

3.1 二次型及其矩阵表示

含有 n 个变量 x_1, x_2, \dots, x_n 的二次齐次函数

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + \dots + a_{nn}x_n^2 + 2a_{12}x_1x_2 + \dots + 2a_{1n}x_1x_n + \dots + 2a_{n-1,n}x_{n-1}x_n$$

称为 n 元二次型, 简称为二次型。利用矩阵乘法, 二次型 f 可以表示为 $f = \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}$, 其中

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \text{ 是一个实对称矩阵, } \mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \text{ 是变量向量。}$$

例 3-1 求二次型 $f(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + 4x_2^2 + 4x_3^2 - 4x_1x_2 + 4x_1x_3 - 8x_2x_3$ 的矩阵 \mathbf{A} , 并计算该二次型的秩。

```
import sympy as sp
x1, x2, x3 = sp.symbols('x1 x2 x3') # 定义符号变量 x1, x2, x3
# 定义二次型多项式
f = x1**2 + 4 * x2**2 + 4 * x3**2 - 4 * x1 * x2 + 4 * x1 * x3 - 8 * x2 * x3
# 使用 sp.hessian() 函数直接生成二次型矩阵
A = sp.hessian(f, (x1, x2, x3)) / 2
print(A)
```

上述代码的输出结果:

```
Matrix([[ 1, -2,  2],
        [-2,  4, -4],
        [ 2, -4,  4]])
print(A.rank())
```

上述代码的输出结果:

```
1 # 该二次型的秩为 1
```

例 3-2 求实对称矩阵 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$ 所对应的二次型 f 。

```

import sympy as sp

def build_quadratic_form(A, symbols):
    X = sp.Matrix(symbols)           # 列向量
    return X.T @ A @ X              # 返回二次型

x1, x2 = sp.symbols('x1 x2')       # 定义符号变量 x1, x2
A = sp.Matrix([[2, 1], [1, 3]])    # 定义实对称矩阵 A
variables = [x1, x2]
quad_form = build_quadratic_form(A, variables)
# 展开二次型
simplified_form = sp.expand(quad_form[0, 0])
print(simplified_form)

```

上述代码的输出结果：

```
2 * x1**2 + 2 * x1 * x2 + 3 * x2**2
```

根据上述代码的输出结果可知，实对称矩阵 \mathbf{A} 对应的二次型为 $f(x_1, x_2) = 2x_1^2 + 2x_1x_2 + 3x_2^2$ 。

3.2 二次型的标准形与惯性定律

如果二次型

$$f = \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} \quad (3-1)$$

通过可逆线性变换 $\mathbf{X} = \mathbf{C}\mathbf{Y}$ 转换为关于 \mathbf{Y} 的二次型

$$f = k_1 y_1^2 + k_2 y_2^2 + \cdots + k_n y_n^2 \quad (3-2)$$

其中， \mathbf{C} 是一个可逆矩阵， k_1, k_2, \dots, k_n 是实数。这种形式的二次型(3-2)称为二次型(3-1)的一个标准形。在这种标准形中，二次型仅包含变量的平方项，没有交叉项，从而简化了分析和处理。

在二次型的标准形中：

- 系数为正的平方项的个数称为二次型的正惯性指数；
- 类似地，系数为负的平方项的个数称为二次型的负惯性指数；
- 正惯性指数与负惯性指数的和称为惯性指数。

设有二次型 $f = \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}$ ，若对于任何非零向量 $\mathbf{X} \neq 0$ ，恒有 $f = \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} > 0$ ，则称 f 为正定二次型，并称矩阵 \mathbf{A} 为正定矩阵。

例 3-3 已知二次型

$$f(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 - 2x_2^2 + x_3^2 + 2x_1x_2 - 4x_1x_3 + 2x_2x_3$$

(1) 计算标准形；(2) 计算正惯性指数；(3) 判断二次型是否正定。

```

>>> import sympy as sp
>>> x1, x2, x3 = sp.symbols('x1 x2 x3')           # 定义符号变量
# 定义二次型多项式
>>> f = x1**2 - 2 * x2**2 + x3**2 + 2 * x1 * x2 - 4 * x1 * x3 + 2 * x2 * x3

