第十章　使用导数的最优化方法

-----研究无约束问题最优化方法

$$\text{算法}\begin{cases}\text{解析法：在计算过程中要用到目标函数的导数} \\ \text{直接法：只用到目标函数值。}\end{cases}$$

精确一维搜索的一个重要性质：

定理：设$f(x)$具有连续的偏导数，且$x^{(k+1)}$是从$x^{(k)}$出发沿方向$d^{(k)}$作一维搜索而得到的，即

$$f(x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)})=\min f(x^{(k)}+\lambda d^{(k)}),$$

则$\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(k)}=0$。

最速下降法

最速下降方向

$$\min \quad f(x)$$
$$s.t. \quad x \in E^n$$

$f(x)$具有一阶连续偏导数。

取搜索方向： $d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$

步骤：

1.给定初点$x^{(1)} \in E^n$,允许误差$\varepsilon > 0$,置$k = 1$。

2.计算搜索方向$d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$.

3.若$\left\| d^{(k)} \right\| \le \varepsilon$，则停止计算；否则，从$x^{(k)}$出发，沿$d^{(k)}$进行一维搜索，求$\lambda_k$，使

$$f(x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}) = \min_{\lambda \ge 0} f(x^{(k)} + \lambda d^{(k)})。$$

4.令$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$，置$k := k + 1$，返回2。

例：求 $\min f(x)=(x_1-1)^2+(x_2-1)^2$，取 $x^{(1)}=(0,0)^T, \varepsilon=0.1.$

解： $\nabla f(x)=\left(2(x_1-1), 2(x_2-1)\right)^T$

第一次迭代

$$d^{(1)}=-(-2,-2)^T=(2,2)^T, \left\|d^{(1)}\right\|=2\sqrt{2}>\varepsilon$$

$\therefore$ 从 $x^{(1)}$ 出发，沿方向 $d^{(1)}$ 进行一维搜索，求步长 λ_1。

$$\min_{\lambda\geq 0}\varphi(\lambda)=\min_{\lambda\geq 0} f(x^{(1)}+\lambda d^{(1)})$$

$$\because x^{(1)}+\lambda d^{(1)}=(2\lambda, 2\lambda)^T, \therefore \varphi(\lambda)=(2\lambda-1)^2+(2\lambda-1)^2.$$

令 $\varphi'(\lambda)=4(2\lambda-1)+4(2\lambda-1)=0$，得 $\lambda_1=\dfrac{1}{2}$

令 $x^{(2)}=x^{(1)}+\lambda_1 d^{(1)}=(1,1)^T.$

第二次迭代

$$d^{(2)} = (0, 0)^T$$

$\because \left\| d^{(2)} \right\| = 0 < \varepsilon, \therefore (1, 1)^T$ 为最优解。

例： 求 $\min f(x)=x_1^2+25x_2^2$，取 $x^{(1)}=(2,2)^T, \varepsilon=0.2.$

k	$x^{(k)}$	$d^{(k)}$	λ_k	$\lVert d^{(k)} \rVert$
1	$\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -4 \\ -100 \end{pmatrix}$	0.02	100
2	$\begin{pmatrix} 1.92 \\ -0.003 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -3.84 \\ 0.15 \end{pmatrix}$	0.482	3.84
3	$\begin{pmatrix} 0.07 \\ 0.07 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.14 \\ -3.50 \end{pmatrix}$	0.02	3.5
4	$\begin{pmatrix} 0.067 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.134 \\ 0 \end{pmatrix}$		$0.134<\varepsilon$

最速下降法的收敛性

定理：设$f(x)$是连续可微实函数，解集合$\Omega=\{\bar{x}\mid\nabla f(\bar{x})=0\}$，最速下降算法产生的序列$\left\{x^{(k)}\right\}$含于某个紧集，则序列$\left\{x^{(k)}\right\}$的每个聚点$\hat{x}\in\Omega$。

证明:最速下降算法A可表示为合成映射 $A=MD$

其中$D(x)=(x,-\nabla f(x))$是$E^n\to 2^{E^n\times E^n}$的映射，算法M是$E^n\times E^n\to 2^{E^n}$的映射(即一维搜索)。

当$d=-\nabla f(x)\neq 0$时，由定理M是闭映射。由于$f(x)$是连续可微函数，所以D连续,$\Rightarrow A$在$x(\nabla f(x)\neq 0)$处是闭的。

其次，当$x\notin\Omega$时，$d=-\nabla f(x)\neq 0$,因此对于$y\in A(x)$，必有$f(y)<f(x)$，即$f(x)$是关于Ω和A的下降函数。

由假设,$\left\{x^{(k)}\right\}$含于紧集中，所以算法收敛。

收敛速度估计

定理 对严格凸二次函数 $f(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\top}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x}$，最优步长最速下降算法线性收敛，即

$$\frac{f_{k+1}-f(\boldsymbol{x}^*)}{f_k-f(\boldsymbol{x}^*)}\leqslant\left(\frac{\lambda_1-\lambda_n}{\lambda_1+\lambda_n}\right)^2,\qquad \frac{\|\boldsymbol{x}_{k+1}-\boldsymbol{x}^*\|}{\|\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}^*\|}\leqslant\frac{\lambda_1-\lambda_n}{\lambda_1+\lambda_n}\sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}}.$$

其中，$\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_n>0$ 为目标函数Hesse阵 $\boldsymbol{G}$ 的特征根

$\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{0}$ 目标函数的的最小值点.

- 很强条件下(目标函数二次、严格凸)最速下降算法的收敛速度估计;
- 线性收敛是一个很慢的收敛速度;
- 有例为证：该估计是精确的，没有提升的空间。

例 $\min_{\boldsymbol{x}\in R^2} f(x_1,x_2)=\frac{1}{3}x_1^2+\frac{1}{2}x_2^2$

唯一最优解 $\boldsymbol{x}^*=(0;0)$

取初始点 $\boldsymbol{x}_0=(3;2)$

迭代点列 $\boldsymbol{x}_k=\left(\frac{3}{5^k};(-1)^k\frac{2}{5^k}\right)\xrightarrow{k\to\infty}(0;0)$

全局收敛，但收敛速度是线性的！ $\|\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}^*\|=\sqrt{13}(\frac{1}{5})^k.$

$$\frac{\|\boldsymbol{x}_{k+1}-\boldsymbol{x}^*\|}{\|\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}^*\|}=\frac{1}{5}<\frac{1}{5}\sqrt{\frac{3}{2}}=\frac{\lambda_1-\lambda_2}{\lambda_1+\lambda_2}\sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_2}}$$

最速下降算法分析

- 搜索方法（最速下降方法）（ best）

$$\nabla f\left(x^{(k)}\right)^T d^{(k)} \leq \nabla f\left(x^{(k)}\right)^T d, \forall d, \| d \| = \| d^{(k)} \|$$

- 步长(精确搜索)(best)

$$f\left(x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}\right) \leq f\left(x^{(k)} + \lambda d^{(k)}\right), \forall \lambda \geq 0$$

- $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$ 是否最好？

- 理论性质和数值结果均不好，较强条件下线性收敛！

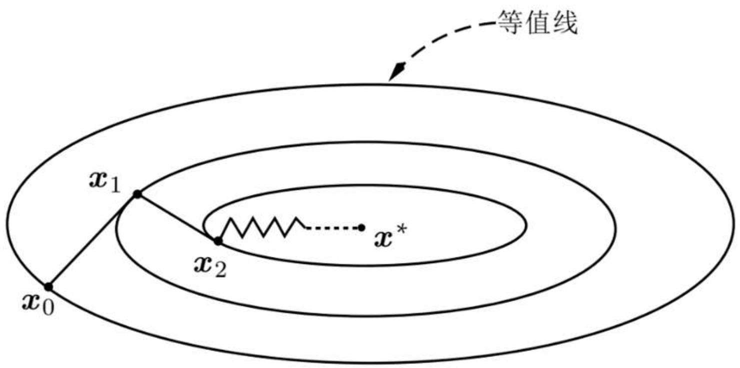
算法分析

- **优点** $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}, d^{(k)} = -\nabla f\left(x^{(k)}\right)$

  迭代过程简单，计算量与存储量小；

  开始时函数值下降较快，可以快速靠近最优解。

- **缺陷** 相邻两搜索方向正交, 导致锯齿现象，不适于算法收局。



最速下降算法的迭代过程

结论：在相继两次迭代中,梯度方向互相正交.

证明：令

$$\varphi(\lambda) = f(x^{(k)} + \lambda d^{(k)})$$

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

为求出从$x^{(k)}$出发沿方向$d^{(k)}$的极小点，令

$$\varphi'(\lambda_k) = \nabla f(x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)})^T d^{(k)} = 0$$

得
$$-\nabla f(x^{(k+1)})^T \nabla f(x^{(k)}) = 0$$

即方向$d^{(k+1)} = -\nabla f(x^{(k+1)})$与$d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$正交。

原因分析

最速下降法的搜索方向基于目标函数的线性近似

$$f\left(x^{(k)}+d\right)=f\left(x^{(k)}\right)+d^T\nabla f\left(x^{(k)}\right)+o(d)$$

$$-\nabla f\left(x^{(k)}\right)=\arg\min\left\{f\left(x^{(k)}\right)+d^T\nabla f\left(x^{(k)}\right) \mid \|d\|\le 1\right\}$$

二阶近似

牛顿算法

牛顿法

- 基本思想:用一个二次函数去近似目标函数 $f(x)$,然后精确地求出这个二次函数的极小点.

- -----一维搜索函数逼近法中的牛顿法的推广.

