МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені І. І. МЕЧНИКОВА
ФАКУЛЬТЕТ МАТЕМАТИКИ, ФІЗИКИ ТА ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ

А. Т. Яровий, Є. М. Страхов, О. Б. Васильєв

МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ

НАВЧАЛЬНИЙ ПОСІБНИК
для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти
спеціальностей 111 Математика, 113 Прикладна математика,
123 Комп’ютерна інженерія

ОДЕСА
ОНУ
2025

УДК 517.97,519.85
Я76

Автори:

А. Т. Яровий, кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри оптимального керування і економічної кібернетики;

Є. М. Страхов, кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри оптимального керування і економічної кібернетики;

О. Б. Васильєв, кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри оптимального керування і економічної кібернетики.

Рецензенти:

А. В. Плотніков, доктор фізико-математичних наук, профессор, професор кафедри інформаційних технологій та прикладної математики Одеської державної академії будівництва та архітектури;

В. М. Пивоварчик, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри вищої математики і статистики ДЗ «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського»;

Ю. С. Процеров, кандидат фізико-математичних наук, доцент, завідувач кафедри методів математичної фізики Одеського національного університету імені І. І. Мечникова.

Рекомендовано до видання вченою радою ОНУ імені І. І. Мечникова.
Протокол № 4 від 29 жовтня 2024 р.

Яровий А. Т.

Я76 Методи оптимізації [Електронний ресурс] : навч. посіб. для здобув. першого (бакалавр.) рівня вищ. освіти спец. 111 Математика, 113 Прикладна математика, 123 Комп'ютерна інженерія / А. Т. Яровий, Є. М. Страхов, О. Б. Васильєв. – Електронні текстові дані (1 файл : 1,5 МБ). – Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2025. – 152 с.

ISBN 978-966-186-336-0

Навчальний посібник складено відповідно до програм обов'язкових курсів «Методи оптимізації», «Методи оптимізації та дослідження операцій» та вибіркового курсу «Оптимізація і системний аналіз» для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти спеціальностей 111 Математика, 113 Прикладна математика, 123 Комп'ютерна інженерія. Розглядаються аналітичні і чисельні методи розв'язування задач нелінійного програмування, теорія опуклого програмування. Багато уваги приділяється практичному застосуванню чисельних методів оптимізації, аналізу переваг та недоліків кожного методу.

Посібник буде корисний здобувачам, які вивчають дисципліни «Методи оптимізації», «Методи оптимізації та дослідження операцій» та суміжні дисципліни, а також усім, хто цікавиться застосуванням математичних методів оптимізації у різноманітних галузях людської діяльності.

УДК 517.97, 519.85

ISBN 978-966-186-336-0

Зміст

Вступ

Темпи розвитку економіки, розв'язання багатьох соціальних проблем залежать від інтенсивності впровадження досягнень науково-технічного прогресу в галузях народного господарства. У свою чергу, цю проблему неможливо розв'язати без швидкого розвитку і впровадження в усі сфери людської діяльності сучасних засобів обчислювальної техніки і прикладної математики.

Одним з розділів прикладної математики, до якого інженерно-технічні працівники і економісти проявляють підвищений інтерес, є мінімізація функцій і функціоналів. Велика кількість різноманітних задач і методів їх розв'язання обумовлює мати посібники, в яких у стислій формі було б викладено алгоритми найвідоміших методів і методику їх застосування. До цього спонукають також нові форми навчання студентів.

Основне завдання посібника — допомога студентам в опануванні базових алгоритмів розв'язування задач мінімізації функцій багатьох змінних.

Частина I.

Аналітичні методи мінімізації функцій

1 Мінімізація функцій однієї змінної

1.1. Необхідні та достатні умови екстремуму

Далі будемо розглядати евклідовий простір. Нехай на числовій прямій E^1 задана скалярна функція $\varphi(x)$. Розглянемо задачу пошуку екстремальних точок, тобто точок, в яких досягається мінімальне або максимальне значення функції $\varphi(x)$.

Сформулюємо деякі означення.

Означення 1.1. *Точка x^* називається точкою* ***глобального (абсолютного) мінімуму функції*** $\varphi(x)$, *якщо умова $\varphi(x^*) \leqslant \varphi(x)$ виконується для всіх $x \in E^1$.*

Означення 1.2. *Якщо для достатньо малого $\varepsilon > 0$ виконується нерівність $\varphi(x^*) \leqslant \varphi(x)$ для всіх $x \in E^1$ таких, що $|x - x^*| \leqslant \varepsilon$, то точка x^* називається точкою* ***локального (відносного) мінімуму функції*** $\varphi(x)$.

Означення 1.3. *Точка x^* називається точкою* ***строгого мінімуму*** *(у локальному або глобальному сенсі), якщо відповідні нерівності в означеннях точок локального і глобального мінімумів виконуються як строгі (при $x \neq x^*$).*

Означення точок локального і глобального максимумів вводяться аналогічно.

Зазначимо, що точки глобального мінімуму є точками локального мінімуму. І тому далі розглядатимемо тільки точки локального мінімуму.

Теорема 1.1 (необхідна умова екстремуму першого порядку). *Нехай функція $\varphi(x)$ визначена і диференційовна на E^1. Якщо x^* — точка локального мінімуму (максимуму), то у ній перша похідна функції дорівнює нулю:*

$$\frac{\mathrm{d}\varphi(x^*)}{\mathrm{d}x} = 0. \tag{1.1}$$

Означення 1.4. *Точки, що задовольняють умові (1.1), називаються* ***ста-***

ціонарними.

Приклад 1.1. Знайти стаціонарні точки функції $\varphi(x) = \frac{1}{3}x^3 - 5x^2 + 24x + 6$. Знайдемо нулі першої похідної: $\frac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x} = x^2 - 10x + 24 = 0$. Маємо $x^1 = 4$, $x^2 = 6$. Отже, у точках x^1 і x^2 функція може досягати екстремальних значень. ☑

Теорема 1.2 (необхідна умова екстремуму другого порядку). *Нехай функція $\varphi(x)$ визначена і двічі диференційовна на E^1. Тоді у точці локального мінімуму (максимуму) друга похідна функції невід'ємна (недодатна):*

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x^*)}{\mathrm{d}x^2} \geqslant 0 \quad (\leqslant 0).$$

Приклад 1.2. Розглянемо ту ж саму функцію $\varphi(x) = \frac{1}{3}x^3 - 5x^2 + 24x + 6$. Друга похідна має вигляд $\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} = 2x - 10$. У стаціонарній точці $x^1 = 4$ друга похідна дорівнює (-2), тобто від'ємна. У цій точці може досягатися максимум функції. У точці $x^2 = 6$ друга похідна додатна, а значить у ній може досягатися мінімум функції. ☑

Теорема 1.3 (достатня умова екстремуму). *Нехай функція $\varphi(x)$ визначена, двічі диференційовна на E^1. Якщо у стаціонарній точці x^* виконується умова $\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x^*)}{\mathrm{d}x^2} > 0$ (< 0), то точка x^* — точка локального мінімуму (максимуму) функції $\varphi(x)$.*

Приклад 1.3. Розглядається функція $\varphi(x) = \frac{1}{3}x^3 - 5x^2 + 24x + 6$. У стаціонарній точці $x^1 = 4$ друга похідна дорівнює (-2). Отже, у цій точці досягається максимум функції, а у точці $x^2 = 6$ друга похідна дорівнює 2, тобто у ній досягається мінімум. ☑

Якщо у стаціонарній точці x^* друга похідна дорівнює нулю, то питання про мінімум чи максимум у цій точці залишається відкритим.

Теорема 1.4 (загальна достатня умова екстремуму). *Нехай функція $\varphi(x)$ визначена на E^1 і має неперервні похідні до k-го порядку включно. Якщо у точці x^* похідні до $(k-1)$-го порядку дорівнюють нулю:*

$$\frac{\mathrm{d}\varphi(x^*)}{\mathrm{d}x} = 0, \ldots, \frac{\mathrm{d}^{k-1}\varphi(x^*)}{\mathrm{d}x^{k-1}} = 0, \text{ але } \frac{\mathrm{d}^k\varphi(x^*)}{\mathrm{d}x^k} \neq 0, \text{ то}$$

1) x^* є точкою локального мінімуму, якщо k — парне число і $\frac{\mathrm{d}^k\varphi(x^*)}{\mathrm{d}x^k} > 0$;

2) x^* є точкою локального максимуму, якщо k — парне число і $\dfrac{\mathrm{d}^k \varphi\left(x^*\right)}{\mathrm{d} x^k}<0$;

3) x^* не є екстремальною точкою, якщо k — непарне число.

Приклад 1.4. Розглянемо функцію $\varphi(x)=e^x+e^{-x}+2 \cos x$. Точка $x=0$ — стаціонарна точка, тому що $\varphi'(0)=\left.e^x-e^{-x}-2 \sin x\right|_{x=0}=0$. Далі отримаємо:

$$
\begin{aligned}
\varphi''(x)=e^x+e^{-x}-2 \cos x, &\quad \varphi''(0)=0, \\
\varphi'''(x)=e^x-e^{-x}+2 \sin x, &\quad \varphi'''(0)=0, \\
\varphi^{IV}(x)=e^x+e^{-x}+2 \cos x, &\quad \varphi^{IV}(0)=4.
\end{aligned}
$$

Так як першою не перетворилась на нуль похідна четвертого порядку і вона додатна, то в точці $x=0$ досягається локальний мінімум функції. ☑

Далі сформулюємо необхідну умову мінімуму функції на відрізку $[a; b]$.

Теорема 1.5. *Якщо точка $x^*=a$ є точкою мінімуму функції $\varphi(x)$ на відрізку $[a; b]$, то $\dfrac{\mathrm{d} \varphi\left(x^*\right)}{\mathrm{d} x} \geqslant 0$, а якщо $x^*=b$ — точка мінімуму, то $\dfrac{\mathrm{d} \varphi\left(x^*\right)}{\mathrm{d} x} \leqslant 0$.*

1.2. Чисельні методи одновимірної мінімізації

Вище показано, що локальний мінімум функції $\varphi(x)$ знаходиться серед коренів рівняння $\dfrac{\mathrm{d} \varphi(x)}{\mathrm{d} x}=0$. Тільки в окремих випадках розв'язок цього рівняння вдається знайти в явному вигляді. Як правило, задача пошуку коренів рівняння $\dfrac{\mathrm{d} \varphi(x)}{\mathrm{d} x}=0$ приблизно так само складна, як і задача мінімізації функції $\varphi(x)$. Обидві ці задачі розв'язуються чисельно. При цьому для розв'язування задач мінімізації можна використовувати чисельні методи знаходження коренів рівняння, але методи, що розроблені спеціально для задач мінімізації, є більш ефективними.

Перерахуємо причини окремого розгляду чисельних методів пошуку екстремуму функції однієї змінної.

По-перше, ці алгоритми використовуються у багатьох алгоритмах пошуку екстремуму функцій багатьох змінних.

По-друге, класи функцій однієї змінної служать зручною моделлю для теоретичного дослідження ефективності методів оптимізації.

По-третє, іноді вдається, використовуючи ті чи інші прийоми, безпосередньо за допомогою алгоритмів одновимірної оптимізації одержати розв'язок багатовимірних задач.

Означення 1.5. *Функція $\varphi(x)$ називається* ***унімодальною*** *на $R = [a;b]$, якщо існує така точка $x_0 \in [a;b]$, що*

$$\varphi(x_1) > \varphi(x_2), \text{ якщо } x_1 < x_2 < x_0, \quad x_1, x_2 \in R,$$
$$\varphi(x_1) < \varphi(x_2), \text{ якщо } x_0 < x_1 < x_2, \quad x_1, x_2 \in R.$$

Лема 1.1. *Нехай функція є унімодальною на R, $x_1, x_2 \in R$, $x_1 < x_2$. Тоді, якщо $\varphi(x_1) \leqslant \varphi(x_2)$, то точка мінімуму x^* така, що $x^* \leqslant x_2$; якщо ж $\varphi(x_1) \geqslant \varphi(x_2)$, то $x^* \geqslant x_1$.*

Виникає питання, а як же знайти проміжок $R = [a;b]$, на якому знаходиться точка мінімуму? Це можна зробити так. Якщо припустити, що множина R необмежена, то за допомогою леми легко побудувати процес, що дозволяє визначити відрізок, якому належить точка мінімуму. Для цього обчислимо значення функції в точках x_1, $x_2 = x_1 + h$, де $h > 0$.

Нехай, наприклад, $\varphi(x_1) > \varphi(x_2)$. Якщо R обмежена зверху числом C, то точка мінімуму належить $[x_1; C]$. Якщо ж R необмежена зверху, то варто обчислювати значення $\varphi(x_i)$; $(x_i = x_{i-1} + h,\ i = 3, 4, \ldots)$ доти, поки не буде знайдена точка x_i, що $\varphi(x_i) \geqslant \varphi(x_{i-1})$. Згідно з лемою точка мінімуму належить проміжку $[x_{i-2}; x_i]$.

1.2.1. Симетричні методи

Зробимо опис довільного симетричного методу мінімізації унімодальної функції $\varphi(x)$ на $[a;b]$.

На проміжку $[a;b]$ (його ще називають **інтервалом невизначеності**) обираємо дві симетричні відносно середини відрізка точки x_1 і x_2, обчислюємо $\varphi(x_1)$ і $\varphi(x_2)$. Якщо $\varphi(x_1) \leqslant \varphi(x_2)$, то згідно з лемою точка мінімуму належить $[a; x_2]$, інакше вона належить $[x_1; b]$. Ми отримали задачу мінімізації унімодальної функції на більш вузькому відрізкові $[a; x_2]$, або $[x_1; b]$. На новому відрізку знову знаходимо за тим же алгоритмом дві симетричні точки і т. д. Нехай ми зменшили наш відрізок до $[a_n; b_n]$. Якщо $b_n - a_n \leqslant 2\varepsilon$, де ε — точність знаходження точки мінімуму, то за точку мінімуму приймаємо точку $\dfrac{a_n + b_n}{2}$.

Зрозуміло, що способів вибору двох симетричних точок на $[a;b]$ є нескінченна кількість. Розглянемо деякі з них.

Метод поділу відрізку навпіл

Симетричні точки x' та x'' обираються у такий спосіб:

$$x' = a + \frac{b-a}{4}, \quad x'' = b - \frac{b-a}{4}.$$

Точки x' та x'' разом із серединою відрізку $[a; b]$ ділять його на чотири рівні частини. Таким чином, на кожному кроці довжина інтервалу невизначеності зменшується вдвічі.

Метод дихотомії

У методі дихотомії точки x' та x'' обираються симетрично до середини відрізку $[a; b]$ на відстані $\frac{\delta}{2}$, де δ — мале додатне число ($\delta < \varepsilon$, де ε — точність пошуку мінімуму). Розрахункові формули мають вигляд

$$x' = \frac{a+b-\delta}{2}, \quad x'' = \frac{a+b+\delta}{2}.$$

Якщо відрізок $[a_k; b_k]$ вміщує точку мінімуму x^*, то його довжина така:

$$b_k - a_k = \frac{b-a}{2^k} + \left(1 - \frac{1}{2^k}\right)\delta.$$

За наближену точку мінімуму обираємо точку $\overline{x}^* = \frac{1}{2}(a_k + b_k)$ і при цьому припускаємося похибки

$$|x^* - \overline{x}^*| \leqslant \frac{1}{2}(b_k - a_k) < \frac{b-a}{2^{k+1}} + \delta.$$

Приклад 1.5. Розв'язати задачу методом дихотомії:

$$\min_{[2;3]} x^2, \quad \varepsilon = 0.2, \quad \delta = 0.05.$$

Розв'язування. Знаходимо середню точку відрізка $[2; 3]$. Це буде точка $\overline{x} = 2.5$. Далі знаходимо дві симетричні відносно середини відрізка точки: $x' = \overline{x} - \frac{\delta}{2} = 2.5 - 0.025 = 2.475$; $x'' = \overline{x} + \frac{\delta}{2} = 2.5 + 0.025 = 2.525$. Так як $\varphi(x') = (2.475)^2 < \varphi(x'') = (2.525)^2$, то точка мінімуму знаходиться на відрізку $[a; x''] = [a_1; b_1] = [2; 2.525]$. Довжина цього відрізка дорівнює $b_1 - a_1 = 2.525 - 2 = 0.525 > 2\varepsilon = 0.4$. Це означає, що продовжуємо знаходити нові дві симетричні точки.

> Середня точка відрізку $[a_1; b_1]$ дорівнює $\overline{x} = \dfrac{a_1 + b_1}{2} = \dfrac{2 + 2.525}{2} = 2.2625$. Тоді дві симетричні точки будуть такі: $x' = 2.2625 - 0.025 = 2.2375$, $x'' = 2.2625 + 0.025 = 2.2875$. Так як $\varphi(x') = (2.2375)^2 < \varphi(x'') = (2.2875)^2$, то відрізок, на якому знаходиться точка мінімуму, буде таким: $[a_2; b_2] = [2; 2.2875]$. Довжина цього відрізка дорівнює $b_2 - a_2 = 2.2875 - 2 = 0.2875 < 2\varepsilon = 0.4$.
> Далі знаходимо середню точку відрізка $[a_2; b_2]$: $\overline{x} = \dfrac{2 + 2.2875}{2} = 2.14375$. За наближену точку мінімуму візьмемо точку $\overline{x}$, тобто $\tilde{x}^* = \overline{x} = 2.14375$, при цьому припустилися такої похибки: $|x^* - \tilde{x}^*| \leqslant \dfrac{1}{2}(b_2 - a_2) = 0.14375$. Вона менша за заявлену похибку у 0.2. ☑

Метод золотого перетину

У цьому методі точки x' та x'' ділять відрізок $[a; b]$ у золотому відношенні.

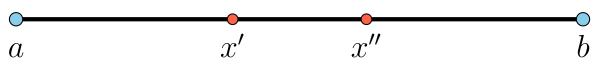
Означення 1.6. *Кажуть, що точка ділить відрізок у відношенні* ***золотого перетину***[1]*, якщо відношення довжини відрізка до більшої частини дорівнює відношенню більшої частини до меншої.*

На відрізку $[a; b]$ є дві симетричні відносно його кінців точки x' и x'' такі, що

$$\frac{b-a}{b-x'} = \frac{b-x'}{x'-a} = \frac{b-a}{x''-a} = \frac{x''-a}{b-x''} = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618.$$

Константа $\varphi = \dfrac{1+\sqrt{5}}{2}$ має назву пропорції золотого перетину.

Зазначимо, що одночасно точка x' утворює золотий перетин відрізку $[a; x'']$, а точка x'' — відрізку $[x'; b]$.



Точки золотого перетину відрізку $[a; b]$

Отже, у методі золотого перетину точки x', x'' на відрізку $[a; b]$ обираються у

---

[1]Вважається, що цей термін уперше ввів Леонардо да Вінчі. Пропорції золотого перетину пов'язують з естетичним сприйняттям форми. Відомо багато прикладів їх використання у живопису, скульптурі, архітектурі, музиці (див., наприклад, *Волошинов А. В. Математика и искусство. — М.: Просвещение, 1992. — 335 с.*).

такий спосіб:

$$x' = a + \frac{3-\sqrt{5}}{2}(b-a),$$
$$x'' = a + \frac{\sqrt{5}-1}{2}(b-a).$$

На кожному кроці обчислюється величина $b_n - a_n$. Якщо $b_n - a_n < 2\varepsilon$, то за точку мінімуму беремо $x^* = \dfrac{a_n + b_n}{2}$, і на цьому обчислення закінчуємо.

Приклад 1.6. Методом золотого перетину знайти мінімум функції $\varphi(x) = x^2$ на відрізку $[1; 2]$ з точністю $\varepsilon = 0.2$.
Розв'язування. Так як $b - a = 2 - 1 = 1 > 2\varepsilon = 0.4$, то розраховуємо дві симетричні точки

$$x' = 1 + \frac{3-2.236}{2}(2-1) = 1.382,$$
$$x'' = 1 + \frac{2.236-1}{2}(2-1) = 1.618.$$

Так як $\varphi(1.382) < \varphi(1.618)$, то $a = 1$, $b = 1.618$. Величина $b - a = 1.618 - 1 = 0.618 > 2\varepsilon = 0.4$, тому на новому відрізку $[1; 1.618]$ знаходимо дві симетричні точки

$$x' = 1 + 0.382 \cdot 0.618 = 1.236,$$
$$x'' = 1 + 0.618 \cdot 0.618 = 1.382.$$

Маємо $\varphi(x') < \varphi(x'')$. Тоді $a = 1$, $b = 1.382$. Так як $b - a = 0.382 < 2\varepsilon = 0.4$, то, взявши $x^* = \dfrac{a+b}{2} = 1.191$, ми отримали точку мінімуму із заданою точністю. ☑

Метод Фібоначчі

У цьому методі використовуються числа Фібоначчі, що визначаються у такий спосіб:

$$F_1 = F_2 = 1, \qquad F_{n+2} = F_{n+1} + F_n.$$

Параметр n — кількість кроків, що використовуються у методі, знаходиться з нерівності

$$F_{n+1} < \frac{b-a}{\varepsilon} \leqslant F_{n+2}, \tag{1.2}$$

де ε — точність знаходження точки мінімуму. Якщо $n = 1$, то візьмемо $x_1' = x_1'' = \dfrac{a+b}{2}$. Тоді найближче значення точки мінімуму дорівнюватиме $x^* = \dfrac{a+b}{2}$.

Якщо $n \geqslant 2$, то обираємо дві точки

$$x_1' = a + \frac{F_n}{F_{n+2}}(b-a), \quad x_1'' = a + \frac{F_{n+1}}{F_{n+2}}(b-a) = a + b - x_1',$$

розташованих на $[a; b]$ симетрично. Подальші дії описані вище. Якщо знайдено відрізок $[a_k; b_k]$ довжини

$$b_k - a_k = \frac{F_{n-k+3}}{F_{n+2}}(b-a),$$

то обираємо на ньому дві точки

$$x_k' = a_k + \frac{F_{n-k+1}}{F_{n+2}}(b-a) \quad \text{і} \quad x_k'' = a_k + \frac{F_{n-k+2}}{F_{n+2}}(b-a).$$

Далі за описаним вище алгоритмом звужуємо відрізок $[a_k; b_k]$ доти, поки k не буде дорівнювати n. Якщо $k = n$, то довжина відрізку $[a_k; b_k]$ дорівнює

$$b_n - a_n = \frac{F_3}{F_{n+2}}(b-a) = \frac{2(b-a)}{F_{n+2}},$$

а точки

$$x_n' = a_n + \frac{F_1}{F_{n+2}}(b-a) = a_n + \frac{b-a}{F_{n+2}},$$
$$x_n'' = a_n + \frac{F_2}{F_{n+2}}(b-a) = a_n + \frac{b-a}{F_{n+2}}$$

співпадають і ділять відрізок $[a_n; b_n]$ навпіл. Приймаючи $x^* = x_n' = x_n''$ за точку мінімуму ми припускаємося похибки не більше ніж ε незалежно від вигляду функції $\varphi(x)$.

Зауваження 1.1. Як у методі Фібоначчі, так і у методі золотого перетину не варто користуватись співвідношенням $x_k'' = a_k + b_k - x_k'$. Це пов'язано з тим, що методи не стійкі до похибок. Накопичення похибок може призвести до того, що при великій кількості кроків точки x_k' і x_k'' будуть лежати поза відрізком $[a_k; b_k]$. Тому на кожному кроці згідно з формулами необхідно знаходити дві симетричні точки.

Приклад 1.7. Методом Фібоначчі знайти мінімум функції $\varphi(x) = x^2$ на відрізку $[1; 2]$ з точністю $\varepsilon = 0.2$.

Розв'язування. Спочатку визначимо кількість кроків n. Вона визначається з умови (1.2). Випишемо декілька чисел Фібоначчі: $1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, \ldots$.

Так як $\dfrac{b-a}{\varepsilon} = 5$, то з нерівності $F_{n+1} < 5 \leqslant F_{n+2}$ отримаємо, що $n = 3$. Покладемо $a_1 = a$, $b_1 = b$.
Беремо $k = 1$. Тоді

$$x_1' = 1 + \frac{F_3}{F_5} = 1.4, \quad x_1'' = 1 + \frac{F_4}{F_5} = 1.6.$$

Так як $\varphi(1.4) < \varphi(1.6)$, то $[a_2; b_2] = [1; 1.6]$.
При $k = 2$

$$x_2' = 1 + \frac{F_2}{F_5} = 1.2, \quad x_2'' = 1 + \frac{F_3}{F_5} = 1.4.$$

(Зазначимо, що $x_2'' = x_1'$.) І так як $\varphi(1.2) < \varphi(1.4)$, то $[a_3; b_3] = [1; 1.4]$.
Тепер $k = n = 3$, тоді

$$x_3' = 1 + \frac{F_1}{F_5} = 1.2, \quad x_3'' = 1 + \frac{F_2}{F_5} = 1.2.$$

За точку мінімуму приймаємо точку $x = 1.2$. Із заданою похибкою точку мінімуму знайдено. ☑

1.3. Завдання для самостійної роботи

1) Знати усі означення і формулювання теорем.
2) Знати алгоритми методів ділення відрізка навпіл, золотого перетину і Фібоначчі.
3) Вказаними методами знайти точку мінімуму функції

$$\varphi(\mathbf{x}) = (x-n)^2 + (x+i)^2$$

з точністю $\varepsilon = 0.1$. Відрізок $[a; b]$ за довжиною більше 1. Параметри: для першої групи $n = 3$, для другої групи $n = 7$; i — порядковий номер студента у списку групи.

1.4. Питання для самоконтролю

1) Дати означення точок локального і глобального мінімуму функції однієї змінної.
2) Сформулювати необхідні умови локального мінімуму.

3) Сформулювати достатню умову локального мінімуму.
4) Сформулювати алгоритм симетричних методів.
5) Сформулювати алгоритм методу золотого перетину.
6) Сформулювати алгоритм методу Фібоначчі.
7) Сформулювати «зауваження» до алгоритмів золотого перетину і Фібоначчі.

2

Мінімізація функцій багатьох змінних без обмежень

Розглядається евклідовий простір E^n, елементами якого є вектори-стовпчики. Для позначення вектора-рядка використовується символ $(^\top)$ — транспонування.

Скалярний добуток двох векторів $\mathbf{x}^1$ і $\mathbf{x}^2$ визначається так: $(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2) = \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^1 x_i^2$.

Під довжиною або нормою (евклідовою нормою) вектора $\mathbf{x} \in E^n$ будемо розуміти число

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}.$$

Для скалярної функції $\varphi(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in E^n$ символи $\dfrac{\partial \varphi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$ і $\dfrac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^2}$ означають

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}, \qquad \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial x^2} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_1} \\ \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x_n \partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_n} & \dots & \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}.$$

Вектор $\dfrac{\partial \varphi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$ — це градієнт функції $\varphi(\mathbf{x})$ в точці $\mathbf{x}$. Він показує напрямок найшвидшого зростання функції у невеликому околі точки x. Матриця $\dfrac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^2}$ — це матриця Гессе.

Означення 2.1. *Симетрична матриця* $\mathbf{A}$ *виміру* $n \times n$ *називається* ***невід'ємною***, *якщо відповідна їй квадратична форма є невід'ємно означеною, тобто* $\mathcal{I} = \mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} \geqslant 0$ *для всіх* $\mathbf{x} \in E^n$.

Означення 2.2. *Симетрична матриця* $\mathbf{A}$ *виміру* $n \times n$ *називається* ***додатною***, *якщо відповідна їй квадратична форма є додатно означеною, тобто*

$\mathcal{I} = \mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} > 0$ *для всіх* $\mathbf{x} \in E^n$, $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$.

Аналогічно вводяться поняття недодатної і від'ємної матриці.

Далі розглядатимемо задачу знаходження екстремальних точок функції $\varphi(x)$, тобто точок мінімуму і максимуму.

Означення 2.3. *Точка* $\mathbf{x}^* \in R$ *називається* ***точкою глобального мінімуму функції*** $\varphi(\mathbf{x})$ *на множині* R, *якщо*

$$\varphi(\mathbf{x}^*) \leqslant \varphi(\mathbf{x}) \quad \text{для всіх } \mathbf{x} \in R,$$

де R *— деяка множина точок* $\mathbf{x} \in E^n$.

Множину точок глобального мінімуму функції позначимо через X_*.

Означення 2.4. *Точка* $\mathbf{x}^* \in R$ *називається* ***точкою локального мінімуму*** *функції* $\varphi(\mathbf{x})$ *на множині* R, *якщо знайдеться константа* $\varepsilon > 0$ *така, що*

$$\varphi(\mathbf{x}^*) \leqslant \varphi(\mathbf{x}) \quad \text{для всіх } \mathbf{x} \in R, \text{ що задовольняють умові } \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| \leqslant \varepsilon.$$

Означення 2.5. *Точка* $\mathbf{x}^* \in R$ *називається точкою* ***строгого мінімуму*** *(у локальному чи глобальному сенсі), якщо відповідні нерівності у наведених означеннях виконуються як строгі (при* $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$*).*

Аналогічно вводяться означення точок локального і глобального максимуму.

Умовне позначення $\varphi(\mathbf{x}) \to \text{extr}$, $\mathbf{x} \in R$ застосовується при розгляданні задачі пошуку екстремуму функції $\varphi(\mathbf{x})$) на множині R. Запис

$$\varphi(\mathbf{x}) \to \min \text{ або } \varphi(\mathbf{x}) \to \max$$

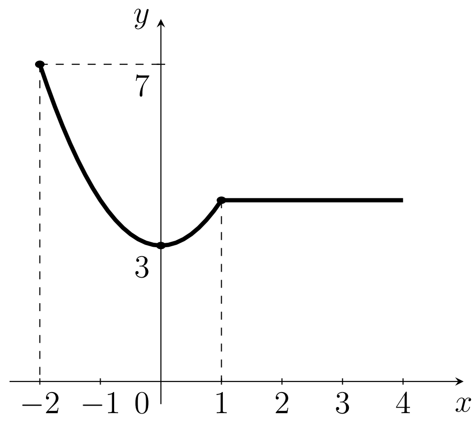
означає, що досліджується тільки задача мінімізації або максимізації функції $\varphi(\mathbf{x})$.

Так як довільна задача максимізації функції $\varphi(\mathbf{x})$ може бути записана у вигляді задачі мінімізації функції $-\varphi(\mathbf{x})$, то всі теоретичні міркування можна проводити тільки для задачі на мінімум.

Розглянемо декілька прикладів.

Приклад 2.1. Розглянемо функцію

$$\varphi(x) = \begin{cases} x^2 + 3, & x \in [-2; 1], \\ 4, & x \geqslant 1. \end{cases}$$

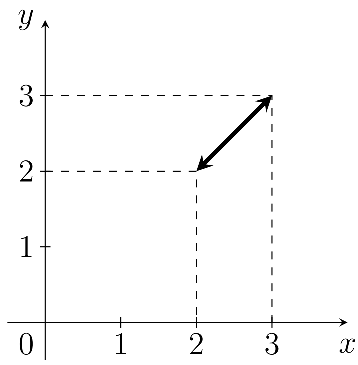


Ця функція на $[-2; +\infty)$ має одну точку строгого глобального мінімуму $x^* = 0$, $\min\limits_{x \in R} \varphi(x) = \varphi(0) = 3$. Точка $x^* = -2$ є точкою строгого локального максимуму, $\varphi(x^*) = \varphi(-2) = 7$. Промінь $[1; +\infty)$ є множиною нестрогого максимуму, $\max \varphi(x) = 4$.

Приклад 2.2. Функція $\varphi(x) = e^{-x}$, $R = \{x \in E^1 \mid x \geqslant 1\}$ має одну точку строгого глобального максимуму $x^* = 1$ і не має точок мінімуму.

Приклад 2.3.

Функція $\varphi(x) = x$ не досягає екстремуму в жодній з точок множини $R = \{x \in E^1 \mid 2 < x < 3\}$.



Узагальненням поняття найменшого значення функції є визначення нижньої межі.

Означення 2.6. *Нехай функція $\varphi(\mathbf{x})$ обмежена знизу на множині R. Число φ_* називається* ***нижньою межею (інфімумом)*** *$\varphi(\mathbf{x})$, якщо воно є найбільшим з нижніх меж функції $\varphi(\mathbf{x})$ на R, тобто*

1) $\varphi_* \leqslant \varphi(\mathbf{x}), \quad \forall\, \mathbf{x} \in R$,
2) $\forall\, \varepsilon > 0 \quad \exists\, \mathbf{x}_\varepsilon \in R: \ \varphi(\mathbf{x}_\varepsilon) < \varphi_* + \varepsilon$.

Якщо функція $\varphi(\mathbf{x})$ обмежена знизу на R, то існує єдина скінченна нижня межа цієї функції на множині R. Приймаючи у якості інфімуму необмеженої знизу на R функції $\varphi_* = -\infty$, можна вважати, що нижня межа (на відміну від мінімуму) існує завжди.

Аналогічно вводиться поняття верхньої межі (супремуму), як найменшої верхньої межі функції $\varphi(\mathbf{x})$ на R.

Розглянуті приклади показують, що не завжди існує точка, в якій досягається нижня межа цільової функції. Тому краще розглянути узагальнену задачу оптимізації — побудову мінімізуючої послідовності.

Означення 2.7. *Послідовність точок $\left\{\mathbf{x}^k\right\}$ з припустимої множини R називається **мінімізуючою** для функції $\varphi(\mathbf{x})$, якщо*

$$\lim_{k\to\infty} \varphi\left(\mathbf{x}^k\right) = \inf_{\mathbf{x}\in R} \varphi(\mathbf{x}) = \varphi_*.$$

Побудова мінімізуючих послідовностей є метою розв'язування задачі мінімізації не тільки у тому випадку, коли точна нижня межа функції не досягається. Більшість методів оптимізації генерують послідовність точок, яка є мінімізуючою.

Розглянемо достатню умову досягнення верхньої і нижньої меж.

Теорема 2.1 (Вейєрштрасса). *Нехай R — обмежена і замкнена множина, функція $\varphi(\mathbf{x})$ — неперервна на R. Тоді $\varphi_* = \inf\limits_{\mathbf{x}\in R} \varphi(\mathbf{x}) > -\infty$, множина точок глобального мінімуму непуста, обмежена і замкнена, а довільна мінімізуюча послідовність збігається до X_*.*

Дуже важливим є такий наслідок з теореми Вейєрштрасса.

Наслідок 2.1. *Нехай функція $\varphi(\mathbf{x})$ неперервна на E^n і множина*

$$R = \{\mathbf{x} \mid \varphi(\mathbf{x}) \leqslant C\}$$

для деякого C непуста і обмежена. Тоді існує точка глобального мінімуму $\varphi(\mathbf{x})$ на E^n.

Наслідок 2.2. *Нехай R — непуста замкнута підмножина E^n, функція $\varphi(\mathbf{x})$ неперервна на R і для довільної послідовності $\left\{\mathbf{x}^k\right\}$ точок з R, що задовольняють умові $\lim\limits_{k\to\infty} \left\|\mathbf{x}^k\right\| = +\infty$, виконується співвідношення $\lim\limits_{k\to\infty} \varphi\left(\mathbf{x}^k\right) = +\infty$. Тоді виконуються всі твердження теореми Вейєрштрасса.*

Аналогічно формулюється теорема для задачі максимізації.

Розглянемо задачу

$$\varphi(\mathbf{x}) \to \mathrm{extr}, \quad \mathbf{x} \in E^n. \tag{2.1}$$

Класичний підхід до пошуку безумовного екстремуму ґрунтується на таких твердженнях.

Теорема 2.2 (необхідна умова екстремуму першого порядку). *Не-*

хай функція $\varphi(\mathbf{x})$ диференційовна у точці $\mathbf{x}^* \in E^n$. Тоді якщо $\mathbf{x}^*$ — локальний розв'язок задачі (2.1), то

$$\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}} = 0. \tag{2.2}$$

Означення 2.8. *Розв'язки системи рівнянь (2.2) називаються **стаціонарними точками**.*

Теорема 2.3 (необхідна умова екстремуму другого порядку). *Нехай функція $\varphi(\mathbf{x})$ двічі диференційовна у точці $\mathbf{x}^* \in E^n$.*

1) *Якщо $\mathbf{x}^*$ — точка локального мінімуму в задачі (2.1), то матриця $\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}^2}$ невід'ємно визначена, тобто*

$$\left(\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}^2}\mathbf{x}, \mathbf{x}\right) \geqslant 0 \quad \text{для всіх } \mathbf{x} \in E^n.$$

2) *Якщо $\mathbf{x}^*$ — точка локального максимуму, то матриця $\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}^2}$ недодатно визначена, тобто*

$$\left(\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}^2}\mathbf{x}, \mathbf{x}\right) \leqslant 0 \quad \text{для всіх } \mathbf{x} \in E^n.$$

Теорема 2.4 (достатня умова екстремуму). *Нехай функція $\varphi(\mathbf{x})$ двічі диференційовна у точці $\mathbf{x}^* \in E^n$ і $\dfrac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}} = 0$.*

1) *Якщо матриця $\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}^2}$ додатно визначена, то $\mathbf{x}^*$ — точка строгого локального мінімуму функції $\varphi(\mathbf{x})$ на E^n.*
2) *Якщо матриця $\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}^2}$ від'ємно визначена, то $\mathbf{x}^*$ — точка строгого локального максимуму функції $\varphi(\mathbf{x})$ на E^n.*

Ці твердження справедливі і для задачі пошуку екстремуму на множині $R \in E^n$, якщо $\mathbf{x}^*$ — внутрішня точка R.

Якщо відомо, що функція має глобальний екстремум, то точкою глобального мінімуму (максимуму) є та стаціонарна точка, в якій функція приймає найменше (найбільше) значення. Для визначення існування глобального екстремуму інколи можна використовувати наслідки з теореми Вейєрштрасса. Якщо ж функція опукла (вгнута) на E^n, то тоді локальні екстремуми точки будуть точками глобального екстремуму.

Можна застосувати таку схему пошуку безумовних екстремумів функцій:

1) Складаємо і розв'язуємо систему рівнянь (2.2).
2) У стаціонарних точках досліджуємо на знаковизначеність матрицю других

похідних; ті точки, в яких матриця додатно визначена, є точками строгого локального мінімуму; стаціонарні точки, в яких матриця від'ємно визначена, є точками строгого локального максимуму.

3) Аналізуємо стаціонарні точки, в яких матриця других похідних не є строго знаковизначеною. Якщо матриця невід'ємно (недодатно) визначена, то відповідні точки підозрілі на локальний мінімум (максимум). Інколи вивчення поведінки функції в околі підозрілої точки дає можливість вияснити, чи є чи ні точка екстремальною. І якщо у стаціонарній точці матриця других похідних не є знаковизначеною, то така точка не може бути екстремальною.
4) Знайдені точки локального екстремуму досліджуємо на глобальний екстремум.

Приклад 2.4. Дослідити на екстремум функцію

$$\varphi(\mathbf{x}) = x_1^4 + x_2^4 - 2(x_1 - x_2)^2.$$

Розраховуємо градієнт функції

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_1} = 4x_1^3 - 4(x_1 - x_2),$$
$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{x})}{\partial x_2} = 4x_2^3 + 4(x_1 - x_2).$$

Прирівнявши його до нуля і розв'язавши отриману систему, маємо

$$\mathbf{x}^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}^2 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ -\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}^3 = \begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Матриця Гессе, матриця других похідних, має вигляд

$$\frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^2} = \begin{pmatrix} 12x_1^2 - 4 & 4 \\ 4 & 12x_2^2 - 4 \end{pmatrix}.$$

У точці $\mathbf{x}^1$ матриця має вигляд

$$\frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x}^1)}{\partial \mathbf{x}^2} = \begin{pmatrix} -4 & 4 \\ 4 & -4 \end{pmatrix}.$$

Вона недодатно визначена. Це означає, що точка $\mathbf{x}^1$ підозріла на максимум, $\varphi(\mathbf{x}^1) = \varphi(0,0) = 0$. Зазначимо, що $\varphi(x_1, x_1) = 2x_1^4 > \varphi(\mathbf{x}^1) = \varphi(0,0) = 0$ і точки, що лежать на прямій $x_1 = x_2$ можуть бути обрані дуже близько до початку координат. Це означає, що у точці $\mathbf{x}^1$ функція не може досягати максимуму.

Розглянемо матрицю Гессе у точці $\mathbf{x}^2$.

$$\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^2)}{\partial\mathbf{x}^2} = \frac{\partial^2\varphi(\sqrt{2},-\sqrt{2})}{\partial\mathbf{x}^2} = \begin{pmatrix} 20 & 4 \\ 4 & 20 \end{pmatrix}.$$

Ця матриця додатно визначена, отже, точка $\mathbf{x}^2$ є точкою строгого локального мінімуму.

