

Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України
Львівський національний університет імені Івана Франка

М. Я. Бартіш, І. М. Дудзяний

Дослідження операцій

Частина 4. Нелінійне програмування

Підручник

Затверджено

Міністерством освіти і науки України



Львів 2011

Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України
Львівський національний університет імені Івана Франка

М. Я. Бартіш, І. М. Дудзяний

Дослідження операцій

Частина 4. Нелінійне програмування

Затверджено

Міністерством освіти і науки України

Львів 2011

УДК 519.8
ББК 22.183
Б 26

Рецензенти:

д-р фіз.-мат. наук, проф. *B. A. Кривень*

(Тернопільський державний технічний університет імені Івана Пулюя);

д-р фіз.-мат. наук, проф. *I. В. Огірко*

(Українська академія друкарства, м. Львів);

д-р фіз.-мат. наук, проф. *P. В. Слоньовський*

(Національний університет “Львівська політехніка”)

Затверджено Міністерством освіти і науки України
як підручник для студентів вищих навчальних закладів
(лист № 14/18-Г-609 від 01.08.06 р.)

Бартіш М. Я.

Б 26 Дослідження операцій. Частина 4 : Нелінійне
програмування : підручник / М. Я. Бартіш, І. М. Дудзяний. –
Львів : ЛНУ ім. Івана Франка, 2011. – 208 с.

ISBN 966-613-496-9
ISBN 978-966-613-854-8

Ч. 4

Розглянуто найважливіші питання, присвячені чисельним методам
розв'язування нелінійних екстремальних задач. Наведено теоретичне
обґрунтування і коротку характеристику цих методів. Значну увагу
приділено методам мінімізації функцій скінченної кількості змінних. З метою
глибокого засвоєння матеріалу наведено достатню кількість довідкового
матеріалу з курсів математичного аналізу та лінійної алгебри.

Для бакалаврів, спеціалістів і магістрів вищих закладів освіти, в яких
викладають предмети ”Дослідження операцій”, ”Математичне
програмування” та інші.

ISBN 966-613-496-9

© Бартіш М. Я., Дудзяний І. М., 2011

ISBN

Ч. 4

© Львівський національний університет імені
Івана Франка, 2011

УДК 519.8
ББК 22.183

1. ВСТУП У ТЕОРІЮ ОПТИМІЗАЦІЇ

■ План викладу матеріалу:

1. Загальні положення.
2. Задачі безумовної оптимізації.
3. Задачі умовної оптимізації.
4. Задачі математичного програмування.

→ Ключові терміни розділу

▼ Функція мети	▼ Мінімум функції
▼ Точка глобального мінімуму	▼ Умовний екстремум
▼ Точка локального мінімуму	▼ Безумовний екстремум
▼ Функція Лагранжа	▼ Градієнт
▼ Регулярна функція Лагранжа	▼ Матриця Гессе
▼ Функціональні обмеження	▼ Прямі обмеження
▼ Задачі математичного програмування	▼ Задачі квадратичного програмування

1.1. Загальні положення

Перші задачі геометричного змісту на відшукання найменших або найбільших значень виникли ще у давні часи. Розвиток промисловості, науки у XVII–XVIII ст. зумовив до потреби у дослідженні складніших задач на екстремум, а також сприяв виникненню варіаційного числення. Лише у XX ст. стали актуальними задачі оптимального керування (у тому або іншому сенсі) різними процесами фізики, техніки, економіки тощо.

Математичною мовою такі задачі можна записати як задачі визначення екстремуму (максимуму або мінімуму) функції або функціонала на деякій множині X :

$$f(x) \rightarrow \min, \quad x \in X, \tag{1.1}$$

де $f(x)$ – функція мети; X – допустима множина. Довільний елемент $x \in X$ є допустимою точкою для задачі (1.1). Розглядатимемо скінченновимірні задачі оптимізації, тобто задачі, коли $X \subseteq R^n$.

Означення 1.1. Точку $x_* \in X$ називають:

1) точкою *глобального мінімуму* функції $f(x)$ на множині X , якщо

$$f(x_*) \leq f(x) \quad \forall x \in X ; \quad (1.2)$$

2) точкою *локального мінімуму* функції $f(x)$ на X , якщо $\exists \varepsilon > 0 :$

$$f(x_*) \leq f(x) \quad \forall x \in X \cap X_\varepsilon(x_*), \quad (1.3)$$

де $X_\varepsilon(x_*) = \{x : x \in R^n, \|x - x_*\| \leq \varepsilon\}$ – окіл точки x_* радіуса $\varepsilon > 0$ з центром у точці x_* . Якщо нерівність (1.2) або (1.3) для $x \neq x_*$ є строгою, то x_* – точка *строгого мінімуму* в глобальному або локальному значенні.

Глобальний розв'язок є водночас і локальним. Твердження навпаки буде неправильним. Вираз (1.2) можна записати у вигляді

$$f(x_*) = \min_{x \in X} f(x),$$

або

$$x_* = \arg \min_{x \in X} f(x),$$

тобто точка x_* реалізує величину $f_* = \min_{x \in X} f(x)$. Множину всіх точок глобального мінімуму $f(x)$ на X позначають так:

$$\operatorname{Arg} \min_{x \in X} f(x) = \left\{ x : x \in X, f(x) = f_* \right\}$$

Отже, $\arg \min_{x \in X} f(x)$ – деяка точка множини $\operatorname{Arg} \min_{x \in X} f(x)$.

За аналогією з задачею (1.1) можна розглядати задачу визначення максимуму функції $f(x)$ на множині X :

$$f(x) \rightarrow \max_{x \in X}. \quad (1.4)$$

Легко бачити, що задача (1.4) еквівалентна задачі

$$-f(x) \rightarrow \min_{x \in X},$$

у тому сенсі, що множини локальних, глобальних, строгих розв'язків першої і другої задач збігаються.

Задачі (1.1) та (1.4) є задачами на екстремум. Надалі розглянемо здебільшого задачі мінімізації (1.1). У разі розв'язування задачі (1.1) виникає питання про існування розв'язку. З огляду на це, нагадаємо результати математичного аналізу.

Теорема 1.1 (Теорема Вейєрштрасса). Нехай X – компакт у R^n , $f(x)$ – неперервна функція на X . Тоді точка глобального мінімуму функції $f(x)$ на X існує.

Надалі буде корисним дещо інший варіант цієї теореми.

Теорема 1.2. Нехай X – замкнута множина в R^n , $f(x)$ – неперервна функція на X , причому для деякого $x^0 \in X$ множина

$$N(x^0) = \{x \in X : f(x) \leq f(x^0)\}$$

обмежена, тоді точка глобального мінімуму $f(x)$ на X існує.

Задача (1.1) – це загальне формулювання задач оптимізації. Такі задачі можна класифікувати за декількома ознаками залежно від вигляду функції $f(x)$ і області X .

1.2. Задачі безумовної оптимізації

Задача (1.1) є задачею безумовної оптимізації, якщо $X \equiv R^n$, тобто

$$f(x) \rightarrow \min, \quad x \in R^n. \tag{1.5}$$

Під час дослідження будь-якого типу оптимізаційних задач важливі значення мають умови оптимальності (екстремуму). Розрізняють необхідні і достатні умови екстремуму. Коротко нагадаємо їх.

Уведемо позначення:

$f'(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right)^T$ – вектор первих частинних похідних,

градієнт функції $f(x)$ у точці $x \in R^n$;

$f''(x) = \left\{ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right\}_{i,j=1,n}$ – матриця других частинних похідних

(гесіан, матриця Гессе) функції $f(x)$ у точці $x \in R^n$.

Теорема 1.3. Нехай функція $f(x)$ диференційовна в точці $x_* \in R^n$.

Якщо x_* – локальний розв’язок задачі (1.5), то

$$f'(x_*) = 0. \quad (1.6)$$

Теорема 1.4. Нехай функція $f(x)$ двічі диференційовна в точці $x_* \in R^n$. Якщо x_* – локальний розв’язок задачі (1.5), то матриця $f''(x_*)$ невід’ємно визначена, тобто

$$(f''(x_*)h, h) \geq 0 \quad \forall h \in R^n. \quad (1.7)$$

Теорема 1.5. Нехай функція $f(x)$ двічі диференційовна в точці $x_* \in R^n$, $f'(x_*) = 0$, а матриця Гессе додатно визначена, тобто

$$(f''(x_*)h, h) > 0 \quad \forall h \in R^n, h \neq 0. \quad (1.8)$$

тоді x_* – строгий локальний розв’язок задачі (1.5).

У випадку $X = R$ умови (1.6) – (1.8) можна записати у вигляді:

$$f'(x_*) = 0; \quad f''(x_*) \geq 0 \quad f''(x_*) > 0.$$

У простих випадках теореми 1.3–1.5 дають змогу явно розв’язати задачу (1.5). Теорема 1.3 дає необхідні умови мінімуму першого порядку. Теореми 1.4, 1.5 – відповідно, необхідні та достатні умови мінімуму другого порядку. У першому випадку використано лише першу похідну, а в теоремах 1.4, 1.5 – другу похідну функції $f(x)$.

2.3. Задачі умовної оптимізації

Задачу (1.1) називають задачею умовної оптимізації, якщо $X \neq R^n$. У цьому випадку умови теорем 1.3 – 1.5 справджаються, якщо $x_* \in \text{int } X$, тобто x_* є внутрішня точка множини X . Для багатьох задач умовної оптимізації екстремум досягається на межі X і в цьому разі класичні результати аналізу не можна застосовувати. Задачі умовної оптимізації складніші, ніж задачі безумовної оптимізації. Розглянемо окремі класи задач умовної оптимізації.

Класична задача на умовний екстремум. У цьому випадку область X задано системою скінченної кількості рівнянь

$$X = \{x \in R^n : f_i(x) = 0, i = \overline{1, m}\}$$

і задачу записують так:

$$f(x) \rightarrow \min, \quad x \in R^n; \tag{1.9}$$

$$f_i(x) = 0, \quad i = \overline{1, m}.$$

У разі дослідження задачі (1.9) важливу роль відіграє функція Лагранжа

$$L(x, \lambda) = \sum_{i=0}^m \lambda_i f_i(x), \tag{1.10}$$

де $x \in R^n$, $f_0(x) = f(x)$; $\lambda = (\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m) \in R^{m+1}$ – множники Лагранжа. У цьому випадку виконується така теорема.

Теорема 1.6 (Правило множників Лагранжа). Нехай функції $f_i(x)$, $i = \overline{0, m}$ неперервно-диференційовні в деякому околі точки x_* . Якщо x_* – локальний розв’язок задачі (1.9), то існує вектор $\lambda^* = (\lambda_0^*, \lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*) \in R^{m+1}$, що не дорівнює нулю і такий, що

$$L'_x(x_*, \lambda^*) = \sum_{i=0}^m \lambda_i^* f'_i(x_*) = 0. \tag{1.11}$$

Якщо ж градієнти $f'_1(x_*) , \dots , f'_m(x_*)$ лінійно незалежні, то виконується умова регулярності і $\lambda_0^* \neq 0$.

Умова (1.11) означає, що вектори (градієнти) $f'_0(x_*) , \dots , f'_m(x_*)$ лінійно залежні. Будь-яка точка $x \in X$, що задовільняє при деякому векторі $\lambda^* = (\lambda_0^*, \lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*) \neq 0$ умову (1.11) і умови допустимості

$$f_i(x_*) = 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad (1.12)$$

є стаціонарною точкою задачі (1.9).

Стаціонарну точку визначають системою $n+m$ рівнянь (1.11), (1.12) з $n+m+1$ невідомим. Оскільки у випадку регулярності $\lambda_0^* \neq 0$, то можна прийняти $\lambda_0^* = 1$. Тому, розв'язуючи систему рівнянь (1.11), (1.12), достатньо розглянути лише два випадки: а) $\lambda_0^* = 0$, б) $\lambda_0^* = 1$ і тоді невідомих у системі буде $n+m$ і $n+m$ рівнянь. Якщо виконується умова регулярності, то замість функції Лагранжа розглядатимемо регулярну функцію Лагранжа:

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x). \quad (1.13)$$

Як і у випадку безумовної оптимізації, стаціонарні точки не обов'язково будуть розв'язком сформульованої задачі. Тут також є необхідні і достатні умови оптимальності другого порядку.

Теорема 1.7. Нехай функції $f_i(x)$, $i = \overline{0, m}$ двічі диференційовні в точці $x_* \in R^n$, яка задовільняє (1.12), і неперервно-диференційовані в деякому околі цієї точки, причому $f'_i(x_*)$, $i = \overline{1, m}$ лінійно незалежні. Якщо x_* – локальний розв'язок задачі (1.9), то $(L''_{xx}(x_*, \lambda^*)h, h) \geq 0$ при довільному λ^* , що задовільняє (1.11) і ненульових $h \in R^n$ таких, що

$$(f'_i(x_*), h) = 0, \quad i = \overline{1, m}. \quad (1.14)$$

Теорема 1.8. Нехай функції $f_i(x)$, $i = \overline{0, m}$ двічі диференційовні в точці $x_* \in R^n$, яка задовольняє (1.12), і для певного $\lambda^* \in R^n$ виконується умова (1.11), крім того, $(L''_{xx}(x_*, \lambda^*)h, h) > 0$ при всіх ненульових $h \in R^n$, що задовольняють (1.14). Тоді x_* строгий локальний розв'язок задачі (1.9).

У простіших випадках теореми 1.6 – 1.8 дають змогу розв'язати задачу (1.9) в явному вигляді.

1.4. Задачі математичного програмування.

Важливий клас задач умовної оптимізації становлять задачі математичного програмування – розділу прикладної математики, в якому вивчають задачі пошуку екстремуму функції $f(x)$ на множині $X \subset R^n$ і розробляють методи їхнього розв'язування. Це задачі типу (1.1), в яких допустима множина має вигляд:

$$X = \{x \in X_0 : f_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m}; f_i(x) = 0, i = \overline{m+1, s}\}. \quad (1.15)$$

Задачу математичного програмування можна записати так:

$$f(x) \rightarrow \min, \quad (1.16)$$

$$f_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m}, \quad (1.17)$$

$$f_i(x) = 0, i = \overline{m+1, s}, x \in X_0. \quad (1.18)$$

Умови типу (1.17) називають обмеженнями-нерівностями, типу (1.18) – обмеженнями-рівностями. Ці типи умов називають функціональними обмеженнями. Умови $x \in X_0$ – прямі обмеження. В (1.15) окремих обмежень може не бути ($m = 0; m = s; s = 0; X_0 \equiv R^n, \dots$). Отже, класична задача на умовний екстремум є частинним випадком задачі математичного програмування.

Зазвичай, множину X_0 вибирають простої структури, наприклад, $X_0 = \{x \in R^n : a_j \leq x_j \leq b_j, j = \overline{1, n}\}$; причому не вилучають $a_j = -\infty$, $b_j = +\infty$, або $X_0 = R_+^n$ та ін. На практиці розгля-

дають окремі підкласи задач математичного програмування. Такими є задачі:

- 1) **лінійного програмування, дискретної оптимізації** (про них мова йшла у частині 1);
- 2) **опуклого програмування.** Задачу (1.16) – (1.18) називають задачею опуклого програмування, якщо X_0 – опукла множина; $f(x)$, $f_i(x)$, $i = \overline{1, m}$ – опуклі функції; $f_i(x)$, $i = \overline{m+1, s}$ – лінійні функції. В такому випадку допустима множина задачі (1.16) – (1.18) опукла;
- 3) **квадратичного програмування** – це задачі мінімізації за лінійних обмежень квадратичної функції вигляду

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

де A – симетрична невід'ємно визначена матриця розмірності $n \times n$; $b \in R^n$.

?

Запитання для самоперевірки

1. Дайте визначення точки локального мінімуму.
2. Дайте визначення точки глобального мінімуму.
3. Дайте постановку задачі на екстремум.
4. Запишіть необхідні умови екстремуму.
5. Запишіть достатні умови екстремуму.
6. Сформулюйте правило множників Лагранжа для задачі на умовний екстремум.
7. Запишіть задачу математичного програмування.
8. Запишіть задачу квадратичного програмування.
9. Дайте визначення для задачі опуклого програмування.

Завдання для самостійної роботи

1. Визначити радіус основи і висоту циліндра об'ємом 1 м^3 і найменшою площею повної поверхні.

2. Визначити радіус основи і висоту циліндра з площею повної поверхні 1 м^2 і найбільшим об'ємом.
3. Визначити найменший периметр прямокутника площею 10 м^2 .
4. Визначити найбільшу площину прямокутника з периметром 16 м.

2. МІНІМІЗАЦІЯ ФУНКЦІЙ ОДНІЄЇ ЗМІННОЇ

■ План викладу матеріалу

1. Загальні положення.
2. Метод поділу відрізка навпіл.
3. Метод золотого поділу відрізка.
4. Оптимальні методи пошуку екстремуму.
5. Метод парабол.
6. Числові методи мінімізації багатоекстремальних функцій.
7. Метод простого перебiranня.
8. Метод послідовного перебiranня.
9. Метод ламаних.
10. Пошук початкового локалізованого відрізка.

► Ключові терміни розділу

- | | |
|--------------------------------------|--|
| ✓ <i>Мінімізаційна послідовність</i> | ✓ <i>Гарантована похибка</i> |
| ✓ <i>Збіжність послідовності</i> | ✓ <i>Оптимальні методи</i> |
| ✓ <i>Стационарні точки</i> | ✓ ε – <i>оптимальні методи</i> |
| ✓ <i>Золотий поділ відрізка</i> | ✓ <i>Числа Фіbonacci</i> |
| ✓ <i>Метод дихотомії</i> | ✓ <i>Нижня межа</i> |
| ✓ <i>Стійкість методу</i> | ✓ <i>Локалізований відрізок</i> |

2.1 Загальні положення

На перший погляд задачі мінімізації функції однієї змінної здаються простими. Однак методи диференціального числення мають обмежене застосування і не завжди зручні для реалізації. Задача мінімізації функції однієї змінної має такий вигляд:

$$f(x) \rightarrow \min, \quad x \in X \subseteq R$$

де $X = [a, b]$, $X = (a, b)$, $X = (a, b]$, $X = [a, b)$, $-\infty \leq a < b \leq +\infty$.

Залежно від функції $f(x)$ і множини X множина розв'язків $X_* = \operatorname{Arg} \min_X f(x)$ може містити одну, декілька або навіть і безмежну кількість точок. Можливі випадки, коли $X_* = \emptyset$.

Приклад 2.1. Нехай

$$f(x) = \sin^2(\pi/x) \text{ при } x \neq 0 \text{ і } f(0) = 0.$$

На множині $X = [1, 2]$ мінімальне значення $f(x)$ дорівнює 0,

$X_* = \{1\}$ – одна точка. Якщо $X = \left[\frac{1}{3}, 1 \right]$, то $X_* = \left\{ \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, 1 \right\}$ – три точки, у випадку $X = (0, 1]$, $X_* = \{x : x = \frac{1}{n}, n = 1, 2, \dots\}$ – зчисленна множина точок, а для $X = [2, +\infty)$, $X_* = \emptyset$, $\inf_X f(x) = 0$,

$$\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 0.$$

Зазначимо таке: якщо $X_* \neq \emptyset$, то нижня межа і \min функції $f(x)$ збігаються $\inf_{x \in X} f(x) = \min_{x \in X} f(x)$. У цьому випадку говорять, що $f(x)$ на X досягає своєї нижньої межі, $\inf_{x \in X} f(x) = f_*$ завжди існує, а $\min_{x \in X} f(x)$ не завжди має сенс.

Означення 2.1. Послідовність $\{x_k\} \in X$ називають

мінімізаційною для функції $f(x)$ на множині X , якщо

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k) = \inf_{x \in X} f(x) = f_*.$$

Означення 2.2. Послідовність $\{x_k\}$ збігається до непорожньої множини X , якщо $\lim_{k \rightarrow \infty} \rho(x_k, X) = 0$, де $\rho(x_k, X) = \inf_{x \in X} |x_k - x|$ – відстань від x_k до множини X .

Якщо $X_* \neq \emptyset$, то завжди існує мінімізаційна послідовність, яка збігається до X_* . Однак не кожна мінімізаційна послідовність $\{x_k\}$ буде збігатися до $X_* \neq \emptyset$.

Приклад 2.2 Нехай

$$f(x) = \frac{x^2}{1+x^4} \rightarrow \min_R$$

У нашому випадку $x_* = 0$, $f(0) = 0$. Послідовність $x_k = k$ для $k=1,2,\dots$ є мінімізаційною

$$f(x_k) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0$$

хоча $\rho(x_k, x_*) = k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} \infty$.

У разі розв'язування задач мінімізації на множині X розрізнятимемо два типи задач:

1) необхідно визначити $f_* = \inf_X f(x)$;

2) потрібно визначити f_* і точку $x_* = \arg \min_X f(x)$.

У першому випадку можливий варіант $X_* = \emptyset$, у другому – обов’язково $X_* \neq \emptyset$. Отримати точний розв’язок задачі першого, або другого типів у загальному випадку практично неможливо. Тому в першому випадку за f_* беруть для мінімізаційної послідовності $\{x_k\}$ деяке значення $f(x_k)$ при достатньо великому k . Для задач другого типу необхідно побудувати мінімізаційну послідовність $\{x_k\}$, яка збігається до X_* , і за наближення до f_* і x_* взяти, відповідно, $f(x_k)$ і x_k при достатньо великому k . Під час розв’язування задач другого типу в окремих випадках треба виконувати додаткові дослідження.

У випадку розв’язування задачі (2.1) можна використовувати класичний метод. Нехай функція $f(x)$ кусковогладка на $[a,b]$, тобто може існувати лише скінчenna кількість точок, де $f(x)$ має розрив першого роду, або неперервна, однак похідна у точці не існує. У цьому разі точкою екстремуму функції $f(x)$ на $[a,b]$ може бути лише та точка, для якої виконується одна з умов:

1. $f(x)$ має розрив першого роду;
2. $f(x)$ неперервна, однак похідна не існує;
3. $f'(x) = 0$;
4. x - точка на кінці відрізка.

Ці точки прийнято називати підозрілими на екстремум. На жаль, класичний метод має доволі вузьке застосування. Обчислення похідної $f'(x)$ в окремих випадках може бути

трудомістким, або $f'(x)$ взагалі неможливо обчислити.

Крім того, розв'язування рівняння $f'(x)=0$ може бути не менш складним, ніж вихідна задача. Тому на практиці використовують методи, які дають змогу безпосередньо знайти мінімум $f(x)$. Для цього треба зробити обмеження на класи функцій.

Означення 2.3. Функція $f(x)$ є *унімодальною* на проміжку $X = [a,b]$, якщо існують такі числа $a \leq \alpha \leq \beta \leq b$, що:

1. $f(x)$ строго монотонно спадає при $a \leq x \leq \alpha$ ($\alpha < b$);
2. $f(x)$ строго монотонно зростає при $\beta \leq x \leq b$ ($\beta < b$);
3. $f(x) = \min_{x \in [a,b]} f(x)$ при $\alpha \leq x \leq \beta$, тобто $X_* = [\alpha, \beta]$.

Випадки, коли один з відрізків $[a,\alpha]$, $[\alpha,\beta]$, $[\beta,b]$ або два одночасно вироджуються в точку, можливі. Якщо $\alpha = \beta$, то $f(x)$ є строго унімодальною на $[a,b]$.

Означення 2.4. Відрізок $[\bar{a}, \bar{b}]$ є *локалізованим*, якщо $[\bar{a}, \bar{b}] \cap X_* \neq \emptyset$ і значення $f(x)$ обчислено не більше, ніж в одній точці $\bar{x} \in (\bar{a}, \bar{b})$.

2.2. Метод поділу відрізка навпіл

Простішим методом мінімізації функції $f(x)$, $x \in [a,b]$ є поділ відрізка навпіл. Пошук мінімуму розпочинають з вибору двох точок

$$x_1 = \frac{a+b-\delta}{2}; \quad x_2 = \frac{a+b+\delta}{2} \text{ для } \delta < b-a.$$

Величину δ вибираємо самі, вона повинна задовольняти дві умови:

по-перше, бути достатньо малою, щоб новий локалізований відрізок отримати якомога меншим;

по-друге, бути достатньо великою, щоб можна розрізнати значення функції у двох точках x_1, x_2 .

Точки x_1, x_2 розміщені симетрично до центра відрізка $[a,b]$ і при малих δ ділять його майже навпіл, від чого походить назва методу. Після вибору точок x_1, x_2 обчислюємо значення $f(x_1)$, $f(x_2)$ і порівнюємо між собою. Якщо $f(x_1) \leq f(x_2)$, то приймаємо $a_1 = a$, $b_1 = x_2$; якщо $f(x_1) > f(x_2)$, то $a_1 = x_1$, $b_1 = b$. Оскільки $f(x)$ унімодальна функція на $[a,b]$, то виконується умова $[a_1, b_1] \cap X_* \neq \emptyset$. Відрізок $[a_1, b_1]$ є локалізованим і його довжина дорівнює $b_1 - a_1 = (b - a - \delta)/2 + \delta$. Аналогічну процедуру виконуємо з відрізком $[a_1, b_1]$. Після $k-1$ -го кроку одержимо локалізований відрізок $[a_{k-1}, b_{k-1}]$, для якого виконуються умови:

$$[a_{k-1}, b_{k-1}] \cap X_* \neq \emptyset, \quad b_{k-1} - a_{k-1} = \frac{b - a - \delta}{2^{k-1}} + \delta > \delta, \quad (2.1)$$

$$(k \geq 2)$$

На k -му кроці вибираємо дві нові точки

$$x_{2k-1} = \frac{a_{k-1} + b_{k-1} - \delta}{2}, x_{2k} = \frac{a_{k-1} + b_{k-1} + \delta}{2}. \quad (2.2)$$

Обчислюємо $f(x_{2k-1})$, $f(x_{2k})$ і знаходимо локалізований відрізок $[a_k, b_k]$ аналогічно до попереднього. Довжина цього відрізка становитиме

$$b_k - a_k = \frac{b - a - \delta}{2^k} + \delta \text{ і } [a_k, b_k] \cap X_* \neq \emptyset \quad (2.3)$$

Якщо кількість обчислень функції не обмежена, то процес поділу продовжуємо доти, доки не буде виконана умова $b_k - a_k < \varepsilon$, де $\varepsilon > \delta$ – задана точність. У цьому разі спрвджується умова $\frac{b - a - \delta}{2^k} + \delta < \varepsilon$ і для досягнення цієї оцінки виконано $2k \geq 2 \log_2((b - a - \delta)/(\varepsilon - \delta))$ обчислень функції $f(x)$. За наближення до розв'язку \bar{x}_k можна взяти точку x_{2k-1} , якщо $f(x_{2k-1}) \leq f(x_{2k})$, або точку x_{2k} , якщо $f(x_{2k-1}) > f(x_{2k})$. За такого вибору наближення до x_* буде допущена похибка

$$\rho(\bar{x}_k, x_*) \leq \max\{b_k - \bar{x}_k, \bar{x}_k - a_k\} = (b - a - \delta)/2^k$$

Якщо не домагатися, щоб наближення для f_* обчислювати безпосередньо в точці, яка є наближенням для x_* , то можна прийняти $\bar{x}_k = \frac{a_k + b_k}{2}$, тоді :

$$\rho(\bar{x}_k, x_*) \leq \frac{b_k - a_k}{2} = \frac{b - a - \delta}{2^{k+1}} + \frac{\delta}{2}$$

Звичайно, можна було б обчислити $f(\bar{x}_k)$ і прийняти $f(\bar{x}_k) \equiv f_*$.

Приклад 2.3. Знайти розв'язок задачі

$$f(x) = x^2 - 2x + 5 \longrightarrow \min_{[0,3]} \quad (2.4)$$

методом поділу відрізка навпіл з точністю $\varepsilon=0.5$

З аналітичного вигляду функції випливає, що $f(x)$ є унімодальною на заданому відрізку, а розв'язок поставленої задачі має вигляд $x^* = 1$, $f(x^*) = 4$.

Для застосування методу покладемо $\delta = 0,2$.