设$x^{(k)}$是$f(x)$的极小点x^*的第k次近似，将$f(x)$在$x^{(k)}$点作二阶Taylor展开，得

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

为求$\varphi(x)$的极小点，令

$$\nabla \varphi(x) = \nabla f(x^{(k)}) + \nabla^2 f(x^{(k)})(x - x^{(k)}) = 0$$

设$\nabla^2 f(x^{(k)})$可逆，则得

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

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

牛顿方向

定理： 设$f(x)$为二次可微函数，$x \in E^n$，$\bar{x}$满足$\nabla f(\bar{x}) = 0$，且$\nabla^2 f(\bar{x})^{-1}$存在。又设$x^{(1)}$充分接近$\bar{x}$，使得存在$k_1, k_2 > 0$，满足$k_1 k_2 < 1$，且对每一个

$$x \in X = \left\{ x \middle| \|x - \bar{x}\| \le \|x^{(1)} - \bar{x}\| \right\}$$

$$\|\nabla^2 f(x)^{-1}\| \le k_1 \text{和} \frac{\|\nabla f(\bar{x}) - \nabla f(x) - \nabla^2 f(x)(\bar{x} - x)\|}{\|\bar{x} - x\|} \le k_2$$

成立，则牛顿法产生的序列收敛于$\bar{x}$。

证明：牛顿算法映射定义为

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

定义解集合$\Omega = \{\bar{x}\}$，令函数$\alpha(x) = \|x - \bar{x}\|$。

下证$\alpha(x)$是关于解集合Ω和算法A的下降函数。

令$x\in X$，且$x\neq\overline{x}$，又令$y\in A(x)$。因为$\nabla f(\overline{x})=0$

$$\therefore y-\overline{x}=x-\nabla^2 f(x)^{-1}\nabla f(x)-\overline{x}$$

$$=(x-\overline{x})-\nabla^2 f(x)^{-1}[\nabla f(x)-\nabla f(\overline{x})]$$

$$=\nabla^2 f(x)^{-1}[\nabla f(\overline{x})-\nabla f(x)-\nabla^2 f(x)(\overline{x}-x)]$$

$$\therefore \left\|y-\overline{x}\right\|\leq\left\|\nabla^2 f(x)^{-1}\right\|\left\|\nabla f(\overline{x})-\nabla f(x)-\nabla^2 f(x)(\overline{x}-x)\right\|$$

$$\leq k_1 k_2\left\|\overline{x}-x\right\|<\left\|\overline{x}-x\right\|$$

因此$\alpha(x)$为下降函数。

由定义$y\in X$,故迭代产生的序列$\left\{x^{(k)}\right\}\subset X$。易知$X$为紧集，因此迭代产生的序列含于紧集中。

又算法A在紧集X上是闭的，

所以迭代产生的序列$\left\{x^{(k)}\right\}$必收敛于$\overline{x}$。

步骤：

1.给定初点$x^{(0)} \in E^n$,允许误差$\varepsilon > 0$,置$k = 0$。

2.若$\left\|\nabla f(x^{(k)})\right\| < \varepsilon$，则停止计算；否则，转3。

3.计算

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

置$k := k+1$，返回2。

算法特点：步长恒取1，无线搜索

例：求 $\min \quad f(x) = x_1^2 + 25x_2^2$

解：取 $x^{(0)} = (2, 2)^T$，则

$$\nabla f(x^{(0)}) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 50x_2 \end{pmatrix}\Bigg|_{x^{(0)}} = \begin{pmatrix} 4 \\ 100 \end{pmatrix}$$

$$\nabla^2 f(x^{(0)}) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 50 \end{pmatrix} \quad \nabla^2 f(x^{(0)})^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{50} \end{pmatrix}$$

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

$$= \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{50} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 100 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

例:求 $\min\ f(x) = 4x_1^2 + x_2^2 - x_1^2 x_2$

分别取初始点为 $x_A = (1,1)^T, x_B = (3,4)^T,$
$x_C = (2,0)^T$,精度要求 $\varepsilon = 10^{-3}$.

解: $f(x) = 4x_1^2 + x_2^2 - x_1^2 x_2$

$$\nabla f(x) = \left(8x_1 - 2x_1x_2, 2x_2 - x_1^2\right)^T$$

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 8 - 2x_2 & -2x_1 \\ -2x_1 & 2 \end{pmatrix}.$$

最优解: $x^* = (0,0)^T$,

鞍点: $x^{(1)} = \left(2\sqrt{2}, 4\right)^T$, $x^{(2)} = \left(-2\sqrt{2}, 4\right)^T$

(1) 取$x^{(1)} = x_A = (1,1)^T$,则

目标函数值增加

k	$x^{(k)}$	$f\left(x^{(k)}\right)$	$\nabla f\left(x^{(k)}\right)$	$\left\Vert\nabla f\left(x^{(k)}\right)\right\Vert$	$\nabla^2 f\left(x^{(k)}\right)$
1	1.0000 1.0000	4.000	6.0000 1.0000	6.0828	6.0000 −2.0000 −2.000 2.0000
2	−0.7500 −1.2500	4.5156	−7.8750 −3.0625	8.4495	10.500 1.5000 1.5000 2.0000
3	−0.1550 −0.1650	0.1273	−1.2911 −0.3540	1.3388	8.3300 0.3100 0.3100 2.0000
4	−0.0057 −0.0111	0.0003	−0.0459 −0.0223	0.0511	8.0222 0.0115 0.0115 2.0000
5	−0.0000 −0.0000	0.0000	−0.0001 −0.0000	0.0001	8.0000 0.0000 0.0000 2.0000

最优解

(2) 取$x^{(1)} = x_B = (3,4)^T$,则

k	$x^{(k)}$	$f\left(x^{(k)}\right)$	$\nabla f\left(x^{(k)}\right)$	$\left\lVert\nabla f\left(x^{(k)}\right)\right\rVert$	$\nabla^2 f\left(x^{(k)}\right)$
1	$\begin{matrix}3.0000\\4.0000\end{matrix}$	16.000	$\begin{matrix}0.0000\\-1.0000\end{matrix}$	1.0000	$\begin{matrix}0.0000 & -6.0000\\-6.000 & 2.0000\end{matrix}$
2	$\begin{matrix}2.8333\\4.0000\end{matrix}$	16.0000	$\begin{matrix}0.0000\\-0.2078\end{matrix}$	0.0278	$\begin{matrix}0.0000 & -5.6667\\-5.6667 & 2.0000\end{matrix}$
3	$\begin{matrix}2.8284\\4.0000\end{matrix}$	16.0000	$\begin{matrix}0.0000\\0.0000\end{matrix}$	0.0000	$\begin{matrix}0.0000 & -5.6569\\-5.6569 & 2.0000\end{matrix}$

鞍点

(3) 取$x^{(1)} = x_C = (2,0)^T$,得到

$$\nabla^2 f\left(x^{(1)}\right)=\begin{pmatrix} 8 & -4 \\ -4 & 2 \end{pmatrix}$$

由于*Hesse*矩阵不可逆，无法进行下一步。

用**Newton**法求解无约束问题会出现以下情形：

（**1**）收敛到极小点。

（**2**）收敛到鞍点。

（**3**）**Hesse**矩阵不可逆，无法迭代下去。

优点：（1）**Newton**法产生的点列$\{x^{(k)}\}$若收敛，则收敛速度快**---**具有至少二阶收敛速率。

(2) Newton法具有二次终止性。

证明：设A为对称，正定矩阵，且

$$f(x)=\frac{1}{2}x^T Ax+b^T x+c$$

令$\nabla f(x)=Ax+b=0$，得$x^*=-A^{-1}b$.

若用$Newton$迭代公式，从任一点$x^{(0)}$出发，得

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

$$=x^{(0)}-A^{-1}(Ax^{(0)}+b)=-A^{-1}b=x^*.$$

缺点:

- （**1**）可能会出现在某步迭代时，目标函数值上升.
- （**2**）当初始点远离极小点时，牛顿法产生的点列可能不收敛，或者收敛到鞍点，或者**Hesse**矩阵不可逆，无法计算.
- （**3**）计算量和存储量大：需要计算目标函数的梯度和**Hesse**矩阵的逆矩阵.

几种补救和改进措施:

- 引入线搜索，阻尼牛顿法，保证收敛性
- 结合最速下降法，设计“杂交” 牛顿法，保证下降性
- 计算牛顿方程的近似解, 建立非精确牛顿算法, 降低计算量
- 寻求新的搜索方向，共轭梯度法、拟牛顿算法

阻尼牛顿法

步骤：

1.给定初点$x^{(1)} \in E^n$,允许误差$\varepsilon > 0$,置$k = 1$。

2.计算$\nabla f(x^{(k)})$，$\nabla^2 f(x^{(k)})^{-1}$。

3.若$\|\nabla f(x^{(k)})\| < \varepsilon$,则停止迭代；否则，令

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

4.从$x^{(k)}$出发，沿方向$d^{(k)}$作一维搜索：

$$\min_{\lambda} f(x^{(k)} + \lambda d^{(k)}) = f(x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}),$$

令$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$

5.置$k := k + 1$，转2。

用阻尼牛顿法求解下列问题:

$$\min\ f(x)=x_1^4+x_1x_2+(1+x_2)^2$$

解：取初始点$x^{(1)}=(0,0)^T$.

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

牛顿方向 $d^{(1)}=-\nabla^2 f(x^{(1)})^{-1}\nabla f(x^{(1)})$

$$=\begin{pmatrix}0&1\\1&2\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}0\\2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-2\\0\end{pmatrix}$$

从$x^{(1)}$出发，沿$d^{(1)}$作一维搜索，令

$$\varphi(\lambda)=f(x^{(1)}+\lambda d^{(1)})=16\lambda^4+1$$

令 $\varphi'(\lambda)=64\lambda^3=0$

则 $\lambda=0$.

