Методы оптимизации

Михайлов Максим

8 апреля 2021 г.

Оглавление стр. 2 из 29

Оглавление

Лекц	ия 1	10 февраля	4				
1 Теория і		рия погрешности	4				
2	2 Задачи оптимизации. Вводное						
3	3 Одномерная минимизация функций. Прямые методы						
	3.1	Метод дихотомии	9				
Лекц	ия 2	17 февраля	11				
	3.2	Метод золотого сечения	11				
	3.3	Метод Фибоначчи	12				
	3.4	Метод парабол	13				
	3.5	Комбинированный метод Брента	14				
Лекц	ия 3	24 февраля	15				
	3.6	Метод равномерного перебора	15				
4	Мет	оды оптимизации, использующие производную	15				
	4.1	Методы средней точки	15				
	4.2	Метод хорд (метод секущей)	16				
	4.3	Метод Ньютона (метод касательной)	17				
Лекц	ия 4	3 марта	18				
	4.	3.1 Достаточное условие монотонной сходимости метода Ньютона 1	19				
	4.4	Модификации метода Ньютона	20				
	4.	4.1 Метод Ньютона-Рафсона	20				
	4.	4.2 Метод Марквардта	20				
5	Мет	од минимизации многомодальных функций <i>(метод ломаных)</i>	20				
Лекц	ия 5	10 марта	22				
6	Мин	имизация функций многих переменных	22				
	6.1	Постановка задачи	22				
	6.2	Свойства выпуклых множеств и выпуклых функций	24				
	6.3	Необходимое и достаточное условие безусловного экстремума	25				
	6.	3.1 Необходимое условие экстремума первого порядка	25				
	6.	3.2 Необходимое условие экстремума второго порядка	25				
6.3.		Достаточное условие экстремума					
6.3.4 Проверка выполнений условий экстремума							
Лекция 6 17 марта							
	6.	3.5 Гритерии Сильвестра проверки достаточных условий экстремума 2	26				
	6.	3.6 Критерии Сильвестра проверки необходимых условий экстремума 2	26				

Оглавление	стр. 3 из 29

6.4	Квадратичные функции	26
	Общие принципы многомерной оптимизации	
6.6	Скорость сходимости минимизирующей последовательности	28

Лекция 1

10 февраля

Этот курс — о минимизации (максимизации) функционалов. Кроме конкретных методов оптимизации, планируется рассмотреть форматы хранения матриц, о методах работы с ними и рассмотреть 1-2 (может быть 3) СЛАУ с использованием различных форматов.

Т.к. значения, получаемые компьютерами — не точные, нам требуется теория погрешности.

1 Теория погрешности

Все погрешности разделяются на два класса:

- 1. Неустранимая обусловлена неточностью исходных данных. Например, неточное знание физических констант или других параметров задачи. Тем не менее, необходимо знать эту погрешность, чтобы ставить рамки погрешности для решения.
- 2. Устранимая погрешность процесса решения задачи. Эту погрешность можно уменьшить выбором метода решения задачи.
 - (а) Погрешность модели
 - (b) Остаточная погрешность (погрешность аппроксимации)
 - Например, аппроксимация ряда первыми n его членами или аппроксимация по теореме Вейерштрасса квадратичной функцией.
 - (с) Погрешность округления
 - (d) Накапливаемая погрешность

2c и 2d часто объединяют в вычислительную погрешность.

Определение. Пусть X^* — точное решение, а X — найденное (приближенное) решение. Тогда X^* — X называется погрешностью, а её модуль $\Delta X = |X^* - X|$ — абсолютная погрешность.

Разумеется, ΔX представляет сугубо теоретический интерес, т.к. X^* неизвестна и ΔX нельзя вычислить.

Определение. В качестве требования к решению часто предоставляется предельная абсолютная погрешность $\Delta_X \geq |X^* - X|$.

Определение. Также существует относительная погрешность
$$\delta X = \left| \frac{X^* - X}{|X|} \right|$$

Относительная погрешность позволяет выражать погрешность относительно значений самой величины. Например, при измерении длины парты погрешность 1 см не очень хорошо, а при измерении расстояния между городами — приемлемо.

Определение. Предельная относительная погрешность
$$\delta_X \geq \left| \frac{X^* - X}{|X|} \right|$$

Определение. Значащие цифры некоторого числа — все цифры в его изображении, отличные от нуля, а также нули, если они содержатся между значащими цифрами или расположены в конце числа и указывают на сохранение разряда точности.

Определение. Если значащая цифра приближенного значения a, находящаяся в разряде, в котором выполняется условие $\Delta \leq 0.5 \cdot 10^k$, т.е. абсолютное значение погрешности не превосходит половину единицы этого разряда (k — номер этого разряда), то такая цифра называется верной в узком смысле.

Цифра называется верной в широком смысле, если в определении выше используется 1 вместо 0.5.

Пример. $a = 3.635, \Delta a = 0.003$

•
$$k = 0$$
 $\frac{1}{2} \cdot 10^0 = \frac{1}{2} \ge \Delta a$

•
$$k = -1$$
 $\frac{1}{2} \cdot 10^{-1} = 0.05 \ge \Delta a$

•
$$k = -2$$
 $\frac{1}{2} \cdot 10^{-2} = 0.005 \ge \Delta a$

•
$$k = -3$$
 $\frac{1}{2} \cdot 10^{-3} = 0.0005 < \Delta a$

Таким образом, цифра 5 является сомнительной, остальные — верные.

