 $\nabla^2 f(x^*)$ 正定，故存在常数 $m > 0$, 使得不等式

$$\|\nabla^2 f(x^{(k)})d\| \geq m\|d\|$$

对所有 $d \in R^n$ 以及所有充分大的 k 都成立．由于 $\delta_k \to 0$, 因此，当 k 充分大时， $\delta_k < m/2$. 而且，

$$m\|d^{(k)}\| \leq \|\nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)}\| \leq \delta_k\|d^{(k)}\| + \|\nabla f(x^{(k)})\|.$$

因此，存在常数 $m_1 > 0$ 使得不等式

$$\|d^{(k)}\| \leq m_1\|\nabla f(x^{(k)})\| = O(\|x^{(k)} - x^*\|) \tag{2.26}$$

对所有充分大的 k 均成立．上式特别包含了 $\{d^{(k)}\} \to 0$.

另一方面，我们有

$$-\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} = d^{(k)T}\nabla^2 f(x^k)d^{(k)} - d^{(k)T}[\nabla f(x^{(k)}) + \nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)}].$$

由此及 (2.25) 可得，存在常数 $\eta > 0$, 使得当 k 充分大时，

$$-\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \geq \eta\|d^{(k)}\|^2.$$

(1) 利用 Taylor 展开，有

$$\begin{aligned}
&f(x^{(k)} + d^{(k)}) - f(x^{(k)}) - \sigma_1\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \\
= \;& [f(x^{(k)} + d^{(k)}) - f(x^{(k)}) - \frac{1}{2}\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}] + (\frac{1}{2} - \sigma_1)\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \\
= \;& (\frac{1}{2} - \sigma_1)\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} + \frac{1}{2}d^{(k)T}[\nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)} + \nabla f(x^{(k)})] + o(\|d^{(k)}\|^2) \\
= \;& (\frac{1}{2} - \sigma_1)\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} + o(\|d^{(k)}\|^2) \leq (\sigma_1 - \frac{1}{2})\eta\|d^{(k)}\|^2 + o(\|d^{(k)}\|^2).
\end{aligned}$$

因此，当 k 充分大时， $f(x^{(k)} + d^{(k)}) - f(x^{(k)}) - \sigma_1\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \leq 0$, 即当 k 充分大时， $\alpha_k = 1$ 满足 Armijo 型线性搜索的条件以及 Wolfe-Powell 型线性搜索中的第一个不等式．再利用中值定理得

$$\begin{aligned}
&\nabla f(x^{(k)} + d^{(k)})^T d^{(k)} - \sigma_2\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \\
= \;& [\nabla f(x^{(k)} + d^{(k)}) - \nabla f(x^{(k)})]^T d^{(k)} + (1 - \sigma_2)\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \\
= \;& d^{(k)T}\nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)} + (1 - \sigma_2)\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} + o(\|d^{(k)}\|^2) \\
= \;& -\sigma_2\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} + d^{(k)T}[\nabla f(x^{(k)}) + \nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)}] + o(\|d^{(k)}\|^2) \\
\geq \;& \eta\sigma_2\|d^{(k)}\|^2 + o(\|d^{(k)}\|^2).
\end{aligned}$$

因此，当 k 充分大时， $\nabla f(x^{(k)} + d^{(k)})^T d^{(k)} - \sigma_2\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \geq 0$, 即当 k 充分大时， $\alpha_k = 1$ 满足 Wolfe-Powell 型线性搜索中的第二个不等式.

(2) 由 (1) 的推导可得

$$\begin{aligned}
&m\|x^{(k+1)} - x^*\| \leq \|\nabla^2 f(x^{(k)})(x^{(k)} + d^{(k)} - x^*)\| \\
= \;& \|\nabla^2 f(x^{(k)})(x^{(k)} - x^*) - \nabla f(x^{(k)}) + \nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)} + \nabla f(x^{(k)})\| \\
\leq \;& \|\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*) - \nabla^2 f(x^{(k)})(x^{(k)} - x^*)\| + \|\nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)} + \nabla f(x^{(k)})\| \\
\leq \;& o(\|x^{(k)} - x^*\| + o(\|d^{(k)}\|) = o(\|x^{(k)} - x^*\|),
\end{aligned}$$

其中，最后一个不等式由 (2.25) 得到，最后一个等式由 (2.26) 得到．上面的不等式说明 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛．

(3) 若 $\delta_k = O(\|x^{(k)} - x^*\|)$, 且 $\nabla^2 f$ 在 x^* 处 Lipschitz 连续，则上面过程中的 $o(\|x^{(k)} - x^*\|)$ 可由 $O(\|x^{(k)} - x^*\|^2)$ 替换．故 $\{x^{(k)}\}$ 二次收敛．

证毕

习题 2

1. 给定函数 $f: R^2 \to R$ 如下：
$$f(x) = (x_1 - x_2)^2 + x_2^4.$$
证明： $d = -(1,1)^T$ 是 f 在点 $x = (0,1)^T$ 处的一个下降方向．

2. 计算 Rosenbrock 函数
$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$
的梯度和 Hessian 矩阵．证明 $x^* = (1,1)^T$ 是函数的局部极小值点且函数在该点的 Hessian 矩阵对称正定．

3. 证明函数
$$f(x) = 8x_1 + 12x_2 + x_1^2 - 2x_2^2$$
有惟一的稳定点但既不是函数的极大值点也不是函数的极小值点．

4. 设一元函数 $\phi: R \to R$ 在区间 $[a,b]$ 上严格凸． $t_1, t_2 \in (a,b)$ 满足 $t_1 < t_2$.

   (i) 若 $\phi(t_1) > \phi(t_2)$. 证明：
$$\phi(t) > \phi(t_2), \quad \forall t \in [a, t_1).$$

   (ii) 若 $\phi(t_1) < \phi(t_2)$. 证明：
$$\phi(t) > \phi(t_1), \quad \forall t \in (t_2, b].$$

5. 设 $f: R^n \to R$ 是连续可微的凸函数．证明： $d \in R^n$ 是 f 在 x 处的下降方向的充要条件是
$$\nabla f(x)^T d < 0.$$

6. (i) 证明：若凸二次函数 f 有下界，则必可达到其下确界，即无约束问题 $\min f(x)$ 有解．

   (ii) 构造一个非二次凸函数 f 有下界但无约束问题 $\min f(x)$ 无解．

7. 设 $f: R^n \to R$ 是凸二次函数， x^* 是其任意极小值点．

   (i) 证明：
$$f(x) = f(x^*) + \frac{1}{2}\nabla f(x)^T (x - x^*), \qquad \forall x \in R^n.$$

   (ii) 设 $\{x^{(k)}\}$ 是采用精确线性搜索的下降算法产生的点列．证明：对任何 k, 若 $x^{(k)}$ 不是二次函数的极小值点，则
$$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}) + \frac{1}{2}\alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} = f(x^{(k)}) - \frac{1}{2}\frac{(f(x^{(k)})^T d^{(k)})^2}{(d^{(k)T}\nabla^2 f(x^{(k)}) d^{(k)})^2}.$$

8. 证明：若凸函数 f 的极小值点存在，则极小值点集合是凸集．

9. 设函数 $f: R^n \to R$ 连续可微．再设由下降算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 有界且相应的函数值序列 $\{f(x^{(k)})\}$ 单调递减并满足
$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0.$$

(i) 若 f 是凸函数，证明： $\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点都是无约束问题 (2.1) 的全局最小值点.

(ii) 若 f 是一致凸函数，证明： $\{x^{(k)}\}$ 收敛于问题 (2.1) 的惟一最小值点.

10. 设函数 $f(x)=|x|:R\to R$, $\{x^{(k)}\}$ 由下式定义：

$$x^{(k+1)}=\begin{cases}\frac{1}{2}(x^{(k)}+1), & \text{若} x^{(k)}>1,\\ \frac{1}{2}x^{(k)}, & \text{若} x^{(k)}\le 1.\end{cases}$$

证明由上述计算格式定义的算法为计算函数 $f(x)$ 极小值问题的一个下降算法.

11. 定义函数 $f:R^2\to R$ 如下：

$$f(x)=\frac{1}{2}\|x\|^2.$$

令

$$x^{(k)}=\left(1+\frac{1}{2^k}\right)\begin{pmatrix}\cos k\\ \sin k\end{pmatrix},\qquad k=0,1,\ldots.$$

证明：

(i) 函数值序列 $\{f(x^{(k)})\}$ 单调递减.

(ii) 单位圆 $\{x\,\big|\,\|x\|^2=1\}$ 上的每一个点都是序列 $\{x^{(k)}\}$ 的极限点.

12. 设函数 $f(x)=(x_1+x_2^2)^2$. 令 $x=(1,0)^T$, $p=(-1,1)^T$. 证明 p 是函数 $f(x)$ 在点 x 处的一个下降方向. 试用黄金分割法求解

$$\min_{\alpha>0} f(x+\alpha p).$$

13. 给定无约束问题

$$\min f(x)=\frac{1}{2}x_1^2+2x_2^2.$$

设 $x^{(0)}=(1,1)^T$. 验证 $d^{(0)}=(-1,-1)^T$ 是 f 在 $x^{(0)}$ 处的下降方向. 并用 Armijo 型线性搜索确定步长 $\alpha_0=0.5^i$ 使得

$$f(x^{(0)}+\alpha_0 d^{(0)})\le f(x^{(0)})+0.9\alpha_0\nabla f(x^{(0)})^T d^{(0)}.$$

14. 用黄金分割法求解

$$\min \phi(\alpha)=\alpha^2-2\alpha.$$

取初始区间 $[a,b]=[-2,5]$.

15. 假设 $f:R^n\to R$ 连续可微， $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向且满足 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}<0$. 再设 f 在射线 $\{x^{(k)}+\alpha d^{(k)}\,|\,\alpha>0\}$ 上有下界. 证明：存在区间 $[a,b]$, 使得 $[a,b]$ 中的任何点都满足 Wolfe-Powell 型线性搜索条件 (2.7).

16. 设假设条件 2.4.1 成立， $\{x^{(k)}\}$ 由采用 Armijo 型线性搜索的下降算法 2.1 产生. 再假设 (2.20) 成立. 证明：若下面的条件之一成立，则

$$\liminf_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\|=0.$$

(i) 存在常数 $C_1>0$, 使得

$$\sum_{\substack{i=0,\\ \alpha_i=1,\,\beta}}^{k-1}\|\nabla f(x^{(i)})\|\le C_1\sum_{\substack{i=0,\\ \alpha_i=1,\,\beta}}^{k-1}\|d^{(k)}\|.$$

(ii) 存在常数 $C_2 > 0$, 使得

$$\prod_{\substack{i=0,\\ \alpha_i=1,\,\beta}}^{k-1} \|\nabla f(x^{(i)})\| \le \prod_{\substack{i=0,\\ \alpha_i=1,\,\beta}}^{k-1} (C_2\|d^{(k)}\|).$$

17. 设假设条件 2.4.1 成立， $\{B_k\}$ 是对称正定矩阵序列并满足

$$m\|d\|^2 \le d^T B_k d \le M\|d\|^2, \quad \forall d \in R^n, \quad k = 0, 1, \ldots,$$

其中 $m \le M$ 是给定的正常数. 给定 $x^{(0)} \in R^n$. 设 $\{x^{(k)}\}$ 由下面的迭代方式产生:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}, \qquad k = 0, 1, \ldots,$$

其中， $d^{(k)} \in R^n$ 是线性方程组

$$B_k d + \nabla f(x^{(k)}) = 0$$

的解， $\alpha_k > 0$ 由精确线性搜索或 Armijo 型线性搜索或 Wolfe-Powell 型线性搜索确定. 证明:

$$\lim_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0.$$

18. 设 $d^{(k)}$ 是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向且满足 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < 0$. 再设 ∇f Lipschitz 连续且 $L > 0$ 为其 Lipschitz 常数. 证明:

(i) 由 Goldstein 型线性搜索产生的步长 α_k 满足

$$\alpha_k \ge -\frac{(1-\delta_1)}{L}\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|d^{(k)}\|^2}.$$

(ii) 由强 Wolfe 型线性搜索产生的步长 α_k 满足

$$\alpha_k \ge -\frac{(1-\sigma_2)}{L}\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|d^{(k)}\|^2}.$$

19. 设假设 2.4.1 的条件成立， $\{x^{(k)}\}$ 是由采用 Goldstein 型线性搜索或强 Wolfe 型线性搜索的算法 2.1 产生的点列. 证明定理 2.4.1 的结论成立.

20. 设 $\{x^{(k)}\}$ 由下面的迭代方式产生:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}, \qquad k = 0, 1, \ldots,$$

其中， $d^{(k)} \in R^n$ 是线性方程组

$$B_k d + \nabla f(x^{(k)}) = 0$$

的解. 设 $\{x^{(k)}\} \to x^*$, $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*)$ 正定. 证明：若

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|(B_k - \nabla^2 f(x^*))d^{(k)}\|}{\|d^{(k)}\|} = 0,$$

则 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 x^*.

21. 设函数 $f: R^n \to R$ 二次连续可微，点列 $\{x^{(k)}\}$ 由采用精确线性搜索的算法 2.1 产生. 设 $\{x^{(k)}\} \to x^*$, 且 $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*)$ 正定. 再设条件 (2.25) 成立. 证明:

(i) 步长序列 $\{\alpha_k\} \to 1$.

(ii) 序列 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 x^*.

22. 设 $\{x^{(k)}\}$ 由如下迭代过程产生：

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}, \quad k = 0, 1, \ldots.$$

若 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 x^*, 则

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x^{(k)} - x^*\|}{\|d^{(k)}\|} = 1.$$

23. 设点列 $x^{(k)}$ 定义为

$$\begin{cases} x^{(2i)} = \dfrac{1}{i!}, \\ x^{(2i+1)} = 2x^{(2i)}, \quad i = 0, 1, \ldots. \end{cases}$$

证明下列结论：

(i) $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 $x^* = 0$.

(ii) 令 $d^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$, $k = 0, 1, \ldots$. 则

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x^{(k)} - x^*\|}{\|d^{(k)}\|} = 1.$$

(iii) $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^* 的速度不是超线性的.

24. 设 $f: R^n \to R$ 连续可微， $\{x^{(k)}\}$ 是采用非单调线性搜索 (2.10) 的算法 2.1 产生的点列.

(i) 证明 $\{x^{(k)}\}$ 包含于水平集

$$\Omega = \{x \in R^n \mid f(x) \le f(x^{(0)})\}.$$

(ii) 设 $l(k)$ 为满足下式的正整数：

$$k - M \le l(k) \le k, \ f(x^{(l(k))}) = \max_{0\le j\le M} f(x^{(k-j)}).$$

证明：子序列 $\{f(x^{(l(k))})\}$ 单调递减.

25. 设假设条件 2.4.1 成立且存在正常数 C_1, C_2 使得 $d^{(k)}$ 满足

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \le -C_1 \|\nabla f(x^{(k)})\|^2, \qquad \|d^{(k)}\| \le C_2 \|\nabla f(x^{(k)})\|.$$

设 $\{x^{(k)}\}$ 是采用非单调线性搜索 (2.10) 算法产生的点列. 证明：

(i) $\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点 $\bar{x}$ 都是 f 的稳定点，即满足 $\nabla f(\bar{x}) = 0$.

(ii) $\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点 $\bar{x}$ 都不是 f 的极大值点.

(iii) 如果 $\{x^{(k)}\}$ 只有有限个稳定点，则 $\{x^{(k)}\}$ 本身收敛.

第三章 无约束问题算法 (I) — 最速下降法、 Newton 法

在上一章中，我们介绍了求解无约束问题

$$\min f(x), \qquad x \in R^n \tag{3.1}$$

的下降算法的一般步骤，即算法 2.1. 在该算法中，确定下降方向 $d^{(k)}$ 的步骤 — 步 3 非常重要，是算法的核心. 不同的算法确定 $d^{(k)}$ 的方式不同. 相应算法的收敛性理论以及数值效果有很大差异. 本章介绍求解无约束问题 (3.1) 的两种常用算法 — 最速下降法和 Newton 法. 本章假设 f 二次连续可微.

§3.1 最速下降法

由定理 2.1.1 知，负梯度方向 $-\nabla f(x^{(k)})$ 是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 令 $d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$. 可以证明： $d^{(k)}$ 是下面问题的解：

$$\min_{p\neq 0} \frac{\nabla f(x^{(k)})^T p}{\|p\|}.$$

事实上，对任何 $p \in R^n$, $\|p\| = 1$, 由 Cauchy-Schwarz 不等式得

$$\nabla f(x^{(k)})^T p \geq -\|\nabla f(x^{(k)})\| \, \|p\| = -\|\nabla f(x^{(k)})\|.$$

当 $p = d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})/||\nabla f(x^{(k)})||$ 时，上面的不等式成为等式. 由于 $d^{(k)}$ 的上述性质，我们称 $d^{(k)}$ 为函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的最速下降方向. 相应的下降算法 2.1 称为最速下降算法. 其步骤如下.

算法 3.1 （最速下降法）

步 *1* 给定初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *2* 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \epsilon$, 则算法终止. 得解 $x^{(k)}$. 否则，计算 $d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$. 转步 *3*.

步 *3* 由线性搜索确定步长 α_k.

步 *4* 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k := k + 1$. 转步 *2*.

例 3.1.1 取初始点 $x^{(0)} = (2, 1)^T$. 用采用精确线性搜索的最速下降法求解下面的最优化问题：

$$\min f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2.$$

解 直接计算得 $\nabla f(x) = (x_1, 2x_2)^T$. 最速下降方向

$$d = (d_1, d_2)^T = -\nabla f(x) = -(x_1, 2x_2)^T.$$

令

$$\phi(\alpha) = f(x + \alpha d) = \frac{1}{2}(x_1 + \alpha d_1)^2 + (x_2 + \alpha d_2)^2.$$

由 $\phi'(\alpha)=0$ (或利用 (2.4)) 不难得到 ϕ 的最小值点 (即精确搜索的步长) 为

$$\alpha=-\frac{x_1d_1+2x_2d_2}{d_1^2+2d_2^2}=\frac{x_1^2+4x_2^2}{x_1^2+8x_2^2}.$$

从而,

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_kd^{(k)}=x^{(k)}-\frac{(x_1^{(k)})^2+4(x_2^{(k)})^2}{(x_1^{(k)})^2+8(x_2^{(k)})^2}\nabla f(x^{(k)})=\Big(\frac{4}{t_k^2+8}x_1^{(k)},-\frac{t_k^2}{t_k^2+8}x_2^{(k)}\Big)^T,$$

其中 $t_k=|x_1^{(k)}/x_2^{(k)}|$. 不难证明，最速下降算法产生的点列如下

$$x^{(k)}=\Big(\frac{1}{3}\Big)^k\begin{pmatrix}2\\(-1)^k\end{pmatrix},\qquad k=0,1,\ldots.$$

易知 $\{x^{(k)}\}\to x^*=(0,0)^T$, 即算法产生的点列收敛于问题的解.

最速下降方向与 f 的负梯度方向一致，即夹角为 $\theta_k=0$. 注意到

$$\|\nabla f(x^{(k)})\|=\|d^{(k)}\|,$$

即不等式 (2.17) 对所有 k 成立. 由定理 2.4.1 — 2.4.3 可得下面关于最速下降法的全局收敛性定理.

定理 3.1.1 *设假设 2.4.1 的条件成立， $\{x^{(k)}\}$ 由采用精确线性搜索，或 Armijo 型线性搜索，或 Wolfe-Powell 型线性搜索最速下降法产生. 则*

$$\lim_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\|=0.$$

由例 3.1.1 不难看出，最速下降法最多具有线性收敛速度. 事实上，例 3.1.1 中的 $\{x^{(k)}\}$ 满足

$$\|x^{(k+1)}-x^*\|=\frac{1}{3}\|x^{(k)}-x^*\|,\quad k=0,1,\ldots.$$

另一方面，由定理 2.5.1 知，最速下降法至少具有线性收敛速度. 因此，最速下降法求解严格凸二次函数极小化问题是恰好具有线性收敛速度.

下面的定理进一步给出了最速下降法求解严格凸二次函数极小值问题时的收敛速度估计. 定理的证明可参看 [19, 定理 3.3].

定理 3.1.2 *设矩阵 $Q\in R^{n\times n}$ 对称正定， $q\in R^n$. 记 $\lambda_{\max}$ 和 $\lambda_{\min}$ 分别是 Q 的最大和最小特征值， $\kappa=\lambda_{\max}/\lambda_{\min}$. 考察如下二次函数极小化问题：*

$$\min f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx.$$

设 $\{x^{(k)}\}$ 是采用精确线性搜索的最速下降法求解上述问题产生的点列. 则下面的不等式对所有 $k\geq 0$ 成立：

$$\|x^{(k+1)}-x^*\|_Q\leq\Big(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\Big)\|x^{(k)}-x^*\|_Q,\tag{3.2}$$

其中 x^* 是问题的惟一解， $\|x\|_Q=(x^TQx)^{1/2}$.

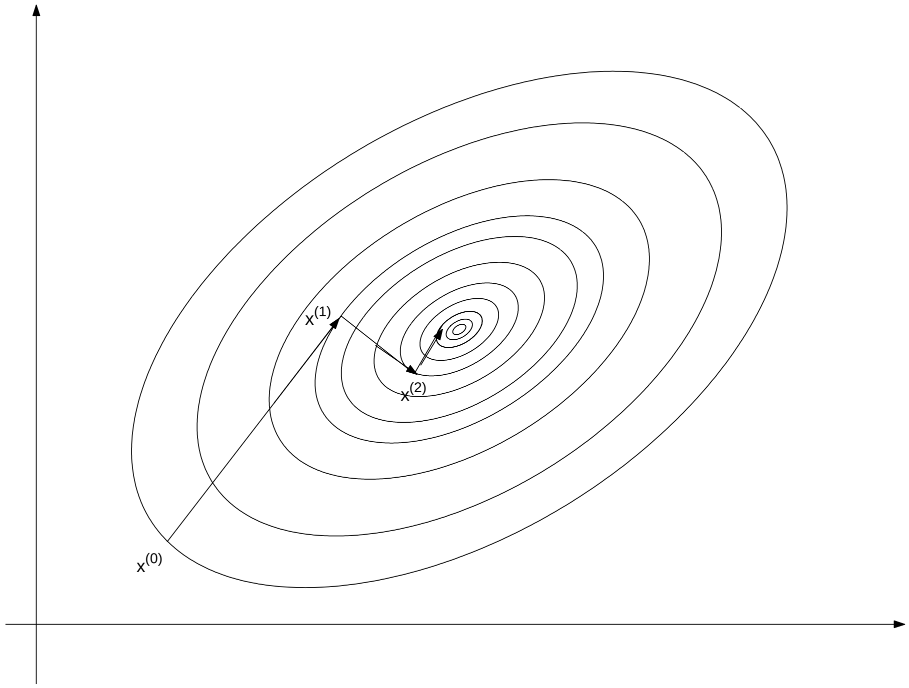

图 3.1: 最速下降法.

由上面的定理可以看出，若条件数 κ 接近于 1 (即 Q 的最大特征值和最小特征值接近时) , 最速下降法收敛很快. 特别，当 Q 的所有特征值都相等时，算法只需一次迭代便终止于问题的解. 但当条件数 κ 较大时 (即 Q 近似于病态时) , 算法收敛得很慢 (参见图 3.1) .

对于二次函数，注意到

$$f(x) - f(x^*) = \frac{1}{2}(x - x^*)^T Q(x - x^*) = \frac{1}{2}\|x - x^*\|_Q^2.$$

因此， (3.2) 可等价地写成

$$f(x^{(k+1)}) - f(x^*) \le \left(\frac{\kappa - 1}{\kappa + 1}\right)^2 (f(x^{(k)}) - f(x^*)).$$

最速下降法求解一般无约束问题的收敛速度由下面的定理给出 (见 [19, 定理 3.4]) .

定理 3.1.3 设 $f : R^n \to R$ 二次连续可微，并设由采用精确线性搜索的最速下降法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于问题 (3.1) 的解 x^* 且 $\nabla^2 f(x^*)$ 正定. 则

$$f(x^{(k+1)}) - f(x^*) \le \left(\frac{\kappa - 1}{\kappa + 1}\right)^2 (f(x^{(k)}) - f(x^*)) + o(f(x^{(k)}) - f(x^*)),$$

其中， $\kappa = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$, $\lambda_{\max}$ 和 $\lambda_{\min}$ 分别是 $\nabla^2 f(x^*)$ 的最大和最小特征值.

§3.2 Newton 法及其修正形式

设 f 二次连续可微且对任意 $x \in R^n$, $\nabla^2 f(x)$ 正定. 由定理 2.1.1 知,方向 $d^{(k)} = -\nabla^2 f(x^{(k)})^{-1}\nabla f(x^{(k)})$ 是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 该方向称为 Newton 方向. 它是 f 在 $x^{(k)}$ 处的二次近似式

$$f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T s + \frac{1}{2} s^T \nabla^2 f(x^{(k)}) s \approx f(x^{(k)} + s)$$

的最小值点. 或等价地， $d^{(k)}$ 是下面关于 d 的线性方程组的解:

$$\nabla^2 f(x^{(k)}) d + \nabla f(x^{(k)}) = 0.$$

此外， Newton 方向也可看成是在范数 $\|\cdot\|_{\nabla^2 f(x^{(k)})}$ 下的最速下降方向，即

$$d^{(k)} = -\nabla^2 f(x^{(k)})^{-1}\nabla f(x^{(k)})$$

是极小化问题

$$\min_{d \in R^n, d \neq 0} \frac{\nabla f(x^{(k)})^T d}{\|d\|_{G_k}}$$

的解，其中 $G_k = \nabla^2 f(x^{(k)})$.

在算法 2.1 的基础上，我们构造求解无约束问题 (3.1) 的 Newton 法如下.

算法 3.2 （ Newton 法 ）

步 *1* 给定初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *2* 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \epsilon$, 则算法终止. 得问题的解 $x^{(k)}$. 否则，解线性方程组

$$\nabla^2 f(x^{(k)}) d + \nabla f(x^{(k)}) = 0 \tag{3.3}$$

得解 $d^{(k)}$.

步 *3* 由线性搜索确定步长 α_k.

步 *4* 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k := k+1$. 转步 *2*.

例 3.2.1 用采用精确线性搜索的 *Newton* 法求解下面的无约束问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 - x_1 x_2 - x_1.$$

分别取初始点 $x^{(0)} = (0,0)^T$ 和 $(1,1)^T$. 该问题的最优解为 $x^* = (2,1)^T$.

解 由计算得

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} x_1 - x_2 - 1 \\ -x_1 + 2x_2 \end{pmatrix}, \qquad \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

对 $d = (d_1, d_2)^T$, 令

$$\phi(\alpha) = f(x + \alpha d) = \frac{1}{2}(x_1 + \alpha d_1)^2 + (x_2 + \alpha d_2)^2 - (x_1 + \alpha d_1)(x_2 + \alpha d_2) - (x_2 + \alpha d_1).$$

由 $\phi'(\alpha)=0$ (或公式 (2.4)) 得精确搜索步长

$$\alpha=-\frac{(x_1-x_2-1)d_1+(-x_1+2x_2)d_2}{d_1^2+2d_2^2-2d_1d_2}.$$

Newton 方向 $d^{(k)}$ 满足方程组

$$\begin{pmatrix}1 & -1\\ -1 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}d_1^{(k)}\\ d_2^{(k)}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}x_1^{(k)}-x_2^{(k)}-1\\ -x_1^{(k)}+2x_2^{(k)}\end{pmatrix}=0.$$

解此方程组得解

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix}d_1^{(k)}\\ d_2^{(k)}\end{pmatrix} &= -\begin{pmatrix}1 & -1\\ -1 & 2\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}x_1^{(k)}-x_2^{(k)}-1\\ -x_1^{(k)}+2x_2^{(k)}\end{pmatrix}\\ &= -\begin{pmatrix}2 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1^{(k)}-x_2^{(k)}-1\\ -x_1+2x_2^{(k)}\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}x_1^{(k)}-2\\ x_2^{(k)}-1\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

计算结果见表 3.1.

表 3.1 例 3.2.1 的计算结果

$x^{(0)}$	k	$x^{(k)}$	$f(x^{(k)})$	$\nabla f(x^{(k)})$	$d^{(k)}$	α_k
$(0,0)^T$	0	$(0,0)^T$	0	$(-1,0)^T$	$(2,1)^T$	1
	1	$(2,1)^T$	-1	$(0,0)^T$		
$(1,1)^T$	0	$(1,1)^T$	$-1/2$	$(-1,1)^T$	$(1,0)^T$	1
	1	$(2,1)^T$	-1	$(0,0)^T$		

值得注意的是：对两个不同的初始点， Newton 法均经过一次迭代后达到问题的最优解. 事实上，我们有如下更一般的结果.

定理 3.2.1 设

$$f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx,$$

其中 $Q\in R^{n\times n}$ 对称正定. 则从任意初始点 $x^{(0)}$ 出发，采用精确线性搜索的 Newton 法最多经一次迭代即可达到 f 的最小值点.

证明 经计算易得

$$\nabla f(x)=Qx+q,\quad \nabla^2 f(x)=Q.$$

因此， Newton 方向 $d^{(0)}$ 由下式给出：

$$d^{(0)}=-\nabla^2 f(x^{(0)})^{-1}\nabla f(x^{(0)})=-Q^{-1}\nabla f(x^{(0)}).$$

若 $d^{(0)}=0$, 则 $\nabla f(x^{(0)})=0$. 由于 f 是凸函数，此时 $x^{(0)}$ 是问题的最优解.

若 $d^{(0)} \neq 0$, 利用 (2.4), 精确线性搜索产生的步长 α_0 由下式给出：

$$\alpha_0 = -\frac{\nabla f(x^{(0)})^T d^{(0)}}{d^{(0)T})Qd^{(0)}} = \frac{\nabla f(x^{(0)})^T Q^{-1} \nabla f(x^{(0)})}{\nabla f(x^{(0)})^T Q^{-1} \nabla f(x^{(0)})} = 1.$$

由此可得

$$x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 d^{(0)} = x^{(0)} + d^{(0)} = x^{(0)} - Q^{-1}\nabla f(x^{(0)}) = x^{(0)} - Q^{-1}(Qx^{(0)} + q) = -Q^{-1}q.$$

由于 $\nabla f(x^{(1)}) = 0$, f 是凸函数，故 $x^{(1)}$ 是 f 的最小值点. **证毕**

定义 3.2.1 *若一个算法用于求解严格凸二次函数极小值问题时，从任意初始点出发，算法经有限次迭代后可达到函数的最小值点，则称该算法具有二次终止性.*

由定理 3.2.1 知， Newton 法具有二次终止性. 另一方面，由例题 3.1.1 知，最速下降法不具有二次终止性.

Newton 法的全局收敛性由如下定理给出.

定理 3.2.2 *设 f 二次连续可微且存在常数 $m > 0$ 使得*

$$d^T \nabla^2 f(x) d \geq m\|d\|^2, \quad \forall d \in R^n, \ \forall x \in \Omega, \tag{3.4}$$

其中,

$$\Omega = \{x \mid f(x) \leq f(x^{0)})\}.$$

设 $\{x^{(k)}\}$ 由 Newton 算法 3.2 产生，其中步长 α_k 由精确线性搜索，或 Armijo 型线性搜索，或 Wolfe-Powell 型线性搜索确定. 则 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 f 在 Ω 中的惟一全局最小值点.

证明 由定理的条件知 f 在 Ω 上是一致凸函数，其全局最小值点存在惟一，它是 $\nabla f(x) = 0$ 的惟一解. 而且水平集 Ω 是一个有界闭凸集. 又由 $\{f(x^{(k)})\}$ 的单调下降性，显然有 $\{x^{(k)}\} \subset \Omega$.

利用 (3.3) 和 (3.4) 不难证明，存在常数 $C > 0$, 使得 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq C\|d^{(k)}\|$.

记 θ_k 为负梯度方向 $-\nabla f(x^{(k)})$ 与 Newton 方向 $d^{(k)} = -\nabla^2 f(x^{(k)})^{-1}\nabla f(x^{(k)})$ 的夹角. 由 (3.4) 不难推得：存在常数 $\delta > 0$ 使得 $\cos\theta_k \geq \delta$. 从而，由定理 2.4.1 — 定理 2.4.3 可得

$$\lim_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0,$$

即 $\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点都是稳定点. 但 f 的稳定点是问题的全局最小值点. 由最小值点的惟一性知 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 f 在 Ω 上的惟一全局最小值点. **证毕**

利用定理 2.5.2 不难证明 Newton 法的二次收敛性.

定理 3.2.3 *设定理 3.2.2 的条件成立. 序列 $\{x^{(k)}\}$ 由采用 Armijo 型线性搜索或 Wolfe-Powell 型线性搜索的算法 3.2 产生. 则 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 f 的全局最小值点 x^*. 此外，若假设 $\nabla^2 f$ 在点 x^* 处 Lipschitz 连续，则 $\{x^{(k)}\}$ 二次收敛于 x^*.*

Newton 法的主要优点之一是其二次收敛性. 但该算法要求对所有的 k, $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 正定. 否则, 不能保证 Newton 方向 $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 因此, 算法 3.2 只适用于求解严格凸函数的极小值点. 为克服 Newton 法的这一缺陷, 可采用修正 Newton 法. 修正 Newton 法的思想是用矩阵 $A_k \stackrel{\triangle}{=} \nabla^2 f(x^{(k)}) + \nu_k I$ 代替 $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 求解子问题 (3.3). 这里, $I \in R^{n\times n}$ 是单位矩阵, 参数 $\nu_k > 0$ 使得矩阵 A_k 正定. 修正 Newton 法的步骤与算法 3.2 惟一不同之处在于确定 $d^{(k)}$ 的线性方程组.

算法 3.3 （ **修正 Newton 法** ）

步 *1* 给定初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *2* 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \epsilon$, 则算法终止. 得问题的解 $x^{(k)}$. 否则, 解线性方程组

$$A_k d + \nabla f(x^{(k)}) = 0$$

得解 $d^{(k)}$, 其中, $A_k \stackrel{\triangle}{=} \nabla^2 f(x^{(k)}) + \nu_k I$, 参数 $\nu_k > 0$ 使得矩阵 A_k 正定.

步 *3* 由线性搜索确定步长 α_k.

步 *4* 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k := k+1$. 转步 *2*.

若 $\nu_k = 0$, 则修正 Newton 法的子问题与 Newton 法的子问题 (3.3) 相同. 对于修正 Newton 法, 利用定理 2.4.2 、定理 2.4.3 和定理 2.5.2 不难证明如下收敛性定理.

定理 3.2.4 假设 (1) 水平集

$$\Omega = \{x \mid f(x) \le f(x^{(0)})\}$$

有界且函数 f 在包含 Ω 的某个有界闭凸集上二次连续可微.

(2) 点列 $\{x^{(k)}\}$ 由采用精确线性搜索、或 *Armijo* 型线性搜索或 *Wolfe-Powell* 型线性搜索的修正 *Newton* 法产生, 且有一个极限点 $\bar{x}$ 使得 $\nabla^2 f(\bar{x})$ 正定.

(3) 数列 $\{\nu_k\}$ 有上界.

则

$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0.$$

若再假设 $\{x^{(k)}\} \to \bar{x}$ 且 $\{\nu_k\} \to 0$. 则采用 *Armijo* 型线性搜索或 *Wolfe-Powell* 型线性搜索的修正 *Newton* 法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 $\bar{x}$. 若进一步假设 $\nabla^2 f$ 在 $\bar{x}$ 处 *Lipschitz* 连续且存在常数 $C > 0$, 使得 $\nu_k \le C\|\nabla f(x^{(k)})\|$, 则 $\{x^{(k)}\}$ 二次收敛于 $\bar{x}$.

修正 Newton 法克服了 Newton 法要求 $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 正定的缺陷. 克服 Newton 法这种缺陷的另一种方法是结合 Newton 法和最速下降法构造 Newton — 最速下降混合型算法. 该算法的基本思想是: 当 Newton 方向不存在 (如 $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 奇异) 或 Newton 方向存在但不是 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向 (如 $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 不正定) 时, 采用最速下降方向取代 Newton 方向. 该算法的步骤如下:

算法 3.4 (Newton — **最速下降法**)

步 *1* 给定初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *2* 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \epsilon$, 则算法终止. 得问题的解 $x^{(k)}$. 否则, 解线性方程组

$$\nabla^2 f(x^{(k)})d + \nabla f(x^{(k)}) = 0. \tag{3.5}$$

若方程组 (3.5) 有解 $d^{(k)}$ 且 $d^{(k)T}\nabla f(x^{(k)}) < 0$, 转步 *3*. 否则, 令 $d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$. 转步 *3*.

步 *3* 由线性搜索确定步长 α_k.

步 *4* 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k := k+1$. 转步 *2*.

算法 3.4 有类似于定理 3.2.4 的收敛性.

定理 3.2.5 假设 (1) 水平集

$$\Omega = \{x \mid f(x) \le f(x^{(0)})\}$$

有界且函数 f 在包含 Ω 的某个有界闭凸集上二次连续可微.

(2) 点列 $\{x^{(k)}\}$ 由采用精确线性搜索、或 *Armijo* 型线性搜索或 *Wolfe-Powell* 型线性搜索的 *Newton* — 最速下降算法产生, 且有一个极限点 $\bar{x}$ 使得 $\nabla^2 f(\bar{x})$ 正定.

则

$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0.$$

若再假设 $\{x^{(k)}\} \to \bar{x}$. 则采用 *Armijo* 型线性搜索或 *Wolfe-Powell* 型线性搜索的 *Newton* — 最速下降算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 $\bar{x}$. 若进一步假设 $\nabla^2 f$ 在 $\bar{x}$ 处 *Lipschitz* 连续, 则 $\{x^{(k)}\}$ 二次收敛于 $\bar{x}$.

§3.3 * 正则化 Newton 法

上一节介绍的 Newton 法及其修正形式有一个共同的缺陷, 即当 $\nabla^2 f(x^*)$ 不正定时, 算法的收敛速度降低为线性. 下面的例子说明了这一点.

例 3.3.1 用 *Newton* 法求解下面的无约束问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + \phi(x_2), \tag{3.6}$$

其中

$$\phi(x_2) = \frac{1}{12}\begin{cases} (x_2-1)^4, & \text{若 } x_2 \in (1,+\infty), \\ 0, & \text{若 } x_2 \in [-1,1], \\ (x_2+1)^4, & \text{若 } x_2 \in (-\infty,-1). \end{cases}$$

不难证明, 上面定义的 f 是凸函数. 而且, 问题 (3.6) 的最优解集为

$$X = \{(x_1,x_2)^T \mid x_1 = 0,\ -1 \le x_2 \le 1\}.$$

直接计算可得, f 在任意 $x^* \in X$ 处的 Hessian 矩阵均为

$$\nabla^2 f(x^*) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

显然， $\nabla^2 f(x^*)$ 对称半正定但奇异.

下面分析用 Newton 法求解 (3.6) 时的收敛速度.

由计算得

$$\phi'(x_2)=\frac{1}{3}\begin{cases}(x_2-1)^3, & \text{若 } x_2\in(1,+\infty),\\ 0, & \text{若 } x_2\in[-1,1],\\ (x_2+1)^3, & \text{若 } x_2\in(-\infty,-1),\end{cases}$$

$$\phi''(x_2)=\begin{cases}(x_2-1)^2, & \text{若 } x_2\in(1,+\infty),\\ 0, & \text{若 } x_2\in[-1,1],\\ (x_2+1)^2, & \text{若 } x_2\in(-\infty,-1),\end{cases}$$

$$\nabla f(x)=\begin{pmatrix} x_1\\ \phi'(x_2)\end{pmatrix},\qquad \nabla^2 f(x)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & \phi''(x_2)\end{pmatrix}.$$

若 $x=(x_1,x_2)^T$ 满足 $x_2\notin[-1,1]$, 则 Newton 法的子问题 (3.3) 有解，且解 $d=(d_1,d_2)^T$ 由下式给出：

$$d_1=-x_1,\qquad d_2=-\frac{\phi'(x_2)}{\phi''(x_2)}=-\frac{1}{3}\begin{cases}(x_2-1), & \text{若 } x_2\in(1,+\infty),\\ (x_2+1), & \text{若 } x_2\in(-\infty,-1).\end{cases}$$

记 $x^+=(x_1^+,x_2^+)^T$ 表示用单位步长 Newton 法产生的下一个点．则

$$x_1^+=x_1+d_1=0,$$

$$x_2^+=x_2+d_2=x_2-\frac{\phi'(x_2)}{\phi''(x_2)}=\begin{cases}1+\frac{2}{3}(x_2-1), & \text{若 } x_2\in(1,+\infty),\\ -1+\frac{2}{3}(x_2+1), & \text{若 } x_2\in(-\infty,-1).\end{cases}$$

不难看出, 若 $x_2>1$, 则 $x_2^+>1$ 且 $x_2^+-1=\frac{2}{3}(x_2-1)$. 若 $x_2<-1$, 则 $x_2^+<-1$ 且 $x_2^++1=\frac{2}{3}(x_2+1)$. 取初始点 $x^{(0)}=(x_1^{(0)},x_2^{(0)})$ 满足 $x_2^{(0)}>1$. 则单位步长 Newton 法产生如下点列：

$$x^{(k+1)}=\begin{pmatrix}0\\ 1+\frac{2}{3}(x_2^{(k)}-1)\end{pmatrix}\quad \text{且}\quad x^{(k+1)}-x^*=\frac{2}{3}(x^{(k)}-x^*),$$

其中， $x^*=(0,1)^T\in X$.

上面的例子说明，当 $\nabla^2 f(x^*)$ 奇异时， Newton 法的收敛速度可降低为线性.

定义 3.3.1 若在问题 (3.1) 的解 x^* 处 $\nabla^2 f(x^*)$ 奇异，则称 x^* 是问题 (3.1) 的奇异解.

当问题 (3.1) 有奇异解时，问题的解可能不惟一．令 X 表示问题 (3.1) 的解集合.

定义 3.3.2 称函数 $F:R^n\to R_+\triangleq\{t\in R\mid t\geq 0\}$ 在 $x^*\in X$ 的邻域内对问题 (3.1) 的解集合 X 提供了一个局部误差界，若存在 x^* 的邻域 $U(x^*)$ 和常数 $m>0$ 使得

$$F(x)\geq m\,\mathrm{dist}(x,X),\qquad \forall x\in U(x^*),\tag{3.7}$$

其中， $\mathrm{dist}(x,X)$ 表示点 x 到集合 X 的距离.

容易证明：若在 $x^* \in X$ 处 $\nabla^2 f(x^*)$ 正定，则 x^* 是问题 (3.1) 的一个孤立解，即在 x^* 的某个邻域内有 $X = \{x^*\}$. 此时函数 $\|\nabla f\|$ 在 x^* 的邻域内对问题 (3.1) 的解集合 $\{x^*\}$ 提供了一个局部误差界. 但反之不然. 在上面的例 3.3.1 中，对任何 $x^* = (x_1^*, x_2^*)^T \in X$, 如果 $-1 < x_2^* < 1$, 则可以证明函数 $\|\nabla f\|$ 在 x^* 的邻域内对问题 (3.1) 的解集合 X 提供了一个局部误差界. 事实上，对这样的 x^*, 存在 x^* 的邻域 $U(x^*)$ 使得对所有的 $x = (x_1, x_2)^T \in U(x^*)$, 有

$$\|\nabla f(x)\| = \sqrt{x_1^2 + \phi'(x_2)^2} \geq |x_1| = \mathrm{dist}(x, X).$$

因此，局部误差界条件比 Hessian 矩阵的正定性条件严格弱.

例 3.3.1 表明，当问题 (3.1) 有奇异解时， Newton 法的收敛速度降低至线性. 下面介绍正则化 Newton 法. 该算法当问题有奇异解时也保证二次收敛性.

假设 3.3.1 1) 函数 $f: R^n \to R$ 二次连续可微且 $\nabla^2 f(x)$ 半正定.
(2) 函数 f 的 *Hessian* 矩阵 $\nabla^2 f$ *Lipschitz* 连续.

由凸函数的等价性定理 1.2.1 知，假设 3.3.1 包含了 f 是凸函数的假设. 此外，对任何正数 μ_k, 矩阵 $\nabla^2 f(x^{(k)}) + \mu_k I$ 正定. 因此，由定理 2.1.1, 线性方程组

$$(\nabla^2 f(x^{(k)}) + \mu_k I)d + \nabla f(x^{(k)}) = 0 \tag{3.8}$$

的解是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 我们称参数 μ_k 为正则化因子.

用线性方程组 (3.8) 取代 Newton 法中的子问题 (3.3), 我们可构造如下求解凸函数极小化问题的正则化 Newton 法.

算法 3.5 (正则化 Newton 法)

步 1 给定常数 $\sigma, \rho \in (0, 1)$, $C > 0$, 初始点 $x^{(0)} \in R^n$. 令 $k := 0$.

步 2 令 $\mu_k = C\|\nabla f(x^{(k)})\|$. 解线性方程组 (3.8) 得解 $d^{(k)}$.

步 3 令 i_k 是使下面的不等式成立的最小非负整数：

$$f(x^{(k)} + \rho^i d^{(k)}) \leq f(x^{(k)}) + \sigma \rho^i \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}. \tag{3.9}$$

令 $\alpha_k := \rho^{i_k}$.

步 4 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k := k + 1$. 转步 *2*.

注： 算法 3.5 中的步 3 实际上是 Armijo 型线性搜索.

下面的定理给出了正则化 Newton 法 (算法 3.5) 的全局收敛性质以及收敛速度估计. 其证明参看 [17].

定理 3.3.1 设假设 *3.3.1* 成立且 f 有下界. 则由正则化 *Newton* 法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 的每一个极限点都是问题 (3.1) 的解.

定理 3.3.2 设下面的条件成立. (1) 假设 3.3.1 成立. (2) 由正则化 Newton 法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 有子列 $\{x^{(k)}\}_{k\in K}$ 收敛于 $\tilde{x}\in X$, 且函数 $\|\nabla f(x)\|$ 在 $\tilde{x}$ 的某邻域内对问题 (3.1) 提供了一个误差界. (3) 在 (3.9) 中取 $\sigma\in(0,1/2)$. 则当 $k\in K$ 充分大时, $\alpha_k=1$, 而且 $\{x^{(k)}\}_{k\in K}$ 二次收敛于 $\bar{x}$, 即存在常数 $M>0$ 使得

$$\text{dist}\,(x^{(k+1)},X)\le M\text{dist}\,(x^{(k)},X)^2.$$

习题 3

1. 给定无约束极值问题
$$\min f(x)=x_1^2+2x_2^2.$$
设 $x^{(0)}=(1,1)^T$.
   (i) 用采用精确线性搜索的最速下降法求解该问题.
   (ii) 用采用精确线性搜索的 Newton 法求解该问题.

2. 设 $\{x^{(k)}\}$ 是采用精确线性搜索的最速下降算法求解严格凸二次函数极小值问题
$$\min f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx \tag{3.10}$$
产生的点列. 则 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_kd^{(k)}$ 是问题的解的充要条件是: $d^{(k)}$ 是 Q 的一个特征向量, 相应的特征值为 α_k^{-1}.

3. 设 $\{x^{(k)}\}$ 是采用精确线性搜索的最速下降算法求解严格凸二次函数极小值问题 (3.10) 产生的点列. 证明: 对任何 $k\ge0$, 下面的不等式成立:
$$f(x^{(k+1)})\le\ (1-\kappa(Q)^{-1})f(x^{(k)}),$$
其中 $\kappa(Q)$ 表示 Q 的条件数. 而且, 若 $q\ne0$, 则上面的不等式严格成立.

4. 设 $\{x^{(k)}\}$ 是采用精确线性搜索的最速下降算法求解严格凸二次函数极小值问题 (3.10) 产生的点列. 设 x^* 是问题的解. 证明下面的等式:
$$\|x^{(k)}-x^*\|_Q^2-\|x^{(k+1)}-x^*\|_Q^2=2\alpha_k\nabla f(x^{(k)})^TQ(x^{(k)}-x^*)-\alpha_k^2\nabla f(x^{(k)})^TQ\nabla f(x^{(k)}),$$
$$\|x^{(k)}-x^*\|_Q^2-\|x^{(k+1)}-x^*\|_Q^2=\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^4}{\|\nabla f(x^{(k)})\|_Q^2},$$
$$\|x^{(k+1)}-x^*\|_Q^2=\Big\{1-\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^4}{\|\nabla f(x^{(k)})\|_Q^2\|\nabla f(x^{(k)})\|_{Q^{-1}}^2}\Big\}\|x^{(k)}-x^*\|_Q^2.$$

5. 设矩阵 $Q\in R^{n\times n}$ 对称正定, $\lambda_{\min}$ 和 $\lambda_{\max}$ 分别表示 Q 的最小和最大特征值. 证明下面的 Kantorovich 不等式:
$$\frac{\|x\|^4}{\|x\|_Q^2\|x\|_{Q^{-1}}^2}\ge\frac{4\lambda_{\min}\lambda_{\max}}{(\lambda_{\min}+\lambda_{\max})^2}.$$

6. 设 $\{x^{(k)}\}$ 是采用精确线性搜索的最速下降算法求解严格凸二次函数极小值问题 (3.10) 产生的点列, x^* 是问题的解.

(i) 证明 $\{x^{(k)}\}$ 具有如下收敛速度估计:

$$\|x^{(k+1)}-x^*\|_Q \le \frac{\kappa-1}{\kappa+1}\|x^{(k)}-x^*\|_Q,$$

其中, κ 是 Q 的条件数，即最大特征值与最小特征值之比.

(ii) 证明：采用 Euclid 范数时, $\{x^{(k)}\}$ 具有如下收敛速度估计:

$$\|x^{(k+1)}-x^*\| \le \frac{\kappa-1}{\kappa+1}\kappa^{1/2}\|x^{(k)}-x^*\|.$$

7. 证明下面的结论.

(i) 设 $\{x^{(k)}\}$ 是采用精确线性搜索的最速下降法求解严格凸二次函数极小值问题 (3.10) 产生的点列. 则对任何 $k\ge 0$,

$$\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2 \le \frac{(\kappa-1)^2}{4\kappa}\|\nabla f(x^{(k)})\|^2,$$

其中, κ 是矩阵 Q 的条件数.

(ii) 设 $f:R^n\to R$ 二次连续可微且一致凸. 则有

$$\limsup_{k\to\infty}\frac{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2} \le \frac{(\kappa-1)^2}{4\kappa},$$

其中, κ 是矩阵 $\nabla^2 f(x^*)$ 的条件数, x^* 是 f 的最小值点.

8. 设假设 2.4.1 的条件成立, $\{x^{(k)}\}$ 由采用精确线性搜索，或 Armijo 型线性搜索，或 Wolfe-Powell 型线性搜索最速下降法产生. 若存在 $\{x^{(k)}\}$ 的一个极限点 x^* 使得 f 在 x^* 的某邻域内二次连续可微且 $\nabla^2 f(x^*)$ 正定. 证明序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^*.

9. 证明定理 3.1.3.

10. 设 $f:R^n\to R$ 二次连续可微. 考察求解无约束问题 (3.1) 的如下迭代格式:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}, \qquad k=0,1,\ldots,$$

设 $\{x^{(k)}\}\to x^*$ 且 $\nabla f(x^*)=0$, $\nabla^2 f(x^*)$ 正定. 令

$$\delta_k = \frac{|\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} + d^{(k)T}\nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)}|}{\|d^{(k)}\|^2}.$$

证明：若 $\lim\limits_{k\to\infty}\delta_k = 0$, 则当 k 充分大时, $\alpha_k = 1$ 满足 Armijo 型线性搜索条件和 Wolfe-Powell 型线性搜索条件.

11. 用古典 Newton 法求函数

$$f(x) = x_1^2 + 2x_2^2 - \ln(x_1x_2-1)$$

的极小值点. 初值分别取为 (i) $x^{(0)}=(2,1.5)^T$; (ii) $x^{(0)}=(1.5,2)^T$. 试求出 $x^{(2)}$.

12. 构造一个二次连续可微函数函数 $f:R^n\to R$, $(n\ge 1)$, 使得用古典 Newton 法求解 (3.1) 时产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 二次收敛于问题的解 x^*, 且 $\nabla^2 f(x^*)$ 半正定但不正定.

13. 设函数 $f:R^n\to R$ 二次连续可微且 $\nabla^2 f(x)$ 对所有 $x\in R^n$ 正定. 证明 Newton 方向是极小化问题

$$\min_{d\in R^n, d\ne 0}\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d}{\|d\|_{G_k}}$$

的解，其中 $G_k = \nabla^2 f(x^{(k)})$.

14. 设函数 $f: R^n \to R$ 二次连续可微且对所有 $x \in R^n$, $\nabla^2 f(x)$ 正定. 给定正数序列 $\{\eta_k\} \to 0$. 考察求解无约束问题 (3.1) 的如下迭代算法：给定 $x^{(0)} \in R^n$,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}, \quad k = 0, 1, \ldots,$$

其中 $d^{(k)}$ 满足

$$\|\nabla^2 f(x^{(k)}) d^{(k)} + \nabla f(x^{(k)})\| \le \eta_k, \quad k = 0, 1, \ldots.$$

证明：该算法 (称为非精确 Newton 算法) 具有局部超线性收敛速度. 若进一步假设 $\nabla^2 f$ Lipschitz 连续，且存在常数 $M > 0$, 使得当 k 充分大时， $\eta_k \le M\|\nabla f(x^{(k)})\|$. 证明 $\{x^{(k)}\}$ 具有二次收敛速度.

15. 函数 $f: R^n \to R$ 二次连续可微且对所有 $x \in R^n$, $\nabla^2 f(x)$ 正定. 考察求解无约束问题 (3.1) 的如下迭代算法 (有限差分 Newton 法): 给定 $x^{(0)} \in R^n$,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}, \quad k = 0, 1, \ldots,$$

其中 $d^{(k)}$ 满足

$$H_k d^{(k)} + \nabla f(x^{(k)}) = 0, \quad k = 0, 1, \ldots,$$

其中 H_k 的第 j 列为

$$(H_k)_j = (\nabla f(x^{(k)} + \epsilon_k e^{(j)}) - \nabla f(x^{(j)}))/\epsilon_k, \quad j = 1, 2, \ldots, n.$$

$e^{(j)}$, $j = 1, 2, \ldots, n$ 是坐标轴方向. 设 ϵ_k 满足：对某个常数 $C > 0$ 有 $0 < \epsilon_k \le C\|\nabla f(x^{(k)})\|$. 证明该算法具有局部超线性收敛性. 若进一步假设 $\nabla^2 f$ Lipschitz 连续，证明 $\{x^{(k)}\}$ 具有二次收敛速度.

16. 建立采用 Goldstein 线性搜索 Newton 法的全局收敛性定理.

17. 证明定理 3.2.4.

18. 证明定理 3.2.5.

19. 设 $f : R^n \to R$ 是二次连续可微的凸函数且 $\nabla^2 f$ Lipschitz 连续， X 表示问题 (3.1) 的最优解集. 给定 $\bar{x} \in X$, 设 $\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \ldots, \bar{\lambda}_l$ 是 $\nabla^2 f(\bar{x})$ 的正特征值， $\bar{\Lambda} = \text{diag}\,(\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \ldots, \bar{\lambda}_l)$. 对任何充分接近 $\bar{x}$ 的点 x, $\lambda_1(x), \lambda_2(x), \ldots, \lambda_n(x)$ 表示是 $\nabla^2 f(x)$ 的正特征值，且当 $x \to \bar{x}$ 时， $\lambda_i(x) \to \bar{\lambda}_i$, $i = 1, \ldots, l$, $\lambda_i(x) \to 0$, $i = l+1, \ldots, n$. 记 $\Lambda_1(x) = \text{diag}\,(\lambda_1(x), \lambda_2(x), \ldots, \lambda_l(x))$, $\Lambda_2(x) = \text{diag}\,(\lambda_{l+1}(x), \lambda_{l+2}(x), \ldots, \lambda_n(x))$. 令正交矩阵 $\bar{Q} = (\bar{Q}_1, \bar{Q}_2)$, $Q(x) = (Q_1(x), Q_2(x)$ 满足：

$$\nabla^2 f(\bar{x}) = (\bar{Q}_1, \bar{Q}_2) \begin{pmatrix} \bar{\Lambda} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{Q}_1^T \\ \bar{Q}_2^T \end{pmatrix}, \qquad \nabla^2 f(x) = Q(x) \begin{pmatrix} \Lambda_1(x) & 0 \\ 0 & \Lambda_2(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_1(x)^T \\ Q_2(x)^T \end{pmatrix}.$$

(i) 证明：存在 $\bar{x}$ 的邻域 $U(\bar{x})$, 使得下面的等式对所有 $x \in U(\bar{x})$ 成立：

$$\|Q_2(x)^T \nabla f(x)\| = o(\text{dist}(x, X)).$$

(ii) 若 $\nabla f(x)$ 对 X 提供了一个局部误差界，证明：存在常数 $m > 0$ 使得

$$\|Q_1(x)^T \nabla f(x)\| \ge m\|x - \hat{x}\| = m \cdot \text{dist}(x, X),$$

$$\|Q_1(x)^T (x - \hat{x})\| \ge m\|x - \hat{x}\| = m \cdot \text{dist}(x, X),$$

其中， $\hat{x}$ 表示 x 到 X 的投影.

20. 类似于定理 3.2.2, 建立并证明采用非单调线性搜索 (2.10) 的 Newton 法的全局收敛性定理.

第四章　无约束问题算法 (II) — 拟 Newton 法

本章介绍求解无约束问题

$$\min f(x), \qquad x \in R^n \tag{4.1}$$

的拟 Newton 法. 假设 $f: R^n \to R$ 连续可微.

§4.1　拟 Newton 法及其性质

上一章介绍的 Newton 法具有二次收敛性. 但当 $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 不正定时，算法产生的方向不能保证是 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 特别，当 $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 奇异时，子问题 (3.3) 可能无解，即 Newton 方向可能不存在. 修正 Newton 法可克服 Newton 法的上述困难. 但在修正 Newton 法中，参数 $\nu_k > 0$ 的选取十分重要. 若参数 ν_k 过小，则相应的修正 Newton 方向仍不能保证是 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 参数 ν_k 太大，则会影响收敛速度. 此外， Newton 法及其修正形式都需要计算函数 f 的二阶导数. 下面介绍的拟 Newton 法可克服 Newton 法的上述缺陷. 而且，算法在一定的条件下具有较快的收敛速度 — 超线性收敛速度.

拟 Newton 法的基本思想是在 Newton 法的子问题 (3.3) 中用 $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 的某个近似矩阵 B_k 取代 $\nabla^2 f(x^{(k)})$. 矩阵 B_k 应具有如下三个特点：

- 在某种意义下有 $B_k \approx \nabla^2 f(x^{(k)})$, 使相应的算法产生的方向 (称为拟 Newton 方向) 是 Newton 方向的近似，以保证算法具有较快的收敛速度.
- 对所有的 k, B_k 对称正定，从而使得算法产生的方向是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向.
- 矩阵 B_k 容易计算.

下面介绍具有这三个特点的 B_k 的构造.

§4.1.1　拟 Newton 方程与 Dennis—Moré 条件

假设 f 二次连续可微. 利用多元函数 Taylor 展开得如下近似式:

$$\nabla f(x^{(k)}) \approx \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla^2 f(x^{(k+1)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}).$$

因此，使 B_k 近似于 $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 的一种合理的取法是：用 B_{k+1} 取代 $\nabla^2 f(x^{(k+1)})$ 时，上面的近似式成立等式，即 B_{k+1} 满足方程

$$B_{k+1} s^{(k)} = y^{(k)}, \tag{4.2}$$

其中， $s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$, $y^{(k)} = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})$. 方程 (4.2) 称为拟 Newton 方程或割线方程. 若令 $H_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$, 则拟 Newotn 方程 (4.2) 可等价地写成

$$H_{k+1} y^{(k)} = s^{(k)}. \tag{4.3}$$

注意到 $s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)} = \alpha_k d^{(k)}$, 拟 Newton 方程 (4.2) 表明矩阵 B_{k+1} 与 $\nabla^2 f(x^{(k+1)})$ 沿方向 $d^{(k)}$ 近似相等. 因而，拟 Newton 方向是 Newton 方向在某种意义上的一个近似. 下面的定理说明，当 B_k 满足一定的条件时，拟 Newton 法具有超线性收敛性.

定理 4.1.1 设函数 $f: R^n \to R$ 二次连续可微. 考察如下迭代过程

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}, \quad k = 0, 1, \ldots,$$

其中 $d^{(k)}$ 是线性方程组

$$B_k d + \nabla f(x^{(k)}) = 0 \tag{4.4}$$

的解. 设 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^* 且 $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*)$ 正定. 则 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛当且仅当

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|(B_k - \nabla^2 f(x^*))d^{(k)}\|}{\|d^{(k)}\|} = 0. \tag{4.5}$$

证明 由于 $\{x^{(k)}\} \to x^*$, 因此, (4.5) 等价于

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|(B_k - \nabla^2 f(x^{(k)}))d^{(k)}\|}{\|d^{(k)}\|} = 0.$$

注意到 $B_k d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$. 上式等价于

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|\nabla f(x^{(k)}) + \nabla^2 f(x^{(k)})d^{(k)}\|}{\|d^{(k)}\|} = 0.$$

因此, 若 (4.5) 成立, 由定理 2.5.2 即得 $\{x^{(k)}\}$ 的超线性收敛性.

反之, 设 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 x^*, 即

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x^{(k+1)} - x^*\|}{\|x^{(k)} - x^*\|} = 0. \tag{4.6}$$

由于 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$. 因此, (4.6) 包含了

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x^{(k)} - x^*\|}{\|d^{(k)}\|} = 1. \tag{4.7}$$

利用 (4.4) 得

$$\begin{aligned} \|(B_k - \nabla^2 f(x^*))d^{(k)}\| &= \|\nabla f(x^{(k)}) + \nabla^2 f(x^*)d^{(k)}\| \\ &\le \|\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*) - \nabla^2 f(x^*)(x^{(k)} - x^*)\| + \|\nabla^2 f(x^*)(x^{(k+1)} - x^*)\|. \end{aligned}$$

利用 f 的二次连续可微性, 并由上式及 (4.7), 不难推得 (4.5). **证毕**

注意到 $s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)} = d^{(k)}$, 条件 (4.5) 可等价地写成

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|(B_k - \nabla^2 f(x^*))s^{(k)}\|}{\|s^{(k)}\|} = 0.$$

上式或 (4.5) 称为 Dennis—Moré 条件.

当 $n > 1$ 时, 满足拟 Newton 方程 (4.2) 的矩阵 B_{k+1} 有很多. 确定 B_{k+1} 的原则之一是使其在计算上容易实现. 已有的拟 Newotn 法通过对 B_k 进行低秩修正产生 B_{k+1}, 即令

$$B_{k+1} = B_k + \Delta_k, \tag{4.8}$$

其中, 矩阵 Δ_k 是秩为 1 或 2 的矩阵. 下面给出几种常用的拟 Newton 修正公式.

§4.1.2 对称秩 1 (SR1) 修正公式

在 (4.8) 中取 Δ_k 为秩 1 的对称矩阵，即令 $\Delta_k = \beta_k u^{(k)} u^{(k)T}$, 其中， $\beta_k \in R$, $u^{(k)} \in R^n$. 由拟 Newton 方程 (4.2) 得

$$(B_k + \beta_k u^{(k)} u^{(k)T}) s^{(k)} = y^{(k)},$$

即有

$$\beta_k (u^{(k)T} s^{(k)}) u^{(k)} = y^{(k)} - B_k s^{(k)}. \tag{4.9}$$

上式说明，向量 $u^{(k)}$ 平行于 $y^{(k)} - B_k s^{(k)}$, 即存在 γ_k, 使得 $u^{(k)} = \gamma_k (y^{(k)} - B_k s^{(k)})$, 或

$$\Delta_k = \beta_k \gamma_k^2 (y^{(k)} - B_k s^{(k)})(y^{(k)} - B_k s^{(k)})^T.$$

从而，由 (4.9) 得

$$[\beta_k \gamma_k^2 (y^{(k)} - B_k s^{(k)})^T s^{(k)} - 1](y^{(k)} - B_k s^{(k)}) = 0.$$

若 $(y^{(k)} - B_k s^{(k)})^T s^{(k)} \neq 0$, 则有

$$\beta_k \gamma_k^2 = \frac{1}{(y^{(k)} - B_k s^{(k)})^T s^{(k)}}, \quad \Delta_k = \frac{(y^{(k)} - B_k s^{(k)})(y^{(k)} - B_k s^{(k)})^T}{(y^{(k)} - B_k s^{(k)})^T s^{(k)}}.$$

故得如下对称秩 1 修正公式：

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y^{(k)} - B_k s^{(k)})(y^{(k)} - B_k s^{(k)})^T}{(y^{(k)} - B_k s^{(k)})^T s^{(k)}}. \tag{4.10}$$

类似地，利用割线方程 (4.3), 对 H_k 进行对称秩 1 修正可得如下关于 H_k 的对称秩 1 修正公式：

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(s^{(k)} - H_k y^{(k)})(s^{(k)} - H_k y^{(k)})^T}{(s^{(k)} - H_k y^{(k)})^T y^{(k)}}. \tag{4.11}$$

§4.1.3 BFGS 修正公式与 BFGS 算法

在 (4.8) 中取 Δ_k 为秩为 2 的对称矩阵，即令 $\Delta_k = a_k u^{(k)} u^{(k)T} + b_k v^{(k)} v^{(k)T}$, 其中， a_k, b_k 是待定实数， $u^{(k)}, v^{(k)} \in R^n$ 是待定向量. 由拟 Newton 方程 (4.2) 得

$$B_k s^{(k)} + a_k (u^{(k)T} s^{(k)}) u^{(k)} + b_k (v^{(k)T} s^{(k)}) v^{(k)} = y^{(k)},$$

或等价地，

$$a_k (u^{(k)T} s^{(k)}) u^{(k)} + b_k (v^{(k)T} s^{(k)}) v^{(k)} = y^{(k)} - B_k s^{(k)}. \tag{4.12}$$

不难发现，满足上式的向量 $u^{(k)}$ 和 $v^{(k)}$ 不惟一. 取 $u^{(k)}$, $v^{(k)}$ 分别平行于 $B_k s^{(k)}$ 和 $y^{(k)}$, 即令 $u^{(k)} = \beta_k B_k s^{(k)}$, $v^{(k)} = \gamma_k y^{(k)}$, 其中， β_k 与 γ_k 是待定参数. 我们有

$$\Delta_k = a_k \beta_k^2 B_k s^{(k)} s^{(k)T} B_k + b_k \gamma_k^2 y^{(k)} y^{(k)T}.$$

由 (4.12) 得

$$[a_k \beta_k^2 (s^{(k)T} B_k s^{(k)}) + 1] B_k s^{(k)} + [b_k \gamma_k^2 (y^{(k)T} s^{(k)}) - 1] y^{(k)} = 0.$$

若向量 $y^{(k)}$ 与 $B_k s^{(k)}$ 不平行，则有

$$a_k\beta_k^2 = -\frac{1}{s^{(k)T}B_k s^{(k)}}, \qquad b_k\gamma_k^2 = \frac{1}{y^{(k)T}s^{(k)}}.$$

从而，

$$\Delta_k = -\frac{B_k s^{(k)} s^{(k)T} B_k}{s^{(k)T}B_k s^{(k)}} + \frac{y^{(k)}y^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}}.$$

故得如下秩 2 修正公式：

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s^{(k)} s^{(k)T} B_k}{s^{(k)T}B_k s^{(k)}} + \frac{y^{(k)}y^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}}. \tag{4.13}$$

公式 (4.13) 称为 BFGS(Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) 修正公式．显然，若 B_k 对称，则 B_{k+1} 也对称.

BFGS 修正公式有如下性质：

命题 4.1.1 *设 B_k 对称正定，B_{k+1} 由 BFGS 修正公式 (4.13) 确定．则当且仅当 $y^{(k)T}s^{(k)} > 0$ 时，B_{k+1} 对称正定.*

证明 注意到

$$y^{(k)T}s^{(k)} = s^{(k)T}B_{k+1}s^{(k)}.$$

若 B_{k+1} 正定，则显然有 $y^{(k)T}s^{(k)} > 0$.

下设 $y^{(k)T}s^{(k)} > 0$ 且 B_k 对称正定，我们证明对任何 $d \in R^n$ 且 $d \neq 0$, 有 $d^TB_{k+1}d > 0$.

由公式 (4.13) 得

$$d^TB_{k+1}d = d^TB_kd - \frac{(d^TB_ks^{(k)})^2}{s^{(k)T}B_ks^{(k)}} + \frac{(d^Ty^{(k)})^2}{y^{(k)T}s^{(k)}}. \tag{4.14}$$

由 B_k 的对称正定性，存在对称正定矩阵 $B_k^{1/2}$ 使得 $B_k = B_k^{1/2}B_k^{1/2}$. 利用 Cauchy-Schwarz 不等式：$|a^Tb| \le \|a\|\,\|b\|, \forall a, b \in R^n$ 得

$$(d^TB_ks^{(k)})^2 = [(B_k^{1/2}d)^T(B_k^{1/2}s^{(k)})]^2 \le \|B_k^{1/2}d\|^2\,\|B_k^{1/2}s^{(k)}\|^2 = (d^TB_kd)(s^{(k)T}B_ks^{(k)}). \tag{4.15}$$

上面的不等式成立等式的充要条件是存在数 $\lambda_k \neq 0$ 使得 $B_k^{1/2}d = \lambda_k B_k^{1/2}s^{(k)}$, 即 $d = \lambda_k s^{(k)}$.

因此，若不等式 (4.15) 为严格不等式，则由 (4.14) 得

$$d^TB_{k+1}d > d^TB_kd - d^TB_kd + \frac{(d^Ty^{(k)})^2}{y^{(k)T}s^{(k)}} = \frac{(d^Ty^{(k)})^2}{y^{(k)T}s^{(k)}} \ge 0.$$

若不等式 (4.15) 中等式成立，即有 $\lambda_k \neq 0$, 使得 $d = \lambda_k s^{(k)}$, 则由不等式 (4.14) 和等式 (4.15) 得

$$d^TB_{k+1}d \ge \frac{(d^Ty^{(k)})^2}{y^{(k)T}s^{(k)}} = \lambda_k^2 y^{(k)T}s^{(k)} > 0.$$

总之， $d^TB_{k+1}d > 0, \forall d \in R^n, d \neq 0$, 即 B_{k+1} 对称正定. **证毕**

上面的命题表明：若初始矩阵 B_0 对称正定，且在迭代时保证 $y^{(k)T}s^{(k)} > 0, \forall k \ge 0$, 则由修正公式 (4.13) 产生的矩阵序列 $\{B_k\}$ 是对称正定矩阵序列．从而，对所有的 k, 方程组 $B_kd + \nabla f(x^{(k)}) = 0$ 有惟一解 $d^{(k)}$. 而且，由定理 2.1.1 知， $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向.

下面的命题给出了保证 $y^{(k)T}s^{(k)} > 0, \forall k \ge 0$ 的条件.

命题 4.1.2 *设 $d^{(k)}$ 满足 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < 0$. 若下面的条件之一成立，则*

$$y^{(k)T} s^{(k)} > 0, \qquad \forall k \geq 0.$$

(1) *算法中采用精确线性搜索或 Wolfe-Powell 型线性搜索.*

(2) *函数 f 二次连续可微且对每个 $x \in R^n$, $\nabla^2 f(x)$ 正定.*

证明 (1) 对于精确线性搜索，我们有 $\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(k)} = 0$. 因此，

$$y^{(k)T} s^{(k)} = \alpha_k (\nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}))^T d^{(k)} = -\alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} > 0.$$

若采用 Wolfe-Powell 型线性搜索，则由 (2.7) 中的第二个不等式得

$$y^{(k)T} s^{(k)} = \alpha_k (\nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}))^T d^{(k)} \geq -(1-\sigma_2)\alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} > 0.$$

(2) 若 f 二次连续可微且 $\nabla^2 f(x)$ 对所有 $x \in R^n$ 正定，则由中值定理有

$$y^{(k)T} s^{(k)} = s^{(k)T} [\int_0^1 \nabla^2 f(x^{(k)} + \tau s^{(k)}) d\tau] s^{(k)} > 0.$$

证毕

上面的命题表明，若在 BFGS 算法中采用精确线性搜索或 Wolfe-Powell 型线性搜索，只要 B_0 对称正定，则由算法产生的矩阵序列 $\{B_k\}$ 是对称正定矩阵序列. 而且，当 BFGS 算法用于求解一致凸函数的极小值问题时，只要 B_0 对称正定，不论采用何种线性搜索，算法产生的矩阵序列 $\{B_k\}$ 是对称正定矩阵序列.

下面给出 BFGS 算法的步骤.

算法 4.1 (BFGS **算法**)

步 *1 取初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 初始对称正定矩阵 $B_0 \in R^{n\times n}$. 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.*

步 *2 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \epsilon$, 则算法终止. 得问题的解 $x^{(k)}$.*

步 *3 解线性方程组*

$$B_k d + \nabla f(x^{(k)}) = 0 \tag{4.16}$$

得解 $d^{(k)}$.

步 *4 由线性搜索确定步长 α_k.*

步 *5 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$. 若 $\|\nabla f(x^{(k+1)})\| \leq \epsilon$, 则得解 $x^{(k+1)}$. 否则，由 BFGS 修正公式 (4.13) 确定 B_{k+1}.*

步 *6 令 $k := k+1$. 转步 3.*

注：若在算法 4.1 的步 4 中采用 Armijo 型线性搜索，由于不能保证 $y^{(k)T}s^{(k)}>0$, 此时，B_k 的正定性不能由线性搜索保证. 为了保证采用 Armijo 型线性搜索时矩阵 B_k 的对称正定性，可采用如下的修正方式：

$$B_{k+1}=\begin{cases} B_k-\dfrac{B_k s^{(k)}s^{(k)T}B_k}{s^{(k)T}B_k s^{(k)}}+\dfrac{y^{(k)}y^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}}, & \text{若} y^{(k)T}s^{(k)}>0 \\ B_k, & \text{若} y^{(k)T}s^{(k)}\le 0. \end{cases} \tag{4.17}$$

不难看出，只要 B_0 对称正定，上述修正方式可保证矩阵序列 $\{B_k\}$ 为对称正定矩阵序列.

例 4.1.1 *用采用精确线性搜索的 BFGS 算法求解下面的无约束问题*

$$\min f(x)=\frac{1}{2}x_1^2+x_2^2-x_1x_2-2x_1.$$

取初始点 $x^{(0)}=(1,1)^T$, 初始矩阵 $B_0=I$ 为单位矩阵. 该问题的最优解为 $x^*=(4,2)^T$.

解 由计算得 $\nabla f(x)=(x_1-x_2-2,-x_1+2x_2)^T$. 对 $d=(d_1,d_2)^T$, 令

$$\phi(\alpha)=f(x+\alpha d)=\frac{1}{2}(x_1+\alpha d_1)^2+(x_2+\alpha d_2)^2-(x_1+\alpha d_1)(x_2+\alpha d_2)-2(x_1+\alpha d_1).$$

由 $\phi'(\alpha)=0$ (或公式 (2.4)) , 不难得到精确线性搜索的步长为

$$\alpha=-\frac{x_1d_1-x_2d_1-2d_1-x_1d_2+2x_2d_2}{(d_1-d_2)^2+d_2^2}.$$

取 $x^{(0)}=(1,1)^T$, $B_0=I\in R^{2\times 2}$. 有 $\nabla f(x^{(0)})=(-2,1)^T$. 对 $k=0$ 解线性方程组 (4.16) 得解 $d^{(0)}=(2,-1)^T$. 因此，$\alpha_0=\dfrac{1}{2}$. 从而

$$x^{(1)}=x^{(0)}+\alpha_0 d^{(0)}=(2,\frac{1}{2})^T, \qquad \nabla f(x^{(1)})=(-\frac{1}{2},-1)^T.$$

容易算得

$$s^{(0)}=x^{(1)}-x^{(0)}=\alpha_0 d^{(0)}=(1,-\frac{1}{2})^T, \qquad y^{(0)}=\nabla f(x^{(1)})-\nabla f(x^{(0)})=(\frac{3}{2},-2)^T.$$

故

$$B_1=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\frac{4}{5}&-\frac{2}{5}\\-\frac{2}{5}&\frac{1}{5}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\frac{9}{10}&-\frac{6}{5}\\-\frac{6}{5}&\frac{8}{5}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{11}{10}&-\frac{4}{5}\\-\frac{4}{5}&\frac{12}{5}\end{pmatrix}.$$

对 $k=1$ 解方程组 (4.16) 得解 $d^{(1)}=(1,3/4)^T$. $\alpha_1=2$, $x^{(2)}=x^{(1)}+\alpha_1 d^{(1)}=(4,2)^T$, $\nabla f(x^{(2)})=(0,0)^T$. 故 $x^*=x^{(2)}=(4,2)^T$.

利用 Sherman-Morrison 公式 (1.16), 不难导出 BFGS 修正公式的逆修正公式如下：

$$\begin{aligned} H_{k+1} &= \Big(I-\frac{s^{(k)}y^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}}\Big)H_k\Big(I-\frac{s^{(k)}y^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}}\Big)^T+\frac{s^{(k)}s^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}} \\ &= H_k+\frac{(s^{(k)}-H_ky^{(k)})s^{(k)T}+s^{(k)}(s^{(k)}-H_ky^{(k)})^T}{y^{(k)T}s^{(k)}} \\ &\quad -\frac{(s^{(k)}-H_ky^{(k)})^Ty^{(k)}}{(y^{(k)T}s^{(k)})^2}s^{(k)}s^{(k)T}, \end{aligned} \tag{4.18}$$

其中，$H_k=B_k^{-1}$, $H_{k+1}=B_{k+1}^{-1}$.

§4.1.4 Broyden 族算法及其性质

秩 2 修正拟 Newton 法中另一个著名的修正公式是 DFP(Davidon-Fletcher-Powell) 公式. 其修正公式如下:

$$\begin{aligned} B_{k+1} &= \Big(I - \frac{y^{(k)}s^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}}\Big)B_k\Big(I - \frac{y^{(k)}s^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}}\Big)^T + \frac{y^{(k)}y^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}} \\ &= B_k + \frac{(y^{(k)} - B_k s^{(k)})y^{(k)T} + y^{(k)}(y^{(k)} - B_k s^{(k)})^T}{y^{(k)T}s^{(k)}} \\ &\quad - \frac{(y^{(k)} - B_k s^{(k)})^T s^{(k)}}{(y^{(k)T}s^{(k)})^2} y^{(k)}y^{(k)T}. \end{aligned} \tag{4.19}$$

其逆修正公式为:

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k y^{(k)}y^{(k)T}H_k}{y^{(k)T}H_k y^{(k)}} + \frac{s^{(k)}s^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}}. \tag{4.20}$$

若将算法 4.1 中步 5 的修正公式用 DFP 公式 (4.19) 替换，则相应的算法称为 DFP 算法，其步骤与 BFGS 算法类似. 不再重复.

比较 BFGS 修正公式 (4.13) 与 DFP 修正公式 (4.19) 以及它们的逆修正公式 (4.18) 与 (4.20), 不难发现，两者之间有下面的关系:

$$B_{k+1} \longleftrightarrow H_{k+1}, \qquad B_k \longleftrightarrow H_k, \qquad s^{(k)} \longleftrightarrow y^{(k)}.$$

BFGS 修正公式与 DFP 修正公式间的上述关系称为对偶关系.

BFGS 公式与 DFP 公式的加权线性组合构成一类修正公式:

$$B_{k+1}^{\phi_k} = \phi_k B_{k+1}^{BFGS} + (1-\phi_k)B_{k+1}^{DFP}, \tag{4.21}$$

$$H_{k+1}^{\phi_k} = \phi_k H_{k+1}^{BFGS} + (1-\phi_k)H_{k+1}^{DFP}, \tag{4.22}$$

其中， B_{k+1}^{BFGS} 、 B_{k+1}^{DFP} 、 H_{k+1}^{BFGS} 和 H_{k+1}^{DFP} 分别由 BFGS 公式和 DFP 公式确定， ϕ_k 为参数. 修正公式 (4.21) 或 (4.22) 称为 Broyden 族修正公式. 相应的拟 Newton 法称为 Broyden 族算法.

类似于命题 4.1.1, 不难证明如下命题.

命题 4.1.3 *设 B_k 对称正定， $B_{k+1}^{\phi_k}$ 由 Broyden 族修正公式 (4.21) 或 (4.22) 确定且 $\phi_k \in [0,1]$. 则当且仅当 $y^{(k)T}s^{(k)} > 0$ 时， B_{k+1} 对称正定.*

Broyden 族算法还具有一个有用的性质 — 仿射不变性. 设 $A \in R^{n\times n}$ 非奇异， $a \in R^n$. 作仿射变换

$$x = Az + a.$$

考察求解如下无约束问题

$$\min F(z) = f(Az + a), \qquad z \in R^n \tag{4.23}$$

的 Broyden 族算法. 记 $\{x^{(k)}\}$ 和 $\{z^{(k)}\}$ 分别表示求解问题 (4.1) 和 (4.23) 的 Broyden 族算法产生的点列， $\{B_k^x\}$ 和 $\{B_k^z\}$ 分别表示算法产生的矩阵序列. 若令

$$x^{(0)} = Az^{(0)} + a, \qquad B_0^x = A^{-T}B_0^z A^{-1}. \tag{4.24}$$

注意到 $\nabla F(z^{(0)}) = A^T \nabla f(x^{(0)})$, 解相应的子问题

$$B_0^x d + \nabla f(x^{(0)}) = 0, \qquad B_0^z d + \nabla F(z^{(0)}) = 0$$

可得 $d_x^{(0)} = A d_z^{(0)}$. 令 α_k^x 和 α_k^z 分别表示求解问题 (4.1) 和 (4.23) 的 Broyden 族算法产生的步长. 则

$$x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0^x d_x^{(0)} = A(z^{(0)} + \alpha_0^x d_z^{(0)}) + a.$$

因此，若取 $\alpha_0^z = \alpha_0^x$, 则

$$z^{(1)} = z^{(0)} + \alpha_0^z d_z^{(0)} = z^{(0)} + \alpha_0^x d_z^{(0)}.$$

由此可得

$$s_x^{(0)} = A s_z^{(0)}, \qquad y_z^{(0)} = A^T y_x^{(0)}.$$

在此基础上，不难证明,

$$B_1^x = A^{-T} B_1^z A^{-1}.$$

利用归纳法，重复上述过程，可以证明：对所有 $k \geq 0$, 若取 $\alpha_k^x = \alpha_k^z$, 则有

$$x^{(k)} = A z^{(k)} + a, \quad B_k^x = A^{-T} B_k^z A^{-1},$$

即下面的定理成立.

定理 4.1.2 设 $\{x^{(k)}\}$ 和 $\{z^{(k)}\}$ 分别是由 *Broyden* 族算法求解问题 (4.1) 和 (4.23) 产生的点列，其中 $z^{(0)}$, B_0^z 满足 (4.24). 若取 $\alpha_k^x = \alpha_k^z$, 则

$$x^{(k)} = A z^{(k)} + a, \quad B_k^x = A^{-T} B_k^z A^{-1}, \qquad k = 0, 1, \ldots.$$

上面的定理也可以叙述为:

定理 4.1.3 设 $\{x^{(k)}\}$ 和 $\{z^{(k)}\}$ 分别是由 *Broyden* 族算法求解问题 (4.1) 和 (4.23) 产生的点列，其中 $z^{(0)}$, B_0^z 满足 (4.24). 若 $x^{(k)} = A z^{(k)} + a$, $\forall k = 0, 1, \ldots$, 则

$$\alpha_k^x = \alpha_k^z, \quad B_k^x = A^{-T} B_k^z A^{-1}, \qquad k = 0, 1, \ldots.$$

由定理 4.1.2 或 4.1.3 给出的性质称为仿射不变性.

§4.2 * 拟 Newton 法的收敛性理论

本节介绍拟 Newton 法的收敛性理论. 首先，我们指出，线性搜索对算法的收敛性有影响. 采用不同线性搜索的拟 Newton 法的收敛性质也不相同.

本节在大多数情况下，我们需用到如下假设条件.

假设 4.2.1 (1) 函数 $f: R^n \to R$ 二次连续可微.

(2) 水平集

$$\Omega(x^{(0)}) = \{x \in R^n \mid f(x) \leq f(x^{(0)})\}$$

是有界凸集且函数 f 在 $\Omega(x^{(0)})$ 上是一致凸函数. 故存在正常数 $m \leq M$, 使得

$$m\|d\|^2 \leq d^T \nabla^2 f(x) d \leq M\|d\|^2, \qquad \forall x \in \Omega(x^{(0)}),\ d \in R^n. \tag{4.25}$$

在假设 4.2.1 的条件下，我们有如下引理.

引理 4.2.1 设假设 *4.2.1* 成立，则序列

$$\left\{\frac{\|y^{(k)}\|}{\|s^{(k)}\|}\right\},\quad \left\{\frac{\|s^{(k)}\|}{\|y^{(k)}\|}\right\},\quad \left\{\frac{y^{(k)T}s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|^2}\right\},\quad \left\{\frac{y^{(k)T}s^{(k)}}{\|y^{(k)}\|^2}\right\},\quad \left\{\frac{\|y^{(k)}\|^2}{y^{(k)T}s^{(k)}}\right\}$$

都是有界序列.

证明 利用中值定理有

$$y^{(k)} = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}) = \Big(\int_0^1 \nabla^2 f(x^{(k)} + \tau s^{(k)})d\tau\Big)s^{(k)} \triangleq \bar{G}_k s^{(k)}.$$

注意到 $\Omega(x^{(0)})$ 是凸集，对任何 $\tau \in [0,1]$, $x^{(k)} + \tau s^{(k)} = (1-\tau)x^{(k)} + \tau x^{(k+1)} \in \Omega(x^{(0)})$. 由假设 4.2.1 中的条件 (2) 知，矩阵 $\bar{G}_k$ 一致正定. 故存在正常数 $m_1 \le M_1$ 使得

$$m_1\|s^{(k)}\| \le \|y^{(k)}\| \le M_1\|s^{(k)}\|, \qquad m_1\|s^{(k)}\|^2 \le y^{(k)T}s^{(k)} \le M_1\|s^{(k)}\|^2.$$

利用上面的不等式不难证明引理的结论. **证毕**

考察采用精确线性搜索的拟 Newton 法的收敛性. 下面的定理由 Dixon (1972) 给出.

定理 4.2.1 设 $f: R^n \to R$ 连续可微，水平集 $\Omega(x^{(0)})$ 有界. 设 B_0 对称正定. 则采用精确线性搜索的 *Broyden* 族算法 ($\phi_k \in [0,1]$) 产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 与 ϕ_k 无关.

定理 4.2.1 表明：从同一初始点和同一初始对称正定矩阵出发，采用精确线性搜索的 Broyden 族算法 ($\phi_k \in [0,1]$) 中的所有算法产生相同的点列. 因此，只要其中的算法之一收敛，则 Broyden 族算法中的任何一个算法都收敛.

Broyden 族算法中的 BFGS 算法 ($\phi_k = 1$) 的全局收敛性定理如下.

定理 4.2.2 设假设 *4.2.1* 成立. 则采用精确线性搜索或 *Wolfe-Powell* 型线性搜索的 *BFGS* 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于问题 (4.1) 的惟一极小值点 x^*.

为证明定理 4.2.2, 我们先证明几个引理.

引理 4.2.2 设假设 *4.2.1* 成立. 则存在常数 $C > 0$ 使得

$$\mathrm{tr}\ (B_k) \le Ck, \qquad \forall k \ge 0, \tag{4.26}$$

$$\frac{1}{k+1}\sum_{i=0}^{k}\frac{\|B_i s^{(i)}\|^2}{s^{(i)T}B_i s^{(i)}} \le C, \qquad \forall k \ge 0, \tag{4.27}$$

其中， $\mathrm{tr}(A)$ 表示矩阵 A 的迹.

证明 设 $C_1 > 0$ 是引理 4.2.1 中序列的上界. 在 (4.13) 两端求矩阵的迹得

$$\begin{aligned}\text{tr }(B_{k+1}) &= \text{tr }(B_k) - \frac{\|B_k s^{(k)}\|^2}{s^{(k)T} B_k s^{(k)}} + \frac{\|y^{(k)}\|^2}{y^{(k)T} s^{(k)}} \\ &\le \text{tr }(B_k) - \frac{\|B_k s^{(k)}\|^2}{s^{(k)T} B_k s^{(k)}} + C_1 \\ &\vdots \\ &\le \text{tr }(B_0) - \sum_{i=0}^{k} \frac{\|B_i s^{(i)}\|^2}{s^{(i)T} B_i s^{(i)}} + C_1(k+1).\end{aligned}$$

令 $C = \text{tr }(B_0) + C_1$, 则得 (4.26). 而且，由 B_{k+1} 的对称正定性， $\text{tr}(B_{k+1}) > 0$. 故得

$$\frac{1}{k+1} \sum_{i=0}^{k} \frac{\|B_i s^{(i)}\|^2}{s^{(i)T} B_i s^{(i)}} \le \text{tr }(B_0) + C_1 = C, \qquad \forall k \ge 0.$$

因此 (4.27) 也成立. **证毕**

引理 4.2.3 *设假设 4.2.1 成立，点列 $\{x^{(k)}\}$ 由采用精确线性搜索或 Wolfe-Powell 型线性搜索的 BFGS 算法产生. 则存在常数 $C_2 > 0$, 使得*

$$\|d^{(k)}\| \le C_2 \alpha_k^{-1} \|\nabla f(x^{(k)})\| \cos\theta_k, \tag{4.28}$$

其中， θ_k 表示 $d^{(k)}$ 与 $-\nabla f(x^{(k)})$ 间的夹角. 而且，存在常数 $\alpha > 0$, 使得算法产生的步长 α_k 满足

$$\prod_{i=0}^{k} \alpha_i \ge \alpha^{k+1}, \qquad \forall k \ge 0. \tag{4.29}$$

证明 先证明 (4.28). 由假设 4.2.1 中条件 (2) , 存在常数 $m_2 > 0$, 使得

$$y^{(k)T} s^{(k)} \ge m_2 \|s^{(k)}\|^2, \qquad \forall k \ge 0.$$

若采用精确线性搜索，我们有

$$\begin{aligned}m_2 \|s^{(k)}\|^2 &\le y^{(k)T} s^{(k)} = [\nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})]^T s^{(k)} \\ &= -\nabla f(x^{(k)})^T s^{(k)} = \|\nabla f(x^{(k)})\| \, \|s^{(k)}\| \cos\theta_k.\end{aligned}$$

此式包含了 (4.28).

若采用 Wolfe-Powell 型线性搜索，利用 Taylor 展开得

$$\begin{aligned}f(x^{(k+1)}) &= f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T s^{(k)} + \frac{1}{2} s^{(k)T} \nabla^2 f(x^{(k)} + \mu_k s^{(k)}) s^{(k)} \\ &\ge f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T s^{(k)} + \frac{1}{2} m_1 \|s^{(k)}\|^2,\end{aligned}$$

其中， $\mu_k \in (0,1)$. 上式代入 (2.7) 的第一个不等式得

$$\frac{1}{2} m_1 \|s^{(k)}\|^2 \le -(1-\sigma_1) \nabla f(x^{(k)})^T s^{(k)} = (1-\sigma_1) \|\nabla f(x^{(k)})\| \, \|s^{(k)}\| \cos\theta_k.$$

由此亦得 (4.28).

再证明 (4.29). 在 (4.13) 两端取行列式，利用公式 (1.18) 得

$$\det(B_{k+1}) = \det(B_k)\cdot\frac{y^{(k)T}s^{(k)}}{s^{(k)T}B_ks^{(k)}} = \det(B_0)\prod_{i=0}^{k}\frac{y^{(i)T}s^{(i)}}{s^{(i)T}B_is^{(i)}}. \tag{4.30}$$

若采用精确线性搜索，我们有

$$y^{(k)T}s^{(k)} = [\nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})]^Ts^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})^Ts^{(k)} = \alpha_k^{-1}s^{(k)T}B_ks^{(k)}.$$

若采用 Wolfe-Powell 型线性搜索，由 (2.7) 中的第二个不等式得

$$\begin{aligned} y^{(k)T}s^{(k)} &= [\nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})]^Ts^{(k)} \ge -(1-\sigma_2)\nabla f(x^{(k)})^Ts^{(k)} \\ &= (1-\sigma_2)\alpha_k^{-1}s^{(k)T}B_ks^{(k)}. \end{aligned}$$

总之，存在常数 $\beta>0$, 使得

$$y^{(k)T}s^{(k)} \ge \beta\alpha_k^{-1}s^{(k)T}B_ks^{(k)}.$$

将上式代入到 (4.30) 得

$$\det(B_{k+1}) \ge \det(B_0)\beta^{k+1}\prod_{i=0}^{k}\alpha_i^{-1}. \tag{4.31}$$

另一方面，由行列式的性质及 (4.26) 知

$$\det(B_{k+1}) \le \Big(\frac{1}{n}\mathrm{tr}(B_{k+1})\Big)^n \le \Big(\frac{C(k+1)}{n}\Big)^n.$$

因此，存在常数 $\beta_1>0$, 使得

$$\det(B_{k+1}) \le \beta_1^{k+1}.$$

由此及 (4.31) 得

$$\prod_{i=0}^{k}\alpha_i \ge \det(B_0)(\beta\beta_1^{-1})^{k+1}.$$

不难看出，上式包含了 (4.29). **证毕**

在上面的基础上，我们来证明定理 4.2.2.

定理 4.2.2 的证明： 我们先证明：

$$\liminf_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\| = 0. \tag{4.32}$$

由 (4.27) 及几何不等式得，对任何 $k\ge 0$,

$$\prod_{i=0}^{k}\Big(\frac{\|B_is^{(i)}\|^2}{s^{(i)T}B_is^{(i)}}\Big)^{\frac{1}{k+1}} \le \frac{1}{k+1}\sum_{i=0}^{k}\frac{\|B_is^{(i)}\|^2}{s^{(i)T}B_is^{(i)}} \le C.$$

记 θ_k 为 $d^{(k)}$ 与 $-\nabla f(x^{(k)})$ 的夹角. 由上面的不等式可得

$$C^{-(k+1)} \le \prod_{i=0}^{k}\frac{s^{(i)T}B_is^{(i)}}{\|B_is^{(i)}\|^2} = \prod_{i=0}^{k}\frac{(-\nabla f(x^{(i)})^Td^{(i)})}{\|\nabla f(x^{(i)})\|^2} = \prod_{i=0}^{k}\frac{\|d^{(i)}\|\cos\theta_i}{\|\nabla f(x^{(i)})\|} \le \prod_{i=0}^{k}\frac{C_2\cos^2\theta_i}{\alpha_i},$$

其中最后一个不等式由 (4.28) 得到. 从而, 由 (4.29) 及上式得

$$\prod_{i=0}^{k} \cos^2 \theta_i \geq (\alpha C^{-1} C_2^{-1})^{k+1},$$

即定理 2.4.4 中的不等式 (2.20) 成立. 于是, 由定理 2.4.4 得 (4.32). 进而, 由第二章习题知 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 f 的惟一最小值点. **证毕**

由定理 4.2.1 和定理 4.2.2 可直接建立采用精确线性搜索的 Broyden 族算法的全局收敛性定理.