修正牛顿法

步骤:

1.给定初点$x^{(1)} \in E^n$,允许误差$\varepsilon > 0$,置$k = 1$。

2.计算$\nabla f(x^{(k)})$，$G_k = \nabla^2 f(x^{(k)})$。若$\left\|\nabla f(x^{(k)})\right\| \le \varepsilon$,

则停止计算，得点$x^{(k)}$；否则转3。

3.置$B_k = G_k + \varepsilon_k I$,其中$\varepsilon_k$是一个非负数，选取$\varepsilon_k$,

使得B_k是对称正定矩阵，计算修正牛顿方向

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

4.从$x^{(k)}$出发，沿方向$d^{(k)}$作一维搜索:

$$\min_{\lambda} f(x^{(k)} + \lambda d^{(k)}) = f(x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}),$$

令$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$

5.置$k := k + 1$，转2。

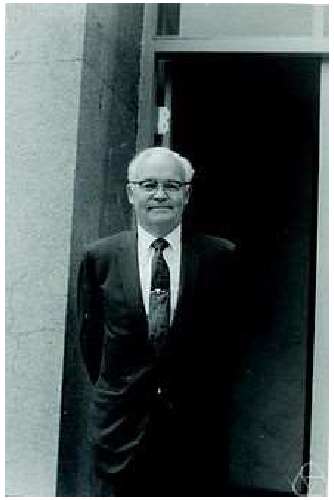
最速下降算法vs牛顿法

	初始点的选取	计算量与存储	收敛速率	二次终止性
最速下降法	任意	小	线性	✗
牛顿法	最优值点临近	大	二次	✓

是否存在一种算法，避免上述缺陷，继承他们的优点？

- 计算量与存储量较小
- 收敛较快

线性共轭梯度法：Hestenes、Stiefel (1952)在求解大规模线性方程组时创立的一种迭代算法。



Hestenes

Stiefel

非线性共轭梯度法：Fletcher等(1964)将其引入到非线性优化问题中，创立了非线性共轭梯度法

Fletcher

线性共轭方向法

线性方程组问题 $Ax=b$

矩阵$A\in\mathbb{R}^{n\times n}$对称正定，$b\in\mathbb{R}^{n}$

经典求解方法：

Gauss消元法　　系数矩阵的三角分解法

算法缺陷： 计算时间随问题规模急速增长。

Q:如何解决大规模问题！

线性方程组

$$Ax=b$$

严格凸二次规划

$$\min_{x}\frac{1}{2}x^{T}Ax-b^{T}x$$

利用问题的特殊结构，构造新的搜索方向，设计新的优化算法

共轭方向法

共轭方向

定义： 设A是$n\times n$对称正定矩阵，若E^n中的两个方向$d^{(1)}$和$d^{(2)}$满足

$$(d^{(1)})^T A d^{(2)} = 0$$

则称这两个方向关于A共轭，或称它们关于A正交。

若$d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(k)}$是$E^n$中$k$个方向，它们俩俩关于$A$共轭，即满足

$$(d^{(i)})^T A d^{(j)} = 0, i \neq j, i, j = 1, \cdots, k$$

则称这组方向是A共轭的，或称它们为A的k个共轭方向。

定理1 设A是n阶对称正定矩阵，$d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(k)}$是$k$个$A$共轭的非零向量，则这$k$个向量线性无关。

证明： 设存在数$\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_k$，使得

$$\alpha_1 d^{(1)}+\alpha_2 d^{(2)}+\cdots+\alpha_k d^{(k)}=0$$

左乘$d^{(i)^T}A$，

因为$d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(k)}$是$k$个$A$共轭的非零向量，

所以有$\alpha_i d^{(i)^T}Ad^{(i)}=0$，

又因为A正定，所以$d^{(i)^T}Ad^{(i)}>0$

$$\Rightarrow \alpha_i=0$$

$\therefore d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(k)}$线性无关。

定理2：设有二次函数

$$f(x)=\frac{1}{2}x^T Ax+b^T x+c,$$

其中$A_{n\times n}$是对称正定矩阵，$d^{(0)},d^{(1)},\cdots,d^{(n-1)}$是$A$共轭的非零向量，从任意一点$x^{(0)}\in E^n$出发，依次沿这组向量进行一维搜索，

$$\min_{\lambda\geq 0} f(x^{(k)}+\lambda d^{(k)})=f(x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)})$$

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)} \quad k=0,1,\cdots,n-1$$

则$\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(j)}=0,\ j=0,1,\cdots,k$。

证明： $\because \nabla f(x) = Ax + b$

$$\therefore \nabla f(x^{(k+1)}) = Ax^{(k+1)} + b = A(x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}) + b$$

$$= Ax^{(k)} + \lambda_k Ad^{(k)} + b$$

$$= A(x^{(k-1)} + \lambda_{k-1} d^{(k-1)}) + \lambda_k Ad^{(k)} + b$$

$$= Ax^{(k-1)} + \lambda_{k-1} Ad^{(k-1)} + \lambda_k Ad^{(k)} + b = \cdots$$

$$= Ax^{(j+1)} + \sum_{i=j+1}^{k} \lambda_i Ad^{(i)} + b = \nabla f(x^{(j+1)}) + \sum_{i=j+1}^{k} \lambda_i Ad^{(i)}$$

$$\therefore \nabla f(x^{(k+1)})^T = \nabla f(x^{(j+1)})^T + \sum_{i=j+1}^{k} \lambda_i d^{(i)^T} A^T$$

右乘$d^{(j)}$: $\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(j)} = \nabla f(x^{(j+1)})^T d^{(j)} + \sum_{i=j+1}^{k} \lambda_i d^{(i)^T} A^T d^{(j)}$

$\because \nabla f(x^{(j+1)})^T d^{(j)} = 0, d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(n-1)}$是$A$共轭的

$$\therefore \nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(j)} = 0, \quad j = 0,1,\cdots,k.$$

定理（扩张子空间定理,expanding subspace theorem）

设有函数 $f(x)=\frac{1}{2}x^T Ax+b^T x+c$

其中A为n阶对称正定矩阵，$d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(k)}$是$A$共轭的非零向量。以任意的$x^{(1)}\in E^n$为初始点，依次沿$d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(k)}$进行一维搜索，得到点$x^{(2)},x^{(3)},\cdots,x^{(k+1)}$，则$x^{(k+1)}$是$f(x)$在线性流形

$$M_k\left(x^{(1)};\left\{d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(k)}\right\}\right)=\left\{x \,\middle|\, x=x^{(1)}+\sum_{i=1}^{k}\mu_i d^{(i)},\mu_i\in R\right\}$$

$$=x^{(1)}+B_k$$

上的唯一极小点。特别的，当$k=n$时，$x^{(n+1)}$是$f(x)$在E^n上的唯一极小点。

证明：由于$f(x)$是严格凸函数，所以对$\forall y \in M_k$,有

$$f(y) > f(x^{(k+1)}) + \nabla f(x^{(k+1)})^T (y - x^{(k+1)}).$$

$\because y, x^{(k+1)} \in M_k, \therefore$ 可设$y = x^{(1)} + \sum_{i=1}^{k} \mu_i d^{(i)}, x^{(k+1)} = x^{(1)} + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i d^{(i)}$

$$f(y) > f(x^{(k+1)}) + \nabla f(x^{(k+1)})^T (x^{(1)} - x^{(k+1)}) + \sum_{i=1}^{k} \mu_i \left[\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(i)} \right]$$

$$= f(x^{(k+1)}) - \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \left[\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(i)} \right] + \sum_{i=1}^{k} \mu_i \left[\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(i)} \right]$$

若能证明$\nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(i)} = 0$，则$x^{(k+1)}$是$M_k$的极小点。

要证明$x^{(k+1)}$是$f(x)$在$x^{(1)} + B_k$上的唯一极小点，只需证明在$x^{(k+1)}$处，$\nabla f(x^{(k+1)})$与子空间B_k正交。

$k=1$时，由一维搜索定义知$\nabla f(x^{(2)}) \perp B_1$.

假设$k=m<n$时，$\nabla f(x^{(m+1)}) \perp B_m$,下证$\nabla f(x^{(m+2)}) \perp B_{m+1}$。

注意$\nabla f(x^{(m+2)}) = Ax^{(m+2)} + b,\ x^{(m+2)} = x^{(m+1)} + \lambda_{m+1} d^{(m+1)}$

$$
\begin{aligned}
\therefore \nabla f(x^{(m+2)}) &= Ax^{(m+2)} + b \\
&= A(x^{(m+1)} + \lambda_{m+1} d^{(m+1)}) + b \\
&= \nabla f(x^{(m+1)}) + \lambda_{m+1} A d^{(m+1)}
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow d^{(i)T} \nabla f(x^{(m+2)}) = d^{(i)T} \nabla f(x^{(m+1)}) + \lambda_{m+1} d^{(i)T} A d^{(m+1)}$

当$i=m+1$，由一维搜索定义有$d^{(i)T} \nabla f(x^{(m+2)}) = 0$,

当$1 \le i \le m$,由归纳假设，有$d^{(i)T} \nabla f(x^{(m+1)}) = 0$。

由于$d^{(1)}, \cdots, d^{(m+1)}$关于$A$共轭，因此有

$$d^{(i)T} A d^{(m+1)} = 0$$

$\Rightarrow d^{(i)T} \nabla f(x^{(m+2)}) = 0 \Rightarrow \nabla f(x^{(m+2)}) \perp B_{m+1}$.