У точці $\mathbf{x}^3$ матриця Гессе має той же вигляд, що і в точці $\mathbf{x}^2$. Це означає, що і в точці $\mathbf{x}^3$ функція має строгий локальний мінімум. Так як $\lim\limits_{k\to\infty} \left\|\mathbf{x}^k\right\| = +\infty$, то згідно з другим наслідком теореми Вейєрштрасса точки $\mathbf{x}^2$ і $\mathbf{x}^3$ є точками глобального мінімуму функції і $\min\limits_{\mathbf{x}\in E^2} \varphi(\mathbf{x}) = -8$. ☑

2.1. Завдання для самостійної роботи

1) Знати усі означення і формулювання теорем.
2) Дослідити на екстремум функцію

$$\varphi(\mathbf{x}) = n\left[x_1^3 + x_2^3 - i\,(x_1 - x_2)^2\right].$$

Параметри: для першої групи $n = 3$, для другої групи $n = 7$; i — порядковий номер студента у списку групи.

2.2. Питання для самоконтролю

1) Дати означення невід'ємної і додатної симетричної матриці.
2) Дати означення точок локального і глобального мінімуму функції багатьох змінних.
3) Сформулювати теорему Вейєрштрасса та наслідок з неї.
4) Сформулювати необхідну умову екстремуму першого порядку функції багатьох змінних.
5) Сформулювати необхідну умову екстремуму другого порядку функції багатьох змінних.
6) Сформулювати достатню умову екстремуму функції багатьох змінних.

3

Мінімізація функцій при обмеженнях типу рівностей

Розглядається задача

$$\varphi(\mathbf{x}) \to \text{extr} \tag{3.1}$$

$$\mathbf{x} \in R = \left\{\mathbf{x} \in E^n \mid g_i(\mathbf{x}) = 0,\ i = \overline{1, m}\right\}. \tag{3.2}$$

Вважаємо, що $m < n$. Це задача на умовний мінімум.

У деяких випадках для розв'язування такої задачі можна застосувати метод виключення. Нехай з обмежень-рівностей можна виразити m якихось компонент вектора $\mathbf{x}$ через інші $n - m$ компонент. Наприклад,

$$x_1 = f_1(x_{m+1}, \ldots, x_n),$$
$$\ldots$$
$$x_m = f_m(x_{m+1}, \ldots, x_n).$$

Далі підкладемо ці вирази у функцію $\varphi(\mathbf{x})$ і отримаємо задачу на безумовний екстремум у просторі E^{n-m}. Звичайно, скористатись таким алгоритмом можна не завжди і тому розглянемо більш загальний підхід — **правило множників Лагранжа**.

Для задачі (3.1)–(3.2) розглянемо функцію Лагранжа

$$L(\mathbf{x}, \lambda_0, \boldsymbol{\lambda}) = \lambda_0 \varphi(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(\mathbf{x}),$$

де $\lambda_0 \in E^1$, $\boldsymbol{\lambda} \in E^m$.

Теорема 3.1 (правило множників Лагранжа). *Нехай $\mathbf{x}^*$ — точка локального екстремуму в задачі (3.1)–(3.2); функції $\varphi(\mathbf{x})$ і $g_i(\mathbf{x})$ $(i = \overline{1, m})$ неперервно диференційовні в околі точки $\mathbf{x}^*$. Тоді існує число λ_0^* і вектор $\boldsymbol{\lambda}^* \in E^m$, які одночасно* *не дорівнюють нулеві і такі, що*

$$\frac{\partial L\left(\mathbf{x}^*, \lambda_0^*, \boldsymbol{\lambda}^*\right)}{\partial \mathbf{x}} = 0.$$

Кожній точці локального екстремуму відповідає нескінченна кількість наборів множників Лагранжа (так як невідомих на одну більше, ніж рівнянь).

Досить часто використовується функція Лагранжа

$$L\left(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}\right) = \varphi(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(\mathbf{x}),$$

яку будемо називати **нормальною функцією Лагранжа**. Ця функція Лагранжа простіше, але правило множників Лагранжа не завжди справедливе.

Приклад 3.1. Розглянемо задачу

$$\min x_1,$$
$$x_1^3 - x_2^2 = 0.$$

Припустимі точки, що задовольняють рівнянню $x_1^3 - x_2^2 = 0$, лежать на напівкубічній параболі.
Зрозуміло, що точка $x_1 = x_2 = 0$ є точкою умовного мінімуму.
Складемо функцію Лагранжа:

$$L\left(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}\right) = x_1 + \lambda\left(x_1^3 - x_2^2\right).$$

Використовуючи правило множників Лагранжа, отримаємо

$$\frac{\partial L\left(\mathbf{x}, \lambda\right)}{\partial x_1} = 1 + 3\lambda x_1^2 = 0,$$
$$\frac{\partial L\left(\mathbf{x}, \lambda\right)}{\partial x_2} = -2\lambda x_2.$$

Точка мінімуму $x_1 = x_2 = 0$ не задовольняє цим рівнянням, тобто правило множників Лагранжа до даної задачі застосувати не можна. ☑

Означення 3.1. *Якщо серед систем множників Лагранжа, що відповідають точці локального екстремуму, немає множників Лагранжа з $\lambda_0^* = 0$, то така точка називається **нормальною точкою екстремуму**, а задача — нормальною.*

Теорема 3.2. *Для нормальної точки локального екстремуму відповідні множники Лагранжа визначаються єдиним способом з $\lambda_0^* = 1$.*

Т е о р е м а 3.3. *Точка локального екстремуму* $\mathbf{x}^*$ *в задачі* (3.1)–(3.2) *є нормальною точкою екстремуму тоді і тільки тоді, коли вектори* $\dfrac{\partial g_1(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}}, \ldots, \dfrac{\partial g_m(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}}$ *лінійно незалежні. Якщо обмеження одне, то тоді* $\dfrac{\partial g(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}} \neq 0$.

Сформулюємо необхідну умову оптимальності другого порядку.

Т е о р е м а 3.4. *Нехай:*

1) *функції* $\varphi(\mathbf{x})$, $g_1(\mathbf{x})$, $\ldots$, $g_m(\mathbf{x})$ *неперервно диференційовні у деякому околі точки* $\mathbf{x}^* \in R$ *і двічі диференційовні у самій цій точці;*
2) *градієнти* $\dfrac{\partial g_1(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}}, \ldots, \dfrac{\partial g_m(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}}$ *лінійно незалежні;*
3) $\mathbf{x}^*$ *— точка локального мінімуму (максимуму) задачі* (3.1)–(3.2).

Тоді

$$\frac{\partial L(\mathbf{x}^*, \lambda_0^*, \boldsymbol{\lambda}^*)}{\partial \mathbf{x}} = 0, \quad \left(\frac{\partial^2 L(\mathbf{x}^*, \lambda_0^*, \boldsymbol{\lambda}^*)}{\partial \mathbf{x}^2}\mathbf{y}, \mathbf{y}\right) \geqslant 0 \ (\leqslant 0)$$

для довільного вектора $\mathbf{y} \in E^n$, *що задовольняє умові*

$$\left(\frac{\partial g_i(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{y}\right) = 0, \quad i = \overline{1, m}.$$

Т е о р е м а 3.5 (достатня умова оптимальності). *Нехай:*

1) *функції* $\varphi(\mathbf{x})$, $g_1(\mathbf{x})$, $\ldots$, $g_m(\mathbf{x})$ *двічі диференційовні у точці* $\mathbf{x}^* \in E^n$;
2) *для деякого нетривіального набору* $\{\lambda_0^*, \boldsymbol{\lambda}^*\}$ *виконується умова*

$$\frac{\partial L(\mathbf{x}^*, \lambda_0^*, \boldsymbol{\lambda}^*)}{\partial \mathbf{x}} = 0;$$

3) *квадратична форма*

$$\mathcal{I} = \left(\frac{\partial^2 L(\mathbf{x}^*, \lambda_0^*, \boldsymbol{\lambda}^*)}{\partial \mathbf{x}^2}\mathbf{y}, \mathbf{y}\right) > 0 \quad (< 0)$$

для всіх $\mathbf{y} \neq 0$, *що задовольняють умові* $\left(\dfrac{\partial g_i(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{y}\right) = 0$, $i = \overline{1, m}$.

Тоді точка $\mathbf{x}^*$ *є точкою строгого локального мінімуму (максимуму) функції* $\varphi(\mathbf{x})$ *на* R.

Рекомендується така схема розв'язування задачі з обмеженнями типу рівностей:

1) Перевіряється нормальність задачі. Якщо вдалося це зробити, то складають нормальну функцію Лагранжа і виписують необхідну умову $\dfrac{\partial L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})}{\partial \mathbf{x}} = 0$, до якої додають обмеження-рівності. З цієї системи знаходять стаціонарні точки

задачі. Переходимо до пункту 3). Якщо ж не вдалося довести нормальність задачі, то переходимо до пункту 2).

2) Розглядається узагальнена функція Лагранжа $L(\mathbf{x}, \lambda_0, \boldsymbol{\lambda}) = \lambda_0\varphi(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}\sum_{i=1}^{m}\lambda_i g_i(\mathbf{x})$. Виписується необхідна умова мінімуму $\dfrac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda_0, \boldsymbol{\lambda})}{\partial \mathbf{x}} = 0$, до неї додаються обмеження-рівності з (3.2). Розглядають два випадки при розв'язуванні системи рівнянь:

   а) $\lambda_0 = 0$. Цей вироджений випадок зустрічається на практиці досить рідко. У більшості задач випадок $\lambda_0 = 0$ призводить до несумісності системи рівнянь, і тоді розглядаємо випадок b);

   б) $\lambda_0 = 1$;

3) Знайдені стаціонарні точки перевіряють на необхідну умову оптимальності другого порядку. Точки, що не задовольняють умові, відкидаються.

4) Ті стаціонарні точки, в яких необхідна умова другого порядку виконується, перевіряють на достатню умову оптимальності.

Приклад 3.2. Розглянемо задачу

$$\varphi(\mathbf{x}) = 2x_1^2 + x_2^2 \to \text{extr}, \quad 2x_1 + x_2 = 1.$$

Спочатку перевіряємо нормальність задачі. Для цього скористаємось умовою нормальності. Для цього розрахуємо $\dfrac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$. Так як $\dfrac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \neq 0$ для всіх припустимих точок, то всі точки нормальні і задача нормальна. Тепер можна уже складати нормальну функцію Лагранжа.

А можна піти іншим шляхом. Складаємо узагальнену функцію Лагранжа і розглянемо випадки $\lambda_0 = 0$ і $\lambda_0 = 1$. Маємо

$$L(\mathbf{x}, \lambda_0, \lambda) = \lambda_0\left(2x_1^2 + x_2^2\right) + \lambda(2x_1 + x_2 - 1).$$

Скористаємося правилом множників Лагранжа і отримаємо таку систему рівнянь

$$\begin{aligned} &\frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda_0, \lambda)}{\partial x_1} = 4\lambda_0 x_1 + 2\lambda = 0, \\ &\frac{\partial L(\mathbf{x}, \lambda_0, \lambda)}{\partial x_2} = 2\lambda_0 x_2 + \lambda = 0, \\ &2x_1 + x_2 = 1. \end{aligned} \tag{3.3}$$

Розглянемо випадок з $\lambda_0 = 0$. Отримаємо, що $\lambda = 0$, а це суперечить твердженням теореми. Отже, $\lambda_0 \neq 0$ і тому розглянемо випадок $\lambda_0 = 1$.

Розв'язавши систему (3.3) з $\lambda_0 = 1$, отримаємо: $x_1^* = \dfrac{1}{3}$, $x_2^* = \dfrac{1}{3}$, $\lambda = -\dfrac{2}{3}$.

Розглянемо матрицю других похідних функції Лагранжа:

$$\frac{\partial^2 L\left(\mathbf{x}^*, 1, -2/3\right)}{\partial \mathbf{x}^2} = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Скористаємось необхідною умовою другого порядку. Визначимо знак квадратичної форми $\mathcal{I} = \mathbf{y}^\top \frac{\partial^2 L\left(\mathbf{x}^*, \lambda_0, \lambda\right)}{\partial \mathbf{x}^2} \mathbf{y}$ на гіперплощині $\frac{\partial g^\top\left(\mathbf{x}^*\right)}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{y} = 0$. Отримаємо

$$\mathcal{I} = 4y_1^2 + 2y_2^2, \quad \frac{\partial g^\top\left(\mathbf{x}^*\right)}{\partial \mathbf{x}} y = 2y_1 + y_2 = 0.$$

Звідси $y_2 = -2y_1$. Тоді $\mathcal{I} = 4y_1^2 + 2y_2^2 = 12y_1^2 \geqslant 0$. Необхідна умова мінімуму виконується. Достатня умова теж виконується: $\varphi = 12y_1^2 > 0$ для $\mathbf{y} \neq 0$. Отже, розв'язком задачі є точка $\mathbf{x}^* = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)^\top$. ☑

3.1. Завдання для самостійної роботи

1) Знати усі означення і формулювання теорем.
2) Розв'язати задачу

$$\varphi(\mathbf{x}) = ix_1^2 + (i+n)x_2^2 \to \text{extr},$$
$$ix_1 + nx_2 = 1.$$

Параметри: для першої групи $n = 3$, для другої групи $n = 7$; i — порядковий номер студента у списку групи.

3.2. Питання для самоконтролю

1) Сформулювати задачу на умовний мінімум.
2) Сформулювати правило множників Лагранжа.
3) Дати означення нормальної функції Лагранжа.
4) Сформулювати теорему про нормальність екстремальної точки.
5) Сформулювати необхідну умову оптимальності другого порядку для задачі на умовний мінімум.
6) Сформулювати достатню умову оптимальності.
7) Написати схему розв'язування задач з обмеженнями типу рівностей.

4 Мінімізація функцій при обмеженнях типу нерівностей

Так як умови оптимальності для таких задач досить громіздкі, то розглянемо тільки задачу мінімізації.

Нехай в n-вимірному просторі визначені функції $\varphi(\mathbf{x})$, $g_1(\mathbf{x})$, $\ldots$, $g_m(\mathbf{x})$. Необхідно знайти точку $\mathbf{x}^* \in E^n$, що задовольняє умовам $g_1(\mathbf{x}^*) \leqslant 0$, $\ldots$, $g_m(\mathbf{x}^*) \leqslant 0$ і таку, що

$$\varphi(\mathbf{x}^*) = \min \varphi(\mathbf{x}), \quad g_i(\mathbf{x}) \leqslant 0, \quad i = \overline{1, m}.$$

Означення 4.1. *Обмеження $g_i(\mathbf{x}) \leqslant 0$ називається* ***активним (жорстким)*** *у точці $\mathbf{x}^0$, якщо $g_i(\mathbf{x}^0) = 0$, і пасивним (нежорстким), якщо $g_i(\mathbf{x}^0) < 0$.*

Далі обмеження будемо записувати у векторному вигляді $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leqslant 0$, де $\mathbf{g}$ — m-вимірний вектор.

Означення 4.2. *Припустиму точку $\mathbf{x}^0$ назвемо* ***звичайною припустимою*** *при обмеженнях $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leqslant 0$, якщо вектори*

$$\frac{\partial g_{i_1}(\mathbf{x}^0)}{\partial \mathbf{x}}, \ldots, \frac{\partial g_{i_k}(\mathbf{x}^0)}{\partial \mathbf{x}}, \quad 1 \leqslant i_1 \leqslant \ldots \leqslant i_k \leqslant m,$$

що відповідають обмеженням $g_{i_1}(\mathbf{x}) \leqslant 0$, $\ldots$, $g_{i_k}(\mathbf{x}) \leqslant 0$, активним у точці $\mathbf{x}^0$, лінійно незалежні.

Сформулюємо необхідні і достатні умови мінімуму для задачі з обмеженнями типу нерівностей.

Теорема 4.1 (необхідна умова мінімуму). *Нехай скалярна функція $\varphi(\mathbf{x})$ і m-вимірна функція $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ визначені і неперервні разом з двома першими похідними за $\mathbf{x}$. Точка $\mathbf{x}^*$ — точка локального мінімуму — є звичайною припустимою і у цій точці активні обмеження з номерами i_1, $\ldots$, i_k. Тоді*

1) *знайдеться невід'ємний множник* $\boldsymbol{\lambda}^* = (\lambda_1^*, \ldots, \lambda_m^*)^\top \geqslant 0$ *такий, що для функції Лагранжа* $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \varphi(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^\top \mathbf{g}(\mathbf{x})$ *виконується рівність*

$$\frac{\partial L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)}{\partial \mathbf{x}} = 0;$$

2) *виконуються умови доповнюючої нежорсткості*

$$\lambda_i^* g_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad i = \overline{1, m};$$

3) *квадратична форма* $\mathcal{I} = \mathbf{y}^\top \dfrac{\partial^2 L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)}{\partial \mathbf{x}^2} \mathbf{y} \geqslant 0$ *на гіперплощині, що задається рівняннями*

$$\left(\frac{\partial g_{i_1}(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{y}\right) = 0, \ldots, \left(\frac{\partial g_{i_k}(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{y}\right) = 0.$$

Означення 4.3. *Припустима точка* $\mathbf{x}^*$ *називається* ***умовно-стаціонарною*** *у сформульованій задачі, якщо для деякого* m*-вимірного вектора* $\boldsymbol{\lambda}^* \geqslant \mathbf{0}$ *виконуються умови*

$$\frac{\partial L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)}{\partial \mathbf{x}} = 0, \quad \lambda_i^* g_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad i = \overline{1, m}.$$

Теорема 4.2 (достатня умова мінімізації). *Для того, щоб умовно-стаціонарна точка* $\mathbf{x}^*$ *була точкою локального мінімуму достатньо, щоб квадратична форма* $\mathcal{I} = \mathbf{y}^\top \dfrac{\partial^2 L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)}{\partial \mathbf{x}^2} \mathbf{y}$ *була додатно визначеною на гіперплощині*

$$\left(\frac{\partial g_{i_1}(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{y}\right) = 0, \ldots, \left(\frac{\partial g_{i_k}(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{y}\right) = 0, \quad y \neq 0,$$

де $i_1, \ldots, i_k$ *— номери обмежень, активних у точці* $\mathbf{x}^*$.

Приклад 4.1. Необхідно побудувати коло і квадрат, сума периметрів яких дорівнює a, так, щоб сума площ круга і квадрата була максимальною.

Розв'язування. Нехай довжина кола дорівнює x_1, а периметр квадрата — x_2. Розрахуємо радіус кола і сторону квадрата. Позначимо їх відповідно через r і y. Маємо $2\pi r = x_1$, $4y = x_2$. Тоді $r = x_1/2\pi$, $y = x_2/4$. Площа круга дорівнює $x_1^2/4\pi$, а квадрата — $x_2^2/16$.

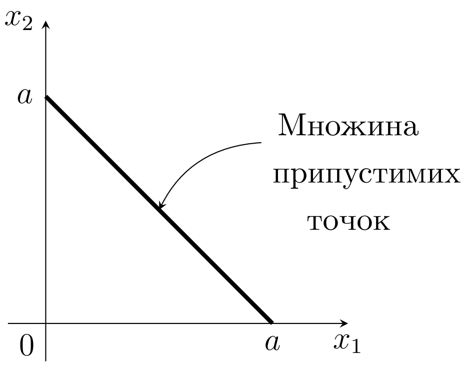
Отже, задача має таку математичну постановку:

$$
\begin{aligned}
&\min -\left[\frac{x_1^2}{4\pi}+\frac{x_2^2}{16}\right],\\
&x_1+x_2=a,\\
&-x_1\leqslant 0,\\
&-x_2\leqslant 0.
\end{aligned}
\tag{4.1}
$$

Введемо функції $\varphi(\mathbf{x}) = -\left[\frac{x_1^2}{4\pi}+\frac{x_2^2}{16}\right]$, $g_1(\mathbf{x}) \equiv x_1+x_2-a$, $g_2(\mathbf{x}) \equiv -x_1$, $g_3(\mathbf{x}) \equiv -x_2$. Тоді задача (4.1) має вигляд

$$
\begin{gathered}
\min \varphi(\mathbf{x}),\\
g_1(\mathbf{x})=0, \quad g_2(\mathbf{x})\leqslant 0, \quad g_3(\mathbf{x})\leqslant 0, \qquad \mathbf{x}\in\mathbb{R}^2.
\end{gathered}
\tag{4.2}
$$

У задачі (4.2) присутні дві нерівності і одна чиста рівність.



Так як множина припустимих точок задачі (4.2) обмежена і замкнута, а функція $\varphi(\mathbf{x})$ є неперервною, то за теоремою Вейєрштрасса задача має розв'язок.

Вектори

$$
\frac{\partial g_1(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \quad \frac{\partial g_2(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}=\begin{pmatrix}-1\\0\end{pmatrix}, \quad \frac{\partial g_3(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}=\begin{pmatrix}0\\-1\end{pmatrix}
$$

попарно лінійно незалежні, а активними одночасно можуть бути $g_1(\mathbf{x})$, $g_1(\mathbf{x})$ і $g_2(\mathbf{x})$ або $g_1(\mathbf{x})$ і $g_3(\mathbf{x})$. Тому кожна припустима точка є звичайною. А це означає, що усі припустимі точки нормальні. Тому можна складати нормальну функцію Лагранжа.

$$
\begin{aligned}
L(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda}) = \varphi(\mathbf{x}) + \lambda_1 g_1(\mathbf{x}) + \lambda_2 g_2(\mathbf{x}) + \lambda_3 g_3(\mathbf{x}) &=\\
= -\left(\frac{x_1^2}{4\pi}+\frac{x_2^2}{16}\right) + \lambda_1(x_1+x_2-a) - \lambda_2 x_1 - \lambda_3 x_2.&
\end{aligned}
$$

Згідно з необхідною умовою знайдуться λ_1, λ_2, λ_3; $\lambda_i \geqslant 0$, $i = 1, 2, 3$ такі, що

$$\frac{\partial L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})}{\partial x_1} = -\frac{x_1}{2\pi} + \lambda_1 - \lambda_2 = 0,$$
$$\frac{\partial L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})}{\partial x_2} = -\frac{x_2}{8} + \lambda_1 - \lambda_3 = 0,$$
$$g_1(\mathbf{x}) \equiv x_1 + x_2 - a = 0,$$
$$\lambda_2 g_2(\mathbf{x}) \equiv -\lambda_2 x_1 = 0,$$
$$\lambda_3 g_3(\mathbf{x}) \equiv -\lambda_3 x_2 = 0.$$

Виключимо змінні x_2, λ_2, λ_3 і отримаємо два рівняння

$$\begin{cases} \left(\lambda_1 - \dfrac{x_1}{2\pi}\right) x_1 = 0, \\ \left(\lambda_1 - \dfrac{a - x_1}{8}\right)(a - x_1) = 0. \end{cases}$$

Розв'язавши цю систему, отримаємо:

1) $x_1^* = \dfrac{\pi a}{4 + \pi}$, $x_2^* = \dfrac{4a}{4 + \pi}$, $\lambda_1 = \dfrac{a}{8 + 2\pi}$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 = 0$;
2) $x_1^* = a$, $x_2^* = 0$, $\lambda_1 = \dfrac{a}{2\pi}$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 = \dfrac{a}{2\pi}$;
3) $x_1^* = 0$, $x_2^* = a$, $\lambda_1 = \dfrac{a}{8}$, $\lambda_2 = \dfrac{a}{8}$, $\lambda_3 = 0$.

Квадратична форма має вигляд

$$\mathcal{I} = \mathbf{x}^\top \frac{\partial^2 L\left(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}\right)}{\partial \mathbf{x}^2} \mathbf{x} = -\frac{1}{2\pi} x_1^2 - \frac{1}{8} x_2^2.$$

Розглянемо кожну з умовно-стаціонарних точок.

1) У першій точці активним є тільки обмеження $g_1(\mathbf{x}) = 0$. Гіперплощина $\dfrac{\partial g_1^\top\left(\mathbf{x}^*\right)}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{x} = 0$ має вигляд $x_1 + x_2 = 0$. Тоді $x_1 = -x_2$. У першій точці квадратична форма матиме вигляд: $\mathcal{I} = -\left[\dfrac{1}{2\pi} + \dfrac{1}{8}\right] x_2^2$ і $\mathcal{I} \leqslant 0$. Так як необхідна умова мінімуму не виконується, то ця точка не може бути розв'язком задачі.
2) Перше і третє обмеження активні у другій точці. Гіперплощина визначається системою
$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 0, \\ -x_2 = 0. \end{cases}$$
Так як $x_1 = x_2 = 0$, то $\mathcal{I} = 0$. Необхідна умова мінімуму виконується.

3) У третій точці активними є перше і друге обмеження. Тоді отримаємо таку систему

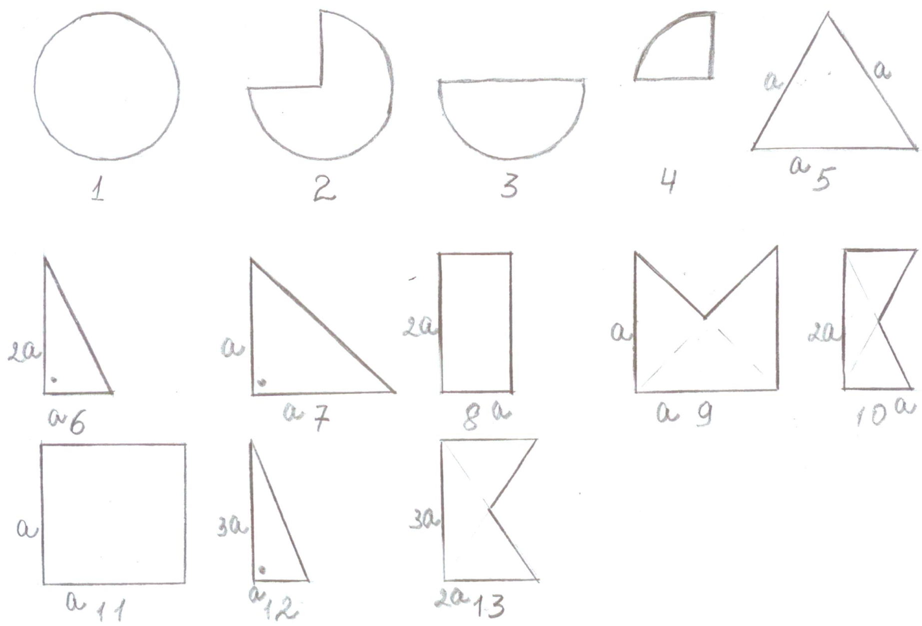
$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 0, \\ -x_1 = 0, \end{cases}$$

що визначає гіперплощину. Маємо: $x_1 = x_2 = 0$, а значить $\mathcal{I} = 0$. У третій точці теж виконується необхідна умова мінімуму.

Отримали, що у двох припустимих точках виконується необхідна умова мінімуму, але у жодній із них не виконується достатня. Так як задача має розв'язок і маємо дві точки, в яких може досягатися мінімум, то порівняємо значення функції у цих точках і оберемо розв'язок. У другій точці значення функції дорівнює $-\dfrac{a^2}{4\pi} \approx -0.0796a^2$, а у третій $-\dfrac{a^2}{16} \approx -0.0625a^2$. Так як $-0.0796 < -0.0625$, то розв'язком задачі є друга точка. Це означає, що необхідно побудувати коло. ☑

4.1. Завдання для самостійної роботи

1) Знати усі означення і формулювання теорем.
2) Побудувати дві фігури, сума периметрів яких дорівнює $100+i+j$ так, щоб сума їх площ була максимальною (i — номер групи, j — номер прізвища студента у списку групи — номер варіанта)



1 ГРУПА

НОМЕР ВАРІАНТА	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
НОМЕРИ ФІГУР	1,2	1,3	1,4	1,5	1,6	1,7	1,8	1,9	1,10	2,3	2,4	2,5	2,6	2,7

15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
2,8	2,9	2,10	2,11	7,9	7,10	1,12	2,12	3,12	4,12	5,12	6,12	1,13	2,13	3,13	4,13	10,13

2 ГРУПА

НОМЕР ВАРІАНТА	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
НОМЕРИ ФІГУР	3,4	3,5	3,6	3,7	3,8	3,9	3,10	3,11	4,5	4,6	4,7	4,8	4,9	4,10

15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
4,11	5,9	5,10	5,11	6,9	6,10	7,12	8,12	9,12	10,12	11,12	5,13	6,13	7,13	8,13	9,13	11,13

4.2. Питання для самоконтролю

1) Сформулювати задачу мінімізації функції з обмеженнями типу нерівностей.
2) Дати означення активних і пасивних обмежень у точці.
3) Дати означення звичайної припустимої точки при обмеженнях $g(x) \leqslant 0$.
4) Сформулювати необхідну умову мінімуму для задачі з обмеженнями типу нерівностей.
5) Дати означення умовно-стаціонарної точки.
6) Сформулювати достатню умову мінімуму.

Частина II.

Мінімізація опуклих функцій

5 Мінімізація опуклих функцій

Розділ нелінійного програмування, в якому задачі мінімізації формулюються для опуклих функцій і опуклих множин, називається опуклим програмуванням.

Введемо деякі означення і властивості опуклих множин та функцій.

Означення 5.1. *Множина $R \subseteq E^n$ називається* ***опуклою****, якщо для довільних точок $\mathbf{x}^1$ і $\mathbf{x}^2$, що належать множині R, точка $\mathbf{x}(\lambda) = \lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2$, $0 \leqslant \lambda \leqslant 1$, теж належить множині R.*

Іншими словами, якщо дві довільні точки належать множині R і відрізок, що їх з'єднує, теж належить множині R, то ця множина називається опуклою.

Приклад 5.1. Довести, що гіперплощина $\mathbf{a}^\top\mathbf{x} = \mathbf{b}$ є опуклою.
Доведення. Отже, $R = \left\{\mathbf{x} \mid \mathbf{a}^\top\mathbf{x} = \mathbf{b}\right\}$. Обираємо довільні дві точки $\mathbf{x}^1$ і $\mathbf{x}^2$ з множини R. Це означає, що $\mathbf{a}^\top\mathbf{x}^1 = \mathbf{b}$ і $\mathbf{a}^\top\mathbf{x}^2 = \mathbf{b}$. Складаємо точку

$$\mathbf{x}(\lambda) = \lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2, \quad 0 \leqslant \lambda \leqslant 1.$$

Маємо

$$\mathbf{a}^\top\mathbf{x}(\lambda) = \mathbf{a}^\top\left(\lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2\right) = \lambda\mathbf{a}^\top\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{a}^\top\mathbf{x}^2 = \lambda\mathbf{b} + (1-\lambda)\mathbf{b} = \mathbf{b}.$$

Отже, точка $\mathbf{x}(\lambda) \in R$ і множина R є опуклою. ☑

Теорема 5.1. *Перетин довільної кількості опуклих множин R_i є опуклою множиною.*

Доведення. Позначимо перетин опуклих множин через $R = \cap_{i\in I} R_i$, де I — непуста множина індексів. Візьмемо дві точки $\mathbf{x}^1$ і $\mathbf{x}^2$ з множини R. Тоді ці точки належать кожній із множин R_i. А так як множини R_i є опуклими, то точка $\mathbf{x}(\lambda) = \lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2$, $0 \leqslant \lambda \leqslant 1$ теж належить опуклим множинам R_i. Якщо $\mathbf{x}(\lambda)$ належить кожній множині R_i, $i \in I$, то вона належить перетину цих множин, тобто належить множині R. А це і означає опуклість множини R. ☑

Означення 5.2. *Функція $\varphi(\mathbf{x})$, що визначена на опуклій множині R, називається **опуклою**, якщо для довільних $\mathbf{x}^1$ і $\mathbf{x}^2 \in R$ і довільного $\lambda \in [0;1]$ виконується нерівність*

$$\varphi\left(\lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2\right) \leqslant \lambda\varphi\left(\mathbf{x}^1\right) + (1-\lambda)\varphi\left(\mathbf{x}^2\right). \tag{5.1}$$

Означення 5.3. *Якщо в (5.1) рівність виконується тільки при $\lambda = 0$ і $\lambda = 1$, то функція $\varphi(\mathbf{x})$ називається **строго опуклою**.*

У строго опуклої функції не існує прямолінійних участків.

Означення 5.4. *Функція $\varphi(\mathbf{x})$, що визначена на опуклій множині R, називається **сильно опуклою**, якщо знайдеться така константа $\gamma > 0$, що для довільних $\mathbf{x}^1$ і $\mathbf{x}^2 \in R$ та $\lambda \in [0;1]$ виконується нерівність*

$$\varphi\left(\lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2\right) \leqslant \lambda\varphi\left(\mathbf{x}^1\right) + (1-\lambda)\varphi\left(\mathbf{x}^2\right) - \gamma\lambda(1-\lambda)\left\|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2\right\|^2.$$

Очевидно, що сильно опукла функція є строго опуклою і опуклою.

Означення 5.5. *Функція $\varphi(\mathbf{x})$, що визначена на опуклій множині R, називається **вгнутою**, якщо для довільних $\mathbf{x}^1$ і $\mathbf{x}^2 \in R$ і довільного $\lambda \in [0;1]$ виконується нерівність*

$$\varphi\left(\lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2\right) \geqslant \lambda\varphi\left(\mathbf{x}^1\right) + (1-\lambda)\varphi\left(\mathbf{x}^2\right).$$

Означення вгнутої функції можна дати й інакше: функція $\varphi(\mathbf{x})$, що визначена на опуклій множині R, називається вгнутою, якщо функція $-\varphi(\mathbf{x})$ є опуклою. Зрозуміло, як дати означення строго і сильно вгнутих функцій.

Приклад 5.2. Довести, що якщо функція $\varphi(\mathbf{x})$ є опуклою, то множина $R = \{\mathbf{x} \mid \varphi(\mathbf{x}) \leqslant c\}$ — опукла (або пуста).

Доведення. Візьмемо дві точки $\mathbf{x}^1$ і $\mathbf{x}^2$ множини R. Так як $\mathbf{x}^1 \in R$, то $\varphi(\mathbf{x}^1) \leqslant c$. Аналогічно, $\varphi(\mathbf{x}^2) \leqslant c$. Розглянемо точку $\mathbf{x}(\lambda) = \lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2$, $\lambda \in [0;1]$. Далі,

$$\varphi(\mathbf{x}(\lambda)) = \varphi\left(\lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2\right) \leqslant \lambda\varphi\left(\mathbf{x}^1\right) + (1-\lambda)\varphi\left(\mathbf{x}^2\right) \leqslant \lambda c + (1-\lambda)c = c.$$

Отже, взявши дві точки $\mathbf{x}^1$ і $\mathbf{x}^2 \in R$, ми довели, що точка $\mathbf{x}(\lambda)$ при $\lambda \in [0;1]$ теж належить множині R. А це означає, що R — опукла множина. ☑

Розглянемо теорему, що показує зв'язок між опуклими функціями і опуклими множинами.

Теорема 5.2. *Для того, щоб функція $\varphi(\mathbf{x})$, визначена на опуклій множині R, була опуклою, необхідно і достатньо, щоб була опуклою множина*

$$\overline{R} = \{\mathbf{x},\, y \mid \mathbf{x} \in R\, y \geqslant \varphi(\mathbf{x})\}\,.$$

Геометричне тлумачення: функція $\varphi(\mathbf{x})$, що визначена на опуклій множині R, опукла тоді і тільки тоді, коли її надграфік є опуклою множиною.

Розглянемо декілька властивостей опуклих функцій.

1) Опукла на опуклій множині R функція $\varphi\left(\mathbf{x}\right)$ є неперервною у всіх внутрішніх точках множини R. Це означає, що опукла функція може мати розриви тільки на межі множини R.
2) Якщо функції $\varphi_i(\mathbf{x})$, $(i = \overline{1, m},\ \mathbf{x} \in R)$ опуклі на опуклій множині R, то при довільних $\alpha_i \geqslant 0$ опуклі й функції

$$\psi\left(\mathbf{x}\right) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \varphi_i\left(\mathbf{x}\right), \quad \alpha_i \geqslant 0,$$
$$f\left(\mathbf{x}\right) = \max_{1 \leqslant i \leqslant m} \varphi_i\left(\mathbf{x}\right).$$

Доведення. Доведемо, що функція $\psi\left(\mathbf{x}\right) = \sum\limits_{i=1}^{m} \alpha_i \varphi_i\left(\mathbf{x}\right)$ є опуклою. Використовуємо означення опуклої функції. Візьмемо дві точки $\mathbf{x}^1$, $\mathbf{x}^2 \in R$, $0 \leqslant \lambda \leqslant 1$. Тоді

$$\psi\left(\lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2\right) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \varphi_i\left(\lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2\right) \leqslant$$
$$\leqslant \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left[\lambda\varphi_i\left(\mathbf{x}^1\right) + (1-\lambda)\varphi_i\left(\mathbf{x}^2\right)\right] = \lambda \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \varphi_i\left(\mathbf{x}^1\right) + (1-\lambda) \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \varphi_i\left(\mathbf{x}^2\right) =$$
$$= \lambda\psi\left(\mathbf{x}^1\right) + (1-\lambda)\psi\left(\mathbf{x}^2\right),$$

а це означає, що функція $\psi(\mathbf{x})$ є опуклою.

Теорема 5.3. *Якщо функція $\varphi(\mathbf{x})$ опукла на опуклій множині R, то точка локального мінімуму функції $\varphi(\mathbf{x})$ одночасно є точкою глобального мінімуму на R. Множина всіх точок мінімумів $\varphi(\mathbf{x})$ на R опукла (якщо вона не пуста). Якщо $\varphi(\mathbf{x})$ строго опукла функція на R, то вона може досягати свого мінімуму на R в одній точці.*

Доведення. Нехай $\mathbf{x}$ — точка локального мінімуму функції $\varphi(\mathbf{x})$, тобто існує такий окіл Q точки $\mathbf{x}^*$, що $\varphi(\mathbf{x}^*) \leqslant \varphi(\mathbf{x})$ для $\mathbf{x} \in Q \cap R$. Нехай існує така точка $\overline{\mathbf{x}} \in R$, що $\varphi(\mathbf{x}^*) > \varphi(\overline{\mathbf{x}})$. Так як $\mathbf{x} = \mathbf{x}^* + \alpha\left(\overline{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\right) \in Q \cap R$ при достатньо малих α, $0 < \alpha < 1$, то, враховуючи опуклість функції $\varphi(\mathbf{x})$, отримаємо

$$\varphi\left(\mathbf{x}^*\right) \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}^* + \alpha\left(\overline{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\right)\right) = \varphi\left(\alpha\overline{\mathbf{x}} + (1-\alpha)\mathbf{x}^*\right) \leqslant$$
$$\leqslant \alpha\varphi\left(\overline{\mathbf{x}}\right) + (1-\alpha)\varphi\left(\mathbf{x}^*\right) < \alpha\varphi\left(\mathbf{x}^*\right) + (1-\alpha)\varphi\left(\mathbf{x}^*\right) = \varphi\left(\mathbf{x}^*\right).$$

Отримали суперечність. Отже, точка $\mathbf{x}^*$ є точкою глобального мінімуму функції $\varphi(\mathbf{x})$ на множині R.

Далі, якщо опукла функція досягає свого мінімуму у двох різних точках $\mathbf{x}^1$ і $\mathbf{x}^2 \in R$, то вона досягає мінімуму у всіх точках відрізку, що з'єднує ці дві точки. Це випливає із співвідношення

$$\varphi\left(\mathbf{x}^1\right) \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}^1 + \alpha\left(\mathbf{x}^2 - \mathbf{x}^1\right)\right) \leqslant$$
$$\leqslant \alpha\varphi\left(\mathbf{x}^2\right) + (1-\alpha)\varphi\left(\mathbf{x}^1\right) \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}^1\right) \text{ (так як } \varphi\left(\mathbf{x}^1\right) = \varphi\left(\mathbf{x}^2\right)\text{)},$$

що перетворюється у рівність при усіх α, $0 \leqslant \alpha \leqslant 1$.

Однак у випадку строго опуклої функції така рівність неможлива при $0 < \alpha < 1$, тобто існує тільки одна точка мінімуму. ☑

Теорема 5.4. *Якщо функція $\varphi(\mathbf{x})$ є опуклою на опуклій множині R і диференційовна, то*

$$\left(\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^2\right)}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2\right) \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}^1\right) - \varphi\left(\mathbf{x}^2\right) \leqslant \left(\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2\right).$$

Теорема 5.5. *Нехай опукла функція $\varphi\left(\mathbf{x}\right)$ неперервно диференційовна на опуклій множині R. Для того, щоб точка $\mathbf{x}^*$ була точкою мінімуму функції $\varphi\left(\mathbf{x}\right)$, необхідно і достатньо, щоб*

$$\left(\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x} - \mathbf{x}^*\right) \geqslant 0 \quad \textit{для всіх } \mathbf{x} \in R.$$

Якщо $\mathbf{x}^*$ — внутрішня точка множини R, то виконується умова $\dfrac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}} = 0$.

