马昌凤
柯艺芬
谢亚君　编著

# 最优化计算方法及其MATLAB程序实现

国防工業出版社
National Defense Industry Press

# 最优化计算方法及其 MATLAB 程序实现

马昌凤　柯艺芬　谢亚君　编著

国防工业出版社

·北京·

# 内 容 简 介

本书较为系统地介绍了最优化问题的基本理论和方法及其主要算法的 MATLAB 程序实现. 关于无约束最优化问题,主要介绍了线搜索方法、梯度法、牛顿法、共轭梯度法、拟牛顿法、信赖域方法和最小二乘问题的数值解法. 关于约束优化问题,主要介绍了最优性条件、线性规划的单纯形方法和非线性规划的可行方向法、罚函数法、二次规划问题和序列二次规划法等. 设计的 MATLAB 程序有精确线搜索的黄金分割法和抛物线法,非精确线搜索的 Armijo 准则,梯度法,牛顿法,重开始共轭梯度法,BFGS 算法,DFP 算法,Broyden 族方法,信赖域方法,求解非线性最小二乘问题的 L-M 算法,解约束优化问题的乘子法,求解二次规划的有效集法,SQP 子问题的光滑牛顿法以及求解约束优化问题的 SQP 方法等. 此外,书中配有丰富的例题和习题,可供学习者使用. 本书既注重计算方法的实用性,又注意保持理论分析的严谨性,强调算法的思想和原理在计算机上的实现.

本书的主要阅读对象是数学与应用数学、信息与计算科学和统计学专业的本科生,应用数学、计算数学和运筹学与控制论专业的研究生,理工科其他有关专业的研究生,对最优化理论与算法感兴趣的教师及科技工作人员.

**图书在版编目(CIP)数据**

最优化计算方法及其 MATLAB 程序实现/马昌凤,柯艺芬,谢亚君编著. —北京:国防工业出版社, 2015.6
ISBN 978-7-118-10236-9

Ⅰ.①最… Ⅱ.①马… ②柯… ③谢… Ⅲ.①Matlab 软件-应用-最优化算法 Ⅳ.①O242.23-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 153095 号

※

国防工业出版社出版发行
(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)
天利华印刷装订有限公司印刷
新华书店经售

*

**开本** 787×1092 1/16 **印张** 17¼ **字数** 390 千字
2015 年 6 月第 1 版第 1 次印刷 **印数** 1—4000 册 **定价** 39.00 元

**(本书如有印装错误,我社负责调换)**

国防书店:(010)88540777 发行邮购:(010)88540776
发行传真:(010)88540755 发行业务:(010)88540717

# 前　言

运筹学的理论与方法广泛应用于工业与农业、交通与运输、国防与建筑以及通信与管理等各个部门、各个领域; 它主要解决最优计划、最优分配、最优决策、最佳设计和最佳管理等最优化问题. 本书所介绍的最优化方法又称为数学规划, 是运筹学的一个重要分支, 也是计算数学和应用数学的一个重要组成部分.

本书系统地介绍了最优化理论与方法及其 MATLAB 程序实现, 其主要阅读对象是数学与应用数学、信息与计算科学专业的本科生, 应用数学、计算数学和运筹学与控制论专业的研究生, 理工科有关专业的研究生, 对最优化理论与算法感兴趣的教师及科技工作人员. 读者只需具备微积分、线性代数和 MATLAB 程序设计方面的初步知识即可.

本书的主要内容包括: 最优化理论基础; 线搜索方法; 梯度法与牛顿法; 共轭梯度法; 拟牛顿法; 信赖域方法; 最小二乘问题的解法; 最优性条件; 线性规划; 罚函数法; 可行方向法; 二次规划; 等等. 设计的 MATLAB 程序有精确线搜索的黄金分割法和抛物线法, 非精确线搜索的 Armijo 准则, 梯度法, 牛顿法, 重开始共轭梯度法, 对称秩 1 算法, BFGS 算法, DFP 算法, Broyden 族方法, 信赖域方法, 非线性最小二乘问题的 L-M 算法, 解约束优化问题的乘子法, 求解二次规划的有效集法, 牛顿-拉格朗日算法, SQP 子问题的光滑牛顿法以及求解约束优化问题的 SQP 方法等. 此外, 书中配有丰富的例题和习题, 可供学习者使用.

本书各章节的主要算法都给出了 MATLAB 程序及相应的计算实例. 为了更好地配合教学, 作者编制了与本教材配套的电子课件 (PDF 格式的 PPT) 和全部算法的 MATLAB 程序, 需要的读者可到国防工业出版社网站下载 (网址:http://www.ndip.cn), 或发邮件至 896369667@qq.com 索取.

本书具有如下特点:

(1) 介绍最优化中最重要最基础的理论与算法, 它们是研究各种复杂的最优化问题的基础和工具.