Пример. Рассмотрим следующие способы записи одного и того же выражения:

$$\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^3 = (\sqrt{2}-1)^6 = (3-2\sqrt{2})^3 = 99-70\sqrt{2}$$

Посчитаем все выражения с различными приближениями $\sqrt{2}$:

•
$$\frac{7}{5} = 1.4$$

•
$$\frac{17}{12} = 1.41666$$

•
$$\frac{707}{500} = 1.414$$

•
$$\sqrt{2} = 1.4142135624$$

$\sqrt{2}$	$\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^3$	$(\sqrt{2}-1)^6$	$(3-2\sqrt{2})^3$	$99 - 70\sqrt{2}$
$\frac{7}{5}$	$\frac{1}{216} \approx 0.00\underline{4}6$	$\frac{64}{15625} \approx 0.00\underline{5}1$	$\frac{1}{125} = 0.008$	1
$\frac{17}{12}$	$\frac{125}{24389} \approx 0.00513$	$\frac{15625}{2985354} \approx 0.00\underline{5}2$	$\frac{1}{216} \approx 0.00\underline{4}6$	$-\frac{1}{6} = -0.6(6)$
$\frac{707}{500}$	$\frac{8869743}{1758416743} \approx 0.005044$	$\frac{78672340886049}{15625 \cdot 10^{12}} \approx 0.00\underline{50}4$	$\frac{636056}{125000000} \approx 0.00\underline{50}9$	0.02

$$\Delta_{(X\pm Y)} = \Delta_X + \Delta_Y$$

$$\Delta_{(X+Y)} \approx |Y|\Delta_X + |X|\Delta_Y$$

$$\Delta_{(X/Y)} \approx \left|\frac{1}{Y}\right| \Delta_X + \left|\frac{X}{Y^2}\right| \Delta_Y$$

$$|\Delta u| = |f(x_1 + \Delta x_1, \dots, x_n + \Delta x_n) - f(x_1 \dots x_n)|$$

$$|\Delta u| \approx |df(x_1 \dots x_n)| = \left|\sum_{i=1}^n \frac{\partial u}{\partial x_i} \Delta x_i\right| \le \sum_{i=1}^n \left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right| |\Delta x_i|$$

$$\Delta_u = \sum_{i=1}^n \left|\frac{\partial \ln u}{\partial x_i}\right| \Delta x_i$$

$$|\delta u| = \sum_{i=1}^n \left|\frac{\partial \ln u}{\partial x_i}\right| |\Delta x_i|$$

$$\delta_u = \sum_{i=1}^n \left|\frac{\partial \ln u}{\partial x_i}\right| |\Delta x_i|$$

$$\delta_{(X\pm Y)} = \left|\frac{X}{X\pm Y}\right| \delta_X + \left|\frac{Y}{X\pm Y}\right| \delta_Y$$

$$\delta_{(X+Y)} = \delta_X + \delta_Y$$

$$\delta_{(X/Y)} = \delta_X + \delta_Y$$

Вернемся к прошлому примеру и посчитаем относительную погрешность.

$$\triangleleft x = \frac{7}{5}$$

$$\delta_{f_1} = 3 \left| \frac{1}{x - 1} - \frac{1}{x + 1} \right| \cdot |\delta x| = 6.25 |\delta x|$$

$$\delta_{f_2} = 6 \left| \frac{1}{x - 1} \right| \cdot |\delta x| = 15 |\delta x|$$

$$\delta_{f_3} = 6 \left| \frac{1}{3 - 2x} \right| \cdot |\delta x| = 30 |\delta x|$$

$$\delta_{f_4} = \left| \frac{90}{99 - 70x} \right| \cdot |\delta x| = 70 |\delta x|$$

Таким образом, наибольшую погрешность даёт f_4 , наименьшую — f_1 .

Пример.

$$y^{2} - 140y + 1 = 0$$
$$y = 70 - \sqrt{4899}$$
$$\sqrt{4899} \approx 69.99$$
$$y \approx 70 - 69.99 = 0.01$$

Посчитаем другим методом — избавимся от вычитания похожих чисел.

$$y = \frac{1}{70 + \sqrt{4899}}$$
$$y = \frac{1}{139.99} \approx \frac{1}{140} = 0.00714285 \approx 0.007143$$

Можно заметить, что результат весьма точнее.

Пример. Рассмотрим задачу вычисления суммы $S = \sum_{i=1}^{10^6} \frac{1}{i^2}$.

Если суммировать по формуле $S_n=S_{n-1}+\frac{1}{n^2}$, то из-за того, что сначала суммируются большие числа, а потом малые, погрешность велика: $\Delta=10^6\cdot 2^{-1}\approx 2\cdot 10^{-4}$

Если же суммировать с конца, то $\Delta = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right) \approx 6 \cdot 10^{-8}$

Рекомендации для увеличения точности вычислений:

- 1. Если складывать или вычитать последовательность чисел, то лучше начинать с малых членов.
- 2. Желательно избавляться от вычитания двух почти равных чисел, по возможности преобразую формулу.
- 3. Необходимо сводить к минимуму число математических операций. Это также способствует ускорению работы алгоритма.

4. Если ЯП и компьютер позволяют использовать числа разных типов, то числа с большим числом разрядов всегда повышают точность вычислений (в ущерб памяти).

Дробные числа нужно сравнивать с помощью ε , т.е. $|a-b| \le \varepsilon$

2 Задачи оптимизации. Вводное.

Здесь и далее целевая функция — функция, которую мы минимизируем.

Обозначение. Пусть целевая функция — f(x). Это обозначается как $f(x) \xrightarrow{x \in U} \min.$

 $f(x) o \max \Rightarrow -f(x) o \min$. Таким образом, мы без потери общности рассматриваем задачу минимизации.

Определение. Если $\exists x^* \in U \ f(x^*) \le f(x) \ \forall x \in U$, то такой x^* называется точкой (глобального) минимума

Обозначение. Множество всех точек минимума обозначается $U^* = \{x_i^* \mid i = 1 \dots k\}$

Мы рассматриваем класс функций таких, что $U^* \neq \varnothing$

Определение. Функция f(x) называется унимодальной на [a,b], если она:

- 1. Непрерывна на [a,b]
- 2. $\exists \alpha, \beta : a \leq \alpha \leq \beta \leq b$, такие что:
 - (a) Если $a < \alpha$, то на $[a, \alpha] f(x)$ строго монотонно убывает.
 - (b) Если $\beta < b$, то на $[\beta,b]$ f(x) строго монотонно возрастает.
 - (c) $\forall x \in [\alpha, \beta]$ $f(x) = f_* = \min_{[a,b]} f(x)$

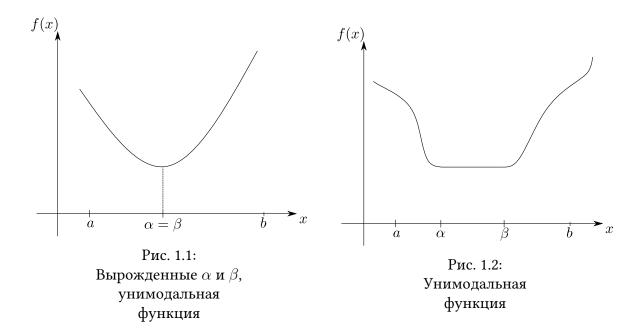
Свойства.

