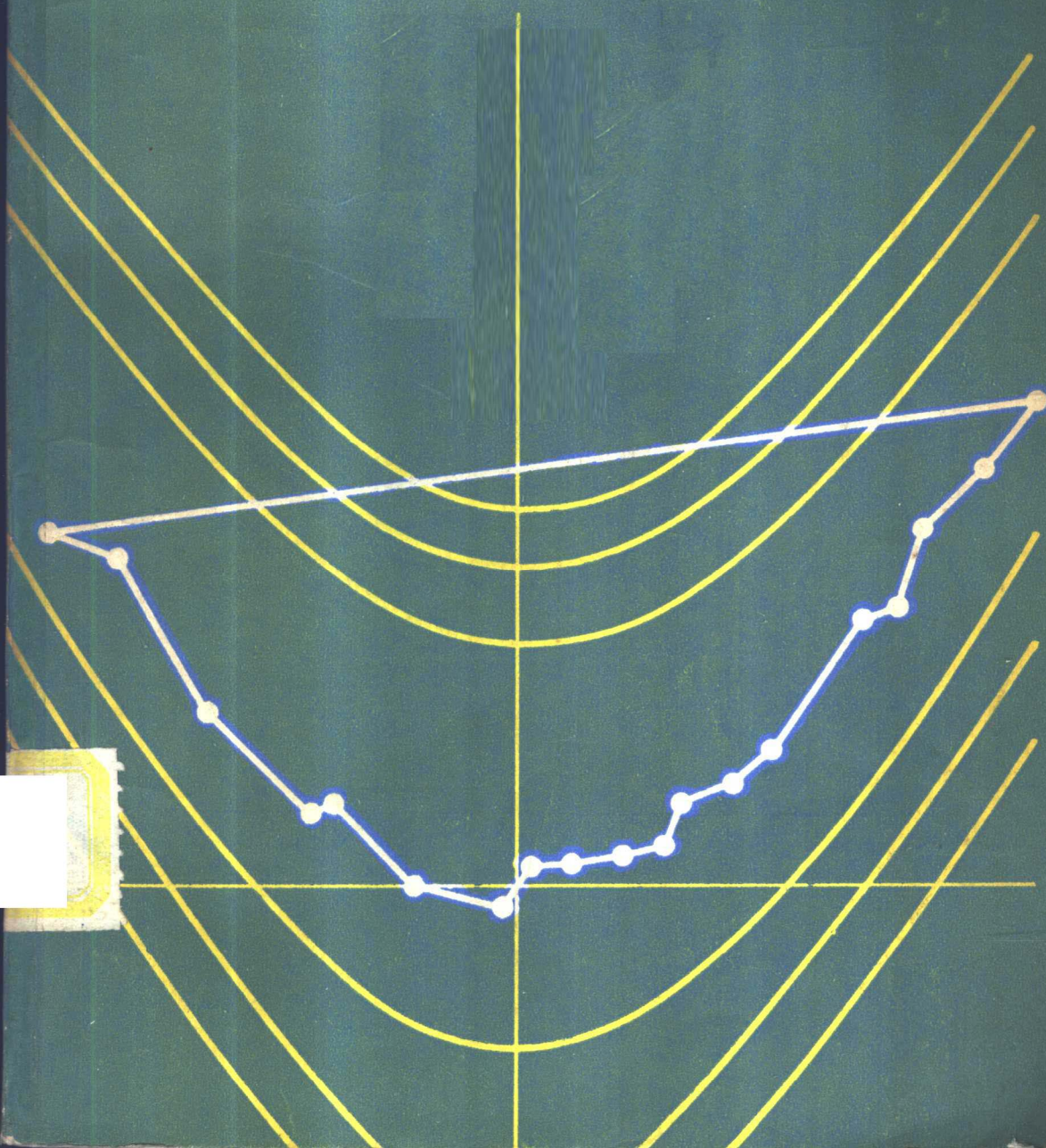


谢如彪 姜培庆 编著

非线性数值分析

上海交通大学出版社



非线性数值分析

谢如彪 姜培庆 编

上海交通大学出版社

内 容 提 要

本书以牛顿法和拟牛顿法为中心,系统介绍非线性方程组、非线性最小二乘问题以及无约束和线性约束最优化问题的迭代解法。对主要的迭代方法在理论和计算细节两方面均作了详细的分析,最后以非正式语言给出算法。

本书配有较丰富的算例和习题,还安排了相当的实验题供上机实习。附录中的程序可供读者参考、使用。

本书可作为应用数学专业高年级学生或工科研究生的教材,也可供从事计算数学和计算机应用的科技工作者及高等院校有关专业的师生参考。

非线性数值分析

谢如彪 姜培英编

★

上海交通大学出版社出版

淮海中路1984弄19号

新华书店上海发行所发行

常熟文化印刷厂排版印刷

★

开本: 787×1092 毫米 1/16 印张: 12.25 字数: 320,000

1984年6月第一版 1984年5月第一次印刷

印数: 1—7000册

统一书号: 13324·0005 科技新书目: 75·204

定价: 1.95元

前 言

本书是编者近几年在上海交通大学应用数学系讲授非线性迭代方法课程时编写的教材,内容包括非线性方程组、非线性最小二乘问题的迭代解法以及无约束和线性约束最优化方法。全书以牛顿法——离散牛顿法——拟牛顿法这条主线贯彻始终,希望能使这四个问题无论从理论或计算方面能融为一体。带有*号的节目,讲授时也可以略去,不会影响以后的学习。