Ітерація 1; $k = 1$, $a_1 = 0$, $b_1 = 3$. Знайдемо точки x_1 та x_2 за формулою 2.2 при $k=1$

$$x_1 = \frac{a_1 + b_1 - \delta}{2} = 1,4, \quad x_2 = \frac{a_1 + b_1 + \delta}{2} = 1,6.$$

Обчислимо $f(x_1)$ та $f(x_2)$:

$$f(x_1) = 1,4^2 - 2 \times 1,4 + 5 = 4,16, \quad f(x_2) = 1,6^2 - 2 \times 1,6 + 5 = 4,36.$$

Через те, що $f(x_1) < f(x_2)$, то $a_2 = a_1 = 0$, $b_2 = x_2 = 1,6$.

Оскільки $b_2 - a_2 = 1,6 > \varepsilon$, то продовжуємо обчислення.

Ітерація 2: $k = 2$, $a_2 = 0$, $b_2 = 1,6$. Знайдемо точки x_3 та x_4 за формулою 2.2 при $k=2$

$$x_3 = \frac{a_2 + b_2 - \delta}{2} = 0,7, \quad x_4 = \frac{a_2 + b_2 + \delta}{2} = 0,9.$$

Обчислимо $f(x_3)$ та $f(x_4)$:

$$f(x_3) = 0,7^2 - 2 \times 0,7 + 5 = 4,09,$$

$$f(x_4) = 0,9^2 - 2 \times 0,9 + 5 = 4,01.$$

Оскільки $4,09 > 4,01$, то $a_3 = 0,7$; $b_3 = 1,6$. При цьому $b_3 - a_3 = 0,9 > \varepsilon$ і обчислення продовжуємо. Результати наступних обчислень подано у табл. 2.1.

Після чотирьох ітерацій ми отримаємо локалізуючий відрізок $[a_5, b_5] = [0,875, 1,25]$. При цьому $b_5 - a_5 = 1,25 - 0,875 = 0,375 < \varepsilon$. Отриманий нами наблизений розв'язок $\bar{x}^* = 1,075$, $f(\bar{x}^*) = 4,005$. Гарантована похибка отриманого розв'язку не перевищує величини

$$\left| \bar{x}^* - \bar{x} \right| = \max\{1,25 - 1,075, 1,075 - 0,875\} = 0,2.$$

В окремих випадках за наближений розв'язок можна вибрати величину $\tilde{x}^* = \frac{b_5 + a_5}{2} = \frac{1,25 + 0,875}{2} = 1,0125$. При цьому додатково необхідно обчислити значення функції:

$$f(1,0125) = 1,0125^2 - 2 \times 1,0125 + 5 = 1,0252 - 2,025 + 5 = 4,0002.$$

Таблиця 2.1

	a_k	b_k	x_{2k-1}	x_{2k}	$f(x_{2k-1})$	$f(x_{2k})$	$b_k - a_k$
	0	3	1,4	1,6	4,16	4,36	3
	0	1,6	0,7	0,9	4,09	4,01	1,6
	0,7	1,6	1,05	1,25	4,0025	4,06	0,9
	0,7	1,25	0,875	1,075	4,0121	4,005	0,55

Якщо врахувати, що на практиці трапляються випадки, коли обчислення $f(x)$ трудомістке або пов'язане з дорогим експериментом, то доцільно за заданої кількості обчислень отримати результат з найліпшою точністю. Із зазначеного вище за допомогою $2k$ обчислень функції можна визначити точку мінімуму унімодальної функції з точністю $\varepsilon = \frac{(b-a-\delta)}{2^k}$. Виникає запитання, чи є кращі методи? Відповідь позитивна.

Примітка. Розглянутий нами метод у літературі іноді називають **методом дихотомії**. Назву **метод поділу відрізка на пів** використовують для іншого алгоритму.

Нехай $f(x) \in C^1[a, b]$ і унімодальна. Розглянемо задачу

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in [a_1, b_1]}.$$

На першому кроці вибираємо точку $x_1 = \frac{a_1 + b_1}{2}$ й

обчислюємо значення похідної $f'(x_1)$. У випадку $f'(x_1) = 0$ точка x_1 є розв'язком. Якщо $f'(x_1) > 0$, то визначаємо новий локалізований відрізок $[a_2, b_2] = [a_1, x_1]$, а у випадку $f'(x_1) < 0$ – $[a_2, b_2] = [x_1, b_1]$. Процес продовжуємо доти, доки не виконається умова $b_n - a_n < \varepsilon$, або $f'(x_k) = 0$. У першому випадку за розв'язок приймаємо точку $\bar{x}_n = (a_n + b_n)/2$, у другому – точку x_k . На практиці умову зупинки алгоритму можна змінити.

2.3. Метод золотого поділу відрізка

Означення 2.5. Золотим поділом відрізка на дві неоднакові частини називають поділ, за якого відношення довжини всього відрізка до довжини довшої його частини дорівнює відношенню довжини довшої частини відрізка до довжини його коротшої частини.

У випадку відрізка одиничної довжини

$$1/\tau = \tau/(1-\tau),$$

звідси $\tau^2 = 1 - \tau$ і $\tau_{1,2} = (-1 \pm \sqrt{5})/2$.

Отже, довший відрізок має довжину

$$\tau = \frac{\sqrt{5} - 1}{2},$$

а коротший

$$\tau_1 = 1 - \tau = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}.$$

У випадку довільного відрізка $[a, b]$ точками золотого поділу

ϵ

$$x_1 = a + \frac{3 - \sqrt{5}}{2}(b - a), x_2 = a + \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(b - a) \quad (2.5)$$

Виявляється, що точки x_1, x_2 – це точки золотого поділу для відрізків $[a, x_2]$ і $[x_1, b]$. Використовуючи цю властивість точок золотого поділу, можна запропонувати для розв'язування задачі (1.1) метод золотого поділу відрізка. Алгоритм цього методу такий.

Приймемо $a_1 = a$, $b_1 = b$. Виберемо точки

$$x_1 = a_1 + \frac{3 - \sqrt{5}}{2}(b_1 - a_1); x_2 = a_1 + b_1 - x_1 = a_1 + \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(b_1 - a_1).$$

Обчислимо значення $f(x_1), f(x_2)$. Якщо $f(x_1) \leq f(x_2)$, то приймемо $a_2 = a_1$, $b_2 = x_2$, $\bar{x}_2 = x_1$, в іншому

випадку ($f(x_1) > f(x_2)$) $a_2 = x_1, b_2 = b_1, \bar{x}_2 = x_2$. Побудований відрізок $[a_2, b_2]$ є локалізованим

$$[a_2, b_2] \cap X_* \neq \emptyset, \quad \bar{x}_2 \in \text{int}[a_2, b_2],$$

$$b_2 - a_2 = x_2 - a_1 = b - x_1 = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(b - a)$$

і відомо значення $f(\bar{x}_2)$. Нехай уже визначено точки x_1, \dots, x_{k-1} , локалізований відрізок $[a_{k-1}, b_{k-1}]$, обчислено відповідні значення функції $f(x_1), \dots, f(x_{k-1})$. У цьому випадку

$$[a_{k-1}, b_{k-1}] \cap X_* \neq \emptyset, \quad b_{k-1} - a_{k-1} = (b - a) \left(\frac{\sqrt{5} - 1}{2} \right)^{k-2},$$

відома точка \bar{x}_{k-1} , яка виконує золотий поділ відрізка $[a_{k-1}, b_{k-1}]$, і обчислено значення мінімізаційної функції в цій точці: $f(\bar{x}_{k-1}) = \min_{i=1, \dots, k-1} f(x_i)$. За іншу точку вибираємо другу точку золотого поділу відрізка $[a_{k-1}, b_{k-1}]$, тобто точку $x_k = a_{k-1} + b_{k-1} - \bar{x}_{k-1}$.

У цій точці обчислюємо $f(x_k)$ і визначаємо локалізований відрізок $[a_k, b_k]$, а саме (вважатимемо, що $\bar{x}_{k-1} < x_k$) у випадку $f(\bar{x}_{k-1}) \leq f(x_k)$ приймемо $a_k = a_{k-1}, b_k = x_k, \bar{x}_k = \bar{x}_{k-1}$, а у випадку $f(x_k) < f(\bar{x}_{k-1})$ – $a_k = \bar{x}_{k-1}, b_k = b_{k-1}, \bar{x}_k = x_k$ (випадок

$\bar{x}_{k-1} > x_k$ розглядається аналогічно). Новий відрізок $[a_k, b_k]$ є локалізований

$$[a_k, b_k] \cap X_* \neq \emptyset, \quad b_k - a_k = \left(\frac{\sqrt{5} - 1}{2} \right)^{k-1} (b - a).$$

Точка \bar{x}_k – це точка золотого поділу відрізка $[a_k, b_k]$ і в цій точці обчислено значення функції $f(\bar{x}_k) = \min_{i=1,k} f(x_i)$. Якщо кількість обчислень функції $f(x)$ не обмежена, то цей процес можна продовжити доти, доки не виконається нерівність $b_k - a_k < \varepsilon$, де ε – задана точність обчислень. Якщо кількість обчислень функції задана і дорівнює n , то після отримання локалізованого відрізка $[a_n, b_n]$ обчислення припиняємо і за розв'язок задачі другого типу беремо \bar{x}_n , $f(\bar{x}_n)$; $f(\bar{x}_n)$ – наближення до $f_* = \min_{x \in [a, b]} f(x)$, а точка \bar{x}_n – наближення до множини X_* з похибкою

$$\rho(\bar{x}_n, X_*) \leq \max(\bar{x}_n - a_n, b_n - \bar{x}_n) = \frac{1}{2}(\sqrt{5} - 1)(b_n - a_n) =$$

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

Приклад 2.4. Знайти розв'язок задачі (2.4) методом золотого поділу відрізка.

➤У даному випадку

$$a_1 = 0, \quad b_1 = 3, \quad \tau = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} = \frac{3 - 2,236}{2} = 0,382; \quad 1 - \tau = 0,618.$$

I ітерація: k=1 і за формулою (2.5) обчислюємо x_1 та x_2 і значення функції у цих точках:

$$x_1 = a_1 + \tau \times (b_1 - a_1) = 0 + 0,382 \times 3 = 1,146;$$

$$x_2 = b_1 - (x_1 - a_1) = 3 - 1,146 = 1,854;$$

$$f(x_1) = 1,146^2 - 2 \times 1,146 + 5 = 1,314 - 2,292 + 5 = 4,022,$$

$$f(x_2) = 1,854^2 - 2 \times 1,854 + 5 = 3,438 - 3,708 + 5 = 4,730.$$

Оскільки $4,73 > 4,022$ то новий локалізуючий відрізок буде $[a_2; b_2] = [0; 1,854]$ з внутрішньою точкою $\bar{x}_2 = 1,146$ в якій значення функції уже обчислено. У даному випадку $b_2 - a_2 = 1,854 > \varepsilon$. Обчислення продовжуємо.

II ітерація: k=2, обчислюємо точку

$$x_3 = b_2 - (\bar{x}_2 - a_2) = 1,854 - (1,146 - 0) = 0,708 \text{ і}$$

$$f(x_3) = 0,708^2 - 2 \times 0,708 + 5 = 0,503 - 1,416 + 5 = 4,087$$

Оскільки $4,087 > 4,022$, то новим локалізуючим відрізком буде $[a_3, b_3] = [0,708; 1,854]$ із внутрішньою точкою $\bar{x}_3 = 1,146$ в якій значення функції відоме $f(\bar{x}_3) = 4,022$. Оскільки

$b_3 - a_3 = 1,146 > \varepsilon$, то обчислення продовжуємо. Результати наступних ітерацій записано у табл. 2.2.

Після четвертої ітерації отримаємо локалізуючий відрізок

$$[a_5; b_5] = [0,708; 1,146] \text{ і точку } \bar{x}_5 = 0,978 \text{ в якій } f(\bar{x}_5) = 4,0005.$$

У даному випадку $b_5 - a_5 = 0,438 < \varepsilon$. Отже, як і у прикладі 2.3 покладаємо $\bar{x}_* = 0,987 \cong x_*$, $f(\bar{x}_*) = 4.0005$. Гарантована похибка рівна

$$\max\{1,146 - 0,978; 0,978 - 0,708\} = 0,270.$$

Якщо врахувати оцінку A_n і аналогічну оцінку в методі поділу відрізка навпіл

Таблиця 2.2

k	a_k	b_k	x_k	x_{k+1}	$f(x_k)$	$f(x_{k+\frac{1}{2}})$	B_n
1	0	3	1146	1854	4,022	4,730	1,146
2	0	1,854	0,708	1,146	4,087	4,022	1,146
3	0,708	1,854	1,146	1,416	4,022	4,173	1,146
4	0,708	1,416	0,978	1,146	4,0005	4,022	0,978

$$\rho(\bar{x}_n, X_*) \leq 2^{-\frac{n}{2}}(b-a-\delta) < 2^{-\frac{n}{2}}(b-a) = B_n,$$

то отримаємо

$$A_n / B_n = (2\sqrt{2} / (\sqrt{5} + 1))^n \approx (0,87...)^n.$$

Отже, навіть для малих n метод золотого поділу ефективніший, у сенсі кількості обчислень, ніж метод поділу відрізка навпів. Недоліком методу золотого поділу в запропонованому вигляді є його нестійкість. Розглянемо числову реалізацію методу. Обов'язково число $\sqrt{5}$ буде задано наближено, а це зумовить до

наближеного обчислення точок $x_1 = a + \frac{3 - \sqrt{5}}{2}(b - a)$,

$x_2 = a + b - x_1$. Розглянемо як ця похибка впливатиме на результат наступних кроків. Уведемо позначення $\Delta_n = b_n - a_n$, тоді маємо різницеве рівняння

$$\Delta_{n-2} = \Delta_n + \Delta_{n-1}, \quad n = 3, 4, \dots \quad (2.6)$$

з початковими умовами

$$\Delta_1 = b_1 - a_1, \quad \Delta_2 = b_2 - a_2.$$

Розв'язок (2.6) шукатимемо у вигляді $\Delta_n = \tau^n$, для визначення τ маємо характеристичне рівняння

$$\tau^2 + \tau = 1 \quad (2.7)$$

Лінійно незалежними частинними розв'язками рівняння (2.6) будуть τ_1^n, τ_2^n $n = 1, 2, \dots$, де $\tau_1 = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}$, $\tau_2 = -\frac{\sqrt{5} + 1}{2}$ – корені рівняння (2.7). Довільний розв'язок рівняння (2.6) можна записати у вигляді:

$$\Delta_n = C_1 \tau_1^n + C_2 \tau_2^n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.8)$$

Сталі C_1, C_2 можна визначити з початкових умов:

$$C_1 \tau_1 + C_2 \tau_2 = \Delta_1 = b_1 - a_1 = b - a,$$

$$C_1 \tau_1^2 + C_2 \tau_2^2 = \Delta_2 = b_2 - a_2 = (b - a) \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \quad (2.9)$$

У разі точного розв'язування системи (2.9):

$$C_1 = \frac{2(b - a)}{(\sqrt{5} - 1)}, \quad C_2 = 0,$$

тоді $\Delta_n = \tau_1^{n-1}(b - a)$. Однак на практиці замість Δ_2 у системі (2.9) беремо наближене значення $\bar{\Delta}_2 = \Delta_2 + \delta$ і замість (2.8) з точними значеннями $C_1, C_2 = 0$ отримаємо

$$\bar{\Delta}_n = \bar{C}_1 \tau_1^n + \bar{C}_2 \tau_2^n = \bar{C}_1 \tau_1^n + \delta_2 \tau_2^n,$$

де

$$\bar{C}_1 = C_1 + \delta_1, \quad \bar{C}_2 = \delta_2.$$

Оскільки $|\tau_2| = 1,6 \dots > 1$, то похибка становитиме

$$\left| \Delta_n - \bar{\Delta}_n \right| = \left| \delta_1 \tau_1^n + \delta_2 \tau_2^n \right| \leq \left| \delta_2 \tau_2^n \right|$$

і зі збільшенням n зростатиме доволі швидко. Отже, уже для малих n точки a_n, b_n, \bar{x}_n відрізнятимуться від теоретичних, які можна отримати лише внаслідок точних обчислень. Практичні підрахунки також підтвердили нестійкість методу. Цей недолік можна легко усунути. Нехай маємо локалізований відрізок $[a_k, b_k]$ і внутрішню точку \bar{x}_k із обчисленним значенням $f(\bar{x}_k)$. Знаходимо точки золотого поділу відрізка $[a_k, b_k]$

$$x'_{k+1} = a_k + \frac{3-\sqrt{5}}{2}(b_k - a_k),$$

$$x''_{k+1} = a_k + \frac{\sqrt{5}-1}{2}(b_k - a_k)$$

Точку, яка є далі від точки \bar{x}_k , вибираємо за x_{k+1} . В іншому алгоритм незмінний. За такої модифікації метод втрачає симетричність і красу в обчисленні, однак зберігає стійкість і повністю відповідає теоретичним висновкам. Метод золотого поділу належить до симетричних методів. Використовуючи цю ідею, можна будувати й інші симетричні методи, але як і в методі золотого поділу, їх потрібно досліджувати на стійкість.

2.4. Оптимальні методи пошуку екстремуму

Після ознайомлення з методами поділу відрізка навпіл і золотого поділу можемо вирішувати питання про побудову опти-

мальних методів, тобто таких, які дають змогу отримати результат із заданою (гарантованою) точністю за мінімальних обчислювальних затрат. На етапі вибору алгоритму відома інформація про мінімізаційну функцію, тобто $f(x) \in F$, де F – деякий клас функцій. Обчислювач попередньо досліджує функцію, визначає наявність важливих властивостей функції: унімодальність, опуклість, обмеженість тощо, а іноді дає кількісні оцінки. Далі потрібно обмежитись певним класом алгоритмів A , з якого вибиратимемо оптимальний. Нехай $\Delta(f, \alpha)$ – похибка розв'язку розглядуваної задачі мінімізації для функції $f(x) \in F$ методом $\alpha \in A$. Розв'язуючи тим самим методом задачу мінімізації для різних функцій із класу F , матимемо різні похибки. Для одних функцій така похибка може дорівнювати нулю, а для інших – бути значною. У разі оцінки методу треба враховувати його гарантовану похибку.

Означення 2.6. Величину $\delta(\alpha) = \sup_f \Delta(f, \alpha)$ називають

гарантованою похибкою методу $\alpha \in A$ на класі функцій F . Метод α_1 кращим від методу α_2 на класі функцій F , якщо $\delta(\alpha_1) < \delta(\alpha_2)$.

Означення 2.7. Метод $p_* \in A$ називають оптимальним на класі F , якщо $\delta(p_*) = \inf_p \delta(p) = \delta_*$, а величина δ_* – найкраща

гарантована похибка методу з A на класі функцій F . Якщо для деякого методу $p_\varepsilon \in A$ виконується нерівність $\delta(p_\varepsilon) \leq \delta_* + \varepsilon$, то метод p_ε назовемо ε -оптимальним на класі F .

Розглянемо клас унімодальних функцій $F(x)$. В опис кожного методу $\alpha \in A$ входить правило вибору точок x_1, x_2, \dots, x_n , що належать $[a, b]$, обчислення $f(x_1), \dots, f(x_n)$ для мінімізаційної функції $f(x) \in F$, виділення з цих точок \bar{x}_n , для якої $f(\bar{x}_n) = \min_i f(x_i)$, і визначення локалізованого відрізка, тобто визначення більших до \bar{x}_n точок ліворуч і праворуч. Застосувавши вибраний метод $\alpha \in A$ до конкретної функції $f(x) \in F$, отримаємо локалізований відрізок $[a_n, b_n]$, точку $\bar{x}_n \in [a_n, b_n]$ з обчисленим значенням $f(\bar{x}_n) = \min_{1 \leq i \leq n} f(x_i)$, у цьому разі $f(x) \geq f(\bar{x}_n)$ для всіх $x \in [a, b] \setminus [a_n, b_n]$ і $[a_n, b_n] \cap X_* \neq \emptyset$. За f_* вибираємо $f(\bar{x}_n)$, за x_* – \bar{x}_n , або $\frac{a_n + b_n}{2}$, тоді

$$\rho(\bar{x}_n, x_*) = \inf_{x \in X_*} |\bar{x}_n - x| \leq b_n - a_n = \Delta(f, \alpha).$$

Величина $\Delta(f, \alpha)$ є фактично гарантованою похибкою розв'язку задачі мінімізації функції $f(x) \in F$ методом $\alpha \in A$. Для визначення кращого методу потрібно уточнити правило вибору точок x_1, \dots, x_n . Залежно від вибору точок x_1, \dots, x_n розрізняють два типи методів, а саме:

- 1) пасивні методи;
- 2) послідовні методи.

У випадку пасивних методів усі точки x_1, x_2, \dots, x_n задають в апріорі і в процесі обчислень не змінюють. У випадку послідовного пошуку точки x_1, \dots, x_n вибирають послідовно, певними порціями і під час вибору наступної порції точок результати попередніх обчислень враховують (див. методи золотого поділу та поділу відрізка навпіл). Звичайно, пасивний метод можна вважати частинним випадком методу послідовного, коли в першій порції вибирають всі n точок.

Нехай F – клас унімодальних функцій і A - множина пасивних методів:

$$A = \{x_1, \dots, x_n : x_0 \stackrel{\text{def}}{=} a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq b = x_{n+1}\}.$$

Після обчислення значень $f(x_i)$, $i = \overline{1, n}$ визначаємо локалізований відрізок $[a_n, b_n]$ з внутрішньою точкою \bar{x}_n , тоді $f(\bar{x}_n) = \min_i f(x_i)$. У цьому випадку:

$$\Delta(f, \alpha) = \max_{i=1, n} (x_{i+1} - x_{i-1}), \quad f \in F, \alpha \in A.$$

Теорема 2.1. При $n = 2k - 1$ існує безліч оптимальних пасивних алгоритмів, а при $n = 2k$ оптимального пасивного алгоритму не існує, існує лише ε -оптимальний алгоритм.

➤ У випадку $n = 2k - 1$ приймаємо $x_{2i} = a + \frac{b-a}{k} i$, $i = \overline{1, k-1}$.

Точки x_{2i-1} , $i = \overline{1, k}$ виберемо так, щоб виконувались умови

$x_{2i-2} < x_{2i-1} < x_{2i}$ та $x_{2i+1} - x_{2i-1} \leq \frac{b-a}{k}$, $i = \overline{1, k-1}$. У цьому випадку

ку $\delta(\alpha) = \frac{b-a}{k}$. Покажемо, що кращого алгоритму побудувати не можна. Доведемо це від протилежного. Нехай такий алгоритм побудовано, у цьому разі

$$\max_{i=1, n} (x_{i+1} - x_{i-1}) < \frac{b-a}{k}.$$

Тоді

$$x_{2i} - x_{2(i-1)} < \frac{b-a}{k}; \quad i = \overline{1, k}; \quad \sum_{i=1}^k (x_{2i} - x_{2(i-1)}) < \frac{b-a}{k} \cdot k$$

або $b-a < b-a$, що суперечить зробленому припущеню. \blacktriangleleft

Розглянемо випадок $n = 2k$, тоді ε -оптимальним буде алгоритм

$$A = \{x_{2i} = a + \frac{b-a}{k+1}i, \quad x_{2i-1} = x_{2i} - \varepsilon, \quad i = 1, 2, \dots, k\}. \quad (2.10)$$

У цьому випадку $\delta_* = \frac{b-a}{k+1} = \inf \delta(\rho)$.

Доведення знову виконаємо від протилежного. Нехай існує такий алгоритм, для якого

$$\max_{i=1, n} (x_{i+1} - x_{i-1}) \leq \frac{b-a}{k+1},$$

тоді $\sum_{i=1}^k (x_{2i} - x_{2i-2}) \leq \frac{b-a}{k+1} k$.

$$\text{або } x_{2k} \leq a + k \frac{b-a}{k+1},$$

що суперечить зробленому припущенняю, оскільки

$$x_{2k+1} - x_{2k-1} = b - x_{2k} + x_{2k} - x_{2k-1} \geq \frac{b-a}{k+1} + \varepsilon. \quad \blacktriangleleft$$

Приклад 2.5. Знайти розв'язок задачі (2.4) з використанням пасивних оптимальних методів у випадку $n=4$ і $n=5$ точок в яких обчислюватимемо значення функції.

У випадку $n=4=2k$ покладемо $\varepsilon = 0.1$ і вибираємо $h=(b-a)/(k+1)=3/3=1$.

Тоді:

$$x_2 = 0 + 1 = 1, \quad x_4 = 0 + 2 \times 1 = 2,$$

$$x_1 = x_2 - \varepsilon = 1 - 0.1 = 0.9 \quad x_3 = x_4 - 0.1 = 1.9.$$

Значення функції у даних точках будуть:

$$f(0.9) = 4.01, f(1) = 4; f(1.9) = 4.81; f(2) = 5.$$

Оскільки $f(1) = \min_i \{f(x_i)\} = 4$, то покладаємо $\bar{x}_* = 1$, а локалізуючий відрізок становитиме $[0.9; 1.9]$. Легко бачити, що довжина локалізуючого відрізка у випадку довільної іншої функції не буде перевищувати $1.1 = 1 + \varepsilon$.

У випадку $n=5=2k+1$ покладаємо $h=3/(k+1)=1$, точки x_2, x_4 вибираємо аналогічно попередньому випадку а інші три точки

визначаємо з умови $x_1 = \delta_1, x_3 = 1 + \delta_3, x_5 = 2 + \delta_5$, де $\delta_i \in (0,1)$ і $\delta_1 \geq \delta_3 \geq \delta_5$. Остання умова дає змогу отримати локалізуючі відрізки довжиною не більше одиниці. Для простоти покладемо $\delta_1 = \delta_3 = \delta_5 = 0.5$. Тоді шукані три точки будуть рівні відповідно 0,5; 1,5; 2,5. Значення функції у вибраних п'яти точках будуть:

$$f(0,5) = 4,25; f(1) = 4; f(1,5) = 4,25; f(2) = 5; f(2,5) = 6,25.$$

Оскільки $f(1) = \min_i \{f(x_i)\} = 4$, то покладаємо $\bar{x}_* = 1$, а локалізуючий відрізок буде $[0,5; 1,5]$.

Теорема 2.2. Серед послідовних алгоритмів немає оптимального, ε -оптимальним є алгоритм Фібоначчі.

Доведення цієї теореми можна знайти в [7]. Коротко розглянемо власне алгоритм.

Означення 2.8. Числа F_i називають числами Фібоначчі, якщо виконується умова $F_{i+1} = F_i + F_{i-1}$, $i = 1, 2, \dots$, $F_1 = F_0 = 1$.

У разі використання методу Фібоначчі потрібноaprіорі знати число n – кількість точок, у яких обчислюємо значення функції $f(x)$. При заданому n на першому кроці для відрізка $[a_1, b_1]$ вибираємо

$$x_1 = a_1 + \frac{F_{n-2}}{F_n} (b_1 - a_1), \quad x_2 = a_1 + \frac{F_{n-1}}{F_n} (b_1 - a_1)$$

у цьому разі $x_2 = a_1 + b_1 - x_1$, тобто метод симетричний. Аналогічно, як у методі золотого поділу, вибираємо локалізований відрізок $[a_2, b_2]$, точку $\bar{x}_2 \in (a_2, b_2)$, тоді

$$b_2 - a_2 = \frac{F_{n-1}}{F_n} (b_1 - a_1) = x_2 - a_1 = b - x_1.$$

На кожному наступному кроці точку, в якій обчислюємо функцію $f(x)$, вибираємо симетрично щодо середини відрізка $x_{k+1} = a_k + b_k - \bar{x}_k$. Взаємне розміщення точок x_i можна пояснити з табл. 2.3, де r_1 , r_2 – відстань нової внутрішньої точки до більчого і далішого кінців локалізованого відрізка.