- 1. Если функция унимодальна на [a,b], то она унимодальна и на $[c,d] \subset [a,b]$
- 2. Если f унимодальна на $[a,b], a \leq x_1 < x_2 \leq b$, тогда:
 - (a) Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то $x^* \in [a, x_2]$
 - (b) Если $f(x_1) > f(x_2)$, то $x^* \in [x_1, b]$

Определение. f(x), заданная на [a,b], называется выпуклой на этом отрезке, если

$$\forall x', x'' \in [a, b], \alpha \in [0, 1] \quad f(\alpha x' + (1 - \alpha)x'') \le \alpha f(x') + (1 - \alpha)f(x'')$$

Свойства.



- 1. Если f(x) выпукло на [a,b], то $\forall [x',x''] \subset [a,b]$, то её график расположен ниже хорды между x' и x''
- 2. Всякая выпуклая функция на отрезке является унимодальной на нём.

Определение. Стационарные точки — точки x, для которых f'(x) = 0.

Мы будем рассматривать одномерные задачи оптимизации, т.к. многомерные задачи часто сводятся к одномерным.

3 Одномерная минимизация функций. Прямые методы.

Прямые методы — методы, не использующие производные целевой функции.

3.1 Метод дихотомии

Этот метод — тернарный поиск.

$$x_1 = \frac{b+a-\delta}{2} \quad x_2 = \frac{b+a+\delta}{2}$$
$$\tau = \frac{b-x_1}{b-a} = \frac{x_2-a}{b-a} \to \frac{1}{2}$$
$$x^* \in [a_i, b_i] \ \forall i$$

Шаг 1: Находим x_1 и x_2 , вычисляем $f(x_1)$ и $f(x_2)$

Шаг 2: Сравниваем $f(x_1)$ и $f(x_2)$.

- Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, переходим к отрезку $[a,x_2]$, т.е. $b=x_2$
- Иначе переходим к $[x_1, b]$, т.е. $a = x_1$

Шаг 3: $\, \varepsilon_n = \frac{b-a}{2} ,$ где n- номер итерации.

- Если $\varepsilon_n>\varepsilon$, переходим к новой итерации.
- Если $\varepsilon_n \leq \varepsilon$, завершаем поиск и переходим к шагу 4.

III
ar 4:
$$X^* \approx \overline{X} = \frac{a+b}{2}$$

Примечание. δ выбирается на интервале $(0,2\varepsilon)$. Чем меньше δ , тем больше относительное уменьшение длины отрезка на каждой итерации. При черезмерно малом δ сравнение $f(x_1)$ и $f(x_2)$ будет затруднительно, т.к. они близки.

Мы можем оценить число необходимых итераций:

$$n \ge \log_2 \frac{b - a - \delta}{2\varepsilon - \delta}$$

Лекция 2

17 февраля

3.2 Метод золотого сечения

Рассмотрим отрезок [0,1]. Пусть $x_2=\tau$, тогда симметрично расположенная $x_1=1-\tau$. Пусть дальше был выбран отрезок $[0,\tau]$, тогда пусть $x_2'=1-\tau$. Чтобы новые точки делили отрезок в таком же соотношении, необходимо, чтобы $\frac{1}{\tau}=\frac{\tau}{1-\tau}\Rightarrow \tau^2=1-\tau\Rightarrow \tau=\frac{\sqrt{5}-1}{2}\approx 0.61803$. Таким образом, $x_1=1-\tau=\frac{3-\sqrt{5}}{2}, x_2=\tau=\frac{\sqrt{5}-1}{2}$

В общем случае для отрезка [a, b]:

$$x_1 = a + \frac{3 - \sqrt{5}}{2}(b - a), x_2 = a + \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(b - a)$$
 (1)

Вычислим погрешность:

$$\Delta_n = \tau^n(b-a)$$
 $\varepsilon_n = \frac{\Delta_n}{2} = \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{5}-1}{2}\right)^n (b-a)$

Для заданного ε условия окончания $\varepsilon_n \leq \varepsilon$.

Результат метода:

$$x^* = \frac{a_{(n)} + b_{(n)}}{2}$$

Оценка числа шагов для достижения искомой точности:

$$n \ge \ln\left(\frac{\frac{2\varepsilon}{b-a}}{\ln \tau}\right) \approx 2 \cdot 1 \cdot \ln\left(\frac{b-a}{2\varepsilon}\right)$$

Шаг 1: Находим x_1 и x_2 по формуле (1), вычисляем $f(x_1)$ и $f(x_2)$. $\varepsilon_n = \frac{b-a}{2}, \tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$.

Шаг 2: — Если $\varepsilon_n > \varepsilon$, переходим к шагу 3.

– Если $\varepsilon_n \leq \varepsilon$, переходим к шагу 4.

Шаг 3: Сравниваем $f(x_1)$ и $f(x_2)$.

- Если $f(x_1) \le f(x_2)$, то $b=x_2, x_2=x_1, x_1=b-\tau(b-a)$. Мы запоминаем $f(x_2)$ для следующего шага, т.к. оно равно $f(x_1)$ на этом шаге.
- Иначе $a=x_1, x_1=x_2, f(x_1)=f(x_2)$. Мы запоминаем $f(x_1)$ для следующего шага, т.к. оно равно $f(x_2)$ на этом шаге.