第一章主要是复习和介绍有关的代数和分析知识。熟悉这一章的内容以及完成有关习题,是阅读以后各章所必需的。

第二、三章主要介绍牛顿法、Brown算法(包括离散型方法)、拟牛顿法和Brent算法。附录中还给出了Brown算法的程序。这两章对全书起了奠基作用,因为以后的许多迭代方法与收敛性分析,仅是采用同样的思想方法进行推广而已。第三章还包括Fréchet导数、中值定理和迭代过程的收敛率。这些内容实际上也是全书的预备知识。

第四、五章构成无约束最优化方法,主要包括最速下降法、牛顿法及其修正算法、Goldstein-Price算法、秩1、秩2拟牛顿法及其修正算法。对于正定二次函数而言,拟牛顿法也是共轭方向法。因此,本书在拟牛顿法的基础上引入共轭梯度法,进而再引入Powell直接法。为叙述连贯起见,本书对一维搜索技巧在正文中未作系统介绍,但在附录中介绍了二次插值过程,并给出了相应的程序。

第六章在线性最小二乘问题的基础上,引入非线性最小二乘问题的牛顿法,进而介绍Levenberg-Marquardt方法及其离散型方法。附录中给出了Marquardt算法的程序。

第七章讨论了线性约束最优化方法,它只是为学习一般最优化理论打下一个基础。主要介绍了二次规划起作用集方法,以及在此基础上引申的线性约束问题的牛顿法和拟牛顿法。

数值实验是学好计算数学十分重要的教学环节,它能培养学生的学习兴趣及独立工作能力,加深理解学习内容。因此,本书对每个方法都用一个或几个算法予以总结,算法均用非正式语言书写。读者在这些算法的基础上,经过摸索,基本上可独立编出电算程序。本书还安排了相当的实验题,供上机实习。附录中的程序均用BASIC II语言书写,并在MIC-80微机上实现,希望读者能从中学得编制一个完整程序的技巧。这种安排只是编者的一种尝试,希望通过它能达到精讲多练的目的。如果在学习这门课程的同时,能解决一、二个实际问题,那就更为理想。

在大多数节后附有习题,它们是本书的有机组成部分。因为只有通过适当的练习,才能较具体地因而也更深刻地掌握理论。少数习题还是正文内容的补充,有些习题是和以后某些章节相联系的。

本书编写时曾采用了有关书籍和文献的内容、方法及数据,这些书名和文章均列入本书参考文献中。

在本书编写过程中,张益杰、程极泰、孙薇荣和胡鸿钊等同志曾给予许多帮助和关心;章学仁同志仔细审阅了本书全部原稿,提出过许多修改意见;邵琰同志、陈克俭同志和朱慈幼同志对本书也提出过修改意见,编者在此一并深致谢忱。

本书前三章曾在工科应用数学协作组计算数学分组审稿会议上讨论过, 协作组同志们提出了许多宝贵意见。对此, 编者表示深切的谢意。

由于编者水平所限, 本书的谬误和缺点在所难免, 真诚地希望读者指正。

谢如彪 姜培成

1984年1月

本书采用的符号

$A, B, C, \dots$	矩阵 $A = (\alpha_{ij}), B = (\beta_{ij}), C = (\gamma_{ij}), \dots$
$A^\dagger$	矩阵 A 的广义逆
$Ax \approx b$	线性最小二乘问题 $\ Ax - b\ _2 = \min$
$\ A\ _2$ (或 $\ A\ $)	矩阵 A 的谱范数
$\ A\ _{\text{BFGS}}, \ A\ _{\text{DFP}}$	矩阵 A 的加权范数
$\ A\ _F$	矩阵 A 的 Frobenius 范数
B_k	Jacobi 阵或 Hesse 阵的近似阵
$\text{Cond}(A)$	矩阵 A 的状态数
$\det(A)$	矩阵 A 的行列式
$f(x)$	n 变量的实值函数
$fl(\alpha)$	浮点数
$fl(A)$	浮点矩阵
$F(x)$	$D \subset R^n \rightarrow R^n$ 的映射 (向量函数)
$F'(x)$	$F(x)$ 的 Fréchet 导数 (或 Jacobi 阵)
$g_\lambda(x)$	$f(x)$ 的梯度投影
$G_\lambda(x)$	$f(x)$ 的 Hesse 阵投影
H_k	Jacobi 阵逆或 Hesse 阵逆的近似阵
$i, j, k, l, m, n, \dots$	正整数及指标
$\text{lub}(A)$	矩阵 A 的界范数
$L(x_0)$	$f(x)$ 在点 x_0 处的水平集
$\min_{x \in D} \ S(x)\ $	非线性最小二乘问题
$\begin{cases} \min f(x) \\ \text{s.t. } c_i(x) \geq 0 \end{cases}$	约束最优化问题
macheps	机器常数
$\text{null}(A)$	矩阵 A 的零度
P_A	对于空间 $\mathcal{R}(A)$ 的正交投影阵
$P_{A,Q}, P_{Q,A}$	对于空间 $\mathcal{R}(A)$ 的一般投影阵
$\text{rank}(A)$	矩阵 A 的秩
R^n	实 n 维向量空间
$R^{n \times m}$	实 $n \times m$ 矩阵全体组成的线性空间
$\mathcal{R}(A)$	矩阵 A 的列空间
$\mathcal{R}(A)^\perp$	$\mathcal{R}(A)$ 的正交补子空间

$\overline{S(\hat{x}, r)}$

$S(\hat{x}, r)$

$\text{tr}(A)$

$x, y, z, \dots$

$\|x\|_2$ (或 $\|x\|$)

