《数值分析》12

- 初等变分原理
- 最速下降法

初等变分原理

I 方程组问题: $Ax = b$

II 极值问题: $\min\limits_{x \in R^n} \quad f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$

设 $x, y \in R^n$ ，记 $(x, y) = x^T y$

- $(x, y) = (y, x)$;
- $(tx, y) = t(x, y)$;
- $(x + y, z) = (x, z) + (y, z)$;
- $(x, x) \geq 0$, 且 $(x, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0$;

设 A 是 n 阶对称正定阵

- $(Ax, y) = (x, Ay)$; （对称）
- $(Ax, x) \geq 0$, 且 $(Ax, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0$ （正定）

定理4.10 设$A=(a_{ij})_{n\times n}$为实**对称正定矩阵**, $x,b\in R^n$

则 x 使二次函数

$$f(x)=\frac{1}{2}(Ax,x)-(b,x)$$

取极小值 $\Leftrightarrow$ x 是线性方程组 $Ax=b$ 的解。

证明: (<=) 设 u 是 $Ax=b$的解

$$\rightarrow\ Au=b\ \rightarrow\ f(u)=-\frac{1}{2}(Au,u)$$

对任意 $x\in R^n$, 只须证明 $f(x)-f(u)\geqslant 0$

$$f(x)-f(u)=\frac{1}{2}(Ax,x)-(b,x)+\frac{1}{2}(Au,u)$$

$$=\frac{1}{2}(A(x-u),(x-u))\geq 0$$

(=>) 设 u 使 $f(x)$ 取极小值. 取非零向量 $x\in R^n$,

对任意 $t\in R$, 有

$$f(u+tx)=\frac{1}{2}(A(u+tx),u+tx)-(b,u+tx)$$

$$= f(u)+t(Au-b,x)+\frac{t^2}{2}(Ax,x)$$

令 $g(t) = f(u + tx)$, 当 $t=0$ 时, $g(0)= f(u)$达到极小值, 所以 $g'(0) =0$,即

$$(Au-b,x)=0 \quad \Rightarrow \quad Au-b=0$$

所以, u 是方程组 $Ax = b$ 的解.

最速下降法 （解对称正定方程组$Ax = b$ ）

从初值点 $x^{(0)}$ 出发,以负梯度方向 r 为搜索方向

选择步长 t_0, 使 $x^{(1)} = x^{(0)} + t_0 r$ 为 $f(x)$ 极小值点

在 x 处,梯度方向是 $f(x)$ 增长最快方向

负梯度方向是 $f(x)$ 下降最快方向

梯度：$\nabla f = \mathrm{grad} f(x) = [\, f_{x1},\ f_{x2},\ \cdots;\ f_{xn}\,]^T$

$$\boxed{\nabla f = Ax - b}$$

方向l : $l = [\, v_1, v_2, \cdots; v_n\,]^T$, $g(t) = f(\, x + t\, l\,)$

其中, $\| l \| = 1$, $x = [x_1, x_2, \cdots; x_n\,]^T$

方向导数: $g'(0) = f_{x1}v_1 + f_{x2}v_2 + \cdots; + f_{xn}v_n$

$$\frac{\partial f}{\partial l} = \nabla f \cdot l = \| \nabla f \| \cos < \nabla f, l >$$

l 与∇f 方向一致时, 方向导数取得最大值

$\Rightarrow$ ∇f 是 $f(x)$ 增长最快方向

l 与 ∇f 方向相反时, 方向导数取得最小值

$\boxed{-\nabla f \text{ 是 } f(x) \text{ 下降最快方向}}$

$$g'(0) = f_{x1}v_1 + f_{x2}v_2 + \cdots; + f_{xn}v_n$$

$$g(t) = f(x + tl) = f(x) + t(Ax - b, l) + \frac{t^2}{2}(Al, l)$$

$$g'(0) = (Ax - b, l)$$

$$\nabla f = Ax - b$$

最速下降方向: $r = -\nabla f = b - Ax$

取初值点 $x^{(0)}$, 取负梯度方向 $r_0 = b - Ax^{(0)}$

求点：$x^{(1)} = x^{(0)} + t_0 r_0$ 使得

$$f(x^{(0)} + t_0 r_0) = \min_{t \in R} f(x^{(0)} + t\, r_0)$$

记 $g(t) = f(x^{(0)}) + t(Ax^{(0)} - b, r_0) + t^2 (Ar_0, r_0)/2$

为选取最佳步长 t_0，令

$$g'(t) = (Ax^{(0)} - b, r_0) + t(Ar_0, r_0) = 0$$

求解, 得 $t_0 = (r_0, r_0)/(Ar_0, r_0)$

解对称正定方程组$Ax=b$的**最速下降算法**:

第一步: 取初值 $x^{(0)} \in R^{(n)}$, ε>0,计算

$$r_0 = b - Ax^{(0)}\quad, \mathrm{k} \leftarrow 0;$$

第二步: 计算 $t_k = (r_k, r_k)/(Ar_k, r_k)$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k r_k; \qquad r_{k+1} = b - Ax^{(k+1)}\ ;$$

第三步: $k \leftarrow k+1$, 如果 $\|r_k\| \geq \varepsilon$,转第二步;

否则,输出: $x^{(k)}$,结束.