定理 4.2.3 设定理 *4.2.2* 中的条件成立. 则采用精确搜线性搜索 *Broyden* 族算法 $(\phi_k \in [0,1])$ 产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于问题 (4.1) 在 $\Omega(x^{(0)})$ 上的惟一极小值点.

对采用 Wolfe-Powell 型线性搜索的 Broyden 族算法, 我们有类似的收敛性定理.

定理 4.2.4 设假设 *4.2.1* 的条件成立. 则采用 *Wolfe-Powell* 型线性搜索的 *Broyden* 族算法 $(\phi_k \in (0,1])$ 产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于问题 (4.1) 在 $\Omega(x^{(0)})$ 上的惟一极小值点.

上面的全局收敛性定理中的条件可放宽为 f 是凸函数. 相应的定理如下. 有关证明可参看 [27, 第 5 章].

定理 4.2.5 设 f 是二次连续可微的凸函数, f 在水平集 $\Omega(x^{(0)})$ 上有界, 且存在常数 $M > 0$, 使得

$$\|\nabla^2 f(x)\| \leq M, \qquad \forall x \in \Omega(x^{(0)}).$$

则采用 *Wolfe-Powell* 型线性搜索的 *Broyden* 族算法当 $\phi_k \in (0,1]$ 时产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 满足

$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0.$$

上面的关于拟 Newton 法的全局收敛性定理只考虑采用精确线性搜索或 Wolfe-Powell 型线性搜索的算法. 如前所述, 若采用 Armijo 型线性搜索, 当 $\nabla^2 f(x)$ 不正定时, 算法不能保证 $y^{(k)T}s^{(k)} > 0$. 此时, BFGS 法或 Broyden 族算法产生的矩阵 B_{k+1} 不一定对称正定. 因而, 相应的拟 Newton 方向可能不是 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 为了克服这一缺陷, 可采用如下的修正形式:

$$B_{k+1} = \begin{cases} B_k - \dfrac{B_k s^{(k)} s^{(k)T} B_k}{s^{(k)T} B_k s^{(k)}} + \dfrac{y^{(k)} y^{(k)T}}{y^{(k)T} s^{(k)}} & \text{若} \quad y^{(k)T} s^{(k)} > 0, \\ B_k, & \text{若} \quad y^{(k)T} s^{(k)} \leq 0. \end{cases} \tag{4.33}$$

类似于定理 4.2.2 的证明, 可建立采用 Armijo 型线性搜索的 BFGS 算法的全局收敛性定理.

定理 4.2.6 设假设 *4.2.1* 成立. 则采用 *Armijo* 型线性搜索的 *BFGS* 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于问题 (4.1) 的惟一极小值点 x^*.

Broyden 族算法的超线性收敛性定理如下.

定理 4.2.7 设假设 4.2.1 成立. 并设函数 f 的 Hessian 阵 $\nabla^2 f$ 在 x^* 处 Hölder 连续, 即存在 x^* 的一个邻域 $U(x^*)$ 以及正常数 ν, H, 使得不等式

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(x^*)\| \le H\|x - x^*\|^\nu \tag{4.34}$$

对所有 $x \in U(x^*)$ 成立. 则由采用 Armijo 型线性搜索或 Wolfe-Powell 型线性搜索的 Broyden 族算法 ($\phi_k \in (0,1]$) 产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 x^*. 而且, 当 k 充分大时, $\alpha_k = 1$.

§4.3 * 拟 Newton 法的修正形式

上一节中介绍的 BFGS 算法以及 Broyden 族算法的全局收敛性要求目标函数 f 是凸函数. 当用于非凸函数极小值问题求解时, 有例子说明, 采用精确线性搜索或 Wolfe-Powell 搜索的 BFGS 算法不收敛 [5, 18]. 为了克服 BFGS 算法的这种缺陷, 本节, 我们介绍修正的 BFGS 算法 — MBFGS(Modified BFGS) 算法以及保守 BFGS 修正算法 — CBFGS(Cautious BFGS) 算法. 我们将简要介绍相应的算法及其收敛性质. 详细内容可参看 [15, 16].

由于 Newton 法的收敛性定理 — 定理 3.2.2 要求 f 是凸函数. 因此, 作为其近似算法 — 拟 Newton 法的全局收敛性也要求函数 f 是凸的. 另一方面, 在修正 Newton 算法 3.3 的全局收敛性定理 — 定理 3.2.4 中, 不必要求 f 是凸函数. 基于上述观察, 我们考虑对拟 Newton 算法进行修改, 使其是修正 Newton 法的近似算法.

设 f 二次连续可微. 注意到 $\nabla^2 f(x^{(k+1)})$ 满足

$$\nabla^2 f(x^{(k+1)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \approx \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}) \triangleq \gamma^{(k)}.$$

令 $\bar{G}_{k+1} = \nabla^2 f(x^{(k+1)}) + \nu_k I$, 其中, $I \in R^{n\times n}$ 是单位矩阵, $\nu_k > 0$. 当 ν_k 充分小时, 有 $\bar{G}_{k+1} \approx \nabla^2 f(x^{(k+1)})$. 易知, $\bar{G}_{k+1}$ 满足如下近似关系:

$$\bar{G}_{k+1}(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = (\nabla^2 f(x^{(k+1)}) + \nu_k I)(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \approx \gamma^{(k)} + \nu_k(x^{(k+1)} - x^{(k)}).$$

令 $s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$, $y^{(k)} = \gamma^{(k)} + \nu_k s^{(k)}$, 则得如下近似关系:

$$\bar{G}_{k+1}s^{(k)} \approx y^{(k)}.$$

对拟 Newton 法进行修正的一种合理的方式是令 B_{k+1} 作为 $\bar{G}_{k+1}$ 的一种近似, 使得上面的近似式成立等式, 即

$$B_{k+1}s^{(k)} = y^{(k)}. \tag{4.35}$$

我们先考虑修正的 BFGS 算法 — MBFGS 算法, 其修正公式如下:

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s^{(k)} s^{(k)T} B_k}{s^{(k)T} B_k s^{(k)}} + \frac{y^{(k)} y^{(k)T}}{y^{(k)T} s^{(k)}}, \tag{4.36}$$

其中,

$$s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}, \qquad y^{(k)} = \gamma^{(k)} + \nu_k s^{(k)} = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}) + \nu_k(x^{(k+1)} - x^{(k)}).$$

不难发现， MBFGS 修正公式 (4.36) 与标准的 BFGS 修正公式的惟一区别在于 $y^{(k)}$ 的定义. 若 $\nu_k=0$, 则修正的 BFGS 公式与标准 BFGS 公式完全一致.

在修正的 BFGS 算法中，参数 ν_k 的确定十分重要. 由定理 3.2.4, 若 ν_k 满足 $\nu_k \le C\|\nabla f(x^{(k)})\|$, 则相应的修正 Newton 算法具有二次收敛速度. 因此，作为修正 Newton 算法的近似算法，修正的 BFGS 算法中的参数 ν_k 也应满足 $\nu_k \le C\|\nabla f(x^{(k)})\|$. 确定 ν_k 的另一个原则是使得算法产生的矩阵序列 $\{B_k\}$ 具有对称正定性. 由命题 4.1.1 后的说明知，若采用精确线性搜索或 Wolfe-Powell 型线性搜索，则只要 B_k 对称正定，就可保证 B_{k+1} 对称正定. 但精确线性搜索或 Wolfe-Powell 型线性搜索的计算量较大. 若采用计算量较小的 Armijo 型线性搜索，则 B_{k+1} 的正定性不能保证.

为了保证 B_{k+1} 的对称正定性，我们可以通过对参数 ν_k 的调整，使得

$$y^{(k)T}s^{(k)}>0, \qquad \forall k\ge 0.$$

满足上式的 ν_k 的取法有许多，例如， ν_k 可由下式确定：

$$\nu_k=Ct_k\|\nabla f(x^{(k)})\|^{\mu}, \qquad t_k=1+\max\Big\{-\frac{\gamma^{(k)T}s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|^2},\ 0\Big\}C^{-1}\|\nabla f(x^{(k)})\|^{-\mu}, \tag{4.37}$$

其中， $\mu>0$ 和 $C>0$ 是常数. 此时，我们有

$$\begin{aligned} y^{(k)T}s^{(k)} &= \gamma^{(k)T}s^{(k)}+Ct_k\|\nabla f(x^{(k)})\|^{\mu}\|s^{(k)}\|^2 \\ &= C\|\nabla f(x^{(k)})\|^{\mu}\|s^{(k)}\|^2+\gamma^{(k)T}s^{(k)}+\|s^{(k)}\|^2\max\Big\{-\frac{\gamma^{(k)T}s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|^2},\ 0\Big\} \\ &\ge C\|\nabla f(x^{(k)})\|^{\mu}\|s^{(k)}\|^2. \end{aligned}$$

在上面的基础上，利用命题 4.1.1 可得如下定理.

定理 4.3.1 *设 $\{B_k\}$ 由修正 BFGS 公式 (4.36) 产生，其中， ν_k 由 (4.37) 确定. 若 B_0 对称正定，则对所有 $k\ge 0$, 矩阵 B_k 对称正定.*

值得注意的是，上面的定理与算法的线性搜索以及函数 f 的凸性无关.

若将算法 4.1 中步 5 的修正方式改为 MBFGS 公式 (4.36), 则相应的算法称为 MBFGS 算法. MBFGS 算法的全局收敛性定理如下.

定理 4.3.2 *设水平集*

$$\Omega(x^{(0)})=\{x\in R^n \mid f(x)\le f(x^{(0)})\}$$

有界. D 是包含了 $\Omega(x^{(0)})$ 的某个有界闭凸集. 函数 f 在 D 上连续可微且其梯度 ∇f Lipschitz 连续. 则采用精确线性搜索或 Armijo 型或 Wolfe-Powell 型线性搜索的 MBFGS 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 满足

$$\liminf_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\|=0.$$

MBFGS 算法的超线性收敛性定理如下 (证明参看 [15]).

定理 4.3.3 设下列条件成立

(1) 由 *MBFGS* 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^*.

(2) 函数 f 在 x^* 的某邻域内二次连续可微且 $\nabla f(x^*)=0$, $\nabla^2 f(x^*)$ 对称正定.

(3) 函数 f 的 *Hessian* 阵 $\nabla^2 f$ 在 x^* 处 *Hölder* 连续.

则采用 *Armijo* 型或 *Wolfe-Powell* 型线性搜索的 *MBFGS* 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 x^*. 而且，当 k 充分大时，$\alpha_k=1$.

MBFGS 算法的一个重要的优点是：该算法用于求解非凸函数极小值问题时也具有全局收敛性. 而且，$\{B_k\}$ 的对称正定性与算法的线性搜索以及目标函数的凸性无关. 但该算法破坏了 BFGS 算法的仿射不变性质，即定理 4.1.2 的结论对 MBFGS 算法不成立.

为了克服 MBFGS 算法的这一缺陷，同时，保持算法对求解非凸函数极小值问题的全局收敛性及其超线性收敛速度，可采用保守 BFGS 修正 — CBFGS(Cautious BFGS) 修正方式.

CBFGS 修正方式如下：

$$B_{k+1}=\begin{cases} B_k-\dfrac{B_k s^{(k)}s^{(k)T}B_k}{s^{(k)T}B_k s^{(k)}}+\dfrac{y^{(k)}y^{(k)T}}{y^{(k)T}s^{(k)}}, & \text{若}\quad \dfrac{y^{(k)T}s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|^2}>\delta\|\nabla f(x^{(k)})\|^{\mu},\\ B_k, & \text{若}\quad \dfrac{y^{(k)T}s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|^2}\le\delta\|\nabla f(x^{(k)})\|^{\mu}, \end{cases} \tag{4.38}$$

其中，$\delta>0,\mu>0$ 是常数，$s^{(k)}=x^{(k+1)}-x^{(k)}, y^{(k)}=\nabla f(x^{(k+1)})-\nabla f(x^{(k)})$.

比较 (4.38) 与 (4.33) 不难看出，两者在形式上类似，但 CBFGS 公式 (4.38) 较 (4.33) 公式保守.

容易看出，若 B_0 对称正定，则由 CBFGS 公式产生的矩阵序列 $\{B_k\}$ 满足 $y^{(k)T}s^{(k)}>0$. 因此，对所有 $k\ge 0$, 矩阵 B_k 对称正定. 该性质与算法的线性搜索以及函数 f 的凸性无关. 此外，若不等式

$$\frac{y^{(k)T}s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|^2}>\delta\|\nabla f(x^{(k)})\|^{\mu}$$

成立，则算法还原为标准的 BFGS 算法. 因而，算法的仿射不变性成立. 事实上，由后面的定理 4.3.5 可以看出，在一定的条件下，当 k 充分大时，CBFGS 算法还原为标准的 BFGS 算法.

若将算法 4.1 中步 5 的修正方式改为 CBFGS 公式 (4.38), 则相应的算法称为 CBFGS 算法. CBFGS 算法的全局收敛性定理如下.

定理 4.3.4 设定理 *4.3.2* 的条件成立. 则采用精确线性搜索或 *Armijo* 型或 *Wolfe-Powell* 型线性搜索的 *CBFGS* 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 满足

$$\liminf_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\|=0.$$

CBFGS 算法的超线性收敛性定理如下.

定理 4.3.5 设定理 *4.3.3* 的条件成立. 则采用 *Armijo* 型或 *Wolfe-Powell* 型线性搜索的 *CBFGS* 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 x^*. 此外，当 k 充分大时，$\alpha_k=1$, 而且，算法还原为标准的 *BFGS* 算法，即不等式

$$y^{(k)T}s^{(k)}>\delta\|\nabla f(x^{(k)})\|^{\mu}\|s^{(k)}\|^2$$

对充分大的 k 均成立.

习题 4

1. 设正数序列 $\{\sigma_k\}$ 和 $\{a_k\}$ 满足

$$a_{k+1} \le (1+\sigma_k)a_k + \sigma_k, \qquad \sum_{k=0}^{\infty} \sigma_k < \infty.$$

证明序列 $\{a_k\}$ 的极限存在.

2. 设 $f: R^n \to R$ 二次连续可微. 考察求解严格凸二次函数极小值问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + q^T x,$$

的如下迭代格式: $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k = 0, 1, \ldots$, 其中 $d^{(k)}$ 是线性方程组 $B_k d + \nabla f(x^{(k)}) = 0$ 的解, B_k 对称正定. 假设 $\{x^{(k)}\} \to x^*$, $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*)$ 正定.

(i) 若 α_k 由精确线性搜索产生, 证明

$$\frac{f(x^{(k+1)}) - f(x^*)}{f(x^{(k)}) - f(x^*)} \le \Big(\frac{\lambda_k^{\max} - \lambda_k^{\min}}{\lambda_k^{\max} + \lambda_k^{\min}}\Big)^2,$$

其中 $\lambda_k^{\max}$ 和 $\lambda_k^{\min}$ 分别表示 $B_k^{-1/2} Q B_k^{-1/2}$ 的最大、最小特征值.

(ii) 证明下面的不等式:

$$\frac{(x^{(k+1)} - x^*)^T B_k (x^{(k+1)} - x^*)}{(x^{(k)} - x^*)^T B_k (x^{(k)} - x^*)} \le \max\{|1 - \alpha_k \lambda_k^{\min}|^2,\ |1 - \alpha_k \lambda_k^{\max}|^2\}.$$

3. 设 $f: R^n \to R$ 二次连续可微. 考察求解 (4.1) 的如下迭代格式: $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k = 0, 1, \ldots$, 其中 $d^{(k)}$ 是线性方程组 $B_k d + \nabla f(x^{(k)}) = 0$ 的解, B_k 对称正定. 假设 $\{x^{(k)}\} \to x^*$, $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*)$ 正定.

(i) 若 α_k 由精确线性搜索产生, 证明

$$\limsup_{k\to\infty} \frac{f(x^{(k+1)}) - f(x^*)}{f(x^{(k)}) - f(x^*)} \le \limsup_{k\to\infty} \Big(\frac{\lambda_k^{\max} - \lambda_k^{\min}}{\lambda_k^{\max} + \lambda_k^{\min}}\Big)^2,$$

其中 $\lambda_k^{\max}$ 和 $\lambda_k^{\min}$ 分别表示 $B_k^{-1/2} \nabla^2 f(x^*) B_k^{-1/2}$ 的最大、最小特征值.

(ii) 证明下面的不等式:

$$\limsup_{k\to\infty} \frac{(x^{(k+1)} - x^*)^T B_k (x^{(k+1)} - x^*)}{(x^{(k)} - x^*)^T B_k (x^{(k)} - x^*)} \le \limsup_{k\to\infty} \max\{|1 - \alpha_k \lambda_k^{\min}|^2,\ |1 - \alpha_k \lambda_k^{\max}|^2\}.$$

4. 考察求解严格凸二次函数极小值问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + q^T x$$

的如下迭代格式:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}, \quad k = 0, 1, \ldots,$$

其中 $d^{(k)}$ 是线性方程组 $B_k d + \nabla f(x^{(k)}) = 0$ 的解 (或 $d^{(k)} = -H_k \nabla f(x^{(k)})$), B_k(或 H_k) 由对称秩一修正公式 (4.10)(或 (4.11) 确定. 从任一点 $x^{(0)}$ 出发, 假设算法一直可以进行.

(i) 证明: 对任何 $k \ge 1$,

$$B_k s^{(j)} = y^{(j)}, \quad (H_k y^{(j)} = s^{(j)}), \quad j = 0, 1, \ldots, k-1. \tag{4.39}$$

(ii) 若对某个 k, $d^{(k)}$ 可由 $d^{(i)}$, $i=0,1,\dots,k-1$ 线性表出．证明：若 H_k 非奇异，则 $x^{(k+1)}$ 是问题的解.

(iii) 若再假设算法进行了 n 步，且产生的方向 $d^{(k)}$, $k=0,1,\dots,n-1$ 线性无关，证明 $B_n=A$(或 $H_n=Q^{-1}$).

(iv) 算法最多经 n 步后终止于问题的解.

5. 用采用精确线性搜索的 BFGS 算法求解下面的无约束问题：

(i)

$$\min f(x)=\frac{1}{2}x_1^2+x_2^2-x_1x_2-x_1.$$

(ii)

$$\min f(x)=\frac{1}{2}x_1^2+x_2^2-x_1x_2.$$

给定初始点 $x^{(0)}=(0,1)^T$, 初始矩阵 $B_0=I$.

6. 设 $f:R^n\to R$ 二次连续可微．$x^*\in R^n$ 满足 $\nabla f(x^*)=0$, $\nabla^2 f(x^*)$ 正定．设 $\{B_k\}$ 为对称正定矩阵序列，点列 $\{x^{(k)}\}$ 由下面的方式确定：

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)},\quad k=0,1,\dots,$$

其中 $d^{(k)}$ 满足 $B_k d^{(k)}+\nabla f(x^{(k)})=0$, α_k 分别由精确线性搜索， Armijo 或 Wolfe-Powell 型线性搜索产生．若 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^* 且

$$\lim_{k\to\infty}\frac{\|(B_k-\nabla^2 f(x^*))d^{(k)}\|}{\|d^{(k)}\|}=0,$$

则有

$$\lim_{k\to\infty}\alpha_k=1.$$

而且， $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 x^*.

7. 设 B_k 对称正定， B_{k+1} 由 BFGS 修正公式 (4.13) 确定．利用 (1.18) 证明：

$$\det(B_{k+1})=\det(B_k)\cdot\frac{y^{(k)T}s^{(k)}}{s^{(k)T}B_k s^{(k)}}.$$

8. 利用 Shermann-Morrison 公式 (1.16) 导出 BFGS 公式的逆修正公式 (4.18).

9. 设 B_k 对称正定， B_{k+1} 由 Broyden 族修正公式 (4.21) 确定，其中 $\phi_k\in[0,1]$. 证明： B_{k+1} 正定的充要条件是 $y^{(k)T}s^{(k)}>0$.

10. 设 $f\in C^2$, $\{x^{(k)}\}$, $\{B_k\}$ 由采用 Wolfe-Powell 型线性搜索的 BFGS 算法产生且 B_0 对称正定．再设存在常数 $M\ge m>0$, 使得

$$m\|d\|^2\le d^T\nabla^2 f(x)d\le M\|d\|^2,\quad \forall x,d\in R^n.$$

设 x^* 是 f 的惟一极小值点.

(i) 证明：

$$f(x)-f(x^*)\ge\frac{1}{2}m\|x-x^*\|^2,\qquad \forall x\in R^n.$$

而且，存在常数 $m_1>0$, 使得

$$\|\nabla f(x)\|\ge m_1\|x-x^*\|,\qquad \forall x\in R^n.$$

(ii) 记 θ_k 为 $-\nabla f(x^{(k)})$ 和 $d^{(k)}$ 间的夹角，即

$$\cos\theta_k=-\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|\nabla f(x^{(k)})\|\,\|d^{(k)}\|}.$$

证明：存在正常数 $c_1 \le C_1$, 使得

$$c_1\|\nabla f(x^{(k)})\|\cos\theta_k \le \|s^{(k)}\| \le C_1\|\nabla f(x^{(k)})\|\cos\theta_k, \quad k=0,1,\ldots.$$

而且,

$$f(x^{(k+1)})-f(x^*) \le (1-\sigma_1 c_1 m\alpha_k\cos^2\theta_k)(f(x^{(k)})-f(x^*)), \qquad k=0,1,\ldots.$$

(iii) 证明：存在正常数 $c_2 \le C_2$, 使得

$$c_2\frac{s^{(k)T}B_k s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|^2} \le \alpha_k \le C_2\frac{s^{(k)T}B_k s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|^2}, \qquad k=0,2,\ldots.$$

11. 设 $f\in C^2$, $\{x^{(k)}\}$, $\{B_k\}$ 由采用精确线性搜索的 DFP 算法产生且 B_0 对称正定. 记 $H_k=B_k^{-1}$, $g_k=\nabla f(x^{(k)})$, $k=0,1,\ldots$. 再设存在常数 $M\ge m>0$, 使得

$$m\|d\|^2 \le d^T\nabla^2 f(x)d \le M\|d\|^2, \quad \forall x,d\in R^n.$$

(i) 证明：对任意 $k=0,1,\ldots$, 有

$$g_{k+1}^T H_{k+1}g_{k+1} = \frac{(g_k^T H_k g_k)(g_{k+1}^T H_k g_{k+1})}{g_k^T H_k g_k + g_{k+1}^T H_k g_{k+1}}.$$

从而,

$$\frac{1}{g_{k+1}^T H_{k+1}g_{k+1}} = \frac{1}{g_{k+1}^T H_k g_{k+1}} + \frac{1}{g_k^T H_k g_k}, \quad k=0,1,\ldots.$$

(ii) 证明：对任意 $k=0,1,\ldots$, 有

$$\mathrm{tr}\,(B_{k+1}) = \mathrm{tr}\,(B_k) + \frac{\|g_{k+1}\|^2}{g_{k+1}^T H_{k+1}g_{k+1}} - \frac{\|g_k\|^2}{g_k^T H_k g_k} - \frac{\|g_{k+1}\|^2}{g_{k+1}^T H_k g_{k+1}} + \frac{\|y^{(k)}\|^2}{y^{(k)T}s^{(k)}}.$$

12. 对对称正定矩阵 $B\in R^{n\times n}$, 定义函数 ψ 如下

$$\psi(B)=\mathrm{tr}\,(B)-\ln(\det(B)).$$

证明如下结论.

(i) 对任何对称正定矩阵 B, 下面的不等式成立：

$$\psi(B)\ge n, \quad \psi(B)>\ln\lambda_n-\ln\lambda_1,$$

其中 λ_n 和 λ_1 分别表示矩阵 B 的最大和最小特征值.

(ii) 当且仅当 $B=I$ 为单位矩阵时， ψ 达到最小值 n.

13. 设 $\{B_k\}$ 由 BFGS 修正公式 (4.13) 产生且 B_0 对称正定. 若存在常数 $m>0$, $M>0$ 使得

$$\frac{y^{(k)T}s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|^2}\ge m, \quad \frac{\|y^{(k)}\|^2}{y^{(k)T}s^{(k)}}\le M, \qquad \forall k\ge 0.$$

则存在常数 $\beta_i>0$, $i=1,2,3$, 使得下面的不等式至少对 $\lceil k/2\rceil$ 个指标 $i\in\{1,2,\ldots,k\}$ 成立：

$$\beta_1\|s^{(i)}\|^2 \le s^{(i)T}B_i s^{(i)} \le \beta_2\|s^{(i)}\|^2, \quad \|B_i s^{(i)}\|\le\beta_3\|s^{(i)}\|. \tag{4.40}$$

14. 证明采用 Armijo 型线性搜索的 BFGS 算法的全局收敛性定理，即定理 4.2.6.

15. 设假设 4.2.1 的条件成立, $\{x^{(k)}\}$ 由采用 Wolfe-Powell 型线性搜索的 BFGS 算法产生. 证明:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|x^{(k)} - x^*\| < \infty,$$

其中, x^* 是 f 在 $\Omega(x^{(0)})$ 上的惟一极小值点.

16. 设 f 连续可微有下界. 证明: 若从同一初始点和同一初始对称正定矩阵出发, 采用精确线性搜索的 Broyden 族中的所有算法 ($\phi_k \in [0,1]$) 产生的方向为同一方向 (即相互平行).

17. 设假设 2.4.1 的条件成立. $\{B_k\}$ 由 MBFGS 修正公式 (4.36) 产生且 B_0 对称正定. 若存在常数 $\epsilon > 0$ 使得 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \ge \epsilon, \forall k \ge 0$, 则第 13 题的结论成立.

18. 设假设 2.4.1 的条件成立. $\{x^{(k)}\}$ 由采用 Armijo 型线性搜索的 MBFGS 算法产生且 B_0 对称正定. 记 K 为使得 (4.40) 成立的指标 i 构成的集合. 证明: 若存在常数 $\epsilon > 0$ 使得 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \ge \epsilon, \forall k \ge 0$, 则 $\{\alpha_i\}_{i\in K}$ 有正的下界.

19. 设假设 2.4.1 的条件成立. $\{x^{(k)}\}$ 由采用 Armijo 型线性搜索的 MBFGS 算法产生且 B_0 对称正定. 设存在常数 $\epsilon > 0$ 使得 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \ge \epsilon, \forall k \ge 0$,

    (i) 证明引理 4.2.2 的结论成立.

    (ii) 证明: 存在常数 $\alpha > 0$ 使得

$$\prod_{i=0}^{k-1} \alpha_i \ge \alpha^k.$$

20. 设假设 2.4.1 的条件成立. $\{x^{(k)}\}$ 由采用 Armijo 型线性搜索的 MBFGS 算法产生且 B_0 对称正定, 若水平集

$$\Omega = \{x \in R^n \mid f(x) \le f(x^{(0)})\}$$

有界, 证明:

$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0.$$

第五章　无约束问题算法 (III) — 共轭梯度法

前面介绍的 Newton 法和拟 Newton 算法具有较快的收敛速度. 但算法需要储存矩阵 B_k. 因而, 在求解大规模问题时会遇到困难. 最速下降法具有存储量少的特点. 但该算法收敛速度慢. 本章介绍求解无约束问题

$$\min f(x), \qquad x \in R^n \tag{5.1}$$

的共轭梯度法. 该算法具有存储量少且收敛速度较快的特点. 为了了解算法的思想, 我们先介绍求解凸二次函数极小值问题的共轭梯度法.

§5.1　二次函数极小化问题的共轭方向法

考察二次函数极小化问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2}x^TQx + q^Tx, \tag{5.2}$$

其中, $Q \in R^{n\times n}$ 对称正定, $q \in R^n$. 先引入向量组共轭的概念.

定义 5.1.1 设 $A \in R^{n\times n}$ 对称正定, $d^{(1)},\dots,d^{(m)}$ 是 R^n 中非零向量. 若对 $i,j = 1,\dots,m$, 有

$$d^{(i)T}Ad^{(j)} = 0, \qquad i \neq j,$$

则称向量组 $d^{(1)},\dots,d^{(m)}$ 关于矩阵 A 相互共轭.

由共轭向量组的定义易知, 若 $A = I$ 是单位矩阵, 则向量组的共轭性等价于正交性. 一般地, 令 $p^{(i)} = A^{1/2}d^{(i)}$, $i = 1,2,\dots,m$. 则向量组 $d^{(1)},\dots,d^{(m)}$ 关于矩阵 A 相互共轭等价于向量组 $p^{(i)}$, $i = 1,2,\dots,m$ 相互正交. 因此, 共轭是正交概念的推广. 下面的定理表明, 共轭向量组线性无关.

定理 5.1.1 设 $A \in R^{n\times n}$ 对称正定. 非零向量组 $d^{(1)},\dots,d^{(m)} \in R^n$ 关于矩阵 A 相互共轭. 则 $d^{(1)},\dots,d^{(m)}$ 线性无关.

证明 设

$$\sum_{i=1}^{m}\alpha_i d^{(i)} = 0.$$

由共轭性得

$$0 = \Big(\sum_{i=1}^{m}\alpha_i d^{(i)}\Big)^T A\Big(\sum_{i=1}^{m}\alpha_i d^{(i)}\Big) = \sum_{i=1}^{m}\alpha_i^2 d^{(i)T}Ad^{(i)}.$$

但 $d^{(i)} \neq 0$ 且 A 对称正定, 因此,

$$\alpha_i = 0, \qquad i = 1,\dots,m,$$

即 $d^{(1)},\dots,d^{(m)}$ 线性无关. **证毕**

定理 5.1.1 表明, 若非零向量组 $d^{(1)},\dots,d^{(m)} \in R^n$ 关于对称正定矩阵 A 相互共轭, 则必有 $m \leq n$.

求解二次函数极小值问题 (5.2) 的共轭方向法的思想是：从某个初始点 $x^{(0)}$ 出发，依次沿关于 Q 相互共轭的 n 个方向 $d^{(i)}$, $i=0,1,\ldots,n-1$ 进行精确线性搜索，即令

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}, \quad k=0,1,\ldots,n-1,$$

其中， α_k 是下面问题的解：

$$f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) = \min_{\alpha \in R} f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}). \tag{5.3}$$

注： 由于 $d^{(k)}$ 可能不是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向，因此，上面的精确线性搜索在整个实数轴上进行.

下面的定理说明，由共轭方向法产生的 $x^{(n)}$ 是问题 (5.2) 的惟一解.

定理 5.1.2（**子空间扩展定理**）设函数 f 由 (5.2) 给出，非零向量组 $d^{(0)}, d^{(1)}, \ldots, d^{(n-1)}$ 关于矩阵 Q 相互共轭. 点 $x^{(0)} \in R^n$ 任意. 设迭代格式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}, \qquad k=0,1,\ldots,n-1$$

中的步长 α_k 由精确线性搜索 (5.3) 确定，即 α_k 满足 (5.3). 则 $x^{(k+1)}$ 是 f 在线性流形

$$S_k = \{x = x^{(0)} + \sum_{i=0}^{k} \beta_i d^{(i)} \mid \beta_i \in R,\ i=0,1,\ldots,k\}$$

中的极小值点. 特别， $x^{(n)} = x^* = -Q^{-1}q$ 是问题 (5.2) 的惟一全局最优解.

证明 由于 $d^{(0)}$, $d^{(1)}$, …, $d^{(n-1)}$ 线性无关，故有 $S_{n-1} = R^n$. 因此，只需证明 $x^{(k+1)}$ 是 f 在线性流形 S_k 中的极小值点.

显然有

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)} = \cdots = x^{(0)} + \sum_{i=0}^{k} \alpha_i d^{(i)} \in S_k.$$

对任何 $x \in S_k$, 存在 $\beta_i \in R$, $i=0,1,\ldots,k$, 使得

$$x = x^{(0)} + \sum_{i=0}^{k} \beta_i d^{(i)}.$$

由 Taylor 展开得

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x^{(k+1)}) + \nabla f(x^{(k+1)})^T (x - x^{(k+1)}) + \frac{1}{2}(x - x^{(k+1)})^T Q (x - x^{(k+1)}) \\ &\geq f(x^{(k+1)}) + \nabla f(x^{(k+1)})^T (x - x^{(k+1)}) \\ &= f(x^{(k+1)}) + \sum_{i=0}^{k} (\beta_i - \alpha_i) \nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(i)}. \end{aligned}$$

而且，当 $x \neq x^{(k+1)}$ 时，上面的不等式为严格不等式. 因此，只需证明

$$\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(i)} = 0, \qquad \forall i = 0,1,\ldots,k. \tag{5.4}$$

注意到对二次函数有

$$\nabla f(x)-\nabla f(y)=Q(x-y), \qquad \forall x,y\in R^n.$$

利用共轭性条件和精确线性搜索条件可得，对任何 $i\le k$,

$$\begin{aligned} d^{(i)T}\nabla f(x^{(k+1)}) &= d^{(i)T}[(\nabla f(x^{(k+1)})-\nabla f(x^{(k)}))+\cdots+(\nabla f(x^{(i+2)})-\nabla f(x^{(i+1)}))+\nabla f(x^{(i+1)})] \\ &= \sum_{j=i+1}^{k} d^{(i)T}[\nabla f(x^{(j+1)})-\nabla f(x^{(j)})]=\sum_{j=i+1}^{k} d^{(i)T}Q(x^{(j+1)}-x^{(j)}) \\ &= \sum_{j=i+1}^{k} \alpha_j d^{(i)T}Qd^{(j)}=0. \end{aligned}$$

因此， (5.4) 成立，从而定理得证. **证毕**

定理 5.1.2 说明，采用精确线性搜索的共轭方向法求解严格凸二次函数极小值问题 (5.2) 时可经过有限步达到问题的最优解. 因此，共轭方向法具有二次终止性.

共轭方向可用类似于 Gram-Schmidt 正交化过程产生.

算法 5.1 (*Gram-Schmidt* **共轭化过程**)

步 *0* 给定线性无关向量组 $p^{(0)},p^{(1)},\dots,p^{(n-1)}\in R^n$. 令 $d^{(0)}=p^{(0)}$, $k:=0$.

步 *1* 计算

$$d^{(k+1)}=p^{(k+1)}-\sum_{j=0}^{k}\frac{d^{(j)T}Qp^{(k+1)}}{d^{(j)T}Qd^{(j)}}d^{(j)}. \tag{5.5}$$

步 *2* 若 $k=n-2$, 则停止. 否则，令 $k:=k+1$. 转步 *1*.

下面的定理说明，算法 5.1 产生的方向序列 $\{d^{(j)}\}_{j=0}^{n-1}$ 关于矩阵 Q 相互共轭.

定理 5.1.3 设矩阵 $Q\in R^{n\times n}$ 对称正定且向量组 $p^{(0)},p^{(1)},\dots,p^{(n-1)}\in R^n$ 线性无关. 则算法 *5.1* 产生的 $\{d^{(j)}\}_{j=0}^{n-1}$ 关于矩阵 Q 相互共轭，即

$$d^{(i)T}Qd^{(j)}=0, \qquad \forall i\ne j,\ i,j=0,1,\dots,n-1.$$

证明 我们用归纳法证明：对所有 $0<k\le n-1$,

$$d^{(i)T}Qd^{(k)}=0, \quad \forall i<k. \tag{5.6}$$

当 $k=1$ 时，由 (5.5) 得

$$d^{(0)T}Qd^{(1)}=d^{(0)T}Qp^{(1)}-\frac{d^{(0)T}Qp^{(1)}}{d^{(0)T}Qd^{(0)}}d^{(0)T}Qd^{(0)}=0.$$

设 (5.6) 对 $k\le m$ 成立，即

$$d^{(i)T}Qd^{(j)}=0, \quad \forall i<j,\ j\le k\le m.$$

我们证明

$$d^{(i)T}Qd^{(m+1)}=0,\quad \forall i\le m.$$

利用 (5.5), 对任意 $i\le m$, 由归纳假设得

$$\begin{aligned} d^{(i)T}Qd^{(m+1)} &= d^{(i)T}Qp^{(m+1)}-\sum_{j=0}^{m}\frac{d^{(j)T}Qp^{(m+1)}}{d^{(j)T}Qd^{(j)}}d^{(i)T}Qd^{(j)} \\ &= d^{(i)T}Qp^{(m+1)}-\frac{d^{(i)T}Qp^{(m+1)}}{d^{(i)T}Qd^{(i)}}d^{(i)T}Qd^{(i)}=0, \end{aligned}$$

即 (5.6) 对 $k=m+1$ 成立．由归纳原理，定理得证. **证毕**

下面的定理表明, 采用精确线性搜索的 Broyden 族算法用于求解问题 (5.2) 时产生的方向 $\{d^{(k)}\}_{k=0}^{n-1}$ 关于矩阵 Q 相互共轭．因此，算法具有二次终止性.

定理 5.1.4 *采用精确线性搜索的 Broyden 族算法用于求解凸二次函数极小化问题* (5.2) *时具有如下性质：*

$$B_{i+1}s^{(j)}=y^{(j)}=Qs^{(j)},\qquad j\le i,\ i=0,1,\ldots,n-1. \tag{5.7}$$

$$s^{(i)T}Qs^{(j)}=0,\qquad j<i,\ i=1,\ldots,n-1. \tag{5.8}$$

特别， $B_n=Q,\ x^{(n)}=x^*=-Q^{-1}q.$

证明 由定理 4.2.1, 采用精确线性搜索的 Broyden 族算法产生相同的点列，故不同算法产生的搜索方向平行．因此我们只需证明等式 (5.7) 和 (5.8) 对 BFGS 算法成立.

由拟 Newton 方程以及 $y^{(j)}$ 的定义可得：对任何 $j=0,1,\ldots,n-1$,

$$B_{j+1}s^{(j)}=y^{(j)}=\nabla f(x^{(j+1)})-\nabla f(x^{(j)})=Q(x^{(j+1)}-x^{(j)})=Qs^{(j)}.$$

而且，由精确线性搜索得：对任何 $i=0,1,\ldots,n-1$,

$$s^{(i+1)T}Qs^{(i)}=s^{(i+1)T}y^{(i)}=s^{(i+1)T}B_{i+1}s^{(i)}=-\alpha_{i+1}\alpha_i\nabla f(x^{(i+1)})^Td^{(i)}=0. \tag{5.9}$$

下面，我们用归纳法证明 (5.7) 和 (5.8) 对 BFGS 算法成立.

先证明 (5.7) 对 $i=0$ 和 $i=1$ 成立，以及 (5.8) 对 $i=1$ 成立．事实上， (5.9) 包含了 (5.8) 对 $i=1$ 成立．由拟 Newton 方程 (4.2) 知，结论 (5.7) 对 $i=0$ 成立．而且当 $i=1$ 时，有 $B_2s^{(1)}=y^{(1)}$. 又由 BFGS 公式 (4.13) 以及 (5.9) 得

$$\begin{aligned} B_2s^{(0)} &= B_1s^{(0)}-\frac{B_1s^{(1)}(s^{(1)T}B_1s^{(0)})}{s^{(1)T}B_1s^{(1)}}+\frac{y^{(1)}(y^{(1)T}s^{(0)})}{y^{(1)T}s^{(1)}} \\ &= y^{(0)}-\frac{B_1s^{(1)}(s^{(1)T}Qs^{(0)})}{s^{(1)T}B_1s^{(1)}}+\frac{y^{(1)}(s^{(1)T}Qs^{(0)})}{y^{(1)T}s^{(1)}}=y^{(0)}. \end{aligned}$$

上面证明了 (5.7) 对 $i=0$ 和 $i=1$ 成立，以及 (5.8) 对 $i=1$ 成立.

设 (5.7) 和 (5.8) 对 i 成立，我们证明 (5.7) 和 (5.8) 对 $i+1$ 也成立．由 (5.9) 知,

$$s^{(i+1)T}Qs^{(i)}=0.$$

而当 $j=0,1,\ldots,i-1$ 时,

$$\begin{aligned}
s^{(i+1)T}Qs^{(j)} &= s^{(i+1)T}B_{i+1}s^{(j)} = -\alpha_{i+1}\nabla f(x^{(i+1)})^T s^{(j)} \\
&= -\alpha_{i+1}(y^{(i)}+y^{(i-1)}+\cdots+y^{(j+1)}+\nabla f(x^{(j+1)}))^T s^{(j)} \\
&= -\alpha_{i+1}(Qs^{(i)}+Qs^{(i-1)}+\cdots+Qs^{(j+1)}+\nabla f(x^{(j+1)}))^T s^{(j)} = 0.
\end{aligned}$$

因此, (5.8) 对 $i+1$ 成立. 下面证明 (5.7) 对 $i+1$ 也成立, 即

$$B_{i+2}s^{(j)} = y^{(j)} = Qs^{(j)}, \qquad j=0,1,\ldots,i+1.$$

当 $j=i+1$ 时, 上式由拟 Newton 方程 (4.2) 直接得到. 当 $j\le i$ 时, 由归纳假设得

$$\begin{aligned}
B_{i+2}s^{(j)} &= B_{i+1}s^{(j)} - \frac{B_{i+1}s^{(i+1)}(s^{(i+1)T}B_{i+1}s^{(j)})}{s^{(i+1)T}B_{i+1}s^{(i+1)}} + \frac{y^{(i+1)}(y^{(i+1)T}s^{(j)})}{y^{(i+1)T}s^{(i+1)}} \\
&= B_{i+1}s^{(j)} - \frac{B_{i+1}s^{(i+1)}(s^{(i+1)T}Qs^{(j)})}{s^{(i+1)T}B_{i+1}s^{(i+1)}} + \frac{y^{(i+1)}(s^{(i+1)T}Qs^{(j)})}{y^{(i+1)T}s^{(i+1)}} \\
&= B_{i+1}s^{(j)} = y^{(j)} = Qs^{(j)},
\end{aligned}$$

即 (5.7) 对 $i+1$ 成立.

由于 $s^{(i)}$, $i=0,1,\ldots,n-1$ 关于 Q 相互共轭, 故线性无关. 因此, 在 (5.7) 中令 $i=n-1$ 即得 $Q=B_n$. 注意到 $s^{(i)}=\alpha_i d^{(i)}$, 因此, (5.8) 等价于

$$d^{(i)T}Qd^{(j)}=0, \qquad j=0,1,\ldots,i-1,$$

即向量组 $d^{(i)}$, $i=0,1,\ldots,n-1$ 关于 Q 相互共轭. 从而, $x^{(n)}$ 可看成是由共轭方向法经 n 步精确线性搜索产生. 因此, 结论 $x^{(n)}=x^*$ 可由定理 5.1.2 直接得到. **证毕**

§5.2 非线性共轭梯度法

求解一般无约束问题 (5.1) 的非线性共轭梯度法是在求解二次函数极小值问题的共轭梯度法的基础上发展起来的. 非线性共轭梯度法利用负梯度方向 $-\nabla f(x^{(k)})$ 与算法的前一个方向的线性组合作为第 k 次迭代的搜索方向. 且取初始方向为 $-\nabla f(x^{(0)})$, 即

$$d^{(k)} = \begin{cases} -\nabla f(x^{(0)}), & \text{若} \quad k=0, \\ -\nabla f(x^{(k)}) + \beta_k d^{(k-1)}, & \text{若} \quad k\ge 1, \end{cases} \tag{5.10}$$

其中, 参数 β_k 的确定使得算法用于求解问题 (5.2) 时, $d^{(k)}$ 与 $d^{(k-1)}$ 关于 Q 相互共轭. 下面导出参数 β_k 的计算公式.

设 f 是由 (5.2) 定义的二次函数, 点列 $\{x^{(k)}\}$ 由下面的迭代格式确定:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}, \quad k=0,1,\ldots,$$

其中 α_k 由精确线性搜索得到, 即

$$\alpha_k = -\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{d^{(k)T}Qd^{(k)}}.$$

注意到

$$\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)}) = Q(x^{(k)} - x^{(k-1)}) = \alpha_{k-1} Q d^{(k-1)}.$$

由 (5.10) 以及 $d^{(k)T} Q d^{(k-1)} = 0$ 可得

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x^{(k)})^T Q d^{(k-1)}}{d^{(k-1)T} Q d^{(k-1)}} = \frac{\nabla f(x^{(k)})^T (\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)}))}{d^{(k-1)T} (\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)}))}. \tag{5.11}$$

上面的公式由 Hestenes-Stiefel (1952) 提出．我们记上面的 β_k 为 β_k^{HS}, 即

$$\beta_k^{HS} = \frac{\nabla f(x^{(k)})^T (\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)}))}{d^{(k-1)T} (\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)}))}, \quad k = 1, 2, \ldots.$$

在此基础上，我们给出共轭梯度法的计算步骤如下：

算法 5.2（**非线性共轭梯度法**— *HS* **算法**）

步 *1* 取初始点 $x^{(0)} \in R^n$, $d^{(0)} = -\nabla f(x^{(0)})$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *2* 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \epsilon$, 则算法终止．得问题的解 $x^{(k)}$. 否则，转步 *3*.

步 *3* 由线性搜索确定步长 α_k.

步 *4* 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$.

步 *5* 由 (5.10) 确定 $d^{(k+1)}$, 其中， $\beta_k = \beta_k^{\mathrm{HS}}$. 令 $k := k+1$. 转步 *2*.

例 5.2.1 用采用精确线性搜索的算法 *5.2* 求解下面的无约束问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2} x_1^2 + x_2^2.$$

取初始点为 $x^{(0)} = (2, 1)^T$.

解 由计算得 $\nabla f(x) = (x_1, 2x_2)^T$. 令

$$\phi(\alpha) = f(x + \alpha d) = \frac{1}{2}(x_1 + \alpha d_1)^2 + (x_2 + \alpha d_2)^2.$$

由 $\phi'(\alpha) = 0$(或公式 (2.4)) 得精确线性搜索步长为

$$\alpha = -\frac{x_1 d_1 + 2 x_2 d_2}{d_1^2 + 2 d_2^2}.$$

计算结果见表 5.1.

表 5.1 例 5.2.1 的计算结果

k	$x^{(k)}$	$\nabla f(x^{(k)})$	$\|\nabla f(x^{(k)})\|$	β_k	$d^{(k)}$	α_k
0	$(2,1)^T$	$(2,2)^T$	$2\sqrt{2}$	-	$-(2,2)^T$	$\frac{2}{3}$
1	$\frac{1}{3}(2,-1)^T$	$\frac{2}{3}(1,-1)^T$	$\frac{2}{3}\sqrt{2}$	$\frac{1}{9}$	$-\frac{4}{9}(2,-1)^T$	$\frac{3}{4}$
2	$(0,0)^T$	$(0,0)^T$	0			

上面的例子说明，当 HS 算法用于求解严格凸二次函数极小化问题时具有有限步终止性. 事实上，下面的定理表明，当用于严格凸二次函数极小化问题的求解时， HS 算法产生的方向关于目标函数的 Hessian 矩阵相互共轭.

定理 5.2.1 设 $\{x^{(k)}\}$ 表示由采用精确线性搜索的 *HS* 算法求解问题 (5.2) 产生的点列. 则向量组 $\{d^{(i)}\}_{i=0}^{n-1}$ 关于 Q 相互共轭. 而且，对任何 $k \le n$, 有

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(j)} = 0, \quad \nabla f(x^{(k)})^T \nabla f(x^{(j)}) = 0, \quad \forall j < k. \tag{5.12}$$

证明 对 k 用归纳法. $k=1$ 时，由 β_k^{HS} 和 $d^{(0)}$ 的定义及线性搜索条件，定理成立.

设定理对 k 成立，即 $d^{(i)}, i=0,1,\dots,k$ 关于 Q 相互共轭且 (5.12) 对 k 成立. 下证定理对 $k+1$ 成立，即 $d^{(i)}, i=0,1,\dots,k+1$ 关于 Q 相互共轭且 (5.12) 对 $k+1$ 成立.

由于 $d^{(i)}, i=0,1,\dots,k$ 关于 Q 相互共轭，类似于 (5.4) 可以证明 (5.12) 中第一式对 $k+1$ 成立. 由此及 (5.10) 得，对任意 $j \le k$,

$$\nabla f(x^{(k+1)})^T \nabla f(x^{(j)}) = \nabla f(x^{(k+1)})^T (-d^{(j)} + \beta_j^{HS} d^{(j-1)}) = 0,$$

即 (5.12) 中的第二式对 $k+1$ 成立.

由 β_k^{HS} 的取法易知 $d^{(k+1)}$ 和 $d^{(k)}$ 关于 Q 相互共轭. 而且，对任意 $j \le k-1$, 有

$$\begin{aligned} d^{(k+1)T} Q d^{(j)} &= -\nabla f(x^{(k+1)})^T Q d^{(j)} + \beta_{k+1} d^{(k)T} Q d^{(j)} = -\nabla f(x^{(k+1)})^T Q d^{(j)} \\ &= -\alpha_j^{-1} \nabla f(x^{(k+1)})^T [\nabla f(x^{(j+1)}) - \nabla f(x^{(j)})] = 0, \end{aligned}$$

即 $d^{(i)}, i=0,1,\dots,k+1$ 关于 Q 相互共轭. 由归纳原理，定理的结论成立. **证毕**

由定理 5.2.1 不难看出，采用精确线性搜索时，下面各公式中的参数值对二次函数是相等的:

$$\begin{aligned}
\beta_k = \beta_k^{\mathrm{HS}} &\triangleq \frac{\nabla f(x^{(k)})^T (\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{k-1}))}{d^{(k-1)T} (\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)}))}, && \text{Hestenes-Stiefel (1952)} \\
\beta_k = \beta_k^{\mathrm{FR}} &\triangleq \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}{\|\nabla f(x^{(k-1)})\|^2}, && \text{Fletcher-Reeves (1964)} \\
\beta_k = \beta_k^{\mathrm{PRP}} &\triangleq \frac{\nabla f(x^{(k)})^T (\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)}))}{\|\nabla f(x^{(k-1)})\|^2}, && \text{Polak-Ribière-Polyak (1969)} \\
\beta_k = \beta_k^{\mathrm{CD}} &\triangleq -\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}{d^{(k-1)T} \nabla f(x^{(k-1)})}, && \text{Fletcher (1987)} \\
\beta_k = \beta_k^{\mathrm{DY}} &\triangleq \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}{d^{(k-1)T} (\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)}))}. && \text{Dai-Yuan (1995)}
\end{aligned}$$

若将算法 5.2 的步 5 中的 $\beta_k = \beta_k^{\mathrm{HS}}$ 改为 $\beta_k = \beta_k^{\mathrm{FR}}$ 或 $\beta_k = \beta_k^{\mathrm{PRP}}$ 或 $\beta_k = \beta_k^{\mathrm{CD}}$ 或 $\beta_k = \beta_k^{\mathrm{DY}}$, 我们称相应的算法为 FR 算法， PRP 算法， CD 算法， DY 算法. 由定理 5.2.1 知，当用于求解凸二次函数极小化问题 (5.2) 时，若采用精确线性搜索，则 FR 算法， PRP 算法， HS 算法， CD 算法以及 DY 算法等价. 进一步地，我们有如下定理 (参看 [25, 定理 5.3.2] 和 [19, 定理 5.4, 5.5]).

定理 5.2.2 *采用精确线性搜索的算法 5.2 用于求解凸二次函数极小化问题 (5.2) 时具有如下性质:*
(1) 算法产生的方向 $\{d^{(k)}\}_{k=0}^{n-1}$ 关于矩阵 Q 相互共轭.
(2) 若矩阵 Q 只有 r 个不同的特征值, 则算法最多经过 r 次迭代达到问题的最优解.
(3) 设 $\lambda_{\max}$ 和 $\lambda_{\min}$ 是矩阵 Q 的最大特征值和最小特征值, $\kappa=\lambda_{\max}/\lambda_{\min}$. 则

$$\|x^{(k)}-x^*\|_Q \le 2\Big(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\Big)^k\|x^{(0)}-x^*\|_Q,$$

其中, $\|x\|_Q=(x^TQx)^{1/2}$.

下面介绍非线性共轭梯度法的全局收敛性. 为此, 我们作如下假设.

假设 5.2.1 *(1) 水平集 $\Omega=\{x\in R^n|f(x)\le f(x^{(0)})\}$ 有界.*

(2) 存在 Ω 的某个邻域 N , 使得 f 在该邻域上连续可微且 ∇f 满足 Lipschitz 条件, 即存在常数 $L>0$ 使得

$$\|\nabla f(x)-\nabla f(y)\|\le L\|x-y\|,\quad \forall x,y\in N. \tag{5.13}$$

我们首先证明采用精确线性搜索的 FR 算法的全局收敛性.

定理 5.2.3 *设假设条件 5.2.1 成立. 则采用精确线性搜索的 FR 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 满足*

$$\liminf_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\|=0. \tag{5.14}$$

证明 由精确线性搜索的条件得 $\nabla f(x^{(k)})^Td^{(k-1)}=0, \forall k\ge 1$. 从而, 由 (5.10) 得

$$\nabla f(x^{(k)})^Td^{(k)}=-\|\nabla f(x^{(k)})\|^2<0, \tag{5.15}$$

即 $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 而且

$$\|d^{(k+1)}\|^2=\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2+\beta_{k+1}^2\|d^{(k)}\|^2=\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2+\frac{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^4}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^4}\|d^{(k)}\|^2.$$

两端同除以 $\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^4$ 得

$$\begin{aligned}\frac{\|d^{(k+1)}\|^2}{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^4} &= \frac{1}{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2}+\frac{\|d^{(k)}\|^2}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^4}\\ &= \frac{1}{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2}+\frac{1}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}+\frac{\|d^{(k-1)}\|^2}{\|\nabla f(x^{(k-1)})\|^4}\\ &\vdots\\ &= \sum_{i=1}^{k+1}\frac{1}{\|\nabla f(x^{(i)})\|^2}+\frac{\|d^{(0)}\|^2}{\|\nabla f(x^{(0)})\|^4}=\sum_{i=0}^{k+1}\frac{1}{\|\nabla f(x^{(i)})\|^2}.\end{aligned} \tag{5.16}$$

令 θ_k 表示 $d^{(k)}$ 与 $-\nabla f(x^{(k)})$ 间的夹角. 由 (5.15) 可得

$$\cos\theta_k=\frac{-\nabla f(x^{(k)})^Td^{(k)}}{\|\nabla f(x^{(k)})\|\,\|d^{(k)}\|}=\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{\|d^{(k)}\|}.$$

上式代入 (5.16) 得

$$\frac{1}{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2\cos^2\theta_{k+1}}=\sum_{i=0}^{k+1}\frac{1}{\|\nabla f(x^{(i)})\|^2}.$$

若 (5.14) 不成立，则存在常数 $\eta>0$ 使得 $\|\nabla f(x^{(k)})\|\geq\eta,\ \forall k$. 由上式得

$$\frac{1}{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2\cos^2\theta_{k+1}}\leq\eta^{-2}(k+2),$$

或等价地，

$$\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2\cos^2\theta_{k+1}\geq\frac{\eta^2}{k+2}.$$

因此

$$\sum_{k=0}^{\infty}\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2\cos^2\theta_{k+1}=+\infty.$$

这与定理 2.4.1 矛盾. 从而， (5.14) 成立. **证毕**

类似于上面的定理，可以建立采用精确线性搜索的 PRP 算法的全局收敛性定理. 其证明可参看 [6, 定理 3.2.1].

定理 5.2.4 *设假设条件 5.2.1 成立，且由采用精确线性搜索的 PRP 算法产生的点列* $\{x^{(k)}\}$ *满足* $\{x^{(k+1)}-x^{(k)}\}\to 0$. *则*

$$\liminf_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\|=0. \tag{5.17}$$

当 f 是一致凸函数时，上面定理中的条件 $\{x^{(k+1)}-x^{(k)}\}\to 0$ 可以去掉，即下面的定理成立 (证明留作练习).

定理 5.2.5 *设函数* f *是连续可微的一致凸函数且* ∇f *Lipschitz 连续. 则由采用精确线性搜索的 PRP 算法产生的点列* $\{x^{(k)}\}$ *满足* (5.17).

下面介绍采用非精确线性搜索时 FR 算法的收敛性. 注意到当采用精确线性搜索时，我们有

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}=0.$$

因此，由 (5.10) 知

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}=-\|\nabla f(x^{(k)})\|^2<0.$$

此时， $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 相应的算法为下降算法. 当采用非精确线性搜索时，

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}=-\|\nabla f(x^{(k)})\|^2+\beta_k\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}.$$

由于 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}$ 非零，此时， $d^{(k)}$ 可能不是 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 下面的引理表明，采用强 Wolfe 线性搜索的 FR 算法也具有下降性.

引理 5.2.1 *设* $\{x^{(k)}\}$ *由 FR 算法产生，其中步长* α_k *满足强 Wolfe 线性搜索条件* (2.9) *且* $\sigma_2\in(0,1/2)$. *则对所有的* k, *有*

$$\frac{1-2\sigma_2+\sigma_2^{k+1}}{1-\sigma_2}\leq\frac{-\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}\leq\frac{1-\sigma_2^{k+1}}{1-\sigma_2}. \tag{5.18}$$

证明 我们对 k 用归纳法证明引理. 当 $k=0$ 时，由于 $d^{(0)}=-\nabla f(x^{(0)})$, 因此， (5.18) 显然成立. 设 (5.18) 对 $k-1$ 成立. 由 (5.10) 以及 β_k 的定义得

$$\frac{-\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}=1+\frac{-\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}}{\|\nabla f(x^{(k-1)})\|^2}.$$

由归纳假设以及 (2.9) 得

$$\frac{-\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}\le 1+\sigma_2\frac{-\nabla f(x^{(k-1)})^T d^{(k-1)}}{\|\nabla f(x^{(k-1)})\|^2}\le 1+\sigma_2\frac{1-\sigma_2^k}{1-\sigma_2}=\frac{1-\sigma_2^{k+1}}{1-\sigma_2}.$$

同理,

$$\frac{-\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}\ge 1-\sigma_2\frac{-\nabla f(x^{(k-1)})^T d^{(k-1)}}{\|\nabla f(x^{(k-1)})\|^2}\ge 1-\sigma_2\frac{1-\sigma_2^k}{1-\sigma_2}=\frac{1-2\sigma_2+\sigma_2^{k+1}}{1-\sigma_2}.$$

由归纳原理， (5.18) 成立. **证毕**

上面的定理说明，采用强 Wolfe 型线性搜索的 FR 算法产生的方向是 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 下面的定理建立了采用强 Wolfe 型线性搜索的 FR 算法的全局收敛性.

定理 5.2.6 *设假设条件 5.2.1 成立. 则采用强 Wolfe 型线性搜索 (2.9)($\sigma_2<1/2$) 的 FR 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 满足*

$$\liminf_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\|=0. \tag{5.19}$$

证明 令 θ_k 表示 $d^{(k)}$ 与 $-\nabla f(x^{(k)})$ 间的夹角. 由 (5.18) 得

$$\begin{aligned}\|\nabla f(x^{(k)})\|\,\|d^{(k)}\|\cos\theta_k &= -\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}\ge\frac{1-2\sigma_2+\sigma_2^{k+1}}{1-\sigma_2}\|\nabla f(x^{(k)})\|^2\\ &\ge \frac{1-2\sigma_2}{1-\sigma_2}\|\nabla f(x^{(k)})\|^2\triangleq\mu\|\nabla f(x^{(k)})\|^2.\end{aligned}$$

因此,

$$\|d^{(k)}\|\cos\theta_k\ge\mu\|\nabla f(x^{(k)})\|. \tag{5.20}$$

再由 (5.10), (2.9) 和 (5.18) 得

$$\begin{aligned}\|d^{(k+1)}\|^2 &= \|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2-2\beta_{k+1}^{\mathrm{FR}}\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(k)}+(\beta_{k+1}^{\mathrm{FR}})^2\|d^{(k)}\|^2\\ &\le \|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2+2\beta_{k+1}^{\mathrm{FR}}|\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(k)}|+(\beta_{k+1}^{\mathrm{FR}})^2\|d^{(k)}\|^2\\ &\le \|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2+2\beta_{k+1}^{\mathrm{FR}}\sigma_2|\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}|+(\beta_{k+1}^{\mathrm{FR}})^2\|d^{(k)}\|^2\\ &= \|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2-2\beta_{k+1}^{\mathrm{FR}}\sigma_2\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}+(\beta_{k+1}^{\mathrm{FR}})^2\|d^{(k)}\|^2\\ &\le \|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2+2\beta_{k+1}^{\mathrm{FR}}\frac{\sigma_2}{1-\sigma_2}\|\nabla f(x^{(k)})\|^2+(\beta_{k+1}^{\mathrm{FR}})^2\|d^{(k)}\|^2\\ &= \|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2+2\frac{\sigma_2}{1-\sigma_2}\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2+\frac{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^4}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^4}\|d^{(k)}\|^2\\ &= \frac{1+\sigma_2}{1-\sigma_2}\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2+\frac{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^4}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^4}\|d^{(k)}\|^2.\end{aligned}$$

上式两端同除以 $\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^4$ 得

$$\begin{aligned}\frac{\|d^{(k+1)}\|^2}{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^4} &\le \frac{1+\sigma_2}{1-\sigma_2}\frac{1}{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2}+\frac{\|d^{(k)}\|^2}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^4}\\ &\le \frac{\|d^{(0)}\|^2}{\|\nabla f(x^{(0)})\|^4}+\frac{1+\sigma_2}{1-\sigma_2}\sum_{i=1}^{k+1}\frac{1}{\|\nabla f(x^{(i)})\|^2}\\ &\le \frac{1+\sigma_2}{1-\sigma_2}\sum_{i=0}^{k+1}\frac{1}{\|\nabla f(x^{(i)})\|^2}.\end{aligned}$$

利用 (5.20), 类似于定理 5.2.3 的证明可得 (5.19). **证毕**

关于其它共轭梯度法的收敛性，可参看 [6].

§5.3 下降共轭梯度法

上一节介绍的非线性共轭梯度法的下降性依赖于算法所采用的线性搜索. 特别，当采用 Armijo 型线性搜索时，共轭梯度法的下降性得不到保证. 本节，我们介绍几个具有下降性的共轭梯度法.

§5.3.1 修正 FR(MFR) 算法

修正 FR(MFR) 算法由 [30] 提出. 其基本过程如下：设 $x^{(k)}$ 是当前迭代点. MFR 算法中 $d^{(k)}$ 由下面的方式确定：

$$d^{(k)}=\begin{cases}-\nabla f(x^{(0)}), & 若\ \ k=0,\\ -(1+\theta_k)\nabla f(x^{(k)})+\beta_k^{\mathrm{FR}}d^{(k-1)}, & 若\ \ k\ge 1,\end{cases} \tag{5.21}$$

其中， β_k^{FR} 由 FR 算法确定，

$$\theta_k=\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}\beta_k^{\mathrm{FR}}=\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}}{\|\nabla f(x^{(k-1)})\|^2}.$$

MFR 算法与 FR 算法的区别在于系数 θ_k. 若 $\theta_k=0$, 则 MFR 算法与 FR 算法一致. 特别若采用精确线性搜索，则 $\theta_k=0$. 此时 MFR 算法与 FR 算法是同一算法.

下面的定理表明，由 MFR 算法产生的方向 $d^{(k)}$ 是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的充分下降方向.

定理 5.3.1 *设函数 $f:R^n\to R$ 连续可微. 则对任何 $k\ge 0$, 由 (5.21) 确定的方向 $d^{(k)}$ 具有如下性质：*

(1) *$d^{(k)}$ 是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的充分下降方向. 而且，*

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}=-\|\nabla f(x^{(k)})\|^2. \tag{5.22}$$

(2) *若采用精确线性搜索，则 $\theta_k=0$. 此时 MFR 算法还原为 FR 算法. 特别， MFR 算法具有二次终止性.*

由于 $d^{(k)}$ 是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向，因此，下面的不等式对所有充分小的 $\alpha_k > 0$ 均成立：

$$f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) \le f(x^{(k)}) + \sigma_1 \alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} - \sigma_2 \|\alpha_k d^{(k)}\|^2, \tag{5.23}$$

其中， $\sigma_1 \in (0,1)$, $\sigma_2 > 0$ 为常数.

不等式 (5.23) 与 Armijo 型线性搜索条件 (2.6) 的形式相似，称为修正的 Armijo 型线性搜索条件. 满足 (5.23) 的步长 α_k 可采用与 Armijo 型线性搜索类似的算法 2.3 确定.

下面我们分析 MFR 算法的全局收敛性.

由假设 5.2.1, 容易得到，存在正数 $\gamma_1 > 0$ 使得

$$\|\nabla f(x)\| \le \gamma_1, \quad \forall x \in \Omega. \tag{5.24}$$

而且，由 (5.22) 可得

$$\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 = -\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \le \|\nabla f(x^{(k)})\| \, \|d^{(k)}\|.$$

因此，

$$\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \|d^{(k)}\|.$$

引理 5.3.1 *设假设 5.2.1 的条件成立. 则存在常数 $c_1 > 0$, 使得下面的不等式成立：*

$$\alpha_k \ge c_1 \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}{\|d^{(k)}\|^2}, \qquad \forall k \ge 0, \tag{5.25}$$

$$\sum_{k\ge 0} \alpha_k^2 \|d^{(k)}\|^2 < \infty, \qquad \sum_{k\ge 0} \alpha_k \|\nabla f(x^{(k)})\|^2 = -\sum_{k\ge 0} \alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < \infty. \tag{5.26}$$

特别，我们有

$$\lim_{k\to\infty} \alpha_k \|d^{(k)}\| = 0, \qquad \lim_{k\to\infty} \alpha_k \|\nabla f(x^{(k)})\|^2 = 0. \tag{5.27}$$

证明 不等式 (5.26) 可由 (5.23) 及假设 5.2.1 直接推得. (5.27) 是 (5.26) 的直接推论. 下面我们分两种情形证明 (5.25) 成立.

情形 (i): 当 $\alpha_k = 1$. 由于 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \|d^{(k)}\|$. 令 $c_1 = 1$, 则 (5.25) 成立等式.

情形 (ii): 当 $\alpha_k < 1$. 则 $\rho^{-1}\alpha_k$ 不满足不等式 (5.23). 这意味着下面的不等式成立：

$$f(x^{(k)} + \rho^{-1}\alpha_k d^{(k)}) - f(x^{(k)}) > \sigma_1 \alpha_k \rho^{-1} \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} - \sigma_2 \rho^{-2} \alpha_k^2 \|d^{(k)}\|^2. \tag{5.28}$$

由中值定理及 Lipschitz 条件 (5.13), 存在 $t_k \in (0,1)$ 使得

$$\begin{aligned}
& f(x^{(k)} + \rho^{-1}\alpha_k d^{(k)}) - f(x^{(k)}) = \rho^{-1}\alpha_k \nabla f(x^{(k)} + t_k \rho^{-1}\alpha_k d^{(k)})^T d^{(k)} \\
= \;& \rho^{-1}\alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} + \rho^{-1}\alpha_k (\nabla f(x^{(k)} + t_k \rho^{-1}\alpha_k d^{(k)}) - \nabla f(x^{(k)}))^T d^{(k)} \\
\le \;& \rho^{-1}\alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} + L\rho^{-2}\alpha_k^2 \|d^{(k)}\|^2.
\end{aligned}$$

将最后一个不等式代入 (5.28), 我们得到

$$\alpha_k > \frac{(1-\sigma_1)\rho \|\nabla f(x^{(k)})\|^2}{(L+\sigma_2)\|d^{(k)}\|^2}.$$

令 $c_1 = \min\{1, \dfrac{1-\sigma_1}{L+\sigma_2}\rho\}$, 我们得到不等式 (5.25). **证毕**

下面的定理给出了 MFR 方法的全局收敛性.

定理 5.3.2 设假设 *5.2.1* 的条件成立. 则采用线性搜索 (5.23) 的 *MFR* 算法产生的 $\{x^{(k)}\}$ 满足

$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0. \tag{5.29}$$

证明 为方便起见，我们简记 $\beta_k^{\rm FR}$ 为 β_k. 由 (5.21) , 我们有

$$\beta_k d^{(k-1)} = d^{(k)} + (1+\theta_k)\nabla f(x^{(k)}).$$

上式两端取范数，利用 (5.22) 得

$$\begin{aligned}\|d^{(k)}\|^2 &= \beta_k^2\|d^{(k-1)}\|^2 - 2(1+\theta_k)d^{(k)T}\nabla f(x^{(k)}) - (1+\theta_k)^2\|\nabla f(x^{(k)})\|^2\\ &= \beta_k^2\|d^{(k-1)}\|^2 + [2(1+\theta_k) - (1+\theta_k^2)]\|\nabla f(x^{(k)})\|^2\\ &= \beta_k^2\|d^{(k-1)}\|^2 + (1-\theta_k^2)\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 \le \beta_k^2\|d^{(k-1)}\|^2 + \|\nabla f(x^{(k)})\|^2.\end{aligned}$$

类似于定理 5.2.3 的证明可得 (5.29). **证毕**

§5.3.2 一种三项共轭梯度法 — 修正 PRP(MPRP) 算法

修正 PRP(MPRP) 算法由 [31] 提出. MPRP 算法中 $d^{(k)}$ 由下面的方式确定:

$$d^{(k)} = \begin{cases} -\nabla f(x^{(0)}), & \text{若} \ \ k=0,\\ -\nabla f(x^{(k)}) + \beta_k^{\rm PRP} d^{(k-1)} - \theta_k y^{(k-1)}, & \text{若} \ \ k\ge 1,\end{cases} \tag{5.30}$$

其中， $\beta_k^{\rm PRP}$ 由 PRP 算法确定， $y^{(k-1)} = \nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)})$,

$$\theta_k = \frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}}{\nabla f(x^{(k)})^T y^{(k-1)}}\beta_k^{\rm PRP} = \frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}}{\|\nabla f(x^{(k-1)})\|^2}.$$

修正 PRP 算法与 PRP 算法的区别在于表达式中的第三项. 若 $\theta_k = 0$, 则 MFR 算法与 FR 算法一致. 特别若采用精确线性搜索，则 $\theta_k = 0$. 此时 MPRP 算法与 PRP 算法是同一算法.

下面的定理表明，由 MPRP 算法产生的方向 $d^{(k)}$ 具有 MFR 算法产生的方向同样的性质.

定理 5.3.3 设函数 $f: R^n \to R$ 连续可微. 则对任何 $k\ge 0$, 由 (5.30) 确定的方向 $d^{(k)}$ 具有如下性质:

(1) $d^{(k)}$ 是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的充分下降方向. 而且,

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} = -\|\nabla f(x^{(k)})\|^2. \tag{5.31}$$

(2) 若采用精确线性搜索，则 $\theta_k = 0$. 此时 *MPRP* 算法还原为 *PRP* 算法. 特别， *MPRP* 算法具有二次终止性.

MPRP 算法具有如下收敛性定理 (见 [31]).

定理 5.3.4 设假设 *5.2.1* 的条件成立. 则采用线性搜索 (5.23) 的 *MPRP* 算法产生的 $\{x^{(k)}\}$ 满足

$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0.$$

§5.3.3 CG_Descent 算法

CG_Descent 算法由 [10] 提出. CG_Descent 算法中 $d^{(k)}$ 由下面的方式确定:

$$d^{(k)} = \begin{cases} -\nabla f(x^{(0)}), & 若 \ k=0, \\ -\nabla f(x^{(k)}) + \beta_k^{HZ^+} d^{(k-1)}, & 若 \ k \ge 1, \end{cases} \tag{5.32}$$

其中,

$$\beta_k^{HZ^+} = \max\{\beta_k^{\mathrm{HZ}}, \eta_k\}, \quad \eta_k = \frac{-1}{\|d^{(k-1)}\| \min\{\eta, \|\nabla f(x^{(k-1)})\|\}},$$

其中 $\eta > 0$ 是常数, $s^{(k-1)} = x^{(k)} - x^{(k-1)}$,

$$\beta_k^{\mathrm{HZ}} = \frac{1}{d^{(k-1)T} y^{(k-1)}} \Big(y^{(k-1)} - 2\frac{\|y^{(k-1)}\|^2}{s^{(k-1)T} y^{(k-1)}} s^{(k-1)} \Big)^T \nabla f(x^{(k)}).$$

容易看出，若采用精确线性搜索，则 $\beta_k^{\mathrm{HZ}} = \beta_k^{\mathrm{HS}}$. 下面的定理表明，不论采用何种线性搜索，由 (5.32) 产生的方向 $d^{(k)}$ 是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向.

定理 5.3.5 *设函数 $f: R^n \to R$ 连续可微. 则对任何 $k \ge 0$, 由 (5.32) 确定的方向 $d^{(k)}$ 满足*

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \le -\frac{7}{8} \|\nabla f(x^{(k)})\|^2. \tag{5.33}$$

证明 不等式 (5.33) 对 $k=0$ 显然成立. 对 $k \ge 1$, 我们有

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} = -\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 + \beta_k^{HZ^+} \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}.$$

若 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)} \ge 0$ 且 $\beta_k^{HZ^+} = \eta_k < 0$, 则由上式不难得到 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \le -\|\nabla f(x^{(k)})\|^2$. 此时, (5.33) 成立.

若 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)} \ge 0$ 且 $\beta_k^{HZ^+} = \beta_k^{\mathrm{HZ}}$, 我们有

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} = -\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 + \beta_k^{\mathrm{HZ}} \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}.$$

若 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)} < 0$, 注意到 $\beta_k^{HZ^+} \ge \beta_k^{\mathrm{HZ}}$, 我们有

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \le -\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 + \beta_k^{\mathrm{HZ}} \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}.$$

因此，我们只需证明

$$-\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 + \beta_k^{\mathrm{HZ}} \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)} \le -\frac{7}{8} \|\nabla f(x^{(k)})\|^2.$$

或等价地

$$\beta_k^{\mathrm{HZ}} \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)} \le \frac{1}{8} \|\nabla f(x^{(k)})\|^2. \tag{5.34}$$

由 β_k^{HZ} 的定义以及不等式

$$u^T v \le \frac{1}{2}(\|u\|^2 + \|v\|^2)$$

可得

$$\begin{aligned}
\beta_k^{\mathrm{HZ}}\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)} &= \frac{\nabla f(x^{(k)})^T\Big(y^{(k-1)} - 2\frac{\|y^{(k-1)}\|^2}{d^{(k-1)T}y^{(k-1)}}d^{(k-1)}\Big)}{d^{(k-1)T}y^{(k-1)}}\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)} \\
&= \frac{\nabla f(x^{(k)})^T y^{(k-1)}(d^{(k-1)T}y^{(k-1)})\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)}}{(d^{(k-1)T}y^{(k-1)})^2} - 2\frac{\|y^{(k-1)}\|^2(\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)})^2}{(d^{(k-1)T}y^{(k-1)})^2} \\
&= \frac{[\frac{1}{2}(d^{(k-1)T}y^{(k-1)})\nabla f(x^{(k)})]^T[2(\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)})y^{(k-1)}]}{(d^{(k-1)T}y^{(k-1)})^2} - 2\frac{\|y^{(k-1)}\|^2(\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k-1)})^2}{(d^{(k-1)T}y^{(k-1)})^2} \\
&\le \frac{1}{8}\|\nabla f(x^{(k)})\|^2.
\end{aligned}$$

即 (5.34) 成立. **证毕**

CG_Descent 算法具有如下收敛性定理 (见 [10]).

定理 5.3.6 *设假设 5.2.1 的条件成立. 则采用 Wolfe-Powell 型线性搜索的 CG_Descent 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 满足*

$$\liminf_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\| = 0.$$

§5.4 * 共轭梯度法的收敛速度

本节, 我们介绍采用精确线性搜索的 PRP 共轭梯度法的收敛速度估计. 为此, 我们作如下假设.

假设 5.4.1 *设函数 $f: R^n \to R$ 二次连续可微, 由 PRP 共轭梯度法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^* 且 $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*)$ 正定.*

由假设 5.4.1, 存在 x^* 的邻域 $U(x^*)$ 和常数 $M \ge m > 0$ 使得

$$m\|d\|^2 \le d^T\nabla^2 f(x)d \le M\|d\|^2, \quad \forall x \in U(x^*),\ \forall d \in R^n.$$

利用中值定理, 对任何 k, 我们有

$$\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)}) = \int_0^1 \nabla^2 f(x^{(k-1)} + \tau s^{(k-1)})d\tau \cdot s^{(k-1)} \triangleq A_{k-1}s^{(k-1)},$$

其中 $s^{(k-1)} = x^{(k)} - x^{(k-1)} = \alpha_{k-1}d^{(k-1)}$. 由此及精确线性搜索条件得

$$\|\nabla f(x^{(k-1)})\|^2 = -\nabla f(x^{(k-1)})^T d^{(k-1)} = (\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)}))^T d^{(k-1)} = \alpha_{k-1}d^{(k-1)T}A_{k-1}d^{(k-1)}.$$

因此, 当 k 充分大时, 我们有

$$\|\nabla f(x^{(k-1)})\|^2 \ge m\alpha_{k-1}\|d^{(k-1)}\|^2.$$

由 β_k 的定义不难推得 (作为练习) 存在常数 $C > 0$ 使得

$$|\beta_k^{PRP}| \le C\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{\|d^{(k-1)}\|}.$$

利用 $d^{(k)}$ 的定义可得

$$\|d^{(k)}\| \le \|\nabla f(x^{(k)})\| + |\beta_k^{PRP}|\|d^{(k-1)}\| \le (1+C)\|\nabla f(x^{(k)})\|.$$

令 θ_k 表示 $d^{(k)}$ 与 $-\nabla f(x^{(k)})$ 间的夹角，则有

$$\cos\theta_k = \frac{-\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{\|\nabla f(x^{(k)})\|\,\|d^{(k)}\|} = \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{\|d^{(k)}\|} \ge (1+C)^{-1}.$$

于是，由定理 2.5.1 可得下面关于 PRP 算法的线性收敛性定理.

定理 5.4.1 *设假设 5.4.1 的条件成立. 则存在常数 $b>0$, $r\in(0,1)$ 使得当 k 充分大时，采用精确线性搜索 PRP 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 满足*

$$\|x^{(k+1)} - x^*\| \le br^k.$$

上面的定理表明了 PRP 算法至少具有线性收敛速度.

为了进一步研究共轭梯度法的收敛速度，我们对算法做适当改进. 由前面的介绍我们知道共轭梯度法具有二次终止性，即用于求解严格凸二次函数极小化问题时算法经有限次 (最多 n 次) 迭代后终止于问题的最优解. 由于一般的非线性函数 f 在任何点的附近均可以用二次函数近似，因此，我们可以粗略地认为，共轭梯度法经过连续 n 次迭代后产生的点是 f 的某个二次近似函数的一个近似解. 基于这种观察，我们可设计重新开始共轭梯度法，即算法每经过 n 次迭代后，将当前迭代点作为新的初始点重新开始共轭梯度法. 算法的具体步骤如下.

算法 5.3 (n **步重新开始共轭梯度法**)

步 *1 取初始点 $x^{(0)}\in R^n$, $d^{(0)} = -\nabla f(x^{(0)})$, 精度 $\epsilon>0$. 令 $k:=0$.*

步 *2 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\|\le\epsilon$, 则算法终止. 得问题的解 $x^{(k)}$. 否则，转步 3.*

步 *3 由线性搜索确定步长 α_k.*

步 *4 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$.*

步 *5 由某个共轭梯度法确定 $d^{(k+1)}$.*

步 *5 若 $k<n$, 令 $k:=k+1$. 转步 2. 若 $k=n$, 令 $x^{(0)}:=x^{(k)}$, $k:=0$. 转步 1.*

类似于定理 5.2.3 的证明，我们可以建立 n 步重新开始的 FR 算法的全局收敛性定理 (作为练习).

关于 n 步重新开始共轭梯度法的收敛速度，我们有如下定理 (证明可参考 [27, 定理 4.3.7]).

定理 5.4.2 *设 $f: R^n\to R$ 是三次连续可微的一致凸函数. $\{x^{(k)}\}$ 是由采用精确线性搜索的 n 步重新开始的 PRP 共轭梯度法产生的点列. 则存在常数 $C>0$ 使得*

$$\limsup_{k\to\infty}\frac{\|x^{(kn+n)} - x^*\|}{\|x^{(kn)} - x^*\|^2} \le C,$$

其中 x^* 是 f 的惟一极小值点.

习题 5

1. 证明向量 $p=(1,0)^T$ 和 $q=(3,-2)^T$ 关于矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}$$

共轭.

2. 给定矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 6 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

求关于 A 相互共轭的两个向量.

3. 设矩阵 $P=(p_1,p_2,\cdots,p_t)\in R^{n\times t}$ 列满秩. $\mathcal{P}=\mathrm{span}\,\{p_1,p_2,\ldots,p_t\}$ 是 $p_1,p_2,\cdots,p_t$ 张成的子空间. f 由 (5.2) 定义，其中 Q 对称. 证明：若矩阵 P^TQP 非奇异，则对任何 $\bar{x}\in R^n$, 问题

$$\min f(\bar{x}+x), \qquad x\in\mathcal{P}$$

的稳定点是

$$x^P=\bar{x}-P(P^TQP)^{-1}P^T\nabla f(\bar{x}).$$

而且满足 $P^T\nabla f(x^P)=0$. 若再设矩阵 P^TQP 正定，则 x^P 是上面问题的解.

4. 设 $A\in R^{n\times n}$ 对称正定，非零向量 $p^{(i)}$, $i=1,2,\ldots,n$ 关于 A 相互共轭.

(i) 证明：

$$x=\sum_{i=1}^{n}\frac{p^{(i)T}Ax}{p^{(i)T}Ap^{(i)}}p^{(i)}, \quad \forall x\in R^n.$$

(ii) 证明：

$$A^{-1}=\sum_{i=1}^{n}\frac{p^{(i)}p^{(i)T}}{p^{(i)T}Ap^{(i)}}.$$

5. 设 $\{x^{(k)}\}$ 是用采用精确线性搜索的 FR 共轭梯度法求解严格凸二次函数极小值问题 (5.2) 产生的点列， $d^{(k)}$ 是算法产生的方向.

(i) 证明：对任何 $k>0$, 有

$$d^{(k)}=-\|\nabla f(x^{(k)})\|^2\sum_{i=0}^{k}\frac{\nabla f(x^{(i)})}{\|\nabla f(x^{(i)})\|^2}.$$

(ii) 证明：对所有 $k=1,2,\ldots,n$

$$x^{(k+1)}-x^{(0)}=-\sum_{i=0}^{k}\frac{\nabla f(x^{(i)})}{\|\nabla f(x^{(i)})\|^2}\sum_{j=i}^{k}\alpha_j\|\nabla f(x^{j)})\|^2,$$

其中， α_j 为步长.

6. 取初始点 $x^{(0)}=0$. 设 $\{x^{(k)}\}$ 是用采用精确线性搜索的 FR 共轭梯度法求解严格凸二次函数极小值问题 (5.2) 产生的点列， $d^{(k)}$ 是算法产生的方向.

(i) 证明：对任何 $0 \le i \le k < n$, 有

$$d^{(k)T}d^{(i)} = \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}{\|\nabla f(x^{(i)})\|^2}\|d^{(i)}\|^2 > 0.$$

(ii) 证明：若 $d^{(k)T}Qd^{(k)} > 0$, $k = 1, 2, \ldots, t$, 则

$$\|x^{(k)}\| < \|x^{(k+1)}\|, \qquad \forall 0 \le k \le t-1.$$

(iii) 证明：

$$x^{(k+1)T}q < x^{(k)T}q, \quad \forall k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

7. 设对称正定矩阵 A 的特征值为 λ_i, $i = 1, 2, \ldots, n$. $P(t)$ 是一个实系数多项式. 证明：

$$\|P(A)x\|_A \le \max_{1 \le i \le n} |P(\lambda_i)| \, \|x\|_A, \qquad \forall x \in R^n.$$

8. 设 $\{x^{(k)}\}$ 是由采用精确线性搜索的共轭方向法求解 (5.2) 产生的点列. 证明：若 Q 只有 r 个不同的特征值，则算法最多经 r 步可得到问题的最优解.

9. 证明下面的结论.

(i) 对任何 $k \ge 0$, 由 FR(PRP, CD, DY, HS) 共轭梯度法产生的方向 $d^{(k)}$ 满足：

$$d^{(k)} \in \text{span}\,\{\nabla f(x^{(0)}), \nabla f(x^{(1)}), \ldots, \nabla f(x^{(k)})\},$$

其中， span $\{\nabla f(x^{(0)}), \nabla f(x^{(1)}), \ldots, \nabla f(x^{(k)})\}$ 表示由向量 $\nabla f(x^{(i)})$, $i = 0, 1, \ldots, k$ 张成的子空间.

(ii) 设 $d^{(k)}$ 是取 $B_0 = I$(或 $H_0 = I$) 的 BFGS(DFP, Broyden 族) 算法产生的方向，则对任何 $k \ge 0$, $d^{(k)}$ 也满足 (i) 中关系.

(iii) 当用于求解严格凸二次函数极小值问题时，若采用精确线性搜索，上面 (i) 和 (ii) 中的 $d^{(k)}$ 相等. 即，采用精确线性搜索的 FR(PRP, CD, DY, HS) 算法与采用精确线性搜索的 BFGS(DFP, Broyden 族) 算法 (取 $B_0 = I$ 或 $H_0 = I$) 用于求解严格凸二次函数极小值问题时是同一算法.

10. 设 $\{x^{(k)}\}$ 是采用精确线性搜索的共轭方向法求解严格凸二次规划 (5.2) 产生的点列. 记 A 的特征值为：$0 < \lambda_1 \le \lambda_2 \le \cdots \le \lambda_n$.

(i) 证明如下估计式：

$$\|x^{(k+1)} - x^*\|_Q^2 \le \Big(\frac{\lambda_{n-k} - \lambda_1}{\lambda_{n-k} + \lambda_1}\Big)^2 \|x^{(0)} - x^*\|_Q^2,$$

其中， x^* 是问题 (5.2) 的惟一解， $\|x\|_Q = (x^TQx)^{1/2}$.

(ii) 证明：

$$\|x^{(k)} - x^*\|_Q \le \Big(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\Big)^{2k} \|x^{(0)} - x^*\|_Q,$$

其中， $\kappa = \lambda_n/\lambda_1$ 是 Q 的条件数.

11. 用采用精确线性搜索的 FR 算法求解下面的无约束问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2 - x_1.$$

取初始点为 $x^{(0)} = (0, 1)^T$.

12. 设函数 f 连续可微有下界且 ∇f Lipschitz 连续. $\{x^{(k)}\}$ 由采用精确线性搜索的 FR 算法产生. 记 θ_k 表示 $-\nabla f(x^{(k)})$ 与 $d^{(k)}$ 间的夹角.

 (i) 证明:
$$\|d^{(k)}\| = \sec\theta_k \|\nabla f(x^{(k)})\|, \quad k=0,1,\ldots.$$

 (ii) 证明:
$$\frac{\tan^2\theta_{k+1}}{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2} = \frac{1}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2} + \frac{\tan^2\theta_k}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}, \quad k=0,1,\ldots.$$

13. 设 $f: R^n \to R$ 是二次连续可微的一致凸函数. $\{x^{(k)}\}$ 是由采用精确线性搜索的 PRP 算法产生的点列.

 (i) 证明:存在常数 $C>0$ 使得
$$|\beta_k^{\rm PRP}| \le C\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{\|d^{(k-1)}\|}.$$

 (ii) 证明:
$$\frac{\|d^{(k)}\|}{\|\nabla f(x^{(k)})\|} \le 1+C.$$

 (iii) 证明: $\{x^{(k)}\}$ 收敛于无约束问题 $\min f(x)$ 的惟一解.

14. 设 $f: R^n \to R$ 是二次连续可微的一致凸函数. $\{x^{(k)}\}$ 是由采用精确线性搜索的 FR 算法产生的点列.

 (i) 证明:存在常数 $C_1>0$ 使得
$$|\beta_k^{\rm FR}-1| \le C_1\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|+\|\nabla f(x^{(k-1)})\|}{\|d^{(k-1)}\|}.$$
 从而
$$\|d^{(k)}-d^{(k-1)}\| \le (1+C_1)\|\nabla f(x^{(k)})\| + C_1\|\nabla f(x^{(k-1)})\|.$$

 (ii) 证明:存在常数 $C_2>0$ 使得
$$\|d^{(k)}\| \le C_2\|d^{(k-1)}\|.$$

15. 证明:采用 Wolfe-Powell 型线性搜索的 DY 算法是下降算法.

16. 证明: MFR 算法产生的方向与 DY 算法产生的方向平行.

17. 证明:对 $k\ge 1$, 若在 BFGS 逆修正公式 (4.18) 中取 $H_{k-1}=I$ 为单位矩阵, 则相应的拟 Newton 方向 $d^{(k)}$ 可表示为形如 (5.30) 的形式. 即 $d^{(k)}$ 可表示为方向 $-\nabla f(x^{(k)})$, $d^{(k-1)}$ 和 $y^{(k-1)}$ 的线性组合.

18. 证明:若 $f(x^{(k)})^T d^{(k)}<0$, 则不等式 (5.23) 对所有充分小的 $\alpha_k>0$ 均成立.

19. 设假设条件 5.2.1 成立, 点列 $\{x^{(k)}\}$ 由 MPRP 算法产生, 其中 α_k 满足修正的 Armijo 型线性搜索条件 (5.23).

 (i) 证明:若存在常数 $\epsilon>0$ 使得 $\|\nabla f(x^{(k)})\|\ge\epsilon$ 对所有的 $k\ge 0$ 成立, 则序列 $\{d^{(k)}\}$ 有界.

 (ii) 证明: $\{x^{(k)}\}$ 满足 (5.29).

20. 设函数 f 为二次连续可微的一致凸函数. 点列 $\{x^{(k)}\}$ 由 MPRP 算法产生, 其中 α_k 满足 Armijo 型线性搜索条件 (2.6). 证明: $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 f 的惟一最小值点.

21. 设函数 f 是二次连续可微的一致凸函数, 点列 $\{x^{(k)}\}$ 由采用 Goldstein 线性搜索或 Wolfe-Powell 型线性搜索的 CG_Descent 算法产生.

(i) 证明下面的不等式：

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^4}{\|d^{(k)}\|^2} < \infty.$$

(ii) 证明存在常数 $C > 0$ 使得

$$|\beta_k^{\mathrm{HZ}}| \le C \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{\|d^{(k-1)}\|}.$$

(iii) 证明：序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 f 的惟一极小值点.

22. 设假设 5.2.1 的条件成立. 建立采用精确线性搜索的 n 步重新开始的 FR 共轭梯度法的全局收敛性定理.

第六章　无约束问题算法 (IV) — 信赖域算法

前面几章介绍求解无约束问题几类算法的共同点是基于方向和步长确定迭代点列 $\{x^{(k)}\}$, 即在当前点 $x^{(k)}$ 处，首先按照某种方式确定一个下降方向 $d^{(k)}$ (如最速下降方向，牛顿方向等), 然后从 $x^{(k)}$ 出发，沿方向 $d^{(k)}$ 进行线性搜索确定步长 α_k, 得到下一个迭代点 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$. 我们称这类方法为线性搜索型算法.

本章我们介绍求解无约束问题

$$\min f(x), \qquad x \in R^n \tag{6.1}$$

的另一类算法 — 信赖域算法. 信赖域算法的基本思想是：在当前迭代点 $x^{(k)}$ 的附近用一个简单函数近似目标函数 f. 用该近似函数在 $x^{(k)}$ 的某个邻域内的极小值点作为下一个迭代点. 与线性搜索型算法比较，信赖域算法在每次迭代同时确定搜索方向和步长.

§6.1　信赖域算法的基本结构

由于信赖域方法用 f 的某个近似函数在 $x^{(k)}$ 邻域的极小值点作为下一个迭代点，因此，设计信赖域算法需要考虑如下相关问题：

- 目标函数 f 的 (简单) 近似形式.
- 点 $x^{(k)}$ 的邻域 (称为信赖域) 大小的确定.
- 函数值序列的下降性检测.
- 近似问题 (称为信赖域子问题) 的求解.

下面针对这四个问题分析，并建立信赖域算法的基本结构.