Доведення.

Необхідність. Нехай $\mathbf{x}^* \in R$ — точка мінімуму функції $\varphi\left(\mathbf{x}\right)$ на R. Тоді для довільних $\mathbf{x} \in R$ і α, $0 < \alpha < 1$, отримаємо

$$0 \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}^* + \alpha\left(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\right)\right) - \varphi\left(\mathbf{x}^*\right) = \\ = \varphi\left(\mathbf{x}^*\right) + \alpha\left(\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x} - \mathbf{x}^*\right) + o(\alpha) - \varphi\left(\mathbf{x}^*\right) = \\ = \alpha\left(\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x} - \mathbf{x}^*\right) + o(\alpha),$$

де $o(\alpha)$ — така величина, що $\lim\limits_{\alpha\to+0} \dfrac{o(\alpha)}{\alpha} = 0$. Маємо

$$\left(\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x} - \mathbf{x}^*\right) + \frac{o(\alpha)}{\alpha} \geqslant 0,$$
$$\lim_{\alpha\to+0}\left[\left(\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x} - \mathbf{x}^*\right) + \frac{o(\alpha)}{\alpha}\right] \geqslant 0,$$
$$\left(\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x} - \mathbf{x}^*\right) \geqslant 0. \tag{5.2}$$

Зазначимо, що опуклість функції не використовувалась.

Нехай $\mathbf{x}^*$ — внутрішня точка множини R і $\mathbf{h}$ — довільний вектор з E^n. Тоді точка $\mathbf{x} = \mathbf{x}^* + \alpha\mathbf{h} \in R$ при достатньо малих α, $|\alpha| \leqslant \alpha_0$. Тоді в (5.2) покладемо $\mathbf{x} = \mathbf{x}^* + \alpha\mathbf{h}$, отримаємо $\alpha\left(\dfrac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}}, h\right) \geqslant 0$ при всіх α, $|\alpha| \leqslant \alpha_0$, що можливо тільки при $\left(\dfrac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}}, h\right) = 0$. Так як $\mathbf{h}$ — довільний вектор, то $\dfrac{\partial\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}} = 0$.

Достатність. Нехай $\varphi\left(\mathbf{x}\right)$ — опукла функція і для деякої точки $\mathbf{x}^*$ виконується (5.2). Тоді з лівої нерівності теореми 5.4 отримаємо

$$\left(\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^*\right)}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x} - \mathbf{x}^*\right) \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}\right) - \varphi\left(\mathbf{x}^*\right) \quad \text{при всіх } \mathbf{x} \in R,$$

а це означає, що $\varphi\left(\mathbf{x}\right) \geqslant \varphi\left(\mathbf{x}^*\right)$ для довільних $\mathbf{x} \in R$. ☑

Теорема 5.6. *Якщо функція $\varphi\left(\mathbf{x}\right)$ двічі неперервно диференційовна, то для опуклості її на опуклій множині R необхідно і достатньо, щоб матриця $\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}^2}$ була невід'ємною для всіх $\mathbf{x} \in R$. Якщо ж матриця додатна, то функція $\varphi\left(\mathbf{x}\right)$ — строго опукла.*

5.1. Теореми про відокремлення опуклих множин

Нехай задані множини X і Y в E^n.

Означення 5.6. *Кажуть, що множини можна* ***відокремити****, якщо існують вектор* $\mathbf{c} \neq \mathbf{0}$ *і число* α *такі, що виконуються нерівності*

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{x} \geqslant \alpha, \quad \mathbf{c}^\top \mathbf{y} \leqslant \alpha \tag{5.3}$$

для всіх $\mathbf{x} \in X$, $\mathbf{y} \in Y$.

Якщо у (5.3) *виконуються строгі нерівності, то множини* X *і* Y ***строго віддільні****.*

Означення 5.7. *Гіперплощина, що задається рівнянням*

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{x} = \alpha,$$

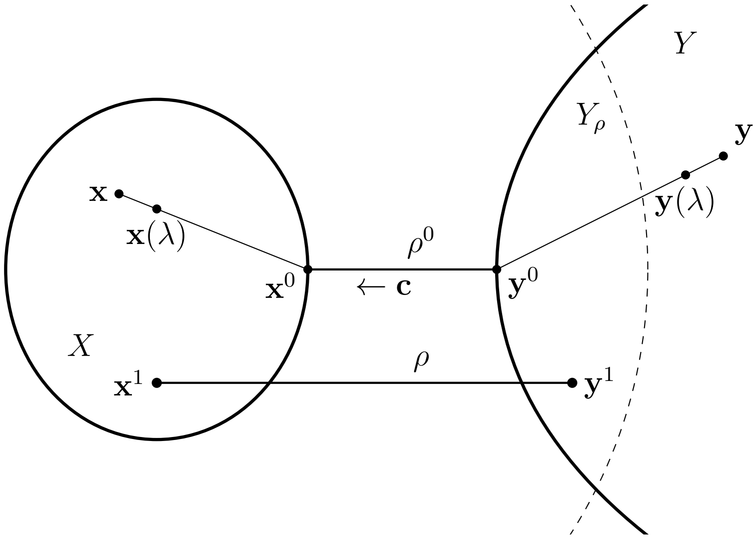
називається ***відокремлюючою гіперплощиною****.*

Теорема 5.7 (про строгу віддільність множин). *Якщо множини* X *та* Y *опуклі, замкнені, не мають спільних точок і одна з них обмежена, то їх можна строго відокремити.*

Доведення. Нехай, наприклад, обмеженою є множина X. У множинах X і Y візьмемо по одній точці $\mathbf{x}^1$ і $\mathbf{y}^1$, відстань між якими позначимо через ρ: $\|\mathbf{x}^1 - \mathbf{y}^1\| = \rho$. Перетин замкненого ρ-околу множини X з множиною Y позначимо через Y_ρ. Множини X і Y_ρ обмежені, замкнені і непусті ($\mathbf{y}^1 \in Y_\rho$). Тому неперервна функція $f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$ досягає на (X, Y_ρ) мінімуму

$$\min_{\mathbf{x} \in X,\, \mathbf{y} \in Y_\rho} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| = \left\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{y}^0\right\| = \rho^0. \tag{5.4}$$

Число ρ_0 є мінімальною відстанню між множинами X і Y_ρ та між X і Y. Так як множини X і Y не мають спільних точок, то $\rho^0 > 0$.



Нехай $\mathbf{x}$ — довільна точка з X. Так як множина X опукла, то точка $\mathbf{x}(\lambda) = \lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{x}^0$ при довільних λ $(0 \leqslant \lambda \leqslant 1)$ належить множині X.

За означенням (5.4) точок $\mathbf{x}^0$, $\mathbf{y}^0$ отримаємо, що функція

$$\varphi(\lambda) = \left\|\mathbf{x}(\lambda) - \mathbf{y}^0\right\|^2 = \left(\mathbf{x}(\lambda) - \mathbf{y}^0\right)^\top \left(\mathbf{x}(\lambda) - \mathbf{y}^0\right), \quad 0 \leqslant \lambda \leqslant 1$$

у межовій точці $\lambda = 0$ відрізка $[0;1]$ досягає мінімуму. Тому

$$\left.\frac{\mathrm{d}\varphi(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda=0} = 2\left(\mathbf{x}(\lambda) - \mathbf{y}^0\right)^\top \left.\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda=0} = 2\left(\mathbf{x}^0 - \mathbf{y}^0\right)^\top \left(\mathbf{x} - \mathbf{x}^0\right) \geqslant 0.$$

Нехай

$$\mathbf{c} = \frac{\mathbf{x}^0 - \mathbf{y}^0}{\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{y}^0\|}, \tag{5.5}$$

тоді отримаємо нерівність

$$\mathbf{c}^\top\mathbf{x} \geqslant \mathbf{c}^\top\mathbf{x}^0, \tag{5.6}$$

яка справедлива для всіх $\mathbf{x} \in X$.

Візьмемо довільну точку $\mathbf{y} \in Y$. Так як Y — опукла множина, то точка $\mathbf{y}(\lambda) = \lambda\mathbf{y} + (1-\lambda)\mathbf{y}^0$ при $\lambda \in [0;1]$ теж належить множині Y. Тоді функція

$$\psi(\lambda) = \left\|\mathbf{y}(\lambda) - \mathbf{x}^0\right\|^2 = \left(\mathbf{y}(\lambda) - \mathbf{x}^0\right)^\top \left(\mathbf{y}(\lambda) - \mathbf{x}^0\right), \quad 0 \leqslant \lambda \leqslant 1$$

досягає мінімуму в точці $\lambda = 0$. Маємо

$$\left.\frac{\mathrm{d}\psi(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda=0} = 2\left(\mathbf{y}(\lambda) - \mathbf{x}^0\right)^\top \left.\frac{\mathrm{d}\mathbf{y}(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\lambda=0} = 2\left(\mathbf{y}^0 - \mathbf{x}^0\right)^\top \left(\mathbf{y} - \mathbf{y}^0\right) \geqslant 0.$$

Використовуючи (5.5), отримаємо нерівність

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{y} \leqslant \mathbf{c}^\top \mathbf{y}^0, \quad \mathbf{y} \in Y. \tag{5.7}$$

Покажемо, що гіперплощина

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{x} = \alpha, \tag{5.8}$$

де

$$\alpha = \frac{\mathbf{c}^\top \left(\mathbf{x}^0 + \mathbf{y}^0\right)}{2}, \tag{5.9}$$

що проведена через середину відрізка, який з'єднує точки $\mathbf{x}^0$, $\mathbf{y}^0$, строго розділяє множини X і Y.

Дійсно, з означення (5.5) вектора $\mathbf{c}$ маємо

$$\mathbf{c}^\top \left(\mathbf{x}^0 - \mathbf{y}^0\right) = \frac{\left(\mathbf{x}^0 - \mathbf{y}^0\right)^\top \left(\mathbf{x}^0 - \mathbf{y}^0\right)}{\left\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{y}^0\right\|} = \left\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{y}^0\right\| = \rho^0.$$

Тому $\mathbf{c}^\top \mathbf{x}^0 = \mathbf{c}^\top \mathbf{y}^0 + \rho^0$ і $\mathbf{c}^\top \mathbf{y}^0 = \mathbf{c}^\top \mathbf{x}^0 - \rho^0$. Підкладаючи ці вирази в (5.9), отримаємо

$$\alpha = \mathbf{c}^\top \mathbf{x}^0 - \frac{\rho^0}{2} \quad \text{і} \quad \alpha = \mathbf{c}^\top \mathbf{y}^0 + \frac{\rho^0}{2}.$$

Звідси

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{x}^0 = \alpha + \frac{\rho^0}{2} > \alpha, \tag{5.10}$$

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{y}^0 = \alpha - \frac{\rho^0}{2} < \alpha, . \tag{5.11}$$

Використовуючи (5.6) і (5.10), отримаємо

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{x} \geqslant \mathbf{c}^\top \mathbf{x}^0 > \alpha, \qquad \mathbf{c}^\top \mathbf{x} > \alpha, \quad \mathbf{x} \in X,$$

а (5.7) і (5.11) дають

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{y} \leqslant \mathbf{c}^\top \mathbf{y}^0 < \alpha, \qquad \mathbf{c}^\top \mathbf{y} < \alpha, \quad \mathbf{y} \in Y.$$

Отримали, що $\mathbf{c}^\top \mathbf{x} > \alpha$, $\mathbf{x} \in X$, $\mathbf{c}^\top \mathbf{y} < \alpha$, $\mathbf{y} \in Y$. Множини X і Y строго віддільні. Теорему доведено. ☑

Означення 5.8. *Гіперплощина* $\mathbf{c}^\top \mathbf{x} = \alpha$ *називається* ***опорною*** *до множини* X *у точці* $\mathbf{x}^0$*, якщо* $\mathbf{c}^\top \mathbf{x}^0 = \alpha$, $\inf \left\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^0\right\| = 0$ *і виконується одна з нерівностей:*

$\mathbf{c}^\top\mathbf{x} \geqslant \alpha$, $\mathbf{c}^\top\mathbf{x} \leqslant \alpha$.

Наслідок 5.1. *Опукла множина X у кожній межовій точці має опорну гіперплощину.*

Теорема 5.8 (про нестрогу віддільність множин). *Якщо опуклі множини X, Y не мають спільних внутрішніх точок, то їх можна відокремити.*

Доведення. Побудуємо множину $Z = X - Y = \{\mathbf{x} - \mathbf{y} \mid \mathbf{x} \in X,\ \mathbf{y} \in Y\}$. Множина Z — опукла. Дійсно, якщо $\mathbf{z}^1 = \mathbf{x}^1 - \mathbf{y}^1 \in Z$ і $\mathbf{z}^2 = \mathbf{x}^2 - \mathbf{y}^2 \in Z$, то для довільного λ $(0 \leqslant \lambda \leqslant 1)$ точка

$$\begin{aligned}\mathbf{z}(\lambda) = \lambda\mathbf{z}^1 + (1-\lambda)\mathbf{z}^2 = \lambda\mathbf{x}^1 - \lambda\mathbf{y}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2 - (1-\lambda)\mathbf{y}^2 = \\ = \left[\lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2\right] - \left[\lambda\mathbf{y}^1 + (1-\lambda)\mathbf{y}^2\right] = \mathbf{x}(\lambda) - \mathbf{y}(\lambda) \in Z,\end{aligned}$$

так як $\mathbf{x}(\lambda) = \lambda\mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2 \in X$, $\mathbf{y}(\lambda) = \lambda\mathbf{y}^1 + (1-\lambda)\mathbf{y}^2 \in Y$ згідно з опуклістю множин X і Y.

Якщо множини X і Y не мають спільних внутрішніх точок, то нульова точка не може бути внутрішньою точкою множини Z.

У взаємному розташуванні нульової точки і множини Z можливі два випадки.

а) Точка $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ не належить замиканню $\overline{Z}$. У цьому випадку за теоремою 5.7 точка $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ строго відокремлена від множини Z, тобто $\mathbf{c}^\top\mathbf{0} < \alpha$, $\mathbf{c}^\top\mathbf{z} > \alpha$ для всіх $\mathbf{z} \in Z$ (за теоремою 5.7), або $\mathbf{c}^\top(\mathbf{x} - \mathbf{y}) > 0$ для $\mathbf{x} \in X$ і $\mathbf{y} \in Y$. Отримали, що $\mathbf{c}^\top\mathbf{x} > \mathbf{c}^\top\mathbf{y}$, $\mathbf{x} \in X$, $\mathbf{y} \in Y$. Теорему доведено.

б) Точка $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ — межова точка множини Z, тобто $\mathbf{0} \in \overline{Z}$. У цьому випадку за наслідком 5.1 існує гіперплощина, що є опорною до Z у точці $\mathbf{z} = \mathbf{0}$. Тоді $\mathbf{c}^\top\mathbf{0} = \alpha$ і $\mathbf{c}^\top\mathbf{z} \geqslant \alpha = 0$ для $\mathbf{z} \in Z$. Звідси $\mathbf{c}^\top\mathbf{z} \geqslant 0$, $\mathbf{c}^\top(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \geqslant 0$, $\mathbf{c}^\top\mathbf{x} \geqslant \mathbf{c}^\top\mathbf{y}$, $\mathbf{x} \in X$, $\mathbf{y} \in Y$. Теорему доведено.

☑

Розглянемо основну теорему опуклого програмування для задачі

$$\begin{gathered}\min \varphi(\mathbf{x}) \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leqslant 0, \quad \mathbf{x} \in R \subset E^n,\end{gathered} \tag{5.12}$$

де $\varphi(\mathbf{x})$ і компоненти m-вимірної функції $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ є опуклі функції на опуклій множині R.

Означення 5.9. *Обмеження задачі (5.12) задовольняють* ***умові Слейтера****, якщо існує вектор $\mathbf{x}^0 \in R$ такий, що $\mathbf{g}(\mathbf{x}^0) < 0$.*

Розглянемо нормальну функцію Лагранжа для задачі опуклого програмування.

Означення 5.10. *Сукупність* $(\mathbf{x}^0, \boldsymbol{\lambda}^0)$ *векторів* $\mathbf{x}^0 \in R$, $\boldsymbol{\lambda}^0 \geqslant 0$ *називається* ***сідловою точкою функції Лагранжа****, якщо для всіх* $\mathbf{x} \in R$ *і* $\boldsymbol{\lambda} \geqslant 0$ *виконується нерівність*

$$L\left(\mathbf{x}^0, \boldsymbol{\lambda}\right) \leqslant L\left(\mathbf{x}^0, \boldsymbol{\lambda}^0\right) \leqslant L\left(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^0\right).$$

Теорема 5.9 (Куна — Таккера). *Нехай обмеження* (5.12) *задовольняють умові Слейтера. Тоді для того щоб вектор* $\mathbf{x}^0 \in R$ *був розв'язком основної задачі опуклого програмування необхідно і достатньо, щоб існував вектор* $\boldsymbol{\lambda}^0 \geqslant \mathbf{0}$ *такий, що пара* $(\mathbf{x}^0, \boldsymbol{\lambda}^0)$ *була сідловою точкою функції Лагранжа* $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \varphi(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^\top \mathbf{g}(\mathbf{x})$.

Доведення.

Необхідність. В $(m+1)$-вимірному просторі побудуємо множини

$$\begin{gathered}A = \{\overline{\mathbf{y}} = (y_0, \mathbf{y}) \mid y_0 \geqslant \varphi(\mathbf{x}),\ \mathbf{y} \geqslant \mathbf{g}(\mathbf{x}) \text{ при деякому } \mathbf{x} \in R\},\\ B = \{\overline{\mathbf{y}} = (y_0, \mathbf{y}) \mid y_0 = \varphi(\mathbf{x}),\ \mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{x}) \text{ при деякому } \mathbf{x} \in R\},\\ Z = \left\{\overline{\mathbf{z}} = (z_0, \mathbf{z}) \mid z_0 < \varphi\left(\mathbf{x}^0\right),\ \mathbf{z} < \mathbf{0}\right\}.\end{gathered}$$

Множини A і Z — опуклі. Дійсно, нехай $(y_0^1, \mathbf{y}^1) \in A$ і $(y_0^2, \mathbf{y}^2) \in A$. Тоді за означенням множини A знайдуться вектори $\mathbf{x}^1 \in R$ і $\mathbf{x}^2 \in R$ такі, що

$$y_0^1 \geqslant \varphi\left(\mathbf{x}^1\right), \quad \mathbf{y}^1 \geqslant \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^1\right), \tag{5.13}$$

$$y_0^2 \geqslant \varphi\left(\mathbf{x}^2\right), \quad \mathbf{y}^2 \geqslant \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^2\right). \tag{5.14}$$

Побудуємо $\lambda y_0^1 + (1-\lambda) y_0^2$, отримаємо

$$\lambda y_0^1 + (1-\lambda) y_0^2 \geqslant \lambda \varphi\left(\mathbf{x}^1\right) + (1-\lambda)\varphi\left(\mathbf{x}^2\right) \geqslant \varphi\left(\lambda \mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2\right) = \varphi\left(\mathbf{x}(\lambda)\right),$$

так як функція $\varphi(\mathbf{x})$ опукла. Далі,

$$\lambda \mathbf{y}^1 + (1-\lambda)\mathbf{y}^2 \geqslant \lambda \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^1\right) + (1-\lambda)\mathbf{g}\left(\mathbf{x}^2\right) \geqslant \mathbf{g}\left(\lambda \mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2\right) = \mathbf{g}\left(\mathbf{x}(\lambda)\right)$$

в силу опуклості функції $\mathbf{g}(\mathbf{x})$. Так як $\mathbf{x}(\lambda) = \lambda \mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2 \in R$, то отримані нерівності доводять, що точка $(\lambda y_0^1 + (1-\lambda) y_0^2, \lambda \mathbf{y}^1 + (1-\lambda)\mathbf{y}^2)$ належить множині A. Отже, множина A — опукла.

Розглянемо множину Z. Візьмемо дві точки з цієї множини: $\overline{\mathbf{z}}^1$ і $\overline{\mathbf{z}}^2$. Маємо

$$\overline{\mathbf{z}}^1 = \left(z_0^1, \mathbf{z}^1\right), \quad \overline{\mathbf{z}}^2 = \left(z_0^2, \mathbf{z}^2\right) \quad \text{і} \quad z_0^1 < \varphi\left(\mathbf{x}^0\right), \ \mathbf{z}^1 < \mathbf{0}, \ z_0^2 < \varphi\left(\mathbf{x}^0\right), \ \mathbf{z}^2 < \mathbf{0}.$$

Тоді

$$\lambda\overline{\mathbf{z}}^1 + (1-\lambda)\overline{\mathbf{z}}^2 = \left(\lambda z_0^1 + (1-\lambda)z_0^2, \lambda\mathbf{z}^1 + (1-\lambda)\mathbf{z}^2\right)$$

і

$$\lambda z_0^1 + (1-\lambda)z_0^2 < \lambda\varphi\left(\mathbf{x}^0\right) + (1-\lambda)\varphi\left(\mathbf{x}^0\right) = \varphi\left(\mathbf{x}^0\right),$$
$$\lambda\mathbf{z}^1 + (1-\lambda)\mathbf{z}^2 < \lambda\cdot\mathbf{0} + (1-\lambda)\cdot\mathbf{0} = \mathbf{0},$$

а це і означає, що множина Z опукла.

Множини A і Z не мають спільних точок. Дійсно, нехай вони мають спільну точку $\overline{\mathbf{y}} = \overline{\mathbf{z}}$. Тоді якщо $\overline{\mathbf{y}} \in A$ і $\overline{\mathbf{z}} \in Z$, то при деякому $\overline{\mathbf{x}} \in R$ будуть виконуватися нерівності

$$\varphi\left(\overline{\mathbf{x}}\right) \leqslant y_0 = z_0 < \varphi\left(\mathbf{x}^0\right),$$
$$\mathbf{g}\left(\overline{\mathbf{x}}\right) \leqslant \mathbf{y} = \mathbf{z} < \mathbf{0},$$

а це означає, що точка $\mathbf{x}^0$ не є точкою мінімуму.

За теоремою про відокремлення опуклих множин (теорема 5.8) множини A і Z можна відокремити, тобто знайдеться $(m+1)$-вимірний вектор $\overline{\mathbf{c}} = (c_0, \mathbf{c})$, $\|\overline{\mathbf{c}}\| = 1$ такий, що

$$\overline{\mathbf{c}}^\top\overline{\mathbf{y}} \geqslant \overline{\mathbf{c}}^\top\overline{\mathbf{z}} \tag{5.15}$$

для всіх $\overline{\mathbf{y}} \in A$, $\overline{\mathbf{z}} \in Z$. З (5.15) і визначення множини Z отримаємо, що вектор $\overline{\mathbf{c}}$ невід'ємний, $\overline{\mathbf{c}} \geqslant \mathbf{0}$. Якщо припустити, що існує від'ємна координата $c_i < 0$, то для вектора

$$\overline{\mathbf{z}} = \left(\varphi\left(\mathbf{x}^0\right) + \varepsilon, \varepsilon, \ldots, \varepsilon, -\beta_i^2, \varepsilon, \ldots, \varepsilon\right)$$

з фіксованим $\varepsilon < 0$ і великим β отримаємо, що число $\overline{\mathbf{c}}^\top\overline{\mathbf{z}}$ може бути досить великим, що суперечить (5.15).

Множина B належить множині A, тому нерівність (5.15) виконується і при $\overline{\mathbf{y}} \in B$, тобто

$$c_0\varphi(\mathbf{x}) + \mathbf{c}^\top\mathbf{g}(\mathbf{x}) \geqslant \overline{\mathbf{c}}^\top\overline{\mathbf{z}} \quad \text{для всіх} \quad \mathbf{x} \in R. \tag{5.16}$$

Так як нерівність (5.16) виконується для всіх точок множини Z, вона буде виконуватись і для граничних точок множини Z, зокрема, для точки $(\varphi(\mathbf{x}^0), \mathbf{0})$:

$$c_0\varphi(\mathbf{x}) + \mathbf{c}^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}) \geqslant c_0\varphi\left(\mathbf{x}^0\right) \quad \text{для всіх} \quad \mathbf{x} \in R. \tag{5.17}$$

Доведемо, що $c_0 > 0$. Якщо $c_0 = 0$, то з $\bar{\mathbf{c}} \geqslant \mathbf{0}$, $\bar{\mathbf{c}} \neq \mathbf{0}$ отримаємо, що $\mathbf{c} \geqslant \mathbf{0}$, $\mathbf{c} \neq \mathbf{0}$, і тому згідно з (5.17)

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}) \geqslant 0 \quad \text{для всіх} \quad \mathbf{x} \in R. \tag{5.18}$$

За умовою Слейтера знайдеться вектор $\mathbf{x}^* \in R$ такий, що $\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) < \mathbf{0}$. Тому $\mathbf{c}^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) < 0$, що суперечить (5.18).

Покладемо $\boldsymbol{\lambda}^0 = \dfrac{\mathbf{c}}{c_0}$. Ясно, що $\boldsymbol{\lambda}^0 \geqslant \mathbf{0}$. Тоді з (5.17) отримаємо

$$\varphi(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}) \geqslant \varphi\left(\mathbf{x}^0\right) \quad \text{для всіх} \quad \mathbf{x} \in R. \tag{5.19}$$

Нехай $\mathbf{x} = \mathbf{x}^0$, отримаємо $\boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}^0) \geqslant 0$. Але з іншого боку $\boldsymbol{\lambda}^0 \geqslant \mathbf{0}$ і $\mathbf{g}(\mathbf{x}^0) \leqslant \mathbf{0}$, тоді $\boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}^0) \leqslant 0$. Маємо

$$\boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^0\right) = 0. \tag{5.20}$$

Нерівність (5.19) та рівність (5.20) дають

$$\varphi\left(\mathbf{x}^0\right) + \boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^0\right) \leqslant \varphi(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}) \quad \text{для всіх} \quad \mathbf{x} \in R. \tag{5.21}$$

Так як $\mathbf{g}(\mathbf{x}^0) \leqslant \mathbf{0}$, то для всіх $\boldsymbol{\lambda} \geqslant \mathbf{0}$ виконується нерівність $\boldsymbol{\lambda}^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}^0) \leqslant 0$. Використовуючи (5.20), отримаємо

$$\varphi\left(\mathbf{x}^0\right) + \boldsymbol{\lambda}^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^0\right) \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}^0\right) = \varphi\left(\mathbf{x}^0\right) + \boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^0\right) \quad \text{для всіх} \quad \boldsymbol{\lambda} \geqslant \mathbf{0}. \tag{5.22}$$

Поєднуючи (5.21) і (5.22), маємо, що пара $(\mathbf{x}^0, \boldsymbol{\lambda}^0)$ є сідловою точкою функції Лагранжа.

Достатність. Маємо, що $(\mathbf{x}^0, \boldsymbol{\lambda}^0)$ — сідлова точка функції Лагранжа, тобто

$$\varphi\left(\mathbf{x}^0\right) + \boldsymbol{\lambda}^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^0\right) \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}^0\right) + \boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^0\right) \leqslant \varphi(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in R, \quad \boldsymbol{\lambda} \geqslant \mathbf{0}. \tag{5.23}$$

Ліва частина нерівності дає

$$\boldsymbol{\lambda}^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^0\right) \leqslant \boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^0\right). \tag{5.24}$$

З (5.24) отримаємо, що $\mathbf{g}(\mathbf{x}^0) \leqslant \mathbf{0}$. Дійсно, якщо при деякому i $(1 \leqslant i \leqslant m)$ $g_i(\mathbf{x}^0) > 0$, то покладемо $\lambda_j = 0$, $j \neq i$, $j = \overline{1, m}$, беремо λ_i досить великим і отримаємо що ліва частина (5.24) буде як завгодно великою, що порушує (5.24).

З (5.24) зрозуміло, що виконується

$$\boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^0\right) = 0. \tag{5.25}$$

Дійсно, якщо припустити, що $\boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^0\right) < 0$, то візьмемо $\boldsymbol{\lambda} = \dfrac{1}{2}\boldsymbol{\lambda}^0$ і з (5.24) отримаємо суперечливу нерівність $0 \leqslant \dfrac{1}{2}\boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}^0\right) < 0$. З урахуванням (5.25) і правої частини (5.23) отримаємо

$$\varphi\left(\mathbf{x}^0\right) \leqslant \varphi(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}_0^\top \mathbf{g}\left(\mathbf{x}\right).$$

Звідси маємо, що для всіх $\mathbf{x} \in R$, що задовольняють нерівності $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leqslant \mathbf{0}$, повинна виконуватись нерівність

$$\varphi\left(\mathbf{x}^0\right) \leqslant \varphi(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in R.$$

Отже, $\mathbf{x}^0$ — розв'язок задачі.

Теорему доведено. ☑

Зауваження 5.1. Якщо функція $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ лінійна, то теорема справедлива і без умови Слейтера.

5.2. Завдання для самостійної роботи

1) Знати усі означення і формулювання теорем.
2) Вміти доводити теорему про необхідну і достатню умову мінімуму опуклої функції на опуклій множині.
3) Вміти доводити дві теореми про відокремлення множин.
4) Вміти доводити теорему Куна — Таккера.

5.3. Питання для самоконтролю

1) Дати означення опуклої множини.
2) Дати означення опуклої функції.
3) Сформулювати означення строго і сильно опуклої функції.
4) Сформулювати теорему про точку локального мінімуму опуклої функції.
5) Сформулювати необхідну і достатню умову мінімуму у задачі з опуклою функцією і обмеженнями.
6) Дати означення відокремлення двох множин.
7) Дати означення відокремлюючої множини.
8) Сформулювати теорему про строгу віддільність множин.

9) Дати означення опорної гіперплощини у точці до множини.
10) Сформулювати теорему про нестрогу віддільність множин.
11) Дати означення умови Слейтера.
12) Дати означення сідлової точки.
13) Сформулювати теорему Куна — Таккера.

6 Задача лінійного програмування

Розділ опуклого прорамування, в якому використовуються тільки лінійні функції, називається лінійним програмуванням. Далі «лінійне програмування» будемо писати ЛП.

Задачі ЛП були першими детально вивченими задачами оптимізації, при наявності обмежень типу нерівностей і рівностей. Термін «лінійне програмування» виник в результаті неточного перекладу англійського «linear programming». Одним із значень слова «programming» — складання планів, планування. Отже, правильним перекладом цього слова було б «лінійне планування» або «планування на основі лінійних співвідношень».

Основною задачею ЛП є задача:

$$
\begin{gathered}
\min(\mathbf{c}, \mathbf{x}) \\
\mathbf{x} \in R = \{\mathbf{x} \in E^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} \geqslant \mathbf{b}, \mathbf{x} \geqslant \mathbf{0}\},
\end{gathered}
\tag{6.1}
$$

де $\mathbf{A}$ — $m \times n$-матриця, $\mathbf{b}$ — m-вектор, $\mathbf{c}$ — n-вектор.

Матриця $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n]$ називається матрицею умов задачі. Її стовпчики $\mathbf{a}_i$, $i = \overline{1, n}$ називаються векторами умов задачі. Вектор $\mathbf{b}$ називається вектором обмежень.

Задачею, двоїстою до задачі (6.1), називається така задача:

$$
\begin{gathered}
\max(\mathbf{b}, \mathbf{y}) \\
\mathbf{y} \in Q = \left\{\mathbf{y} \in E^m \mid \mathbf{A}^\top \mathbf{y} \leqslant \mathbf{c}, \mathbf{y} \geqslant \mathbf{0}\right\},
\end{gathered}
\tag{6.2}
$$

Задача (6.1) є двоїстою до задачі (6.2).

Дійсно, розглянемо задачу, еквівалентну до задачі (6.2)

$$\min(\mathbf{b}, \mathbf{y})$$
$$Q = \left\{\mathbf{y} \mid -\mathbf{A}^\top \mathbf{y} \geqslant -\mathbf{c},\ \mathbf{y} \geqslant \mathbf{0}\right\}$$

і побудуємо згідно з означенням її двоїсту задачу

$$\max(-\mathbf{c}, \mathbf{x})$$
$$R = \{\mathbf{x} \mid -\mathbf{A}\mathbf{x} \leqslant -\mathbf{b},\ \mathbf{x} \geqslant \mathbf{0}\}$$

Ця задача еквівалентна наступній:

$$\min(\mathbf{c}, \mathbf{x})$$
$$R = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} \geqslant \mathbf{b}, \mathbf{x} \geqslant \mathbf{0}\},$$

а це і є задача (6.1).

Отже, задачі (6.1) і (6.2) взаємодвоїсті.

Можна дати геометричне тлумачення задачі ЛП у просторі обмежень — це перетин напівпросторів $(\mathbf{A}\mathbf{x})_i \geqslant b_i$, $i = \overline{1, m}$, $x_j \geqslant 0$, $j = \overline{1, n}$. Перетин напівпросторів і дає нам множину R. Лінії постійного рівня мають вигляд $(\mathbf{c}, \mathbf{x}) = \lambda$.

Розглянемо довільну точку $\mathbf{x}^0 \in R$. Їй відповідає значення цільової функції $\lambda_0 = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^0)$. Якщо зміщувати гіперплощину $(\mathbf{c}, \mathbf{x}) = \lambda$ у напрямку зменшення функції, а це є антиградієнт $(-\mathbf{c})$, до тих пір, поки вона останній раз не торкнеться множини R у точці $\mathbf{x}^*$, то ця точка $\mathbf{x}^*$ і буде розв'язком задачі.

Легко зобразити на малюнку випадки, коли R необмежена, але розв'язок існує; коли розв'язок існує, але не єдиний; коли R необмежена і функція теж необмежена на R.

6.1. Основні теореми лінійного програмування

Теорема 6.1 (Теорема двоїстості). *Пряма і двоїста задачі або мають розв'язок і тоді*

$$(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{y}^*)$$

або обидві не мають.

Доведення. Випишемо функцію Лагранжа для прямої і двоїстої задач. Для прямої задачі маємо:

$$L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{c}, \mathbf{x}) + (\mathbf{y}, \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}).$$

Двоїсту задачу перепишемо у вигляді основної задачі ЛП, тобто у вигляді (6.1):

$$\begin{array}{ll}
\max(\mathbf{b}, \mathbf{y}) & \min -(\mathbf{b}, \mathbf{y}) \\
\mathbf{y} \in Q & \mathbf{y} \in Q \\
Q = \{\mathbf{y} \mid \mathbf{A}^\top \mathbf{y} \leqslant \mathbf{c}, \mathbf{y} \geqslant 0\} \qquad & Q = \{\mathbf{y} \mid -\mathbf{A}^\top \mathbf{y} \geqslant -\mathbf{c}, \mathbf{y} \geqslant 0\}
\end{array}$$

Тоді функція Лагранжа для двоїстої задачі матиме вигляд:

$$L_2(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = -(\mathbf{b}, \mathbf{y}) + (\mathbf{x}, -\mathbf{c} + \mathbf{A}^\top \mathbf{y}).$$

Знайдемо зв'язок між функціями Лагранжа прямої і двоїстої задач:

$$\begin{aligned}
L_2(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = -(\mathbf{b}, \mathbf{y}) + (\mathbf{x}, -\mathbf{c} + \mathbf{A}^\top \mathbf{y}) = -(\mathbf{b}, \mathbf{y}) - (\mathbf{c}, \mathbf{x}) + (\mathbf{x}, \mathbf{A}^\top \mathbf{y}) = \\
= -[(\mathbf{b}, \mathbf{y}) + \mathbf{c}, \mathbf{x}) - (\mathbf{y}, \mathbf{A}\mathbf{x})] = -[(\mathbf{c}, \mathbf{x}) + (\mathbf{y}, \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x})] = -L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}).
\end{aligned}$$

Отже, отримали, що

$$L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -L_2(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \tag{6.3}$$

Припустимо, що задача (6.1) має розв'язок $\mathbf{x}^*$. Тоді згідно з теоремою Куна — Таккера знайдеться вектор $\mathbf{y}^*$ такий, що $(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)$ — сідлова точка функції Лагранжа, тобто

$$L_1(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}) \leqslant L_1(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \leqslant L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}^*).$$

Використовуючи (6.3), маємо

$$\begin{aligned}
-L_2(\mathbf{y}, \mathbf{x}^*) \leqslant -L_2(\mathbf{y}^*, \mathbf{x}^*) \leqslant -L_2(\mathbf{y}^*, \mathbf{x}), \\
L_2(\mathbf{y}^*, \mathbf{x}) \leqslant L_2(\mathbf{y}^*, \mathbf{x}^*) \leqslant L_2(\mathbf{y}, \mathbf{x}^*).
\end{aligned}$$

А це і означає, що $(\mathbf{y}^*, \mathbf{x}^*)$ є сідловою точкою функції Лагранжа, а згідно з теоремою Куна — Таккера $\mathbf{y}^*$ є розв'язком двоїстої задачі.

Якщо ж двоїста задача має розв'язок, то і пряма теж має розв'язок. Дійсно, так як двоїста має розв'язок, то існує $\mathbf{x}^*$ така, що $(\mathbf{y}^*, \mathbf{x}^*)$ є сідловою точкою функції Лагранжа для двоїстої задачі:

$$L_2(\mathbf{y}^*, \mathbf{x}) \leqslant L_2(\mathbf{y}^*, \mathbf{x}^*) \leqslant L_2(\mathbf{y}, \mathbf{x}^*).$$

Використовуючи (6.3), отримаємо

$$-L_1(\mathbf{x},\mathbf{y}^*) \leqslant -L_1(\mathbf{x}^*,\mathbf{y}^*) \leqslant -L_1(\mathbf{x}^*,\mathbf{y}),$$
$$L_1(\mathbf{x}^*,\mathbf{y}) \leqslant L_1(\mathbf{x}^*,\mathbf{y}^*) \leqslant L_1(\mathbf{x},\mathbf{y}^*).$$

А це і означає, що $\mathbf{x}^*$ є розв'язком прямої задачі ЛП.

Нехай пряма задача не має розв'язку, а двоїста має. Так як двоїста задача має розв'язок, то згідно з вищедоведеним пряма задача має розв'язок, що суперечить умові.

Якщо двоїста задача не має розв'язку, то і пряма задача теж не має розв'язку. Доводиться аналогічно.

Випишемо умови доповнюючої нежорсткості для прямої і двоїстої задач

$$(\mathbf{x}^*, \mathbf{c} - \mathbf{A}^\top \mathbf{y}^*) = 0,$$
$$(\mathbf{y}^*, \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^*) = 0.$$

Тоді $(\mathbf{x}^*, \mathbf{c}) = (\mathbf{x}^*, \mathbf{A}^\top \mathbf{y}^*)$ і $(\mathbf{y}^*, \mathbf{b}) = (\mathbf{y}^*, \mathbf{A}\mathbf{x}^*)$, але $(\mathbf{x}^*, \mathbf{A}^\top \mathbf{y}^*) = (\mathbf{y}^*, \mathbf{A}\mathbf{x}^*)$. Отримаємо $(\mathbf{x}^*, \mathbf{c}) = (\mathbf{y}^*, \mathbf{b})$. ☑

Наслідок 6.1. *Якщо i-те обмеження прямої задачі пасивне в точці $\mathbf{x}^*$, то i-та компонента розв'язку $\mathbf{y}^*$ двоїстої задачі дорівнює нулеві. Якщо i-те обмеження двоїстої задачі пасивне в точці $\mathbf{y}^*$, то i-та компонента розв'язку $\mathbf{x}^*$ прямої дорівнює нулеві.*

Теорема 6.2. *Для довільних припустимих $\mathbf{x} \in R$ і $\mathbf{y} \in Q$ виконується нерівність*

$$(\mathbf{c}, \mathbf{x}) \geqslant (\mathbf{b}, \mathbf{y}). \tag{6.4}$$

Доведення. Випишемо множини R і Q

$$R = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} \geqslant \mathbf{b}, \mathbf{x} \geqslant 0\}, \quad Q = \{\mathbf{y} \mid \mathbf{A}^\top \mathbf{y} \leqslant \mathbf{c}, \mathbf{y} \geqslant 0\}.$$

Тоді $(\mathbf{c}, \mathbf{x}) \geqslant (\mathbf{A}^\top \mathbf{y}, \mathbf{x}) = (\mathbf{y}, \mathbf{A}\mathbf{x}) \geqslant (\mathbf{y}, \mathbf{b})$. ☑

Теорема 6.3. *Якщо $\mathbf{x}^* \in R$ і $\mathbf{y}^* \in Q$, а $(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{y}^*)$, то $\mathbf{x}^*$ і $\mathbf{y}^*$ оптимальні розв'язки відповідно прямої і двоїстої задач.*

Доведення. Для довільного $\mathbf{x} \in R$ згідно з (6.4) і умовою теореми маємо

$$(\mathbf{c}, \mathbf{x}) \geqslant (\mathbf{b}, \mathbf{y}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^*),$$

а це означає, що $\mathbf{x}^*$ є розв'язком прямої задачі.