当$k=n$时，$d^{(1)},d^{(2)},\cdots,d^{(n)}$是$E^n$的一组基，

若$\nabla f(x^{(n+1)})\neq 0$，令

$$\nabla f(x^{(n+1)})=\alpha_1 d^{(1)}+\alpha_2 d^{(2)}+\cdots+\alpha_n d^{(n)}$$

两边左乘$\nabla f(x^{(n+1)})^T$,得

$$\nabla f(x^{(n+1)})^T\nabla f(x^{(n+1)})=\alpha_1\nabla f(x^{(n+1)})^T d^{(1)}+\cdots+\alpha_n\nabla f(x^{(n+1)})^T d^{(n)}$$

$\Rightarrow\nabla f(x^{(n+1)})^T\nabla f(x^{(n+1)})=0$，矛盾，

所以，$\nabla f(x^{(n+1)})=0$，

即$x^{(n+1)}$是函数$f(x)$在E^n上的唯一极小点。

共轭方向法

从任意点出发，依次沿某组共轭方向进行一维搜索求解非线性规划问题的方法。

步骤（适用于正定二次函数）

1.给定初始点$x^{(0)} \in E^n$，选定下降方向$d^{(0)}$，令$k=0$。

2.从$x^{(k)}$出发，沿$d^{(k)}$方向进行一维搜索，求λ_k：

$$\min f(x^{(k)}+\lambda d^{(k)}) = x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)}$$

令$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)}$，计算$\nabla f(x^{(k+1)})$.

3.若$\left\|\nabla f(x^{(k+1)})\right\|=0$，则停止迭代，否则转4。

4.选定共轭方向$d^{(k+1)}$，使满足

$$d^{(j)^T} A d^{(k+1)} = 0, j=0,1,\cdots,k.$$

令$k=k+1$，返回2。

结论：$\lambda_k = -\dfrac{d^{(k)T}(Ax^{(0)}+b)}{d^{(k)T}Ad^{(k)}} = -\dfrac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{d^{(k)T}Ad^{(k)}}.$

证明：设$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$，则有

$$0 = \nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(k)} = d^{(k)^T}\nabla f(x^{(k+1)}) = d^{(k)^T}(Ax^{(k+1)}+b)$$

$$= d^{(k)^T}(Ax^{(k)} + \lambda_k Ad^{(k)} + b) \Rightarrow \lambda_k = -\frac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{d^{(k)^T}Ad^{(k)}}$$

又由$0 = d^{(k)^T}(Ax^{(k)} + \lambda_k Ad^{(k)} + b)$

$$\Rightarrow d^{(k)^T}(Ax^{(k)}+b) = -\lambda_k d^{(k)^T}Ad^{(k)}$$

将$x^{(k)} = x^{(0)} + \sum_{i=0}^{k-1}\lambda_i d^{(i)}$代入上式，且$d^{(i)}$共轭，得

$$d^{(k)^T}(Ax^{(0)}+b) = -\lambda_k d^{(k)^T}Ad^{(k)} \Rightarrow \lambda_k = -\frac{d^{(k)^T}(Ax^{(0)}+b)}{d^{(k)^T}Ad^{(k)}}$$

共轭方向法

步骤（适用于正定二次函数）

1.给定初始点$x^{(0)} \in E^n$，选定下降方向$d^{(0)}$，令$k=0$。

2.计算$\lambda_k = -\dfrac{d^{(k)^T}(Ax^{(0)}+b)}{d^{(k)^T}Ad^{(k)}}$，

令$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$，计算$\nabla f(x^{(k+1)})$.

3.若$\left\|\nabla f(x^{(k+1)})\right\| = 0$，则停止迭代，否则转4。

4.选定共轭方向$d^{(k+1)}$，使满足

$$d^{(j)^T}Ad^{(k+1)} = 0, j = 0,1,\cdots,k.$$

令$k=k+1$，返回2。

共轭方向法

步骤（适用于正定二次函数）

1.给定初始点$x^{(0)} \in E^n$，选定下降方向$d^{(0)}$，令$k=0$。

2.计算$\lambda_k = -\dfrac{\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}}$，

令$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$，计算$\nabla f(x^{(k+1)})$.

3.若$\left\| \nabla f(x^{(k+1)}) \right\| = 0$，则停止迭代，否则转4。

4.选定共轭方向$d^{(k+1)}$，使满足

$$d^{(j)T} A d^{(k+1)} = 0, j = 0,1,\cdots,k.$$

令$k = k+1$，返回2。

例： $\min x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + \frac{1}{2}x_3^2$

$A = diag(2, 1, 1),\ x^{(0)} = (1, 1, 1)^T,$

$d^{(0)} = (-1, -2, 0)^T, \nabla f = (2x_1, x_2, x_3)^T$

k	$x^{(k)}$	$d^{(k)}$	$\nabla f(x^{(k)})$	λ_k
0	$(1, 1, 1)^T$	$(-1, -2, 0)^T$	$(2, 1, 1)^T$	$\frac{2}{3}$
1	$\left(\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, 1\right)^T$	$(1, -1, 0)^T$	$\left(\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, 1\right)^T$	$-\frac{1}{3}$
2	$(0, 0, 1)^T$	$(0, 0, 1)^T$	$(0, 0, 1)^T$	-1
3	$(0, 0, 0)^T$		$(0, 0, 0)^T$	

共轭梯度法（Conjugate Gradient Method）（FR法）

记号：　$\nabla f(x^{(k)}) = g_k$

在共轭梯度法中，初始点处的搜索方向取为该点的负梯度方向，即取

$$d^{(1)} = -\nabla f(x^{(1)}) = -g_1$$

而以下各共轭方向$\boldsymbol{d^{(k)}}$由第$\boldsymbol{k}$次迭代点$\boldsymbol{x^{(k)}}$处的负梯度$\boldsymbol{-g_k}$与已经得到的共轭向量$\boldsymbol{d^{(k-1)}}$的线性组合来确定。

$$\min\ f(x)=\frac{1}{2}x^T Ax+b^T x+c$$

选取初始点$x^{(1)}$，取$d^{(1)}=-g_1$,从$x^{(1)}$出发，沿$d^{(1)}$做一维搜索，

$$\lambda_1=-\frac{\nabla f(x^{(1)})^T d^{(1)}}{d^{(1)^T}Ad^{(1)}}=\frac{g_1{}^T g_1}{d^{(1)^T}Ad^{(1)}},\quad x^{(2)}=x^{(1)}+\lambda_1 d^{(1)}$$

当$x^{(1)}\neq x^*$时,$g_1\neq 0\Rightarrow\lambda_1\neq 0$。

若$x^{(2)}\neq x^*$（否则迭代终止），则$g_2{}^T d^{(1)}=0\therefore g_2$与$d^{(1)}$线性无关。

令$d^{(2)}=-g_2+\beta_1 d^{(1)}$

用$d^{(1)^T}A$左乘上式，并令$d^{(1)^T}Ad^{(2)}=0$，得

$$\beta_1=\frac{d^{(1)^T}Ag_2}{d^{(1)^T}Ad^{(1)}}\quad\Rightarrow d^{(2)}=-g_2+\frac{d^{(1)^T}Ag_2}{d^{(1)^T}Ad^{(1)}}d^{(1)}$$

从$x^{(2)}$出发，沿$d^{(2)}$做一维搜索，得

$$\lambda_2=-\frac{\nabla f(x^{(2)})^T d^{(2)}}{d^{(2)^T}Ad^{(2)}}=\frac{g_2{}^T g_2-\beta_1\nabla f(x^{(2)})^T d^{(1)}}{d^{(2)^T}Ad^{(2)}}=\frac{g_2{}^T g_2}{d^{(2)^T}Ad^{(2)}}$$

以此类推，得

$$d^{(k)} = -g_k + \beta_{k-1} d^{(k-1)}$$

$$\beta_{k-1} = \frac{d^{(k-1)^T} A g_k}{d^{(k-1)^T} A d^{(k-1)}}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$$

$$\lambda_k = \frac{g_k^{\ T} g_k}{d^{(k)^T} A d^{(k)}}$$

定理：对正定二次函数，FR法在$m \le n$次一维搜索后终止，且对$\forall i(1 \le i \le m)$,下列关系式成立：

(1) $d^{(i)^T} A d^{(j)} = 0,\ j = 1, 2, \cdots, i-1;$

(2) $g_i^T g_j = 0,\ j = 1, 2, \cdots, i-1;$

(3) $g_i^T d^{(i)} = -g_i^T g_i$.(蕴含$d^{(i)} \neq 0$)

$$d^{(k)} = -g_k + \beta_{k-1} d^{(k-1)}$$

$$\beta_{k-1} = \frac{d^{(k-1)^T} A g_k}{d^{(k-1)^T} A d^{(k-1)}}$$

证明：（用归纳法）

$i=1$时，$g_1 = \nabla f(x^{(1)}), d^{(1)} = -g_1, \therefore$ (3)成立。

$i=2$时，由构造法，$d^{(2)^T} A d^{(1)} = 0$,即(1)成立。

由一维搜索性质，$\nabla f(x^{(2)})^T d^{(1)} = 0$，而

$d^{(1)} = -g_1 \Rightarrow g_2^T g_1 = 0 \Rightarrow$ (2)成立。

$\because d^{(2)} = -g_2 + \beta_1 d^{(1)}$

$\therefore g_2^T d^{(2)} = g_2^T(-g_2 + \beta_1 d^{(1)}) = -g_2^T g_2 \therefore$ (3)成立。

假设对某个$3 \le i < m$,(1),(2),(3)均成立，下证对$i+1$也成立。

先证(2)

(2) $x^{(i+1)} = x^{(i)} + \lambda_i d^{(i)}$

$$\nabla f(x^{(i+1)}) = Ax^{(i+1)} + b = Ax^{(i)} + \lambda_i Ad^{(i)} + b = \nabla f(x^{(i)}) + \lambda_i Ad^{(i)}$$