考虑到一般非线性函数在任何点的邻域内都可以用二次函数近似，而且二次函数的极小值问题相对容易求解. 因此，在信赖域算法中，通常我们采用二次函数作为目标函数 f 的近似，用该二次函数在 $x^{(k)}$ 某邻域内的极小值点作为下一个迭代点，即 $x^{(k+1)}$ 为下面问题的解：

$$\begin{array}{ll} \min & f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T(x - x^{(k)}) + \frac{1}{2}(x - x^{(k)})^T B_k (x - x^{(k)}) \\ \text{s.t.} & \|x - x^{(k)}\| \le \Delta_k, \end{array}$$

其中， $B_k \in R^{n\times n}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的 Hessian 阵或其近似，参数 $\Delta_k > 0$ 控制 $x^{(k)}$ 的邻域大小. 若令 $d = x - x^{(k)}$, 则上面的问题可改写为如下等价的二次函数极小值问题：

$$\begin{array}{ll} \min & f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T d + \frac{1}{2} d^T B_k d \stackrel{\triangle}{=} q_k(d), \\ \text{s.t.} & \|d\| \le \Delta_k. \end{array} \tag{6.2}$$

设 $d^{(k)}$ 是问题 (6.2) 的解. 则下一个迭代点为 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$. 问题 (6.2) 中的可行域

$$D = \{d \in R^n \mid \|d\| \le \Delta_k\}$$

称为信赖域，参数 $\Delta_k > 0$ 称为信赖域半径，问题 (6.2) 称为信赖域子问题，其中范数可任意选取．在本章中，如无特别说明，我们采用 Euclid 范数．

信赖域子问题 (6.2) 是仅有一个不等式约束的二次函数极小化问题．我们将在本章的 §4 中介绍求解该子问题的常用算法．

由函数的二阶 Taylor 展开我们知道，当 Δ_k 充分小时，二次函数 q 在信赖域 D 中是 f 的一个很好的近似．另一方面，当 f 本身是一个二次函数或近似于二次函数时， q 可能在某一个较大的范围内也是 f 的一个很好的近似．如何确定信赖域半径是信赖域算法的一个重要环节．一方面，我们希望在 D 中 q 与 f 的近似程度好，另一方面，我们希望信赖域尽可能的大．为了合理地确定信赖域半径，我们定义 Δf_k 为 f 在第 k 步的实际下降量，即

$$\Delta f_k = f(x^{(k)}) - f(x^{(k)} + d^{(k)}), \tag{6.3}$$

其中 $d^{(k)}$ 是信赖域子问题 (6.2) 的解．令 Δq_k 为对应的预测下降量，即

$$\Delta q_k = f(x^{(k)}) - q_k(d^{(k)}). \tag{6.4}$$

定义比值

$$r_k = \frac{\Delta f_k}{\Delta q_k}. \tag{6.5}$$

注意到 r_k 从某种角度反映了二次函数 $q_k(d^{(k)})$ 与目标函数 $f(x^{(k)} + d^{(k)})$ 的近似程度．若 r_k 接近于 1, 则可以认为二次函数 $q_k(d^{(k)})$ 在信赖域 D 上与目标函数 $f(x^{(k)} + d^{(k)})$ 的近似程度很好．反之，若 r_k 离 1 较远，我们认为 $q_k(d^{(k)})$ 在信赖域 D 上与目标函数 $f(x^{(k)} + d^{(k)})$ 的近似程度不好．基于上述观察，我们可用 r_k 与 1 的近似程度作为对信赖域半径是否合适的准则．即，可通过如下方式调整信赖域半径．

给定常数 $\eta, \eta_1, \eta_2 \in (0,1)$ 满足 $\eta < \eta_1 < \eta_2$ (一般地 η 接近于或等于 0, η_2 接近于 1, 如 $\eta_2 = 3/4$ 等). 若 $r_k \geq \eta_2$, 我们可认为 q 在 D 中是 f 的一个很好的近似，或者说得到一个非常成功的迭代点 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$. 此时， q 有可能在一个更大一点的区域内也是 f 的一个很好的近似，因此，我们可将信赖域的半径扩大，即令 $\Delta_{k+1} > \Delta_k$. 若 $\eta_1 < r_k < \eta_2$, 我们可认 q 在 D 中是 f 的一个好的近似，或者说得到一个好的迭代点 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$. 此时可保持信赖域半径不变，即令 $\Delta_{k+1} = \Delta_k$ (为了在下一次迭代得到一个更成功的点，也可减少信赖域半径，即令 $\Delta_{k+1} < \Delta_k$). 若 $r_k \leq \eta$, 我们可认 q 在 D 中是 f 的近似程度不好，或者说 $x^{(k)} + d^{(k)}$ 是一个不成功的迭代点．说明信赖域半径过大，此时需减少信赖域半径，即令 $\Delta_{k+1} < \Delta_k$.

在上面的基础上，我们给出求解 (6.1) 的信赖域算法如下．

算法 6.1 *(信赖域算法)*

步 *0 (初始化)* 取初始点 $x^{(0)} \in R^n$, $\bar{\Delta} > 0$, $\Delta_0 \in (0, \bar{\Delta})$, $\eta \in [0, \frac{1}{4})$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *1 (收敛性检测)* 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \epsilon$, 则算法终止．得问题的解 $x^{(k)}$. 否则，转步 *2*.

步 *2 (子问题求解)* 解信赖域子问题 (6.2) 得解 $d^{(k)}$.

步 *3 (信赖域修正)* 由 (6.3), (6.4)) 和 (6.5) 计算 r_k.
若 $r_k > \frac{3}{4}$, 则令 $\Delta_{k+1} = \min\{2\Delta_k, \bar{\Delta}\}$.
若 $\eta < r_k < \frac{1}{4}$, 则令 $\Delta_{k+1} = \frac{1}{2}\Delta_k$.
若 $\frac{1}{4} \le r_k \le \frac{3}{4}$, 则令 $\Delta_{k+1} = \Delta_k$.

步 *4 (可接受检测)* 若 $r_k \le \eta$, 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)}$, $k := k+1$, 转步 *2*；
否则令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$, $k := k+1$. 转步 *1*.

注: 算法 6.1 的步 3 中的常数 $\frac{1}{4}$, $\frac{3}{4}$ 和 2 是根据经验选取的. 实际计算时, 可根据问题对它们进行调整.

由于子问题 (6.2) 的可行域有界, 因此, 算法 6.1 步 2 中的 $d^{(k)}$ 存在. 下面的定理说明, 若 $x^{(k)}$ 不是问题 (6.1) 的稳定点, 则预估下降量 $\Delta q_k(d^{(k)}) > 0$. 因此, 算法是适定的.

定理 6.1.1 设 $d^{(k)}$ 是问题 (6.2) 的解. 若 $\nabla f(x^{(k)}) \neq 0$, 则

$$\Delta q_k(d^{(k)}) = f(x^{(k)}) - q_k(d^{(k)}) > 0.$$

证明 注意到 $d = 0$ 是子问题 (6.2) 的可行点, 因此 $q_k(d^{(k)}) \le q_k(0) = f(x^{(k)})$, 即 $\Delta q_k(d^{(k)}) \ge 0$. 若 $\Delta q_k(d^{(k)}) = 0$, 即 $q_k(d^{(k)}) = f(x^{(k)}) = q_k(0)$. 故 0 是子问题 (6.2) 的最优解. 但 0 是可行域的内点, 因此 $\nabla q_k(0) = 0$, 即 $\nabla f(x^{(k)}) = 0$. **证毕**

利用定理 6.1.1 不难证明函数值序列 $\{f(x^{(k)})\}$ 是单调非增的. 事实上, 对任意 k, 若 $r_k \le \eta$, 则 $x^{(k+1)} = x^{(k)}$, 此时有 $f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)})$. 若 $r_k > \eta$, 由定理 6.1.1 以及 r_k 的定义有

$$f(x^{(k)}) - f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}) - f(x^{(k)} + d^{(k)}) \ge \eta \Delta q_k(d^{(k)}) > 0.$$

因此, $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$. 上面的过程证明了如下推论.

推论 6.1.1 设 $\{x^{(k)}\}$ 由算法 *6.1* 产生. 则序列 $\{f(x^{(k)})\}$ 单调非增.

§6.2 信赖域算法的收敛性

为了分析信赖域算法的收敛性, 我们引入在迭代点 $x^{(k)}$ 处的柯西点 p_k^c (Cauchy Point):

$$p_k^c = -\tau_k \frac{\Delta_k}{\|\nabla f(x^{(k)})\|} \nabla f(x^{(k)}), \tag{6.6}$$

其中

$$\tau_k = \begin{cases} 1, & \text{如果 } \nabla f(x^{(k)})^T B_k \nabla f(x^{(k)}) \le 0, \\ \min\left\{ \dfrac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^3}{\Delta_k \nabla f(x^{(k)})^T B_k \nabla f(x^{(k)})}, 1 \right\}, & \text{其它}. \end{cases} \tag{6.7}$$

不难验证

$$\|p_k^c\| = \tau_k \Delta_k \le \Delta_k.$$

因此, 柯西点 p_k^c 在信赖域子问题的约束区域内, 它平行于 f 在 $x^{(k)}$ 处的最速下降方向. 下面引理给出了柯西点的一个重要性质.

引理 6.2.1 柯西点 p_k^c 满足

$$f(x^{(k)}) - q_k(p_k^c) \geq \frac{1}{2}\|\nabla f(x^{(k)})\| \min\left\{\Delta_k, \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{\|B_k\|}\right\}. \tag{6.8}$$

证明 首先考虑 $\nabla f(x^{(k)})^T B_k \nabla f(x^{(k)}) \leq 0$ 的情况．此时有 $\tau_k = 1$ 且

$$\begin{aligned} f(x^{(k)}) - q_k(p_k^c) &= \frac{\Delta_k}{\|\nabla f(x^{(k)})\|}\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 - \frac{\Delta_k^2}{2\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}\nabla f(x^{(k)})^T B_k \nabla f(x^{(k)}) \\ &\geq \Delta_k\|\nabla f(x^{(k)})\| \geq \|\nabla f(x^{(k)})\| \min\left\{\Delta_k, \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{\|B_k\|}\right\}. \end{aligned}$$

故 (6.8) 成立.

再考虑 $\nabla f(x^{(k)})^T B_k \nabla f(x^{(k)}) > 0$ 的情况．若

$$\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^3}{\Delta_k \nabla f(x^{(k)})^T B_k \nabla f(x^{(k)})} \leq 1, \tag{6.9}$$

则 $\tau_k = \|\nabla f(x^{(k)})\|^3 / (\Delta_k \nabla f(x^{(k)})^T B_k \nabla f(x^{(k)}))$, 且

$$\begin{aligned} f(x^k) - q_k(p_k^c) &= \frac{1}{2}\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^4}{\nabla f(x^{(k)})^T B_k \nabla f(x^{(k)})} \geq \frac{1}{2}\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}{\|B_k\|} \\ &\geq \frac{1}{2}\|\nabla f(x^{(k)})\| \min\left\{\Delta_k, \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{\|B_k\|}\right\}, \end{aligned}$$

即 (6.8) 成立．若 (6.9) 不成立，则 $\tau_k = 1$ 且

$$\nabla f(x^{(k)})^T B_k \nabla f(x^{(k)}) < \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^3}{\Delta_k}.$$

因此,

$$\begin{aligned} f(x^{(k)}) - q_k(p_k^c) &= \frac{\Delta_k}{\|\nabla f(x^{(k)})\|}\|\nabla f(x^{(k)})\|^2 - \frac{1}{2}\frac{\Delta_k^2}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}\nabla f(x^{(k)})^T B_k \nabla f(x^{(k)}) \\ &\geq \Delta_k\|\nabla f(x^{(k)})\| - \frac{1}{2}\frac{\Delta_k^2}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|^3}{\Delta_k} \\ &\geq \frac{1}{2}\|\nabla f(x^{(k)})\| \min\left\{\Delta_k, \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{\|B_k\|}\right\}, \end{aligned}$$

即 (6.8) 也成立. **证毕**

注意到柯西点是子问题的可行点，若 $d^{(k)}$ 是子问题的解点，则有 $q_k(p_k^c) \geq q_k(d^{(k)})$. 因此，由上面的引理可直接得下面的推论.

推论 6.2.1 设 $d^{(k)}$ 是信赖域子问题 (6.2) 的解．则

$$f(x^{(k)}) - q_k(d^{(k)}) \geq \frac{1}{2}\|\nabla f(x^{(k)})\| \min\left\{\Delta_k, \frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{\|B_k\|}\right\}. \tag{6.10}$$

下面两个定理分别给出了算法 6.1 对 $\eta=0$ 和 $\eta>0$ 两种取值的收敛结果. 首先，我们证明 $\eta=0$ 时，算法 6.1 的如下收敛性定理.

定理 6.2.1 *设函数 f 连续可微有下界，且存在常数 $\beta>0$, 使得 $\|B_k\|\le\beta$. 若在算法 6.1 中取 $\eta=0$, 则*

$$\liminf_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\|=0. \tag{6.11}$$

证明 由 r_k 的定义我们有

$$|r_k-1|=\left|\frac{q_k(d^{(k)})-f(x^{(k)}+d^{(k)})}{f(x^{(k)})-q_k(d^{(k)})}\right|.$$

又由中值定理可得

$$\begin{aligned}|q_k(d^{(k)})-f(x^{(k)}+d^{(k)})| &= \left|\frac{1}{2}d^{(k)T}B_kd^{(k)}-\int_0^1[\nabla f(x^{(k)}+td^{(k)})-\nabla f(x^{(k)})]^Td^{(k)}dt\right|\\ &\le \frac{\beta}{2}\|d^{(k)}\|^2+\|d^{(k)}\|\int_0^1\|\nabla f(x^{(k)}+td^{(k)})-\nabla f(x^{(k)})\|dt\\ &\triangleq \frac{\beta}{2}\|d^{(k)}\|^2+C(d^{(k)})\|d^{(k)}\|.\end{aligned} \tag{6.12}$$

此处 $C(d^{(k)})$ 满足 $\lim\limits_{d\to 0}\frac{C(d)}{\|d\|}=0$.

反设 (6.11) 不成立，则存在 $\epsilon>0$, 使得对所有 $k\ge 0$ 有 $\|\nabla f(x^{(k)})\|\ge\epsilon$. 由 (6.10) 和 B_k 的有界性，对所有 $k\ge 0$ 有

$$f(x^{(k)})-q_k(d^{(k)})\ge\frac{1}{2}\|\nabla f(x^{(k)})\|\min\left\{\Delta_k,\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{\|B_k\|}\right\}\ge\frac{1}{2}\epsilon\min\left\{\Delta_k,\frac{\epsilon}{\beta}\right\}. \tag{6.13}$$

上式结合 (6.12) 及 $d^{(k)}$ 的信赖域限制可得

$$|r_k-1|\le\frac{\Delta_k(\beta\Delta_k+2C(d^{(k)}))}{\epsilon\min(\Delta_k,\epsilon/\beta)}. \tag{6.14}$$

由 $C(d^{(k)})$ 的性质知，存在 $\tilde\Delta\in(0,\bar\Delta)$, 当 $\Delta_k\le\min\{\tilde\Delta,\epsilon\beta^{-1}\}$ 时有

$$\beta\Delta_k+2C(d^{(k)})\le\frac{\epsilon}{4}.$$

由此及 (6.14) 推得

$$|r_k-1|\le\frac{\epsilon\Delta_k/4}{\epsilon\Delta_k}=\frac{1}{4}.$$

因此 $r_k>\frac{3}{4}$. 由算法 6.1 知信赖半径 Δ_k 减少只可能发生在 $\Delta_k\ge\min\{\tilde\Delta,\epsilon\beta^{-1}\}$. 因此，

$$\Delta_k\ge\frac{1}{4}\min\{\tilde\Delta,\epsilon\beta^{-1}\}\qquad\forall k\ge 0. \tag{6.15}$$

若有一个无限指标集 $\mathcal{K}$ 使得 $r_k\ge\frac{1}{4},\ \ k\in\mathcal{K}$. 则由 (6.13) 和算法 6.1 中步 3, 对 $k\in\mathcal{K},\ k\ge k_0$ 我们导出

$$f(x^{(k)})-f(x^{(k+1)})=f(x^{(k)})-f(x^{(k)}+d^{(k)})\ge\frac{1}{4}[f(x^{(k)})-q_k(d^{(k)})]\ge\frac{1}{8}\epsilon\min(\Delta_k,\epsilon/\beta).$$

因 $\{f(x^{(k)})\}$ 单调非增有下界，上式隐含着

$$\lim_{k\in\mathcal{K},k\to\infty}\Delta_k=0.$$

与 (6.15) 矛盾. 因此，对所有充分大的 k, 必有 $r_k<\frac{1}{4}$. 另一方面，由算法 6.1 中步 3, 当 $r_k<\frac{1}{4}$ 时，Δ_k 按 1/2 比率缩小. 故有 $\lim_{k\to\infty}\Delta_k=0$, 与 (6.15) 矛盾. 因此假设条件 $\|\nabla f(x^{(k)})\|\geq\epsilon$ 不成立. 即 (6.11) 成立. **证毕**

我们给出 $\eta>0$ 时，算法 6.1 的如下收敛性定理.

定理 6.2.2 *设定理 6.2.1 的条件满足且 ∇f Lipschitz 连续. 若在算法 6.1 中取 $\eta>0$, 则*

$$\lim_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\|=0. \tag{6.16}$$

下面的定理给出了 Newton 型信赖域算法 (即在算法 6.1 中取 $B_k=\nabla^2 f(x^{(k)})$) 的收敛速度估计. 其证明见 [27] 中定理 3.6.2 和定理 3.6.3.

定理 6.2.3 *设 $f\in C^2$ 有下界，且由 Newton 型信赖域算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 有界. 则存在 $\{x^{(k)}\}$ 的聚点 x^* 满足优化问题 (6.1) 的一阶必要条件和二阶必要条件. 若再假设在 x^* 处 f 的 Hessian 阵正定，则*

$$\lim_{k\to\infty}r_k=1,\quad \lim_{k\to\infty}x^{(k)}=x^*,\quad \inf\ \Delta_k>0,$$

而且，当 k 充分大时，$\|d^{(k)}\|<\Delta_k$. 此外，$\{x^{(k)}\}$ 的超线性收敛到 x^*. 若进一步假设 $\nabla^2 f$ 在 x^* 处 Lipschitz 连续，则 $\{x^{(k)}\}$ 的收敛速度是二阶的.

§6.3 信赖域 — 线性搜索型算法

信赖域算法的一个重要特点是其鲁棒性. 而且，信赖域子问题一定有解. 但在每次迭代时信赖域算法可能需要求解多次子问题才能获得成功迭代点. 由于信赖域子问题是一个约束问题，求解相对复杂. 另一方面，线性搜索型算法无需多次求解子问题即可产生一个使得目标函数下降的点. 为了保持信赖域算法的优点，同时减少计算量，可采用信赖域和线性搜索型算法相结合的方式，即信赖域 — 线性搜索型算法求解 (6.1). 其基本思想如下. 在当前迭代点 $x^{(k)}$ 处，求解信赖域子问题 (6.2) 得方向 $d^{(k)}$. 然后利用线性搜索确定步长 α_k, 并令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}$. 下引理说明信赖域子问题 (6.2) 的解是 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向 (证明留作练习).

引理 6.3.1 *设 f 连续可微. 则信赖域子问题 (6.2) 的解 $d^{(k)}$ 满足*

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}\leq-\frac{1}{2}\|\nabla f(x^{(k)})\|\min\Big\{\Delta_k,\frac{\|\nabla f(x^{(k)})\|}{2\|B_k\|}\Big\}. \tag{6.17}$$

在上面的基础上，我们建立求解无约束问题 (6.1) 的信赖域 — 线性搜索型算法如下 (详见文献 [20]).

算法 6.2（**信赖域 - 线性搜索组合算法**）

步 *0 (初始化)* 取初始点 $x^{(0)} \in R^n$, $\Delta_0 > 0$, $\eta \in (0,1)$, 选取常数 $0 < c_2 < c_3 < 1 < c_1$, $\rho \in (0,1)$; 令 $k := 0$.

步 *1 (收敛性检测)* 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \epsilon$, 则算法终止. 得问题的解 $x^{(k)}$.

步 *2 (子问题求解)* 解信赖域子问题 (6.2) 得解 $d^{(k)}$.

步 *3 (下降测试和线性搜索)* 若 $f(x^{(k)} + d^{(k)}) < f(x^{(k)})$, 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$, 转步 *4*. 否则，令 α_k 是 $\{\rho^i \mid i = 0, 1, \cdots\}$ 中使得下式成立的最大者

$$f(x^{(k)} + \rho^i d^{(k)}) < f(x^{(k)}).$$

令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$. 取 $\Delta_{k+1} \in \{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|, c_3\Delta_k\}$. 转步 *5*

步 *4 (信赖域修正)* 计算

$$r_k = \frac{f(x^{(k)}) - f(x^{(k+1)})}{q_k(0) - q_k(d^{(k)})}.$$

若 $r_k > \eta$ 且 $\|d^{(k)}\| < \Delta_k$, 令 $\Delta_{k+1} = \Delta_k$. 否则定义

$$\Delta_{k+1} = \begin{cases} [c_2\|d^{(k)}\|,\ c_3\Delta_k], & \text{若 } r_k < \eta, \\ [\Delta_k,\ c_1\Delta_k], & \text{若 } r_k > \eta \text{ 且 } \|d^{(k)}\| = \Delta_k. \end{cases}$$

步 *5 (循环)* 确定 B_{k+1}, 令 $k := k + 1$. 转步 *1*.

注: 步 2 的子问题可采用非精确求解，其近似解 $d^{(k)}$ 满足：存在正常数 $\tau > 0$, 使得

$$q_k(0) - q_k(d^{(k)}) \ge \tau \|\nabla f(x^{(k)})\| \min\{\Delta_k, \|\nabla f(x^{(k)})\|/\|B_k\|\} \tag{6.18}$$

和

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \le -\tau \|\nabla f(x^{(k)})\| \min\{\Delta_k, \|\nabla f(x^{(k)})\|/\|B_k\|\}. \tag{6.19}$$

下面的定理给出算法 6.2 的全局收敛性 (证明参见 [20, 定理 3.7]).

定理 6.3.1 设函数 f 二次连续可微且 $\|\nabla^2 f(x)\|$ 有界. 若算法 *6.2* 产生的点列有界，且 B_k 满足

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{1 + \max\limits_{1 \le i \le k} \|B_k\|} = \infty,$$

则有

$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0.$$

§6.4 信赖域子问题的求解

信赖域算法中子问题的求解是算法实现的关键．子问题 (6.2) 是一个目标为二次函数的约束优化问题．当采用 $\|\cdot\|_\infty$ 范数时，可利用第十一章介绍的有效集算法求解．下面介绍采用 Euclid 范数时，精确求解与非精确求解子问题 (6.2) 的特殊算法．为方便起见，省略迭代指标，用 $x \in R^n$ 表示当前迭代点，此时信赖域子问题为：

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) + \nabla f(x)^T d + \frac{1}{2} d^T B d \triangleq q(d), \\ \text{s.t.} & \|d\| \le \Delta. \end{array} \tag{6.20}$$

§6.4.1 精确求解方法

不难发现，若 B 正定且 $\bar{d} \triangleq -B^{-1}\nabla f(x)$ 满足 $\|\bar{d}\| \le \Delta$, 即无约束问题

$$\min f(x) + \nabla f(x)^T d + \frac{1}{2} d^T B d$$

的解是问题 (6.20) 的可行点，则 $\bar{d}$ 是问题 (6.20) 的解.

一般情况下子问题 (6.20) 的解有如下结论，其证明留作练习.

定理 6.4.1 *d^* 是子问题 (6.20) 的全局最优解当且仅当 d^* 可行，存在常数 $\lambda^* \ge 0$ 满足 $(B+\lambda^* I)$ 半正定，且有*

$$\begin{cases} (B+\lambda^* I) d^* = -\nabla f(x), \\ \lambda^*(\Delta - \|d^*\|) = 0. \end{cases} \tag{6.21}$$

定理 6.4.1 给出了信赖域子问题 (6.20) 解的一个等价性条件．利用此条件，我们可构造求解子问题算法．设矩阵 $B + \lambda^* I$ 正定．若线性方程组

$$Bd + \nabla f(x) = 0$$

的解 $\bar{d}$ 满足 $\|\bar{d}\| \le \Delta$, 则 $d^* = \bar{d}$. 此情形对应于 $\lambda^* = 0$ 且 B 正定．否则，必有 $\lambda^* > 0$. 此时求解信赖域子问题 (6.20) 等价于解如下方程组

$$\begin{cases} (B+\lambda I) d &= -\nabla f(x), \\ \|d\| &= \Delta. \end{cases} \tag{6.22}$$

取 $\lambda > 0$ 充分大使得 $B + \lambda I$ 正定，由 (6.22) 知求 (6.20) 的解可通过解如下关于 λ 的一元非线性方程

$$\phi_1(\lambda) = \|(B+\lambda I)^{-1}\nabla f(x)\| - \Delta = 0 \tag{6.23}$$

得到解 λ^*. 然后由 (6.22) 的第一个方程组得子问题的解 $d^* = d(\lambda^*) = -(B+\lambda^* I)^{-1}\nabla f(x)$.

基于非线性方程 (6.23) 求信赖域子问题的方法称为子问题的精确解法．利用矩阵的对角化分解可知 (见 [19, 第四章]), $\phi_1(\lambda)$ 是一非线性程度高的系统．为了简化方程的计算，定义

$$\phi_2(\lambda) = \frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\|d(\lambda)\|}. \tag{6.24}$$

$\phi_2(\lambda)$ 近似为线性方程系统，且方程组 (6.23) 等价于方程

$$\phi_2(\lambda) = 0.$$

该方程系统可应用牛顿迭代法建立其迭代计算式为：

$$\lambda_{l+1} = \lambda_l - \frac{\phi_2(\lambda_l)}{\phi_2'(\lambda_l)} = \lambda_l + \left(\frac{\|d_l\|}{\|q_l\|}\right)^2 \left(\frac{\|d_l\| - \Delta}{\Delta}\right). \tag{6.25}$$

根据如上分析可建立信赖域子问题精确求解的计算步骤如下：

算法 6.3 *(*信赖域子问题的精确算法*)*

步 *0* 给定 $\lambda_0 > 0$, $\Delta > 0$. 令 $l := 0$.

步 *1* 若 λ_l 是问题 (6.24) 的解，则解线性问题 (6.22) 得解 $d^{(l)}$. 否则，转步 *2.*

步 *2* 作 *Cholesky* 分解 $B + \lambda^{(l)} I = R^T R$. 解方程组

$$R^T R d_l = -\nabla f(x), \quad R^T q_l = d_l$$

得解 d_l, q_l.

步 *3*

$$\lambda_{l+1} = \lambda_l + \left(\frac{\|d_l\|}{\|q_l\|}\right)^2 \left(\frac{\|d_l\| - \Delta}{\Delta}\right). \tag{6.26}$$

步 *4* 令 $l := l + 1$, 转步 *1.*

注: 上面的算法只适合于矩阵 $B + \lambda^* I$ 正定时的情况. 当 $B + \lambda^* I$ 非正定时，子问题 (6.20) 的求解较为复杂. 此时，子问题的求解方法可参看 [24] 中 §2.4.

§6.4.2 折线方法 (Dogleg Method)

上小节介绍的信赖域子问题精确求解计算量较大. 而且当 $B + \lambda^* I$ 非正定时，子问题 (6.20) 的求解较为复杂. 另一方面，从定理 6.2.1 的证明可见，算法 6.1 全局收敛的关键是柯西下降性条件 (6.8). 此条件为保证算法的全局收敛性提供了非精确解的一个标准. 因此，我们可考虑非精确求解子问题 (6.2), 获得其近似解 $d^{(k)}$ 满足部分柯西下降量. 即求 $d^{(k)} \in D$ 使得对某个 $c \in (0, 1]$,

$$f(x^{(k)}) - f(x^{(k)} + d^{(k)}) \ge c[f(x^{(k)}) - f(x^{(k)} + p_k^c)], \tag{6.27}$$

其中 p_k^c 为由 (6.6) 定义的柯西点.

下面我们介绍非精确求解信赖域子问题的折线方法. 由信赖域子问题 (6.20) 知其解 d^* 是信赖域半径 Δ 的函数，记为 $d^*(\Delta)$. 几何上为一条曲线，称其为最优解曲线 (见图 6.1) .

折线法的思想是用一条折线代替精确解曲线 $d^*(\Delta)$. 为了构造合适的折线，首先分析子问题解的特性. 若 B 正定且 $\|-B^{-1}\nabla f(x)\| \le \Delta$, 则 (6.20) 的精确解为

$$d^*(\Delta) = -B^{-1}\nabla f(x) \triangleq d^B. \tag{6.28}$$

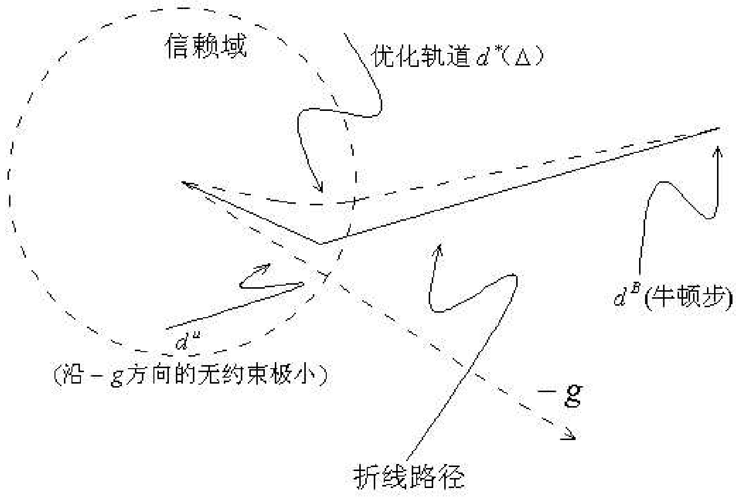

图 6.1: 最优解曲线和折线近似图示.

否则，我们可作如下分析. 当 Δ 很小时，信赖域子问题中目标函数的二次项的作用不大. 因此，可用函数 $f(x)$ 的一次 (线性) 近似，此时在约束 $\|d\| \le \Delta$ 下子问题的近似解为 $d^*(\Delta) \approx -\Delta\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|}$. 这显示可采用最速下降方向作为解曲线的近似. 基于最速下降方向的考虑和省略信赖域约束，我们取子问题解的形式为 $d = -\tau\nabla f(x)$. 通过目标函数极小化可确定子问题沿最速下降方向的解为

$$d^U = -\frac{\nabla f(x)^T\nabla f(x)}{\nabla f(x)^T B \nabla f(x)}\nabla f(x). \tag{6.29}$$

另一方面，为了得到收敛性能更好的搜索方向，我们可选择牛顿方向 d^B. 由两方向 d^U 和 d^B 可分段构造折线搜索方向 (见图 6.1) . 记由图 6.1 方式构造出的折线为 $\tilde{d}(\tau)$, 数学上的定义式为:

$$\tilde{d}(\tau) = \begin{cases} \tau d^U, & 0 \le \tau \le 1, \\ d^U + (\tau-1)(d^B - d^U), & 1 \le \tau \le 2. \end{cases} \tag{6.30}$$

上式说明当 τ 较小时方向选用最速下降方向 d^U, 否则取 d^U 和 d^B 的组合方向. 沿如上构造的折线方向 $\tilde{d}(\tau)$, 在信赖域约束下求子问题 (6.20) 的解. 理论上可证明 (6.30) 构造的折线具有如下性质.

引理 6.4.1 *设 B 对称正定. 则*
(1) $\|\tilde{d}(\tau)\|$ *关于 τ 为单调增函数.*
(2) $q(\tilde{d}(\tau))$ *关于 τ 为单调减函数.*

上面的引理说明，当沿 $\tilde{d}(\tau)$ 求子问题的极小点时，解在信赖域边界上达到，即 τ 满足

$$\|d^U + (\tau-1)(d^B - d^U)\|^2 = \Delta^2.$$

上式为关于 τ 的二次代数方程，求解此方程可得到折线法的解. 性质 (2) 说明按折线方向所求出的近似解满足下降性条件 (6.27), 从而可保证信赖域算法的全局收敛性.

例 6.4.1 取初始点为 $x^{(0)} = (-1, 2)^T$, 初始信赖半径 $\Delta_0 = 5$, $\eta = 1/8$, 采用信赖域算法 *6.1* 和计算子问题的折线法求解最优化问题

$$\min f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2.$$

解 在算法 6.1 中取 $\epsilon = 1.0e - 5$. 计算结果如表 6.1.

表 6.1. 信赖域方法计算结果

k	i_k	$x^{(k)}$	$d^{(k)}$	$\|\nabla f(x^{(k)})\|$
0	1	$(-1, 2)^T$	$(-0.0101, -0.9799)^T$	443.6395
1	1	$(-1.0101, 1.0201)^T$	$(1.9702, -3.9800)^T$	4.0610
2	1	$(0.9602, -2.9599)^T$	$(0.0001, 3.8820)^T$	$1.6809e + 003$
3	1	$(0.9602, 0.9221)^T$	$(0.0398, 0.0763)^T$	0.0795
4	1	$(1.0000, 0.9984)^T$	$(0.0000, 0.0016)^T$	0.7067
5		$(1.0000, 1.0000)^T$		$1.0009e - 008$

在表 6.1 中, k 表示迭代次数, i_k 表示对应于第 k 次迭代可接受的信赖域步所需计算子问题的次数, $x^{(k)}$ 为产生的迭代点, $d^{(k)}$ 表示第 k 次迭代时可接受的子问题的解, $\|\nabla f(x^{(k)})\|$ 为目标函数的梯度在迭代点的范数.

§6.4.3 截断共轭梯度法

前面介绍的精确方法和折线近似方法能保证信赖域算法的全局收敛性，然而实际计算过程中涉及到以 B 或 $B + \lambda I$ 为系数阵的线性方程组的求解. 当 $B \in R^{n \times n}$ 的维数较高时，这些方法可导致计算上的高消费. 本小节介绍非精确求解子问题的另一种方法 — 截断共轭梯度法. 它可用于求解大规模信赖域子问题. 该算法是解线性方程组共轭梯度法的一种变形，其计算步骤如下：

算法 6.4 *(截断共轭梯度法)*

步 *0* 给定 $\epsilon > 0$. 设 $d_0 = 0$, $r_0 = \nabla f(x)$, $p_0 = -r_0$. 令 $j := 0$.

步 *1* 若 $\|r_j\| \le \epsilon$, 取 $d = d_j$ 为问题 (6.24) 的解, 算法终止. 否则, 转步 *2*.

步 *2* 若 $p_j^T B p_j \le 0$, 确定 τ 使得 $d = d_j + \tau p_j$ 满足 $\|d\| = \Delta$, d 作为子问题的近似解, 停止计算. 否则, 计算

$$\alpha_j = r_j^T r_j / (p_j^T B p_j), \quad d_{j+1} = d_j + \alpha_j p_j.$$

步 *3* 若 $\|d_{j+1}\| \ge \Delta$, 确定 $\tau \ge 0$ 使得 $d = d_j + \tau p_j$ 满足 $\|d\| = \Delta$, 取 d 为子问题的近似解, 停止计算. 否则设 $r_{j+1} = r_j + \alpha_j B p_j$.

步 *4* 若 $\|r_{j+1}\| < \epsilon \|r_0\|$, 设 $d = d_{j+1}$ 为子问题的近似解, 停止计算;
否则设

$$\beta_{j+1} = r_{j+1}^T r_{j+1} / r_j^T r_j, \quad p_{j+1} = r_{j+1} + \beta_{j+1} p_j.$$

步 *5* 设 $j := j+1$, 转步 *1.*

与传统的共轭梯度方法比较，截断共轭梯度法增加了两个出口，其一是搜索方向 p_j 为零方向或沿 B 的负曲率方向时 (步 2) ；其二是 d_{j+1} 破坏了信赖域约束时 (步 3) . 两种情况下近似解均在约束的边界上达到.

保证信赖域算法收敛的条件是信赖域子问题 (6.20) 的近似解满足条件 (6.27). 从算法 6.4 步 2 对 $j=0$ 直接计算有

$$d_1 = \begin{cases} -\frac{\Delta}{\|\nabla f(x)\|}\nabla f(x), & \text{若 } p_0^T B p_0 \le 0 \\ -\frac{r_0^T r_0}{(p_0^T B p_0)} p_0 = -\frac{\nabla f(x)^T \nabla f(x)}{\nabla f(x)^T B \nabla f(x)} \nabla f(x), & \text{其它.} \end{cases}$$

上式表示 d_1 为精确的柯西点，则 d_1 满足子问题近似解的条件 (6.27). 另一方面，共轭梯度法具有逐步减少 $q(d)$ 值的性质，因此，算法 6.4 所求子问题的近似解满足信赖域算法的收敛性要求.

习题 6

1. 设矩阵 $B_k \in R^{n\times n}$ 对称正定， $d^{(k)}$ 是问题 (6.2) 的解. 证明： $d^{(k)}$ 是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向.

2. 证明满足 (6.7) 式的 τ_k 是 $q_k(d)$ 在信赖域 D 中沿负梯度方向 $-\nabla f(x^{(k)})$ 的极小点, 其中 $q_k(d)$ 由 (6.2) 式定义.

3. 用信赖域算法 6.1 编程求解如下最优化问题

$$\min \ f(x) = 10(x_2 - x_1)^2 + (1-x_1)^2,$$

其中信赖域子问题的计算用精确算法 6.3.

4. 用信赖域算法 6.1 和子问题的截断共轭梯度算法 6.4 编程计算如下最优化问题 (取 $n=10$) 的解.

$$\min \ f(x) = \sum_{i=1}^{n} \left[(1-x_{2i-1})^2 + 10(x_{2i} - x_{2i-1}^2)^2\right].$$

5. 设由算法 6.2 产生的点列有界，并设函数 f 二次连续可微且满足 $\|\nabla^2 f(x)\| \le M$ ($M>0$ 为常数). 记信赖域子问题的解为 $d^{(k)}$. 证明：若对所有迭代 k, 有 $\|\nabla f(x^{(k)})\| > \delta > 0$ (δ 为常数), 则下式成立

$$\lim_{k\to\infty} \min\{\Delta_k, 1/M_k\} = 0,$$

其中 $M_k = 1 + \max_{1\le i\le k} \|B_i\|$.

6. 若对称矩阵 $B \in R^{n\times n}$ 可对角分解为 $B = Q\Lambda Q^T$, 其中 $Q = (q_1, q_2, \cdots, q_n)$ 为正交矩阵, $\Lambda = diag(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$, 证明方程组 (6.22) 的解可表示为

$$d(\lambda) = -\sum_{j=1}^{n} \frac{q_j^T \nabla f(x)}{\lambda_j + \lambda} q_j.$$

进一步证明

$$\frac{d}{d\lambda}\left(\|d(\lambda)\|^2\right) = -2\sum_{j=1}^{n} \frac{(q_j^T \nabla f(x))^2}{(\lambda_j + \lambda)^3}.$$

7. 利用上题的结论，证明在信赖域子问题的计算中，牛顿迭代式 (6.25) 与 (6.26) 的等价性.

8. 证明沿方向 $d=-\tau\nabla f(x)$, 忽略信赖域子问题 (6.2) 中的信赖域约束，则子问题沿该方向 d 的最优解为

$$d^U=-\frac{\nabla f(x)^T\nabla f(x)}{\nabla f(x)^T B\nabla f(x)}\nabla f(x).$$

9. 证明引理 6.4.1.

10. 双折线方法 (double-dogleg method) 以信赖域中心点为起点，牛顿方向 d^B 为终点，沿三条线段构造折线搜索路径，其中四个联结点为

    - 信赖域中心点 ($x^{(k)}$ 点) ；
    - 无约束柯西步 $p^c=-(g^Tg)/(g^TBg)g$ (CP 点) ；
    - 部分牛顿步 $\bar{\gamma}d^B=-\bar{\gamma}B^{-1}g$ ($\hat{N}$ 点) , 此处 $\bar{\gamma}\in(\gamma,1]$ 且

    $$\gamma\le\frac{\|g\|^4}{(g^TBg)(g^TB^{-1}g)}\le 1;$$

    - 牛顿步 $d^B=-B^{-1}g$ (x_{k+1} 点) .

    此处 $g=\nabla f(x)$. 画出双折线方法的搜索路径图；并证明：
    (i) 从 $x^{(k)}$ 到 CP 点，到 $\hat{N}$ 点，到 x_{k+1} 点的距离单调增加.
    (ii) 当从 $x^{(k)}$ 向 CP 点， $\hat{N}$ 点和 x_{k+1} 点移动时，二次模型 $q_k(x^{(k)}+d)$ 的值单调下降.

第七章　无约束问题算法 (V) — 直接法

§7.1　坐标轮换法及其改进

设 $e^{(i)}, i=0,\ldots,n-1$ 是坐标轴方向．所谓坐标轮换法就是从初始点 $x^{(0)}$ 出发，依次沿坐标轴的方向进行线性搜索，得点 $x^{(i)}, i=1,\ldots,n$. 再以 $x^{(0)}:=x^{(n)}$ 为初始点，重复上述过程．直至得到问题的解．该算法的实现过程如图 7.1 所示.

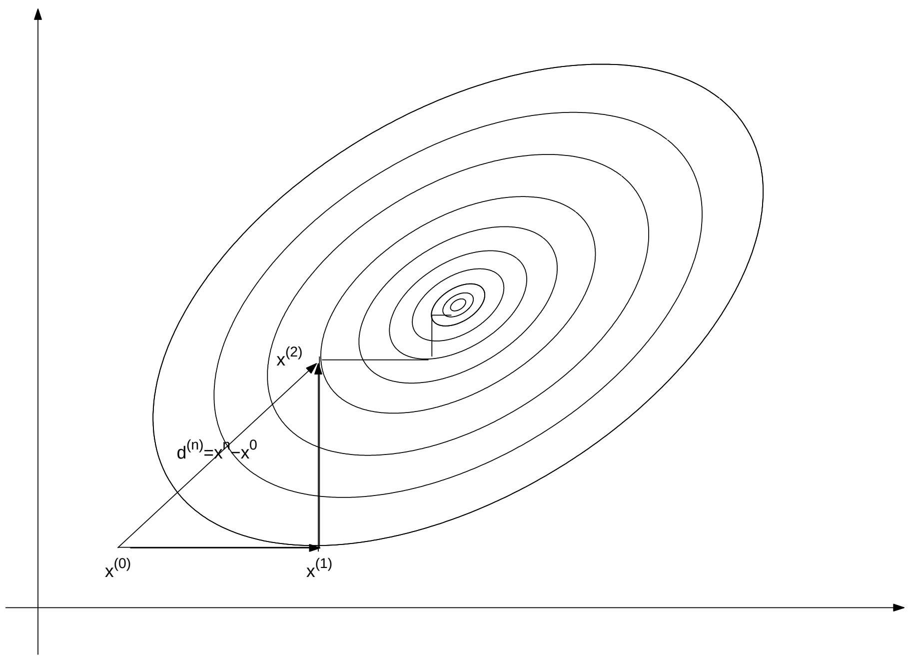

图 7.1　坐标轮换法.

由图 7.1 可以看出，坐标轮换法的效率很低．类似于采用精确线性搜索的最速下降法，坐标轮换法相邻两次搜索方向相互垂直．因此，算法的收敛速度慢．为提高算法的效率，我们对坐标轮换法加以改进.

如图 7.1 所示，在沿坐标轴进行一轮搜索之后，产生了一个方向 $d^{(n)} \triangleq x^{(n)}-x^{(0)}$. 称之为加速方向．若从 $x^{(n)}$ 出发，沿加速方向再搜索一次，则算法的效率可得到改善．按这种方式对坐标轮换法进行改进后产生的算法称为原始 Powell 算法．其步骤如下：

算法 7.1（**原始** *Powell* **算法**）

步 *1* 给定 n 个线性无关向量 $d^{(i)}, i=0,1,\ldots,n-1$, 取初始点 $x^{(0)}\in R^n$, 精度 $\epsilon>0$. 令 $k:=0$.

步 *2* 从 $x^{(0)}$ 出发，依次沿 $d^{(0)}, d^{(1)}, \ldots, d^{(n-1)}$ 进行精确线性搜索得 $x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(n)}$, 即

$$x^{(i+1)}=x^{(i)}+\alpha_i d^{(i)}, \quad i=0,1,\ldots,n-1,$$

其中步长 α_i 由精确线性搜索得到，即 α_i 是下面的一维最优化问题的解：

$$\min_{\alpha\in R} f(x^{(i)}+\alpha d^{(i)}). \tag{7.1}$$

步 *3 (加速搜索)* 令 $d^{(n)}=x^{(n)}-x^{(0)}$. 若 $\|d^{(n)}\|\le\epsilon$, 则得解 $x^{(n)}$. 否则，从 $x^{(n)}$ 出发，沿 $d^{(n)}$ 进行精确线性搜索确定步长 α_n. 令 $x^{(n+1)}=x^{(n)}+\alpha_n d^{(n)}$.

步 *4* 令 $d^{(i)}:=d^{(i+1)}$, $i=0,1,\ldots,n-1$, $x^{(0)}:=x^{(n+1)}$, $k:=k+1$. 转步 *2*.

值得注意的是，原始 Powell 算法中，方向 $d^{(i)}$ 一般不能保证是函数 f 在 $x^{(i)}$ 处的下降方向. 因此，精确线性搜索 (7.1) 在整个实数轴 R 上进行. 因而，算法产生的步长 α_i 可能为负值.

例 7.1.1 用原始 *Powell* 算法求解如下无约束问题：

$$\min f(x)=\frac{3}{2}x_1^2+\frac{1}{2}x_2^2-x_1x_2-2x_1.$$

(I) 取初始点 $x^{(0)}=(-2,4)^T$, 初始方向 $d^{(0)}=(1,0)^T$, $d^{(1)}=(0,1)^T$. (II) 取初始点 $x^{(0)}=(-2,-8)^T$, 初始方向 $d^{(0)}=(1,0)^T$, $d^{(1)}=(0,1)^T$. 该问题的最优解为 $x^*=(1,1)^T$.

解 由计算得 f 的梯度以及精确线性搜索步长：

$$\nabla f(x)=\begin{pmatrix}3x_1-x_2-2\\ -x_1+x_2\end{pmatrix},\quad \alpha=-\frac{3x_1d_1-x_2d_1-2d_1-x_1d_2+x_2d_2}{3d_1^2+d_2^2-2d_1d_2}.$$

(I) 对 $x^{(0)}=(-2,4)^T$, $d^{(0)}=(1,0)^T$, $d^{(1)}=(0,1)^T$, 用算法 7.1 求解. 计算结果见表 7.1.

表 7.1 例 7.1.1 (I) 的计算结果

轮次	i	$x^{(i)}$	$d^{(i)}$	α_i	$\|x^{(n)}-x^{(0)}\|$
1	0	$(-2,4)^T$	$(1,0)^T$	4	
	1	$(2,4)^T$	$(0,1)^T$	-2	
	2	$(2,2)^T$	$(4,-2)^T$	$-\frac{2}{17}$	$2\sqrt{5}$
2	0	$(\frac{26}{17},\frac{38}{17})^T$	$(0,1)^T$	$-\frac{12}{17}$	
	1	$(\frac{26}{17},\frac{26}{17})^T$	$(4,-2)^T$	$-\frac{18}{289}$	
	2	$(\frac{370}{289},\frac{478}{289})^T$	$-(\frac{72}{289},\frac{168}{289})^T$	$\frac{9}{8}$	$\frac{24}{289}\sqrt{58}$
3	0	$(1,1)^T$	$(4,-2)^T$	0	
	1	$(1,1)^T$	$-(\frac{72}{289},\frac{168}{289})^T$	0	
	2	$(1,1)^T$			0

算法终止于问题的最优解 $x^*=(1,1)^T$.

(II) 对 $x^{(0)}=(-2,-8)^T$, $d^{(0)}=(1,0)^T$, $d^{(1)}=(0,1)^T$, 用算法 7.1 求解. 计算结果见表 7.2.

表 7.2 例 7.1.1 (II) 的计算结果

轮次	i	$x^{(i)}$	$d^{(i)}$	α_i	$\|x^{(n)}-x^{(0)}\|$
1	0	$(-2,-8)^T$	$(1,0)^T$	0	
	1	$(-2,-8)^T$	$(0,1)^T$	6	
	2	$(-2,-2)^T$	$(0,6)^T$	0	6
2	0	$(-2,-2)^T$	$(0,1)^T$	0	
	1	$(-2,-2)^T$	$(0,6)^T$	0	
	2	$(-2,-2)^T$			0

算法终止于非最优解 $\bar{x}=(-2,-2)^T$.

原始 Powell 算法具有如下性质.

定理 7.1.1 *设 $Q\in R^{n\times n}$ 对称正定，$q\in R^n$. 则算法 7.1 用于求解问题*

$$\min f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx$$

时产生的加速方向关于 Q 两两共轭.

证明 算法 7.1 的计算过程如表 7.3.

表 7.3 算法 7.1 的计算过程

轮次	初始点	搜索方向	轮次终点	加速方向
1	$x^{(0)}$	$d^{(0)},\ldots,d^{(n-1)}$	$x^{(n)}$	$d^{(n)}=x^{(n)}-x^{(0)}$
2	$x^{(n+1)}$	$d^{(1)},\ldots,d^{(n-1)},d^{(n)}$	$x^{(2n+1)}$	$d^{(n+1)}=x^{(2n+1)}-x^{(n+1)}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
m	$x^{((m-1)(n+1))}$	$d^{(m-1)},\ldots,d^{(n+m-2)}$	$x^{((m-1)(n+1)+n)}$	$d^{(n+m-1)}=x^{((m-1)(n+1)+n)}-x^{((m-1)(n+1))}$

下面对 m 用归纳法证明定理.

当 $m=2$ 时，算法产生两个加速方向：$d^{(n)}$ 和 $d^{(n+1)}$. 我们需证明

$$d^{(n+1)T}Qd^{(n)}=0,$$

或等价地证明

$$(x^{(2n+1)}-x^{(n+1)})^TQd^{(n)}=0.$$

由于 $\nabla f(x)=Qx+q$, 上式可等价地写为

$$[\nabla f(x^{(2n+1)})-\nabla f(x^{(n+1)})]^Td^{(n)}=0. \tag{7.2}$$

注意到 $x^{(2n+1)}$ 由 $x^{(2n)}$ 沿 $d^{(n)}$ 精确线性搜索得到，$x^{(n+1)}$ 由 $x^{(n)}$ 沿 $d^{(n)}$ 精确线性搜索得到，故有

$$\nabla f(x^{(2n+1)})^Td^{(n)}=0,\qquad \nabla f(x^{(n+1)})^Td^{(n)}=0.$$

两式相减即得 (7.2), 即定理对 $m=2$ 成立.

设定理对 $m=t$ 成立 (此时算法 7.1 产生的加速方向为 $d^{(n)}, d^{(n+1)}, \ldots, d^{(n+t-1)}$) , 即

$$d^{(n+i)T} Q d^{(n+j)}=0, \quad 0 \leq i<j \leq t-1. \tag{7.3}$$

我们证明定理对 $m=t+1$ 成立 (此时算法 7.1 产生的加速方向为 $d^{(n)}, d^{(n+1)}, \ldots, d^{(n+t-1)}, d^{(n+t)}$), 即证

$$d^{(n+i)T} Q d^{(n+t)}=0, \qquad i=0,1, \ldots, t-1. \tag{7.4}$$

记第 $t+1$ 轮迭代产生的迭代点和方向依次为

$$y^{(0)} \xrightarrow[\tilde{d}^{(0)}]{\tilde{\alpha}_0} y^{(1)} \xrightarrow[\tilde{d}^{(1)}]{\tilde{\alpha}_1} \ldots, \quad \xrightarrow[\tilde{d}^{(n-2)}]{\tilde{\alpha}_{n-2}} y^{(n-1)} \xrightarrow[\tilde{d}^{(n-1)}]{\tilde{\alpha}_{n-1}} y^{(n)}, \quad \tilde{d}^{(n)}=y^{(n)}-y^{(0)},$$

其中 $y^{(i)}=x^{(t(n+1)+i)}, i=0,1, \ldots, n, \tilde{d}^{(i)}=d^{(t+i)}, i=0,1, \ldots, n$. 利用 ∇f 的表达式，共轭关系 (7.3) 和 (7.4) 可分别等价地写成

$$\tilde{d}^{(n-t+i)T} Q \tilde{d}^{(n-t+j)}=0, \quad 0 \leq i<j \leq t-1 \tag{7.5}$$

和

$$d^{(n+t)T} Q d^{(n+i)}=[\nabla f(y^{(n)})-\nabla f(y^{(0)})]^T \tilde{d}^{(n-t+i)}=0, \qquad i=0,1, \ldots, t-1. \tag{7.6}$$

利用归纳假设 (7.5), ∇f 的表达式以及精确线性搜索条件可得对任何 $0 \leq i \leq t-1$,

$$\begin{aligned}
\nabla f(y^{(n)})^T \tilde{d}^{(n-t+i)} &= \sum_{j=n-t+i+1}^{n-1}[\nabla f(y^{(j+1)})-\nabla f(y^{(j)})]^T \tilde{d}^{(n-t+i)}+\nabla f(y^{(n-t+i+1)})^T \tilde{d}^{(n-t+i)} \\
&= \sum_{j=n-t+i+1}^{n-1} \tilde{\alpha}_j \tilde{d}^{(j)T} Q \tilde{d}^{(n-t+i)}=0,
\end{aligned} \tag{7.7}$$

其中， $\tilde{\alpha}_j$ 表示由 $y^{(j)}$ 出发沿 $\tilde{d}^{(j)}$ 精确线性搜索得到的步长．另一方面， $y^{(0)}=x^{(t(n+1))}$ 作为第 t 轮搜索的终点，其产生过程如下：

$$x^{((t-1)(n+1))}:=\bar{y}^{(0)} \xrightarrow[\bar{d}^{(0)}]{\bar{\alpha}_0} \bar{y}^{(1)} \xrightarrow[\bar{d}^{(1)}]{\bar{\alpha}_1} \ldots, \quad \xrightarrow[\bar{d}^{(n-2)}=\tilde{d}^{(n-3)}]{\bar{\alpha}_{n-2}} \bar{y}^{(n-1)} \xrightarrow[\bar{d}^{(n-1)}=\tilde{d}^{(n-2)}]{\bar{\alpha}_{n-1}} \bar{y}^{(n)} \xrightarrow[\bar{d}^{(n)}=\tilde{d}^{(n-1)}]{\bar{\alpha}_n} \bar{y}^{(n+1)}=y^{(0)}.$$

类似于前面的推导可得：对任何 $0 \leq i \leq t-1$,

$$\nabla f(y^{(0)})^T \tilde{d}^{(n-t+i)}=\nabla f(\bar{y}^{(n+1)})^T \bar{d}^{(n-t+i-1)}=0.$$

上式以及 (7.7) 包含了 (7.6). 或等价地， (7.4) 成立．由归纳原理，定理成立． **证毕**

上面的定理说明，若每轮迭代的前 n 个方向线性无关，则算法 7.1 用于二次函数极小化问题的求解时产生的加速方向关于二次函数的 Hessian 矩阵相互共轭．从而，算法具有二次终止性．但当迭代方向线性相关时，例 7.1.1(II) 说明，算法 7.1 产生的点列可能不收敛于问题的解．这是原始 Powell 算法的一个缺陷．因此，有必要对算法 7.1 加以改进.

§7.2 Powell 直接法

原始 Powell 算法中，若在某一轮次的 n 个搜索方向线性相关，则算法产生的点列可能不收敛于问题的解. 为了克服原始 Powell 算法的这一缺陷，有必要在算法中引入某种技术，使得算法在每一轮次的 n 个搜索方向均线性无关.

设在初始步给定初始点 $x^{(0)}$ 和 n 个线性无关的方向 $d^{(0)}, d^{(1)}, \dots, d^{(n-1)}$. 从初始点 $x^{(0)}$ 出发，依次沿这些方向进行搜索后得点 $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}$. 并产生一个加速方向 $d^{(n)} = x^{(n)} - x^{(0)}$. 原始 Powell 算法中用 $d^{(n)}$ 替代 $d^{(0)}$ 的方式确定下一轮搜索方向，即下一轮的搜索方向组为 $d^{(1)}, d^{(2)}, \dots, d^{(n)}$. 这种自然的替换方式忽略了向量组 $d^{(1)}, d^{(2)}, \dots, d^{(n)}$ 可能出现线性相关的情况. 为了避免出现下一轮搜索方向组线性相关，当向量组 $d^{(1)}, d^{(2)}, \dots, d^{(n)}$ 线性相关时，可考虑用 $d^{(n)}$ 替换 $d^{(0)}, d^{(1)}, \dots, d^{(n-1)}$ 中的某个向量 $d^{(t)}$, $0 \le t < n$, 使得向量组 $d^{(i)}$, $i = 0, \dots, n$, $i \neq t$ 线性无关. 进而，将此向量组作为下一轮的搜索方向组. 若 $d^{(n)}$ 替换向量组 $d^{(0)}, d^{(1)}, \dots, d^{(n-1)}$ 中的任何向量后产生的向量组均线性相关，则用同样的向量组 (即 $d^{(n)}$ 不替换向量组 $d^{(0)}, d^{(1)}, \dots, d^{(n-1)}$ 中的任何向量) 作为下一轮搜索方向组. 显然，利用上面的方式确定下一轮计算的搜索方向必定线性无关.

为了实现上面的过程, 我们需要给出一个替换准则, 即在什么条件下用 $d^{(n)}$ 替换 $d^{(t)}$, $0 \le t \le n-1$. 在什么条件下， $d^{(n)}$ 不替换向量组 $d^{(0)}, d^{(1)}, \dots, d^{(n-1)}$ 中的任何向量. 为此，我们先引入正交程度和共轭程度的概念.

定理 7.2.1 *设 $p^{(1)}, \dots, p^{(n)}$ 是 R^n 中单位向量. 记*

$$D \triangleq D(p^{(1)}, \dots, p^{(n)}) = (p^{(1)}, \cdots, p^{(n)}).$$

则

$$|\det(D)| \le 1. \tag{7.8}$$

而且，等式成立当且仅当 $p^{(1)}, \dots, p^{(n)}$ 相互正交.

证明 若向量组 $p^{(1)}, \dots, p^{(n)}$ 线性相关，则 $\det(D) = 0$. 此时 (7.8) 成立. 现设向量组 $p^{(1)}, \dots, p^{(n)}$ 线性无关. 令

$$A = D^T D = \begin{pmatrix} p^{(1)T}p^{(1)} & \cdots & p^{(1)T}p^{(n)} \\ \vdots & & \vdots \\ p^{(n)T}p^{(1)} & \cdots & p^{(n)T}p^{(n)} \end{pmatrix}.$$

由于向量组 $p^{(1)}, \dots, p^{(n)}$ 线性无关，因此 A 对称正定. 记 λ_i, $i = 1, \dots, n$ 表示 A 的特征值. 则

$$(\det(D))^2 = \det(A) = \prod_{i=1}^n \lambda_i \le \Big(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \lambda_i\Big)^n = \Big(\frac{1}{n}\mathrm{tr}(A)\Big)^n = \Big(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n p^{(i)T}p^{(i)}\Big)^n = 1.$$

故得 (7.8). 而且，由几何不等式中等式成立的充要条件知 (7.8) 成立等式的充要条件是 $\lambda_i = \lambda_j$, $\forall i, j = 1, \dots, n$, 或等价地， A 的所有特征值都是 1. 但 A 对称，因此， $A = I$ 为单位矩阵. 或等价地，向量组 $p^{(1)}, \dots, p^{(n)}$ 相互正交. **证毕**

从上面的定理可以看出，对 R^n 中非零向量组 $p^{(1)},\cdots,p^{(n)}$, 行列式 $D(p^{(1)}/\|p^{(1)}\|,\cdots,p^{(n)}/\|p^{(n)}\|)$ 的绝对值

$$\delta(p^{(1)},\cdots,p^{(n)})\triangleq\left|\det(\frac{p^{(1)}}{\|p^{(1)}\|},\cdots,\frac{p^{(n)}}{\|p^{(n)}\|})\right|$$

的大小反映了向量组 $p^{(1)},\cdots,p^{(n)}$ 之间的正交程度. 我们称 $\delta(p^{(1)},\cdots,p^{(n)})$ 为非零向量组 $p^{(1)},\cdots,p^{(n)}$ 的正交程度.

类似地，可引入共轭程度的概念. 设 $A\in R^{n\times n}$ 对称正定. 对 R^n 中的非零向量组 $p^{(1)},\cdots,p^{(n)}$, 令 $q^{(i)}=A^{1/2}p^{(i)}$. 显然，$q^{(i)}$ 与 $q^{(j)}$ 正交当且仅当 $p^{(i)}$ 与 $p^{(j)}$ 关于 A 相互共轭. 因此, 向量组 $p^{(1)},\cdots,p^{(n)}$ 关于 A 的共轭性等价于向量组 $q^{(1)},\ldots,q^{(n)}$ 的正交性. 在此基础上，我们可定义向量组 $p^{(1)},\cdots,p^{(n)}$ 关于矩阵 A 的共轭程度为向量组 $q^{(1)},\ldots,q^{(n)}$ 的正交程度，即 $p^{(1)},\cdots,p^{(n)}$ 关于矩阵 A 的共轭程度为

$$\Delta(p^{(1)},\ldots,p^{(n)})\triangleq\left|\det(\frac{q^{(1)}}{\|q^{(1)}\|},\cdots,\frac{q^{(n)}}{\|q^{(n)}\|})\right|=|\det A^{1/2}|\left|\det(\frac{p^{(1)}}{\|A^{1/2}p^{(1)}\|},\cdots,\frac{p^{(n)}}{\|A^{1/2}p^{(n)}\|})\right|. \qquad (7.9)$$

利用定理 7.2.1, 容易证明下面的定理.

定理 7.2.2 设 $A\in R^{n\times n}$ 对称正定， $p^{(1)},\ldots,p^{(n)}$ 是 R^n 中向量组. 则

$$\Delta(p^{(1)},\cdots,p^{(n)})\le 1.$$

而且，等式成立当且仅当 $p^{(1)},\ldots,p^{(n)}$ 关于矩阵 A 相互共轭.

利用上面的定理，我们可以确定用 $d^{(n)}$ 替换 $d^{(0)},\ldots,d^{(n-1)}$ 中某个向量的准则. 考察求解如下二次函数极小值问题的原始 Powell 算法：

$$\min f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx,$$

其中， Q 对称正定. 设算法在某一轮产生的点列以及相应的 (线性无关) 搜索方向分别为

$$y^{(0)},\ldots,y^{(n-1)},y^{(n)} \qquad \text{和} \qquad d^{(0)},\ldots,d^{(n-1)}.$$

在该轮搜索完毕后产生加速方向 $d^{(n)}=y^{(n)}-y^{(0)}$. 此时，共有 $n+1$ 个方向： $d^{(0)},\ldots,d^{(n-1)},d^{(n)}$. 我们在此 $n+1$ 个方向中选择 n 个方向作为下一轮的搜索方向组. 确定搜索方向组的一个原则是该方向组必须线性无关. 我们可在方向组 $d^{(0)},\ldots,d^{(n-1)},d^{(n)}$ 中选择 n 个向量，使得该 n 个向量构成的向量组关于矩阵 Q 的共轭程度最大.

令 $\tilde d^{(i)}=\|Q^{1/2}d^{(i)}\|^{-1}d^{(i)}$, $i=0,1,\ldots,n$,

$$D_i=(\tilde d^{(0)},\cdots,\tilde d^{(i-1)},\tilde d^{(i+1)},\cdots,\tilde d^{(n)}), \qquad i=0,1,\ldots,n-1,$$

$$D=(\tilde d^{(0)},\cdots,\tilde d^{(n-1)}).$$

因此，由 (7.9), 用 $d^{(n)}$ 替换某个 $d^{(t)}$, $0\le t\le n-1$ 的条件是下面的不等式成立：

$$|\det(D)|<\max\{|\det(D_i)|\ \big|\ i=0,1,\ldots,n-1\}=|\det(D_t)|.$$

反之，若上式不成立，即

$$|\det(D)| \geq \max\{|\det(D_i)| \,\Big|\, i=0,1,\ldots,n-1\}, \tag{7.10}$$

则无需替换，即下一轮的搜索方向组仍然是 $d^{(i)}$, $i=0,1,\ldots,n-1$.

下面，我们确定使得 $|\det(D_i)|$ 取到最大的下标 t, 即

$$|\det(D_t)| = \max\{|\det(D_i)| \,\Big|\, i=0,1,\ldots,n-1\}. \tag{7.11}$$

注意到

$$y^{(n)} = y^{(n-1)} + \tilde{\alpha}_{n-1}\tilde{d}^{(n-1)} = y^{(n-2)} + \tilde{\alpha}_{n-2}\tilde{d}^{(n-2)} + \tilde{\alpha}_{n-1}\tilde{d}^{(n-1)} = \cdots = y^{(0)} + \sum_{i=0}^{n-1}\tilde{\alpha}_i\tilde{d}^{(i)},$$

其中， $\tilde{\alpha}_i$ 表示从 $y^{(i)}$ 出发，沿方向 $\tilde{d}^{(i)}$ 进行精确线性搜索得到的步长．该轮搜索产生的加速方向为

$$d^{(n)} = y^{(n)} - y^{(0)} = \sum_{i=0}^{n-1}\tilde{\alpha}_i\tilde{d}^{(i)}.$$

由此得

$$\tilde{d}^{(n)} = \|Q^{1/2}d^{(n)}\|^{-1}d^{(n)} = \|Q^{1/2}(y^{(n)}-y^{(0)})\|^{-1}\sum_{i=0}^{n-1}\tilde{\alpha}_i\tilde{d}^{(i)} \triangleq \beta^{-1}\sum_{i=0}^{n-1}\tilde{\alpha}_i\tilde{d}^{(i)}.$$

利用行列式的性质得

$$|\det(D_i)| = \beta^{-1}|\tilde{\alpha}_i||\det(D)|. \tag{7.12}$$

由于 $\beta>0$ 与 i 无关，因此，使 $|\det(D_i)|$ 取到最大等价于使 $\tilde{\alpha}_i$ 的绝对值取到最大．由于 f 是二次函数，我们有

$$\begin{aligned} f(y^{(i)}) &= f(y^{(i+1)}) + \nabla f(y^{(i+1)})^T(y^{(i)}-y^{(i+1)}) + \frac{1}{2}(y^{(i)}-y^{(i+1)})^TQ(y^{(i)}-y^{(i+1)}) \\ &= f(y^{(i+1)}) - \tilde{\alpha}_i\nabla f(y^{(i+1)})^T\tilde{d}^{(i)} + \frac{1}{2}\tilde{\alpha}_i^2\tilde{d}^{(i)T}Q\tilde{d}^{(i)} \\ &= f(y^{(i+1)}) + \frac{1}{2}\tilde{\alpha}_i^2. \end{aligned} \tag{7.13}$$

因此，使得 (7.11) 成立的下标 t 与使得下式成立的下标 t 相同：

$$f(y^{(t)}) - f(y^{(t+1)}) = \max_{0\leq i\leq n-1}\{f(y^{(i)}) - f(y^{(i+1)})\}, \tag{7.14}$$

即 t 为达到最大下降量的下标.

下面我们导出使得不等式 (7.10), 即

$$|\det(D_t)| \leq |\det(D)|$$

成立的条件．由 (7.12), 上式等价于 $\beta^{-1}|\tilde{\alpha}_t| \leq 1$, 利用 (7.13), 可等价地得到

$$\beta^2 \geq \tilde{\alpha}_t^2 = 2(f(y^{(t)}) - f(y^{(t+1)})).$$

由 β 的定义得,

$$
\begin{aligned}
\beta^2 &= \|Q^{1/2}d^{(n)}\|^2 = (d^{(n)})^T Q d^{(n)} = (y^{(n)} - y^{(0)})^T Q (y^{(n)} - y^{(0)}) \\
&= \nabla f(y^{(n)})^T (y^{(0)} - y^{(n)}) + \frac{1}{2}(y^{(0)} - y^{(n)})^T Q (y^{(0)} - y^{(n)}) \\
&\quad + \nabla f(y^{(n)})^T (y^{(n)} - y^{(0)}) + \frac{1}{2}(y^{(n)} - y^{(0)})^T Q (y^{(n)} - y^{(0)}) \\
&= f(y^{(0)}) - f(y^{(n)}) + f(2y^{(n)} - y^{(0)}) - f(y^{(n)}) \\
&= f(y^{(0)}) - 2f(y^{(n)}) + f(2y^{(n)} - y^{(0)}),
\end{aligned}
$$

其中第三个等式由 $f(y^{(0)})$ 和 $f(2y^{(n)} - y^{(0)})$ 在 $y^{(n)}$ 处作 Taylor 展开得到. 由此得 (7.10) 成立等价于:

$$
f(y^{(0)}) - 2f(y^{(n)}) + f(2y^{(n)} - y^{(0)}) \geq 2(f(y^{(t)}) - f(y^{(t+1)})). \tag{7.15}
$$

上式即为 $d^{(n)}$ 不替换 $d^{(i)}$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$ 中任何一个方向的条件.

在上面的基础上，我们给出 Powell 直接法的步骤如下：

算法 7.2 (*Powell* **直接法**)

步 *1* 取初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 精度 $\epsilon > 0$. 给定 n 个线性无关向量 $d^{(i)}$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$. 令 $k := 0$.

步 *2* 从 $x^{(0)}$ 出发，依次沿 $d^{(0)}$, $d^{(1)}$, …, $d^{(n-1)}$ 进行精确线性搜索得 $x^{(1)}$, $x^{(2)}$, …, $x^{(n)}$, 即

$$
f(x^{(i)} + \alpha_i d^{(i)}) = \min_{\alpha \in R} f(x^{(i)} + \alpha d^{(i)}), \qquad x^{(i+1)} = x^{(i)} + \alpha_i d^{(i)}, \quad i = 0, 1, \ldots, n-1.
$$

步 *3* 令 $d^{(n)} = x^{(n)} - x^{(0)}$. 若 $\|d^{(n)}\| \leq \epsilon$, 则得解 $x^{(n)}$. 否则，从 $x^{(n)}$ 出发，沿 $d^{(n)}$ 进行精确线性搜索得 $x^{(n+1)}$.

步 *4* 由 (7.14) 计算最大下降量所确定的指标 t.

步 *5* 若 (7.15) 成立，则 $x^{(0)} := x^{(n)}$, $k := k+1$. 转步 *2*.

步 *6* 令 $d^{(t+i)} := d^{(t+i+1)}$, $i = 0, 1, \ldots, n-t-1$, $x^{(0)} := x^{(n+1)}$, $k := k+1$. 转步 *2*.

例 7.2.1 用算法 *7.2* 求解

$$
\min f(x) = x_1^2 + x_2^2,
$$

取 $x^{(0)} = (1, 1)^T$, $d^{(0)} = (1, -1)^T$, $d^{(1)} = (0, 1)^T$.

解 计算结果见表 7.4.

表 7.4　例 7.2.1 的计算结果

轮次	i	$x^{(i)}$	$d^{(i)}$	α_i	$f(x^{(i)})$	$f(x^{(i)}) - f(x^{(i+1)})$	$f(x^{(0)}) - 2f(x^{(n)}) + f(2x^{(n)} - x^{(0)})$
1	0	$(1,1)^T$	$(1,-1)^T$	0	2	0	
	1	$(1,1)^T$	$(0,1)^T$	-1	2	$\mathbf{1}$	$2 = 2(f(x^{(i)}) - f(x^{(i+1)}))$
	2	$(1,0)^T$	$(0,-1)^T$	0	1		
2	0	$(1,0)^T$	$(1,-1)^T$	$-\frac{1}{2}$	1	$\mathbf{\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{2} < 2(f(x^{(i)}) - f(x^{(i+1)}))$
	1	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2})^T$	$(0,1)^T$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	
	2	$(\frac{1}{2},0)^T$	$(-\frac{1}{2},0)^T$	1	$\frac{1}{4}$		
3	0	$(0,0)^T$	$(0,1)^T$	0	0	0	
	1	$(0,0)^T$	$(-\frac{1}{2},0)^T$	0	0	0	
	2	$(0,0)^T$	$(0,0)^T$	0			

算法 7.2 的收敛性定理如下 (其证明见 [2, 推论 9.7]) .

定理 7.2.3 设 f 是连续可微的一致凸函数. 并设水平集

$$\Omega(x^{(0)}) = \{x \mid f(x) \le f(x^{(0)})\}$$

有界. 则算法 7.2 产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 f 在 $\Omega(x^{(0)})$ 中的惟一极小值点.

§7.3 轴向搜索法

轴向搜索法由 Hooke-Jeeves(1961) 提出，故又称为 Hooke-Jeeves 算法. 该算法的基本思想是从某个初始点 $x^{(0)}$ 出发，采用固定步长 $\delta > 0$, 依次沿坐标轴 $e^{(i)}$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$ 的正向或反向进行试探. 产生点列

$$y^{(1)},\ y^{(2)},\ \ldots, y^{(n)}.$$

若

$$f(y^{(n)}) < f(x^{(0)}),$$

则称该轮试探成功. 若试探成功，则算法转入下一轮试探，即从 $x^{(1)} = y^{(n)}$ 出发，采用固定步长 $\delta > 0$, 再依次沿坐标轴 $e^{(i)}$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$ 的正向或反向进行试探. 若试探不成功，即

$$f(y^{(n)}) \ge f(x^{(0)}), \tag{7.16}$$

则缩小试探步长 δ, 即令 $\delta := \beta\delta$, 其中 $\beta \in (0, 1)$, 重新进行试探. 重复上述过程，直至该轮试探成功. 算法的细节如下：

从初始点 $x^{(0)}$ 出发，沿坐标轴 $e^{(0)}$ (的正方向) 进行试探得点 $y^{(1)} = x^{(0)} + \delta e^{(0)}$. 若

$$f(y^{(1)}) < f(x^{(0)}) \tag{7.17}$$

不成立，则从 $x^{(0)}$ 出发沿 $e^{(0)}$ 的反方向重新试探得点 $y^{(1)} = x^{(0)} - \delta e^{(0)}$. 若 (7.17) 仍不成立，则再重新赋值 $y^{(1)} = x^{(0)}$. 然后，从 $y^{(1)}$ 出发沿 $e^{(1)}$ 的正方向或负方向得新的试探点 $y^{(2)} = y^{(1)} \pm \delta e^{(1)}$. 重复上述过程直至沿所有坐标的正方向或反方向都进行了一次试探. 此时，得点列

$$y^{(1)},\ y^{(2)},\ \ldots, y^{(n)}.$$

若 (7.17) 成立，则该轮试探成功. 令 $x^{(0)} := y^{(n)}$, 转入下一轮试探. 若 (7.17) 不成立，则令 $\delta := \beta\delta$, 其中 $\beta \in (0, 1)$. 从初始点 $x^{(0)}$ 出发，重复上述试探过程，得新的点列

$$y^{(1)},\ y^{(2)},\ \ldots, y^{(n)}.$$

若 (7.17) 仍不成立，则再令 $\delta := \beta\delta$. 重复上述试探过程，直至该轮试探成功.

轴向搜索算法的步骤如下：

算法 7.3（轴向搜索法）

步 *1* 取初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 初始步长 $\delta > 0$, 步长缩减因子 $\beta \in (0,1)$, 步长加速因子 $\alpha \geq 0$, 精度 $\epsilon > 0$. 给定 n 个坐标轴向量 $e^{(i)}$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$. 令 $y^{(0)} := x^{(0)}$, $k := 0$, $j := 0$.

步 *2* 若

$$f(y^{(j)} + \delta e^{(j)}) < f(y^{(j)}),$$

则令

$$y^{(j+1)} = y^{(j)} + \delta e^{(j)}.$$

转步 *4*. 否则，转步 *3*.

步 *3* 若

$$f(y^{(j)} - \delta e^{(j)}) < f(y^{(j)}),$$

则令

$$y^{(j+1)} = y^{(j)} - \delta e^{(j)}.$$

转步 *4*. 否则，令 $y^{(j+1)} := y^{(j)}$. 转步 *4*.

步 *4* 若 $j < n-1$, 令 $j := j+1$ 并转步 *2*. 否则，转步 *5*.

步 *5* 若 $f(y^{(n)}) < f(x^{(k)})$, 令

$$x^{(k+1)} := y^{(n)},\ \ y^{(0)} := x^{(k+1)} + \alpha(x^{(k+1)} - x^{(k)}),\ \ k := k+1,\ \ j := 0,$$

并转步 *2*. 否则，转步 *6*.

步 *6* 若 $\delta \leq \epsilon$, 则得解 $x^{(k)}$. 否则，令

$$\delta := \beta\delta,\ \ y^{(0)} := x^{(k)},\ \ x^{(k+1)} := x^{(k)},\ \ k := k+1,\ \ j := 0.$$

转步 *2*.

例 7.3.1 用轴向搜索法求解

$$\min f(x) = (1 - x_1)^2 + 5(x_2 - x_1^2)^2.$$

取 $x^{(0)} = (2,0)^T$, $e^{(0)} = (1,0)^T$, $e^{(1)} = (0,1)^T$, $\delta = \frac{1}{2}$, $\alpha = 1$, $\beta = \frac{1}{2}$ $\epsilon = 0.2$.

解 计算结果见表 7.5.

表 7.5 例 7.3.1 的计算结果

$x^{(k)}$	j	$y^{(j)}$	$f(y^{(j)})$	$y^{(j)}+\delta e^{(j)}$	$f(y^{(j)}+\delta e^{(j)})$	$y^{(j)}-\delta e^{(j)}$	$f(y^{(j)}-\delta e^{(j)})$	δ
$x^{(0)}$	0	$(2,0)^T$	81	$(\frac{5}{2},0)^T$	$197\frac{9}{16}\approx 197.56$	$(\frac{3}{2},0)^T$	$25\frac{9}{16}\approx \mathbf{25.56}$	$\frac{1}{2}$
	1	$(\frac{3}{2},0)^T$	25.56	$(\frac{3}{2},\frac{1}{2})^T$	$15\frac{9}{16}\approx \mathbf{15.56}$			
	2	$(\frac{3}{2},\frac{1}{2})^T$	15.56			$2x^{(1)}-x^{(0)}=(1,1)^T$		
$x^{(1)}$	0	$(1,1)^T$	0	$(\frac{3}{2},1)^T$	$8\frac{1}{16}\approx 8.06$	$(\frac{1}{2},1)^T$	$3\frac{1}{16}\approx 3.06$	$\frac{1}{2}$
	1	$(1,1)^T$	0	$(1,\frac{3}{2})^T$	$1\frac{1}{4}=1.25$	$(1,\frac{1}{2})^T$	$1\frac{1}{4}=1.25$	
	2	$(1,1)^T$						
$x^{(2)}$	0	$(1,1)^T$	0	$(\frac{5}{4},1)^T$	$1\frac{165}{256}\approx 1.64$	$(\frac{3}{4},1)^T$	$1\frac{5}{256}\approx 1.02$	$\frac{1}{4}$
	1	$(1,1)^T$	0	$(1,\frac{5}{4})^T$	$\frac{5}{16}\approx 0.31$	$(1,\frac{3}{4})^T$	$\frac{5}{16}\approx 0.31$	
	2	$(1,1)^T$						
$x^{(3)}$	0	$(1,1)^T$	0	$(\frac{9}{8},1)^T$	$\frac{1509}{4096}\approx 0.37$	$(\frac{7}{8},1)^T$	$\frac{1189}{4096}\approx 0.29$	$\frac{1}{8}$
	1	$(1,1)^T$	0	$(1,\frac{9}{8})^T$	$\frac{5}{64}\approx 0.08$	$(1,\frac{7}{8})^T$	$\frac{5}{64}\approx 0.08$	
	2	$(1,1)^T$						
	$x^*=x^{(3)}=(1,1)^T$							

习题 7

1. 用原始 Powell 算法求解如下无约束问题：

$$\min f(x)=x_1^2+x_2^2.$$

取初始点 $x^{(0)}=(1,1)^T$, $d^{(0)}=(1,0)^T$, $d^{(1)}=(1,1)^T$. 该问题的最优解为 $x^*=(0,0)^T$.

2. 用 Powell 直接法求解无约束问题

$$\min f(x)=10(x_1+x_2-5)^2+(x_1-x_2)^2.$$

取初始点 $x^{(0)}=(0,0)^T$, 初始搜索方向 $d^{(0)}=(1,0)^T$, $d^{(1)}=(0,1)^T$. 试确定下两轮的搜索搜索方向以及产生的迭代点.

3. 设 f 是严格凸二次函数. 证明： Powell 算法中的不替换准则 (7.10) 等价于

$$|\alpha_t|\le\left|\frac{f(x^{(0)})-f(x^{(n+1)})}{f(x^{(t)})-f(x^{(t+1)})}\right|^{1/2},$$

其中， t 为最大下降量方向，即满足 (7.14), α_t 为精确线性搜索产生的步长.

4. 用轴向搜索法求解第 1 题和第 2 题中的问题. 求出两轮搜索后的迭代点.

第八章　非线性方程组与最小二乘问题

非线性方程组与最小二乘问题有广泛的应用背景. 本章简要介绍有关非线性方程组和最小二乘问题的基本数值求解方法.

§8.1　非线性方程组的局部算法

§8.1.1　局部 Newton 法

设 $F: R^n \to R^n$ 连续可微. 考察如下非线性方程组:

$$F(x) = 0. \tag{8.1}$$

若 F 是某个函数 $f: R^n \to R$ 的梯度, 则由定理 2.1.2 知, 方程组 (8.1) 表示无约束问题 $\min f(x)$ 的最优解的一阶必要条件.

记 $F'(x)$ 为函数 F 在 x 处的 Jacobian 矩阵. 求解方程组 (8.1) 的局部 Newton 法的迭代格式如下: $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$, $d^{(k)}$ 是线性方程组

$$F'(x^{(k)})d + F(x^{(k)}) = 0 \tag{8.2}$$

的解.

比较 (8.2) 与 (3.3) 不难发现, 若 F 是函数 $f: R^n \to R$ 的梯度, 则求解非线性方程组 (8.1) 的局部 Newton 法与求解无约束问题 $\min f(x)$ 的古典 Newton 法一致. 因此, 求解非线性方程组的 Newton 法是求解无约束最优化问题 Newton 法的一种推广.

类似于定理 2.5.2, 可以证明如下关于局部 Newton 法的超线性收敛性定理 (证明留作练习) .

定理 8.1.1 *设 $F: R^n \to R^n$ 连续可微, $\bar{x}$ 是方程组 (8.1) 的一个解, $F'(\bar{x})$ 非奇异. 则存在 $\bar{x}$ 的一个邻域 $U(\bar{x})$, 使得当 $x^{(0)} \in U(\bar{x})$ 时, 局部 Newton 法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 包含于该邻域中, 而且 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 $\bar{x}$. 若再假设 F' Lipschitz 连续, 则 $\{x^{(k)}\}$ 二次收敛于 $\bar{x}$.*

§8.1.2　局部拟 Newton 法

求解 (8.1) 的局部拟 Newton 法的迭代格式为: $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$, $d^{(k)}$ 是线性方程组

$$B_k d^{(k)} + F(x^{(k)}) = 0 \tag{8.3}$$

的解, 其中, 矩阵 B_k 是 $F'(x^{(k)})$ 的近似, 它满足下面的拟 Newton(割线) 方程:

$$B_{k+1} s^{(k)} = y^{(k)}, \tag{8.4}$$

其中 $y^{(k)} = F(x^{(k+1)}) - F(x^{(k)})$, $s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$. 注意到 $y^{(k)} \approx F'(x^{(k+1)})s^{(k)}$, 因此, B_{k+1} 与 $F'(x^{(k+1)})$ 沿方向 $s^{(k)}$ 很接近.

类似于第四章, 拟 Newton 矩阵 B_{k+1} 可以通过对 B_k 的低秩修正产生. 如对称秩一修正公式 (4.10), DFP 修正公式 (4.19), BFGS 修正公式 (4.13) 等. 这些修正公式产生的矩阵对称. 然而, 一般地, 对于

非线性方程组 (8.1), $F'(x^{(k)})$ 可能不是对称矩阵, 此时, 可采用下面的非对称秩一修正公式 — Broyden 秩一修正公式:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y^{(k)} - B_k s^{(k)}) s^{(k)T}}{\|s^{(k)}\|^2}. \tag{8.5}$$

采用 Broyden 秩一修正公式的拟 Newton 法称为 Broyden 秩一算法或简称 Broyden 算法.

记

$$A_{k+1} = \int_0^1 F'(x^{(k)} + \tau s^{(k)}) d\tau. \tag{8.6}$$

由向量值函数的中值定理 (1.8) 知 $y^{(k)} = A_{k+1} s^{(k)}$. 利用此性质, 我们可以导出 Broyden 秩一修正公式的如下关系式.

$$B_{k+1} - A_{k+1} = \Big(B_k - A_{k+1}\Big)\Big(I - \frac{s^{(k)} s^{(k)T}}{\|s^{(k)}\|^2}\Big). \tag{8.7}$$

在此基础上, 利用第一章习题的结论, 容易推得 Broyden 秩一修正公式的如下性质.

定理 8.1.2 *设 $F: R^n \to R^n$ 连续可微. 则由 Broyden 秩一修正公式 (8.5) 产生的矩阵 B_k 满足*

$$\|B_{k+1} - A_{k+1}\|_F^2 = \|B_k - A_{k+1}\|_F^2 - \frac{\|y^{(k)} - B_k s^{(k)}\|^2}{\|s^{(k)}\|^2}, \tag{8.8}$$

其中, $\|\cdot\|_F$ 表示矩阵的 Frobenius 范数.

下面我们分析局部 Broyden 算法的收敛性. 设 F' Lipschitz 连续. 若 B_k^{-1} 存在, 则有

$$\begin{aligned}
\|x^{(k+1)} - \bar{x}\| &= \|x^{(k)} + d^{(k)} - \bar{x}\| \le \|B_k^{-1}\| \|B_k (x^{(k)} - \bar{x}) + B_k d^{(k)}\| \\
&\le \|B_k^{-1}\| (\|B_k - F'(\bar{x})\| \, \|x^{(k)} - \bar{x}\| + \|B_k d^{(k)} + F'(\bar{x})(x^{(k)} - \bar{x})\|) \\
&= \|B_k^{-1}\| (\|B_k - F'(\bar{x})\| \, \|x^{(k)} - \bar{x}\| + \|F(x^{(k)}) - F(\bar{x}) - F'(\bar{x})(x^{(k)} - \bar{x})\|)
\end{aligned}$$

另一方面, 由 (8.8), 我们有

$$\begin{aligned}
\|B_{k+1} - F'(\bar{x})\|_F &\le \|B_{k+1} - A_{k+1}\|_F + \|A_{k+1} - F'(\bar{x})\|_F \\
&\le \|B_k - A_{k+1}\|_F + \|A_{k+1} - F'(\bar{x})\|_F \\
&\le \|B_k - F'(\bar{x}))\|_F + 2\|A_{k+1} - F'(\bar{x})\|_F.
\end{aligned}$$

若 F' Lipschitz 连续, 则有

$$\|A_{k+1} - F'(\bar{x})\| \le L(\|x^{(k+1)} - \bar{x}\| + \|x^{(k)} - \bar{x}\|),$$

其中, $L > 0$ 是 F' 的 Lipschitz 常数.

在上面的基础上, 利用数学归纳法, 可以证明下面的关于局部 Broyden 算法的收敛性定理.

定理 8.1.3 *设 $F: R^n \to R^n$ 连续可微, 且 F' Lipschitz 连续. 再设在方程组 (8.1) 的解 $\bar{x}$ 处 $F'(\bar{x})$ 非奇异. 则存在 $\bar{x}$ 的一个邻域 $U(\bar{x})$, 使得当 $x^{(0)} \in U(\bar{x})$, 且 B_0 与 $F'(\bar{x})$ 充分接近时, 局部 Boryden 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 包含于该邻域中, 而且 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于 $\bar{x}$.*

§8.2 非线性方程组的全局化算法

上一节介绍了求解非线性方程组的局部 Newton 法和局部拟 Newton 法. 本节, 我们介绍相应的全局化方法.

§8.2.1 阻尼 Newton 法

设 $F(x) = (F_1(x), F_2(x), \cdots, F_n(x))^T$. 引入函数

$$\theta(x) = \frac{1}{2}\|F(x)\|^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} F_i(x)^2.$$

我们称 θ 是方程组 (8.1) 的残量函数或模函数. 经计算, 容易得到 θ 的梯度具有如下形式:

$$\nabla\theta(x) = \sum_{i=1}^{n} F_i(x)\nabla F_i(x) = F'(x)^T F(x).$$

设 $\bar{d}$ 是下面的线性方程组的解:

$$F'(x)d + F(x) = 0.$$

则有

$$\nabla\theta(x)^T\bar{d} = -\|F(x)\|^2 < 0.$$

即 $\bar{d}$ 是函数 θ 在 x 处的一个下降方向. 利用此性质, 我们可构造求解非线性方程组 (8.1) 的线性搜索型 Newton 法. 称之为阻尼 Newton 法.

算法 8.1 **(非线性方程组的阻尼** ***Newton*** **法)**

步 *1 给定初始点* $x^{(0)} \in R^n$, *常数* $\rho \in (0,1)$, $\sigma_1 \in (0, 1/2)$, *精度* $\epsilon > 0$. *令* $k := 0$.

步 *2 若* $\|F(x^{(k)})\| \le \epsilon$, *则终止算法, 得解* $x^{(k)}$. *否则, 转步 3.*

步 *3 解线性方程组* (8.2) *得方向* $d^{(k)}$.

步 *4 确定步长* α_k *为集合* $\{\rho^i \mid i = 0, 1, 2, \ldots\}$ *中使得下面的不等式成立的最大者:*

$$\theta(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) \le (1 - 2\sigma_1\alpha_k)\theta(x^{(k)}). \tag{8.9}$$

步 *5 令* $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k := k+1$. *转步 2.*

注: 上面的步 4 实际上是 Armijo 型线性搜索. 事实上, 对于 Newton 方向 $d^{(k)}$, 我们有

$$\nabla\theta(x^{(k)})^T d^{(k)} = -\|F(x^{(k)})\|^2 = -2\theta(x^{(k)}).$$

因此, (8.9) 与 (2.6) 一致.

下面的定理建立了阻尼 Newton 法的全局收敛性及其超线性收敛性.

定理 8.2.1 设 $F: R^n \to R^n$ 连续可微且对每一个 $x \in R^n$, $F'(x)$ 非奇异, $\{x^{(k)}\}$ 是由阻尼 *Newton* 法产生的点列. 假设水平集

$$\Omega = \{x \in R^n \mid \theta(x) \le \theta(x^{(0)})\}$$

有界. 则

(1) 序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于非线性方程组 (8.1) 的惟一解, 而且收敛速度是超线性的.

(2) 若再假设 F' *Lipschitz* 连续, 则 $\{x^{(k)}\}$ 二次收敛.

证明 由于函数值序列 $\{\theta(x^{(k)})\}$ 单调递减, 因此 $\{x^{(k)}\} \subset \Omega$ 是有界序列. 而且, 由 (8.9) 知

$$\lim_{k\to\infty} \alpha_k \theta(x^{(k)}) = 0. \tag{8.10}$$

下面, 我们先证明存在 $\{x^{(k)}\}$ 的极限点是非线性方程组 (8.1) 的解. 记 $\bar{\alpha} = \limsup_{k\to\infty} \alpha_k$. 则 $\bar{\alpha} \in [0,1]$.

情形 (I): $\bar{\alpha} > 0$. 设子序列 $\{\alpha_k\}_{k\in K}$ 收敛于 $\bar{\alpha}$. 由 (8.10) 知

$$\lim_{k\in K,\ k\to\infty} \theta(x^{(k)}) = 0.$$

此时存在 $\{x^{(k)}\}_{k\in K}$ 的极限点是 (8.1) 的解.

情形 (II): $\bar{\alpha} = 0$. 即 $\lim_{k\to\infty} \alpha_k = 0$. 当 k 充分大时, 必有 $\alpha_k < 1$. 由线性搜索准则, $\alpha_k' \triangleq \alpha_k \rho^{-1}$ 不满足线性搜索条件 (8.9), 即有

$$\theta(x^{(k)} + \alpha_k' d^{(k)}) - \theta(x^{(k)}) > -2\sigma_1 \alpha_k' \theta(x^{(k)}).$$

设 $\bar{x}$ 是 $\{x^{(k)}\}$ 的一个极限点且 $\{x^{(k)}\}_{k\in K_1} \to \bar{x}$. 在上式两端同除以 α_k' 并令 $k\to\infty$, $k \in K_1$, 取极限得

$$\nabla\theta(\bar{x})^T \bar{d} \ge -2\sigma_1 \theta(\bar{x}),$$

其中, $\bar{d} = -F'(\bar{x})^{-1} F(\bar{x})$ 是 Newton 方向序列 $\{d^{(k)}\}_{k\in K_1}$ 的极限. 注意到 $\sigma_1 \in (0, 1/2)$, 上式包含了 $\theta(\bar{x}) = 0$. 即 $\bar{x}$ 是方程组 (8.1) 的解.

上面的过程证明了存在 $\{x^{(k)}\}$ 的极限点是方程组 (8.1) 的解. 由于函数值序列 $\{\theta(x^{(k)})\}$ 单调递减, 因此, 其极限为 0. 从而, $\{x^{(k)}\}$ 的每个极限点都是 (8.1) 的解. 但 (8.1) 的解惟一, 因此序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 (8.1) 的惟一解.

类似于定理 2.5.2 的证明, 可以证明, 当 k 充分大时 $\alpha_k = 1$. 即, 此时阻尼 Newton 法还原为局部 Newton 法. 因而, 由定理 8.1.1, $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛 / 二次收敛. **证毕**

§8.2.2 线性搜索型拟 Newton 算法

本小节, 我们介绍一种具有全局收敛性的拟 Newton 法. 与第四章中求解无约束最优化问题的拟 Newton 法不同, 即使 B_k 对称正定, 由 (8.3) 确定的拟 Newton 方向 $d^{(k)}$ 也不能保证是模函数 θ 在 $x^{(k)}$ 处的下降方向. 因此, 为了全局化拟 Newton 法, 需要新的线性搜索技术. 下面的非单调搜索技术由 [14] 给出. 给定常数 $\sigma_1 \in (0,1)$, $\eta > 0$ 和正数序列 $\{\eta_k\}$ 满足

$$\sum_{k=0}^{\infty} \eta_k \le \eta.$$

求步长 α_k 使得

$$\|F(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)})\| \le \|F(x^{(k)})\| - \sigma_1\|\alpha_k d^{(k)}\|^2 + \eta_k\|F(x^{(k)})\|. \tag{8.11}$$

由于上面的不等式右端有一个与 α_k 无关的项，因此，不等式对所有充分小的 $\alpha_k > 0$ 都成立．而且，α_k 可以通过类似于 Armijo 型线性搜索的方式获得.

利用上面的非单调线性搜索，我们给出求解非线性方程组 (8.1) 的全局化 Broyden 秩一算法如下.

算法 8.2 （**非线性方程组的全局化** *Broyden* **算法**）

步 *1* 给定初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 常数 $\rho \in (0,1)$, $\sigma_2 > 0$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k = 0$.

步 *2* 若 $\|F(x^{(k)})\| \le \epsilon$, 则终止算法，得解 $x^{(k)}$. 否则，转步 *3*.

步 *3* 解线性方程组 (8.3) 得方向 $d^{(k)}$.

步 *4* 若

$$\|F(x^{(k)}+d^{(k)})\| \le \rho\|F(x^{(k)})\| - \sigma_2\|d^{(k)}\|^2,$$

则令 $\alpha_k = 1$. 转步 *6*.

步 *5* 确定步长 α_k 为集合 $\{\rho^i \mid i = 0, 1, 2, \ldots\}$ 中使得不等式 (8.11) 成立的最大者.

步 *6* 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$.

步 *7* 由 *Broyden* 秩一修正公式 (8.5) 修正 B_k 得 B_{k+1}. 令 $k := k+1$. 转步 *2*.

注：在上面的算法中，步 4 的作用是使得当 k 充分大时，单位步长可以取到.

算法 8.2 具有如下性质.

引理 8.2.1 由全局化 *Broyden* 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 包含于下面的水平集中：

$$\Omega = \{x \in R^n \mid \|F(x^{(k)})\| \le e^{\eta}\|F(x^{(0)})\|\}.$$

证明 利用几何不等式，对任何 k, 我们均有

$$\begin{aligned}
\|F(x^{(k+1)})\| &\le (1+\eta_k)\|F(x^{(k)})\| \le (1+\eta_k)(1+\eta_{k-1})\|F(x^{(k-1)})\| \\
&\le \cdots \le \|F(x^{(0)})\|\prod_{i=0}^{k}(1+\eta_i) \le \|F(x^{(0)})\|\Big(\frac{1}{k+1}\sum_{i=0}^{k}(1+\eta_i)\Big)^{k+1} \\
&= \|F(x^{(0)})\|\Big(1+\frac{1}{k+1}\sum_{i=0}^{k}\eta_i\Big)^{k+1} \le \|F(x^{(0)})\|\Big(1+\frac{\eta}{k+1}\Big)^{k+1} \\
&\le e^{\eta}\|F(x^{(0)})\|.
\end{aligned}$$

证毕

算法 8.2 的全局收敛性定理如下 (证明留作练习).