Як бачимо з табл. 2.3, після $(n-1)$ -го кроку точка \bar{x}_{n-1} є серединою відрізка $[a_{n-1}, b_{n-1}]$. Точку x_n виберемо на відстані δ від середини відрізка $[a_n, b_n]$, $x_n = \bar{x}_{n-1} - \delta$ і аналогічно до попереднього знаходимо локалізований відрізок $[a_n, b_n]$ і внутрішню точку \bar{x}_n . Довжина $[a_n, b_n]$ не більша $\frac{b-a}{F_n} + \delta$. У цьому разі приймемо $f_* \equiv f(\bar{x}_n)$, $x_* \equiv \bar{x}_n$. Якщо в точці \bar{x}_n не обов'язково мати значення функції $f(x)$, то приймаємо

$$x_* \equiv \frac{a_n + b_n}{2}.$$

Таблиця 2.3

Кількість виконаних кроків	r_1	r_2	Довжина відрізка Локалізації
2	$\frac{F_{n-3}}{F_n}(b-a)$	$\frac{F_{n-2}}{F_n}(b-a)$	$\frac{F_{n-1}}{F_n}(b-a)$
3	$\frac{F_{n-4}}{F_n}(b-a)$	$\frac{F_{n-3}}{F_n}(b-a)$	$\frac{F_{n-2}}{F_n}(b-a)$
\vdots
k	$\frac{F_{n-k-1}}{F_n}(b-a)$	$\frac{F_{n-k}}{F_n}(b-a)$	$\frac{F_{n-k+1}}{F_n}(b-a)$
\vdots
$n-1$	$\frac{1}{F_n}(b-a)$	$\frac{1}{F_n}(b-a)$	$\frac{2}{F_n}(b-a)$
n	δ	$\frac{1}{F_n}(b-a)$	$\frac{b-a}{F_n}$ або $\frac{b-a}{F_n} + \delta$

Приклад 2.6. Знайти розв'язок задачі 2.4 методом Фібоначчі при $n=4$.

У нашому випадку

$$x_1 = 0 + \frac{F_{n-2}}{F_n}(b_n - a_n) = \frac{2}{5}(3 - 0) = 1,2;$$

$$x_2 = 0 + \frac{F_{n-1}}{F_n} (b_n - a_n) = \frac{3}{5} (3 - 0) = 1,8;$$

$$F_0 = F_1 = 1; \quad F_2 = 2; \quad F_3 = 3; \quad F_4 = 5; f(1,2) = 4,04; f(1,8) = 4,64.$$

Отже, новий локалізований відрізок буде $[0;1,8] \quad i \quad \bar{x}_2 = 1,2$

Наступні наближення подано у табл. 2.4

Таблиця 2.4

k	a_k	b_k	x_k	x_{k+1}	$f(x_k)$	$f(x_{k+1})$	\bar{x}_{k+1}
1	0	3	1,2	1,8	4,04	4,64	1,2
2	0	1,8	0,6	1,2	4,16	4,04	1,2
3	0,6	1,8	1,2	1,2	4,04	4,04	1,2
4	0,6	1,2	1,1	1,2	4,01	4,04	1,1

Отримано локалізований відрізок $[0,6; 1,2]$ і внутрішню точку $\bar{x}_4 = 1,1$, яка є наближенням до розв'язку задачі, а значення функції у цій точці рівне $f(x_4) = 4,04$.

Як і метод золотого поділу, метод Фібоначчі нестійкий, Тому на k -му кроці, маючи локалізований відрізок $[a_k, b_k]$, точку \bar{x}_k , за наступну точку x_{k+1} вибираємо ту із двох точок

$$x'_k = a_k + \frac{F_{n-k-1}}{F_{n-k+1}} (b_k - a_k), \quad x''_k = a_k + \frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}} (b_k - a_k),$$

яка розташована далі від точки \bar{x}_k . Інші обчислення аналогічні до методу золотого поділу. Крім нестійкості, цей метод має ще один недолік. Він суттєво залежить від априорного значення n . Враховуючи строгу залежність методу від n і ту властивість, що при великих n локалізовані відрізки $[a'_n, b'_n]$ за методом золотого поділу і $[a''_n, b''_n]$ за методом Фібоначчі мало відрізняються $\frac{b'_n - a'_n}{b''_n - a''_n} \approx 1,1708\dots$, на практиці частіше застосовують метод золотого поділу.

Зазначимо, що запропоновані методи можна використовувати для мінімізації функцій, які не є унімодальними. Однак у такому випадку не можна гарантувати, що знайдений розв'язок буде наближенням до глобального мінімуму. Це може бути локальний мінімум.

2.5. Метод парабол

Нехай задано локалізований відрізок $[a_1, b_1]$, точку $c_1 \in (a_1, b_1)$, і виконуються умови:

$$\Delta^- = f(a_1) - f(c_1) \geq 0, \quad \Delta^+ = f(b_1) - f(c_1) \geq 0, \quad \Delta^- + \Delta^+ > 0 \quad (2.10)$$

Трійку чисел, для яких виконуються умови (2.10), називають опуклою. Через точки $(a_1, f(a_1))$, $(c_1, f(c_1))$, $(b_1, f(b_1))$ проведемо параболу (квадратний тричлен, графік якого перетинає перелічені точки). Рівняння параболи можна записати у такому вигляді:

$$F(x) = \left(\frac{\Delta^+}{b_1 - c_1} + \frac{\Delta^-}{c_1 - a_1} \right) \frac{(x - c_1)(x - b_1)}{b_1 - a_1} + \frac{\Delta^+}{b_1 - c_1} (x - c_1) + f(c_1)$$

Легко бачити, що коефіцієнт при x^2 додатний. Отже, функція досягає свого мінімуму в точці

$$s_1 = c_1 + \frac{1}{2} \frac{(b_1 - c_1)^2 \Delta^- - (c_1 - a_1)^2 \Delta^+}{(b_1 - c_1) \Delta^- + (c_1 - a_1) \Delta^+} \quad (2.11)$$

З (2.11) отримаємо оцінку

$$\frac{a_1 + c_1}{2} \leq s_1 \leq \frac{b_1 + c_1}{2}.$$

Цю точку виберемо за точку наступного обчислення функції $f(x)$. Якщо $s_1 = c_1$, тоді за точку наступного обчислення $f(x)$ можна взяти довільну точку, яка належить проміжку $\left[\frac{a_1 + c_1}{2}, \frac{b_1 + c_1}{2} \right]$. Припустимо, що такою вибрано точку $(a_1 + c_1)/2$.

Отже, наступне обчислення функції виконуємо в точці

$$t_1 = \begin{cases} s_1, & s_1 \neq c_1, \\ \frac{c_1 + a_1}{2}, & s_1 = c_1. \end{cases}$$

За значеннями функції $f(x)$ у точках a_1, t_1, c_1, b_1 визначимо новий локалізований відрізок $[a_2, b_2]$ із внутрішньою точкою c_2 , у якій обчислено значення функції $f(x)$. У цьому випадку $c_2 = c_1$, або $c_2 = t_1$. Далі процес продовжують для відрізка $[a_2, b_2]$

аналогічно, як на попередньому кроці. Алгоритм повторюють доти, доки не буде виконана умова зупинки, наприклад, $(b_n - a_n) < \varepsilon$.

Приклад 2.7. Знайти розв'язок задачі:

$$x^4 + 2x^2 - 3 \underset{[-1;2]}{\longrightarrow} \min .$$

У нашому випадку для

$$a_1 = -1, b_1 = 2, c_1 = 0,$$

$$\text{маємо } f\{-1\} = 0, f(0) = -3, f(2) = 21, \Delta^- = 3, \Delta^+ = 24,$$

А це означає, що вибрана трійка точок є опуклою. Парабола,

яка проходить через задані точки, матиме вигляд:

$$F(x) = \left(\frac{24}{2} + \frac{3}{1}\right) \frac{(x-0)(x-2)}{3} + \frac{24}{2}(x-0) - 3 = 5x^2 + 2x - 3$$

При цьому:

$$s_1 = -0,222; \quad f(-0,222) = -2,9184.$$

Новий локалізуючий відрізок визначено [-0,222; 2]. Тепер

можна застосувати повторно метод парабол при цьому покладаємо
 $a_2 = -0,222; \quad b_2 = 2; \quad c_2 = 0$ або використати один із
 розглянутих вище методів

2.6. Числові методи мінімізації багатоекстремальних функцій

Як зазначено вище, розглянуті методи можна використовувати для відшукання мінімуму унімодальних функцій. У випадку багатоекстремальних функцій можемо знайти локальний мінімум (не має жодної гарантії, що знайдений розв'язок є точкою глобального мінімуму). Розглянемо клас функцій F , які задовольняють на проміжку $[a, b]$ умову Ліпшица зі сталою L .

Сформулюємо задачу: знайти $f_* = \min_{[a,b]} f(x)$ з точністю ε ,

тобто для \bar{x}_n повинна виконуватися умова:

$$f(\bar{x}_n) \leq f_* + \varepsilon, \quad (2.12)$$

однак відстань від точки \bar{x}_n до множини X_* до уваги не беремо. Для розв'язування такої задачі можна розглянути декілька методів.

2.6.1. Метод простого перебирання. Нехай задано $\varepsilon > 0$.

Виберемо крок $h = \frac{2\varepsilon}{L}$ і послідовність точок

$$x_1 = a + \frac{h}{2}, \dots, x_{i+1} = x_i + h = x_1 + ih, \dots, x_{n-1} = x_1 + (n-2)h,$$

$$x_n = \min\{x_1 + (n-1)h, b\}$$

Точка x_n повинна задовольняти умову $x_{n-1} < b - \frac{h}{2} \leq x_n$. У кожній із заданих точок обчислюємо $f(x_i)$, а за \bar{x}_n вибираємо точку, для якої виконується умова $f(\bar{x}_n) = \min_{i=1,n} \{f(x_i)\}$. Задане значення функції задовольняє умову (2.12), тобто розв'язує сформульовану задачу.

Розглянемо проміжок

$$\Delta_i = \left[x_i - \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{2} \right], i = \overline{1, n}. \text{ На цьому проміжку виконується оцінка}$$

$$f(x) \geq f(x_i) - L \frac{h}{2} \geq f(\bar{x}_n) - \frac{h}{2} L = f(\bar{x}_n) - \varepsilon \quad \forall x \in \Delta_i.$$

Оскільки $\bigcup_{i=1}^n \Delta_i$ покриває весь проміжок $[a, b]$, то ця оцінка

правильна для всіх $x \in [a, b]$, а також для точки мінімуму (якої ми не обчислили). Отже, $f(x_*) \geq f(\bar{x}_n) - \varepsilon$. Звідси випливає (2.12).

2.6.2. Метод послідовного перебирання. Метод простого перебирання потребує обчислення значень функцій у достатньо великій кількості точок, водночас не враховує інформації в уже обчислених точках, що робить його неефективним. Цей недолік частково усуває метод послідовного перебирання. Точки x_i вибираємо так:

$$x_1 = a + \frac{h}{2}, \quad x_{i+1} = x_i + h + \frac{f(x_i) - F_i}{L}, \quad i = \overline{1, n-1};$$

$$x_n = \min\{x_{n-1} + h + (f(x_{n-1}) - F_{n-1})/L, b\},$$

де

$$F_i = \min_{j=1,i} f(x_j),$$

n вибираємо з умови

$$x_{n-1} < b_n - \frac{h}{2} \leq x_{n-1} + h + \frac{f(x_{n-1}) - F_{n-1}}{L}.$$

Легко бачити, що для

$$x \in \left[x_i, x_i + \frac{h}{2} + \frac{f(x_i) - F_i}{L} \right], \quad i = \overline{1, n-1}$$

виконуються оцінки:

$$\begin{aligned} f(x) &\geq f(x_i) - L \left(x_i + \frac{h}{2} + \frac{f(x_i) - F_i}{L} - x_i \right) = \\ &= F_i - L \frac{h}{2} \geq F_n - \varepsilon = f(\bar{x}_n) - \varepsilon, \end{aligned} \tag{2.13}$$

аналогічна оцінка виконується для $x \in \left[x_i - \frac{h}{2}, x_i \right]$, $i = \overline{1, n}$ та

$x \in [x_n, b]$. Оскільки проміжки

$$\left[x_i - \frac{h}{2}, x_i \right] \cup \left[x_i, x_i + \frac{h}{2} + \frac{f(x_i) - F_i}{L} \right], \quad i = \overline{1, n-1} \text{ та } [x_n, b]$$

покривають весь відрізок $[a, b]$, то нерівність (2.13) виконується також для точки $x = x_*$. Отже,

$$f(x_*) = f_* \geq f(\bar{x}_n) - \varepsilon.$$

Звідси випливає умова (2.12). Методи перебiranня іноді називають методами покріттів.

Приклад 2.8. Розв'язати методом послідовного перебiranня з точністю $\epsilon = 0,2$ задачу

$$f(x) = \begin{cases} x^2 - 2x + 5 & \text{і}\delta\text{є } x \in (-\infty, 2] \\ 7 - x & \text{і}\delta\text{є } x \in [2, \infty) \end{cases} \rightarrow \min_{x \in [0, 4]}$$

Легко бачити, що на проміжку $[0:4]$ константа Ліпшиця $L=2$.

Оскільки $h = \frac{2\epsilon}{L} = 0,2$, то $x_1 = 0,1$; $f(0,1) = 4,81$.

Наступні обчислення подано у табл. 2.5

Отже нами отримано наблизений розв'язок
 $\bar{x}_* = 3,928$ $f(\bar{x}_*) = 3,072$. Розв'язком задачі ϵ точка
 $x_* = 4,0$; $f(x_*) = 3$.

Таблиця 2.5

k	x_k	$f(x_k)$	F_k	к	x_k	$f(x_k)$	F_k
1	0,1	4,81	4,81	9	1,88	4,774	4,01
2	0,3	4,49	4,49	10	2,46	4,54	4,01
3	0,5	4,25	4,25	11	2,925	4,074	4,01

4	0,7	4,09	4,09	12	3,128	3,872	3,872
5	0,9	4,01	4,01	13	3,328	3,672	3,672
6	1,1	4,01	4,01	14	3,528	3,472	3,472
7	1,3	4,09	4,01	15	3,728	3,272	3,272
8	1,54	4,29	4,01	16	3,928	3,072	3,072

2.6.3. Метод ламаних. Нехай $f(x) \in Q_L(f)$ класу функцій, які задовольняють умову Ліпшица зі сталою L . Виберемо на проміжку $[a,b]$ деяку точку y і проведемо ламану лінію

$$q(x, y) = f(y) - L|x - y|. \quad (2.14)$$

Легко з'ясувати, що графік цієї лінії лежить не вище від графіка функції $f(x)$ і має з нею хоча б одну спільну точку $(y, f(y))$ (можливий спільний відрізок).

$$f(x) - q(x, y) = f(x) - f(y) + L|x - y| \geq L|x - y| - |f(x) - f(y)| \geq 0$$

Використовуючи цю властивість, можна побудувати алгоритм відшукання мінімуму функції $f(x)$. Нехай задана функція $f(x) \in Q_L(f)$ на проміжку $[a,b]$, виберемо деяку точку x_0 і побудуємо ламану

$$q(x, x_0) = f(x_0) - L|x - x_0| = \rho_0(x).$$

Тепер визначимо точку x_1 з умови $\rho_0(x_1) = \min_{[a,b]} \rho_0(x)$.

Припустимо, що уже побудували ламану $\rho_k(x)$ і визначили точку x_{k+1} із умови

$$\rho_k(x_{k+1}) = \min_{[a,b]} \rho_k(x).$$

Маючи точку x_{k+1} , будуємо ламану

$$q(x, x_{k+1}) = f(x_{k+1}) - L|x - x_{k+1}|$$

і визначаємо ламану

$$\rho_{k+1}(x) = \max\{\rho_k(x), q(x, x_{k+1})\}.$$

Точку x_{k+2} визначаємо з умови

$$\rho_{k+1}(x_{k+2}) = \min_{[a,b]} \rho_{k+1}(x).$$

Процес можна припинити, якщо $|\rho_k(x_{k+1}) - f(x_{k+1})| < \varepsilon$, тоді значення f_* знайдено з точністю ε : $f(x_{k+1}) \geq f_* - \varepsilon$, хоча відхилення від точного розв'язку $\rho(x_{k+1}, x_*)$ нам не відоме.

2.7. Пошук початкового локалізованого відрізка

Запропоновані вище методи використовують лише тоді, коли відомий локалізований відрізок $[a, b]$, у цьому випадку $x_* \in [a, b]$. Постає запитання, як знайти цей відрізок? Нехай $f(x)$ – унімодаль-

на функція на R . Треба знайти проміжок $[a,b]$, якому належить точка x_* . Для розв'язування цієї задачі є низка методів. Розглянемо алгоритм, запропонований *Девісом, Свенна, Кемпі* (ДСК). У разі одновимірного пошуку за ДСК збільшуємо крок доти, доки не перейдемо точку мінімуму. Виберемо точку x_0 і крок $h_0 > 0$ та обчислимо значення функцій $f(x_0)$, $f(x_0 + h_0)$. Нехай $f(x_0) > f(x_0 + h_0)$, якщо $f(x_0) < f(x_0 + h_0)$, то беремо $h_0 < 0$; величина $|h_0|$ є достатньо малою, щоб виконувалася одна з таких умов:

$$f(x_0 + |h_0|) < f(x_0) \text{ або } f(x_0 - |h_0|) < f(x_0).$$

Зауваження. Якщо виконуються умови

$$f(x_0 + |h_0|) > f(x_0), f(x_0 - |h_0|) > f(x_0) \text{ і } |h_0| < \varepsilon,$$

то можна вважати x_0 розв'язком задачі з заданою точністю ε .

Отже, нехай $f(x_0) > f(x_0 + h_0)$, тоді приймемо $x_1 = x_0 + h_0$, $h_1 = 2h_0$ і обчислимо $f(x_2)$, де $x_2 = x_1 + h_1$. Якщо $f(x_1) > f(x_2)$, то приймаємо $x_2 = x_1 + h_1$ і $h_2 = 2h_1$ і т.д. Нехай після k кроків одержано

$$f(x_k) < f(x_k + h_k)$$

$$(x_k = x_{k-1} + h_{k-1}, \quad h_k = 2h_{k-1} = 2^{k-1}h_1).$$

Введемо такі позначення: $x_{k+1} = x_k + h_k = x_m$, $x_k = x_{m-1}$, $x_{k-1} = x_{m-2}$. Зменшимо крок $h_{k+1} = h_k / 2$ і обчислимо $x_{m+1} = x_m - h_{k+1}$ та $f(x_{m+1})$. З чотирьох точок $x_{m-2} < x_{m-1} < x_{m+1} < x_m$ вилучаємо x_m або x_{m-2} і залишаємо три точки, які утворюють локалізований відрізок $[\bar{a}, \bar{b}]$ із внутрішньою точкою \bar{x}_m , для якої $f(\bar{x}_m) = \min_i f(x_i)$. У цьому випадку

$$\bar{x}_m - \bar{a} = \bar{b} - \bar{x}_m = \Delta x \text{ і } [\bar{a}, \bar{b}] \cap X_* \neq \emptyset.$$

Через точки $(\bar{a}, f(a))$, $(\bar{x}_m, f(\bar{x}_m))$, $(\bar{b}, f(b))$ для визначення x_* проведемо параболу, у цьому випадку

$$x_* \approx \bar{x}_* = \bar{x}_m + \frac{\Delta x [f(a) - f(b)]}{2[f(a) - 2f(\bar{x}_m) + f(b)]}.$$

Цим завершуємо перший етап методу ДСК. За бажанням цю процедуру можна продовжити, за початкову точку взяти \bar{x}_* та зменшити h_0 . Можна використати запропоновані раніше методи, вибравши за початковий відрізок уже отриманий відрізок за методом ДСК.

Приклад 2.8. Визначити локалізований відрізок для функції (2.4) за умови, що $x_0 = 2$, $\Delta x_0 = 0.1$.

I крок . Перейдемо у точку $x_1 = x_0 + \Delta x_0 = 2.1$ і обчислимо $f(x_0) = 5$, $f(x_1) = 5.21$. Оскільки $5.21 > 5$, то потрібно змінити напрям руху, тобто вибрести $\Delta x_0 = -0.1$. При цьому

$x_1 = x_0 + \Delta x_0 = 1,9; f(x_1) = 4,81$ і далі працюємо з зазначеним кроком. Результати обчислень за алгоритмом ДСК подано у табл. 2.6.

Оскільки $f(x_4) > f(x_3)$, то покладаємо
 $\Delta x_4 = 0,5 \times \Delta x_3 = -0,4$, знаходимо наступну точку
 $x_5 = 0,5 + 0,4 = 0,9$ і значення функції у даній точці $f(x_5) = 4,01$.

Таблиця 2.6

k	Δx_k	x_k	$f(x_k)$	x_{k+1}	$f(x_{k+1})$
0	-0,1	2	5	1,9	4,81
1	-0,2	1,9	4,81	1,7	4,41
2	-0,4	1,7	4,41	1,3	4,09
3	-0,8	1,3	4,09	0,5	4,25
4	-0,4	0,5	4,25	0,9	4,01

За значенням функції у точках x_2, x_3, x_4, x_5 знаходимо локалізуючий відрізок $[0,5; 1,3]$, точку $\bar{x}_* = 0,9$ можна вибрати за наближений розв'язок. При такому виборі наближеного розв'язку ми гарантуємо похибку не більше $\max\{1,3 - 0,9; 0,9 - 0,5\} = 0,4$.

Для визначення розв'язку з меншою гарантованою похибкою можна поступити по різному.

I. Покладемо $x_0 = 0,9; \Delta x_0 = 0,02 < 0,5$ і алгоритм ДСК повторимо.

ІІ. Маючи локалізований відрізок використаємо один із розглянутих вище методів (метод золотого поділу відрізка, алгоритм Фібоначчі, метод дихотомії і інші методи).

?

Запитання для самоперевірки

1. Дайте означення унімодальної функції.
2. Зробіть постановку одновимірної оптимізаційної задачі.
3. Опишіть метод ділення відрізка навпіл.
4. Дайте означення золотого поділу відрізка.
5. Сформулюйте метод золотого поділу.
6. Дайте означення опуклої трійки точок.
7. Опишіть метод парабол.
8. Опишіть оптимальний метод пасивного пошуку.
9. Опишіть ε -оптимальний метод пасивного пошуку.
10. Опишіть метод Фібоначчі.
11. Опишіть метод ламаних.
12. Дайте визначення локалізуючого відрізка.
13. Опишіть метод ДСК.
14. Опишіть метод простого перебiranня.
15. Опишіть метод послідовного перебiranня.
16. Опишіть недолік методів золотого поділу та Фібоначчі, спричинений заокругленням в процесі обчислень.

»

Завдання для самостійної роботи

Розв'язати методом поділу відрізка навпіл з точністю

$$|b_n - a_n| < \varepsilon \text{ одновимірні задачі оптимізації:}$$

$$2.1. f(x) = x^2 - 5x + 3x(x-1) \rightarrow \min_{[2,8]} \quad \varepsilon = 0,5 .$$

$$2.2. f(x) = \begin{cases} -2x - 1 & \text{і}\delta\text{є } x \leq 1 \\ x^2 - 4x & \text{і}\delta\text{є } x \geq 1 \end{cases} \rightarrow \min_{[0,3]} \quad \varepsilon = 0,5$$

- 2.3 Розв'язати методом золотого поділу відрізка задачі 2,1; 2,2.
- 2.4 Використовуючи оптимальні методи пасивного пошуку розв'язати задачі 2,1; 2,2 при $n=5$, 6.
- 2.5 Знайти локалізуючий відрізок методом ДСК для задачі 2,1 ($x_0 = 7$) і задачі 2,2 ($x_0 = 2,5$) при $\Delta x_0 = 0,2$.
- 2.6 Розв'язати методом Фібоначчі задачі 2,1; 2,2. при $n=5$.
- 2.7 Розв'язати послідовним методом перебiranня задачі 2,1; 2,2 при $\varepsilon = 0,5$.
- 2.8 Використовуючи метод парабол знайти розв'язок задачі $f(x) = x^4 + 4x^2 + 4x + 2 \rightarrow \min_{[-3,1]}$.
- 2.9 Розв'язати задачу 2.8 методом Фібоначчі та методом золотого поділу при $n=12$ і порівняти результати.
- 2.10 Знайти розв'язок задачі

$$2x^3 - 15x^2 + 24x - 5 \rightarrow \min \quad x \in [0;5]$$

- 2.11 Знайти розв'язок задачі

$$f(x) = \begin{cases} x^2 - 5x + 4 & x \geq 2 \\ x^2 + 2x - 10 & x \leq 2 \end{cases} \rightarrow \min_{[-1,4]}$$

- 2.12 Знайти методом золотого поділу розв'язок задачі

$$f(x) = |x - 5| - 5 \rightarrow \min_{[0,10]}$$

3. МІНІМІЗАЦІЯ ФУНКЦІЙ БАГАТЬОХ ЗМІННИХ

■ План викладу матеріалу:

1. Опуклі множини.
2. Опуклі функції.
3. Віддільність множин і опорні гіперплощини.

→ Ключові терміни розділу

- | | |
|-----------------------------------|---------------------------------------|
| ✓ <i>Опуклі множини</i> | ✓ <i>Субдиференціал функції</i> |
| ✓ <i>Сильно опуклі множини</i> | ✓ <i>Локальний мінімум</i> |
| ✓ <i>Конус</i> | ✓ <i>Глобальний мінімум</i> |
| ✓ <i>Афінні множини</i> | ✓ <i>Множина Лебега</i> |
| ✓ <i>Сильно опуклі функції</i> | ✓ <i>Проекція точки</i> |
| ✓ <i>Теорема Каратеодорі</i> | ✓ <i>Опорна гіперплоскість</i> |
| ✓ <i>Замикання множини</i> | ✓ <i>Віддільність множин</i> |
| ✓ <i>Опуклі функції</i> | ✓ <i>Теорема Фаркаша</i> |
| ✓ <i>Лінійна комбінація точок</i> | ✓ <i>Віддільність точки і множини</i> |
| ✓ <i>Строго опуклі функції</i> | ✓ <i>Теорема Жордана</i> |
| ✓ <i>Нерівність Йенсена</i> | ✓ <i>Сильна віддільність множин</i> |

Перш ніж аналізувати безпосередньо задачі математичного програмування, розглянемо частковий випадок – задачі опуклого програмування.

3.1. Опуклі множини

Означення 3.1. Множину X називають *опуклою*, якщо для будь-яких двох точок $x, y \in X$, $x_\lambda = \lambda x + (1 - \lambda)y = y + \lambda(x - y) \in X$ при всіх $0 \leq \lambda \leq 1$.

Мовою геометрії це означає таке: якщо будь-які дві точки належать множині X , то і весь відрізок, який сполучає ці точки, належить множині X .

Прикладами опуклої множини є точка, куля, пряма, гіперплощина, півпростір тощо. Порожню множину також вважають опуклою. Названі опуклі множини запишемо так: точка — $X = \{x^0\}$,

куля радіусом r з центром у точці x^0

$$S(x^0, r) = \left\{ x : x \in R^n, \|x - x^0\| \leq r \right\};$$

пряма, яка проходить через точки x^0, x^1

$$M = \{x : x \in R^n, x = ax^0 + (1 - a)x^1 = x^1 + a(x^0 - x^1), a \in R\};$$

гіперплощина —

$$H = \{x : x \in R^n, (c, x) = \gamma\},$$

або

$$H = x : x \in R^n, (c, x - x_0) = 0,$$

де $c = (c_1, \dots, c_n) \neq 0$, $c \in R^n$, $\gamma \in R$;

півпростір —

$$\overline{H_+} = \{x : x \in R^n, (c, x) \geq \gamma, \gamma \in R\},$$

$$\overline{H_-} = \{x : x \in R^n, (c, x) \leq \gamma, \gamma \in R\}.$$

Означення 3.2. Множину X називають *сильно опуклою*, якщо для будь-яких точок $x^1, x^2 \in X$ точка

$$x = \frac{x^1 + x^2}{2} + y \in X,$$

де $\|y\| \leq \alpha \|x^1 - x^2\|^2$, $\alpha > 0$ достатньо мале число.

Теорема 3.1. Переріз декількох опуклих множин $X = \bigcap_{i=1}^k X_i$ є опуклою множиною.

➤ Нехай $x^1 \in X$, $x^2 \in X$, $\lambda \in [0,1]$. Оскільки X_i опуклі, то за визначенням перерізу для $x^1, x^2 \in X_i$, $i = \overline{1, m}$ маємо $x = \lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2 \in X_i$ для всіх $i = \overline{1, m}$, а, отже, $x \in X$. ↵

Теорема 3.2. Нехай X_i - опуклі множини, $\alpha_i \in R$, $i = \overline{1, m}$, тоді множину

$$X = \sum_{i=1}^m \alpha_i X_i = \{x : x = \sum_{i=1}^m \alpha_i x^i, x^i \in X_i, i = \overline{1, m}\}$$

називають лінійною комбінацією X_i , $i = \overline{1, m}$ і вона опукла.

