

第三章

4. 设 $\varphi(t) = e^{-t} + e^t$, 区间为 $[-1, 1]$ 。

(1) 用 0.618 法极小化 $\varphi(t)$ 。(计算两步)

(2) 用 Fibonacci 法极小化 $\varphi(t)$ 。(计算两步)

解答. (1) 初始化:

$$a_1 = -1, b_1 = 1, \lambda_1 = a_1 + \frac{3 - \sqrt{5}}{2}(b_1 - a_1) = 2 - \sqrt{5}, \mu_1 = a_1 + \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(b_1 - a_1) = \sqrt{5} - 2$$

第一步: 由于 $\varphi(t)$ 为偶函数, 所以 $\varphi(\lambda_1) = \varphi(\mu_1)$, 于是

$$a_2 = a_1 = -1, b_2 = \mu_1 = \sqrt{5} - 2, \mu_2 = \lambda_1 = 2 - \sqrt{5}, \lambda_2 = a_2 + \frac{3 - \sqrt{5}}{2}(b_2 - a_2) = 2\sqrt{5} - 5$$

第二步: 由于 $2.285 \approx \varphi(\lambda_2) > \varphi(\mu_2) \approx 2.056$, 所以极小化值为 $\varphi(\mu_2) \approx 2.056$ 。

(2) 初始化: 取 $n = 4$, 则 $a_1 = -1, b_1 = 1, \lambda_1 = a_1 + \frac{1}{3}(b_1 - a_1) = -\frac{1}{3}, \mu_1 = a_1 + \frac{2}{3}(b_1 - a_1) = \frac{1}{3}$

第一步: 由于 $\varphi(\lambda_1) = \varphi(\mu_1)$, 于是

$$a_2 = a_1 = -1, b_2 = \mu_1 = \frac{1}{3}, \mu_2 = \lambda_1 = -\frac{1}{3}, \lambda_2 = a_2 + \frac{1}{2}(b_2 - a_2) = -\frac{1}{3}$$

第二步: 由于 $\mu_2 = \lambda_2$, 于是极小化值为 $\varphi(\mu_2) \approx 2.112$ 。

6. 设 $\varphi(t) = 1 - te^{-t^2}$, 区间为 $[0, 1]$ 。试用三点二次插值法极小化 $\varphi(t)$ 。(计算一步)

解答. 设 $x_1 = 0, x_2 = 0.5, x_3 = 1$, 下面列出三阶差商表

x_i	$\varphi[x_i]$	$\varphi[x_i, x_{i+1}]$	$\varphi[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$
x_1	1		
x_2	$1 - \frac{1}{2}e^{-\frac{1}{4}}$	$-e^{-\frac{1}{4}}$	
x_3	$1 - e^{-1}$	$e^{-\frac{1}{4}} - 2e^{-1}$	$2e^{-\frac{1}{4}} - 2e^{-1}$

由 Newton 插值多项式可知

$$N_2(x) = 1 - e^{-\frac{1}{4}}x + (2e^{-\frac{1}{4}} - 2e^{-1})x(x - \frac{1}{2}) = (2e^{-\frac{1}{4}} - 2e^{-1})x^2 + (-2e^{-\frac{1}{4}} + e^{-1})x + 1$$

则 $\bar{x} = \frac{2e^{-\frac{1}{4}} - e^{-1}}{4(e^{-\frac{1}{4}} - e^{-1})} \approx 0.7238 > x_2$, 又由于 $0.61 \approx \varphi(x_2) > \bar{\varphi} = \varphi(\bar{x}) \approx 0.57$, 所以令 $x_1 \leftarrow \bar{x}, \varphi(x_1) \leftarrow \bar{\varphi}$, 极小化值为 $\bar{\varphi} \approx 0.57$ 。

第四章

1. 设 $f(x) = \frac{3}{2}x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 - x_1x_2 - 2x_1$, 设初始点 $x^{(0)} = (-2, 4)^T$. 试用最速下降法和牛顿法极小化 $f(x)$. (计算两步)

解答. 最速下降法: 已知 $\nabla f = [3x_1 - x_2 - 2, x_2 - x_1]^T$, $x^{(0)} = (-2, 4)^T$.

第一步: $d_0 = -g_0 = -\nabla f(x^{(0)}) = [12, -6]^T$, 求线性步长因子

$$\nabla f(x^{(0)} + \alpha_0 d_0)^T d_0 = \nabla f(-2 + 12\alpha_0, 4 - 6\alpha_0)^T \begin{bmatrix} 12 \\ -6 \end{bmatrix} = -5 + 16\alpha_0 = 0$$

则 $\alpha_0 = \frac{5}{16}$, 于是 $x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 d_0 = (\frac{26}{16}, \frac{38}{16})^T$.