定理 8.2.2 设 (1) 由引理 *8.2.1* 定义的水平集 Ω 有界. (2) 函数 F 在 Ω 中连续可微且 F' *Lipschitz* 连续. (3) 对任何 $x \in \Omega$, $F'(x)$ 非奇异. 则由算法 *8.2* 产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于方程组 (8.1) 的惟一解. 而且收敛速度是超线性的.

§8.2.3 信赖域算法

正如第六章所指出的，全局化 Newton 法和拟 Newton 法的另一条途径是采用信赖域算法．本小节介绍求解非线性方程组 (8.1) 的信赖域算法.

类似于第六章求解无约束问题的信赖域算法，我们构造求解非线性方程组 (8.1) 的信赖域算法，其子问题为

$$\begin{cases} \min \quad m_k(d) \triangleq \dfrac{1}{2}\|F(x^{(k)}) + F'(x^{(k)})d\|^2 \\ \text{s.t.} \quad \|d\| \le \Delta_k, \end{cases} \tag{8.12}$$

其中 $\Delta_k > 0$ 是信赖域半径．记该问题的解为 $d^{(k)}$.

函数 m_k 是 θ 的近似函数，它由在 θ 中对 F 做线性近似产生．类似于第六章，我们有预估下降量 $m_k(0) - m_k(d^{(k)})$ 和实际下降量 $\theta(x^{(k)}) - \theta(x^{(k)} + d^{(k)})$. 利用实际下降量与预估下降量的比值

$$r_k = \frac{\theta(x^{(k)}) - \theta(x^{(k)} + d^{(k)})}{m_k(0) - m_k(d^{(k)})} \tag{8.13}$$

与 1 的近似程度作为调整信赖域半径的准则.

在上面的基础上，我们给出求解非线性方程组 (8.1) 的信赖域算法如下：

算法 8.3 （**非线性方程组的** *Newton* — **信赖域算法**）

步 *0* 取初始点 $x^{(0)} \in R^n$, $\bar{\Delta} > 0$, $\Delta_0 \in (0, \bar{\Delta})$, $\eta \in [0, \frac{1}{4})$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *1* 若 $\|\nabla\theta(x^{(k)})\| \le \epsilon$, 则算法终止．得问题的解 $x^{(k)}$. 否则，转步 *2*.

步 *2* 解信赖域子问题 (8.12) 得解 $d^{(k)}$.

步 *3* 由 (8.13) 计算 r_k. 若 $r_k > \frac{3}{4}$, 则令 $\Delta_{k+1} = \min\{2\Delta_k, \bar{\Delta}\}$. 若 $\eta < r_k < \frac{1}{4}$, 则令 $\Delta_{k+1} = \frac{1}{2}\Delta_k$；若 $\frac{1}{4} \le r_k \le \frac{3}{4}$, 则令 $\Delta_{k+1} = \Delta_k$.

步 *4* 若 $r_k \le \eta$, 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)}$, $k := k+1$. 转步 *2*. 否则令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$, $k := k+1$. 转步 *1*.

注: 算法 8.3 的步 3 中的常数 $\frac{1}{4}$, $\frac{3}{4}$ 和 2 等是根据经验选取的．实际计算时，可根据问题对它们进行调整.

若将信赖域子问题中的 $F'(x^{(k)})$ 用某个拟 Newton 矩阵 B_k 代替，则相应的算法为求解非线性方程组的拟 Newton 型信赖域算法.

类似于定理 6.2.1 和 6.2.2 的证明，可以证明 Newton — 信赖域算法具有如下收敛性定理.

定理 8.2.3 设函数 $F: R^n \to R^n$ 连续可微且水平集 $\Omega = \{x \in R^n \mid \theta(x) \le \theta(x^{(0)})\}$ 有界，若在算法 *8.3* 中取 $\eta = 0$, 则

$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla\theta(x^{(k)})\| = 0.$$

定理 8.2.4 设定理 *8.2.3* 的条件满足且 ∇f *Lipschitz* 连续．若在算法 *8.3* 中取 $\eta > 0$, 则

$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla\theta(x^{(k)})\| = 0.$$

§8.3 最小二乘问题

本节，我们考察如下特殊形式的无约束问题：

$$\min f(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} F_i(x)^2, \tag{8.14}$$

其中， $F_i : R^n \to R$, $i = 1, 2, \ldots, m$ 连续可微. 我们称该问题为最小二乘问题. 非线性最小二乘问题包含非线性方程组作为其特殊情形，即 $m = n$, 且问题 (8.14) 的最优解处的目标函数值为 0. 当 F_i, $i = 1, 2, \ldots, m$ 都是线性函数时，问题 (8.14) 称为线性最小二乘问题.

§8.3.1 线性最小二乘问题

设 $F_i(x)$, $i = 1, 2, \ldots, m$ 为线性函数：

$$F_i(x) = a_i^T x - b_i, \qquad i = 1, 2, \ldots, m,$$

其中， $a_i \in R^n$, $b_i \in R$, $i = 1, 2, \ldots, m$. 考察如下线性最小二乘问题：

$$\min f(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(a_i^T x - b_i)^2. \tag{8.15}$$

容易证明，问题 (8.15) 是一个凸二次规划问题.

由无约束问题解的最优性条件，问题 (8.15) 等价于下面的线性方程组：

$$\nabla f(x) = \sum_{i=1}^{m}(a_i^T x - b_i)a_i = 0.$$

若记 $A = (a_1, \cdots, a_m)^T$, $b = (b_1, \cdots, b_m)^T$. 则上面的线性方程组可写为

$$A^T A x - A^T b = 0. \tag{8.16}$$

线性方程组 (8.16) 称为问题 (8.15) 的正规方程组. 由于正规方程组的系数矩阵的秩与其增广矩阵的秩相等，因此，方程组有解.

§8.3.2 非线性最小二乘问题

当 (8.14) 中的至少有一个 F_i 是非线性函数是，问题称为非线性最小二乘问题. 设 F 二次连续可微. 经直接计算可得

$$\nabla f(x) = \sum_{i=1}^{m} F_i(x)\nabla F_i(x) = F'(x)^T F(x),$$

$$\nabla^2 f(x) = F'(x)^T F'(x) + \sum_{i=1}^{m} F_i(x)\nabla^2 F_i(x),$$

其中,

$$F'(x) = (\nabla F_1(x), \nabla F_2(x), \cdots, \nabla F_m(x))^T$$

表示函数 F 在 x 处的 Jacobian 矩阵.

非线性最小二乘问题 (8.14) 是一个无约束最优化问题，因此，可以利用求解无约束最优化问题的算法求解，注意到该问题的特殊结构，我们可以针对该问题设计特别的算法. 下面我们介绍求解 (8.14) 的两种常用算法： Gauss-Newton 法和 Levenberg-Marquardt 算法.

求解非线性最小二乘问题 (8.14) 的 Gauss-Newton 法中 $d^{(k)}$ 是下面的线性方程组的解：

$$F'(x^{(k)})^T F'(x^{(k)})d + F'(x^{(k)})^T F(x^{(k)}) = 0. \tag{8.17}$$

或等价地， $d^{(k)}$ 是线性最小二乘问题

$$\min \frac{1}{2}\|F(x^{(k)}) + F'(x^{(k)})d\|^2$$

的解.

注意到 $\nabla^2 f(x)$ 的表达式，线性方程组 (8.17) 的系数矩阵实际上是在 $\nabla^2 f(x^{(k)})$ 中去掉了高阶导数项 $\sum\limits_{i=1}^m F_i(x)\nabla^2 F_i(x)$ 后的余下部分. 若 $\|F(x)\|$ 很小，则 (8.17) 确定的 $d^{(k)}$ 是一种近似 Newton 方向或非精确 Newton 方向. 下面的定理表明，若 $\nabla f(x^{(k)}) \neq 0$, 则 $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向.

定理 8.3.1 设函数 $F = (F_1, F_2, \ldots, F_m)^T : R^n \to R^m$ 连续可微. 函数 $f : R^n \to R$ 由 (8.14) 定义. 若 $\nabla f(x^{(k)}) \neq 0$, 则由 (8.17) 确定的 $d^{(k)}$ 满足

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < 0.$$

证明 由 ∇f 的表达式及 (8.17), 我们有

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} = (F'(x^{(k)})^T F(x^{(k)}))^T d^{(k)} = -(F'(x^{(k)})^T F'(x^{(k)})d^{(k)})^T d^{(k)} = -\|F'(x^{(k)})d^{(k)}\|^2.$$

若 $F'(x^{(k)})d^{(k)} \neq 0$, 则有 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < 0$. 若 $F'(x^{(k)})d^{(k)} = 0$, 由 (8.17), 有 $F'(x^{(k)})^T F(x^{(k)}) = 0$, 即 $\nabla f(x^{(k)}) = 0$. 因此，定理的结论成立. **证毕**

由于 $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向，因此，可利用第二章中介绍的下降算法构造求解 (8.14) 的算法.

算法 8.4 （**非线性最小二乘问题的** *Gauss-Newton* **法**）

步 *1* 给定初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 常数 $\rho \in (0, 1)$, $\sigma_1 \in (0, 1/2)$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *2* 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \epsilon$, 则终止算法，得解 $x^{(k)}$. 否则，转步 *3*.

步 *3* 解线性方程组 (8.17) 得方向 $d^{(k)}$.

步 *4* 确定步长 α_k 为集合 $\{\rho^i \mid i = 0, 1, 2, \ldots\}$ 中使得下面的不等式成立的最大者：

$$f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) \leq f(x^{(k)}) + \sigma_1 \alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}. \tag{8.18}$$

步 *5* 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k := k + 1$. 转步 *2*.

Gauss-Newton 法的全局收敛性定理如下.

定理 8.3.2 设函数 $F=(F_1,F_2,\dots,F_m)^T: R^n\to R^m$ 连续可微，函数 $f:R^n\to R$ 由 (8.14) 定义且存在常数 $\gamma>0$ 使得

$$\|F'(x)d\|\ge\gamma\|d\|,\qquad \forall x,d\in R^n.$$

设 $\{x^{(k)}\}$ 是由 *Gauss-Newton* 法产生的点列且水平集

$$\Omega=\{x\in R^n\mid f(x)\le f(x^{(0)})\}$$

有界. 则

$$\lim_{k\to\infty}\|\nabla f(x^{(k)})\|=0. \tag{8.19}$$

证明 我们利用定理 2.4.3 证明本定理的结论. 首先, 由 $\nabla f(x)$ 的表达式以及 (8.17) 容易推得 (2.17).

设 θ_k 表示 $d^{(k)}$ 与 $-\nabla f(x^{(k)})$ 之间的夹角. 由于 $\{x^{(k)}\}\subset\Omega$ 有界, 故存在 $\beta>0$ 使得 $\|F'(x^{(k)})\|\le\beta$. 由 (8.17) 有

$$\cos\theta_k=\frac{-\nabla f(x^{(k)})^Td^{(k)}}{\|\nabla f(x^{(k)})\|\,\|d^{(k)}\|}=\frac{\|F'(x^{(k)})d^{(k)}\|^2}{\|F'(x^{(k)})^TF'(x^{(k)})d^{(k)}\|\,\|d^{(k)}\|}\ge\frac{\gamma^2\|d^{(k)}\|^2}{\beta^2\|d^{(k)}\|^2}=\gamma^2\beta^{-2}.$$

由定理 2.4.3 即得 (8.19). **证毕**

关于 Gauss-Newton 法的收敛速度，我们有如下定理 (证明留作练习).

定理 8.3.3 设定理 *8.3.2* 的条件成立. 再设由 *Gauss-Newton* 法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^* 且 $F(x^*)=0$. 则 $\{x^{(k)}\}$ 具有超线性收敛速度. 若进一步假设 F' *Lipschitz* 连续，则 $\{x^{(k)}\}$ 二次收敛于 x^*.

Levenberg-Marquardt 算法是求解非线性最小二乘问题的另一种常用算法，该算法中 $d^{(k)}$ 是下面的线性方程组的解：

$$(F'(x^{(k)})^TF'(x^{(k)})+\mu_kI)d+F'(x^{(k)})^TF(x^{(k)})=0, \tag{8.20}$$

其中，$I\in R^{n\times n}$ 表示单位矩阵，$\mu_k>0$. 若 $\mu_k=0$, 则 Levenberg-Marquardt 算法还原为 Gauss-Newton 算法. 从这种意义出发， Levenberg-Marquardt 可作为是一种修正的 Gauss-Newton 法. 注意到线性方程组 (8.20) 中的系数矩阵对称正定，因而，其解存在惟一.

利用无约束问题解的最优性条件，不难发现，线性方程组 (8.20) 与下面的无约束凸二次规划问题等价：

$$\min\frac12\|F(x^{(k)})+F'(x^{(k)})d\|^2+\frac12\mu_k\|d\|^2.$$

Levenberg-Marquardt 算法与信赖域算法之间也有密切的关系. 事实上，我们有如下定理 (证明留作练习，见下一章习题).

定理 8.3.4 线性方程组 (8.20) 的解 $d^{(k)}$ 是某个信赖域子问题

$$\min\frac12\|F'(x^{(k)})d+F(x^{(k)})\|^2,\qquad s.t.\ \|d\|\le\Delta_k \tag{8.21}$$

的解的充要条件是它满足存在 $\lambda_k\ge0$ 使得

$$\left\{\begin{array}{rcl}(F'(x^{(k)})^TF'(x^{(k)})+\lambda_kI)d^{(k)}+F'(x^{(k)})^TF(x^{(k)})&=&0,\\ \lambda_k(\|d^{(k)}\|-\Delta_k)&=&0.\end{array}\right.$$

由于线性方程组 (8.20) 的系数矩阵对称正定且 $\nabla f(x^{(k)}) = F'(x^{(k)})^T F(x^{(k)})$, 因此，由定理 2.1.1 知, 线性方程组 (8.20) 确定的方向 $d^{(k)}$ 是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向. 下面, 我们给出 Levenberg-Marquardt 算法的计算步骤.

算法 8.5 （**非线性最小二乘问题的** *Levenberg-Marquardt* **算法**）

步 *1* 给定初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 常数 $\rho \in (0,1)$, $\sigma_1 \in (0,1/2)$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *2* 若 $\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \epsilon$, 则终止算法，得解 $x^{(k)}$. 否则，转步 *3*.

步 *3* 解线性方程组 (8.20) 得方向 $d^{(k)}$.

步 *4* 确定步长 α_k 为集合 $\{\rho^i \mid i = 0,1,2,\ldots\}$ 中使得下面的不等式成立的最大者：

$$f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) \le f(x^{(k)}) + \sigma_1 \alpha_k \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}. \tag{8.22}$$

步 *5* 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k := k+1$. 转步 *2*.

Levenberg-Marquardt 算法与 Gauss-Newton 算法的惟一区别在于确定下降方向的子问题.
下面的定理给出了算法 8.5 的全局收敛性.

定理 8.3.5 设 F 连续可微，且水平集

$$\Omega = \{x \in R^n \mid f(x) \le f(x^{(0)})\}$$

有下界. $\{x^{(k)}\}$ 由算法 *8.5* 产生. 若 (x^*, μ^*) 是序列 $\{(x^{(k)}, \mu_k)\}$ 的一个极限点使得矩阵 $F'(x^*)^T F'(x^*) + \mu^* I$ 正定，则 x^* 满足 $\nabla f(x^*) = 0$.

类似于定理 8.3.3, 关于 Levenberg-Marquardt 算法的收敛速度，我们有如下定理.

定理 8.3.6 设定理 *8.3.5* 的条件成立. 再设由 *Levenberg-Marquardt* 算法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^* 且 $F(x^*) = 0$, $F'(x^*)$ 满秩. 若 $\{\mu_k\} \to 0$, 则 $\{x^{(k)}\}$ 具有超线性收敛速度. 若进一步假设 F' *Lipschitz* 连续，且存在常数 $C > 0$ 使得 $\mu_k \le C\|F(x^{(k)})\|$, 则 $\{x^{(k)}\}$ 二次收敛于 x^*.

习题 8

1. 设矩阵 $A \in R^{m\times n}$, $m \ge n$. 证明： A 列满秩的充要条件是矩阵 $A^T A$ 正定.
2. 设 $F : R^n \to R^n$ 连续可微且对每一个 $x \in R^n$, $F'(x)$ 非奇异.
   (i) 证明：对任何 $\bar{x} \in R^n$, 存在其邻域 $U(\bar{x})$ 使得 $F'(x)$ 在 $U(\bar{x})$ 上一致非奇异，即存在常数 $m > 0$ 使得
   $$\|F'(x)d\| \ge m\|d\|, \qquad \forall x \in U(\bar{x}),\ \forall d \in R^n.$$
   (ii) 证明： $\|F'(x)^{-1}\|$ 在任何有界闭集 $D \subset R^n$ 上有界.

3. 给定函数 $F: R^n \to R^n$ 连续. 证明：若 F 强单调，即存在常数 $m>0$ 使得

$$(F(x)-F(y))^T(x-y) \geq m\|x-y\|^2, \quad \forall x, y \in R^n.$$

则对任何 $\alpha \in R^n$, 水平集

$$\Omega = \{x \in R^n \mid \|F(x)\| \leq \alpha\}$$

是有界闭集.

4. 证明局部 Newton 法的收敛性定理，即定理 8.1.1.

5. 设函数 $F: R^n \to R^n$ 连续可微，x^* 是方程组 (8.1) 的解且 $F'(x^*)$ 非奇异. 设 $\{x^{(k)}\}$ 是如下局部非精确 Newton 迭代格式产生的点列：

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}.$$
$$\|F'(x^{(k)})d^{(k)} + F(x^{(k)})\| \leq \eta_k \|F(x^{(k)})\|,$$

其中，$\eta_k \in (0, \eta)$, $\eta < 1$. 证明：

 (i) 当常数 $\eta > 0$ 充分小时，$\{x^{(k)}\}$ 局部线性收敛于 x^*.

 (ii) 若 $\eta_k \to 0$, 则 $\{x^{(k)}\}$ 局部超线性收敛于 x^*.

 (iii) 若 $\eta_k = O(\|F(x^{(k)})\|)$ 且 F' Lipschitz 连续，则 $\{x^{(k)}\}$ 局部二次收敛于 x^*

6. 给定序列 $\{x^{(k)}\} \subset R^n$.

 (i) 若存在常数 $\rho \in (0,1)$ 以及指标 $\bar{k}$ 使得不等式

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \rho \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$$

 对所有 $k \geq \bar{k}$ 均成立. 证明：$\{x^{(k)}\}$ 收敛于某个点 x^*, 而且存在常数 $C > 0$, $\beta \in (0,1)$ 使得当 k 充分大时,

$$\|x^{(k)} - x^*\| \leq C\beta^k.$$

 (2) 若存在常数 $M > 0$, $t > 1$ 以及指标 $\bar{k}$, 使得 $M^{1/(t-1)}\|x^{(\bar{k}+1)} - x^{(\bar{k})}\| < 1$, 且

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq M\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|^t, \qquad \forall k \geq \bar{k}+1.$$

 证明：$\{x^{(k)}\}$ 收敛于某个 x^*, 而且

$$\lim_{k\to\infty} \|x^{(k)} - x^*\|^{1/t} = 0.$$

7. 设下面的条件成立：

 (1) $F: R^n \to R^n$ 连续可微且 F' Lipschitz 连续，其 Lipschitz 常数为 $L > 0$.

 (2) 对任何 $x \in R^n$, $F'(x)$ 非奇异且存在常数 $M > 0$ 使得 $\|F'(x)^{-1}\| \leq M$.

 证明：若初始点 $x^{(0)}$ 满足

$$\|F'(x^{(0)})^{-1}F(x^{(0)})\| \leq 2LM^{-1},$$

 则古典 Newton 法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于方程组 (8.1) 的解，而且收敛速度是二次的.

8. 在定理 8.2.1 的条件下，证明当 k 充分大时，算法 8.1 产生的步长 $\alpha_k = 1$.

9. 证明 Broyden 秩一修正公式产生的矩阵的最小改变性，即由 Broyden 秩一修正公式 (8.5) 产生的 B_{k+1} 满足

$$\|B_{k+1} - B_k\|_F \leq \|B - B_k\|_F, \quad \forall B: Bs^{(k)} = y^{(k)}.$$

10. 设正数序列 $\{a_k\}$, $\{b_k\}$ 和 $\{\zeta_k\}$ 满足

$$a_{k+1}^2 \le (a_k + b_k)^2 - \zeta_k^2.$$

(i) 证明：若

$$\sum_{k=0}^{\infty} b_k^2 < \infty,$$

则有

$$\lim_{k\to\infty} \frac{1}{k}\sum_{i=0}^{k-1} \zeta_i^2 = 0.$$

(ii) 证明：若

$$\sum_{k=0}^{\infty} b_k < \infty,$$

则有

$$\sum_{k=0}^{\infty} \zeta_i^2 < \infty.$$

11. 设 (1) 由引理 8.2.1 定义的水平集 Ω 有界. (2) 函数 F 在 Ω 中连续可微且 F' Lipschitz 连续. (3) 对任何 $x \in \Omega$, $F'(x)$ 非奇异. 设 $\{x^{(k)}\}$ 表示由全局 Broyden 算法 (算法 8.2) 产生的点列. 记 $\zeta_k = \|y^{(k)} - B_k s^{(k)}\|/\|s^{(k)}\|$. 证明：

(i) 序列 $\{s^{(k)}\}$ 满足

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|s^{(k)}\|^2 < \infty.$$

(ii) 序列 $\{\zeta_k\}$ 满足

$$\lim_{k\to\infty} \frac{1}{k}\sum_{i=0}^{k-1} \zeta_i^2 = 0.$$

(iii) 序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于方程组 (8.1) 的惟一解.

12. 设上一题的条件成立. 证明：存在常数 $\zeta > 0$ 及指标 $\bar{k}$ 使得当 $\zeta_k \le \zeta$ 且 $k \ge \bar{k}$ 时 $\alpha_k = 1$, 而且不等式

$$\|F(x^{(k)} + d^{(k)})\| \le \rho\|F(x^{(k)})\| - \sigma_2\|d^{(k)}\|^2$$

对所有满足 $\zeta_k \le \zeta$ 的 $k \ge \bar{k}$ 成立.

13. 设上一题的条件成立. 证明：

(i) 序列序列 $\{\|F(x^{(k)})\|\}$, $\{\|x^{(k)} - \bar{x}\|\}$ 和 $\{s^{(k)}\}$ 满足

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|F(x^{(k)})\| < \infty, \qquad \sum_{k=0}^{\infty} \|x^{(k)} - \bar{x}\| < \infty, \qquad \sum_{k=0}^{\infty} \|s^{(k)}\| < \infty.$$

(ii) 序列 $\{\zeta_k\}$ 满足

$$\sum_{k=0}^{\infty} \zeta_k^2 < \infty.$$

(iii) 序列 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛于方程组 (8.1) 的惟一解.

14. 设 $F: R^n \to R^n$ 单调，即满足

$$(F(u)-F(v))^T(u-v) \ge 0, \quad \forall u, v \in R^n.$$

设 $x, y \in R^n$ 满足 $F(y)^T(x-y) > 0$. 令

$$x^+ = x - \frac{F(y)^T(x-y)}{\|F(y)\|^2} F(y).$$

证明：对方程组 (8.1) 的任何解 $\bar{x}$, 下面的不等式成立：

$$\|x^+ - \bar{x}\| \le \|x-\bar{x}\|^2 - \|x^+ - x\|^2.$$

15. 证明线性最小二乘问题 (8.15) 是一个凸规划问题.

16. 设定理 8.3.2 的条件成立. 则采用 Wolfe-Powell 型线性搜索的 Gauss-Newton 法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 也满足 (8.19).

17. 证明定理 8.3.3.

18. 设矩阵 $A \in R^{n\times n}$ 对称半正定， $a \in R^n$. 证明：

    (i) 函数

    $$\phi(t) = \|(A+tI)^{-1}a\|^2$$

    关于 $t > 0$ 单调递减.

    (ii) 矩阵 $A+tI$ 的条件数关于 $t > 0$ 单调递减.

19. 证明定理 8.3.5.

20. 证明定理 8.3.6.

第九章　约束问题解的最优性条件

设函数 $f, g_i, h_j : R^n \to R$, $i = 1, \ldots, m_1$, $j = m_1 + 1, \ldots, m$ 连续可微. 考察约束最优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(x) \ge 0,\ i \in \mathcal{I} \triangleq \{1, \ldots, m_1\}, \\ & h_j(x) = 0,\ j \in \mathcal{E} \triangleq \{m_1+1, \ldots, m\}. \end{aligned} \tag{9.1}$$

问题 (9.1) 的可行域为

$$D = \{x \in R^n \mid g_i(x) \ge 0, i \in \mathcal{I}, h_j(x) = 0, j \in \mathcal{E}\}.$$

显然，可行域 D 为闭集. 为了导出约束问题最优解的必要条件，我们先引入可行方向的概念.

§9.1　可行方向

定义 9.1.1 *设 $x \in D$, $d \in R^n$. 若存在数 $\delta > 0$ 使得*

$$x + \alpha d \in D, \qquad \forall \alpha \in (0, \delta],$$

则称 d 是 D 在 x 处的一个可行方向. D 在 x 处的全体可行方向构成的集合记为 $FD(x, D)$.

函数 f 在 x 处的可行的下降方向称为 f 在 x 处的可行下降方向，简称为 f 的可行下降方向. 由定理 2.1.1 知，若 $x \in D$, $d \in FD(x, D)$ 且 $\nabla f(x)^T d < 0$, 则 d 是函数 f 在 x 处的一个可行下降方向.

定义 9.1.2 *设 $x \in D$, $d \in R^n$. 若存在序列 $\{d^{(k)}\} \subset R^n$ 和正数序列 $\{\delta_k\}$ 使得*

$$x + \delta_k d^{(k)} \in D, \quad \forall k,$$

且有 $\lim\limits_{k\to\infty} d^{(k)} = d$, $\lim\limits_{k\to\infty} \delta_k = 0$, 则称 d 是 D 在 x 处的一个序列可行方向. D 在 x 处的全体序列可行方向构成的集合记为 $SFD(x, D)$.

由可行方向和序列可行方向的定义不难看出：对任给的 $x \in D$, $FD(x, D) \subseteq SFD(x, D)$. 几何上，可行方向是指向可行域内部的方向，序列可行方向包含了可行方向全体及其极限 (见图 9.1).

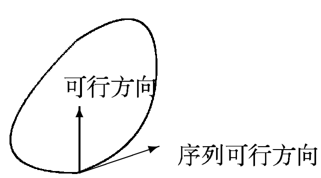

图 9.1　可行方向与序列可行方向.

下面的定理给出了约束问题最优解的一个必要条件.

定理 9.1.1 设 $x^* \in D$ 是问题 (9.1) 的一个局部最优解. 则

$$\nabla f(x^*)^T d \geq 0, \qquad \forall d \in SFD(x^*, D).$$

证明 任给 $d \in SFD(x^*, D)$, 存在向量序列 $\{d^{(k)}\} \to d$ 和正数序列 $\{\delta_k\} \to 0$ 使得 $x^* + \delta_k d^{(k)} \in D$. 由于 x^* 是问题 (9.1) 的局部最优解，故当 k 充分大时，必有

$$f(x^*) \leq f(x^* + \delta_k d^{(k)}) = f(x^*) + \delta_k \nabla f(x^*)^T d^{(k)} + o(\delta_k).$$

从而，$\nabla f(x^*)^T d^{(k)} \geq 0 + o(1)$. 令 $k \to \infty$ 即得

$$\nabla f(x^*)^T d \geq 0.$$

证毕

注 (1) 利用定理 2.1.1, 定理 9.1.1 可粗略地理解为：若 x^* 是问题 (9.1) 的局部最优解，则该点处的任何序列可行方向都不是函数 f 的下降方向．特别，函数 f 在 x^* 处不存在可行的下降方向． (2) 无约束问题最优解的一阶必要条件可作为是上面定理的一个特殊情况.

定理 9.1.2 设 $x^* \in D$ 且满足

$$\nabla f(x^*)^T d > 0, \qquad \forall d \in SFD(x^*, D), d \neq 0.$$

则 x^* 是问题 (9.1) 的一个严格局部最优解.

证明 反设 x^* 不是问题 (9.1) 的严格局部最优解．则存在 $\{x^{(k)}\} \subset D$ 使得 $f(x^{(k)}) \leq f(x^*)$ 且 $\{x^{(k)}\} \to x^*$, $x^{(k)} \neq x^*$. 令 $d^{(k)} = (x^{(k)} - x^*)/\|x^{(k)} - x^*\|$. 则序列 $\{d^{(k)}\}$ 有界，故必有收敛的子列．不妨设其本身收敛于某个向量 d. 显然 $d \neq 0$. 令 $\delta_k = \|x^{(k)} - x^*\|$. 则 $\delta_k \to 0$, $k \to \infty$. 由 $SFD(x^*, D)$ 的定义知 $d \in SFD(x^*, D)$. 但

$$\frac{f(x^{(k)}) - f(x^*)}{\|x^{(k)} - x^*\|} \leq 0.$$

上式中令 $k \to \infty$ 得 $\nabla f(x^*)^T d \leq 0$. 与定理的假设矛盾．因此， x^* 是问题 (9.1) 的严格局部最优解.
证毕

定理 9.1.2 说明：若在问题 (9.1) 的可行点 x^* 处的所有序列可行方向都是函数 f 在 x^* 处的上升方向，则 x^* 必是问题 (9.1) 的严格局部最优解.

定理 9.1.1 和 9.1.2 称为约束问题 (9.1) 的几何最优性条件.

对 $x \in D$, 记

$$\mathcal{I}(x) = \{i \in \mathcal{I} \mid g_i(x) = 0\}, \quad A(x) = \mathcal{E} \cup \mathcal{I}(x).$$

集合 $A(x)$ 称为可行点 x 处的有效集或积极集．若 $i \in A(x)$, 称相应的约束为 x 处的有效约束．此时有 $g_i(x) = 0$ 或 $h_i(x) = 0$, 即 x 位于可行域边界 $g_i(x) = 0$ 或 $h_i(x) = 0$ 上．其它约束称为非有效约束．由有效约束的定义可知，对任何 $x \in D$, 等式约束均为有效约束．一般地，不同的可行点有不同的有效约束.

例 9.1.1 考察如下约束问题:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = x_1^2 + x_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + 2x_2 \le 8, \\ & 0 \le x_1 \le 4, \\ & 0 \le x_2 \le 3. \end{aligned}$$

在可行点 $x^{(0)} = (0,0)^T$ 处的有效集为 $A(x^{(0)}) = \{2,4\}$, 相应的有效约束为 $x_1 \ge 0$ 和 $x_2 \ge 0$. 而在可行点 $x^{(1)} = (4,2)^T$ 处的有效集为 $A(x^{(1)}) = \{1,3\}$, 相应的有效约束为 $x_1 + 2x_2 \le 8$ 和 $x_1 \le 4$. 见图 9.2.

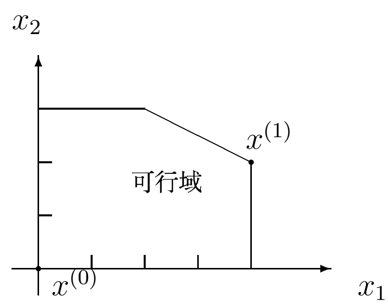

图 9.2 有效约束.

定义 9.1.3 集合

$$LFD(x, D) = \{d \in R^n \mid d^T \nabla g_i(x) \ge 0, d^T \nabla h_j(x) = 0, \ \forall i \in \mathcal{I}(x), j \in \mathcal{E}\}$$

中的向量 d 称为 D 在 x 处的线性化可行方向.

利用定义 9.1.1, 9.1.2 和 9.1.3 可以证明：对任意的 $x \in D$, 下面的包含关系是成立：

$$FD(x, D) \subseteq SFD(x, D) \subseteq LFD(x, D).$$

事实上，第一个包含关系显然. 下证 $SFD(x, D) \subseteq LFD(x, D)$. 对任何 $d \in SFD(x, D)$, 有向量序列 $\{d^{(k)}\} \to d$ 以及正数序列 $\{\delta_k\} \to 0$, 使得 $x + \delta_k d^{(k)} \in D$. 因此,

$$\begin{aligned} 0 \le g_i(x + \delta_k d^{(k)}) = \delta_k \nabla g_i(x)^T d^{(k)} + o(\delta_k), \quad \forall i \in \mathcal{I}(x), \\ 0 = h_j(x + \delta_k d^{(k)}) = \delta_k \nabla h_j(x)^T d^{(k)} + o(\delta_k), \quad \forall j \in \mathcal{E}. \end{aligned}$$

上面的不等式和等式两端同除以 δ_k 并令 $k \to \infty$ 即得 $d \in LFD(x, D)$.

下面的定理给出了可行方向、序列可行方向与线性化可行方向等价的一个充分条件.

定理 9.1.3 若 g_i, h_j, $i \in \mathcal{I}$, $j \in \mathcal{E}$ 都是线性函数，则

$$FD(x, D) = SFD(x, D) = LFD(x, D).$$

证明 只需证明 $LFD(x,D) \subseteq FD(x,D)$. 令

$$g_i(x) = a_i^T x + b_i, \quad i \in \mathcal{I}, \quad h_j(x) = a_j^T x + b_j, \quad j \in \mathcal{E}.$$

由 $LFD(x,D)$ 的定义知

$$LFD(x,D) = \{d \in R^n \mid a_i^T d \geq 0, a_j^T d = 0,\ i \in \mathcal{I}(x), j \in \mathcal{E}\}.$$

任取 $d \in LFD(x,D)$. 由 x 的可行性及 $\mathcal{I}(x)$ 的定义，对任意 $\alpha \geq 0$, 有

$$g_i(x+\alpha d) = a_i^T(x+\alpha d) + b_i = \alpha a_i^T d \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}(x)$$

及

$$h_j(x+\alpha d) = a_j^T(x+\alpha d) + b_j = \alpha a_j^T d = 0, \quad j \in \mathcal{E}.$$

若 $\mathcal{I}\backslash\mathcal{I}(x) \neq \emptyset$, 令

$$\bar{\alpha} = \min\{-\frac{g_i(x)}{a_i^T d} \,\Big|\, i \in \mathcal{I}\backslash\mathcal{I}(x),\ a_i^T d < 0\}.$$

则 $\bar{\alpha} \geq 0$ 且 $\alpha \in [0, \bar{\alpha}]$ 时,

$$g_i(x+\alpha d) = a_i^T(x+\alpha d) + b_i = g_i(x) + \alpha a_i^T d \geq 0, \quad i \in \mathcal{I}\backslash\mathcal{I}(x).$$

上面的过程证明了 $d \in FD(x,D)$. **证毕**

定义 9.1.4 设 $x \in D$. 若向量组 $\{\nabla h_j(x), \nabla g_i(x),\ i \in \mathcal{I}(x), j \in \mathcal{E}\}$ 线性无关，则称在 x 处线性无关约束品性成立，或简称为在 x 处 *LICQ (linear independence constraint qualification)* 成立.

引理 9.1.1 若在 $x \in D$ 处 *LICQ* 成立，则 $SFD(x,D) = LFD(x,D)$.

* **证明** 只需证明 $SFD(x,D) \supseteq LFD(x,D)$. 任取 $d \in LFD(x,D)$. 若 $d = 0$, 则显然有 $d \in SFD(x,D)$. 若 $d \neq 0$, 不妨设 $\mathcal{I}(x) = \{1, \ldots, m_1'\}$. 定义函数 $c: R^n \to R^{m_e}$ 如下：

$$c_i(x) = \begin{cases} g_i(x), & i \in \mathcal{I}(x), \\ h_i(x), & i \in \mathcal{E}, \end{cases}$$

其中 $m_e = m_1' + m - m_1$. 令矩阵 $Z \in R^{n\times(n-m_e)}$ 列满秩且它的列构成 $c'(x)$ 的核空间的一组基，即

$$Z \in R^{n\times(n-m_e)}, \quad Z \text{ 列满秩且} \quad c'(x)Z = 0.$$

考察下面的关于变量 (u,t) 的非线性方程组

$$R(u,t) \triangleq \begin{pmatrix} c(u) - tc'(x)d \\ Z^T(u - x - td) \end{pmatrix} = 0. \tag{9.2}$$

通过计算得该方程组左端函数 $R(u,t)$ 在 $(x,0)$ 处的关于 u 的 Jacobi 矩阵为 $R_u'(x,0) = (c'(x)^T, Z)^T$. 由 $c'(x)$ 和 Z 的定义，该矩阵非奇异. 因此，由隐函数定理知，当 $t = t_k > 0$ 充分小时，方程组 (9.2) 有惟一解 $u = x^{(k)} \neq x$ 且 $x^{(k)} \to x$. 故有

$$\begin{aligned} g_i(x^{(k)}) &= c_i(x^{(k)}) = t_k \nabla c_i(x)^T d \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}(x), \\ h_i(x^{(k)}) &= c_i(x^{(k)}) = t_k \nabla c_i(x)^T d = 0, \quad \forall i \in \mathcal{E}. \end{aligned}$$

而对任何 $i \in \mathcal{I} \backslash \mathcal{I}(x)$, 有 $g_i(x) > 0$, 故当 $x^{(k)}$ 充分接近 x 时，有 $g_i(x^{(k)}) > 0$. 从而 $x^{(k)} \in D$. 利用 Taylor 展开得

$$\begin{aligned} 0 = R(x^{(k)}, t_k) &= \begin{pmatrix} c'(x)(x^{(k)} - x) + o(\|x^{(k)} - x\|) - t_k c'(x) d \\ Z^T (x^{(k)} - x - t_k d) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} c'(x) \\ Z^T \end{pmatrix} (x^{(k)} - x - t_k d) + o(\|x^{(k)} - x\|). \end{aligned}$$

上式中令 $k \to \infty$ 并注意到系数矩阵的非奇异性，可得

$$\lim_{k \to \infty} \Big(\frac{x^{(k)} - x}{\|x^{(k)} - x\|} - \frac{t_k}{\|x^{(k)} - x\|} d \Big) = 0.$$

因此,

$$\lim_{k \to \infty} \frac{t_k \|d\|}{\|x^{(k)} - x\|} = 1.$$

故

$$\lim_{k \to \infty} t_k = \lim_{k \to \infty} (\|x^{(k)} - x\|) \|d\| = 0,$$

且

$$\|d\| \lim_{k \to \infty} \Big(\frac{x^{(k)} - x}{\|x^{(k)} - x\|} - \frac{t_k}{\|x^{(k)} - x\|} d \Big) = \lim_{k \to \infty} \Big[\frac{\|x^{(k)} - x\|}{t_k} \cdot \Big(\frac{x^{(k)} - x}{\|x^{(k)} - x\|} - \frac{t_k}{\|x^{(k)} - x\|} d \Big) \Big] = 0,$$

即

$$\lim_{k \to \infty} \frac{x^{(k)} - x}{t_k} = d.$$

令 $d^{(k)} = \dfrac{x^{(k)} - x}{t_k}$. 则 $x + t_k d^{(k)} = x^{(k)} \in D$ 且 $d^{(k)} \to d$, $\lim_{k \to \infty} t_k = 0$, 即 $d \in SFD(x, D)$. **证毕**

下面的引理从某种意义上 (当 $SFD(x, D) = LFD(x, D)$ 时) 给出了几何最优性必要条件的一种等价形式.

引理 9.1.2 不等式 $\nabla f(x)^T d \geq 0$ 对所有的 $d \in LFD(x, D)$ 均成立的充要条件是：存在 λ_i, μ_j, $i \in \mathcal{I}(x)$, $j \in \mathcal{E}$ 使得

$$\nabla f(x) - \sum_{i \in \mathcal{I}(x)} \lambda_i \nabla g_i(x) - \sum_{j \in \mathcal{E}} \mu_j \nabla h_j(x) = 0, \quad \lambda_i \geq 0, \ \forall i \in \mathcal{I}(x). \tag{9.3}$$

证明 充分性：设 (9.3) 成立．对任何 $d \in LFD(x, D)$ 有

$$d^T \nabla f(x) = \sum_{i \in \mathcal{I}(x)} \lambda_i d^T \nabla g_i(x) + \sum_{j \in \mathcal{E}} \mu_j d^T \nabla h_j(x) = \sum_{i \in \mathcal{I}(x)} \lambda_i d^T \nabla g_i(x) \geq 0.$$

必要性：记

$$S = \Big\{ s \ \Big| \ s = \sum_{i \in \mathcal{I}(x)} \lambda_i \nabla g_i(x) + \sum_{j \in \mathcal{E}} \mu_j \nabla h_j(x), \ \lambda_i \geq 0, \ \forall i \in \mathcal{I}(x) \Big\}.$$

反设 (9.3) 不成立，即 $\nabla f(x) \notin S$. 下面我们寻找 $d \in LFD(x, D)$, 使得 $d^T \nabla f(x) < 0$. 令 $\hat{s}$ 是 $\nabla f(x)$ 到集合 S 的投影，即 $\hat{s}$ 是下面问题的解：

$$\min \|s - \nabla f(x)\|^2 \triangleq \psi(s), \quad \text{s.t. } s \in S.$$

由于 ψ 是一致凸 (二次) 函数且集合 S 是闭凸锥，上面的问题存在惟一解 $\hat{s}$. 令

$$\phi(t) = \psi(t\hat{s}) = \|t\hat{s} - \nabla f(x)\|^2.$$

由于 S 是闭凸锥， $tS \subseteq S, \forall t \geq 0$, 故 $t = 1$ 是问题 $\min_{t \geq 0} \phi(t)$ 的一个最优解. 因此， $\phi'(1) = 0$, 即有

$$\hat{s}^T(\hat{s} - \nabla f(x)) = 0. \tag{9.4}$$

另一方面，注意到 S 是凸集，对任何 $s \in S$, 方向 $s - \hat{s}$ 是 S 在 $\hat{s}$ 处的可行方向. 由定理 9.1.1 及 (9.4) 知

$$0 \leq (s - \hat{s})^T \nabla \psi(\hat{s}) = 2(s - \hat{s})^T(\hat{s} - \nabla f(x)) = 2s^T(\hat{s} - \nabla f(x)). \tag{9.5}$$

取 $d = \hat{s} - \nabla f(x)$. 由于 $\nabla f(x) \notin S$, 故 $d \neq 0$. 由 S 的定义，显然有

$$\nabla g_i(x) \in S,\ \nabla h_j(x) \in S, \qquad \forall i \in \mathcal{I}(x),\ j \in \mathcal{E}.$$

上式结合 (9.5) 不难验证 $d \in LFD(x, D)$. 但是，我们有

$$d^T \nabla f(x) = d^T(\hat{s} - d) = d^T\hat{s} - \|d\|^2 = (\hat{s} - \nabla f(x))^T \hat{s} - \|d\|^2 = -\|d\|^2 < 0.$$

这与假设矛盾. 因此， (9.3) 成立. **证毕**

§9.2 约束问题的最优性条件

我们称函数 $L : R^{n+m} \to R$:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) - \lambda^T g_{\mathcal{I}}(x) - \mu^T h_{\mathcal{E}}(x) = f(x) - \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i g_i(x) - \sum_{j \in \mathcal{E}} \mu_j h_j(x)$$

为问题 (9.1) 的 Lagrange 函数，其中， $\lambda \in R^{m_1}$, $\mu \in R^{m-m_1}$ 称为 Lagrange 乘子.

下面的定理通常称为约束问题 (9.1) 的一阶最优性条件— K-K-T(Karush-Kuhn-Tucker) 条件.

定理 9.2.1 *设 x^* 是问题 (9.1) 的局部最优解. 并设在 x^* 处*

$$SFD(x^*, D) = LFD(x^*, D). \tag{9.6}$$

则存在 Lagrange 乘子向量 $\lambda^* \in R^{m_1}$, $\mu^* \in R^{m-m_1}$ 使得下面的条件成立：

$$\begin{cases} \nabla_x L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = 0, \\ h_j(x^*) = 0, \ \ j \in \mathcal{E}, \\ \lambda_i^* \geq 0, \ g_i(x^*) \geq 0, \ \lambda_i^* g_i(x^*) = 0, \ \ i \in \mathcal{I}. \end{cases} \tag{9.7}$$

特别，若在 x^* 处 LICQ 成立；或函数 g_i, h_j, $i \in \mathcal{I}$, $j \in \mathcal{E}$ 都是线性函数，则上面的 K-K-T 条件 (9.7) 成立.

证明 由定理 9.1.1 及 (9.6) 知，对任何 $d \in LFD(x^*, D)$, 有 $d^T\nabla f(x^*) \geq 0$. 利用引理 9.1.2, 存在 $\lambda_i^* \geq 0$, μ_j^*, $i \in \mathcal{I}(x^*)$, $j \in \mathcal{E}$, 使得

$$\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{I}(x^*)} \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) - \sum_{j \in \mathcal{E}} \mu_j^* \nabla h_j(x^*) = 0.$$

令 $\lambda_i^* = 0, \forall i \in \mathcal{I} \backslash \mathcal{I}(x^*)$ 即得 (9.7). **证毕**

条件 (9.6) 称为约束问题 (9.1) 的约束品性或约束规格. (9.7) 称为约束问题 (9.1) 的 K-K-T 条件, 其解称为 K-K-T 点. K-K-T 条件 (9.7) 可以写成如下紧凑形式:

$$H(x, \lambda, \mu) \triangleq \begin{pmatrix} \nabla_x L(x, \lambda, \mu) \\ h_{\mathcal{E}}(x) \\ \min\{\lambda_{\mathcal{I}}, g_{\mathcal{I}}(x)\} \end{pmatrix} = 0,$$

其中，向量值函数的极小值按分量进行.

例 9.2.1 *求下面问题的 K-K-T 点：*

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = x_1 \\ \text{s.t.} & g(x) = 16 - (x_1 - 4)^2 - x_2^2 \geq 0, \\ & h(x) = x_1^2 + (x_2 - 2)^2 - 4 = 0. \end{array}$$

解 问题的 Lagrange 函数为

$$L(x, \lambda, \mu) = x_1 - \lambda[16 - (x_1 - 4)^2 - x_2^2] - \mu[x_1^2 + (x_2 - 2)^2 - 4].$$

K-K-T 条件为

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \nabla_x L(x, \lambda, \mu) & = & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 2\lambda \begin{pmatrix} x_1 - 4 \\ x_2 \end{pmatrix} - 2\mu \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 - 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ h(x) & = & x_1^2 + (x_2 - 2)^2 - 4 = 0, \\ g(x) & = & 16 - (x_1 - 4)^2 - x_2^2 \geq 0,\ \lambda \geq 0,\ \lambda[16 - (x_1 - 4)^2 - x_2^2] = 0. \end{array} \right.$$

解此 K-K-T 系统得 K-K-T 点

$$\begin{array}{rcl} z^{(1)} = (x^{(1)}, \lambda_1, \mu_1)^T & = & (0, 0, 1/8, 0)^T, \\ z^{(2)} = (x^{(2)}, \lambda_2, \mu_2)^T & = & (8/5, 16/5, 3/40, 1/5)^T, \\ z^{(3)} = (x^{(3)}, \lambda_3, \mu_3)^T & = & (2, 2, 0, 1/4)^T. \end{array}$$

由图 9.3 不难看出 $x^{(1)}$ 是问题的局部最优解. 但 $x^{(2)}$ 与 $x^{(3)}$ 都不是问题的局部最优解 ($x^{(3)}$ 是问题的局部极大值点) .

下面介绍约束问题的二阶最优性条件. 设 x^* 是问题 (9.1) 的一个解且在点 x^* 处约束品性 (9.6) 成立. 由定理 9.2.1 知存在 Lagrange 乘子 λ_i^*, μ_j^*, $i \in \mathcal{I}$, $j \in \mathcal{E}$ 使得 (9.7) 成立. 记 $z^* = (x^*, \lambda^*, \mu^*)$, $S(z^*)$

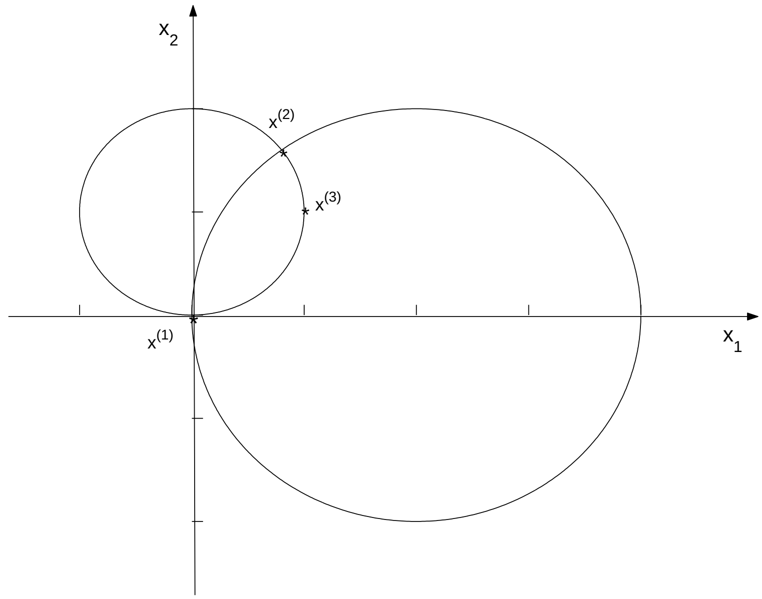

图 9.3: K-K-T 点.

是满足如下条件的 $d \in R^n$ 构成的集合：

$$\begin{cases} d^T\nabla h_j(x^*) = 0,\ \forall j \in \mathcal{E}, \\ d^T\nabla g_i(x^*) = 0,\ \forall i \in \mathcal{I}(x^*) \text{ 且} \lambda_i^* > 0, \\ d^T\nabla g_i(x^*) \geq 0,\ \forall i \in \mathcal{I}(x^*) \text{ 且} \lambda_i^* = 0. \end{cases}$$

易知 $S(z^*) \subseteq LFD(x^*, D)$.

下面的定理给出了 x^* 是约束问题 (9.1) 的局部最优解的二阶必要条件.

定理 9.2.2 设 f, g_i, h_j, $i \in \mathcal{I}$, $j \in \mathcal{E}$ 二次连续可微， x^* 是问题 (9.1) 的一个局部最优解且在该点处 $LICQ$ 成立. 设 $\lambda^* \in R^{m_1}$, $\mu^* \in R^{m-m_1}$ 满足 (9.7). 则

$$w^T\nabla_x^2 L(z^*)w \geq 0, \qquad \forall w \in S(z^*), \tag{9.8}$$

其中 $z^* = (x^*, \lambda^*, \mu^*)$.

* **证明** 对 $w \in S(z^*) \subseteq LFD(x^*, D)$, 类似于引理 9.1.1 的证明，可构造 $d^{(k)} \in SFD(x^*, D)$, $t_k > 0$, 使得 $d^{(k)} \to w$, $t_k \to 0$ 且 $x^{(k)} = x^* + t_k d^{(k)} \in D$ 满足

$$\begin{aligned} g_i(x^{(k)}) &= t_k\nabla g_i(x^*)^T w \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I}(x^*), \\ h_j(x^{(k)}) &= t_k\nabla h_j(x^*)^T w = 0, \quad \forall j \in \mathcal{E}. \end{aligned}$$

由 w 和 $L(x,\lambda,\mu)$ 的定义得

$$\begin{aligned} L(x^{(k)},\lambda^*,\mu^*) &= f(x^{(k)}) - \sum_{i\in\mathcal{I}} \lambda_i^* g_i(x^{(k)}) - \sum_{j\in\mathcal{E}} \mu_j^* h_j(x^{(k)}) \\ &= f(x^{(k)}) - \sum_{i\in\mathcal{I}(x^*)} \lambda_i^* g_i(x^{(k)}) \\ &= f(x^{(k)}) - t_k \sum_{i\in\mathcal{I}(x^*)} \lambda_i^* w^T \nabla g_i(x^*). \end{aligned}$$

由于 $w\in S(x^*)$, 有 $\lambda_i^* w^T\nabla g_i(x^*)=0$. 从而上式意味着 $L(x^{(k)},\lambda^*,\mu^*)=f(x^{(k)})$. 故由 Taylor 展开得

$$\begin{aligned} 0 &\le f(x^{(k)})-f(x^*) = L(x^{(k)},\lambda^*,\mu^*)-f(x^*) \\ &= L(x^*,\lambda^*,\mu^*) + \nabla_x L(x^*,\lambda^*,\mu^*)^T(x^{(k)}-x^*) \\ &\quad + \frac{1}{2}(x^{(k)}-x^*)^T\nabla_x^2 L(x^*,\lambda^*,\mu^*)(x^{(k)}-x^*) + o(\|x^{(k)}-x^*\|^2) - f(x^*) \\ &= \frac{1}{2}t_k^2 d^{(k)T}\nabla_x^2 L(x^*,\lambda^*,\mu^*)d^{(k)} + o(t_k^2\|d^{(k)}\|^2). \end{aligned}$$

上式两端同除以 t_k^2 并令 $k\to\infty$ 即得 (9.8). **证毕**

约束问题的二阶充分条件如下：

定理 9.2.3 设 $x^*\in D$, $\lambda^*\in R^{m_1}$, $\mu^*\in R^{m-m_1}$ 满足 (9.7). 若

$$w^T\nabla_x^2 L(z^*)w > 0, \qquad \forall\, 0\ne w\in S(z^*), \tag{9.9}$$

其中 $z^*=(x^*,\lambda^*,\mu^*)$, 则 x^* 是问题 (9.1) 的一个严格局部最优解.

证明 我们用反证法证明定理. 设 x^* 不是问题 (9.1) 的严格局部最优解. 则存在 $\{x^{(k)}\}\subset D$ 满足 $x^{(k)}\to x^*$ 且 $f(x^{(k)})\le f(x^*)$. 令 $d^{(k)}=(x^{(k)}-x^*)/\|x^{(k)}-x^*\|$. 不妨设 $d^{(k)}\to d$. 易知 $d\ne 0$, 且成立 $d\in SFD(x^*,D)\subseteq LFD(x^*,D)$ 及 $d^T\nabla f(x^*)\le 0$. 利用 K-K-T 条件 (9.7) 得

$$0\ge d^T\nabla f(x^*) = \sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i^* d^T\nabla g_i(x^*) + \sum_{j\in\mathcal{E}}\mu_j^* d^T\nabla h_j(x^*) = \sum_{i\in\mathcal{I}(x^*)}\lambda_i^* d^T\nabla g_i(x^*) \ge 0.$$

由于 $d\in LFD(x^*,D)$, 上式的最后一个和式中的每一项均非负. 故得 $d^T\nabla g_i(x^*)=0$, $\forall i\in\mathcal{I}(x^*)$ 且 $\lambda_i^*>0$, 即 $d\in S(z^*)$. 但此时有

$$\begin{aligned} 0 &\ge f(x^{(k)})-f(x^*) \ge L(x^{(k)},\lambda^*,\mu^*)-f(x^*) \\ &= L(z^*) + (x^{(k)}-x^*)^T\nabla_x L(z^*) + \frac{1}{2}(x^{(k)}-x^*)^T\nabla_x^2 L(z^*)(x^{(k)}-x^*) + o(\|x^{(k)}-x^*\|^2) - f(x^*) \\ &= \frac{1}{2}(x^{(k)}-x^*)^T\nabla_x^2 L(z^*)(x^{(k)}-x^*) + o(\|x^{(k)}-x^*\|^2). \end{aligned}$$

上式两端同除以 $\|x^{(k)}-x^*\|^2$ 并令 $k\to\infty$ 得

$$d^T\nabla_x^2 L(z^*)d\le 0.$$

与假设条件 (9.9) 矛盾. 因此 x^* 是问题 (9.1) 的严格局部最优解. **证毕**

例 9.2.2 利用定理 *9.2.2* 和 *9.2.3* 判断例 *9.2.1* 中的 *K-K-T* 点是否为局部最优解.

解 Lagrange 函数 L 的 Hessian 阵为

$$\nabla_x^2 L(x,\lambda,\mu)=\begin{pmatrix} 2(\lambda-\mu) & 0 \\ 0 & 2(\lambda-\mu) \end{pmatrix}.$$

经计算可得

$$\nabla_x^2 L(z^{(1)})=\begin{pmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{pmatrix},\quad \nabla_x^2 L(z^{(2)})=\begin{pmatrix} -1/4 & 0 \\ 0 & -1/4 \end{pmatrix},\quad \nabla_x^2 L(z^{(3)})=\begin{pmatrix} -1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}.$$

由于矩阵 $\nabla_x^2 L(z^{(1)})$ 正定，故由定理 9.2.3 知 $x^{(1)}$ 是问题的局部最优解. 矩阵 $\nabla_x^2 L(z^{(2)})$ 和 $\nabla_x^2 L(z^{(3)})$ 都是负定矩阵，故由定理 9.2.2 知 $x^{(2)}$ 和 $x^{(3)}$ 都不是问题的局部最优解.

下面的定理表明，对凸规划问题， K-K-T 条件也是充分条件.

定理 9.2.4 设 f 是凸函数， $g_i,\ i\in\mathcal{I}$ 都是凹函数. $h_j,\ j\in\mathcal{E}$ 都是线性函数. 又设在 $x^*\in D$ 处 *K-K-T* 条件 (9.7) 成立. 则 x^* 是问题 (9.1) 的全局最优解.

证明 对任给 $x\in D$, 由函数 $f,\ -g_i,\ i=1,\ldots,m_1$ 的凸性可得

$$\begin{aligned} &f(x)\ge f(x^*)+\nabla f(x^*)^T(x-x^*),\\ &g_i(x)\le g_i(x^*)+\nabla g_i(x^*)^T(x-x^*),\ i\in\mathcal{I}. \end{aligned}$$

特别，有

$$0\le g_i(x)\le \nabla g_i(x^*)^T(x-x^*),\quad \forall i\in\mathcal{I}(x^*).$$

由于 $h_j,\ j\in\mathcal{E}$ 都是线性函数，故

$$\nabla h_j(x^*)(x-x^*)=0,\quad \forall j\in\mathcal{E}.$$

从而，由 K-K-T 条件 (9.7) 得

$$\begin{aligned} f(x) &\ge f(x^*)+\nabla f(x^*)^T(x-x^*)\\ &= f(x^*)+\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i^*\nabla g_i(x^*)^T(x-x^*)+\sum_{j\in\mathcal{E}}\mu_j^*\nabla h_j(x^*)^T(x-x^*)\\ &= f(x^*)+\sum_{i\in\mathcal{I}(x^*)}\lambda_i^*\nabla g_i(x^*)^T(x-x^*)\ge f(x^*). \end{aligned}$$

即 x^* 是问题的全局最优解. **证毕**

习题 9

1. 设 $D\subset R^n$ 是凸集， $x\in D$.

   (i) 证明： $d\in FD(x,D)$ 的充要条件是存在 $y\in D$, 使得 $d=y-x$.

(ii) 证明： $FD(x,D)$, $SFD(x,D)$ 和 $LFD(x,D)$ 都是凸锥.

2. 设 D 是问题 (9.1) 的可行域， $x^* \in D$ 是一个可行点. 连续可微函数 $x(t): R \to R^n$ 满足： $x(0)=x^*$, 且对任何充分小的 $t>0$, $x(t) \in D$. 证明： $x'(0)$ 是 D 在 x^* 处的一个序列可行方向，即 $x'(0) \in SFD(x^*, D)$.

3. 设 $f: R^n \to R$ 连续可微， $a_i \in R^n$, $b_i \in R$, $i=1,\ldots,m$. 考察如下约束问题：

$$(*) \qquad \begin{cases} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & a_i^T x - b_i \geq 0,\ i \in \mathcal{I} = \{1,2,\ldots,m_1\}, \\ & a_i^T x - b_i = 0,\ i \in \mathcal{E} = \{m_1+1,\ldots,m\}. \end{cases}$$

设 d 是问题

$$\begin{cases} \min & \nabla f(x)^T d \\ \text{s.t.} & a_i^T d \geq 0,\ i \in \mathcal{I}(x), \\ & a_i^T d = 0,\ i \in \mathcal{E}, \\ & \|d\| \leq 1 \end{cases}$$

的解. 证明：

(i) 若 $\nabla f(x)^T d \neq 0$, 则 d 是 f 在 x 处的一个可行下降方向.

(ii) $\nabla f(x)^T d = 0$ 的充要条件是 x 是约束问题 $(*)$ 的 K-K-T 点.

4. 给定约束问题：

$$\begin{cases} \min & f(x) = x_1^2 + (x_2-1)^2 \\ \text{s.t.} & g_1(x) = (x_1-2)^2 - x_2 \geq 0, \\ & g_2(x) = -2x_1 + x_2 + 1 \geq 0, \\ & h(x) = x_1 + x_2 = 0. \end{cases}$$

验证 $x=(0,0)^T$ 是问题的一个可行点并指出相应的有效约束. 问：在该点处 LICQ 是否成立？

5. 设 $f, g_i: R^n \to R$, $i \in \mathcal{I}$ 连续可微. 记约束问题：

$$\begin{cases} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & g_i(x) \geq 0,\ i \in \mathcal{I} \end{cases}$$

的可行域为 D. 设 $x \in D$, $d \in R^n$ 满足

$$\nabla g_i(x)^T d > 0, \qquad i \in \mathcal{I}(x).$$

证明： d 是约束上述问题的一个可行方向.

6. 设 $f: R^n \to R$ 连续可微， $A \in R^{m\times n}$ 行满秩， $b \in R^m$. 考察如下等式约束问题：

$$\min f(x), \quad \text{s.t.} \quad Ax = b.$$

设 x^* 是问题的一个局部极小值点. 导出相应的 Lagrange 乘子的解析表达式.

7. 设 x^* 是约束问题 (9.1) 的一个局部最优解，且在该点 LICQ 成立. 证明相应的 Lagrange 乘子惟一.

8. 设 (x^*, λ^*, μ^*) 是约束问题 (9.1) 的一个 K-K-T 点. 记 $\mathcal{I}^+ = \{i \in \mathcal{I}(x^*) \mid \lambda_i^* > 0\}$.

(i) 证明：若向量组 $\nabla h_j(x^*)$, $j \in \mathcal{E}$ 线性相关，则在 x^* 处的 Lagrange 乘子向量构成的集合无界.

(ii) 证明：若向量组 $\nabla h_j(x^*)$, $\nabla g_i(x^*)$, $j \in \mathcal{E}$, $i \in \mathcal{I}^+$ 线性相关，则在 x^* 处的 Lagrange 乘子不惟一.

9. 证明下面的 Fakas 引理. 设 $A \in R^{m\times n}$, $b \in R^m$. 则对所有满足 $Ay \geq 0$ 的 y 成立不等式 $b^T y \geq 0$ 的充要条件是存在 $u \in R^m$, $u \geq 0$ 使得 $A^T u = b$.

10. 设 D 是问题 (9.1) 的可行域, $x^* \in D$ 是一个可行点. 定义集合

$$S = \{d \in R^n \mid \nabla f(x^*)^T d < 0\}.$$

证明: $LFD(x^*, D) \cap S = \emptyset$ 的充要条件是: 存在 $\lambda^* \in R^{m_1}$, $\mu^* \in R^{m-m_1}$ 使得

$$\begin{cases} \nabla f(x^*) - \sum\limits_{i\in\mathcal{I}} \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) - \sum\limits_{i\in\mathcal{E}} \mu_i^* \nabla h_j(x^*) = 0, \\ \lambda_i^* \geq 0,\ \lambda_i^* g_i(x^*) = 0. \end{cases}$$

由此导出 K-K-T 条件 (9.7).

11. 设 x^* 是约束问题 (9.1) 的一个可行点, 且在该点处 LICQ 成立. 证明在该点处 MFCQ 成立, 即 $\nabla h_j(x^*), j \in \mathcal{E}$ 线性独立且存在 $w \in R^n$, 使得

$$\begin{cases} \nabla g_i(x^*)^T w > 0, & i \in \mathcal{I}(x^*), \\ \nabla h_j(x^*)^T w = 0, & j \in \mathcal{E}. \end{cases} \tag{9.10}$$

12. 设 x^* 是问题 (9.1) 的一个局部最优解且在该点处 MFCQ 成立, 即 $\nabla h_j(x^*), j \in \mathcal{E}$ 线性独立且存在 $w \in R^n$ 且 (9.10) 成立. 证明存在 $\lambda^* \in R^{m_1}$, $\mu^* \in R^{m-m_1}$ 使得 K-K-T 条件 (9.7) 成立.

13. 设 x^* 是 (9.1) 的一个局部极小值点. 证明 MFCQ 等价于在 x^* 处满足 K-T-T 条件的 Lagrange 乘子构成的集合有界.

14. 设 $f_i : R \to R$, $i = 1, 2, \ldots, n$ 连续可微. 考察下面的约束问题

$$\begin{cases} \min & f(x) = \sum\limits_{i=1}^n f_i(x_i) \\ \text{s.t.} & \sum\limits_{i=1}^n x_i = 1, \\ & x_i \geq 0,\ i = 1, 2, \ldots, n. \end{cases}$$

设 $x^* = (x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*)^T$ 是问题的一个局部最优解. 证明: 存在数 α 使得

$$f_i'(x_i^*) \geq \alpha, \qquad (f_i'(x_i^*) - \alpha)x_i^* = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

15. 给定正数 a_i, b, c_i, $i = 1, 2, \ldots, n$. 考察如下约束问题

$$\begin{cases} \min & f(x) = \sum\limits_{i=1}^n \dfrac{c_i}{x_i}, \\ \text{s.t.} & \sum\limits_{i=1}^n a_i x_i = b, \\ & x_i \geq 0,\ i = 1, 2, \ldots, n. \end{cases}$$

求出该问题的 K-K-T 点, 并证明它是问题的全局最优解.

16. 设 $f : R^n \to R$ 连续可微. 证明: d^* 是信赖域子问题 (6.20) 的全局最优解当且仅当 d^* 可行, 且存在常数 $\lambda^* \geq 0$ 使得 $(B + \lambda^* I)$ 半正定并满足

$$\begin{cases} (B + \lambda^* I)d^* = -\nabla f(x), \\ \lambda^*(\Delta - \|d^*\|) = 0. \end{cases}$$

17. 证明定理 8.3.4.

18. 求约束问题：

$$\begin{cases} \min & f(x) = (x_1-2)^2 + (x_2-3)^2 \\ \text{s.t.} & g(x) = (x_1-2)^2 - x_2 \geq 0, \\ & h(x) = 2x_1 - x_2 - 1 = 0 \end{cases}$$

的 K-K-T 点，并用二阶最优性条件判断所求得的 K-K-T 点是否是问题的局部最优解.

19. 确定各面平行于坐标平面且内接于椭球

$$\frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} + \frac{x_3^2}{c^2} \leq 1$$

的平行六面体的最大体积.

20. 设 $f: R^n \to R$ 是连续可微的凸函数. 证明： $x \in R^n$ 是约束问题

$$\min f(x), \quad x \geq 0$$

的解的充要条件是它满足：

$$x \geq 0, \quad \nabla f(x) \geq 0, \quad x^T \nabla f(x) = 0.$$

21. 设 $g_i, i \in \mathcal{I}$ 是凹函数， $h_j, j \in \mathcal{E}$ 为线性函数，且问题 (9.1) 严格可行，即集合

$$\{x \in R^n \mid g_i(x) > 0,\ i \in \mathcal{I},\ h_j(x) = 0,\ j \in \mathcal{E}\}$$

非空 (该条件称为 Slater 约束品性).

(i) 若 $h_j, j \in \mathcal{E}$ 为线性函数. 证明：对任何可行点 x, 存在满足下面条件的 $d \in R^n$:

$$d^T \nabla g_i(x) > 0,\ \forall i \in \mathcal{I}(x), \qquad d^T \nabla h_j(x) = 0,\ \forall j \in \mathcal{E}.$$

(ii) 证明：满足 (i) 的 d 是 D 在 x 处的可行方向，即 $d \in FD(x, D)$, 其中 D 是问题 (9.1) 的可行域.

(iii) 证明：若 x^* 是问题 (9.1) 的一个局部最优解，则 K-K-T 条件 (9.7) 成立.

第十章　线性规划

§10.1　线性规划问题的标准型

在最优化问题 (1.5) 中，当函数 f 和约束函数 h_i, $i \in \mathcal{I}$, h_j, $j \in \mathcal{E}$ 都是线性函数时，问题 (1.5) 称为线性规划问题．线性规划问题的标准形式如下：

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \\ \text{s.t.} \quad & a_i^T x = b_i, \qquad i = 1, \ldots, m, \\ & x_j \geq 0, \qquad j = 1, \ldots, n. \end{aligned} \tag{10.1}$$

令 $x = (x_1, \ldots, x_n)^T \in R^n$, $c = (c_1, \ldots, c_n)^T \in R^n$, $A = (a_1, \cdots, a_m)^T \in R^{m \times n}$, $b = (b_1, \ldots, b_m)^T \in R^m$, 则线性规划问题的标准型可写为如下简洁形式：

$$\begin{aligned} \min \quad & c^T x \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b, \\ & x \geq 0, \end{aligned} \tag{10.2}$$

其中向量不等式 $x \geq 0$ 按分量取．

任何一个线性规划问题都可以化成标准型．事实上，若问题的目标是求线性函数的极大值，即 $\max c^T x$, 可利用关系式 $\max c^T x = -\min(-c^T x)$ 将其转化为求线性函数的极小值．对不等式约束

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j x_j \geq \beta,$$

可引入松弛变量 x_{n+1}, 将其等价地转化为等式约束

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j x_j - x_{n+1} = \beta.$$

同时，增加非负约束 $x_{n+1} \geq 0$. 同理，对不等式约束

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j x_j \leq \beta,$$

可引入松弛变量 x_{n+1}, 将其等价地转化为等式约束

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j x_j + x_{n+1} = \beta.$$

同时，增加非负约束 $x_{n+1} \geq 0$. 对于自由变量 (即没有非负性要求的变量) x_i, 可引入两个非负变量 u_{i1} 和 u_{i2}, 并令 $x_i = u_{i1} - u_{i2}$.

例 10.1.1 将如下线性规划问题化为标准型:

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1 - 2x_2 + 5x_3 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 - x_3 \geq 6, \\ & 2x_2 + x_3 \leq 2, \\ & x_1 \geq 0, \ \ x_2 \geq 0. \end{aligned}$$

解 引入非负松弛变量 x_4 和 x_5 并令 $x_3 = x_6 - x_7$, $x_6 \geq 0$, $x_7 \geq 0$. 则原线性规划问题化为如下等价的标准形式:

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1 - 2x_2 + 5x_6 - 5x_7 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 - x_4 - x_6 + x_7 = 6, \\ & 2x_2 + x_5 + x_6 - x_7 = 2, \\ & x_i \geq 0, \ \ i = 1, 2, 4, 5, 6, 7. \end{aligned}$$

在线性规划的标准型 (10.2) 中，我们总认为系数矩阵 A 是行满秩的．否则，可通过消元法去掉多余的约束方程．同时，在一般情况下，我们约定 b 是非负向量．否则，可在相应的等式约束两端同乘以 -1.

我们记

$$S = \{x \mid Ax = b, \ x \geq 0\}$$

为线性规划问题的可行域．显然 S 是一个凸集．事实上， S 是一个多面体区域．由第一章关于凸集的性质我们知道， S 无界的充要条件是它有方向．下面的定义对 S 的方向进行了进一步描述.

定理 10.1.1 $d \in R^n$ 是线性规划问题 (10.2) 的可行域 S 的一个方向的充要条件是它满足

$$d \geq 0 \quad 且 \quad Ad = 0.$$

证明 由定义， $d \in R^n$ 是 S 的方向的充要条件是：对任何 $x \in S$ 有

$$\{x + \alpha d \mid \alpha \geq 0\} \subseteq S,$$

即,

$$A(x + \alpha d) = b, \quad x + \alpha d \geq 0, \quad \forall x \in S, \quad \forall \alpha \geq 0.$$

或等价地， $Ad = 0, d \geq 0$. **证毕**

下面的定理称为表示定理，它刻画了线性规划问题 (10.2) 的可行域的结构.

定理 10.1.2 （表示定理） 设线性规划问题 (10.2) 的可行域 S 非空．则

(1) S 有有限个顶点 $x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(r)}$.

(2) S 有极方向的充要条件是 S 无界．而且，若 S 无界，则存在有限个极方向 $d^{(1)}, d^{(2)}, \ldots, d^{(t)}$.

(3) $x \in S$ 的充要条件是：存在非负数 $\alpha_i \in R$, $i = 1, \ldots, r$ 和非负数 $\beta_j \in R$, $j = 1, 2, \ldots, t$ 使得

$$x = \sum_{i=1}^{r} \alpha_i x^{(i)} + \sum_{j=1}^{t} \beta_j d^{(j)}.$$

$$\sum_{i=1}^{r}\alpha_i = 1.$$

§10.2 线性规划问题的基本概念和基本理论

线性规划问题的目标函数和约束函数都是线性函数. 该类问题具有许多独有的特点. 首先，不难看出线性规划问题 (10.2) 的可行域 $D=\{x \mid Ax=b,\ x\geq 0\}$ 是一个凸集. 事实上， D 是一个凸多面体. 下面我们从代数的角度来描述该多面体的性质. 首先引入如下概念：

定义 10.2.1 线性规划问题 (10.2) 的系数矩阵 A 的 $m\times m$ 阶非奇异子矩阵称为线性规划问题的一组基. 换句话说，线性规划问题的基是由矩阵 A 的 m 个线性无关列组成的子矩阵. 构成基的列向量称为基向量. 相应的变量称为基变量. 其它变量称为非基变量.

由上面的定义不难看出，一个线性规划问题可以有多组基. 对应于不同的基有不同的基变量. 线性规划 (10.2) 最多可以有 $\begin{pmatrix} n \\ m \end{pmatrix}$ 组基.

例 10.2.1 线性规划问题

$$\begin{array}{ll}
\min & -x_1-3x_2 \\
\text{s.t.} & x_1+x_2+x_3=3, \\
& -x_1+2x_2+x_4=3, \\
& x_1\geq 0,\ x_2\geq 0,\ x_3\geq 0,\ x_4\geq 0
\end{array}$$

中有基：

$$B_1=\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix},\quad B_2=\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},\quad B_3=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

等. 相应的基变量分别为 x_1,x_2； x_1,x_3 和 x_3,x_4.

定义 10.2.2 线性规划问题 (10.2) 的可行点称为可行解. 令非基变量为 *0* 所得到的可行解称为线性规划问题的基础可行解.

线性规划可以有多个基础可行解, 线性规划问题 (10.2) 最多可以有 $\begin{pmatrix} n \\ m \end{pmatrix}$ 个基础可行解. 例如, 在例 10.2.1 中，有 $(1,2,0,0)^T$ 和 $(0,0,3,3)^T$ 等基础可行解. 相应的基分别为 B_1 和 B_3 等.

下面的定理可由基础可行解的定义直接得到.

定理 10.2.1 线性规划问题的可行解为基础可行解的充要条件是它的正分量所对应的系数构成的列向量组线性无关.

下面的定理揭示了基础可行解的几何意义.

定理 10.2.2 线性规划问题的基础可行解对应于可行域的顶点.

证明 设 $x=(x_B^T,x_N^T)^T=(x_B^T,0)^T$ 是问题 (10.2) 的一个基础可行解. 并设 $A=(B,N)$, 其中 B 是相应的基, 即 x 满足

$$Bx_B=(B,N)\begin{pmatrix} x_B \\ 0 \end{pmatrix}=b.$$

反设 x 不是可行域 D 的顶点. 则存在 $x^{(1)},x^{(2)}\in D$, $x^{(1)}\neq x^{(2)}$ 以及数 $\alpha\in(0,1)$, 使得 $x=\alpha x^{(1)}+(1-\alpha)x^{(2)}$. 由 $x^{(1)},x^{(2)}$ 的可行性得

$$Bx_B^{(1)}+Nx_N^{(1)}=b,\qquad Bx_B^{(2)}+Nx_N^{(2)}=b.$$

由于 $x_N=\alpha x_N^{(1)}+(1-\alpha)x_N^{(2)}=0$, 且 $x_N^{(1)}\geq 0$, $x_N^{(2)}\geq 0$, $\alpha\in(0,1)$, 故可得 $x_N^{(1)}=x_N^{(2)}=0$. 由此可得, $Bx_B^{(1)}=b$, $Bx_B^{(2)}=b$. 但 B 非奇异, 因此有 $x_B=x_B^{(1)}=x_B^{(2)}$, 即 $x=x^{(1)}=x^{(2)}$. 矛盾. 从而 x 是可行域 D 的顶点.

现设 x 是 D 的一个顶点. 我们证明 x 必是 (10.2) 的基础可行解. 不妨设 $x=(x_1,\ldots,x_t,0,\ldots,0)^T$ 且 $x_i>0$, $i=1,\ldots,t$. 令 $A=(\alpha^{(1)},\ldots,\alpha^{(n)})$. 则

$$x_1\alpha^{(1)}+\cdots+x_t\alpha^{(t)}=b. \tag{10.3}$$

如果 x 不是 (10.2) 的基础可行解, 则 $\alpha^{(1)},\ldots,\alpha^{(t)}$ 线性相关, 即存在不全为零的数 $k_1,\ldots,k_t$ 使得

$$k_1\alpha^{(1)}+\cdots+k_t\alpha^{(t)}=0. \tag{10.4}$$

设数 ϵ 充分小, 使得 $x_i\pm\epsilon k_i\geq 0$, $\forall i=1,\ldots,t$. 方程 (10.4) 两端同乘以 $\pm\epsilon$ 后再与方程 (10.3) 相加得

$$(x_1\pm\epsilon k_1)\alpha^{(1)}+\cdots+(x_t\pm\epsilon k_t)\alpha^{(t)}=b.$$

对 $i=1,\ldots,t$, 令 $y_i=x_i+\epsilon k_i$, $z_i=x_i-\epsilon k_i$, 并令 $y_j=z_j=0$, $j=t+1,\ldots,n$. 易知 $y,z\in D$, $y\neq z$ 且 $x=\frac{1}{2}(y+z)$. 这与 x 是顶点矛盾. 从而, x 是基础可行解. **证毕**

下面的定理称为线性规划基本定理.

定理 10.2.3 (**线性规划基本定理**)

(1) 线性规划问题若有可行解, 则必有基础可行解.

(2) 线性规划问题若有最优解, 则必有最优基础可行解.

(3) 若线性规划问题的可行域有界, 则线性规划问题必有最优解.

证明 (1) 设 x 是问题 (10.2) 的一个可行解. 不妨设 $x=(x_1,\ldots,x_t,0,\ldots,0)^T$, 其中, $x_i>0$, $i=1,\ldots,t$. 显然,

$$x_1\alpha^{(1)}+\cdots+x_t\alpha^{(t)}=b. \tag{10.5}$$

若 $\alpha^{(i)}$, $i=1,\ldots,t$ 线性相关, 则存在不全为零的数 k_i, $i=1,\ldots,t$ 使得

$$k_1\alpha^{(1)}+\cdots+k_t\alpha^{(t)}=0. \tag{10.6}$$

不妨设至少有一个 k_i, $i=1,\ldots,t$ 为正. 否则, 可在上式两端同乘以 -1. 令 $\beta=(k_1,\ldots,k_t,0,\ldots,0)^T$,

$$\epsilon=\min_{1\leq i\leq t}\left\{\frac{x_i}{k_i}\mid k_i>0\right\}.$$

则 $y(\epsilon) \triangleq x - \epsilon\beta$ 是问题 (10.2) 的一个可行解．且其正分量数目比 x 的正分量数目少．若 A 的相应于 $y(\epsilon)$ 的正分量的列向量线性无关，则 $y(\epsilon)$ 是一个基础可行解．否则，重复上述步骤，可得另一可行解，其正分量的数目比 $y(\epsilon)$ 的正分量数目少．如此进行下去，最终可得问题 (10.2) 的一个基础可行解.

(2) 设 x 是问题 (10.2) 的一个最优解．若它不是基础可行解，则对任意充分小的数 ϵ, $y(\epsilon)$ 可行，故 $c^Tx \le c^Ty(\epsilon) = c^Tx - \epsilon c^T\beta$. 由 ϵ 的任意性易知， $c^T\beta = 0$. 从而， $c^Ty(\epsilon) = c^Tx$, 即 $y(\epsilon)$ 也是问题 (10.2) 的最优解．类似于 (1) 的证明，可适当选取 $\epsilon > 0$, 使 $y(\epsilon)$ 是最优可行解，且其正分量的数目比 x 的正分量的数目少．重复此过程，可得一最优基础可行解.

(3) 连续函数 c^Tx 在有界闭集 D 上达到最小值．故问题 (10.2) 存在最优解. **证毕**

由定理 10.2.2 和 10.2.3 易知，线性规划问题若有最优解，则必有可行域的顶点为最优解．由于线性规划是凸规划，其最优解集合是凸集．因此，若目标函数在多个顶点达到最优，则在这些点的凸组合处也达到最优，此时问题有无穷多个解.

下面的定理给出了线性规划问题有解的充要条件.

定理 10.2.4 设线性规划问题 (10.2) 的可行域非空．则该问题有最优解的充要条件是：对任何极方向 $d^{(j)}$, 有 $c^Td^{(j)} \ge 0$.

证明 设 $x^{(i)}, i = 1, \dots, r$ 和 $d^{(j)}, j = 1, \dots, t$ 分别是问题 (10.2) 的可行域的顶点和极方向．由定理 10.1.2 知可行域 D 可表示为

$$D = \{x = \sum_{i=1}^r \alpha_i x^{(i)} + \sum_{j=1}^t \beta_j d^{(j)} \;\Big|\; \alpha_i \ge 0, i = 1, \dots, r, \sum_{i=1}^r \alpha_i = 1, \beta_j \ge 0, j = 1, \dots, t\}.$$

因此，问题 (10.2) 可等价地写为

$$\begin{aligned}
\min \quad & f(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^r \alpha_i c^T x^{(i)} + \sum_{j=1}^t \beta_j c^T d^{(j)} \\
\text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^r \alpha_i = 1, \\
& \alpha_i \ge 0, \quad i = 1, \dots, r, \\
& \beta_j \ge 0, \quad j = 1, \dots, t.
\end{aligned}$$

若问题 (10.2) 有解，即上面的问题有解，则对所有 $j = 1, \dots, t$, 必有 $c^Td^{(j)} \ge 0$. 否则，存在某个 j 使得 $c^Td^{(j)} < 0$. 此时，上面的问题无界．矛盾．故必要性成立.

反之，设 $c^Td^{(j)} \ge 0, \forall j = 1, 2, \dots, t$. 则上面的问题等价于

$$\begin{aligned}
\min \quad & f(\alpha) = \sum_{i=1}^r \alpha_i c^T x^{(i)} \\
\text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^r \alpha_i = 1, \\
& \alpha_i \ge 0, \quad i = 1, \dots, r.
\end{aligned}$$

记上标 p 满足

$$c^Tx^{(p)} = \min_{1 \le i \le r} c^Tx^{(i)}.$$

则，对任何 $x \in D$, 有

$$c^T x = \sum_{i=1}^{r} \alpha_i c^T x^{(i)} + \sum_{j=1}^{t} \beta_j c^T d^{(j)} \geq \sum_{i=1}^{r} \alpha_i c^T x^{(p)} = c^T x^{(p)},$$

即， $x = x^{(p)}$ 是问题 (10.2) 的最优解. **证毕**

由上面的定理的证明过程也可以得到，线性规划的最优解必可在可行域的顶点达到. 下面，我们通过图解法对线性规划基本定理作进一步的理解.

例 10.2.2 通过作图求解下面的线性规划问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = -2x_1 - 3x_2 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + 2x_2 \leq 8, \\ & 0 \leq x_1 \leq 4, \\ & 0 \leq x_2 \leq 3. \end{aligned}$$

解 该问题的可行域为多边形区域，见图 10.1.

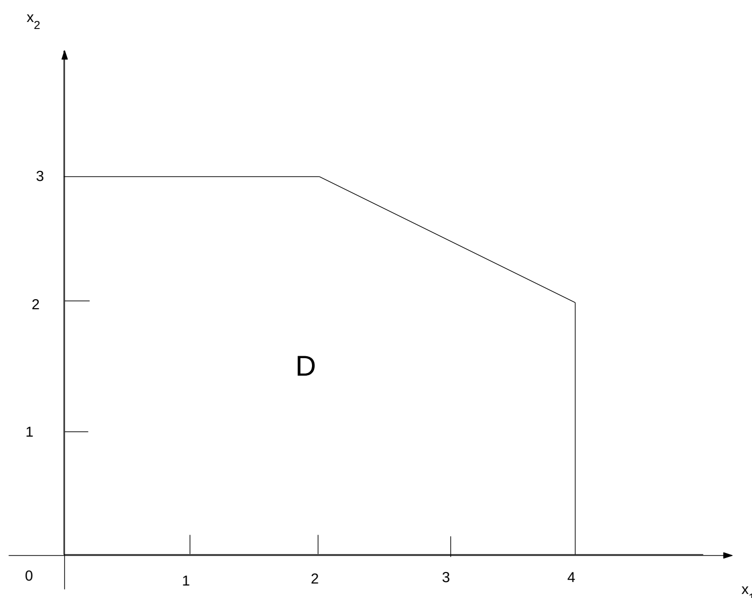

图 10.1 线性规划问题的可行域.

目标函数等高线的变化情况如图 10.2 表示.

由图 10.2 不难看出所求问题的最优解为 $x^* = (4, 2)^T$. 它是可行域的一个顶点.

§10.3 单纯形法

本节介绍求解线性规划问题的一种常用算法 — 单纯形算法. 由线性规划基本定理知，线性规划问题 (10.2) 若有最优解，则必有最优基础可行解. 而线性规划问题 (10.2) 的基础可行解只有有限个. 因

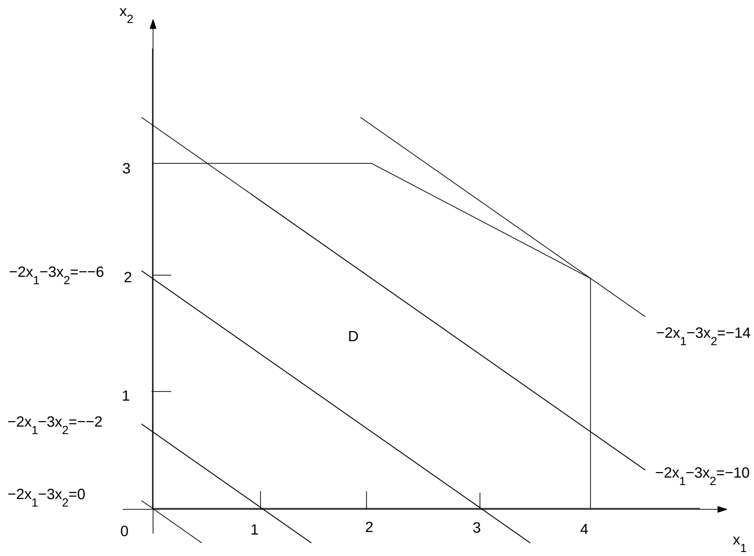

图 10.2 目标函数等高线变化趋势.

而，求解线性规划问题只需要求出基础可行解中目标函数值最小者. 单纯形法就是利用这个性质求解线性规划的一种有效算法. 单纯形法的基本思想是从一个基础可行解出发，若该基础可行解不是问题的最优解，则按某种法则寻找另一个基础可行解，如此下去，直至求得问题的一个最优基础可行解. 下面先通过一个例子介绍单纯形法的基本步骤.

对于线性规划问题

$$
\begin{array}{ll}
\min & f(x) = -3x_1 - 2x_2 \\
\text{s.t.} & \begin{array}{rcrcrcrcrcl}
x_1 & + & x_2 & + & x_3 & & & & & = & 35, \\
2x_1 & + & x_2 & & & + & x_4 & & & = & 60, \\
x_1 & + & 3x_2 & & & & & + & x_5 & = & 90,
\end{array} \\
& \qquad x_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, 5.
\end{array}
$$

不难看出，该线性规划问题有一组基为单位矩阵，相应的基变量为 x_3, x_4, x_5. 对问题的可行域变形，使基变量位于方程组的左边，非基变量位于方程组的右边，得

$$
\begin{array}{ll}
\min & f(x) = -3x_1 - 2x_2 \\
\text{s.t.} & \begin{array}{rcl}
x_3 & = & 35 - x_1 - x_2, \\
x_4 & = & 60 - 2x_1 - x_2, \\
x_5 & = & 90 - x_1 - 3x_2,
\end{array} \\
& x_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, 5.
\end{array}
$$

令非基变量 $x_1 = 0$, $x_2 = 0$ 得基础可行解 $x^{(0)} = (0, 0, 35, 60, 90)^T$. 相应的目标函数值为 $f(x^{(0)}) = 0$. $x^{(0)}$ 显然不是问题的最优解，因为当 x_1 或 x_2 取正值时，目标函数的值可以减小. 利用线性规划基本定理，我们寻找一个新的基础可行解，使 x_1 或 x_2 取正值. 注意到在基础可行解中，取正值的变量必

为基变量. 因此, 在确定新的基础可行解时, 应将非基变量 x_1 或 x_2 (称为换入变量) 取代原来的基变量 x_3, x_4 或 x_5 (称为换出变量) 中的一个.

我们取 x_1 作为换入变量. 下面介绍换出变量的确定. 确定换出变量的原则是使得新的基础解可行, 即满足非负性条件. 由于在新的基础可行解中, x_2 仍然是非基变量, 其取值为 0, 因此, 确定换出变量时只需保证

$$\begin{cases} x_3 &= 35 - x_1 \geq 0, &\iff& x_1 \leq 35, \\ x_4 &= 60 - 2x_1 \geq 0, &\iff& x_1 \leq 60/2 = 30, \\ x_5 &= 90 - x_1 \geq 0, &\iff& x_1 \leq 90. \end{cases}$$

由上式可以看出, 当 $x_4 = 0$ 时, 非负性条件得到保证. 因此, 我们可确定换出变量为 x_4, 即得新的基变量 x_3, x_1 和 x_5.

将原线性规划问题化为如下等价的问题 (基变量位于方程组的左边, 非基变量位于方程组的右边):

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -3x_1 - 2x_2 \\ \text{s.t.} & \begin{array}{ccccccccc} x_1 & + & x_3 & = & 35 & - & x_2, & & \\ 2x_1 & & & = & 60 & - & x_2 & - & x_4, \\ x_1 & + & x_5 & = & 90 & - & 3x_2, & & \end{array} \\ & \qquad x_i \geq 0, \ \ i = 1, 2, \ldots, 5. \end{array}$$

等价地,

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -90 - \frac{1}{2}x_2 + \frac{3}{2}x_4 \\ \text{s.t.} & x_3 = 5 - \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{2}x_4, \\ & x_1 = 30 - \frac{1}{2}x_2 - \frac{1}{2}x_4, \\ & x_5 = 60 - \frac{5}{2}x_2 + \frac{1}{2}x_4, \\ & x_i \geq 0, \ \ i = 1, 2, \ldots, 5. \end{array}$$

令非基变量 $x_2 = 0, x_4 = 0$ 得基础可行解 $x^{(1)} = (30, 0, 5, 0, 60)^T$. 相应的目标函数值为 $f(x^{(1)}) = -90 < f(x^{(0)})$. 由于 x_2 的系数 $-\frac{1}{2}$ 为负数, 因此, 当它取正值时, 目标函数值还会减小, 即 $x^{(1)}$ 不是问题的最优解. 为此, 我们再确定一个新的基础可行解, 使得 x_2 成为换入变量, 取代原来的基变量 x_1, x_3 或 x_5 中的一个.

类似于上面的过程, 由下面的关系确定换出变量:

$$\begin{cases} x_3 &= 5 - \frac{1}{2}x_2 \geq 0, &\iff& x_2 \leq 10, \\ x_1 &= 30 - \frac{1}{2}x_2 \geq 0, &\iff& x_2 \leq 60, \\ x_5 &= 60 - \frac{5}{2}x_2 \geq 0, &\iff& x_2 \leq 24. \end{cases}$$

因此, 换出变量为 x_3. 对约束条件作等价变换, 使基变量位于方程组的左边, 非基变量位于方程组的右边, 同时将目标函数写成非基变量的函数得等价的线性规划问题:

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -95 + x_3 + x_4 \\ \text{s.t.} & x_2 = 10 - 2x_3 + x_4, \\ & x_1 = 25 + x_3 - x_4, \\ & x_5 = 35 + 5x_3 - 2x_4, \\ & x_i \geq 0, \ \ i = 1, 2, \ldots, 5. \end{array}$$

令非基变量 $x_3=0, x_4=0$ 得基础可行解 $x^{(2)}=(25,10,0,0,35)^T$. 相应的目标函数值为 $f(x^{(2)})=-95<f(x^{(1)})$. 由于，目标函数中非基变量 x_3, x_4 的系数均为正数，因此，当 x_3 或 x_4 的值变大时，目标函数值不会再减小，即 $x^{(2)}$ 是问题的最优解.

上面的例子介绍了求解线性规划的单纯形法的思想. 下面我们对单纯形法的步骤作一般性描述. 设 $A=(I,N)$, 其中 I 是单位矩阵，它构成一组基. 设 x_B 和 x_N 分别是相应于该基的基变量和非基变量. 易知， $\bar{x}=(b^T,0^T)^T$ 是一个基础可行解. 令 $c^T=(c_B^T,c_N^T)$.

首先，我们给出判断一个基础可行解为最优解的条件. 线性规划问题 (10.2) 的任何可行解 x 均满足

$$x_B=b-Nx_N.$$

从而，目标函数可表示为

$$f(x)=c^Tx=c_B^Tx_B+c_N^Tx_N=c_B^Tb+(c_N^T-c_B^TN)x_N. \tag{10.7}$$

由此可知，若 $c_N^T-c_B^TN\geq 0$, 则对任何可行解 x 均有 $f(x)\geq f(\bar{x})=c_B^Tb$, 即 $\bar{x}$ 是问题 (10.2) 的一个最优解. 因此，我们有如下定理：

定理 10.3.1 *设 x 是线性规划 (10.2) 的一个基础可行解，相应的基是单位矩阵 I. 则 x 是最优解的充要条件是*

$$\sigma_N\triangleq c_N^T-c_B^TN\geq 0.$$

我们称

$$\sigma_N=c_N^T-c_B^TN$$

为检验数 (或判别数) .