Важливим класом опуклих множин є опуклі конуси та афінні множини.

Означення 3.3. Множину $X \subseteq R^n$ називають:

1) *конусом*, якщо $\lambda x \in X$ при всіх $x \in X, \lambda \geq 0$, тобто X разом з точкою x містить промінь з початком у нулі, який проходить через точку x ;

2) *опуклим конусом*, якщо X одночасно є конусом і опуклою множиною.

Означення 3.4.. Множину X називають *афінною*, якщо $\lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2 \in X$ при всіх $x^1, x^2 \in X, \lambda \in R$, тобто X разом з точками x^1, x^2 містить також пряму, яка проходить через ці точки.

Афінні множини є зсувами лінійних підпросторів або множиною розв'язків систем скінченної кількості лінійних рівнянь, або перерізом скінченної кількості гіперплощин.

Теорема 3.3. Нехай X – афінна множина в R^n . Тоді при довільному $x^0 \in X$ множина $L = X - x^0$ є лінійним підпростором, причому L не залежить від вибору $x^0 \in X$. Множину X можна записати у вигляді:

$$X = \{x \in R^n : Ax = b\} = \{x \in R^n : (a_i, x) = b_i, i = \overline{1, m}\} \quad (3.1)$$

де A матриця розмірності $m \times n$ із рядками a_i , $i = \overline{1, m}$, $b = (b_1, \dots, b_m) \in R^m$.

➤ У нашому випадку L – афінна множина і $0 \in L$. Тоді для довільних $x^1, x^2 \in L$, $x = 0,5x^1 + 0,5x^2 \in L$, $\lambda x^1 = \lambda x^1 + (1-\lambda)0 \in L$ і $2x \in L$; тобто $x_1 + x_2 \in L$, отже, L – лінійна множина. Нехай $L_1 = X - x^1$, де $x^1 \in X$. Візьмемо $x \in L$, оскільки $x^1 - x^0 \in L$, то $x + x^1 - x^0 \in L$ і $x \in L + x^0 - x^1 = X - x^1 = L_1$, $L \subset L_1$. Аналогічно доводимо $L_1 \subset L$.

Відомо, що довільний лінійний простір можна записати як розв'язок системи лінійних однорідних рівнянь. Нехай $L = \{x \in R^n : Ax = 0\}$, тоді при $b = Ax^0$ отримаємо (3.1). ◀

Означення 3.5. Нехай x^1, \dots, x^m – точки з R^n . Лінійну комбінацію

$\sum_{i=1}^m \lambda_i x^i$ називають:

1) опуклою, якщо $\lambda_i \geq 0$, $i = \overline{1, m}$, $\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$;

2) невід'ємною, якщо $\lambda_i \geq 0$, $i = \overline{1, m}$;

3) афінною, якщо $\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$.

Теорема 3.4. Опукла множина (опуклий конус, афінна множина) містить усі можливі опуклі (невід'ємні, афінні) комбінації своїх точок.

➤ Розглянемо лише випадок опуклої множини, оскільки решта два твердження випливають із означення опуклого конуса та

теореми про афінну множину. Отже, треба показати, що для

довільного $m = 1, 2, \dots$ із умов $x = \sum_{i=1}^m \lambda_i x^i; x^i \in X, \lambda_i \geq 0, i = \overline{1, m}$,

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1 \text{ випливає } x \in X.$$

Для доведення використаємо метод математичної індукції. При $m = 2$ твердження теореми випливає з означення опукlosti множини. Нехай виконується це твердження для деякого $k > 2$, тоді для $m = k + 1$ маємо $(0 < \lambda_{k+1} < 1)$, за припущенням

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^k \frac{\lambda_i}{1 - \lambda_{k+1}} x^i \in X,$$

$$x = (1 - \lambda_{k+1})\bar{x} + \lambda_{k+1}x^{k+1} \in X$$

отже,

$$\sum_{i=1}^{k+1} \lambda_i x^i \in X. \Leftarrow$$

Означення 3.6. Нехай X довільна множина в R^n . Переріз усіх опуклих множин (опуклих конусів, афінних множин) з R^n , які містять X , називають її *опуклою (конічною, афінною) оболонкою* і позначають $\text{conv } X$ ($\text{cone } X$, $\text{aff } X$) .

Для довільного X , $\text{conv } X$ – непорожня множина, X – опукла множина тоді і тільки тоді, якщо $\text{conv } X = \bar{X}$.

Означення 3.7. Лінійний підпростір, паралельний до афінної оболонки множини X , називають паралельним X і позначають $\text{Lin } X$.

Отже, $\text{Lin } X = \text{aff } X - x^0$, де $x^0 \in X$.

Лема 3.1. Якщо:

1) $x^1, x^2 \in X$, то $x^1 - x^2 \in \text{Lin } X$;

- 2) $x \in X$, $h^1, h^2 \in \text{Lin}X$, $\alpha_1, \alpha_2 \in R$, то $x + \alpha_1 h^1 + \alpha_2 h^2 \in \text{aff}X$;
 3) $0 \in X$, то $\text{Lin}X = \text{aff}X$.

Теорема 3.5. Опукла (конічна, афінна) оболонка довільної множини X збігається з множиною всіляких опуклих (невід'ємних, афінних) комбінацій точок з X .

➤Розглянемо лише випадок опуклої оболонки. Нехай Z – множина всіляких опуклих комбінацій точок з X . Покажемо, що виконується рівність $\text{conv}X = Z$. Нехай $x, y \in Z$, $\lambda \in [0,1]$. За означенням Z можемо записати

$$x = \sum_{i=1}^m \mu_i x^i, \text{ де } x^i \in X, \mu_i \geq 0, i = \overline{1, m}, \sum_{i=1}^m \mu_i = 1,$$

$$y = \sum_{i=1}^k \alpha_i y^i, \text{ де } y^i \in X, \alpha_i \geq 0, i = \overline{1, k}, \sum_{i=1}^k \alpha_i = 1.$$

Розглянемо точку $z = \lambda x + (1 - \lambda)y = \sum_{i=1}^k (1 - \lambda)\alpha_i y^i + \sum_{i=1}^m \lambda \mu_i x^i$.

Отже, z – лінійна комбінація точок з множини X , оскільки коефіцієнти невід'ємні і в сумі дорівнюють одиниці $(\lambda \sum_{i=1}^m \mu_i + (1 - \lambda) \sum_{i=1}^k \alpha_i = \lambda + 1 - \lambda = 1)$, то z – опукла комбінація з X ,

тобто $z \in Z$ і Z опукла множина, причому $X \subset Z$. Крім того, оскільки $X \subset Z$ і будь-яка опукла множина, що містить X , містить і Z , в силу попередньої теореми, то $\text{conv}X \supset Z$, звідси випливає $\text{conv}X = Z$. ↵

Можна також довільну точку з $\text{conv}X$ записати у вигляді опуклої комбінації не більше ніж $n+1$ точки з X . Спершу розглянемо допоміжну теорему, яку самостійно використовуватимемо надалі.

Теорема 3.6. Якщо x – невід'ємна комбінація точок x^1, \dots, x^m , які не дорівнюють нулю одночасно, то x можна записати у вигляді невід'ємної комбінації лінійно незалежної підсистеми цих точок.

➤ За умови $x = \sum_{i=1}^m \lambda_i x^i$ при деяких $\lambda_i \geq 0$ $i = \overline{1, m}$. Вважатимемо, що всі $\lambda_i > 0$, $i = \overline{1, m}$. Якщо точки x^i лінійно залежні, то виконується умова $\sum_{i=1}^m \mu_i x^i = 0$ і числа μ_1, \dots, μ_m не всі одночасно дорівнюють нулю. Серед цих чисел є додатні (в іншому випадку у всіх μ_i міняємо знаки). Вибравши $\alpha = \lambda_s / \mu_s = \min_{\mu_i > 0} \lambda_i / \mu_i$, можемо записати

$$x = \sum_{i=1}^m \lambda_i x^i - \alpha \sum_{i=1}^m \mu_i x^i = \sum_{i=1}^m (\lambda_i - \alpha \mu_i) x^i = \sum_{i=1, i \neq s}^m \gamma_i x^i,$$

де $\gamma_i = \lambda_i - \alpha \mu_i \geq 0$

Отже, у зображені точки x використано не більше ніж $m-1$ точку; якщо вони незалежні, то задачу розв'язано. У протилежному випадку процедуру вилучення точок продовжуємо. У гіршому варіанті залишиться лише одна точка. Вона, як ненульова, становитиме тривіальну систему лінійно незалежних точок. ↵

Якщо врахувати, що в просторі R^n може бути не більше ніж n лінійно незалежних векторів, то звідси випливає такий наслідок.

Наслідок 3.1. Нехай X – довільна множина в R^n . Тоді будь-яку точку з $\text{cone } X$ можна записати у вигляді невід'ємної комбінації не більше ніж n точок з X .

Теорема 3.7 (Теорема Каратеодорі). Нехай X – довільна множина в R^n . Тоді будь-яку точку з $\text{conv } X$ можна записати у вигляді опуклої комбінації не більше ніж $n+1$ точки з X .

➤ У просторі R^{n+1} розглянемо множину $A = \{X, 1\}$, тобто сукупність точок вигляду $(x, 1)$, де $x \in X$, тоді:

$$x = \sum_{i=1}^m \lambda_i x^i, \quad x^i \in X, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad \sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$$

еквівалентне тому, що $(x,1) \in \text{cone}A$ тобто

$$(x,1) = \sum_{i=1}^m \lambda_i (x^i, 1); \quad x^i \in X, \lambda_i \geq 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad \sum_{i=1}^m \lambda_i = 1.$$

Тепер треба застосувати записаний вище наслідок. \blacktriangleleft

Означення 3.8. Замиканням множини X називають множину, яка є об'єднанням множини X і всіх її межових точок і позначають \bar{X} .

Для довільної точки y і довільної множини $X \subset R^n$ виконується одна і тільки одна з трьох можливостей:

1) існує ε окіл точки y , усі точки якого належать X , а точка y внутрішня; $y \in \text{int } X$; множину X , для якої $\text{int } X = X$, називають відкритою;

2) існує ε окіл точки y , який не містить жодної точки множини X , точка y – зовнішня щодо X ;

3) будь-який окіл точки y містить точки з X і з $R^n \setminus X$, точка y – межова точка множини X . Сукупність таких точок позначимо $G_0(X)$.

Означення 3.9. Точку $x \in G_0(X)$, де X - опукла множина, називають кутовою, якщо її не можна записати у вигляді

$$x = \lambda x^1 + (1-\lambda)x^2, \quad \text{де } x^1, x^2 \in X, \quad x^1 \neq x^2, \quad 0 < \lambda < 1.$$

Геометрично x є кутовою точкою множини X , якщо не існує відрізка, кінці якого лежать у X , а x є внутрішньою точкою цього відрізка.

Теорема 3.8. Якщо X - опукла множина, то її замикання \bar{X} та $\text{int } X$ також опуклі множини.

Доведення цієї теореми див. у [12].

3.2. Опуклі функції

Означення 3.10. Функцію $f(x)$, яку визначено на опуклій множині X , називають *опуклою* на цій множині, якщо

$$\underline{f(\lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y)} \quad (3.2)$$

для всіх $x, y \in X$ і $\lambda \in [0,1]$. Якщо в (3.2) $x \neq y$ і рівність виконується лише для $\lambda = 0$ та 1 , то функцію $f(x)$ називають строго опуклою на множині X .

Прикладами опуклих функцій є лінійна функція $f(x) = (c, x)$, норма $f(x) = \|x\|$ та ін.

Означення 3.11. Функцію $f(x)$, яку визначено на опуклій множині $X \in R^n$, називають сильно опуклою на X зі сталою $\theta > 0$, якщо

$$\underline{f(\lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y) - \theta \lambda(1-\lambda) \|x-y\|^2} \quad (3.2)$$

для всіх $x, y \in X$ і $\lambda \in [0,1]$.

Простішим прикладом сильно опуклої функції на R^n є функція $f = (x, x)$. Справді, нехай $x, y \in X$, тоді для $x_\lambda = \lambda x + (1-\lambda)y$ маємо

$$\begin{aligned} \|x_\lambda\|^2 &= (\lambda x + (1-\lambda)y, \lambda x + (1-\lambda)y) = \lambda(x, x) + (1-\lambda)(y, y) - \\ &- \lambda(1-\lambda)(x-y, x-y) = \lambda\|x\|^2 + (1-\lambda)\|y\|^2 - \lambda(1-\lambda)\|x-y\|^2. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Отже, $\theta = 1$.

Означення 3.12. Функцію $f(x)$ називають *увігнутою* (строго, сильно ввігнутою) на опуклій множині X , якщо $-f(x)$ є опукла (строго, сильно опукла) на X .

Надалі розглядатимемо власне опуклі функції.

Теорема 3.9 (Нерівність Йенсена). Нехай $f(x)$ – опукла функція на опуклій множині X . Тоді виконується нерівність

$$f\left(\sum_{i=1}^m \lambda_i x^i\right) \leq \sum_{i=1}^m \lambda_i f(x^i) \quad (3.4)$$

де

$$m > 1, \quad x^i \in X, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad \sum_{i=1}^m \lambda_i = 1.$$

➤. Доведення проведемо методом математичної індукції за m . Якщо $m = 2$, то (3.4) випливає з означення опуклої функції. Нехай формула (3.4) справджується для $m = k \geq 2$. Доведемо її для $m = k + 1$. Виберемо

$$x = \sum_{i=1}^{k+1} \lambda_i x^i; \quad (0 < \lambda_{k+1} < 1), \quad \lambda_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^{k+1} \lambda_i = 1,$$

$$\text{тоді } \bar{x} = \sum_{i=1}^k \frac{\lambda_i}{1 - \lambda_{k+1}} x^i \in X,$$

за припущенням і з використанням опукlosti та індукції отримаємо

$$\begin{aligned} f(x) &\leq (1 - \lambda_{k+1})f(\bar{x}) + \lambda_{k+1}f(x^{k+1}) \leq (1 - \lambda_{k+1}) \sum_{i=1}^k \frac{\lambda_i}{1 - \lambda_{k+1}} f(x^i) + \\ &+ \lambda_{k+1}f(x^{k+1}) = \sum_{i=1}^{k+1} \lambda_i f(x^i) \end{aligned}$$

Нерівність Йенсена дає змогу отримати низку відомих результатів. Розглянемо лише один з них. Нехай $f(x) = -\ln x$ – функція, опукла на $\text{int } R_+$. Для довільних

$$m = 1, 2, \dots; \quad x^i > 0, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad \sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$$

маємо за (3.4)

$$-\ln \left(\sum_{i=1}^m \lambda_i x^i \right) \leq -\sum_{i=1}^m \lambda_i \ln x^i = -\ln \left(\prod_{i=1}^m (x^i)^{\lambda_i} \right).$$

Отже, $\sum_{i=1}^m \lambda_i x^i \geq \prod_{i=1}^m (x^i)^{\lambda_i}$ і для $\lambda_i = \frac{1}{m}$ маємо нерівність між середнім арифметичним і середнім геометричним

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x^i \geq \sqrt[m]{\prod_{i=1}^m x^i}$$

Теорема 3.10. Нехай X – опукла множина, функція $f(x)$ визнана й опукла на X . Тоді будь-яка точка локального мінімуму $f(x)$ одночасно є точкою глобального мінімуму на X , причому множина

$$X_* = \{x : x \in X, f(x) = f_* = \min f(x)\} – \text{опукла.}$$

Якщо $f(x)$ - строго опукла, то X_* містить не більше однієї точки.

➤ Нехай x_* – точка локального мінімуму функції $f(x)$. Це означає, що в ε -околі цієї точки $0(x_*, \varepsilon) = \{x : \|x - x_*\| < \varepsilon\}$, $f(x_*) \leq f(x)$ для всіх $x \in 0(x_*, \varepsilon) \cap X$. Візьмемо будь-яку точку $x \in X$ і число $\alpha > 0$ достатньо мале таке, що виконується нерівність $\alpha \|x - x_*\| < \varepsilon$, тоді точка $x_* + \alpha(x - x_*) \in 0(x_*, \varepsilon) \cap X$, і з урахуванням опукlosti маємо

$f(x_*) \leq f(x_* + \alpha(x - x_*)) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(x_*) = f(x_*) + \alpha(f(x) - f(x_*))$ або $\alpha(f(x) - f(x_*)) \geq 0$. Звідси отримуємо $f(x) - f(x_*) \geq 0$ для довільного $x \in X$.

Якщо $x, y \in X_*$, то

$$f(x) = f(y) = f(x_*) = f_*, \quad (x, y \in X_*)$$

і

$$f_* \leq f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) = f_* \quad (3.5)$$

Отже, $\alpha x + (1 - \alpha)y \in X_*$ для $\alpha \in [0, 1]$. Опуклість X_* доведена. Якщо $f(x)$ строго опукла, то умова (3.5) виконується у випадку $\alpha \in (0, 1)$ лише для $x = y$. Отже, строго опукла функція може досягти мінімуму лише в одній точці. ◀

Розглянемо ще деякі властивості опуклих функцій.

Теорема 3.11. Нехай X – опукла множина, і функція $f(x) \in C^1(X)$. Тоді для того щоб $f(x)$ була опуклою, необхідно і достатньо виконання нерівності

$$f(x) \geq f(y) + (f'(y), x - y), \forall x, y \in X \quad (3.6)$$

➤. **Необхідність.** Нехай $f(x)$ – опукла на X , тоді

$$f(y + \alpha(x - y)) - f(y) \leq \alpha(f(x) - f(y)); \quad \alpha \in [0, 1]; \quad x, y \in X.$$

Застосувавши формулу скінчених приростів, одержимо

$$\alpha(f'(y + \theta\alpha(x - y)), x - y) \leq \alpha[f(x) - f(y)]; \quad 0 \leq \theta \leq 1.$$

Поділимо дану нерівність на $\alpha > 0$ і спрямуємо α до нуля, тоді отримаємо (3.6).

Достатність. Нехай виконується (3.6). Виберемо довільні точки $x, y \in X$ і $x_* = \alpha x + (1 - \alpha)y$. Тоді, використавши нерівність (3.6) можемо записати

$$f(x) - f(x_*) \geq (f'(x_*), x - x_*),$$

$$f(y) - f(x_*) \geq (f'(x_*), y - x_*).$$

Помножимо першу нерівність на α , другу – на $1 - \alpha$ і додамо. Тоді

$$\alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) - f(x_*) \geq (f'(x_*), \alpha x + (1 - \alpha)y - x_*) = 0,$$

а це означає, що $f(x)$ – опукла функція. Геометричний сенс нерівності (3.6) полягає у тому, що графік функції лежить не нижче дотичної гіперплощини до цього графіка в довільній точці $x \in X$. ◀

Теорема 3.12 (Необхідні і достатні умови оптимальності). Нехай X – опукла множина, $f(x) \in C^1(X)$ і $X_* = \{x \in X : f(x) = \min_X f(x)\}$.

Тоді в будь-якій точці $x_* \in X_*$ необхідно виконується умова

$$(f'(x_*), x - x_*) \geq 0, \quad \forall x \in X, \quad (3.7)$$

а у випадку $x_* \in \text{int } X$ (3.7) заміняється рівністю $f'(x_*) = 0$.

Якщо $f(x)$ опукла на X , то умова (3.7) – достатня для того, щоб $x_* \in X_*$.

➤**Н е о б х і д н і с т ь.** Нехай $x_* \in X_*$, тоді для довільних $x \in X$ і $\alpha \in [0,1]$ маємо

$$0 \leq f(x_* + \alpha(x - x_*)) - f(x_*) = \alpha(f'(x_*), x - x_*) + 0(\alpha),$$

або $(f'(x_*), x - x_*) + 0(\alpha)/\alpha \geq 0$. При $\alpha \rightarrow 0$ отримуємо умову (3.7).

Якщо $x_* \in \text{int } X$, то для довільного $h \in R^n$ знайдеться таке $\varepsilon_0 > 0$, що

$$x^1 = x_* + \varepsilon h \in X \quad \text{i} \quad x^2 = x_* - \varepsilon h \in X$$

як тільки $\varepsilon < \varepsilon_0$, а це означає, що $(f'(x_*), h) \geq 0$, $(f'(x_*), -h) \geq 0$, що можливо лише при $f'(x_*) = 0$.

Д о с т а т н і с т ь. Нехай $f(x) \in C^1(X)$, опукла на X , і для деякої точки x_* виконується умова (3.7), тоді з нерівності (3.6)

$$f(x) - f(x_*) \geq (f'(x_*), x - x_*) \geq 0.$$

$$\text{Отже, } f(x) \geq f(x_*) \quad \forall x \in X,$$

тобто $x_* \in X_*$. ◀

Розглянемо деякі диференціальні критерії опуклих функцій.

Теорема 3.13. Нехай $f(x) \in C^1(X)$ на опуклій множині $X \subset R^n$. Функція $f(x)$ сильно опукла зі сталою $\theta \geq 0$ на X тоді і тільки тоді, коли

$$f(x) - f(y) \geq (f'(y), x - y) + \theta \|x - y\|^2 \quad \forall x, y \in X.$$

➤Доводять теорему аналогічно до теореми 3.11. Геометричний сенс цієї теореми полягає у тому, що графік функції $f(x)$ лежить вище від графіка гіперплощини і має з нею лише одну спільну точку $(y, f(y))$. ◀

Теорема 3.14. Нехай $f(x) \in C^1(X)$ на опуклій множині $X \subset R^n$. Функція $f(x)$ сильно опукла зі сталою $\theta \geq 0$ на X тоді і тільки тоді, коли

$$(f'(x) - f'(y), x - y) \geq 2\theta \|x - y\|^2, \forall x, y \in X \quad (3.8)$$

(у випадку $\theta = 0$ йдеться про опуклу функцію).

➤. **Н е о б х і д н і с т ь.** Нехай $f(x)$ сильно опукла на X .

Використаємо попередню теорему і запишемо:

$$f(x) - f(y) \geq (f'(y), x - y) + \theta \|x - y\|^2,$$

$$f(y) - f(x) \geq (f'(x), y - x) + \theta \|x - y\|^2$$

для всіх $x, y \in X$. Додавши ці нерівності, отримаємо (3.8).

Д о с т а т н і с т ь. Нехай виконується (3.8), тоді:

$$\begin{aligned} f(x) - f(y) - (f'(y), x - y) &= \int_0^1 (f'((y + \tau(x - y))), x - y) d\tau - (f'(y), x - y) = \\ &= \int_0^1 (f'(y + \tau(x - y)) - f'(y), x - y) d\tau = \int_0^1 \frac{1}{\tau} (f'(y + \tau(x - y)) - f'(y), \tau(x - y)) d\tau \geq \\ &\geq \int_0^1 2\theta\tau \|x - y\|^2 d\tau = \theta \|x - y\|^2. \quad \blacktriangleleft \end{aligned}$$

У цьому ланцюжку перетворень використано формулу Ньютона - Лейбніца і нерівність (3.8) для $\tau \in [0, 1]$.

Теорема 3.15. Нехай $f(x) \in C^2(X)$ на опуклій множині $X \subset R^n$, причому $\text{int } X \neq \emptyset$. Функція $f(x)$ сильно опукла зі сталою $\theta > 0$ на X тоді і тільки тоді, якщо

$$(f''(x)h, h) \geq 2\theta \|h\|^2, \quad \forall x \in X, \quad h \in R^n. \quad (3.9)$$

При $\theta = 0$ ця умова означає, що в будь-якій точці $x \in X$ матриця Гессе функції $f(x)$ невід'ємно визначена. У разі $\theta > 0$ умова (3.9) сильніша, ніж просто додатна визначеність цієї матриці. Зазначимо, що в нашому випадку θ не залежить від $y \in X$. Доведення цієї теореми можна відшукати в [12]. \blacktriangleleft

Наслідок 3.2. Нехай A – симетрична матриця розмірності $n \times n$, $b \in R^n$. Квадратична функція $f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x)$ опукла (сильно опукла) на R^n тоді і тільки тоді, коли A невід'ємно (додатно) визначена.

У цьому випадку $f''(x) = A$. Якщо A додатно визначена, то число $m = \min_{\|h\|=1} (Ah, h)$ додатне, тоді виконується (3.9) при $m = \theta$.

Зазначимо, що з додатної визначеності матриці $f''(x)$ не випливає сильна опуклість функції $f(x)$. Наприклад, $f(x) = e^x$ не є сильно опуклою на R , водночас є сильно опуклою на множині $X' = [\alpha, \infty]$, де $\alpha > -\infty$ – довільне число. Вимога $\theta > 0$ є суттєвою для сильної опуклості функції. Опукла функція на деякій опуклій множині може бути недиференційовна, градієнт не існує. У цьому випадку можна використовувати поняття субградієнта та субдиференціала, які заміняють у багатьох питаннях поняття градієнта і зводяться до нього, якщо функція диференційовна.

Означення 3.13. Нехай функція $f(x)$ визначена на множині $X \subset R^n$. Вектор $c = c(y) \in R^n$ є субградієнтом функції $f(x)$ у точці $y \in X$, якщо

$$f(x) \geq f(y) + (c(y), x - y), \quad \forall x \in X \tag{3.10}$$

Множину всіх субградієнтів функції $f(x)$ у точці y називають субдиференціалом цієї функції в точці y і позначають через $\partial f(y)$.

Нерівність (3.10) має простий геометричний зміст і означає, що графік функції $f(x)$, ($x \in X$) лежить не нижче від графіка лінійної функції $f(y) + (c(y), x - y)$, ($x \in X$), причому в точці $x = y$ два графіки збігаються. Для гладких функцій градієнт є субградієнтом. Розглянемо функцію $f(x) = |x|$, $x \in R$ тоді

$$\partial f = \begin{cases} \{-1\}, & x < 0; \\ [-1,1], & x = 0; \\ \{1\}, & x > 0. \end{cases}$$

Субдиференціал відіграє важливу роль у разі дослідження задач опуклого програмування і побудови числових методів розв'язування таких задач. Нижче розглянемо, як впливають на опуклість деякі операції над функціями.

Теорема 3.16. Якщо функції $f_i(x)$, $i = \overline{1, m}$ опуклі на опуклій множині X , то функція

$$f(x) = \sum_{i=1}^m \alpha_i f_i(x) \quad (3.11)$$

опукла на цій множині при довільних $\alpha_i \geq 0$, $i = \overline{1, m}$.

Теорема 3.17. Нехай $f_i(x)$, $i = \overline{1, m}$ опуклі функції на опуклій множині X , тоді $f(x) = \sup_i f_i(x)$, $x \in X$ опукла на X .

Наслідок 3.3. Нехай функція $g(x)$ опукла на опуклій множині X . Тоді функція $g^+(x) = \max\{g(x), 0\}$ опукла на X .

Теорема 3.18. Нехай $\varphi(t)$, $t \in R$ опукла і не спадає на $[a, b] \in R$, $g(x)$ опукла на опуклій множині $X \subseteq R^n$, причому $g(x) \in [a, b]$ для всіх $x \in X$. Тоді функція $f(x) = \varphi(g(x))$ опукла на X .

➤ Візьмемо $x, y \in X$; $\alpha \in [0, 1]$, тоді

$$\begin{aligned} f(\alpha x + (1 - \alpha)y) &= \varphi(g(\alpha x + (1 - \alpha)y)) \leq \varphi(\alpha g(x) + (1 - \alpha)g(y)) \leq \\ &\leq \alpha \varphi(g(x)) + (1 - \alpha)\varphi(g(y)) = \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) \end{aligned}$$

Наслідок 3.4. Якщо функція $g(x)$ опукла і невід'ємна на опуклій множині X , то функція $f(x) = g(x)^p$ опукла на X при всіх $p \geq 1$.

Теорема 3.19. Нехай X – опукла множина, функція $f(x)$ опукла на X . Тоді множина $M(c) = \{x : x \in X, f(x) \leq c\}$ опукла при довільному c .

Зазначимо, що множину $M(c)$ прийнято називати множиною Лебега.