即$g_{i+1} = g_i + \lambda_i Ad^{(i)}$

$$\text{其中}\lambda_i = \frac{g_i^T g_i}{d^{(i)T} Ad^{(i)}} \overset{\text{归纳假设}}{=} \frac{-g_i^T d^{(i)}}{d^{(i)T} Ad^{(i)}} \neq 0$$

$$\boxed{\begin{aligned}&(1)\ d^{(i)^T} Ad^{(j)} = 0\\&(2)\ g_i^T g_j = 0\\&(3)\ g_i^T d^{(i)} = -g_i^T g_i\end{aligned}}$$

$$\therefore g_{i+1}^T g_j = \left(g_i^T + \lambda_i d^{(i)T} A^T\right) g_j$$

$$= g_i^T g_j + \lambda_i d^{(i)T} A\left(-d^{(j)} + \beta_{j-1} d^{(j-1)}\right)$$

$$= g_i^T g_j - \lambda_i d^{(i)T} Ad^{(j)} + \lambda_i \beta_{j-1} d^{(i)T} Ad^{(j-1)}$$

$$\boxed{\begin{aligned}&d^{(k)} = -g_k + \beta_{k-1} d^{(k-1)}\\&\beta_{k-1} = \frac{d^{(k-1)^T} Ag_k}{d^{(k-1)^T} Ad^{(k-1)}}\end{aligned}}$$

$$= \begin{cases} 0 & i \neq j \\ g_i^T g_j - g_i^T g_j + \lambda_i \beta_{j-1} d^{(i)T} Ad^{(j-1)} = 0 & i = j \end{cases}$$

$$(1)\ d^{(i+1)} = -g_{i+1} + \beta_i d^{(i)}$$

$$d^{(i+1)T} A d^{(j)} = \left(-g_{i+1} + \beta_i d^{(i)}\right)^T A d^{(j)} = -g_{i+1}{}^T A d^{(j)} + \beta_i d^{(i)T} A d^{(j)}$$

若$i = j$,由$\beta_i = \dfrac{d^{(i)T} A g_{i+1}}{d^{(i)T} A d^{(i)}} \Rightarrow d^{(i+1)T} A d^{(i)} = 0$，以下假设$i \neq j$。

$$\because g_{i+1} - g_i = (Ax^{(i+1)} + b - (Ax^{(i)} + b))$$

$$= A(x^{(i+1)} - x^{(i)}) = A(x^{(i)} + \lambda_i d^{(i)} - x^{(i)}) = \lambda_i A d^{(i)}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} (1)\ d^{(i)^T} A d^{(j)} = 0 \\ (2)\ g_i{}^T g_j = 0 \\ (3)\ g_i{}^T d^{(i)} = -g_i{}^T g_i \end{array}}$$

$$\therefore A d^{(i)} = \frac{g_{i+1} - g_i}{\lambda_i}$$

$$\therefore d^{(i+1)T} A d^{(j)} = -g_{i+1}{}^T \frac{g_{j+1} - g_j}{\lambda_j} + \beta_i d^{(i)T} A d^{(j)}$$

$$= -\frac{1}{\lambda_j} g_{i+1}{}^T g_{j+1} + \frac{1}{\lambda_j} g_{i+1}{}^T g_j + \beta_i d^{(i)T} A d^{(j)} = 0$$

$$(3)\ g_{i+1}^{\ \ T} d^{(i+1)} = g_{i+1}^{\ \ T}\left(-g_{i+1} + \beta_i d^{(i)}\right)$$

$$= -g_{i+1}^{\ \ T} g_{i+1} + \beta_i g_{i+1}^{\ \ T} d^{(i)}$$

$$\because g_{i+1}^{\ \ T} d^{(i)} = g_{i+1}^{\ \ T}\left(-g_i + \beta_{i-1} d^{(i-1)}\right)$$

$$= \beta_{i-1} g_{i+1}^{\ \ T} d^{(i-1)} = \cdots = \beta_{i-1} \ldots \beta_1 g_{i+1}^{\ \ T} d^{(1)}$$

$$== \beta_{i-1} \ldots \beta_1 g_{i+1}^{\ \ T}\left(-g_1\right) = 0.$$

$$\therefore g_{i+1}^{\ \ T} d^{(i+1)} = -g_{i+1}^{\ \ T} g_{i+1}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} (1)\ d^{(i)^T} A d^{(j)} = 0 \\ (2)\ g_i^{\ T} g_j = 0 \\ (3)\ g_i^{\ T} d^{(i)} = -g_i^{\ T} g_i. \end{array}}$$

定理: $\beta_i = \dfrac{d^{(i)T} A g_{i+1}}{d^{(i)T} A d^{(i)}} = \dfrac{\left\|g_{i+1}\right\|^2}{\left\|g_i\right\|^2} (i \geq 1, g_i \neq 0).$

证明： 由$Ad^{(j)} = \dfrac{1}{\lambda_j}\left(g_{j+1} - g_j\right)$得

$$\beta_i = \frac{\dfrac{1}{\lambda_i}\left(g_{i+1} - g_i\right)^T g_{i+1}}{d^{(i)T} \dfrac{1}{\lambda_i}\left(g_{i+1} - g_i\right)} = \frac{g_{i+1}{}^T g_{i+1} - g_i{}^T g_{i+1}}{d^{(i)T} g_{i+1} - d^{(i)T} g_i}$$

$$= \frac{g_{i+1}{}^T g_{i+1}}{g_i{}^T g_i} = \frac{\left\|g_{i+1}\right\|^2}{\left\|g_i\right\|^2}$$

(1) $d^{(i)^T} A d^{(j)} = 0$

(2) $g_i{}^T g_j = 0$

(3) $g_i{}^T d^{(i)} = -g_i{}^T g_i.$

步骤(FR共轭梯度法）

1.给定初始点$x^{(1)}$，置$k=1$。

2.计算$g_k=\nabla f(x^{(k)})$，若$\|g_k\|=0$，则停止计算，得点$\bar{x}=x^{(k)}$；否则进行下一步。

3.令$d^{(k)}=-g_k+\beta_{k-1}d^{(k-1)}$，其中，当$k=1$时，

$\beta_{k-1}=0$，当$k>1$时，$\beta_{k-1}=\dfrac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}$。

4.令$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)}$，其中$\lambda_k=-\dfrac{g_k{}^T d^{(k)}}{d^{(k)T}Ad^{(k)}}$。

5.若$k=n$，则停止计算，得点$\bar{x}=x^{(k+1)}$；否则，置$k=k+1$，返回2。

例: $\min x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + \frac{1}{2}x_3^2$

解: $\nabla f(x) = (2x_1, x_2, x_3)^T$, 取$x^{(1)} = (1,1,1)^T$.

k	$x^{(k)}$	g_k	β_{k-1}	$d^{(k)}$	λ_k
1	$(1,1,1)^T$	$(2,1,1)^T$	0	$-(2,1,1)^T$	$\frac{3}{5}$
2	$\left(-\frac{1}{5},\frac{2}{5},\frac{2}{5}\right)^T$	$\left(-\frac{2}{5},\frac{2}{5},\frac{2}{5}\right)^T$	$\frac{2}{25}$	$\frac{6}{25}(1,-2,-2)^T$	$\frac{5}{6}$
3	$(0,0,0)^T$				

观察: 算法两步迭代后终止。

问题: 算法的迭代步数与什么有关?

收敛速度

定理 对严格凸二次函数

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

若系数矩阵$\boldsymbol{A}$有 r个相异特征根，则最优步长规则下的共轭梯度法至多 r步迭代后终止。

例: $$\min x_1^2+\frac{1}{2}x_2^2+\frac{1}{2}x_3^2$$

$$A=diag(2,1,1),\ x^{(1)}=(1,1,1)^T,$$

$$d^{(1)}=(-1,-2,0)^T,\nabla f=(2x_1,x_2,x_3)^T$$

从$x^{(1)}$出发，沿方向$d^{(1)}$做一维搜索，得$\lambda_1=\dfrac{2}{3}$,

$$\Rightarrow \quad x^{(2)}=x^{(1)}+\lambda_1 d^{(1)}=\left(\frac{1}{3},-\frac{1}{3},1\right)^T,g_2=\left(\frac{2}{3},-\frac{1}{3},1\right)^T.$$

令$d^{(2)}=-g_2+\beta_1 d^{(1)}$，其中$\beta_1=\dfrac{d^{(1)T}Ag_2}{d^{(1)T}Ad^{(1)}}=-\dfrac{1}{9}$

$$\Rightarrow \quad d^{(2)}=\left(-\frac{5}{9},\frac{5}{9},-1\right)^T$$

从$x^{(2)}$出发，沿方向$d^{(2)}$做一维搜索，得$\lambda_2=\dfrac{21}{26}$,

$$\Rightarrow \quad x^{(3)}=x^{(2)}+\lambda_2 d^{(2)}=\left(-\frac{9}{78},\frac{9}{78},\frac{5}{26}\right)^T,$$

$$g_3=\left(-\frac{18}{78},\frac{9}{78},\frac{5}{26}\right)^T.$$

令$d^{(3)}=-g_3+\beta_2 d^{(2)}$，其中$\beta_2=\dfrac{d^{(2)T}Ag_3}{d^{(2)T}Ad^{(2)}}=\dfrac{45}{676}$

$$\Rightarrow \quad d^{(3)}=\frac{1}{676}(131,-53,-175)^T$$

结论：$d^{(1)}$与$d^{(2)}$关于A共轭，$d^{(2)}$与$d^{(3)}$关于A共轭，但$d^{(1)}$与$d^{(3)}$关于A不共轭。

线性共轭梯度法小结

对大规模线性方程组问题，由于线性共轭梯度法小的计算量和储存量及快速收敛性，使其计算效率方面高于传统的Gauss消元法和系数矩阵的分解算法.所以,对于大规模线性方程组问题,线性共轭梯度法往往成为首选．不过,对于小规模的线性方程组问题，Gauss消元法更简便.