下面我们给出确定换入、换出变量的方法. 设 $x=(b^T,0^T)^T$ 是线性规划问题的一个基础可行解，相应的基是单位矩阵 I. 若存在某个 j 使得检验数 $(\sigma_N)_j<0$, 则 x 不是问题的最优解. 此时，我们需寻找一个新的基础可行解 $x^{(1)}$, 使得 $f(x^{(1)})<f(x)$. 单纯形法寻找新的基础可行解的方法是将 x_B 中的一个变量 x_i (称之为换出变量) 与 x_N 中的某个变量 x_j (称之为换入变量) 对换. 确定换入变量的原则是使得新产生的基础可行解的目标函数值较原基础可行解处的目标函数值小. 由 (10.7) 易知， x_N 中任何满足 $(\sigma_N)_j<0$ 的变量 x_j 均可作为换入变量. 确定换出变量的原则是使得新产生的解可行. 下面给出确定换出变量 x_i 的准则.

记 $\alpha_j=(a_{1j},\ldots,a_{mj})^T$ 为 N 的第 j 列. 当 x_i 与 x_j 对换后，其它的非基变量仍为非基变量. 因此，新的基础可行解只需满足

$$x_B=b-x_j\alpha_j\geq 0,$$

即

$$x_j\leq\min\{\frac{b_k}{\alpha_{kj}}\mid\alpha_{kj}>0,\ 1\leq k\leq m\}.$$

取 i 为使上式右端达到最小的下标 k. 则得一新的基础可行解 $x^{(1)}$. 该基础可行解的目标函数值为

$$f(x^{(1)})=c^Tx^{(1)}=c_B^Tx_B+(\sigma_N)_jx_j^{(1)}=c_B^Tx_B+(\sigma_N)_j\frac{b_i}{\alpha_{ij}}<c_B^Tx_B=f(x).$$

在上面的基础上，我们给出单纯形法的计算步骤如下：

算法 10.1 （**单纯形法**， $A=(I,N)$ ）

步 *1* 取初始基础可行解 $x=(x_B^T,x_N^T)^T=(b^T,0^T)^T$.

步 *2* 计算非基变量的检验数 $\sigma_N=c_N^T-c_B^TN$. 若 $\sigma_N\geq 0$, 则停止计算，得解 x. 否则在非基变量中确定换入变量 x_j 使 $\sigma_j=\min\{\sigma_k,\ k\in N\}$.

步 *3* 令 $\alpha_j=(\alpha_{ij})_{i=1}^m$ 表示 N 的第 j 列. 若 $\alpha_j\leq 0$, 则停止计算. 此时，问题的解不存在. 否则转下一步.

步 *4* 确定下标 i 使

$$\frac{b_i}{\alpha_{ij}}=\min\{\frac{b_k}{\alpha_{kj}}\mid \alpha_{kj}>0\}.$$

步 *5* 以 α_{ij} 为主元，在方程组 $Ax=b$ 中进行 *Gauss* 消元，将第 j 列变为单位向量. 转步 *2*.

注：单纯形算法中的步 5 的目的是为了使得新产生的基础可行解的基变量对应的基仍然是单位矩阵.

上面的单纯形算法可总结为表 10.1.

表 10.1 单纯形表

$c_j\ \to$			c_1	$\cdots$	c_m	c_{m+1}	$\cdots$	c_n	θ
c_B	x_B	b	x_1	$\cdots$	x_m	x_{m+1}	$\cdots$	x_n	
c_1	x_1	b_1	1	$\cdots$	0	$\alpha_{1,m+1}$	$\cdots$	α_{1n}	θ_1
c_2	x_2	b_2	0	$\cdots$	0	$\alpha_{2,m+1}$	$\cdots$	α_{2n}	θ_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
c_m	x_m	b_m	0	$\cdots$	1	$\alpha_{m,m+1}$	$\cdots$	α_{mn}	θ_m
$f(x)$		$\sum\limits_{i=1}^m c_ib_i$	0	$\cdots$	0	$c_{m+1}-\sum\limits_{i=1}^m c_i\alpha_{i,m+1}$	$\cdots$	$c_n-\sum\limits_{i=1}^m c_i\alpha_{in}$	

单纯形表中的第一行为目标函数的系数向量，最后一行分别是基础可行解对应的目标函数值和检验数. 容易看出，基变量的检验数全部为零. 表中的第一、二列分别表示基变量及其在目标函数中相应系数. 第三列表示右端向量. 接下来的各列分别表示基变量及其系数列向量 (构成单位阵) 和非基变量及其系数列向量. 单纯形表的最后一列列出了单纯形算法的步 4 中确定换出变量的各比值，即 $\theta_k=\frac{b_k}{\alpha_{kj}}$.

利用单纯形表可以非常容易地做出如下判断： (1) 确定基础可行解，即令表中的第二列中的基变量分别取第三列中的值，非基变量取值为零； (2) 解的最优性判断. 若最后一行中的检验数都非负，则相应的基础可行解为最优解； (3) 换入、换出变量的确定. 换入变量为最后一行的最小检验数 (负数) 对应的非基变量，换出变量为最后一列中最小的正数对应的基变量； (4) 基础可行解对应的目标函数值，即最后一行的第二个数.

例 10.3.1 利用单纯形表来求解下面的线性规划问题：

$$\begin{array}{rllllllll}\min f(x) & =-2x_1-3x_2 \\ \text{s.t.} & x_1 & + & 2x_2 & + & x_3 & & & = 8, \\ & 4x_1 & & & & & + & x_4 & = 16, \\ & & & 4x_2 & & & & + x_5 & = 12, \\ & & & x_i\geq 0, & & i=1,2,3,4,5. \end{array}$$

解 计算过程见表 10.2.

表 10.2 例 10.3.1 的单纯形表

$c_j \rightarrow$			-2	-3	0	0	0	θ
c_B	x_B	b	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	
0	x_3	8	1	2	1	0	0	4
0	x_4	16	4	0	0	1	0	-
0	x_5	12	0	**4**	0	0	1	**3**
$f(x)$		0	-2	**-3**	0	0	0	
0	x_3	**2**	1	0	1	0	$-1/2$	**2**
0	x_4	16	4	0	0	1	0	4
-3	x_2	3	0	1	0	0	$1/4$	-
$f(x)$		-9	**-2**	0	0	0	$3/4$	
-2	x_1	2	1	0	1	0	$-1/2$	-
0	x_4	8	0	0	-4	1	**2**	**4**
-3	x_2	3	0	1	0	0	$1/4$	12
$f(x)$		-13	0	0	2	0	**-1/4**	
-2	x_1	4	1	0	0	$1/4$	0	
0	x_5	4	0	0	-2	$1/2$	1	
-3	x_2	2	0	1	$1/2$	$-1/8$	0	
$f(x)$		-14	0	0	$3/2$	$1/8$	0	

由于单纯形最终表中的检验数均为非负数，故得最优解 $x^* = (4, 2, 0, 0, 4)^T$, 最优目标函数值为 $f(x^*) = -14$.

§10.4 初始基础可行解的确定 — 两阶段单纯形法

前一节介绍的单纯形法要求已知一个初始基础可行解，且其相应的基是单位矩阵．然而，在一般情况下，这种初始基础可行解不容易观察到．本节介绍一种求初始基础可行解的算法.

在线性规划问题 (10.1) 中引入人工变量 x_i, $i = n+1, \ldots, n+m$. 考察如下约束条件:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n + x_{n+1} = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n + x_{n+2} = b_2, \\ \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n + x_{n+m} = b_n, \\ \qquad x_i \geq 0, \ \ i = 1, 2, \ldots, n+m. \end{cases} \tag{10.8}$$

易知，若 $x = (x_1, \ldots, x_n, \ldots, x_{n+m})^T$ 是上面约束的一个基础可行解且 $x_i = 0$, $i = n+1, \ldots, n+m$, 则 x 是线性规划问题 (10.8) 的一个基础可行解.

构造如下辅助线性规划问题:

$$\min f(x) = \sum_{i=n+1}^{n+m} x_i, \quad x \in \Omega, \tag{10.9}$$

其中， $\Omega \subseteq R^{n+m}$ 是满足 (10.8) 的全体 x 构成的集合．不难发现，线性规划问题 (10.1) 有可行解当且仅当线性规划问题 (10.9) 的最优解存在，且最优目标函数值为零．在此基础上，我们得到两阶段单纯形法的基本步骤，即先求解问题 (10.9)；然后再求解原线性规划问题 (10.1)．下面用一个例子介绍该算法的实现过程.

例 10.4.1 用两阶段单纯形法求解如下线性规划问题：

$$\begin{array}{lrcrcrcrcrcl}
\min f(x) & = -3x_1 + x_2 + x_3 \\
\text{s.t.} & x_1 & - & 2x_2 & + & x_3 & + & x_4 & & & = & 11, \\
 & -4x_1 & + & x_2 & + & 2x_3 & & & & -x_5 & = & 3, \\
 & -2x_1 & & & + & x_3 & & & & & = & 1, \\
 & & & & x_i \geq 0, \ i = 1,2,3,4,5. \\
\end{array} \tag{10.10}$$

解 引入人工变量 x_6, x_7. 构造辅助线性规划问题：

$$\begin{array}{llllllll}
\min f(x) & = x_6 + x_7 \\
\text{s.t.} & x_1 & -2x_2 & +x_3 & +x_4 & & & & = 11, \\
 & -4x_1 & +x_2 & +2x_3 & & -x_5 & +x_6 & & = 3, \\
 & -2x_1 & & +x_3 & & & & +x_7 & = 1, \\
 & & & x_i \geq 0, \ i = 1,2,3,4,5. \\
\end{array}$$

显然，上述线性规划问题有基 $B = I$, 相应的基变量为 x_4, x_6, x_7. 因而，可利用单纯形法求解．结果见表 10.3.

表 10.3 第一阶段单纯形表

$c_j \to$			0	0	0	0	0	1	1	θ
c_B	x_B	b	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	
0	x_4	11	1	-2	1	1	0	0	0	11
1	x_6	3	-4	1	2	0	-1	1	0	3/2
1	x_7	1	-2	0	**1**	0	0	0	1	**1**
$f(x)$		4	6	-1	**-3**	0	1	0	0	
$c_j \to$			0	0	0	0	0	1	1	θ
c_B	x_B	b	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	
0	x_4	10	3	-2	0	1	0	0	-1	-
1	x_6	1	0	**1**	0	0	-1	1	-2	**1**
0	x_3	1	-2	0	1	0	0	0	1	-
$f(x)$		1	0	**-1**	0	0	1	0	3	
0	x_4	12	3	0	0	1	-2	2	-5	
0	x_2	1	0	1	0	0	-1	1	-2	
0	x_3	1	-2	0	1	0	0	0	1	
$f(x)$		0	0	0	0	0	0	1	1	

故得初始基础可行解 $x^{(0)} = (0, 1, 1, 12, 0)^T$. 从而得第二阶段初始单纯形表，即求解问题 (10.10) 的初始单纯形表. 进而，可利用单纯形法求解原问题. 计算结果见表 10.4.

表 10.4 第二阶段单纯形表

$c_j \to$			-3	1	1	0	0	θ
c_B	x_B	b	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	
0	x_4	12	**3**	0	0	1	-2	4
1	x_2	1	0	1	0	0	-1	-
1	x_3	1	-2	0	1	0	0	-
$f(x)$		2	**-1**	0	0	0	1	
-3	x_1	4	1	0	0	1/3	-2/3	
1	x_2	1	0	1	0	0	-1	
1	x_3	9	0	0	1	2/3	-4/3	
$f(x)$		-2	0	0	0	1/3	1/3	

所求问题的最优解为 $x^* = (4, 1, 9, 0, 0)^T$. 相应的目标函数值为 $f(x^*) = -2$.

§10.5 线性规划问题的对偶理论

对于任何一个线性规划问题, 存在与之密切相关的另一个线性规划问题. 称为该问题的对偶问题. 本节介绍有关线性规划的对偶规划及相关基本理论.

定义 10.5.1 给定 R^n 中线性规划问题:

$$\begin{cases} \min & f(x) = c^T x \\ \text{s.t.} & Ax \geq b, \\ & x \geq 0, \end{cases} \tag{10.11}$$

其中 $A = (a_{ij}) \in R^{m\times n}$, $b = (b_1, b_2, \ldots, b_m)^T$, $c = (c_1, c_2, \ldots, c_n)^T$. 我们称线性规划问题

$$\begin{cases} \max & g(y) = b^T y \\ \text{s.t.} & A^T y \leq c, \\ & y \geq 0, \end{cases} \tag{10.12}$$

为问题 (10.11) 的对偶问题. 称问题 (10.11) 为原问题.

我们分别记 D_P 和 D_D 为原问题 (10.11) 和对偶问题 (10.12) 的可行域. 下面的定理给出线性规划原问题与其对偶问题之间的一种密切关系.

定理 10.5.1 设原问题 (10.11) 和对偶问题 (10.12) 都有可行点. 则

(1) 对任何 $x \in D_P$, 任何 $y \in D_D$ 均有

$$c^T x \geq b^T y. \tag{10.13}$$

(2) 若点 $x^* \in D_P$, $y^* \in D_D$ 满足 $c^T x^* = b^T y^*$, 则 x^* 和 y^* 分别是原问题 (10.11) 和对偶问题 (10.12) 的最优解.

证明 (1) 对任何 $x \in D_P$, $y \in D_D$, 我们有 $Ax \geq b$, 注意到 $y \geq 0$, $x \geq 0$ 故得

$$b^T y \leq y^T A x = (A^T y)^T x \leq c^T x.$$

(2) 由 (1) 知对任何 $x \in D_P$, $c^T x$ 都是对偶问题 (10.12) 的一个上界. 若该上界在某个 $y \in D_D$ 达到, 则 y 是问题 (10.12) 的一个最优解. 反之亦然. **证毕**

下面的定理称为线性规划问题的对偶定理.

定理 10.5.2 *(线性规划对偶定理)*

(1) 若线性规划问题 (10.11) 或其对偶问题 (10.12) 之一有最优解, 则两个问题都有最优解. 而且, 两问题的最优目标函数值相等.

(2) 若线性规划问题 (10.11) 或其对偶问题 (10.12) 之一的目标函数值无界, 则另一问题无可行解.

证明(1) 假设 (10.11) 有最优解 x^*. 由于线性规划是一个凸规划, 由定理 9.2.4 知 x^* 是最优解的充要条件是存在 Lagrange 乘子向量 $\lambda^* \in R^m$, $\mu^* \in R^n$ 使得

$$\begin{cases} c - A^T\lambda^* - \mu^* = 0, \\ \lambda^* \geq 0,\ Ax^* - b \geq 0,\ \lambda^{*T}(Ax^* - b) = 0, \\ \mu^* \geq 0,\ x^* \geq 0,\ \mu^{*T} x^* = 0. \end{cases}$$

不难看出， $\lambda^* \in D_D$. 而且,

$$b^T\lambda^* = \lambda^{*T}Ax^* = c^Tx^*.$$

由定理 10.5.1 知 λ^* 是 (10.12) 的最优解. 类似地可以证明：若 (10.12) 有最优解，则相应的 Lagrange 乘子是 (10.11) 的最优解.

(2) 可由定理 10.5.1 (1) 直接得之. **证毕**

由定理 10.5.2(1) 的证明可以看出，原问题的最优解对应的 Lagrange 乘子是其对偶问题的最优解. 反之亦然. 另一方面，也可以从单纯形法的角度将原问题和对偶问题联系起来. 事实上，若 x^* 是原问题的最优解， B 是相应的基，则 $B^{-T}c$ 是其对偶问题的最优解.

由上面的两个定理还可以得到下面的结论.

定理 10.5.3 线性规划问题 (10.11) 及其对偶问题 (10.12) 有最优解的充要条件是 D_P 和 D_D 都不是空集.

下面的定理表明，对偶关系具有自反性.

定理 10.5.4 对偶问题的对偶问题是原问题.

利用对偶问题的定义，可以证明 (作为练习) 线性规划问题 (10.1) 的对偶问题为如下线性规划问题：

$$g(y) = \min b^Ty, \qquad \text{s.t. } A^Ty \le c. \tag{10.14}$$

一个线性规划问题可以叙述成原问题的形式，也可以叙述成对偶问题的形式. 因此，我们可以根据计算的效率，选择合适的问题求解. 一般说来，约束的个数太多会增加计算的复杂性，因为约束的个数决定了为获取基本可行解而所需要的基向量的个数. 因此，如果原问题含有大量的约束，而自变量的个数相对少的话，通过求解对偶问题会在计算上带来好处.

习题 10

1. 设 $D \subset R^n$ 是非空闭集. $f(x) = c^Tx$ 是线性函数. 证明：
   (i) 若 f 在 D 上有下界，则必可达到其下确界. 即问题 $\min_{x\in D} f(x)$ 有最优解.
   (ii) 若 f 在 D 上有上界，则必可达到其上确界. 即问题 $\max_{x\in D} f(x)$ 有最优解.
2. 设 x^* 是线性规划问题 (10.2) 的一个可行解，则它是最优解的充要条件是：存在 $u \in R^m$ 使得
   $$A^Tu \le c, \qquad (c - A^Tu)^Tx^* = 0.$$
3. 设线性规划问题 (10.2) 的可行域 S 非空. 证明：
   (i) 若 S 存在极方向，则每一个极方向的正分量相应的 A 的列向量线性无关.
   (ii) $d \in R^n$ 是 S 的一个极方向的充要条件是： A 可以分解为 $A = (B, N)$, 使得对 N 的某个列向量 $a^{(j)}$ 满足 $B^{-1}a^{(j)} \le 0$, 而且， d 与向量 $\begin{pmatrix} B^{-1}a^{(j)} \\ e^{(j)} \end{pmatrix}$ 同向，其中， $e^{(j)}$ 是第 j 个 $n-m$ 维坐标向量.
4. 证明线性规划问题可行域的表示定理，即定理 10.1.2.

5. 证明：若线性规划问题有最优非基础可行解，则线性规划至少有两个最优基础可行解或只有一个基础可行解且解集合无界.

6. 设矩阵 $A=(a_{ij})\in R^{n\times n}$ 对称正定. 证明单位矩阵是下面的线性规划问题的解：

$$\begin{cases} \max & \sum\limits_{i=1}^{n}\sum\limits_{j=1}^{n} a_{ij}x_{ij} \\ \text{s.t.} & \sum\limits_{i=1}^{n} x_{ij}=1, \qquad j=1,2,\ldots,n, \\ & \sum\limits_{j=1}^{n} x_{ij}=1, \qquad i=1,2,\ldots,n, \\ & x_{ij}\ge 0, \qquad i,j=1,2,\ldots,n. \end{cases}$$

7. 给定如下线性规划问题：

$$\begin{cases} \max & c^Tx \\ \text{s.t.} & Ax\le b, \end{cases}$$

其中， $A=(a_{ij})\in R^{n\times n}$ 是 n 阶 Hilbert 矩阵， $b=(b_1,b_2,\ldots,b_n)^T$，$c=(c_1,c_2,\ldots,c_n)^T\in R^n$:

$$a_{ij}=\frac{1}{i+j},\quad b_i=\sum_{j=1}^{n}\frac{1}{i+j},\quad c_j=\frac{2}{j+1}+\sum_{j=2}^{n}\frac{1}{j+i},\quad i,j=1,2,\ldots,n.$$

证明该问题有惟一解 $x^*=(1,1,\ldots,1)^T$.

8. 将下列线性规划问题化为标准型.

(i)
$$\begin{aligned} \min\quad & f(x)=-3x_1+4x_2-3x_3+5x_4 \\ \text{s.t.}\quad & 4x_1-x_2+2x_3-x_4=-2, \\ & -2x_1+3x_2-x_3+2x_4\ge 2, \\ & x_1+x_2+3x_3-x_4\le 14, \\ & x_1,x_2,x_3\ge 0. \end{aligned}$$

(ii)
$$\begin{aligned} \max\quad & f(x)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} c_{ij}x_{ij} \\ \text{s.t.}\quad & 1-\sum_{j=1}^{m} x_{ij}=0, i=1,\ldots,n, \\ & x_{ij}\ge 0,\quad i=1,\ldots,n, j=1,\ldots,m. \end{aligned}$$

9. 通过作图指出问题是具有惟一最优解、多重最优解、无最优解还是无可行解.

(i)
$$\begin{aligned} \max\quad & f(x)=6x_1+5x_2 \\ \text{s.t.}\quad & 3x_1+x_2\le 160, \\ & x_1\le 40, \\ & x_2\le 130, \\ & x_1,x_2\ge 0. \end{aligned}$$

(ii)
$$\begin{aligned} \min\quad & f(x)=-7x_1-10x_2 \\ \text{s.t.}\quad & x_1\le 36, \\ & x_2\le 12, \\ & x_1+4x_2\le 60, \\ & 2x_1+x_2\ge 30, \\ & x_1-x_2\ge 0, \\ & x_1,x_2\ge 0. \end{aligned}$$

(iii)
$$\begin{aligned} \max\quad & f(x)=5x_1+7x_2 \\ \text{s.t.}\quad & x_1-x_2\ge 0, \\ & 3x_1-x_2\le -3, \\ & x_1,x_2\ge 0. \end{aligned}$$

(iv)
$$\begin{aligned} \min\quad & f(x)=3x_1+5x_2 \\ \text{s.t.}\quad & x_1+3x_2\ge 3, \\ & x_1+x_2\ge 2, \\ & x_1,x_2\ge 0. \end{aligned}$$

10. 考虑线性约束

$$\begin{cases} x_1 +2x_2 +10x_3 +4x_4 -2x_5 = 5, \\ x_1 +x_2 +3x_3 -x_4 +x_5 = 8, \\ x_1,x_2,x_3,x_4,x_5\ge 0. \end{cases}$$

(i) 试求出以 x_1, x_2 为基变量的基解并判断它是否为可行解.

(ii) 基础可行解最多可能有多少个?

11. 求下面线性规划问题的所有基和基础可行解，并通过计算目标函数在这些基础可行解的函数值，确定线性规划问题的最优解.

$$\begin{array}{ll} \max & f(x) = 2x_1 + 3x_2 + 4x_3 + 7x_4 \\ \text{s.t.} & 2x_1 + 3x_2 - x_3 - 4x_4 = 8, \\ & x_1 - 2x_2 + 6x_3 - 7x_4 = -3, \\ & x_1, x_2, x_3, x_4 \geq 0. \end{array}$$

12. 用单纯形法求解下列线性规划问题.

(i)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -20x_1 - 30x_2 \\ \text{s.t.} & x_1 + 2x_2 \leq 8, \\ & x_1 \leq 4, \\ & x_2 \leq 3, \\ & x_1, x_2 \geq 0. \end{array}$$

(ii)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -3x_1 - 2x_2 \\ \text{s.t.} & -x_1 + 2x_2 \leq 4, \\ & 3x_1 + 2x_2 \leq 14, \\ & x_1 - x_2 \leq 3, \\ & x_1, x_2 \geq 0. \end{array}$$

(iii)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -5x_1 - 2x_2 - 3x_3 + x_4 - x_5 \\ \text{s.t.} & x_1 + 2x_2 + 2x_3 + x_4 = 8, \\ & 3x_1 + 4x_2 + x_3 + x_5 = 7, \\ & x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \geq 0. \end{array}$$

(iv)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -2x_1 - 3x_2 \\ \text{s.t.} & x_1 - x_2 \leq 2, \\ & 3x_1 - x_2 \geq 4, \\ & x_1, x_2 \geq 0. \end{array}$$

(v)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -12x_1 - 8x_2 \\ \text{s.t.} & 4x_1 + 4x_2 + x_3 = 1400, \\ & 6x_1 + 3x_2 + x_4 = 1800, \\ & 2x_1 + 6x_2 + x_5 = 1800, \\ & x_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, 5. \end{array}$$

13. 用两阶段法求解下列线性规划问题：

(i)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -2x_1 - 3x_2 + 5x_3 \\ \text{s.t.} & x_1 + x_2 + x_3 = 7, \\ & 2x_1 - 5x_2 + x_3 \geq 10, \\ & x_1, x_2, x_3 \geq 0. \end{array}$$

(ii)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -3x_1 - 4x_2 - 2x_3 \\ \text{s.t.} & x_1 + x_2 + x_3 + x_4 \leq 30, \\ & 3x_1 + 6x_2 + x_3 - 2x_4 \leq 0, \\ & x_1, x_2, x_3, x_4 \geq 0. \end{array}$$

14. 用两阶段法证明下面线性规划问题不可行：

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = 2x_1 + 4x_2 \\ \text{s.t.} & 2x_1 - 3x_2 \geq 2, \\ & -x_1 + x_2 \geq 3, \\ & x_1, x_2 \geq 0. \end{array}$$

15. 写出线性规划问题

$$\begin{array}{ll} \max & f(x) = x_1 + 2x_2 \\ \text{s.t.} & 3x_1 + 2x_2 \leq 60, \\ & 2x_1 + 6x_2 \leq 90, \\ & x_1 + 3x_2 \geq 30, \\ & 2x_1 + x_2 \geq 20, \\ & x_1, x_2 \geq 0. \end{array}$$

的对偶问题并求对偶问题的最优解.

16. 已知线性规划问题

$$\begin{aligned} \max \quad & f(x) = x_1 + x_2 \\ \text{s.t.} \quad & -x_1 + x_2 + x_3 \le 2, \\ & -2x_1 + x_2 - x_3 \le 1, \\ & x_1, x_2, x_3 \ge 0. \end{aligned}$$

试用对偶理论证明上述线性规划问题无最优解.

17. 给出线性规划问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = 2x_1 + 3x_2 + 5x_3 + 2x_4 + 3x_5 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 + 2x_3 + x_4 + 3x_5 \ge 4, \\ & 2x_1 - x_2 + 3x_3 + x_4 + x_5 \ge 3, \\ & x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \ge 0. \end{aligned}$$

已知其对偶问题的最优解为 $y^* = (4/5, 3/5)^T$, 相应的目标函数值为 $g(y^*) = 5$. 试用对偶理论找出原问题的最优解.

18. 证明线性规划问题 (10.1) 的对偶问题是 (10.14).

19. 证明：若 x^* 是原问题 (10.1) 的最优基础可行解， B 是相应的基，则 $B^{-T}c_B$ 是其对偶问题 (10.14) 的最优解.

20. 证明定理 10.5.3.

21. 证明：对偶问题的对偶问题是原问题.

22. 设线性规划 (10.11) 及其对偶问题 (10.12) 的最优解存在. 设 $\bar{x}$ 和 $\bar{y}$ 分别是 (10.11) 和 (10.12) 的任意最优解. 证明：

    (i) 若对某个 $1 \le j \le n$, 有 $\bar{x}_j > 0$, 则必有 $(A^T\bar{y} - c)_j = 0$.

    (ii) 若对某个 $1 \le i \le m$, 有 $(A\bar{x} - b)_i > 0$, 则必有 $\bar{y}_i = 0$.

    (iii) 若对某个 $1 \le i \le m$, 有 $\bar{y}_i > 0$, 则必有 $(A\bar{x} - b)_i = 0$.

    (iv) 若对某个 $1 \le j \le n$, 有 $(A^T\bar{y} - c)_j < 0$, 则必有 $\bar{x}_j = 0$.

第十一章　二次规划

当目标函数是二次函数且约束函数都是线性函数时，约束最优化问题 (1.5) 称为二次规划．二次规划在工程中有广泛的应用．而且，求解一般非线性约束最优化问题的某些算法的子问题是二次规划问题．因此，二次规划是一类非常重要的最优化问题．

二次规划的一般形式为：

$$\begin{array}{ll} \min & f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx \\ \text{s.t.} & a_i^Tx\ge b_i,\quad i\in\mathcal{I}=\{1,\ldots,m_1\}, \\ & a_i^Tx=b_i,\quad i\in\mathcal{E}=\{m_1+1,\ldots,m\}, \end{array} \tag{11.1}$$

其中，$Q\in R^{n\times n}$ 是一个对称矩阵，$q\in R^n$, $a_i\in R^n$, $i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}$. 设 x^* 是问题 (11.1) 的解．由定理 9.2.1 知，存在 Largrnage 乘子 λ_i^*, $i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}$, 使得

$$\begin{array}{l} \nabla f(x^*)-\sum\limits_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}\lambda_i^*a_i=0, \\ a_i^Tx^*-b_i=0,\quad i\in\mathcal{E}, \\ \lambda_i^*\ge 0,\ \ a_i^Tx^*-b_i\ge 0,\quad \lambda_i^*(a_i^Tx^*-b_i)=0,\quad i\in\mathcal{I}. \end{array} \tag{11.2}$$

令

$$A=(a_1,\ldots,a_m)^T,\quad A_{\mathcal{I}}=(a_1,\ldots,a_{m_1})^T,\quad A_{\mathcal{E}}=(a_{m_1+1},\ldots,a_m)^T,$$

$$b_{\mathcal{I}}=(b_1,\ldots,b_{m_1})^T,\quad b_{\mathcal{E}}=(b_{m_1+1},\ldots,b_m)^T,$$

$$\lambda^*=(\lambda_1^*,\ldots,\lambda_m^*)^T,\quad \lambda_{\mathcal{I}}^*=(\lambda_1^*,\ldots,\lambda_{m_1}^*)^T,\quad \lambda_{\mathcal{E}}^*=(\lambda_{m_1+1}^*,\ldots,\lambda_m^*)^T.$$

则 K-K-T 系统 (11.2) 可等价地写成下面紧凑的形式：

$$\begin{array}{l} \nabla f(x^*)-A^T\lambda^*=0, \\ A_{\mathcal{E}}x^*-b_{\mathcal{E}}=0, \\ \lambda_{\mathcal{I}}^*\ge 0,\ \ A_{\mathcal{I}}x^*-b_{\mathcal{I}}\ge 0,\quad (\lambda_{\mathcal{I}}^*)^T(A_{\mathcal{I}}x^*-b_{\mathcal{I}})=0. \end{array} \tag{11.3}$$

当 Q 是半正定矩阵时，二次规划是一个凸规划问题．此时，由定理 9.2.4 知，x^* 是问题 (11.1) 的解的充要条件是它是问题 (11.1) 的 K-K-T 点，即是 (11.3) 的解．

§11.1　等式约束二次规划

我们先考察等式约束严格凸二次规划问题

$$\begin{array}{ll} \min & f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx \\ \text{s.t.} & Ax=b, \end{array} \tag{11.4}$$

其中，$Q\in R^{n\times n}$ 对称正定，$q\in R^n$, $A=(a_1,a_2,\ldots,a_m)^T\in R^{m\times n}$, $b\in R^m$. 假设 A 行满秩，即 A 的秩是 m. 从而，问题 (11.4) 的可行域非空．

由 (11.3) 知， x^* 是问题 (11.4) 的解的充要条件是：存在 Lagrange 乘子 $\lambda^* \in R^m$, 使得 (x^*, λ^*) 满足

$$Qx - A^T\lambda = -q, \qquad Ax = b.$$

或等价地， (x^*, λ^*) 是下面的线性方程组的解：

$$\begin{pmatrix} Q & -A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -q \\ b \end{pmatrix}. \tag{11.5}$$

下面的定理给出了线性方程组 (11.5) 有惟一解的条件.

定理 11.1.1 *设矩阵 A 行满秩. 若在问题 (11.5) 的解 x^* 处二阶充分条件成立，即*

$$d^TQd > 0, \quad \forall d \in R^n,\ d \neq 0, Ad = 0,$$

则线性方程组 (11.5) 的系数矩阵

$$\begin{pmatrix} Q & -A^T \\ A & 0 \end{pmatrix}$$

非奇异. 因此，线性方程组 (11.5) 有惟一解.

证明 设 (d, v) 是齐次线性方程组

$$\begin{pmatrix} Q & -A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ v \end{pmatrix} = 0 \tag{11.6}$$

的解，即

$$Qd - A^Tv = 0, \quad Ad = 0.$$

因此，

$$d^TQd = d^TA^Tv = 0, \quad Ad = 0.$$

由二阶充分条件知，必有 $d = 0$. 从而，

$$A^Tv = Qd = 0.$$

但 A 行满秩，故必有 $v = 0$. 因此，齐次线性方程组 (11.6) 只有零解. 从而，线性方程组 (11.5) 的系数矩阵非奇异，因而有惟一解. **证毕**

令矩阵 $Z \in R^{n\times(n-m)}$ 的列向量构成矩阵 A 的核空间的一组基，即 Z 列满秩且满足 $AZ = 0$. 不难验证，二阶充分条件可等价地叙述为矩阵 Z^TQZ 正定. 我们称矩阵 Z^TQZ 为二次规划问题 (11.4) 的投影 Hessian 阵或既约 Hessian 阵. 因此，定理 11.1.1 可等价地叙述为下面定理.

定理 11.1.2 *设矩阵 A 行满秩. 若二次规划问题 (11.4) 的投影 Hessian 阵 Z^TQZ 正定，则线性方程组 (11.5) 有惟一解.*

例 11.1.1 考察如下二次规划问题:

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = 3x_1^2 + 2x_1x_2 + x_1x_3 + 2.5x_2^2 + 2x_2x_3 + 2x_3^2 - 8x_1 - 3x_2 - 3x_3 \\ \text{s.t.} & x_1 + x_3 = 3, \quad x_2 + x_3 = 0. \end{array} \tag{11.7}$$

与 *(11.4)* 相对应，我们有

$$Q = \begin{pmatrix} 6 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 2 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad q = \begin{pmatrix} -8 \\ -3 \\ -3 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

解该问题的 *K-K-T* 系统

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 & 1 & -1 & 0 \\ 2 & 5 & 2 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & 4 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 3 \\ 3 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}$$

得

$$x^* = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \lambda^* = \begin{pmatrix} 3 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

在上面的例子中， Q 对称正定，且 A 行满秩．根据投影 Hessian 矩阵的定义，可定义矩阵 Z 如下：

$$Z = (-1, -1, 1)^T.$$

显然

$$Z^TQZ = 13 > 0.$$

因此， $x^* = (2, -1, 1)^T$ 是问题的最优解.

下面的定理表明，在定理 11.1.1 的条件下，二次规划的 K-K-T 点是该二次规划问题的惟一全局最优解 (证明留作练习).

定理 11.1.3 设定理 *11.1.1 (*或定理 *11.1.2)* 的条件成立，则 x^* 是问题 (11.4) 的惟一全局最优解.

若定理 11.1.2 的条件不成立，即投影 Hessian 矩阵 Z^TQZ 不正定，则等式约束问题 (11.4) 无解或有无界解．事实上，若 Z^TQZ 有负特征值，设向量 u 满足

$$u^TZ^TQZu < 0.$$

令 $d = Zu$. 显然， $d \neq 0$. 则对任何 $\alpha > 0$, 任何可行点 x^*, 由 $Ad = 0$ 得 $A(x^* + \alpha d) = b$. 因此， $x^* + \alpha d$ 是问题 (11.4) 的可行点．但是，

$$\begin{aligned} f(x^* + \alpha d) &= \frac{1}{2}\alpha^2 d^TQd + \alpha d^T(Qx^* + q) + f(x^*) \\ &= \frac{1}{2}\alpha^2 d^TQd + \alpha d^TA^T\lambda^* + f(x^*) \\ &= \frac{1}{2}\alpha^2 d^TQd + f(x^*) = \frac{1}{2}\alpha^2 u^TZ^TQZu + f(x^*) < f(x^*). \end{aligned}$$

上式说明，此时问题 (11.4) 的目标函数值无下界．若 Z^TQZ 没有负特征值，即 Z^TQZ 半正定但不正定．故存在 $u\neq 0$ 使得 $u^TZ^TQZu=0$. 按上面同样的方式可得

$$f(x^*+\alpha d)\le f(x^*),\qquad \forall \alpha>0.$$

此时，问题 (11.4) 若有解 x^*, 则对任何 $\alpha>0$, $x^*+\alpha d$ 也是问题的解．因而有无界解．而且 x^* 不是问题的严格局部最优解.

§11.2 解二次规划的有效集法

本节介绍求解一般二次规划问题 (11.1) 的有效集法．有效集法被认为是求解中小规模二次规划问题的最有效的算法之一．我们假设 Q 是半正定矩阵．此时，问题 (11.1) 是一个凸规划问题．其任何局部最优解也是其全局最优解．记

$$\mathcal{A}(x)=\{i\in\mathcal{I}\cup\mathcal{E}\mid a_i^Tx=b_i\}.$$

称 $\mathcal{A}(x)$ 为问题 (11.1) 在可行点 x 处的有效集．由定理 9.2.4 知， x^* 是问题 (11.1) 的解的充要条件是它是问题 (11.1) 的 K-K-T 点．不难发现， x^* 也是下面等式约束问题的 K-K-T 点：

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx\\ \text{s.t.} & a_i^Tx=b_i,\quad i\in\mathcal{A}(x^*).\end{array}\tag{11.8}$$

问题 (11.8) 显然也是一个凸二次规划问题．因此， x^* 也是它的一个最优解.

上面的讨论说明，含不等式约束的二次规划问题等价于一个等式约束二次规划问题．但是，由于问题 (11.8) 依赖于问题 (11.1) 的最优解 x^*. 它是事先不知道的．因此，不能直接通过求解 (11.8) 的方式求解原二次规划问题 (11.1).

求解二次规划问题 (11.1) 的有效集法的基本思想是：从问题 (11.1) 的某个初始可行点 $x^{(0)}$ 出发，若 $x^{(0)}$ 不是问题 (11.1) 的解，则令 $\mathcal{A}_0=\mathcal{A}(x^{(0)})$ 作为 $A(x^*)$ 的一个估计，称之为工作集．然后，用 $\mathcal{A}_0$ 替换 $\mathcal{A}(x^*)$, 求解等式约束二次规划问题 (11.8). 在此基础上得一个新的可行点 $x^{(1)}$, 若 $x^{(1)}$ 不是问题 (11.1) 的解，则按照某种方式确定一个新的工作集 $\mathcal{A}_1$. 一般地，设已产生了可行点 $x^{(k)}$, 若 $x^{(k)}$ 不是问题 (11.1) 的解，则按照某种方式确定工作集 $\mathcal{A}_k$, 然后求解等式约束二次规划问题：

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx\\ \text{s.t.} & a_i^Tx=b_i,\quad i\in\mathcal{A}_k.\end{array}\tag{11.9}$$

在此基础上得一个新的可行点 $x^{(k+1)}$. 若 $x^{(k+1)}$ 不是问题 (11.1) 的解，则按照某种方式确定一个新的工作集 $\mathcal{A}_{k+1}$, 并求解一个等式约束二次规划问题．重复此过程，算法产生可行点序列 $\{x^{(k)}\}$. 该序列的最后一个点是二次规划问题 (11.1) 的最优解.

下面介绍有效集法的具体步骤．首先，我们证明如下定理.

定理 11.2.1 设 $x^{(k)}$ 是问题 (11.1) 的一个可行点．集合 $\mathcal{A}_k\subset\mathcal{A}(x^{(k)})$. 若等式约束二次规划问题

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx\\ \text{s.t.} & a_i^Tx=b_i,\quad i\in\mathcal{A}_k\end{array}\tag{11.10}$$

的解为 $x^{(k)}$, 且相应的 *Lagrange* 乘子 $\lambda_i^{(k)}$, $i \in \mathcal{A}_k$ 满足 $\lambda_i^{(k)} \geq 0$, $\forall i \in \mathcal{A}_k \cap \mathcal{I}$, 则 $x^{(k)}$ 是原二次规划问题 (11.1) 的解.

证明 由假设， $x^{(k)}, \lambda_i^{(k)}, i \in \mathcal{A}_k$ 是等式约束问题 (11.10) 的 K-K-T 点. 它们满足如下条件:

$$\begin{cases} \nabla f(x^{(k)}) - \sum\limits_{i \in \mathcal{A}_k} \lambda_i^{(k)} a_i = 0, \\ \lambda_i^{(k)} \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{A}_k \cap \mathcal{I}, \\ a_i^T x^{(k)} - b_i = 0, \quad i \in \mathcal{A}_k. \end{cases}$$

令

$$\lambda_i^{(k)} = 0, \quad \forall i \in \mathcal{I} \backslash \mathcal{A}_k.$$

注意到 $x^{(k)}$ 的可行性，我们有

$$\begin{cases} \nabla f(x^{(k)}) - \sum\limits_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^{(k)} a_i = 0, \\ \lambda_i^{(k)} \geq 0, \quad a_i^T x^{(k)} - b_i \geq 0, \quad \lambda_i^{(k)} (a_i^T x^{(k)} - b_i) = 0, \quad i \in \mathcal{I}, \\ a_i^T x^{(k)} - b_i = 0, \quad \forall i \in \mathcal{E}, \end{cases}$$

即 $x^{(k)}$ 是原问题 (11.1) 的 K-K-T 点， $\lambda_i^{(k)}, i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ 是相应的 Lagrange 乘子. 但问题 (11.1) 是凸规划，因此， $x^{(k)}$ 是问题的解. **证毕**

记 $d = x - x^{(k)}$. 则 $x^{(k)}$ 是问题 (11.10) 的解等价于 $d = 0$ 是下面二次规划问题的解.

$$\begin{array}{ll} \min & \frac{1}{2} d^T Q d + \nabla f(x^{(k)})^T d \\ \text{s.t.} & a_i^T d = 0, \quad i \in \mathcal{A}_k. \end{array} \tag{11.11}$$

因此，上面的定理可等价地叙述为下面的定理.

定理 11.2.2 设 $x^{(k)}$ 是问题 (11.1) 的一个可行点. 集合 $\mathcal{A}_k \subset \mathcal{A}(x^{(k)})$. 若等式约束二次规划问题 (11.11) 的解为 $d = 0$, 且相应的 *Lagrange* 乘子 $\lambda_i^{(k)}$, $i \in \mathcal{A}_k$ 满足 $\lambda_i^{(k)} \geq 0$, $\forall i \in \mathcal{A}_k \cap \mathcal{I}$, 则 $x^{(k)}$ 是原二次规划问题 (11.1) 的解.

定理 11.2.1 和 11.2.2 给出了判断可行点是问题的最优解的条件. 下面，我们讨论有效集法的具体计算步骤. 设 $x^{(k)}$ 是问题 (11.1) 的可行点， $\mathcal{A}_k \subset \mathcal{A}(x^{(k)})$ 是工作集. 令 $d^{(k)}$ 是问题 (11.11) 的解.

情形 1. $d^{(k)} \neq 0$, 或等价地 (11.9) 的解 $\bar{x}^{(k)} \triangleq x^{(k)} + d^{(k)} \neq x^{(k)}$. 注意到 $x^{(k)}$ 也是问题 (11.9) 的可行点，故必有

$$f(\bar{x}^{(k)}) \leq f(x^{(k)}).$$

若 $\bar{x}^{(k)}$ 可行，则令

$$x^{(k+1)} = \bar{x}^{(k)} = x^{(k)} + d^{(k)}.$$

此时，若存在 $i \notin \mathcal{A}_k$, 使得 $a_i^T \bar{x}^{(k)} = b_i$, 则任取使得该等式成立的一个 $i \notin \mathcal{A}_k$, 并令

$$\mathcal{A}_{k+1} = \mathcal{A}_k \cup \{i\}.$$

否则取 $\mathcal{A}_{k+1}=\mathcal{A}_k$.

若 $\bar{x}^{(k)}$ 不可行，我们在以 $x^{(k)}$ 和 $x^{(k+1)}$ 为端点的线段 $[x^{(k)},x^{(k)}+d^{(k)}]$ 中寻找可行点作为 $x^{(k+1)}$, 即令

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)},$$

其中， α_k 是区间 $[0,1)$ 使得 $x^{(k+1)}$ 可行的最大者．下面导出 α_k 的表达式.

由于 $d^{(k)}$ 是问题 (11.11) 的可行点，故对任何 $\alpha_k\geq 0$, 均有

$$a_i^T(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)})=a_i^Tx^{(k)}=b_i,\qquad \forall i\in\mathcal{E}.$$

同理，任何 $\alpha_k\geq 0$ 有,

$$a_i^T(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)})=a_i^Tx^{(k)}=b_i,\qquad \forall i\in\mathcal{I}\cap\mathcal{A}_k.$$

对 $i\notin\mathcal{A}_k$. 若 $a_i^Td^{(k)}\geq 0$, 则对任何 $\alpha_k\geq 0$, 均有

$$a_i^T(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)})\geq a_i^Tx^{(k)}\geq b_i.$$

考察 $i\notin\mathcal{A}_k$ 且 $a_i^Td^{(k)}<0$. 为了使得 $x^{(k+1)}$ 可行，必有

$$a_i^T(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)})\geq b_i.$$

因此,

$$\alpha_k\leq\frac{b_i-a_i^Tx^{(k)}}{a_i^Td^{(k)}}.$$

综上所述，我们得到当 $\bar{x}^{(k)}$ 不可行时，区间 $[0,1)$ 中使得 $x^{(k+1)}$ 可行的最大 α_k 为：

$$\alpha_k=\min\left\{\frac{b_i-a_i^Tx^{(k)}}{a_i^Td^{(k)}}\;\middle|\; i\notin\mathcal{A}_k,\ a_i^Td^{(k)}<0\right\}. \tag{11.12}$$

上式右边的值严格小于 1 (因为 $\bar{x}^{(k)}=x^{(k)}+d^{(k)}$ 不可行) . 故上式可等价地写为

$$\alpha_k=\min\left\{1,\ \frac{b_i-a_i^Tx^{(k)}}{a_i^Td^{(k)}}\;\middle|\; i\notin\mathcal{A}_k,\ a_i^Td^{(k)}<0\right\}. \tag{11.13}$$

设 i 是使得上面的右端取到最小值的任意一个下标，此时，取 $\mathcal{A}_{k+1}=\mathcal{A}_k\cup\{i\}$.

另一方面，当 $\bar{x}^{(k)}=x^{(k)}+d^{(k)}$ 可行时，等式 (11.12) 右端的值必定不小于 1．此时， $x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}$, $\alpha_k=1$, 即 α_k 也可由 (11.13) 确定.

上面的讨论说明，当 $d^{(k)}\neq 0$ 时，可取

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)},\quad \mathcal{A}_{k+1}=\mathcal{A}_k\cup\{i\},$$

其中， α_k 由 (11.13) 确定， i 是使得 (11.13) 的右端取得最小值的任意一个下标.

不难证明，上面方式确定的 $x^{(k+1)}$ 和 $\mathcal{A}_{k+1}$ 满足

$$f(x^{(k+1)})\leq f(x^{(k)}),\quad \mathcal{A}_{k+1}\subset\mathcal{A}(x^{(k+1)}).$$

情形 2. $d^{(k)}=0$, 即 $x^{(k)}$ 是问题 (11.9) 的解. 设相应的 Lagrange 乘子为 $\lambda_i^{(k)}$, $i\in\mathcal{A}_k$.

由定理 11.2.1 知，若 $\lambda_i^{(k)}\geq 0$, $\forall i\in\mathcal{A}_k\cap\mathcal{I}$, 则 $x^{(k)}$ 是二次规划问题 (11.1) 的解.

若存在 $i\in\mathcal{A}_k\cap\mathcal{I}$, 使得 $\lambda_i^{(k)}<0$, 令 $\mathcal{A}_{k+1}=\mathcal{A}_k\backslash\{i\}$.

下面的定理表明，若在 (11.11) 中用 $\mathcal{A}_{k+1}$ 替代 $\mathcal{A}_k$, 则问题的解是原二次规划问题 (11.1) 的可行域在 $x^{(k)}$ 处的一个可行方向，而且是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向 (证明参看 [19, 定理 16.4]) .

定理 11.2.3 设 a_i, $i\in\mathcal{A}_k$ 线性无关， $d^{(k+1)}$ 是问题 (11.11) 中用 $\mathcal{A}_{k+1}$ 替代 $\mathcal{A}_k$ 得到的解. 则 $d^{(k+1)}$ 是二次规划问题 (11.1) 的可行域在 $x^{(k)}$ 处的一个可行方向，而且是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向.

利用上面的讨论，我们给出求解二次规划问题 (11.1) 的有效集法的步骤.

算法 11.1 (**二次规划的有效集法**)

步 *1* 给定初始可行点 $x^{(0)}$, 令 $\mathcal{A}_0=\mathcal{A}(x^{(0)})$, $k:=0$.

步 *2* 求解等式约束二次规划子问题 (11.11) 得解 $d^{(k)}$ 及相应的 *Lagrange* 乘子 $\lambda_i^{(k)}$, $i\in\mathcal{A}_k$.

步 *3* 若 $d^{(k)}\neq 0$, 则由 (11.13) 确定 α_k. 令

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)},\quad \mathcal{A}_{k+1}=\mathcal{A}_k\cup\{i\},$$

其中，

$$i=\arg\min\Big\{1,\ \frac{b_j-a_j^Tx^{(k)}}{a_j^Td^{(k)}}\ \Big|\ j\notin\mathcal{A}_k,\ a_j^Td^{(k)}<0\Big\}.$$

令 $k:=k+1$, 转步 *2*.

若 $d^{(k)}=0$, 则当 $\lambda_i^{(k)}\geq 0$, $\forall i\in\mathcal{A}_k\cap\mathcal{I}$ 时，得问题 (11.1) 的解 $x^{(k)}$. 否则，令

$$i=\arg\min_{j\in\mathcal{A}_k\cap I}\lambda_j^{(k)},\quad x^{(k+1)}=x^{(k)},\quad \mathcal{A}_{k+1}=\mathcal{A}_k\backslash\{i\}.$$

令 $k:=k+1$. 转步 *2*.

不难看出，上面的算法经有限步后终止于问题 (11.1) 的惟一最优解.

例 11.2.1 用有效集法求解下面的二次规划问题:

$$\begin{aligned}\min\quad & f(x)=x_1^2+x_2^2-2x_1-4x_2\\ \text{s.t.}\quad & -x_1-x_2+1\geq 0,\\ & x_1\geq 0,\ x_2\geq 0.\end{aligned}$$

解 取初始可行点 $x^{(0)}=(0,0)^T$, $\mathcal{A}_0=\mathcal{A}(x^{(0)})=\{2,3\}$. 求解等式约束子问题

$$\begin{aligned}\min\quad & d_1^2+d_2^2-2d_1-4d_2\\ \text{s.t.}\quad & d_1=0,\ d_2=0\end{aligned}$$

得解和相应的 Lagrange 乘子

$$d^{(0)} = (0,0)^T, \quad \lambda = (-2,-4)^T.$$

故得

$$x^{(1)} = x^{(0)} = (0,0)^T, \quad \mathcal{A}_1 = \mathcal{A}_0 \backslash \{3\} = \{2\}.$$

转入第二次迭代. 求解等式约束子问题

$$\begin{array}{ll} \min & d_1^2 + d_2^2 - 2d_1 - 4d_2 \\ \text{s.t.} & d_1 = 0 \end{array}$$

得解

$$d^{(1)} = (0,2)^T \neq 0.$$

计算

$$\alpha_1 = \min\left\{1, \ \frac{b_i - a_i^T x^{(1)}}{a_i^T d^{(1)}} \ \Big| \ i = 1,3, \ a_i^T d^{(1)} < 0\right\} = \frac{b_1 - a_1^T x^{(1)}}{a_1^T d^{(1)}} = \frac{1}{2}.$$

令

$$x^{(2)} = x^{(1)} + \alpha_1 d^{(1)} = (0,1)^T, \quad \mathcal{A}_2 = \mathcal{A}_1 \cup \{1\} = \{1,2\}.$$

转入第三次迭代. 求解等式约束子问题

$$\begin{array}{ll} \min & d_1^2 + d_2^2 - 2d_1 - 2d_2 \\ \text{s.t.} & d_1 + d_2 = 0, \ \ d_1 = 0 \end{array}$$

得解和相应的 Lagrange 乘子

$$d^{(2)} = (0,0)^T, \quad \lambda^{(2)} = (2,0)^T.$$

由于 $\lambda^{(2)} \geq 0$, 故得所求二次规划问题的最优解为

$$x^* = x^{(2)} = (0,1)^T,$$

相应的 Lagrange 乘子为

$$\lambda^* = (2,0,0)^T.$$

习题 11

1. 设矩阵 $Q \in R^{n\times n}$ 对称半正定, $P \in R^{n\times n}$ 对称且满足

$$d^T P d > 0, \quad \forall d \neq 0, d^T Q d = 0.$$

   证明：存在常数 $M > 0$ 使得矩阵 $P + MQ$ 正定.

2. 设矩阵 $Q \in R^{n\times n}$ 对称正定, $A \in R^{m\times n}$ 行满秩.

(i) 证明：矩阵

$$M=\begin{pmatrix} Q & A^T \\ A & 0 \end{pmatrix}$$

非奇异，且

$$M^{-1}=\begin{pmatrix} C & E \\ E^T & F \end{pmatrix},$$

其中，

$$C=Q^{-1}-Q^{-1}A^T(AQ^{-1}A^T)^{-1}AQ^{-1},\quad E=Q^{-1}A^T(AQ^{-1}A^T)^{-1},\quad F=-(AQ^{-1}A^T)^{-1}.$$

(ii) 证明：矩阵 M 有 n 个正特征值， m 个负特征值，没有 0 特征值.

(iii) 证明：线性方程组

$$M\begin{pmatrix} -p \\ \lambda \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} g \\ b \end{pmatrix}$$

等价于下面的线性方程组：

$$(AQ^{-1}A^T)\lambda=AQ^{-1}g-b,\quad Qp=A^T\lambda-g.$$

3. 设矩阵 $W\in R^{n\times n}$ 对称， $Z\in R^{n\times t}$, $u\in R^n$ 可由 Z 的列线性表出. 记 $\bar{Z}=(Z,u)$. 证明：若矩阵 Z^TWZ 正定， $u^TWu\ge 0$, 则矩阵 $\bar{Z}^TW\bar{Z}$ 是半正定的.
4. 考察等式约束二次规划问题 (11.4). 设矩阵 $Z\in R^{n-m}$ 的列构成 A^T 的正交补的一组基, 且 Z^TQZ 有负特征值. 证明: 若 $(x^*,\ \lambda^*)$ 满足 K-K-T 条件 (11.5), 对任何满足 $d^TZ^TQZd<0$ 的 $d\in R^n$. 一元函数 $\phi(\alpha)=f(x^*+\alpha Zd)$ 无下界.
5. 设 x^* 满足定理 11.1.1 的条件. 证明： x^* 是问题 (11.4) 的惟一全局最优解.
6. 设问题 (11.1) 中的 Q 对称半正定且可行域 D 非空. 证明：若 f 在 D 中有下界，则问题的最优解存在.
7. 设 $\bar{x}$ 是二次规划 (11.1) 的解. 证明 $\bar{x}$ 也是下面的线性规划的解

$$\begin{aligned} \min\quad & \phi(x)=x^T(Q\bar{x}+q) \\ \text{s.t.}\quad & a_i^Tx\ge b_i,\quad i\in\mathcal{I}=\{1,\dots,m_1\}, \\ & a_i^Tx=b_i,\quad i\in\mathcal{E}=\{m_1+1,\dots,m\}, \end{aligned}$$

8. 设 $Q\in R^{n\times n}$ 对称正定， $A\in R^{m\times n}$, $c\in R^n$, $b\in R^m$, $d\in R$. 考察如下最优化问题：

$$\begin{aligned} \min\quad & f(x)=\frac{(x^TQx)^{1/2}}{c^Tx+d} \\ \text{s.t.}\quad & Ax=b, \\ & x\ge 0. \end{aligned}$$

假设该问题有解 $\bar{x}$, 且对任何可行点 x, 有 $c^Tx+d>0$. 试将上面的分式规划问题转化为一个凸二次规划问题.

9. 设 $Q\in R^{n\times n}$ 对称正定， $a\in R^n$ 非负. 证明下面的问题：

$$\left\{\begin{aligned} \max\quad & g(x)\triangleq\frac{a^Tx}{(x^TQx)^{1/2}} \\ \text{s.t.}\quad & \sum_{j=1}^n x_j=1, \\ & x_j\ge 0,\quad j=1,2,\dots,n \end{aligned}\right.$$

有惟一解，而且其解可通过下面的问题得到：

$$\min f(x) = \frac{1}{2}x^TQx - a^Tx, \quad \text{s.t.} \ \ x \geq 0.$$

10. 求解如下等式约束二次规划问题：

$$\text{(i)} \ \begin{cases} \min & x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1x_2 - 2x_1 - 6x_2 \\ \text{s.t.} & x_1 + x_2 = 1. \end{cases} \qquad \text{(ii)} \ \begin{cases} \min & 2x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 - x_1 - x_2 \\ \text{s.t.} & x_1 - 2x_2 = 2. \end{cases}$$

11. 证明设二次规划问题 (11.1) 的可行域的充要条件是：对任何满足

$$\sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}} \mu_i a_i = 0, \quad \mu_i \geq 0, \ i \in \mathcal{I} \tag{11.14}$$

的非零向量 μ, 有

$$\sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}} \mu_i b_i \leq 0.$$

12. 设 $d^{(k)} \neq 0$ 是问题 (11.11) 的解且二阶充分条件成立．证明：

$$f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) < f(x^{(k)}), \quad \forall \alpha \in (0,1].$$

13. 设 $\bar{x} \in R^n$ 是二次规划问题 (11.1) 的一个可行点，且是问题

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = \frac{1}{2}x^TQx + q^Tx \\ \text{s.t.} & a_i^Tx - b_i = 0, \ \ i \in \mathcal{A} \end{array}$$

的解，其中 $\mathcal{E} \subseteq \mathcal{A} \subseteq \mathcal{A}(\bar{x})$. 记 $\bar{\lambda}$ 是相应的 Lagrange 乘子．假设 a_i, $i \in \mathcal{A}$ 线性无关，再假设存在 $j \in \mathcal{A}$ 使得 $\bar{\lambda}_j < 0$, $\bar{d}$ 是问题

$$\begin{array}{ll} \min & \frac{1}{2}d^TQd + (Q\bar{x} + q)^Tx \\ \text{s.t.} & a_i^Td = 0, \ \ i \in \mathcal{A}\backslash\{j\} \end{array}$$

的解，且二阶充分条件成立．证明：

(i) $a_j^T\bar{d} \geq 0$.

(ii) $\bar{d}$ 是函数 ϕ 在 $\bar{x}$ 处的一个下降方向，即 $\nabla f(\bar{x})^T\bar{d} < 0$.

14. 设 $A \in R^{m\times n}$ 行满秩， $a \in R^n$. 证明：二次规划问题

$$\begin{array}{ll} \min & \frac{1}{2}(x-a)^T(x-a) \\ \text{s.t.} & Ax = b \end{array}$$

的解以及相应的 Lagrange 乘子分别为：

$$x^* = a + A^T(AA^T)^{-1}(b - Aa), \quad \text{和} \quad \lambda^* = (AA^T)^{-1}(b - Aa).$$

15. 利用有效集法求解下面的二次规划问题：

(i)

$$\begin{cases} \min & x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1x_2 - 2x_1 - 6x_2 \\ \text{s.t.} & \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2 \leq 1, \\ & -x_1 + 2x_2 \leq 2, \\ & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0. \end{cases}$$

取初始点为 $x^{(0)} = (0,0)^T$.

(ii)

$$\begin{cases} \min & x_1^2 + 2x_2^2 - x_1x_2 - x_1 - 10x_2 \\ \text{s.t.} & -3x_1 - 2x_2 \geq -6, \\ & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0. \end{cases}$$

取初始点为 $x^{(0)} = (0,0)^T$.

16. 设 Q 对称正定， λ^* 是问题

$$\begin{array}{ll} \min & \frac{1}{2}\lambda^T(A^TQ^{-1}A)\lambda-(b+A^TQ^{-1}q)^T\lambda \\ \text{s.t.} & \lambda_i\geq 0, \quad i\in\mathcal{I} \end{array}$$

的解．证明： $x^*=-Q^{-1}(q-A\lambda^*)$ 是问题 (11.1) 的解．

17. 设 $Q\in R^{n\times n}$ 对称正定． $A=(a_i^T)_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}$ 行满秩．证明：若 λ^*, μ^* 是问题

$$\left\{\begin{array}{ll} \min & g(\lambda)\triangleq\frac{1}{2}\lambda^T(AQ^{-1}A^T)\lambda-(b+AQ^{-1}q)^T\lambda \\ \text{s.t.} & \lambda_i\geq 0, \quad i\in\mathcal{I} \end{array}\right.$$

的解．证明： $x^*=Q^{-1}(A\lambda^*-q)$ 是下面的不等式约束问题

$$\min f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx, \quad \text{s.t. } Ax\geq b$$

的解．

18. 设 $Q\in R^{n\times n}$ 对称半正定， $q\in R^n$, $A\in R^{m\times n}$, $b\in R^m$. 考察如下两个二次规划问题 (称为原始 — 对偶问题):

$$\min f(x)=\frac{1}{2}x^TQx+q^Tx, \quad \text{s.t. } Ax=b,\ x\geq 0, \tag{11.15}$$

$$\max g(y,u,v)=-\frac{1}{2}y^TQy+b^Tu, \quad \text{s.t. } -Qy+A^Tu+v=q,\ v\geq 0. \tag{11.16}$$

证明下面的结论:

(i) 若问题 (11.15) 无界，则问题 (11.16) 无可行点.

(ii) 若问题 (11.16) 无界，则问题 (11.15) 无可行点.

(iii) 若问题 (11.15) 有最优解 x^*, 则存在 u^*, v^*, 使得 $(y,u,v)=(x^*,u^*,v^*)$ 是问题 (11.16) 的最优解.

(iv) 若问题 (11.16) 有最优解 x^*, 则问题 (11.15) 也有最优解，而且两问题的最优值相等.

19. 设上一题的条件成立．证明下面的结论.

(i) 设 x^* 是问题 (11.15) 的最优解， (x^*,u^*,v^*) 是问题 (11.16) 的最优解．则 $x^{*T}v^*=0$.

(ii) 设 x^* 是问题 (11.15) 的可行点且使得， (x^*,u^*,v^*) 是问题 (11.16) 的可行点并满足 $x^{*T}v^*=0$, 则 x^* 是问题 (11.15) 的最优解， (x^*,u^*,v^*) 是问题 (11.16) 的最优解.

第十二章　约束问题算法 (I) — 增广目标函数法

本章，我们考察约束最优化问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(x) \geq 0,\ i \in \mathcal{I} = \{1, \ldots, m_1\}, \\ & h_j(x) = 0,\ j \in \mathcal{E} = \{m_1+1, \ldots, m\}, \end{aligned}$$

其中函数 $f, g_i, i \in \mathcal{I}, h_j, j \in \mathcal{E}$ 连续可微．记

$$g_{\mathcal{I}}(x) = (g_1(x), \ldots, g_{m_1}(x))^T, \quad h_{\mathcal{E}}(x) = (h_{m_1+1}(x), \ldots, h_m(x))^T.$$

则上面的约束问题可等价地写成

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & g_{\mathcal{I}}(x) \geq 0, \\ & h_{\mathcal{E}}(x) = 0. \end{aligned} \tag{12.1}$$

问题 (12.1) 的可行域为

$$D = \{x \mid g_{\mathcal{I}}(x) \geq 0,\ h_{\mathcal{E}}(x) = 0\}.$$

§12.1　罚函数法

求解约束问题 (12.1) 的一类重要的算法称为序列无约束问题算法．该类算法通过求解一系列无约束问题的解来逼近问题 (12.1) 的解．罚函数法是序列无约束问题算法的典型代表．

§12.1.1　外点罚函数法

定义函数 $F: R^n \to R$ 如下：

$$F(x) = \begin{cases} f(x), & x \in D, \\ +\infty, & x \notin D. \end{cases}$$

容易看出，约束问题 (12.1) 的解等价于下面的无约束问题的解：

$$\min F(x), \qquad x \in R^n.$$

然而，函数 F 在可行域 D 的边界不连续，因此，难以直接通过求解 F 的极小值来获得问题 (12.1) 的解．

外点罚函数法的基本思想是构造连续可微的辅助函数 $F_\mu: R^n \to R$, 其中参数 $\mu > 0$. 函数 F_μ 在可行域 D 的内部的取值与问题 (12.1) 的目标函数 f 的取值相等，而在可行域 D 的外部取值远大于目标函数 f 的值．换句话说，对可行域外部点的目标函数值加以惩罚，使得无约束问题 $\min F_\mu(x)$ 的解是约束问题 (12.1) 的近似解．而且，当 $\mu \to \infty$ 时，问题 $\min F_\mu(x)$ 的解 $x(\mu)$ 趋于约束问题 (12.1) 的解．

我们先从一个具体的例子出发，了解外点罚函数法的基本思想．考察仅有一个不等式约束的约束问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = x^2 \\ \text{s.t.} \quad & g(x) = -x - 1 \geq 0. \end{aligned} \tag{12.2}$$

该问题的可行域以及最优解分别为 $D = (-\infty, -1]$ 和 $x^* = -1$. 如图 12.1 所示.

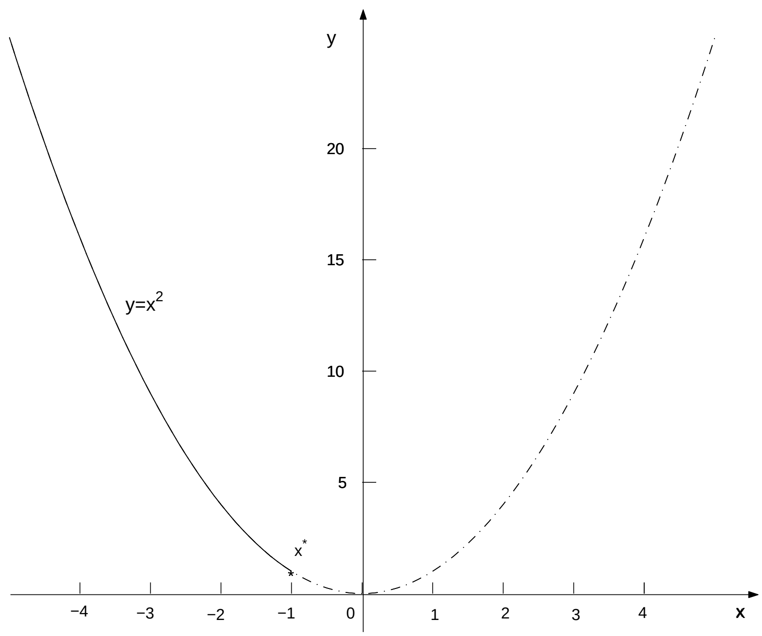

图 12.1 问题 (12.2) 的可行域和最优解.

令

$$S(x) = \min{}^2\{g(x), 0\}.$$

则 $S(x) = 0$ 当且仅当 $x \in D$. 再令

$$P_\mu(x) = \frac{1}{2}\mu S(x) = \frac{1}{2}\mu \min{}^2\{g(x), 0\}.$$

若 $\mu > 0$ 较大，则函数 P_μ 对可行域以外的点进行了惩罚．构造辅助函数 F_μ

$$F_\mu(x) = f(x) + P_\mu(x) = f(x) + \frac{1}{2}\mu \min{}^2\{g(x), 0\}.$$

显然，

$$\begin{cases} F_\mu(x) = f(x), & \forall x \in D, \\ F_\mu(x) > f(x), & \forall x \notin D. \end{cases}$$

而且，当 x 远离可行域 D 时，有 $F_\mu(x) \gg f(x)$.

不难得到，无约束问题 $\min F_\mu(x)$ 的解为

$$x(\mu) = -\frac{\mu}{2+\mu}.$$

易知，当 $\mu \to +\infty$ 时， $x(\mu) \to -1 = x^*$. 图 12.2 中画出了无约束问题

$$\min F_\mu(x), \qquad x \in R^n \tag{12.3}$$

对应于不同的 μ 值函数 F_μ 的图象以及相应的无约束问题 (12.3) 的解的变化情况.

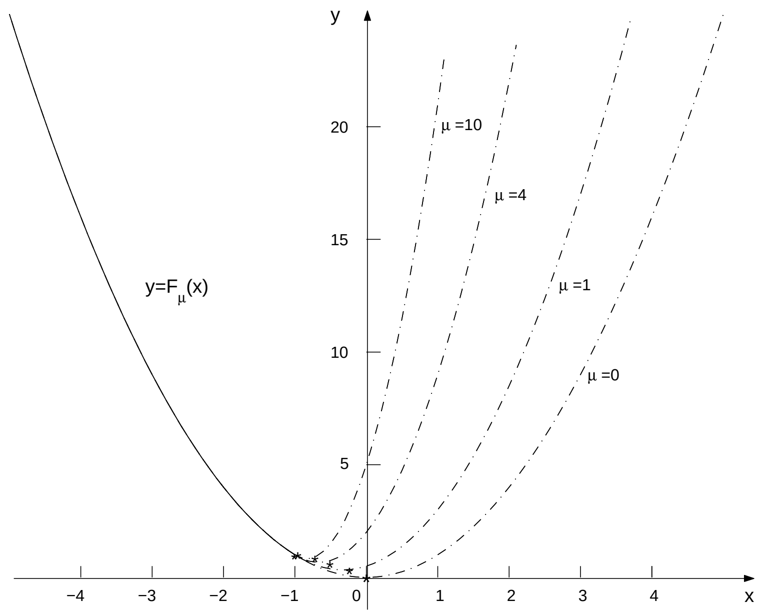

图 12.2： 增广目标函数 $F_\mu(x)$ 及其极小值点.

在上面的例子中，函数 P_μ 对可行域以外的点进行了惩罚．我们称之为问题 (12.2) 的罚函数.

类似于上面的例子，对一般的约束问题 (12.1), 我们引入如下函数：

$$S(x) = \|h_{\mathcal{E}}(x)\|^2 + \|\min\{g_{\mathcal{I}}(x), 0\}\|^2, \qquad P_\mu(x) = \frac{1}{2}\mu S(x), \qquad F_\mu(x) = f(x) + P_\mu(x). \tag{12.4}$$

显然有 $F_\mu(x) = f(x), \forall x \in D$. 而且，当 $\mu > 0$ 很大时，对任何 $x \notin D$, 有 $F_\mu(x) \gg f(x)$. 因此，上面定义的 P_μ 是一个罚函数．我们称函数 F_μ 为增广目标函数，其中参数 $\mu > 0$ 称为罚参数．我们称函数 S 为问题 (12.1) 的约束违反度． $S(x)$ 的大小度量了点 x 违反问题 (12.1) 的约束条件的程度.

利用增广目标函数 F_μ, 我们可构造如下外点罚函数法.

算法 12.1（**外点罚函数法**）

步 *0* 取初始点 $x^{(0)} \in R^n$. 罚参数序列 $\{\mu_k\}$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *1* 构造增广目标函数

$$F_{\mu_k}(x) = f(x) + P_{\mu_k}(x) = f(x) + \frac{1}{2}\mu_k\Big(\|h_{\mathcal{E}}(x)\|^2 + \|\min\{g_{\mathcal{I}}(x), 0\}\|^2\Big).$$

步 *2* 求解无约束问题

$$\min F_{\mu_k}(x), \quad x \in R^n$$

得解 $x^{(k)}$.

步 *3* 若 $P_{\mu_k}(x^{(k)}) \le \epsilon$ 或

$$-\min\{g_i(x^{(k)}) \,\Big|\, i \in \mathcal{I}\} \le \epsilon, \quad \max\{|h_j(x^{(k)})| \,\Big|\, j \in \mathcal{E}\} \le \epsilon,$$

则得解 $x^{(k)}$, 否则, 令 $k := k+1$. 转步 *1*.

例 12.1.1 用外点罚函数法求解约束问题

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{6}x_2^2 \\ \text{s.t.} & h(x) = x_1 + x_2 - 1 = 0. \end{array}$$

取罚参数序列为 $\mu_k = 2^{k-1}$.

解 构造增广目标函数 F_μ 如下:

$$F_\mu(x) = f(x) + \frac{1}{2}\mu h^2(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{6}x_2^2 + \frac{1}{2}\mu(x_1 + x_2 - 1)^2.$$

由计算得

$$\nabla F_\mu(x) = (x_1 + \mu(x_1 + x_2 - 1),\ \frac{1}{3}x_2 + \mu(x_1 + x_2 - 1))^T.$$

由于函数 F_μ 是二次凸函数，因此，无约束问题 $\min F_\mu(x)$ 的解等价于方程组 $\nabla F_\mu(x) = 0$ 的解，即方程组

$$\begin{cases} x_1 + \mu(x_1 + x_2 - 1) & = & 0, \\ \frac{1}{3}x_2 + \mu(x_1 + x_2 - 1) & = & 0 \end{cases}$$

的解．解此方程组得解

$$x_\mu = (\frac{\mu}{1+4\mu},\ \frac{3\mu}{1+4\mu})^T.$$

因此，外点罚函数法产生的点列为

$$x^{(k)} = (\frac{2^{k-1}}{1+2^{k+1}},\ \frac{3\times 2^{k-1}}{1+2^{k+1}})^T.$$

取极限得 $x^{(k)} \to x^* = (1/4,\ 3/4)^T$.

外点罚函数法具有如下性质:

引理 12.1.1 设函数 S 和 P_μ 由 (12.4) 定义, $\{x^{(k)}\}$ 由算法 *12.1* 产生且罚参数序列 $\{\mu_k\}$ 单调递增. 则

(1) 序列 $\{S(x^{(k)})\}$ 关于 k 单调非增.

(2) 序列 $\{f(x^{(k)})\}$ 关于 k 单调非降.

(3) 序列 $\{F_{\mu_k}(x^{(k)})\}$ 关于 k 单调非降.

证明 (1) 由 $x^{(k)}$ 的定义知

$$\begin{cases} F_{\mu_k}(x^{(k)}) & \leq & F_{\mu_k}(x^{(k-1)}), \\ F_{\mu_{k-1}}(x^{(k-1)}) & \leq & F_{\mu_{k-1}}(x^{(k)}). \end{cases}$$

上面的两式相加得

$$\frac{1}{2}(\mu_k - \mu_{k-1})(S(x^{(k)}) - S(x^{(k-1)})) \leq 0.$$

因此, $S(x^{(k)}) \leq S(x^{(k-1)})$, 即 (1) 成立.

(2) 由 $F_{\mu_{k-1}}(x^{(k-1)}) \leq F_{\mu_{k-1}}(x^{(k)})$ 得

$$f(x^{(k-1)}) \leq f(x^{(k)}) + \frac{1}{2}\mu_{k-1}(S(x^{(k)}) - S(x^{(k-1)})) \leq f(x^{(k)}),$$

即 (2) 成立.

(3) 由 F_μ 以及 $x^{(k)}$ 的定义得

$$F_{\mu_k}(x^{(k)}) \leq F_{\mu_k}(x^{(k+1)}) = f(x^{(k+1)}) + \frac{1}{2}\mu_k S(x^{(k+1)}) \leq f(x^{(k+1)}) + \frac{1}{2}\mu_{k+1} S(x^{(k+1)}) = F_{\mu_{k+1}}(x^{(k+1)}),$$

即 (3) 成立. **证毕**

引理 12.1.2 设函数 S 和 P_μ 由 (12.4) 定义, $\{x^{(k)}\}$ 由算法 *12.1* 产生且罚参数序列 $\{\mu_k\}$ 单调递增. 记 $\delta_k = S(x^{(k)})$. 则 $x^{(k)}$ 也是约束问题

$$\min f(x) \quad \text{s.t. } S(x) \leq \delta_k \tag{12.5}$$

的解.

证明 设 x 是问题 (12.5) 的可行点. 我们有

$$\begin{aligned} 0 &\leq \frac{1}{2}\mu_k[S(x^{(k)}) - S(x)] \\ &= [F_{\mu_k}(x^{(k)}) - F_{\mu_k}(x)] + [f(x) - f(x^{(k)})] \\ &\leq f(x) - f(x^{(k)}). \end{aligned}$$

因此, $x^{(k)}$ 是问题 (12.5) 的解. **证毕**

注意到 $S(x) = 0$ 等价于 $x \in D$, 问题 (12.1) 等价于

$$\min f(x) \quad \text{s.t. } S(x) \leq 0.$$

上面的引理说明, 若 δ_k 充分小, 则问题 (12.5) 是约束问题 (12.1) 的近似. 因此, $x^{(k)}$ 可以看成是问题 (12.1) 的一个近似解.

外点罚函数法的收敛性如下:

定理 12.1.1 设函数 $f, g_i, h_j, i \in \mathcal{I}, j \in \mathcal{E}$ 连续且约束问题 (12.1) 的解存在. 设 $\{x^{(k)}\}$ 由算法 *12.1* 产生，其中罚参数序列 $\{\mu_k\}$ 单调递增且趋于 $+\infty$. 则 $\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点都是问题 (12.1) 的解.

证明 设 $\{x^{(k)}\}_{k\in K} \to \bar{x}^*$. 又设 x^* 是问题 (12.1) 的最优解. 由于 $x^{(k)}$ 是无约束问题

$$\min F_{\mu_k}(x), \qquad x \in R^n$$

的解，故有

$$F_{\mu_k}(x^{(k)}) \le F_{\mu_k}(x^*) = f(x^*) + \frac{1}{2}\mu_k S(x^*) = f(x^*),$$

即

$$F_{\mu_k}(x^{(k)}) = f(x^{(k)}) + \frac{1}{2}\mu_k S(x^{(k)}) \le f(x^*).$$

由此可得

$$0 \le S(x^{(k)}) \le \frac{2(f(x^*) - f(x^{(k)}))}{\mu_k}.$$

在上式两端令 $k \in K, k \to \infty$, 注意到 $\{x^{(k)}\}_{k\in K} \to \bar{x}^*$, $\mu_k \to \infty$, 故得

$$f(\bar{x}^*) \le f(x^*) \quad 且 \quad S(\bar{x}^*) = 0,$$

即 $\bar{x}^*$ 可行且 $f(\bar{x}^*) \le f(x^*)$. 但 x^* 是问题 (12.1) 的解，因此 $\bar{x}^*$ 也是问题 (12.1) 的解. **证毕**

§12.1.2 内点罚函数法

上一节介绍的外点罚函数法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 位于问题 (12.1) 的可行域 D 的外部. 因此，算法 12.1 称为外点罚函数法. 本节介绍内点罚函数法. 与外点罚函数法相反，内点罚函数法产生的点列从可行域的内部逼近问题的解.

考察约束问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(x) \ge 0, \;\; i \in \mathcal{I}. \end{aligned} \tag{12.6}$$

记问题 (12.6) 的可行域为

$$D = \{x \mid g_i(x) \ge 0, i \in \mathcal{I}\}.$$

我们称集合

$$D_0 = \{x \mid g_i(x) > 0, i \in \mathcal{I}\}$$

为问题 (12.6) 的严格可行域. 假设 $D_0 \ne \emptyset$.

内点罚函数法的基本思想是：构造辅助 (光滑) 函数 F_μ, 该函数在严格可行域 D_0 以外的取值为无穷大，而且，当点 x 从 D_0 趋于 D 的边界时，函数值趋于无穷大. 这样，无约束问题 $\min F_\mu(x)$ 的解一定在 D_0 内. 我们希望当 μ 趋于无穷大时，无约束问题 $\min F_\mu(x)$ 的解 $x(\mu)$ 趋于约束问题 (12.6) 的解. 辅助函数 F_μ 在 D 的边界筑起了一道很高的墙，把无约束问题 $\min F_\mu(x)$ 的解挡在了可行域 D 的内部. 因此，内点罚函数法也称为障碍函数法.

令

$$F_\mu(x) = f(x) - \mu^{-1}\sum_{i\in\mathcal{I}} \log g_i(x). \tag{12.7}$$

易知，函数 F_μ 满足上述辅助函数的要求．我们称函数

$$S(x) = -\sum_{i\in\mathcal{I}} \log g_i(x)$$

为对数障碍函数.

对约束问题 (12.2), 我们有

$$F_\mu(x) = x^2 - \mu^{-1}\log[-(x+1)],$$

相应的无约束问题

$$\min F_\mu(x), \qquad x \in R$$

的解为

$$x(\mu) = -\frac{1+\sqrt{1+2\mu^{-1}}}{2} \longrightarrow -1 = x^*,\ \mu \to \infty.$$

图 12.3 画出了对应于不同的 μ 值时函数 F_μ 的图象以及相应的无约束问题 $\min F_\mu(x)$ 的解的变化情况.

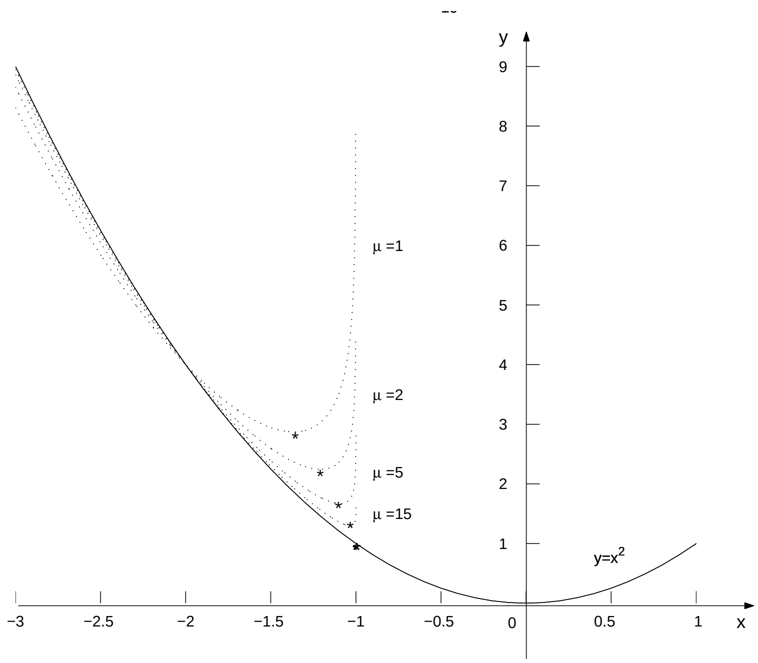

图 12.3： 辅助目标函数 $F_\mu(x)$ 及其极小值点.

内点罚函数法的计算步骤如下:

算法 12.2 （ 内点罚函数法 ）

步 *0* 取初始点 $x^{(0)} \in D_0$. 罚参数序列 $\{\mu_k\}$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *1* 构造辅助函数

$$F_{\mu_k}(x) = f(x) + \mu_k^{-1} S(x) = f(x) - \mu_k^{-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} \log g_i(x).$$

步 *2* 以 $x^{(k-1)}$ 作为初始点（ $k = 0$ 是初始点任意），求解无约束问题 $\min F_{\mu_k}(x),\, x \in R^n$ 得解 $x^{(k)}$.

步 *3* 若

$$-\mu_k^{-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} \log g_i(x^{(k)}) \le \epsilon,$$

则得解 $x^{(k)}$. 否则，令 $k := k + 1$. 转步 *1*.

例 12.1.2 用内点罚函数法求解如下约束问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = \tfrac{1}{2}(x_1 + 1)^2 + x_2 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 - 1 \ge 0, \\ & x_2 \ge 0. \end{aligned}$$

取 $\mu_k = 10^k,\, k = 1, 2, \ldots$.

解 构造辅助函数

$$F_\mu(x) = f(x) - \mu^{-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} \log g_i(x) = \frac{1}{2}(x_1 + 1)^2 + x_2 - \mu^{-1}(\log(x_1 - 1) + \log x_2).$$

求解无约束问题

$$\min F_\mu(x), \qquad x \in R^2$$

得解

$$x(\mu) = ((1 + \mu^{-1})^{1/2},\, \mu^{-1})^T.$$

因此,

$$x(\mu_k) = ((1 + 10^{-k})^{1/2},\, 10^{-k})^T, \qquad k = 1, 2, \ldots.$$

取极限得

$$x(\mu_k) \to (1, 0)^T, \quad k \to \infty.$$

类似于引理 12.1.1 和 12.1.2, 可以证明，内点罚函数法具有如下性质：

引理 12.1.3 设 $\{x^{(k)}\}$ 由算法 *12.2* 产生且罚参数序列 $\{\mu_k\}$ 单调递增. 则

(1) 序列 $\{S(x^{(k)})\}$ 关于 k 单调非降.

(2) 序列 $\{F_{\mu_k}(x^{(k)})\}$ 关于 k 单调非增.

(3) 记 $\delta_k = S(x^{(k)})$. 则 $x^{(k)}$ 也是下述约束问题的解：

$$\min f(x) \quad \text{s.t. } S(x) \le \delta_k.$$

上面的 (3) 说明，当 δ_k 充分大时， $x^{(k)}$ 是问题 (12.6) 的一个近似解.

内点罚函数法有如下收敛性定理，其证明可参看 [27, 定理 10.3.4].

定理 12.1.2 设函数 $f, g_i, i \in \mathcal{I}$ 连续可微， D_0 非空且其闭包为 D. 再设问题 (12.6) 有解， $\{x^{(k)}\}$ 由算法 *12.2* 产生，其中罚参数序列 $\{\mu_k\}$ 单调递增且趋于 $+\infty$. 则 $\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点都是问题 (12.6) 的解.

§12.2 乘子法

§12.2.1 等式约束问题的乘子法

从罚函数法的收敛性定理可以看出，要使得无约束问题 $\min F_{\mu_k}(x)$ 的解是约束问题 (12.1) 的较好的近似，罚参数 μ_k 必须很大. 但当 μ_k 很大时，函数 F_{μ_k} 的 Hessian 阵会出现病态. 下面我们以求解等式约束问题

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & h_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E} = \{m_1+1, \ldots, m\} \end{array} \tag{12.8}$$

的外点罚函数法为例估计 $\nabla^2 F_{\mu_k}(x^{(k)})$ 的条件数. 此时，我们有

$$F_{\mu_k}(x) = f(x) + \frac{1}{2}\mu_k \sum_{i\in\mathcal{E}} h_i^2(x),$$

$$\nabla F_{\mu_k}(x) = \nabla f(x) + \mu_k \sum_{i\in\mathcal{E}} h_i(x)\nabla h_i(x),$$

$$\nabla^2 F_{\mu_k}(x) = \nabla^2 f(x) + \mu_k \sum_{i\in\mathcal{E}} \nabla h_i(x)\nabla h_i(x)^T + \mu_k \sum_{i\in\mathcal{E}} h_i(x)\nabla^2 h_i(x). \tag{12.9}$$

由 $\nabla F_{\mu_k}(x^{(k)}) = 0$ 得

$$\nabla f(x^{(k)}) + \mu_k \sum_{i\in\mathcal{E}} h_i(x^{(k)})\nabla h_i(x^{(k)}) = 0. \tag{12.10}$$

设 x^* 是问题 (12.8) 的最优解， $\{x^{(k)}\} \to x^*$ 且在 x^* 处某种约束品性成立. 由 K-K-T 条件，有

$$\nabla f(x^*) - \sum_{i\in\mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla h_i(x^*) = 0.$$

在 (12.10) 中令 $k \to \infty$ 可得

$$\mu_k h_i(x^{(k)}) \to -\lambda_i^*.$$

由此，

$$\nabla^2 f(x^{(k)}) + \mu_k \sum_{i\in\mathcal{E}} h_i(x^{(k)})\nabla^2 h_i(x^{(k)}) \longrightarrow \nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*)$$

$$\sum_{i\in\mathcal{E}} \nabla h_i(x^{(k)})\nabla h_i(x^{(k)})^T \longrightarrow \sum_{i\in\mathcal{E}} \nabla h_i(x^*)\nabla h_i(x^*)^T.$$

由 $\nabla^2 F_{\mu_k}(x)$ 的表达式，知当 k 充分大时， $\nabla^2 F_{\mu_k}(x^{(k)})$ 病态.

由上面的分析可以看出，导致 $\nabla^2 F_{\mu_k}(x^{(k)})$ 病态的原因是由于罚参数 μ_k 过大．另一方面，要使得 $x^{(k)}$ 是问题 (12.8) 的解 x^* 的近似， μ_k 必须充分大．事实上，由于 $x^{(k)}$ 是无约束问题 $\min F_{\mu_k}(x)$ 的解，故满足 (12.10). 要使得 $x^{(k)} \approx x^*$, 必有 $h_i(x^{(k)}) \approx 0$. 若 μ_k 较小，则由 (12.10) 有

$$\nabla f(x^*) \approx \nabla f(x^{(k)}) \approx \nabla F_{\mu_k}(x^{(k)}) = 0.$$

而在一般情况下， $\nabla f(x^*) \neq 0$. 因此，要使得 $x^{(k)} \approx x^*$, 罚参数 μ_k 必须充分大.

为了克服由于罚参数过大而引起的数值计算上的困难，我们构造函数 $L_\mu(x)$, 使得当罚参数 μ 相对较小时，无约束问题 $\min L_\mu(x)$ 的解 $x(\mu)$ 也是约束问题 (12.8) 的解的一个很好的近似．设 x^* 是问题 (12.8) 的最优解， λ^* 是相应的 Lagrange 乘子．定义函数 $\tilde{L}_\mu(x)$ 如下：

$$\tilde{L}_\mu(x) = L(x, \lambda^*) + \frac{1}{2}\mu S(x),$$

其中，

$$L(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i h_i(x)$$

是问题 (12.8) 的 Lagrange 函数，

$$S(x) = \|h_{\mathcal{E}}(x)\|^2 = \sum_{i \in \mathcal{E}} h_i(x)^2$$

是约束破坏度函数.

设 $x(\mu)$ 是无约束问题

$$\min \tilde{L}_\mu(x), \qquad x \in R^n$$

的解．则有

$$0 = \nabla \tilde{L}_\mu(x(\mu)) = \nabla_x L(x(\mu), \lambda^*) + \mu \sum_{i \in \mathcal{E}} h_i(x(\mu)) \nabla h_i(x(\mu)).$$

若 $x(\mu)$ 近似可行，即 $h_i(x(\mu)) \approx 0,\ i \in \mathcal{E}$, 则有 $\nabla_x L(x(\mu), \lambda^*) \approx 0$. 因此， $x(\mu)$ 是问题 (12.8) 的一个近似 K-K-T 点．此时，无须要求罚参数 μ 充分大．由此可以推断，若在算法 12.1 中用 $\tilde{L}_\mu$ 取代 F_μ, 可望克服算法 12.1 中由于罚参数 μ 过大带来的数值计算上的困难．由于函数 $\tilde{L}_\mu$ 中含有未知量 λ^*, 因此，实际计算 $\tilde{L}_\mu$ 是不可行的．为此，我们可采取逐次逼近的形式．令

$$L_\mu(x, \lambda) = L(x, \lambda) + \frac{1}{2}\mu S(x) = f(x) - \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i h_i(x) + \frac{1}{2}\mu \sum_{i \in \mathcal{E}} h_i^2(x). \tag{12.11}$$

称上式定义的 L_μ 为问题 (12.8) 的增广 Lagrange 函数．显然，若 $\lambda \approx \lambda^*$, 则 $L_\mu(x, \lambda) \approx \tilde{L}_\mu(x)$. 增广 Lagrange 函数 L_μ 是在 Lagrange 函数的基础上，对非可行点加以惩罚产生的.

利用增广 Lagrange 函数 L_μ, 可建立类似于算法 12.1 的罚函数法．我们称相应的算法为乘子法．乘子法实现过程如下：设在第 k 次迭代的罚参数 μ_k 已给定，并设已有了对乘子向量 λ^* 的估计 $\lambda^{(k)}$. 求解关于变量 x 的无约束问题 $\min L_{\mu_k}(x, \lambda^{(k)})$ 得解 $x^{(k)}$. 在此基础上，对乘子向量 λ^* 进一步估计得 $\lambda^{(k+1)}$. 下面的定理给出了这种思想的合理性.

定理 12.2.1 设 $x^{(k)}$ 是无约束问题

$$\min L_{\mu_k}(x,\lambda^{(k)}),\qquad x\in R^n \tag{12.12}$$

的解. 则 $x^{(k)}$ 也是约束问题

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)\\ \text{s.t.} & h_i(x)=h_i(x^{(k)}),\ i\in\mathcal{E}\end{array} \tag{12.13}$$

的解.

证明 由于 $x^{(k)}$ 是无约束问题 (12.12) 的解，故有

$$L_{\mu_k}(x,\lambda^{(k)})\ge L_{\mu_k}(x^{(k)},\lambda^{(k)}),\qquad \forall x\in R^n,$$

即

$$f(x)-\sum_{i\in\mathcal{E}}\lambda_i^{(k)}h_i(x)+\frac{1}{2}\mu_k\sum_{i\in\mathcal{E}}h_i^2(x)\ge f(x^{(k)})-\sum_{i\in\mathcal{E}}\lambda_i^{(k)}h_i(x^{(k)})+\frac{1}{2}\mu_k\sum_{i\in\mathcal{E}}h_i^2(x^{(k)}).$$

从而，

$$f(x)-f(x^{(k)})\ge -\sum_{i\in\mathcal{E}}\lambda_i^{(k)}(h_i(x^{(k)})-h_i(x))+\frac{1}{2}\mu_k\sum_{i\in\mathcal{E}}(h_i^2(x^{(k)})-h_i^2(x)),\qquad \forall x\in R^n.$$

上式特别对满足 $h_i(x)=h_i(x^{(k)}),\ i\in\mathcal{E}$ 的所有 x 成立，即 $x^{(k)}$ 也是问题 (12.13) 的解. **证毕**

上面的定理说明，若 $x^{(k)}$ 近似可行，即 $S(x^{(k)})$ 充分小时， $x^{(k)}$ 是等式约束问题 (12.8) 的一个近似解.

下面，我们导出乘子 $\lambda^{(k)}$ 的迭代公式. 注意到 $x^{(k)}$ 是无约束问题 (12.12) 的解. 我们有

$$\begin{aligned}0 &= \nabla_x L_{\mu_k}(x^{(k)},\lambda^{(k)})\\ &= \nabla f(x^{(k)})-\sum_{i\in\mathcal{E}}\lambda_i^{(k)}\nabla h_i(x^{(k)})+\mu_k\sum_{i\in\mathcal{E}}h_i(x^{(k)})\nabla h_i(x^{(k)})\\ &= \nabla f(x^{(k)})-\sum_{i\in\mathcal{E}}[\lambda_i^{(k)}-\mu_k h_i(x^{(k)})]\nabla h_i(x^{(k)}).\end{aligned}$$

另一方面，由 K-K-T 条件，若 x^* 是问题 (12.8) 的解，且 λ^* 是相应的 Lagrange 乘子，则有

$$\nabla f(x^*)-\sum_{i\in\mathcal{E}}\lambda_i^*\nabla h_i(x^*)=0.$$

比较上面两式，我们可取如下乘子迭代格式：

$$\lambda_i^{(k+1)}=\lambda_i^{(k)}-\mu_k h_i(x^{(k)}),\qquad i\in\mathcal{E}.$$

基于上述讨论，我们得到如下求解等式约束问题 (12.8) 的乘子法.

算法 12.3 **（等式约束问题的乘子法）**

步 *0* 取初始点 $x^{(0)}\in R^n$, 初始乘子 $\lambda_i^{(0)},\ i\in\mathcal{E}$. 给定罚参数序列 $\{\mu_k\}$, 精度 $\epsilon>0$. 令 $k:=0$.