Шаг 4: $X^* pprox \overline{X} = \frac{a_{(n)} + b_{(n)}}{2}$

3.3 Метод Фибоначчи

Мы знаем, что $F_n=rac{\left(rac{1+\sqrt{5}}{2}
ight)^n-\left(rac{1-\sqrt{5}}{2}
ight)^n}{\sqrt{5}}$, а также при $n o+\infty$ $\ F_npproxrac{\left(rac{1+\sqrt{5}}{2}
ight)^n}{\sqrt{5}}$

Рассмотрим нулевую итерацию:

$$x_1 = a + \frac{F_n}{F_{n+2}}(b-a)$$
 $x_2 = a + \frac{F_{n+1}}{F_{n+2}}(b-a)$

Рассмотрим k-тую итерацию:

$$x_1 = a_{(k)} + \frac{F_{n-k+1}}{F_{n-k+3}}(b_k - a_k) = a_k + \frac{F_{n-k+1}}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$$

$$x_2 = a_{(k)} + \frac{F_{n-k+2}}{F_{n-k+3}}(b_k - a_k) = a_k + \frac{F_{n-k+2}}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$$

Пусть k = n, тогда:

$$x_1 = a_n + \frac{F_1}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$$
 $x_2 = a_n + \frac{F_2}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$

Условие на погрешность:

$$\frac{b_n - a_n}{2} = \frac{b_0 - a_0}{F_{n+2}} < \varepsilon$$

Какое брать n? Такое, что $\frac{b_0 - a_0}{\varepsilon} < F_{n+2}$

Есть проблема, при большом $n \, \frac{F_n}{F_{n+2}}$ есть бесконечная десятичная дробь, вследствие чего образуется погрешность.



Рис. 2.1: Функция f(x) и её приближение параболой.

Метод парабол

Пусть
$$\exists x_1, x_2, x_3 \in [a,b]$$
, такие что $\begin{cases} x_1 < x_2 < x_3 \\ f(x_1) \geq f(x_2) \leq f(x_3) \end{cases}$

Тогда приближающая парабола имеет вид $q(x)=a_0+a_1(x-x_1)+a_2(x-x_1)(x-x_2).$ Мы имеем условия на коэффициенты этой параболы: $\begin{cases} q(x_1)=f(x_1)=f_1\\ q(x_2)=f(x_2)=f_2\\ q(x_3)=f(x_3)=f_3 \end{cases}$

Коэффициенты можно найти следующим образом:

$$a_0 = f_1$$
 $a_1 = \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1}$ $a_2 = \frac{1}{x_3 - x_2} \left(\frac{f_3 - f_1}{x_3 - x_1} - \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \right)$

Тогда результат итерации есть $\overline{x}=\frac{1}{2}\left(x_1+x_2-\frac{a_1}{a_2}\right)$, на следующей лекции будет рассказан переход к следующей итерации.

Точки x_1, x_2, x_3 для новой итерации выбираются следующим образом:

1. (a) Если $x_1 < \overline{x} < x_2 < x_3$ и $f(\overline{x}) \geq f(x_2)$, то $x^* \in [\overline{x}, x_3], x_1 = \overline{x}$, точки x_2 и x_3 не меняются.

- (b) Если $x_1 < \overline{x} < x_2 < x_3$ и $f(\overline{x}) < f(x_2)$, то $x^* \in [x_1,x_2], x_3 = x_2, x_2 = \overline{x}$, точка x_1 не меняется.
- 2. (a) Если $x_1 < x_2 < \overline{x} < x_3$ и $f(\overline{x}) \le f(x_2)$, то $x^* \in [x_2,x_3], x_1 = x_2, x_2 = \overline{x}$, точка x_3 не меняется.
 - (b) Если $x_1 < x_2 < \overline{x} < x_3$ и $f(\overline{x}) > f(x_2)$, то $x^* \in [x_1, \overline{x}], x_3 = \overline{x}$, точки x_1 и x_2 не меняются.

Примечание. Метод парабол имеет квадратичную сходимость.

Примечание. Метод парабол требует гладкость функции, что неверно для предыдущих методов.

3.5 Комбинированный метод Брента

Для собственного изучения.

Лекция 3

24 февраля

3.6 Метод равномерного перебора

Шаг 1: Если $f(x_0)>f(x_0+\delta)$, то $k=1, x_1=x_0+\delta, h=\delta$ иначе $x_1=x_0, h=-\delta$

Шаг 2: $h = 2h, x_{k+1} = x_k + h$

Шаг 3: Если $f(x_k)>f(x_{k+1})$, то k=k+1 и переходим к шагу 2. Иначе прекращаем поиск и искомое лежит в $[x_{k-1},x_{k+1}]$

4 Методы оптимизации, использующие производную

В рамках этой главы f(x) — дифференцируемая или дважды дифференцируемая выпуклая функция.

Есть три классических метода, использующих производную:

- Средней точки
- Метод хорд
- Метод Ньютона

f'(x) = 0 — необходимое и достаточное условие глобального минимума. Таким образом, условие остановки вычислений — $f'(x) \approx 0$, т.е. $|f'(x)| \leq \varepsilon$

4.1 Методы средней точки

Средняя точка $\overline{x} = \frac{a+b}{2}$.

Общая идея алгоритма:

- Если f'(x)>0, то $\overline{x}\in$ участку монотонного возрастания f(x) и $x^*<\overline{x}$, т.е. минимум лежит на $[a,\overline{x}]$
- Если f'(x) < 0, то аналогично можем вывести, что минимум лежит на $[\overline{x}, b]$
- Если f'(x) = 0, то мы нашли решение.

Перепишем это в виде алгоритма:

Шаг 1: $\overline{x} = \frac{a+b}{2}$, вычислим $f'(\overline{x})$

Шаг 2: Если $|f'(x)| \leq \varepsilon$, то $x^* = \overline{x}$ и завершаем вычисление.

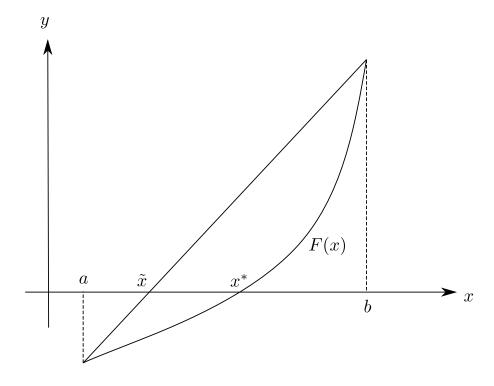
Шаг 3: Сравниваем f'(x) с нулём:

- Если f'(x)>0, то $x^*\in [a,\overline{x}]$ и $b=\overline{x}$
- Иначе $x^* \in [\overline{x}, b]$ и $a = \overline{x}$

Длина отрезка после n итераций есть $\Delta_n = \frac{b-a}{2^n}$

4.2 Метод хорд (метод секущей)

Если $\exists f'(x)$ на [a,b], $f'(a)\cdot f'(b)<0$ и f'(x) непрерывна на [a,b], то $\exists x\in(a,b):f'(x)=0.$ F(x)=f'(x). Пусть $\tilde{x}-$ точка пересечения хорды F(x) с осью Ox на [a,b]



Можем тривиально вывести \tilde{x} из уравнения прямой по двум точками:

$$\tilde{x} = a - \frac{f'(a)}{f'(a) - f'(b)}(a - b)$$
 (2)

Шаг 1: Считаем \tilde{x} по (2)

Шаг 2: Если $|f'(\tilde{x})| \leq \varepsilon$, то $x^* = \tilde{x}$ и мы заканчиваем вычисление.