$\langle x, y \rangle$

$\alpha, \beta, \gamma, \delta, \lambda, \xi, \eta, \zeta, \dots$

$\lambda(A)$

$\rho(A)$

$\nabla f(x)$

$\nabla^2 f(x)$

以 $\hat{x}$ 为中心, r 为半径的闭球

以 $\hat{x}$ 为中心, r 为半径的开球

矩阵 A 的迹

向量 $x = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{pmatrix}$, $y = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_n \end{pmatrix}$, $z = \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \vdots \\ \zeta_n \end{pmatrix}$

向量 x 的欧氏范数

向量内积

实数

矩阵 A 的特征值集合

矩阵 A 的谱半径

$f(x)$ 的梯度

$f(x)$ 的 Hesse 阵

目 录

第一章 预备知识	(1)
§ 1.1 范数与谱半径	(1)
§ 1.2 几个分析概念	(5)
§ 1.3 对称矩阵特征值的扰动定理	(11)
§ 1.4 投影矩阵与广义逆矩阵	(13)
第二章 非线性方程组的牛顿型方法	(16)
§ 2.1 概述	(16)
§ 2.2 非线性方程组的牛顿法	(18)
§ 2.3 迭代过程的收敛率与效率	(24)
§ 2.4 牛顿法的收敛性分析	(28)
§ 2.5 离散型牛顿法	(34)
*§ 2.6 割线法与 S_k 算法	(38)
第三章 非线性方程组的拟牛顿法	(46)
§ 3.1 拟牛顿法的基本思想	(46)
§ 3.2 Broyden 方法	(47)
*§ 3.3 Broyden 方法的收敛性分析	(51)
第四章 无约束最优化问题的牛顿型方法	(56)
§ 4.1 下降方法概述	(56)
§ 4.2 最速下降法	(63)
§ 4.3 无约束最优化问题的牛顿法	(69)
*§ 4.4 牛顿法的 Murray 修正算法	(73)
第五章 无约束最优化问题的拟牛顿法	(79)
§ 5.1 概述	(79)
§ 5.2 对称秩 1 校正公式	(79)
§ 5.3 PSB 校正公式	(83)
§ 5.4 DFP 校正公式	(86)
§ 5.5 BFGS 校正公式	(91)
§ 5.6 共轭梯度法	(94)
*§ 5.7 拟牛顿法的 Gill-Murray 修正算法	(98)
*§ 5.8 秩 2 拟牛顿法的收敛性分析	(103)
§ 5.9 Powell 直接法	(110)
第六章 非线性最小二乘问题的迭代法	(121)
§ 6.1 概述	(121)
§ 6.2 线性最小二乘问题	(123)

§ 6.3 Gauss-Newton 方法	126)
§ 6.4 Levenberg-Marquardt 方法	(129)
*§ 6.5 离散型 Marquardt 方法	(135)
第七章 约束最优化方法初步	(139)
§ 7.1 约束问题局部解的概念	(139)
§ 7.2 二次规划与起作用集方法	(145)
§ 7.3 线性约束问题的牛顿型方法	(153)
§ 7.4 线性约束问题的拟牛顿法	(162)
附录	(166)
附录 1 一维搜索算法(二次插值过程 QUAD)	(166)
附录 2 试验函数	(171)
附录 3 Brown 算法程序	(174)
附录 4 二次插值程序	(178)
附录 5 Marquardt 算法程序	(182)
参考文献	(185)

第一章 预备知识

§ 1.1 范数与谱半径

在非线性方程组迭代解法与最优化问题的理论研究中,我们将大量接触有关向量、矩阵的误差估计以及它们序列的收敛性。为此,需要简单复习一下范数的概念及其有关理论。

设 R^n 表示实 n 维向量空间,而 $R^{n \times n}$ 表示实 n 阶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 $x \in R^n$ 的范数 $\|x\|$ 是一个非负实数,它必须满足以下条件:

- (1) $x \neq 0 \iff \|x\| > 0$
- (2) $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\| \quad (\lambda \in R^1)$
- (3) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

向量的 l_p 范数(记为 $\|\cdot\|_p$)为

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |\xi_i|^p \right)^{1/p}$$

常用的向量范数有

$$l_1: \|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |\xi_i|$$

$$l_2: \|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |\xi_i|^2 \right)^{1/2} = \langle x, x \rangle^{1/2} \quad (l_2 \text{ 范数又称为 Euclid 范数})$$

$$l_\infty: \|x\|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \left(\sum_{i=1}^n |\xi_i|^p \right)^{1/p} = \max_i |\xi_i|$$

矩阵 $A \in R^{n \times n}$ 的范数是一个非负实数,它除了满足以上类似条件之外,还必须具备乘法性质:

$$(4) \|AB\| \leq \|A\| \|B\| \quad \forall A, B \in R^{n \times n}$$

如果一矩阵范数 $\|\cdot\|_\mu$ 相对于某向量范数 $\|\cdot\|$,满足以下不等式:

$$(5) \|Ax\|_\mu \leq \|A\|_\mu \|x\|, \quad \forall x \in R^n$$

则称矩阵范数 $\|\cdot\|_\mu$ 和向量范数 $\|\cdot\|$ 是相容的。进一步如果在(5)中,存在 $x \neq 0$ 使等式成立,则称矩阵范数 $\|\cdot\|_\mu$ 从属于向量范数 $\|\cdot\|$ 。这时,向量范数和相应的矩阵范数常采用相同的符号 $\|\cdot\|$ 。