Теорема 3.20. Нехай X_0 – опукла множина, функції $g_i(x)$, $i = \overline{1, m}$ опуклі на X_0 , а $g_i(x) = (a_i, x) - b_i$, $i = m+1, \dots, s$ – лінійні, тоді множина

$$X = \{x : x \in X_0, g_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m}, g_i(x) = 0, i = \overline{m+1, s}\} – \text{опукла.}$$

Теорема 3.21. Нехай $f(x)$ – опукла функція на опуклій множині $X \in R^n$. Тоді $f(x)$ неперервна в довільній точці $x_* \in \text{int } X$.

Доведення сформульованих теорем можна знайти в [7, 15].

Теорема 3.22. Нехай $f(x)$ – неперервна, сильно опукла зі сталою $\theta > 0$ функція на замкнутій, опуклій множині X . Тоді при довільному β множина

$$X_\beta = \{x \in X : f(x) \leq \beta, \beta \in R\}$$

є обмежена.

➤ Зафіксуємо довільну точку $x^0 \in X_\beta$ (якщо $X_\beta = \emptyset$, то твердження теореми тривіальне). Нехай $U = U\{x^0, 1\}$ – куля одиничного радіуса з центром у x^0 . З огляду на неперервність $f(x)$ і замкнутість X , існує стала α така, що

$$f(x) \geq \alpha \quad \forall x \in X \cap U \tag{3.12}$$

Покажемо, що

$$\|x - x^0\| \leq 1 + \frac{\beta - \alpha}{\theta} \quad \forall x \in X_\beta \quad (3.13)$$

а це означатиме обмеженість множини X_β . Якщо $x \in X_\beta \cap U$, то $\|x - x^0\| \leq 1$, тобто нерівність (3.13) виконується. Нехай $x \in X_\beta \setminus U$.

Приймемо $\lambda = 1/\|x - x^0\|$, $\bar{x} = \lambda x + (1 - \lambda)x^0$, тоді $0 < \lambda < 1$ і $\bar{x} \in X \cap U$. Послідовно враховуючи нерівність (3.12), сильну опуклість функції $f(x)$, умови $f(x^0) \leq \beta$, $f(x) \leq \beta$ і визначення λ , одержимо:

$$\begin{aligned} \alpha &\leq f(\bar{x}) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(x^0) - \theta\lambda(1 - \lambda)\|x - x^0\|^2 \leq \\ &\leq \beta - \theta\lambda(1 - \lambda)\|x - x^0\|^2 = \beta - \theta(\|x - x^0\| - 1). \end{aligned}$$

Звідси отримуємо (3.13). ◀

Наслідок 3.5. При виконанні умов теореми 3.22 точка мінімуму функції $f(x)$ на множині X існує і єдина.

Це випливає з теореми Вейєрштрасса і мінімуму строго опуклих функцій.

3.3. Віддільність множин і опорні гіперплощини

Поняття опорної гіперплощини і віддільність множин, які не перетинаються, відіграють важливу роль у теорії оптимізації. Для розгляду цих питань нам потрібне поняття проекції точки на множину.

Означення 3.15. Проекцією точки $x \in R^n$ на множину X називають найближчу до x точку \bar{x} з множини X , для якої виконується умова

$$\|x - \bar{x}\| = \inf_{y \in X} \|y - x\|.$$

Проекцію точки x на множину X позначатимемо $P_X(x) = \bar{x}$. Оскільки $\rho(x, X) = \inf_{y \in X} \|x - y\|$ – відстань від точки x до множини X , то з означення 3.15 випливає :

$$\rho(x, X) = \|x - P_X(x)\| \leq \|x - y\|, \quad \forall y \in X, \quad \forall x \in R^n.$$

Якщо $x \in X$, то $P_X(x) = x$ і $\rho(x, X) = 0$. Проекція точки $x \in R^n$ на множину X не завжди існує. Наприклад, $X = \{x \in R^n; \|x\| < 1\}$. Якщо X – замкнута множина, то будь-яка точка $x \in R^n$ має проекцію на X . Проекція точки $x \in R^n$ на множину X може визначатися неоднозначно (рис. 3.1). Для опуклих множин такої ситуації немає.

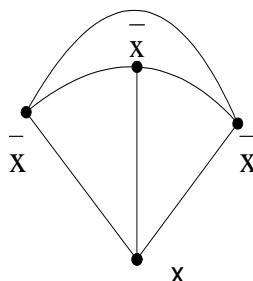


Рис. 3.1.

Теорема 3.23. Нехай $X \subset R^n$ опукла замкнута множина , тоді:

- 1) будь-яка точка $a \in R^n$ має єдину проекцію на цю множину;
- 2) для того, щоб точка \bar{x} була проекцією точки a на X , необхідно і достатньо виконання нерівності

$$(\bar{x} - a, x - \bar{x}) \geq 0, \quad \forall x \in X ; \tag{3.14}$$

3) якщо X – афінна множина, то замість (3.14) виконується умова

$$(\bar{x} - a, x - \bar{x}) = 0, \quad \forall x \in X; \quad (3.15)$$

Розглянемо довільну точку $x \in X$, число $r = \|\bar{x} - a\|$ і множину $\tilde{X} = \{x \in X : \|x - a\| \leq r\}$. Ця множина не порожня, замкнута й обмежена. За теоремою Вейерштрасса точка мінімуму неперервної функції $g(x) = \|a - x\|^2$ на \tilde{X} існує. З визначення $g(x)$ зрозуміло, що ця точка буде точкою мінімуму функції $g(x)$ на множині X . Отже, $\bar{x} = P_X(a)$ існує. За теоремою 3.12 для того щоб у точці x досягався мінімум, необхідно і достатньо, щоби $(g'(\bar{x}), x - \bar{x}) = 2(\bar{x} - a, x - \bar{x}) \geq 0$ для всіх $x \in X$, що рівносильно (3.14). Якщо X – афінна множина, то $X = \{x \in R^n : Ax = b\}$, і для цієї множини нерівність (3.14) також виконується. Однак афінна множина має таку властивість: якщо $x, y_0 \in X$, то $2y_0 - x \in X$. Прийнявши $y_0 = \bar{x}$, отримаємо $2\bar{x} - x \in X$ при довільному $x \in X$. Підставимо в (3.14) замість x точку $2\bar{x} - x$, тоді

$$(\bar{x} - a, 2\bar{x} - x - \bar{x}) = (\bar{x} - a, \bar{x} - x) \geq 0 \quad \forall x \in X.$$

Порівнявши з (3.14), отримаємо рівність (3.15). \blacktriangleleft

Наведемо деякі приклади, коли проекцію точки можна записати явно.

Приклад 3.1. Нехай $X = \{x \in R^n : \|x - x^0\| \leq r\}$ – куля радіусом r з центром у точці x^0 . Проекцію точки $x \notin X$ є точка $\bar{x} = x^0 + r(x - x^0) / \|x - x^0\|$.

Приклад 3.2. Нехай $X = \{x \in R^n : (c, x) = \gamma, c \in R^n, c \neq 0, \gamma \in R\}$. Проекцію на гіперплощині шукаємо у вигляді $\bar{x} = x + \alpha c; c -$

вектор-нормаль до X , α визначаємо з умови
 $\bar{x} \in X$, $(\bar{x}, c) = (x + \alpha c, c) = \gamma$, звідси $\alpha = (\gamma - (x, c)) / \|c\|^2$ і

$$\bar{x} = x + (\gamma - (x, c))c / \|c\|^2.$$

Якщо виконуються умови теореми 3.23, то, використавши умову (3.14), можемо записати

$$\begin{aligned} (\bar{x} - a, y - \bar{x} + a - a) &= (\bar{x} - a, y - a) - (\bar{x} - a, \bar{x} - a) = \\ &= (\bar{x} - a, y - a) - \|\bar{x} - a\|^2 \geq 0, \end{aligned}$$

тобто виконується нерівність ($\bar{x} \neq a$)

$$(\bar{x} - a, y - a) \geq \|\bar{x} - a\|^2 > 0. \quad (3.16)$$

Із (3.14) та (3.16) бачимо, що кут між векторами $\bar{x} - a$, $x - \bar{x}$ не тупий (скалярний добуток невід'ємний), а між векторами $\bar{x} - a$ і $y - a$ “із запасом” гострий (скалярний добуток строго додатний).

Ще раз нагадаємо визначення гіперплощини.

Означення 3.16. Сукупність точок $H = \{x : (p, x) = \alpha\}$, де $p \neq 0$, $p \in R^n$, $\alpha \in R$ утворюють гіперплощину H у просторі R^n . Вектор p називають нормаллю до гіперплощини H .

Гіперплощина H задає два замкнуті півпростори

$$\bar{H}_+ = \{x : (p, x) \geq \alpha\}, \bar{H}_- = \{x : (p, x) \leq \alpha\}$$

і два відкриті півпростори

$$H_+ = \{x : (p, x) > \alpha\}, H_- = \{x : (p, x) < \alpha\}.$$

Гіперплощину H можна задавати в іншому вигляді $H = \{x : (p, x - x^0) = 0\}$, де $x^0 \in H$. Аналогічно можна задати і півпростори.

Означення 3.17. Нехай X_1, X_2 – непорожні множини із R^n . ГоворяТЬ, що гіперплощина $H = \{x : (p, x) = \alpha\}$

1) відділяє X_1, X_2 , якщо $(p, x) \geq \alpha \quad \forall x \in X_1 \quad \text{i} \quad (p, x) \leq \alpha \quad \forall x \in X_2$;

2) відділення називають власним, якщо справджується умова
1) і $(p, x_1) > (p, x_2)$ для деяких $x_i \in X_i, i = 1, 2$;

3) відділяє строго X_1, X_2 , якщо $(p, x) > \alpha \quad \forall x \in X_1 \quad \text{i} \quad (p, x) < \alpha \quad \forall x \in X_2$;

4) відділяє сильно X_1, X_2 , якщо існує $\varepsilon > 0$ таке, що

$$(p, x) \geq \alpha + \varepsilon \quad \forall x \in X_1 \quad \text{i} \quad (p, x) \leq \alpha - \varepsilon \quad \forall x \in X_2.$$

Приклади віддільності множин проілюстровано на рис. 3.2.

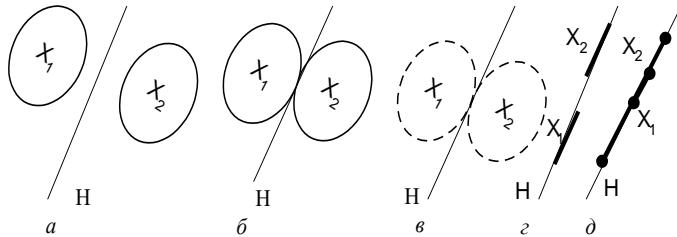


Рис. 3.2. Різні види віддільності опуклих множин:

a - сильна; *b* - власна; *c* - строга; *g*, *d* - невласна

Сформулюємо теорему про віддільність множини X і точки $y \notin X$.

Теорема 3.24. Нехай $X \subset R^n$ – замкнута опукла множина і $y \notin X$. Тоді існують такий вектор $p \neq 0$, $p \in R^n$ і скаляр $\alpha \in R$, що $(p, y) > \alpha$ і $(p, x) \leq \alpha$ для всіх $x \in X$.

➤ В нашому випадку існує єдина точка \bar{x} , яка є проекцією y , $\bar{x} = P_X(y)$, і виконується умова

$$(x - \bar{x}, y - \bar{x}) \leq 0 \quad \forall x \in X \tag{3.17}$$

Оскільки з (3.17)

$$-(\bar{x}, y - \bar{x}) \leq -(x, y - \bar{x}) \quad \forall x \in X ,$$

то можемо записати

$$\begin{aligned} \|y - \bar{x}\|^2 &= (y - \bar{x}, y - \bar{x}) = (y, y - \bar{x}) - (\bar{x}, y - \bar{x}) \leq \\ &\leq (y, y - \bar{x}) - (x, y - \bar{x}) = (y - \bar{x}, y - x) \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\text{Прийнявши } p = y - \bar{x} \neq 0, \text{ маємо } (p, y) \geq (p, x) + \|p\|^2 \quad \forall x \in X .$$

При $\alpha = \sup(p, x)$ отримаємо твердження теореми. \blacktriangleleft

На підставі результатів цієї теореми можна сформулювати теорему Фаркаша, яку широко використовують з метою виведення умов оптимальності для задач математичного програмування.

Теорема 3.25 (Теорема Фаркаша). Нехай A - матриця розмірності $m \times n$, $c \in R^n$. Тоді розв'язок має тільки одна з таких систем:

$$\text{система 1: } Ax \leq 0; \quad (c, x) > 0; \quad x \in R^n;$$

$$\text{система 2: } A^T y = c, \quad y \geq 0, \quad y \in R^m.$$

➤Нехай система 2 має розв'язок, тобто існує вектор $y \geq 0$ такий, що $A^T y = c$. Нехай $Ax \leq 0$, тоді $(c, x) = (A^T y, x) = (y, Ax) \leq 0$. Отже, система 1 не має розв'язку.

Припустимо, що система 2 не має розв'язку. Розглянемо замкнуту опуклу множину $Z = \{x : x = A^T y, y \geq 0\}$. За припущенням $c \notin Z$. Тоді, з огляду на теорему 3.24, існують вектор $p \in R^n$, $p \neq 0$ і число $\alpha \in R$ такі, що $(p, c) > \alpha$, $(p, x) \leq \alpha \quad \forall x \in Z$. Оскільки, $0 \in Z$, то $\alpha \geq 0$, $(p, c) > 0$, і $\alpha \geq (p, A^T y) = (y, Ap) \quad \forall y \geq 0$. Компоненти вектора $y \geq 0$ можуть бути як завгодно великими, тому з останньої нерівності отримуємо $Ap \leq 0$. Отже, p – розв'язок системи 1. \blacktriangleleft

Наслідок 3.6. Нехай A - матриця порядку $m \times n$, $c \in R^n$. Тоді має розв'язок одна і тільки одна з таких двох систем:

$$\text{система 1: } Ax \leq 0, \quad x \geq 0, \quad (c, x) > 0, \quad x \in R^n;$$

$$\text{система 2: } A^T y \geq c, \quad y \geq 0, \quad y \in R^m.$$

Наслідок 3.6 випливає з теореми 3.25, якщо прийняти $\tilde{A}^T = [A^T, -I]$, де I - одинична матриця розмірності $n \times n$. У цьому випадку наші системи можна переписати у вигляді

$$\begin{pmatrix} A \\ -1 \end{pmatrix} x \leq 0, \quad (c, x) > 0, \quad x \in R^n; \quad [\tilde{A}^T, -I] y = c, \quad y \geq 0,$$

$y \in R^{n+m}$, що відповідає теоремі Фаркаша.

Наслідок 3.7. Нехай A - матриця порядку $m \times n$, B - матриця порядку $l \times n$, $c \in R^n$, тоді має розв'язок одна з таких систем:

$$\text{система 1: } Ax \leq 0, \quad Bx = 0, \quad (c, x) > 0, \quad x \in R^n;$$

$$\text{система 2: } A^T y + B^T z = c, \quad y \geq 0, \quad y \in R^m, \quad z \in R^l.$$

➤ Введемо матрицю $\tilde{A} = \begin{pmatrix} A \\ B \\ -B \end{pmatrix}$, тоді наші системи можна переписати у такому вигляді:

$$\text{система 1: } \tilde{A}x \leq 0, \quad (c, x) > 0, \quad x \in R^n;$$

$$\text{система 2: } A^T y + B^T z^1 - B^T z^2 = c, \quad y \geq 0; \quad y \in R^m, \quad z^i \geq 0,$$

$$z^i \in R^l, \quad i=1,2,$$

а це відповідає теоремі Фаркаша.

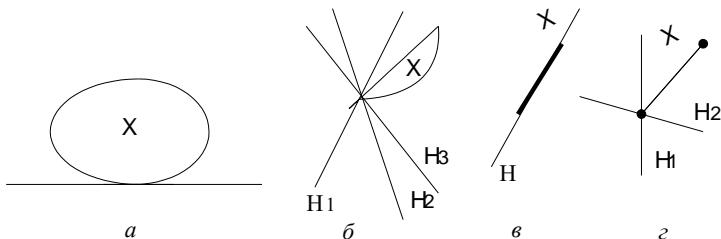
Означення 3.18. Нехай $X \neq \emptyset$, $X \subset R^n$ і $\bar{x} \in G_0(X)$. Гіперплощину $H = \{x : (p, x - \bar{x}) = 0\}$ називають опорною до X у точці \bar{x} , якщо або $X \subset \overline{H}_+$, тобто $(p, x - \bar{x}) \geq 0 \quad \forall x \in X$, або $X \subset \overline{H}_-$, тобто $(p, x - \bar{x}) \leq 0 \quad \forall x \in X$.

Якщо $X \not\subset H$, то H називають власне опорною гіперплощиною до X у точці \bar{x} .

Це означення можна змінити, а саме:

Означення 3.18'. Гіперплощина $H = \{x : (p, x - \bar{x}) = 0\}$ є опорною до X у точці \bar{x} , якщо $(p, \bar{x}) = \inf\{(p, x), x \in X\}$, або $(p, \bar{x}) = \sup\{(p, x), x \in X\}$.

Приклади опорних гіперплощин зображені на рис. 3.3.



РРис.3.3. Приклади опорних гіперплощин:

а – єдина опорна гіперплощина; б, г – безліч опорних гіперплощин; в – невласна опорна гіперплощина

Теорема 3.26. Нехай $X \subset R^n$ – непорожня опукла множина і $\bar{x} \in G_0(X)$. Тоді існує гіперплощина, опорна до X у точці \bar{x} , тобто існує такий ненульовий вектор p , що $(p, x - \bar{x}) \leq 0$ для всіх $x \in X$.

► Оскільки $\bar{x} \in G_0(X)$, то існує послідовність $y_k \notin \bar{X}$ для всіх k і $y_k \rightarrow \bar{x}$. За теоремою 3.24 для кожного y_k існує вектор $p_k \in R^n$, $p_k \neq 0$ такий, що $(p_k, y_k) > (p_k, x) \quad \forall x \in \bar{X}$. У цьому разі можна вибрати p_k так, що $\|p_k\|=1$. Оскільки $\{p_k\}$ обмежена, то можна вибрати збіжну підпослідовність $\{p_{k_i}\}_{I+}$ до деякого p . Для цієї послідовності виконуються умови $(p_{k_i}, y_{k_i}) > (p_{k_i}, x)$ при довільному $x \in \bar{X}$. Зафіксуємо довільну точку x і перейдемо до границі при $k \rightarrow \infty$, $k \in I+$, $x \in X$. Тоді $(p, x - \bar{x}) \leq 0$. ◀

Наслідок 3.8. Нехай $X \subseteq R^n$ – непорожня опукла множина і $\bar{x} \notin X$. Тоді знайдеться ненульовий вектор p такий, що $(p, x - \bar{x}) \leq 0$ для всіх $x \in X$.

У процесі доведення розглядаємо два випадки: $\bar{x} \notin \bar{X}$, $\bar{x} \in G_0(X)$.

Вище розглянуто віддільність точки і множини. Нижче покажемо, що дві опуклі множини, які не перетинаються, можуть бути розділені гіперплощиною.

Теорема 3.27. Нехай X_1 і X_2 – не порожні опуклі множини в R^n такі, що $X_1 \cap X_2 = \emptyset$. Тоді існує гіперплощина H , яка відділяє X_1, X_2 , тобто існує такий вектор $p \neq 0, p \in R^n$, що

$$\inf\{(p, x); x \in X_1\} \geq \sup\{(p, x); x \in X_2\}.$$

➤Розглянемо опуклу множину

$$X = X_1 - X_2 = \{x = x_1 - x_2 : x_1 \in X_1, x_2 \in X_2\}.$$

Оскільки $X_1 \cap X_2 = \emptyset$, то $0 \notin X$, тоді знайдеться вектор $p \neq 0$ такий, що $(p, x) \geq 0 \quad \forall x \in X$, а це означає $(p, x_1) \geq (p, x_2)$ для всіх $x_1 \in X_1, x_2 \in X_2$. ◀

Наслідок 3.9. Якщо $X_1 \cap X_2 \neq \emptyset$ – опуклі множини з R^n , $\text{int } X_2 \neq \emptyset$, $X_1 \cap \text{int } X_2 = \emptyset$, тоді існує такий вектор $p \neq 0$, що $\inf((p, x), x \in X_1) \geq \sup((p, x), x \in X_2)$.

Доведення випливає з теореми 3.27, якщо X_2 замінити на $\text{int } X_2$ і врахувати

$$\sup\{(p, x), x \in X_2\} = \sup\{(p, x), x \in \text{int } X_2\}.$$

Теорема 3.28 (Теорема Жордана). Нехай A - матриця розмірності $m \times n$, тоді з двох систем:

система 1: $Ax < 0, x \in R^n$;

система 2: $A^T p = 0, p \geq 0, p \in R^m, p \neq 0$,

має розв'язок лише одна.

➤ Нехай система 1 має розв'язок \bar{x} . Тоді $A\bar{x} < 0$. Припустимо, що існує розв'язок \bar{p} системи 2. Тоді $\bar{p} \geq 0$, $\bar{p} \neq 0$, і виконується нерівність $(\bar{p}, A\bar{x}) < 0$, тобто $(\bar{x}, A^T \bar{p}) < 0$. Однак $A^T \bar{p} = 0$ і ми отримали суперечність.

Припустимо, що система 1 не має розв'язку. Розглянемо дві множини $X_1 = \{z : z = Ax, x \in R^n\}$, $X_2 = \{z : z < 0\}$. У нашому випадку $X_1 \cap X_2 = \emptyset$. Тоді знайдеться гіперплощина, яка розділяє ці множини. Існує ненульовий вектор p такий, що $(p, Ax) \geq (p, z)$ для довільного $x \in R^n$ і $z \in \bar{X}_2$. Оскільки координати вектора z можуть бути які завгодно великі по модулю від'ємні числа, то $p \geq 0$. Прийнявши $z = 0 \in \bar{X}_2$, отримаємо $(p, Ax) \geq 0$ для всіх $x \in R^n$. Виберемо $x = -A^T p$, тоді $(p, A(-A^T p)) = -(A^T p, A^T p) \geq 0$, отже $A^T p = 0$. ◀

Теорема 3.29 (Сильна віддільність). Нехай X_1, X_2 – замкнуті опуклі множини, і X_1 обмежена. Якщо $X_1 \cap X_2 = \emptyset$, то існує такий вектор $p \neq 0$ і скаляр $\varepsilon > 0$, що

$$\inf\{(p, x), x \in X_1\} \geq \varepsilon + \sup\{(p, x), x \in X_2\}.$$

➤ Нехай $X = X_1 - X_2$. Тоді X опукла множина і $0 \notin X$. Покажемо, що X замкнута. Нехай $\{x_k\}$, $(x_k \in X)$ збігається до x . За означенням X кожний елемент послідовності можна записати у вигляді $x_k = y_k - z_k$, де $y_k \in X_1$, $z_k \in X_2$. Оскільки X_1 компакт, то існує підпослідовність $\{y_{k_i}\}_k$, яка збігається до $y \in X_1$. Оскільки $y_{k_i} - z_{k_i} \rightarrow x$, $y_{k_i} \rightarrow y$, то $z_{k_i} \rightarrow z$, причому $z \in X_2$ з огляду на замкнутість. Звідси випливає, що $x = y - z$, $y \in X_1$, $z \in X_2$, тобто $x \in X$. Отож X замкнута множина. Тоді знайдеться такий ненульовий вектор p і число ε , що $(p, x) \geq \varepsilon \quad \forall x \in X$ і $(p, 0) < \varepsilon$. Отже $\varepsilon > 0$. З означення X отримаємо $(p, x_1) \geq \varepsilon + (p, x_2)$ для довільних $x_1 \in X_1$, $x_2 \in X_2$. ◀

? Запитання для самоперевірки

1. Дайте визначення опуклої та сильно опуклої множин.
2. Дайте визначення конуса та опуклого конуса.
3. Дайте визначення афінної множини.
4. Дайте визначення опуклої, невід'ємної та афінної комбінацій.
5. Дайте визначення опуклої, конічної та афінної оболонок.
6. Сформулюйте теорему Каратаеодорі.
7. Дайте визначення опуклої, строго опуклої та сильно опуклої функції.
8. Доведіть нерівність Йенсена.
9. Наведіть приклад застосування нерівності Йенсена.
10. Властивість точки локального мінімуму для опуклих функцій.
11. Сформулюйте необхідні і достатні умови оптимальності.
12. Дайте визначення субдиференціала та субградієнта функції.
13. За яких умов множина Лебега обмежена.
14. Дайте визначення проекції точки на множину.
15. Як визначити проекцію точки на окремі множини (куля, гіперплошина і т.д.).
16. Дайте визначення гіперплощини.
17. Наведіть приклади віддільності множин.
18. Сформулюйте теорему про віддільність точки та множини.
19. Доведіть теорему Фаркаша.
20. Сформулюйте наслідки з теореми Фаркаша.
21. Дайте визначення опорної гіперплощини.
22. Сформулюйте і доведіть теорему про віддільність множин.
23. Теорема про існування опорної гіперплощини.
24. Сформулюйте і доведіть теорему Жордана.
25. Сформулюйте і доведіть теорему про сильну віддільність множин.

 **Завдання для самостійної роботи**

1. Знайти проекцію точки $(1,1)$ на множину $\{(x, y) \in R^2 \mid x^2 + y^2 \leq 1\}$.
2. Використовуючи властивість опуклих функцій, дослідити на опуклість:
 1. а) функцію Розенброка $f(x, y) = 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2$,
 2. б) $f(x, y) = x^2 - xy + 4y^2 + e^{x^2+y^2}$,
 3. в) $f(x, y) = x^2 - 4xy + 4y^2 + e^{x^2+y^2}$,
 4. г) $f(x, y) = 5x^2 - 3xy + 4y^2 + e^{x^2+y^2}$,
3. Перевірити виконання необхідних умов локального мінімуму в точці $M(1,1)$ для задачі мінімізації функції Розенброка 2а) за умови $x^2 + y^2 \leq 2$.
4. Довести опуклість функцій:
 - а) $y = e^{x^2} \quad x \in R$;
 - б) $y = \cos x \quad x \in [\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}]$.
5. Нехай $f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x) + c$ де A матриця розмірності $n \times n$, $x, b \in R^n$, $c \in R$. Довести що $f(x)$ строго опукла тоді і тільки тоді, якщо A додатньо визначена.
6. Нехай X_1, X_2 опуклі множини. Довести, що $X = X_1 \cup X_2$ може бути не опуклою множиною.
7. Довести опуклість множин:
 - а) $X = \left\{ x \in R^n \mid (a, x) \leq 0, 0 \neq a \in R^n \right\}$.
 - б) $X = \left\{ x \in R^n \mid (a, x) = 0, 0 \neq a \in R^n \right\}$

4. УМОВИ ОПТИМАЛЬНОСТІ

■ План викладу матеріалу:

1. Загальні положення.
2. Необхідні і достатні умови екстремуму у випадку обмежень нерівностей.
3. Необхідні і достатні умови екстремуму у випадку задач зі змішаними обмеженнями.

→ Ключові терміни розділу:

- | | |
|---|---|
| <p>✓ Точка екстремуму</p> <p>✓ Конус можливих напрямів</p> <p>✓ Необхідні умови оптимальності Ф. Джона</p> <p>✓ Напрям спадання значення функції</p> <p>✓ Множники Лагранжа</p> | <p>✓ Умови регулярності</p> <p>✓ Активні обмеження</p> <p>✓ Необхідні умови оптимальності Куна-Таккера</p> <p>✓ Умови доповнюючої нежорсткості</p> <p>✓ Стационарні точки</p> |
|---|---|

4.1. Загальні положення

Розглянемо задачу

$$f(x) \rightarrow \min, \quad x \in X \subseteq R^n, \text{ де } f : R^n \rightarrow R. \quad (4.1)$$

У вступі ми вже розглядали умови оптимальності для задач (4.1) без обмежень, коли $X = R^n$. В практичних застосуваннях такі задачі трапляються зрідка, однак умови оптимальності для задач з обмеженнями є логічним узагальненням аналогічних умов для задач безумовної оптимізації. Необхідні і достатні умови існування екстремуму для задач безумовної оптимізації сформульовані в теоремах 1.3–1.5. Якщо функція $f(x)$ проста, то, використовуючи результати цих теорем, можна легко розв'язати задачу (4.1).