步 *1* 构造增广 *Lagrange* 函数

$$L_{\mu_k}(x,\lambda^{(k)})=L(x,\lambda^{(k)})+\frac{1}{2}\mu_k S(x),$$

其中，

$$L(x,\lambda^{(k)})=f(x)-\sum_{i\in\mathcal{E}}\lambda_i^{(k)}h_i(x),\qquad S(x)=\|h_{\mathcal{E}}(x)\|^2=\sum_{i\in\mathcal{E}}h_i^2(x).$$

步 *2* 以 $x^{(k-1)}$ 作为初始点（ $k=0$ 时，初始点任意），求解无约束问题

$$\min L_{\mu_k}(x,\lambda^{(k)}),\quad x\in R^n$$

得解 $x^{(k)}$.

步 *3* 若

$$\|h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})\|=S(x^{(k)})^{1/2}\le\epsilon,$$

则得解 $x^{(k)}$.

步 *4* 进行乘子迭代：

$$\lambda_i^{(k+1)}=\lambda_i^{(k)}-\mu_k h_i(x^{(k)}),\qquad i\in\mathcal{E}.$$

令 $k:=k+1$. 转步 *1.*

例 12.2.1 用乘子法求解下面的约束问题

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)=x_1^2-3x_2-x_2^2\\ \text{s.t.} & h(x)=x_2=0.\end{array}$$

取 $\lambda_0=-1$, $\mu_k=6$. 该问题的最优解为 $x^*=(0,0)^T$, 相应的 *Lagrange* 乘子为 $\lambda^*=-3$.

解 该问题的增广 Lagrange 函数为

$$L_\mu(x,\lambda)=x_1^2-3x_2-x_2^2-\lambda x_2+\frac{1}{2}\mu x_2^2.$$

无约束问题 $\min L_{\mu_k}(x,\lambda_k)$ 的解为

$$x^{(k)}=\Big(0,\frac{3+\lambda_k}{\mu_k-2}\Big)^T=\Big(0,\frac{3+\lambda_k}{4}\Big)^T.$$

乘子迭代格式为：

$$\begin{aligned}\lambda_{k+1}&=\lambda_k-\mu_k x_2^{(k)}=-\frac{9}{2}-\frac{1}{2}\lambda_k\\ &=-\frac{9}{2}\Big(1-\frac{1}{2}+\frac{1}{2^2}-\cdots+(-1)^k\frac{1}{2^k}\Big)+(-1)^k\frac{1}{2^{k+1}}\lambda_0\\ &=-3\Big(1-(-1)^{k+1}\frac{1}{2^{k+1}}\Big)+(-1)^{k+1}\frac{1}{2^{k+1}}\\ &=-3+(-1)^{k+1}\frac{1}{2^k}\to-3=\lambda^*.\end{aligned}$$

从而

$$x^{(k)} = \left(0,\ (-1)^k \frac{1}{2^{k+1}}\right)^T \to (0,0)^T = x^*.$$

上面的例子说明，乘子法中 μ_k 不必趋于 $+\infty$. 下面的定理从理论上证明，若在问题 (12.8) 的解 x^* 处， Lagrange 乘子 λ 的精确值 λ^* 已知，则对所有充分大的 $\mu > 0$, x^* 也是无约束问题

$$\min L_\mu(x,\lambda^*) = f(x) - \sum_{j\in\mathcal{E}} \lambda_j^* h_j(x) + \frac{1}{2}\mu \sum_{j\in\mathcal{E}} h_j^2(x), \quad x \in R^n \tag{12.14}$$

的解.

定理 12.2.2 *设 x^* 是问题 (12.8) 的一个局部最优解且 LICQ 在 x^* 处成立，即 $\nabla h_j(x^*)$, $j \in \mathcal{E}$ 线性无关. 再设在 x^* 处二阶充分条件成立. 则存在 $\bar{\mu} > 0$, 使得对所有 $\mu \geq \bar{\mu}$, x^* 是无约束问题*

$$\min L_\mu(x,\lambda^*) = f(x) - \sum_{i\in\mathcal{E}} \lambda_i^* h_i(x) + \frac{1}{2}\mu \sum_{i\in\mathcal{E}} h_i^2(x) \tag{12.15}$$

的严格局部最优解，其中 λ^* 为解 x^* 处的 Lagrange 乘子.

证明 我们证明 x^* 满足问题 (12.15) 解的二阶充分条件，即

$$\nabla_x L_\mu(x^*,\lambda^*) = 0, \qquad \nabla_x^2 L_\mu(x^*,\lambda^*) \ \text{正定}.$$

从而，由定理 2.1.4 知 x^* 是问题 (12.15) 的一个严格局部最优解.

由 K-K-T 条件 (定理 9.2.1) 知，对任何 $\mu > 0$,

$$\begin{aligned}
\nabla_x L_\mu(x^*,\lambda^*) &= \nabla f(x^*) - \sum_{j\in\mathcal{E}} \lambda_j^* \nabla h_j(x^*) + \mu \sum_{j\in\mathcal{E}} h_j(x^*) \nabla h_j(x^*) \\
&= \nabla f(x^*) - \sum_{j\in\mathcal{E}} \lambda_j^* \nabla h_j(x^*) \\
&= \nabla_x L(x^*,\lambda^*) = 0.
\end{aligned}$$

下面证明：当 $\mu > 0$ 充分大时，矩阵 $\nabla_x^2 L_\mu(x^*,\lambda^*)$ 正定. 注意到 x^* 满足 $h_j(x^*) = 0, \forall j \in \mathcal{E}$, 直接计算得

$$\nabla_x^2 L_\mu(x^*,\lambda^*) = \nabla_x^2 L(x^*,\lambda^*) + \mu \sum_{j\in\mathcal{E}} \nabla h_j(x^*) \nabla h_j(x^*)^T \triangleq \nabla_x^2 L(x^*,\lambda^*) + \mu A^T A,$$

其中， $A = h'_{\mathcal{E}}(x^*)$. 由 LICQ 知，矩阵 A 行满秩. 设 $p \in R^n$ 任意. 对 p 作如下正交分解:

$$p = u + A^T v, \qquad v \in R^{m-m_1},\ u \in \text{Null }(A),$$

其中， $\text{Null}(A)$ 表示矩阵 A 的零空间，即满足 $Aw = 0$ 的全体 $w \in R^n$ 构成的集合. 由此可得

$$\begin{aligned}
p^T \nabla_x^2 L_\mu(x^*,\lambda^*) p &= (u + A^T v)^T \nabla_x^2 L(x^*,\lambda^*)(u + A^T v) + \mu (u + A^T v)^T A^T A (u + A^T v) \\
&= u^T \nabla_x^2 L(x^*,\lambda^*) u + 2u^T \nabla_x^2 L(x^*,\lambda^*) A^T v \\
&\quad + v^T A \nabla_x^2 L(x^*,\lambda^*) A^T v + \mu v^T (AA^T)(AA^T) v.
\end{aligned} \tag{12.16}$$

由约束问题最优解的二阶充分条件 (定理 9.2.3) 知：存在常数 $a>0$ 使得

$$u^T\nabla_x^2 L(x^*,\lambda^*)u \geq a\|u\|^2.$$

由于 A 行满秩，矩阵 AA^T 对称正定．令 $b>0$ 表示 AA^T 的最小特征值．记

$$c=\|\nabla_x^2 L(x^*,\lambda^*)A^T\|,\quad d=\|A\nabla_x^2 L(x^*,\lambda^*)A^T\|.$$

由 (12.16), 我们有

$$\begin{aligned} p^T\nabla_x^2 L_\mu(x^*,\lambda^*)p &\geq a\|u\|^2-2c\|u\|\|v\|-d\|v\|^2+b^2\mu\|v\|^2 \\ &= a\Big(\|u\|-\frac{c}{a}\|v\|\Big)^2+(b^2\mu-d-\frac{c^2}{a})\|v\|^2. \end{aligned}$$

取 $\bar\mu$ 为满足不等式 $\bar\mu>\frac{d}{b^2}+\frac{c^2}{ab^2}$ 的任意常数，则当 $\mu\geq\bar\mu$ 时，

$$p^T\nabla_x^2 L_\mu(x^*,\lambda^*)p\geq 0.$$

而且，上式中等号成立的充要条件是 $u=0$, $v=0$, 或等价地 $p=0$. 从而， $\nabla_x^2 L_\mu(x^*,\lambda^*)$ 正定． **证毕**

§12.2.2 一般约束问题的乘子法

我们先考察不等式约束问题的乘子法．对于不等式约束问题

$$\begin{aligned} &\min\quad f(x) \\ &\text{s.t.}\quad g_i(x)\geq 0,\ i\in\mathcal{I}=\{1,2,\ldots,m_1\}, \end{aligned}\tag{12.17}$$

引入松弛变量 z_i, $i\in\mathcal{I}$, 上面的问题等价于如下等式约束问题：

$$\begin{aligned} &\min\quad f(x) \\ &\text{s.t.}\quad \bar g_i(x,z)\stackrel{\triangle}{=}g_i(x)-z_i^2=0,\ i\in\mathcal{I}. \end{aligned}\tag{12.18}$$

因此，可利用算法 12.3 求解问题 (12.18). 该问题的增广 Lagrange 函数为

$$\begin{aligned} \bar L_\mu(x,z,\lambda) &= f(x)-\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i\bar g_i(x,z)+\frac{1}{2}\mu\sum_{i\in\mathcal{I}}\bar g_i^2(x,z) \\ &= f(x)-\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i(g_i(x)-z_i^2)+\frac{1}{2}\mu\sum_{i\in\mathcal{I}}(g_i(x)-z_i^2)^2. \end{aligned}$$

利用算法 12.3 求解问题 (12.18) 时，乘子迭代格式为

$$\lambda^{(k+1)}=\lambda^{(k)}-\mu_k(g_{\mathcal{I}}(x^{(k)})-z_k^2),\tag{12.19}$$

其中， $z_k^2=((z_1^{(k)})^2,(z_2^{(k)})^2,\ldots,(z_{m_1}^{(k)})^2)^T$, $(x^{(k)},z_k)$ 是下面的无约束问题

$$\min\bar L_{\mu_k}(x,z,\lambda^{(k)}),\quad (x,z)\in R^{n+m_1}$$

的解.

上面问题的维数 $n+m_1>n$. 为了降低问题的维数，我们对问题作如下简化：先对 z 求极小：

$$\min_z \bar{L}_\mu(x,z,\lambda), \quad z\in R^{m_1}. \tag{12.20}$$

令该问题的解为 $z=z(x)$. 然后再对 x 求极小：

$$\min_x \bar{L}_\mu(x,z(x),\lambda) \triangleq L_\mu(x,\lambda), \quad x\in R^n. \tag{12.21}$$

对给定的 x, λ 和 μ, 关于 z 的无约束问题 (12.20) 的解满足

$$\nabla_z \bar{L}_\mu(x,z,\lambda)=0,$$

即

$$z_i[\lambda_i-\mu(g_i(x)-z_i^2)]=0, \quad i\in\mathcal{I},$$

由此得

$$z_i^2=\max\{0,g_i(x)-\mu^{-1}\lambda_i\}=\mu^{-1}\max\{0,\,\mu g_i(x)-\lambda_i\}, \quad i\in\mathcal{I}, \tag{12.22}$$

即问题 (12.20) 的解 $z=z(x)$ 由 (12.22) 给出．从而，

$$\begin{aligned}\bar{g}_i(x,z(x)) &= g_i(x)-z_i^2(x)=g_i(x)-\mu^{-1}\max\{0,\,\mu g_i(x)-\lambda_i\}\\ &= \mu^{-1}\Big(\min\{\mu g_i(x),\,\lambda_i\}\Big)=\mu^{-1}\Big(\min\{\mu g_i(x)-\lambda_i,\,0\}+\lambda_i\Big).\end{aligned} \tag{12.23}$$

将此式代入到 (12.21) 得

$$\begin{aligned}L_\mu(x,\lambda) &= f(x)-\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i\bar{g}_i(x,z(x))+\frac{1}{2}\mu\sum_{i\in\mathcal{I}}\bar{g}_i^2(x,z(x))\\ &= f(x)-\mu^{-1}\sum_{i\in\mathcal{I}}\lambda_i\Big(\min\{\mu g_i(x)-\lambda_i,\,0\}+\lambda_i\Big)+\frac{1}{2}\mu^{-1}\sum_{i\in\mathcal{I}}\Big(\min\{\mu g_i(x)-\lambda_i,\,0\}+\lambda_i\Big)^2\\ &= f(x)+\frac{1}{2}\mu^{-1}\sum_{i\in\mathcal{I}}\Big(\min{}^2\{\mu g_i(x)-\lambda_i,\,0\}-\lambda_i^2\Big).\end{aligned}$$

将 (12.22) 代入到 (12.19) 可得乘子迭代格式如下：

$$\lambda_i^{(k+1)}=\max\{\lambda_i^{(k)}-\mu_k g_i(x^{(k)}),\,0\}, \quad i\in\mathcal{I}. \tag{12.24}$$

上面的讨论实际上给出了求解不等式约束问题 (12.17) 的乘子法．该算法的增广 Lagrange 函数为

$$L_\mu(x,\lambda)=f(x)+\frac{1}{2}\mu^{-1}\sum_{i\in\mathcal{I}}\Big(\min{}^2\{\mu g_i(x)-\lambda_i,\,0\}-\lambda_i^2\Big).$$

乘子迭代格式由 (12.24) 给出．算法的终止准则为 $\|\bar{g}_{\mathcal{I}}(x^{(k)},z(x^{(k)}))\|\le\epsilon$. 利用 (12.23), 该终止准则可等价地写成

$$\|\min\{g_{\mathcal{I}}(x^{(k)}),\;\mu_k^{-1}\lambda_{\mathcal{I}}^{(k)}\}\|\le\epsilon. \tag{12.25}$$

综合求解等式约束问题 (12.8) 与不等式约束问题 (12.17) 的乘子法，我们可构造求解一般约束问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(x) \ge 0,\ i \in \mathcal{I}, \\ & h_j(x) = 0,\ j \in \mathcal{E} \end{aligned} \tag{12.26}$$

的乘子法.

问题 (12.26) 的增广 Lagrange 函数为：

$$L_\mu(x,\lambda) = f(x) + \frac{1}{2}\mu^{-1}\sum_{i\in\mathcal{I}}\left(\min{}^2\{\mu g_i(x)-\lambda_i,\,0\}-\lambda_i^2\right) - \sum_{j\in\mathcal{E}}\lambda_j h_j(x) + \frac{1}{2}\mu\sum_{j\in\mathcal{E}}h_j^2(x). \tag{12.27}$$

相应的乘子迭代格式为：

$$\lambda_j^+ = \begin{cases} \lambda_j - \mu h_j(x), & j \in \mathcal{E}, \\ \max\{\lambda_i - \mu g_i(x),\,0\}, & i \in \mathcal{I}, \end{cases} \tag{12.28}$$

其中， x, μ, λ 表示当前迭代点的值， λ^+ 表示下一次迭代的乘子向量.

类似于算法 12.3, 求解一般约束问题 (12.26) 的乘子法如下：

算法 12.4（**乘子法**）

步 *0* 取初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 初始乘子向量 $\lambda^{(0)}$. 给定罚参数序列 $\{\mu_k\}$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *1* 由 (12.27) 构造增广 *Lagrange* 函数 $L_\mu(x,\lambda)$.

步 *2* 以 $x^{(k-1)}$ 作为初始点（ $k=0$ 时，初始点任意），求解无约束问题

$$\min L_{\mu_k}(x,\lambda^{(k)}), \quad x \in R^n$$

得解 $x^{(k)}$.

步 *3* 若

$$\|h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})\| + \|\min\{g_{\mathcal{I}}(x^{(k)}),\ \mu_k^{-1}\lambda_{\mathcal{I}}^{(k)}\}\| \le \epsilon,$$

则得解 $x^{(k)}$.

步 *4* 在 (12.28) 中取 $x = x^{(k)}$, $\lambda = \lambda^{(k)}$ 得 $\lambda^{(k+1)}$. 令 $k := k+1$. 转步 *1*.

例 12.2.2 用算法 *12.4* 求解下面的约束问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = x_1^2 + x_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & g(x) = x_1 - 1 \ge 0. \end{aligned}$$

取 $\mu_k = 4,\ \lambda_0 = 0$.

解 问题的增广 Lagrange 函数为

$$\begin{aligned} L_\mu(x,\lambda) &= x_1^2+x_2^2+\frac{1}{2}\mu^{-1}\Big[\min{}^2\{\mu(x_1-1)-\lambda,\ 0\}-\lambda^2\Big] \\ &= \begin{cases} x_1^2+x_2^2+\frac{1}{2}\mu(x_1-1)^2-\lambda(x_1-1), & 若\ x_1\le 1+\mu^{-1}\lambda, \\ x_1^2+x_2^2-\frac{1}{2}\mu^{-1}\lambda^2, & 若\ x_1>1+\mu^{-1}\lambda. \end{cases} \end{aligned}$$

直接计算可得

$$\frac{\partial L_\mu(x,\lambda)}{\partial x_1}=\begin{cases} 2x_1+\mu(x_1-1)-\lambda, & 若\ x_1\le 1+\mu^{-1}\lambda, \\ 2x_1, & 若\ x_1>1+\mu^{-1}\lambda. \end{cases}$$

且

$$\frac{\partial L_\mu(x,\lambda)}{\partial x_2}=2x_2.$$

由 $\nabla_x L_\mu(x,\lambda)=0$ 得无约束问题

$$\min_x L_\mu(x,\lambda_k),\quad x\in R^n$$

的极小值点

$$x^{(k)}=\Big(\frac{\lambda_k+\mu_k}{2+\mu_k},\ 0\Big)^T=(\frac{\lambda_k+4}{6},\ 0)^T.$$

乘子满足

$$\lambda_{k+1}=\max\{\lambda_k-4(x_1^{(k)}-1),\ 0\}=\max\{\frac{\lambda_k+4}{3},\ 0\}=\frac{\lambda_k+4}{3}.$$

因此， $\lambda_k\to 2,\ x^{(k)}\to(1,0)^T,\ k\to\infty.$

由例 12.2.1 和 12.2.2 可以看出，用乘子法产生的点列收敛于问题的解．而且，罚参数 μ_k 不必趋于 $+\infty$.

习题 12

1. 设函数 $f,\ g_i,\ h_j,\ i\in\mathcal{I},\ j\in\mathcal{E}$ 连续可微．函数 F_μ 由 (12.4) 定义．设 $\{\mu_k\}\to+\infty,\ \{\tau_k\}\to 0.$ $x^{(k)}$ 满足

$$\|\nabla F_{\mu_k}(x^{(k)})\|\le\tau_k.$$

设 $\bar{x}$ 是 $\{x^{(k)}\}$ 的极限点且向量组 $\nabla g_i(\bar{x}),\ i\in\mathcal{I},\ \nabla h_j(\bar{x}),\ j\in\mathcal{E}$ 线性无关．证明： $\bar{x}$ 是问题 (12.1) 的 K-K-T 点.

2. 证明引理 12.1.3.

3. 设函数 f 是凸函数， $g_i,\ i\in\mathcal{I}$ 是凹函数．证明：对任给的 $\mu>0$, 由 (12.7) 定义的函数 F_μ 是 D_0 中的凸函数.

4. 设 f 连续可微， $g_i,\ i\in\mathcal{I}$ 是连续可微的凹函数， $h_j,\ i\in\mathcal{E}$ 是线性函数．考察问题 (12.1)．定义如下 l_1 罚函数：

$$F_\mu(x)=f(x)+\mu\Big(-\sum_{i\in\mathcal{I}}\min\{g_i(x),0\}+\sum_{i\in\mathcal{E}}|h_j(x)|\Big).$$

设 (x^*,λ^*,μ^*) 是问题 (12.6) 的 K-K-T 点．证明：对任何

$$\mu\ge\max\{\lambda_i^*,\ i\in\mathcal{I},\ |\mu_j^*|,\ j\in\mathcal{E}\},$$

x^* 也是无约束问题

$$\min F_\mu(x), \quad x \in R^n$$

的解.

5. 设函数 $f,\, g_i,\, h_j,\, i \in \mathcal{I},\, j \in \mathcal{E}$ 连续, $\{x^{(k)}\}$ 由算法 12.1 产生, 其中罚参数序列 $\{\mu_k\}$ 单调递增且趋于 $+\infty$. 若 x^* 是 $\{x^{(k)}\}$ 任何极限点且在该点处满足 LICQ, 则存在无限指标集 K 使得

$$\lim_{k \in K,\, k \to \infty} (x^{(k)}, -\mu_k \min\{g(x^{(k)}),\, 0\},\, -\mu_k h(x^{(k)})) = (x^*,\, \lambda^*,\, \mu^*)$$

是 (12.1) 的 K-K-T 点.

6. 考察不等式约束问题 (12.6). 定义函数

$$S(x) = \min\{0,\, g_i(x), i \in \mathcal{I}\}.$$

记 $J(x) = \{i \in \mathcal{I} \mid g_i(x) = S(x)\}$. 假设 $X \subset R^n$ 是紧集且对每个 $x \in X$, 向量组 $\{\nabla g_i(x),\ i \in J(x)\}$ 线性无关. 证明: 对每个 $x \in X$, 下面的关于 $\lambda_j,\, j \in \mathcal{I}$ 的二次规划问题有惟一解 $\bar{\lambda}(x)$:

$$\min q_x(\lambda) = \|\nabla f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i \nabla g_i(x)\|^2 + \sum_{i \in \mathcal{I}} [S(x) - g_i(x)]^2 \lambda_i^2.$$

而且, $\bar{\lambda}(x)$ 关于 x 连续. 若进一步假设 (x^*, λ^*) 是问题 (12.6) 的 K-K-T 点, 则 $\bar{\lambda}(x^*) = \lambda^*$.

7. 设上一题的条件成立. 定义函数

$$F_\mu(x) = f(x) - \mu S(x).$$

证明: 存在常数 $\bar{\mu} \geq 0$ 使得当 $\mu > \bar{\mu}$ 时,

(i) 若 $x^* \in X$ 是 f_μ 的稳定点, 即 f 的方向导数 $f_\mu(x^*; d)$ 满足

$$F'_\mu(x^*; d) \geq 0, \qquad \forall d \in R^n,$$

则存在 λ^* 使得 (x^*, λ^*) 是 (12.6) 的 K-K-T 点.

(ii) 若 (x^*, λ^*) 是问题 (12.6) 的 K-K-T 点且 $x^* \in X$, 则 x^* 是 F_μ 的稳定点.

8. 设 $f, g_i : R^n \to R,\, i \in \mathcal{I}$ 连续可微, F_μ 由 (12.7) 定义. 再设不等式约束问题 (12.6) 的可行域是紧集. 证明: 对任给 $\mu > 0$, 无约束问题 $\min F_\mu(x)$ 有解 $x(\mu)$ 满足 $g_i(x(\mu)) < 0,\, i \in \mathcal{I}$.

9. 设函数 $f,\, g_i : R^n \to R,\, i \in \mathcal{I}$ 连续可微, F_μ 由 (12.7) 定义. 设 $\bar{x}$ 是问题 (12.6) 的一个严格局部最优解且在该点的任何邻域内都有点满足 $g_i(x) < 0,\, i \in \mathcal{I}$. 证明:

(i) 无约束问题 $\min F_\mu(x)$ 的解 $x(\mu)$ 满足

$$\lim_{\mu \to \infty} F_\mu(x(\mu)) = \min\{f(x) \mid g_i(x) \leq 0,\ i \in \mathcal{I}\}.$$

(ii) 序列 $\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点都是问题 (12.6) 的解, 而且, 当 $\mu \to \infty$ 时, $\mu^{-1} S(x(\mu)) \to 0$.

10. 用外点罚函数法求解下面的问题:

(i)
$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = \tfrac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & 3x_1 + x_2 \leq 10, \\ & 1 \leq x_1 \leq 4, \end{aligned}$$

(ii)
$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = \tfrac{1}{2}x_1^2 - x_1 x_2 + x_2^2 - 2x_1 \\ \text{s.t.} \quad & 3x_1 + x_2 \leq 2, \\ & x_1 \leq 1, \end{aligned}$$

11. 用内点罚函数法求解

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = \tfrac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 - 2 \ge 0, \\ & 0 \le x_1 \le 1, \end{aligned}$$

12. 设 $f,\, h_j,\, j \in \mathcal{E}$ 二次连续可微，(x^*, λ^*) 是等式约束问题 (12.8) 的一个 K-K-T 点. 假设 $\nabla h_j(x^*),\, j \in \mathcal{E}$ 线性无关，且 $\nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*)$ 正定. 考察如下迭代格式：

$$\begin{cases} x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha \nabla_x L(x^{(k)},\, \lambda^{(k)}), \\ \lambda^{(k+1)} = \lambda^{(k)} - \alpha h(x^{(k)}), \end{cases} \qquad k = 0, 1, 2, \ldots.$$

证明：存在 $\bar{\alpha} > 0$ 使得上面的迭代格式产生的点列 $(x^{(k)},\, \lambda^{(k)})$ 局部收敛于 (x^*, λ^*).

13. 设 x^* 是等式约束问题 (12.8) 的一个严格局部极小值点，$(x^* \lambda^*)$ 满足二阶充分条件. 设 $(d_x^{(k)}, d_\lambda^{(k)})$ 是用 Newton 法求解等式约束问题 (12.8) 产生的方向，即它们满足

$$\begin{pmatrix} \nabla_x^2 L(x^{(k)},\, \lambda^{(k)}) & -\nabla h(x^{(k)}) \\ \nabla h(x^{(k)})^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_x^{(k)} \\ d_\lambda^{(k)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla_x L(x^{(k)}, \lambda^{(k)}) \\ -h(x^{(k)}) \end{pmatrix}.$$

证明：对任何 $\mu > 0$, $d_x^{(k)}$ 是下面的精确罚函数在 $x^{(k)}$ 处的一个下降方向：

$$F_\mu(x) = f(x) + \mu \max\{|h_1(x),\, |h_2(x)|,\, \ldots, |h_m(x)|\}.$$

14. 设函数 $f,\, h_j,\, j \in \mathcal{E}$ 二次连续可微，x^* 是等式约束问题 (12.8) 的一个局部最优解，λ^* 是相应的 Lagrange 乘子. $L_\mu(x, \lambda)$ 由 (12.11) 定义. 证明：若二阶充分条件成立，则存在常数 $\bar{\mu} > 0,\, \gamma > 0,\, \delta > 0$ 使得

$$L_\mu(x, \lambda^*) \ge L_\mu(x^*, \lambda^*) + \gamma \|x - x^*\|^2, \quad \forall \mu \ge \bar{\mu},\ \forall x : \|x - x^*\| \le \delta.$$

而且，

$$f(x) \ge f(x^*) + \gamma \|x - x^*\|^2, \qquad \forall x : h(x) = 0,\, \|x - x^*\| \le \delta.$$

15. 设函数 $f,\, h_j,\, j \in \mathcal{E}$ 都是连续函数，$\{\lambda^{(k)}\}$ 是有界序列，$\{\mu_k\}$ 是单调递增的正数序列且 $\{\mu_k\} \to +\infty$, $x^{(k)}$ 是无约束问题

$$\min L_{\mu_k}(x) \triangleq f(x) + \lambda^{(k)T} h_{\mathcal{E}}(x) + \frac{1}{2}\mu_k \|h_{\mathcal{E}}(x)\|^2$$

的全局最优解. 证明：$\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点都是等式约束问题 (12.8) 的全局最优解.

16. 设 $f : R^n \to R$ 连续可微，$A \in R^{m \times n}$ 满秩，$b \in R^m$. 设 $\{x^{(k)}\}$ 是用乘子法求解如下线性等式约束问题

$$\min\ f(x), \quad \text{s.t.}\ \ Ax = b.$$

产生的点列，其中罚参数 $\mu_k > 0$.

(i) 证明：$x^{(k)}$ 是问题的一个可行点的充要条件是它是问题的一个 K-K-T 点，而且 $\lambda^{(k)}$ 是相应的 Lagrange 乘子.

(ii) 若 $\{x^{(k)}\}$ 有界且下面的条件之一成立：

(a) 罚参数序列 $\{\mu_k\} \to \infty$;

(b) $\{x^{(k+1)} - x^{(k)}\} \to 0$, 且存在 $\bar{\mu} > 0$ 使得 $\mu_k \ge \bar{\mu}$.

则 $\{\lambda^k\}$ 有界，而且 $(x^{(k)}, \lambda^{(k)})$ 的任何极限点都是问题的 K-K-T 点.

17. 设函数 $f, h_j, j\in\mathcal{E}$ 都是连续函数，$\{\lambda^{(k)}\}$ 是有界序列，$\{\mu_k\}$ 是单调递增的正数序列且 $\{\mu_k\}\to+\infty$. 设 x^* 是等式约束问题 (12.8) 的一个孤立极小值点. 证明：存在 $\{x^{(k)}\}\to x^*$, 且对每个 k, $x^{(k)}$ 是无约束问题

$$\min L_{\mu_k}(x) \triangleq f(x)+\lambda^{(k)T}h_{\mathcal{E}}(x)+\frac{1}{2}\mu_k\|h_{\mathcal{E}}(x)\|^2$$

的局部极小值点.

18. 设函数 $f, h_j, j\in\mathcal{E}$ 连续可微，$\{\lambda^{(k)}\}$ 是有界序列, 正数序列 $\{\mu_k\}$ 单调递增且 $\{\mu_k\}\to+\infty$, 正数序列 $\{\epsilon_k\}\to 0$. 设 $x^{(k)}$ 满足

$$\|\nabla f(x^{(k)})+\nabla h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})\lambda^{(k)}+\mu_k\nabla h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})\|\le\epsilon_k,\quad k=0,1,\dots.$$

再设子列 $\{x^{(k)}\}_{k\in K}$ 收敛于 x^*, 且 $\nabla h_{\mathcal{E}}(x^*)$ 列满秩. 证明：存在 λ^*, 使得

$$\{\lambda^{(k)}+\mu_k h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})\}_{k\in K}\to\lambda^*,$$

$$\nabla f(x^*)+\nabla h_{\mathcal{E}}(x^*)\lambda^*=0,\quad h_{\mathcal{E}}(x^*)=0.$$

19. 设 $f, h_j, j\in\mathcal{E}$ 二次连续可微，x^* 是等式约束问题 (12.8) 的一个局部极小值点，$\nabla h_j(x^*), j\in\mathcal{E}$ 线性无关，λ^* 是相应的 Lagrange 乘子，且二阶充分条件成立. 再设 L_μ 由 (12.11) 定义，且存在 $\bar\mu>0$ 使得 $\nabla_x^2 L_{\bar\mu}(x^*,\lambda^*)$ 正定.

   (i) 证明：存在数 $\delta>0$, $\epsilon>0$, 使得关于 x 的问题

   $$\min L_\mu(x,\lambda,\mu)\quad \text{s.t. } x\in U_\epsilon(x^*)=\{x\mid \|x-x^*\|\le\epsilon\}$$

   有惟一全局最优解 $x(\lambda,\mu)$, 且 $x(\lambda,\mu)$ 在

   $$\Omega=\{(\lambda,\mu)\mid \|\lambda-\lambda^*\|<\delta\mu,\ \mu\ge\bar\mu\}.$$

   的内部连续可微. 进一步证明：在常数 $M>0$ 使得

   $$\|x(\lambda,\mu)-x^*\|\le M\mu^{-1}\|\lambda-\lambda^*\|.$$

   (ii) 记 $\tilde\lambda(\lambda,\mu)=\lambda+\mu h(x(\lambda,\mu))$. 证明：存在常数 $M>0$ 使得

   $$\|\tilde\lambda(\lambda,\mu)-\lambda^*\|\le M\mu^{-1}\|\lambda-\lambda^*\|.$$

   (iii) 证明：对所有 $(\lambda,\mu)\in\Omega$, 矩阵 $\nabla_x^2L_\mu(x(\lambda,\mu),\lambda)$ 对称正定，而且 $\nabla h'(x(\lambda,\mu))$ 行满秩.

20. 用乘子法求解下面的约束问题

   (i) $\min\ f(x)=\frac{1}{2}x_1^2+\frac{1}{6}x_2^2$
   s.t. $h(x)=x_1+x_2-1=0$.
   取 $\lambda_0=0$, $\mu_k=6$.

   (ii) $\min\ f(x)=(x_1-2)^2+(x_2-3)^2$
   s.t. $h_1(x)=x_2-(x_1-2)^2\le 0$,
   $h_2(x)=2x_1-x_2-1=0$.
   取 $\lambda^{(0)}=(0,0)^T$, $\mu_k=4$.

21. 设 $f, g_i, i\in\mathcal{I}=\{1,2,\dots,m\}$ 连续可微. 对 $\mu>0$, 记 $g_\mu^+(x,\lambda)$ 的分量为

   $$g_i^+(x,\lambda,\mu)=\min\{g_i(x),\ \lambda_i/\mu\},\quad i\in\mathcal{I}.$$

   (i) 证明：对任何满足 $\lambda_i^*-\mu g_i(x^*)\ne 0$ 的 (x^*,λ^*), g_μ 在该点的某个邻域内连续可微.

   (ii) 设 (x^*,λ^*) 满足 $\lambda_i^*-\mu g_i(x^*)\ne 0$. 证明 (x^*,λ^*) 是下面的方程组

   $$\begin{cases}\nabla f(x)+\nabla_x g_\mu^+(x,\lambda) &= 0,\\ g_\mu^+(x,\lambda) &= 0\end{cases}$$

   的解的充要条件是它是不等式约束问题 (12.18) 的满足严格互补条件的 K-K-T 点.

第十三章　约束问题算法 (II) — 可行方向法

为了了解求解约束问题可行方向法的思想，我们先回顾一下求解无约束问题的下降算法．求解无约束问题的下降算法的过程是：在当前点 $x^{(k)}$ 处，寻找目标函数 f 的下降方向 $d^{(k)}$, 然后，从 $x^{(k)}$ 出发，沿 $d^{(k)}$ 进行线性搜索产生步长 α_k, 进而得到 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$.

解约束问题的可行方向法与解无约束问题的下降算法类似．但对约束问题而言，我们所关心的只是问题的可行点．可行方向法从问题的可行点出发，在该点的可行方向中，寻找使目标函数下降的方向．然后沿该方向进行线性搜索，得到一个新的可行点．如此进行下去，算法产生一个点列，该点列中的所有的点均为问题的可行点．希望该点列终止于问题的解，或其极限点是问题的解.

§13.1　线性约束问题的可行方向法

§13.1.1　Zoutendijk 算法

我们先考察约束函数为线性函数的最优化问题：

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & g_i(x) \triangleq a_i^T x - b_i \geq 0,\ i \in \mathcal{I} = \{1, 2, \dots, m_1\}, \\ & h_j(x) \triangleq a_j^T x - b_j = 0,\ j \in \mathcal{E} = \{m_1+1, m_1+2, \dots, m\}, \end{array} \tag{13.1}$$

其中， $a_i \in R^n, i \in \mathcal{I} \cup \mathcal{E}$ 是给定的向量， $b_i \in R, i \in \mathcal{I} \cup \mathcal{E}$ 是给定的实数．记问题 (13.1) 的可行域为

$$D_L = \{x \mid g_i(x) \geq 0,\, i \in \mathcal{I},\, h_j(x) = 0,\, j \in \mathcal{E}\}.$$

令 $\mathcal{I}(x)$ 表示在点 $x \in D_L$ 处不等式约束中的有效约束，即

$$\mathcal{I}(x) = \{i \in \mathcal{I} \mid g_i(x) = 0\}.$$

由于问题 (13.1) 的约束均为线性约束，由定理 9.1.3, $x \in D_L$ 处的可行方向与线性化可行方向等价，即 $d \in R^n$ 是 $x \in D_L$ 处的可行方向的充要条件是它满足

$$a_i^T d \geq 0,\ \forall i \in \mathcal{I}(x), \qquad a_j^T d = 0,\ \forall j \in \mathcal{E}.$$

记点 $x \in D_L$ 处的可行方向集为 $\mathcal{S}(x)$, 即

$$\mathcal{S}(x) = \{d \in R^n \mid a_i^T d \geq 0,\, i \in \mathcal{I}(x),\ a_j^T d = 0,\, j \in \mathcal{E}\}.$$

由定理 2.1.1, 向量 $d \in R^n$ 是函数 f 在点 x 处的下降方向的条件是： $\nabla f(x)^T d < 0$. 类似于求解无约束问题的最速下降法，我们在可行方向中寻找 d 使得 $\nabla f(x)^T d$ 达到最小，即 d 是下面问题的解：

可行方向中. $\nabla f(x)^T d$ 达到 min. (必有 $\|d\|$ 取到 1)

$$\begin{array}{ll} \min & \nabla f(x)^T d \\ \text{s.t.} & a_i^T d \geq 0,\ i \in \mathcal{I}(x), \\ & a_j^T d = 0,\ j \in \mathcal{E}, \\ & \|d\| \leq 1. \end{array} \tag{13.2}$$

上面问题的可行域是一个有界闭集，因此，该问题有解．而且，由于 $d=0$ 是问题 (13.2) 的可行点，问题 (13.2) 的解 d 满足 $\nabla f(x)^T d \le 0$．下面的定理说明，若 x 不是问题 (13.1) 的 K-K-T 点，则问题 (13.2) 的解是函数 f 在 x 处的下降方向 (其证明留作练习)．

定理 13.1.1 设 $x \in D_L$, $\bar{d}$ 是问题 (13.2) 的解．则
(1) 当 $\nabla f(x)^T \bar{d} = 0$ 时， x 是问题 (13.1) 的 *K-K-T* 点．
(2) 当 $\nabla f(x)^T \bar{d} \neq 0$ 时， $\nabla f(x)^T \bar{d} < 0$．特别， $\bar{d}$ 是 f 在 x 处的可行下降方向．

上面的定理给出了寻找点 $x \in D_L$ 处的可行下降方向的方法．设 $x \in D_L$ 是当前迭代点．类似于无约束问题，可利用线性搜索确定步长因子 t, 得到下一个迭代点

$$x^+ = x + t\bar{d}.$$

为了保证 x^+ 可行，需对步长因子 t 作适当限制．类似于 (11.12) 的推导，令

$$t_{\max} = \min\Big\{ -\frac{a_i^T x - b_i}{a_i^T \bar{d}} \mid i \in \mathcal{I} \backslash \mathcal{I}(x),\ a_i^T \bar{d} < 0 \Big\}. \tag{13.3}$$

则当 $t \in [0, t_{\max}]$ 时，总有 $x^+ = x + t\bar{d} \in D_L$. 若对所有 $i \in \mathcal{I} \backslash \mathcal{I}(x)$, 均有 $a_i^T \bar{d} \ge 0$, 则可令 $t_{\max} = +\infty$.

在上面的基础上，我们得到如下算法．

算法 13.1 (Zoutendijk 算法)

步 *0* 取初始点 $x^{(0)} \in D_L$, 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *1* 求解

$$\begin{aligned} \min \quad & \nabla f(x^{(k)})^T d \\ \text{s.t.} \quad & a_i^T d \ge 0,\ i \in \mathcal{I}(x^{(k)}), \\ & a_j^T d = 0,\ j \in \mathcal{E}, \\ & \|d\| \le 1 \end{aligned} \tag{13.4}$$

得解 $d^{(k)}$.

步 *2* 若 $|\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}| \le \epsilon$, 则得解 $x^{(k)}$. 否则，转步 *3*.

步 *3* 由线性搜索

$$\min_{0 \le t \le t_{\max}} f(x^{(k)} + t d^{(k)}) = f(x^{(k)} + t_k d^{(k)})$$

确定步长 t_k, 其中 $t_{\max}$ 为 (13.3) 中当 $x = x^{(k)}$, $\bar{d} = d^{(k)}$ 时的取值．令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k d^{(k)}$, $k := k+1$. 转步 *1*.

例 13.1.1 用算法 *13.1* 求解下面的最优化问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = x_1^2 + x_2^2 - x_1 x_2 - 2x_1 - 3x_2 \\ \text{s.t.} \quad & g_1(x) = -x_1 - x_2 + 2 \ge 0, \\ & g_2(x) = -x_1 - 5x_2 + 5 \ge 0, \\ & g_3(x) = x_1 \ge 0, \\ & g_4(x) = x_2 \ge 0. \end{aligned}$$

取初始点 $x^{(0)}=(0,0)^T$. 求出 $x^{(2)}$.

解 由计算得

$$\nabla f(x)=(2x_1-x_2-2,\ -x_1+2x_2-3)^T.$$

当 $k=0$ 时, $\nabla f(x^0)=(-2,-3)^T, \mathcal{I}(x^0)=\{3,4\}$. 此时，子问题 (13.4) (这里，我们取无穷向量范数) 为下面的线性规划问题:

$$\begin{array}{ll}\min & \nabla f(x^0)^T d=-2d_1-3d_2\\ \text{s.t.} & d_1\ge 0,\ d_2\ge 0,\\ & \|d\|_\infty\le 1.\end{array}$$

解此线性规划问题得 $d^{(0)}=(1,1)^T$. $|\nabla f(x^{(0)})^T d^{(0)}|=5$. 由 (13.3) 得

$$t_{\max}=\min\left\{\frac{2}{2},\ \frac{5}{6}\right\}=\frac{5}{6}.$$

由线性搜索

$$\min_{0\le t\le \frac{5}{6}} f(x^{(0)}+td^{(0)})=t^2-5t$$

得 $t_0=\frac{5}{6}$. 因此, $x^{(1)}=x^{(0)}+t_0d^{(0)}=(\frac{5}{6},\frac{5}{6})^T$.

当 $k=1$ 时, $\nabla f(x^{(1)})=(-\frac{7}{6},-\frac{13}{6})^T, \mathcal{I}(x^{(1)})=\{2\}$. 此时，子问题 (13.4) 为下面的线性规划问题:

$$\begin{array}{ll}\min & \nabla f(x^{(1)})^T d=-\frac{7}{6}d_1-\frac{13}{6}d_2\\ \text{s.t.} & d_1+5d_2\le 0,\\ & \|d\|_\infty\le 1.\end{array}$$

解此线性规划问题得 $d^{(1)}=(1,-\frac{1}{5})^T$. $|\nabla f(x^{(1)})^T d^{(1)}|=\frac{11}{15}$. 由 (13.3) 得

$$t_{\max}=\min\left\{\frac{1/3}{4/5},\ \frac{5/6}{1/5}\right\}=\min\left\{\frac{5}{12},\ \frac{25}{6}\right\}=\frac{5}{12}.$$

由线性搜索

$$\min_{0\le t\le \frac{5}{12}} f(x^{(1)}+td^{(1)})=\frac{31}{25}t^2-\frac{11}{15}t+f(x^{(1)})$$

得 $t_1=\frac{55}{186}$. 因此, $x^{(2)}=x^{(1)}+t_1d^{(1)}=(\frac{35}{31},\frac{24}{31})^T$.

对于非线性约束问题

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)\\ \text{s.t.} & g_i(x)\ge 0,\ i\in\mathcal{I}=\{1,\dots,m_1\}.\end{array}\tag{13.5}$$

可以证明，若 $d\in R^n$ 满足

$$\nabla g_i(x)^T d>0,\qquad i\in\mathcal{I}(x),$$

则 d 是问题 (13.5) 在 x 处的可行方向. 一种自然的想法是，类似于 (13.4), 由下面的问题确定 $d^{(k)}$:

$$\begin{array}{ll}\min & \nabla f(x^{(k)})^T d\\ \text{s.t.} & \nabla g_i(x^{(k)})^T d>0,\ i\in\mathcal{I}(x^{(k)}),\\ & \|d\|\le 1.\end{array}$$

但上面问题的可行域不是闭集，而且可能是空集．因此，问题可能无解．为此，对上面的问题作如下修正：

$$
\begin{array}{ll}
\min & z \\
\text{s.t.} & \nabla f(x^{(k)})^T d - z \le 0, \\
& \nabla g_i(x^{(k)})^T d + z \ge 0,\ i \in \mathcal{I}(x^{(k)}), \\
& \|d\| \le 1.
\end{array} \tag{13.6}
$$

设 $(z^{(k)}, d^{(k)})$ 是问题 (13.6) 的解．则 $z^{(k)} \le 0$, 因为 $(z, d) = (0, 0)$ 是 (13.6) 的可行点．若 $z_k < 0$, 则 $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的可行下降方向．

上面的算法不能保证产生的点列收敛于问题 (13.5) 的 K-K-T 点．这主要是由于 $\{d^{(k)}\}$ 的极限 d^* 可能不是 D_L 在 x^* 处的可行方向所引起的．为此，可对算法加以修正，即将确定可行下降方向的子问题换成

$$
\begin{array}{ll}
\min & z \\
\text{s.t.} & \nabla f(x^{(k)})^T d - z \le 0, \\
& g_i(x^{(k)}) + \nabla g_i(x^{(k)})^T d + z \ge 0,\ i \in \mathcal{I}, \\
& \|d\| \le 1.
\end{array} \tag{13.7}
$$

相应的算法称为 Topkis-Veinott 算法．其步骤如下：

算法 13.2 (Topkis-Veinott 算法)

步 *0* 取初始点 $x_0 \in D = \{x \mid g_i(x) \ge 0,\ i \in \mathcal{I}\}$. 令 $k := 0$.

步 *1* 求解 (13.7) 得解 $d^{(k)}$.

步 *2* 若 $d^{(k)} = 0$, 则得解 $x^{(k)}$. 否则，转步 *3*.

步 *3* 由线性搜索

$$
\min_{0 \le t \le t_{\max}} f(x^{(k)} + t d^{(k)}) = f(x^{(k)} + t_k d^{(k)})
$$

确定步长 t_k, 其中，

$$
t_{\max} = \{\sup\{t \mid g_i(x^{(k)} + t d^{(k)}) \ge 0,\ i \in \mathcal{I}\}.
$$

令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k d^{(k)}$, $k := k + 1$. 转步 *1*.

算法 13.2 有如下收敛性定理 (参看 [3]) .

定理 13.1.2 设函数 f, g_i, $i \in \mathcal{I}$ 连续可微．则算法 *13.2* 产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点 $\bar{x}$ 都是问题 (13.5) 的 *Fritz-John* 点，即存在不全为零的数 $\lambda_i \ge 0$, $i \in \mathcal{I} \cup \{0\}$ 使得

$$
\lambda_0 \nabla f(\bar{x}) - \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i \nabla g_i(\bar{x}) = 0.
$$

§13.1.2 Frank-Wolfe 算法

Frank-Wolfe 算法与 Zoutendijk 算法类似. 该算法中确定可行下降方向通过求解下面线性规划问题确定.

$$\min_{y\in D_L} f(x^{(k)})+\nabla f(x^{(k)})^T(y-x^{(k)}),$$

或等价地

$$\min_{y\in D_L} \nabla f(x^{(k)})^T y. \tag{13.8}$$

其中 D_L 是问题 (13.1) 的可行域. 设问题 (13.8) 的解为 $y^{(k)}$. 令 $d^{(k)}=y^{(k)}-x^{(k)}$. 则当 $x^{(k)}$ 不是问题 (13.1) 的解时, $d^{(k)}$ 是函数 f 在 $x^{(k)}$ 处的可行下降方向. 事实上, 类似于定理 13.1.1, 我们有下面的定理.

定理 13.1.3 设 $x^{(k)}\in D_L$, $y^{(k)}$ 是问题 (13.8) 的解. 令 $d^{(k)}=y^{(k)}-x^{(k)}$. 则
(1) 当 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}=0$ 时, $x^{(k)}$ 是问题 (13.1) 的 *K-K-T* 点.
(2) 当 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}\neq 0$ 时, $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}<0$. 特别, $d^{(k)}$ 是 f 在 $x^{(k)}$ 处的可行下降方向.

证明 由于 $x^{(k)}\in D_L$ 是问题 (13.8) 的可行点, $y^{(k)}$ 是问题 (13.8) 的解, 故

$$\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}=\nabla f(x^{(k)})^T(y^{(k)}-x^{(k)})\le 0.$$

若 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}\neq 0$, 则必有 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}<0$, 即 (2) 成立.

若 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}=0$, 即 $\nabla f(x^{(k)})^T x^{(k)}=\nabla f(x^{(k)})^T y^{(k)}$. 由于 $y^{(k)}$ 是问题 (13.8) 的解, 故 $x^{(k)}$ 也是问题 (13.8) 的解. 于是, 存在 λ_i, $i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}$, 使得

$$\begin{aligned}
&\nabla f(x^{(k)})-\sum_{i\in\mathcal{I}\cup\mathcal{E}}\lambda_i a_i=0,\\
&a_i^T x^{(k)}-b_i=0,\ i\in\mathcal{E},\\
&\lambda_i\ge 0,\ (a_i^T x^{(k)}-b_i)\ge 0,\ \lambda_i(a_i^T x^{(k)}-b_i)=0,\ i\in\mathcal{I},
\end{aligned}$$

即 $x^{(k)}$ 是问题 (13.1) 的 K-K-T 点. **证毕**

求解 (13.1) 的 Frank-Wolfe 算法的步骤如下:

算法 13.3 (Frank-Wolfe 算法)

步 *0* 取初始点 $x^{(0)}\in D_L$, 精度 $\epsilon>0$. 令 $k:=0$.

步 *1* 求解线性规划问题 (13.8) 得 $y^{(k)}$. 令 $d^{(k)}=y^{(k)}-x^{(k)}$.

步 *2* 若 $|\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}|\le\epsilon$, 则得解 $x^{(k)}$. 否则, 转步 *3*.

步 *3* 由线性搜索

$$\min_{0\le t\le 1} f(x^{(k)}+td^{(k)})=f(x^{(k)}+t_k d^{(k)})$$

确定步长 t_k. 令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_k d^{(k)}$, $k:=k+1$. 转步 *1*.

例 13.1.2 用 *Frank-Wolfe* 算法求解下面问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = 2x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1x_2 - 4x_1 - 6x_2 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 \le 2, \\ & x_1 + 5x_2 \le 5, \\ & x_1 \ge 0, x_2 \ge 0. \end{aligned}$$

取初始点 $x^{(0)} = (0,0)^T$. 求出 $x^{(2)}$.

解 由计算得

$$\nabla f(x) = (4x_1 - 2x_2 - 4, -2x_1 + 4x_2 - 6)^T.$$

当 $k = 0$ 时， $x^{(0)} = (0,0)^T \in D_L$, $\nabla f(x^{(0)}) = (-4,-6)^T$. 解下面线性规划问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & \nabla f(x^{(0)})^T y = -4y_1 - 6y_2 \\ \text{s.t.} \quad & y_1 + y_2 \le 2, \\ & y_1 + 5y_2 \le 5, \\ & y_1 \ge 0, y_2 \ge 0. \end{aligned}$$

得 $y^{(0)} = (\frac{5}{4}, \frac{3}{4})^T$. 于是 $d^{(0)} = y^{(0)} - x^{(0)} = (\frac{5}{4}, \frac{3}{4})^T$. 由线性搜索

$$\min_{0 \le t \le 1} f(x^{(0)} + td^{(0)}) = \frac{19}{8}t^2 - \frac{19}{2}t$$

得 $t_0 = 1$. 因此,

$$x^{(1)} = x^{(0)} + t_0 d^{(0)} = (\frac{5}{4}, \frac{3}{4})^T.$$

计算结果见表 13.1.

表 13.1 例 13.1.2 的计算结果

k	$x^{(k)}$	$\nabla f(x^{(k)})$	$y^{(k)}$	$d^{(k)}$	$\lvert\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}\rvert$	t_k
0	$(0,0)^T$	$(-4,-6)^T$	$(\frac{5}{4}, \frac{3}{4})^T$	$(\frac{5}{4}, \frac{3}{4})^T$	$\frac{19}{2}$	1
1	$(\frac{5}{4}, \frac{3}{4})^T$	$-(\frac{1}{2}, \frac{11}{2})^T$	$(0,1)^T$	$(-\frac{5}{4}, \frac{1}{4})^T$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{31}$

故得

$$x^{(2)} = x^{(1)} + t_1 d^{(1)} = (\frac{35}{31}, \frac{24}{31})^T.$$

算法 13.3 有如下收敛性定理.

定理 13.1.4 设函数 f 连续可微且 D_L 有界. 点列 $\{x^{(k)}\}$ 由算法 *13.3* 产生. 则
(1) 当点列 $\{x^{(k)}\}$ 是有限点列时，最后一个点是问题 (13.1) 的 *K-K-T* 点.
(2) 当点列 $\{x^{(k)}\}$ 是无限点列时， $\{x^{(k)}\}$ 的任何极限点都是问题 (13.1) 的 *K-K-T* 点.

证明 (1) 显然.

(2) 设 $\{x^{(k)}\}_{k\in K} \to x^*$, $\{x^{(k+1)}\}_{k\in K} \to \bar{x}^*$. 由于 D_L 是闭集且 $\{x^{(k)}\} \subset D_L$, 故 $x^*, \bar{x}^* \in D_L$. 而且，由 $\{f(x^{(k)})\}$ 的单调性知 $f(x^*) = f(\bar{x}^*)$. 又由于序列 $\{y^{(k)}\}_{k\in K} \subset D_L$ 有界，故必有极限点. 不妨设 $\{y^{(k)}\}_{k\in K} \to y^*$. 从而， $\{d^{(k)}\}_{k\in K} \to d^* = y^* - x^*$. 注意到 $x^*, y^* \in D_L$. 容易看出 d^* 是 x^* 处的可行方向.

由线性搜索条件可得

$$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)} + t_k d^{(k)}) \le f(x^{(k)} + td^{(k)}), \qquad \forall t \in [0,1].$$

令 $k \in K$, $k \to \infty$ 得

$$f(\bar{x}^*) \le f(x^* + td^*), \qquad \forall t \in [0,1]. \tag{13.9}$$

另一方面，由于 $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} \le 0$, 故有 $\nabla f(x^*)^T d^* \le 0$. 若 $\nabla f(x^*)^T d^* < 0$, 则 d^* 是 f 在 $x^* \in D_L$ 处的可行下降方向. 当 $t > 0$ 充分小时，必有

$$f(x^* + td^*) < f(x^*).$$

上式结合 (13.9) 得到 $f(\bar{x}^*) < f(x^*)$. 矛盾. 因此，我们有 $\nabla f(x^*)^T d^* = 0$. 注意到 d^* 是可行方向，类似于定理 13.1.3, 可以证明 x^* 是问题 (13.1) 的 K-K-T 点. **证毕**

§13.2 投影梯度法

前一节介绍的可行方向法中搜索方向 $d^{(k)}$ 可理解为可行点 $x^{(k)}$ 处的可行方向中的最速下降方向. 因此，它是最速下降算法的一种推广. 本节，我们从另一种角度将最速下降算法推广至约束问题的求解. 该算法中搜索方向 $d^{(k)}$ 为 $x^{(k)}$ 处的最速下降方向在可行方向集中的投影. 我们称相应的算法为投影梯度法.

我们先引入投影的概念.

定义 13.2.1 *设 $\Omega \subseteq R^n$ 是闭凸集. 对 $x \in R^n$, 若向量 $P_\Omega(x) \in \Omega$ 满足*

$$\|P_\Omega(x) - x\| = \min\{\|y - x\| \mid y \in \Omega\}, \tag{13.10}$$

则称 $P_\Omega(x)$ 是 x 在 Ω 中的投影.

再引入投影矩阵的概念.

定义 13.2.2 *若对称矩阵 P 满足 $P^2 = P$, 则称 P 是一个投影矩阵.*

由定义 13.2.2 易知，投影矩阵是半正定的.

设矩阵 $M \in R^{m\times n}$ 行满秩. 令

$$P = M^T(MM^T)^{-1}M, \quad Q = I - P.$$

直接验证可知，矩阵 P 和 Q 都是对称矩阵且满足 $P^2 = P$, $Q^2 = Q$. 因此，由定义 13.2.2, 知， P 和 Q 都是投影矩阵. 事实上，矩阵 P 将 R^n 中的向量投影到由 M 的行向量生成的子空间，而 Q 将 R^n 中的向量投影到 M 的零空间上，即

$$\|Px - x\| = \min\left\{\|y - x\| \;\middle|\; y = M^T u,\, u \in R^m\right\}, \quad MQy = 0, \quad \forall y \in R^n.$$

定理 13.2.1 对 $x \in D_L$, 令

$$M = \begin{pmatrix} (a_i^T)_{i\in\mathcal{I}(x)} \\ (a_i^T)_{i\in\mathcal{E}} \end{pmatrix},$$

即 M 的行向量由点 $x \in D_L$ 处的有效约束的梯度的转置构成. 设在点 x 处的有效约束的梯度线性无关, 即矩阵 M 行满秩. 令

$$P = I - M^T(MM^T)^{-1}M, \quad d = -P\nabla f(x).$$

若 $d \neq 0$, 则 d 是函数 f 在 x 处的可行下降方向.

证明 由于 P 是投影矩阵. 直接计算得

$$\nabla f(x)^T d = -\nabla f(x)^T P\nabla f(x) = -\nabla f(x)^T P^T P\nabla f(x) = -\|P\nabla f(x)\|^2 < 0.$$

因此, d 是 f 在 x 处的下降方向. 而且,

$$Md = -MP\nabla f(x) = -M(I - M^T(MM^T)^{-1}M)\nabla f(x) = 0,$$

即

$$a_i^T d = 0, \quad i \in \mathcal{I}(x) \cup \mathcal{E}.$$

因此, d 是可行方向. **证毕**

定理 13.2.1 给出了当 $P\nabla f(x) \neq 0$ 时, 求可行下降方向的一种方式. 下面的定理给出了当 $P\nabla f(x) = 0$ 时确定可行下降方向的方法.

定理 13.2.2 设定理 *13.2.1* 的条件成立且 $P\nabla f(x) = 0$. 令

$$w = (MM^T)^{-1}M\nabla f(x) = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix},$$

其中 u, v 的维数分别与 $\mathcal{I}(x)$ 和 $\mathcal{E}$ 中的元素数目相同.

(1) 若 $u \geq 0$, 则 x 是问题 (13.1) 的 *K-K-T* 点.

(2) 若 u_i 中有负数: $u_j < 0$, 令

$$\bar{M} = \begin{pmatrix} (a_i^T)_{i\in\mathcal{I}(x)\setminus\{j\}} \\ (a_i^T)_{i\in\mathcal{E}} \end{pmatrix},$$

$$\bar{P} = I - \bar{M}^T(\bar{M}\bar{M}^T)^{-1}\bar{M}, \quad d = -\bar{P}\nabla f(x).$$

则 d 是函数 f 在 x 处的可行下降方向.

证明 (1) 由 $P\nabla f(x) = 0$ 得

$$0 = (I - M^T(MM^T)^{-1}M)\nabla f(x) = \nabla f(x) - M^T w = \nabla f(x) - \sum_{i\in\mathcal{I}(x)} u_i a_i - \sum_{i\in\mathcal{E}} v_i a_i. \tag{13.11}$$

令 $u_i = 0, i \in \mathcal{I}\setminus\mathcal{I}(x)$, 则 (x, u, v) 是问题 (13.1) 的 K-K-T 点.

(2) 先证明 $\bar{P}\nabla f(x)\neq 0$. 反设 $\bar{P}\nabla f(x)=0$. 令

$$\begin{pmatrix} \bar{u} \\ \bar{v} \end{pmatrix} = (\bar{M}\bar{M}^T)^{-1}\bar{M}\nabla f(x).$$

则

$$0=(I-\bar{M}^T(\bar{M}\bar{M}^T)^{-1}\bar{M})\nabla f(x)=\nabla f(x)-\sum_{i\in\mathcal{I}(x),i\neq j}\bar{u}_i a_i-\sum_{i\in\mathcal{E}}\bar{v}_i a_i.$$

上式减去 (13.11) 得

$$u_j a_j+\sum_{i\in\mathcal{I}(x),\, i\neq j}(u_i-\bar{u}_i)a_i+\sum_{i\in\mathcal{E}}(v_i-\bar{v}_i)a_i=0.$$

注意到 $u_j\neq 0$, 因此，上式与点 x 处的有效约束的梯度线性无关假设矛盾．从而， $\bar{P}\nabla f(x)\neq 0$. 由此可得，

$$\nabla f(x)^T d=-\nabla f(x)^T\bar{P}\nabla f(x)=-\nabla f(x)^T\bar{P}^T\bar{P}\nabla f(x)=-\|\bar{P}\nabla f(x)\|^2<0,$$

即 d 是 f 在 x 处的下降方向．下面证明 d 是可行方向．类似于定理 13.2.1 的证明可得 $\bar{M}d=0$, 即

$$a_i^T d=0,\ i\in\mathcal{I}(x)\backslash\{j\},\quad a_i^T d=0,\ i\in\mathcal{E}. \tag{13.12}$$

又由 (13.11) 得

$$0=\nabla f(x)-M^T w=\nabla f(x)-\bar{M}^T\bar{w}-u_j a_j,$$

其中， $\bar{w}$ 为 w 中去掉 u_j 后得到的子向量．在上式两端同乘以 $a_j^T\bar{P}$, 注意到 $\bar{P}\bar{M}^T=0$, 我们得

$$0=a_j^T\bar{P}\nabla f(x)-u_j a_j^T\bar{P}a_j=-a_j^T d-u_j a_j^T\bar{P}a_j.$$

因此，

$$a_j^T d=-u_j a_j^T\bar{P}a_j.$$

由于投影矩阵 $\bar{P}$ 半正定且 $u_j<0$, $a_j^T d\geq 0$. 由此及 (13.12) 知， d 是可行方向． **证毕**

利用定理 13.2.1 和定理 13.2.2, 我们可构造如下求解问题 (13.1) 的投影梯度法.

算法 13.4 (Rosen 投影梯度法)

步 *0* 取初始点 $x^{(0)}\in D_L$, 精度 $\epsilon>0$. 令 $k:=0$, $\mathcal{I}_0=\mathcal{I}(x^{(0)})$.

步 *1* 若 $\mathcal{I}_k=\emptyset$, 令 $P_k=I$ 为单位矩阵．否则，令

$$M_k=\begin{pmatrix} (a_i^T)_{i\in\mathcal{I}_k} \\ (a_i^T)_{i\in\mathcal{E}} \end{pmatrix},\quad P_k=I-M_k^T(M_k M_k^T)^{-1}M_k.$$

步 *2* 令 $d^{(k)}=-P_k\nabla f(x^{(k)})$. 若 $\|d^{(k)}\|>\epsilon$, 则转步 *4*.

步 *3* 若 $\mathcal{I}_k=\emptyset$, 则得解 $x^{(k)}$. 否则，令

$$w^{(k)}=(M_k M_k^T)^{-1}M_k\nabla f(x^{(k)})=\begin{pmatrix} u^{(k)} \\ v^{(k)} \end{pmatrix}.$$

若 $u^{(k)}\geq 0$, 则得解 $x^{(k)}$. 否则，确定 $j\in\mathcal{I}_k$ 使得 $u_j^{(k)}<0$. 令 $\mathcal{I}_k=\mathcal{I}_k\backslash\{j\}$. 转步 *1*.

步 *4* 由线性搜索

$$\min_{0\le t\le t_{\max}} f(x^{(k)}+td^{(k)}) = f(x^{(k)}+t_kd^{(k)})$$

确定步长 t_k, 其中, $t_{\max}$ 由 (13.3) (其中 $x=x^{(k)}$, $\bar{d}=d^{(k)}$) 确定. 令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+t_kd^{(k)}$, $\mathcal{I}_{k+1}=\mathcal{I}(x^{(k+1)})$, $k:=k+1$, 转步 *1*.

例 13.2.1 用 *Rosen* 梯度投影法求解

$$\begin{array}{ll} \min & f(x)=x_1^2+x_2^2-x_1x_2-2x_1-3x_2 \\ \text{s.t.} & -x_1-x_2+2\ge 0, \\ & -x_1-5x_2+5\ge 0, \\ & x_1\ge 0,\ \ x_2\ge 0. \end{array}$$

取初始可行点 $x^{(0)}=(0,1)^T$.

解 由计算得

$$\nabla f(x)=(2x_1-x_2-2,\ -x_1+2x_2-3)^T.$$

当 $k=0$ 时, $\mathcal{I}_0=\mathcal{I}(x^{(0)})=\{2,3\}$. $\nabla f(x^{(0)})=(-3,-1)^T$.

$$M_0=\begin{pmatrix} -1 & -5 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad P_0=I-M_0^T(M_0M_0^T)^{-1}M_0=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

故

$$d^{(0)}=-P_0\nabla f(x^{(0)})=(0,0)^T.$$

计算

$$w^{(0)}=(M_0M_0^T)^{-1}M_0\nabla f(x^{(0)})=(\frac{1}{5},\ -\frac{14}{5})^T.$$

确定 $j=3$, 使得 $u_j=-\frac{14}{5}<0$. 再计算

$$M_0=(-1,-5)^T,\quad P_0=I-M_0^T(M_0M_0^T)^{-1}M_0=\begin{pmatrix} \frac{25}{26} & -\frac{5}{26} \\ -\frac{5}{26} & \frac{1}{26} \end{pmatrix}.$$

得

$$d^{(0)}=-P_0\nabla f(x^{(0)})=\frac{7}{13}(5,-1)^T.$$

在进行精确线性搜索时，不妨令 $d^{(0)}=(5,-1)^T$. 由 (13.3) 得

$$t_{\max}=\min\{\frac{1}{4},\frac{1}{1}\}=\frac{1}{4}.$$

由线性搜索

$$\min_{0<t\le 1/4} f(x^{(0)}+td^{(0)})=31t^2-14t-2$$

得步长 $t_0=7/31$. 因此,

$$x^{(1)}=x^{(0)}+t_0d^{(0)}=(35/31,\ 24/31)^T.$$

当 $k=1$ 时， $\mathcal{I}_1=\mathcal{I}(x^{(1)})=\{2\}$. $\nabla f(x^{(1)})=(-16/31,-80/31)^T$.

$$M_1=(1,\ -5),\quad P_1=I-M_1^T(M_1M_1^T)^{-1}M_1=\frac{1}{26}\begin{pmatrix}25 & -5\\ -5 & 1\end{pmatrix}.$$

故

$$d^{(1)}=-P_1\nabla f(x^{(1)})=(0,0)^T.$$

计算

$$w^{(1)}=(M_1M_1^T)^{-1}M_1\nabla f(x^{(1)})=\frac{16}{31}>0.$$

因此， $x^{(1)}=(35/31,\ 24/31)^T$ 是解.

§13.3 既约梯度法

先考察如下线性等式约束问题：

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)\\ \text{s.t.} & a_i^Tx-b_i=0,\ i\in\mathcal{E}=\{1,\ldots,m\}.\end{array}\tag{13.13}$$

设 $A=(a_1,\cdots,a_m)$, B 是 A 的一组基， x_B 和 x_N 分别是相应的基变量和非基变量. 令

$$A=(B,N),\quad b=(b_1,\cdots,b_m)^T,\quad x=\begin{pmatrix}x_B\\ x_N\end{pmatrix}.$$

由问题 (13.13) 的可行性条件解得

$$x_B(x_N)=B^{-1}b-B^{-1}Nx_N.\tag{13.14}$$

因此，问题 (13.13) 可等价地表示为下面的无约束问题：

$$\min f(x_B(x_N),x_N)\triangleq F(x_N),\quad x_N\in R^{n-m}.\tag{13.15}$$

从而，可利用求解无约束问题的算法求解等式约束问题 (13.13).

利用复合函数求导法则，可得 F 的梯度：

$$r(x_N)\triangleq\nabla F(x_N)=\nabla_{x_N}f(x_B(x_N),x_N)-(B^{-1}N)^T\nabla_{x_B}f(x_B(x_N),x_N).\tag{13.16}$$

称之为 f 的既约梯度.

对一般的线性约束问题

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)\\ \text{s.t.} & a_i^Tx-b_i=0,\ i\in\mathcal{E}=\{1,\ldots,m\},\\ & x\geq 0.\end{array}\tag{13.17}$$

令

$$D_L=\{x\in R^n\mid Ax-b=0,\ x\geq 0\}$$

表示问题 (13.17) 的可行域. 利用变换 (13.14), 问题 (13.17) 可转化为等价的仅有非负约束的约束问题:

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(x_B(x_N), x_N) \triangleq F(x_N) \\
\text{s.t.} \quad & x_B(x_N) \ge 0, \;\; x_N \ge 0.
\end{aligned}
\tag{13.18}
$$

下面, 我们研究利用 (13.18) 求解问题 (13.17) 的算法. 函数 F 的梯度由 (13.16) 给出. 设 $x \in D_L$. 显然, 负梯度方向 $-\nabla F(x_N) = -r(x_N)$ 是问题 (13.18) 的目标函数 F 的下降方向. 下面, 我们利用 $-r(x_N)$ 构造问题 (13.17) 的可行下降方向

$$d = \begin{pmatrix} d_B \\ d_N \end{pmatrix}.$$

令下一个迭代点为

$$x^+ = x + \alpha d \in D_L.$$

若 $-r(x_N)$ 是可行方向, 则可取 $d_N = -r(x_N)$. 当 $-r(x_N)$ 不是可行方向时, 为保证 x_N^+ 可行, 必须有

$$x_N - \alpha r(x_N) \ge 0.$$

若对某个 j, $(x_N)_j = 0$, 则上式对某个 $\alpha > 0$ 成立的充要条件是 $r_j(x_N) \le 0$. 因此, 若对某个 j, $(x_N)_j = 0$ 且 $r_j(x_N) > 0$, 则 $x_N - \alpha r(x_N)$ 必不可行. 为了使得 $x_N - \alpha r(x_N)$ 满足 (13.18) 的约束条件, 我们可取 d_N 如下:

$$
(d_N)_j = \begin{cases} 0, & \text{若} x_j = 0, \text{ 且 } r_j(x_N) > 0, \\ -r_j(x_N), & \text{其它}. \end{cases}
\tag{13.19}
$$

从而, 当 $\alpha > 0$ 充分小时, $x_N + \alpha d_N \ge 0$. 下面考察如何确定 d_B, 使得 $x_B^+ = x_B + \alpha d_B \ge 0$. 注意到

$$\alpha A d = A(x^+ - x) = 0.$$

故得 $Ad = 0$. 因此 d_B 满足

$$B d_B + N d_N = 0, \tag{13.20}$$

或等价地

$$d_B = -B^{-1} N d_N,$$

其中 d_N 由 (13.19) 定义. 可以证明, 上面定义的 d 是 f 在 x 处的一个可行下降方向 (留作练习).

下面讨论步长 $\alpha > 0$ 的限制条件. 为保证 $x^+ \in D_L$, 步长 α 必须满足

$$x_i + \alpha d_i \ge 0, \qquad i \in \mathcal{E}.$$

令

$$\alpha_{\max} = \min\{-\frac{x_j}{d_j} \,\Big|\, d_j < 0\}. \tag{13.21}$$

则当 $\alpha \in [0, \alpha_{\max}]$ 时, x^+ 可行.

在上面的基础上, 我们得到求解 (13.17) 的如下算法.

算法 13.5 (既约梯度法)

步 *0* 取初始点 $x^{(0)}=(x_B^{(0)},x_N^{(0)})\in D_L$, 精度 $\epsilon>0$. 令 $B_0=B$, $N_0=N$, $k:=0$.

步 *1* 分解 $A=(B_k,N_k)$. 由公式 (13.16) 求 $r(x_{N_k}^{(k)})$. 由 (13.19) 和 (13.20) 确定 $d_{N_k}^{(k)}$ 和 $d_{B_k}^{(k)}$, 进而, 确定求 $d^{(k)}$.

步 *2* 若 $\|d^{(k)}\|\le\epsilon$, 则得解 $x^{(k)}$. 否则由线性搜索

$$\min_{0\le\alpha\le\alpha_{\max}} f(x^{(k)}+\alpha d^{(k)})=f(x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)})$$

确定步长 α_k, 其中, $\alpha_{\max}$ 由 (13.21) 确定. 令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}$.

步 *3* 若 $x_{B_k}^{(k+1)}>0$, 则基向量不变, 令 $k:=k+1$. 转步 *1*. 否则, 将 $x_{B_k}^{(k+1)}$ 中取值为零的某个分量 j 换出, $x_{N_k}^{(k+1)}$ 中分量最大者换入产生新的基 B_{k+1}. 令 $k:=k+1$. 转步 *1*.

例 13.3.1 用算法 *13.5* 求解下面的问题:

$$\begin{aligned}\min\quad & f(x)=(x_1-3)^2(4-x_2)\\ \text{s.t.}\quad & x_1+x_2-3\le 0,\\ & x_1-2\le 0,\\ & x_2-2\le 0,\\ & x_1\ge 0,\ \ x_2\ge 0.\end{aligned}$$

解 引入松弛变量 x_3, x_4, x_5, 将问题改写成:

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)=(x_1-3)^2(4-x_2)\\ \text{s.t.} & x_1+x_2+x_3-3=0,\\ & x_1+x_4-2=0,\\ & x_2+x_5-2=0,\\ & x_i\ge 0,\quad i=1,2,\ldots,5.\end{array}$$

取初始可行解为 $x^{(0)}=(0.2,1.8,1,1.8,0.2)^T$, 初始基变量为 x_1, x_2, x_3.

$$B=\begin{pmatrix}1&1&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\quad N=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\\0&1\end{pmatrix}.$$

由计算得

$$B^{-1}=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&-1&-1\end{pmatrix},\quad \nabla_{x_N}f(x)=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},\quad \nabla_{x_B}f(x)=\begin{pmatrix}2(x_1-3)(4-x_2)\\-(x_1-3)^2\\0\end{pmatrix}.$$

故得

$$
\begin{aligned}
x_B &= \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = B^{-1}b - B^{-1}Nx_N \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 2 - x_4 \\ 2 - x_5 \\ -1 + x_4 + x_5 \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

由于

$$
x_B^{(0)} = (0.2, 1.8, 1)^T, \qquad x_N^{(0)} = (1.8, 0.2)^T.
$$

故得

$$
r(x_N^{(0)}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -12.32 \\ -7.84 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12.32 \\ 7.84 \end{pmatrix},
$$

$$
d_N^{(0)} = -r(x_N^{(0)}) = (-12.32, -7.84)^T,
$$

$$
d_B^{(0)} = -B^{-1}Nd_N^{(0)} = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -12.32 \\ -7.84 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12.32 \\ 7.84 \\ -20.16 \end{pmatrix},
$$

$$
d^{(0)} = (12.32, 7.84, -20.16, -12.32, -7.84)^T,
$$

$$
\alpha_{\max} = \min\left\{\frac{1}{20.16}, \frac{1.8}{12.32}, \frac{0.2}{7.84}\right\} = \frac{0.2}{7.84} = 0.0255.
$$

求解

$$
\min_{0 \le \alpha \le 0.0255} f(x^{(0)} + \alpha d^{(0)})
$$

得解

$$
\alpha = \alpha_{\max} = 0.0255.
$$

$$
x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 d^{(0)} = (0.512, 2, 0.488, 1.488, 0)^T.
$$

由于 $x_B^{(1)} = (0.512, 2, 0.488)^T > 0$ 故基不改变. 因此,

$$
r(x_N^{(1)}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -9.95 \\ -6.18 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.95 \\ 6.18 \end{pmatrix}.
$$

又由于 $x_5^{(1)}=0$, $r_5(x_N^{(1)})=6.18>0$, 故

$$d_N^{(1)}=(-9.95,0)^T,\quad d_B^{(1)}=-B^{-1}Nd_N^{(1)}=(9.95,0,-9.95)^T,\quad d^{(1)}=(9.95,0,-9.95,-9.95,0)^T,$$

$$\alpha_{\max}=\min\left\{\frac{0.488}{9.95},\frac{1.488}{9.95}\right\}=\frac{0.488}{9.95}=0.049.$$

由线性搜索可得 $\alpha_1=\alpha_{\max}=0.049$. 故得

$$x^{(2)}=(1,2,0,1,0)^T.$$

进行基变量替换: $x_3^{(2)}=0$, 故 x_3 换出. $x_4^{(2)}>x_5^{(2)}$. 故 x_4 换人换入. 得新的基

$$B=\begin{pmatrix}1&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad N=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\\0&1\end{pmatrix}.$$

由计算得

$$B^{-1}=\begin{pmatrix}1&0&-1\\0&0&1\\-1&1&1\end{pmatrix},\quad B^{-1}N=\begin{pmatrix}1&-1\\0&1\\-1&1\end{pmatrix},$$

$$\nabla_{x_N}f(x)=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},\quad \nabla_{x_B}f(x)=\begin{pmatrix}2(x_1-3)(4-x_2)\\-(x_1-3)^2\\0\end{pmatrix}.$$

故

$$r(x_N^{(2)})=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}1&0&-1\\-1&1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-8\\-4\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}8\\-4\end{pmatrix},$$

$$d_N^{(2)}=\begin{pmatrix}0\\4\end{pmatrix},\quad d_B^{(2)}=\begin{pmatrix}4\\-4\\-4\end{pmatrix},\quad d^{(2)}=(4,-4,0,-4,4)^T,$$

$$\alpha_2=\alpha_{\max}=\frac{1}{4},\qquad x^{(3)}=x^{(2)}+\alpha_2d^{(2)}=(2,1,0,0,1)^T.$$

换出 x_3, 换入 x_5, 得新基

$$B=\begin{pmatrix}1&1&0\\1&0&0\\0&1&1\end{pmatrix},\quad N=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\\0&0\end{pmatrix},$$

由计算得

$$B^{-1}=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&-1&0\\-1&1&1\end{pmatrix},\quad B^{-1}N=\begin{pmatrix}0&1\\1&-1\\-1&1\end{pmatrix},$$

$$\nabla_{x_N} f(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla_{x_B} f(x) = \begin{pmatrix} 2(x_1-3)(4-x_2) \\ -(x_1-3)^2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

得

$$r(x_N^{(3)}) = (1,5)^T \geq 0, \quad d_N^{(3)} = 0.$$

从而， $x^{(3)}$ 为最优解.

可行方向法与既约梯度法都可能出现拉锯现象．为了避免这一现象，可改变 d_N 的取法如下：

$$(d_N)_j = \begin{cases} -(x_N)_j r_j(x_N), & 若\ r_j(x_N) > 0, \\ -r_j(x_N), & 若\ r_j(x_N) \leq 0. \end{cases} \tag{13.22}$$

下面的定理说明这样定义 d 的合理性.

定理 13.3.1 设 x 是问题 (13.17) 的可行解， $A=(B,N)$, B 非奇异， $x=(x_B,x_N)$, $x_B>0$. 又设 f 在点 x 处可微， d 由 (13.22) 和 (13.20) 产生．若 $d \neq 0$, 则 d 是 f 在 x 处的可行下降方向．而且， $d=0$ 的充要条件是： x 是问题 (13.17) 的 K-K-T 点.

证明 先证明 d 是可行方向．由 d 的定义，有

$$Ad = Bd_B + Nd_N = B(-B^{-1}N)d_N + Nd_N = 0.$$

而且，当 $(x_N)_j = 0$ 时，有 $(d_N)_j \geq 0$. 又 $x_B > 0$, 因此由可行方向的定义知， d 是 x 处的可行方向. 又由于

$$\begin{aligned} \nabla f(x)^T d &= \nabla_{x_N} f(x)^T d_N + \nabla_{x_B} f(x)^T d_B \\ &= \nabla_{x_N} f(x)^T d_N - \nabla_{x_B} f(x)^T B^{-1} N d_N \\ &= r(x_N)^T d_N. \end{aligned}$$

若 $d_N \neq 0$, 则由 d_N 的定义， $r(x_N)^T d_N < 0$, 即 d 是 f 在 x 处的下降方向.

下面证明 $d=0$ 的充要条件是： x 是问题 (13.17) 的 K-K-T 点，或等价地，存在 $\lambda = (\lambda_B, \lambda_N) \geq 0$, μ 使得

$$\begin{pmatrix} \nabla_{x_B} f(x) \\ \nabla_{x_N} f(x) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} B^T \\ N^T \end{pmatrix} \mu - \begin{pmatrix} \lambda_B \\ \lambda_N \end{pmatrix} = 0, \tag{13.23}$$

且

$$\lambda_B^T x_B = 0, \qquad \lambda_N^T x_N = 0.$$

若 x 是问题 (13.17) 的 K-K-T 点，则由于 $x_B > 0$, 可得 $\lambda_B = 0$. 从而，由 (13.23) 的第一个方程得

$$\mu = -B^{-T} \nabla_{x_B} f(x).$$

又由 (13.23) 的第二个方程得

$$0 \leq \lambda_N = \nabla_{x_N} f(x) - (B^{-1}N)^T \nabla_{x_B} f(x) = r(x_N).$$

因此，

$$r(x_N)^T x_N = 0.$$

于是，由 d 的定义有 $d = 0$.

反之，若 $d = 0$, 由 d 的定义知 $r(x_N) \geq 0$, 而且 $r(x_N)^T x_N = 0$. 令

$$\lambda_B = 0, \qquad \lambda_N = r(x_N), \qquad \mu = -B^{-T} \nabla_{x_B} f(x).$$

则， (x, λ, μ) 满足 K-K-T 条件. **证毕**

§13.4 广义既约梯度法

本节介绍广义既约梯度法 (GRG 算法) .

考察等式约束问题

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & h_i(x) = 0,\ i \in \mathcal{E} = \{1, 2, \ldots, m\}. \end{array} \tag{13.24}$$

令 $h(x) = (h_1(x), \cdots, h_m(x))^T$, $x = (x_B,\, x_N)$. 设在 x 附近的 Jacobi 矩阵 $\nabla_{x_B} h(x)$ 满秩. 由隐函数存在定理知关于 x_N 的方程组

$$h(x_B, x_N) = 0 \tag{13.25}$$

有惟一解 $x_B = \phi(x_N)$. 利用此关系式，问题 (13.24) 可等价地转化为无约束问题：

$$\min f(\phi(x_N), x_N) \triangleq F(x_N), \quad x_N \in R^{n-m}. \tag{13.26}$$

函数 F 的梯度称为 f 的既约梯度. 下面推导 f 的既约梯度的表达式. 用 $\dfrac{\partial h(x)}{\partial x_N}$ 表示 h 对 x_N 的 Jacobi 矩阵，即若 $x_N = (x_1, \ldots, x_t)^T$, $t = n - m$, 则

$$\frac{\partial h(x)}{\partial x_N} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial h_1(x)}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial h_1(x)}{\partial x_t} \\ \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial h_m(x)}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial h_m(x)}{\partial x_t} \end{pmatrix}.$$

由 (13.25) 得

$$\Big(\frac{\partial h(x)}{\partial x_N}\Big)^T + \Big(\frac{\partial \phi(x_N)}{\partial x_N}\Big)^T \Big(\frac{\partial h(x)}{\partial x_B}\Big)^T = 0$$

$$\begin{aligned} \nabla F(x_N) &= \nabla_{x_N} f(x) + \Big(\frac{\partial \phi(x_N)}{\partial x_N}\Big)^T \nabla_{x_B} f(x) \\ &= \nabla_{x_N} f(x) - \Big(\frac{\partial h(x)}{\partial x_N}\Big)^T \Big(\frac{\partial h(x)}{\partial x_B}\Big)^{-T} \nabla_{x_B} f(x) \\ &\triangleq \nabla_{x_N} f(x) + \Big(\frac{\partial h(x)}{\partial x_N}\Big)^T \lambda, \end{aligned} \tag{13.27}$$

其中

$$\lambda = \Big(\frac{\partial h(x)}{\partial x_B}\Big)^{-T} \nabla_{x_B} f(x)$$

是线性方程组

$$\left(\frac{\partial h(x)}{\partial x_B}\right)^T \lambda + \nabla_{x_B} f(x) = 0 \tag{13.28}$$

的解．因此， (13.27) 也可以写成：

$$\nabla F(x_N) = \nabla_{x_N} L(x,\lambda), \tag{13.29}$$

其中

$$L(x,\lambda) = f(x) + \lambda^T h(x)$$

是问题 (13.24) 的 Lagrange 函数， λ 是线性方程组 (13.28) 的解.

求解问题 (13.24) 的广义既约梯度法即求解 (13.26) 的最速下降法．其计算步骤如下：

算法 13.6 *(广义既约梯度法)*

步 *0* 取初始可行点 $x^{(0)} = (x_B^{(0)}, x_N^{(0)})$, 常数 $\sigma \in (0,1)$. 精度 $\epsilon > 0$. 令 $k := 0$.

步 *1* 计算

$$\frac{\partial h(x)}{\partial x} = \left(\frac{\partial h(x)}{\partial x_B}, \frac{\partial h(x)}{\partial x_N}\right).$$

由公式 (13.28) 求 λ. 并由 (13.29) 求 $\nabla F(x_N^{(k)})$.

步 *2* 若 $\|\nabla F(x_N^{(k)})\| \le \epsilon$, 则得解 $x^{(k)}$. 否则令 $d_N^{(k)} = -\nabla F(x_N^{(k)})$. 取 $\alpha := 1$.

步 *3* 令

$$x_N^{(k+1)} = x_N^{(k)} + \alpha d_N^{(k)}.$$

步 *4* 以 $x_B^{(k)}$ 为初始点，用 *Newton* 法求解方程组

$$h(x_B, x_N^{(k+1)}) = 0$$

得 $x_B^{(k+1)}$.

步 *5* 若

$$F(x_N^{(k+1)}) > F(x_N^{(k)}) + \sigma\alpha \nabla F(x_N^{(k)})^T d_N^{(k)}, \tag{13.30}$$

则令 $\alpha := \frac{1}{2}\alpha$. 转步 *3*. 否则，令 $x^{(k+1)} = (x_B^{(k+1)}, x_N^{(k+1)})$, $k := k+1$. 转步 *2*.

算法 13.6 的收敛性定理如下 (参考 [27, 定理 11.3.3])：

定理 13.4.1 设 f, h 二次连续可微．并设 $\left(\frac{\partial h(x)}{\partial x_B}\right)^{-1}$ 一致有界．则必有

$$\lim_{k\to\infty} \|\nabla f(x^{(k)})\| = 0,$$

或

$$\lim_{k\to\infty} f(x^{(k)}) = -\infty.$$

习题 13

1. 考察线性约束问题

$$\min \quad f(x)=\frac{1}{2}x_1^2-x_1x_2+x_2^2-x_3, \qquad \text{s.t.} \quad x_1\ge 0,\ \ x_2\ge 0,\ \ x_3\ge 1.$$

求出函数 f 在 $x=(1,0,2)^T$ 处的一个可行下降方向.

2. 设 $f: R^n\to R$ 连续可微有下界且 ∇f Lipschitz 连续, $D\subset R^n$ 是闭集. 考察如下约束问题:

$$\min\ f(x) \quad \text{s.t. } x\in D.$$

设 $x\in D$, $d\in FD(x;D)$ 且 $\nabla f(x)^Td<0$. 设 $\alpha_{\max}>0$ 使得 $x+td\in D$, $\forall t\in(0,\alpha_{\max}]$. 给定 ρ, $\sigma\in(0,1)$. 设 α 满足:

$$f(x+\alpha d)\le f(x)+\sigma\alpha\nabla f(x)^Td,$$

而且, 若 $\rho^{-1}\in(0,\alpha_{\max}]$, 则

$$f(x+\rho^{-1}\alpha d)>f(x)+\sigma\rho^{-1}\alpha\nabla f(x)^Td.$$

证明下面二式至少有一个成立:

$$f(x+\alpha^*)\le f(x)-\rho\frac{\sigma(1-\sigma)}{L}\Big(\frac{\nabla f(x)^Td}{\|d\|}\Big)^2,$$

或

$$f(x+\alpha^*)\le f(x)+\rho\frac{\mu(x)}{\|d\|}\nabla f(x)^Td,$$

其中 L 是 ∇f 的 Lipschitz 常数, $\mu(x)$ 是 x 到可行域边界的距离, 即

$$\mu(x)=\inf_{y\neq D}\|x-y\|.$$

3. 设上一题的条件成立. 记 α^* 是采用精确线性搜索得到的步长, 即 α^* 满足

$$f(x+\alpha^*d)=\min_{0<\alpha\le t_{\max}}f(x+\alpha d)$$

证明下面二式至少有一个成立:

$$f(x+\alpha^*d)\le f(x)-\frac{1}{4L}\frac{(\nabla f(x)^Td)^2}{\|d\|^2},$$

或

$$f(x+\alpha^*d)\le f(x)+\frac{\mu(x)}{2\|d\|}\nabla f(x)^Td.$$

4. 设 $x\in D_L$, $\bar d$ 是下面线性规划问题的解:

$$\begin{array}{ll}\min & \nabla f(x)^Td\\ \text{s.t.} & a_i^Td\ge 0,\ i\in\mathcal{I}(x),\\ & a_j^Td=0,\ j\in\mathcal{E},\\ & \nabla f(x)^Td\ge -1.\end{array}$$

(1) 当 $\nabla f(x)^T\bar d=0$ 时, x 是问题 (13.1) 的 K-K-T 点.

(2) 当 $\nabla f(x)^T\bar d\neq 0$ 时, $\nabla f(x)^T\bar d<0$. 特别, $\bar d$ 是 f 在 x 处的可行下降方向.

5. 考察如下凸规划问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = \frac{4}{3}(x_1^2 - x_1x_2 + x_3^2)^{3/4} - x_3 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 \ge 0,\ x_2 \ge 0,\ 0 \le x_3 \le 2. \end{aligned}$$

 (i) 证明该问题有惟一解 $x^* = (0, 0, 2)^T$.

 (ii) 设 $\{x^{(k)}\}$ 表示从初始点 $x^{(0)} = (0, a, 0)^T$ 出发， $a \le 1/(2\sqrt{2})$, 采用 Zoutendijk 算法产生的点列. 证明：

$$x^{(1)} = (\frac{1}{2}a,\ 0,\ \frac{1}{2}\sqrt{a})^T.$$

 (iii) 证明：对任何 $k \ge 2$, 有

$$x^{(k)} = \begin{cases} (0,\ \left(\dfrac{1}{2}\right)^k a,\ \dfrac{1}{2}\displaystyle\sum_{j=0}^{k-1}\left(\dfrac{a}{2^j}\right)^{1/2}), & k \ge 3 \text{ 为偶数}, \\ (\left(\dfrac{1}{2}\right)^k a,\ 0,\ \dfrac{1}{2}\displaystyle\sum_{j=0}^{k-1}\left(\dfrac{a}{2^j}\right)^{1/2}), & k \ge 3 \text{ 为奇数}. \end{cases}$$

 (iv) 证明 $\{x^{(k)}\}$ 收敛但其极限既不是问题的解也不是问题的 K-K-T 点.

6. 证明定理 13.1.2.

7. 设 $f: R^n \to R$ 连续可微且 ∇f Lipschitz 连续， D 是问题 (13.1) 的可行域， $\{x^{(k)}\}$ 是采用下面的修正 Armijo 型线性搜索的 Zoutendijk 算法产生的点列：给定正数 $\sigma > 0$, $\rho, \sigma_1 \in (0, 1)$, α_k 是集合 $\{\rho^i,\ i = 0, 1, 2, \ldots\}$ 中使得下式成立且 $x^{(k)} + \alpha d^{(k)} \in D$ 的最大者：

$$f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) \le f(x^{(k)}) + \sigma_1 \rho^i \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} - \sigma \|\rho^i d^{(k)}\|^2. \tag{13.31}$$

 记 $\Omega = \{x \in R^n \mid f(x) \le f(x^{(0)})\}$. 证明：若 $\Omega \cap D$ 有界， $\bar{x}$ 是 $\{x^{(k)}\}$ 的极限点且在该点处 LICQ 成立，则 $\bar{x}$ 是问题 (13.1) 的 K-K-T 点.

8. 在上一题的基础上，建立采用修正 Armijo 型线性搜索 (13.31) 的 Frank-Wolfe 算法的收敛性定理.

9. 设 $(z^{(k)}, d^{(k)})$ 是问题 (13.7) 的解且 $z^{(k)} < 0$. 证明：

 (i) $d^{(k)}$ 是问题 (13.5) 在 $x^{(k)}$ 处的一个可行下降方向.

 (ii) $z^{(k)} = 0$ 的充要条件是 $x^{(k)}$ 是问题 (13.5) 的一个 K-K-T 点.

10. 设 f, g_i, $i \in \mathcal{I}$ 连续可微， $\{x^{(k)}\}$ 和 $\{d^{(k)}\}$ 分别是 Topkis-Veinott 算法求解问题 (13.5) 产生的点列和方向序列. 记 D 是问题的可行域. 证明：对 $\{(x^{(k)},\ d^{(k)})\}$ 的任一收敛子列 $\{(x^{(k)},\ d^{(k)})\}_{k\in K}$, 下面两种情形不会同时出现：

 (1) 存在 $\bar{\alpha} > 0$ 使得

$$x^{(k)} + \alpha d^{(k)} \in D, \quad \forall \alpha \in [0, \bar{\alpha}].$$

 (2) $\displaystyle\lim_{k\in K,\, k\to\infty} \nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} < 0$.

11. 设 $f: R^n \to R$ 连续可微. 考察下面的约束问题：

$$\min f(x), \qquad x \ge 0.$$

 设 $x \ge 0$ 是一个可行点， D 是一个具有正对角元的对角矩阵. 记

$$x(\alpha) = [x - \alpha D \nabla f(x)]_+ = \max\{x - \alpha D \nabla f(x),\ 0\}, \quad \alpha \ge 0.$$

(i) 证明：x 是问题的一个 K-K-T 点的充要条件是

$$x = x(\alpha), \quad \forall \alpha > 0.$$

(ii) 若 x 不是问题的 K-K-T 点，证明存在 $\bar{\alpha} > 0$ 使得

$$f(x(\alpha)) < f(x), \quad \forall \alpha \in (0, \bar{\alpha}].$$

12. 用算法 12.1 求解下面的线性约束问题

$$\text{(i)} \quad \begin{array}{ll} \min & f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 \\ \text{s.t.} & 3x_1 + x_2 \le 10, \\ & 1 \le x_1 \le 4. \end{array} \qquad \text{(ii)} \quad \begin{array}{ll} \min & f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2 - 2x_1 \\ \text{s.t.} & 3x_1 + x_2 \le 2, \\ & x_1 \le 1. \end{array}$$

13. 设 $\Omega \subset R^n$ 是闭凸集. 证明下面的不等式：

$$\begin{aligned} &(P_\Omega(x) - x)^T(y - P_\Omega(x)) \ge 0, \quad \forall x \in R^n, \forall y \in \Omega, \\ &(P_\Omega(x) - P_\Omega(y))^T(x - y) \ge \|P_\Omega(x)) - P_\Omega(y)\|^2, \quad \forall x, y \in R^n, \\ &\|P_\Omega(x) - P_\Omega(y)\|^2 \le \|x - y\|^2 - \|P_\Omega(x) - x + y - P_\Omega(y)\|^2, \quad \forall x, y \in R^n, \\ &\|P_\Omega(x) - y\|^2 \le \|x - y\|^2 - \|P_\Omega(x) - x\|^2, \quad \forall x \in R^n, \forall y \in \Omega. \end{aligned}$$

14. 设 $\Omega \subset R^n$ 是闭凸集， $x \in \Omega$, $d \in R^n$, $x(t) = P_\Omega(x + td)$. 证明：

(i) 函数 $\theta_1(t) = d^T(x - x(t))$ 关于 $t > 0$ 单调非增.