Далі,

$$(\mathbf{b}, \mathbf{y}) \leqslant (\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{y}^*),$$

звідси маємо, що $\mathbf{y}^*$ — розв'язок двоїстої задачі. ☑

Теорема 6.4. *Якщо* $(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = \min_R(\mathbf{c}, \mathbf{x})$ *і якщо існують* $\mathbf{x}^1, \ldots, \mathbf{x}^M$ *такі, що* $\mathbf{x}^i \in R$, $i = \overline{1, M}$ *і* $\mathbf{x}^* = \sum\limits_{i=1}^{M} \alpha_i \mathbf{x}^i$, *де* $\sum\limits_{i=1}^{M} \alpha_i = 1$, $\alpha_i > 0$, $i = \overline{1, M}$, *то* $(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^1) = \ldots = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^M)$.

Доведення. Нехай

$$(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) \leqslant (\mathbf{c}, \mathbf{x}^1) \leqslant \ldots \leqslant (\mathbf{c}, \mathbf{x}^M). \tag{6.5}$$

Тоді

$$(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = (\mathbf{c}, \sum_{i=1}^{M} \alpha_i \mathbf{x}^i) = \sum_{i=1}^{M} \alpha_i (\mathbf{c}, \mathbf{x}^i) \geqslant \sum_{i=1}^{M} \alpha_i (\mathbf{c}, \mathbf{x}^1) = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^1).$$

Враховуючи (6.5), отримаємо $(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^1)$. Зробимо індуктивне припущення

$$(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^1) = \ldots = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^k), \quad (k < M)$$

і доведемо, що $(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^{k+1})$. Дійсно,

$$(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = \sum_{i=1}^{M} \alpha_i (\mathbf{c}, \mathbf{x}^i) = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i (\mathbf{c}, \mathbf{x}^i) + \sum_{i=k+1}^{M} \alpha_i (\mathbf{c}, \mathbf{x}^i) \geqslant$$
$$\geqslant (\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) \sum_{i=1}^{k} \alpha_i + \sum_{i=k+1}^{M} \alpha_i (\mathbf{c}, \mathbf{x}^{k+1}) = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) \sum_{i=1}^{k} \alpha_i + (\mathbf{c}, \mathbf{x}^{k+1}) \sum_{i=k+1}^{M} \alpha_i.$$

Звідси

$$(1 - \sum_{i=1}^{k} \alpha_i)(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) \geqslant (\mathbf{c}, \mathbf{x}^{k+1}) \sum_{i=k+1}^{M} \alpha_i,$$
$$(1 - \sum_{i=1}^{k} \alpha_i)(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) \geqslant (\mathbf{c}, \mathbf{x}^{k+1})(1 - \sum_{i=1}^{k} \alpha_i).$$

Так як $\sum\limits_{i=1}^{k} \alpha_i < 1$, то

$$(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) \geqslant (\mathbf{c}, \mathbf{x}^{k+1}).$$

Враховуючи (6.5), отримаємо

$$(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^{k+1}).$$

Індукція завершена і теорема доведена. ☑

Означення 6.1. *Точка* $\mathbf{x}$ *множини* R *називаєтьcя кутовою (крайньою) точкою, якщо в* R *не існує таких точок* $\mathbf{x}^1$ *і* $\mathbf{x}^2$, $\mathbf{x}^1 \neq \mathbf{x}^2$, *що*

$$\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}^1 + (1-\lambda)\mathbf{x}^2 \in R \text{ при деяких } \lambda \in (0,1).$$

Теорема 6.5 (Теорема про зображення). *Довільна точка* $\mathbf{x}^0$ *опуклої, замкненої, обмеженої множини* R *може бути зображена у вигляді опуклої комбінації скінченної кількості кутових точок цієї множини:*

$$\mathbf{x}^0 = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \mathbf{x}^i, \quad \sum_{i=1}^{N} \alpha_i = 1, \quad \alpha_i > 0, \quad i = \overline{1,N}.$$

☑

Теорема 6.6. *Якщо задача ЛП має розв'язок* $\mathbf{x}^*$, *то існує кутова точка* $\overline{\mathbf{x}}$ *така, що*

$$(\mathbf{c}, \overline{\mathbf{x}}) = \min_{\mathbf{x}\in R} (\mathbf{c}, \mathbf{x}).$$

Доведення.

1) Нехай R — обмежена множина. Тоді за теоремою про зображення існують такі кутові точки $\mathbf{x}^1, \ldots, \mathbf{x}^N$ множини R, що

$$\mathbf{x}^* = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \mathbf{x}^i, \quad \sum_{i=1}^{N} \alpha_i = 1, \quad \alpha_i \geqslant 0, \quad i = \overline{1,N}.$$

Виокремимо ті точки, яким відповідають $\alpha_i = 0$. Перепозначимо точки з $\alpha_i \neq 0$, отримаємо

$$\mathbf{x}^* = \sum_{i=1}^{M} \alpha_i \mathbf{x}^i, \quad \sum_{i=1}^{M} \alpha_i = 1, \quad \alpha_i \geqslant 0, \quad i = \overline{1,M},$$

тобто виконуються умови теореми 6.4 і тому

$$(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^1) = \ldots = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^M).$$

За точку $\overline{\mathbf{x}}$ можна взяти довільну з $\mathbf{x}^i$, $i = \overline{1,M}$.

2) Множина R — необмежена.

Побудуємо множину

$$L = \left\{ \mathbf{x} \mid \sum_{i=1}^{n} x_i \leqslant \mu \right\}$$

так, щоб $x^* \in R \cap L$ і $x^* \overline{\in} l = \left\{ \mathbf{x} \mid \sum\limits_{i=1}^{n} x_i = \mu \right\}, \quad \mu > 0.$
Так як перетин «ортанта» $\mathbf{x} \geqslant 0$ з множиною L обмежена множина, то існують кутові точки $\mathbf{x}^1, \ldots, \mathbf{x}^M$ множини $R \cap L$ такі, що

$$(\mathbf{c}, \mathbf{x}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^1) = \ldots = (\mathbf{c}, \mathbf{x}^M).$$

Теорема буде доведена, якщо хоча б одна точка $\mathbf{x}^i$ не належить l. Якщо всі точки $\mathbf{x}^i$ належать l, то отримаємо

$$\mathbf{x}^* = \sum_{i=1}^{M} \alpha_i \mathbf{x}^i, \quad \sum_{i=1}^{M} \alpha_i = 1, \quad \alpha_i > 0, \quad i = \overline{1, M},$$
$$\sum_{j=1}^{n} x_j^* = \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{M} \alpha_i x_j^i = \sum_{i=1}^{M} \alpha_i \sum_{j=1}^{n} x_j^i = \sum_{i=1}^{M} \alpha_i \mu = \mu.$$

Це означає, що точка $\mathbf{x}^* \in l$, що суперечить побудові множини L.
Отже, існують крайні точки, що не належать множині l. Отримали випадок 1.

☑

6.2. Завдання для самостійної роботи

1) Знати усі означення і формулювання теорем.
2) Вміти доводити теореми 1, 2, 3, 4, 6.
3) Нехай i — номер академічної групи, j — порядковий номер прізвища студента у списку академічної групи. Розв'язати графічним, M-методом і модифікованим симплекс-методом задачу лінійного програмування

$$\min z = ix_1 + x_2$$
при обмеженнях
$$(i+4)x_1 + x_2 = j + 1,$$
$$(i+1)x_1 + x_2 \geqslant j,$$
$$ix_1 + x_2 \leqslant j,$$
$$x_1,\ x_2 \geqslant 0.$$

6.3. Питання для самоконтролю

1) Постановка задачі лінійного програмування (ЛП). Пряма і двоїста задачі.

2) Сформулювати теорему двоїстості.
3) Сформулювати означення кутової точки.
4) Сформулювати теорему про зображення.
5) Сформулювати теорему про те, що мінімум у задачі ЛП досягається у кутовій точці.

Частина III.

Чисельні методи безумовної мінімізації функцій багатьох змінних

Методи безумовної мінімізації

Методи безумовної мінімізації різняться або вибором напрямку спуску, або способом руху вздовж напрямку спуску. Методи спуску мають таку процедуру побудови послідовності $\{\mathbf{x}^k\}$. За початкову точку обирається, взагалі кажучи, довільна точка $\mathbf{x}^0 \in E^n$. Послідовні наближення $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \ldots$ знаходимо за алгоритмом

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \beta_k \mathbf{s}^k,$$

де $\mathbf{s}^k$ — напрямок спуску, β_k — довжина кроку руху вздовж $\mathbf{s}^k$.

У залежності від максимального порядку похідної, що бере участь в утворенні $\mathbf{s}^k$, методи бувають нульового, першого і другого порядків.

7 Методи нульового порядку

7.1. Покоординатний спуск з подвоєнням кроку

Опишемо перший цикл методу, що складається з n ітерацій.

Задаємо довільно початкову точку $\mathbf{x}^0$ і напрямок спуску обираємо $\mathbf{s}^0 = \pm e_1$ і визначаємо величину β_0 способом подвоєння (другий спосіб вибору кроку), так щоб $\varphi\left(\mathbf{x}^1\right) = \varphi\left(\mathbf{x}^0 + \beta_0\mathbf{s}^0\right) < \varphi\left(\mathbf{x}^0\right)$. Потім обираємо $\mathbf{s}^1 = \pm e_2$, $\beta = \beta_0$, подвоєнням розраховуємо β_1 і т. д. Цикл закінчується при $k = n - 1$, після чого починають наступний цикл, поклавши $\mathbf{s}^n = \pm e_1$ і т. д.

7.2. Класична схема покоординатного спуску

Нехай уже знаємо $\mathbf{x}^k$. Позначимо

$$\max_{i=\overline{1,n}} \left|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial x_i}\right| = \left|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial x_j}\right|.$$

Вважаємо, що $\left|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial x_j}\right| > 0$, так як інакше $\left|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial x}\right| = 0$ і процес мінімізації закінчується.

У формулі $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \beta_k\mathbf{s}^k$ у якості напрямку спуску $\mathbf{s}^k$ обирається e_j або $-e_j$, вздовж якого функція $\varphi(\mathbf{x})$ локально зменшується.

При дуже простих умовах на функцію можна отримати таку оцінку збіжності:

$$\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varphi\left(\mathbf{x}^*\right) \leqslant C\frac{n}{k},$$

де n — вимір простору. Цікаво, що ця оцінка залежить від кількості змінних у функції.

7.3. Метод Нелдера — Міда

У просторі E^n задається $(n+1)$ точка, які є вершинами регулярного многогранника. Ці точки є пробними у нашому методі. З геометрії відомо, що координати вершин регулярного многогранника визначаються матрицею D, стовпчики якої є вершинами:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & d_1 & d_2 & \dots & d_2 & d_2 \\ 0 & d_2 & d_1 & \dots & d_2 & d_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & d_2 & d_2 & \dots & d_2 & d_1 \end{pmatrix},$$

де $d_1 = \frac{1}{n\sqrt{2}}(\sqrt{n+1}+n-1)$, $d_2 = \frac{1}{n\sqrt{2}}(\sqrt{n+1}-1)$, t — відстань між вершинами.

Наприклад, для $n=2$, $t=1$ трикутник має такі координати:

Вершини	x_1	x_2
1	0	0
2	0.965	0.259
3	0.259	0.965

Розглянемо алгоритм методу. Нехай $\mathbf{x}_i^k = \left[x_{i1}^k, \dots, x_{in}^k\right]$, $i = \overline{1, n+1}$ є вершиною в E^n на k-му етапі пошуку. Відзначимо ті вершини многогранника, в яких $\varphi(\mathbf{x})$ досягає максимального і мінімального значення:

$$\varphi(\mathbf{x}_h^k) = \max\left[\varphi\left(\mathbf{x}_1^k\right), \dots, \varphi\left(\mathbf{x}_{n+1}^k\right)\right],$$
$$\varphi(\mathbf{x}_l^k) = \min\left[\varphi\left(\mathbf{x}_1^k\right), \dots, \varphi\left(\mathbf{x}_{n+1}^k\right)\right].$$

Нехай $\mathbf{x}_{n+2}^k$ буде центром ваги всіх вершин, за виключенням $\mathbf{x}_h$. Координати цього центру визначається за формулою

$$x_{n+2,j}^k = \frac{1}{n}\left[\sum_{i=1}^{n+1} x_{ij}^k - x_{hj}^k\right], \quad j = \overline{1, n},$$

де j — номер координати точки.

Крок 1. Відбиття. Проектуємо $\mathbf{x}_h^k$ через центр ваги відповідно із співвідношенням

$$\mathbf{x}_{n+3}^k = \mathbf{x}_{n+2}^k + \alpha\left(\mathbf{x}_{n+2}^k - \mathbf{x}_h^k\right),$$

де $\alpha > 0$ є коефіцієнтом відбиття.

Крок 2. Розтягування. Якщо $\varphi\left(\mathbf{x}_{n+3}^k\right) \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}_i^k\right)$, то вектор $\left(\mathbf{x}_{n+3}^k - \mathbf{x}_{n+2}^k\right)$ розтягується відповідно зі співвідношенням

$$\mathbf{x}_{n+4}^k = \mathbf{x}_{n+2}^k + \gamma\left(\mathbf{x}_{n+3}^k - \mathbf{x}_{n+2}^k\right),$$

де $\gamma > 1$ — коефіцієнт розтягування. Якщо $\varphi\left(\mathbf{x}_{n+4}^k\right) \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}_l^k\right)$, то $\mathbf{x}_h^k$ замінюємо на $\mathbf{x}_{n+4}^k$ і процедура починається з кроку 1 при $k = k+1$. В іншому випадку $\mathbf{x}_h^k$ замінимо на $\mathbf{x}_{n+3}^k$, і переходимо до кроку 1 при $k = k+1$.

Крок 3. Стиснення. Якщо $\varphi\left(\mathbf{x}_{n+3}^k\right) > \varphi\left(\mathbf{x}_i^k\right)$ для всіх $i \neq h$, то вектор $\left(\mathbf{x}_h^k - \mathbf{x}_{n+2}^k\right)$ стискується у відповідності з формулою

$$\mathbf{x}_{n+5}^k = \mathbf{x}_{n+2}^k + \beta\left(\mathbf{x}_h^k - \mathbf{x}_{n+2}^k\right),$$

де $0 < \beta < 1$ — коефіцієнт стиснення. Потім $\mathbf{x}_h^k$ замінюємо на $\mathbf{x}_{n+5}^k$ і повертаємося до кроку 1 при $k = k+1$.

Крок 4. Редукція. Якщо $\varphi\left(\mathbf{x}_{n+3}^k\right) > \varphi\left(\mathbf{x}_h^k\right)$, то всі вектори $\left(\mathbf{x}_i^k - \mathbf{x}_l^k\right), i = \overline{1, n+1}$ зменшуються у два рази відповідно з формулою

$$\mathbf{x}_i^k = \mathbf{x}_l^k + 0.5\left(\mathbf{x}_i^k - \mathbf{x}_l^k\right), \quad i = \overline{1, n+1}.$$

Потім повертаємося до кроку 1 при $k = k+1$.

Критерій зупинки має вигляд

$$\left\{\frac{1}{n+1}\sum_{i=1}^{n+1}\left[\varphi\left(\mathbf{x}_i^k\right) - \varphi\left(\mathbf{x}_{n+2}^k\right)\right]^2\right\}^2 \leqslant \varepsilon,$$

де ε — мале число, а $\mathbf{x}_{n+2}^k$ — центр ваги на k-му кроці.

Коефіцієнт відбиття α використовується для проектування вершини з найбільшим значенням $\varphi(\mathbf{x})$ через центр ваги многогранника.

Коефіцієнт γ вводиться для розтягування вектора пошуку у випадку, коли відбуття дає вершину зі значеннм $\varphi(\mathbf{x})$ меншим, ніж найменше значення $\varphi(\mathbf{x})$, отримане до відбиття.

Коефіцієнт стиснення β використовується для зменшення вектора пошуку, якщо операція відбиття не привела до вершини зі значенням $\varphi(\mathbf{x})$ меншим, ніж друге по величині (після найменшого) значення $\varphi(\mathbf{x})$, отримане до відбиття.

Таким чином, за допомогою операції розтягування або стиснення розміри і форма многогранника масштабуються так, щоб вони задовольняли топології задачі.

Яким же чином обрати α, β і γ? Рекомендації такі.

Нелдер і Мід довели, що при розв'язанні задачі з $\alpha = 1$ використовується менша кількість обислень функції, ніж при $\alpha < 1$. З іншого боку, α не повинна бути набагато більшим 1, тому що:

1) Многогранник краще адантується до топології задачі при менших значеннях α, особливо, коли необхідно змінювати напрямок пошуку, зіткнувшись зі зігнутою впадиною.
2) В околі локального мінімуму розміри многогранника повинні зменшуватися і велика α у цих випадках уповільняє збіжність. Отже, обирають $\alpha = 1$.

Недер і Мід рекомендували брати $\alpha = 1$, $\beta = 0.5$, $\gamma = 2$. Розміри і орієнтація початкового многогранника впливали на час розв'язування задачі, але значення α, β та γ мали більший вплив.

Павіані зазначає, що важко визначити правило вибору α, β та γ, але вплив вибору β на ефективність пошуку більший, ніж вибір γ. Він рекомендує такі діапазони вибору параметрів: $0.4 \leqslant \beta \leqslant 0.6$; $2.8 \leqslant \gamma \leqslant 3.0$. При $0 < \beta < 0.4$ існує ймовірність того, що через сплющення многогранника буде мати місце передчасне закінчення процесу. При $\beta > 0.6$ може збільшитись кількість кроків для досягнення точки мінімуму.

7.4. Метод Пауелла

Означення 7.1. *Напрямки* $\mathbf{s}_i$ *і* $\mathbf{s}_j$ *називаються спряженими, якщо* $\mathbf{s}_i \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x}^k)}{\partial \mathbf{x}^2} \mathbf{s}_j = 0$, $i \neq j$ *і матриця* $\frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x}^k)}{\partial \mathbf{x}^2}$ *додатно визначена* (> 0).

Нам відомі напрямки спуску $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \ldots, \mathbf{s}_n$. Спочатку це осі координат. Пошук починається на k-му етапі з деякої точки $\mathbf{x}_0^k = \mathbf{x}_{n+1}^{k-1}$ і проводиться таким чином:

Крок 1. Починаючи з точки $\mathbf{x}_0^k$ за допомогою якогось одновимірного методу визначаємо λ_1^k так, щоб $\varphi\left(\mathbf{x}_0^k + \lambda_1 \mathbf{s}_1^k\right)$ приймала мінімальне значення, і покладаємо $\mathbf{x}_1^k = \mathbf{x}_0^k + \lambda_1^k \mathbf{s}_1^k$. Починаємо з $\mathbf{x}_1^k$ і визначаємо λ_2^k так, щоб $\varphi\left(\mathbf{x}_1^k + \lambda_2 \mathbf{s}_2^k\right)$ приймала мінімальне значення і отримаємо $\mathbf{x}_2^k = \mathbf{x}_1^k + \lambda_2^k \mathbf{s}_2^k$. Таким же чином рухаємося вздовж усіх напрямків спуску $\mathbf{s}_3^k, \ldots, \mathbf{s}_n^k$.

Крок 2. Після мінімізації функції вздовж n напрямків робимо ще один крок: $2\mathbf{x}_n^k - \mathbf{x}_0^k = \mathbf{x}_{n+1}^k$.

Крок 3. Позначимо найбільше зменшення $\varphi(\mathbf{x})$ в будь-якому напрямку пошуку на k-му етапі через

$$\Delta^k = \max_{i=\overline{1,n}} \left\{ \varphi\left(\mathbf{x}_{i-1}^k\right) - \varphi\left(\mathbf{x}_i^k\right) \right\}.$$

Напрямок пошуку, що відповідає цій максимальна зміні $\varphi(\mathbf{x})$, позначимо через $\mathbf{s}_m^k$. Для компактності викладок позначимо $\varphi_1 = \varphi\left(\mathbf{x}_0^k\right)$, $\varphi_2 = \varphi\left(\mathbf{x}_n^k\right)$, $\varphi_3 = \varphi\left(2\mathbf{x}_n^k - \mathbf{x}_0^k\right)$. Тоді якщо $\varphi_3 \geqslant \varphi_1$ і (або)

$$(\varphi_1 - 2\varphi_2 + \varphi_3) \cdot \left(\varphi_1 - \varphi_2 - \Delta^k\right)^2 \geqslant 0.5 \cdot \Delta^k \left(\varphi_1 - \varphi_3\right)^2,$$

то на $(k+1)$ етапі використовують ті ж напрямки спуску $\mathbf{s}_1^k$, $\mathbf{s}_2^k$, $\ldots$, $\mathbf{s}_n^k$, що і на k-му етапі, тобто $\mathbf{s}_i^{k+1} = \mathbf{s}_i^k$, $i = \overline{1,n}$ і починаємо пошук з точки $\mathbf{x}_0^{k+1} = \mathbf{x}_n^k$ (або з $\mathbf{x}_0^{k+1} = 2\mathbf{x}_n^k - \mathbf{x}_0^k = \mathbf{x}_{n+1}^k$ в залежності від того, в якій точці функція $\varphi(\mathbf{x})$ приймає менше значення).

Крок 4. Якщо тест на кроці 3 не виконується, то шукаємо мінімум функції в напрямку вектора $\mathbf{s}^k = \mathbf{x}_n^k - \mathbf{x}_0^k$. Точка мінімуму функції в напрямку вектора $\mathbf{s}^k$ береться початковою для наступного $(k+1)$ етапу. Система напрямків, що використовується на $(k+1)$ етапі, та ж що і на k-му етапі, за виключенням напрямку $\mathbf{s}_m^k$, який замінюється на $\mathbf{s}^k$. Однак напрямок $\mathbf{s}^k$ розміщують в останньому стовпчикові матриці напрямків. Отже на $(k+1)$ етапі використовуються такі напрямки:

$$\left[\mathbf{s}_1^{k+1}, \ldots, \mathbf{s}_n^{k+1}\right] = \left[\mathbf{s}_1^k, \mathbf{s}_2^k, \ldots, \mathbf{s}_{m-1}^k, \mathbf{s}_{m+1}^k, \ldots, \mathbf{s}_n^k, \mathbf{s}^k\right].$$

Крок 5. Критерій задовільної збіжності для методу Пауелла, що використовується для визначення момента закінчення пошуку в кінці етапу, полягає в тому, що зміна на кожній незалежній змінній повинна бути меншою за точність ε_i, $i = \overline{1,n}$, або

$$\left\|\mathbf{x}_n^k - \mathbf{x}_0^k\right\| \leqslant 0.1 \cdot \varepsilon.$$

Якщо функція строго опукла, то послідовність точок збігається до точки, в якій градієнт функції дорівнює нулеві, а це означає, що точка є мінімумом функції.

7.5. Завдання для самостійної роботи

1) Знати алгоритми методів Нелдера — Міда, Пауелла, покоординатного спуску і класичного покоординатного спуску.
2) Знайти мінімум функції

$$\varphi(\mathbf{x}) = i\left(x_1 - n\right)^2 + \left(2x_2 + n\right)^2 + ix_1x_2$$

методами покоординатного спуску та класичного покоординатного спуску. Параметри: для першої групи $n = 3$, для другої групи $n = 7$; i — порядковий номер студента у списку групи.

3) Для отримання $\geqslant 90$ балів розв'язати попередній приклад методом Нелдера — Міда або Пауелла.

7.6. Питання для самоконтролю

1) Сформулювати алгоритм методу покоординатного спуску.
2) Сформулювати алгоритм Нелдера — Міда.
3) Метод Пауелла. Сформулювати його алгоритм.

8 Методи першого порядку

Для того щоб у чисельному методі мінімізації функції отримати послідовність точок, що збігається при деяких умовах до точки мінімуму, необхідно знати напрямок спуску і крок руху по напрямку спуску. Відомо, що напрямок $\mathbf{s}^k$ буде напрямком спуску в точці $\mathbf{x}^k$, якщо виконується умова

$$\left(\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{s}^k\right) < 0.$$

За допомогою цього співвідношення можна визначити, чи є напрямок $\mathbf{s}^k$ напрямком спуску.

Також необхідно знати, як обирати крок β_k у формулі для отримання послідовності точок

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \beta_k\mathbf{s}^k.$$

Розглянемо декілька способів вибору кроку β_k.

1) $\beta_k : \min\limits_{\beta\geqslant 0}\varphi\left(\mathbf{x}^k + \beta\mathbf{s}^k\right)$. Тобто необхідно скористатися одновимірною мінімізацією функції $\varphi\left(\mathbf{x}^k + \beta\mathbf{s}^k\right)$ за параметром β. Для цього користуємося методами одновимірної мінімізації, що розглядалися вище.
2) $\beta_k = \mathrm{const}$ і перевіряється умова монотонності $\varphi\left(\mathbf{x}^{k+1}\right) < \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)$. Якщо вона порушується, то β зменшуємо до тих пір, поки не відновиться монотонність. Час від часу β збільшують зі збереженням монотонності.
3) Задаємо деякі числа β, ε, $0 < \varepsilon < 1$, $0 < \beta < 1$. Далі перевіряємо на кожному кроці нерівність

$$\varphi\left(\mathbf{x}^k + \beta\mathbf{s}^k\right) \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varepsilon\beta\left\|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|^2.$$

Якщо нерівність не виконується, то замінюємо β на $\beta\varepsilon$ і перевірка повторюється.

4) Інколи величину β_k обирають до початку обчислень. Можна скористатися такою процедурою вибору β_k:

$$\beta_k > 0, \quad k = 0, 1, \ldots, \quad \sum_{k=0}^{\infty} \beta_k = +\infty, \quad \sum_{k=0}^{\infty} \beta_k^2 < +\infty$$

(наприклад, $\beta_k = \dfrac{C}{k+1}$). Умова збіжності ряду $\sum\limits_{k=0}^{\infty} \beta_k^2$ дає досить швидку збіжність послідовності β_k до нуля з метою забезпечення збіжності методу в околі точки мінімуму. Умова розбіжності $\sum\limits_{k=0}^{\infty} \beta_k$ забезпечує досягнення точки мінімуму при невдалому вибору точки $\mathbf{x}^0$.

Зазначимо, що у кожному із методів може бути і своє правило вибору β_k.

Критерії зупинки

Майже всі оптимізаційні методи дають розв'язок лише у граничному розумінні. Тому у програмах, що їх реалізують, доводиться передбачати спеціальні правила переривання розрахунку — критерії зупинки.

Оптимізаційний процес бажано перервати, якщо:

1) досягнута потрібна точність розв'язку;
2) добре наближення ще не знайдено, але швидкість руху до оптимуму досить мала і немає сенсу рахувати далі;
3) метод почав розбігатися або зациклився.

Якщо задача погано обумовлена, тобто $q = \dfrac{l}{L} \ll 1$, де l і L — мінімальне і максимальне власні числа матриці $\dfrac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}^2}$, то чекати доброго наближення $\mathbf{x}^k$ до $\mathbf{x}^*$ даремно. Тому регулювати точність будемо параметром τ — кількістю правильних розрядів $\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)$, що не перевищують за модулем одиниці, старші розряди після десяткової точки повинні враховуватись, навіть якщо у них знаходяться нулі. Наприклад, якщо $\tau = 10^{-5}$, то це означає, що при $|\varphi(\mathbf{x}^*)| \geqslant 1$ бажано, щоб у $\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)$ і $\varphi(\mathbf{x}^*)$ співпадали п'ять перших значущих цифр, а при $|\varphi(\mathbf{x}^*)| \leqslant 1$ — щоб $\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)$ і $\varphi(\mathbf{x}^*)$ різнилися не більше, ніж на 10^{-5}.

При розв'язуванні задач безумовної мінімізації гладких функцій критерій зупинки має вигляд:

$$A: \begin{array}{ll} A_1: & \varphi\left(\mathbf{x}^{k-1}\right)-\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)<\tau\left(1+\left|\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right|\right), \\ A_2: & \left\|\mathbf{x}^{k-1}-\mathbf{x}^k\right\|<\sqrt{\tau}\left(1+\left\|\mathbf{x}^k\right\|\right), \\ A_3: & \left\|\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\| \leqslant \sqrt[3]{\tau}\left(1+\left|\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right|\right). \end{array}$$

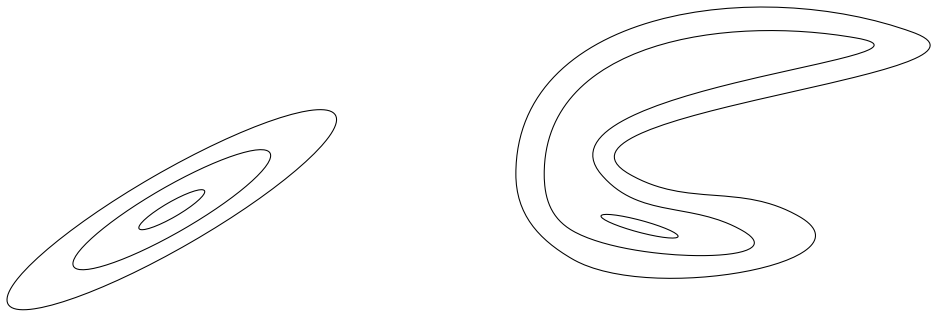
Означення 8.1. ***Лініями постійного рівня*** *функції $\varphi(\mathbf{x})$ називається множина точок $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, для яких виконується рівність $\varphi(\mathbf{x}) = \mathrm{const}$.*

Приклад 8.1. Розглянемо функцію $\varphi(\mathbf{x}) = x_1^2 + 25x_2^2$. Знайдемо лінії постійного рівня цієї функції. Маємо $x_1^2 + 25x_2^2 = c$; далі,

$$\frac{x_1^2}{(\sqrt{c})^2} + \frac{x_2^2}{\left(\sqrt{\dfrac{c}{25}}\right)^2} = 1.$$

Отже, лініями постійного рівня функції $\varphi(\mathbf{x}) = x_1^2 + 25x_2^2$ є еліпси.

Означення 8.2. *Функція $y = \varphi(\mathbf{x})$ називається* ***яристою****, якщо її лінії постійного рівня витягнуті або вигнуті.*



Це геометричне тлумачення яристої функції.

Означення 8.3. *Функція $y = \varphi(\mathbf{x})$ називається* ***яристою****, якщо її матриця Гессе, що розрахована у точці мінімуму, погано обумовлена, тобто $g = \dfrac{l}{L} \ll 1$, де l і L — мінімальне і максимальне власні числа цієї матриці.*

8.1. Градієнтний метод

Розглянемо дуже важливий в ідейному відношенні метод безумовної мінімізації — градієнтний метод. Цей метод рідко використовується на практиці. Він служить моделлю для побудови більш ефективних методів.

Нехай функція $\varphi(\mathbf{x})$ — неперервно диференційовна. Алгоритм градієнтного методу має вигляд

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \beta_k \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}.$$

Будемо вважати, що послідовність точок $\mathbf{x}^k$ така, що $\dfrac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}} \neq 0$. Тобто у жодній із точок $\mathbf{x}^k$ не виконується необхідна умова мінімуму.

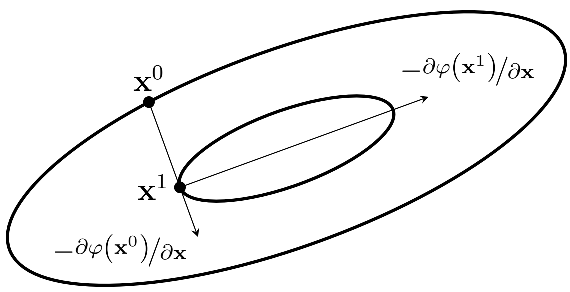
Зазначимо, що

$$\left(\frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{s}^k\right) = \left(\frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}, -\frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}\right) = -\left\|\frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}\right\| < 0,$$

а це означає, що $\mathbf{s}^k = -\dfrac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}$ є напрямок спуску (це відомо студентам ще на першому курсі при вивчені дисципліни «Математичний аналіз»).

Початкова точка обирається довільно. Якщо β_k обирати за першим способом: $\beta_k : \min\limits_{\beta \geqslant 0} \varphi\left(\mathbf{x}^k - \beta \dfrac{\partial \varphi(^k)}{\partial \mathbf{x}}\right)$, то метод називається методом найшвидшого спуску.

У методі найшвидшого спуску напрямок руху від точки $\mathbf{x}^k$ дотикається лінії постійного рівня функції у точці $\mathbf{x}^{k+1}$.

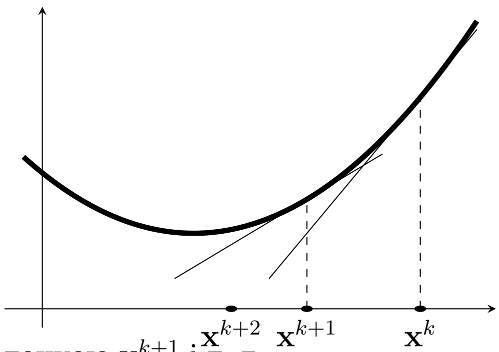


Послідовність точок $\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1, \ldots, \mathbf{x}^k, \ldots$ зигзагоподібно наближається до точки мінімуму $\mathbf{x}^*$, і при цьому ланки цього зигзагу ортогональні між собою. Дійсно, β обирається з умови мінімуму функції $\psi(\beta) = \varphi\left(\mathbf{x}^k - \beta \dfrac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}\right)$ і тому

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\beta} = -\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}^{k+1})}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}} = 0.$$

Таким чином, напрямки спуску на двох послідовних ітераціях взаємно ортогональні.

8.1.1. Геометрична інтерпретація градієнтного методу



У градієнтному методі функцію $\varphi(\mathbf{x})$ апроксимуємо в околі точки $\mathbf{x}^k$ лінійною функцією, тобто проводимо дотичну до функції $\varphi(\mathbf{x})$ у точці $(\mathbf{x}^k, \varphi(\mathbf{x}^k))$. Далі, замість функції $\varphi(\mathbf{x})$ мінімізуємо лінійну функцію. А так як вона не має мінімуму $(-\infty)$, то знаходимо її мінімум у невеликому околі точки $\mathbf{x}^k$. Ця точка мінімуму лінійної функції і є точкою $\mathbf{x}^{k+1}$ і т. д.

Розглянемо теореми збіжності.

Т е о р е м а 8.1. *Нехай функція $\varphi(\mathbf{x})$ диференційовна, обмежена знизу, а градієнт задовольняє умові Ліпшиця. Тоді послідовність $\{\mathbf{x}^k\}$ така, що*

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\partial \varphi(\mathbf{x}^k)}{\partial \mathbf{x}} = 0.$$

Для сильно опуклих функцій можна отримати більш точні оцінки.

Т е о р е м а 8.2. *Нехай функція $\varphi(\mathbf{x})$ сильно опукла, тобто*

$$m\|\mathbf{y}\|^2 \leqslant \left(\frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^2}\mathbf{y}, \mathbf{y}\right) \leqslant M\|\mathbf{y}\|^2, \quad \text{де} \quad M \geqslant m > 0,$$

а послідовність $\{\mathbf{x}^k\}$ будується методом найшвидшого спуску. Тоді $\{\mathbf{x}^k\}$ збігається до точки мінімуму зі швидкістю геометричної прогресії зі знаменником $q = \dfrac{M-m}{M+m}$, тобто

$$\left\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\right\| \leqslant \frac{M-m}{M+m}\left\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\right\|.$$

Зауваження 8.1. За величини M і m можна брати максимальне і мінімальне власні числа матриці $\dfrac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}^2}$.

Розглянемо квадратичну функцію $\varphi(\mathbf{x}) = \dfrac{1}{2}\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}^\top \mathbf{x} + c$, $\mathbf{A} > 0$. Якщо користуватися методом найшвидшого спуску, то крок β_k можна записати у явному вигляді:

$$\beta_k = \frac{\left\| \dfrac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}^2} \right\|^2}{\left(\mathbf{A} \dfrac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}^2}, \dfrac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}^2} \right)}.$$

Теорема 8.3. *Для квадратичної функції мають місце оцінки:*

$$\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varphi(\mathbf{x}^*) \leqslant \left(\varphi\left(\mathbf{x}^0\right) - \varphi(\mathbf{x}^*)\right) \left(\frac{L-l}{L+l}\right)^{2k},$$
$$\left\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\right\| \leqslant q^k \sqrt{2l^{-1}\left(\varphi(\mathbf{x}^0) - \varphi(\mathbf{x}^*)\right)}, \quad q = \frac{L-l}{L+l},$$

де l — найменше, а L — найбільше власні числа матриці $\mathbf{A}$.

Зауважимо, що перша оцінка у теоремі є точною.

Якщо порівнювати метод найшвидшого спуску з іншими варіантами градієнтного методу, то можна прийти до висновку, що метод найшвидшого спуску для квадратичної функції збігається не швидше, ніж інші варіанти градієнтного методу. Цей висновок справедливий і для неквадратичних функцій.

Однак, не слід вважати, що неможливо збільшити швидкість градієнтного методу шляхом вибору довжини кроку. Наприклад, якщо для мінімізації квадратичної функції застосувати градієнтний метод з $\beta_k = \dfrac{1}{\lambda_{k+1}}$, $k = 0, 1, \ldots, n-1$, де λ_k — власні числа матриці $\mathbf{A}$ і $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_n$, то такий варіант методу буде скінченним і $\mathbf{x}^n = \mathbf{x}^*$.

На практиці краще всього користуватися другим способом вибору кроку.

Якщо лінії постійного рівня є гіперсфери, то метод найшвидшого спуску збігається за один крок.

Отже, якщо функції гладкі і опуклі, то варіанти градієнтного методу збігаються зі швидкістю геометричної прогресії. Величина q для сильно опуклих функцій залежить від найбільшого і найменшого власних чисел матриці $\dfrac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}^2}$. Знаменник буде малим, якщо ці числа мало відрізняються одне від одного. Якщо ж вони сильно відрізняються (на порядок), то це означає, що функція яриста.

Мала швидкість збігу градієнтних методів або зациклювання не дозволяє розв'язувати за їх допомогою складні задачі мінімізації. Градієнтні методи використовуються у комбінації з більш ефективними методами на початковій стадії мінімізації, коли ще точки $\mathbf{x}^k$ досить далекі від точки мінімуму.

Приклад 8.2. Знайти точку мінімуму функції $\varphi(\mathbf{x}) = x_1^2 + 25x_2^2$ з точністю $\tau = 0.01$ методом найшвидшого спуску.

Розв'язування. За початкову точку візьмемо точку $\mathbf{x}^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Тоді

$$\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 - \beta_0 \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} x_1^0 \\ x_2^0 \end{pmatrix} - \beta_0 \begin{pmatrix} 2x_1^0 \\ 50x_2^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \beta_0 \begin{pmatrix} 2 \\ 50 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - 2\beta_0 \\ 1 - 50\beta_0 \end{pmatrix}.$$

Крок β_0 знаходимо з умови

$$\beta_0 : \min_{\beta \geqslant 0} \varphi\left(\mathbf{x}^0 - \beta \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}}\right) = \min_{\beta \geqslant 0} \varphi \begin{pmatrix} 1 - 2\beta \\ 1 - 50\beta \end{pmatrix} =$$
$$= \min_{\beta \geqslant 0} \left[(1 - 2\beta)^2 + 25(1 - 50\beta)^2\right].$$

Отримаємо $\beta_0 \approx \dfrac{1}{50}$. Тоді $\mathbf{x}^1 = \begin{pmatrix} 1 - 2 \cdot \dfrac{1}{50} \\ 1 - 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.96 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Перевіримо критерій зупинки. Розглянемо пункт A_1:

$$\varphi\left(\mathbf{x}^0\right) - \varphi\left(\mathbf{x}^1\right) < \tau\left(1 + \left|\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)\right|\right).$$

Маємо

$$26 - 1 <^? 0.01(1 + 1),$$
$$25 \not< 0.02.$$

Перший пункт критерію зупинки не виконується. Тоді два інші пункти недоцільно перевіряти.