Приклад 4.1. Розглянемо задачу

$$f(x) = (x^2 - 1)^3 \rightarrow \min \quad x \in R.$$

Знайдемо критичні точки

$$f'(x) = 0, \quad 6x(x^2 - 1)^2 = 0, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = 1, \quad x_3 = -1.$$

Тепер перевіримо умови оптимальності другого порядку

$$f''(x) = 24x^2(x^2 - 1)^2 + 6(x^2 - 1)^2,$$

при цьому

$$f''(0) = 6 > 0, \quad f''(1) = f''(-1) = 0.$$

У всіх трьох точках $f''(x) \geq 0$, тобто невід'ємно визначена і необхідні умови виконуються. Однак достатні умови виконуються лише в точці $x = 0$, яка є точкою мінімуму. В цьому легко переконатися побудовою графіка функції $f(x)$, що на рис.4.1.

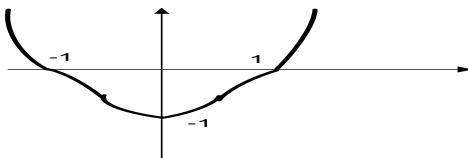


Рис. 4.1 Ескіз графіка

Точки $x = -1, x = 1$ є точками перегину. Перейдемо тепер до задач з обмеженнями, а саме $X \neq R^n$ і $X \subseteq R^n$.

Означення 4.1. Нехай $X \neq \emptyset$, $X \subset R^n$ і $\bar{x} \in \bar{X}$. Конусом можливих напрямів у точці \bar{x} називають множину $D_0 = \{d \in R^n, d \neq 0, \bar{x} + \lambda d \in X, \forall \lambda \in (0, \delta)\}$ для деякого достатньо малого $\delta > 0$. Довільний вектор з D_0 називають можливим напрямом.

Легко бачити, що при виконанні умови $(f'(\bar{x}), d) < 0$, d є напрямом спадання функції $f(x)$, мале переміщення з точки \bar{x} вздовж напряму d зумовлює зменшення $f(x)$, тобто для достатньо малого $\delta > 0$ виконується умова

$$f(\bar{x} + \lambda d) < f(\bar{x}), \quad \forall \lambda \in (0, \delta) \tag{4.2}$$

Теорема 4.1. Нехай функція $f(x)$ диференційовна в точці \bar{x} і $(f'(\bar{x}), d) < 0$, для деякого вектора $d \neq 0$, тоді існує таке $\delta > 0$, що $f(\bar{x} + \lambda d) < f(\bar{x})$ для всіх $\lambda \in (0, \delta)$, тобто d є напрямом спадання $f(x)$ з точки \bar{x} .

Наслідок 4.1. Якщо $f(x) \in C^1(X)$ і має в точці $\bar{x} \in \text{int } X$ локальний мінімум, то $f'(\bar{x}) = 0$.

Теорема 4.2. Нехай $X \neq \emptyset$, $X \subseteq R^n$, функція $f(x)$ диференційовна в деякій точці \bar{x} . Якщо \bar{x} є точкою локального мінімуму, то $F_0 \cap D_0 = \emptyset$, де $F_0 = \{d : (f'(\bar{x}), d) < 0\}$.

У цій теоремі F_0 є множиною напрямів з x , вздовж яких функція $f(x)$ спадає.

➤Доведення проведемо від протилежного. Нехай існує $d \in F_0 \cap D_0$. Тоді за теоремою 4.1 існує $\delta_1 > 0$ таке, що

$$f(\bar{x} + \lambda d) < f(\bar{x}), \forall \lambda \in (0, \delta_1) \quad (4.3)$$

а з означення 4.1 існує $\delta_2 > 0$ таке, що

$$\bar{x} + \lambda d \in X, \forall \lambda \in (0, \delta_2) \quad (4.4)$$

Співвідношення (4.3), (4.4) суперечать тому, що \bar{x} точка локального мінімуму $f(x)$. Отже, $D_0 \cap F_0 = \emptyset$. ↘

4.2. Необхідні та достатні умови екстремуму у випадку обмежень нерівностей

На практиці область X часто задають у вигляді

$$X = \{x : x \in X_0, q_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m}\}, \quad (4.5)$$

де $q_i(x) : R^n \rightarrow R$, $i = \overline{1, m}$, $X \subset R^n$ – непорожня множина. В цьому випадку задачу (4.1) можна записати так

$$f(x) \rightarrow \min, x \in X \quad (4.6)$$

де X подано за (4.5).

Теорема 4.3. Нехай $\bar{x} \in X$ з (4.5), X_0 – непорожня, відкрита множина, функції $f(x)$, і $q_i(x)$ при $i \in I = \{i : q_i(\bar{x}) = 0, i = \overline{1, m}\}$, диференційовні в точці \bar{x} , а функції $q_i(x)$ при $i \notin I$ неперервні в \bar{x} . Якщо \bar{x} – точка локального мінімуму, то $F_0 \cap G_0 = \emptyset$, де $F_0 = \{d : (f'(\bar{x}), d) < 0\}$, $G_0 = \{d : (q'_i(\bar{x}), d) < 0 \quad \forall i \in I\}$.

➤ Нехай $d \in G_0$, оскільки $\bar{x} \in X_0$ і X_0 відкрита множина, то існує $\delta_1 > 0$ таке, що

$$\bar{x} + \lambda d \in X_0, \quad \lambda \in (0, \delta_1) \quad (4.7)$$

Оскільки, $q_i(\bar{x}) < 0$ для $i \notin I$ і неперервні в околі \bar{x} , то існує $\delta_2 > 0$ таке, що

$$q_i(\bar{x} + \lambda d) < 0, \quad \forall \lambda \in (0, \delta_2), \quad i \notin I. \quad (4.8)$$

Якщо врахувати, що $d \in G_0$, то знайдеться таке $\delta_3 > 0$, при якому

$$q_i(\bar{x} + \lambda d) \leq q_i(\bar{x}) = 0, \quad \forall \lambda \in (0, \delta_3), \quad i \in I \quad (4.9)$$

Отже, існує таке $\delta = \min\{\delta_1, \delta_2, \delta_3\}$, що умови (4.7) – (4.9) виконуються при $\lambda \in (0, \delta)$, отож вектор d належить конусу допустимих напрямів з точки \bar{x} , тобто $G_0 \subset D_0$. Оскільки \bar{x} – точка локального мінімуму задачі (4.6), то за теоремою 4.2 маємо $D_0 \cap F_0 = \emptyset$, а це означає, що $F_0 \cap G_0 = \emptyset$. ↙

Примітка. Множину $I = \{i : q_i(\bar{x}) = 0, i = \overline{1, m}\}$ називатимемо множиною активних обмежень у точці \bar{x} .

Приклад 4.2. Розглянемо задачу

$$(x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min,$$

$$\begin{aligned} X = \{x \in R^2 : &x_1^2 + x_2^2 - 5 \leq 0, \quad x_1 + x_2 - 3 \leq 0, \\ &-x_1 \leq 0, \quad -x_2 \leq 0\} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Розглянемо точку $\bar{x} = \left(\frac{9}{5}, \frac{6}{5} \right)$. У цій точці активним є лише одне обмеження $q_2(x) = x_1 + x_2 - 3$. При цьому $f'(x)$ і $q'_2(x)$ набувають, відповідно, значення $f'(\bar{x}) = \left(-\frac{12}{5}, -\frac{8}{5} \right)^T$; $q'_2(\bar{x}) = (1,1)^T$.

На рис. 4.2 зображені множини F_0 і G_0 . Оскільки $F_0 \cap G_0 \neq \emptyset$, то точка \bar{x} не є точкою локального мінімуму.

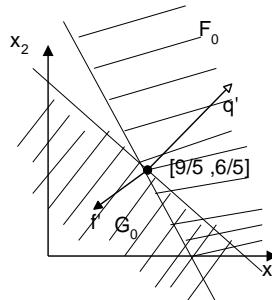


Рис. 4.2

Розглянемо тепер точку $x^* = (2,1)$. Перші два обмеження активні і градієнти в точці x^* дорівнюють

$$f'(x^*) = (-2, -2)^T,$$

$$q'_1(x^*) = (4, 2)^T,$$

$$q'_2(x^*) = (1, 1)^T$$

Множини F_0 і G_0 зображені на рис. 4.3, при цьому $F_0 \cap G_0 = \emptyset$. Отже, умови нашої теореми виконуються, хоча не можна гарантувати, що x^* є розв'язком сформульованої задачі.

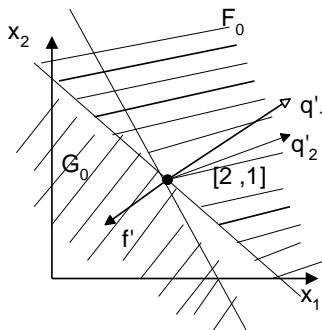


Рис. 4.3

Необхідні умови дають змогу визначити лише критичні точки, тобто точки, які можуть бути розв'язком цієї задачі. Ефективність сформульованої теореми суттєво залежить від того, в якій формі наведено обмеження.

Приклад 4.3. Розглянемо задачу

$$(x_1 - 1)^2 + (x_2 - 1)^2 \rightarrow \min,$$

$$X = \{x \in R^2 : (x_1 + x_2 - 1)^3 \leq 0, -x_1 \leq 0, -x_2 \leq 0\} \quad (4.11)$$

У цьому випадку область X еквівалентна області X_1

$$X_1 = \{x \in R^2 : x_1 + x_2 - 1 \leq 0, -x_1 \leq 0, -x_2 \leq 0\}..$$

Легко бачити, що умова $G_0 \cap F_0 = \emptyset$ виконується в першому випадку для всіх точок відрізка $x_1 + x_2 - 1 = 0$, в другому випадку лише в точці $x^* = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, яка є розв'язком задачі (4.11).

Отже, ми навели приклад, коли необхідні умови виконуються і в неоптимальних точках. Такий випадок матимемо і тоді, коли $f'(\bar{x}) = 0$. Оскільки $F_0 = \{d : (f'(\bar{x}), d) < 0\} = \emptyset$, то $F_0 \cap G_0 = \emptyset$. Аналогічно виконуються умови оптимальності і для точок \bar{x} , в яких $q'_i(\bar{x}) = 0$ для деякого $i \in I$.

Розглянемо тепер задачі з обмеженнями – рівностями

$$f(x) \rightarrow \min, \quad x \in X, \quad (4.12)$$

$$X = \{x : x \in X_0, \quad q_i(x) = 0, i = \overline{1, s}\}.$$

Обмеження типу $q_i(x) = 0$ еквівалентні двом обмеженням $q_i(x) \leq 0, -q_i(x) \leq 0$. Тоді для довільних допустимих точок $\bar{x} \in X$ всі обмеження активні. Отож не існує вектора $d \neq 0$, для якого виконується обмеження $(q_i(\bar{x}), d) < 0, (-q_i(\bar{x}), d) < 0$. Тобто $G_0 = \emptyset$ і $G_0 \cap F_0 = \emptyset$. Необхідні умови виконуються для всіх допустимих точок і фактично жодної користі не дають.

Вище розглянуто необхідні умови в геометричній формі. Тепер переформулюємо ці умови в термінах градієнтів функцій $f(x)$ та $q_i(x), i = \overline{1, m}$.

Теорема 4.4 (Умови Ф. Джона). Нехай $X_0 \neq \emptyset$ відкрита множина з R^n , точка \bar{x} є точкою локального мінімуму для задачі (4.6), функції $f(x), q_i(x)$ для $i \in I = \{i : q_i(\bar{x}) = 0, i = \overline{1, m}\}$ диференційовні в точці \bar{x} , а функції $q_i(x)$ для $i \notin I$ неперервні в \bar{x} , тоді існують такі числа $\lambda_0, \lambda_i, i \in I$, для яких

$$\lambda_0 f'(\bar{x}) + \sum_{i \in I} \lambda_i q'_i(\bar{x}) = 0 \quad (4.13)$$

$$(\lambda_0, \lambda) \geq 0, (\lambda_0, \lambda) \neq 0$$

де λ – вектор, компонентами якого є числа $\lambda_i, i \in I$.

Якщо функції $q_i(x)$ при $i \notin I$, крім того, диференційовні в точці \bar{x} , то умови (4.13) можна записати у вигляді:

$$\lambda_0 f'(\bar{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i q'_i(\bar{x}) = 0 \quad (4.13')$$

$$\lambda_i g_i(\bar{x}) = 0, \quad i = \overline{1, m},$$

$$(\lambda_0, \lambda) \geq 0, (\lambda_0, \lambda) \neq 0,$$

де λ – вектор з компонентами $\lambda_1, \dots, \lambda_m$.

➤ Оскільки \bar{x} – локальний мінімум задачі (4.6), то згідно з теоремою 4.3, не існує такого вектора d , для якого виконується умова $(f'(\bar{x}), d) < 0, (q'_i(\bar{x}), d) < 0 \quad \forall i \in I$. Побудуємо матрицю A , рядками якої є компоненти векторів $f'(\bar{x})$ та $q'_i(\bar{x})$ для $i \in I$. Умови оптимальності еквівалентні тому, що система нерівностей $Ad < 0$ несумісна. За теоремою Жордана існує вектор $p \neq 0, p \geq 0$ для якого $A^T p = 0$. Прийнявши λ_0 та $\lambda_i, i \in I$ такими, що дорівнюють відповідним компонентам вектора p , отримаємо умову (4.13'). Форму необхідних умов типу (4.13') легко одержати, прийнявши $\lambda_i = 0$ для $i \notin I$. ◀

Числа λ_i в умовах (4.13), (4.13') називають множниками Лагранжа, а рівність $\lambda_i q_i(\bar{x}) = 0, i = \overline{1, m}$ – умовою доповнюючої нежорсткості.

Приклад 4.4. Розглянемо задачу

$$(x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min$$

$$X = \{x \in R^2 : x_1^2 + x_2^2 - 5 \leq 0, x_1 + 2x_2 - 4 \leq 0, -x_1 \leq 0, -x_2 \leq 0\}.$$

Допустиму область зображену на рис. 4.4 (заштриховано)

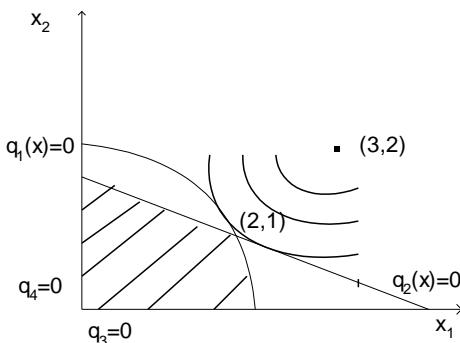


Рис. 4.4

Перевіримо виконання умов (4.13') в оптимальній точці $\bar{x} = (2,1)$. У заданій точці $I = \{1,2\}$. Отож $\lambda_3 = \lambda_4 = 0$, $f'(\bar{x}) = (-2, -2)^T$, $q'_1(\bar{x}) = (4, 2)^T$, $q'_2(\bar{x}) = (1, 2)^T$. Для вектора $(\lambda_0, \lambda) = (\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, 0, 0)$ повинні виконуватись умови

$$\lambda_0 \begin{pmatrix} -2 \\ -2 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Розв'язком цієї системи є числа $\lambda_1 = \frac{1}{3}\lambda_0$, $\lambda_2 = \frac{2}{3}\lambda_0$.

Прийнявши $\lambda_0 = 3$, отримаємо $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 2$. Отже, умова (4.13') виконується.

Розглянемо іншу точку, наприклад, $\tilde{x} = (0,0)$. Для цього випадку $I = \{3,4\}$ і

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 0, \quad f'(\tilde{x}) = (-6, -4)^T, \quad q'_3(\tilde{x}) = (-1, 0)^T, \quad q'_4(\tilde{x}) = (0, -1)^T.$$

Для визначення параметрів λ_i маємо систему

$$\lambda_0 \begin{pmatrix} -6 \\ -4 \end{pmatrix} + \lambda_3 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_4 \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

розв'язком якої є $\lambda_3 = -6\lambda_0$, $\lambda_4 = -4\lambda_0$. Можливі два варіанти:

a) $\lambda_0 > 0$, тоді $\lambda_3 < 0$, $\lambda_4 < 0$ і умова $(\lambda_0, \lambda) \geq 0$ не виконується;

б) $\lambda_0 = 0$, тоді $\lambda_3 = \lambda_4 = 0$ і умова $(\lambda_0, \lambda) \neq 0$ не виконується.

Умови Ф.Джона не виконуються, точка не є точкою мінімуму.

Приклад 4.5. Розглянемо задачу, запропоновану Куном і Таккетром 1951 р.:

$$-x_1 \rightarrow \min, \quad x \in X,$$

$$X = \{x \in R^2 : x_2 - (1-x_1)^3 \leq 0, -x_2 \leq 0\}.$$

Допустиму область зображена на рис. 4.5.

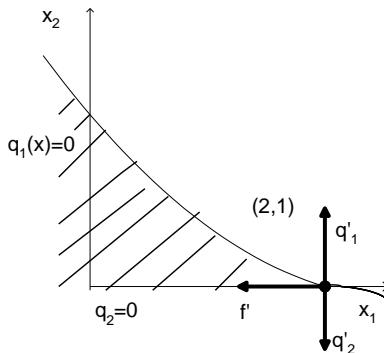


Рис. 4.5

Оптимальною є точка $\bar{x} = (1, 0)$. У цій точці для визначення λ_i маємо систему

$$\lambda_0 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

розв'язком якої є $\lambda_0 = 0, \lambda_1 = \lambda_2 = \alpha > 0$. Отже, в точці $\bar{x} = (1, 0)$ необхідні умови оптимальності (4.13') виконуються.

Як бачимо, у прикладі 4.4 $\lambda_0 > 0$, вектори $q'_i(\bar{x})$ лінійно незалежні, а в прикладі 4.5 $\lambda_0 = 0$, вектори $q'_i(\bar{x})$ лінійно залежні. У випадку, коли $\lambda_0 = 0$, в умовах (4.13) не використано інформації про функцію мети. Умови (4.13) просто фіксують, що вектори

$q'_i(\bar{x})$ лінійно залежні, тобто існує лінійна комбінація градієнтів тих обмежень, які активні.

У такому випадку умови (4.13) неефективні для відшукання оптимальних точок. Постає питання, коли можна гарантувати, що $\lambda_0 > 0$. Відповідь на це питання у 1951 р. дали Кун і Таккер. Обмеження повинні задовольняти певні додаткові умови. Ці умови названо умовами регулярності.

Теорема 4.5 (Необхідні умови Куна-Таккера). Нехай $X_0 \subset R^n$ непорожня відкрита множина. Якщо \bar{x} – точка локального мінімуму задачі (4.6), функції $f(x)$, $q_i(x)$ для $i \in I$ диференційовні, а $q_i(x)$ для $i \notin I$ неперервні в точці \bar{x} , вектори $q'_i(\bar{x})$ для $i \in I$ лінійно незалежні, то існують такі числа λ_i для $i \in I$, що

$$f'(\bar{x}) + \sum_{i \in I} \lambda_i q'_i(\bar{x}) = 0, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i \in I. \quad (4.14)$$

У випадку, коли функції $q_i(x)$ при $i \notin I$ диференційовні в точці \bar{x} , умови (4.14) можна переписати у вигляді

$$f'(\bar{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i q'_i(\bar{x}) = 0,$$

$$\lambda_i q'_i(\bar{x}) = 0, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = \overline{1, m}. \quad (4.14')$$

➤ За теоремою 4.4 існують числа $\tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}_i$ для $i \in I$, які не всі дорівнюють нуллю, і такі, що

$$\tilde{\lambda}_0 f'(\bar{x}) + \sum_{i \in I} \tilde{\lambda}_i q'_i(\bar{x}) = 0,$$

$$(\tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}) \geq 0, \quad (\tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}) \neq 0,$$

$\tilde{\lambda}$ – вектор, компоненти якого $\in \tilde{\lambda}_i$ для $i \in I$. Оскільки $q'_i(\bar{x})$ для $i \in I$ лінійно незалежні, то $\tilde{\lambda}_0 > 0$, в іншому випадку ($\tilde{\lambda}_0 = 0$) всі компоненти $\tilde{\lambda}_i = 0$, що суперечить умові $(\tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}) \neq 0$. Прийнявши

$\lambda_i = \frac{\tilde{\lambda}_i}{\tilde{\lambda}_0}$, отримаємо умови (4.14). Умови (4.14') одержимо аналогічно, як у теоремі 4.4 при $\lambda_i = 0$ для $i \notin I$. \blacktriangleleft

Як і в умовах Джона, числа λ_i називають множниками Лагранжа, а умови $\lambda_i q_i(\bar{x}) = 0$ -умовами доповнівальної нежорсткості. Якщо повернутися до прикладів 4.4, 4.5, то легко бачити, що у прикладі 4.4 умови Куна-Таккера виконуються при $\lambda = (1/3, 2/3, 0, 0)$, а у прикладі 4.5 вони не виконуються, оскільки $q'_1(\bar{x})$ і $q'_2(\bar{x})$ лінійно залежні.

Розглянемо геометричну інтерпретацію умов Куна-Таккера. Довільний вектор, записаний у вигляді $\sum_{i \in I} \lambda_i q'_i(\bar{x})$, де $\lambda_i \geq 0$, належить конусу, натягнутому на вектори градієнтів відповідних функцій у точці \bar{x} . З умов (4.14) випливає, що

$$-f'(\bar{x}) = \sum_{i \in I} \lambda_i q'_i(\bar{x}), \quad \lambda_i \geq 0.$$

Отже, вектор $-f'(\bar{x})$ належить цьому конусу натягнутому на вектори $q'_i(\bar{x})$, $i \in I$.

Розглянемо задачу

$$f(x) = (x_1 - x_1^0)^2 + (x_2 - x_2^0)^2 \rightarrow \min_X.$$

На рис. 4.6 область X заштриховано, точка $(x_1^0, x_2^0) \notin X$, лінії рівня зображені дугами.

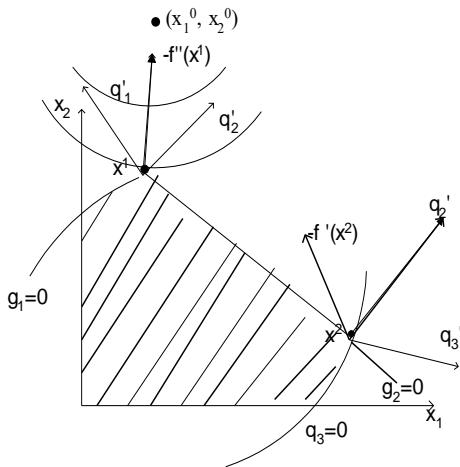


Рис 4.6

Розглянемо дві точки x^1, x^2 . Легко бачити, що в точці x^1 , яка є точкою мінімуму, вектор $-f'(x^1)$ належить конусу, натягнутому на вектори $q'_1(x^1), q'_2(x^1)$. У випадку точки x^2 , яка не є точкою мінімуму, цього не простежується. Аналогічну картину маємо і на попередніх рисунках.

Теорема 4.6 (Достатні умови Куна-Таккера). Нехай \bar{x} - довільна допустима точка задачі (4.6). Множина X_0 – непорожня відкрита в R^n , функції $f(x)$ та $q_i(x)$ для $i \in I$ опуклі і диференційовні в точці \bar{x} , $\text{int } X \neq \emptyset$. Якщо в \bar{x} виконуються умови Куна-Таккера, то \bar{x} – точка глобального мінімуму задачі (4.6).

➤ Нехай x – довільна допустима точка задачі (4.6). Тоді $q_i(\bar{x}) \geq q_i(x)$ для $i \in I$. Звідси отримаємо, що q_i не зростає унаслідок руху з точки \bar{x} у напрямі $x - \bar{x}$, а це означає, що повинна виконуватись нерівність $(q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) \leq 0$. Звідси для $\lambda_i \geq 0$ $i \in I$

$$\sum_{i \in I} \lambda_i (q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) \leq 0 \quad (4.15)$$

Тепер з урахуванням умов (4.14) отримаємо

$$(f'(\bar{x}), x - \bar{x}) + \sum_{i \in I} \lambda_i (q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) = 0$$

Тобто

$$(f'(\bar{x}), x - \bar{x}) = - \sum_{i \in I} \lambda_i (q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) \geq 0$$

З опукості $f(x)$ одержимо $f(x) \geq f(\bar{x}) \Leftarrow$.

4.3 Необхідні та достатні умови екстремуму у випадку задач зі змішаними обмеженнями.

Перейдемо до задачі зі змішаними обмеженнями, а саме

$$f(x) \rightarrow \min, \quad x \in X \quad (4.16)$$

$$X = \{x : x \in X_0, \quad q_i(x) \leq 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad q_i(x) = 0, \quad i = \overline{m+1, s}\}$$

Узагальненням теореми 4.3 на клас задач (4.16) є така теорема.

Теорема 4.7. Нехай $X_0 \neq \emptyset$ – відкрита множина з R^n , \bar{x} – точка локального мінімуму задачі (4.16), функції $q_i(x)$ для $i \notin I = \{i : q_i(\bar{x}) = 0, i = \overline{1, m}\}$ неперервні, функції $f(x), q_i(x)$ для $i \in I$ диференційовні, а $q_i(x)$ $i = \overline{m+1, s}$ неперервно диференційовні в точці \bar{x} . Якщо вектори $q'_i(x)$, $i = \overline{m+1, s}$ лінійно незалежні, то $F_0 \cap G_0 \cap H_0 = \emptyset$,

$$\text{де } F_0 = \{d : (f'(\bar{x}), d) < 0\}, \quad G_0 = \{d : (d, q'_i(\bar{x})) < 0, i \in I\},$$

$$H_0 = \{d : (q'_i(\bar{x}), d) = 0, i = \overline{m+1, s}\}.$$

Доведення теореми можна знайти в [3].

Теорема 4.8 (Необхідні умови Ф. Джона). Нехай $X_0 \neq \emptyset$ – відкрита множина з R^n , \bar{x} – допустима точка для задачі (4.16), в якій функ-

ції $q_i(x)$ для $i \notin I$ неперервні, $f(x)$ та $q_i(x)$ для $i \in I$ диференційовні, а $q_i(x)$ для $i = \overline{m+1, s}$ неперервно диференційовні. Якщо \bar{x} – точка локального мінімуму для задачі (4.16), то існують числа λ_0, λ_i для $i \in I$ та λ_i для $i = \overline{m+1, s}$ такі, що

$$\lambda_0 f'(\bar{x}) + \sum_{i \in I} \lambda_i q'_i(\bar{x}) + \sum_{i=m+1}^s \lambda_i q'_i(\bar{x}) = 0, \quad (4.17)$$

$$\lambda_0 \geq 0, \quad \lambda_i \geq 0 \quad i \in I,$$

$$\lambda_0, \lambda_i \quad i \in I, \quad i = \overline{m+1, s}$$

не всі дорівнюють нулю.