(ii) 函数 $\theta_2(t) = d^T(x - x(t))/t$ 关于 $t > 0$ 单调非减.

(iii) 函数 $\theta_3(t) = \|x - x(t)\|$ 关于 $t > 0$ 单调非减.

(iv) 函数 $\theta_4(t) = \|x - x(t)\|/t$ 关于 $t > 0$ 单调非增.

(v) 函数 $\theta_5(t) = \|x(t) - x - td\|$ 关于 $t > 0$ 单调非减.

(vi) 函数 $\theta_6(t) = \|x(t) - x - td\|/t$ 关于 $t > 0$ 单调非减.

15. 设 $\Omega \subset R^n$ 是非空闭凸集， $f : R^n \to R$ 连续可微. 考察下面的约束最优化问题：

$$\min\ f(x) \qquad x \in \Omega.$$

设 $P_\Omega(x)$ 是 $-\nabla f(x)$ 在 Ω 上的投影，即 $P_\Omega(x) \in \Omega$ 且满足

$$\|P_\Omega(x) + \nabla f(x)\| = \min\{\|u + \nabla f(x)\| \mid u \in \Omega\}.$$

证明下面的结论：

(i)

$$\nabla f(x)^T P_\Omega(x) = -\|P_\Omega(x)\|^2.$$

(ii)

$$\min\{\nabla f(x)^T d \mid d \in SFD(x, \Omega),\ \|d\| \le 1\} = -\|P_\Omega(x)\|.$$

(iii) $\nabla f(x)^T d \ge 0, \forall d \in SFD(x, \Omega)$ 的充要条件是 $P_\Omega(x) = 0$.

16. 证明关于投影矩阵的如下性质：

(i) 若 $P \in R^{n \times n}$ 是投影矩阵，则 P 是半正定的.

(ii) 矩阵 P 是投影矩阵的充要条件是 $Q = I - P$ 是投影矩阵.

(iii) 设 P 是投影矩阵，则

$$L \triangleq \{Px \mid x \in R^n\} \quad 与 \quad L^{\perp} \triangleq \{(I-P)x \mid x \in R^n\}$$

相互正交，而且， R^n 中的任何向量 x 可惟一分解为

$$x = p + q, \quad p \in L, q \in L^{\perp}.$$

17. 用 Frank-Wolfe 算法求解下面的问题

(i)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -2x_1 - 3x_2 + 5x_3 \\ \text{s.t.} & x_1 + x_2 + x_3 = 7, \\ & 2x_1 - 5x_2 + x_3 \geq 10, \\ & x_1, x_2, x_3 \geq 0. \end{array}$$

(ii)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = -3x_1 - 4x_2 - 2x_3 \\ \text{s.t.} & x_1 + x_2 + x_3 + x_4 \leq 30, \\ & 3x_1 + 6x_2 + x_3 - 2x_4 \leq 0, \\ & x_1, x_2, x_3, x_4 \geq 0. \end{array}$$

18. 用 Rosen 投影梯度法求解下面的问题

(i)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 - 3x_1 - x_2 \\ \text{s.t.} & x_1 + x_2 + x_3 = 1, \\ & x_1 - x_2 + 3 \geq 0, \\ & x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0,\ x_3 \geq 0. \end{array}$$

(ii)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + 2x_1 \\ \text{s.t.} & x_1 - 2x_2 \geq 0, \\ & x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0. \end{array}$$

19. 用既约梯度法求解下面的问题

(i)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 - x_1x_2 - x_1 \\ \text{s.t.} & x_1 + x_2 + x_3 = 3, \\ & x_1 + 5x_2 + x_4 = 6, \\ & x_i \geq 0,\ i = 1, 2, 3, 4. \end{array}$$

(ii)
$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = x_1^2 + 2x_2^2 - x_1x_2 + 4x_2 \\ \text{s.t.} & x_1 + x_2 + x_3 = 5, \\ & x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0,\ x_3 \geq 0. \end{array}$$

20. 设 $f : R^n \to R$ 连续可微. $A = (B, N) \in R^{m \times n}$ 行满秩， $b \in R^m$. 设 $x = (x_B,^T, x_N^T)^T$ 是线性约束问题 (13.17) 的一个可行点， $x_B > 0$ 且 $B \in R^{m \times m}$ 非奇异. 设 d 由 (13.19) 与 (13.20) 定义. 证明:

(i) 若 $d \neq 0$, 则 d 是 f 在 x 处的一个可行下降方向.

(ii) $d = 0$ 的充要条件是 x 是问题 (13.17) 的一个 K-K-T 点.

第十四章　约束问题算法 (III) — 序列二次规划算法

本章将求解无约束最优化问题的 Newton 法和拟 Newton 法推广到求解约束最优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(x) \geq 0, \qquad i \in \mathcal{I} = \{1, 2, \ldots, m_1\}, \\ & h_j(x) = 0, \qquad j \in \mathcal{E} = \{m_1 + 1, \ldots, m\}. \end{aligned} \tag{14.1}$$

假设 $f, g_i, h_j, i \in \mathcal{I}, j \in \mathcal{E}$ 二次连续可微,记 $g_{\mathcal{I}}(x) = (g_1(x), \ldots, g_{m_1}(x))^T$, $h_{\mathcal{E}}(x) = (h_{m_1+1}(x), \ldots, h_m(x))^T$.

§14.1　局部序列二次规划算法

§14.1.1　等式约束优化的 Lagrange-Newton 法

考虑等式约束最优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & h_j(x) = 0, \quad j \in \mathcal{E} = \{1, 2, \ldots, m\}. \end{aligned} \tag{14.2}$$

记 $A(x) = h'_{\mathcal{E}}(x)$ 为约束函数在 x 点的 Jacobi 矩阵．设 x^* 是问题 (14.2) 的解，并设 $A(x^*)$ 行满秩．则由约束优化的最优性条件，存在 $\lambda^* \in R^m$ 使得 (x^*, λ^*) 满足如下非线性方程 (称为问题 (14.2) 的 K-K-T 点)

$$F(x, \lambda) \triangleq \begin{pmatrix} \nabla_x L(x, \lambda) \\ h_{\mathcal{E}}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla f(x) - A(x)^T \lambda \\ h_{\mathcal{E}}(x) \end{pmatrix} = 0, \tag{14.3}$$

其中

$$L(x, \lambda) = f(x) - \lambda^T h_{\mathcal{E}}(x)$$

称为问题 (14.2) 的 Lagrange 函数.

上面的分析表明：等式约束最优化问题 (14.2) 的 K-K-T 点为方程 (14.3) 的解．因此，我们建立求解 (14.3) 的牛顿迭代算法．记 $W(x, \lambda) = \nabla_x^2 L(x, \lambda)$, 则函数 $F(x, \lambda)$ 的 Jacobi 矩阵为

$$\begin{pmatrix} W(x, \lambda) & -A(x)^T \\ A(x) & 0 \end{pmatrix}.$$

由非线性方程的牛顿计算式 (8.2) 直接导出解 (14.3) 的 Newton 迭代格式为:

$$\begin{pmatrix} x^{(k+1)} \\ \lambda^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^{(k)} \\ \lambda^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d^{(k)} \\ d_\lambda^{(k)} \end{pmatrix}, \tag{14.4}$$

其中 $(d^{(k)}, d_\lambda^{(k)})$ 是线性方程组

$$\begin{pmatrix} W(x^{(k)}, \lambda^{(k)}) & -A(x^{(k)})^T \\ A(x^{(k)}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ d_\lambda \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla f(x^{(k)}) - A(x^{(k)})^T \lambda^{(k)} \\ h_{\mathcal{E}}(x^{(k)}) \end{pmatrix} \tag{14.5}$$

的解．我们称由 (14.4)-(14.5) 建立的求解约束最优化问题 (14.2) 的算法为 Lagrange-Newton 法.

由牛顿法的收敛定理 8.1.1 可得到如下 Lagrange-Newton 法的收敛性.

定理 14.1.1 设 f 和 $h_{\mathcal{E}}$ 在 x^* 的某邻域内三次连续可微， $A(x^*)$ 行满秩，而且在 x^* 处二阶充分条件满足. 则当 $(x^{(0)},\lambda^{(0)})$ 充分靠近 (x^*,λ^*) 时必有 $x^{(k)}\to x^*$, $\lambda^{(k)}\to\lambda^*$, 且

$$\left\|\begin{pmatrix}x^{(k+1)}-x^*\\ \lambda^{(k+1)}-\lambda^*\end{pmatrix}\right\| = O\left(\left\|\begin{pmatrix}x^{(k)}-x^*\\ \lambda^{(k)}-\lambda^*\end{pmatrix}\right\|^2\right). \tag{14.6}$$

证明 $\{x^{(k)},\lambda^{(k)}\}$ 实际上由 Newton 法产生. 由于 $A(x^*)$ 行满秩且二阶充分条件成立，由定理 11.1.1 知，矩阵

$$\begin{pmatrix}W(x^*,\lambda^*) & -A(x^*)^T\\ A(x^*) & 0\end{pmatrix}$$

非奇异. 从而，利用定理 8.1.1 可直接得到定理的结论. **证毕**

§14.1.2 局部 SQP 算法

上节介绍的 Lagrange-Newton 法不易直接用于求解不等式约束优化问题. 为此, 我们导出 Lagrange-Newton 法的另一种计算方式. 由约束最优化的 K-K-T 条件可推出， Lagrange-Newton 迭代式 (14.4)-(14.5) 计算的 $d^{(k)}$ 等价于解下面二次规划问题

$$\begin{array}{ll}\min & q_k(d)=\frac{1}{2}d^TW(x^{(k)},\lambda^{(k)})d+\nabla_x L(x^{(k)},\lambda^{(k)})^Td\\ \text{s.t.} & A(x^{(k)})d+h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})=0\end{array}. \tag{14.7}$$

优化问题 (14.7) 可进一步化简. 对问题 (14.7) 的任何可行点 d 有

$$\nabla_x L(x^{(k)},\lambda^{(k)})^Td=\nabla f(x^{(k)})^Td-\lambda^{(k)T}A(x^{(k)})d=\nabla f(x^{(k)})^Td+\lambda^{(k)T}h_{\mathcal{E}}(x^{(k)}).$$

因此，问题 (14.7) 等价于如下的二次规划问题

$$\begin{array}{ll}\min & q_k(d)=\frac{1}{2}d^TW(x^{(k)},\lambda^{(k)})d+\nabla f(x^{(k)})^Td\\ \text{s.t.} & A(x^{(k)})d+h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})=0.\end{array} \tag{14.8}$$

直接计算得到问题 (14.8) 的 K-K-T 条件为

$$\begin{pmatrix}W(x^{(k)},\lambda^{(k)}) & -A(x^{(k)})^T\\ A(x^{(k)}) & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}d\\ \lambda^+\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}\nabla f(x^{(k)})\\ h_{\mathcal{E}}(x^{k)})\end{pmatrix}. \tag{14.9}$$

比较 (14.4), (14.7) 与 (14.9), 不难发现，求解非线性方程组 (14.3) 的 Lagrange-Newton 法可等价地叙述为：求二次规划问题 (14.8) 的 K-K-T 点 $(d^{(k)},\lambda^{(k+1)})$, 令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+d^{(k)}$, 由此产生迭代序列 $\{(x^{(k)},\lambda^{(k)})\}$. 通过求解 (14.8) 产生迭代序列的方法称为解等式约束优化的 *序列二次规划 (SQP) 算法*, 称 (14.8) 为 QP 子问题.

类似于如上等式约束优化问题 (14.2) 的序列二次规划算法，我们可构造求解一般约束优化问题 (14.1) 的序列二次规划算法. 在当前点 $(x^{(k)},\lambda^{(k)})$ 处，构造如下二次规划子问题:

$$\begin{array}{ll}\min & q_k(d)=\dfrac{1}{2}d^TW_kd+\nabla f(x^{(k)})^Td\\ \text{s.t.} & \nabla g_{\mathcal{I}}(x^{(k)})^Td+g_{\mathcal{I}}(x^{(k)})\ge 0,\\ & \nabla h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})^Td+h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})=0.\end{array} \tag{14.10}$$

解上面二次规划子问题得解 $d^{(k)}$ 及对应的乘子 $\lambda^{(k+1)}$, 并产生新的迭代点 $(x^{(k+1)}, \lambda^{(k+1)})$, 其中, $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$. 子问题 (14.10) 是问题 (14.1) 的近似二次规划. 我们称上面的算法为求解约束问题 (14.1) 的局部 Newton- 序列二次规划算法 (简称为局部 Newton-SQP 算法).

对含有不等式约束的最优化问题 (14.1) 的 K-K-T 点 (x^*, λ^*), 若对所有 $i \in \mathcal{I}$, 均有 $(\lambda_i^*)^2 + g_i(x^*)^2 \neq 0$, 则称在该点处满足严格互补松驰条件. 可以证明若在问题 (14.1) 的解 x^* 处 LICQ 成立, 对应的 Lagrange 函数的 Hessian 阵 $W(x^*, \lambda^*)$ 在 $A(x^*)$ 的零空间上正定, 且严格互补松驰条件成立, 则当 $(x^{(k)}, \lambda^{(k)})$ 充分靠近 (x^*, λ^*) 时, 子问题 (14.10) 的有效集与 (14.1) 的有效集一致, 即问题 (14.1) 在 (x^*, λ^*) 的邻域等价于某个等式约束问题.

类似于求解无约束最优化问题的拟 Newton 法, 可在 Newton-SQP 算法中用对称正定矩阵 B_k 近似 $W(x^{(k)}, \lambda^{(k)})$, 由此建立下面二次规划子问题

$$\begin{aligned} \min \quad & q_k(d) = \frac{1}{2} d^T B_k d + \nabla f(x^{(k)})^T d \\ \text{s.t.} \quad & \nabla g_{\mathcal{I}}(x^{(k)})^T d + g_{\mathcal{I}}(x^{(k)}) \geq 0, \\ & \nabla h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})^T d + h_{\mathcal{E}}(x^{(k)}) = 0. \end{aligned} \tag{14.11}$$

求解约束问题 (14.1) 的局部 SQP 算法的计算步骤如下:

算法 14.1 *(局部 SQP 算法)*

步 0 取初始点对 $(x^{(0)}, \lambda^{(0)})$, 对称正定阵 B_0. 令 $k := 0$.

步 1 若 $(x^{(k)}, \lambda^{(k)})$ 满足约束问题 (14.1) 的 K-K-T 条件, 则停止计算得解 $x^{(k)}$; 否则转步 2.

步 2 解 SQP 子问题 (14.10) 或 (14.11) 得解 $(d^{(k)}, \lambda^{(k+1)})$.

步 3 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$, 若采用 SQP 子问题 (14.10), 则令 $k := k+1$ 转步 1 ; 否则转步 4.

步 4 用适当的拟 Newton 法修正 B_k 得 B_{k+1}. 令 $k := k+1$ 转步 1.

§14.1.3 QP 子问题

该节考虑局部 SQP 算法 14.1 中的子问题 (14.11). 求解 QP 子问题的两个相关问题是矩阵 B_k 的修正方式和子问题的相容性 (或称可行性).

对于 B_k 的修正, 一方面, B_k 应为 Lagrange 函数 Hessian 阵的近似. 另一方面我们希望 B_k 保持对称正定性, 使得相应的 QP 子问题是一个严格凸二次规划问题. 类似于求解无约束问题的拟 Newton 法, 我们令

$$s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}, \quad y^{(k)} = \nabla_x L(x^{(k+1)}, \lambda^{(k+1)}) - \nabla_x L(x^{(k)}, \lambda^{(k+1)}) \approx W(x^{(k+1)}, \lambda^{(k+1)}) s^{(k)},$$

然后利用 BFGS 修正公式 (4.13) 计算 B_{k+1}. 与无约束问题不同的是这种修正不能保证条件 $y^{(k)T} s^{(k)} > 0$ 成立. 因此, B_k 对称正定不能保证 B_{k+1} 的正定性. 为了克服此困难, Powell(1978) 利用 $y^{(k)}$ 和 $s^{(k)}$ 的一个凸组合代替 $y^{(k)}$, 记为

$$\bar{y}^{(k)} = \begin{cases} y^{(k)}, & \text{如果 } y^{(k)T} s^{(k)} \geq 0.2 s^{(k)T} B_k s^{(k)}, \\ \theta_k y^{(k)} + (1-\theta_k) B_k s^{(k)}, & \text{其它}. \end{cases} \tag{14.12}$$

其中

$$\theta_k = \frac{0.8 s^{(k)T} B_k s^{(k)}}{s^{(k)T} B_k s^{(k)} - y^{(k)T} s^{(k)}}.$$

修正后的 BFGS 计算式为：

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s^{(k)} s^{(k)T} B_k}{s^{(k)T} B_k s^{(k)}} + \frac{\bar{y}^{(k)} \bar{y}^{(k)T}}{\bar{y}^{(k)T} s^{(k)}}. \tag{14.13}$$

容易验证，若 B_k 对称正定，则 $\bar{y}^{(k)T} s^{(k)} > 0$, 从而 B_{k+1} 正定．我们称这种修正方法为 *截断 BFGS 修正*.

例 14.1.1 *用局部 SQP 算法 14.1 求解下面的问题：*

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = -x_1 - x_2 \\ \text{s.t.} \quad & g_1(x) = -x_1^2 - x_2^2 + 1 \geq 0, \\ & g_2(x) = -x_1^2 + x_2 \geq 0. \end{aligned}$$

取初值 $x^{(0)} = (0.5, 1)^T$. 采用终止准则： $\|d^{(k)}\| \leq 10^{-5}$. 此问题的最优解为 $x^* = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})^T$.

解 我们用两种方法求解．(1) Newotn-SQP 算法，即

$$B_k = W(x^{(k)}, \lambda^{(k)}) = \begin{pmatrix} 2(\lambda_1^{(k)} + \lambda_2^{(k)}) & 0 \\ 0 & 2\lambda_2^{(k)} \end{pmatrix}.$$

(2) 用 Powell 的截断 BFGS 修正公式 (14.13).

计算结果分别见表 14.1 和表 14.2.

表 14.1 Newton-SQP 算法求解例 14.1.1 的计算结果

k	$x^{(k)}$	$\lambda^{(k)}$	$g(x^{(k)})$	$d^{(k)}$	$\|d^{(k)}\|$
0	$(0.5000, 1.0000)^T$	$(0, 0)^T$	$(-0.7500, 0.2500)^T$	$(0.4167, -0.3333)^T$	0.5336
1	$(0.9167, 0.6667)^T$	$(0.3333, 0.6667)^T$	$(0.1736, 0.2847)^T$	$(-0.1695, 0.0196)^T$	0.1707
2	$(0.7471, 0.6863)^T$	$(0, 0.7304)^T$	$(-0.1281, 0.0291)^T$	$(-0.0384, 0.0205)^T$	0.0435
3	$(0.7088, 0.7068)^T$	$(0, 0.7067)^T$	$(-0.2044, 0.0019)^T$	$(-0.0017, 0.0003)^T$	0.0017
4	$(0.7071, 0.7071)^T$	$(0, 0.7071)^T$	$(-0.2071, 0)^T$	$10^{-5} * (-0.0490, -0.1518)^T$	$1.5949E-06$

表 14.2. 截断 BFGS-SQP 算法求解例 14.1.1 的计算结果

k	$x^{(k)}$	$g(x^{(k)})$	$\lambda^{(k+1)}$	$d^{(k)}$	$\|d^{(k)}\|$
0	$(0.5000, 1.0000)^T$	$(-0.7500, 0.2500)^T$	$(0, 0.6500)^T$	$(0.3500, -0.300)^T$	0.4610
1	$(0.8500, 0.7000)^T$	$(0.0225, 0.2125)^T$	$(0, 0.6857)^T$	$(-0.1391, 0.0172)^T$	0.1402
2	$(0.7109, 0.7172)^T$	$(-0.2118, 0.0197)^T$	$(0, 0.7055)^T$	$(-0.0025, -0.0112)^T$	0.0115
3	$(0.7083, 0.7060)^T$	$(-0.2043, 0.0001)^T$	$(0, 0.7071)^T$	$(-0.0012, 0.0011)^T$	0.0017
4	$(0.7071, 0.7071)^T$	$(-0.2072, 0.0000)^T$	$(0, 0.7071)^T$	$10^{-4} * (0.2844, -0.3044)^T$	$4.1655E-05$
5	$(0.7071, 0.7071)^T$	$(-0.2071, 0.0000)^T$	$(0, 0.7071)^T$	$10^{-8} * (-0.2150, 0.0924)^T$	$2.3404E-09$

对 QP 子问题的相容性，如果初始点取得不恰当，即使原问题可行，也可导致子问题不相容．例如，对于约束

$$\begin{cases} g_1(x) = -x + 1 \geq 0, \\ g_2(x) = x^2 \geq 0. \end{cases} \tag{14.14}$$

在点 $x = 3$ 处，其线性化约束

$$\begin{cases} -2 - d \geq 0, \\ 9 + 6d \geq 0 \end{cases}$$

不相容．

Powell 提出的方法较好地解决了这一问题．引进辅助变量 ξ, 首先解一个线性规划问题

$$\begin{aligned} \max \quad & \xi \\ \text{s.t.} \quad & \nabla g_i(x^{(k)})^T d + \xi g_i(x^{(k)}) \geq 0, \quad i \in V_k = \{i \in \mathcal{I} | g_i(x^{(k)}) < 0\}, \\ & \nabla g_i(x^{(k)})^T d + g_i(x^{(k)}) \geq 0, \quad i \in S_k = \{i \in \mathcal{I} | g_i(x^{(k)}) \geq 0\}, \\ & \nabla h_j(x^{(k)})^T d + \xi h_j(x^{(k)}) = 0, \quad j \in \mathcal{E}, \\ & 0 \leq \xi \leq 1. \end{aligned} \tag{14.15}$$

因 $\xi = 0, d = 0$ 为该线性规划问题的可行点， (14.15) 的最优解总是存在的，记为 $\bar{\xi}$. 显然有 $0 \leq \bar{\xi} \leq 1$, 且原子问题 (14.11) 相容当且仅当 $\bar{\xi} = 1$. 若 $\bar{\xi} = 0$ 或很小，则改变初始点重新开始．若 $\bar{\xi} > 0$, 我们将子问题 (14.11) 中的约束条件用 (14.15) 中的约束条件代替，即 SQP 子问题取为

$$\begin{aligned} \min \quad & q_k(d) = \tfrac{1}{2} d^T B_k d + \nabla f(x^{(k)})^T d \\ \text{s.t.} \quad & \nabla g_i(x^{(k)})^T d + \xi g_i(x^{(k)}) \geq 0, \quad i \in V_k = \{i \in \mathcal{I} | g_i(x^{(k)}) < 0\}, \\ & \nabla g_i(x^{(k)})^T d + g_i(x^{(k)}) \geq 0, \quad i \in S_k = \{i \in \mathcal{I} | g_i(x^{(k)}) \geq 0\}, \\ & \nabla h_j(x^{(k)})^T d + \xi h_j(x^{(k)}) = 0, \quad j \in \mathcal{E}, \end{aligned} \tag{14.16}$$

其中 ξ 取为 $(0, \bar{\xi}]$ 中的一个定值．

例如我们考察约束 (14.14), 在点 $x = 3$ 处建立的 (14.15) 为如下线性规划：

$$\begin{aligned} \max \quad & \xi \\ \text{s.t.} \quad & -d - 2\xi \geq 0, \\ & 6d + 9 \geq 0, \\ & 0 \leq \xi \leq 1. \end{aligned}$$

其最优解为 $\bar{\xi} = 3/4$. 若取 $\xi = 1/2$, 则 $\xi \in (0, \bar{\xi}]$, 且对应的 SQP 子问题 (14.16) 相容．

§14.1.4　局部 SQP 算法的超线性收敛性

我们作如下假设：

假设 14.1.1 (1) $f(x)$, $g_{\mathcal{I}}(x)$, $h_{\mathcal{E}}(x)$ 二次连续可微.

(2) $x^{(k)} \to x^*$ $(k \to \infty)$, 且 x^* 为问题 (14.1) 的 *K-K-T* 点.

(3) 在 x^* 处 *LICQ* 成立, 即向量组

$$\nabla g_i(x^*), \quad \nabla h_j(x^*), \quad i \in \mathcal{I}(x^*),\ j \in \mathcal{E} \tag{14.17}$$

线性无关.

(4) 在 x^* 点处二阶充分条件成立.

(5) 当 $x^{(k)}$ 充分靠近 x^* 时, 子问题 (14.11) 的解 $d^{(k)}$ 也是如下等式约束二次规划问题的解

$$\begin{aligned} \min \quad & \nabla f(x^{(k)})^T d + \frac{1}{2} d^T B_k d \\ \text{s.t.} \quad & \nabla g_i(x^{(k)})^T d + g_i(x^{(k)}) = 0, \qquad i \in \mathcal{I}(x^*), \\ & \nabla h_j(x^{(k)})^T d + h_j(x^{(k)}) = 0, \qquad j \in \mathcal{E}. \end{aligned} \tag{14.18}$$

在上面假设条件下, 可建立 $d^{(k)}$ 是超线性收敛步的等价条件. 其证明参看 [27, 定理 12.3.3].

定理 14.1.2 设假设条件 *14.1.1* 成立, 则 $\{x^{(k)}\}$ 超线性收敛的充要条件为

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|P_k(B_k - W(x^*, \lambda^*))d^{(k)}\|}{\|d^{(k)}\|} = 0, \tag{14.19}$$

其中 P_k 是到 $A(x^{(k)})^T = (\nabla g_{\mathcal{I}(x^{(k)})}(x^{(k)})^T, \nabla h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})^T)$ 零空间上的投影算子

$$P_k = I - A(x^{(k)})^T (A(x^{(k)})A(x^{(k)})^T)^{-1} A(x^{(k)}). \tag{14.20}$$

§14.2 全局 SQP 算法

本节介绍线性搜索全局 SQP 算法. 全局化方法需要选择一个函数作为算法下降性的检测, 以便在线性搜索算法中控制搜索步长以及在信赖域算法中调节信赖域半径. 我们称这种函数为效益函数. 在求解无约束问题的算法中, 自然的选择是目标函数本身, 在约束最优化中, 需建立一种既含目标函数信息又包含约束条件信息的函数. SQP 算法中常用的一类效益函数为 l_1 精确罚函数, 定义为

$$\begin{aligned} \Phi_1(x,\mu) &= f(x) + \mu[\|\min\{g_{\mathcal{I}}(x), 0\}\|_1 + \|h_{\mathcal{E}}(x)\|_1] \\ &= f(x) + \mu \sum_{i\in\mathcal{I}} |\min\{g_i(x), 0\}| + \sum_{j\in\mathcal{E}} |h_j(x)|, \end{aligned} \tag{14.21}$$

其中 μ 称为罚因子. 如下结论说明, 当罚参数满足一定条件时, 子问题 (14.11) 的解 $d^{(k)}$ 是 l_1 罚函数的下降方向.

引理 14.2.1 设 $(d^{(k)}, \lambda^{(k+1)})$ 是子问题 (14.11) 的解. 则 l_1 罚函数 $\Phi_1(x^{(k)}, \mu)$ 沿 $d^{(k)}$ 方向的方向导数满足

$$\begin{aligned} D(\Phi_1(x^{(k)}, \mu); d^{(k)}) \leq\ & -d^{(k)T} B_k d^{(k)} - \mu[\|\min\{g_{\mathcal{I}}(x^{(k)}), 0\}\|_1 \\ & + \|h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})\|_1] - \lambda_{\mathcal{I}}^{(k+1)T} g_{\mathcal{I}}(x^{(k)}) - \lambda_{\mathcal{E}}^{(k+1)T} h_{\mathcal{E}}(x^{(k)}). \end{aligned} \tag{14.22}$$

进一步, 若 $d^{(k)T} B_k d^{(k)} > 0$ 且 $\mu \geq \|\lambda^{(k+1)}\|_\infty$, 则 $d^{(k)}$ 是 l_1 精确罚函数在 $x^{(k)}$ 处的下降方向.

证明 利用中值定理得，对任何 $t>0,\ i\in\mathcal{I}$,

$$\begin{aligned}
&\min\{g_i(x^{(k)}+td^{(k)}),\ 0\}=\min\{g_i(x^{(k)})+t\nabla g_i(x^{(k)})^Td^{(k)},\ 0\}+o(t)\\
&=\ \min\{(1-t)g_i(x^{(k)})+t(g_i(x^{(k)})+\nabla g_i(x^{(k)})^Td^{(k)}),\ 0\}+o(t)\\
&\ge\ (1-t)\min\{g_i(x^{(k)}),\ 0\}+t\min\{g_i(x^{(k)})+\nabla g_i(x^{(k)})^Td^{(k)},\ 0\}+o(t)\\
&=\ (1-t)\min\{g_i(x^{(k)}),\ 0\}+o(t).
\end{aligned}$$

同理，对任何 $t>0,\ j\in\mathcal{E}$,

$$h_j(x^{(k)}+td^{(k)})=h_j(x^{(k)})+t\nabla h_j(x^{(k)})^Td^{(k)}+o(t)=(1-t)h_j(x^{(k)})+o(t).$$

因此，

$$\begin{aligned}
&\|\min\{g_\mathcal{I}(x^{(k)}+td^{(k)}),0\}\|_1-\|\min\{g_\mathcal{I}(x^{(k)}),0\}\|_1+\|h_\mathcal{E}(x^{(k)}+td^{(k)})\|_1-\|h_\mathcal{E}(x^{(k)})\|_1\\
&=\ \sum_{i\in\mathcal{I}}\Big(|\min\{g_i(x^{(k)}+td^{(k)}),0\}|-|\min\{g_i(x^{(k)}),0\}|\Big)+\sum_{j\in\mathcal{E}}\Big(|h_j(x^{(k)}+td^{(k)})|-|h_j(x^{(k)})|\Big)\\
&=\ \sum_{i\in\mathcal{I}}\Big(-\min\{g_i(x^{(k)}+td^{(k)}),0\}+\min\{g_i(x^{(k)}),0\}\Big)+\sum_{j\in\mathcal{E}}\Big(|(1-t)h_j(x^{(k)})|-|h_j(x^{(k)})|\Big)+o(t)\\
&\le\ t\Big(\sum_{i\in\mathcal{I}}\min\{g_i(x^{(k)}),0\}-\sum_{j\in\mathcal{E}}|h_j(x^{(k)})|\Big)+o(t)\\
&=\ -t\Big(\|\min\{g_\mathcal{I}(x^{(k)}),0\}\|_1+\|h_\mathcal{E}(x^{(k)})\|_1\Big)+o(t)
\end{aligned}$$

故得

$$\begin{aligned}
&D(\Phi_1(x^{(k)},\mu);d^{(k)})=\lim_{t\to0^+}\frac{\Phi_1(x^{(k)}+td^{(k)},\mu)-\Phi_1(x^{(k)},\mu)}{t}\\
&=\ \nabla f(x^{(k)})^Td^{(k)}+\mu\lim_{t\to0^+}t^{-1}\Big(\|\min\{g_\mathcal{I}(x^{(k)}+td^{(k)}),0\}\|_1-\|\min\{g_\mathcal{I}(x^{(k)}),0\}\|_1\\
&\quad+\|h_\mathcal{E}(x^{(k)}+td^{(k)})\|_1-\|h_\mathcal{E}(x^{(k)})\|_1\Big)\\
&\le\ \nabla f(x^{(k)})^Td^{(k)}-\mu\Big(\|\min\{g_\mathcal{I}(x^{(k)}),0\}\|_1+\|h_\mathcal{E}(x^{(k)})\|_1\Big).
\end{aligned}\tag{14.23}$$

再利用 (14.11) 的 K-K-T 条件得

$$\begin{aligned}
&\nabla f(x^{(k)})^Td^{(k)}=-d^{(k)T}B_kd^{(k)}+\lambda_\mathcal{I}^{(k+1)T}\nabla g_\mathcal{I}(x^{(k)})^Td^{(k)}+\lambda_\mathcal{E}^{(k+1)T}\nabla h_\mathcal{E}(x^{(k)})^Td^{(k)},\\
&\lambda_i^{(k+1)}\ge0,\quad \lambda_i^{(k+1)}(\nabla g_i(x^{(k)})^Td^{(k)}+g_i(x^{(k)}))=0,\quad i\in\mathcal{I}.
\end{aligned}$$

由于 $d^{(k)})$ 满足 (14.11), 故上面两式包含了

$$\nabla f(x^{(k)})^Td^{(k)}=-d^{(k)T}B_kd^{(k)}-\lambda_\mathcal{I}^{(k+1)T}g_\mathcal{I}(x^{(k)})-\lambda_\mathcal{E}^{(k+1)T}h_\mathcal{E}(x^{(k)}).$$

上式代入到 (14.23) 即得结论 (14.22).

注意到 $\lambda_i^{(k+1)} \geq 0, \forall i \in \mathcal{I}$, 因此,

$$\begin{aligned}
-\lambda_{\mathcal{I}}^{(k+1)T} g_{\mathcal{I}}(x^{(k)}) - \lambda_{\mathcal{E}}^{(k+1)T} h_{\mathcal{E}}(x^{(k)}) &= -\sum_{i\in\mathcal{I}} \lambda_i^{(k+1)} g_i(x^{(k)}) - \sum_{j\in\mathcal{E}} \lambda_j^{(k+1)} h_j(x^{(k)}) \\
&\leq \sum_{i\in\mathcal{I}} \lambda_i^{(k+1)} |\min\{g_i(x^{(k)}), 0\}| + \sum_{j\in\mathcal{E}} |\lambda_j^{(k+1)}|\, |h_j(x^{(k)})| \\
&\leq \|\lambda^{(k+1)}\|_\infty \Big(\|\min\{g_{\mathcal{I}}(x^{(k)}), 0\}\|_1 + \|h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})\|_1 \Big).
\end{aligned}$$

上式代入 (14.22) 即得

$$D(\Phi_1(x^{(k)}, \mu); d^{(k)}) \leq -d^{(k)T} B_k d^{(k)} - (\mu - \|\lambda^{(k+1)}\|_\infty) \Big(\|\min\{g_{\mathcal{I}}(x^{(k)}), 0\}\|_1 + \|h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})\|_1 \Big).$$

从而引理成立. **证毕**

由上引理我们建立求解问题 (14.1) 的全局 SQP 算法如下.

算法 14.2 *(**线性搜索** SQP **算法**)*

步 *0* 选取参数 $\mu > 0$, $\delta > 0$, $\epsilon > 0$. 取初始点 $x^{(0)} \in R^n$, 初始对称正定阵 B_0. 令 $k := 0$.

步 *1* 解子问题 (14.11) 得解 $(d^{(k)}, \lambda^{(k+1)})$. 若 $d^{(k)}$ 满足 $\|d^{(k)}\| \leq \epsilon$, 则停止计算, 得解 $x^{(k)}$. 否则转步 *2*.

步 *2* 确定 $\alpha_k \in [0, \delta]$, 使得

$$\Phi_1(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}, \mu) \leq \min_{0\leq\alpha\leq\delta} \Phi_1(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}, \mu) + \epsilon_k, \tag{14.24}$$

其中 ϵ_k 满足

$$\sum_{k=0}^{\infty} \epsilon_k < +\infty.$$

步 *3* 令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$.

步 *4* 用适当的拟 *Newton* 修正公式修正 B_k 得 B_{k+1}, 使得 B_{k+1} 对称正定. 令 $k := k+1$ 转步 *1*.

算法 14.2 的全局收敛定理如下. 其证明可参看 [27, 定理 12.2.3].

定理 14.2.1 设 f 和 $g_{\mathcal{I}}$, $h_{\mathcal{E}}$ 连续可微, 且存在常数 $\bar{m}, \bar{M} > 0$, 使得

$$\bar{m}\|d\|^2 \leq d^T B_k d \leq \bar{M}\|d\|^2$$

对一切 k 和 $d \in R^n$ 都成立. 再设子问题 (14.11) 有解, 且 $\mu \geq \|\lambda^{(k)}\|_\infty$. 则由算法 *14.2* 产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 或者终止于问题 (14.1) 的 *K-K-T* 点, 或者其聚点是问题 (14.1) 的 *K-K-T* 点.

定理 14.2.1 中的要求满足条件 $\mu \geq \|\lambda^{(k)}\|_\infty$. 在实际计算时，很难选取适当的 μ 使得该条件成立. 为了提高算法的实用性，我们可在不同的迭代步 k 采用不同的 μ 值. 例如，可按下面的方式选取 μ. 令

$$\Phi(x,\mu^{(k)}) = f(x) + \sum_{i\in\mathcal{I}} \mu_i^{(k)} |\min\{g_i(x),0\}| + \sum_{j\in\mathcal{E}} |\mu_i^{(k)} h_j(x)|.$$

对 $i \in \mathcal{I}\cup\mathcal{E}$, 任意取 $\mu_i^{(0)}$. 对 $k \geq 1$, 取

$$\mu_i^{(k)} = \max\{|\lambda_i^{(k)}|, \frac{1}{2}[\mu_i^{(k-1)} + |\lambda_i^{(k)}|]\}, \quad i \in \mathcal{I}\cup\mathcal{E}.$$

然后，在算法 14.2 中，用上面的 $\Phi(x,\mu^{(k)})$ 取代 $\Phi_1(x,\mu)$.

算法 14.2 中，步 2 的近似精确线性搜索计算量较大. 实际计算时常采用如下非精确线性搜索

$$\Phi_1(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}, \mu^{(k)}) \leq \Phi_1(x^{(k)}, \mu^{(k)}) + \beta\alpha_k D(\Phi_1(x^{(k)}, \mu^{(k)}); d^{(k)}). \tag{14.25}$$

确定步长 α_k, 其中 $\beta \in (0,1)$.

§14.3 信赖域 SQP 算法

本节介绍 SQP 算法全局收敛的另一种方法 – 信赖域算法. 为了简化问题，我们只考虑等式约束最优化 (14.2). 记 $h(x) = h_{\mathcal{E}}(x)$. 根据信赖域算法的思想，我们在 SQP 子问题 (14.11) 中增加信赖域约束. 因此，在点 $x^{(k)}$ 处，对给定的信赖域半径 Δ_k, 包括信赖域约束的 SQP 子问题为 (简称信赖域 SQP 子问题) ：

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2} d^T B_k d + \nabla f(x^{(k)})^T d \\ \text{s.t.} \quad & A(x^{(k)})d + h(x^{(k)}) = 0, \\ & \|d\| \leq \Delta_k, \end{aligned} \tag{14.26}$$

其中， $A(x) = h'(x)$ 表示 h 在 x 处的 Jacobi 矩阵.

§14.3.1 信赖域 SQP 子问题

对给定的 Δ_k, 子问题 (14.26) 可能不相容 (即可行域可能是空集), 如图 14.1 所示. 虽然可增大 Δ_k 的值以保证子问题的相容性，但这样将破坏信赖域算法中半径的调节功能 (即保证近似模型与实际模型的一致性). 为了保证子问题的相容性，我们可对子问题进行适当修改. 修改子问题的一种合适的方法是在每个迭代步不要求子问题的等式约束精确满足，而按照逐步提高相容性直到在极限点满足可行性条件. 基于这种近似相容的思想，常用的克服信赖域子问题不相容的方法有如下四种.

(一) 移位法

将子问题 (14.26) 的线性等式约束替换为

$$A(x^{(k)})d + \theta_k h(x^{(k)}) = 0, \tag{14.27}$$

其中 $\theta_k \in (0,1]$ 是一个参数. 如果 θ_k 充分小，则 (14.26) 中的两约束是相容的. 这种转换在几何上表示将子问题中约束的可行域往原点方向压缩，如图 14.2 所示.

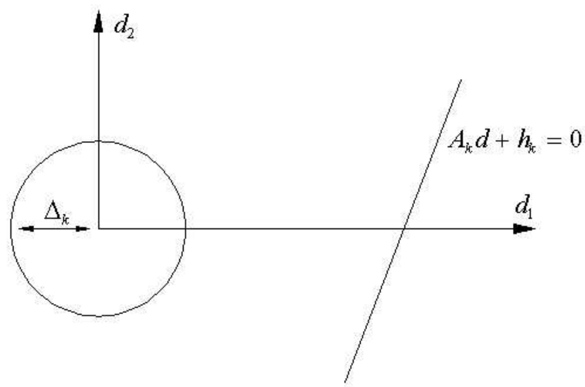

图 14.1: 信赖域约束不相容图示.

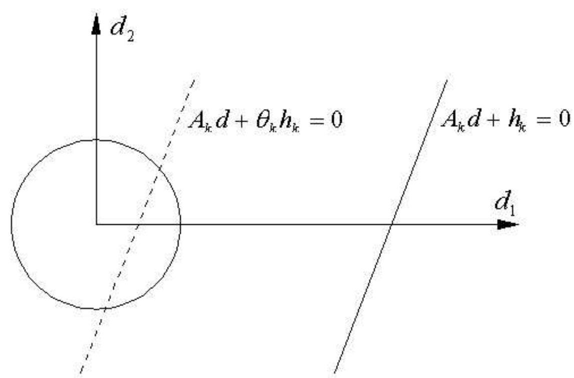

图 14.2: 约束移位图示.

为使变换后的子问题与原子问题的解尽量一致，一方面，我们应当选取 θ_k 尽可能靠近 1. 另一方面, 为了使子问题能有一定的自由度, 我们不能让 θ_k 过大. 一种直接选取 θ_k 的方法是利用 Gauss-Newton 步. 记下列问题

$$\min_{d \in R^n} \|A(x^{(k)})d + h(x^{(k)})\|$$

的最小范数解为 Gauss-Newton 步 d_k^{GN}, θ_k 的选取要求满足

$$\delta\Delta_k \le \theta_k \|d_k^{GN}\| \le \Delta_k,$$

其中 $\delta \in (0,1)$ 是给定常数. 上式中右不等式要求变换后的子问题有可行点，左不等式要求 θ_k 不要太小. 例如，可取

$$\theta_k = \begin{cases} 1, & \text{如果 } 2\|d_k^{GN}\| \le \Delta_k, \\ \frac{1}{2}\Delta_k / \|d_k^{GN}\|, & \text{否则}. \end{cases}$$

(二) 两球约束法

另一种使子问题相容的方法是将子问题 (14.26) 用下面的问题替换：

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2}d^T B_k d + \nabla f(x^{(k)})^T d \\ \text{s.t.} \quad & \|A(x^{(k)})d + h(x^{(k)})\|^2 \le \xi_k, \\ & \|d\|^2 \le \Delta_k^2, \end{aligned} \tag{14.28}$$

其中 ξ_k 是保证上面问题相容的参数． Powell-Yuan (1991) 的研究中选取 ξ_k 满足

$$\min_{\|d\| \le b_1 \Delta_k} \|A(x^{(k)})d + h(x^{(k)})\|^2 \le \xi_k \le \min_{\|d\| \le b_2 \Delta_k} \|A(x^{(k)})d + h(x^{(k)})\|^2,$$

其中 b_1, b_2 是满足 $0 < b_2 \le b_1 < 1$ 的常数.

(三) 罚函数法

考虑一般约束最优化问题 (14.1). 基于精确 l_1 罚函数

$$\Phi_1(x, \mu) = f(x) + \mu[\|\min\{g_{\mathcal{I}}(x), 0\}\|_1 + \|h_{\mathcal{E}}(x)\|_1].$$

我们可构造子问题为

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2}d^T B_k d + \nabla f(x^{(k)})^T d + \mu_k[\|\nabla g_{\mathcal{I}}(x^{(k)})^T d + \min\{g_{\mathcal{I}}(x^{(k)}), 0\}\|_1 + \|\nabla h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})^T d + h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})\|_1] \\ \text{s.t.} \quad & \|d\| \le \Delta_k. \end{aligned} \tag{14.29}$$

此方法适用于一般等式和不等式约束最优化问题，并放松 $A(x^{(k)})$ 线性无关的假设．但此方法对罚因子的选取比较敏感，并因 l_1 罚函数的不可微性导致局部收敛性分析中的 Maratos 效应 (见下节内容) .

(四) 方向分解法

在点 $x^{(k)}$ 处将信赖域试探步 $d^{(k)}$ 分解成两个分量：切分量 d_k^t 和法分量 d_k^n, 即 $d^{(k)} = d_k^n + d_k^t$ (见图 14.3) .

法分量 d_k^n 由下式确定

$$\begin{aligned} \min_{d^n \in R^n} \quad & \|A(x^{(k)})d^n + h(x^{(k)})\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & \|d^n\| \le \tau \Delta_k, \end{aligned} \tag{14.30}$$

其中 $\tau \in (0,1)$ 是给定的常数．法分量的作用是要求约束的可行性.

记 $Z_k \in R^{n\times m}$ 是由 $A(x^{(k)})$ 零空间的正交基所形成的矩阵．设切分量为 $d_k^t = Z_k \bar{d}_k^t$, 当法分量确定后，由 $d^{(k)}$ 的计算模式，子问题 (14.26) 可化成

$$\begin{aligned} \min_{\bar{d}^t \in R^m} \quad & [Z_k^T(B_k d_k^n + \nabla f(x^{(k)}))]^T \bar{d}^t + \frac{1}{2}(\bar{d}^t)^T Z_k^T B_k Z_k \bar{d}^t, \\ \text{s.t.} \quad & \|Z_k \bar{d}^t\|^2 \le \Delta_k^2 - \|d_k^n\|^2. \end{aligned} \tag{14.31}$$

由此确定切向分量，从而确定信赖域 SQP 子问题的解 $d^{(k)}$.

在上述方法中，确定 $\bar{d}_k^t$ 是一个低维的子问题，且两个子问题 (14.30) 和 (14.31) 为无约束优化的信赖子问题，可方便地用第六章的方法求解．此方法较好地处理了信赖域 SQP 子问题的相容性.

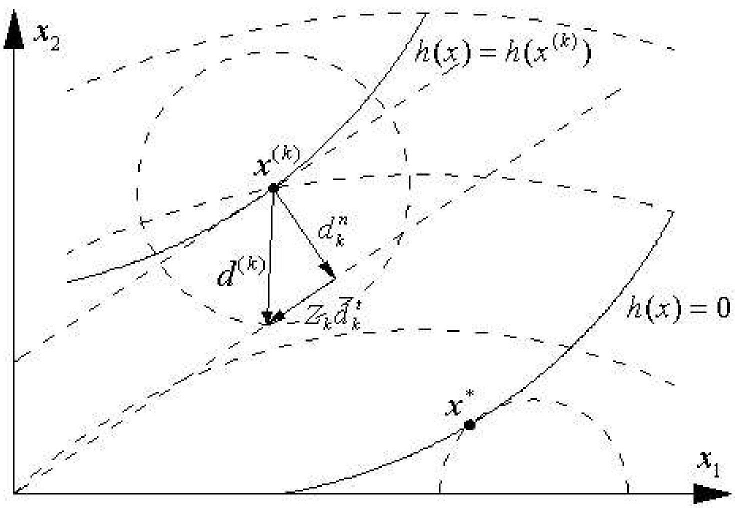

图 14.3: 信赖域方向分解图示.

§14.3.2 信赖域 SQP 算法

记优化问题 (14.2) 的 Lagrange 函数为

$$L(x,\lambda)=f(x)-\lambda^T h(x). \tag{14.32}$$

令

$$\Phi(x,\lambda;\mu)=f(x)-\lambda^T h(x)+\frac{1}{2}\mu\|h(x)\|^2, \tag{14.33}$$

其中 μ 是罚因子, $\lambda=\lambda(x)$ 是下面最小二乘问题的解:

$$\min\ \|\nabla f(x)-A(x)^T\lambda\|.$$

在 $A(x)$ 行满秩的条件下，不难推得上面问题的解为

$$\lambda(x)=(A(x)A(x)^T)^{-1}A(x)\nabla f(x). \tag{14.34}$$

我们称由 (14.33) 定义的函数 Φ 为 Fletcher 精确罚函数. 不难看出, Fletcher 精确罚函数是可微的.

类似于第六章求解无约束最优化的信赖域算法，在求出信赖域子问题的解后，需要检验子问题解的可接受性，并调节下次迭代的信赖域半径. 设信赖域子问题的解为 $d^{(k)}$. 定义实际下降量和预估下降量分别为:

$$Ared_k=\Phi(x^{(k)},\lambda^{(k)};\mu_k)-\Phi(x^{(k)}+d^{(k)},\lambda^{(k+1)};\mu_k), \tag{14.35}$$

和

$$Pred_k=-u_k+\mu_k v_k, \tag{14.36}$$

其中

$$u_k=\nabla_x L(x^{(k)},\lambda^{(k)})^T d^{(k)}+\frac{1}{2}d^{(k)T}B_k d^{(k)}+(\lambda^{(k+1)}-\lambda^{(k)})^T[A(x^{(k)})d^{(k)}+h(x^{(k)})],$$

$$v_k = \|h(x^{(k)})\|^2 - \|A(x^{(k)})d^{(k)} + h(x^{(k)})\|^2.$$

罚参数 μ_k 的调节可按如下方式进行：取 $\mu_{-1}=1$ 和充分小的常数 $\beta>0$, 在点 $x^{(k)}$ 处计算出试探步 $d^{(k)}$ 后，由 μ_{k-1} 计算 μ_k

$$\mu_k = \begin{cases} \mu_{k-1}, & \text{若 } Pred_k \geq \frac{\mu_{k-1}v_k}{2}, \\ \frac{2u_k}{v_k}+\beta, & \text{其它}. \end{cases} \tag{14.37}$$

可以证明 (见本章习题 10) , 按上式调节的 μ_k 满足下关系式

$$Pred_k \equiv Pred_k(d^{(k)};\mu_k) \geq \frac{\mu_k}{2}[\|h(x^{(k)})\|^2 - \|A(x^{(k)})d^{(k)} + h(x^{(k)})\|^2].$$

采用方向分解方法求解等式约束优化问题 (14.2) 的信赖域 SQP 算法如下：

算法 14.3 *(信赖域 SQP 算法)*

步 *0 (初始化)* 选取常数 $\Delta_{\min}>0$, $\Delta_{\max}>0$, $\Delta_{\min}\leq\Delta_0\leq\Delta_{\max}$, $\alpha_1,\tau\in(0,1)<1$, $\alpha_2>1$, $0<\eta_1<\eta_2<1$, $\epsilon>0$, $\beta>0$, $\mu_{-1}=1$. 取初始对 $(x^{(0)},\lambda^{(0)})$, 初始矩阵 B_0. 计算 Z_0. 令 $k:=0$.

步 *1 (停止测试)* 若

$$\|Z_k^T\nabla f(x^{(k)})\| + \|h(x^{(k)})\| \leq \epsilon,$$

终止算法，得解 $x^{(k)}$ ；否则转步 *2*.

步 *2 (计算试探步)* 解信赖域子问题 (14.30) 和 (14.31) 得解 $d^{(k)} = d_k^n + Z_k\bar{d}_k^t$.

步 *3 (修正乘子 λ)* 在 $x^{(k)}+d^{(k)}$ 处用最小二乘估计 (14.34) 计算 $\lambda^{(k+1)}$, 并计算 $\Delta\lambda=\lambda^{(k+1)}-\lambda^{(k)}$.

步 *4 (修正罚参数 μ)* 用公式 (14.37) 计算 μ_k.

步 *5 (测试试探步的可接受性)* 由 (14.35) 和 (14.36) 计算 $Ared_k, Pred_k$ 和 $r_k=\frac{Ared_k}{Pred_k}$.
若 $r_k<\eta_1$, 拒绝试探步 $d^{(k)}$, 取 $\Delta_k=\alpha_1\|d^{(k)}\|$ 返回步 *2*.
若 $\eta_1\leq r_k$, 接受试探步，设 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+d^{(k)}$. 且若 $r_k\leq\eta_2$ 时，令 $\Delta_{k+1}:=\max\{\Delta_k,\Delta_{min}\}$ ；否则 $\Delta_{k+1}:=\min\{\Delta_{max},\max\{\Delta_{min},\alpha_2\Delta_k\}\}$.

步 *6* 用适当的方式修正 B_k 得 B_{k+1}. 令 $k:=k+1$ 转步 *1*.

注 1：上面算法中的步 1 给出的终止准则等价于 $x^{(k)}$ 是问题 (14.2) 的 K-K-T 点 (见本章习题 8) .

注 2：算法中的步 5 包括试探步可接受的判断和信赖域半径的调节，其中 r_k 描述了近似模型与原问题一致性程度．当 $r_k<\eta_1$, 信赖域 SQP 子问题的解被拒绝，需缩小信赖半径重新解子问题，否则接受子问题的解，并根据 r_k 的值确定保持或放大下次迭代计算的信赖域半径。

在收敛性分析中，我们需要如下假设条件：

假设 14.3.1 (1) 存在凸集 $\Omega \subseteq R^n$ 使 $\{x^{(k)}\}$ 和 $\{x^{(k)}+d^{(k)}\}$ 都在 Ω 内.
(2) 对所有 $x \in \Omega$, $rank(A(x^{(k)})) = m$.
(3) 对 $x \in \Omega$, $f(x), \nabla f(x), \nabla^2 f(x), h(x), A(x), (A(x)A(x)^T)^{-1}, Z(x)$ 和 $\nabla^2 h(x))$ 一致有界.
(4) B_k 一致有界.

算法 14.3 的全局收敛定理如下.

定理 14.3.1 设假设 *14.3.1* 中的条件均满足, 则当 $\epsilon > 0$ 时算法 *14.3* 必有限步迭代终止于问题 (14.2) 的 K-K-T 点或产生无穷点列 $\{x^{(k)}\}$ 满足

$$\lim_{k\to\infty} \inf[\|Z_k^T \nabla f(x^{(k)})\| + \|h(x^{(k)})\|] = 0. \tag{14.38}$$

例 14.3.1 取初值 $x^{(0)} = (-1,-1)^T$, 用算法 *14.3* 求解下面的最优化问题:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = (1-x_1)^2 \\ \text{s.t.} \quad & h(x) = 10(x_2 - x_1^2) = 0. \end{aligned}$$

此问题的最优解为 $x^* = (1,1)^T$.

解 信赖域子问题用方向分解法求解, 且用非精确方法. B_k 取为 Lagrange 函数的 Hessian 阵, $A(x)$ 用 QR 分解 $A(x) = [Y(x), Z(x)]\binom{R(x)}{0}$. 在 $x^{(k)}$ 处, 设法向分量为: $d^n = \alpha_k Y_k u_k$, 由子问题 (14.30) 满足 Cauchy (见第六章关于 Cauchy 点的定义) 部分下降的近似解为

$$u_k = -(R_k)^{-T} h_k, \quad \alpha_k = \begin{cases} 1, & \text{若 } \|u_k\| \le \tau\Delta_k, \\ \frac{\tau\Delta_k}{\|u_k\|}, & \text{若 } \|u_k\| > \tau\Delta_k, \end{cases}$$

其中 $Y_k = Y(x^{(k)})$, $R_k = R(x^{(k)})$, $h_k = h(x^{(k)})$. 切向分量的子问题 (14.31) 用第六章介绍的截断共轭梯度算法 6.4. 算法 14.3 中所用的常数为 $\epsilon = 10^{-5}$, $\Delta_{\max} = 10$, $\Delta_{\min} = 0.001, \Delta_0 = 5, \eta_1 = 0.05, \eta_2 = 0.75, \alpha_1 = 0.5, \alpha_2 = 2, \tau = 0.8, \beta = 0.01$. 计算结果见表 14.3.

表 14.3 信赖域 SQP 计算结果

k	$x^{(k)}$	$\|Z_k^T \nabla f_k\| + \|h_k\|$	$d^{(k)}$	μ_k
0	$(-1,-1)^T$	21.7889	$(1.1905, -0.3810)^T$	1
1	$(0.1905, -1.3810)^T$	15.6861	$(0.1700, 1.3439)^T$	1
2	$(0.3606, -0.2461)^T$	4.7984	$(0.2196, 0.5344)^T$	1
3	$(0.5801, 0.2883)^T$	1.0303	$(0.2418, 0.3288)^T$	1
4	$(0.8219, 0.6171)^T$	0.7699	$(0.1278, 0.2686)^T$	1
5	$(0.9497, 0.8856)^T$	0.2102	$(0.0415, 0.0952)^T$	1
6	$(0.9913, 0.9809)^T$	0.0251	$(0.0080, 0.0175)^T$	1
7	$(0.9992, 0.9984)^T$	0.0013	$(0.0007, 0.0015)^T$	1
8	$(1.0000, 0.9999)^T$	$2.8507E-05$	$10^{-4} * (0.2572, 0.5196)^T$	1
9	$(1.0000, 1.0000)^T$	$1.9725E-07$		

在表 14.3 中, k 表示迭代次数, $x^{(k)}$ 为迭代点列, $\|Z_k^T \nabla f_k\| + \|h_k\|$ 为 K-K-T 条件的检测, $d^{(k)}$ 为信赖域子问题的近似解, μ_k 为迭代计算中的罚参数. 若简单地取 $B_k = I$ (I 为单位阵), 在相同的算法和参数条件下, 当迭代次数 $k = 22$ 时可求得满足相同精度的解.

§14.4 *Maratos 效应及改进策略

定理 14.1.2 和定理 14.2.1 分别给出了局部 SQP 算法的超线性条件和线性搜索 SQP 算法 14.2 的全局收敛性条件. 由此可知，若全局 SQP 算法中单位步长可以接受 (即 $\alpha_k = 1$), 则全局 SQP 算法具有超线性收敛性. 然而，在许多情况下，算法 14.2 不能保证单位步长被接受. 从而不能保证算法的超线性收敛性. 此现象首先由 Maratos (1978) 指出，故称为 Maratos 效应. 本节说明计算中的此种现象，并介绍改进该现象的常用方法.

Powell (1986) 给出如下问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = -x_1 + 2(x_1^2 + x_2^2 - 1) \\ \text{s.t.} \quad & x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0. \end{aligned}$$

此问题的最优解为 $x^* = (1,0)^T$, 且在最优解处 Lagrange 乘子和 Lagrange 函数的 Hessian 阵分别为 $\lambda^* = \frac{1}{2}$ 和 $W(x^*, \lambda^*) = I$. 用 SQP 算法求解 (取 $B_k = I$) 时， $x^{(k)} = (\cos\theta_k, \sin\theta_k)^T$. 显然，当 $x^{(k)} \to x^*$ 时有 $\cos\theta_k \to 1$. 直接计算有

$$f(x^{(k)}) = -\cos\theta_k, \quad \nabla f(x^{(k)}) = (4\cos\theta_k - 1, 4\sin\theta_k)^T, \quad A(x^{(k)}) = (2\cos\theta_k, 2\sin\theta_k).$$

不难推出此例的 SQP 子问题的解为 $d^{(k)} = (\sin^2\theta_k, -\sin\theta_k\cos\theta_k)^T$. 由于 $x^{(k)} + d^{(k)} = (\cos\theta_k + \sin^2\theta_k, \sin\theta_k(1-\cos\theta_k))^T$, 有

$$\frac{\|x^{(k)} + d^{(k)} - x^*\|}{\|x^{(k)} - x^*\|^2} = \frac{1}{2}.$$

此式说明 $d^{(k)}$ 是超线性收敛步. 若取效益函数为 l_1 罚函数

$$\Phi_1(x, \mu) = f(x) + \mu\|h(x)\|_1,$$

其中 $\mu \geq 0$, 此时由于 $x^{(k)}$ 的可行性有

$$\begin{aligned} &\Phi_1(x^{(k)}, \mu) = -\cos\theta_k, \\ &\Phi_1(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}, \mu) = -\cos\theta_k - \alpha\sin^2\theta_k + (2+\mu)\alpha^2\sin^2\theta_k. \end{aligned}$$

要使效益函数单调下降，即 $\Phi_1(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}, \mu) < \Phi_1(x^{(k)}, \mu)$, α 需满足 $\alpha < \frac{1}{2+\mu}$. 因此，不论 $x^{(k)}$ 多么靠近 x^*, 单位步长不可能取到，从而算法不具有超线性收敛性.

克服 Maratos 效应通常有三类方法：

(一) Watchdog 技术

此方法是一种非单调技术. 算法按 “标准型搜索” 与 “松驰搜索” 进行. 在 “标准型搜索” 中要求

$$\Phi(x^{(k+1)}, \mu) < \Phi(x^{(k)}, \mu).$$

而在另一些迭代中进行 “松驰搜索”，如简单取步长 $\alpha_k = 1$. “松驰搜索” 计算的前提是在某次迭代中产生的点比所求迭代点中最好点处效益函数有 “足够的” 下降 (所谓 “最好点” 即效益函数值在此点最小) , 则下次迭代用 “松驰搜索”，也即松驰搜索的起点是所求的点中 “最好” 的点. 具体判断何时进行 “松驰搜索” 由下面分析确定. 设算法中所用的效益函数为 l_1 罚函数

$$\Phi_1(x, \mu) = f(x) + \mu[\|\min\{g_{\mathcal{I}}(x), 0\}\|_1 + \|h_{\mathcal{E}}(x)\|_1]. \tag{14.39}$$

定义 $\Phi_1(x,\mu)$ 在 $x^{(k)}$ 的近似函数为

$$\begin{aligned}\Phi_1^{(k)}(x,\mu) &= f(x^{(k)})+\nabla f(x^{(k)})^T(x-x^{(k)})+\frac{1}{2}(x-x^{(k)})^TB_k(x-x^{(k)}) \\ &\quad +\mu[\|\min\{\nabla g_{\mathcal{I}}(x^{(k)})^T(x-x^{(k)})+g_{\mathcal{I}}(x^{(k)}),0\}\|_1+\|\nabla h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})^T(x-x^{(k)})+h_{\mathcal{E}}(x^{(k)})\|_1].\end{aligned} \tag{14.40}$$

设 $l\le k$ 是至第 k 次迭代“最好”的，即

$$\Phi_1(x^{(l)},\mu)=\min_{1\le i\le k}\Phi_1(x^{(i)},\mu). \tag{14.41}$$

由于 $x^{(l)}$ 是“最好”点，步长可选择 $\alpha_l=1$, 直接计算可得

$$\Phi_1(x^{(l)},\mu)-\Phi_1^{(l)}(x^{(l+1)},\mu)=-\nabla f(x^{(l)})^Td^{(l)}-\frac{1}{2}(d^{(l)})^TB_ld^{(l)}+\mu[\|\min\{g_{\mathcal{I}}(x^{(l)}),0\}\|_1+\|h_{\mathcal{E}}(x^{(l)})\|_1]>0.$$

若 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_kd^{(k)}$ 满足

$$\Phi_1(x^{(k+1)},\mu)\le\Phi_1(x^{(l)},\mu)-\beta[\Phi_1(x^{(l)},\mu)-\Phi_1^{(l)}(x^{(l+1)},\mu)], \tag{14.42}$$

其中 $\beta\in(0,1/2)$, 则下次搜索方式取为“松驰搜索”. 在一次松驰搜索后，接着进行标准搜索. 由于标准型搜索要求效益函数的下降性，因此标准搜索后的点比松驰型搜索的终点要好，但不一定比已求得的“最好”点好，经过几次标准型搜索后，可求得比原“最好”点更好的点. 一般我们设松驰型搜索后的标准搜索最多进行 t 次 (如取 $t=5$), 若 t 次后我们仍找不到比已有“最好”点更好的点，说明“松驰搜索”是不恰当的，要再次回到该次松驰搜索的起点重新进行标准搜索. 这样最多作 $t+2$ 次迭代，我们总可找到比原来“最好”点更好的点. 因此算法总体仍是下降的. 数值 t 用来控制算法从弯路上返回，这也即 "Watchdog" 名称的由来. Watchdog 算法结构如下.

算法 14.4 *(Watchdog* **算法***)*

步 *1* 取初始 $x^{(0)}$, 正整数 t, $\beta\in(0,\frac{1}{2})$, 取搜索模式为标准型， $k:=0,\ l:=0$.

步 *2* 解 *SQP* 子问题 (14.11) 得搜索方向 $d^{(k)}$, 并利用线性搜索类型 (标准型或松驰型) 求得搜索步长 $\alpha_k>0$, 令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_kd^{(k)}$.

步 *3* 若 $\Phi_1(x^{(k+1)},\mu)$ 满足松驰搜索条件 (14.42), 则下次搜索为松驰型，否则为标准型.

步 *4* 若 $\Phi_1(x^{(k+1)},\mu)\le\Phi_1(x^{(l)},\mu)$, 则令 $l:=k+1$.

步 *5* 若 $k<l+t$, 则转步 *6*； 否则 $x^{(k+1)}:=x^{(l)};l:=k+1$.

步 *6* 如果需要迭代，则 $k:=l+1$ 转步 *2*.

理论上可证：若 $d^{(k)}$ 是超线性收敛步，则用 Watchdog 技术的 SQP 算法不仅具有全局收敛性，而且保证局部超线性收敛性. 有关细节可参看 [27, §12.5].

(二) 二阶校正步技巧

二阶校正步是指在 $x^{(k)}$ 处求得 SQP 子问题的解 $d^{(k)}$ 后，对 $d^{(k)}$ 进行二阶修正，即求 $\hat{d}^{(k)}$ 使得

$$\|\hat{d}^{(k)}\|=O(\|d^{(k)}\|^2),\ \ \Phi(x^{(k)}+d^{(k)}+\hat{d}^{(k)})<\Phi(x^{(k)}). \tag{14.43}$$

显然， $\hat{d}^{(k)}+d^{(k)}$ 仍是一超线性收敛步.

设 $\hat{d}^{(k)}$ 为如下二次规划问题

$$\begin{array}{ll}\min & \nabla f(x^{(k)})^T(d^{(k)}+d)+\dfrac{1}{2}(d^{(k)}+d)^TB_k(d^{(k)}+d)\\ \text{s.t.} & \nabla g_i(x^{(k)})^Td+g_i(x^{(k)}+d^{(k)})\ge 0,\quad i\in\mathcal{I},\\ & \nabla h_j(x^{(k)})^Td+h_j(x^{(k)}+d^{(k)})=0,\quad j\in\mathcal{E}\end{array} \tag{14.44}$$

的解. 可以证明, 在一定的条件下， $\hat{d}^{(k)}$ 满足 (14.43), 故 $d^{(k)}+\hat{d}^{(k)}$ 为可接受的超线性收敛步 [27, §12.6].

(三) 采用光滑效益函数

引起 Maratos 效应是因为非光滑的效益函数, 有效的处理方法之一是用光滑的效益函数. 如果 $P(x)$ 是一光滑函数，它在点 x^* 处达到最小且 $\nabla^2P(x^*)$ 对称正定，则存在正数 m 和 M, 使得当 x 充分接近 x^* 时,

$$m\|x-x^*\|^2\le P(x)-P(x^*)\le M\|x-x^*\|^2.$$

于是，只要 $d^{(k)}$ 是一超线性收敛步，则当 k 充分大时,

$$\begin{array}{rcl}P(x^{(k)}+d^{(k)}) & \le & P(x^*)+M\|x^{(k)}+d^{(k)}-x^*\|^2\\ & \le & P(x^{(k)})-m\|x^{(k)}-x^*\|^2(1-\frac{M\|x^{(k)}+d^{(k)}-x^*\|^2}{m\|x^{(k)}-x^*\|^2})\le P(x^{(k)}),\end{array}$$

$d^{(k)}$ 为可接受的超线性收敛步.

例如，对于等式约束问题，我们可用 Fletcher 精确罚函数 (14.33) 作为效益函数．由于函数 Φ 的光滑性，可避免 Maratos 效应．参看 [27, §12.7].

习题 14

1. 若 $d=0$ 是 SQP 子问题 (14.10) 或 (14.11) 的解，则 $x^{(k)}$ 是问题 (14.1) 的 K-K-T 点.
2. 用局部 SQP 算法 14.1 求解问题

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)=x_1+x_2\\ \text{s.t.} & x_2-x_1^2\ge 0.\end{array}$$

   初始点取为 $x^{(0)}=(0,0)^T$, B_k 用两种取法：

   (1) 取 $B_k=\nabla_x^2L(x^{(k)},\lambda^{(k)})$, 且 $\lambda^{(0)}=1$; 若取 $\lambda^{(0)}=0$, 分析计算结果.

   (2) 取 $B_0=I$, 并采用 Powell 所给出的校正公式 (14.12) 和 (14.13) 校正 B_k.
3. 用局部 SQP 算法 14.1 编程计算如下最优化问题：

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)=e^{x_1x_2x_3x_4x_5}-\dfrac{1}{2}(x_1^3+x_2^3+1)^2\\ \text{s.t.} & x_1^2+x_2^2+x_3^2+x_4^2+x_5^2-10=0,\\ & x_2x_3-5x_4x_5=0,\\ & x_1^3+x_2^3+1=0.\end{array}$$

   取初始点 $x^{(0)}=(-1.71,1.59,1.82,-0.763,-0.763)$, $\lambda^{(0)}=(0,0,0)$, $B_k=\nabla_x^2L(x^{(k)},\lambda^{(k)})$. (该问题的最优解为 $x^*=(-1.8,1.7,1.9,-0.8,-0.8)$.)

4. 用线性搜索全局 SQP 算法 14.2 求解

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = -x_1 - x_2 \\ \text{s.t.} \quad & g_1(x) = x_2 - x_1^2 \geq 0, \\ & g_2(x) = 1 - x_1^2 - x_2^2 \geq 0. \end{aligned}$$

此问题的最优点为 $x^* = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})$. 取初始点 $x^{(0)} = (\frac{1}{2}, 1)$, $\lambda^{(0)} = (0, 0)$, B_k 用两种计算: (1) $B_k = \nabla_x^2 L(x^{(k)}, \lambda^{(k)})$; (2) 取 $B_0 = I$, 并采用 Powell 所给出的校正公式 (14.12) 和 (14.13) 校正 B_k.

5. 在假设条件 14.1.1 下证明 $G^* = \binom{P_* W(x^*, \lambda^*)}{A(x^*)}$ 列满秩, 其中 $P_* = I - A(x^*)^T (A(x^*) A(x^*)^T)^{-1} A(x^*)$, $A(x)$ 为等式约束和不等式积极约束组成函数在点 x 处的 Jacobin 矩阵.

6. 考虑如下问题:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = -x_1 + 2(x_1^2 + x_2^2 - 1) \\ \text{s.t.} \quad & x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0. \end{aligned}$$

若取效益函数为 Fletcher 精确罚函数, 试问单位步长能否使效益函数单调下降?

7. 证明在假设 14.3.1 条件下, 若 $x^{(k)}, x^{(k)} + d^{(k)} \in \Omega$, 则由 (14.35) 和 (14.36) 定义的实际下降量和预估下降量满足

$$|Ared_k - Pred_k| \leq b\mu_k \|d^{(k)}\|^2,$$

其中 $b > 0$ 为一常数.

8. 设在每点 x, $A(x) = h'(x)$ 存在 QR 分解

$$A(x)^T = [Y(x), Z(x)] \begin{pmatrix} R(x) \\ 0 \end{pmatrix},$$

其中 $Y(x), Z(x)$ 满足 $Y(x)^T Y(x) = I_m$, $Z(x)^T Z(x) = I_{n-m}$, $Y(x)Y(x)^T + Z(x)Z(x)^T = I_n$. 考虑等式约束最优化问题 (14.2), 设在 $A(x)^T$ 的如上 QR 分解条件下, Lagrange 乘子计算采用最小二乘公式 (14.34). 证明最优化问题 (14.2) 的 K-K-T 条件为:

$$\begin{pmatrix} Z(x)^T \nabla f(x) \\ h(x) \end{pmatrix} = 0.$$

9. 信赖域 SQP 算法中子问题的计算考虑用方向分解法. 若在迭代点 $x^{(k)}$, 法向分量 d_k^n (见 (14.30) 式) 的计算采用

$$R_k^T u_k = -h_k,$$

$$\alpha_k = \begin{cases} 1, & \text{若 } \|u_k\| \leq \tau\Delta_k \\ \frac{\tau\Delta_k}{\|u_k\|}, & \text{其它}, \end{cases}$$

$$d_k^n = \alpha_k Y_k u_k,$$

其中 Y, Z, R 为上题中相关于 $A(x)$ 的 QR 分解的量, 下标 k 代表在 $x^{(k)}$ 点的取值, 如 $h_k = h(x^{(k)})$. 证明在假设条件 14.3.1 下, 成立

$$\|h_k\|^2 - \|h_k + \alpha_k A_k Y_k u_k\| \geq \|h_k\| \min\{\|h_k\|, \frac{\tau\Delta_k}{b_0}\},$$

其中 b_0 是满足 $\|u_k\| \leq b_0 \|h_k\|$ 的常数.

10. 证明在信赖域 SQP 算法中, 用 El-Alem (1991) 选择的罚参数 μ_k 的修正公式 (14.37) 具有性质:

    (1) $\mu_k \geq \mu_{k-1}$.

    (2) $Pred_k(d^{(k)}; \mu_k) \geq \frac{\mu_k}{2}[\|h(x^{(k)})\|^2 - \|A(x^{(k)})d^{(k)} + h(x^{(k)})\|^2]$.

11. 用信赖域 SQP 算法 14.3 编程计算等式约束最优化问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = x_1 x_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 = 2. \end{aligned}$$

取初始点 $x^{(0)} = (-2, -2)^T$, $B_k = I$, 信赖域子问题的求解用方向分解法和无约束信赖域子问题的计算.

第十五章　全局最优化方法简介

我们在前面章节中介绍了不少数值最优化方法，这些方法一般只能求得问题的一个稳定点或 K-K-T 点．不能保证求得问题的全局最优解．本章简要介绍求全局最优解的几种常用的全局最优化方法．

§15.1　基本概念

全局最优化问题指的是求如下最优化问题的全局最优解：

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & x \in D, \end{array} \tag{15.1}$$

即求 $x^* \in D$, 使得

$$f(x^*) \le f(x), \qquad x \in D. \tag{15.2}$$

此时，我们称满足 (15.2) 的 x^* 为 f 在 D 上的一个全局最优解，$f(x^*)$ 为 f 在 D 上的全局极小值，并分别记为 $x^* \in \text{argmin} f(D)$ 和 $\min f(D)$.

迄今为止，全局最优化方法依赖于问题的特殊结构．下面我们介绍最基本的几类全局最优化问题．

定义 15.1.1 设 $D \subseteq R^n$. 如果函数 $f : R^n \to R$ 在 D 上 *Lipschitiz* 连续，则称全局最优化问题 (15.1) 为 *Lipschtz* 最优化问题．

定义 15.1.2 设 $D \subseteq R^n$ 为凸集，函数 $f : D \to R$. 如果存在两个凸函数 $p : D \to R$ 和 $q : D \to R$ 使得

$$f(x) = p(x) - q(x), \qquad \forall x \in D, \tag{15.3}$$

则称函数 f 是 D 上的 *d.c.* 函数．

R^n 上的 *d.c.* 函数简称为 *d.c.*(difference of two convex functions) 函数．

定义 15.1.3 设 $C \subseteq R^n$ 为凸集．如果函数 f, g_i,$i = 1, \ldots, m$ 均为 C 上的 *d.c.* 函数，则称全局最优化问题

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & x \in C, \\ & g_i(x) \le 0, \quad i = 1, \ldots, m \end{array} \tag{15.4}$$

为 *d.c.* 规划问题．

下面的定理说明 *d.c.* 函数关于最优化中常遇到的运算仍保持其 *d.c.* 性质．

定理 15.1.1 如果 $f(x)$, $f_i(x)$, $i = 1, \ldots, m$ 是 *d.c.* 函数，那么以下结论成立：

(1) $-f(x)$ 是 *d.c.* 函数．

(2) $f_i(x)$, $i = 1, \ldots, m$ 的任何线性组合是 *d.c.* 函数．

(3) $\max\limits_{1\le i\le m} f_i(x)$ 和 $\min\limits_{1\le i\le m} f_i(x)$ 是 $d.c.$ 函数.

(4) $f^+(x)\triangleq\max\{f(x),0\}$, $f^-(x)\triangleq\min\{f(x),0\}$ 和 $|f(x)|$ 都是 $d.c.$ 函数.

证明 (1) 显然．由于凸函数的任意正的线性组合仍是凸函数，利用 (1) 即得 (2).

(3) 设 $f_i(x)=p_i(x)-q_i(x)$, $i=1,\ldots,m$, 其中 p, q, $i=1,\ldots,m$ 为凸函数．因为

$$f_i(x)=p_i(x)-q_i(x)=p_i(x)+\sum_{\substack{j=1\\ j\ne i}}^{m}q_j(x)-\sum_{j=1}^{m}q_j(x),$$

其中最后一个和式不依赖于 i, 所以

$$\begin{aligned}\max_{1\le i\le m} f_i(x) &= \max_{1\le i\le m}\{p_i(x)-q_i(x)\}\\ &= \max_{1\le i\le m}\left\{p_i(x)+\sum_{\substack{j=1\\ j\ne i}}^{m}q_j(x)\right\}-\sum_{j=1}^{m}q_j(x).\end{aligned}$$

又由于 $\max_{1\le i\le m}\{p_i(x)+\sum\limits_{\substack{j=1\\ j\ne i}}^{m}q_j(x)\}$ 仍是凸函数，所以 $\max\limits_{1\le i\le m} f_i(x)$ 是 $d.c.$ 函数.

又注意到 $\min\limits_{1\le i\le m} f_i(x)=-\max\limits_{1\le i\le m}[-f_i(x)]$, 结合 (1) 知 $\min\limits_{1\le i\le m} f_i(x)$ 是 $d.c.$ 函数．故 (3) 得证.

(4) 由于 0 是凸函数并注意到 $|f(x)|=f^+(x)-f^-(x)$ 知 (4) 也成立. **证毕**

下面定理说明 $d.c.$ 函数是一类相当广泛的函数，从而说明 $d.c.$ 规划在实际中具有广泛的应用性.

定理 15.1.2 任何二次连续可微的函数是 $d.c.$ 函数.

定理 15.1.3 对任何紧集 $D\subseteq R^n$ 上的实值连续函数，都存在 D 上一个 $d.c$ 函数序列一致收敛于这个函数.

§15.2 覆盖法

最基本和最简单的全局最优化方法之一是覆盖法．该方法要求目标函数具有有界变化率．显然，任何 Lipschitz 连续的函数都具有有界变化率性质．从这个意义上说，覆盖法能用来解决相当多的一类最优化问题.

为了叙述的简单性，我们仅介绍求解如下 Lipschitz 最优化问题

$$\begin{array}{ll}\min & f(x)\\ \text{s.t.} & x\in[a,b]\end{array}\tag{15.5}$$

的覆盖法，其中 $f:R\to R$ 在区间 $[a,b]$ 上的 Lipschitz 常数为 L.

求解问题 (15.5) 的覆盖法主要包括两个基本过程：一是识别那些不含有全局最小值点的子区间，二是从当前的子区间簇中删除这些子区间.

将区间 $[a,b]$ 分为 $N-1$ 等份，其等分点分别为 $a=x_1<\ldots<x_N=b$. 记

$$\hat f_N^*=\min_{1\le i\le N} f(x_i).$$

用 $\hat{f}_N^*$ 作为全局极小值 f^* 的近似值，其误差 ϵ_N 满足条件

$$\epsilon_N \triangleq |f^* - \hat{f}_N^*| \le \frac{L(b-a)}{2N}.$$

上式说明，当 $N \to +\infty$ 时，误差 $\epsilon_N \to 0$. 也就是说，只要我们计算足够多的函数值，就可以得到满足任意精度的近似最优解. 但当精度要求较高时，这样直接计算计算量太大. 可行的方式是采用逐步增加 $[a,b]$ 上要计算函数值的分点. 比如说，最初我们在 $[a,b]$ 上只选取一个分点 (称为试探点) $x_1 = (a+b)/2$, 然后按照某种方式逐步增加试探点. 具体做法如下：

假设 $x_1 < x_2 < \ldots < x^{(k)}$ 是区间 $[a,b]$ 内已计算过函数值的 k 个试探点 (不一定是等分点). 记

$$y_{ok} = \min_{1\le i\le k} f(x_i).$$

那么区间 $[a,b]$ 上的折线函数

$$F_k(x) \triangleq \max_{1\le i\le k}\{f(x_i) - L|x - x_i|\}, \qquad x \in [a,b]$$

构成了目标函数 $f(x)$ 的一个下界函数，即对任意的 $x \in [a,b]$, 恒有 $F_k(x) \le f(x)$.

如果令

$$A_k \triangleq \{x \in [a,b] \mid F_k(x) \ge y_{ok}\}.$$

那么不难看出，对任意的 $x \in A_k$,

$$f(x) \ge y_{ok} \ge f^*.$$

一般地， A_k 是由 $[a,b]$ 的某些子区间构成的区间簇的并. 上式说明此区间簇中的任意子区间内都不含有全局最小值点，因而，可将这些子区间删除. 记经过删除后的剩余子区间构成的区间簇为 $\mathcal{A}$. 记 $A = \bigcup_{I\in\mathcal{A}} I$. 如果 $\mathcal{A}$ 中长度最大的子区间的长度达到了精度要求，则算法终止；否则，在剩余子区间内按如下方式选取新的试探点：

$$x_{k+1} = \mathrm{argmin}_{x\in A} F_k(x).$$

上述寻找能覆盖全局极小值且长度又足够小的子区间的过程，称为覆盖法. 它广泛应用于求解容易估算 Lipschitz 常数的 Lipschitz 最优化问题.

关于利用覆盖法求解多元函数的全局最优化问题，读者可参阅文献 [1].

§15.3 外逼近法

外逼近法是求解全局最优化问题的最重要的一类方法，许多有效的全局优化算法都是基于外逼近法的思想.

考虑问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & x \in D \subseteq R^n, \end{aligned} \tag{15.6}$$

其中函数 $f: R^n \to R$ 连续， D 为闭集.

求解问题 (15.6) 的外逼近法就是用较简单的松弛问题逐步逼近原问题. 所谓 "松弛" 问题是指

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & x \in D_k, \end{array} \tag{15.7}$$

其中 D_k 满足以下最基本的条件

$$R^n \supset D_0 \supset D_1 \supset \ldots \supset D, \qquad \lim_{k\to\infty} \min f(D_k) = \min f(D).$$

下面是外逼近法的基本计算过程:

算法 15.1 (外逼近法)
步 *0* 取 $D_0 \supset D$. 令 $k = 0$.
步 *1* 求解松弛问题 (15.7) 得其解 $x^{(k)} \in argminf(D_k)$.
步 *2* 如果 $x^{(k)} \in D$, 则得解 $x^{(k)}$, 否则, 按如下方式构造 D_{k+1} :

$$D_{k+1} = D_k \cap \{x \mid l_k(x) \le 0\}, \tag{15.8}$$

其中 $l_k : R^n \to R$ 满足

$$l_k(x^{(k)}) > 0, \qquad l_k(x) \le 0, \quad \forall x \in D. \tag{15.9}$$

令 $k := k+1$, 并转步 *1*.

注 1 由步 2 知 $D \subseteq D_{k+1} \subset D_k$, 故以下不等式成立:

$$\min f(D_k) \le \min f(D_{k+1}) \le \min f(D).$$

从而, 如果 $x^{(k)} \in D$, 那么 $x^{(k)} \in \mathrm{argmin} f(D)$.

注 2 为便于计算, 我们通常取 D_0 为包含可行域 D 的一个凸多面体. 由 (15.8) 知, 当 l_k 为线性函数时, D_k 仍然是凸多面体.

注 3 在问题 (15.6) 中, 假设

$$D = \{x \in R^n \mid g(x) \le 0\}, \tag{15.10}$$

其中 $g : R^n \to R$ 是凸函数. 记集合

$$\partial g(x^{(k)}) \triangleq \{v \in R^n \mid g(x) - g(x^{(k)}) \ge v^T(x - x^{(k)}),\ \forall x \in R^n\}. \tag{15.11}$$

如果令

$$l_k(x) = p^{(k)T}(x - x^{(k)}) + g(x^{(k)}), \tag{15.12}$$

其中 $p^{(k)} \in \partial g(x^{(k)})$, 则相应的外逼近法称为 KCG 割平面法.

注 4 在注 3 中, 如果 $x^{(k)} \notin D$, 即 $g(x^{(k)}) > 0$, 则 $l_k(x^{(k)}) = g(x^{(k)}) > 0$, 且对任何 $x \in D$, 即 $g(x) \le 0$, 有

$$l_k(x) = p^{(k)T}(x - x^{(k)}) + g(x^{(k)}) \le g(x) \le 0.$$

因此, $l_k(x)$ 满足 (15.9).

注 5 如果 g 连续可微，则可证明 $\nabla g(x^{(k)}) = \partial g(x^{(k)})$ (见习题)．因此，在 KCG 割平面法中 $l_k(x) = \nabla g(x^{(k)})^T(x - x^{(k)}) + g(x^{(k)})$.

注 6 如果 $D_1 = \{x \in R^n \mid g_i(x) \le 0,\ i = 1, \dots, m\}$, 记 $\mathcal{I} \triangleq \{\ i = 1, \dots, m\ \}$, 令

$$g(x) = \max_{i \in \mathcal{I}}\ g_i(x),$$

则 $D_1 = D = \{x \in R^n \mid g(x) \le 0\}$, 即多个不等式约束的最优化问题可归结为单个不等式约束的最优化问题. 因此， KCG 割平面法适合于求解多个不等式约束的最优化问题.

定理 15.3.1 *假设下列条件成立:*

(1) 对每一个 k, $l_k(x)$ 下半连续，即 $\liminf_{x \to \bar{x}} l_k(x) \ge l_k(\bar{x})$, $\forall \bar{x} \in R^n$.

(2) 对迭代序列 $\{x^{(k)}\}$ 的每一个收敛子列 $\{x^{(q)}\}$ (不妨设 $\lim_{q \to \infty} x^{(q)} = \bar{x}$), 存在子列 $\{x^{(r)}\} \subseteq \{x^{(q)}\}$ 满足条件:

$$\lim_{r \to \infty} l_r(x^{(r)}) = \lim_{r \to \infty} l_r(\bar{x}).$$

(3) 如果 $\lim_{r \to \infty} l_r(\bar{x}) = 0$, 则 $\bar{x} \in D$.

那么，序列 $\{x^{(k)}\}$ 的每一个聚点都属于可行域 D, 且是问题 (15.6) 的最优解.

证明 假设 $\bar{x}$ 是迭代点列 $\{x^{(k)}\}$ 的一个聚点， $\{x^{(q)}\} \subseteq \{x^{(k)}\}$ 是收敛到该聚点的某个子列．假设 $\{x^{(r)}\} \subseteq \{x^{(q)}\}$ 为满足条件 2, 3 的子列，则由可行域的修正步 2 知：

$$l_r(x^{(r^{'})}) \le 0, \qquad \forall\ r^{'} > r,$$

根据 $l_k(x)$ 的下半连续性知 $l_r(\bar{x}) \le 0$.

根据假设 2 可得

$$\lim_{r \to \infty} l_r(x^{(r)}) = \lim_{r \to \infty} l_r(\bar{x}) \le 0. \tag{15.13}$$

因为对所有的 r, 函数 $l_r(x)$ 满足条件 $l_r(x^{(r)}) > 0$, 所以

$$\lim_{r \to \infty} l_r(x^{(r)}) = \lim_{r \to \infty} l_r(\bar{x}) \ge 0. \tag{15.14}$$

根据 (15.13) 和 (15.14) 式知 $\lim_{r \to \infty} l_r(\bar{x}) = 0$. 从而，由假设 3 知 $\bar{x} \in D$.

最后，因为对所有的 $x \in D_k \supset D$, $f(x^{(k)}) \le f(x)$, 所以，对所有的 $x \in D$, 成立 $f(\bar{x}) \le f(x)$, 即 $\bar{x}$ 是问题 (15.1) 的全局最小值点. **证毕**

由此定理不难推得 KCG 割平面法的收敛性.

§15.4 分枝定界方法

分枝定界方法广泛应用于求解许多较复杂的全局最优化问题．其基本思想是对松弛后的可行域进行剖分 (分枝过程), 再在每个子区域上确定目标函数的上下界 (定界过程), 依此删除不包含全局最优解的子域，从而使问题的求解得以简化.

利用分枝定界方法求解全局最优化问题 (15.1) 的基本思想如下:

首先构造一个松驰的可行集 $M_0 \supset D$, 把 M_0 剖分成有限个子区域 $M_i, i \in I$.

其次，在每一个 $M_i \cap D$ 上确定目标函数的下界 $\beta(M_i)$ 和上界 $\alpha(M_i)$(如果可能的话) 使之满足条件

$$\beta(M_i) \leq \inf f(M_i \cap D) \leq \alpha(M_i).$$

因此， $\beta = \min_{i \in I} \beta(M_i)$, $\alpha = \min_{i \in I} \alpha(M_i)$ 分别是目标函数在整个可行域内的最小值的下界和上界，即

$$\beta \leq \min f(D) \leq \alpha.$$

最后，如果 $\alpha = \beta$(或者对某个事先给定的精度 ε, $\alpha - \beta \leq \varepsilon$), 那么算法终止. 否则，恰当地选取某些子区域 M_i, 再把这些子区域剖分以得到 M_0 的一个修正的剖分. 基于 M_0 的新剖分，确定目标函数最小值的新的更好的上下界.

重复上述过程，直到算法终止.

分枝定界方法的优点之一是，在每个迭代步我们总可以删除 D 的那些一定不包含最优解的子域，从而可以减少迭代步骤. 其明显的缺点是近似解的精度由当前步的上下界的差 $\alpha - \beta$ 来度量，这样，一个可能早就找到了的 “好的” 可行点常常要等到好几步以后才会被识别.

为了进一步描述利用分枝定界方法求解问题 (15.1) 的详细步骤，先介绍如下概念.

定义 15.4.1 *设 $M \subseteq R^n$ 是已知集， I 是有限下标集. 由 M 的子集组成的集合 $\mathcal{M} = \{M_i\}_{i \in I}$ 称为 M 的一种剖分 (partition), 如果*

$$M = \cup_{i \in I} M_i, \quad M_i \cap M_j = \partial M_i \cap \partial M_j, \quad \forall\ i, j \in I, i \neq j,$$

其中 ∂M_i 表示 M_i 的相对边界. 而子集 M_i, $i \in I$ 称为 M 的剖分集.

分枝定界方法中总是把剖分集取成简单多面体，如单纯形，长方形，凸多面锥等. 它们都可以用各自的顶点集表示.

下面是分枝定界方法求解最优化问题 (15.1) 的具体计算过程.

算法 15.2 *(**分枝定界算法**)*

*步 0(**初始化**) 选取 $M_0 \supseteq D$, $S_{M_0} \subseteq D$, $-\infty < \beta_0 \leq \min f(M_0)$. 给定 $\epsilon > 0$, $k := 0$. 对 M_0 进行剖分： $\mathcal{M}_0 = \{M_i^{(k)}\}$. 令*

$$\alpha_k = \min f(S_{M_k}), \quad \beta(M_k) = \beta_k.$$

如果 $\alpha_k < \infty$, 那么取 $x^{(k)} \in argmin\ f(S_{M_k})$.

*步 1 (**终止步**) 如果 $\alpha_k - \beta_k \leq \epsilon$, 则得解 $x^{(k)}$ 和最小值 $\alpha_k = \min f(D)$, 否则执行步 2.*

*步 2 (**修正剖分集**) 令 $k := k+1$, 依次进行如下运算：*

步 2.1 从 $\mathcal{M}_{k-1}$ 中删除所有满足 $\beta(M) \geq \alpha_{k-1}$ 的剖分集，即如果一个剖分集上目标函数的下界不小于当前目标函数近似最小值的上界，那么就可以删除这个剖分集. 因为这些剖分集中不可能含有全局最小值点. 用 $\mathcal{R}_k$ 表示经删除后 $\mathcal{M}_{k-1}$ 中剩余剖分集组成的集合.

步 2.2 在 $\mathcal{R}_k$ 中选取部分 (或全体) 剖分集组成集合 $\mathcal{P}_k$. 然后对 $\mathcal{P}_k$ 中的每一个剖分集进行剖分.

记所有的剖分集构成的集合为 $\mathcal{P}_k'$, 其中既包括 $\mathcal{R}_k$ 中没有被选出来的 “旧的” 剖分集，也包括对 $\mathcal{P}_k$ 中剖分集剖分后新得到的所有剖分集.

步 2.3 在 $\mathcal{P}_k'$ 中删除所有的不可行剖分集，因为这些剖分集中肯定不含有最优解. 记 $\mathcal{P}_k'$ 中还剩下来的那些剖分集组成集合为 $\mathcal{M}_k'$.

步 2.4 对 $\mathcal{M}_k'$ 中的每一个剖分集 M, 配置一个集合 S_M 和一个实数 $\beta(M)$. 配置原则如下：

$$
\begin{array}{lll}
S_M \subseteq M \cap D, & \beta(M) \leq \mathit{inf}\, f(M \cap D), & \alpha(M) = \min f(S_M) \\
S_M \supseteq M \cap S_{M'}, \beta(M) \geq \beta(M'), & \text{如果} M \subseteq M' \in \mathcal{M}_{k-1}. &
\end{array}
$$

步 2.5 令 $\mathcal{M}_k = (\mathcal{R}_k \backslash \mathcal{P}_k) \cup \mathcal{M}_k'$.

步 3 (**确定新的上下界**) 计算

$$
\alpha_k = \min\ \{\alpha(M) \mid M \in \mathcal{M}_k\}, \qquad \beta_k = \min\ \{\beta(M) \mid M \in \mathcal{M}_k\}.
$$

如果 $\alpha_k < \infty$, 那么寻找一点 $x^{(k)} \in D$ 满足条件 $f(x^{(k)}) = \alpha_k$. 转步 1.

注 1 对每一个剖分集 M, $S_M \subseteq M \cap D$ 的配置常常是在 M 中挑选若干个可行点. 因此，如果 $S_M \neq \emptyset$, 那么就不难算出 $\alpha(M) = \min f(S_M)$. 如果 M 中没有可行点，那么 $S_M = \emptyset$. 这时，令 $\alpha(M) = \infty$. 假设每步迭代都能够从某些 M 中选取到可行点，那么就一定有 $\alpha_k < \infty$. 除非所有的 S_M 都只能是空集，才有 $\alpha_k = \infty$.