可以证明:对任意给定的矩阵范数,必存在一个与之相容的向量范数;对任意给定的向量范数,必存在从属于它的矩阵范数。对于同一个向量范数,若把从属于它的矩阵范数(有时称为界范数)和与之相容的矩阵范数分别记为 $\text{lub}(A)$ 、 $\|A\|$,则显然成立

$$\text{lub}(A) \leq \|A\| \quad (1.1.1)$$

且有

$$\text{lub}(A) = \max_{\substack{x \in R^n \\ x \neq 0}} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \quad (1.1.2)$$

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

$$\|A\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$$

$$\|A\|_2 = \max \{ |\lambda| \mid \lambda^2 \in \lambda(A^T A) \}$$

$$\|A\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$

$\|A\|_1$ 、 $\|A\|_2$ 以及 $\|A\|_\infty$ 亦可写作 $\text{lub}_1(A)$ 、 $\text{lub}_2(A)$ 以及 $\text{lub}_\infty(A)$ 。它们分别称作列范数、谱范数和行范数。以后为书写简便计,一般 $\|A\|_2$ 、 $\|x\|_2$ 就写作 $\|A\|$ 、 $\|x\|$ 。

本书在讨论各种迭代算法的收敛性时,通常采用谱范数和 Frobenius 范数。为此,我们将有关它们的性质罗列如下,以利于阅读以后相应的章节。

$$(1) \|A\| = \max_{\substack{x \in R^n \\ x \neq 0}} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \max \{ |\lambda| \mid \lambda^2 \in \lambda(A^T A) \}$$

$$(2) \|A\|_F^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 = \sum_{i=1}^n \|Ae_i\|^2 = \text{tr}(A^T A)$$

$\|A\|_F$ 称为 Frobenius 范数。其中 e_i 为单位矩阵 I 的第 i 列向量, $\text{tr}(E)$ 表示矩阵 E 的迹。

(3) 谱范数和 Frobenius 范数都与向量的欧氏范数相容,即

$$\|Ax\| \leq \|A\| \|x\| \quad \forall x \in R^n$$

$$\|Ax\| \leq \|A\|_F \|x\| \quad \forall x \in R^n$$

因此

$$\|A\| \leq \|A\|_F$$

(4) 设 $x, y \in R^n$, 则

$$\|xy^T\| = \|x\| \|y\| = \|xy^T\|_F$$

(5) 如果 A 为对称矩阵,则

$$\|A\| = \max |\lambda(A)|$$

(6) 如果 A 为对称正定阵,则

$$\|A\| = \max \lambda(A)$$

$$\|A^{-1}\| = \max \frac{1}{\lambda(A)}$$

$$\|A^{1/2}\|^2 = \|A\|$$

(7) $\|A\|_p = \|A^T\|_p \quad (p=2, F)$

(8) $\|AA^T\| = \|A\|^2 = \|A^T A\|$

(9) 设 U 为正交阵,则

$$\|UA\|_p = \|A\|_p = \|AU\|_p \quad (p=2, F)$$

(10) 如果 $\|P\| < 1$, 则 $I + P$ 为非异。

(11) 如果 $\|P\| < 1$, 则

$$(i) \|(I + P)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|P\|}$$

$$(ii) \|(I + P)^{-1} - I\| \leq \frac{\|P\|}{1 - \|P\|}$$

$$(iii) \|(I + P)^{-1}\| \geq 1 - \frac{\|P\|}{1 - \|P\|}$$

(12) 设 $A, B \in R^{n \times n}$, 则

$$\|AB\|_F \leq \min\{\|A\|_2\|B\|_F, \|A\|_F\|B\|_2\}$$

以下我们只证性质(7)和(12), 而将其余的性质留给读者作为练习.

首先证(7):

$p = F$ 时, 性质(7)显然成立.

$p = 2$ 时, 若 $A = 0$, 性质(7)显然成立; 若 $A \neq 0$, 设 $\|x\| = 1$ 且有 $\|Ax\| = \|A\|$, 则据 Cauchy 不等式有

$$\|A\|^2 = x^T A^T A x \leq \|x\| \|A^T A x\| \leq \|A^T\| \|Ax\| = \|A^T\| \|A\|$$

故 $\|A\| \leq \|A^T\|$. 同理可证 $\|A^T\| \leq \|A\|$, 于是性质(7)得证. $\square$

再证(12):

设 $B = (b_1, b_2, \dots, b_n)$, 其中 b_i 为矩阵 B 的第 i 列, 则

$$\begin{aligned} \|AB\|_F^2 &= \|(Ab_1, \dots, Ab_n)\|_F^2 = \|Ab_1\|^2 + \dots + \|Ab_n\|^2 \leq \|A\|^2 \|b_1\|^2 + \dots + \|A\|^2 \|b_n\|^2 \\ &= \|A\|^2 \|B\|_F^2 \end{aligned}$$

又据性质(7)及以上不等式应有:

$$\|AB\|_F^2 = \|B^T A^T\|_F^2 \leq \|B^T\|^2 \|A^T\|_F^2 = \|B\|^2 \|A\|_F^2. \quad \square$$

§ 5.8 讨论秩 2 拟牛顿法收敛性时, 由于校正公式的特殊形式, 采用如下加权范数:

$$\|A\|_{M,2} = \|MAM\|_2, \quad \|A\|_{M,F} = \|MAM\|_F \quad (1.1.3)$$

是合适的. 这里 $M \in R^{n \times n}$ 为非异的对称阵. 不难验证这两种加权范数都满足范数条件 (1)~(3), 但不一定满足(4). 可是用它们表示矩阵的相对误差却是十分适宜的. 设 A 为一对称正定矩阵, 而 B 为另一个对称正定阵, 视其为 A 的近似矩阵. 利用性质(6)和(12)不难验证:

$$\frac{\|B - A\|_p}{\|A\|_p} \leq \|A^{-1/2}(B - A)A^{-1/2}\|_p, \quad (p = 2, F) \quad (1.1.4)$$

由此可见, 如果取 $M = A^{-1/2}$, 则 $\|B - A\|_{M,p}$ 就表示以 B 近似替代对称正定阵 A 时的相对误差界.