Иначе шаг 3.

Шаг 3: Переходим к новому отрезку:

- Если $f'(\tilde{x}) > 0$, то $x^* \in [a, \tilde{x}], b = \tilde{x}, f'(b) = f'(\tilde{x})$, переходим к шагу 1
- иначе $x^* \in [\tilde{x},b], a = \tilde{x}, f'(a) = f'(\tilde{x})$, переходим к шагу 1

Примечание. Если $f'(a) \cdot f'(b) \ge 0$, то $x^* = a$ или $x^* = b$.

4.3 Метод Ньютона (метод касательной)

Если f выпуклая на [a,b] и дважды непрерывно дифференцируемая, то уравнение f'(x)=0 решается методом Ньютона.

Пусть $x_0 \in [a,b]$ — начальное приближение x^* . F(x) = f'(x) линеаризуема в окрестности x_0 , т.е.

$$F(x) \approx F(x_0) + F'(x_0)(x - x_0)$$

Пусть x_1 — следующее приближение к x^* . Это будет пересечение касательной с Ox. Найдём эту точку.

$$F(x_0) + F'(x_0)(x_1 - x_0) = 0$$
$$x_1 = x_0 - \frac{F(x_0)}{F'(x_0)}$$

Таким образом, мы можем получить $\{x_k\}_{k=1}^n$ — итерационную последовательность.

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

Условие остановки такое же, как в предыдущих методах: $|f'(x_k)| \leq \varepsilon$

Лекция 4. 3 марта стр. 18 из 29

Лекция 4

3 марта

Пусть x_k — текущая оценка решения x^*

Рассмотрим ряд Тейлора:

$$f(x_k + p) = f(x_k) + pf'(x_k) + \frac{1}{2}p^2f''(x_k) + \dots$$

$$f(x*) = \min_{x} f(x)$$

$$= \min_{p} f(x_k + p)$$

$$= \min_{p} \left(f(x_k) + pf'(x_k) + \frac{1}{2}p^2 f''(x_k) + \dots \right)$$

$$\approx \min_{p} \left(f(x_k) + pf'(x_k) + \frac{1}{2}p^2 f''(x_k) \right)$$

Приравняем производную выражения под min к нулю:

$$f'(x_k) + pf''(x_k) = 0$$
$$p = -\frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$$

Тогда
$$x^* pprox x_k + p$$
 и $x_{k+1} = x_k + p = x_k - rac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$

Главное преимущество метода Ньютона — квадратичная скорость сходимости, т.е. если x_k достаточно близка к x^* и $f''(x^*)>0$, то $|x_{k+1}-x^*|\leq \beta |x_k-x^*|^2$

Метод Ньютона может потерпеть неудачу в следующих случаях:

Лекция 4. 3 марта стр. 19 из 29

1. f(x) плохо аппроксимируется первыми тремя членами в ряде Тейлора. Тогда x_{k+1} может быть хуже (как аппроксимация) x_k .

- 2. $f''(x_k) = 0$, тогда p не определен.
- 3. Кроме f нужно вычислять f' и f'', что затруднительно в реальных задачах.

Мы можем аппроксимировать производную по определению:

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k + h) - f(x_k)}{h}$$

Эта формула называется правой разностной схемой, у нее есть улучшение, называемое центральной разностной схемой:

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k + h) - f(x_k - h)}{2h}$$

Если f(x) — квадратичная функция, то метод Ньютона сходится за один шаг при любом выборе x_0 .

4.3.1 Достаточное условие монотонной сходимости метода Ньютона

Пусть $x^* \in [a,b]$ и f(x) трижды непрерывно дифференцируемая и выпуклая на [a,b] функция. Тогда $\{x_k\}$ будет сходиться к пределу x^* монотонно, если $0 < \frac{x^* - x_{k+1}}{x^* - x_k} < 1$

$$f'(x^*) = 0 = f'(x_k) + f''(x_k)(x^* - x_k) + \frac{f'''(x)}{2}(x^* - x_k)^2$$
$$\frac{x^K - x_{k+1}}{x^* - x_k} = \frac{x^* - x_k + \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}}{x^* - x_k} = 1 - \frac{2}{2 + \frac{f'''(x)(x^* - x_k)^2}{f'(x_k)}}$$

Последовательность итераций $\{x_k\}$ монотонна, если $\frac{f'''(x)}{f'(x_k)}>0$, таким образом условие монотонной сходимости метода Ньютона — постоянство на $x\in[x^*,x_0]$ знака f'''(x) и его совпадение с $f'(x_0)$.

Пример. $f(x) = x \cdot \operatorname{arctg}(x) - \frac{1}{2}$???

$$f'(x) = \operatorname{arctg} x \quad f''(x) = \frac{1}{1+x^2} > 0 \quad f'''(x) = -\frac{2x}{(1+x^2)^2}$$

 $f'(x) \cdot f'''(x) < 0$, таким образом не будет монотонной сходимости.

Пусть $x_0 = 1$.