(2) 最优化方法与 MATLAB 程序实现相结合, 采用当前最流行的数学软件 MATLAB 编制了主要优化算法的 MATLAB 程序. 所有程序都在计算机上经过调试和运行, 简洁而实用.

(3) 书中的每一程序之后都给出了相应的计算实例. 这不仅能帮助学生理解程序里所包含的最优化理论知识, 而且对培养学生处理最优化问题的能力也大有裨益.

(4) 每章都配备了一定数量的习题, 以加强学生对所学知识的理解.

由于作者水平有限, 加之时间仓促, 书中的缺点和错误在所难免, 恳请读者不吝赐教. 来信请发至: macf88@163.com, yfke89@163.com 或 xieyajun0525@163.com.

作　者

2015 年 3 月

# 目　录

# 第 1 章　最优化方法引论

## 1.1　最优化问题

在现实生活中, 经常会遇到某类实际问题, 要求在众多的方案中选择一个最优方案. 例如, 在工程设计中, 怎样选择参数使设计方案在满足要求的前提下达到成本最低; 在产品加工过程中, 如何搭配各种原料的比例才能既降低成本, 又能提高产品质量; 在资源配置时, 如何分配现有资源, 使得分配方案得到最好的经济效益. 这类基于现有资源使效益极大化或者为实现某类目标使成本极小化的问题称为最优化问题.

通俗地说, 最优化问题, 就是求一个多元函数在某个给定集合上的极值问题. 因此, 几乎所有类型的最优化问题都可以用下面的数学模型来描述:

$$\begin{aligned} &\min f(\boldsymbol{x}), \\ &\text{s.t.}\ \ \boldsymbol{x} \in \Omega, \end{aligned} \tag{1.1}$$

式中: $\Omega$ 为某个给定的集合, 称为可行集或可行域; $f(\boldsymbol{x})$ 为定义在集合 $\Omega$ 上连续可微的多元实值函数, 称为目标函数; $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$ 为决策变量; s.t. 为 subject to (受限于) 的缩写.

对于极大化目标函数的情形, 可通过在目标函数前添加负号等价地转化为极小化目标函数. 因此, 这里只考虑极小化目标函数的情形.

可行域 $\Omega$ 的表述方式有多种, 一般常用等式和不等式来描述, 即

$$\Omega = \left\{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n | c_i(\boldsymbol{x}) = 0,\ i \in \mathcal{E};\ c_i(\boldsymbol{x}) \geqslant 0,\ i \in \mathcal{I}\right\}, \tag{1.2}$$

式中: $c_i(\boldsymbol{x})$ $(i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I})$ 为定义在 $\mathbf{R}^n$ 上连续可微的多元实值函数, 称为约束函数.

对于 $i \in \mathcal{E}$, $c_i(\boldsymbol{x}) = 0$ 称为等式约束, $\mathcal{E}$ 称为等式约束指标集; 对于 $i \in \mathcal{I}$, $c_i(\boldsymbol{x}) \geqslant 0$ 称为不等式约束, $\mathcal{I}$ 称为不等式约束指标集.

若指标集 $\mathcal{E} \cup \mathcal{I} = \varnothing$, 则称为无约束优化问题, 否则称为约束优化问题. 特别地, 把 $\mathcal{E} \neq \varnothing$ 且 $\mathcal{I} = \varnothing$ 的优化问题称为等式约束优化问题; 而把 $\mathcal{I} \neq \varnothing$ 且 $\mathcal{E} = \varnothing$ 的优化问题称为不等式约束优化问题. 此外, 通常把目标函数为二次函数而约束函数都是线性函数的优化问题称为二次规划; 而把目标函数和约束函数都是线性函数的优化问题称为线性规划.

## 1.2　向量和矩阵范数

在算法的收敛性分析中, 需要用到向量和矩阵范数的概念及其有关理论.

设 $\mathbf{R}^n$ 表示实 $n$ 维向量空间, $\mathbf{R}^{m\times n}$ 表示实 $m\times n$ 矩阵全体所组成的线性空间. 在这两个空间中, 分别定义向量和矩阵的范数.

向量 $\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n$ 的范数 $\|\cdot\|$ 是一个非负数, 它必须满足以下条件:

(1) $\|\boldsymbol{x}\|\geqslant 0,\ \|\boldsymbol{x}\|=0 \Longleftrightarrow \boldsymbol{x}=\mathbf{0}$;

(2) $\|\alpha\boldsymbol{x}\|=|\alpha|\|\boldsymbol{x}\|,\ \forall\ \alpha\in\mathbf{R}$;

(3) $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|\leqslant\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|$.