Знайдемо друге наближення.

$$\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 - \beta_1 \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)}{\partial\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0.96 \\ 0 \end{pmatrix} - \beta_1 \begin{pmatrix} 2 \cdot 0.96 \\ 50 \cdot 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.96 - 1.92\beta \\ 0 \end{pmatrix}.$$

$$\beta_1 : \min_{\beta \geqslant 0} \varphi\left(\mathbf{x}^1 - \beta \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)}{\partial\mathbf{x}}\right) = \min_{\beta \geqslant 0} \varphi \begin{pmatrix} 0.96 - 1.92\beta \\ 0 \end{pmatrix} =$$
$$= \min_{\beta \geqslant 0} \left[(0.96 - 1.92\beta)^2 + 25 \cdot 0^2\right].$$

Отримаємо $\beta_1 = 0.5$. Отже, $\mathbf{x}^2 = \begin{pmatrix} 0.96 - 1.92 \cdot 0.5 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.
Перевіримо виконання критерію зупинки. Наприклад, розглянемо умову A_2:

$$\left\|\mathbf{x}^{k-1} - \mathbf{x}^k\right\| < \sqrt{\tau}\left(1 + \left\|\mathbf{x}^k\right\|\right).$$

Отримали

$$\left\|\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0.96 \\ 0 \end{pmatrix}\right\| <^? \sqrt{0.01}\left(1 + \left\|\begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix}\right\|\right),$$
$$0.96 \not< 0.33.$$

Так як нерівність не виконується, то будемо знаходити третє наближення (хоча зрозуміло, що точка $\mathbf{x}^2$ є точкою мінімуму).

$$\mathbf{x}^3 = \mathbf{x}^2 - \beta_2 \frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^2)}{\partial\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \beta_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

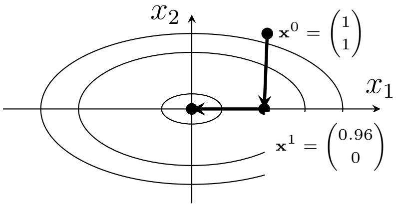
Точки $\mathbf{x}^2$ і $\mathbf{x}^3$ співпали. Очевидно, що всі три умови критерію зупинки виконуються.
Тепер доведемо, що точка $\overline{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ є точкою мінімуму функції $\varphi(\mathbf{x}) = x_1^2 + 25x_2^2$.
Спочатку доведемо, що функція є опуклою. Дійсно,

$$\mathcal{I} = \mathbf{x}^\top \frac{\partial^2\varphi\left(\overline{\mathbf{x}}\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\mathbf{x} = 2x_1^2 + 50x_2^2 > 0, \quad \mathbf{x} \neq 0.$$

Так як $\dfrac{\partial^2\varphi\left(\overline{\mathbf{x}}\right)}{\partial\mathbf{x}^2} > 0$, то функція $\varphi(\mathbf{x}) = x_1^2 + 25x_2^2$ є опуклою. Посилаємось на теорему: якщо для опуклої функції $\varphi(\mathbf{x})$ виконується умова $\dfrac{\partial\varphi\left(\overline{\mathbf{x}}\right)}{\partial\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, то точка $\overline{\mathbf{x}}$ — точка мінімуму функції. Маємо $\dfrac{\partial\varphi\left(\overline{\mathbf{x}}\right)}{\partial\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$. Отже, точка $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ є точкою мінімуму функції $\varphi(\mathbf{x}) = x_1^2 + 25x_2^2$. ☑

Зауваження 8.2. Функція $\varphi(\mathbf{x}) = x_1^2 + 25x_2^2$ є яристою. Дійсно, матриця Гессе має вигляд: $\dfrac{\partial^2\varphi\left(\overline{\mathbf{x}}\right)}{\partial\mathbf{x}^2} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 50 \end{pmatrix}$. Власні числа матриці 2 і 50. Вони відрізняються на порядок.

Якщо взяти кроки $\dfrac{1}{50}$ і $\dfrac{1}{2}$, то мінімум квадратичної функції знаходиться за два кроки, що ми і отримали.



На малюнку представлені лінії постійного рівня — це еліпси. Дно яру направлене по осі x_1, а стінки яру — по осі x_2. Спочатку спуск робиться по стінці яру, а потім по дну яру до точки мінімуму.

8.2. Метод спряжених градієнтів

Розглянемо двокроковий метод, тобто метод, у якому для знаходження $(k+1)$-го наближення використовуються $(k-1)$-е і k-е наближення:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \alpha_k \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}} + \beta_k\left(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}\right), \tag{8.1}$$

$$\{\alpha_k, \beta_k\}: \quad \min_{\alpha,\beta}\varphi\left(\mathbf{x}^k - \alpha\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}} + \beta\left(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}\right)\right). \tag{8.2}$$

Для випадку квадратичної функції $\varphi(\mathbf{x}) = \dfrac{1}{2}\mathbf{x}^\top\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}^\top\mathbf{x} + c$, $\mathbf{A} > 0$ задача (8.2) має такі розв'язки:

$$\alpha_k = \frac{\left\|\mathbf{r}^k\right\|^2\left(\mathbf{A}\mathbf{p}^k, \mathbf{p}^k\right) - \left(\mathbf{r}^k, \mathbf{p}^k\right)\left(\mathbf{A}\mathbf{r}^k, \mathbf{p}^k\right)}{\left(\mathbf{A}\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k\right)\left(\mathbf{A}\mathbf{p}^k, \mathbf{p}^k\right) - \left(\mathbf{A}\mathbf{r}^k, \mathbf{p}^k\right)^2},$$
$$\beta_k = \frac{\left\|\mathbf{r}^k\right\|^2\left(\mathbf{A}\mathbf{r}^k, \mathbf{p}^k\right) - \left(\mathbf{r}^k, \mathbf{p}^k\right)\left(\mathbf{A}\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k\right)}{\left(\mathbf{A}\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k\right)\left(\mathbf{A}\mathbf{p}^k, \mathbf{p}^k\right) - \left(\mathbf{A}\mathbf{r}^k, \mathbf{p}^k\right)^2},$$

де $\mathbf{r}^k = \dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x}^k - \mathbf{b}$, $\mathbf{p}^k = \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}$.

У квадратичному випадку метод (8.1)–(8.2) є скінченним, тобто дає точний мінімум квадратичної функції за скінченну кількість ітерацій, що дорівнює n.

Для неквадратичних функцій метод (8.1)–(8.2) збігається глобально.

Методу спряжених градієнтів можна надати і іншу форму:

$$\begin{gathered}\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k\mathbf{s}^k,\\ \alpha_k: \quad \min_{\alpha}\varphi\left(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{s}^k\right),\\ \mathbf{s}^k = -\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}} + \beta_k\mathbf{s}^{k-1}, \quad \mathbf{s}^0 = -\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}}, \quad \beta_0 = 0.\end{gathered} \tag{8.3}$$

Метод називається методом спряжених градієнтів, тому що має місце така властвивість: вектори $\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^i\right)}{\partial\mathbf{x}}$, $i=\overline{0,n-1}$ взаємно ортогональні, а $\mathbf{s}^0,\ldots,\mathbf{s}^{n-1}$ — взаємно спряжені $((\mathbf{A}\mathbf{s}^i,\mathbf{s}^j)=0)$.

Існує декілька способів вибору параметра β_k:

1) $\beta_k = \dfrac{\left\|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|^2}{\left\|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^{k-1}\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|^2}$;

2) $\beta_k = \dfrac{\left(\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}, \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}} - \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^{k-1}\right)}{\partial\mathbf{x}}\right)}{\left\|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^{k-1}\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|^2}$;

3) $\beta_k = \dfrac{\left(\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\mathbf{s}^{k-1}, \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}\right)}{\left(\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\mathbf{s}^{k-1}, \mathbf{s}^{k-1}\right)}$.

Для випадку квадратичної функції методи (8.1), (8.2) і (8.3) за першим способом вибору параметру β_k при однаковому $\mathbf{x}^0$ визначають одну і ту саму послідовність точок $\mathbf{x}^k$.

Зазвичай для неквадратичних задач метод спряжених градієнтів застосовується в іншій формі. До нього додається процедура оновлення — час від часу крок здійснюється вздовж градієнта. При цьому метод перестає бути скінченним, і напрямки спуску не будуть взаємно спряженими відносно якої-небудь матриці. Оновлення роблять через кількість ітерацій, що дорівнює виміру простору n:

$$
\begin{gathered}
\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k\mathbf{s}^k,\\
\alpha_k: \quad \min_{\alpha}\varphi\left(\mathbf{x}^k+\alpha\mathbf{s}^k\right),\\
\mathbf{s}^k = -\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}} + \overline{\beta}_k\mathbf{s}^{k-1}, \quad \mathbf{s}^0 = -\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}},\\
\overline{\beta}_k = \begin{cases} 0, & k=0,n,2n,\ldots,\\ \beta_k, & k\neq 0,n,2n,\ldots, \end{cases}
\end{gathered}
$$

а β_k обирається одним із вказаних вище способів.

Метод спряжених градієнтів з оновленням збігається глобально; в околі точки мінімуму швидкість збіжності є квадратичною.

Послідовності точок, отриманих за першим і другим способами вибору параметру β_k, співпадають.

Для задач великого виміру ($k < n$) можна гарантувати лише збіжність зі швидкістю геометричної прогресії. При $k < n$ для квадратичних функцій можна гарантувати збіжність зі швидкістю геометричної прогресії зі знаменником $g = \dfrac{\sqrt{L}-\sqrt{l}}{\sqrt{L}+\sqrt{l}}$, де L і l — найбільше і найменше власні числа матриці $\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}^2}$.

Метод спряжених градієнтів є оптимальним по швидкості збіжності у класі методів першого порядку.

Приклад 8.3. Знайти мінімум функції $\varphi(\mathbf{x}) = x_1^2 + 25x_2^2$ з точністю $\tau = 0.01$ методом спряжених градієнтів.

Розв'язування. За початкову точку візьмемо точку $\mathbf{x} = (1;1)^\top$. Перше наближення у методі спряжених градієнтів є першим наближенням у методі найшвидшого спуску. Першим наближенням у методі найшвидшого спуску є $\mathbf{x}^1 = (0.96;0)^\top$ (див. приклад 8.2). так як критерій зупинки не виконується (див. приклад 8.2), то знаходимо друге наближення.

Маємо: $\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 + \alpha_1\mathbf{s}^1$, де $\alpha_1 :\ \min_{\alpha\geqslant 0}\varphi\left(\mathbf{x}^1+\alpha\mathbf{s}^1\right)$, а

$$\mathbf{s}^1 = -\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)}{\partial\mathbf{x}} + \beta_1\mathbf{s}^0 = -\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)}{\partial\mathbf{x}} - \beta_1\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}}.$$

Так як $\dfrac{\partial\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}} = \begin{pmatrix}2x_1\\50x_2\end{pmatrix}$, то $\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)}{\partial\mathbf{x}} = \begin{pmatrix}1.92\\0\end{pmatrix}$, а $\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}} = \begin{pmatrix}2\\50\end{pmatrix}$.

Розрахуємо парметр β_1, використовуючи перший спосіб його вибору:

$$\beta_1 = \frac{\left\|\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|^2}{\left\|\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|^2} = (\text{норма евклідова}) = \frac{\left(\sqrt{1.92^2+0^2}\right)^2}{\left(\sqrt{2^2+50^2}\right)^2} \approx 0.0015.$$

Тоді

$$\mathbf{s}^1 = -\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)}{\partial\mathbf{x}} - \beta_1\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}} = -\begin{pmatrix}1.92\\0\end{pmatrix} - 0.0015\begin{pmatrix}2\\50\end{pmatrix} = -\begin{pmatrix}1.923\\0.075\end{pmatrix}.$$

Отже,

$$\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 + \alpha_1\mathbf{s}^1 = \begin{pmatrix}0.96\\0\end{pmatrix} - \alpha_1\begin{pmatrix}1.923\\0.075\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0.96-1.923\alpha_1\\-0.075\alpha_1\end{pmatrix}.$$

Параметр α_1 знайдемо з умови:

$$\alpha_1: \min_{\alpha\geqslant 0}\varphi\left(\mathbf{x}^1+\alpha\mathbf{s}^1\right)=\min_{\alpha\geqslant 0}\varphi\begin{pmatrix}0.96-1.923\alpha\\-0.075\alpha\end{pmatrix}=$$

$$\min_{\alpha\geqslant 0}\left[(0.96-1.923\alpha)^2+25(-0.075\alpha)^2\right]=\min_{\alpha\geqslant 0}(3.839\alpha^2-3.692\alpha+0.922).$$

$$\alpha_{\min}=-\frac{-3.692}{2\cdot 3.839}\approx 0.481.$$

Так як $\alpha_{\min}>0$, то $\alpha_1=\alpha_{\min}=0.481$. Остаточно отримаємо

$$\mathbf{x}^2=\begin{pmatrix}0.96-1.923\cdot 0.481\\-0.075\cdot 0.481\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0.035\\-0.036\end{pmatrix}.$$

Перевіряємо перший пункт критерію зупинки:

$$\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)-\varphi\left(\mathbf{x}^2\right)<\tau\left(1+\left|\varphi\left(\mathbf{x}^2\right)\right|\right).$$

Маємо $\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)=0.922$, $\varphi\left(\mathbf{x}^2\right)=0.033$. Далі,

$$0.922-0.033<^{?}0.01(1+0.033),$$
$$0.889<0.010.$$

Так як нерівність не виконується, то інші два пункти критерію зупинки не будемо перевіряти.

Знайдемо третє наближення.

$\mathbf{x}^3=\mathbf{x}^2+\alpha_2\mathbf{s}^2$, де α_2 : $\min_{\alpha\geqslant 0}\varphi\left(\mathbf{x}^2+\alpha\mathbf{s}^2\right)$, а $\mathbf{s}^2=-\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^2\right)}{\partial\mathbf{x}}+\beta_2\mathbf{s}^1$. Маємо $\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^2\right)}{\partial\mathbf{x}}=\begin{pmatrix}0.070\\-1.8\end{pmatrix}$. Тоді

$$\mathbf{s}^2=-\begin{pmatrix}0.070\\-1.8\end{pmatrix}+\beta_2\begin{pmatrix}-1.923\\-0.075\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-0.070-1.923\beta_2\\1.8-0.075\beta_2\end{pmatrix},$$

а

$$\beta_2=\frac{\left\|\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^2\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|^2}{\left\|\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|^2}=\frac{\left(\sqrt{0.070^2+(-1.8)^2}\right)^2}{\left(\sqrt{1.92^2+0^2}\right)^2}\approx 0.88.$$

Остаточно:

$$\mathbf{s}^2=\begin{pmatrix}-0.070-1.923\cdot 0.88\\1.8-0.075\cdot 0.88\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1.762\\1.734\end{pmatrix}.$$

Отже,

$$\mathbf{x}^3 = \begin{pmatrix} 0.035 \\ -0.036 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} -1.762 \\ 1.734 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.035 - 1.762\alpha_2 \\ -0.036 + 1.734\alpha_2 \end{pmatrix}.$$

Параметр α_2 знайдемо з умови:

$$\alpha_2 : \min_{\alpha \geqslant 0} \varphi\left(\mathbf{x}^2 + \alpha \mathbf{s}^2\right) = \min_{\alpha \geqslant 0} \varphi \begin{pmatrix} 0.035 - 1.762\alpha \\ -0.036 + 1.734\alpha \end{pmatrix} =$$

$$\min_{\alpha \geqslant 0} \left[(0.035 - 1.762\alpha)^2 + 25(-0.036 + 1.734\alpha)^2\right], \quad \alpha_2 = 0.021.$$

Остаточно отримаємо

$$\mathbf{x}^3 = \begin{pmatrix} 0.035 - 1.762 \cdot 0.021 \\ -0.036 + 1.734 \cdot 0.021 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.002 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Перевіряємо перший пункт критерію зупинки:

$$\varphi\left(\mathbf{x}^2\right) - \varphi\left(\mathbf{x}^3\right) < \tau\left(1 + \left|\varphi\left(\mathbf{x}^3\right)\right|\right).$$

Маємо

$$0.033 - 0 <^? 0.01(1 + 0),$$
$$0.033 < 0.01.$$

Перший пункт критерію зупинки не виконується, і тому розрахуємо четверте наближення.
$\mathbf{x}^4 = \mathbf{x}^3 + \alpha_3 \mathbf{s}^3$, де α_3 : $\min_{\alpha \geqslant 0} \varphi\left(\mathbf{x}^3 + \alpha \mathbf{s}^3\right)$, а $\mathbf{s}^3 = -\dfrac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^3\right)}{\partial \mathbf{x}} + \beta_3 \mathbf{s}^2$. Маємо $\dfrac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^3\right)}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} -0.004 \\ 0 \end{pmatrix}$. Тоді

$$\mathbf{s}^3 = -\begin{pmatrix} 0.004 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta_3 \begin{pmatrix} -1.762 \\ 1.734 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.004 - 1.762\beta_3 \\ 1.734\beta_3 \end{pmatrix}, \quad \beta_3 = \frac{\left\|\dfrac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^3\right)}{\partial \mathbf{x}}\right\|^2}{\left\|\dfrac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^2\right)}{\partial \mathbf{x}}\right\|^2} = 0.$$

Отже, $\mathbf{s}^3 = -\begin{pmatrix} 0.004 \\ 0 \end{pmatrix}$. Тоді

$$\mathbf{x}^4 = \begin{pmatrix} -0.002 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_3 \begin{pmatrix} 0.004 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.002 + 0.004\alpha_3 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

$$\alpha_3: \ \min_{\alpha\geqslant 0}\varphi\begin{pmatrix}-0.002+0.004\alpha\\0\end{pmatrix}=\min_{\alpha\geqslant 0}\left[(-0.002+0.004\alpha)^2+25\cdot 0^2\right], \quad \alpha_2=0.5.$$

Остаточно отримаємо $\mathbf{x}^4=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$.

Нагадаємо критерій зупинки:

$$A: \begin{array}{ll} A_1: & \varphi\left(\mathbf{x}^{k-1}\right)-\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)<\tau\left(1+\left|\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right|\right),\\ A_2: & \left\|\mathbf{x}^{k-1}-\mathbf{x}^k\right\|<\sqrt{\tau}\left(1+\left\|\mathbf{x}^k\right\|\right),\\ A_3: & \left\|\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|\leqslant\sqrt[3]{\tau}\left(1+\left|\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right|\right).\end{array}$$

Розглядаємо перший пункт критерія:

$$\varphi\left(\mathbf{x}^3\right)-\varphi\left(\mathbf{x}^4\right)<^{?}\tau\left(1+\left|\varphi\left(\mathbf{x}^4\right)\right|\right); \quad \text{так як} \quad \varphi\left(\mathbf{x}^3\right)=0 \text{ і } \varphi\left(\mathbf{x}^4\right)=0,$$

то отримаємо

$$0-0<^{?}0.01(1+0), \quad 0<0.1.$$

Перший пункт критерія зупинки виконується. Перевіряємо другий пункт:

$$\left\|\mathbf{x}^3-\mathbf{x}^4\right\|<\sqrt{\tau}\left(1+\left\|\mathbf{x}^4\right\|\right).$$

Маємо

$$\left\|\begin{pmatrix}-0.002\\0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}\right\|<^{?}\sqrt{0.01}\left(1+\left\|\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}\right\|\right);$$
$$0.002<0.1.$$

Другий пункт критерію зупинки теж виконується. Переходимо до третього пункту:

$$\left\|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^4\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|\leqslant\sqrt[3]{\tau}\left(1+\left|\varphi\left(\mathbf{x}^4\right)\right|\right),$$
$$\left\|\begin{matrix}0\\0\end{matrix}\right\|\leqslant^{?}\sqrt[3]{0.01}\,(1+0),$$
$$0\leqslant\sqrt[3]{0.01}.$$

І третій пункт критерія зупинки виконується.

Отже, знайшли точку $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, яка може бути точкою мінімуму функції. Доведення того, що точка $\mathbf{x}^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ є точкою мінімуму функції $\varphi(\mathbf{x}) = x_1^2 + 25x_2^2$ див. у прикладі 8.2.

8.3. Модифікація методу спряжених градієнтів

Алгоритм (Яровий А. Т., Страхов Є. М., 2009) має вигляд

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{s}^k,$$
$$\alpha_k : \quad \min_{\alpha} \varphi\left(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{s}^k\right),$$
$$\mathbf{s}^k = -\mathbf{H}_k \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}} + \overline{\beta}_k \mathbf{s}^{k-1}, \quad \mathbf{s}^0 = -\frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial \mathbf{x}},$$
$$\overline{\beta}_k = \begin{cases} 0, & k = 0, n, 2n, \ldots, \\ \beta_k, & k \neq 0, n, 2n, \ldots, \end{cases}$$

де матриця $\mathbf{H}_k$ розраховується за рекурентною формулою

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \frac{\left(\Delta \mathbf{x}^k - \mathbf{H}_k \Delta \mathbf{y}^k\right)^{\top} \left(\Delta \mathbf{x}^k - \mathbf{H}_k \Delta \mathbf{y}^k\right)}{\left(\Delta \mathbf{x}^k - \mathbf{H}_k \Delta \mathbf{y}^k, \Delta \mathbf{y}^k\right)}, \quad \mathbf{H}_0 = \mathbf{I}.$$

8.4. Завдання для самостійної роботи

1) Знати усі означення і теореми.
2) Знати алгоритми градієнтного методу і методу спряжених градієнтів.
3) Розв'язати задачу:

$$\min\left[n x_1^2 + (i+4) x_2^2\right], \quad \varepsilon = 0.1, \quad \mathbf{x}^0 = (1; 1)$$

градієнтним методом і методом спряжених градієнтів. Параметри: для першої групи $n = 3$, для другої групи $n = 7$; i — порядковий номер студента у списку групи.

8.5. Питання для самоконтролю

1) Сформулювати умову вибору напрямку спуску функції у точці.
2) Сформулювати загальний алгоритм методів мінімізації функцій.
3) Способи вибору кроку руху за напрямком спуску.
4) Сформулювати критерій зупинки.
5) Сформулювати алгоритм градієнтного методу.
6) Геометрична інтерпретація градієнтного методу.
7) Теорема про збіжність градієнтного спуску для сильно опуклих функцій.
8) Означення яристої функції.
9) Алгоритм методу спряжених градієнтів.
10) Способи вибору параметра β_k у методі спряжених градієнтів.
11) Алгоритм методу спряжених градієнтів з оновленням.
12) Властивості алгоритму спряжених градієнтів.

9

Методи другого порядку

9.1. Метод Ньютона

У градієнтному методі для визначення напрямку руху використовується лише лінійний член з розвинення функції у ряд Тейлора, тобто використовується найбільш груба апроксимація функції. Тому для функцій з погано обумовленими матрицями Гессе метод повільно збігається. Якщо використовувати другі частинні похідні, то отримані методи не будуть «реагувати» на яристість функцій.

Нехай функція $\varphi(\mathbf{x})$ двічі диференційовна, скористаємося квадратичною апроксимацією функції у точці $\mathbf{x}^k$:

$$\varphi_k(\mathbf{x}) = \varphi\left(\mathbf{x}^k\right) + \left(\frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x} - \mathbf{x}^k\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}^2}\left(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\right), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k\right).$$

У градієнтному методі наступне наближення $\mathbf{x}^{k+1}$ знаходилося з умови мінімуму лінійної апроксимації при додаткових обмеженнях на близькість до точки $\mathbf{x}^k$ (так як лінійна функція не досягає мінімуму на $\mathbb{R}^n$). Для квадратичної функції $\varphi_k(\mathbf{x})$ можна не накладати таких обмежень, так як при $\dfrac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^2} > 0$ функція $\varphi_k(\mathbf{x})$ має безумовний мінімум. Обираємо точку мінімуму $\varphi_k(\mathbf{x})$ за нове наближення. Отже, отримаємо такий алгоритм

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \left[\frac{\partial^2 \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}^2}\right]^{-1} \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}. \tag{9.1}$$

До цього методу можна прийти і іншим шляхом. Точка мінімуму повинна бути розв'язком системи n рівнянь з n невідомими, необхідна умова безумовного мінімуму першого порядку, $\dfrac{\partial \varphi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = 0$.

Одним з методів розв'язання таких задач є метод Ньютона або дотичних, а саме: лінеаризуємо систему у точці $\mathbf{x}^k$ і розв'язуємо лінеаризовану систему, яка має вигляд

$$\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}} + \frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}^k\right) = 0,$$

звідки

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \left[\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}.$$

Розглянемо теорему збіжності.

Теорема 9.1. *Нехай $\varphi(\mathbf{x})$ двічі диференційовна функція, $\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2}$ задовольняє умові Ліпшиця з константою M, $\varphi(\mathbf{x})$ — сильно опукла з константою l і початкове наближення задовольняє умові*

$$q = \frac{M}{2l^2}\left\|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\| < 1. \tag{9.2}$$

Тоді метод збігається до точки глобального мінімуму $\mathbf{x}^*$ з квадратичною швидкістю:

$$\left\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\right\| \leqslant \frac{2l}{M}q^{2^k}.$$

Зауваження 9.1. Усі умови теореми є суттєвими. Сильна опуклість забезпечує існування $\left[\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}$, а невиконання (9.2) може призвести до розбіжності методу. Якщо ж відмовитися від умови Ліпшиця для $\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2}$, то збіжність не буде квадратичною (може збігатися зі швидкістю геометричної прогресії).

Зауваження 9.2. У методі Ньютона ніколи не обертають матрицю $\dfrac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}$. Зрозуміло, що напрямок спуску у методі є таким:

$$\mathbf{s}^k = -\left[\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}.$$

Тоді (9.1) можна переписати у вигляді:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \mathbf{s}^k.$$

Вектор $\mathbf{s}^k$ знаходимо з системи рівнянь

$$\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\mathbf{s}^k = -\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}.$$

А цю систему можна досить ефективно розв'язати і при $\left\|\dfrac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right\| \sim \varepsilon$, де $\varepsilon > 0$ — мале число.

Умови теореми можна послабити тільки в одному напрямку — глобальні вимоги до функції $\varphi(\mathbf{x})$ замінити на локальні.

Для квадратичної функції $\varphi(\mathbf{x}) = \dfrac{1}{2}\mathbf{x}^\top\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}^\top\mathbf{x} + c$, $\mathbf{A} > 0$ метод Ньютона збігається за один крок при довільній початковій точці $\mathbf{x}^0$.

Чим ближча функція до квадратичної, тим швидше збігається метод Ньютона. Формально — чим менше M, то згідно з теоремою буде більша область збіжності і тим швидша збіжність, що визначається величиною q.

Отже, вдалий вибір початковою наближення $\mathbf{x}^0$ гарантує збіжність методу Ньютона. Однак пошук вдалого початкового наближення — це нетривіальна задача. Тому необхідно якось змінити метод Ньютона, щоб досягти збіжності процесу незалежно від початкового наближення. Для цього необхідно крім вибору напрямку руху $-\left[\dfrac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}$ вибирати і довжину кроку руху. Такий алгоритм називається демпфованим методом Ньютона — Рафсона або узагальненим методом Ньютона:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \beta_k\left[\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}.$$

Як і у градієнтному методі, у методі Ньютона — Рафсона крок обирається так, щоб забезпечити зменшення цільової функції на кожній ітерації. Наприклад, використовувати перші два способи вибору кроку або такий: крок β_k обирається так, щоб виконувалася нерівність

$$\varphi\left(\mathbf{x}^k - \beta_k\left[\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}\right) \leqslant$$

$$\leqslant \varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varepsilon\beta_k\left(\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}, \left[\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}\right),$$

де $0 < \varepsilon < 1/2$ — деяке число.

Покладемо $\beta_k = 1$, і якщо ця нерівність виконується, то $\beta_k = 1$, а якщо ні, то зменшуємо β_k до тих пір, поки не виконається нерівність.

Метод Ньютона може застосовуватися для мінімізації таких функцій, у яких існує обмежена обернена матриця других похідних. Такі властивості мають сильно опуклі двічі неперервно диференційовні функції, і виконується умова

$$m\left\|\mathbf{y}\right\|^2 \leqslant \left(\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}}\mathbf{y},\mathbf{y}\right) \leqslant M\left\|\mathbf{y}\right\|^2, \quad m>0,$$

для довільних $\mathbf{x}$ і $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$. Тоді функції обмеженні і у них існує одна точка мінімуму.

Теорема 9.2. *Якщо функція $\varphi(\mathbf{x})$ така, що виконується умова (9.2) і матриця $\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2}$ задовольняє умові Ліпшиця з константою L, крок обирається з умови (9.1), то послідовність точок, отриманих методом Ньютона — Рафсона незалежно від вибору початкових точки $\mathbf{x}^0$ збігається до точки мінімуму з квадратичною швидкістю, тобто*

$$\left\|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^k\right\| \leqslant \frac{L}{m}\left\|\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*\right\|^2.$$

9.2. Модифікації методу Ньютона

Усі труднощі, що виникають при практичній реалізації методу Ньютона, умовно можна розбити на дві групи. Перші пов'язані з необхідністю обчислювати матрицю $\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2}$. Розглянемо дві модифікації методу Ньютона, які використовують не точні значення, а деякі наближені аналоги матриці других похідних. У результаті зменшується трудомісткість методу, але погіршується їх збіжність.

До другої групи відносяться всі ускладнення, що виникають у зв'язку з порушенням у процесі обчислень додатної визначеності матриці других похідних.

Перша модифікація Алгоритм методу має вигляд

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \beta_k\left[\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}, \quad \beta_k \geqslant 0.$$

У цій схемі використовується один раз розрахована матриця $\dfrac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}^2}$.

Друга модифікація Вона пов'язана з оновленням матриці других похідних через певну кількість кроків. Ітераційний процес має вигляд

$$\mathbf{x}^{kt+i+1} = \mathbf{x}^{kt+i} - \beta_{kt+i}\left[\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^{kt}\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^{kt+i})}{\partial\mathbf{x}},$$

$\beta_{kt+i} \geqslant 0$; $k=0,1,\ldots$; $i=0,1,\ldots,t-1,t$; $t>0$.

Якщо виконуються умови теореми 9.2, то справедлива оцінка

$$\left\|\mathbf{x}^{(k+1)t} - \mathbf{x}^*\right\| \leqslant c \left\|\mathbf{x}^{kt} - \mathbf{x}^*\right\|^{t+1}, \quad c \geqslant 0.$$

Ця оцінка означає, що послідовність $\left\{\mathbf{x}^k\right\}$ збігається до розв'язку зі швидкістю порядку $t+1$.

Третя модифікація Нехай матриця Гессе функції $\varphi(\mathbf{x})$ не є додатно визначеною. У цьому випадку послідовність точок методу Ньютона буде розбіжною. Левенберг і Марквардт запропонували додавати до матриці других похідних на кожному кроці величину $\alpha_k \mathbf{I}$, де α_k — деяке число, а $\mathbf{I}$ — одинична матриця. Тоді ітераційний процес матиме вигляд

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \left[\frac{\partial^2 \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}^2} + \alpha_k \mathbf{I}\right]^{-1} \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}.$$

У цьому алгоритмі довжина кроку дорівнює 1, а α_k обирають так, щоб виконувались умови

$$\cos\left(\left(\frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}^2} + \alpha_k \mathbf{I}\right)^{-1} \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}, \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}\right) \geqslant \varepsilon_1 > 0;$$

$$\varphi(\mathbf{x}^{k+1}) \leqslant \varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varepsilon_2 \left(\left[\frac{\partial^2 \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}^2} + \alpha_k \mathbf{I}\right]^{-1} \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}, \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}\right), \quad 0 < \varepsilon_2 < \frac{1}{2}.$$

Перша нерівність означає, що кут між напрямком спуску антиградієнта у точці $\mathbf{x}^k$ повинен бути гострим, а виконання другої умови гарантує зменшення функції на кожній ітерації.

При досить великому значенні α_k метод вдалині від точки мінімуму веде себе як градієнтний і початкову точку можна обирати довільно, а при наближенні α_k до нуля метод переходить у звичайний метод Ньютона.

9.3. Обговорення властивостей методу Ньютона

Встановлено, що метод Ньютона з регулюванням кроку збігається до розв'язку незалежно від початкової точки $\mathbf{x}^0$ і має або зверхлінійну швидкість збіжності, або ж квадратичну в залежності від вимог до функції $\varphi(\mathbf{x})$.

Збіжність з довільної початкової точки є суттєвою перевагою методу Ньютона — Рафсона у порівнянні зі звичайним методом Ньютона, в якому збіжність гарантується лише при наявності досить хорошого початкового наближення. Крім того, перевірити умови, які гарантують, що дане початкове наближення забезпечить збіжність процесу, у методі Ньютона практично важко, тому що вимагається знання таких відомостей про функцію, які звичайно невідомі.

Якщо порівнювати метод Ньютона і градієнтні методи стосовно до розв'язування задач мінімізації опуклих функцій, то метод Ньютона забезпечує більш високу швидкість збігу послідовності точок до розв'язку. Однак більш точна суть поняття ефективності методу є в оцінці загальної кількості обчислень для розв'язування задачі з заданою точністю. Отже, про ефективність того чи іншого алгоритму необхідно судити по кількості ітерацій, необхідних для розв'язування задачі, і по кількості обчислень на кожній ітерації.

Кількість обчислень на ітерації методу Ньютона, як правило, значно більша, ніж у градієнтних методах, за рахунок обчислення і обертання матриці других похідних. Але на отримання розв'язку з досить високим ступенем точності за допомогою методу Ньютона необхідно у десятки, а то і у сотні раз менше ітерацій, ніж при використанні градієнтних методів. А у деяких задачах трудомісткість ітерації методу Ньютона може бути непомірно великою за рахунок обчислення матриці других похідних (а не її обертання). У цих випадках для розв'язування задач можна використовувати модифікації методу Ньютона. В одній з таких модифікацій обчислювати і обертати матрицю Гессе потрібно лише один раз, а у другій це робиться через скінченну кількість ітерацій. При цьому, якщо початкове наближення вдало обране, то швидкість збігу буде досить високою.

Однак використання модифікації методу Ньютона не є кардинальним розв'язком питання про скорочення трудомісткості розв'язування задачі. Тому виникає питання про побудову методів мінімізації, які б по швидкості збігу були близькі до методу Ньютона, але для своєї реалізації вимагали значно меншу кількість обчислень на кожній ітерації.

Приклад 9.1. Знайти мінімум функції $\varphi(\mathbf{x}) = x_1^2 + 25x_2^2$ методом Ньютона з точністю $\varepsilon = 0.1$.

Розв'язування. За початкову точку візьмемо точку $\mathbf{x}^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Тоді $\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 - \left[\dfrac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1} \dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}}$ або $\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0 + \mathbf{s}^0$,

де $\mathbf{s}^0 = -\left[\dfrac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1} \dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}}$. Отримаємо систему для визначення $\mathbf{s}^0$:

$$\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\mathbf{s}^0 = -\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^0)}{\partial\mathbf{x}}.$$

Маємо

$$\frac{\partial\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 50x_2 \end{pmatrix}, \qquad \frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 50 \end{pmatrix}.$$

Система має вигляд

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 50 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1^0 \\ s_2^0 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 2 \\ 50 \end{pmatrix}, \quad \text{або} \quad \begin{cases} 2s_1^0 = -2, \\ 50s_2^0 = -50. \end{cases}$$

Розв'язавши її, отримаємо $s_1^0 = -1$, $s_2^0 = -1$. Тоді $\mathbf{x}^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Критерій зупинки не виконується, наприклад, пункт A_1, і тому знаходимо друге наближення

$$\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 + \mathbf{s}^1, \quad \frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\mathbf{s}^1 = \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)}{\partial\mathbf{x}},$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 50 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1^1 \\ s_2^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} 2s_1^1 = 0, \\ 50s_2^1 = 0, \end{cases} \qquad x_1^1 = 0,\ x_2^1 = 0.$$

Усі пункти критерію зупинки виконуються. Так як функція $\varphi(\mathbf{x}) = x_1^2 + 25x_2^2$ є опуклою (див. приклад 8.2), то точка $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ є розв'язком нашої задачі. ☑

Метод Ньютона є методом другого порядку.

9.4. Завдання для самостійної роботи

1) Знати усі означення і теореми.
2) Знати алгоритми методів другого порядку.
3) Розв'язати задачу:

$$\min\left[nx_1^2 + (i+4)x_2^2\right], \quad \varepsilon = 0.1, \quad \mathbf{x}^0 = (1;1)$$

   методом Ньютона. Параметри: для першої групи $n = 3$, для другої групи $n = 7$; i — порядковий номер студента у списку групи.
4) Для отримання $\geqslant 90$ балів розв'язати попередній приклад методом Ньютона — Рафсона або Левенберга — Марквардта.

9.5. Питання для самоконтролю

1) Сформулювати алгоритм методу Ньютона.
2) Геометрична інтерпретація алгоритму Ньютона.
3) Сформулювати теорему збіжності алгоритму Ньютона.
4) Зауваження про обертання матриці Гессе.
5) Сформулювати алгоритм Ньютона — Рафсона.
6) Сформулювати алгоритм Левенберга — Макрвардта.
7) Властивості алгоритму Ньютона.

10

Квазіньютонівські методи (методи змінної метрики)

В основі цих методів лежить ідея відновлення квадратичної апроксимації функції по значенням її градієнтів у ряді точок. Таким чином методи об'єднують переваги градієнтного методу і методу Ньютона. Ці методи мають таку загальну структуру:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \beta_k \mathbf{H}_k \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}, \tag{10.1}$$

де матриця $\mathbf{H}_k$ перераховується рекурентним способом на основі інформації, отриманої на k-й ітерації так, що

$$\mathbf{H}_k - \left[\frac{\partial^2 \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}^2}\right]^{-1} \to 0 \quad \text{при} \quad k \to +\infty.$$

Таким чином, методи переходять у ньютоновські, і тому мають таку назву.

Теорема 10.1. *Нехай $\mathbf{x}^*$ — невироджена точка мінімуму*[1] *функції $\varphi(\mathbf{x})$, $\varphi(\mathbf{x})$ — двічі неперервно диференційовна в околі точки $\mathbf{x}^*$ і $\left\|\mathbf{H}_k - \left[\frac{\partial^2 \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}^2}\right]^{-1}\right\| \to 0$ при $k \to \infty$. Тоді метод (10.1) з $\beta_k = 1$ локально збігається до $\mathbf{x}^*$ швидше довільної геометричної прогресії.*

Метод при додатно визначених $\mathbf{H}_k$ має глобальну збіжність.

Перейдемо до побудови матриць $\mathbf{H}_k$. Їх будемо будувати так, щоб вони апро-

[1] Точка $\mathbf{x}^*$ є невиродженою, якщо $\left\|\frac{\partial^2 \varphi\left(\mathbf{x}^*\right)}{\partial \mathbf{x}^2}\right\| \neq 0$.

ксимували $\left[\dfrac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}$. Має місце співвідношення

$$\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}} - \frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^{k+1})}{\partial\mathbf{x}} = \frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^{k+1})}{\partial\mathbf{x}^2}\left(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1}\right) + o\left(\left\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1}\right\|\right).$$

Якщо матриця $\dfrac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^{k+1})}{\partial\mathbf{x}^2}$ невироджена, то з точністю до членів більш високого порядку малості у порівняні з $\left\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k+1}\right\|$ маємо

$$\left[\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^{k+1})}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}\left(\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^{k+1})}{\partial\mathbf{x}} - \frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^k)}{\partial\mathbf{x}}\right) \approx \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k.$$

Якщо функція $\varphi(\mathbf{x})$ є квадратичною, тобто $\varphi(\mathbf{x}) = \dfrac{1}{2}(\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x}) - (\mathbf{b}, \mathbf{x})$, то наближена рівність перетвориться у точну

$$\left[\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^{k+1})}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}\Delta\mathbf{y}^k = \Delta\mathbf{x}^k,$$

де $\Delta\mathbf{y}^k = \dfrac{\partial\varphi(\mathbf{x}^{k+1})}{\partial\mathbf{x}} - \dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}$, $\Delta\mathbf{x}^k = \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k$. Тому природно вимагати, щоб для матриці $\mathbf{H}_k$, що наближає $\left[\dfrac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^{k+1}\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}$, виконувалась умова

$$\mathbf{H}_{k+1}\Delta\mathbf{y}^k = \Delta\mathbf{x}^k. \tag{10.2}$$

Ця умова має назву квазіньютонівської.