第二步: $d_1 = -g_1 = -\nabla f(x^{(1)}) = -[\frac{6}{17}, \frac{12}{17}]^T$, 求线性步长因子

$$\nabla f(x^{(1)} + \alpha_1 d_1)^T d_1 = \nabla f\left(\frac{26}{17} - \frac{6}{17}\alpha_1, \frac{38}{17} - \frac{12}{17}\alpha_1\right)^T \begin{bmatrix} -\frac{6}{17} \\ -\frac{12}{17} \end{bmatrix} = \left(\frac{6}{17}\right)^2 (3\alpha_1 - 5) = 0$$

则 $\alpha_1 = \frac{5}{3}$, 于是 $x^{(2)} = x^{(1)} + \alpha_1 d_1 = (\frac{16}{17}, \frac{18}{17})^T$, 所以通过最速下降法两步得到的极小化值为

$$f(x^{(2)}) = \frac{3}{2} \cdot \left(\frac{16}{17}\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{18}{17}\right)^2 - \frac{16}{17} \cdot \frac{18}{17} - 2 \cdot \frac{16}{17} = -\frac{286}{289} \approx -0.9896$$

牛顿法: 已知 $\nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$, $x^{(0)} = (-2, 4)^T$, 则

$$G_0 d_0 = -g_0 \Rightarrow \begin{bmatrix} -3 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} d_0 = \begin{bmatrix} 12 \\ -6 \end{bmatrix} \Rightarrow d_0 = \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \end{bmatrix}$$

求线性步长因子

$$\nabla f(x^{(0)} + \alpha_0 d_0)^T d_0 = \nabla f(-2 + 3\alpha_0, 4 - 3\alpha_0)^T \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \end{bmatrix} = 54(\alpha_0 - 1) = 0$$

则 $\alpha_0 = 1$, 于是 $x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 d_0 = (1, 1)^T$, 由于 $g_1 = \nabla f(x^{(1)}) = \mathbf{0}$, 所以 $f(x)$ 的极小化值为 $f(x^{(1)}) = -1$.

定理 4.3.3. 设 $x_0 \in \mathbb{R}^n$ 是任意初始点. 对于极小化二次函数 $\frac{1}{2}x^T Gx - b^T x$, 共轭方向至多经 n 步精确线性搜索终止; 且每一 x_{i+1} 都是 $f(x)$ 在 x_0 和方向 d_0, \dots, d_i 所张成的线性流形 $\{x : x = x_0 + \sum_{j=0}^i \alpha_j d_j, \forall \alpha_j\}$ 中的极小点。

证明. 设 $U = \{x : x = x_0 + \sum_{j=0}^i \alpha_j d_j, \forall \alpha_j\}$, 则 $x_{i+1} = \min_{x \in U} f(x)$ 等价于

$$\nabla f(x_{i+1}) = 0 \iff [g_{i+1}^T d_1, g_{i+1}^T d_2, \dots, g_{i+1}^T d_i] = 0$$

所以, 只需证明 $\forall 1 \leq i \leq n$, 有 $g_i^T d_j = 0$ ($\forall 0 \leq j < i$) 成立, 由于

$$g_{k+1} - g_k = G(x_{k+1} - x_k) = \alpha G d_k \text{ 且 } g_{k+1}^T d_k = 0$$

则, 任意的 $j < i$ 有

$$\begin{aligned} g_i^T d_j &= (g_{j+1} + (g_i - g_{i-1} + g_{i-1} - g_{i-2} + \dots + g_{j+2} - g_{j+1}))^T d_j \\ &= \left(g_{j+1} + \sum_{k=j+1}^{i-1} \alpha_k d_j^T G d_k \right)^T d_j = g_{j+1}^T d_j + \sum_{k=j+1}^{i-1} \alpha_k d_j^T G d_k \\ &= 0 \quad (\text{第一式由于精确线性搜索为 } 0, \text{ 第二式由于共轭性为 } 0) \end{aligned}$$

由于 \mathbb{R}^n 空间可以视为由 n 个共轭向量所张成的, 当 $i = n$ 时, 有 $g_n^T d_j = 0$ ($j = 0, 1, \dots, n-1$), 所以 $g_n \equiv 0$, 所以共轭方向法至多经 n 步精确线性搜索终止. \square

4. 证明: 当极小化正定二次函数时, 共轭梯度法 FR 公式, PRP 公式和 Dixon 公式是等价的。

证明. 设正定二次函数为 $f(x) = \frac{1}{2} x^T G x - b^T x$, 第 k 步的搜索方向为 $d_k = -g_k + \beta_{k-1} d_{k-1}$, 由精确线性搜索可知 $g_{k+1}^T d_k = 0$, 则 $g_{k+1}^T (-g_k + \beta_{k-1} d_{k-1}) = 0$, 通过**定理 4.3.3** 可知 $g_{k+1}^T g_k = \beta_{k-1} g_{k+1}^T d_{k-1} = 0$, 于是

$$\begin{aligned} (\text{Dixon 公式}) \quad \beta_{k-1} &= -\frac{g_k^T g_k}{d_{k-1}^T g_{k-1}} = -\frac{g_k^T g_k}{(-g_{k-1} + \beta_{k-2} d_{k-2})^T g_{k-1}} \xrightarrow{\text{精确线性搜索条件}} \frac{g_k^T g_k}{g_{k-1}^T g_{k-1}} \quad (\text{FR 公式}) \\ &= \frac{g_k^T g_k + g_k^T g_{k-1}}{g_{k-1}^T g_{k-1}} = \frac{g_k^T (g_k - g_{k-1})}{g_{k-1}^T g_{k-1}} \quad (\text{PRP 公式}) \end{aligned}$$

\square