```

```

#使用 sp.hessian() 函数直接生成二次型矩阵
>>>A =sp.hessian(f, (x1, x2, x3)) / 2
>>>A
Matrix([
 [ 1, 1, -2],
 [ 1, -2, 1],
 [-2, 1, 1]])
>>>eigenvals =A.eigenvals()
#计算特征值
>>>eigenvals
# 3 个特征值都不重复
{-3: 1, 3: 1, 0: 1}
# 3 个特征值的出现次数都为 1
#提取并降序排列特征值
>>>eigenvalues =sorted(eigenvals.keys(), reverse=True)
>>>eigenvalues
[3, 0, -3]
>>>eigenvecs =A.eigenvecs()
#计算特征向量
#存储格式:特征值,特征值重复出现的次数,对应的特征向量
>>>eigenvecs[0]
#查看第一个特征向量
(-3, 1, [Matrix([ [ 1],
                  [-2],
                  [ 1]])])
#提取并排序特征向量(依据对应特征值从大到小的顺序)
>>>eigenvectors = [vec[2][0] for vec in sorted(eigenvecs, key=lambda x: -x[0])]
>>>for vec in eigenvectors:
    print(vec)
Matrix([[ -1], [0], [1]])
Matrix([[1], [1], [1]])
Matrix([[1], [-2], [1]])
>>>P =sp.Matrix.hstack(* eigenvectors)
#构造正交矩阵①
>>>P
Matrix([[ -1, 1,  1],
        [ 0, 1, -2],
        [ 1, 1,  1]])
>>>D =P.inv() @A @P
#计算对角矩阵
>>>D
Matrix([ [3, 0,  0],
        [0, 0,  0],
        [0, 0, -3]])
#计算标准形
>>>y1, y2, y3 =sp.symbols('y1 y2 y3')
>>>Y =sp.Matrix([y1, y2, y3])
>>>standard_form =sp.simplify(Y.T @D @Y) [0, 0]
>>>standard_form
3 * y1**2 - 3 * y3**2
#标准形:  $3y_1^2 - 3y_3^2$ 

```

① hstack()函数用于水平堆叠(horizontal stack)数组。

```
#计算正惯性指数
>>>positive_inertia =sum(1 for val in eigenvalues if val >0)
>>>positive_inertia
1
#判断二次型是否正定
>>>is_positive_definite =all(val >0 for val in eigenvalues)
>>>is_positive_definite
False
```

知识点补充:

all()函数用于检查一个可迭代对象(如列表、元组、集合等)中的所有元素是否都等价于 True。如果所有元素都为 True(或者在布尔上下文中被视为 True),则 all()函数返回 True;否则,只要有一个元素为 False(或者在布尔上下文中被视为 False),则返回 False。

```
>>>all([1, 'hello'])
True
```

下列代码展示了如何使用 NumPy 库中的 hstack()和 vstack()函数对数组进行水平和垂直堆叠操作。

```
>>>a =np.array([1, 2, 3])
>>>b =np.array([4, 5, 6])
>>>np.hstack((a, b))                                     #水平堆叠
array([1, 2, 3, 4, 5, 6])
>>>np.vstack((a, b))                                     #垂直堆叠(vertical stack)
array([[1, 2, 3],
       [4, 5, 6]])
```

使用单星(*)操作符从数据容器中解包(unpacking)数据。

```
>>>data = [1, 2, 3]
>>>print(data)
[1, 2, 3]
>>>print(*data)                                         #观察解包与不解包时不同的输出结果
1 2 3
```

3.3 正交变换二次型为标准形

用正交变换将二次型化为标准形的步骤如下:

- (1) 写出二次型对应的对称矩阵 \mathbf{A} ;
- (2) 计算特征值与特征向量: 求出矩阵 \mathbf{A} 的所有特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 及其对应的特征向量;
- (3) 正交归一化特征向量: 若特征值不同,则对应特征向量自然正交;若存在重根,则需使用施密特正交化方法对其进行正交化,再进行单位化,最终得到一组标准正交基;
- (4) 构造正交矩阵: 将上述单位化特征向量作为列向量,构造正交矩阵 \mathbf{P} ,满足 $\mathbf{P}^T \mathbf{A} \mathbf{P} = \mathbf{D}$;
- (5) 变量替换: 令 $\mathbf{Y} = \mathbf{P}^T \mathbf{X}$,则原二次型 $f(\mathbf{X}) = \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}$ 转换为 $f(\mathbf{Y}) = \mathbf{Y}^T \mathbf{D} \mathbf{Y}$,其中 \mathbf{D} 是对角

矩阵,其主对角线元素是 \mathbf{A} 的特征值;

(6) 写出标准形: 新的二次型表示为 $f(\mathbf{Y}) = \lambda_1 y_1^2 + \lambda_2 y_2^2 + \cdots + \lambda_n y_n^2$ 。