一类有用的向量范数是 $p$- 范数, 其定义为

$$\|\boldsymbol{x}\|_p=\left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}},\quad p\geqslant 1. \tag{1.3}$$

其中最常用的向量范数有:

1- 范数: $\|\boldsymbol{x}\|_1=\sum\limits_{i=1}^{n}|x_i|$;

2- 范数: $\|\boldsymbol{x}\|_2=\left(\sum\limits_{i=1}^{n}|x_i|^2\right)^{\frac{1}{2}}$;

$\infty$- 范数: $\|\boldsymbol{x}\|_\infty=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}|x_i|$.

矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{m\times n}$ 的范数, 完全可以按照向量范数的定义引入矩阵范数. 但大多数情形下, 研究的矩阵范数还需满足乘法性质:

$$\|\boldsymbol{AB}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{B}\|,\quad \forall\ \boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{m\times n},\boldsymbol{B}\in\mathbf{R}^{n\times q},$$

式中: $\|\boldsymbol{AB}\|$, $\|\boldsymbol{A}\|$, $\|\boldsymbol{B}\|$ 分别为 $\mathbf{R}^{m\times q}$, $\mathbf{R}^{m\times n}$, $\mathbf{R}^{n\times q}$ 中的矩阵范数.

如果一矩阵范数 $\|\cdot\|_\mu$ 相对于向量范数 $\|\cdot\|$ 满足不等式

$$\|\boldsymbol{Ax}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|_\mu\|\boldsymbol{x}\|,\quad \forall\ \boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{m\times n},\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^{n},$$

则称矩阵范数 $\|\cdot\|_\mu$ 和向量范数 $\|\cdot\|$ 是相容的. 进一步, 若存在 $\boldsymbol{x}\neq\mathbf{0}$ 使

$$\|\boldsymbol{A}\|_\mu=\max_{\boldsymbol{x}\neq\mathbf{0}}\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}=\max_{\|\boldsymbol{x}\|=1}\|\boldsymbol{Ax}\|, \tag{1.4}$$

则称矩阵范数 $\|\cdot\|_\mu$ 是由向量范数 $\|\cdot\|$ 诱导出来的算子范数, 简称算子范数, 有时也称为从属于向量范数 $\|\cdot\|$ 的矩阵范数. 此时向量范数和算子范数通常采用相同的符号 $\|\cdot\|$.

不难验证, 从属于向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|_1$, $\|\boldsymbol{x}\|_2$ ,$\|\boldsymbol{x}\|_\infty$ 的矩阵范数分别为

$$\|\boldsymbol{A}\|_1=\max_{1\leqslant j\leqslant n}\sum_{i=1}^{m}|a_{ij}|,$$

$$\|\boldsymbol{A}\|_2=\max\left\{\sqrt{\lambda}\mid\lambda\in\lambda(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})\right\},$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|,$$

它们分别称为列和范数, 谱范数, 行和范数.

本书在讨论各种迭代算法的收敛性时, 通常采用谱范数和按下述方式定义的 F-范数:

$$\|A\|_F = \left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}^2\right)^{1/2} = \sqrt{\mathrm{tr}(A^{\mathrm{T}}A)}. \tag{1.5}$$

下面讨论向量序列和矩阵序列的收敛性. 若 $\{x^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}\subset \mathbf{R}^n$, 则

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x \Longleftrightarrow \lim_{k\to\infty} x_i^{(k)} = x_i,$$

式中: $i=1,2,\cdots,n$. 类似地, 若 $\{A^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}\subset \mathbf{R}^{m\times n}$, 则

$$\lim_{k\to\infty} A^{(k)} = A \Longleftrightarrow \lim_{k\to\infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij},$$

式中: $i=1,2,\cdots,m;\ j=1,2,\cdots,n$. 为了利用范数描述上述极限, 必须建立向量范数的等价定理以及矩阵范数的等价定理.

**定理 1.1** (1) 设 $\|\cdot\|$ 和 $\|\cdot\|'$ 是定义在 $\mathbf{R}^n$ 上的两个向量范数, 则存在两个正数 $c_1$ 和 $c_2$, 对所有 $x\in\mathbf{R}^n$ 均成立

$$c_1\|x\| \leqslant \|x\|' \leqslant c_2\|x\|.$$

(2) 设 $\|\cdot\|$ 和 $\|\cdot\|'$ 是定义在 $\mathbf{R}^{m\times n}$ 上的两个矩阵范数, 则存在两个正数 $m_1$ 和 $m_2$, 对所有 $A\in\mathbf{R}^{m\times n}$ 均成立

$$m_1\|A\| \leqslant \|A\|' \leqslant m_2\|A\|.$$

下面利用范数的概念, 等价地定义向量序列和矩阵序列的收敛性.