У випадку, коли функції $q_i(x)$, для $i \notin I$ також диференційовні в точці \bar{x} , умови (4.17) можна переписати у вигляді

$$\lambda_0 f'(\bar{x}) + \sum_{i=1}^s \lambda_i q'_i(\bar{x}) = 0,$$

$$\lambda_i q_i(\bar{x}) = 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = \overline{0, m}, \quad \sum_{i=0}^s \lambda_i^2 \neq 0. \quad (4.17')$$

➤. Якщо $g'_i(\bar{x})$, $i = \overline{m+1, s}$ лінійно залежні, то існують числа λ_i ,

$$i = \overline{m+1, s}, \quad \text{які не всі дорівнюють нулю і такі, що} \quad \sum_{i=m+1}^s \lambda_i q'_i(\bar{x}) = 0.$$

Прийнявши $\lambda_i = 0$, $i = \overline{0, m}$, отримаємо першу частину твердження. Нехай тепер вектори $q'_i(\bar{x})$, $i = \overline{m+1, s}$ лінійно незалежні. Побудуємо матрицю A_1 , рядками якої є вектор-функції $f'(\bar{x})$ та $q'_i(\bar{x})$, $i \in I$, та матрицю A_2 , рядками якої є $q'_i(\bar{x})$, $i = \overline{m+1, s}$. З теореми 4.7 випливає несумісність системи

$$A_1 d < 0, \quad A_2 d = 0.$$

Розглянемо дві множини

$$S_1 = \{(z_1, z_2) : z_1 = A_1 d, \quad z_2 = A_2 d\},$$

$$S_2 = \{(z_1, z_2) : z_1 < 0, z_2 = 0\}.$$

Легко бачити, що $S_1 \neq \emptyset$, $S_2 \neq \emptyset$ - опуклі множини і $S_1 \cap S_2 = \emptyset$. Отже, існує відокремлювальна гіперплощина, тобто вектор $p = (p_1, p_2) \neq 0$ такий, що

$$(p_1, A_1 d) + (p_2, A_2 d) \geq (p_1, z_1) + (p_2, z_2) \quad (4.18)$$

для всіх $d \in R^n$, $(z_1, z_2) \in \bar{S}_2$. Оскільки $z_2 = 0$, а $z_1 < 0$, - довільний вектор, компоненти якого можуть бути як завгодно великі за абсолютною значенням і від'ємні, то $p_1 \geq 0$. Отже,

$$(p_1, A_1 d) + (p_2, A_2 d) = (A_1^T p_1 + A_2^T p_2, d) \geq 0 \text{ для } d \in R^n.$$

Приймемо

$$d = -(A_1^T p_1 + A_2^T p_2),$$

тоді правильна оцінка

$$-(A_1^T p_1 + A_2^T p_2, A_1^T p_1 + A_2^T p_2) \geq 0,$$

або $A_1^T p_1 + A_2^T p_2 = 0$.

Позначимо компоненти вектора p_i , відповідно, через λ_i , $i \in I$, а компоненти вектора p_2 через λ_i , $i = \overline{m+1, s}$. Тоді отримаємо першу частину твердження теореми 4.8 у випадку незалежних векторів $q'_i(\bar{x})$, $i = \overline{m+1, s}$. Другу частину твердження теореми отримаємо, якщо приймемо $\lambda_i = 0$, $i \notin I$. ↙

Приклад 4.6. Розглянемо задачу

$$\begin{matrix} x_1^2 + x_2^2 \\ X \end{matrix} \rightarrow \min,$$

$$X = \{x \in R^2 : x_1^2 + x_2^2 - 5 \leq 0, -x_1 \leq 0, -x_2 \leq 0, x_1 + 2x_2 - 4 = 0\}.$$

У записаній задачі маємо тільки одне обмеження-рівність. Множиною допустимих точок є відрізок прямої лінії $x_1 + 2x_2 - 4 = 0$ між точками А(0,2) та В(2,1) (див. рис. 4.7).

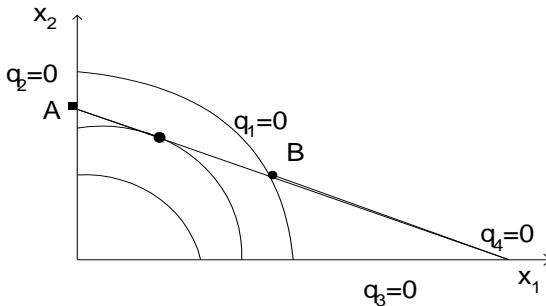


Рис. 4.7

Розглянемо точку $\bar{x} = \left(\frac{4}{5}, \frac{8}{5} \right)$ і перевіримо виконання умов (4.17) у цій точці. У нашому випадку активних обмежень-нерівностей немає: $I = \emptyset$, отже, $\lambda = (0, 0, 0, \lambda_4)$, λ_4 – відповідає обмеженню рівності,

$$f'(\bar{x}) = \left(\frac{8}{5}, \frac{16}{5} \right)^T; \quad q'_4(\bar{x}) = (1, 2)^T.$$

Для визначення λ_0 і λ_4 маємо систему рівнянь

$$\lambda_0 \begin{pmatrix} 8/5 \\ 16/5 \end{pmatrix} + \lambda_4 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = 0.$$

Одним із розв'язків цієї системи є $\lambda_0 = 5$, $\lambda_4 = -8$. Умови (4.17) виконуються.

Приклад 4.7. Розглянемо задачу

$$f(x) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min, \quad x \in X,$$

$$X = \{x \in R^2 : x_1^2 + x_2^2 - 5 \leq 0; -x_1 \leq 0, -x_2 \leq 0, x_1 + x_2 - 3 = 0\}.$$

Аналогічну задачу розглянуто в прикладі 4.2, лише одна нерівність замінена рівністю. Оптимальною в нашому випадку є точка $\bar{x} = (2, 1)$, $I = \{1\}$. Умови (4.17) набудуть вигляду:

$$\lambda_0 \begin{pmatrix} -2 \\ -2 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} + \lambda_4 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

які виконуються при $\lambda_1 = 0; \lambda_4 = 2\lambda_0$, наприклад, $\lambda_0 = 1, \lambda_1 = 0, \lambda_4 = 2; (\lambda_2 = \lambda_3 = 0)$.

Приклад 4.8. Розглянемо задачу

$$f(x) = -x_1 \rightarrow \min, \quad x \in X,$$

$$X = \{x \in R^2 : x_2 - (1 - x_1)^3 = 0, -x_2 - (1 - x_1)^3 = 0\}.$$

На рис. 4.8 бачимо $X = \{(1,0)\}$, тобто існує лише одна допустима точка $\bar{x} = (1,0)$, в якій

$$f'(\bar{x}) = (-1,0)^T; q'_1(\bar{x}) = (0,1)^T \quad q'_2(\bar{x}) = (0,-1)^T$$

і умови (4.17) набувають вигляду

$$\lambda_0 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \lambda_4 \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

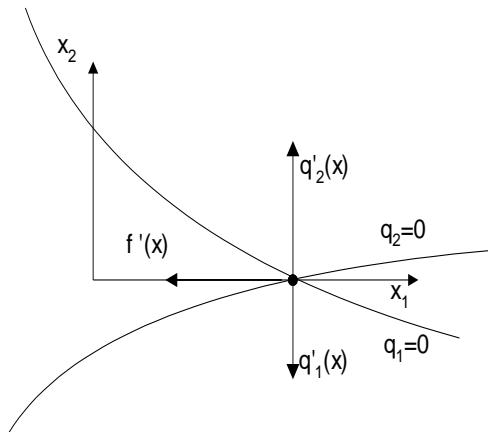


Рис. 4.8.

Звідси отримаємо $\lambda_0 = 0, \lambda_1 = \lambda_2 = \alpha \neq 0, \alpha$ - довільне число. Умови (4.17) виконуються. Отже, в умовах Джона множник λ_0 не обов'язково додатний, він може дорівнювати нулю, що робить умови Джона неефективними для знаходження точок $\bar{x} \in X$,

підозрілих на екстремум. З деякими додатковими обмеженнями на $q_i(x)$ можна стверджувати, що λ_0 буде більшим від нуля.

Теорема 4.9 (Необхідні умови Куна-Таккера). Нехай $X_0 \subset R^n$ – відкрита множина, \bar{x} – деяка допустима точка задачі (4.16), в якій функції $q_i(x)$ для $i \notin I$ неперервні, $f(x)$, $q_i(x)$ при $i \in I$ диференційовні, $q_i'(x)$ для $i \in I$ та $i = \overline{m+1, s}$ неперервно диференційовні, вектори $q'_i(x)$ для $i \in I$ та $i = \overline{m+1, s}$ лінійно незалежні. Якщо \bar{x} є точкою локального мінімуму, то знайдуться такі числа λ_i для $i \in I$ та $i = \overline{m+1, s}$, що

$$f'(\bar{x}) + \sum_{i \in I} \lambda_i q'_i(\bar{x}) + \sum_{i=m+1}^s \lambda_i q'_i(\bar{x}) = 0, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i \in I. \quad (4.19)$$

У випадку, коли $q_i(x)$ для $i \notin I$ також диференційовні в точці \bar{x} , то умови (4.19) можна переписати у такому вигляді:

$$\begin{aligned} f'(\bar{x}) + \sum_{i=1}^s \lambda_i q'_i(\bar{x}) &= 0 \\ \lambda_i q_i(\bar{x}) &= 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = \overline{1, m}. \end{aligned} \quad (4.19')$$

➤ За теоремою 4.8, існують числа $\tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}_i$ для $i \in I$ та $i = \overline{m+1, s}$, які не всі дорівнюють нулю, і такі, що виконуються умови (4.17)

$$\tilde{\lambda}_0 f'(\bar{x}) + \sum_{i \in I} \tilde{\lambda}_i q'_i(\bar{x}) + \sum_{i=m+1}^s \tilde{\lambda}_i q'_i(\bar{x}) = 0; \quad (4.20)$$

$\tilde{\lambda}_0 \geq 0$, $\tilde{\lambda}_i \geq 0$ для $i \in I$, та $\tilde{\lambda}_i$ не всі дорівнюють нулю.

При $\tilde{\lambda}_0 = 0$ з урахуванням незалежності векторів отримаємо, що всі $\tilde{\lambda}_i = 0$, а це неможливо за теоремою 4.8. Отже, в умовах нашої теореми $\tilde{\lambda}_0 > 0$. Приймемо $\lambda_i = \frac{\tilde{\lambda}_i}{\tilde{\lambda}_0}$ і з (4.20) отримаємо (4.19). Якщо прийняти $\lambda_i = 0$ для $i \notin I$, то отримаємо другу частину твердження, ↵

Легко бачити, що для задач з прикладів 4.6 та 4.7 умова (4.19') виконується, а для задачі з прикладу 4.8 – не виконується, оскільки градієнти для обмежень рівностей лінійно залежні.

Теорема 4.10 (Достатні умови Куна-Таккера). Нехай $X_0 \neq \emptyset$,

$X_0 \in R^n$ – відкрита множина, \bar{x} – деяка допустима точка для задачі (4.16), в якій виконуються умови Куна-Таккера, тобто існують числа $\lambda_i \geq 0$ для $i \in I$, та λ_i , для $i = \overline{m+1, s}$ такі, що

$$f'(\bar{x}) + \sum_{i \in I} \lambda_i q'_i(\bar{x}) + \sum_{i=m+1}^s \lambda_i q'_i(\bar{x}) = 0,$$

а також $f(x)$ та $q_i(x)$ для $i \in I$ опуклі, $q_i(x)$, $i = \overline{m+1, s}$ – лінійні, $int X \neq \emptyset$. Тоді \bar{x} є точкою глобального мінімуму.

➤ Нехай $x \in X$ – довільна допустима точка задачі (4.16). Тоді $q_i(\alpha x + (1-\alpha)\bar{x}) \leq q_i(\bar{x})$ для $\forall \alpha \in (0,1)$, $i \in I$, тобто вздовж напряму $x - \bar{x}$, з точки \bar{x} функція $q_i(x)$ не зростає

$$(q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) \leq 0, \quad i \in I. \quad (4.21)$$

З лінійності функції $q_i(x)$ для $i = \overline{m+1, s}$ отримуємо

$$(q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) = 0 \text{ для } i = \overline{m+1, s}. \quad (4.22)$$

Помножимо (4.21) на $\lambda_i \geq 0$, $i \in I$, а (4.22) – на довільне λ_i і додамо. Тоді

$$\sum_{i \in I} \lambda_i (q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) + \sum_{i=m+1}^s \lambda_i (q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) \leq 0 \quad (4.23)$$

Використавши (4.19) та (4.23), одержимо

$$(f'(\bar{x}), x - \bar{x}) + \sum_{i \in I} \lambda_i (q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) + \sum_{i=m+1}^s \lambda_i (q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) = 0$$

$$(f'(\bar{x}), x - \bar{x}) = - \sum_{i \in I} \lambda_i (q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) - \sum_{i=m+1}^s \lambda_i (q'_i(\bar{x}), x - \bar{x}) \geq 0.$$

Оскільки $f(x)$ опукла, то

$$f(x) \geq f(\bar{x}).$$

Перепишемо умови (4.19') у векторному вигляді

$$f'(\bar{x}) + {q'_a}^T(\bar{x})\lambda_a + {q'_b}^T(\bar{x})\lambda_b = 0$$

$$(\lambda_a, q_a(\bar{x})) = 0, \quad \lambda_a \geq 0, \quad \bar{x} \in X, \quad (4.24)$$

де λ_a – вектор з компонентами $\lambda_i \quad i = \overline{1, m}$; λ_b – вектор з компонентами $\lambda_{m+1}, \dots, \lambda_s$; $q'_a(\bar{x})$ – матриця розмірності $m \times n$, стовпцями якої є градієнти $q'_i(x) \quad i = 1, m$; $q'_b(x)$ – матриця розмірності $(s-m) \times n$, рядками якої є градієнти $q'_i(x)$ для $i = \overline{m+1, s}$. Умови Куна-Таккера (4.24) дають змогу обчислити значення невідомих компонент критичної точки \bar{x} та вектора λ , який відповідає цій точці в умовах Куна-Таккера. Справді, маємо $n+s$ невідомих x_i , $i = \overline{1, n}$; $\lambda_i, \quad i = \overline{1, s}$ і маємо $n+s$ рівнянь для їх обчислення, n рівнянь – це перша рівність з (4.24), m рівнянь – це друга рівність з (4.24) $\sum_{i=1}^m \lambda_i q_i(\bar{x}) = 0$ (оскільки $\lambda_i \geq 0, \quad q_i(\bar{x}) \leq 0$, то друга рівність з (4.24) еквівалентна m рівностям $\lambda_i q_i(x) = 0, \quad i = \overline{1, m}$) та $s-m$ рівнянь отримуємо з умови $\bar{x} \in X$, а саме $q_i(\bar{x}) = 0, \quad i = \overline{m+1, s}$. Зазначимо, що умови Куна-Таккера дають змогу визначити критичні точки, але їхнє використання пов'язано з лінійною незалежністю відповідних градієнтів, набір яких змінюється у разі переходу від однієї точки до іншої не тільки якісно, а й кількісно, що робить використання цих умов не завжди ефективним.

؟ Запитання для самоперевірки

1. Умови оптимальності для задачі $f(x) \rightarrow \min_{R^n}$.
2. Дайте означення конуса можливих напрямів.
3. Яким умовам задовольняють множини $F_0, i G_0$ у точці мінімуму (довести).
4. Необхідні умови мінімуму у геометричній формі для задач з обмеженнями нерівностями.
5. Умови Ф. Джона у випадку обмежень нерівностей.
6. Необхідні умови Куна-Таккера у випадку обмежень-нерівностей
7. Достатні умови Куна-Таккера у випадку обмежень-нерівностей.
8. Геометрична інтерпретація умов Куна-Таккера.
9. Необхідні умови Ф. Джона у випадку загальних обмежень .
10. Необхідні умови Куна-Таккера у випадку загальних обмежень .
11. Достатні умови Куна-Таккера у випадку загальних обмежень.

Завдання для самостійної роботи

1. Перевірити за теоремою Куна-Таккера виконання необхідних умов локального мінімуму для задачі

$$f(x, y) = (x^1 - 1)^2 + (x^2 - 4)^2 \rightarrow \min_X,$$

$$X = \{x \in R^2; 2x + y \leq 5, \quad x^2 + y^2 \leq 9, x \geq 0, y \geq 0\}$$

у точках

$$\text{a) } ((x, y)) = \left(2 - \frac{2}{\sqrt{5}}, 1 + \frac{4}{\sqrt{5}}\right)$$

$$\text{б) } (x, y) = (2, 1).$$

2. Перевірити виконання необхідних умов локального мінімуму в точці $M(1,1)$ для задачі мінімізації функції Розенброка

$$f(x, y) = 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2$$

за умови

$$x^2 + y^2 \leq 4$$

$$x + y = 2$$

3. Користуючись теоремою Куна-Таккера розв'яжіть задачі

a) $f(x, y, z) = 4x^2 + 4xy + 2y^2 - 4zy + 4z^2 + (z-2)^2 \rightarrow \min_X$

$$X = \{x \in R^3 \mid x + 2y + z \leq 10; \quad x \geq 0, y \geq 0, z \geq 0\}$$

б) $f(x, y, z) = x^2 + 4xy + 3y^2 - 8zy + 2z^2 + (z-2)^2 \rightarrow \min_X$

$$X = \{x \in R^3 \mid x + 2z \leq 10; \quad x^2 + y^2 + z^2 \leq 16, x \geq 0, \\ y \geq 0, z \geq 0\}.$$

5. СІДЛОВІ ТОЧКИ ФУНКЦІЇ ЛАГРАНЖА. ДВОЇСТІСТЬ

■ План викладу матеріалу:

1. Загальні положення.
2. Необхідні і достатні умови сідової точки функції Лагранжа.
3. Умови регулярності та сідлові точки.
4. Двоїсті задачі математичного програмування.
5. Зв'язок між двоїстими задачами математичного програмування
6. Двоїсті задачі у лінійному програмуванні.

☞ Ключові терміни розділу

✓ *Множники Лагранжа*

✓ *Двоїста задача*

✓ *Сідлова точка.*

✓ *Умови регулярності*

✓ *Канонічна задача лінійного
програмування*

✓ *Основна (стаціонарна)
задача) лінійного програмування*

✓ *Двоїста задача лінійного
програмування* ✓ *Загальна задача лінійного
програмування*

5.1. Загальні положення

**Розглянемо необхідні та достатні умови оптимальності
для задачі математичного програмування типу**

$$f(x) \rightarrow \min, \quad x \in X,$$

5.1)

$$X = \{x : x \in X_0; \quad q_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m}; \quad q_i(x) = 0, i = \overline{m+1, s}\}.$$

Якщо X_0 – деяка опукла множина з R^n , $f(x)$, $q_i(x)$, $i = \overline{1, m}$ опуклі, а $q_i(x)$, $i = \overline{m+1, s}$ – лінійні функції, то задачу (5.1) називають задачею опуклого програмування. Важливе місце в теорії опуклого програмування займає теорема про сідлову точку функції Лагранжа, яка відома в літературі як теорема Куна-Таккера (американські вчені, які перші сформулювали і довели деякі варіанти цієї теореми). Теорема визначає необхідні та достатні умови належності тієї ж або іншої точки до множини X_* , де

$$X_* = \{x : x \in X, \quad f(x) = \min_X f(x) = f_*\} \quad 5.2)$$

Введемо для задачі (5.1) регулярну функцію Лагранжа

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^s \lambda_i q_i(x) \quad 5.3)$$

де $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_s) \in \Lambda_0 = \{\lambda \in R^s : \lambda_i \geq 0, i = \overline{1, m}\}$, яку називатимемо функцією Лагранжа.

Означення 5.1. Точку $(x_*, \lambda^*) \in X_0 \times \Lambda_0$ називають сідовою точкою функції Лагранжа (5.3), якщо

$$L(x_*, \lambda) \leq L(x_*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*) \quad 5.4)$$

Для визначення сідової точки можна дати й інше формулювання.

5.2. Необхідні та достатні умови існування сідової точки

Лема 5.1. Для того щоби пара $(x_*, \lambda^*) \in X_0 \times \Lambda_0$ була сідовою точкою функції Лагранжа (5.3), необхідно і достатньо, щоб виконувались такі умови:

$$L(x_*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*), \quad \forall x \in X_0, \quad 5.5)$$

$$\lambda_i^* q_i(x_*) = 0, \quad i = \overline{1, s}, \quad x_* \in X. \quad 5.6)$$

Легко бачити, що права нерівність (5.4) збігається з (5.5), тому потрібно розглядати лише ліву частину нерівності (5.4).

➤ **Н е о б х і д н і с т ь.** Нехай пара $(x_*, \lambda^*) \in X_0 \times \Lambda_0$ є сідовою точкою функції Лагранжа, тобто виконується (5.4). Перепишемо ліву нерівність (5.4) у вигляді

$$\sum_{i=1}^s \lambda_i^* q_i(x_*) \leq \sum_{i=1}^s \lambda_i^* q_i(x_*),$$

або

$$\sum_{i=1}^s (\lambda_i^* - \lambda_i) q_i(x_*) \geq 0, \quad \forall \lambda \in \Lambda_0 \quad 5.7)$$

Виберемо $\lambda_{i_0} = \lambda^*_{i_0} + 1$ для деякого довільного $1 \leq i_0 \leq m$ та $\lambda_i = \lambda^*_i$ для $i \neq i_0$, $i = \overline{1, s}$. Легко бачити, що з (5.7) маємо - $q_{i_0}(x_*) \geq 0$, або $q_{i_0}(x_*) \leq 0$ для $1 \leq i_0 \leq m$. Тепер виберемо $\lambda_{i_0} = \lambda^*_{i_0} + q_{i_0}(x_*)$ для довільного $m+1 \leq i_0 \leq s$, а решту $\lambda_i = \lambda^*_i$, $i \neq i_0$, $i = \overline{1, s}$. Тоді з (5.7) $-q_{i_0}^2(x_*) \geq 0$, або $q_{i_0}(x_*) = 0$. Отже, $x_* \in X$. Приймемо $\lambda_{i_0} = 0$ для деякого довільного $1 \leq i_0 \leq m$, решту $\lambda_i = \lambda^*_i$ для $i \neq i_0$, $i = \overline{1, s}$. З (5.7) отримаємо $\lambda_{i_0}^* q_{i_0}(x_*) \geq 0$. Якщо зважити, що $\lambda_{i_0}^* \geq 0$ і $q_{i_0}(x_*) \leq 0$ ($x_* \in X$), то маємо $\lambda_{i_0}^* q_{i_0}(x_*) \leq 0$. Отже, $\lambda_i^* q_i(x_*) = 0$, $i = \overline{1, m}$. Оскільки для $i = \overline{m+1, s}$ рівність $q_i(x_*) = 0$ виконується із-за $x_* \in X$, то $\lambda_i^* q_i(x_*) = 0$ для $i = \overline{m+1, s}$. Отож умову (5.6) доведено.

Д о с т а т н і с т ь. Нехай виконуються умови (5.6). Покажемо, що виконується ліва нерівність з (5.4). З умови $x_* \in X$ отримуємо $q_i(x_*) \leq 0$ для $i = \overline{1, m}$ та $q_i(x_*) = 0$ для $i = \overline{m+1, s}$.

Отже,

$$(\lambda_i^* - \lambda_i) q_i(x_*) \geq 0 \quad \forall i = \overline{1, s}, \quad \lambda \in \Lambda_0. \quad 5.8)$$

Справді,

$$(\lambda_i^* - \lambda_i) q_i(x_*) = \lambda_i^* q_i(x_*) - \lambda_i q_i(x_*) = -\lambda_i q_i(x_*) \geq 0$$

Додавши всі нерівності (5.8), отримаємо

$$\sum_{i=1}^s \lambda_i^* q_i(x_*) \geq \sum_{i=1}^s \lambda_i q_i(x_*),$$

або

$$f(x_*) + \sum_{i=1}^s \lambda_i^* q_i(x_*) \geq f(x_*) + \sum_{i=1}^s \lambda_i q_i(x_*),$$

тобто маємо ліву нерівність з (5.4). \triangleleft

Виявляється, що сідлова точка (x_*, λ^*) і розв'язок задачі (5.1) взаємопов'язані.

Теорема 5.1. Нехай $(x_*, \lambda^*) \in X_0 \times \Lambda_0$ – сідлова точка функції Лагранжа для задачі (5.1). Тоді $x_* \in X_*$, $f_* = L(x_*, \lambda^*) = f(x_*)$, тобто x_* є розв'язком задачі (5.1).

\triangleright З умови (5.6) маємо $x_* \in X$, тоді

$$f(x_*) = f(x_*) + \sum_{i=1}^s \lambda_i^* q_i(x_*) = L(x_*, \lambda^*),$$

водночас $L(x_*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*) \quad \forall x \in X_0$, що можна переписати у вигляді

$$f(x_*) \leq f(x) + \sum_{i=1}^s \lambda_i^* q_i(x) \quad \forall x \in X_0. \quad 5.9$$

Оскільки $X \subset X_0$, то нерівність (5.9) виконується для $x \in X$. Враховуючи умови $q_i(x) \leq 0$ для $i = \overline{1, m}$, $q_i(x) = 0$ для $i = \overline{m+1, s}$, та умову $\lambda^*_i \geq 0$ для $i = \overline{1, m}$, маємо з (5.9)

$$f(x_*) \leq f(x). \blacktriangleleft$$

Примітка. Лема 5.1 і теорема 5.1 доведені без будь-яких обмежень на функції $f(x)$, $q_i(x)$, $i = \overline{1, s}$ та на множину X_0 щодо опукlosti.

Звичайно, виникає питання, чи для будь-якої задачі (5.1) функція Лагранжа має сідлову точку? Відповідь негативна.

Приклад 5.1. Розглянемо задачу

$$f(x) = -x \rightarrow \min, \quad x \in X$$

$$X = \{x \in [0, a]; \quad q(x) = x^2 \leq 0\}, \text{ де } 0 < a \leq \infty.$$

Тут $X_0 = [0, a]$ – опукла множина, $f(x), q(x)$ – опуклі функції на X_0 , $X = \{0\}$, $X_* = \{0\}$, $f_* = 0 = f(0)$; а функція Лагранжа має вигляд

$$L(x, \lambda) = -x + \lambda x^2, \quad 0 \leq x \leq a, \quad \lambda \geq 0.$$

Ця функція не має сідової точки, оскільки для достатньо малого числа x ($a > x > 0$), умова

$$L(x_*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*), \quad (0 \leq -x + \lambda^* x^2), \quad x \in X_0$$

не виконується. Отже, навіть опуклість не гарантує наявності сідової точки. Для існування сідової точки обмеження повинні задовольняти додаткові умови.

5.3. Умови регулярності та сідлові точки

Розглянемо обмеження типу нерівностей

$$X = \{x : x \in X_0, q_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m}\}. \quad (5.10)$$

Додатковими умовами при яких існує сідрова точка є умови регулярності області X . Ми вже розглядали такі умови вище, однак у певному сенсі вони неефективні для практичної реалізації. Далі розглянемо деяко інший варіант умов регулярності.

Означення 5.2. Множина (5.10) є регулярною, якщо існує точка $\bar{x} \in X$ така, що

$$q_i(\bar{x}) < 0 \quad \forall i = \overline{1, m}. \quad (5.11)$$

Якщо X_0 – опукла множина, функції $q_i(x)$, $i = \overline{1, m}$ опуклі на X_0 , то замість (5.11) можна використати умови, що для кожного $i = \overline{1, m}$ існує точка $\bar{x}_i \in X$ така, що $q_i(\bar{x}_i) < 0$. Справді, виберемо точку \bar{x} у вигляді

$$x = \sum_{i=1}^m \alpha_i \bar{x}_i, \text{де } \alpha_i > 0, \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i = 1,$$

тоді $\bar{x} \in X_0$ і

$$q_k(\bar{x}) = q_k\left(\sum_{i=1}^m \alpha_i \bar{x}_i\right) \leq \sum_{i=1}^m \alpha_i q_k(\bar{x}_i) < 0, k = \overline{1, m}.$$

Отже, умови (5.11) у цьому випадку також виконуються. Ці умови іноді називають умовами Слейтера.

Теорема 5.2. Нехай множина X_0 – опукла, функції $f(x)$, $q_i(x)$, $i = \overline{1, m}$ опуклі на X_0 , множина X – регулярна, $X_* \neq \emptyset$ – множина точок мінімуму функції $f(x)$ на X . Тоді для кожної точки $x_* \in X_*$ необхідно існувати множники Лагранжа $\lambda^* \in \Lambda_0$ такі, що пара (x_*, λ^*) утворює сідлову точку функції Лагранжа на множині $X_0 \times \Lambda_0$.

➤ В просторі R^{m+1} введемо множини

$$A = \{a = (a_0, a_1, \dots, a_m) \in R^{m+1} : a_0 \geq f(x), a_i \geq q_i(x), i = \overline{1, m}, x \in X_0\},$$

$$B = \{b = (b_0, b_1, \dots, b_m) \in R^{m+1} : b_0 < f_*, b_i < 0, i = \overline{1, m}\}.$$

Легко бачити, що $A \cap B = \emptyset$. Справді, нехай $a \in A$, тоді знайдеться така точка $x \in X_0$, що $a_0 \geq f(x)$, $a_i \geq q_i(x)$, $i = \overline{1, m}$. У цьому разі можливі варіанти:

a) $x \in X$, тоді $a_0 \geq f(x_*) \geq f_* > b_0$, отже, $a \notin B$;

б) $x \in X_0 \setminus X$, тоді існує індекс $1 \leq i_0 \leq m$, для якого $q_{i_0}(x) > 0$, отож $a_{i_0} \geq q_{i_0}(x) > 0 > b_{i_0}$ і знову $a \notin B$.