Лекция 4. 3 марта стр. 20 из 29

k	$ x_k $	$f'(x_k)$	$f''(x_k)$
0	1	0.785	$\frac{1}{2}$
1	-0.57	-0.518	\bar{a}
2	0.117	0.	
4	$9 \cdot 10^{-8}$		

4.4 Модификации метода Ньютона

4.4.1 Метод Ньютона-Рафсона

$$x_{k+1} = x_k - \tau_k \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, 0 < \tau_k \le 1$$

 au_k — константы. Если au=1, то метод Ньютона-Рафсона вырождается в метод Ньютона. Для нахождения au_k зададим au(au):

$$\varphi(\tau) = f(x_k - \tau \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}) \to \min$$

Тогда

$$au_k=rac{(f'(x_k))^2}{(f'(x_k))^2+(f'(ilde x))^2}$$
 , где $ilde x=x_k-rac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$

4.4.2 Метод Марквардта

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

, где $\mu_k > 0$

 μ_0 выбирают на порядок выше значения $f''(x_0), \mu_{k+1} = egin{cases} rac{m_k}{2} &, \ \operatorname{если} \ f(x_{k+1}) < f(x_k) \\ \mu_{k+1} = 2\mu_k &, \ \operatorname{если} \ f(x_{k+1}) \geq f(x_k) \end{cases}$

5 Метод минимизации многомодальных функций *(метод ломаных)*

Определение. $f(x), x \in [a,b]$ удовлетворяет условию Липшица, если $\forall x_1, x_2 \in [a,b] \mid f(x_1) - f(x_2) \mid \leq L \mid x_1 - x_2 \mid$

- Шаг 1 Возьмём $x_1^*=\frac{1}{2L}(f(a)-f(b)+L(a+b))$ и $p_1^*=\frac{1}{2}(f(a)+f(b)+L(a-b))$. Добавим в рассматриваемое множество $x_1'=x_1^*-\Delta_1$ и $x_1''=x_1^*+\Delta_1$, где $\Delta_1=\frac{1}{2L}(f(x_1^*)-p_1)$
- Шаг 2 Ииз пар (x_1', p_1) и (x_1'', p_1) выберем пару с минимальной $p: (x_2^*, p_2^*)$ и исключим из рассматриваемого множества.

Лекция 4. 3 марта стр. 21 из 29

Шаг n В результате мы получим множество из n пар (x,p). Исключаем пару с минимальной p и вместо неё

Пример.
$$f(x) = \frac{\sin x}{x}$$
, $[a,b] = [10,15]$, $\varepsilon = 0.01$

Проверим условие Липшица:

$$|f'(x)| = \left| \frac{x \cos x - \sin x}{x^2} \right| < \frac{x |\cos x| + \sin |x|}{x^2} < \frac{x+1}{x^2} \le 0.11$$

n	x_n^*	p_n^*	$2L\Delta_n$	x_n'	x_n''	p_n
1	12.056	-0.281	0.240	10.963	13.149	-0.161
2	10.963	-0.161	0.070	10.646	11.280	-0.126
3	13.149	-0.161	0.203	12.227	14.701	-0.096
4	10.646	-0.126	0.038	10.474	10.818	-0.107
5	11.280	-0.126	0.041	11.094	11.466	-0.106
6	10.474	-0.107	0.024	10.364	10.584	-0.095
7	10.818	-0.107	0.160	10.745	10.891	-0.099
8	11.094	-0.106	0.016	11.020	11.168	-0.098
9	11.466	-0.106	0.028	11.338	11.594	-0.092
10	10.891	-0.099	$0.008 < \varepsilon$			
	I	I	I	1		I

Лекция 5

10 марта

6 Минимизация функций многих переменных

6.1 Постановка задачи

Необходимо найти $x^* = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \end{pmatrix}^T \in U \subset E_n$, где U — множество допустимых значений, а E_n — евклидово пространство размера n, при этом $f(x^*) = \min_{x \in U} f(x)$.

Примечание.

- 1. Как и в одномерном случае, задача минимизации эквивалентна задачи максимизации и в общем случае называется задачей поиска экстремума.
- 2. Если U задается ограничениями на вектор x, то такая задача оптимизации называется задачей поиска условного экстремума.
- 3. Если $U=E_n$, т.е. не имеет ограничений, то такая задача оптимизации называется задачей поиска безусловного экстремума.
- 4. Решением задачи поиска экстремума называется пара $(x^*, f(x^*))$.

Определение. Если $f(x^*) \le f(x) \ \forall x \in U$, то x^* называется глобальным минимумом.

Определение. Если $\exists \varepsilon>0: ||x-x^*||<\varepsilon \Rightarrow f(x^*)\geq f(x),$ то x^* называется локальным минимумом.

Примечание.

$$||x|| = \sqrt{\sum_{i} x_i}$$

Определение. Поверхностью уровня функции f(x) называется множество точек, в которых функция принимает постоянное значение.

Определение. Градиентом $\nabla f(x)$ непрерывно дифференцируемой функции f(x) в x называется:

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Примечание. Градиент направлен по нормали к поверхности нормали уровня, т.е. перпендикулярно к касательной плоскости, проведенной в точке x в сторону наибольшего возрастания функции.

Определение. Матрица Гессе $\mathbf{H}(x)$ дважды непрерывно дифференцируемой в точке x функции f(x) называется матрица частных производных производных второго порядка, вычисленных в данной точке.

$$\mathbf{H}(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \cdots & h_{nn} \end{pmatrix}$$

- 1. $\mathbf{H}(x)$ симметрична, имеет размер $n \times n$.
- 2. Можно определить антиградиент вектор, равный по модулю градиенту и направленный противоположно. Антиградиент указывает в сторону наибольшего убывания f(x).
- 3. $\Delta f(x) = f(x + \Delta x) f(x) = \nabla f(x)^T \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^T \mathbf{H}(x) \Delta x + \mathcal{O}(||\Delta x||^2)$, где $\mathcal{O}(||\Delta x||^2)$ есть сумма всех членов разложения, имеющих порядок выше второго. Можем заметить, что $\Delta x^T \mathbf{H}(x) \Delta x$ квадратичная форма.

Определение. Квадратичная форма $\Delta x^T \mathbf{H}(x) \Delta x^1$ называется:

- Положительно определенной, если $\forall \Delta x \neq 0 \ \Delta x^T \mathbf{H}(x) \Delta x > 0$
- Отрицательно определенной, если $\forall \Delta x \neq 0 \ \Delta x^T \mathbf{H}(x) \Delta x < 0$
- Положительно полуопределенной, если $\forall \Delta x \ \Delta x^T \mathbf{H}(x) \Delta x \geq 0$ и имеется $\Delta x \neq 0$: $\Delta x^T \mathbf{H}(x) \Delta x = 0$
- Отрицательно полуопределенной, если $\forall \Delta x \ \Delta x^T \mathbf{H}(x) \Delta x \leq 0$ и имеется $\Delta x \neq 0$: $\Delta x^T \mathbf{H}(x) \Delta x = 0$
- Неопределенной, если $\exists \Delta x, \Delta \tilde{x} : \Delta x^T \mathbf{H}(x) \Delta x > 0, \Delta \tilde{x}^T \mathbf{H}(x) \Delta \tilde{x} < 0$
- Тождественно равной нулю, если $\forall \Delta x \ \Delta x^T \mathbf{H}(x) \Delta x = 0$

 $^{^{\}scriptscriptstyle 1}$ и соответствующая ей матрица $\mathbf{H}(x)$

6.2 Свойства выпуклых множеств и выпуклых функций

Определение. Пусть $x,y\in E_n$, множество точек вида $\{z\}\subset E_n:z=\alpha x+(1-\alpha)y$, т.е. z это отрезок [x,y].