**定理 1.2** (1) 设 $\{x^{(k)}\}$ 为 $n$ 维向量序列, $\|\cdot\|$ 为定义在 $\mathbf{R}^n$ 上的向量范数, 则

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

(2) 设 $\{A^{(k)}\}$ 为 $m\times n$ 矩阵序列, $\|\cdot\|$ 为定义在 $\mathbf{R}^{m\times n}$ 上的矩阵范数, 则

$$\lim_{k\to\infty} A^{(k)} = A \Longleftrightarrow \lim_{k\to\infty}\|A^{(k)}-A\| = 0.$$

## 1.3　多元函数分析

本节主要介绍后文经常需要用到的 $n$ 元函数的一阶和二阶导数以及泰勒展开式.

**定义 1.1** 设有 $n$ 元实函数 $f(\boldsymbol{x})$, 其中自变量 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbf{R}^n$. 称向量

$$\nabla f(\boldsymbol{x})=\left(\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1},\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}} \tag{1.6}$$

为 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}$ 处的一阶导数或梯度. 称矩阵

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x})=\begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1^2} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1\partial x_n} \\ \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} \tag{1.7}$$

为 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}$ 处的二阶导数或 Hesse 阵. 若梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 的每个分量函数在 $\boldsymbol{x}$ 处都连续, 则称 $f$ 在 $\boldsymbol{x}$ 处一阶连续可微. 若 Hesse 阵 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ 的各个分量函数在 $\boldsymbol{x}$ 处都连续, 则称 $f$ 在 $\boldsymbol{x}$ 处二阶连续可微.

若 $f$ 在开集 $\mathcal{D}$ 的每一点都一阶连续可微, 则称 $f$ 在 $\mathcal{D}$ 上一阶连续可微. 若 $f$ 在开集 $\mathcal{D}$ 的每一点都二阶连续可微, 则称 $f$ 在 $\mathcal{D}$ 上二阶连续可微.

由定义 1.1 不难发现, 若 $f$ 在 $\boldsymbol{x}$ 处二阶连续可微, 则

$$\frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_i\partial x_j}=\frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_j\partial x_i},\quad i,j=1,2,\cdots,n,$$

即 Hesse 阵 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ 是对称阵.

**例 1.1** 设二次函数

$$f(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},$$

式中: $\boldsymbol{b}\in\mathbf{R}^n$ 且 $\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{n\times n}$ 是对称阵. 那么, 不难计算 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}$ 处的梯度及 Hesse 阵分别为

$$\nabla f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b},\quad \nabla^2 f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{A}.$$

**例 1.2** (泰勒展开) 设函数 $f:\mathbf{R}^n\to\mathbf{R}$ 连续可微, 则

$$f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}) \;=\; f(\boldsymbol{x})+\int_0^1 \nabla f(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}\mathrm{d}t$$

$$
\begin{aligned}
&= f(\boldsymbol{x})+\nabla f(\boldsymbol{x}+\theta\boldsymbol{h})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h} \quad (\theta\in(0,1))\\
&= f(\boldsymbol{x})+\nabla f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}+o(\|\boldsymbol{h}\|).
\end{aligned}
$$

进一步, 若函数 $f$ 是二次连续可微的, 则有

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}) &= f(\boldsymbol{x})+\nabla f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}+\int_0^1(1-t)\boldsymbol{h}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h})\boldsymbol{h}\mathrm{d}t\\
&= f(\boldsymbol{x})+\nabla f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}+\frac{1}{2}\boldsymbol{h}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\boldsymbol{x}+\theta\boldsymbol{h})\boldsymbol{h} \quad (\theta\in(0,1))\\
&= f(\boldsymbol{x})+\nabla f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}+\frac{1}{2}\boldsymbol{h}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}+o(\|\boldsymbol{h}\|^2)
\end{aligned}
$$

及

$$
\begin{aligned}
\nabla f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}) &= \nabla f(\boldsymbol{x})+\int_0^1\nabla^2 f(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}\mathrm{d}t\\
&= \nabla f(\boldsymbol{x})+\nabla^2 f(\boldsymbol{x}+\theta\boldsymbol{h})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h} \quad (\theta\in(0,1))\\
&= \nabla f(\boldsymbol{x})+\nabla^2 f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}+o(\|\boldsymbol{h}\|).
\end{aligned}
$$

下面简单介绍向量值函数的可微性及中值定理. 设有向量值函数

$$
\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})=(F_1(\boldsymbol{x}),F_2(\boldsymbol{x}),\cdots,F_m(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}}:\mathbf{R}^n\to\mathbf{R}^m.
$$