用于一般函数的共轭梯度法

与原方法的主要区别：

(1) 步长λ_k不能再用公式$\lambda_k = -\dfrac{g_k{}^T d^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}}$计算，必须用其他一维搜索方法来确定。

(2) 凡用到矩阵A之处，需用现行点处的$Hession$矩阵$\nabla^2 f(x^{(k)})$代替。

(3) 有限步迭代达不到极小点。

迭代的延续方法：

(1) 直接延续：即总用公式$d^{(k+1)}=-g_{k+1}+\beta_k d^{(k)}$构造搜索方向。

(2) 重新开始，把n步作为一轮，每搜索一轮之后，取一次最速下降方向，开始下一轮。

计算参数β_k的常用公式：

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x^{(k+1)})^T \nabla f(x^{(k+1)})}{\nabla f(x^{(k)})^T \nabla f(x^{(k)})} \qquad Fletcher-\mathrm{Re}\,eves(FR)$$

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x^{(k+1)})^T \left(\nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})\right)}{\nabla f(x^{(k)})^T \nabla f(x^{(k)})} \qquad Polak-Ribiere-Polyak(PRP)$$

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x^{(k+1)})^T \left(\nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})\right)}{d^{(k)T} \left(\nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})\right)} \qquad Crowder-Wolfe$$

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x^{(k+1)})^T \nabla^2 f(x^{(k+1)}) d^{(k)}}{d^{(k)T} \nabla^2 f(x^{(k+1)}) d^{(k)}} \qquad Daniel$$

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x^{(k+1)})^T \nabla f(x^{(k+1)})}{d^{(k)T} \nabla f(x^{(k)})} \qquad Dixon$$

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x^{(k+1)})^T \nabla f(x^{(k+1)})}{d^{(k)T} \left(\nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})\right)} \qquad Dai-Yuan$$

步骤(FR共轭梯度法）

1.给定初始点$x^{(1)}$，允许误差$\varepsilon > 0$，置$y^{(1)} = x^{(1)}$，

$d^{(1)} = -\nabla f(y^{(1)}), k = j = 0$。

2.若$\left\|\nabla f(y^{(j)})\right\| < \varepsilon$,则停止计算；否则作一维搜索，求$\lambda_j$

满足$f(y^{(j)} + \lambda_j d^{(j)}) = \min f(y^{(j)} + \lambda d^{(j)})$,

令$y^{(j+1)} = y^{(j)} + \lambda_j d^{(j)}$。

3.若$j < n$，则转4，否则转5。

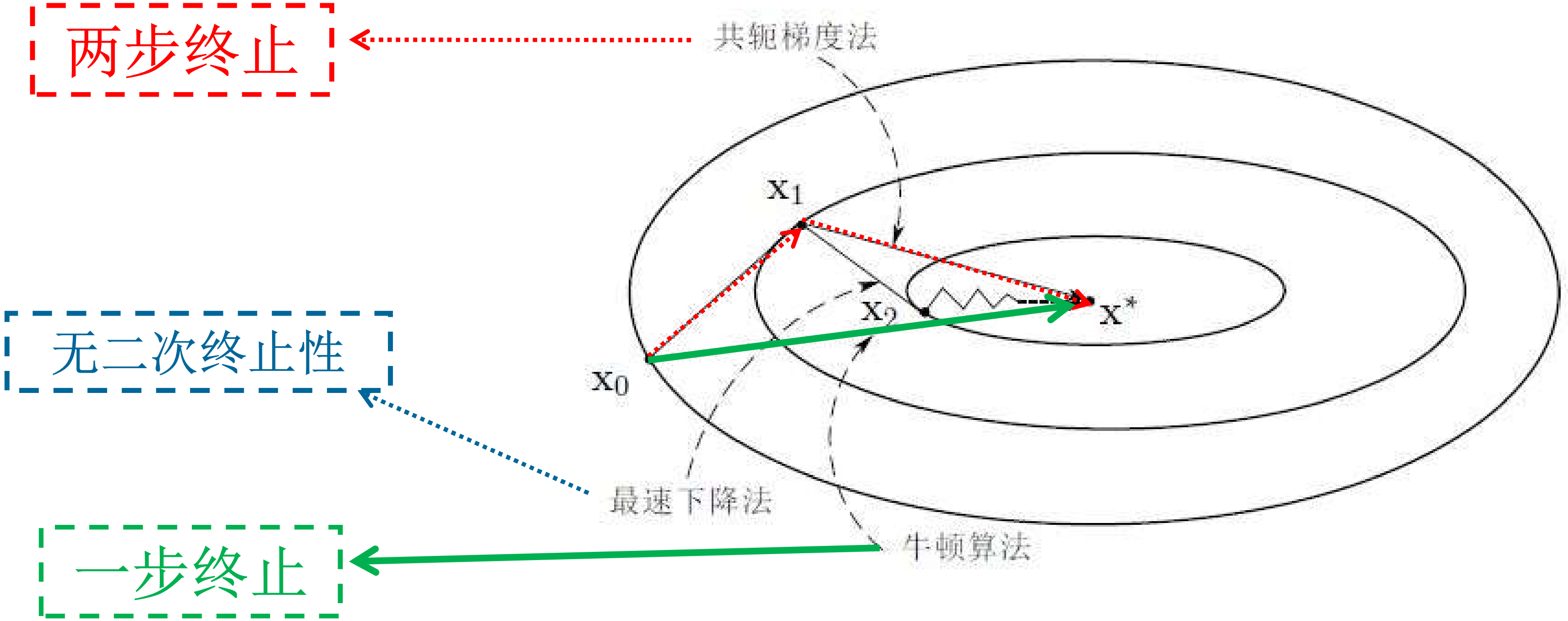
4.令$d^{(j+1)} = -\nabla f(y^{(j+1)}) + \beta_j d^{(j)}, \beta_j = \dfrac{\left\|\nabla f(y^{(j+1)})\right\|^2}{\left\|\nabla f(y^{(j)})\right\|^2}$,

置$j = j+1$，转2。

5.令$x^{(k+1)} = y^{(n+1)}, y^{(1)} = x^{(k+1)}, d^{(1)} = -\nabla f(y^{(1)}), j = 1$

$k = k+1$，返回2。

最速下降法、牛顿法、共轭梯度法的比较



严格凸二元二次规划的迭代轨迹

最速下降算法、牛顿法、共轭梯度法比较

——————理论分析

	初始点的选取	计算量与存储	收敛速率	二次终止性
最速下降法	任意	小	线性	✗
牛顿法	邻域内	大	二次	✓
共轭梯度法	任意	小	线性	✓

变尺度法(Variable Metric Method)
拟牛顿法(Quasi-Newton Method）

这是一种求解无约束极值问题的有效算法，由于它既避免了计算二阶导数、矩阵及其求逆过程，又比最速下降法的收敛速度快，特别是对高维问题具有显著的优越性，所以，它被公认为求解无约束极值问题最有效的算法之一。

牛顿法的缺点:

- （1）可能会出现在某步迭代时，目标函数值上升.
- （2）当初始点远离极小点时，牛顿法产生的点列可能不收敛，或者收敛到鞍点，或者Hesse矩阵不可逆，无法计算.
- （3）需要计算Hesse矩阵的逆矩阵，计算量大.

基本原理：

阻尼牛顿法：

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$$

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

λ_k -----最佳步长。

为了避免计算$\nabla^2 f(x^{(k)})^{-1}$，设法构造另一个矩阵H_k，用它直接逼近$\nabla^2 f(x^{(k)})^{-1}$。

要求：

(1)每一步都能以现有的信息来确定下一个搜索方向。

(2)每一次迭代，目标函数值均有所下降。

(3)$H_k \to \nabla^2 f(x^{(k)})^{-1}$.

设在第k次迭代后，得到点$x^{(k+1)}$.

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

$\therefore$ 在$x^{(k+1)}$附近有

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

令$x = x^{(k)}$，则有

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

记$p^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}, q^{(k)} = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})$

$$\Rightarrow q^{(k)} \approx \nabla^2 f(x^{(k+1)}) p^{(k)}$$

设$\nabla^2 f(x^{(k+1)})$可逆，则

$$p^{(k)} \approx \nabla^2 f(x^{(k+1)})^{-1} q^{(k)} \qquad (*)$$

$\therefore$ 计算出$p^{(k)}$和$q^{(k)}$后，可以根据(*)估计在$x^{(k+1)}$处的$Hesse$矩阵的逆矩阵。

令$p^{(k)} = H_{k+1} q^{(k)}$

拟牛顿条件

拟牛顿法步骤

1.给定初始点$x^{(0)}$，正定矩阵H_0，允许误差$\varepsilon > 0$;

计算$g_0 = \nabla f(x^{(0)})$, 置$k = 0$。

2.若$\|g_k\| < \varepsilon$,则停止计算；否则，计算搜索方向

$$d^k = -H_k \mathrm{g}_\mathrm{k}\text{。}$$

3.作一维搜索，求λ_k,满足

$$f(x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}) = \min f(x^{(k)} + \lambda d^{(k)}),$$

令$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$。

4.计算$g_{k+1} = \nabla f(x^{(k+1)})$，并且对矩阵$H_k$进行校正，得到$H_{k+1}$，使之满足拟牛顿条件；令$k = k+1$，返回2。

秩1校正

一般策略：H_1取为任一个n阶对称正定矩阵，通过修正H_k给出H_{k+1}。

令 $$H_{k+1} = H_k + \Delta H_k$$

校正矩阵

确定ΔH_k的方法之一：令

$$\Delta H_k = \alpha_k Z^{(k)} Z^{(k)^T}$$

其中α_k为常数，$Z^{(k)}$为n维列向量，

$\therefore \Delta H_k$是秩为1的对称矩阵，$Z^{(k)}$的选取应使拟牛顿条件成立，即$p^{(k)} = H_{k+1} q^{(k)}$.