矩阵 A 的谱半径为:

$$\rho(A) = \max\{|\lambda| \mid \lambda \in \lambda(A)\}$$

不难证明

$$\rho(A) \leq \text{lub}(A) \leq \|A\| \quad (1.1.5)$$

也就是说, 矩阵的谱半径是所有矩阵范数的下界. 进一步还可以证明: 谱半径 $\rho(A)$ 是所有界范数 $\text{lub}(A)$ 的下确界. 我们不加证明引入以下定理:

定理 1.1.1 对任意给定的 $A \in R^{n \times n}$ 及 $\varepsilon > 0$, 必存在一个界范数 $\text{lub}_k(A)$, 使

$$\text{lub}_k(A) \leq \rho(A) + \varepsilon \quad \square \quad (1.1.6)$$

设 $\{x_k\}$ 为 n 维向量序列, 则

$$\lim x_k = x \iff \lim \xi_i^{(k)} = \xi_i, \quad (i = 1, \dots, n)$$

设 $\{A_k\}$ 为 n 阶矩阵序列, 则

$$\lim A_k = A \iff \lim a_{ij}^{(k)} = a_{ij}, \quad (i, j = 1, \dots, n)$$

为利用范数来描述上述极限, 必须建立向量范数的等价定理和矩阵范数的等价定理.

定理 1.1.2 设 $\|\cdot\|$ 和 $\|\cdot\|_\mu$ 为定义在 R^n 上两个向量范数, 则存在两个正数 $\sigma_{\nu,\mu}$ 和 $\tau_{\nu,\mu}$, 对所有 $x \in R^n$ 均成立

$$\sigma_{r,\mu}\|x\|_\mu \leq \|x\|_r \leq \tau_{r,\mu}\|x\|_\mu \quad (1.1.7)$$

证: 只要证明 $\|x\|_\mu$ 为欧氏范数时, (1.1.7) 式成立, 则对一般情形 (1.1.7) 式亦成立.

据 Cauchy 不等式可得:

$$\begin{aligned} \|x\|_\mu &= \left\| \sum_{i=1}^n \xi_i e_i \right\|_\mu \leq \sum_{i=1}^n \|\xi_i e_i\|_\mu = \sum_{i=1}^n |\xi_i| \|e_i\|_\mu \leq \left(\sum_{i=1}^n |\xi_i|^2 \right)^{1/2} \cdot \left(\sum_{i=1}^n \|e_i\|_\mu^2 \right)^{1/2} \\ &= \|x\| \left(\sum_{i=1}^n \|e_i\|_\mu^2 \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (1.1.8)$$

取 $\sigma_{2,\mu} = \left(\sum_{i=1}^n \|e_i\|_\mu^2 \right)^{-1/2}$, 利用 (1.1.8) 式得:

$$\|x\|_\mu - \|y\|_\mu \leq \|x - y\|_\mu \leq \sigma_{2,\mu}^{-1} \|x - y\|$$

由此可见 $\|x\|_\mu$ 对欧氏范数而言是连续函数. 因为单位球面 $S = \{x \mid \|x\| = 1\}$ 是有界紧集, 所以 $\|\cdot\|_\mu$ 在 S 上可达到其最小值 $\alpha \geq 0$. 设 $x_0 \in S$, 有 $\|x_0\|_\mu = \alpha$. 若 $\alpha = 0$, 则 $x_0 = 0$, 矛盾; 因此 $\alpha > 0$, 这样, 对所有 $x \in R^n$ 有:

$$\|x\|_\mu \geq \alpha \|x\|$$

取 $\tau_{2,\mu} = \alpha^{-1}$, 于是 (1.1.7) 式在 $\|x\|_\mu = \|x\|$ 时成立. $\square$

对于矩阵范数亦有类似的定理.

定理 1.1.3 设 $\{x_k\}$ 为 n 维向量序列, $\|\cdot\|$ 为定义在 R^n 上的向量范数, 则

$$\lim x_k = x \iff \lim \|x_k - x\| = 0 \quad (1.1.9)$$

证: 若 $\lim x_k = x$, 则必有 $\lim \|x - x_k\|_\infty = 0$. 据定理 1.1.2 知, $\|x - x_k\| \leq \tau_{r,\infty} \|x - x_k\|_\infty$, 因此, $\lim \|x - x_k\| = 0$. 反之, 若 $\lim \|x - x_k\| = 0$, 据定理 1.1.2 可知有 $\sigma_{r,\infty} \|x - x_k\|_\infty \leq \|x - x_k\|$, 因此 $\lim \|x - x_k\|_\infty = 0$, 故 $\lim x_k = x$. $\square$

定理 1.1.3 的重要性在于 (1.1.9) 式的右式亦可作为向量序列的极限定义. 因为范数 $\|\cdot\|$ 是任意取定的, 所以可选取这样的向量范数 $\|\cdot\|$, 它能较容易地说明关系式 $\lim \|x - x_k\| = 0$. 依此, 就能断定 $\lim x_k = x$ 成立, 而这正是范数等价的意义所在. 对于矩阵序列亦有类似的定理.

习 题——1.1

1. 试验证 $\|A\|_{M,2}$ 、 $\|A\|_{M,F}$ 满足正性、齐次性以及三角不等式.

2. 试证:

(1) 谱范数和 Frobenius 范数的性质 (3)~(12).

(2) 不等式 (1.1.4).