例 3-4 已知二次型 $f(x_1, x_2, x_3, x_4) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + 2x_1x_2 - 2x_1x_4 + 2x_2x_3 - 2x_3x_4$, 用正交变换将其化为标准形。

```
>>> from sympy import GramSchmidt
>>> x1, x2, x3, x4 = sp.symbols("x1 x2 x3 x4")      # 定义符号变量
# 定义二次型多项式
>>> f = x1**2 + x2**2 + x3**2 + x4**2 + 2 * x1 * x2 - 2 * x1 * x4 + 2 * x2 * x3 - 2 * x3 * x4
# 使用 sp.hessian() 函数直接生成二次型矩阵
>>> A = sp.hessian(f, (x1, x2, x3, x4)) / 2
>>> A
Matrix([
 [ 1, 1,  0, -1],
 [ 1, 1,  1,  0],
 [ 0, 1,  1, -1],
 [-1, 0, -1,  1]])
>>> eigenvals = A.eigenvals()                        # 计算特征值
>>> eigenvals
{3: 1, -1: 1, 1: 2}                                # 特征值 1 重复出现了 2 次
>>> eigenvalues = list(eigenvals.keys())             # 提取特征值
>>> eigenvalues
[3, -1, 1]
>>> eigenvecs = A.eigenvecs()                       # 计算特征向量
# 输出特征值、它们的重数(即重复次数)以及相应的特征向量
>>> for val, multiple, vecs in eigenvecs:
    print(f"特征值: {val}, 重复次数: {multiple}, 对应的特征向量: {[v.T for v in vecs]}")
```

上述代码的输出结果:

```
特征值: -1, 重复次数: 1, 对应的特征向量: [Matrix([[1, -1, 1, 1]])]
特征值: 1, 重复次数: 2, 对应的特征向量: [Matrix([[ -1, 0, 1, 0]]), Matrix([[0, 1, 0, 1]])]
特征值: 3, 重复次数: 1, 对应的特征向量: [Matrix([[ -1, -1, -1, 1]])]
# 排序特征值和特征向量
>>> eigenvecs_sorted = sorted(eigenvecs, key=lambda x: -x[0])
# 提取并归一化特征向量
>>> eigenvectors = []
>>> for val, mult, vecs in eigenvecs_sorted:
    if mult == 1:
        # 单个特征向量归一化, 注意使用 append(), 而不是 extend() 方法
        eigenvectors.append(vecs[0] / vecs[0].norm())
    else:
        ortho_vecs = GramSchmidt(vecs, orthonormal=True)
        eigenvectors.extend(ortho_vecs)
# 构造正交矩阵 P
```


3.4 数值优化算法

数值优化算法是用于寻找函数极值(最小值或最大值)的方法。下面介绍3种常见的数值优化算法,它们分别是牛顿法(Newton methods)、拟牛顿法(quasi-Newton methods)和共轭梯度法(conjugate gradient methods)。

1. 牛顿法

牛顿法是一种基于目标函数二阶泰勒展开的迭代优化算法,它利用函数的一阶导数和二阶导数信息来寻找极值点,具有较快的收敛速度。对于单变量目标函数 $f(x)$, 牛顿法的迭代更新公式为

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$$

其中, $f'(x_k)$ 表示函数 $f(x)$ 在点 x_k 处的一阶导数, $f''(x_k)$ 表示在该点的二阶导数。

对于具有两个变量的目标函数 $f(x_1, x_2)$, 牛顿法的迭代更新公式为 $x_{k+1} = x_k - \mathbf{H}^{-1}(x_k) \nabla f(x_k)$ 。其中, $x_k = [x_{1,k}, x_{2,k}]^T$; 梯度向量 $\nabla f(x_k) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_{1,k}}, \frac{\partial f}{\partial x_{2,k}} \right]^T$; Hessian

$$\text{矩阵 } \mathbf{H}(x_k) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_{1,k}^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_{1,k} \partial x_{2,k}} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_{2,k} \partial x_{1,k}} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_{2,k}^2} \end{bmatrix}。 \mathbf{H}^{-1}(x_k) \text{ 表示该 Hessian 矩阵的逆矩阵。}$$