$$\Rightarrow p^{(k)} = H_k q^{(k)} + \alpha_k Z^{(k)} Z^{(k)T} q^{(k)} \qquad (1)$$

$$\therefore Z^{(k)} = \frac{p^{(k)} - H_k q^{(k)}}{\alpha_k Z^{(k)T} q^{(k)}}$$

$$\boxed{p^{(k)} = H_{k+1} q^{(k)}}$$

另一方面，(1)式两端左乘$q^{(k)T}$

$$q^{(k)T}\left(p^{(k)} - H_k q^{(k)}\right) = \alpha_k (Z^{(k)T} q^{(k)})^2$$

$$\therefore \Delta H_k = \alpha_k Z^{(k)} Z^{(k)T} = \alpha_k \frac{\left(p^{(k)} - H_k q^{(k)}\right)}{\alpha_k Z^{(k)T} q^{(k)}} \frac{\left(p^{(k)} - H_k q^{(k)}\right)^T}{\alpha_k Z^{(k)T} q^{(k)}}$$

$$= \frac{\left(p^{(k)} - H_k q^{(k)}\right)\left(p^{(k)} - H_k q^{(k)}\right)^T}{\alpha_k (Z^{(k)T} q^{(k)})^2} = \frac{\left(p^{(k)} - H_k q^{(k)}\right)\left(p^{(k)} - H_k q^{(k)}\right)^T}{q^{(k)^T}\left(p^{(k)} - H_k q^{(k)}\right)}$$

$$\therefore H_{k+1} = H_k + \frac{\left(p^{(k)} - H_k q^{(k)}\right)\left(p^{(k)} - H_k q^{(k)}\right)^T}{q^{(k)^T}\left(p^{(k)} - H_k q^{(k)}\right)}$$

秩1-拟牛顿法步骤

1.给定初始点$x^{(0)}$，正定矩阵H_0，允许误差$\varepsilon>0$;

$H_0=I$

计算$g_0=\nabla f(x^{(0)})$, 置$k=0$。

2.若$\|g_k\|<\varepsilon$,则停止计算；否则，计算搜索方向

$$d^k=-H_k g_k。$$

3.作一维搜索，求λ_k,满足

$$f(x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)})=\min f(x^{(k)}+\lambda d^{(k)}),$$

令$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\lambda_k d^{(k)}$。

4.计算$g_{k+1}=\nabla f(x^{(k+1)}), p^{(k)}=x^{(k+1)}-x^{(k)}, q^{(k)}=g_{k+1}-g_k$,

$$H_{k+1}=H_k+\frac{\left(p^{(k)}-H_k q^{(k)}\right)\left(p^{(k)}-H_k q^{(k)}\right)^T}{q^{(k)T}\left(p^{(k)}-H_k q^{(k)}\right)}$$

令$k=k+1$，返回2。

算法收敛性

对严格凸二次函数 $f(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$，对任意初始点和对称阵 $\boldsymbol{H}_0$，若秩1–拟牛顿法产生的点列满足 $(\boldsymbol{s}_k-\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{y}_k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_k\neq 0$，向量组 $\boldsymbol{s}_0,\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\cdots,\boldsymbol{s}_{n-1}$ 线性无关, 则 $\boldsymbol{H}_n=\boldsymbol{A}^{-1}$。

进一步, 若采用最优步长或单位步长，则秩1–拟牛顿法具有二次终止性.

DFP算法(变尺度法)

定义：

$$\Delta H_k = \frac{p^{(k)} p^{(k)^T}}{p^{(k)^T} q^{(k)}} - \frac{H_k q^{(k)} q^{(k)^T} H_k}{q^{(k)^T} H_k q^{(k)}}$$

$$H_{k+1} = H_k + \frac{p^{(k)} p^{(k)^T}}{p^{(k)^T} q^{(k)}} - \frac{H_k q^{(k)} q^{(k)^T} H_k}{q^{(k)^T} H_k q^{(k)}}$$

DFP公式

DFP法计算步骤:

1.给定初始点$x^{(1)}$，计算误差$\varepsilon > 0$。

2.置$H_1 = I$，计算$g_1 = \nabla f(x^{(1)})$，置$k = 1$。

3.令$d^{(k)} = -H_k g_k$.

4.从$x^{(k)}$出发，沿$d^{(k)}$做一维搜索：$f(x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}) = \min f(x^{(k)} + \lambda d^{(k)})$

令$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)}$。

5.若$\left\|\nabla f(x^{(k+1)})\right\| < \varepsilon$，则停止迭代，得点$\bar{x} = x^{(k+1)}$；否则转6。

6.若$k = n$，则令$x^{(1)} = x^{(k+1)}$，返回2；否则，进行7。

7.令$g_{k+1} = \nabla f(x^{(k+1)}), p^k = x^{(k+1)} - x^{(k)}, q^k = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)})$,

$$H_{k+1} = H_k + \frac{p^{(k)} p^{(k)^T}}{p^{(k)^T} q^{(k)}} - \frac{H_k q^{(k)} q^{(k)^T} H_k}{q^{(k)^T} H_k q^{(k)}},$$

置$k = k + 1$，返回3。

例：用**DFP**方法求解下列问题：

$$\min\ 2x_1^2 + x_2^2 - 4x_1 + 2$$

解：$\nabla f(x) = \left(4x_1 - 4, 2x_2\right)^T$

初始点和初始矩阵分别取为：

$x^{(1)} = (2, 1)^T, H_1 = I$

第一次迭代

在点$x^{(1)}$处的梯度为$g_1 = \left(4, 2\right)^T$，

令搜索方向 $d^{(1)} = -H_1 g_1 = \left(-4, -2\right)^T$

从$x^{(1)}$出发，沿方向$d^{(1)}$做一维搜索，得$\lambda_1 = \dfrac{5}{18}$，

$$\Rightarrow \quad x^{(2)} = x^{(1)} + \lambda_1 d^{(1)} = \left(\frac{8}{9}, \frac{4}{9}\right)^T, g_2 = \left(-\frac{4}{9}, \frac{8}{9}\right)^T.$$

第二次迭代

$$p^{(1)}=\lambda_1 d^{(1)}=\left(-\frac{10}{9},-\frac{5}{9}\right)^T, q^{(1)}=g_2-g_1=\left(-\frac{40}{9},-\frac{40}{9}\right)^T$$

$$H_2=\frac{1}{360}\begin{pmatrix}86 & -38\\ -38 & 305\end{pmatrix}$$

$$\boxed{\begin{aligned}p^k&=x^{(k+1)}-x^{(k)},\\ q^k&=\nabla f(x^{(k+1)})-\nabla f(x^{(k)}),\end{aligned}}$$

令 $d^{(2)}=-H_2 g_2=\frac{12}{51}\begin{pmatrix}1\\ -4\end{pmatrix}$

从$x^{(2)}$出发，沿方向$d^{(2)}$进行一维搜索，得$\lambda_2=\frac{17}{36}$,

$\Rightarrow \quad x^{(3)}=x^{(2)}+\lambda_2 d^{(2)}=(1,0)^T$

此时，$g_3=(0,0)^T, \therefore x^{(3)}=(1,0)^T$为最优解。

例：用共轭梯度法求解下列问题：

$$\min 2x_1^2 + x_2^2 - 4x_1 + 2$$

解：$\nabla f(x) = \left(4x_1 - 4, 2x_2\right)^T \quad A = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

初始点取为：$x^{(1)} = (2,1)^T$

第一次迭代

在点$x^{(1)}$处的梯度为$g_1 = \left(4,2\right)^T$，

令搜索方向 $d^{(1)} = -g_1 = \left(-4,-2\right)^T$

从$x^{(1)}$出发，沿方向$d^{(1)}$做一维搜索，得$\lambda_1 = \dfrac{5}{18}$,

$$\Rightarrow \quad x^{(2)} = x^{(1)} + \lambda_1 d^{(1)} = \left(\frac{8}{9}, \frac{4}{9}\right)^T, g_2 = \left(-\frac{4}{9}, \frac{8}{9}\right)^T.$$

第二次迭代

$$g_2=\left(-\frac{4}{9},\frac{8}{9}\right)^T,\quad \beta_1=\frac{\|g_2\|^2}{\|g_1\|^2}=\frac{4}{81}$$

令 $\quad d^{(2)}=-g_2+\beta_1 d^{(1)}=\frac{20}{81}\begin{pmatrix}1\\-4\end{pmatrix}$

从$x^{(2)}$出发，沿方向$d^{(2)}$进行一维搜索，得$\lambda_2=\frac{9}{20}$,

$\Rightarrow \quad x^{(3)}=x^{(2)}+\lambda_2 d^{(2)}=(1,0)^T$

此时，$g_3=(0,0)^T, \therefore x^{(3)}=(1,0)^T$为最优解。

DFP算法(变尺度法)

$$\Delta H_k = \frac{p^{(k)} p^{(k)^T}}{p^{(k)^T} q^{(k)}} - \frac{H_k q^{(k)} q^{(k)^T} H_k}{q^{(k)^T} H_k q^{(k)}}$$

$$H_{k+1} = H_k + \frac{p^{(k)} p^{(k)^T}}{p^{(k)^T} q^{(k)}} - \frac{H_k q^{(k)} q^{(k)^T} H_k}{q^{(k)^T} H_k q^{(k)}}$$

定理：设矩阵H_k是正定对称矩阵，且$p^{(k)^T} q^{(k)} > 0,$
则由DFP公式构造的H_{k+1}是正定对称的。

证明：由于$p^{(k)^T} q^{(k)} > 0$，所以$q^{(k)} \neq 0,$由H_k的正定性，得到

$q^{(k)^T} H_k q^{(k)} > 0,$所以$DFP$公式有意义。对$\forall x \neq 0,$考察

$$x^T H_{k+1} x = x^T H_k x + \frac{\left(x^T p^{(k)}\right)^2}{p^{(k)^T} q^{(k)}} - \frac{\left(x^T H_k q^{(k)}\right)^2}{q^{(k)^T} H_k q^{(k)}}$$

$$= \frac{\left(x^T H_k x\right)\left(q^{(k)^T} H_k q^{(k)}\right) - \left(x^T H_k q^{(k)}\right)^2}{q^{(k)^T} H_k q^{(k)}} + \frac{\left(x^T p^{(k)}\right)^2}{p^{(k)^T} q^{(k)}}$$

由$Cauchy-schwarz$不等式，知

$$\left(x^T H_k x\right)\left(q^{(k)^T} H_k q^{(k)}\right) \geq \left(x^T H_k q^{(k)}\right)^2$$

且等式成立当且仅当存在$\lambda \neq 0$，使得$x = \lambda q^{(k)}$

$$\Rightarrow x^T H_{k+1} x > 0 \Rightarrow H_{k+1}\text{正定。}$$

推论：若$d^{(k)}$是下降方向，且一维搜索是精确的，并设H_k是正定对称矩阵，则H_{k+1}也是正定对称阵.