3. $A \in R^{n \times n}$, $x, y \in R^n$, 则

$$\|A + xy^T\|_F^2 = \|A\|_F^2 + 2y^T A^T x + \|x\|^2 \|y\|^2$$

(提示: $\|A + xy^T\|_F^2 = \text{tr}[(A + xy^T)^T(A + xy^T)]$)

4. 设 $x, y \in R^n$, 且 $x^T y = 1$, 置 $\sigma = \|I - xy^T\|$, 则

$$\sigma = \|x\| \|y\|$$

(提示: 考虑矩阵 $M = (I - xy^T)^T(I - xy^T)$ 的最大特征值, 它对应的特征向量为 $(I - yx^T)x$)

5. 承前题, 试证 $\|I - xy^T\| = 1$ 的充分必要条件为 x 与 y 共线.

6. 设 $x, y \in R^n$, 则

$$\det(I + xy^T) = 1 + \langle x, y \rangle$$

7. 设 $A, B \in R^{n \times n}$, $s \in R^n$ 为一非零向量且满足

$$\|As\| = \|Bs\|$$

若对任一与 s 正交的非零向量 v 有

$$\|Av\| \leq \|Bv\|$$

则

$$\|A\|_F \leq \|B\|_F$$

(提示: 构造正交阵 $U = (s/\|s\|, v_1, \dots, v_{n-1})$, 再利用正交变换下 F 范数不变性质.)

8. 设 $\xi_i^{(k)} = i + \frac{1}{k+1}$ ($i = 1, 2, k = 0, 1, \dots$), 试证: $\{x_k\}$ 在 $\|\cdot\|_\infty$ 意义下收敛于 $x^* = (1, 2)^T$, 从而推知在任何向量范数意义下, $x_k \rightarrow x^*$.

9. 向量序列 $\{x_k\}$ 为关于范数 $\|\cdot\|$ 的 Cauchy 序列是指: 若对任意给定的 $\varepsilon > 0$, 存在一个正整数 N , 当 $m, n \geq N$ 时, $\|x_m - x_n\| < \varepsilon$.

试证: 若 $\|\cdot\|_\mu, \|\cdot\|$ 均为向量范数, 而 $\{x_k\}$ 为关于 $\|\cdot\|$ 的 Cauchy 序列, 则 $\{x_k\}$ 也是关于 $\|\cdot\|_\mu$ 的 Cauchy 序列.

10. 试证: 向量序列 $\{x_k\}$ 为 Cauchy 序列的充分必要条件是对任一 i , 序列 $\{\xi_i^{(k)}\}$ 也是一个 Cauchy 序列.

11. 设向量函数 $F(t) = (f_1(t), f_2(t), \dots, f_n(t))^T$, 其中 $f_i(t)$ ($i = 1, \dots, n$) 在区间 $[a, b]$ 上连续, 试证:

$$\left\| \int_a^b F(t) dt \right\| \leq \int_a^b \|F(t)\| dt$$

这里

$$\int_a^b F(t) dt = \begin{pmatrix} \int_a^b f_1(t) dt \\ \vdots \\ \int_a^b f_n(t) dt \end{pmatrix}$$

§ 1.2 几个分析概念

定义 1.2.1 设给定点 $\hat{x} \in R^n$ 及实数 $r > 0$, 则满足 $\|x - \hat{x}\| \leq r$ 的点 $x \in R^n$ 的集合称为以 $\hat{x}$ 为中心, r 为半径的闭球, 记作

$$\overline{S}(\hat{x}, r) = \{x \in R^n \mid \|x - \hat{x}\| \leq r\}$$

而以 $\hat{x}$ 为中心, r 为半径的开球定义为集合

$$S(\hat{x}, r) = \{x \in R^n \mid \|x - \hat{x}\| < r\}$$

定义 1.2.2 集合 $D \subset R^n$ 称为是凸的, 如果对任意 $x', x'' \in D$, 线段 $[x', x''] = \{x \in R^n \mid x = (1-\lambda)x' + \lambda x'', 0 \leq \lambda \leq 1\}$ 完全落 D 中.

以二维空间为例, 图 1.2.1 中的集合是凸的, 图 1.2.2 中的集合不是凸的.

定义在区域 $D \subset R^n$ 上的多元函数 $f(x)$ 常记为 $f: D \subset R^n \rightarrow R^1$. 定义在 $D \subset R^n$ 上的向量函数 $F(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x))^T$ 常记为 $F: D \subset R^n \rightarrow R^m$. 向量函数可视为一个从区域 $D \subset R^n$ 至 R^m 的映射.

定义 1.2.3 设 $F: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $F(x)$ 在 $\hat{x} \in D$ 处连续, 如果在 $\mathbb{R}^m$ 和 $\mathbb{R}^n$ 中分别存在向量范数 $\|\cdot\|_\mu$ 和 $\|\cdot\|$, 当 $\|x - \hat{x}\| \rightarrow 0$ 时, 有

$$\|F(x) - F(\hat{x})\|_\mu \rightarrow 0 \quad (1.2.1)$$

这个定义与分量函数 f_i ($i=1, \dots, m$) 的连续性等价, 这是由定理 1.1.3 保证的.

定义 1.2.4 设 $f: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^1$, $x^* \in D$ 为 f 在 D 上的一个局部极小点, 如果存在 $\varepsilon > 0$ 使 $S(x^*, \varepsilon) \subset D$ 且

$$f(x^*) \leq f(x) \quad (\forall x \in S(x^*, \varepsilon), x \neq x^*) \quad (1.2.2)$$

如果(1.2.2)中“ $\leq$ ”改为“ $<$ ”, 则 x^* 称为 f 在 D 上的强局部极小点.