对于一般的 n 维目标函数 $f(x)$, 牛顿法的迭代更新公式为 $x_{k+1} = x_k - \mathbf{H}^{-1}(x_k) \nabla f(x_k)$ 。其中, $\nabla f(x_k) \in \mathbb{R}^n$ 是梯度向量, $\mathbf{H}(x_k) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是 Hessian 矩阵。

```
def newton_method_2d(f, grad_f, hessian_f, x0, tol=1e-6, max_iter=100):
```

```
    """
```

```
    使用牛顿法在二维空间中寻找目标函数 f 的极小值点
```

```
    参数:
```

```
    f: 目标函数, 输入为 x(数组或元组), 输出是一个标量
```

```
    grad_f: f 的梯度函数, 返回梯度向量
```

```
    hessian_f: f 的 Hessian 矩阵函数, 返回一个 2x2 的矩阵
```

```
    x0: 初始猜测值, 一维数组, 形如 [x0, y0]
```

```
    tol: 收敛精度阈值, 当更新步长小于该值时停止迭代
```

```
    max_iter: 最大迭代次数
```

```
    返回值: 近似极小值点的坐标 x
```

```
    """
```

```
    x = x0
```

```
    # 初始化当前点为初始猜测值
```

```
    for i in range(max_iter):
```

```
        gradient = grad_f(x)
```

```
        # 计算当前点的梯度
```

```
        hessian = hessian_f(x)
```

```
        # 计算当前点的 Hessian 矩阵
```

```
        try:
```

```
            # 求解线性方程组 H * delta_x = gradient, 得到 delta_x
```

```
            delta_x = np.linalg.solve(hessian, gradient)
```

```
        except np.linalg.LinAlgError:
```

```

        # 如果 Hessian 矩阵不可逆, 抛出异常并终止迭代
        print("Hessian 矩阵是不可逆的!")
        break # 终止迭代
    # 判断是否收敛: 如果步长足够小, 说明已经接近极小值点
    if np.linalg.norm(delta_x) < tol:
        break
    x -= delta_x # 更新 x 值
return x # 返回找到的最优解

def f(x): # 定义目标函数 (x-1)^2 + (y-2)^2
    return (x[0] - 1)**2 + (x[1] - 2)**2

def grad_f(x): # 定义目标函数的梯度 (一阶导数)
    return np.array([2 * (x[0] - 1), 2 * (x[1] - 2)])

# 定义目标函数的 Hessian 矩阵 (二阶导数)
def hessian_f(x):
    return np.array([[2, 0], [0, 2]])

x0 = np.array([0.0, 0.0]) # 初始猜测点

optimal_x = newton_method_2d(f, grad_f, hessian_f, x0) # 运行牛顿法
print(f'最优解: { optimal_x }')
```

上述代码的输出结果:

最优解: [1. 2.]

2. 拟牛顿法

拟牛顿法旨在避免直接计算目标函数的 Hessian 矩阵, 从而降低计算复杂度, 同时保持较快的收敛速度。该类方法在每次迭代中通过更新一个近似的 Hessian 矩阵或其逆矩阵, 逐步逼近真实的二阶导数信息。其中, DFP(Davidon-Fletcher-Powell) 和 BFGS(Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) 算法是最具代表性的两种拟牛顿法。

```

from scipy.optimize import minimize①
import numpy as np

def f(x): # 定义目标函数
    return (x[0] - 1)**2 + (x[1] - 2)**2

def grad_f(x): # 定义目标函数的梯度
    return np.array([2 * (x[0] - 1), 2 * (x[1] - 2)])

x0 = np.array([0.0, 0.0]) # 初始猜测点
```

^① SciPy 中的 `scipy.optimize.minimize` 已经内置了牛顿法的多种变体, 支持自动计算梯度和 Hessian 矩阵, 适用于大多数非线性优化问题。

```

result = minimize(f, x0, method="BFGS",          # 使用 BFGS 拟牛顿法
                 jac=grad_f,                  # 提供梯度函数
                 options={
                     'gtol':1e-6,            # 梯度容差 (gradient tolerance)
                     'disp':True            # 显示收敛信息 Discription
                 })
print(f"最优解: {result.x}")

```

上述代码的输出结果:

```

Optimization terminated successfully.
  Current function value: 0.000000
  Iterations: 2
  Function evaluations: 3
  Gradient evaluations: 3
最优解: [1. 2.]