Определение. $U \subset E_n$ выпуклое, если вместе с точками $x,y \in U$ оно содержит весь отрезок z.

Определение. Функция f(x), заданная на выпуклом множестве $U \subset E_n$, называется:

• выпуклой, если:

$$\forall x, y \in U, \alpha \in [0, 1] \ f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \le \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$$

• строго выпуклой, если:

$$\forall x, y \in U, \alpha \in (0,1) \ f(\alpha x + (1-\alpha)y) < \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y)$$

• сильно выпуклой с константой l>0, если:

$$\forall x, y \in U, \alpha \in [0, 1] \ f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \le \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) - \frac{l}{2}\alpha(1 - \alpha)||x - y||^2$$

Свойства.

- 1. Функция f(x) выпуклая, если её график целиком лежит не выше отрезка, соединяющего две её произвольные точки.
- 2. Функция f(x) строго выпуклая, если её график целиком лежит ниже отрезка, соединяющего две её произвольные, но не совпадающие точки.².
- 3. Если функция сильно выпуклая, то она одновременно строго выпуклая и выпуклая.
- 4. Если функция строго выпуклая, то она выпуклая.
- 5. Выпуклость функции можно определить по H(x):
 - Если $\mathbf{H}(x) \geq 0 \ \forall x \in E_n$, то f(x) выпуклая.
 - Если $\mathbf{H}(x) > 0 \ \forall x \in E_n$, то f(x) строго выпуклая.
 - Если $\mathbf{H}(x) \geq lE^3 \ \forall x \in E_n$, то f(x) сильно выпуклая.

Свойства (выпуклых функций).

1. Если f(x) — выпуклая функция на множестве U, то всякая точка локального минимума — глобальный минимум на U.

² Пример будет на следующей лекции

³ единичная матрица

- 2. Если выпуклая функция достигает своего минимума в двух различных точках, то она достигает минимума во всех точках отрезка, соединяющего эти точки.
- 3. Если f(x) строго выпуклая функция на множестве U, то она может достигать своего глобального минимума на U не более чем в одной точке.

6.3 Необходимое и достаточное условие безусловного экстремума

6.3.1 Необходимое условие экстремума первого порядка

Пусть $x^* \in E_n$ — точка локального минимума f(x) на E_n и f(x) дифференцируема в точке x^* . Тогда $\nabla f(x)$ в точке x^* равен нулю: $\nabla f(x^*) = 0$ или $\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = 0 \ \forall i \in 1\dots n$. Точка x^* называется стационарной.

6.3.2 Необходимое условие экстремума второго порядка

Пусть $x^* \in E_n$ — точка локального минимума f(x) на f(x) дважды дифференцируема в точке x^* . Тогда $\mathbf{H}(x^*)$ положительно полуопределена или отрицательно полуопределена.

6.3.3 Достаточное условие экстремума

Пусть f(x) в $x^* \in E_n$ дважды дифференцируема, $\nabla f(x^*) = 0$ и $\mathbf{H}(x) > 0$ (или $\mathbf{H}(x) < 0$). Тогда x^* — точка локального минимума f(x) на E_n .

6.3.4 Проверка выполнений условий экстремума

- Вычисление угловых миноров H(x)
- Вычисление главных миноров H(x)

Есть два способа это сделать:

- 1. Исследование положительной или отрицательной определенности угловых и главных миноров $\mathbf{H}(x)$.
- 2. Анализ собственных значений H(x).

⁴ или максимума

⁵ или максимума

⁶ или максимума

Лекция 6

17 марта

6.3.5 Критерии Сильвестра проверки достаточных условий экстремума

- 1. Для того, чтобы $\mathbf{H}(x^*)>0$ и x^* являлась точкой локального минимума, необходимо и достаточно, чтобы угловые миноры были строго положительными, т.е. $\Delta_1>0, \Delta_2>0\dots \Delta_n>0.$
- 2. Для того, чтобы $\mathbf{H}(x^*)<0$ и x^* являлась точкой локального максимума, необходимо и достаточно, чтобы знаки угловых миноров чередовались, т.е. $\Delta_1<0,\Delta_2>0\dots(-1)^n\Delta_n>0$

6.3.6 Критерии Сильвестра проверки необходимых условий экстремума

- 1. Для того, чтобы $\mathbf{H}(x^*) \geq 0$ и x^* мог быть точкой локального минимума, необходимо и достаточно, чтобы главные миноры были положительными, т.е. $\Delta_1 \geq 0, \Delta_2 \geq 0, \ldots \Delta^n \geq 0$
- 2. Для того, чтобы $\mathbf{H}(x^*) \leq 0$ и x^* мог быть точкой локального максимума, необходимо и достаточно, чтобы знаки главных миноров чередовались, т.е. $\Delta_1 \leq 0, \Delta_2 \geq 0, \dots (-1)^n \Delta^n \geq 0$

Определение. Собственные значения λ_i матрицы $\mathbb{H}(x^*)$ находятся как корни характеристического уравнения $|H(x^*) - \lambda E| = 0$

Если H(x) — вещественная, симметричная матрица, то λ_i тоже вещественные.

6.4 Квадратичные функции

Определение. Функция вида

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^{n} b_j x_j + c$$

называется квадратичной функцией n переменных.

Положим $a_{ij}=a_{ji}^{-1}$, тогда a_{ij} задаёт симметричную матрицу A.

$$f(x) = \frac{1}{2} \langle Ax, x \rangle + \langle b, x \rangle + c \tag{3}$$

, где $b = \begin{pmatrix} b_1 & \dots & b_n \end{pmatrix}^T \in E_n$ — вектор коэффициентов, $x = \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_n \end{pmatrix}^T$

Свойства (квадратичных функций).