定义 1.2.5 设 $f: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^1$, $x^* \in D$ 为 f 在 D 上的整体极小点, 如果

$$f(x^*) \leq f(x) \quad (\forall x \in D) \quad (1.2.3)$$

如果(1.2.3)中“ $\leq$ ”改为“ $<$ ”, 则 x^* 称为 f 在 D 上的强整体极小点(见图 1.2.3 和 1.2.4).

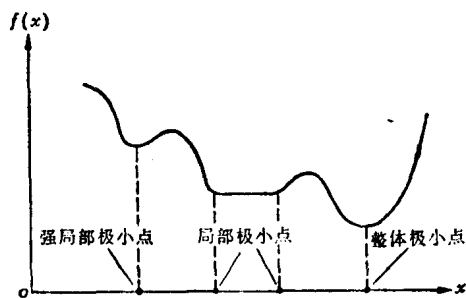


图 1.2.3

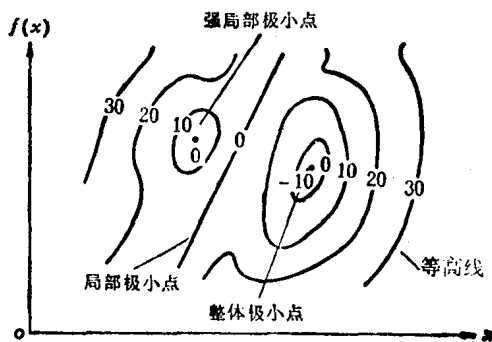


图 1.2.4

类似地可定义整体极大点和局部极大点. 一般来说, 寻求一个问题的整体极值点是一个较难处理的问题. 通常的数值方法主要是寻找局部极值点.

不难证明, 如果 $f(x)$ 在开凸集 D 上具有连续的一阶偏导数, 而 x^* 为 f 在 D 上的局部极小点, 则 x^* 为非线性方程组

$$\frac{\partial f}{\partial \xi_j} = 0 \quad (j=1, \dots, n) \quad (1.2.4)$$

的一个解. D 内满足(1.2.4)的解称为 $f(x)$ 的稳定点.

事实上, 考虑 $f(x)$ 在 x^* 处的 Taylor 展开式

$$f(x^* + \varepsilon h) = f(x^*) + \varepsilon h^T \nabla f(x^*) + O(\varepsilon^2) \quad (1.2.5)$$

其中 ε 是一实数, $h \in \mathbb{R}^n$ 为单位长的任意向量. 若对充分小的 ε 成立

$$f(x^*) \leq f(x^* + \varepsilon h)$$

这就蕴含着

$$h^T \nabla f(x^*) = 0$$

因 h 是任意的非零向量, 故有

$$\nabla f(x^*) = 0$$

因此函数的局部极值点必为稳定点, 但反之未必成立.

若 $f(x)$ 在稳定点 $\hat{x}$ 处既不能取到极小值, 又不能取到极大值, 则称稳定点 $\hat{x}$ 为 $f(x)$ 的鞍点, 如图 1.2.5 所示.

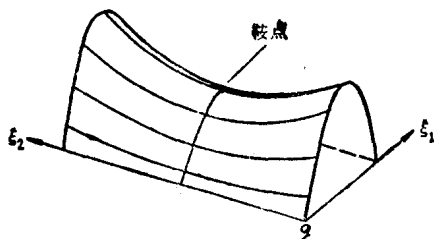


图 1.2.5

进一步若 $f(x)$ 在 D 上二次连续可微, 则 $f(x)$ 在 x^* 处的 Taylor 展开式可写成

$$f(x^* + \varepsilon h) = f(x^*) + \varepsilon h^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 h^T \nabla^2 f(x^*) h + O(\varepsilon^3)$$

其中 $\nabla^2 f(x^*)$ 为 $f(x)$ 在 x^* 处的 Hesse 矩阵

$$\nabla^2 f(x^*) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial \xi_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial \xi_2 \partial \xi_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial \xi_n \partial \xi_1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial \xi_1 \partial \xi_n} & \frac{\partial^2 f}{\partial \xi_2 \partial \xi_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial \xi_n^2} \end{pmatrix}_{x=x^*}$$

若 x^* 为 f 在 D 上的局部极小点, 则 x^* 必为稳定点, 且 $\nabla^2 f(x^*)$ 至少为非负定阵。因为若不然, 存在某单位长向量 $\hat{h} \in R^n$, 使

$$\hat{h}^T \nabla^2 f(x^*) \hat{h} < 0$$

则当 ε 充分小时必有

$$f(x^* + \varepsilon \hat{h}) < f(x^*)$$

这与假设相矛盾。

同样可证: 若 x^* 为 f 在 D 上的强局部极小点且 $\nabla^2 f(x^*) \neq 0$, 则 $\nabla^2 f(x^*)$ 必为正定阵。反之, 如果 x^* 为 $f(x)$ 的稳定点而 $\nabla^2 f(x^*)$ 为正定, 则 x^* 为 $f(x)$ 的一个强局部极小点。对于局部极大点亦可作类似的讨论。

函数的凸性在多元函数极值理论中起着十分重要的作用。这是因为许多函数在局部极小点充分小的邻域中往往是凸的。其次, 许多方法的收敛性定理都是在 $f(x)$ 为凸函数的前提下建立起来的。

定义 1.2.6 函数 $f: R^n \rightarrow R^1$ 在凸集 $D \subset R^n$ 上称为是凸的, 如果对任意 $x', x'' \in D$ ($x' \neq x''$) 以及对任意 $\lambda \in (0, 1)$ 成立

$$f[\lambda x' + (1-\lambda)x''] \leq \lambda f(x') + (1-\lambda)f(x'') \quad (1.2.6)$$