若每个分量函数 $F_i$ 都是 (连续) 可微的, 则称 $\boldsymbol{F}$ 是 (连续) 可微的. 向量值函数 $\boldsymbol{F}$ 在 $\boldsymbol{x}$ 处的导数 $\boldsymbol{F}'\in\mathbf{R}^{m\times n}$ 是指它在 $\boldsymbol{x}$ 处的 Jacobi 矩阵, 记为 $\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x})$ 或 $\boldsymbol{J}_F(\boldsymbol{x})$, 即

$$
\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}):=\boldsymbol{J}_F(\boldsymbol{x}):=\begin{pmatrix}
\dfrac{\partial F_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dfrac{\partial F_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial F_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\\
\dfrac{\partial F_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dfrac{\partial F_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial F_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\
\dfrac{\partial F_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dfrac{\partial F_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial F_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}
\end{pmatrix}.
$$

考虑到标量函数的梯度定义, 有时也把向量函数 $\boldsymbol{F}$ 的 Jacobi 矩阵的转置称为 $\boldsymbol{F}$ 在 $\boldsymbol{x}$ 处的梯度矩阵, 记为

$$
\nabla\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{J}_F(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}=\big(\nabla F_1(\boldsymbol{x}),\nabla F_2(\boldsymbol{x}),\cdots,\nabla F_m(\boldsymbol{x})\big).
$$

不难发现, 例 1.2 中关于多元实函数的一些结论可以推广到向量值函数的情形. 例如, 若向量值函数 $\boldsymbol{F}:\mathbf{R}^n\to\mathbf{R}^m$ 是连续可微的, 则对于任意的 $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{h}\in\mathbf{R}^n$, 有

$$
\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h})=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})+\int_0^1\nabla\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}\mathrm{d}t=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})+\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}+o(\|\boldsymbol{h}\|).
$$

对于向量值函数 $\boldsymbol{F}$, 也可以定义 Lipschitz 连续性的概念.

**定义 1.2** 设向量值函数 $\boldsymbol{F}:\mathbf{R}^n\to\mathbf{R}^m$, $\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n$, 称 $\boldsymbol{F}$ 在 $\boldsymbol{x}$ 处是 Lipschitz 连续的, 是指存在常数 $L>0$, 使得对任意的 $\boldsymbol{y}\in\mathbf{R}^n$, 满足

$$\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{F}(\boldsymbol{y})\|\leqslant L\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|, \tag{1.8}$$

式中: $L$ 为 Lipschitz 常数.

若式 (1.8) 对任意的 $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}\in\mathbf{R}^n$ 都成立, 则称 $\boldsymbol{F}$ 在 $\mathbf{R}^n$ 内是 Lipschitz 连续的.

在迭代法的收敛性分析中, 有时需要用到向量值函数的“中值定理”, 现引述如下.

**定理 1.3** 设向量值函数 $\boldsymbol{F}:\mathbf{R}^n\to\mathbf{R}^m$ 连续可微, 那么

(1) 对任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbf{R}^n$, 有

$$\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{F}(\boldsymbol{y})\|\leqslant\sup_{0\leqslant t\leqslant 1}\|\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{y}+t(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}))\|\,\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|;$$

(2) 对任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}\in\mathbf{R}^n$, 有

$$\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{y})-\boldsymbol{F}(\boldsymbol{z})-\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{z})\|\leqslant\sup_{0\leqslant t\leqslant 1}\|\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{z}+t(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{z}))-\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x})\|\,\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{z}\|.$$

由定理 1.3 的结论 (2) 可推得下面的结论.

**推论 1.1** 设向量值函数 $\boldsymbol{F}:\mathbf{R}^n\to\mathbf{R}^m$ 是连续可微的, 且其 Jacobi 矩阵映射是 Lipschitz 连续的, 即存在常数 $L>0$ 使得

$$\|\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{u})-\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{v})\|\leqslant L\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}\|,\quad\forall\,\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\in\mathbf{R}^n, \tag{1.9}$$

则对任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{h}\in\mathbf{R}^n$, 有

$$\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h})-\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\|\leqslant\frac{1}{2}L\|\boldsymbol{h}\|^2. \tag{1.10}$$

## 1.4 凸集与凸函数

本节介绍凸集、锥和凸函数的有关概念.

**定义 1.3** 设集合 $\mathcal{D}\subset\mathbf{R}^n$. 称集合 $\mathcal{D}$ 为凸集, 是指对任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathcal{D}$ 及任意的实数 $\lambda\in[0,1]$, 都有 $\lambda\boldsymbol{x}+(1-\lambda)\boldsymbol{y}\in\mathcal{D}$.

由定义 1.3 不难知道凸集的几何意义, 即对非空集合 $\mathcal{D}\subset\mathbf{R}^n$, 若连接其中任意两点的线段仍属于该集合, 则称该集合 $\mathcal{D}$ 为凸集.

不难证明凸集的下列基本性质.