Нехай наближення до $\left[\dfrac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^{k+1}\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}$ перераховується за формулою

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \Delta\mathbf{H}_k.$$

Укажемо будь-яку матрицю $\Delta\mathbf{H}_k$, що забезпечує (10.2). Для цього перепишемо (10.2) таким чином:

$$\left(\mathbf{H}_k + \Delta\mathbf{H}_k\right)\Delta\mathbf{y}^k = \Delta\mathbf{x}^k,$$
$$\Delta\mathbf{H}_k\Delta\mathbf{y}^k = \Delta\mathbf{x}^k - \mathbf{H}_k\Delta\mathbf{y}^k.$$

Цій рівності задовольняє, наприклад, така матриця:

$$\Delta\mathbf{H}_k = \frac{1}{(\mathbf{z}^k, \Delta\mathbf{y}^k)}\left(\Delta\mathbf{x}^k - \mathbf{H}_k\Delta\mathbf{y}^k\right)\mathbf{z}^k,$$

де $\mathbf{z}^k$ — довільний вектор такий, що $\left(\mathbf{z}^k, \Delta\mathbf{y}^k\right) \neq 0$.

Обираємо $\mathbf{z}^k = \Delta\mathbf{x}^k - \mathbf{H}_k\Delta\mathbf{y}^k$, і тоді отримаємо:

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \frac{\left(\Delta\mathbf{x}^k - \mathbf{H}_k\Delta\mathbf{y}^k\right)^\top \left(\Delta\mathbf{x}^k - \mathbf{H}_k\Delta\mathbf{y}^k\right)}{\left(\Delta\mathbf{x}^k - \mathbf{H}_k\Delta\mathbf{y}^k, \Delta\mathbf{y}^k\right)}. \tag{10.3}$$

При такому виборі перерахунку $\mathbf{H}_k$ отримуємо метод Бройдена.

Якщо β_k обрати за способом 1 (тобто мінімізуємо по одновимірному напрямку), то цей метод дає спряжені напрямки. Якщо функція $\varphi(\mathbf{x})$ є квадратичною, то за n кроків отримаємо, що $\mathbf{H}_n = \mathbf{A}^{-1}$.

Цікава особливість цього методу: β_k не обов'язково повинно давати мінімум по одновимірному напрямку, воно має бути довільним параметром, поки не виникла сингулярність матриці $\mathbf{H}_k$[2] або знаменник (10.3) не перетворився в нуль.

У випадку, коли функція $\varphi(\mathbf{x})$ не є квадратичною, при застосуванні методу Бройдена можуть виникнути такі небажані явища:

1) Матриця $\mathbf{H}_k$ може перестати бути додатно визначеною. Для цього існують методи, що перетворюють матрицю $\mathbf{H}_k$ у додатно визначену (див. Д. Хіммельблау. Прикладное нелинейное программирование, роз. 3.2).
2) Величина $\Delta\mathbf{H}_k$ може стати необмеженою (інколи і для квадратичних функцій внаслідок похибок округлення).
3) Якщо на k-му кроці напрямок спуску співпадає з напрямком спуску на $(k-1)$-му кроці, то матриця $\mathbf{H}_{k+1}$ може бути сингулярною.

Якщо $\mathbf{H}_{k+1}$ перерахувати за формулою

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \frac{\left(\Delta\mathbf{x}^k\right)^\top \Delta\mathbf{x}^k}{\left(\Delta\mathbf{x}^k, \Delta\mathbf{y}^k\right)} - \frac{\mathbf{H}_k \left(\left(\Delta\mathbf{y}^k\right)^\top \Delta\mathbf{y}^k\right) \mathbf{H}_k}{\left(\mathbf{H}_k\Delta\mathbf{y}^k, \Delta\mathbf{y}^k\right)}, \tag{10.4}$$

то отримаємо метод Девідона — Флетчера — Пауелла (ДФП).

Якщо $\mathbf{H}_0 = \mathbf{I}$, то при оптимізації маємо поступовий перехід від градієнтного напрямку до ньютонівського.

При використанні (10.4) похибка обчислень $\dfrac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}$ повинна бути малою, і тоді $\mathbf{H}_k$ не стане «поганою». Другий доданок у формулі (10.4) забезпечує виконання умови: $\mathbf{H}_k \to \left[\dfrac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^*\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}$, а третій доданок забезпечує додатновизначеність $\mathbf{H}^{k+1}$ на всіх етапах.

У випадку квадратичної функції в алгоритмі (10.4) використовуються спря-

[2] Тобто $\mathbf{H}_k = \mathbf{0}$.

жені напрямки. Якщо функція загального виду, то ефективність методу ДФП є швидше наслідком використання спряжених напрямків, ніж близької апроксимації $\left[\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}$ матрицею $\mathbf{H}$.

Практика показала, що у деяких задачах неможливо досягти мінімуму цільової функції за допомогою квазіньютонівських методів, якщо точність одновимірного пошуку недостатня. Тому рекомендується, щоб точність одновимірного пошуку була еквівалентна точності закінчення головного алгоритму.

Метод ДФП можна використовувати і у випадку, коли компоненти градієнта оцінюються за допомогою різницевих співвідношень.

Існують ще квазіньютонівські методи під назвою: Пірсона 1, Пірсона 2, Пірсона 3, Девідона, Флетчера, Мургата і Сарджента і інші. Досить ефективним є метод Бройдена — Флетчера — Гольдфарба — Шенно (БФГШ).

Вище квазіньютонівські методи були отримані як наближення до методу Ньютона. Проте на них можна поглянути і з іншого боку.

Якщо поряд з евклідовою нормою розглянути таку: $\|\mathbf{x}\|_1 = \sqrt{(\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x})}$, де матриця $\mathbf{A} > 0$, то у цій метриці градієнт матиме вигляд

$$(\operatorname{grad}\varphi(\mathbf{x}))_1 = \mathbf{A}^{-1}\frac{\partial\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}}.$$

Тоді у новій метриці градієнтний метод набуває вигляду

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \beta_k\mathbf{A}^{-1}\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}$$

і відрізняється від алгоритму градієнтного методу наявністю матриці $\mathbf{A}^{-1}$.

Природно намагатися вибрати метрику так, щоб прискорити збіжність методу. Для квадратичної функції покладають $\mathbf{A} = \frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2}$, тобто отримують (при $\beta_k = 1$) метод Ньютона, і градієнтний метод збігається за один крок.

Для неквадратичної функції метод

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \beta_k\mathbf{H}_k\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}, \quad \mathbf{H}_k > 0$$

може розглядатися як градієнтний у метриці $(\mathbf{x}, \mathbf{y})_1 = \left(\mathbf{H}_k^{-1}\mathbf{x}, \mathbf{y}\right)$, і оптимальним вибором метрики є $\mathbf{H}_k = \left[\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}$. Іншими словами, квазіньютонівські методи можуть трактуватися як градієнтні, у яких на кожному кроці обирається нова метрика, за можливістю близька до найкращої. У зв'язку з цим часто вживають термін «методи змінної метрики» як синонім квазіньютонівських методів.

10.1. Завдання для самостійної роботи

1) Знати алгоритм методу, теорему.
2) Розв'язати задачу:

$$\min \left[n x_1^2 + (i+4) x_2^2 \right], \quad \varepsilon = 0.1, \quad \mathbf{x}^0 = (1; 1)$$

методом змінної метрики. Параметри: для першої групи $n = 3$, для другої групи $n = 7$; i — порядковий номер студента у списку групи.

10.2. Питання для самоконтролю

1) Алгоритм квазіньютоновського (змінної метрики) методу.
2) Пояснити назву алгоритма змінної метрики.
3) Знати алгоритм перерахунку матриці H_k методу Девідона — Флетчера — Пауелла.
4) Властивості алгоритму змінної метрики.

11 Мінімізація недиференційовних функцій

Означення 11.1. *Субградієнтом функції* $\varphi(\mathbf{x})$ *в точці* $\mathbf{x}^0$ *називається такий вектор* $\mathbf{l}$, *що*

$$\varphi(\mathbf{x}) \geqslant \varphi\left(\mathbf{x}^0\right) + \left(\mathbf{l}, \mathbf{x} - \mathbf{x}^0\right).$$

Означення 11.2. *Сукупність субградієнтів функції* $\varphi(\mathbf{x})$ *в точці* $\mathbf{x}^0$ *називається субдиференціалом* $(\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right))$.

Теорема 11.1. *Для того, щоб точка* $\mathbf{x}^0$ *була точкою мінімуму функції* $\varphi(\mathbf{x})$ *необхідно і достатньо, щоб* $\mathbf{0} \in \partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)$.

Доведення. **Необхідність.** Нехай $\mathbf{x}^0$ — точка мінімуму і тому $\varphi(\mathbf{x}) \geqslant \varphi\left(\mathbf{x}^0\right)$, тоді

$$\varphi(\mathbf{x}) \geqslant \varphi\left(\mathbf{x}^0\right) + \left(\mathbf{0}, \mathbf{x} - \mathbf{x}^0\right),$$

а це означає, що $\mathbf{0}$ — субградієнт.

Достатаність. $\mathbf{0} \in \partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)$, це означає, що $\mathbf{0}$ — субградієнт функції $\varphi(\mathbf{x})$ в точці $\mathbf{x}^0$, тобто

$$\varphi(\mathbf{x}) \geqslant \varphi\left(\mathbf{x}^0\right) + \left(\mathbf{0}, \mathbf{x} - \mathbf{x}^0\right),$$

або

$$\varphi(\mathbf{x}) \geqslant \varphi\left(\mathbf{x}^0\right).$$

Отже, точка $\mathbf{x}^0$ — мінімум функції $\varphi(\mathbf{x})$. ☑

11.1. Субградієнтний метод

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \beta_k \partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right). \tag{11.1}$$

Особливості методу:

1) Значення функції у методі (11.1) не зменшується монотонно, а монотонно зменшується відстань до точки мінімуму.
2) Не можна обирати $\beta_k = \beta$, як у градієнтному методі. Наприклад, якщо $\left\|\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right\| = 1$, то $\left\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\right\| = \beta$ і метод не збігається.
3) Не можна обирати β_k як у методі найшвидшого спуску, тому що функція не обов'язково зменшується у напрямку $-\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)$.

Можна користуватися таким алгоритмом

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \beta_k \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\left\|\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right\|}, \tag{11.2}$$

$\beta_k \to 0$, $\sum\limits_{k=0}^{\infty} \beta_k = +\infty$.

Метод (11.2) збігається повільно.

Теорема 11.2. *У методі (11.2) для опуклої функції*

$$\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) \to \varphi^*, \quad k \to +\infty.$$

Можна запропонувати більш ефективний метод без невідомого параметру β_k:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \frac{\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varphi^*}{\left\|\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right\|^2} \partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right). \tag{11.3}$$

Теорема 11.3. *Нехай $\varphi(x)$ — опукла функція. Множина точок мінімумів непуста. Тоді в методі (11.3) $\mathbf{x}^k \to \mathbf{x}^*$. Для довільної функції $\varphi(x)$ має місце оцінка швидкості збігу:*

$$\lim_{k\to+\infty} \sqrt{k}\left(\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varphi\left(\mathbf{x}^*\right)\right) = 0.$$

Якщо ж φ^* невідомо, то можна скористатися таким алгоритмом:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \frac{\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \overline{\varphi}}{\left\|\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right\|^2} \partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right),$$

де $\overline{\varphi}$ — деяка оцінка φ^* і $\overline{\varphi}$ перераховується на основі поведінки $\mathbf{x}^k$ і $\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)$.

11.2. Багатокрокові методи

Це найкращий шлях збільшення швидкості збігу, пов'язаний з використанням інформації, отриманої на попередніх кроках. Нехай вже набудовані точки $\mathbf{x}^0$, $\mathbf{x}^1$, $\ldots$, $\mathbf{x}^k$ і в них розраховані $\partial\varphi\left(\mathbf{x}^0\right)$, $\partial\varphi\left(\mathbf{x}^1\right)$, $\ldots$, $\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)$. Так як

$$\varphi\left(\mathbf{x}^*\right) \geqslant \varphi\left(\mathbf{x}^i\right) + \left(\partial\varphi\left(\mathbf{x}^i\right), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}^i\right),$$

то можна стверджувати, що точка мінімуму $\mathbf{x}^*$ лежить в області

$$Q_k = \left\{x \mid \left(\partial\varphi\left(\mathbf{x}^i\right), \mathbf{x} - \mathbf{x}^i\right) \leqslant \varphi^* - \varphi\left(\mathbf{x}^i\right),\ i = \overline{0,k}\right\}, \tag{11.4}$$

а якщо φ^* невідомо, то в більш широкій області

$$Q_k = \left\{x \mid \left(\partial\psi\left(\mathbf{x}^i\right), \mathbf{x} - \mathbf{x}^i\right) \leqslant 0\ i = \overline{0,k}\right\}. \tag{11.5}$$

Зрозуміло, що нову точку $\mathbf{x}^{k+1}$ необхідно обрати так, щоб зменшити цю область. Існують різні варіанти вибору $\mathbf{x}^{k+1}$.

а) **Метод відтинаючих гіперплощин**

У цьому методі точка $\mathbf{x}^{k+1}$ обирається як точка мінімуму кусково-лінійної апроксимації $\varphi\left(\mathbf{x}\right)$, що визначається значеннями $\varphi\left(\mathbf{x}^i\right)$ і $\partial\varphi\left(\mathbf{x}^i\right)$, $i = \overline{0,k}$ на множині Q_0, яка якимось чином задається. Отже, $\mathbf{x}^{k+1}$ є розв'язком задачі лінійного програмування

$$\min z$$
$$\varphi\left(\mathbf{x}^i\right) + \left(\partial\varphi\left(\mathbf{x}^i\right), \mathbf{x} - \mathbf{x}^i\right) \leqslant z,\ i = \overline{1,k},\ \mathbf{x} \in Q_k.$$

Значить, на кожному кроці необхідно розв'язувати задачу лінійного програмування.

Теорема 11.4. *Нехай $\varphi(\mathbf{x})$ є опуклою функцією на $\mathbb{R}^n$, а множина Q_0 обмежена і включає $\mathbf{x}^*$. Тоді $\lim\limits_{k\to+\infty} \varphi\left(\mathbf{x}^k\right) = \varphi^*$.*

Недолік: на кожному кроці розв'язується задача лінійного програмування, де кількість обмежень зростає. Швидкість збігу досліджена мало.

б) **Метод чебишевських центрів**

За $\mathbf{x}^{k+1}$ обирається чебишевський центр багатогранника Q_k, тобто точка, максимум відстані якої від граней багатогранника мінімальна, тобто

$$\max z$$
$$\left(\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^i\right)}{\left\|\partial\varphi\left(\mathbf{x}^i\right)\right\|}, \mathbf{x}-\mathbf{x}^i\right)+z \leqslant 0, \quad i=\overline{1,k}.$$

в) **Метод еліпсоїдів — метод Шора**

Помістимо многогранник Q_k всередину кулі, тоді її центр беремо за $\mathbf{x}^{k+1}$. Рахуємо $\partial\varphi\left(\mathbf{x}^{k+1}\right)$ і «відтинаємо» половину кулі. Половину, що залишилася, вписуємо в еліпсоїд мінімального об'єму. Потім перетворюємо еліпсоїд в кулю і т. д. Тоді

$$\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^k-\gamma_k\mathbf{H}_k\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right),$$
$$\gamma_k=\frac{\rho}{n+1}\left(\frac{n}{\sqrt{n^2-1}}\right)^k,$$
$$\mathbf{H}_{k+1}=\mathbf{H}_k-\frac{2}{n+1}\frac{\mathbf{H}_k\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\left(\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right)^\top\mathbf{H}_k}{\left(\mathbf{H}_k\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right),\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right)}, \quad \mathbf{H}_0=\mathbf{I},$$

ρ — радіус початкової кулі з центром у точці $\mathbf{X}^0$, в якій локалізується точка мінімуму.

Теорема 11.5. *Має місце оцінка*

$$\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)-\varphi^*\leqslant Cq^k,$$
$$q=n(n-1)^{-\frac{n-1}{2n}}(n+1)^{-\frac{n+1}{2n}}.$$

При великих n метод програє методу центрів ваги.

Шор прийшов до методу еліпсоїдів з іншого боку. Він об'єднав субградієнтний метод з процедурою розтягу простору. Розтяг він проводить у напрямку останнього субградієнта або ж у напрямку різниці двох останніх субградієнтів.

$$\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^k-\gamma_k\mathbf{H}_k\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right),$$
$$\mathbf{H}_{k+1}=\mathbf{H}_k-\left(1-\frac{1}{\alpha_k^2}\frac{\mathbf{H}_k\mathbf{s}^k\left(\mathbf{s}^k\right)^\top\mathbf{H}_k}{\mathbf{H}_k\mathbf{s}^k,\mathbf{s}^k}\right), \quad \mathbf{H}_0=\mathbf{I},$$

де α_k — коефіцієнт розтягу простору на k-ій ітерації, γ_k — довжина кроку, $\mathbf{s}^k$ — напрямок розтягу.

Наприклад:

$$\mathbf{s}^k = \partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right), \quad \gamma_k = \frac{2\left(\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varphi^*\right)}{\left(\mathbf{H}_k\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right), \partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right)}, \quad \alpha_k \to +\infty,$$

$$\mathbf{s}^k = \partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right), \quad \gamma_k = \lambda\frac{\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varphi^*}{\left(\mathbf{H}_k\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right), \partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)\right)}, \quad \alpha_k = \alpha.$$

Цей метод може застосовуватися і до гладкої оптимізації.

11.3. Завдання для самостійної роботи

1) Знати означення і вміти доводити теорему про необхідну і достатню умову мінімуму.
2) Знати алгоритм і властивості субградієнтного методу.
3) Знати алгоритм методу Шора.

11.4. Питання для самоконтролю

1) Дати означення субградієнта функції у точці.
2) Дати означення субдиференціала функції у точці.
3) Теорема про необхідну і достатню умову мінімуму недиференційовної функції.
4) Сформулювати алгоритм субградієнтного методу.
5) Теорема про збіжність субградієнтного алгоритму.
6) Алгоритм методу відтинаючих гіперплощин.
7) Алгоритм методу еліпсоїдів (Шора).

12

Мінімізація яристих функцій

Багато методів (особливо градієнтні методи) повільно збігаються у тих випадках, коли поверхні рівня функції $\varphi(\mathbf{x})$ сильно витягнуті і фунція має «яристий» характер. Така ситуація в тих випадках, коли $\lambda_{\min} \ll \lambda_{\max}$, де λ_i $(i = \overline{1, n})$ — власні числа матриці Гессе, розрахованій у точці мінімуму.

Наявність яру означає, що невеликі зміни деяких змінних призводять до сильної зміни значень функції — ця група змінних характеризує «схил яру». По іншим змінним, що визначають «дно яру», функція змінюється незначно. Якщо точка лежить на «схилі яру», то напрямок спуску з цієї точки буде направленим на протилежний «схил яру», і в результаті наближення $\mathbf{x}^k$, що отримані градієнтним методом, будуть почергово знаходитись то на одному, то на іншому «схилі яру». Якщо «схили яру» досить круті, то такі скачки зі схилу на схил точок $\mathbf{x}^k$ можуть досить сильно знизити швидкість збігу градієнтного методу.

1) Для збільшення швидкості збігу методу градієнтного спуску при мінімізації «яристої» функції можна скористатися яристим методом.
   На початку пошуку задають дві точки $\overline{\mathbf{x}}^0$, $\overline{\mathbf{x}}^1$ і з них робиться спуск за допомогою якогось варіанту градієнтного методу і отримаємо дві точки $\mathbf{x}^0$ та $\mathbf{x}^1$ на «дні яру». Нехай $\varphi\left(\mathbf{x}^1\right) < \varphi\left(\mathbf{x}^0\right)$.
   Далі покладемо $\overline{\mathbf{x}}^2 = \mathbf{x}^1 + \dfrac{\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0}{\|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0\|} h$, $h > 0$ називається кроком. Точка $\overline{\mathbf{x}}^2$, взагалі-то, знаходиться на «схилі яру». З неї робимо спуск на «дно яру» за допомогою варіанту градієнтного спуску. Отримаємо точку $\mathbf{x}^2$. Якщо уже відомі точки $\mathbf{x}^0$, $\mathbf{x}^1$, $\ldots$, $\mathbf{x}^n$ і $\varphi\left(\mathbf{x}^n\right) < \varphi\left(\mathbf{x}^{n-1}\right)$, то з точки $\overline{\mathbf{x}}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \dfrac{\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}}{\|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}\|} h$ здійснюємо спуск за допомогою градієнтного методу і знаходимо точку $\mathbf{x}^{n+1}$ на «дні яру» (може доведеться зробити не один крок, а декілька, щоб досягти дна яру).
   Величину кроку h розраховують, враховуючи інформацію про функцію $\varphi(\mathbf{x})$, яку отримали у процесі мінімізації.
   Від правильного вибору h суттєво залежить швидкість збіжності методу. Якщо

крок h великий, то на крутих поворотах «яру» точки $\overline{\mathbf{x}}^n$ можуть дуже віддалятися від «дна яру» і тому на спуск з точки $\overline{\mathbf{x}}^n$ в точку $\mathbf{x}^n$ знадобиться великий обсяг обчислень. Крім того, при великих h на крутих поворотах може статися викид точки $\overline{\mathbf{x}}^n$ з «яру» і правильний напрямок пошуку точки мінімуму буде втрачений.

Якщо ж крок h досить малий, то пошук уповільнюється і ефект методу знижується.

Ефективність методу зросте, якщо величина h_n буде змінною. Вона реагує на повороти «яру», а саме:

- швидше проходити прямолінійні участки на «дні яру» за рахунок збільшення кроку;
- на крутих поворотах яру запобігати викиду з яру за рахунок зменшення кроку h.

Для правильної реакції на повороти яру необхідно враховувати «кривизну дна яру». Інформацію про кривизну дна яру необхядно отримувати з попередніх ітерацій методу.

Наприклад, існує такий спосіб вибору кроку:

$$h_{n+1} = h_n \cdot C^{\cos\alpha_n - \cos\alpha_{n-1}}, \quad n = 2, 3, \ldots,$$

де α_n — кут між векторами $\overline{\mathbf{x}}^n - \mathbf{x}^{n-1}$ і $\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}$, тобто

$$\cos\alpha_n = \frac{\left(\overline{\mathbf{x}}^n - \mathbf{x}^{n-1}, \mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}\right)}{\left\|\overline{\mathbf{x}}^n - \mathbf{x}^{n-1}\right\| \cdot \left\|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}\right\|},$$

а $C > 1$. Тоді точка $\overline{\mathbf{x}}^{n+1}$ визначається так:

$$\overline{\mathbf{x}}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \frac{\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}}{\left\|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}^{n-1}\right\|} \cdot h_{n+1} \; (\text{якщо } \varphi\left(\mathbf{x}^n\right) < \varphi\left(\mathbf{x}^{n-1}\right)).$$

Величина $\cos\alpha_n - \cos\alpha_{n-1}$ пов'язана з «кривизною дна яру» і вказує та напрямок зміни кривизни. А саме, при переході з участків дна яру з малою кривизною на участки з більшою кривизною величина $\cos\alpha_n - \cos\alpha_{n-1} < 0$. Тоді $h_{n+1} < h_n$, тобто крок зменшується і великого викиду точки $\overline{\mathbf{x}}^{n+1}$ на схил яру не буде.

А при переході з участків дна яру з великою кривизною на участки з меншою кривизною величина $\cos\alpha_n - \cos\alpha_{n-1} > 0$, тому крок збільшується і прямі участки дна яру проходимо швидко.

Якщо кривизна яру постійна, то $\cos\alpha_n - \cos\alpha_{n-1}$ близька до нуля і крок буде постійним.

2) Інший спосіб збільшення швидкості збігу методів полягає в обранні заміни змінних $\mathbf{x} = g(\mathbf{y})$ так, що поверхні рівня функції $\varphi(g(\mathbf{y}))$ у просторі змінних $\mathbf{y}$ були близькі до сфер (роботи Шора Н. З.).

   Метод зміни масштабів

   Розглянемо простий приклад. Нехай

$$\varphi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} a_i x_i^2, \quad a_i > 0, \quad i = \overline{1, n}. \tag{12.1}$$

   Якщо числа a_i різні, то поверхні рівня функції $\varphi(\mathbf{x})$ витягнуті по тим координатним напрямкам l_i, яким відповідають малі значення a_i, тобто функція має яристий вигляд з пологими схилами, що відповідають малим значенням a_i, і крутими схилами, що відповідають великим значенням a_i.

   Якщо поверхні рівня стали сферичного типу, то це гарантує швидку збіжність довільного методу.

   Для функції (12.1) можна зробити таку заміну змінних:

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y}, \quad \text{де } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \sqrt{a_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{a_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sqrt{a_n} \end{pmatrix}.$$

   Тоді

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{a_1}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{a_2}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\sqrt{a_n}} \end{pmatrix}.$$

   Далі,

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{a_1}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{a_2}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\sqrt{a_n}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{a_1}} y_1 \\ \frac{1}{\sqrt{a_2}} y_2 \\ \vdots \\ \frac{1}{\sqrt{a_n}} y_n \end{pmatrix},$$

   тобто $x_i = \frac{1}{\sqrt{a_i}} y_i$. Отримаємо

$$\varphi(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{n} a_i \left(\frac{1}{\sqrt{a_i}} y_i \right)^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i^2.$$

   У отриманої функції лінії рівня — сфери. Методи збігаються за один крок.

Якщо функція $\varphi(\mathbf{x})$ гладка опукла, то обирають $a_i = \dfrac{\partial^2 \varphi\left(\overline{\mathbf{x}}\right)}{\partial x_i^2}$ у точці $\overline{\mathbf{x}}$ одновимірного мінімуму вздовж напрямку l_i. Це перетворення може і не перевторити поверхні рівня у сфери, але зменшить їх витягнутість.
Масштабні множники a_i звичайно отримують у результаті застосування методу циклічного покоординатного спуску.

12.1. Завдання для самостійної роботи

1) Знати алгоритми яристого методу і методу зміни масштабу.
2) Для отримання $\geqslant 90$ балів застосувати яристий метод для мінімізації функції:

$$\varphi(\mathbf{x}) = (70 + i + n)\left(x_2 - x_1^2\right)^2 + (1 - x_1)^2, \quad \mathbf{x}^0 = (-1.2; 1).$$

Параметри: для першої групи $n = 3$, для другої групи $n = 7$; i — порядковий номер студента у списку групи.

12.2. Питання для самоконтролю

1) Алгоритм яристого методу мінімізації яристих функцій.
2) Метод зміни масштабів.

13

Виродженість

Ми будували чисельні методи мінімізації функцій багатьох змінних при умові невиродженості точки мінімуму, тобто

$$\frac{\partial^2 \varphi\left(\mathbf{x}^*\right)}{\partial \mathbf{x}^2} \neq 0.$$

Припустимо, що ця умова не виконується.

13.1. Поведінка стандартних методів

А. Простежимо поведінку градієнтного методу безумовної мінімізації диференційовних функцій $\varphi(\mathbf{x})$, що опуклі і невиродженість не вимагається. Для алгоритму

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \gamma \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}}. \tag{13.1}$$

має місце

Теорема 13.1. *Нехай $\varphi(\mathbf{x})$ — опукла і диференційовна функція в $\mathbb{R}^n$, градієнт якої задовільняє умові Ліпшиця з const L, а множина точок мінімумів непуста. Тоді метод (13.1) з $0 < \gamma < \frac{2}{L}$ збігається до точки мінімуму і $\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varphi^* = O\left(\frac{1}{k}\right)$.* ☑

Отже, ми маємо, що градієнтний метод збігається без вимог про невиродженість.

Розглянемо поведінку градієнтного методу для квадратичної функції

$$\varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x}) - (\mathbf{b}, \mathbf{x}), \quad \mathbf{A} > 0. \tag{13.2}$$

Ця задача невироджена ($\mathbf{A} > 0$) і тому існує єдиний розв'язок (точка мінімуму).

Нас цікавить випадок погано обумовленої задачі, який близький до виродженого. Нехай L і l — найбільше і найменше власні числа матриці A: $\mu = \dfrac{L}{l} \gg 1$; μ — число обумовленості.

Якщо обрати $\gamma = \dfrac{2}{L+l}$, то справедлива оцінка:

$$\left\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\right\| \leqslant \left\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\right\| \cdot q^k, \quad q = \frac{L-l}{L+l} = \frac{\mu-1}{\mu+1}.$$

Збіжність по функції можна гарантувати зі швидкістю геометричної прогресії зі знаменником $q_1 = \left(\frac{L-l}{L+l}\right)^2$. Однак $q_1 \approx 1 - \frac{4}{\mu}$, що близьке до 1. Отже, можна отримати оцінку швидкості збіжності по функції.

Теорема 13.2. *Метод* (13.1) *при мінімізації квадратичної функції* (13.2) *при* $0 < \gamma < \frac{2}{L}$ *дає таку оцінку:*

$$\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varphi^* \leqslant \frac{C}{k}.$$

☑

Щодо збіжності по аргументу, то не можна отримати ніякої «рівномірної по обумовленості» оцінки.

Б. Розглянемо метод спряжених градієнтів

Питання про поведінку для випадку виродженого мінімуму не досліджене, десь-то швидка збіжність його не зберігається. Розглянемо випадок квадратичних функцій і припустимо, що вимір задачі великий. Відома така оцінка:

$$\left\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\right\| \leqslant C q^k, \quad q = \frac{\sqrt{\mu}-1}{\sqrt{\mu}+1}.$$

Знаменник прогресії q залежить від обумовленості і близький до 1 для погано обумовлених задач.

Має місце

Теорема 13.3. *У методі спряжених градієнтів для квадратичної функції* (13.2) *справедлива оцінка*

$$\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varphi^* \leqslant \frac{C}{k^2}.$$

☑

Отже, ми бачимо, що незалежно від обумовленості задачі метод спряжених градієнтів гарантує досить високу швидкість збіжності по функції типу $O\left(\frac{1}{k^2}\right)$ замісіть $O\left(\frac{1}{k}\right)$, як у градієнтному методі. Отриману оцінку підсилити не можна. Більш того, можна показати, що довільний метод мінімізації квадратичних функцій, що використовує лише градієнти, не може дати швидкість збіжності більш високу, ніж $O\left(\frac{1}{k^2}\right)$, рівномірно по виміру n і по всьому класові квадратичних функцій.

Щодо оцінки швидкості збігу по аргументові метода спряжених градієнтів, то не можливо отримати ніяких оцінок, що не залежать від обумовленості і виміру.

B. Розглянемо метод Ньютона

Перш за все, цей метод не завжди буде коректно визначений, так як матриця $\dfrac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}$ може бути виродженою у будь-якому околі точки $\mathbf{x}^k$. Тому метод не можна застосовувати для розв'язання вироджених задач.

Існує більш вузький клас задач, у яких ця трудність відсутня. А саме, нехай $\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2} > 0$ для усіх $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$ з околу $\mathbf{x}^*$, а у самій точці матриця $\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x}^*)}{\partial\mathbf{x}^2}$ не має оберненої. Тоді при деяких додаткових умовах метод Нютона буде збіжним, але швидкість збігу буде значно нижчою, ніж для невиродженого випадку.

Отже, можна сказати, що в основному стандартні (розглянуті) методи мінімізації залишаються збіжними при пошуку виродженого мінімуму гладкої функції, але швидкість збігу значно менша.

13.2. Спеціальні методи розв'язування вироджених задач

А. Метод регуляризації

Нухай функція $\varphi(\mathbf{x})$ має вироджений мінімум. Тоді розглянемо функцію $\varphi(\mathbf{x}) + \varepsilon g(\mathbf{x})$, і мінімізуємо її при $\varepsilon \to 0$. Сподіваємося, що послідовність точок при $\varepsilon \to 0$ буде прямувати до точки мінімуму початкової задачі.

Має місце

Т е о р е м а 13.4. *Нехай $\varphi(\mathbf{x})$ — опукла неперервна функція в $\mathbb{R}^n$, що має непусту множину точок мінімумів X^*, а $g(\mathbf{x})$ — сильно опукла неперервна функція. Нехай $\mathbf{x}_\varepsilon = \arg\min[\varphi(\mathbf{x}) + \varepsilon g(\mathbf{x})]$, $\varepsilon > 0$, тоді $\mathbf{x}_\varepsilon \to \mathbf{x}^*$ при $\varepsilon \to +0$, де $\mathbf{x}^*$ — та з точок мінімуму функції $\varphi(\mathbf{x})$, для якої $g(\mathbf{x})$ мінімальна, тобто $\mathbf{x}^* = \arg\min_{\mathbf{x}\in X^*} g(\mathbf{x})$.* ☑

Ясно, що чим менше ε, тим ближче $\mathbf{x}_\varepsilon$ до розв'язку. Але ε не можна обирати малим через вплив похибок в обчисленні функції і градієнта.

Б. Прокс-метод

Розглядається задача мінімізації функції $\varphi(\mathbf{x})$. Наближення будуємо таким чином:

$$\mathbf{x}^k = \mathbf{x}_{\varepsilon_k} = \arg\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \left[\varphi(\mathbf{x}) + \frac{\varepsilon_k}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|^2\right], \quad \varepsilon_k \to 0.$$

Можна зробити інакше: не змінювати ε_k, а замінити параметр на $\mathbf{x}^k$. Тоді ми приходимо до методу:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \arg\min \left[\varphi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\varepsilon \left\|\mathbf{x}-\mathbf{x}^k\right\|^2\right], \quad \varepsilon > 0.$$

Цей метод називається проксимаційним (або прокс-методом). Інколи його записують: $\mathbf{x}^{k+1} = Prox\mathbf{x}^k$.

Оператор

$$Prox\mathbf{a} = \arg\min \left[\varphi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\varepsilon\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|^2\right], \quad \varepsilon > 0$$

$\varphi(x)$ — опукла функція, називається проксимаційним.

Має місце

Теорема 13.5. *Нехай $\varphi(\mathbf{x})$ — опукла функція на $\mathbb{R}^n$ і множина точок мінімуму X^* непуста. Тоді прокс-метод збігається до деякої точки $\mathbf{x}^* \in X^*$.* ☑

Перевага прокс-методу перед методом регуляризації полягає в тому, що обумовленість допоміжних задач мінімізації в ньому не погіршується (так як параметр ε є постійним).

B. Ітеративна регуляризація

У раніше описаних методах вважалось, що на кожному кроці розв'язується деяка допоміжна задача безумовної мінімізації. При цьому не фіксувався метод розв'язування. Можна зробити інакше: взяти деякий метод безумовної мінімізації і зробити декілька ітерацій цього методу для допоміжної задачі (число ітерацій можна задавати наперед або регулювати у процесі обчислень). У простому варіанті методів цього типу робиться один крок градієнтного списку для мінімізації регуляризованої функції, після чого змінюється параметр регуляризації. Таким чином отримуємо метод ітеративної регуляризації:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \gamma_k \left[\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}} + \varepsilon_k \frac{\partial g\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}\right],$$

де $g(\mathbf{x})$ — регуляризуюча функція, ε_k — параметр регуляризації, який змінюється на кожному кроці.

Теорема 13.6. *Нехай $\varphi(\mathbf{x})$ і $g(\mathbf{x})$ — дві диференційовані функції, опуклі на*

$\mathbb{R}^n$, $\left\|\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2}\right\| \leqslant L$, $l\mathbf{I} \leqslant \frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2} \leqslant L\mathbf{I}$, $l > 0$ *для всіх* $\mathbf{x}$, $X^* = \mathrm{Arg}\,\min_{x\in\mathbb{R}^n}\varphi(\mathbf{x}) \neq \varnothing$ *і*

$$0 \leqslant \frac{\varepsilon_{k-1}-\varepsilon_k}{\varepsilon_k^2} \to 0, \quad 0 \leqslant \varepsilon_k \to 0, \quad \sum_{k=0}^{\infty}\varepsilon_k = \infty,$$

$$\gamma_k = \gamma, \quad 0 < \gamma < \frac{2}{(1+\varepsilon_0)\,L}.$$

Тоді $\mathbf{x}^k \to \mathbf{x}^*$, *де* $\mathbf{x}^* \in X^*$, $\mathbf{x}^* = \arg\min_{\mathbf{x}\in X^*} g(\mathbf{x})$. ☑

Щодо швидкості збіжності, то так як $\sum\limits_{k=0}^{\infty}\varepsilon_k = +\infty$, то параметр ε_k не можна $\to 0$ дуже швидко. Метод збігається не швидше, ніж метод регуляризації, а той збігається не дуже швидко.

13.3. Завдання для самостійної роботи

1) Ознайомитись з поведінкою стандартних методів при наявності виродженості.
2) Вивчити алгоритми регуляризації.

13.4. Питання для самоконтролю

1) Поведінка градієнтного методу при умові виродженості матриці Гессе.
2) Поведінка алгоритму спряжених градієнтів при умові виродженості матриці Гессе.
3) Вплив виродженості на роботу алгоритму Ньютона.
4) Метод регуляризації у вироджених задачах.
5) Алгоритм ітеративної регуляризації розв’язання вироджених задач.

14 Вплив перешкод на работу методів мінімізації функцій

14.1. Джерела перешкод

А. Коли Функція і градієнт задаються формулами, то похибки виникають внаслідок похибок обчислень, пов'язаних з округленням при виконані арифметичних дій на комп'ютері. У результаті $\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)$, $\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}$ обчислюються з деякою похибкою і тоді ми отримаємо не $\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)$, $\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}$, а $\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)+r_k$, $\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}+r_k$. Перешкода r_k є детермінованою, тому що похибки округлення в комп'ютері не носять випадкового характеру і тому їх рівень можна оцінити. Похибку r_k можна оцінити величиною ε, яке є постійною величиною і її можна зменшити, взявши вдвічі більше знаків.

Б. У деяких задачах $\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)$ і $\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}$ ми отримуємо не за допомогою обчислень, а у результаті виміру. Тоді перешкоди носять випадковий характер. У цьому випадку, як правило, відомі статистичні характеристики перешкод.

В. У ряді задач похибки виникають тому, що значення функції і градієнта обчислюються за спрощеними або наближеними формулами. Нерідко точне обчислення вимагає громіздкого розрахунку, розв'язування складних допоміжних задач, врахування взаємодії всіх праметрів. Усі ці розрахунки проводити повністю не доцільно. Їх спрощення і огрублення приводить до похибок при розрахунку функції і градієнта. Це так звані **неусувні** похибки.

Г. У багатьох задачах похибки виникають через необхідність розв'язування допоміжних задач, яке не можна виконати точно. Наприклад, у методі Ньютона на кожному кроці необхідно розв'язувати систему лінійних рівнянь, що пов'язано з похибками. У ціому випадку кажуть про **похибку методу**.

14.2. Типи перешкод

Далі мова буде йти про обчислення градієнта, коли замість $\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^k)}{\partial\mathbf{x}}$ ми будемо оперувати з $\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^k)}{\partial\mathbf{x}} + r^k$, де r^k — перешкода.

А. **Абсолютні детерміновані перешкоди**

Вони задовольняють умові $\left\|r^k\right\| \leqslant \varepsilon$. Це означає, що градієнт обчислюється із заданою абсолютною похибкою. Вважається, що про перешкоди більше нічого не відомо. Вектор r^k може бути не випадковим або він може корелювати з попередніми перешкодами. Така ситуація характерна для похибок обчислень і систематичних похибок вимірів.

Б. **Відносні детерміновані перешкоди**

Вони задовольняють умовам $\left\|r^k\right\| \leqslant \varepsilon \left\|\frac{\partial\varphi(\mathbf{x}^k)}{\partial\mathbf{x}}\right\|$. Тобто градієнт обчислюється з відносною похибкою. Про похибки більше нічого невідомо. Такі перешкоди виникають при використанні наближених формул, що дають фіксовану відносну похибку.

В. **Абсолютні випадкові перешкоди**

Нехай перешкоди r^k випадкові, незалежні при різних $\mathbf{x}$, центровані і мають обмежену дисперсію:

$$Mr^k = 0, \quad M\left\|r^k\right\|^2 \leqslant \sigma^2.$$

Перешкоди такого типу властиві задачам, у яких градієнт розраховується у результаті вимірів на реальному об'єкті.

Г. **Відносні випадкові перешкоди**

Вони мають ті ж властивості, що і в пункті В, однак у них дисперсія зменшується при наближенні до точки мінімуму:

$$Mr^k = 0, \quad M\left\|r^k\right\|^2 \leqslant \tau \left\|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|^2.$$

Звичайно, що на практиці зустрічаються й інші типи перешкод, наприклад, випадкові перешкоди зі систематичною похибкою ($\left\|Mr^k\right\| \leqslant \varepsilon$) або випадкові обмежені похибки ($\left\|r^k\right\| \leqslant \varepsilon$). Їх можна розглядати як комбінацію основних типів, розглянутих вище.