函数 f 在凸集 D 上是严格凸的, 如果对任意 $x', x'' \in D$ ($x' \neq x''$) 以及任意 $\lambda \in (0, 1)$ 成立

$$f[\lambda x' + (1-\lambda)x''] < \lambda f(x') + (1-\lambda)f(x'') \quad (1.2.7)$$

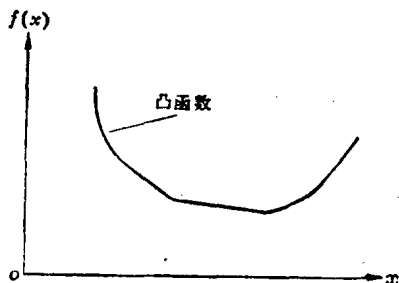


图 1.2.6

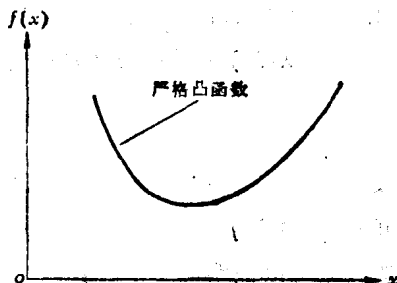


图 1.2.7

如果 $-f(x)$ 为凸集 D 上的凸函数, 则称 $f(x)$ 为 D 上的凹函数。

与一元函数的情形一样, 如果 $f(x)$ 在凸集 D 上为严格凸函数, 则它在 D 上取得最小值的整体极小点是唯一的。事实上, 若设 x^* 和 x^{**} 为严格凸函数 $f(x)$ 在凸集 D 上两个不同的整体极小点, 则有

$$f\left(\frac{1}{2}x^* + \frac{1}{2}x^{**}\right) < \frac{1}{2}f(x^*) + \frac{1}{2}f(x^{**}) = f(x^*)$$

但 $\frac{1}{2}x^* + \frac{1}{2}x^{**} \in D$, 引起矛盾, 故 $x^* = x^{**}$.

一般来说, 依定义来验证函数的凸性是较困难的. 为此, 下面讨论光滑函数为凸函数的充分必要条件.

定理 1.2.1 设 $f: R^n \rightarrow R^1$ 在开凸集 $D \subset R^n$ 上具有连续的一阶偏导数, 则 f 在 D 上为凸的充分必要条件为

$$f(x'') \geq f(x') + \nabla f(x')^T(x'' - x') \quad (\forall x', x'' \in D) \quad (1.2.8)$$

证: 若在 D 上 f 为凸函数, 则对任意 $x', x'' \in D$ 成立

$$f[x' + \lambda(x'' - x')] \leq f(x') + \lambda(f(x'') - f(x')) \quad (1.2.9)$$

据微分中值定理有

$$f[x' + \lambda(x'' - x')] = f(x') + \lambda \nabla f(\bar{x})^T(x'' - x') \quad (1.2.10)$$

其中

$$\bar{x} = x' + \theta \lambda(x'' - x') \quad \theta \in (0, 1)$$

因 D 为凸集, 故 $\bar{x} \in D$. 而据 (1.2.9) 和 (1.2.10) 式有

$$f(x'') - f(x') \geq \nabla f(\bar{x})^T(x'' - x') \quad (\forall \lambda \in (0, 1))$$

又因 f 在 D 中具有连续的一阶偏导数, 故当 $\lambda \rightarrow 0$ 时, $\nabla f(\bar{x}) \rightarrow \nabla f(x')$. 于是, 当 x' 和 x'' 固定, 而让 $\lambda \rightarrow 0$ 即得

$$f(x'') - f(x') \geq \nabla f(x')^T(x'' - x')$$

上式对所有 $x', x'' \in D$ 均成立.

反之, 若 (1.2.8) 对任何 $x', x'' \in D$ 均成立, 任取 $x, y \in D$, 设

$$z = \lambda x + (1 - \lambda)y \quad \lambda \in (0, 1)$$

则因 D 为凸集, 故 $z \in D$. 据 (1.2.8) 有

$$f(x) - f(z) \geq \nabla f(z)^T(x - z) \quad (1.2.11)$$

及

$$f(y) - f(z) \geq \nabla f(z)^T(y - z) \quad (1.2.12)$$

将 (1.2.11) 和 (1.2.12) 式分别乘以 λ 和 $(1 - \lambda)$, 然后相加便得

$$\begin{aligned} \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) - f(z) &= \lambda[f(x) - f(z)] + (1 - \lambda)[f(y) - f(z)] \\ &\geq \nabla f(z)^T[\lambda(x - z) + (1 - \lambda)(y - z)] = 0 \end{aligned}$$

所以

$$\lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \geq f[\lambda x + (1 - \lambda)y] \quad (\forall \lambda \in (0, 1))$$

由此可见, 在 D 上 f 为凸函数. $\square$

类似地可以证明以下定理:

定理 1.2.2 设 $f: R^n \rightarrow R^1$ 在开凸集 D 上具有连续的一阶偏导数, 则 f 在 D 上为严格凸的充分必要条件为

$$f(x'') > f(x') + \nabla f(x')^T(x'' - x') \quad (\forall x', x'' \in D, x' \neq x'') \quad \square \quad (1.2.13)$$

对一元函数而言, 以上两个定理的几何意义是明显的. 现在我们用二次函数

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T A x + b^T x + c \quad (x \in R^n) \quad (1.2.14)$$