**性质 1.1** 设 $\mathcal{D},\mathcal{D}_1,\mathcal{D}_2$ 是凸集, $\alpha$ 是一实数, 那么

(1) $\alpha\mathcal{D} := \{\boldsymbol{y}|\boldsymbol{y}=\alpha\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}\in\mathcal{D}\}$ 是凸集;

(2) 交集 $\mathcal{D}_1\cap\mathcal{D}_2$ 是凸集;

(3) 和集 $\mathcal{D}_1+\mathcal{D}_2 := \{\boldsymbol{z}|\boldsymbol{z}=\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y},\ \boldsymbol{x}\in\mathcal{D}_1,\ \boldsymbol{y}\in\mathcal{D}_2\}$ 也是凸集.

**例 1.3** $n$ 维欧几里得空间中的 $m$ 个点的凸组合是一个凸集, 即集合

$$\left\{\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\boldsymbol{x}_i \,\middle|\, \boldsymbol{x}_i\in\mathbf{R}^n,\ \alpha_i\geqslant 0,\ \sum_{i=1}^{m}\alpha_i=1\right\}$$

是凸集.

**例 1.4** $n$ 维欧几里得空间中的超平面 $H := \{\boldsymbol{x}|\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\alpha\}$ 是一个凸集, 其中 $\alpha\in\mathbf{R}$, $\boldsymbol{b}\in\mathbf{R}^n\backslash\{\boldsymbol{0}\}$ 是超平面的法向量. 此外, 下面的四个半空间都是凸集:

(1) 正的闭半空间 $H^+ := \{\boldsymbol{x}|\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\geqslant\alpha\}$;

(2) 负的闭半空间 $H^- := \{\boldsymbol{x}|\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\leqslant\alpha\}$;

(3) 正的开半空间 $\overset{\circ}{H}{}^{+} := \{\boldsymbol{x}|\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}>\alpha\}$;

(4) 负的开半空间 $\overset{\circ}{H}{}^{-} := \{\boldsymbol{x}|\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}<\alpha\}$.

**例 1.5** 以 $\boldsymbol{x}_0\in\mathbf{R}^n$ 为起点、$\boldsymbol{d}\in\mathbf{R}^n\backslash\{\boldsymbol{0}\}$ 为方向的射线

$$r(\boldsymbol{x}_0;\boldsymbol{d}) := \{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n\,|\,\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{d},\ \alpha\geqslant 0\}$$

是凸集.

**定义 1.4** 集合 $\mathcal{D}\subset\mathbf{R}^n$ 的凸包 (convex hull) 是指所有包含 $\mathcal{D}$ 的凸集的交集, 记为

$$\operatorname{conv}(\mathcal{D}) := \bigcap_{\mathcal{G}\supseteq\mathcal{D}}\mathcal{G},$$

式中: $\mathcal{G}$ 为凸集.

下面给出锥和凸锥的定义.

**定义 1.5** 设非空集合 $\mathcal{G}\subset\mathbf{R}^n$. 若对任意的 $\boldsymbol{x}\in\mathcal{G}$ 和任意的实数 $\lambda>0$, 有 $\lambda\boldsymbol{x}\in\mathcal{G}$, 则称 $\mathcal{G}$ 为一个锥 (cone). 若 $\mathcal{G}$ 同时也是凸集, 则称 $\mathcal{G}$ 为一个凸锥 (convex cone). 此外, 对于锥 $\mathcal{G}$, 若 $\boldsymbol{0}\in\mathcal{G}$, 则称 $\mathcal{G}$ 为一个尖锥 (pointed cone). 相应地, 包含 $\boldsymbol{0}$ 的凸锥称为尖凸锥.

**例 1.6** 多面体 $\{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\geqslant\boldsymbol{0}\}$ 是一个尖凸锥, 通常称为多面锥 (polyhedral cone).

**例 1.7** 集合

$$\mathbf{R}^n_+ := \{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n | x_i \geqslant 0,\ i=1,2,\cdots,n\}$$

是一个尖凸锥, 通常称为非负锥 (nonnegative cone). 相应地, 凸锥

$$\mathbf{R}^n_{++} := \{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n | x_i > 0,\ i=1,2,\cdots,n\}$$

称为正锥 (positive cone).

有了凸集的概念之后, 就可以定义凸集上所谓的凸函数.