注 2 假设对所有 k, $\alpha_k < \infty$, 那么由 S_M 和 $\beta(M)$ 的配置规则可知序列

$$
\{\alpha_k\}_0^\infty = \{f(x^{(k)}) \mid x^{(k)} \in \operatorname{argmin}\ f(S_M), S_M \subseteq M \cap D\}
$$

是非增序列，而序列 $\{\beta_k\}_0^\infty$ 是非减序列，且它们满足条件

$$
\alpha_k \geq \min f(D) \geq \beta_k.
$$

因此，差 $\alpha_k - \beta_k$ 反映了当前迭代步获得的最好近似解 $x^{(k)}$ 与全局最优解的近似程度. 从这个意义上说，算法的终止条件 $\alpha_k - \beta_k < \varepsilon$, 是合理的.

注 3 值得注意的是，即使所有的 $S_M = \emptyset$, 从而对所有的 k, $\alpha_k = \infty$, 分枝定界算法的每一步仍合理.

注 4 在实际执行分枝定界算法时，确定或计算剖分集 M 上的上下界 $\alpha(M)$ 和 $\beta(M)$, 合适地选取 $\mathcal{P}_k$, 对待剖分的剖分集选择合适的剖分方式，以及提出有效的删除多余剖分集的规则等对分枝定界算法的收敛性和改善计算效率具有重要作用.

例 15.4.1 求如下问题的全局最优解：

$$
\begin{array}{ll}
\min & f(x_1, x_2) \triangleq -(x_1 - 20)^2 - (x_2 - 10)^2 \\
s.t. & -\frac{1}{2}x_1 + x_2 \leq 10, \\
& x_1^2 + (x_2 - 10)^2 \leq 500, \\
& x_1 \geq 0, x_2 \geq 0.
\end{array}
$$

解 步 0：选取 M_0 为单纯形 $\mathrm{conv}\{(0,0)^T,(0,40)^T,(40,0)^T\}$, 它的三个顶点为 $(0,0)^T,(0,40)^T,(40,0)^T$.

因为 $f(x_1,x_2)$ 是凹函数，所以为了计算目标函数在 M_0 上的下界，我们构造仿射函数 $\phi(x_1,x_2)=a_1x_1+a_2x_2+a_3$, 它在 M_0 的顶点处的函数值与目标函数的函数值相等，从而正好是目标函数的下界函数，即对任意的 $(x_1,x_2)^T\in M_0$, $\phi(x_1,x_2)\le f(x_1,x_2)$. 要计算目标函数的下界，只要求该仿射函数的下界．为此，我们解下列线性方程组：

$$\begin{cases} a_3=-500 \\ 40a_2+a_3=-1300 \\ 40a_1+a_3=-500. \end{cases}$$

可得 $\phi(x_1,x_2)=-20x_2-500$. 然后再通过求解下列最优化问题 (目标函数为仿射函数) 得到目标函数在 M_0 上的下界 β_0：

$$\begin{array}{ll} \min & \phi(x_1,x_2) \\ \text{s.t.} & (x_1,x_2)^T\in M_0\cap D. \end{array}$$

解得 $(x_1,x_2)^T=(20,20)^T$, 且 $\beta_0=-900$.

可以验证 $(0,0)^T,(20,20)^T$ 为原问题的两个可行点．因此可令

$$S_{M_0}=\{(0,0)^T,(20,20)^T\},$$

从而

$$\alpha_0=\min f(S_{M_0})=f(0,0)=-500.$$

故 $x^{(0)}=(0,0)^T$.

步 1: 把 M_0 剖分成两个单纯形

$$M_{1,1}=\mathrm{conv}\{(0,0)^T,(0,40)^T,(20,20)^T\},\quad M_{1,2}=\mathrm{conv}\{(0,0)^T,(20,20)^T,(40,0)^T\}.$$

像第 0 步一样，我们分别计算下界 $\beta(M_{1,1})$ 和 $\beta(M_{1,2})$.

计算 $\beta(M_{1,1})$ 的过程如下：

首先构造仿射函数 $\phi_{1,1}(x_1,x_2)$, 它在 $M_{1,1}$ 的顶点处的函数值与目标函数的函数值相同．由此得 $\phi_{1,1}(x_1,x_2)=40x_1-20x_2-500$.

其次求解最优化问题

$$\begin{array}{ll} \min & \phi_{1,1}(x_1,x_2) \\ \text{s.t.} & (x_1,x_2)^T\in M_{1,1}\cap D. \end{array}$$

得 $(x_1,x_2)^T=(0,10)^T$, 且 $\beta(M_{1,1})=-700$.

类似地可计算 $\beta(M_{1,2})$. 此时，满足条件的仿射函数 $\phi_{1,2}(x_1,x_2)=20x_2-500$. 所需求解的最优化问题

$$\begin{array}{ll} \min & \phi_{1,2}(x_1,x_2) \\ \text{s.t.} & (x_1,x_2)^T\in M_{1,2}\cap D. \end{array}$$

的解为 $(x_1,x_2)^T=(0,0)^T$, 而 $\beta(M_{1,2})=-500$.

由上述计算可知 $\beta_1=\min\{\beta(M_{1,1}),\beta(M_{1,2})\}=-700$.

至此，剖分集 $M_{1,1}$ 和 $M_{1,2}$ 中的可行点集是

$$S_{M_{1,1}} = \{(0,0)^T, (0,10)^T, (20,20)^T\}, \quad S_{M_{1,2}} = \{(0,0)^T, (20,20)^T\}.$$

因而， $\alpha(M_{1,1}) = \alpha(M_{1,2}) = f(0,0) = -500$. 故 $\alpha_1 = -500$, 且 $x^{(1)} = (0,0)^T$.

步 2: 因为 $\beta(M_{1,2}) = -500 = \alpha_1$, 所以删除 $M_{1,2}$. 我们选取 $M_{1,1}$ 进行再剖分.

我们把集合 $M_{1,1}$ 剖分成如下两个单纯形：

$$M_{2,1} = \mathrm{conv}\{(0,0)^T, (0,20)^T, (20,20)^T\}, \quad M_{2,2} = \mathrm{conv}\{(0,20)^T, (0,40)^T, (20,20)^T\}.$$

仿照第 1 步的计算过程构造仿射函数 $\phi_{2,1}(x_1,x_2)$, 使它在 $M_{2,1}$ 的顶点处的函数值与目标函数的函数值相同，从而得到 $\phi_{2,1}(x_1,x_2) = 20x_1 - 500$. 求解最优化问题

$$\begin{array}{ll} \min & \phi_{2,1}(x_1,x_2) \\ \text{s.t.} & (x_1,x_2)^T \in M_{2,1} \cap D, \end{array}$$

得 $(x_1,x_2)^T = (0,0)^T$ 及 $\beta(M_{2,1}) = -500$.

因为 $M_{2,2} \cap D = \{(20,20)^T\}$, 所以不需要构造 $M_{2,2}$ 上的仿射函数 $\phi_{2,2}(x_1,x_2)$ 就能确定 $(x_1,x_2)^T = (20,20)^T$ 和 $\beta(M_{2,2}) = f(20,20) = -100$.

这样,

$$\begin{aligned} &\beta_2 = -500, \\ &S_{M_{2,1}} = \{(0,0)^T, (0,10)^T, (0,20)^T, (20,20)^T\}, \quad \alpha(M_{2,1}) = -500, \\ &S_{M_{2,2}} = \{(20,20)^T\}, \quad \alpha(M_{2,2}) = -100. \end{aligned}$$

因而， $\alpha_2 = -500$ 且 $x^{(2)} = (0,0)^T$.

因为 $\beta_2 = \alpha_2$, 所以算法有限步终止. $x^{(2)} = (0,0)^T$ 是全局最优解.

§15.5 应用分枝定界方法的几个问题

本节讨论应用分枝定界方法求解全局最优化问题时需要注意的几个问题. 它们对保证算法的收敛性和减少运算量具有重要作用. 这些问题包括

(1) 如何对集合进行剖分？

(2) 如何配置剖分集上目标函数的下界？

(3) 如何确定删除规则以删除不必要的剖分集？

(一) 初始单纯形 M_0 的确定方法

为了容易确定剖分集上目标函数的下界，分枝定界方法中的剖分集 M“形状” 自然应该是最简单的多面形. 通常我们都是把给定集合剖分成单纯形，长方形 (体) 或多面锥等.

下面介绍单纯形剖分方式，它是指算法中的 M_0 及其所有的剖分集都是 n 维单纯形. 本小节都假设可行域 $D \subseteq R^n$ 是稳健凸集，即 D 是某个开集的闭包.

对给定的 D, 规定

$$a_j \triangleq \min\{x_j \mid x \in D\}, \quad j = 1, \ldots, n, \qquad a \triangleq \max\left\{\sum_{j=1}^n x_j \mid x \in D\right\}. \tag{15.15}$$

如果定义集合

$$M_0 \triangleq \left\{ x \in R^n \mid a_j - x_j \le 0, \quad j = 1, \ldots, n, \sum_{j=1}^{n} x_j - a \le 0 \right\}, \tag{15.16}$$

那么， M_0 就是一个包含 D 单纯形． M_0 的 $n+1$ 个面分别是超平面

$$\{x \in R^n \mid x_j = a_j\}, \qquad j = 1, \ldots, n, \qquad \left\{ x \in R^n \mid \sum_{j=1}^{n} x_j = a \right\}.$$

不难看出，这 $n+1$ 个超平面都是 D 的支撑平面.

此外，单纯形 M_0 的顶点集可以写成

$$V_1 = \{v^{(0)}, \ldots, v^{(n)}\},$$

其中,

$$v^{(0)} = (a_1, \ldots, a_n)^T,$$

$$v^{(j)} = (a_1, \ldots, a_{j-1}, a - \sum_{i \ne j} a_i, a_{j+1}, \ldots, a_n)^T, \quad j = 1, \ldots, n.$$

注意到 (15.15) 中包含两个目标函数均为线性函数的凸规划问题，所以可以使用许多有效的局部最优化方法计算它们的解．因此，集合 M_0 的确定不存在任何计算问题.

特别地，如果 D 是包含于 R_+^n 的一个凸集，那么 M_0 可选取为集合

$$M_0 = \{x \in R^n \mid x_j \ge 0, \ j = 1, \ldots, n, \quad \sum_{j=1}^{n} x_j \le a\}.$$

此时， M_0 的顶点分别为零点 $v^{(0)}$, $v^{(j)} = ae^j$, $j = 1, \ldots, n$. 这里的记号 e^j 表示第 j 个分量为 1, 其余分量全为 0 的单位向量.

(二) 单纯形的剖分方法

对任意给定的 n 维单纯形 M, 记其顶点集为 $V(M) = \{v^{(0)}, \ldots, v^{(n)}\}$. 在 M 内选取点 w, 但 $w \notin V(M)$. 如果 w 可用 M 的 $n+1$ 个顶点表示为

$$w = \sum_{i=0}^{n} \lambda_i v^{(i)}, \quad \lambda_i \ge 0, \quad i = 0, 1, \ldots, n, \quad \sum_{i=0}^{n} \lambda_i = 1.$$

那么对每一个给定的指标 i, 当 $\lambda_i > 0$ 时，可以证明集合

$$M(i, w) = \mathrm{conv}\{v^{(0)}, \ldots, v^{(i-1)}, w, v^{(i+1)}, \ldots, v^{(n)}\}.$$

是 M 的一个子集，而且也是一个单纯形．进一步还可以证明：

(1) $M \subseteq \cup M(i, w)$.

(2) 当 $i \ne k$ 时， $M(i, w) \cap_{i=0}^{n} M(k, w) = \emptyset$. 所以，集合

$$\{M(i, w) \mid \lambda_i > 0, w \in M, w \notin V(M)\}$$

构成了单纯形 M 的一个剖分. 我们称之为 M 的星形剖分.

为保证分枝定界算法的收敛性，在上述星形剖分中，我们还不能随便选取 M 内的点 w. 通常，可取 w 为剖分集 M 的最长边的中点. 这时,

$$w = \frac{1}{2}(v_M^{(r)} + v_M^{(s)}),$$

其中, $v_M^{(r)}, v_M^{(s)}$ 表示 M 的最长边的两个端点. 实际上，此时 M 被分成两个 n 维单纯形，且它们具有相同的体积. 因此，这种剖分方式又称为二分剖分.

如果用 $\delta(M)$ 表示 M 的半径. 我们称单纯形序列 $\{M_k\}_0^\infty$ 是递减的, 如果 $\{\delta(M_k)\}_0^\infty$ 是递减序列. 下面的命题刻画了二分剖分具有的性质.

命题 15.5.1 假设 $\{M_q\}_0^\infty$ 是任意一个由二分剖分产生的递减 n 维单纯形序列. 那么
(1) 对所有的 q, 我们有 $\delta(M_{n+q}) \le \frac{\sqrt{3}}{2}\delta(M_q)$.
(2) $\lim_{q\to\infty} \delta(M_q) = 0$.

证明 略.

本节提出的星形剖分概念可以类似地用于对长方形 (体) 和多面锥的剖分.

(三) 下界的确定方法

下面研究利用分枝定界方法解决特殊的全局最优化问题时，如何确定目标函数在剖分集 M 上的下界 $\beta(M)$?

我们首先考虑 Lipschitz 最优化问题. 假设 M 为包含可行域 D 的单纯形 (或超长方体), 目标函数 f 在 M 上 Lipschitz 连续，且其 Lipshctz 常数为 L.

设 M 的半径为 $\delta(M)$. 显然，当 M 是单纯形时， $\delta(M)$ 是 M 的最长边的长度；当 M 是超长方体

$$\{x \in R^n \mid a \le x \le b, a, b \in R^n, a < b\} \tag{15.17}$$

时， $\delta(M)$ 是连接 “左下角” 顶点和 “右上角” 顶点的对角线的长度.

由 f 的 Lipschitz 连续性，对任意的 $x, z \in M$, 有

$$f(z) \ge f(x) - L\|z - x\|. \tag{15.18}$$

如果 $V'(M)$ 是 M 的顶点集 $V(M)$ 的任意子集，那么

$$\beta(M) = \max\{f(x) \mid x \in V'\} - L\delta(M).$$

显然是 $f(x)$ 在 M 上的一个下界.

注 1 如果已知 M 的任意子集 M', 那么上式中的顶点子集 $V'(M)$ 可以用 M' 代替.

注 2 如果 M 是 (15.17) 式中定义的超长方体，那么可以取

$$\beta(M) = f(\frac{1}{2}(a+b)) - \frac{L}{2}\delta(M)$$

作为 $f(x)$ 在 M 上的下界，它显然比 (15.18) 式更好.

对一般的多面体 M, 当目标函数具有某种特殊结构时，我们也能给出具体的下界确定方法.

如果 $f(x)$ 是 M 上凹函数，那么

$$\inf f(M \cap D) \geq \min f(M) = \min f(V(M)),$$

其中 $V(M)$ 是 M 的 (有限) 顶点集. 因此，我们可以选取下界

$$\beta(M) = \min f(V(M)).$$

如果 $f(x)$ 是 $d.c.$ 函数，即 $f(x)$ 可写成

$$f(x) = f_1(x) + f_2(x),$$

其中 $f_1(x)$ 是 M 上的凹函数， $f_2(x)$ 是 M 上的凸函数.

在 M 内任取一点 v^*, 选取

$$\bar{v} \in \text{argmin}\{f_1(v) + f_2(v^*) + p^{*T}(v - v^*) \mid v \in V(M)\},$$

其中 $V(M)$ 是 M 的顶点集,

$$p^* \in \partial f_2(v^*) \triangleq \{v \in R^n \mid f_2(x) - f_2(v^*) \geq v^T(x - v^*),\ \forall x \in R^n\}.$$

显然，仿射函数

$$l(x) = f_2(v^*) + p^{*T}(x - v^*)$$

满足条件

$$l(x) \leq f_2(x), \quad \forall x \in R^n,$$

即 $l(x)$ 是 $f_2(x)$ 的一个下界函数. 从而，对所有的 $x \in R^n$ 有

$$f_1(x) + l(x) \leq f(x).$$

因为 $f_1(x) + l(x)$ 是 M 上的凹函数，所以它在 M 上的最小值于 M 的某个顶点 $\bar{v}$ 处达到. 这样就不难得到目标函数 $f(x)$ 在 M 上的下界

$$\beta(M) = f_1(\bar{v}) + f_2(v^*) + p^{*T}(\bar{v} - v^*).$$

最后，对更一般的目标函数，如 M 上的下半连续函数，要计算它在 M 上的下界 $\beta(M)$, 往往需要利用 M 的简单结构或假设目标函数 $f(x)$ 具有特殊形式的表达式，以构造 $f(x)$ 在 M 上的凸下界函数 (或凸包络) $\phi(x)$, 再利用 $\phi(x)$ 来计算 $\beta(M)$. 相关知识的了解要参看全局最优化方面的专门文献，如 [12].

(四) 删除规则

对给定的剖分集 M, 提出合适的删除规则以判别 $M \cap D = \emptyset$ 或者 $M \cap D \neq \emptyset$, 是删除不可行剖分集的前提. 下面我们就具有某种特殊结构的可行域提出合适的删除规则.

所谓提出合适的 “删除规则”, 就是给出可计算的能判别 $M \cap D = \emptyset$ 或 $M \cap D \neq \emptyset$ 的条件.

这里都假设所有的剖分集 M 都是凸多面体，因而可由它的顶点集 $V(M)$ 惟一确定.

先看最简单的一种情形．假设可行域

$$D=\{x\in R^n \mid h(x)\geq 0\},$$

其中， $h:R^n\to R$ 是凸函数．这时，对给定的剖分集 M, 如果它的 (有限) 顶点集 $V(M)$ 满足条件

$$V(M)\subseteq\{x\in R^n \mid h(x)<0\}, \tag{15.19}$$

那么就可以判定 M 为不可行剖分集，从而被删除．

显然，条件 (15.19) 是可计算的．

下面再看稍复杂一点的情形．假设可行域 D 是具有如下表示形式的紧集：

$$D=\{x\in R^n \mid g(x)\leq 0\}, \tag{15.20}$$

其中 $g:R^n\to R$ 是凸函数．我们还假设已知 D 的一个内点 $y^{(0)}$, 即 $g(y^{(0)})<0$.

因为对给定的剖分集 M, 如果存在一个顶点 $v\in V(M)$ 使得 $v\in D$, 那么当然有 $M\cap D\neq\emptyset$, 所以我们可以据此判定 M 为可行剖分集，从而不被删除．但是，因为 $V(M)\cap D=\emptyset$ 并不意味着 $M\cap D=\emptyset$, 所以不能把此条件作为删除 M 的条件．这就是说，要删除 M, 如果已知 $V(M)\cap D=\emptyset$ 还不够，需要提出另一些可计算的条件．

设 p 是集合 $M\backslash D$ 中的任意点．计算 “线段” $[y^{(0)},p\,]$ 与 D 的边界 ∂D 的交点 z. 根据 D 的凸性知

$$z=\lambda y^{(0)}+(1-\lambda)p, \tag{15.21}$$

其中 λ 是下列单变量凸规划问题的惟一解：

$$\min\{\mu\in[0,1] \mid \mu y^{(0)}+(1-\mu)p\in D\}. \tag{15.22}$$

设 $s(z)\in\partial g(z)$ 是函数 $g(x)$ 在 z 处的次梯度，如果由它确定的超平面

$$s(z)^T(x-z)=0$$

把集合 M 与 D 严格分离，那么，剖分集 M 即可被删除．

综上所述，我们可以提出如下删除规则：

删除规则 1： 对给定的剖分集 M, 如果它的顶点集 $V(M)$ 满足条件

(1) $V(M)\cap D=\emptyset$.

(2) $V(M)\subseteq\{x \mid s(z)^T(x-z)>0\}$, 其中 $z\in[y^{(0)},p]\cap\partial D$, $s(z)\in\partial g(z)$.

那么剖分集 M 为不可行剖分集，从而被删除．

值得注意的是，删除规则 1 中的两个条件仅仅是判别不可行剖分集的充分条件．

最后再考虑更复杂一点的可行域 D. 假设 $D=D_1\cap D_2$, 且 D_1 和 D_2 具有如下表示形式：

$$\begin{aligned}&D_1=\{x\in R^n \mid g(x)\leq 0\},\\&D_2=\{x\in R^n \mid h_j(x)\geq 0, j=1,\dots,r\}.\end{aligned}$$

其中 $g:R^n\to R$, $h_j:R^n\to R$, $j=1,\dots,r$, 是凸函数， D_1 是紧集．我们还假设已知 D_1 的一个内点 $y^{(0)}$.

记

$$C_j \triangleq \{x \in R^n \mid h_j(x) < 0\}, \qquad j = 1, \ldots, r.$$

利用删除规则 1, 我们可以提出如下删除规则：

删除规则 2： 设 M 为给定剖分集， $V(M)$ 是它的顶点集. 当用 D_1 代替 D 时， $V(M)$ 满足删除规则 1, 或者存在一个 $j \in \{1, \ldots, r\}$ 使得 $V(M) \subseteq C_j$, 那么剖分集 M 即可被删除.

同样地，删除规则 2 中的条件也仅仅是判别不可行剖分集的充分条件.

对于具有其它特殊性质的可行域，也能提出相应的删除规则，此处恕不一一介绍.

§15.6 遗传算法

对于复杂的全局最优化问题，本节将要介绍的遗传算法是非常有效的算法之一. 同前面各节介绍的确定性方法不同，遗传算法属于随机最优化算法或不确定性算法，它既不要求目标函数具有特定的性质，也不要求可行域具有好的结构. 因此，该方法广泛应用于解决许多复杂的实际问题，如运输问题，车辆调度问题，旅行商问题，模式识别问题，网络最优化问题等.

(一) 遗传算法的基本计算步骤

遗传算法通常都包括以下几个计算步骤：

第一步随机产生一定数目的染色体. 所谓遗传算法中的 “染色体”, 是指这样一串数据或数组，它们被用来作为所要求解的最优化问题的解的代码，其本身还不一定是最优解.

这些随机产生的染色体构成了一个种群. 种群中染色体的数目成为种群的大小和种群的规模.

第二步构造评价函数以评价每一个染色体的优劣，即染色体对环境的适应程度，简称适应度. 适应度强的染色体才有利于随后的遗传运算.

第三步从当前种群中选出优良的染色体，使它们成为新一代的染色体.

判断染色体优劣的准则就是各染色体具有的适应度越强的染色体被选择的机会将越多. 通过一定的筛选便产生了新的种群.

第四步对新的种群先进行交叉遗传运算 (相当于生物遗传中的杂交过程), 再进行变异遗传运算，以挖掘种群中个体的多样性，克服可能陷入局部解的弊病.

经过上面四步运算过程产生的染色体成为后代. 对新产生的后代重复上述运算步骤，直到所做的迭代次数达到某个事先给定的值，把所得到的染色体作为最优化问题的最优解.

下面我们对以下几个问题进行更详细的介绍：

(1) 如何产生初始染色体？

(2) 如何构造评价函数？

(3) 如何对染色体进行筛选？

(4) 如何进行交叉遗传运算和变异遗传运算？

(二) 初始染色体的产生

在遗传算法中，不失一般性，都可以假设所求解的最优化问题中只含有不等式约束条件. 如果实际问题的数学模型中含有等式约束条件，如 $g_i(x_1, \ldots, x_n) = 0$, $i = 1, \ldots, k_e$, 那么可以通过解这些等式约束构成的方程组，用一部分变量 (自由变量) 表示其它变量，并将它们代入到其它所有不等式约束条件中. 显然，经过这样处理后的问题只含有不等式约束.

现假设种群中含有的染色体的个数为 p. 遗传算法的第一步就是要随机地产生 p 个初始染色体. 由于所求解最优化问题的复杂性，所以一般不会存在产生可行初始染色体的解析方法. 实际中，我们常用下面两种方法来产生可行初始染色体.

第一种方法是假设决策者能够给出最优化问题的可行域的某个内点，不妨记之为 P_0. 给定一个充分大的实数 M(其实际大小由所要解决的决策问题确定), 我们在空间 R^n 中随机地选择某个方向向量 d. 如果 P_0+Md 满足问题中所有的不等式约束条件，那么 $P=P_0+Md$ 便作为一个初始染色体；否则，M 为 0 到 M 之间的某个随机数，重新检验 P_0+Md 是否满足所有的不等式约束条件. 由于 P_0 是可行域的内点，所以在有限次执行上述运算过程后，总可以找到满足所有不等式约束条件的可行解.

在 R^n 中选取 p 个不同的方向向量 d, 就可以按照上述方法产生 p 个可行初始染色体 $P_1,\ldots,P_p$.

第二种方法是假设决策者事先给不出可行域的内点，但可以根据所决策的问题确定一个包含最优解的区域，这个区域不一定是可行域，也不一定是可行域的子集. 一般情况下，我们可以把这个区域设计成一个 n 维超立方体.

从已知的超立方体中，随机产生一点，并验证它是否满足所有的不等式约束条件，直到得到可行的内点为止. 至此，我们可以用第一种方法产生 p 个可行染色体 $P_1,\ldots,P_p$.

(三) 评价函数的构造

构造对染色体的评价函数，就是对当前种群中的每一个给定染色体，设定一个概率 (刻画它被选择产生后代的机会) 其大小与该染色体与其它染色体的适应性成比例. 实际上就是通过轮盘赌，适应性强的染色体被选择产生后代的机会应该要大.

比较常用的评价函数是基于序的评价函数.

假设目前该代中的染色体为 $P=\{P_1,\ldots,P_s\}$, 而且决策者可以对该 s 个染色体给出一种序的关系，序号越小的，被认为是越好的染色体. 譬如说在 (单目标) 全局最小化问题中，由于每一个染色体都确定了一个目标函数值 (被看成是该染色体的适应度), 所以染色体的序可由目标函数值的大小确定，所对应的目标函数值越小染色体的序号也越大. 如果所对应的函数值相同，那么就认为这些染色体之间没有差别，采用随机排序.

基于染色体的排序，我们可以定义如下评价函数 $E:P\to R$:

$$E(P_i)=c(1-c)^{i-1}, i=1,\ldots,s. \tag{15.23}$$

其中 $c\in(0,1)$ 为某个给定值.

考虑到在种群的进化过程中可能出现下面两种现象：一是进化初期可能会出现一些适应度超常的染色体，它们在进化过程中被不断地按比例复制，从而使这些异常的染色体可能在种群中占有较大的比例，又由于它们的竞争力突出因而可能会控制整个选择过程，进而影响算法的全局最优化性能，出现所谓的 “早熟现象”. 二是进化到一定程度后，种群中每个染色体的适应度都得到了普遍改善，从而使得种群的平均适应度接近于最优染色体的适应度. 这意味着最优染色体的竞争力的下降，因而导致后期进化过程出现所谓的 “随机游动现象”. 所以评价函数可用如下方式构造.

记 $f_1,\ldots,f_s$ 分别为染色体 $P_1,\ldots,P_s$ 对应的适应度 (如各自的目标函数值).

令

$$f_i^{'}=af_i+b, \qquad i=1,\ldots,s, \tag{15.24}$$

其中 $f_i^{'}$ 称为染色体 P_i 新的适应度，a,b 为待定参数. a,b 的选取有两个条件确定，一个条件是保证

新的适应度的平均值等于原适应度的平均值，第二个条件是保证新的最优适应度是原平均适应度的指定倍数.

我们把上述确定染色体的新适应度的过程叫做适应度定标. 利用定标后的适应度可以构造如下评价函数：

$$E(P_i) = \frac{f_i'}{\sum\limits_{j=1}^{s} f_j'}, \qquad i = 1, \ldots, s. \tag{15.25}$$

(四) 对染色体的筛选

对染色体的筛选过程类似于旋转赌轮的过程. 不过该赌轮上的刻度是按当前种群中每一个染色体的适应度来划分的. 因此，赌轮上的刻度一般不是均匀划分的，染色体的适应度越大，它在赌轮上所占的面积也越大，该染色体被筛选出来的概率就越大. 将赌轮旋转一次，赌轮指针所指区域即为新的种群选择了一个染色体. 重复旋转赌轮 s 次，则得到新的种群.

上述轮盘赌过程可写成如下计算程序：

算法 15.3 *(**染色体筛选算法**)*

步 0 对每一个染色体 P_i, 计算累计概率 q_i:

$$\begin{cases} q_0 = 0 \\ q_i = \sum_{j=1}^{i} E(P_i), \qquad i = 1, \ldots, s. \end{cases}$$

步 1 从区间 $(0, s]$ 中产生一个随机数 r.

步 2 如果 $q_{i-1} < r < q_i$, 则选择第 i 个染色体 $P_i (1 \le i \le s)$.

步 3 重复步 1 和步 2 共 s 次，则可以得到 s 个复制的染色体.

(五) 遗传运算

经过筛选出来的染色体需要进行两种遗传运算. 一种叫做交叉遗传运算，简称交叉运算；另一种叫做变异遗传运算，简称变异运算. 经过交叉和变异运算后生成的染色体就构成了后代染色体.

所谓 “交叉运算”, 是指下面两个过程：

1. 选择父本

给定一个参数 p_c, 用它表示当前种群中每个染色体可能与其它染色体进行交叉运算的概率. 这样, s 个染色体中参与交叉运算的染色体的数目 X 服从二项分布 $B(s, p_c)$, 从而随机变量 X 的数学期望为 $e_c = sp_c$. 就是说当前种群中的染色体参与交叉运算的平均染色体数目为 e_c.

为了产生参与交叉运算的染色体父本，我们执行如下算法：

算法 15.4 *(**选择父本算法** 1)*

步 0 给定 p_c, 令 $N = 1$, $k = 1$.

步 1 在 $[0, 1]$ 中生成一个随机数 r.

步 2 如果 $r < p_c$, 那么选择 P_N 为交叉运算的父本，令 $k := k + 1$ ；否则令 $N := N + 1$, 执行步 3.

步 3 如果 $N > s$, 算法终止，把选择出来的父本依次记为 $P_1', \ldots, P_{k-1}'$ 作为进行交叉运算的父本；否则转步 1.

2. 父本进行交叉运算

把上述算法产生的 $k-1$ 个父本进行随机配对，则共得到 $(k-1)/2$(或 $(k-2)/2$) 对染色体．假设 $(P_1^{'}, P_2^{'})$ 是其中的一对染色体，则它们之间的 “交叉运算” 是指进行如下运算以生成后代

算法 15.5 *(生成后代算法)*

步 0 设定最大循环次数 N. 令 $k=1$.

步 1 在区间 $(0,1)$ 内生成一个随机数 r_1.

步 2 令

$$P_a = r_1 P_1^{'} + (1-r_1)P_2^{'}, \qquad P_b = (1-r_1)P_1^{'} + r_1 P_2^{'}. \tag{15.26}$$

步 3 检验 P_a, P_b 是否为原最优化问题的两个可行点，如果两个点都是，则用它们代替其父代，算法终止；如果只有一个点是，则保留这个点 (但不能取代其父本), 令 $k:=k+1$, 执行步 4；如果两个都不是，则令 $k:=k+1$, 执行步 4.

步 4 如果 $k>N$ 或已经有两个可行点被保留下来，则用两个可行点取代父本，算法终止；否则，返回步 1.

对所有配对染色体进行上述交叉运算则得到后代染色体.

类似交叉运算，我们对当前种群中染色体进行的变异运算也包括下面两个过程.

1. 选择父本

给定一个参数 p_m, 用它表示当前种群中每个染色体可能与其它染色体进行变异运算的概率．这样， s 个染色体中参与变异运算的染色体的数目 Y 服从二项分布 $B(s, p_m)$, 从而随机变量 Y 的数学期望为 $e_m = sp_m$. 就是说当前种群中的染色体参与交叉运算的平均染色体数目为 e_m.

为了产生参与变异运算的染色体父本，我们执行与算法 15.4 类似的算法.

算法 15.6 *(选择父本算法 2)*

步 0 给定 p_m, 令 $N=1$, $k=1$.

步 1 在 $[0,1]$ 中生成一个随机数 r.

步 2 如果 $r<p_m$, 那么选择 P_N 为变异运算的父本，令 $k:=k+1$；否则令 $N:=N+1$, 执行步 3.

步 3 如果 $N>s$, 算法终止，把选择出来的父本依次记为 $P_1^{'}, \ldots, P_{k-1}^{'}$ 作为进行变异运算的父本；否则转步 1.

2. 对选择出来的父本进行变异运算

所谓 “变异运算” 是指下面的过程：

用 $P=(x_1, x_2, \ldots, x_s)$ 表示由上述算法产生的参与变异运算的父本， M 是产生初始化染色体的过程中设定的足够大的数． d 是空间 R^n 中随机产生的某个变异方向，如果

$$P^{'} = P + Md$$

是原最优化问题的可行点，则 $P^{'}$ 即为变异后的染色体，并用它代替父本染色体 P.

如果 $P^{'}$ 不可行，则 M 为 $(0, M)$ 之间某个随机生成的数，并进一步检验 $P^{'}$ 的可行性．重复这一过程直到产生变异染色体为止.

如果在预先给定的最大循环次数内没有找到可行的变异染色体，则保留父本进入后代遗传.

(六) 遗传算法的计算程序及算例

最初的染色体经过筛选、交叉和变异遗传运算，便得到了一个新的种群，并准备进入下一代进化. 这种过程循环数次后，整个遗传算法在一定条件下终止.

需要指出的是，目前遗传算法的终止条件还没有定论. 在一些实际最优化问题的求解过程中，常常看种群的染色体是否已进化到一种稳定状态，即各染色体的适应度相近，则终止循环过程.

对于用遗传算法求解一般的最优化问题，我们可以给出如下计算程序：

算法 15.7 *(**遗传算法**)*

步 0 生成 s 个初始染色体.

步 1 对染色体进行交叉遗传运算和变异遗传运算.

步 2 计算所有染色体的目标函数值.

步 3 根据目标函数值，计算每个染色体的适应度.

步 4 通过旋转赌轮，筛选染色体.

步 5 重复步 *1* 至步 *4*, 直到满足终止条件.

步 6 把算法终止时最好的染色体作为最优化问题的解.

注 算法终止时最好的染色体不一定是最后一代中的染色体. 因此算法要求把整个进化过程中已找到的最好染色体存贮下来，即为 P_0. 当新的种群中发现更好的染色体时，则将它重新赋值给 P_0, 直到算法终止.

例 15.6.1 用遗传算法求解如下极大化问题

$$\begin{cases} \max & \sqrt{x_1}+\sqrt{x_2}+\sqrt{x_3} \\ \text{s.t.} & x_1^2+2x_2^2+3x_3^2 \le 1, \\ & x_1,x_2,x_3 \ge 0. \end{cases} \tag{15.27}$$

解 首先，我们要设置需要用到的参数：种群规模为 30; 染色体参与交叉运算的概率为 0.3; 染色体参与变异运算的概率为 0.2; 基于序的评价函数中用到的参数 $c=0.05$. 这些参数的不同选取不会对遗传算法所求出的解产生太大影响. 就是说遗传算法对这些参数的设定是稳健的 (Robust).

用染色体 $P=(x_1,x_2,x_3)$ 作为 (15.27) 的解的代码.

由于问题 (15.27) 的可行集包含于立方体

$$\mathcal{X}=\{(x_1,x_2,x_3)\mid 0\le x_1\le 1, 0\le x_2\le 1, 0\le x_3\le 1,\},$$

所以我们可以从 $\mathcal{X}$ 中选取初始染色体

$$x_1=\mathcal{U}(0,1), x_2=\mathcal{U}(0,1), x_3=\mathcal{U}(0,1),$$

其中 $x_i=\mathcal{U}(0,1)$, $i=1,2,3$ 表示 x_i 是来自区间 $[0,1]$ 上的均匀分布的随机数.

如果该染色体不可行，则拒绝接受，并重新产生这样的随机数作为初始染色体；如果可行，则接受它为种群中的一名成员.

重复上述过程以得到 30 个可行的初始染色体. 他们经过 400 次的遗传运算后，得到的最优染色体为

$$x^* = (0.636, 0.395, 0.307).$$

其适应度为 1.980.

因此，我们可以认为问题 (15.27) 的近似解为 $(0.636, 0.395, 0.307)$.

习题 15

1. 设 $f : D \to R$ 是凹函数， D 是非空紧凸集. 证明： $f(x)$ 在 D 上的全局极小值一定在 D 的极限点处取到.

2. 设函数 $f_i(x), i = 1, \dots, m,$ 都是 $d.c.$ 函数. 证明

$$\min_{1 \le i \le m} f_i(x)$$

是 $d.c.$ 函数.

3. 设 $f_i : M \subseteq R^n \to R^n, i = 1, \dots, m,$ 是 Lipschitz 函数，令 $F(x) \triangleq (f_1(x), \dots, f_m(x))^T$. 证明： $\|F(x)\|_2$ 是 M 上的 Lipschitz 函数.

4. 应用覆盖法求解下列问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & \mathrm{e}^{-x} \sin(1/x) \\ \text{s.t.} \quad & x \in [10^{-5}, 1], \end{aligned}$$

5. 如果在 (15.12) 式中，令

$$p^{(k)} = (x^{(k)} - \pi^{(k)}), \quad y^{(k)} = \pi^{(k)}, \quad \beta_k = 0,$$

其中 $\pi^{(k)}$ 是点 $x^{(k)}$ 在可行域 D 上的投影. 证明所得割平面法产生的点列 $\{x^{(k)}\}$ 的任何聚点是原问题的解.

6. 设函数 f 连续可微. 证明

$$\nabla f(x) = \partial f(x) \triangleq \{v \in R^n \mid f(y) - f(x) \ge v^T(y - x),\ \forall y \in R^n\}.$$

7. 用分枝定界方法求解下列问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x_1, x_2) \triangleq -(x_1 - 10)^2 - (x_2 - 20)^2 \\ \text{s.t.} \quad & \tfrac{1}{2}x_1 + x_2 \le 10, \\ & (x_1 - 10)^2 + (x_2)^2 \le 500, \\ & x_1 \ge 0, x_2 \ge 0. \end{aligned}$$

8. 设 M 为 n 维单纯形，记其顶点集为 $V(M) = \{v^{(0)}, v^{(1)}, \dots, v^{(n)}\}$. 点 $w \in M$ 但 $w \notin V(M)$. 如果 w 关于 M 的 $n+1$ 个顶点表示式为

$$w = \sum_{i=0}^{n} \lambda_i v^{(i)}, \quad \lambda_i \ge 0, \quad (i = 0, 1, \dots, n), \quad \sum_{i=0}^{n} \lambda_i = 1.$$

证明以下结论成立：

(1) 对每一个给定的指标 i, 当 $\lambda_i > 0$ 时，集合

$$M(i, w) = \mathrm{conv}\{v^{(0)}, \dots, v^{(i-1)}, w, v^{(i+1)}, \dots, v^{(n)}\}.$$

是 M 的子集，而且也是一个单纯形.

(2) $M \subseteq \cup M(i,w)$.

(3) 当 $i \neq k$ 时， $M(i,w) \cap M(k,w) = \emptyset$.

9. 用遗传算法求解如下极大化问题

$$\begin{cases} \max & \sqrt{x_1} + \sqrt{x_2} + \sqrt{x_3} \\ \text{s.t.} & 2x_1^2 + x_2^2 + 5x_3^2 \leq 1, \\ & x_1, x_2, x_3 \geq 0. \end{cases}$$

附录一　解线性方程组的常用算法

给定 n 元线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n. \end{cases} \tag{A.1}$$

令

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

则线性方程组 (A.1) 可简写成矩阵形式

$$Ax = b. \tag{A.2}$$

假定 $\det(A) \neq 0$. 由 Gramer 法则，方程组 (A.1) 的解存在惟一. 本章我们将介绍求解线性方程组 (A.1) 的常用的数值算法.

§A.1　Gauss 消元法

Gauss 消元法是一种常用的求解线性方程组的直接法. 为介绍 Gauss 消元法，我们首先分析求解一类特殊线性方程组 — 三角形线性方程组的直接法. 三角形线性方程组分下三角形和上三角形线性方程组两类：系数矩阵为下三角形矩阵的线性方程组，即形如

$$\begin{cases} l_{11}x_1 & = & b_1, \\ l_{21}x_1 + l_{22}x_2 & = & b_2, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & \cdots & \\ l_{n1}x_1 + l_{n2}x_2 + \cdots + l_{nn}x_n & = & b_n \end{cases} \tag{A.3}$$

的线性方程组称为下三角形线性方程组. 而系数矩阵为上三角形矩阵的线性方程组，即形如

$$\begin{cases} u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n & = & b_1, \\ u_{22}x_2 + \cdots + u_{2n}x_n & = & b_2, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & \cdots & \\ u_{nn}x_n & = & b_n \end{cases} \tag{A.4}$$

的线性方程组称为上三角形线性方程组，其中， $l_{11}l_{22}\cdots l_{nn} \neq 0$, $u_{11}u_{22}\cdots u_{nn} \neq 0$. 对于下三角形线性方程组 (A.3), 可由前推过程求解，即

$$\begin{cases} x_1 = b_1/l_{11}, \\ x_i = (b_i - l_{i1}x_1 - \cdots - l_{i,i-1}x_{i-1})/l_{ii}, \qquad i = 2, \ldots, n. \end{cases} \tag{A.5}$$

而对于上三角形线性方程组 (A.4), 则可通过回代过程求解:

$$\begin{cases} x_n = b_n/u_{nn}, \\ x_i = (b_i - u_{i,i+1}x_{i+1} - \cdots - l_{in}x_n)/u_{ii}, \qquad i = n-1, \ldots, 1. \end{cases} \tag{A.6}$$

Gauss 消元法的基本思想是先通过逐次消元将原线性方程组化为同解的上三角形线性方程组，然后回代求解. 下面介绍 Gauss 消元求解线性方程组的整个求解过程. 对于 n 元线性方程组 (A.1) 或等价地 (A.2), Gauss 消元法的步骤如下:

算法 1.1 *(Gauss* **消元法***)*

步 *0* 令 $A = A^{(1)} = (a_{ij}^{(1)})$, $b = b^{(1)} = (b_i^{(1)})$.

步 *1* 若 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, 令

$$l_{i1} = a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}, \qquad i = 2, \ldots, n.$$

用 l_{i1} 乘方程组 (A.1) 中第一个方程加到第 i 个方程 $(i = 2, \ldots, n)$, 可消去第 i 个方程中的变量 x_1, 将 (A.1) 变为同解线性方程组:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)}, \\ \qquad\qquad a_{22}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)}, \\ \qquad\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad a_{n2}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(2)}x_n = b_n^{(2)}, \end{cases} \tag{A.7}$$

其中

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(2)} &= a_{ij}^{(1)} - l_{i1}a_{1j}^{(1)}, \qquad i, j = 2, \ldots, n, \\ b_i^{(2)} &= b_i^{(1)} - l_{i1}b_1^{(1)}, \qquad i = 2, \ldots, n. \end{aligned}$$

步 *2* 若 $a_{22}^{(2)} \neq 0$, 令

$$l_{i2} = a_{i2}^{(2)}/a_{22}^{(2)}, \qquad i = 3, \ldots, n.$$

用 l_{i2} 乘方程组 (A.7) 中第二个方程加到第 i 个方程 $(i = 3, \ldots, n)$, 可消去第 i 个方程中的变量 x_2, 将 (A.7) 变为同解线性方程组:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)}, \\ \qquad\qquad a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)}, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad a_{33}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{3n}^{(3)}x_n = b_3^{(3)}, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad a_{n3}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{nn}^{(3)}x_n = b_n^{(3)}, \end{cases}$$

其中

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(3)} &= a_{ij}^{(2)} - l_{i2}a_{2j}^{(2)}, \qquad i, j = 3, \ldots, n, \\ b_i^{(3)} &= b_i^{(2)} - l_{i2}b_2^{(2)}, \qquad i = 3, \ldots, n. \end{aligned}$$

步 $k-1$ 若 $a_{k-1,k-1}^{(k-1)} \neq 0$, 令

$$l_{i,k-1} = a_{i,k-1}^{(k-1)}/a_{k-1,k-1}^{(k-1)}, \qquad i = k, \ldots, n.$$

重复上述消元过程，可将线性方程组 (A.1) 变成同解线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + \cdots\cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)}, \\ \qquad a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots\cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)}, \\ \qquad\qquad a_{33}^{(3)}x_3 + \cdots\cdots + a_{3n}^{(3)}x_n = b_3^{(3)}, \\ \qquad\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad a_{kk}^{(k)}x^{(k)} + \cdots + a_{kn}^{(k)}x_n = b_k^{(k)}, \\ \qquad\qquad a_{nk}^{(k)}x^{(k)} + \cdots + a_{nn}^{(k)}x_n = b_n^{(k)}, \end{cases}$$

其中

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - l_{i,k-1}a_{k-1,j}^{(k-1)}, \qquad i,j = k, \ldots, n, \tag{A.8}$$

$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - l_{i,k-1}b_{k-1}^{(k-1)}, \qquad i = k, \ldots, n. \tag{A.9}$$

如此经 $n-1$ 步消元后，线性方程组 (A.1) 变为如下同解的上三角形线性方程组：

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)}, \\ \qquad a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)}, \\ \qquad\qquad a_{33}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{3n}^{(3)}x_n = b_3^{(3)}, \\ \qquad\qquad\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)}. \end{cases} \tag{A.10}$$

步 n 回代求解上三角形线性方程组 (A.10):

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)}/a_{nn}^{(n)}, \\ x_i = (b_i^{(i)} - a_{i,i+1}^{(i)}x_{i+1} - \cdots - a_{in}^{(i)})/a_{ii}^{(i)}, \qquad i = n-1, \ldots, 1. \end{cases}$$

上述 Gauss 消元法中， $a_{kk}^{(k)}$ 称为第 k 步的主元． Gauss 消元法的前 $n-1$ 步称为消元过程，第 n 步称为回代过程. 由算法 1.1 可知， Gauss 消元法实际上是先将线性方程组进行消元，将其化成同解的且易于求解的上三角形线性方程组，再经回代求得问题的解. 观察 (A.8), (A.9) 以及 (1.1), 可得 Gauss 消元法的计算量．其加法和乘法运算量均为 $\frac{1}{3}\mathrm{O}(n^3)$.

Gauss 消元法一般是不稳定的算法, 因此需进行改进. 最常用的改进方法是选主元 Gauss 消元法. 选主元 Causs 消元法通常分为两类．一类是全选主元方法，另一类是列选主元方法.

算法 1.2 *(***全选主元** *Causs* **消元法***)*

步 *0* 令 $A = A^{(1)} = (a_{ij}^{(1)})$, $b = b^{(1)} = (b_i^{(1)})$.

步 k $(k=1,\ldots,n-1)$ 设经过 $k-1$ 步全选主元 *Gauss* 消元后，线性方程组变为

$$
\left\{
\begin{aligned}
a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + \cdots\cdots\cdots\cdots + a_{1n}^{(1)}x_n &= b_1^{(1)},\\
a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots\cdots\cdots\cdots + a_{2n}^{(2)}x_n &= b_2^{(2)},\\
a_{33}^{(3)}x_3 + \cdots\cdots\cdots\cdots + a_{3n}^{(3)}x_n &= b_3^{(3)},\\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots &\\
a_{kk}^{(k)}x^{(k)} + \cdots + a_{kn}^{(k)}x_n &= b_k^{(k)},\\
a_{nk}^{(k)}x^{(k)} + \cdots + a_{nn}^{(k)}x_n &= b_n^{(k)}.
\end{aligned}
\right.
$$

在第 k 步消元过程中，首先全选主元，即求 p 和 q, 使得

$$|a_{pq}^{(k)}| = \max_{k\le i,j\le n} |a_{ij}^{(k)}|.$$

互换第 k 个与第 p 个方程，且交换变量 $x^{(k)}$ 与 x_q. 然后，再按照通常的 *Gauss* 消元法进行消元.

步 n 回代求解.

全选主元消元法基本上可保证舍入误差不会扩散. 它是一个稳定的算法. 但是，该方法的每一消元步都需要选主元，增加了计算时间以及程序设计的难度. 由于在第 k 步，为了确定最大值 $\max\limits_{k\le i,j\le n} |a_{ij}^{(k)}|$, 需在 $(n-k)^2$ 个元素中进行比较，因此，全选主元消元法总的比较次数为 $\frac{1}{3}\mathrm{O}(n^3)$.

为了减少全选主元消元法的比较次数，可采用列选主元消元. 其思想是在第 k 步列选主元消元过程中，仅仅在 $a_{kk}^{(k)},\ldots,a_{nk}^{(k)}$ 中选取主元，即求 $p\ge k$, 使得

$$|a_{pk}^{(k)}| = \max_{k\le i\le n} |a_{ik}^{(k)}|.$$

互换第 k 个与第 p 个方程，然后再按照通常的 Gauss 消元法进行消元. 上述列选主元 Gauss 消元法简称列主元消元法. 不难算出，它的比较次数仅为 $\frac{1}{2}\mathrm{O}(n^2)$. 和全选主元相比，比较次数降低了一个数量级. 而且，程序设计也很简单. 此外，列选主元消元法基本上是稳定的. 由于上述原因，人们一般乐于用列选主元消元法而不用全选主元消元法求解线性方程组.

§A.2 *LU* 分解

如果 $A=LU$, 其中 L 和 U 分别为下三角矩阵和上三角矩阵，则称 LU 为矩阵 A 的一个三角分解。矩阵的三角分解在求解线性方程组中应用广泛. 由于 Gauss 消元法的消元过程实际上是对线性方程组进行一系列初等行变换的过程，而线性方程组的初等变换相当于对其增广矩阵实行初等行变换，也即相当于增广矩阵左边乘以一个初等矩阵. 不难证明， Gauss 消元法实际上相当于先将系数矩阵 A 进行三角分解:

$$A = LU, \tag{A.11}$$

其中 L 和 U 分别为单位下三角矩阵和上三角矩阵 U 的乘积，即

$$L=\begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix}, \qquad U=\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \cdots & \cdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}.$$

然后求解一对三角形线性方程组：

$$\begin{cases} Ly=b, \\ Ux=y. \end{cases} \tag{A.12}$$

通过直接比较 (A.11) 两端各个元素，可导出三角分解 $A=LU$ 的计算公式：对于 $i=1,\ldots,n$,

$$u_{ij}=a_{ij}-\sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}, \qquad j=i,\ldots,n, \tag{A.13}$$

$$l_{ji}=(a_{ji}-\sum_{k=1}^{i-1} l_{jk}u_{ki})/u_{ii}, \qquad j=i+1,\ldots,n. \tag{A.14}$$

而三角形线性方程组对 (A.12), 则可通过下面前推过程和回代过程求解：

$$\begin{cases} y_1=b_1, \\ y_i=b_i-l_{i1}y_1-\cdots-l_{i,i-1}y_{i-1}, \qquad i=2,\ldots,n, \end{cases} \tag{A.15}$$

$$\begin{cases} x_n=y_n/u_{nn}, \\ x_i=(y_i-u_{i,i+1}x_{i+1}-\cdots-u_{in}x_n)/u_{ii} \qquad i=n-1,\ldots,1. \end{cases} \tag{A.16}$$

三角分解 (A.11) 也称为矩阵 A 的 Doolittle 分解. 由计算公式 (A.13) 和 (A.14) 知， Doolittle 分解的加法和乘法的计算量均为 $\frac{1}{3}\mathrm{O}(n^3)$. 下面给出 Doolittle 分解存在惟一的一个充要条件.

定理 1.2.1 *设矩阵 A 非奇异. 当且仅当矩阵 A 的所有顺序主子式都不为零时，其 Doolittle 分解 (A.11) 存在，且分解是惟一的.*

和 Gauss 消元法一样，为了保证算法的可行性和计算的稳定性，矩阵的三角分解一般应采用选主元技术. 例如，设在列选主元 Doolittle 分解的第 $k-1$ 步后，矩阵分解的紧凑格式为

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1,k-1} & u_{1k} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2,k-1} & u_{2k} & \cdots & u_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{k-1,1} & l_{k-1,2} & \cdots & u_{k-1,k-1} & u_{k-1,k} & \cdots & u_{k-1,n} \\ l_{k1} & l_{k2} & \cdots & l_{k,k-1} & a_{kk} & \cdots & a_{kn} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,k-1} & a_{nk} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

在上面存储方式中,

$$l_{ji}\Rightarrow a_{ji}, \qquad i=1,\ldots,k-1, j=i+1,\ldots,n,$$

$$u_{ij} \Rightarrow a_{ij}, \qquad i=1,\dots,k-1, j=i,\dots,n,$$

在第 k 步计算时，分如下两步：

- (选主元) ：计算

$$s_j = a_{jk} - \sum_{t=1}^{k-1} a_{jt}a_{tk} \Rightarrow a_{jk}, \qquad j=k,\dots,n,$$

并求 p, 使得

$$|s_p| = \max_{k\le j\le n} |s_j|.$$

如果 $k \neq p$, 则互换矩阵第 k 行与第 p 行，即

$$s=a_{kj}, \quad a_{kj}=a_{pj}, \quad a_{pj}=s, \qquad j=1,\dots,n.$$

- (计算 L 的第 k 列， U 的第 k 行) ：

$$l_{jk} = \frac{a_{jk}}{a_{kk}} \Rightarrow a_{jk}, \qquad j=k+1,\dots,n,$$

$$u_{kj} = a_{kj} - \sum_{t=1}^{k-1} a_{kt}a_{tj} \Rightarrow a_{kj}, \qquad j=k+1,\dots,n.$$

对于列选主元 Doolittle 分解，有如下结论：

定理 1.2.2 *如果矩阵 A 非奇异，则列选主元 Doolittle 分解存在，即存在置换矩阵 P 和元素的绝对值不大于 1 的单位下三角形矩阵 L 以及非奇异上三角形矩阵 U, 使得*

$$PA = LU.$$

设在三角分解 $A=LU$ 中， L 为下三角形矩阵， U 为单位上三角形矩阵，即

$$A = LU = \begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & \cdots & u_{2n} \\ & & \cdots & \cdots \\ & & & 1 \end{bmatrix}. \tag{A.17}$$

则称分解 (A.17) 为矩阵 A 的 Crout 分解． Crout 分解中 L 和 U 的计算公式为：

$$l_{ji} = a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk}u_{ki}, \qquad j=i,\dots,n,$$

$$u_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj})/l_{ii}, \qquad j=i+1,\dots,n.$$

Crout 分解的加法和乘法的计算量和 Doolittle 分解相同．可类似建立矩阵的 Crout 分解的存在性与惟一性定理．同样，为使算法稳定，矩阵的 Crout 分解也应采用选主元技术．

当矩阵 A 对称正定时，下面结论成立：

定理 1.2.3 设矩阵 A 对称正定，则 A 存在惟一的三角分解：

$$A = \tilde{L}\tilde{L}^T = \begin{bmatrix} \tilde{l}_{11} & & & \\ \tilde{l}_{21} & \tilde{l}_{22} & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ \tilde{l}_{n1} & \tilde{l}_{n2} & \cdots & \tilde{l}_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{l}_{11} & \tilde{l}_{21} & \cdots & \tilde{l}_{n1} \\ & \tilde{l}_{22} & \cdots & \tilde{l}_{n2} \\ & & \cdots & \cdots \\ & & & \tilde{l}_{nn} \end{bmatrix}. \tag{A.18}$$

分解 (A.18) 称为矩阵 A 的 Cholesky 分解. Cholesky 分解 $\tilde{L}$ 的计算公式为：

$$\begin{cases} \tilde{l}_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} \tilde{l}_{ik}^2}, & i = 1, \ldots, n, \\ \tilde{l}_{ji} = (a_{ji} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} \tilde{l}_{jk}\tilde{l}_{ik})/\tilde{l}_{ii}, & i = 1, \ldots, n, j = i+1, \ldots, n. \end{cases} \tag{A.19}$$

由 (A.19) 知，对称正定矩阵 A 的 Cholesky 分解的加法和乘法的计算量均为 $\frac{1}{6}\mathrm{O}(n^3)$, 约为 Doolittle 分解或 Crout 分解的一半．但需作 n 次开平方运算.

在求解系数矩阵对称正定的线性方程组 $Ax = b$ 时，可先对系数矩阵 A 进行 Cholesky 分解：$A = \tilde{L}\tilde{L}^T$, 然后求解一对三角形线性方程组

$$\begin{cases} \tilde{L}y = b, \\ \tilde{L}^T x = y. \end{cases}$$

称上述解线性方程组方法为平方根法.

下面讨论三对角线性方程组 $Ax = d$ 的求解方法．此时,

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_3 & b_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n \end{bmatrix}, \qquad d = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix}.$$

由公式 (§A.2) 和 (§A.2), 可得系数矩阵 A 的 Crout 分解：

$$A = \begin{bmatrix} l_1 & & & & & \\ a_2 & l_2 & & & & \\ & a_3 & l_3 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & l_{n-1} & \\ & & & & a_n & l_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_1 & & & & \\ & 1 & u_2 & & & \\ & & 1 & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1 & u_{n-1} \\ & & & & & 1 \end{bmatrix},$$

其中

$$\begin{cases} l_1 = b_1, \\ l_i = b_i - a_i u_{i-1}, \quad i = 2, \ldots, n, \\ u_i = c_i / l_i, \qquad\quad\; i = 1, \ldots, n-1. \end{cases} \tag{A.20}$$

求解线性方程组 $Ly = d$ 得

$$\begin{cases} y_0 = 0, \\ y_i = (d_i - a_i y_{i-1})/l_i, \quad i = 1, \ldots, n. \end{cases} \tag{A.21}$$

求解线性方程组 $Rx = y$ 得解:

$$\begin{cases} x_n = y_n, \\ x_i = y_i - u_i x_{i+1}, \quad i = n-1, \ldots, 1. \end{cases} \tag{A.22}$$

公式 (A.20)-(A.22) 称为求解三对角线性方程组 $Ax = d$ 的追赶法. 公式 (A.20) 和 (A.21) 称为追的过程, 而 (A.22) 称为赶的过程. 不难看出, 追赶法的加法的运算量 $3O(n)$, 乘法的运算量为 $5O(n)$.

§A.3 迭代法

用直接法求解中小型线性代数方程组时, 速度快精度高, 是一种十分有效的方法. 但是当求解大规模问题, 特别是大规模稀疏问题时, 迭代法有它的优越性, 比如存储量□绦蚣虻サ下面我们介绍几种常见的迭代方法.

将线性代数方程组

$$Ax = b \tag{A.23}$$

写成某种等价形式

$$x = Bx + g. \tag{A.24}$$

据此构造迭代格式

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + g, \tag{A.25}$$

其中矩阵 B 称为迭代格式 (A.25) 的迭代矩阵. 给出初始向量 $x^{(0)}$, 可通过迭代格式 (A.25) 产生相应的迭代序列 $\{x^{(k)}\}$. 如果 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x^*$, 则 x^* 必是线性方程组 (A.23) 的解. 我们下面给出迭代序列收敛的条件以及迭代误差的估计.

定理 1.3.1 *迭代格式 (A.25) 收敛的充要条件为迭代矩阵 B 的谱半径 $\rho(B) < 1$. $\rho(B) < 1$ 也称为迭代格式 (A.25) 的收敛半径.*

矩阵的谱半径的计算非常麻烦. 下面定理给出了迭代序列收敛的一个充分条件.

定理 1.3.2 *如果对某种范数 $||\cdot||$ 成立 $||B|| < 1$, 则迭代格式 (A.25) 收敛于 (A.23) 的解, 且有误差估计式*

$$||x^{(k)} - x|| \le \frac{||B||}{1 - ||B||} ||x^{(k)} - x^{(k-1)}||, \tag{A.26}$$

$$||x^{(k)}-x|| \le \frac{||B||^k}{1-||B||}||x^{(1)}-x^{(0)}||, \tag{A.27}$$

其中 x 为线性方程组 (A.23) 的解.

由 (A.27) 可知，若要求 $||x^{(k)}-x|| < \epsilon$, 迭代次数 k 满足

$$k > \left[\ln \frac{\epsilon(1-||B||)}{||x^{(1)}-x^{(0)}||} / \ln ||B||\right]$$

即可. 从估计 (A.26) 可知，在 $||B||$ 不接近 1 的情况下，可用两次相邻迭代解之差的范数大小来判断迭代解的精确程度.

如果等价线性方程组 (A.24) 取为

$$x = x - \theta(Ax-b),$$

即 $B = I - \theta A$, 则得到众所周知的 Richardson 迭代：

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \theta(Ax^{(k)}-b). \tag{A.28}$$

Richardson 迭代格式 (A.28) 可按分量写成：

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - \theta(\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} - b_i), \qquad i=1,\dots,n, \quad k=0,1,\dots.$$

定理 1.3.3 设矩阵 A 的特征值全部为实数. 则 *Richardson* 迭代格式 (A.28) 收敛的充要条件是

$$0 < \theta < 2/\lambda_{\max}(A),$$

且收敛半径为

$$\rho(I-\theta A) = \max\{|1-\theta\lambda_{\min}(A)|, |1-\theta\lambda_{\max}(A)|\},$$

其中 $\lambda_{\min}(A)$ 和 $\lambda_{\max}(A)$ 分别表示矩阵 A 的最小的和最大的特征值.

从定理 1.3.3 可知，如果矩阵 A 的特征值全部为正实数，则当

$$\theta_{\text{opt}} = \frac{2}{\lambda_{\min}(A)+\lambda_{\max}(A)}$$

时， Richardson 迭代收敛最快. 此时的收敛半径为

$$\rho_{\text{opt}} = \frac{\lambda_{\max}(A)-\lambda_{\min}(A)}{\lambda_{\max}(A)+\lambda_{\min}(A)}.$$

下面再介绍几种常用的古典迭代算法. 将 A 分裂成

$$A = M - N, \tag{A.29}$$

其中 M 非奇异. 则线性方程组 (A.23) 等价于

$$Mx = Nx + b \qquad \text{或等价地} \qquad x = M^{-1}Nx + M^{-1}b.$$

由此可构造迭代格式

$$x^{(k+1)} = M^{-1}Nx^{(k)} + M^{-1}b.$$

记 $A = D - L - U$, 其中 D, L 和 U 分别为对角矩阵、严格下三角形矩阵和严格上三角形矩阵.

如果在 (A.29) 中取 $M = D$ 则得到 Jacobi 迭代：

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= D^{-1}(L+U)x^{(k)} + D^{-1}b \\ &= x^{(k)} - D^{-1}(Ax^{(k)} - b). \end{aligned} \tag{A.30}$$

Jacobi 迭代格式 (A.30) 可按分量写成：

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - \frac{1}{a_{ii}}(\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} - b_i), \qquad i = 1, \ldots, n, \quad k = 0, 1, \ldots.$$

如果在 (A.29) 中取 $M = D - L$ 则得到 Gauss-Seidel 迭代：

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= (D-L)^{-1}Ux^{(k)} + (D-L)^{-1}b \\ &= x^{(k)} - D^{-1}[-Lx^{(k+1)} + (D-U)x^{(k)} - b]. \end{aligned} \tag{A.31}$$

Gauss–Seidel 迭代格式 (A.31) 可按分量写成：

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - \frac{1}{a_{ii}}(\sum_{j<i}^{n} a_{ij}x_j^{(k+1)} + \sum_{j\geq i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} - b_i), \qquad i = 1, \ldots, n, \quad k = 0, 1, \ldots.$$

如果在 (A.29) 中取 $M = \frac{1}{\omega}(D - \omega L) = \frac{1}{\omega}D - L$ 则得到 SOR(successive overrelaxation) 迭代：

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U]x^{(k)} + \omega(D-\omega L)^{-1}b \\ &= x^{(k)} - \omega D^{-1}[-L^{(k+1)}x^{(k+1)} + (D-U)x^{(k)} - b]. \end{aligned} \tag{A.32}$$

SOR 迭代 (A.32) 可按分量写成：

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} - \frac{\omega}{a_{ii}}(\sum_{j<i}^{n} a_{ij}x_j^{(k+1)} + \sum_{j\geq i}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} - b_i), \qquad i = 1, \ldots, n, \quad k = 0, 1, \ldots.$$

SOR 迭代法 (A.32) 中的 ω 称为松弛因子. 松弛因子应在区间 (0,2) 内取值. 如何选取松弛因子使收敛速度加快是讨论逐次松弛迭代法的一个重要内容. 目前只对少数模型问题，才有确定使收敛速度达到最优的松弛因子 (称为最佳松弛因子) 的理论公式. 例如，当系数矩阵为三对角对称正定矩阵时，下面结论成立.

定理 1.3.4 设矩阵 A 为三对角对称正定矩阵，则 $\rho(B_G) = [\rho(B_J)]^2 < 1$, 且最佳松弛因子为

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - [\rho(B_J)]^2}}.$$

此时，

$$\rho(B_{\omega_{\text{opt}}}) = \omega_{\text{opt}} - 1.$$

此处， $\rho(B_G)$ 和 $\rho(B_J)$ 分别表示 *Gauss-Seidel* 迭代和 *Jacobi* 迭代的收敛半径.

由于 $\rho(B_J)$ 难以计算，上面定理实际应用起来仍有困难．通常的办法是通过选定几个松弛因子进行几步试算，以确定一个近似最佳松弛因子，再用此松弛因子继续迭代．

一般地，下列结论成立．

定理 1.3.5 *若矩阵 A 为按行 (或列) 严格对角占优矩阵或为不可约按行 (或列) 对角占优矩阵，则 A 非奇异，且 Jacobi 迭代和 Gauss-Seidel 迭代均收敛．*

定理 1.3.6 *若矩阵 A 为对称正定矩阵，则高斯 - 赛德尔迭代收敛，且 Jacobi 迭代收敛的充要条件是 $2D-A$ 对称正定．*

定理 1.3.7 *设 $a_{ii}\neq 0,\, i=1,\ldots,n$. 若 SOR 迭代收敛，则 $0<\omega<2$.*

定理 1.3.8 *若矩阵 A 为对称正定矩阵，则 SOR 迭代收敛的充要条件是 $0<\omega<2$.*

此外，当线性方程组 (A.1) 的系数矩阵 A 对称正定时，线性方程组 $Ax=b$ 的求解等价于下面的最优化问题的求解：

$$\min f(x)=\frac{1}{2}x^TAx+b^Tx.$$

因此，可采用第五章第一节中的共轭方向法求解．称相应的算法为求解线性方程组 $Ax=b$ 的共轭方向法或共轭斜量法．具体细节见第五章．

附录二 MATLAB 入门

MATLAB 名字由 MATRIX (矩阵) 和 LABORATORY (实验室) 两个英文单词的前三个字母组合而成. 它是目前国际上公认为准确、可靠的科学计算标准软件. 此软件不仅在数值计算方面独占鳌头，而且还具有相当不错的数据图视功能.

MATLAB 软件是一个适用于多种类型计算机和操作系统的数值软件平台. 可以使用 MATLAB 的计算机大到各种企业级的服务器，小到具有一般配置的 PC 机. MATLAB 的基本数据单元是不需指定维数的矩阵. 用户可以把 MATLAB 视为一个计算机语言，但它使用起来比我们熟悉的其它高级语言简捷得多.

实际上，只要用户的机器上安装了 MATLAB 软件，只需激活 MATLAB, 便可得到 MATLAB 的指令窗 (Command Window) . 指令窗的界面是标准的 Windows 界面，由窗口、工具条和菜单选项三部分组成. 指令窗的顶部是菜单选项，含有 “File” 、 “Edit” 、 “Window” 和 “Help” 四项. 用鼠标单击菜单选项中的任意一个选项，便可得到一个下拉式菜单. 许多常见的命令都可在这些菜单中找到. 菜单选项下面一行是一看就明白的工具条 (当光标点在相应工具条目上时，会出现相应的英文解释) . 利用这些工具条，可快捷打开一些常用的指令，给用户带来方便.

简单操作：

1. 点击 “help” 可得到帮助窗口，由此了解和掌握 MATLAB 软件的全方面信息.
2. 计算器功能. MATLAB 指令窗便是一个功能齐全的计算器. 比如，你想求 $\frac{12+2\times(7-1)}{3^2}$ 的算术结果，直接在指令窗中输入命令行：

   (12+2*2*(7-1))/3 ^ 2

   并按回车键，运行结果立即会在指令窗中显示出来.
3. 如果用户想完成多条指令，逐行输入相应指令即可. 每条指令在按回车键后便会执行. 只要不用清除命令或重新赋值，运行的结果都将驻留在内存中.
4. 如果用户想将运行的数据结果 (此数据可能经过长时间运行才得到，还可能含有相当大的数据量) 保存，以便在以后的程序中使用，可用以下几种方式达到目的：

   (a) 在 MATLAB 指令窗中选择 “File ； Save Workspace As” 菜单项，然后根据提示，选择待建数据文件的目录，给待建数据文件命名 (以 mat 为扩展名) , 再点击 “保存”, 即可产生数据文件. 此文件将保存工作空间 (Workspace) 中的全部数据内容.

   (b) 使用 save 命令可更灵活方便. 以下列出几条相关命令和相应功能.

save FileName	将全部内存变量存入 FileName.mat 文件，其中 FileName 可带路经，但不要扩展名
save FileName v1 v2	将变量 v1 和 v2 存入 FileName.mat 文件
save FileName v1 v2 -append	将变量 v1 和 v2 添加到 FileName.mat 文件

   (c) 如果在以后运行程序时，需要这些数据，可使用 load 命令将变量重新装入内存. 如

load FileName	将 FileName.mat 文件中的内容全部装入内存
load FileName v1 v2	将 FileName.mat 文件中的变量 v1 和 v2 装入内存

5. 如果用户想编一个较复杂的程序，可用鼠标点击指令窗顶端的 “File ” 选项，便可打开编辑窗口，编辑 M –文件了 (一般应建立用户自己的工作目录，以便将自己的文件存入其中) .

6. 如果用户想运行自己工作目录中的 M –文件，需先将工作目录设置为当前目录．具体做法是，先点击指令窗工具条上的目录浏览器，弹出对话框；然后点击 “Browse”, 选择用户工作目录后按 “OK” ；最后在路径浏览器中选择 “File ； Save Path” 下拉菜单.

§B.1 基本运算

1. 矩阵运算.

   矩阵数值计算是 MATLAB 软件的精妙所在．因此，学习使用 MATLAB 软件的最好方法无疑是先学习 MATLAB 是如何处理矩阵的．这也是我们本节的主要内容．矩阵是一个由数组成的矩形阵列，其特例包括 1 × 1 矩阵也即常数，和仅有 1 行或 1 列的矩阵也即行向量或列向量．MATLAB 中可用其它方式储存数字型或非数字型数据，但对初学者，不妨假设所有数据均为矩阵．MATLAB 在处理矩阵时非常容易便捷．本节引入一个非常有趣的矩阵，我们称为 Magic 阵．矩阵

$$\begin{bmatrix} 16 & 2 & 3 & 13 \\ 5 & 11 & 10 & 8 \\ 9 & 7 & 6 & 12 \\ 4 & 14 & 15 & 1 \end{bmatrix}$$

   为四阶的 Magic 阵．它可通过 MATLAB 中内部函数 magic(4) 生成．我们将以此阵为例，说明 MATLAB 在处理矩阵时的各种运算.

   (a) 矩阵的输入． MATLAB 可由下面几种方式输入矩阵.

      i. 直接输入矩阵元素．直接输入矩阵元素有如下基本原则：

         A. 同一行的元素之间以空格或逗号隔开；

         B. 每一行用分号作为结尾标志；

         C. 矩阵元素写在方括号内.

      例如，输入上述 Magic 阵只需键入：

      A=[16 3 2 13; 5 10 11 8; 9 6 7 12; 4 15 14 1]

      或者

      A=[16,3,2,13; 5,10,11,8; 9,6,7,12; 4, 15, 14, 1]

      ii. 通过内部函数产生矩阵．可产生几类特殊矩阵的内部函数有

zeros	零矩阵	zeros(m,n)
eye	单位矩阵	eye(m,n)

ones	元素为 1 的矩阵	ones(m,n)
rand	一致分布的随机矩阵	rand(m,n)
randn	正态分布的随机矩阵	randn(m,n)
magic(n)	n 阶 Magic 阵	magic(n)

其中 m 表示矩阵的行数， n 表示矩阵的列数．而在矩阵函数 magic(n) 中 n 表示 Magic 方阵的维数．

iii. 通过自编的 M –文件产生矩阵．通过 M –文件输入矩阵时须先建立一个后缀为． m 的 M –文件．比如一个名为 example.m 的文本文件包括下面几行：

```
A=[   16 .0   2.0    3.0    13.0
      5.0     11.0   10 .0  8.0
      9.0     7.0    6.0    12.0
      4.0     14.0   15.0   1.0];
```

则键入

example

将产生相应的矩阵 A.

iv. 通过外部数据文件输入矩阵.

(b) 矩阵的基本运算.

i. 求矩阵各列和的运算 sum.

ii. 求矩阵转置的运算 A'.

iii. 求矩阵对角元的运算 diag(A) 与对角元求和的运算 sum(diag(A)).

除了以上矩阵运算以外，我们还常常用到下面一些内部矩阵函数

det(A)	矩阵 A 的行列式
rref (A)	对矩阵 A 实行初等行变换化为阶梯阵
inv(A)	A 的逆矩阵 (若 A 不可逆则出现警告信息)
eig(A)	A 的特征向量、特征值
poly(A)	A 的特征多项式的系数
mean(A)	对 A 的列求均值
orth(A)	求向量的标准正交基

(c) 矩阵的元素表示法 (下标表示法)．和通常数学公式一样，我们用 A(i, j) 表示矩阵 A 的第 i 行第 j 列元素．例如键入指令：

A(1,4)+A(2,4)+A(3,4)+A(4,4)

可得到矩阵 A 第 4 列各元素之和.

如果下标超界，则出错．但是如果给超界元素赋值，则整个矩阵改变阶数.

(d) 多项式的表达方式及其相应运算.

由于多项式和其系数有一一对应关系，因此，可将多项式视为一个一维数组．事实上，MATLAB 中正是用 $n+1$ 维数组 $P=[a_1,a_2,\ldots,a_n,a_{n+1}]$ 表示 n 次降幂多项式 $p(x)=a_1x^n+a_2x^{n-1}+\cdots a_nx+a_{n+1}$ 的．产生多项式的基本指令为

P=poly(PA)

如果 PA 为向量，如 $PA = [r_1, r_2, \ldots, r_n]$, 则 PA 表示首项系数为 1 的 n 次降幂多项式 $(x - r_1)(x - r_2)\cdots(x - r_n) = x^n + a_2x^{n-1} + \cdots + a_nx + a_{n+1}$, 即 $r_1, r_2, \ldots, r_n$ 为多项式的 n 个根. 因此，要想得到实系数多项式，根向量 $[r_1, r_2, \ldots, r_n]$ 中的复数根必须共轭成对. 如果 PA 为方阵，则 PA 表示矩阵 PA 的特征多项式 $\det(xI - PA)$.

有关多项式常见的指令还有

poly2str	将多项式按人们习惯的方式显示
real	取多项数实部，此命令常用来避免由于舍入带来的虚部噪声
root	求多项式的根

2. 冒号运算符.

冒号 (:) 在 MATLAB 中是一个非常重要的运算符号，它出现在以下各种场合.

(a) 表示一个等差数列. 例如：

1:10

表示一个 (数列) 行向量，其元素为由 1 到 10 的整数组成，即

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

(b) 如果各相邻元素之间相差不为单位，也可类似表示，比如，

100： -7： 50

表示

100 93 86 79 72 65 58 51

而

0： pi/4:pi

则表示

0 0.7854 1.5708 2.3562 3.1416

(c) 矩阵的下标表示结合冒号运算符可描述矩阵的某一部分. 例如，对于四阶 Magic 矩阵 A,

B=A(1:3,4)

表示矩阵 A 的前 3 行第 4 列的元素组成的子矩阵：

```
B =
        13
        8
        12
```

(d) 上述表达式也可用 B=A(1:3,end) 表示，其中 “end” 表示矩阵的最后一行或最后一列. 而 B=A(1:3,2:4)

则表示矩阵 A 的前 3 行后 3 列组成的子矩阵：

B =

2	3	13
11	10	8
7	6	12

3. 表达式.

和大多数程序语言一样， MATLAB 也提供数学表达式. 但和大多数程序语言不同的是，MATLAB 的数学表达式可针对整个矩阵，形式更为简洁. 表达式的基本构件分为以下四类：

(a) 变量. MATLAB 不须对变量进行类型说明. MATLAB 每遇到一个新变量，马上自动产生该变量并分配适当的存储空间. 当给已存在的变量赋新值时，若有必要的话，可分配新的存储空间. 变量名为字母开头的字符串，可包含字母、数字、下划线. MATLAB 仅区分字符串的前 26 个字符而且区分大小字母. 例如：

num_ student31=25

产生一个名为 num_ student31 的 1×1 矩阵并给其赋值 25.

(b) 常量. MATLAB 表示常量的方式有三种：十进制表示、指数表示和复数表示 (虚部用 i 或 j 结尾) . 例如

3	-99	0.0001	9.6397238
1.60210e-20	-6.02252e23		
1i	-3.14159j	3e5i	1 + 2.2361i

(c) 运算符. 运算符包括关系运算符、逻辑运算符和算术运算符. 例如通常的算术运算符有

+	加法
-	减法
*	乘法
/	除法
\	左除法 (在矩阵和线性代数中运用)
ˆ	乘幂
’	复数的共轭
( )	指定的运算顺序

在矩阵之间进行除法运算时，包括左除和右除两种. X=A\ B (左除) 表示 AX=B 的解， X=B/A (右除) 表示 XA=B 的解.

在矩阵和向量的运算中，如果单纯是对应元素之间进行 * 、 / 、 \ 、 ˆ 和’ 运算，则在运算符前面加点 “.” 以区别于通常数学意义下的相应运算. 例如对于以前讲到的 magic 矩阵 A, A.*A 表示矩阵：

256	4	9	169
25	121	100	64
81	49	36	144

16 196 225 1

(d) 标准函数． MATLAB 提供大量的标准基本数学函数，包括 abs (求绝对值), sqrt (开平方), exp(指数), 和 sin(正弦) 等等．在 MATLAB 中对负数进行开平方和对数运算不算错，其值为某个复数形式．另外，在 MATLAB 中还含有大量高级标准函数，比如 Bessel 函数和 Γ 函数等．大多数标准函数都接受复数为自变量．如果分别键入指令

```
help elfun
help specfun
help elmat
```

可相应得到标准函数表、高级标准函数表和矩阵函数表.

下面列出几个特殊函数 (也称为预定义变量)：

pi	3.1415926 ⋯	inf	无穷
i	纯虚数 $\sqrt{-1}$	eps	机器零阀值
j	纯虚数 $\sqrt{-1}$	NaN	非数字
realmax	最大正浮点数	realmin	最小正浮点数

在 MATLAB 种，当除数为零或上溢时值取无穷，当出现 0/0 或 inf/inf 等不定情况时取值 NaN. 在 MATLAB 中标准函数值也可由于重新赋值而发生改变．比如键入指令：

```
inf=pi
```

则产生

```
inf =
  3.1416
```

若想保持标准函数值可用清除函数，比如若再键入

```
clear inf
```

则恢复 inf 至标准值.

MATLAB 的表达式由上述基本构件组成．例如键入指令

```
rho=(1+sqrt(5))/2
```

产生

```
rho =
   1.6180
```

键入指令

```
a=abs(3+4i)
```

产生

```
a =
   5
```

4. 语句行中的标点符号.

标点在 MATLAB 中的地位极其重要. 为此, 我们把各个标点的作用归纳如下:

空格		输入量与输入量之间的分隔符 (为机器所辨认) 数组元素分隔符
逗号	,	要显示计算结果的指令与其后指令之间的分隔符 输入量与输入量之间的分隔符 数组元素分隔符
句号	.	数值中的小数点
分号	;	不显示计算结果的指令的 " 结尾 " 标识符 不显示计算结果的指令与其后指令之间的分隔符 数组行之间的分隔符
冒号	:	生成一维数值数组 单下标援引时, 表示全部矩阵构成长列 多下标援引时, 表示矩阵某行或者某列的全部
百分号 (注释号)	%	注释号后的所有物理行部分被看成非执行语句
单引号对	' '	字符串记述符
圆括号对	( )	在数组援引时用 函数指令输入变量列表时用
方括号对	[ ]	输入数组时用 函数指令输出变量列表时用
花括号对	{}	元胞数组记述符
下联符	_	一个变量、函数或文件名中的连字符 (为使人易于阅读)
续行号 (三个句号)	···	续行号, 下面一行看成是续行号所在行的继续, 用以构成一个完整的长语句

5. 常用编辑指令.

以下是一些常用的 MATLAB 编辑命令:

↑	ctrl-p	光标移到上一行
↓	ctrl-n	光标移到下一行
←	ctrl-b	光标移到前一字符
→	ctrl-f	光标移到后一字符
ctrl →	ctrl-r	光标右移一个单词
ctrl ←	ctrl-l	光标左移一个单词
home	ctrl-a	光标移到行首
end	ctrl -e	光标移到行尾
esc	ctrl-u	清除当前行
del	ctrl-d	删除光标处字符
backspace	ctrl-h	删除光标左边字符

ctrl-k	删除光标右边字符

§B.2 基本绘图

MATLAB 绘图通过一些绘图函数完成. 常用的绘图函数有

函数名	功能描述
axes	坐标轴位置设置
axis	坐标轴标度设置
box	坐标轴盒状设置
brighten	图形亮度调整
caxis	坐标轴伪彩色设置
colorbar	颜色条设置
diffuse	图像漫射设置
fill fill3	填充二、三维多边形
grid	坐标网格线开关设置
hold	设置当前图形保护模式
lighting	光照模式
mesh	三维网格图形绘制
plot plot3	二维线性坐标图形、三维线或点型图形绘制
polar	二维极坐标图形绘制
specular	设置镜面反射
subplot	设置图形子窗口
surf	三维表面图形绘制
surf1	带光照的三维表面绘制
text	在鼠标位置加文字说明
title	给图形加标题
xlabel ylabel zlabel	分别给图形三个坐标加说明
zoom	二维图形缩放

这些基本绘图函数可配合一些特殊图形函数使用. 常见的特殊图形函数有

函数名	功能描述
area	二维区域填充
bar barth	二维条形图、水平条形图绘制
bar3 bar3h	三维条形图、三维水平条形图绘制
clabel	二维等高线高程标志
comet comet3	二维、三维彗星状轨迹绘制
contour	二维等高线绘制
contour3	三维等高线绘制

contourf	二维等高线填充绘制
errorbar	二维误差条形图绘制
feather	二维羽状图形绘制
hist	二维直方图绘制
pcolor	伪色绘制
pie	二维饼状图形绘制
quiver quiver3	二维、三维有向图 (箭头) 绘制
stem	二维离散序列图形绘制
stairs	二维梯形图状绘制
surfc	带等高线的三维表面绘制

下面以二维绘图为例，说明绘图的一般步骤.

步 0:	数据准备	典型指令
	选定所要表现的范围	t=pi*(0:100)/100
	产生自变量采样向量	y=sin(t).*sin(9*t)
	计算相应的函数值向量	
步 1:	选定图形窗和子图位置	典型指令
	缺省时，打开 Fingure No 1, 或当前子图	figure(1) % 指定 1 号图形窗
	可用指令指定图形窗号和子图号	subplot(2,2,3) % 指定 3 号子图
步 2:	调用高层绘图指令	典型指令
	线形、色彩、数据点形	plot(t,y,'b-') % 用蓝色实线画线
步 3:	设置轴的范围、刻度和坐标分格线	典型指令
		axis([0,pi,-1,1]) % 设置轴的范围
		grid on % 画坐标分格线
步 4:	图形注释	典型指令
	图名、坐标名、图例、文字说明	title(' 调制波形') % 图形
		xlabel('t');ylabel('y') % 轴名
		legend('sin(t)','sin(t) sin(9t)') % 图例
		text(2,0.5,'y=sin(t) sin(9t)') % 文字说明
步 5:	图形的精确修饰 (图柄操作)	典型指令
	利用对象属性值设置	set(h,'MarkerSize',10) % 设置数据点大小
	利用图形窗工具条进行	
步 6:	打印.	

在绘图过程中，下面几点值得注意：

1. 步骤 0 、 2 为基本绘图步骤. 一般说来，单用这两步所绘出的图形已经具备足够的表现力. 至于其它步骤，并不完全必须.

2. 步骤 3 、 4 、 5 可根据实际需要改变次序.

3. 步骤 5 涉及图柄操作，需对图形对象进行属性设置.

例如指令组：

```
x=0:π/100:2*π;
y=sin(x);
p1=0.25*π;
p2=0.5*π;
y1=sin(x-p1);
y2=sin(x-p2);
plot(x,y,'*')
hold on
plot(x,y1,'-.')
plot(x,y2,':')
hold on
axis([0 2*π -1 1])
xlabel('-π ≤ x ≤ π')
title('Periodic Function')
text(0.35,0.2,'sin (x)')
text(0.9,0,'sin (x-0.25π)')
text(1.5,-0.25,'sin (x-0.5π)')
```

得到的图形见图 B.1.

§B.3 逻辑控制

MATLAB 有以下五种逻辑控制命令：

1. 条件语句；

2. 开关控制语句；

3. for 循环语句；

4. while 循环语句；

5. break 语句.

下面分别介绍这几种语句的使用格式.

1. 条件语句.

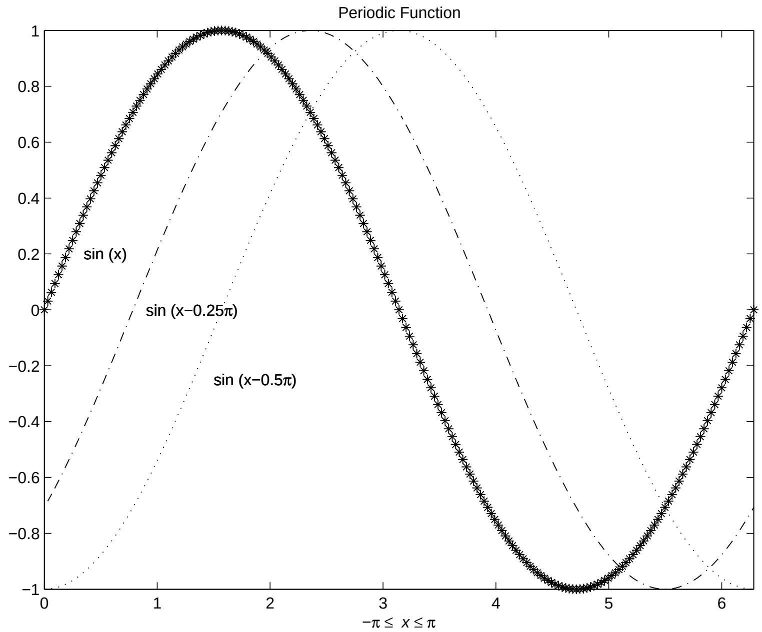

图 B.1：简单作图示例.

(a) 基本句型 1:

　　if 逻辑表达式，语句 1

　　else, 语句 2

　　end

含义为：若逻辑表达式真，执行语句 1 否则执行语句 2.

(b) 基本句型 2:

　　if 逻辑表达式 1, 语句 1

　　elseif 逻辑表达式 2, 语句 2

　　else 语句 3

　　end

含义为：若逻辑表达式 1 真，执行语句 1 否则又若逻辑表达式 2 真，执行语句 2 否则执行语句 3.

上述各语句中可以是一组可执行语句构成的语句组．在 if 句型中要注意应用逗号、分号或通过换行的形式把逻辑表达式和语句分开．例如以下条件语句

```
if x < 0
'y=-1'
elseif x==0
'y=0'
```

```
elseif x>0
'y=1'
else
error('Unexpected situation')
end
```

可用来计算函数

$$y = \begin{cases} -1, & \text{if } x < 0, \\ 0 & \text{if } x = 0, \\ 1 & \text{if } x > 0. \end{cases}$$

MATLAB 中的关系运算符和逻辑运算符有

运算符	含义	运算符	含义
>	大于	&	与
<	小于	|	或
==	相等	~	非
>=	大于等于	<=	小于等于
~ =	不等于		

2. 开关控制语句.
基本句型：

switch(表达式)

case 常量表达式 1, 语句 1

case 常量表达式 2, 语句 2

⋮

case 常量表达式 n, 语句 n

otherwise , 语句 n+1

end

和 C 语言不同，当表达式的值与某一个 case 后面的常量表达式的值相等时，执行该后面的语句并跳出 switch 语句，因此，此处不需要 break 语句．同样，在 case 句型中也要注意应用逗号、分号或通过换行的形式把常量表达式和语句分开.

3. for 循环语句.

(a) 句型 1:

for 循环变量赋初值：循环变量终值
语句
end

(b) 句型 2:

for 循环变量 1 赋初值：循环变量 1 终值

for 循环变量 2 赋初值：循环变量 2 终值

语句

end

end

例如，我们可通过以下循环语句输入循环矩阵：$H = \left(\frac{1}{i+j}\right)_{m\times n}$:

```
for i=1:m
for j=1:n
H(i,j)=1/(i+j)
end
end
```

4. while 循环语句.
基本句型：

```
while 表达式
语句
end
```

5. Break 语句.　Break 语句在循环语句中可用来跳出循环体.

§B.4　M －文件

MATLAB 的 M －文件形式有手稿型和函数型两种. 手稿型 M －文件没有输入变量也没有输出变量，所有操作全部在工作空间，即指令窗中进行. 文件中的变量值都保存在工作空间的内存里面，其中包括产生的图形. 例如一个名为 magicrank.m 的文件由以下内容组成：

```
% 观察 magic 阵的秩
r=zeros(1,32);
for n=3:32
r(n)=rank(magic(n));
end
r ;
bar(r)   % 绘制直方图
```

键入指令

```
Magicrank
```

将产生相应的直方图并将 n 和向量 r 的值保存在工作空间的内存中.

函数型 M –文件可有输入变量也可有输出变量. 除了这两种变量，文件中出现的其它变量全为局部变量.

MATLAB 除了大量内部函数可以直接利用外，还可自编一些 M –文件并将它们存入用户自己的工作目录中. 若想调用它们只需在工作空间中指定相应路径即可. 例如，如果先建立 M –函数文件 humps.m 如下：

```
function y=humps(x)
y=1./((x-.3).^ 2+0.01)+1./((x-.9).^ 2+0.04)-6;
```

在当前目录指令窗中键入指令

```
x=0:.002:1;
y=humps(x) ;
plot(x,y)
```

将产生函数

$$y = \frac{1}{(x-0.3)^2+0.01} + \frac{1}{(x-0.9)^2+0.04} - 6$$

的图形.

对于上述函数，我们还可通过调用一些内部函数了解它的性质. 例如，键入指令

```
p=fmins('humps',0.5)
```

得到 humps 函数在 0.5 附近的极小值点：

```
p =
   6370
```

键入

```
q=fzero('humps',0.5)
```

得到 humps 函数在 0.5 附近的零点：

```
q =
    -0.1316
```

MATLAB 提供有大量的库函数供用户选用. 用户可在工具箱中查找.

参考文献

[1] A. Törn and A. Žiliskas, *Global Optimization*, Springer-Verlag, 1990.

[2] M. Avriel, *Nonlinear Programming, Analysis and Methods*, Prentice-Hall Co. Inc., 1976.

[3] M.S. Bazaraa and C.M. Shetty, Nonlinear Programming: Theory and Algorithms (第二版), Wiley, New York, 1993.

[4] 陈宝林, 最优化理论与算法, 清华大学出版社, 1989.

[5] Y. Dai, Convergence properties of the BFGS algorithm, *SIAM Journal on Optimization*, 13 (2003), 693-701.

[6] 戴虹, 袁亚湘, 非线性共轭梯度法, 上海科学技术出版社, 2000.

[7] 邓乃杨, 诸梅芳, 最优化方法, 辽宁教育出版社, 1987.

[8] R. Fletcher, *Practical Optimization Methods*, Second Edition, John Wiley and Sons, Chichester, 1987.

[9] L. Grippo, F. Lampariello and S. Lucidi, A nonmonotone line search technique for Newton's method, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 23 (1986), 707-716.

[10] W.W. Hager and H. Zhang, A new conjugate gradient method with guaranteed descent and an efficient line search, *SIAM Journal on Optimization*, 16 (2006), 170-192.

[11] J-B. Hiriart-Urruty and C. Lemaréchal, *Convex Analysis and Minimization Algorithm I: Fundamentals*, Springer-Verlag, Berlin, 1993.

[12] R. Horst and H. Tuy, *Global Optimization: Deterministic Approaches*, Second, Revised Edition, Springer-Verlag, Berlin, 1993.

[13] C.T. Kelley, *Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations*, SIAM Publications, Philadelphia, Penn, 1995.

[14] D.H. Li and M. Fukushima, A derivative-free line search and global convergence of Broyden-like method for nonlinear equations, *Optimization Methods and Software*, 13 (2000), 181-201.

[15] D.H. Li and M. Fukushima, A modified BFGS method and its global convergence in nonconvex minimization, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 129 (2001), 15-35.

[16] D.H. Li and M. Fukushima, On the global convergence of the BFGS method for nonconvex unconstrained optimization problems, *SIAM Journal on Optimization*, 11 (2001), 1054-1064.

[17] D.H. Li, M. Fukushima, L. Qi and N. Yamashita, Regularized Newton methods for convex minimization problems with singular solutions, *Computational Optimization and Applications*, 28 (2004), 131-147.

[18] W.F. Mascarenhas, The BFGS method with exact line searches fails for non-convex objective functions, *Mathematical Programming*, 99 (2004), 49-61.

[19] J. Nocedal and S. Wright, *Numerical Optimization*, Springer, New York, 1999.

[20] J. Nocedal and Y. Yuan, Combining trust region and line search techniques, in Y. Yuan, ed., *Advances in Nonlinear Programming*, Kluwer, 1998, 153-175.

[21] R.T. Rockafellar, *Convex Analysis*, Princeton Unversity Press, Princeton, N.J..

[22] 王宜举，修乃华， *非线性规划 — 理论与算法*, 陕西科学技术出版社， 2004.

[23] 席少霖，赵凤治， *最优化计算方法*, 上海科学技术出版社， 1983.

[24] 徐成贤，陈志平，李乃成， *近代最优化方法*, 科学出版社， 2002.

[25] 徐树方，高立，张平文， *数值线性代数*, 北京大学出版社， 2002.

[26] 袁亚湘， *非线性规划数值方法*, 上海科学技术出版社， 1993.

[27] 袁亚湘，孙文瑜， *最优化理论与方法*, 科学出版社， 1997.

[28] 运筹学编写组， *运筹学 (第二版)* , 清华大学出版社， 1990.

[29] H. Zhang and W.W. Hager, A nonmonotone line search technique and its application to unconstrained optimization, *SIAM Journal on Optimization*, 14 (2004), 1043-1056.

[30] L. Zhang, W. Zhou and D.H. Li, Global convergence of a modified Fletcher-Reeves conjugate gradient method with Armijo-type line search, *Numerishe Mathematik*, 104 (2006), 561-572

[31] L. Zhang, W. Zhou and D.H. Li, A descent modified Polak-Ribiere-Polyak conjugate gradient method and its global convergence, *IMA Journal of Numerical Analysis*, 26 (2006), 629-640.