Іноді вважають, що рівень перешкод ε_k залежить від номера ітерації і $\varepsilon_k \to 0$ при $k \to +\infty$. Таке припущення не дуже реалістичне. У деяких випадках можна досягти його виконання за допомогою точності обчислень і зменшення похибки методу.

14.3. Градієнтний метод при наявності перешкод

Розглянемо градієнтний метод мінімізації диференційовної функції $\varphi(\mathbf{x})$, коли градієнт обчислюється з похибкою:

$$\mathbf{x}^k + 1 = \mathbf{x}^k - \gamma_k \mathbf{s}^k, \quad S^k = \frac{\partial \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}} + r^k.$$

Відносно перешкод r^k будемо робити припущення щодо належності одному з розглянутих типів. Нехай $\varphi(\mathbf{x})$ — сильно опукла, а градієнт задовольняє умові Ліпшиця. Нас буде цікавити поведінка градієнтного методу з $\gamma_k = \gamma$ при наявності перешкод.

А. **Абсолютні детерміновані перешкоди**

Наявність таких перешкод приводить до того, що градієнтний метод з постійним кроком не збігається до точки мінімуму. Він дає можливість потрапити до деякого околу точки мінімуму, розміри якого тим менше, чим менший рівень перешкод. Збіжність до цього околу відбувається зі швидкістю геометричної прогресії.

Б. **Відносні детерміновані перешкоди**

Градієнтний метод стійкий до відносних похибок, якщо їх рівень менше ніж 100 %. Причина цього очевидна — кожний напрямок, що складає з антиградієнтом гострий кут, є напрямком спуску функції $\varphi(\mathbf{x})$ і може бути використаний замість антиградієнта.

В. **Абсолютні випадкові перешкоди**

Варіант градієнтного методу з $\gamma_k = \gamma$ при наявності вказаних перешкод не збігається до точки мінімуму, а приводить лише в окіл мінімуму. Розміри цієї області тим менше, чим менше γ. Обираючи $\gamma_k \to 0$, можна зробити метод збіжним ($\gamma_k \to 0$ або $\sum\limits_{k=0}^{\infty} \gamma_k^2 < +\infty$). Швидкість збігу при цьому досить мала $\sim O\left(\frac{1}{k}\right)$.

Г. **Відносні випадкові перешкоди**

Наявність випадкових відносних перешкод довільного рівня не призводить до порушення збіжності.

Отже, ми отримали, що у залежності від перешкод їх присутність може або зберегти, або порушити збіжність градієнтного методу. Інколи збіжність можна відновити за рахунок регулювання довжини кроку.

14.4. Метод Ньютона при наявності перешкод

Питання про поведінку методу Ньютона при наявності перешкод значно складніше, ніж для градієнтого методу. Справа в тому, що у цьому методі може бути декілька джерел перешкод (обчислення $\varphi(\mathbf{x})$, $\frac{\partial\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}}$, $\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2}$, розв'язування системи).

Розглянемо тільки важливі перешкоди. Нехай у результаті усіх розрахунків отримали вектор $\mathbf{s}^k = \left[\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\right]^{-1}\left(\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2} + r^k\right)$, де r^k — перешкода і робиться крок

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \mathbf{s}^k.$$

Припустимо, що перешкода містить в собі систематичну похибку: $\left\|r^k\right\| \leqslant \varepsilon$.

Ми знаємо, що метод Ньютона збігається локально у деякій області Q. Зрозуміло, що якщо ε більше діаметра Q, то збіжності немає при довільній $\mathbf{x}^0$, як завгодно близькій до $\mathbf{x}^*$, тобто процес відбувається поза Q.

Таким чином, виникає ситуація, якої не було у градієнтному методі: при досить високому рівні абсолютних перешкод метод Ньютона може вести себе непередбачувано.

Виникнення систематичних похибок у методі Ньютона неминуче, навіть якщо $\frac{\partial\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}}$ і $\frac{\partial^2\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}^2}$ обчислюються точно. Справа в тому, що якщо число обумовленості $\mu = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$ у точці мінімуму велике, то матриця $\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}$ буде погано обумовленою. Тому розв'язок системи лінійних рівнянь $\frac{\partial^2\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}^2}\mathbf{s} = \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}$ для визначення напрямку спуску відрізняється від точного розв'язку внаслідок похибок округлення у комп'ютері. Для погано обумовлених задач це може призвести до розвалу метода Ньютона.

Присутність випадкових або відносних похибок не дуже катастрофічно, але може спричинити суттєве сповільнення методу Ньютона. Наприклад, для квадратичних функцій він буде збігатись не швидше $O\left(\frac{1}{k}\right)$. Але цю швидкість має більш простий градієнтний метод.

Аналогічна ситуація виникає при наявності відносної похибки. Якщо градієнт розраховується з відносною похибкою, то метод Ньютона може збігатися лише зі швидкістю геометричної прогресії.

Тільки при вісокій точності обчислень метод Ньютона зберігає свої переваги.

14.5. Багатокрокові методи при наявності перешкод

Одним з найпростіших таких методів є двокроковий метод важкої кульки:

$$\mathbf{x}^k + 1 = \mathbf{x}^k - \alpha \frac{\partial^2 \varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial \mathbf{x}} + \beta\left(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}\right),$$

де $\alpha > 0$, $\beta \geqslant 0$ — деякі параметри.

Існує

Теорема 14.1. *Нехай* $\mathbf{x}^*$ *— невироджена точка мінімуму* $\varphi(\mathbf{x})$*,* $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$*. Тоді при*

$$0 \leqslant \beta < 1, \quad 0 < \alpha < \frac{2(1+\beta)}{L}, \quad l\mathbf{I} \leqslant \frac{\partial^2 \varphi\left(\mathbf{x}^*\right)}{\partial \mathbf{x}^2} \leqslant L\mathbf{I}$$

знайдеться $\varepsilon > 0$*, що при довільних* $\mathbf{x}^0$*,* $\mathbf{x}^1$*,* $\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\| \leqslant \varepsilon$*,* $\|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^*\| \leqslant \varepsilon$ *метод збігається зі швидкістю геометричної прогресії:*

$$\left\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\right\| \leqslant C(\delta)(q+\delta)^k, \quad 0 \leqslant q < 1, \quad 0 < \delta < 1 - q.$$

Величина q *мінімальна і дорівнює:*

$$q^* = \frac{\sqrt{L} - \sqrt{l}}{\sqrt{L} + \sqrt{l}} \text{ при } \alpha^* = \frac{4}{\sqrt{L} + \sqrt{l}},\ \beta^* = \left(\frac{\sqrt{L} - \sqrt{l}}{\sqrt{L} + \sqrt{l}}\right)^2.$$

Розглянемо метод важкої кульки. Він кращий за градієнтний метод по швидкості збігу без перешкод, але менш ефективний при наявності перешкод. Це відноситься до асимптотичної поведінки методів.

На початкових кроках, коли відносна похибка перешкод мала, двокроковий метод працює краще за однокроковий також і при наявності перешкод. При наявності абсолютних детермінованих перешкод у визначенні градієнта метод важкої кульки збігається в області навколо мінімуму. Для квадратичної функції ця область більша, ніж для градієнтного методу.

Приблизно така ж ситуація і з методом спряжених градієнтів. Аналіз його поведінки при наявності перешкод дуже складний. Найбільш стійкий до похибок алгоритм:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \gamma_k \frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}} + \beta_k\left(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}\right),$$
$$\{\gamma_k, \beta_k\}:\ \arg\min\varphi\left[\mathbf{x}^k - \gamma\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}} + \beta\left(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^{k-1}\right)\right].$$

При абсолютних і відносних перешкодах метод спряжених градієнтів поблизу мінімуму втрачає переваги перед градієнтним методом. Лише якщо перешкоди задовольняють умові $\left\|r^k\right\| \leqslant C\left\|\frac{\partial\varphi\left(\mathbf{x}^k\right)}{\partial\mathbf{x}}\right\|^2$, то метод спряжених градієнтів зберігає свої переваги.

14.6. Квазінютоновські методи при наявності перешкод

Ці методи дуже чутливі до похибок обчислення градієнта. Дійсно, в них матриця Гессе відтворюється по вимірам градієнта. Якщо кроки малі ($\mathbf{x}^{k+1}$ близьке до $\mathbf{x}^k$), а $\frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{x}}$ має похибки, то матриця відтворюється погано. Для випадкових перешкод можна збільшувати кількість точок для відтворення $\frac{\partial\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}}$. Для детермінованих перешкод ця пропозиція не спрацьовує.

14.7. Завдання для самостійної роботи

1) Знати джерела перешкод, типи перешкод і як вони впливають на основні методи мінімізації.

14.8. Питання для самоконтролю

1) Сформулювати джерела перешкод.
2) Сформулювати типи перешкод.
3) Поведінка градієнтного методу при наявності перешкод.
4) Поведінка методу Ньютона при наявності перешкод.
5) Поведінка багатокрокових методів при наявності перешкод.
6) Поведінка квазіньотоновських методів при наявності перешкод.

15 Порівняння алгоритмів нелінійного програмування при відсутності обмежень

Перш ніж оцінити ефективність різних алгоритмів при відсутності обмежень, зробимо декілька зауважень відносно критеріїв, які використовуються при оцінці ефективності алгоритмів. Особливий інтерес представляють відповіді на питання:

1) Які алгоритми є кращими, а які гірші?
2) Як впливає природа задачі, а саме нелінійність, число змінних і т. д. на якість роботи алгоритма?
3) Яка ефективність алгоритмів, що не використовують похідних, у порівняння з алгоритмами, що їх використовують?
4) Чому деякі алгоритми в певних умовах не працюють?

15.1. Критерії оцінки

Алгоритми можна дослідити як з теоретичної, так і з експериментальної точок зору. Перший підхід можна застосовувати тільки для досить обмеженого класу задач, тому будемо оцінювати ефективність алгоритмів за допомогою експеримента, тобто розв'язку тестових задач. Алгоритми можуть бути перевірені на спеціальних задачах як з малою, так і з великою кількістю змінних, на задачах з різним ступенем нелінійності, а також на задачах, що виникають на практиці, таких, як задачі мінімізації суми квадратів, розв'язування систем нелінійних рівнянь і т. д. Досліджуючи ефективність алгоритмів на таких задачах, ми зможемо прогнозувати роботу алгоритмів на нових задачах.

Порівнювати між собою декілька методів оптимізації за результатами чисельних експериментів і зробити висновки про переваги одного з них не дуже просто.

По-перше, порівнянню підлягають не методи, а комп'ютерна реалізація відповідних алгоритмів. Добрий метод можна «загубити» поганим програмуванням, невдалим вибором параметрів алгоритму, малою кількістю розрядів і т. д.

По-друге, не зрозуміло, яким чином порівнювати трудомісткість різних методів. Критерій — витрачений час у дійсності не дуже вдалий. Час залежить від класу комп'ютера, мови програмування, кваліфікації програміста. Більш надійним показником є кількість розрахунків функції або інша «внутрішня» характеристика методу. Але і тут виникають проблеми: функції бувають різні, апроксимація похідних теж різна.

Ніякого задовільного способу подолання вказаних труднощів не існує. Єдине, що можна зробити в подібній ситуації — приводити дані про результати обчислень в розгорнутому вигляді, щоб мати можливість порівнювати методи за різними критеріями.

Взагалі-то, при друкуванні результатів роботи алгоритму необхідно дотримуватися таких правил:

а) давати точне формулювання задачі, всі її параметри і початкове наближення;
б) детально описати алгоритм або відіслати до друкованої роботи;
в) виводити проміжні результати, а також і при зміні параметрів;
г) вказувати тип комп'ютера, довжину слова, мову программування, відомості про програму;
д) повідомляти різні характеристики точності наближення ($\left\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\right\|$, $\varphi\left(\mathbf{x}^k\right) - \varphi^*$), при малих розмірах і самі наближення;
е) вказати дані про трудоміскість обчислень: кількість ітерацій, обчислень $\varphi(\mathbf{x})$ і $\dfrac{\partial\varphi(\mathbf{x})}{\partial\mathbf{x}}$, час.

Цю інформацію необхідно давати тільки в працях, які присвячені чисельній перевірці методів.

Порівняння методів доцільно робити на стандартних спеціально підібраних задачах-тестах. Бажано, щоб вони задовольняли таким вимогам:

- тести повинні бути уніфікованими, загальноприйнятими і популярними;
- тести повинні моделювати типові труднощі: бути різної обумовленості, різного виміру, різної кривизни ліній рівня, одно- та багатоекстремальними;
- розв'язок тестової задачі відомий;
- тестова задача повинна бути компактною;
- задачі, що мають специфічні властивості, не можуть бути тестовими (наприклад, сепарабельні задачі).

На жаль, зараз відсутні загальноприйняті тестові задачі, їх класифікація по складності.

Наведемо декілька відомих тестових задач, що в деякій мірі задовольнять вищесформульованим вимогам.

Задача 1 Функція Розенброка, $n = 2$

$$\varphi(\mathbf{x}) = 100\left(x_2 - x_1^2\right)^2 + (1 - x_1)^2\,,$$
$$\mathbf{x}^0 = (-1.2; 1), \quad \mathbf{x}^* = (1; 1), \quad \varphi^* = 0.$$

Функція погано обумовлена ($\mu = 2500$), неопукла, з параболічним яром.

Можна розглядати багатовимірний варіант:

$$\varphi(\mathbf{x}) = 100\sum_{i=2}^{n}\left(x_i - x_{i-1}^2\right)^2 + (1 - x_i)^2\,,$$
$$x_1^0 = -1;\; x_i^0 = \left(x_{i-1}^0\right)^2 - 0.2,\; i = \overline{2, n}, \quad \mathbf{x}^* = (1; 1; \ldots; 1), \quad \varphi^* = 0.$$

Задача 2 Функція Пауелла

$$\varphi(\mathbf{x}) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5\,(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10\,(x_1 - x_4)^4\,,$$
$$\mathbf{x}^0 = (3; -1; 0; 1), \quad \mathbf{x}^* = (0; 0; 0; 0), \quad \varphi^* = 0.$$

Функція неопукла. Точка мінімуму — вироджена ($\mu = \infty$).

Задача 3 Різницевий аналог задачі про брахистохрону, $n > 1$ — довільне

$$\varphi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n+1}\left[\frac{0.0016 + (x_i - x_{i-1})^2}{0.04i}\right]^{\frac{1}{2}}\,,$$
$$\mathbf{x}^0 = (0; 0; \ldots; 0), \quad \mathbf{x}_{i+1}^* = \mathbf{x}_i^* + 0.04\left[\frac{0.0099099(i+1)}{1 - 0.0099099(i+1)}\right]^{\frac{1}{2}},\; i = \overline{0, n}.$$

Функція опукла, обумовленість зростає з ростом n, але не досить швидко ($\mu \sim 10^4$ при $n = 50$).

Задача 4

$$\varphi(\mathbf{x}) = \alpha^{-2} \sum_{j=1}^{10} \left[\alpha \exp(-0.2j) + 2\alpha \exp(-0.4j) - \right.$$
$$\left. - x_1 \exp(-0.2jx_2) - x_3 \exp(-0.2jx_4)^2\right], \quad \varphi^* = 0,$$

а) $\mathbf{x}^0 = (0.5; 0; 2.5; 3)$, $\mathbf{x}^* = (1; 1; 2; 2)$, $\alpha = 1$;
б) $\mathbf{x}^0 = (500; 0; 2500; 3)$, $\mathbf{x}^* = (1000; 1; 2000; 2)$, $\alpha = 1000$.

Функція неопукла, обумовленість досить велика (особливо у випадку б)).

Мінімізація цих функцій здійснювалася методами: градієнтним, спряжених градієнтів, Девідона — Флетчера — Пауелла, Бройдена — Флетчера — Шенно і Шора.

Результати обчислень показують, що градієнтний метод непридатний для розв'язання таких задач.

Метод Бройдена — Флетчера — Шенно працює краще, ніж метод спряжених градієнтів.

Метод Шора працює краще, ніж квазіньотоновські методи.

Задача 5

$$\varphi(\mathbf{x}) = 100\left(x_2 - x_1^3\right)^2 + (1 - x_1)^2, \quad \mathbf{x}^0 = (-1.2; 1), \quad \mathbf{x}^* = (1; 1), \quad \varphi^* = 0.$$

Задача 6

$$\varphi(\mathbf{x}) = [1.5 - x_1(1 - x_2)]^2 + \left[2.25 - x_1\left(1 - x_2^2\right)\right]^2 + \left[2.625 - x_1\left(1 - x_2^3\right)\right]^2,$$
$$\mathbf{x}^0 = (2; 0.2), \quad \mathbf{x}^* = (3; 0.5), \quad \varphi^* = 0.$$

Задача 7

$$\varphi(\mathbf{x}) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4,$$
$$\mathbf{x}^0 = (3; -1; 0; 1), \quad \mathbf{x}^0 = (1; 1; 1; 1), \quad \mathbf{x}^* = (0; 0; 0; 0), \quad \varphi^* = 0.$$

Задача 8

$$\varphi(\mathbf{x}) = (x_1 x_2)^2 (1 - x_1)^2 \left[1 - x_1 - x_2 (1 - x_1)^5\right]^2,$$
$$\mathbf{x}^0 = (-1.2; 1),$$
$$\mathbf{x}^* = (1; \infty), \quad \mathbf{x}^* = (0; \infty), \quad \mathbf{x}^* = (\infty; 0), \quad \varphi^* = 0.$$

Задача 9

$$\varphi(\mathbf{x}) = \left(x_1^2 + x_2 - 11\right)^2 + \left(x_1 + x_2^2 - 7\right)^2,$$
$$\mathbf{x}^0 = (1; 1), \quad \mathbf{x}^* = (3.58443; -1.84813), \quad \mathbf{x}^* = (3; 2), \quad \varphi^* = 0.$$

Задача 10

$$\varphi(\mathbf{x}) = 100 \left[x_3 - \left(\frac{x_1 + x_2}{2}\right)^2\right]^2 + (1 - x_1)^2 + (1 - x_2)^2,$$
$$\mathbf{x}^0 = (-1.2; 2; 0), \quad \mathbf{x}^* = (1; 1; 1), \quad \varphi^* = 0.$$

Задача 11

$$\varphi(\mathbf{x}) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 + \frac{0.04}{g(\mathbf{x})} + \frac{h^2(\mathbf{x})}{0.2},$$
$$g(\mathbf{x}) = -\frac{x_1^2}{4} - x_2^2 + 1; \quad h(\mathbf{x}) = x_1 - 2x_2 + 1;$$
$$\mathbf{x}^0 = (2; 2), \quad \mathbf{x}^* = (1.7954; 1.3779), \quad \varphi^* = 0.16904.$$

Задача 12

$$\varphi(\mathbf{x}) = 100 \left\{[x_3 - 10 f(x_1, x_2)]^2 + \left[\left(x_1^2 + x_2^2\right)^{\frac{1}{2}} - 1\right]^2\right\} + x_3^2,$$
$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{x_2}{x_1}, & x_1 > 0, \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{x_2}{x_1}, & x_1 < 0. \end{cases}$$
$$\mathbf{x}^0 = (-1; 0; 0), \quad \mathbf{x}^* = (1; 0; 0), \quad \varphi^* = 0.$$

Задача 13

$$\varphi(\mathbf{x}) = u_1^2 + u_2^2 + u_3^2$$
$$u_i = c_i - x_1\left(1 - x_2^i\right), \quad c_1 = 1.5,\ c_2 = 2.25;\ c_3 = 2.625,$$
$$\mathbf{x}^0 = (2; 0.2), \quad \mathbf{x}^* = (3; 0.5), \quad \varphi^* = 0.$$

15.2. Завдання для самостійної роботи

1) Знати критерії оцінки алгоритмів мінімізації функцій.
2) Знати 2-3 тестові функції.

15.3. Питання для самоконтролю

1) Критерії оцінки алгоритмів мінімізації функцій.
2) Уміти написати дві тестові функції.
3) Дати порівняльну характеристику методів: градієнтного, спряжених градієнтів, ДФП, БФШ і Шора.

Частина IV.

Чисельні методи умовної мінімізації функцій багатьох змінних

16 Методи проекції градієнта

Напрямок найшвидшого спуску — антиградієнт. Але при наявності обмежень рух вздовж антиградієнта може призвести до неприпустимої точки.

16.1. Метод проекції градієнта Розена

У методі проекції градієнта Розена антиградієнт проектується таким чином, що значення цільової фукнції покращується, і в той же час припустимість точок траєкторії.

Означення 16.1. *Матриця* $\mathbf{P}$ *виміру* $n \times n$ *називається матрицею проектування, якщо* $\mathbf{P} = \mathbf{P}^\top$, $\mathbf{PP} = \mathbf{P}$.

16.1.1. Задача з лінійними обмеженнями

Розглянемо задачу

$$\min \varphi(\mathbf{x}), \tag{16.1}$$

$$\mathbf{Ax} \leqslant \mathbf{b}, \quad \mathbf{Hx} = \mathbf{h}, \tag{16.2}$$

де $\mathbf{A}$ — $m \times n$-матриця; $\mathbf{H}$ — $l \times n$-матриця; $\mathbf{b}$ — m, $\mathbf{h}$ — l-вимірні вектори.

У точці $\mathbf{x}$ напрямок найшвидшого спуску $-\varphi'(\mathbf{x})$. Однак рух вздовж $-\varphi'(\mathbf{x})$ може порушити припустимість. Щоб її зберегти, спроектуємо $-\varphi'(\mathbf{x})$ так, щоб рухатись вздовж $\mathbf{s} = -\mathbf{P}\varphi'(\mathbf{x})$, де $\mathbf{P}$ — матриця проектування.

Розглянемо задачу (16.1)–(16.2). Нехай $\mathbf{x}$ — припустима точка, для якої $\mathbf{A}_1\mathbf{x} = \mathbf{b_1}$, $\mathbf{A}_2\mathbf{x} < \mathbf{b_2}$, де $\mathbf{A}^\top = \left[\mathbf{A}_1^\top, \mathbf{A}_2^\top\right]$, $\mathbf{b}^\top = \left[\mathbf{b}_1^\top, \mathbf{b}_2^\top\right]$. Нехай $\varphi(\mathbf{x})$ диференційовна в точці $\mathbf{x}$. Якщо $\mathbf{P}$ — матриця проектування така, що $\mathbf{P}\varphi'(\mathbf{x}) \neq 0$, то вектор $\mathbf{s} = -\mathbf{P}\varphi'(\mathbf{x})$ є напрямком спуску для точки $\mathbf{x}$. Крім того, якщо $\mathbf{M}^\top = \left[\mathbf{A}_1^\top, \mathbf{H}^\top\right]$ має повний ранг і

якщо
$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{M}^\top \left(\mathbf{M}\mathbf{M}^\top\right)^{-1} \mathbf{M},$$
то $\mathbf{s}$ — можливий напрямок спуску.

Якщо $\mathbf{P}\varphi'(\mathbf{x}) = 0$, то

$$\mathbf{P}\varphi'(\mathbf{x}) = \left[\mathbf{I} - \mathbf{M}^\top \left(\mathbf{M}\mathbf{M}^\top\right)^{-1} \mathbf{M}\right] \varphi'(\mathbf{x}) =$$
$$= \varphi'(\mathbf{x}) - \mathbf{M}^\top \left(\mathbf{M}\mathbf{M}^\top\right)^{-1} \mathbf{M}\varphi'(\mathbf{x}) = \varphi'(\mathbf{x}) + \mathbf{M}^\top\mathbf{w} = \varphi'(\mathbf{x}) + \mathbf{A}_1^\top\mathbf{u} + \mathbf{H}^\top\mathbf{v},$$

де $\mathbf{w}^\top = \left[\mathbf{u}^\top, \mathbf{v}^\top\right]$.

Маємо $\mathbf{w} = -\left(\mathbf{M}\mathbf{M}^\top\right)^{-1} \mathbf{M}\varphi'(\mathbf{x})$.

Якщо $\mathbf{u} \geqslant 0$, то $\mathbf{x}$ — точка Куна — Таккера. Нехай деяка компонента $u_j < 0$, а $\widehat{\mathbf{M}}^\top = \left[\widehat{\mathbf{A}}_1^\top, \mathbf{H}^\top\right]$, де $\widehat{\mathbf{A}}_1$ отримується з $\mathbf{A}_1$ викресленням рядка, що відповідає u_j. Позначимо $\widehat{\mathbf{P}} = \mathbf{I} - \widehat{\mathbf{M}}^\top \left(\widehat{\mathbf{M}}\widehat{\mathbf{M}}^\top\right)^{-1} \widehat{\mathbf{M}}$ і нехай $\widehat{\mathbf{s}} = -\widehat{\mathbf{P}}\varphi'(\mathbf{x})$. Тоді вектор $\widehat{\mathbf{s}}$ є можливим напрямком спуску.

16.2. Алгоритм методу проекції градієнта Розена

$$\min \varphi(\mathbf{x}),$$
$$\mathbf{A}\mathbf{x} \leqslant \mathbf{b}, \quad \mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{h}.$$

Попередній етап Обрати точку $\mathbf{x}^1$, для якої $\mathbf{A}\mathbf{x}^1 \leqslant \mathbf{b}$, $\mathbf{H}\mathbf{x}^1 = \mathbf{h}$. Представимо $\mathbf{A}^\top$ і $\mathbf{b}^\top$ у вигляді $\left[\mathbf{A}_1^\top, \mathbf{A}_2^\top\right]$ і $\left[\mathbf{b}_1^\top, \mathbf{b}_2^\top\right]$. Маємо $\mathbf{A}_1\mathbf{x} = \mathbf{b_1}$, $\mathbf{A}_2\mathbf{x} < \mathbf{b_2}$. Покласти $k = 1$ і перейти до основного етапу.

Основний етап

Перший крок Покладемо $\mathbf{M}^\top = \left[\mathbf{A}_1^\top, \mathbf{H}^\top\right]$. Якщо $\mathbf{M} = \mathbf{0}$, то $\mathbf{P} = \mathbf{I}$, інакше $\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{M}^\top \left(\mathbf{M}\mathbf{M}^\top\right)^{-1} \mathbf{M}$. Тоді $\mathbf{s}^k = -\mathbf{P}\varphi'\left(\mathbf{x}^k\right)$. Якщо $\mathbf{s}^k \neq \mathbf{0}$, то перейти до другого кроку.

Якщо $\mathbf{s}^k = \mathbf{0}$ і $\mathbf{M} = \mathbf{0}$, то зупинитись. Інакше ($\mathbf{M} \neq \mathbf{0}$) покласти $\mathbf{w} = -\left(\mathbf{M}\mathbf{M}^\top\right)^{-1} \mathbf{M}\varphi'(\mathbf{x})$. Нехай $\mathbf{w}^\top = \left[\mathbf{u}^\top, \mathbf{v}^\top\right]$. Якщо $\mathbf{u} \geqslant 0$, то зупинитись і $\mathbf{x}^k$ — точка Куна — Таккера. Якщо ж $\mathbf{u} \ngeqslant 0$, то обрати $u_j < 0$ з цього вектора $\mathbf{u}$, переозначити матрицю $\mathbf{A}_1$, викреслюючи рядок, що відповідає $u_j < 0$, і повторити перший крок.

Другий крок У якості λ_k взяти оптимальний розв'язок задачі $\min\limits_{0\leqslant\lambda\leqslant\lambda_{\max}} \varphi\left(\mathbf{x}^k+\lambda\mathbf{s}^k\right)$, а $\lambda_{\max}$ обирається так:

$$\lambda_{\max} = \begin{cases} \min\left\{\dfrac{\widehat{b}_i}{\widehat{s}_i}\,\middle|\,\widehat{s}_i>0\right\}, & \text{якщо } \widehat{\mathbf{s}} \nleqslant 0,\\ \infty, & \text{якщо } \widehat{\mathbf{s}} \leqslant 0,\end{cases}$$

$\widehat{\mathbf{b}} = \mathbf{b}_2 - \mathbf{A}_2\mathbf{x}^k$, $\widehat{\mathbf{s}} = \mathbf{A}_2\mathbf{s}^k$.

Покласти $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \lambda_k\mathbf{s}^k$, замінити k на $k+1$ і перейти до першого кроку.

Приклад 16.1. Методом проекції градієнта розв'язати задачу

$$\min\left[2x_1^2+2x_2^2-2x_1x_2-4x_1-6x_2\right]$$

$$\begin{aligned} x_1+x_2&\leqslant 2,\\ x_1+5x_2&\leqslant 5,\\ -x_1&\leqslant 0,\\ -x_2&\leqslant 0.\end{aligned}$$

$\mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$, $\mathbf{b}_2 = \begin{pmatrix}2\\5\end{pmatrix}$. Нехай $\mathbf{x}^1 = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$.

Перша ітерація В точці $\mathbf{x}^1 = (0,0)^\top$ маємо $\varphi'\left(\mathbf{x}^1\right) = (-4,-6)^\top$. Визначаємо $\mathbf{A}_1$, $\mathbf{A}_2$ і $\mathbf{P}$:

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 5\end{pmatrix},$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{A}_1^\top\left(\mathbf{A}_1\mathbf{A}_1^\top\right)^{-1}\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

і $\mathbf{s} = -\mathbf{P}\varphi'\left(\mathbf{x}^1\right) = (0,0)^\top$.
Так як обмеження-рівності відсутні ($\mathbf{H}$ — відсутня), то

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} = -\left(\mathbf{A}_1\mathbf{A}_1^\top\right)^{-1}\mathbf{A}_1\varphi'\left(\mathbf{x}^1\right) = (-4,-6)^\top.$$

Обираємо $u_4 = -6$ і видаляємо градієнт, що відповідає четвертому обмеженню, з матриці $\mathbf{A}_1$. Матриця $\mathbf{A}_1$ матиме вигляд $\mathbf{A}_1 = (-1, 0)$. Тоді матриця проектування матиме вигляд

$$\widehat{\mathbf{P}} = \mathbf{I} - \widehat{\mathbf{A}}_1^\top \left(\widehat{\mathbf{A}}_1 \widehat{\mathbf{A}}_1^\top\right)^{-1} \widehat{\mathbf{A}}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

а напрямок $\mathbf{s}^1 = -\widehat{\mathbf{P}}\varphi'\left(\mathbf{x}^1\right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -4 \\ -6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 6 \end{pmatrix}$.

Лінійний пошук Точку $\mathbf{x}^2$ представляємо у вигляді

$$\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 + \lambda \mathbf{s}^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 6\lambda \end{pmatrix}.$$

Відповідне значення $\varphi\left(\mathbf{x}^2\right) = 72\lambda^2 - 36\lambda$.

Перший підхід

$$\widehat{\mathbf{b}} = \mathbf{b}_2 - \mathbf{A}_2\mathbf{x}^1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix},$$

$$\widehat{\mathbf{s}} = \mathbf{A}_2\mathbf{s}^1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 30 \end{pmatrix},$$

$$\frac{\widehat{b}_1}{\widehat{s}_1} = \frac{2}{6}, \quad \frac{\widehat{b}_2}{\widehat{s}_2} = \frac{5}{30}, \quad \lambda_{\max} = \min\left\{\frac{2}{6}, \frac{5}{30}\right\} = \frac{1}{6}.$$

Другий підхід Підкладемо $\mathbf{x}^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 6\lambda \end{pmatrix}$ у обмеження:

$$\begin{cases} 0 + 6\lambda \leqslant 2, \\ 0 + 5 \cdot 6\lambda \leqslant 5, \\ -0 \leqslant 0, \\ -6\lambda \leqslant 0. \end{cases} \qquad \begin{cases} \lambda \leqslant \dfrac{2}{6}, \\ \lambda \leqslant \dfrac{5}{30}, \\ \lambda \geqslant 0. \end{cases} \implies \lambda_{\max} \leqslant \frac{1}{6}.$$

Отже, λ_1 є розв'язком задачі

$$\min_{0 \leqslant \lambda \leqslant \frac{1}{6}} 72\lambda^2 - 36\lambda.$$

Розв'язком є $\lambda_1 = \dfrac{1}{6}$.

Тоді $\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 + \lambda \mathbf{s}^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \dfrac{1}{6} \begin{pmatrix} 0 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Друга ітерація. Пошук напрямку В точці $\mathbf{x}^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ маємо $\varphi'\left(\mathbf{x}^2\right) = \begin{pmatrix} -6 \\ -2 \end{pmatrix}$. У цій точці активними є друге і третє обмеження. Отримали:

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 5 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Далі отримаємо:

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{A}_1^\top \left(\mathbf{A}_1\mathbf{A}_1^\top\right)^{-1} \mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{і} \quad \mathbf{s}^2 = -\mathbf{P}\varphi'\left(\mathbf{x}^2\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Розрахуємо $\mathbf{u} = -\left(\mathbf{A}_1\mathbf{A}_1^\top\right)^{-1} \mathbf{A}_1\varphi'\left(\mathbf{x}^2\right) = \left(\frac{2}{5}, -\frac{28}{5}\right)^\top$. Так як $u_3 < 0$ (воно пов'язано з третім обмеженням), то рядок $(-1, 0)$ викреслимо з $\mathbf{A}_1$ і отримаємо матрицю $\widehat{\mathbf{A}}_1 = (1, 5)$. Тоді матриця проектування має вигляд

$$\widehat{\mathbf{P}} = \mathbf{I} - \widehat{\mathbf{A}}_1^\top \left(\widehat{\mathbf{A}}_1\widehat{\mathbf{A}}_1^\top\right)^{-1} \widehat{\mathbf{A}}_1 = \begin{pmatrix} \frac{25}{26} & -\frac{5}{26} \\ -\frac{5}{26} & \frac{1}{26} \end{pmatrix},$$

а $\mathbf{s}^2 = -\widehat{\mathbf{P}}\varphi'\left(\mathbf{x}^2\right) = \left(\frac{70}{13}, -\frac{14}{13}\right)^\top$. Так як нас не цікавить довжина вектора $\mathbf{s}^2$, то отриманий вектор еквівалентний вектору $\mathbf{s}^2 = (5, -1)^\top$.

Лінійний пошук Розглядається точка $\mathbf{x}^3 = \mathbf{x}^2 + \lambda\mathbf{s}^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 5 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5\lambda \\ 1-\lambda \end{pmatrix}$ і $\varphi\left(\mathbf{x}^3\right) = 62\lambda^2 - 28\lambda - 4$.
Розрахуємо $\lambda_{\max}$, для якого $\mathbf{x}^2 + \lambda\mathbf{s}^2$ буде припустимою.

Перший підхід

$$\mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\widehat{\mathbf{b}} = \mathbf{b}_2 - \mathbf{A}_2\mathbf{x}^2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\widehat{\mathbf{s}} = \mathbf{A}_2\mathbf{s}^1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 5 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\frac{\widehat{b}_1}{\widehat{s}_1} = \frac{1}{4}, \quad \frac{\widehat{b}_2}{\widehat{s}_2} = \frac{1}{1}, \quad \lambda_{\max} = \min\left\{\frac{1}{4}, \frac{1}{1}\right\} = \frac{1}{4}.$$

Другий підхід

$$\begin{cases} 5\lambda + 1 - \lambda \leqslant 2, \\ 5\lambda + 5(1-\lambda) \leqslant 5, \\ -5\lambda \leqslant 0, \\ -(1-\lambda) \leqslant 0. \end{cases} \qquad \begin{cases} 4\lambda \leqslant 1, \\ 5 \leqslant 5, \\ \lambda \geqslant 0, \\ \lambda \leqslant 1. \end{cases} \Longrightarrow \lambda_{\max} \leqslant \frac{1}{4}.$$

Отже, λ_2 знаходимо з розв'язку задачі

$$\min_{0 \leqslant \lambda \leqslant \frac{1}{4}} 62\lambda^2 - 28\lambda - 4.$$

Оптимальним розв'язком є $\lambda_2 = \dfrac{7}{31}$. Тоді $\mathbf{x}^3 = \left(\dfrac{35}{31}, \dfrac{24}{31}\right)^\top$.

Третя ітерація. Пошук напрямку В точці $\mathbf{x}^3 = \left(\dfrac{35}{31}, \dfrac{24}{31}\right)^\top$ градієнт $\varphi'(\mathbf{x}^3) = \left(-\dfrac{32}{31}, -\dfrac{160}{31}\right)^\top$, а активне обмеження — друге. Отже, $\mathbf{A}_1 = (1, 5)$. Матриця проектування має вигляд:

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{A}_1^\top \left(\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_1^\top\right)^{-1} \mathbf{A}_1 = \frac{1}{26}\begin{pmatrix} 25 & -5 \\ -5 & 1 \end{pmatrix},$$

а напрямок спуску $\mathbf{s}^3 = -\mathbf{P}\varphi'(\mathbf{x}^3) = (0, 0)^\top$. Розраховуємо $\mathbf{u} = -\left(\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_1^\top\right)^{-1} \mathbf{A}_1 \varphi'(\mathbf{x}^3) = \dfrac{32}{32} > 0$. Це означає, що $\mathbf{x}^3$ — розв'язок нашої задачі.

☑

16.3. Завдання для самостійної роботи

1) Знати алгоритми методів проекції градієнта.
2) Розв'язати задачу

$$\begin{gathered} \min \left[3x_1^2 + 3x_2^2 - 2x_1x_2 - 5x_1 - 6x_2\right] \\ x_1 + x_2 \leqslant 3, \\ x_1 + 5x_2 \leqslant 7, \\ -x_1 \leqslant 0, \\ -x_2 \leqslant 0. \end{gathered}$$

16.4. Питання для самоконтролю

1) Сформулювати перший крок алгоритму методу проекції градієнта Розена.
2) Сформулювати другий крок алгоритму методу проекції градієнта Розена.

17 Метод умовного градієнта

Розглядається задача

$$\min \varphi(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in X \subset \mathbb{R}^n,$$

X — опукла, замкнена і обмежена множина.

Наближення будуються за формулою

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \beta_k \mathbf{h}^k, \quad k = 0, 1, \ldots, \tag{17.1}$$

де $\mathbf{h}^k$ — це вектор напрямку спуску функції і припустимий напрямок відносно X у точці $\mathbf{x}^k \in X$. Параметр $\beta_k > 0$ обирається з умови

$$\varphi\left(\mathbf{x}^{k+1}\right) < \varphi\left(\mathbf{x}^k\right), \quad \mathbf{x}^{k+1} \in X.$$

Для вибору $\mathbf{h}^k$ на k-му кроці розв'язується задача мінімізації на X лінійної апроксимації функції $\varphi(\mathbf{x})$ у точці $\mathbf{x}^k$, тобто

$$\varphi_k(\mathbf{x}) = \varphi\left(\mathbf{x}^k\right) + \left(\varphi'\left(\mathbf{x}^k\right), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k\right).$$

Відкинувши константу, запишемо

$$\min_{\mathbf{x} \in X} \left(\varphi'\left(\mathbf{x}^k\right), \mathbf{x} - \mathbf{x}^k\right).$$

Нехай $\overline{\mathbf{x}}^k$ — розв'язок цієї задачі, а

$$\eta_k = \left(\varphi'\left(\mathbf{x}^k\right), \overline{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\right).$$

Так як $\overline{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k$ — напрямок зменшення функції у точці $\mathbf{x}^k$, то згідно з необхідною умовою мінімуму $\left(\varphi'\left(\mathbf{x}^k\right), \mathbf{s}^k\right) \leqslant 0$ отримаємо, що $\eta_k = \left(\varphi'\left(\mathbf{x}^k\right), \overline{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k\right) \leqslant 0$.

Можливі два випадки:

а) $\eta_k = 0$. У цьому випадку необхідна умова мінімуму виконана і $\mathbf{x}^k$ є стаціонарною точкою, а якщо функція $\varphi(\mathbf{x})$ є опуклою, то $\mathbf{x}^k$ — точка мінімуму.

б) $\eta_k < 0$. Тоді покладаємо $\mathbf{h}^k = \overline{\mathbf{x}}^k - \mathbf{x}^k$ — цей вектор називається умовним антиградієнтом функції $\varphi(\mathbf{x})$ у точці $\mathbf{x}^k$.

Коефіцієнт β_k в (17.1) обирається з $(0;1]$ для того, щоб $\mathbf{x}^k + \beta\mathbf{s}^k = \beta\overline{\mathbf{x}}^k + (1-\beta)\mathbf{x}^k \in X$ (X — опукла).