**定义 1.6** 设函数 $f:\mathcal{D}\subset\mathbf{R}^n\to\mathbf{R}$, 其中 $\mathcal{D}$ 为凸集.

(1) 称 $f$ 是 $\mathcal{D}$ 上的凸函数, 是指对任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathcal{D}$ 及任意的实数 $\lambda\in[0,1]$, 都有

$$f(\lambda\boldsymbol{x}+(1-\lambda)\boldsymbol{y}) \leqslant \lambda f(\boldsymbol{x})+(1-\lambda)f(\boldsymbol{y}):$$

(2) 称 $f$ 是 $\mathcal{D}$ 上的严格凸函数, 是指对任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathcal{D}$, $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{y}$ 及任意的实数 $\lambda\in(0,1)$, 都有

$$f(\lambda\boldsymbol{x}+(1-\lambda)\boldsymbol{y}) < \lambda f(\boldsymbol{x})+(1-\lambda)f(\boldsymbol{y}).$$

(3) 称 $f$ 是 $\mathcal{D}$ 上的一致凸函数, 是指存在常数 $\gamma>0$, 使对任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathcal{D}$ 及任意的实数 $\lambda\in[0,1]$, 都有

$$f(\lambda\boldsymbol{x}+(1-\lambda)\boldsymbol{y})+\frac{1}{2}\lambda(1-\lambda)\gamma\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2 \leqslant \lambda f(\boldsymbol{x})+(1-\lambda)f(\boldsymbol{y}).$$

凸函数具有下列基本性质.

**性质 1.2** 设 $f,f_1,f_2$ 都是凸集 $\mathcal{D}$ 上的凸函数, $c_1,c_2\in\mathbf{R}_+$, $\alpha\in\mathbf{R}$, 则有

(1) $c_1f_1(\boldsymbol{x})+c_2f_2(\boldsymbol{x})$ 也是 $\mathcal{D}$ 上的凸函数;

(2) 水平集

$$\mathcal{L}(f,\alpha)=\{\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}\in\mathcal{D},\ f(\boldsymbol{x})\leqslant\alpha\}$$

是凸集.

凸集和凸函数在优化理论中起着举足轻重的作用, 但是利用凸函数的定义来判断一个函数是否具有凸性并非一件容易的事情. 如果函数是一阶或二阶连续可微的, 则可利用函数的梯度或 Hesse 阵来判别或验证函数的凸性要相对容易一些. 下面给出几个判别定理.

**定理 1.4** 设 $f$ 在凸集 $\mathcal{D}\subset\mathbf{R}^n$ 上一阶连续可微, 则

(1) $f$ 在 $\mathcal{D}$ 上为凸函数的充要条件是

$$f(\boldsymbol{x})\geqslant f(\boldsymbol{y})+\nabla f(\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}),\quad \forall\ \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathcal{D}; \tag{1.11}$$

(2) $f$ 在 $\mathcal{D}$ 上为严格凸函数的充要条件是, 当 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{y}$ 时, 成立

$$f(\boldsymbol{x}) > f(\boldsymbol{y}) + \nabla f(\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}), \quad \forall\, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathcal{D}; \tag{1.12}$$

(3) $f$ 在 $\mathcal{D}$ 上为一致凸函数的充要条件是, 存在常数 $c > 0$, 使对任意的 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathcal{D}$, 成立

$$f(\boldsymbol{x}) \geqslant f(\boldsymbol{y}) + \nabla f(\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) + c\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|^2. \tag{1.13}$$

在一元函数中, 若 $f(x)$ 在区间 $(a, b)$ 上二阶可微且 $f''(x) \geqslant 0$ $(> 0)$, 则 $f(x)$ 在 $(a, b)$ 内凸 (严格凸). 对于二阶连续可微的多元函数 $f: \mathcal{D} \subset \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}$, 也可以由其二阶导数 (Hesse 阵) 给出凸性的一个近乎完整的表述.

**定义 1.7** 设 $n$ 元实函数 $f$ 在凸集 $\mathcal{D}$ 上是二阶连续可微的. 若对一切 $\boldsymbol{h} \in \mathbf{R}^n$, 有 $\boldsymbol{h}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{h} \geqslant 0$, 则称 $\nabla^2 f$ 在点 $\boldsymbol{x}$ 处是半正定的. 若对一切 $\mathbf{0} \neq \boldsymbol{h} \in \mathbf{R}^n$, 有 $\boldsymbol{h}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{h} > 0$, 则称 $\nabla^2 f$ 在点 $\boldsymbol{x}$ 处是正定的. 进一步, 若存在常数 $c > 0$, 使得对任意的 $\boldsymbol{h} \in \mathbf{R}^n$, $\boldsymbol{x} \in \mathcal{D}$, 有 $\boldsymbol{h}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{h} \geqslant c\|\boldsymbol{h}\|^2$, 则称 $\nabla^2 f$ 在 $\mathcal{D}$ 上是一致正定的.

有了定义 1.7, 可以把一元函数关于用二阶导数表述凸性的结果推广到多元函数上.