证明：因为一维搜索是精确的，所以有

$$\nabla f\left(x^{(k+1)}\right)^T d^{(k)} = 0$$

而且步长$\lambda_k > 0$.由于

$$p^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)} = x^{(k)} + \lambda_k d^{(k)} - x^{(k)} = \lambda_k d^{(k)}$$

$$\therefore \quad \nabla f\left(x^{(k+1)}\right)^T p^{(k)} = 0$$

$$\because p^{(k)^T} q^{(k)} = p^{(k)^T} \left(\nabla f\left(x^{(k+1)}\right) - \nabla f\left(x^{(k)}\right)\right)$$

$$= -p^{(k)^T} \nabla f\left(x^{(k)}\right) = -\lambda_k d^{(k)^T} \nabla f\left(x^{(k)}\right) > 0,$$

由定理知，H_{k+1}是正定的。

定理：设初始矩阵H_1是正定对称矩阵，且一维搜索是精确的，若$g_k = \nabla f\left(x^{(k)}\right) \neq 0$，则产生的搜索方向$d^{(k)}$是下降方向.

证明：用归纳法证明$g_k{}^T d^{(k)} < 0.$

当$k=1$时，H_1正定，因此

$$g_1{}^T d^{(1)} = -g_1{}^T H_1 g_1 < 0.$$

$$\boxed{d^{(k)} = -H_k g_k.}$$

假设当$k=m$时，命题为真，

即$g_m{}^T d^{(m)} < 0,$

由推论，H_{m+1}正定，因此有

$$g_{m+1}{}^T d^{(m+1)} = -g_{m+1}{}^T H_{m+1} g_{m+1} < 0,$$

即当$k=m+1$时，命题为真.

定理：用DFP算法求解正定二次函数

$$f(x)=\frac{1}{2}x^TAx+b^Tx+c,$$

若一维搜索是精确的，假设已进行了m次迭代，则

(1) 搜索方向$d^{(1)},\cdots,d^{(m)}$是m个非零的关于A共轭的方向；

(2) 对于$j=1,2,\cdots,m$,有

$$H_{m+1}q^{(j)}=p^{(j)}$$

且当$m=n$时，有 $H_{m+1}=A^{-1}.$

其中$p^{(i)}=x^{(i+1)}-x^{(i)}=\lambda_i d^{(i)}.$

证明：由算法知，$d^{(1)},\cdots,d^{(m)}$是非零的。

用数学归纳法证明

$$\begin{cases} p^{(i)^T}Ap^{(j)}=0, \quad 1\le j<i\le m \\ H_{m+1}Ap^{(j)}=p^{(j)} \quad 1\le j\le m. \end{cases}$$

$$\boxed{\begin{aligned} d^{(k)} &= -H_k g_k \\ p^{(i)} &= \lambda_i d^{(i)} \end{aligned}}$$

当$m=1$时，有

$$H_2Ap^{(1)}=\left(H_1+\frac{p^{(1)}p^{(1)^T}}{p^{(1)^T}q^{(1)}}-\frac{H_1q^{(1)}q^{(1)^T}H_1}{q^{(1)^T}H_1q^{(1)}}\right)Ap^{(1)}$$

由于 $Ap^{(i)}=A\left(x^{(i+1)}-x^{(i)}\right)=g_{i+1}-g_i=q^{(i)}$

所以 $H_2Ap^{(1)}=p^{(1)}.$

当$m=2$时，有

$$p^{(2)^T}Ap^{(1)}=\lambda_2 d^{(2)^T}Ap^{(1)}=-\lambda_2\left(H_2g_2\right)^TAp^{(1)}$$

$$=-\lambda_2 g_2{}^T H_2Ap^{(1)}=-\lambda_2 g_2{}^T p^{(1)}=-\lambda_1\lambda_2 g_2{}^T d^{(1)}=0$$

由拟牛顿条件，得 $H_3 q^{(2)} = p^{(2)}$,

而 $Ap^{(2)} = q^{(2)}$,所以，$H_3 Ap^{(2)} = p^{(2)}$.

$$\text{又} H_3 Ap^{(1)} = \left(H_2 + \frac{p^{(2)} p^{(2)^T}}{p^{(2)^T} q^{(2)}} - \frac{H_1 q^{(2)} q^{(2)^T} H_2}{q^{(2)^T} H_2 q^{(2)}} \right) Ap^{(1)}$$

$$= H_2 Ap^{(1)} + \frac{p^{(2)} p^{(2)^T} Ap^{(1)}}{p^{(2)^T} q^{(2)}} - \frac{H_1 q^{(2)} q^{(2)^T} H_2 Ap^{(1)}}{q^{(2)^T} H_2 q^{(2)}}$$

$$= p^{(1)} - \frac{H_1 q^{(2)} \left(Ap^{(2)} \right)^T p^{(1)}}{q^{(2)^T} H_2 q^{(2)}} = p^{(1)}.$$

$$\begin{cases} p^{(i)^T} Ap^{(j)} = 0, \\ H_{m+1} Ap^{(j)} = p^{(j)}. \end{cases}$$

$$Ap^{(i)} = q^{(i)}$$

假设$m=k-1$时，有$\begin{cases} p^{(i)^T}Ap^{(j)}=0, & 1\le j<i\le k-1 \\ H_kAp^{(j)}=p^{(j)} & 1\le j\le k-1. \end{cases}$

当$m=k$时，对$1\le j\le k-1$

$$p^{(k)^T}Ap^{(j)}=\lambda_k d^{(k)^T}Ap^{(j)}=-\lambda_k\left(H_kg_k\right)^T Ap^{(j)}$$

$$=-\lambda_k g_k^T H_k Ap^{(j)}=-\lambda_k g_k^T p^{(j)}=-\lambda_k\lambda_j g_k^T d^{(j)}=0.$$

对$1\le j\le k$,

$$H_{k+1}Ap^{(j)}=\left(H_k+\frac{p^{(k)}p^{(k)^T}}{p^{(k)^T}q^{(k)}}-\frac{H_kq^{(k)}q^{(k)^T}H_k}{q^{(k)^T}H_kq^{(k)}}\right)Ap^{(j)}$$

若$j=k$,将$Ap^{(k)}=q^{(k)}$代入得$H_{k+1}Ap^{(k)}=p^{(k)}$.

$$H_{k+1}Ap^{(j)} = \left(H_k + \frac{p^{(k)} p^{(k)^T}}{p^{(k)^T} q^{(k)}} - \frac{H_k q^{(k)} q^{(k)^T} H_k}{q^{(k)^T} H_k q^{(k)}} \right) Ap^{(j)}$$

若$j < k$,则

$$H_{k+1}Ap^{(j)} = H_k Ap^{(j)} + \frac{p^{(k)} p^{(k)^T} Ap^{(j)}}{p^{(k)^T} q^{(k)}} - \frac{H_k q^{(k)} q^{(k)^T} H_k Ap^{(j)}}{q^{(k)^T} H_k q^{(k)}}$$

$$= p^{(j)} - \frac{H_k q^{(k)} \left(Ap^{(k)} \right)^T p^{(j)}}{q^{(k)^T} H_k q^{(k)}} = p^{(j)}$$

$\Rightarrow$ 命题成立

$$\begin{cases} p^{(i)^T} Ap^{(j)} = 0, \\ H_{m+1}Ap^{(j)} = p^{(j)}. \end{cases}$$

$$Ap^{(i)} = q^{(i)}$$

令 $D=\left(p^{(1)}, p^{(2)}, \cdots, p^{(n)}\right)$

由于$p^{(1)}, p^{(2)}, \cdots, p^{(n)}$是一组关于$A$共轭的非零向量，

因此它们线性无关，故，D是可逆矩阵，

由于 $H_{n+1}AD=D$

所以 $H_{n+1}=A^{-1}$.

定理： 若$g_i \neq 0$，$i=1,2,\cdots,n$，则DFP方法构造的矩阵$H_i(i=1,2,\cdots,n)$为对称正定矩阵。

推论： 若目标函数是正定二次函数，则DFP方法经有限步迭代必达极小点。

定理： 如果$f(x)$是E^n上的二次连续可微实函数，对任意的$\hat{x} \in E^n$，存在常数$m>0$，使得当

$$x \in C(\hat{x}) = \{x \mid f(x) \leq f(\hat{x})\}$$

$y \in E^n$时，有$m\|y\|^2 \leq y^T \nabla^2 f(x) y$，则$DFP$方法产生的序列$\left\{x^{(k)}\right\}$或终止于或收敛于$f$在$E^n$上的唯一极小点。