β_k можна обирати так:

- $\beta_k :\ \min_{0<\beta\leqslant 1} \varphi\left(\mathbf{x}^k + \beta\mathbf{h}^k\right)$;
- $\sum\limits_{k=0}^{+\infty} \beta_k = +\infty$, $\sum\limits_{k=0}^{+\infty} \beta_k^2 < +\infty$ (наприклад, $\beta_k = \frac{1}{k+1}$);
- за правилом поділу кроку до виконання умови

$$\varphi\left(\mathbf{x}^k + \beta\mathbf{h}^k\right) - \varphi\left(\mathbf{x}^k\right) \leqslant \varepsilon\beta\left(\varphi'\left(\mathbf{x}^k\right), \mathbf{h}^k\right), \quad \varepsilon \in (0,1),\ \beta \in (0;\beta_0].$$

17.1. Завдання для самостійної роботи

1) Знати алгоритм умовного градієнта.
2) Розв'язати задачу

$$\min\left[n x_1^2 + i x_2^2\right]$$
$$1 \leqslant x_1 \leqslant 2,$$
$$0 \leqslant x_2 \leqslant 1.$$

Параметри: для першої групи $n = 3$, для другої групи $n = 7$; i — порядковий номер студента у списку групи.

17.2. Питання для самоконтролю

1) Сформулювати алгоритм методу умовного градієнта.
2) Способи вибору кроку в алгоритмі умовного градієнта.

18 Методи можливих напрямків

18.1. Метод Зойтендейка

Розглядається задача

$$\min \varphi(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in R \subset \mathbb{R}^n.$$

Означення 18.1. *Ненульовий вектор* $\mathbf{s}$ *є* ***можливим напрямком у точці*** $\mathbf{x} \in R$, *якщо існує таке* $\delta > 0$, *що* $\mathbf{x} + \lambda\mathbf{s} \in R$ *для всіх* $\lambda \in (0; \delta)$.

Означення 18.2. *Вектор* $\mathbf{s}$ *називається можливим напрямком спуску у точці* $\mathbf{x} \in R$, *якщо існує таке* $\delta > 0$, *що* $\varphi(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{s}) < \varphi(\mathbf{x})$ *і* $\mathbf{x} + \lambda\mathbf{s} \in R$ *для всіх* $\lambda \in (0; \delta)$.

Розглянемо задачу мінімізації функції з лінійними обмеженнями:

$$\begin{aligned} &\min \varphi(\mathbf{x}) \\ &\mathbf{A}\mathbf{x} \leqslant \mathbf{b}, \\ &\mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{h}, \end{aligned} \tag{18.1}$$

де $\mathbf{A}$ — $m \times n$-матриця, $\mathbf{H}$ — $l \times n$-матриця, $\mathbf{b}$ — m-вектор, $\mathbf{h}$ — l-вектор.

Лема 18.1. *Розглядається задача* (18.1). *Нехай* $\mathbf{x}$ *— припустима точка і нехай* $\mathbf{A}_1\mathbf{x} = \mathbf{b}_1$, $\mathbf{A}_2\mathbf{x} < \mathbf{b}_2$, *де* $\mathbf{A}^\top = \left(\mathbf{A}_1^\top, \mathbf{A}_2^\top\right)$, *а* $\mathbf{b}^\top = \left(\mathbf{b}_1^\top, \mathbf{b}_2^\top\right)$. *Тоді ненульовий вектор* $\mathbf{s}$ *є можливим напрямком у точці* $\mathbf{x}$ *тоді і тільки тоді, коли* $\mathbf{A}_1\mathbf{s} \leqslant 0$ *і* $\mathbf{H}\mathbf{s} = \mathbf{0}$. *Якщо і* $(\varphi'(\mathbf{x}), \mathbf{s}) < 0$, *то* $\mathbf{s}$ *є можливим напрямком спуску.*

Приклад 18.1.

$$\min\, (x_1 - 6)^2 + (x_2 - 2)^2$$

при умовах

$$\begin{aligned} &-x_1 + 2x_2 \leqslant 4,\\ &3x_1 + 2x_2 \leqslant 12,\\ &-x_1 \leqslant 0,\\ &-x_2 \leqslant 0. \end{aligned}$$

Візьмемо точку $\mathbf{x} = (2,3)^\top$. У цій точці активними є перші два обмеження. Тоді $\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$. Отже, вектор $\mathbf{s}$ є можливим напрямком тоді і тільки тоді, коли $\mathbf{A}_1\mathbf{s} \leqslant 0$ і $\mathbf{Hs} = \mathbf{0}$, $\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Отримаємо:

$$\begin{aligned} &-s_1 + 2s_2 \leqslant 0,\\ &3s_1 + 2s_2 \leqslant 0. \end{aligned}$$

Напрямком спуску для функції у точці $\mathbf{x}$ є напрямок, що задовольняє умові $(\varphi'(\mathbf{x}), \mathbf{s}) < 0$, тобто $-8s_1 + 2s_2 < 0$.
Перетин конусу можливих напрямків з цим напівпростором задає множину всіх можливих напрямків спуску.

18.2. Алгоритм методу Зойтендейка (випадок лінійних обмежень)

Попередній етап Знайти початкову припустиму точку $\mathbf{x}^1$, для якої $\mathbf{Ax}^1 \leqslant \mathbf{b}$ і $\mathbf{Hx}^1 = \mathbf{h}$. Покласти $k = 1$ і перейти до основного етапу.

Основний етап k-а ітерація

Перший крок Нехай $\mathbf{x}^k$ — визначена і $\mathbf{A}^\top = \left(\mathbf{A}_1^\top, \mathbf{A}_2^\top\right)$ так, що $\mathbf{A}_1\mathbf{x}^k = \mathbf{b}_1$, $\mathbf{A}_2\mathbf{x}^k < \mathbf{b}_2$. Напрямок спуску $\mathbf{s}^k$ визначається як розв'язок задачі

$$\begin{gathered} \min \varphi'^\top\left(\mathbf{x}^k\right)\mathbf{s},\\ \mathbf{A}_1\mathbf{s} \leqslant \mathbf{0},\\ \mathbf{Hs} = \mathbf{0},\\ -1 \leqslant s_j \leqslant 1, \quad j = \overline{1,n}. \end{gathered}$$

Якщо $\varphi'^{\top}\left(\mathbf{x}^k\right)\mathbf{s}^k = 0$, то $\mathbf{x}^k$ — розв'язок задачі, інакше перейти до другого кроку.

Другий крок Параметр λ_k визначається таким чином:

$$\min \varphi\left(\mathbf{x}^k + \lambda \mathbf{s}^k\right),$$
$$\text{при умові } 0 \leqslant \lambda \leqslant \lambda_{\max},$$

де $\lambda_{\max}$ обирається таким чином:

$$\lambda_{\max} = \begin{cases} \min\left\{ \dfrac{\widehat{b}_i}{\widehat{s}_i} \middle| \widehat{s}_i > 0 \right\}, & \text{якщо } \widehat{\mathbf{s}} \nleqslant 0, \\ \infty, & \text{якщо } \widehat{\mathbf{s}} \leqslant 0, \end{cases}$$

$\widehat{\mathbf{b}} = \mathbf{b}_2 - \mathbf{A}_2\mathbf{x}^k$, $\widehat{\mathbf{s}} = \mathbf{A}_2\mathbf{s}^k$.

Покласти $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \lambda_k\mathbf{s}^k$, визначити нову множину активних обмежень у точці $\mathbf{x}^{k+1}$ і перевизначити матриці $\mathbf{A}_1$ та $\mathbf{A}_2$. Замінити k на $k+1$ і перейти до першого кроку.

18.3. Алгоритм методу Зойтендейка (випадок нелінійних обмежень-нерівностей)

Розглядається задача

$$\min \varphi(\mathbf{x}),$$
$$g_i(\mathbf{x}) \leqslant 0, \quad i = \overline{1, m}.$$

Попередній етап Обрати точку $\mathbf{x}^1$ таку, щоб $g_i(\mathbf{x}^1) \leqslant 0$, $i = \overline{1, m}$. Покласти $k = 1$ і перейти до основного етапу.

Основний етап k-а ітерація

Перший крок Покласти $I = \left\{i \mid g_i\left(\mathbf{x}^k\right) = 0\right\}$ і розв'язати задачу

$$\min z$$

при умовах

$$\varphi'^{\top}\left(\mathbf{x}^k\right)\mathbf{s} - z \leqslant 0,$$
$$g_i'^{\top}\left(\mathbf{x}^k\right)\mathbf{s} - z \leqslant 0, \quad i \in I,$$
$$-1 \leqslant s_j \leqslant 1, \quad j = \overline{1,n}.$$

Нехай $\left(z^k, \mathbf{s}^k\right)$ — оптимальний розв'язок задачі. Якщо $z^k = 0$, то розв'язок знайшли. Якщо $z^k < 0$, то перейти до другого кроку.

Другий крок Для визначення кроку λ_k розв'яжемо задачу

$$\min \varphi\left(\mathbf{x}^k + \lambda \mathbf{s}^k\right),$$
$$\text{при умові } 0 \leqslant \lambda \leqslant \lambda_{\max},$$

де $\lambda_{\max}$ — найбільше λ, що задовольняє всім умовам $g_i\left(\mathbf{x}^k + \lambda\mathbf{s}^k\right) \leqslant 0$, $i = \overline{1,m}$.

Покласти $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \lambda_k \mathbf{s}^k$, замінити k на $k+1$ і перейти до першого кроку.

Приклад 18.2. Розглянемо задачу

$$\min\left(2x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1x_2 - 4x_1 - 6x_2\right)$$

при умовах

$$\begin{aligned} x_1 + 5x_2 &\leqslant 5,\\ 2x_1^2 - x_2 &\leqslant 0,\\ -x_1 &\leqslant 0,\\ -x_2 &\leqslant 0. \end{aligned} \tag{18.2}$$

Розв'язування. Обираємо точку $\mathbf{x}^1 = (0, 0.75)^{\top}$.

Пошук напрямку спуску Маємо $\varphi'(\mathbf{x}) = (4x_1 - 2x_2 - 4, 4x_2 - 2x_1 - 6)^{\top}$, $\varphi'\left(\mathbf{x}^1\right) = (-5.5, -3.0)^{\top}$. Множина індексів активних обмежень у точці $\mathbf{x}^1$ є $I = \{3\}$. Тому $g_3'\left(\mathbf{x}^1\right) = (-1, 0)^{\top}$.
Для знаходження напрямку спуску розв'яжемо задачу

$$\min z,$$
$$-5.5s_1 - 3.0s_2 - z \leqslant 0,$$
$$-s_1 - z \leqslant 0,$$
$$-1 \leqslant s_j \leqslant 1, \quad j = 1, 2.$$

Цю задачу розв'язуємо симплекс-методом, отримаємо $\mathbf{s}^1 = (s_1^1, s_2^1)^\top = (1.00, -1.00)^\top$, $z_1 = -1.00$. Так як $z_1 < 0$, то переходимо до наступного кроку — пошуку λ_1.

Лінійний пошук Довільну точку за напрямком $\mathbf{s}^1 = (1.00, -1.00)^\top$ з точки $\mathbf{x}^1 = (0, 0.75)^\top$ можна представити у вигляді

$$\mathbf{x}^1 + \lambda \mathbf{s}^1 = (0, 0.75)^\top + (\lambda, -\lambda)^\top = (\lambda, 0.75 - \lambda)^\top,$$

а відповідне їй значення функції дорівнює $\varphi\left(\mathbf{x}^1 + \lambda \mathbf{s}^1\right) = 6\lambda^2 - 2.5\lambda - 3.375$. Значення $\lambda_{\max}$ знайдемо, розв'язавши систему нерівностей (18.2) при $\mathbf{x} = (\lambda, 0.75 - \lambda)^\top$. Маємо

$$\begin{cases} \lambda + 3.75 - 5\lambda \leqslant 5, \\ 2\lambda^2 - 0.75 + \lambda \leqslant 0, \\ -\lambda \leqslant 0, \\ -0.75 + \lambda \leqslant 0. \end{cases} \qquad \begin{cases} \lambda \geqslant -0.31, \\ \lambda \in \left[\frac{-1-\sqrt{7}}{4}, \frac{-1+\sqrt{7}}{4}\right], \\ \lambda \geqslant 0, \\ \lambda \leqslant 0.75. \end{cases}$$

Отримаємо, що $\lambda_{\max} = \dfrac{-1+\sqrt{7}}{4} \approx 0.414$.
Для знаходження λ_1 розв'язуємо задачу

$$\min\left(6\lambda^2 - 2.5\lambda - 3.375\right),$$
$$0 \leqslant \lambda \leqslant 0.414.$$

Функція $6\lambda^2 - 2.5\lambda - 3.375$ досягає мінімуму (без обмежень) у точці $\lambda_{\min} \approx 0.2083$. Значення $\lambda_{\min} \in [0, 0.414]$, отже, $\lambda_1 = 0.2083$. Отримали, що

$$\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 + \lambda_1 \mathbf{s}^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.75 \end{pmatrix} + 0.2083 \begin{pmatrix} 1.00 \\ -1.00 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.2083 \\ 0.5417 \end{pmatrix}.$$

Друга ітерація. Пошук напрямку спуску У точці $\mathbf{x}^2 = (0.2083, 0.5417)^\top$ градієнт функції дорівнює $\varphi'\left(\mathbf{x}^2\right) = (-4.25, -4.25)^\top$. Активних обмежень у цій точці немає, тому задача знаходження напрямку спуску має вигляд

$$\min z,$$
$$-4.25 s_1 - 4.25 s_2 - z \leqslant 0,$$
$$-1 \leqslant s_j \leqslant 1, \quad j = 1, 2.$$

Оптимальний розв'язок: $\mathbf{s}^2 = (1,1)^\top$, $z^2 = -8.5$. Так як $z^2 < 0$, то розв'язуємо далі.

Лінійний пошук Значення $\lambda_{\max}$, при якому точка $\mathbf{x}^2 + \lambda\mathbf{s}^2$ припустима, дорівнює $\lambda_{\max} = 0.347$. Для знаходження λ_2 розв'язуємо задачу

$$\min\left(2\lambda^2 - 8.5\lambda - 3.6354\right),$$
$$0 \leqslant \lambda \leqslant 0.347.$$

Отримали, що $\lambda_2 = 0.347$, тоді $\mathbf{x}^3 = \mathbf{x}^2 + \lambda_2\mathbf{s}^2 = (0.555, 0.889)^\top$ і т. д.

18.4. Алгоритм Зойтендейка (випадок нелінійних обмежень-рівностей)

Якщо існують обмеження-рівності і точка $\mathbf{x}^k$ знаходиться на обмеженні-рівності, то не існує ненульового напрямку $\mathbf{s}$ такого, що $h\left(\mathbf{x}^k + \lambda\mathbf{s}\right) = 0$ при $\lambda \in (0,\delta)$, $\delta > 0$. Можна рухатись по дотичній, а потім повернутися у припустиму множину.

Розглянемо задачу

$$\begin{aligned} &\min\varphi(\mathbf{x}),\\ &g_i(\mathbf{x}) \leqslant 0, \quad i = \overline{1,m},\\ &h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = \overline{1,l}. \end{aligned}$$

Нехай $\mathbf{x}^k$ — припустима точка і $I = \left\{i \mid g_i\left(\mathbf{x}^k\right) = 0\right\}$. Розв'язуємо задачу лінійного програмування

$$\begin{aligned} &\min\varphi'^\top\left(\mathbf{x}^k\right)\mathbf{s},\\ &g_i'\left(\mathbf{x}^k\right)^\top\mathbf{s} \leqslant 0, \quad i \in I,\\ &h_i'\left(\mathbf{x}^k\right)^\top\mathbf{s} = 0, \quad i = \overline{1,l}. \end{aligned}$$

Отриманий напрямок спуску $\mathbf{s}^k$ є дотичним до обмежень-рівностей і до деяких активних нелінійних обмежень-нерівностей.

Одним з недоліків методу є те, що якщо точка $\mathbf{x}^k$ буде близька до межі, що визначається одним із обмежень, а воно не використовується у процесі знаходження напрямку руху, то може статися, що, зробивши малий крок, ми будемо знаходитися на межі, що визначається цим обмеженням. Тому краще розширити множину активних обмежень I, визначивши її так: $I = \left\{i \mid g_i\left(\mathbf{x}^k\right) + \varepsilon \geqslant 0\right\}$, $\varepsilon > 0$ — мале число.

18.5. Модифікація алгоритму можливих напрямків

Алгоритм Зойтендейка може не збігатися до точки Куна — Таккера. Справа в тому, що кроки вздовж напрямків прямують до нуля і відбувається «заїдання» у неоптимальній точці. Тому була запропонована модифікація методу (Топкніс і Кейнотт), яка гарантує збіжність алгоритму до точки Куна — Таккера.

Розглянемо задачу

$$\min \varphi(\mathbf{x}),$$
$$g_i(\mathbf{x}) \leqslant 0, \quad i = \overline{1, m}.$$

Для знаходження напрямку спуску розв'язуємо задачу лінійного програмування; $\mathbf{x}^k$ — задано:

$$\min z$$

при умовах

$$\varphi'^{\top}\left(\mathbf{x}^k\right)\mathbf{s} - z \leqslant 0,$$
$$g_i'^{\top}\left(\mathbf{x}^k\right)\mathbf{s} - z \leqslant -g_i\left(\mathbf{x}^k\right), \quad i = \overline{1, m},$$
$$-1 \leqslant s_j \leqslant 1, \quad j = \overline{1, n}.$$

Тут при визначенні напрямку спуску враховуються всі обмеження — як активні, так і неактивні. Тепер не відбувається неочікувана зміна напрямків, коли наближаємося до межі множини, що визначається неактивним у цій точці обмеженням.

18.5.1. Алгоритм методу

Початковий етап Обрати точку $\mathbf{x}^1$ таку, щоб $g_i(\mathbf{x}^1) \leqslant 0$, $i = \overline{1, m}$. Покласти $k = 1$ і перейти до основного етапу.

Основний етап k-а ітерація

Перший крок Розв'язуємо задачу лінійного програмування для знаходження z^k і $\mathbf{s}^k$:

$$\min z$$

при умовах

$$\varphi'^{\top}\left(\mathbf{x}^k\right)\mathbf{s} - z \leqslant 0,$$
$$g_i'^{\top}\left(\mathbf{x}^k\right)\mathbf{s} - z \leqslant -g_i\left(\mathbf{x}^k\right), \quad i = \overline{1, m},$$
$$-1 \leqslant s_j \leqslant 1, \quad j = \overline{1, n}.$$

Якщо $z^k = 0$, то зупинитись і $\mathbf{x}^k$ — точка Куна — Таккера. Якщо ж $z^k < 0$, то перейти до другого кроку.

Другий крок Для визначення λ_k розв'яжемо задачу

$$\min \varphi\left(\mathbf{x}^k + \lambda \mathbf{s}^k\right),$$
$$\text{при умові } 0 \leqslant \lambda \leqslant \lambda_{\max},$$

де $\lambda_{\max} = \sup\left\{\lambda \mid g_i\left(\mathbf{x}^k + \lambda \mathbf{s}^k\right) \leqslant 0, i = \overline{1, m}\right\}$.

Покласти $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \lambda_k \mathbf{s}^k$, замінити k на $k+1$ і перейти до першого кроку.

Приклад 18.3. Розглянемо задачу

$$\min\left(2x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1x_2 - 4x_1 - 6x_2\right)$$

при умовах

$$x_1 + 5x_2 \leqslant 5,$$
$$2x_1^2 - x_2 \leqslant 0,$$
$$-x_1 \leqslant 0,$$
$$-x_2 \leqslant 0.$$

Скористаємося модифікованим алгоритмом можливих напрямків. Візьмемо $\mathbf{x}^1 = (0, 0.75)^{\top}$. Зазначимо, що $\varphi'(\mathbf{x}) = (4x_1 - 2x_2 - 4, 4x_2 - 2x_1 - 6)^{\top}$, $g_1'(\mathbf{x}) = (1, 5)^{\top}$, $g_2'(\mathbf{x}) = (4x_1, -1)^{\top}$, $g_3'(\mathbf{x}) = (-1, 0)^{\top}$, $g_4'(\mathbf{x}) = (0, -1)^{\top}$.

Перша ітерація. Пошук напрямку спуску Маємо $\varphi'\left(\mathbf{x}^1\right) = (-5.5, -3)^\top$. Для отримання напрямку спуску розв'яжемо задачу

$$\begin{gathered}\min z,\\ -5.5s_1 - 3s_2 - z \leqslant 0,\\ s_1 + 5s_2 \leqslant 1.25,\\ -s_2 - z \leqslant 0.75,\\ -s_1 - z \leqslant 0,\\ -s_2 - z \leqslant 0,\\ -1 \leqslant s_j \leqslant 1, \quad j = 1, 2.\end{gathered}$$

Умова $-s_2 - z \leqslant 0$ — зайва (порівняти умови 3 і 5). Оптимальним розв'язком цієї задачі є $\mathbf{s}^1 = (0.7143, -0.03571)^\top$, $z^1 = -0.7143$.

Лінійний пошук Для знаходження кроку λ необхідно розв'язати задачу

$$\begin{gathered}\min\left(0.972\lambda^2 - 4.036\lambda - 3.375\right),\\ 0 \leqslant \lambda \leqslant \lambda_{\max}.\end{gathered}$$

Знайдемо $\lambda_{\max}$: це те найбільше λ, яке задовольняє усім обмеженням. Отримаємо $\lambda_{\max} = 0.84$. Далі розглядаємо задачу

$$\begin{gathered}\min\left(0.972\lambda^2 - 4.036\lambda - 3.375\right),\\ 0 \leqslant \lambda \leqslant 0.84.\end{gathered}$$

Отримаємо $\lambda_1 = 0.84$. Отже, $\mathbf{x}^2 = \mathbf{x}^1 + \lambda_1\mathbf{s}^1 = (0.60, 0.72)^\top$ і т. д.

18.6. Завдання для самостійної роботи

1) Знати алгоритми методів Зойтендейка.
2) Нехай i — номер академічної групи, j — порядковий номер прізвища студента у

списку академічної групи. Розв'язати задачу

$$\min\left[3x_1^2+3x_2^2-2x_1x_2-5x_1-6x_2\right]$$
$$x_1+x_2\leqslant 3j,$$
$$x_1+300x_2\leqslant 7i,$$
$$-x_1\leqslant 0,$$
$$-x_2\leqslant 0.$$

18.7. Питання для самоконтролю

1) Дати означення можливого напрямку у точці множини.
2) Дати означення можливого напрямку спуску у точці множини.
3) Сформулювати алгоритм методу Зойтендейка (випадок лінійних обмежень).
4) Сформулювати алгоритм методу Зойтендейка (випадок нелінійних обмежень-нерівностей).
5) Сформулювати алгоритм методу Зойтендейка (випадок нелінійних обмежень-рівностей).
6) Модифікації алгоритму можливих напрямків.

19 Методи штрафних функцій

Методи цієї групи мають одну і ту ж ідею: у цих методах робиться перехід від задачі на умовний мінімум до послідовності задач на безумовний мінімум.

Далі розглянемо три групи методів штрафних функцій: методи внутрішньої точки, зовнішньої точки і комбіновані методи.

У методах внутрішньої точки поточна точка постійно знаходиться всередині припустимої області за допомогою штрафної функції, яку інколи називають бар'єрною.

Методи зовнішньої точки, навпаки, генерують послідовність точок, яка знаходиться за межами припустимої області.

У комбінованих методах у процесі мінімізації одні з обмежень задовольняються, а інші — ні. Однак при досягненні розв'язку задачі всі умови у межах заданого допуску задовольняються.

19.1. Метод внутрішньої точки

Розглянемо задачу

$$\begin{gathered} \min \varphi(\mathbf{x}) \\ \mathbf{x} \in R = \left\{ \mathbf{x} \mid g_i(\mathbf{x} \geqslant 0,\ i = \overline{1,p} \right\} \end{gathered} \tag{19.1}$$

Перейдемо від задачі (19.1) до послідовності задач безумовної мінімізації

$$\min P(\mathbf{x}, r),$$

де штрафна функція $P(\mathbf{x}, r)$ має вигляд

$$P(\mathbf{x}, r) = \varphi(\mathbf{x}) + \Phi(\mathbf{x}, r).$$

Функція $\Phi(\mathbf{x}, r)$ має такі властивості:

$$\Phi(\mathbf{x}, r) = \begin{cases} \infty, & \text{якщо } \mathbf{x} \notin R, \\ \to 0, & \text{якщо } \mathbf{x} \in R,\ \mathbf{x} \notin \partial R,\ r \to 0, \\ \to \infty, & \text{якщо } \mathbf{x} \in R,\ \mathbf{x} \to \partial R, \end{cases}$$

де ∂R — межа множини R. Функцію $\Phi(\mathbf{x}, r)$ називають штрафом.

У якості функції $\Phi(\mathbf{x}, r)$ можна обирати такі функції:

а) $\Phi_1(\mathbf{x}, r) = r \sum\limits_{i=1}^{p} \dfrac{w_i}{g_i(\mathbf{x})}$,

б) $\Phi_2(\mathbf{x}, r) = r \sum\limits_{i=1}^{p} \dfrac{w_i}{g_i^2(\mathbf{x})}$,

в) $\Phi_3(\mathbf{x}, r) = -r \sum\limits_{i=1}^{p} w_i \ln g_i(\mathbf{x})$.

Побудувавши штрафну функцію і визначивши внутрішню точку, мінімізуємо штрафну функцію $P(\mathbf{x}, r)$ при заданому початковому значенні r^0. Тоді точка мінімуму штрафної функції є початковою точкою мінімізації штрафної функції при зменшеному значенні r, і т. д.

Безумовну мінімізацію штрафної функції робимо довільним методом безумовної мінімізації.

На ефективність методу істотно впливають і вибір початкового значення r, і алгоритм зменшення r, і вибір вагових коефіцієнтів w_i.

Якщо в $P(\mathbf{x}, r)$ значення r^0 обрати дуже малим, то на початковій стадії процесу мінімізації ми прийдемо до мінімуму функції $\varphi(\mathbf{x})$, який буде далеко від умовного мінімуму. Тоді рух до точки умовного мінімуму буде дуже довгим. А якщо значення r^0 дуже велике, то на перших етапах обчислювального процесу поточна точка буде дуже далеко за межами припустимих точок і повернення її у припустиму область буде дуже довгим.

Вважається, що на початковій стадії оптимізаційного процесу кут між $\varphi'(\mathbf{x}^0)$ і $P'(\mathbf{x}^0, r^0)$ повинен бути гострим, а значення r повинно збільшуватися або зменшуватися шляхом множення або ділення початкового значення цього параметра на деяке число до тих пір, поки кут між $\varphi'\left(\mathbf{x}^k\right)$ і $P'\left(\mathbf{x}^k, r^0\right)$ не стане тупим. Крім того, необхідно виконання умови $r^0 \geqslant 10^{-4}$. (На практиці частіше всього обирають $r^0 = 50$.) Рекомендується при переході від одного етапу обчислювального процесу до іншого перемножати поточне значення r на 0.1 (або число з проміжку $[0.02; 0.1]$).

Відносно w_i рекомендації такі: значення w_i необхідно обирати так, щоб усі доданки в а), б) і в) після відповідного масштабування були по можливості одного порядку.

19.1.1. Знаходження внутрішньої точки

Задача полягає у пошуку точки, що задовольняє строгим нерівностям $g_i(\mathbf{x}) > 0$, $i = \overline{1,p}$, як це вимагається в алгоритмах внутрішньої точки.

Нехай задана точка $\mathbf{x}^0$, що не задовольняє всім нерівностям. Розглянемо множини

$$S = \{s \mid g_s(\mathbf{x}) \leqslant 0,\ 1 \leqslant s \leqslant p\} \text{ і } T = \{t \mid g_t(\mathbf{x}) > 0,\ 1 \leqslant t \leqslant p\}.$$

Необхідно побудувати таку послідовність точок, щоб значення $\sum\limits_{s\in S} g_s(\mathbf{x})$ збільшувалося, але жодне з уже виконаних обмежень ($g_t(\mathbf{x}) > 0$) не порушувалося. Для цього знаходимо $\max \sum\limits_{s\in S} g_s(\mathbf{x})$ (або $\min \left[-\sum\limits_{s\in S} g_s(\mathbf{x})\right]$), тобто мінімізуємо функцію

$$U\left(\mathbf{x}, r^k\right) = -\sum_{s\in S} g_s(\mathbf{x}) + \sum_{t\in T} \Phi_t\left(\mathbf{x}, r^k\right),$$

де $r^k \to 0$ строго.

Це допоміжна задача. На кожному кроці з'являється нова точка, що задовольняє одному або кільком обмеженням з тих, що раніше не задовольнялись. Відповідні індекси переходять з S до T, при цьому змінюється допоміжна задача. Якщо множина S буде пустою, то внутрішня точка знайдена.

19.1.2. Геометрична інтерпретація методу внутрішніх штрафних фукнцій

Розглянемо приклад:

$$\min_{2\leqslant x\leqslant 3} x,$$

або, у іншому запису,

$$\min_{\substack{x-2\geqslant 0\\ 3-x\geqslant 0}} x.$$

Складемо штрафну функцію, наприклад, таку:

$$P(\mathbf{x}, r) = x + r\left(\frac{1}{(x-2)^2} + \frac{1}{(3-x)^2}\right).$$

Обираємо початкову внутрішню точку припустимої множини

$$\{x - 2 \geqslant 0,\ 3 - x \geqslant 0\}\,.$$

Нехай $r^0 = 50$. Функцію $P(\mathbf{x}, 50) = x + 50\left(\dfrac{1}{(x-2)^2} + \dfrac{1}{(3-x)^2}\right)$ мінімізуємо ефективним методом для яристих функцій і знаходимо точку мінімуму x^{*1}. Зменшуємо r, наприклад, візьмемо $r^1 = 5$ і мінімізуємо функцію $P(\mathbf{x}, 5)$ при початковій точці x^{*1}. Отримаємо точку мінімуму x^{*2} і т. д. Послідовність точок $\mathbf{x}^0$, x^{*1}, x^{*2}, $\ldots$ буде збігатися до точки мінімуму $x^* = 2$.

19.2. Метод зовнішньої точки

У методі зовнішніх штрафів від задачі (19.1) переходимо до послідовності задач безумовної мінімізації

$$\min P(\mathbf{x}, r), \quad r \to \infty$$

де штрафна функція $P(\mathbf{x}, r)$ має вигляд

$$P(\mathbf{x}, r) = \varphi(\mathbf{x}) + \Psi(\mathbf{x}, r).$$

Штраф $\Psi(\mathbf{x}, r)$ має такі властивості:

$$\Psi(\mathbf{x}, r) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } \mathbf{x} \in R, \\ \to \infty, & \text{якщо } \mathbf{x} \notin R,\ r \to +\infty. \end{cases}$$

У якості функції $\Psi(\mathbf{x}, r)$ можна обирати такі функції:

а) $\Psi_1(\mathbf{x}, r) = r \sum\limits_{i=1}^{p} g_i^2(\mathbf{x})$, якщо $R = \{\mathbf{x} \mid g(\mathbf{x} = 0\}$;

б) $\Psi_2(\mathbf{x}, r) = r \sum\limits_{i=1}^{p} \min\left(0, g_i(\mathbf{x})\right)$, якщо $R = \{\mathbf{x} \mid g(\mathbf{x} \geqslant 0\}$.

Параметр r пропонується обирати таким чином: $r^0 = 1$, $r^k = 4r^{k-1}$.

19.2.1. Відмінності між методами внутрішньої та зовнішньої точки

Методи внутрішньої і зовнішньої точки побудовані на істотно різних принципах. У той час як у методах внутрішньої точки штрафний член перешкоджає порушенню обмежень (бар'єр), у методах зовнішньої точки він потрібен, щоб точка далеко не відходила від припустимої точки. У цьому сенсі метод зовнішньої точки більш простий.

У методах зовнішньої точки обмеження у формі нерівностей, ставши один раз на ітерації припустимими, залишаються і надалі такими. Ці обмеження можна виключити з розрахунків.

Для методів внутрішньої точки потрібна інформація про всі обмеження на протязі всього обчислювального процесу.

За цю перевагу алгоритми зовнішньої точки платять пониженням порядку диференційовності (по $\mathbf{x}$) штрафної функції у довільній межовій точці припустмиої області. У методах внутрішньої точки порядок диференціовності $P(\mathbf{x}, r)$ такий, як і у $\varphi(\mathbf{x})$, якщо $\Phi(\mathbf{x}, r)$ нескінченно диференційовна.

Метод зовнішньої точки працює і з обмеженнями типу рівностей.

У методах зовнішньої точки не потрібно відділяти фазу припустимості, як у методах внутрішньої точки, що спрощує програмування алгоритмів зовнішньої точки.

Вважається, що мінімізація безумовних функцій у методах зовнішньої точки буде більш трудомісткою, ніж у методах внутрішньої точки.

19.2.2. Геометрична інтерпретація методу зовнішніх штрафів

Розглянемо приклад:

$$\min_{2 \leqslant x \leqslant 3} x,$$

або, у іншому запису,

$$\min_{\substack{x-2 \geqslant 0 \\ 3-x \geqslant 0}} x.$$

Складемо штрафну функцію:

$$P(\mathbf{x}, r) = x + r\left[\left(\frac{x-2-|x-2|}{2}\right)^2 + \left(\frac{3-x-|3-x|}{2}\right)^2\right].$$

Обираємо зовнішню до множини припустимих точок початкову точку $\mathbf{x}^0$, а $r^0 = 1$. Як правило, функція $P(\mathbf{x}, r)$ — яриста, тому обираємо ефективний метод мінімізації яристих функцій і мінімізуємо $P(\mathbf{x}, 1)$. Точка мінімуму x^{*1} є початковою для мінімізації функції $P(\mathbf{x}, 4)$ $(r = 4)$. Знайдемо x^{*2} і т. д. Послідовність точок $\mathbf{x}^0$, x^{*1}, x^{*2}, ...

буде збігатися до точки мінімуму $x^* = 2$.

19.3. Комбіновані методи

Якщо у задачі мінімізації є обмеження типу рівностей, то корисно користуватися комбінованим методом штрафних функцій.

Розглянемо задачу

$$\begin{gathered} \min \varphi(\mathbf{x}) \\ g_i(\mathbf{x}) \geqslant 0,\ i = \overline{1, m}, \\ h_i(\mathbf{x}) = 0,\ i = \overline{1, p}. \end{gathered} \tag{19.2}$$

Задачу (19.2) перетворимо у послідовність задач без обмежень. Для цього розглянемо штрафні функції такого типу:

1) $P(\mathbf{x}, r) = \varphi(\mathbf{x}) + \frac{1}{r} \sum\limits_{i=1}^{p} h_i^2(\mathbf{x}) - r \sum\limits_{i=1}^{m} \ln g_i(\mathbf{x})$;
2) $P(\mathbf{x}, r) = \varphi(\mathbf{x}) + \frac{1}{r} \sum\limits_{i=1}^{p} h_i^2(\mathbf{x}) + r \sum\limits_{i=1}^{m} \frac{1}{g_i(\mathbf{x})}$;
3) $P(\mathbf{x}, r) = \varphi(\mathbf{x}) + \frac{1}{\sqrt{r}} \sum\limits_{i=1}^{p} h_i^2(\mathbf{x}) - r \sum\limits_{i=1}^{m} \ln g_i(\mathbf{x})$;
4) $P(\mathbf{x}, r) = \varphi(\mathbf{x}) + \frac{1}{\sqrt{r}} \sum\limits_{i=1}^{p} h_i^2(\mathbf{x}) - r \sum\limits_{i=1}^{m} \ln g_i(\mathbf{x}),\ r \to 0$.

Мінімізація штрафних функцій починається з внутрішньої точки або межової точки, де уже обмеження типу нерівностей виконуються.

При мінімізації штрафної функції при наближенні до точки мінімуму матриця Гессе функції $P(\mathbf{x}, r)$ веде себе погано. Тобто $P(\mathbf{x}, r)$ стає все більш яристою.

Швидкість збіжності залежить від вибору r^0 і способу його зміни.

При дуже великих значеннях r^0 процес починається з внутрішніх точок, які лежать дуже далеко від межі припустимої області, тоді як при дуже малих r^0 початковий розв'язок дуже близький до межі області. Найбільш практичний спосіб вибору r^0 це $r^0 = 1$. Однак, щоб досягти при розв'язуванні задачі найбільшої точності, r^0 обирають таким чином:

$$r^0 = \left(\frac{\varphi'^{\top}\left(\mathbf{x}^0\right) \left[R''\left(\mathbf{x}^0\right)\right]^{-1} \varphi'\left(\mathbf{x}^0\right)}{R'^{\top}\left(\mathbf{x}^0\right) \left[R''\left(\mathbf{x}^0\right)\right]^{-1} R'\left(\mathbf{x}^0\right)} \right)^{\frac{1}{2}},$$

де $R''\left(\mathbf{x}^0\right)$ — матриця Гессе для $R(\mathbf{x}) = \sum\limits_{i=1}^{m} \frac{1}{g_i(\mathbf{x})}$.

Експериментально було доведено, що після визначення r^0 одним із цих двох способів ефективність алгоритма не дуже зміниться, якщо послідовність $\left\{r^k\right\}$ будувати таким чином:

$$r^k = \frac{1}{4} r^{k-1}.$$

Момент знаходження $\min P\left(\mathbf{x}, r^k\right)$ на кожному етапі обчислювального процесу визначається за допомогою одного з критеріїв:

а) $\left|\dfrac{\partial P\left(\mathbf{x}^k, r^k\right)}{\partial x_i} \cdot \Delta x_i\right| < \varepsilon$, $i = \overline{1, n}$;

б) $\left|P'\left(\mathbf{x}^k, r^k\right)\left[P''\left(\mathbf{x}^k, r^k\right)\right]^{-1} P'\left(\mathbf{x}^k, r^k\right)\right| < \dfrac{P\left(x^{k-1}\right) - P\left(\mathbf{x}^k\right)}{5}$;

в) $\left|\dfrac{\partial P\left(\mathbf{x}^k, r^k\right)}{\partial x_i}\right| < \varepsilon$, $i = \overline{1, n}$.

19.4. Завдання для самостійної роботи

1) Знати алгоритми штрафних функцій.
2) Методом внутрішніх штрафів розв'язати задачу

$$\begin{gathered}\min i x_1 + n x_2 \\ g_1 = -x_1^2 + x_2 \geqslant 0, \\ g_2 = x_1 \geqslant 0.\end{gathered}$$

   Параметри: для першої групи $n = 3$, для другої групи $n = 7$; i — порядковий номер студента у списку групи.
3) Методом зовнішніх штрафів розв'язати задачу

$$\begin{gathered}\min n x_1^2 + i x_2^2, \\ i x_1 + n x_2 = i + 2.\end{gathered}$$

   Параметри: для першої групи $n = 3$, для другої групи $n = 7$; i — порядковий номер студента у списку групи.

19.5. Питання для самоконтролю

1) Сформулювати алгоритм методу внутрішньої точки.
2) Алгоритм вибору параметра r.
3) Геометрична інтерпретація методу внутрішніх штрафів.
4) Алгоритм методу зовнішньої точки.

5) Алгоритм вибору параметра r.
6) Геометрична інтерпретація методу зовнішніх штрафів.
7) Сформулювати алгоритм комбінованого методу.
8) Сформулювати правило вибору параметра r.

Рекомендована література

[1] Лавров Є. А., Перхун Л. П. та ін. Математичні методи дослідження операцій. Суми, СДУ, 2017. 212 с.

[2] Панасенко О. В., Чаговець Л. О. Дослідження операцій та методи оптимізації. Харків, ХНЕУ ім. С. Кузнеця, 2019. 64 с.

[3] Сікора Я. Б. Методи оптимізації та дослідження операцій. Житомир, вид. ЖНУ ім. І. Франка, 2019. 148 с.

[4] Лисенко О. І., Алєксеєва І. В. Дослідження операцій. Київ, НТУУ «КПІ», 2016. 196 с.

[5] Яровий А. Т., Страхов Є. М. Методи оптимізації та варіаційне числення. Одеса, Освіта України, 2017. 153 с.

Навчальне видання

Яровий Анатолій Трохимович
Страхов Євген Михайлович
Васильєв Олександр Борисович

МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ

НАВЧАЛЬНИЙ ПОСІБНИК
для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти спеціальностей 111 Математика, 113 Прикладна математика, 123 Комп'ютерна інженерія

Електронне видання мережевого використовування

В авторській редакції

Затвердж. авт. 27.01.2025. Шрифт Times New Roman.
Системні вимоги: операційна система сумісна з програмним забезпеченням для читання файлів формату PDF.
Обсяг 1,5 МБ. Зам. № 2920.

Видавець і виготовлювач
Одеський національний університет імені І. І. Мечникова
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4215 від 22.11.2011 р.
вул. Університетська, 12, м. Одеса, 65082, Україна
Тел.: (048) 723 28 39, e-mail: druk@onu.edu.ua