**定理 1.5** 设 $n$ 元实函数 $f$ 在凸集 $\mathcal{D} \subset \mathbf{R}^n$ 上二阶连续可微, 则

(1) $f$ 在 $\mathcal{D}$ 上为凸函数的充要条件是 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ 对一切 $\boldsymbol{x} \in \mathcal{D}$ 为半正定;

(2) $f$ 在 $\mathcal{D}$ 上为严格凸函数的充分条件是 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ 对一切 $\boldsymbol{x} \in \mathcal{D}$ 为正定;

(3) $f$ 在 $\mathcal{D}$ 上为一致凸函数的充要条件是 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ 对一切 $\boldsymbol{x} \in \mathcal{D}$ 为一致正定.

**注** $\nabla^2 f$ 正定是 $f$ 为严格凸函数的充分条件而非必要条件.

## 1.5 无约束问题的最优性条件

本节讨论无约束优化问题

$$\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n} f(\boldsymbol{x}) \tag{1.14}$$

的最优性条件, 它包含一阶条件和二阶条件. 首先给出极小点的定义, 它分为全局极小点和局部极小点.

**定义 1.8** 若对于任意的 $\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n$, 都有

$$f(\boldsymbol{x}^*) \leqslant f(\boldsymbol{x}),$$

则称 $\boldsymbol{x}^*$ 为 $f$ 的一个全局极小点. 若上述不等式严格成立且 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}^*$, 则称 $\boldsymbol{x}^*$ 为 $f$ 的一个严格全局极小点.

**定义 1.9** 若对于任意的 $\boldsymbol{x} \in N(\boldsymbol{x}^*, \delta) = \{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n | \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*\| < \delta\}$, 都有

$$f(\boldsymbol{x}^*) \leqslant f(\boldsymbol{x}),$$

则称 $\boldsymbol{x}^*$ 为 $f$ 的一个局部极小点, 其中 $\delta > 0$ 为某个常数. 若上述不等式严格成立且 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}^*$, 则称 $\boldsymbol{x}^*$ 为 $f$ 的一个严格局部极小点.

由定义 1.8 和定义 1.9 可知, 全局极小点一定是局部极小点, 反之不然. 一般来说, 求全局极小点是相当困难的, 因此, 通常只求局部极小点 (在实际应用中, 有时求局部极小点已满足了问题的要求). 故本书所讨论的求极小点的方法都是指局部极小点.

为了讨论和叙述的方便, 本书引入下列记号:

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \nabla f(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{g}_k = \nabla f(\boldsymbol{x}_k), \quad \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}) = \nabla^2 f(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{G}_k = \nabla^2 f(\boldsymbol{x}_k).$$

**定理 1.6** **(一阶必要条件)** 设 $f(\boldsymbol{x})$ 在开集 $\mathcal{D}$ 上一阶连续可微. 若 $\boldsymbol{x}^* \in \mathcal{D}$ 是问题 (1.14) 的一个局部极小点, 则必有 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$.

**证明** 取 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^* - \alpha \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*) \in \mathcal{D}$, 其中 $\alpha > 0$ 为某个常数, 则有

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) &= f(\boldsymbol{x}^*) + \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*) + o(\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*\|) \\ &= f(\boldsymbol{x}^*) - \alpha \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*) + o(\alpha) \\ &= f(\boldsymbol{x}^*) - \alpha \|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*)\|^2 + o(\alpha). \end{aligned}$$

注意到 $f(\boldsymbol{x}) \geqslant f(\boldsymbol{x}^*)$ 及 $\alpha > 0$, 于是有

$$0 \leqslant \|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*)\|^2 \leqslant \frac{o(\alpha)}{\alpha}.$$

上式两边令 $\alpha \to 0$, 得 $\|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*)\| = 0$, 即 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$. 证毕. □

**定理 1.7** **(二阶必要条件)** 设 $f(\boldsymbol{x})$ 在开集 $\mathcal{D}$ 上二阶连续可微. 若 $\boldsymbol{x}^* \in \mathcal{D}$ 是问题 (1.14) 的一个局部极小点, 则必有 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$ 且 $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^*)$ 是半正定矩阵.

**证明** 设 $\boldsymbol{x}^*$ 是一局部极小点, 那么由定理 1.6 可知 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$. 下面只需证明 $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^*)$ 的半正定性. 任取 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^* + \alpha \boldsymbol{d} \in \mathcal{D}$, 其中 $\alpha > 0$ 且 $\boldsymbol{d} \in \mathbf{R}^n$. 由泰勒展开式, 得

$$0 \leqslant f(\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{x}^*) = \frac{1}{2}\alpha^2 \boldsymbol{d}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^*) \boldsymbol{d} + o(\alpha^2),$$

即

$$\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^*) \boldsymbol{d} + \frac{o(2\alpha^2)}{\alpha^2} \geqslant 0.$$

对上式令 $\alpha \to 0$, 即得 $\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^*) \boldsymbol{d} \geqslant 0$, 从而定理成立. 证毕. □