1.
$$\nabla f(x) = Ax + b$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^n b_j x_j + c \right)$$
$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (a_{ik} + a_{ki}) x_i + b_k$$
$$= \sum_{i=1}^n a_{ki} x_i + b_k$$

2. $\mathbf{H}(x) = A$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_l \partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_l} \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_l} \left(\sum_{i=1}^n a_{ki} x_i + b_k \right) = a_{kl}$$

3. Квадратичная функция f(x), для которой выполнено (3), с положительно определенной матрицей A сильно выпуклая, т.к. $\mathbf{H}(x) = A$ — симметричная и положительная определенная, а следовательно $\lambda_i > 0$ и \exists ортонормированный базис из собственных векторов этой матрицы. В этом базисе:

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} \quad A - lE = \begin{pmatrix} \lambda_1 - l & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 - l & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n - l \end{pmatrix}$$

В этом базисе все угловые миноры матрицы A и матрицы A-lE положительны при достаточно малом $l:0< l<\lambda_{\min}\Rightarrow f$ сильно выпуклая.

 $^{^1}$ На лекции было дано $a_{ij}=a_{ij}+a_{ji}$, но это не похоже на правду, т.к. тогда $a_{ji}=0 \ \forall i,j$. Нулевая матрица действительно симметрична, но вряд ли это подразумевалось.

6.5 Общие принципы многомерной оптимизации

Алгоритмы многомерной оптимизации обычно используют итерационную процедуру, описываемую следующим образом: $x^{k+1} = \Phi(x^k, x^{k-1} \dots x^0), x^0 \in E_n$. Эти алгоритмы строят последовательность промежуточных результатов $\{x_k\}$, которая обладает следующими свойствами:

$$\begin{cases} \lim_{k \to +\infty} f(x^k) = f^* = \min_{E_n} f(x), & \text{если } U^* \neq \varnothing \\ \lim_{k \to +\infty} f(x^k) = f^* = \inf_{E_n} f(x), & \text{если } U^* = \varnothing \end{cases} \tag{4}$$

, где U^* — множество точек глобального минимума функции f(x).

Определение. Если для $\{x^k\}$ выполняется условие (4), то эта последовательность называется минимизирующей.

Определение. Если для $U^* \neq \varnothing$ выполняется условие $\lim_{k\to +\infty} \rho(x^k,U^*)=0$, то $\{x^k\}$ сходится к множеству U^*

Определение (расстояние от точки до множества). $\rho(x, U) = \inf_{y \in U} \rho(x, y)$

Если U^* состоит из одной точки x^* , то для $\{x^k\}$, сходящейся к U^* , $\lim_{k\to+\infty}x^k=x^*$. Минимизирующая последовательность может и не сходиться к точке минимума.

Теорема 1 (Вейерштрасса). Если f*x непрерывна в E_n и множество $U^{\alpha} = \{x: f(x) \leq \alpha\}$ для некоторого α непусто и ограничено, то f(x) достигает глобального минимума в E_n .

6.6 Скорость сходимости минимизирующей последовательности

Определение. $\{x^k\}$ сходится к точке x^* линейно (со скоростью геометрической прогрессии), если

$$\exists q \in (0,1) : \rho(x^k, x^*) = q\rho(x^{k-1}, x^*)$$

, т.е.
$$\rho(x^k, x^*) \le q^k \rho(x^0, x^*)$$

Определение. Сходимость называется сверхлинейной, если

$$\rho(x^k, x^*) \le (c\rho(x^{k-1}, x^*))^2, c > 0$$

Критерий окончания итерационного процесса:

1.
$$\rho(x^{k+1}, x^k) < \varepsilon_1$$

2.
$$|f(x^{k+1}) - f(x^k)| < \varepsilon_2$$

3.
$$||\nabla f(x^k)|| < \varepsilon_3$$

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k \tag{5}$$

, где p^k — направление поиска из x^k в x^{k+1} , а α_k — величина шага. Алгоритмы, которые мы будем рассматривать, различаются этими двумя величинами.

Определение. В итерационном процессе (5) производится исчерпывающий спуск, если величина шага α_k находится из решения одномерной задачи минимизации

$$\Phi_k(\alpha) \to \min_{\alpha}, \Phi_k(\alpha) = f(x^k + \alpha p^k)$$

Теорема 2. Если функция f(x) дифференцируема в E_n , то в итерационном процессе (5) с выбором шага с исчерпывающим спуском для любого $k \geq 1$ выполняется следующее условие:

$$\langle \nabla f(x^{k+1}), p^k \rangle = 0$$

Доказательство. Для $\Phi_k(\alpha)$ необходимое условие минимума функции:

$$\frac{d\Phi_k(\alpha)}{d\alpha} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f(x^{k+1})}{\partial x_j} \frac{dx_j^{k+1}}{d\alpha} = 0$$

Учитывая, что $x_j^{k+1}=x_j^k+\alpha p_j^k$, получаем, что $\frac{dx_j^{k+1}}{d\alpha}=p_j^k$

Теорема 3. Для квадратичной функции $f(x) = \frac{1}{2} \langle Ax, x \rangle + \langle b, x \rangle + c$ величина α_k исчерпывающего спуска в итерационном процессе (5) равна:

$$\alpha_k = -\frac{\left\langle \nabla f(x^k), p^k \right\rangle}{\left\langle A p^k, p^k \right\rangle} = -\frac{\left\langle A x^k + b, p^k \right\rangle}{\left\langle A p^k, p^k \right\rangle}$$

Доказательство.

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k$$
$$Ax^{k+1} + b = Ax^k + b + \alpha_k Ap^k$$
$$\nabla f(x^{k+1}) = \nabla f(x^k) + \alpha_k Ap^k$$

$$\langle \nabla f(x^{k+1}), p^k \rangle = 0$$

$$\langle \nabla f(x^k) + \alpha_k A p^k, p^k \rangle = 0$$

$$\langle \nabla f(x^k), p^k \rangle + \langle \alpha_k A p^k, p^k \rangle = 0$$

$$\langle \nabla f(x^k), p^k \rangle + \alpha_k \langle A p^k, p^k \rangle = 0$$

$$\alpha_k = -\frac{\langle \nabla f(x^k), p^k \rangle}{\langle A p^k, p^k \rangle}$$