```

3. 共轭梯度法

共轭梯度法是一种用于求解大规模无约束优化问题的高效迭代算法,尤其适用于具有对称正定 Hessian 矩阵的二次目标函数。该方法无须直接计算或存储完整的 Hessian 矩阵,而是通过构造一组关于 Hessian 矩阵共轭的方向,从而在较少的迭代次数内快速逼近最优解。

在每次迭代中,共轭梯度法不仅利用当前点的梯度信息,还结合前一步的搜索方向,以确保新方向与之前所有方向关于 Hessian 矩阵是共轭的,即满足某种广义的正交性。

具体来说,对于一个给定的正定二次目标函数 $f(x) = \frac{1}{2}x^T \mathbf{A}x - b^T x + c$, 其中 \mathbf{A} 是对称正定矩阵,共轭梯度法通过以下步骤逐步逼近最小值点。

- 初始化: 选择初始点 x_0 , 并令初始搜索方向 $d_0 = -\nabla f(x_0)$ 。
- 迭代更新: 在每一步迭代中,首先计算最优步长 α_k , 然后更新当前位置为 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$; 接着根据新的梯度信息计算下一个搜索方向 d_{k+1} , 确保其与前一方向满足共轭条件。

共轭梯度法的主要优点在于,它不需要显式地计算或存储 Hessian 矩阵,同时对于严格凸的二次函数,能够在有限步数内精确收敛到最优解。此外,由于仅需存储少量向量,如梯度和搜索方向,该方法特别适合求解大规模稀疏系统。

```

from scipy.optimize import minimize
import numpy as np

def f(x):
    return (x[0] - 1)**2 + (x[1] - 2)**2          # 定义目标函数

def grad_f(x):
    return np.array([2 * (x[0]-1), 2 * (x[1]-2)]) # 定义目标函数的梯度

# 定义目标函数的 Hessian 矩阵 (二阶导数)

```



```
def hessian_f(x):
    return np.array([[2, 0], [0, 2]])

x0 = np.array([0.0, 0.0]) # 初始猜测点
result = minimize(f, x0, method="Newton-CG"①, jac=grad_f, hess=hessian_f)
print(f"最优解: {result.x}") # 最优解: [1. 2.]
```

3.5 小结

本章介绍了二次型的基本概念,包括如何从二次型多项式中提取系数并求出系数矩阵的秩。此外,还详细讲解了通过正交变换将二次型化为标准形的方法,计算其惯性指数,并判断该二次型是否为正定二次型。

数值优化算法通过迭代逼近函数极值点。牛顿法借助二阶导数实现快速收敛但计算负担较重,拟牛顿法则通过近似二阶信息在效率与精度间取得平衡,而共轭梯度法凭借独特的共轭方向设计,尤其适合处理高维稀疏问题。这些方法的共同特点是以梯度信息为基础,根据问题规模与计算条件灵活选用。

3.6 习题 3

1. 矩阵的秩(rank)是一个重要的概念,查阅资料简要列举其主要意义。
2. 查阅资料并回答 Python 的可迭代对象有哪些?(至少写出 3 种)

3. 已知 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$, $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & -2 \\ -2 & 6 \end{bmatrix}$, 计算 $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ 。

4. 求下列二次型的系数矩阵,并计算其秩。

(1) $f = 3x_1x_2 + 6x_1x_3 - x_2x_3 - 3x_3^2$;

(2) $f = 5x_1^2 + 2x_3^2 + x_1x_3 - 5x_2x_4 - 10x_3x_4$ 。

5. 写出实对称矩阵 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -2 \\ 1 & 0 & 4 \\ -2 & 4 & 6 \end{bmatrix}$ 的二次型 f 。

6. 求解正交变换 $\mathbf{X} = \mathbf{P}\mathbf{Y}$,把下列二次型化为标准形。

$$f = x_1^2 + x_2^2 + 10x_1x_2$$

7. 设二次型

$$f = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + 2x_1x_2 + 2x_3x_4$$

求二次型 f 的秩及其正、负惯性指数。

8. 判断下列二次型的正定性。

$$f = x_1^2 - 5x_2^2 + x_3^2 + 6x_1x_2 + 6x_1x_3 + 6x_2x_3$$

9. 已知二次型

^① Newton-CG 表示牛顿-共轭梯度法。

$$f = 2x_1^2 + 3x_2^2 + 3x_3^2 + 2mx_2x_3$$

可用正交变换为 $f = y_1^2 + 2y_2^2 + 5y_3^2$, 求 m 和所用的正交变换。

10. 求矩阵 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -2 & 2 \\ 2 & -2 \end{bmatrix}$ 的一个奇异值分解。

11. 对于二次型 $f(x) = x_1^2 + 3x_2^2 - 2x_1x_2$: (1) 手动计算梯度 ∇f 和 Hessian \mathbf{H} ; (2) 用牛顿法实现求解(初始点 $x_0 = [5, 5]$), 验证是否一步收敛。

12. 对于二次型 $f(x) = \frac{1}{2}x^T \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} x - [1 \ 2]x$, 手动推导前两步共轭梯度法的搜索方向 d_0, d_1 和迭代点 x_1, x_2 。