Множини A і B опуклі. Покажемо, що A – опукла множина. Нехай $a, c \in A$, тоді існують точки x та $y \in X_0$, для яких виконуються умови

$$a_0 \geq f(x), a_i \geq q_i(x), c_0 \geq f(y), c_i \geq q_i(y), i = \overline{1, m}.$$

Візьмемо точку $a_\alpha = \alpha a + (1 - \alpha)c$ і приймемо $x_\alpha = \alpha x + (1 - \alpha)y$, $\alpha \in (0, 1)$. З опукlosti $f(x)$ та $q_i(x)$, $i = \overline{1, m}$ випливає

$$f(x_\alpha) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) \leq \alpha a_0 + (1 - \alpha)c_0 = a_{\alpha_0},$$

$$q_i(x_\alpha) \leq \alpha q_i(x) + (1 - \alpha)q_i(y) \leq \alpha a_i + (1 - \alpha)c_i = a_{\alpha_i} \quad \forall i = \overline{1, m}.$$

Отримані оцінки свідчать, що $a_\alpha \in A$. Аналогічно доводять опуклість множини B . Отже, існує гіперплошина $(p, a) = \gamma$, де $p \in R^{m+1}$, $p \neq 0$, яка розділяє множини A і \overline{B} , а це означає, що

$$(p, b) = \sum_{i=0}^m p_i b_i \leq \gamma \leq (p, a) = \sum_{i=0}^m p_i a_i \quad \forall a \in A, \forall b \in \overline{B}. \quad (5.12)$$

Перейдемо до визначення вектора p . Приймемо

$$y = (f_*, 0, \dots, 0) \in A \cap \overline{B},$$

тоді

$$p_0 f_* \leq \gamma \leq p_0 f_* \quad \mathbf{i} \quad \gamma = p_0 f_*,$$

а (5.12) можна переписати у вигляді

$$p_0 b_0 + \sum_{i=1}^m p_i b_i \leq p_0 f_* \leq p_0 a_0 + \sum_{i=1}^m p_i a_i, \quad a \in A, \quad b \in \bar{B}. \quad (5.13)$$

Виберемо точку $b = (f_* - 1, 0, \dots, 0) \in \bar{B}$, тоді з лівого боку нерівності (5.13) маємо $-p_0 \leq 0$, отже, $p_0 \geq 0$. Для точки $b = (f_*, 0, \dots, 0, -1, 0, \dots, 0)$ з лівої нерівності (5.13) отримаємо $p_i \geq 0$, $i = \overline{1, m}$. Отже, $p \geq 0$. Тепер для довільної точки $x_* \in X_* \subset X$ візьмемо $a = b = (f_*, 0, \dots, 0, q_i(x_*), 0, \dots, 0) \in A \cap \bar{B}$. Використавши (5.12), отримаємо $p_i q_i(x_*) \leq 0 \leq p_i q_i(\bar{x})$, що еквівалентно рівності $p_i q_i(x_*) = 0$. Отож умови (5.6) доведені. Покажемо, що $p_0 > 0$.

Виберемо точку $a = (f(\bar{x}), q_1(\bar{x}), \dots, q_m(\bar{x})) \in A$, тоді з (5.13)

$$p_0 f_* \leq p_0 f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^m p_i q_i(\bar{x}).$$

Нехай $p_0 = 0$, тоді $\sum_{i=1}^m p_i q_i(\bar{x}) \geq 0$. Якщо врахувати, що

$p_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^m p_i > 0$, $q_i(\bar{x}) < 0$, то отримаємо суперечність $0 > 0$. Отже,

$p_0 > 0$. Приймемо $\lambda_i^* = \frac{p_i}{p_0}$, тоді з (5.13) для точки $a = (f(x), q_1(x), \dots, q_m(x)) \in A$ маємо

$$f(x_*) \leq f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* q_i(x) = L(x, \lambda^*), \quad x \in X_0.$$

З іншого боку, $f(x_*) = L(x_*, \lambda^*)$ при довільному $x_* \in X_*$.

Звідси випливає, що умови (5.5) виконані. \blacktriangleleft

Практично теореми 5.1 і 5.2 дають необхідні і достатні умови оптимальності для задачі (5.1).

Лема 5.2. Нехай (5.1) є задачею опуклого програмування, $f(x)$, $q_i(x) \in C^1(X_o)$, $i = \overline{1, m}$, тоді для того щоб точка $(x_*, \lambda^*) \in X_0 \times \Lambda_0$ була сідовою точкою функції Лагранжа, необхідно і достатньо, щоб

$$(L'_x(x_*, \lambda^*), x - x_*) = (f'(x_*) + \sum_{i=1}^s \lambda_i^* q'_i(x_*), x - x_*) \geq 0, \quad \forall x \in X_0 \quad (5.5')$$

$$\lambda_i^* q_i(x_*) = 0, \quad i = \overline{1, s}, \quad x_* \in X. \quad ($$

5. 6')

\blacktriangleright За зробленими припущеннями функція Лагранжа опукла і дифе–ренційовна за $x \in X_0$ при кожному $\lambda \in \Lambda_0$. Тому умова (5.5') еквівалентна умові (5.5). \blacktriangleleft

Теорема 5.3. Нехай $X_0 \subset R^n$ – опукла множина, функції $f(x)$, $q_i(x)$, $i = \overline{1, m}$ опуклі на X_0 , $q_i(x) = (a_i, x) - b^i$, $i = \overline{m+1, s}$ – лінійні, множина X_* точок мінімуму функції $f(x)$ на множині

$$X = \{x : x \in X_0, q_i(x) \leq 0, \quad i = \overline{1, m}; \quad q_i(x) = (a_i, x) - b^i \leq 0, \quad i = \overline{m+1, p}; \\ q_i(x) = (a_i, x) - b^i = 0, \quad i = \overline{p+1, s}\}.$$

непорожня, виконується узагальнена умова регулярності, тобто

існує точка $\bar{x} \in r_i X_0 \cap X$ така, що $q_i(\bar{x}) < 0$, $i = \overline{1, m}$. Тоді для кожної точки $x_* \in X_*$ необхідно існувати множники Лагранжа

$$\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_s^*) \in \Lambda_0 = \{\lambda \in R^s, \lambda_i \geq 0, i = \overline{1, p}\}$$

такі, що пара (x_*, λ^*) утворює сідлову точку функції Лагранжа на множині $X_0 \times \Lambda_0$.

Означення 5.3. Точку $y \in X$ називають відносно внутрішньою точкою X , якщо існує ε -окіл $O(y, \varepsilon) = \{x \in R^n : \|x - y\| < \varepsilon\}$ точки y такий, що переріз $O(y, \varepsilon) \cap \text{aff}X$ повністю належить X . Множину всіх відносно внутрішніх точок множини X позначають через $r_i X$.

Зазначимо, що узагальнені умови регулярності можна записати і в іншому вигляді.

Теорема 5.4. Нехай функція $f(x)$ опукла на опуклій множині X_0 , де $X_0 = \{x \in R^n : (d_i, x) \leq l_i, i = \overline{1, p}; (d_i, x) = l_i, i = \overline{p+1, q}\}$ – багато–гранна множина, $d_i \in R^n, l_i \in R, f(x) \in C^1(X_0)$. Множина X визначена згідно з формулою

$$X = \{x : x \in X_0, q_i(x) = (a_i, x) - b^i \leq 0, i = \overline{1, m},$$

$$q_i(x) = (a_i, x) - b^i = 0, i = \overline{m+1, s}\}, \quad X_* \neq \emptyset.$$

Тоді для кожної точки $x_* \in X_*$ необхідно існують множники Лагранжа $\lambda^* \in \Lambda_0 = \{\lambda \in R^s, \lambda_i \geq 0, i = \overline{1, m}\}$ такі, що пара (x_*, λ^*) утворює сідлову точку функції Лагранжа на множині $X_0 \times \Lambda_0$.

Доведення теорем 5.3, 5.4 можна знайти в [7].

5.4 Двоїсті задачі математичного програмування

Розглянемо двоїсті задачі до задачі (5.1). За допомогою функції Лагранжа задачу математичного програмування (5.1) можна переписати в іншому вигляді. Введемо функцію

$$\chi(x) = \sup_{\lambda \in \Lambda_0} L(x, \lambda), \quad x \in X_0 \quad (5.14)$$

де $L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^s \lambda_i q_i(x)$ – функція Лагранжа,

$$\lambda \in \Lambda_0 = \{\lambda \in R^s, \lambda_i \geq 0, i = \overline{1, m}\}.$$

Зауважимо, що при $x \in X$ маємо $\sum_{i=1}^s \lambda_i q_i(x) \leq 0$ для $\lambda \in \Lambda_0$,

причому рівність нулю отримуємо, наприклад, при $\lambda = 0 \in \Lambda_0$.

Якщо $x \notin X$, тобто $x \in X_0 \setminus X$, то обов'язково виконується хоча б одна з умов: $\exists i_0, 1 \leq i_0 \leq m$ таке, що $q_{i_0}(x) > 0$, або $\exists i_0,$

$m+1 \leq i_0 \leq s$ таке, що $q_{i_0}(x) \neq 0$. Отож можемо записати

$$\chi(x) = \begin{cases} f(x) & \forall x \in X \\ \infty & \forall x \in X_0 \setminus X. \end{cases}$$

Отже,

$$\inf_{X_0} \chi(x) = \inf_X f(x) = f_*$$

і задачу (5.1) запишемо так:

$$\chi(x) \rightarrow \inf, \quad x \in X_0 \quad (5.15)$$

Якщо припустити, що $f_* > -\infty$, $X_* \neq \emptyset$, то виконується умова

$$\inf_{X_0} \chi(x) = f_*, \quad X_* = \{x : x \in X_0, \chi(x) = f_*\}.$$

Отож множини розв'язків для задач (5.15) і (5.1) збігаються.

Поряд з функцією (5.14) розглянемо функцію

$$\Psi(x) = \inf_{X_0} L(x, \lambda), \quad \lambda \in \Lambda_0 \quad (5.16)$$

і запишемо задачу

$$\Psi(\lambda) \rightarrow \sup, \quad \lambda \in \Lambda_0 \quad (5.17)$$

яку називатимемо двоїстою до задачі (5.15), а змінні λ – двоїстими

$$\sup_{\Lambda_0} \Psi(\lambda) = \Psi^*, \quad \Lambda^* = \{\lambda \in \Lambda_0, \Psi(\lambda) = \Psi^*\}.$$

Виявляється, що задачі (5.15) і (5.17) взаємопов'язані. Завжди виконується умова

$$\Psi(\lambda) \leq \Psi^* \leq f_* \leq \chi(x) \quad \forall x \in X_0 \quad \forall \lambda \in \Lambda_0 \quad (5)$$

.18)

Із визначення $\Psi(\lambda)$ можна записати

$$\Psi(\lambda) = \inf_{X_0} L(x, \lambda) \leq L(x, \lambda), \quad x \in X_0, \lambda \in \Lambda_0,$$

тому

$$\Psi^* = \sup_{\Lambda_0} \Psi(\lambda) \leq \sup_{\Lambda_0} L(x, \lambda) = \chi(x), \quad x \in X_0.$$

Перейдемо до нижньої границі по $x \in X_0$ і отримаємо $\Psi^* \leq f_*$, що підтверджує нерівність (5.18).

5.5. Зв'язок між розв'язками прямої та двоїстої задач

З'ясуємо, за яких умов $\psi^* = f_*$ і обидві задачі (5.15), (5.17) мають розв'язок, тобто

$$X_* \neq \emptyset, \quad \Lambda^* \neq \emptyset, \quad f_* = \Psi^*. \quad (5.19)$$

Умови (5.19) взаємопов'язані з сідовою точкою функції Лагранжа. Відповідь на сформульоване питання дає така теорема.

Теорема 5.5. Для того щоб виконувалось (5.19), необхідно і достатньо, щоб функція Лагранжа $L(x, \lambda)$ мала сідлову точку на $X_0 \times \Lambda_0$. Множина сідлових точок функції $L(x, \lambda)$ на $X_0 \times \Lambda_0$ збігається з $X_* \times \Lambda^*$.

➤ **Н е о б х і д н і с т ь.** Нехай виконується (5.19). Візьмемо довільні точки $x_* \in X_*$, $\lambda^* \in \Lambda^*$. Тоді:

$$\Psi^* = \Psi(\lambda^*) = \inf_{X_0} L(x, \lambda^*) \leq L(x_*, \lambda^*) \leq \sup_{\Lambda_0} L(x_*, \lambda) = f(x_*) = f_*$$

Якщо прийняти, що $\Psi^* = f_*$, то всі знаки \leq нашої нерівності замінимо знаками рівності. Отже,

$$\inf_{X_0} L(x, \lambda^*) = L(x_*, \lambda^*) = \sup_{\Lambda_0} L(x_*, \lambda),$$

або

$$L(x_*, \lambda) \leq L(x_*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*),$$

що є умовою сідової точки. Отже, $X_* \times \Lambda^*$ – множина сідлових точок $L(x, \lambda)$ на $X_0 \times \Lambda_0$.

Д о с т а т н і с т ь. Нехай $(x_*, \lambda^*) \in X_0 \times \Lambda_0$ – сідрова точка. З умови

$$L(x_*, \lambda) \leq L(x_*, \lambda^*) \quad \forall \lambda \in \Lambda_0$$

Отримаємо

$$\chi(x_*) = \sup_{\Lambda_0} L(x_*, \lambda) = L(x_*, \lambda^*),$$

а з умови $L(x_*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*) - \Psi(\lambda^*) = \inf_{X_0} L(x, \lambda^*) = L(x_*, \lambda^*)$.

Використавши умови (5.18), можемо записати

$$L(x_*, \lambda^*) = \Psi(\lambda^*) \leq \Psi^* \leq f_* \leq \chi(x_*) = L(x_*, \lambda^*).$$

Знову всі знаки \leq заміняємо на рівність, тобто $\Psi(\lambda^*) = \Psi^* = f_* = f(x_*)$, а це означає, що виконується (5.19), і $\lambda^* \in \Lambda^*$, $x_* \in X_*$. Отож множина сідлових точок функції $L(x, \lambda)$ на $X_0 \times \Lambda_0$ належить множині $X_* \times \Lambda^*$. \blacktriangleleft

Наслідок 5.1. Наведені нижче твердження рівносильні:

1) $(x_*, \lambda^*) \in X_0 \times \Lambda_0$ – сідлова точка функції $L(x, \lambda)$ на $X_0 \times \Lambda_0$;

2) виконується умова (5.19);

3) існують точки $x_* \in X_0$, $\lambda^* \in \Lambda_0$ такі, що

$$\chi(x_*) = \Psi(\lambda^*);$$

4) справджується рівність

$$\max_{\Lambda_0} \inf_{X_0} L(x, \lambda) = \min_{X_0} \sup_{\Lambda_0} L(x, \lambda).$$

Зазначимо, що рівність $\Psi^* = f_*$ може виконуватись і у випадку, коли одна з множин X_* або Λ^* порожня.

Приклад 5.2. Розглянемо задачу

$$f(x) = -x \rightarrow \min$$

$$X = \{x \in R, x \geq 0, x^2 \leq 0\}.$$

У цьому випадку $X = \{0\}$, $X_* = \{0\}$, $f_* = 0$ і функція Лагранжа

$$L(x, \lambda) = -x + \lambda x^2, \quad (x \geq 0, \lambda \geq 0),$$

не має сідової точки, хоча

$$\Psi(\lambda) = \inf_{x \geq 0} L(x, \lambda) = -\frac{1}{4\lambda} \text{ при } \lambda > 0 \text{ та } \Psi(0) = -\infty$$

i

$$\sup_{\lambda \geq 0} \Psi(\lambda) = \Psi^* = 0 = f_*.$$

Однак $\Lambda^* = \emptyset$.

Поряд з цим можливий випадок, коли без сідової точки

виконується строга нерівність $\psi^* < f_*$, хоча

$$X_* \neq \emptyset, \Lambda^* \neq \emptyset.$$

Приклад 5. 3. Розглянемо задачу

$$f(x) = e^{-x} \rightarrow \min_X, \quad X = \{x : x \in R, xe^{-x} = 0\}.$$

Маємо $X = \{0\}$, $X_* = \{0\}$, $f_* = f(0) = 1$.

Крім того,

$$\Psi(\lambda) = \inf_{x \in R} L(x, \lambda) = \inf_{x \in R} e^{-x}(1 + \lambda x) = \begin{cases} 0, & \lambda = 0 \\ -\infty, & \lambda > 0 \\ \lambda e^{-1+\frac{1}{\lambda}}, & \lambda < 0 \end{cases}$$

$$\chi(x) = \sup_{\Lambda_0} L(x, \lambda) = \begin{cases} 1, & x = 0, \\ \infty, & x \neq 0, \end{cases} \quad \Lambda_0 = R.$$

Звідси

$$\Psi^* = \sup \Psi(\lambda) = 0 = \Psi(0); \quad \Lambda^* = \{0\},$$

$$f_* = \inf f(x) = 1 = f(0), \quad X_* = \{0\},$$

тобто $0 = \Psi^* < f_* = 1$. Одночасно функція Лагранжа не має сідової точки. Умова $L(x_*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*)$ не виконується. Справді, $L(x, \lambda) = e^{-x}(1 + \lambda x)$, $\lambda^* = x_* = 0$ і умова $L(x_*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*)$ ($1 \leq e^{-x}$) для $x > 0$ не виконується.

Зазначимо таке: двоїста задача (5.17) рівнозначна задачі опуклого програмування незалежно від вигляду прямої задачі. Функція $L(x, \lambda)$ лінійна за λ , і функція $-\Psi(\lambda) = \sup_{X_0} (-L(x, \lambda))$ опукла на

опуклій множині Λ_0 . Враховуючи це, в окремих випадках доцільно спочатку дослідити двоїсту задачу, а потім повернутися до прямої. Особливо ефективний цей підхід до задач лінійного програмування. У цьому випадку двоїсту задачу можна записати в явному вигляді.

5.6. Двоїсті задачі у лінійному програмуванні

На практиці трапляються різні записи задачі лінійного програмування.

5.6.1. Канонічна задача лінійного програмування

$$(c, x) \rightarrow \inf, \quad x \in X = \{x : x \in R^n, x \geq 0, Ax - b = 0\}, \quad (5.20)$$

де A - матриця розмірності $m \times n$, $b \in R^s$, $c \in R^n$. У нашому випадку

$$X_0 = \{x \in R^n, x \geq 0\} = R_+^n, \quad \Lambda_0 = R^m.$$

Для задачі (5.20) функція Лагранжа має вигляд

$$L(x, \lambda) = (c, x) + (\lambda, Ax - b) = (c + A^T \lambda, x) - (\lambda, b).$$

Тоді

$$\psi(x) = \inf_{X_0} L(x, \lambda) = \begin{cases} -(b, \lambda), & \text{якщо } c + A^T \lambda \geq 0, \\ -\infty, & \exists i_0, (c + A^T \lambda)_{i_0} < 0, \lambda \in \Lambda_0. \end{cases}$$

Тепер можемо записати двоїсту задачу для задачі (5.20), яка матиме вигляд

$$(b, \lambda) \rightarrow \inf \quad (-b, \lambda) \rightarrow \sup, \quad \lambda \in \Lambda = \{\lambda \in R^s, c + A^T \lambda \geq 0\} \quad (5.21)$$

Задача (5.21) також є задачею лінійного програмування. Двоїста задача до задачі (5.21) буде прямою задачею (5.20). Справді, запишемо множину Λ в іншому вигляді

$$\Lambda = \{\lambda \in R^s, -c - A^T \lambda \leq 0\}, \text{ тоді}$$

$$L_1(\lambda, x) = (b, \lambda) + (x, -c - A^T \lambda) = (b - Ax, \lambda) - (c, x) = -L(x, \lambda),$$

тут $\lambda \in \Lambda_0 = R^s$, $x \in X_0 = \{x \in R^n, x \geq 0\}$. У цьому випадку

$$\Psi_1(x) = \inf_{\Lambda_0} L_1(\lambda, x) = \begin{cases} -(c, x), & b - Ax = 0, \\ -\infty, & \exists i_0 \quad (b - Ax)_{i_0} \neq 0; x \in X_0. \end{cases}$$

Отже, отримали задачу

$$\Psi_1(x) \rightarrow \sup_{x \in X}, \quad (-\Psi_1(x) \rightarrow \inf_X),$$

або

$$(c, x) \rightarrow \inf, \quad x \in X = \{x \in X_0, b - Ax = 0\},$$

що збігається з задачею (5.20).

5.6.2. Основна задача лінійного програмування

$$(c, x) \rightarrow \inf, \quad x \in X = \{x \in R^n, x \geq 0, Ax - b \leq 0\} \quad .(5.22)$$

іноді цю задачу називають стандартною. У цьому випадку A – матриця розмірності $m \times n$, $b \in R^m$, $c \in R^n$,

$$X_0 = \{x \in R^n, x \geq 0\} = R_+^n, \quad \Lambda_0 = \{\lambda \in R^m, \lambda \geq 0\} = R_+^m.$$

Функція Лагранжа має вигляд

$$L(x, \lambda) = (c, x) + (\lambda, Ax - b) = (c + A^T \lambda, x) - (b, \lambda),$$

і звідси

$$\Psi(\lambda) = \inf_{X_0} L(x, \lambda) = \begin{cases} -(b, \lambda), & c + A^T \lambda \geq 0 \\ -\infty, & \exists i_0, (c + A^T \lambda)_{i_0} < 0, \lambda \in \Lambda_0. \end{cases}$$

Двоїста задача до задачі (5.22) має вигляд

$$(b, \lambda) \rightarrow \inf, \quad \lambda \in \Lambda = \{\lambda \in R^m : c + A^T \lambda \geq 0, \lambda \geq 0\} \quad ($$

5.23)

Задача (5.23) є задачею лінійного програмування і легко показати, що двоїста задача до неї буде вихідною задачею (5.22).

5.6.3. Загальна задача лінійного програмування

$$(c, x) \rightarrow \inf, \quad (5.24)$$

$$x \in X = \{x \in R^n : x_j \geq 0, j \in I; Ax - b \leq 0; \bar{A}x - \bar{b} = 0\},$$

де I – деяка підмножина індексів з множини $\{1, 2, \dots, n\}$, A, \bar{A} – матриці, відповідно, порядку $m \times n$, $s \times n$, $b \in R^m$, $\bar{b} \in R^s$, $c \in R^n$. Запишемо множники Лагранжа у вигляді

$$\lambda = (\mu, \bar{\mu}), \quad \text{де } \mu \in R^m, \bar{\mu} \in R^s.$$

Отже,

$$\lambda \in \Lambda_0 = \{\lambda = (\mu, \bar{\mu}) \in R^m \times R^s, \mu \geq 0\}.$$

Функція Лагранжа має вигляд

$$\begin{aligned} L(x, \lambda) &= (c, x) + (\mu, Ax - b) + (\bar{\mu}, \bar{A}x - \bar{b}) = \\ &= (c + A^T \mu + \bar{A}^T \bar{\mu}, x) - (\mu, b) - (\bar{\mu}, \bar{b}), \quad x \in X_0, \quad \lambda \in \Lambda_0. \end{aligned}$$

Звідси

$$\Psi(\lambda) = \inf_{X_0} L(x, \lambda) = \begin{cases} (-b, \mu) - (\bar{b}, \bar{\mu}), & (c + A\mu + \bar{A}\bar{\mu})_i \geq 0, \quad i \in I, \\ & (c + A\mu + \bar{A}\bar{\mu})_i = 0, \quad i \notin I, \\ -\infty, & \text{у решті випадків.} \end{cases}$$

Тепер двоїсту задачу до (5.24) можна записати так:

$$(b, \mu) + (\bar{b}, \bar{\mu}) \rightarrow \inf, \quad \lambda = (\mu, \bar{\mu}) \in \Lambda = \{\lambda = (\mu, \bar{\mu}) \in R^m \times R^s, \mu \geq 0;$$

$$(c + A^T \mu + \bar{A}^T \bar{\mu})_i \geq 0, \quad i \in I; \quad (c + A^T \mu + \bar{A}^T \bar{\mu})_i = 0, \quad i \notin I. \quad (5.25)$$

Отже, ми знову отримали задачу лінійного програмування, двоїста до якої збігається з вихідною.

Якщо задача лінійного програмування має розв'язок $f_* > -\infty$, $X_* \neq \emptyset$, то, згідно з теоремою 5.4, функція Лагранжа для цієї задачі має сідлову точку. Звідси і з урахуванням зв'язку між прямою і двоїстою задачею випливають теореми, які мають важливе значення в теорії лінійного програмування.

Теорема 5.6. У випадку розгляду прямої (5.24) і двоїстої (5.25) задач лінійного програмування можуть виникнути такі взаємно виключні ситуації:

1) Пряма задача має допустимий розв'язок і її функція мети необмежена в допустимій області. Множина допустимих розв'язків двоїстої задачі порожня.

2) Двоїста задача має допустимий розв'язок і її функція мети необмежена в допустимій області. Множина допустимих розв'язків прямої задачі порожня.

3) Дві задачі мають допустимий розв'язок. У цьому випадку обидві задачі мають оптимальний розв'язок x_*, λ^* і

$$(x_*, c) = -(b, \mu^*) - (\bar{b}, \bar{\mu}^*).$$

4) Допустимі області обох задач – порожні множини.

➤ Нехай вектори x і λ такі, що задовольняють допустимі множини для задач (5.24) і (5.25), тоді

$$\inf\{(c, x), x \in X\} \geq \sup\{-(b, \mu) - (\bar{b}, \bar{\mu}), \lambda = (\mu, \bar{\mu}) \in \Lambda\} \quad (5.26)$$

Якщо значення функції мети прямої задачі необмежене, то з (5.26) випливає, що двоїста задача не має допустимих розв'язків. Аналогічно з (5.26) випливає твердження 2). Тепер перейдемо до твердження 3). Нехай пряма і двоїста задачі (5.24), (5.25) мають допустимий розв'язок. Використавши нерівність (5.26), отримуємо, що значення $\inf\{(c, x), x \in X\}$ скінченне, тоді пряма задача має розв'язок, який позначимо через x_* . Згідно з теоремою 5.4 існує пара (x_*, λ^*) , яка утворює сідлову точку функції Лагранжа для задачі (5.4). Тепер запишемо функцію Лагранжа для двоїстої задачі (5.25):

$$L_1(\lambda, x) = (b, \mu) + (\bar{b}, \bar{\mu}) - (x, c + A^T \mu + \bar{A}^T \bar{\mu}),$$

$$\lambda \in \Lambda_0 = \{\lambda = (\mu, \bar{\mu}) \in R^m \times R^s, \mu \geq 0\},$$

$$x \in X_0 = \{x \in R^n, x^i \geq 0, i \in I\}.$$

Роль множників Лагранжа для цієї функції відіграють величини $x = (x_1, \dots, x_n)$. Як бачимо, функції Лагранжа для задач (5.24) – (5.25) відрізняються лише знаком, справді

$$\begin{aligned} L_1(\lambda, x) &= (b, \mu) + (\bar{b}, \bar{\mu}) - (c, x) - (Ax, \mu) - (\bar{A}x, \bar{\mu}) = \\ &= -(c, x) + (b - Ax, \mu) + (\bar{b} - \bar{A}x, \bar{\mu}) = -L(x, \lambda). \end{aligned}$$

За теоремою 5.1 двоїста задача (5.25) має розв'язок $\lambda^* = (\mu^*, \bar{\mu}^*)$, якщо функція $L_1(\lambda, x)$ на $\Lambda_0 \times X_0$ має сідлову точку $(\lambda^*, x_*) \in \Lambda_0 \times X_0$, тобто

$$L_1(\lambda^*, x) \leq L_1(\lambda^*, x_*) \leq L_1(\lambda, x_*), \quad x \in X_0, \quad \lambda \in \Lambda_0 \tag{5.27}$$

Оскільки (x_*, λ^*) є сідловою точкою функції Лагранжа для прямої задачі і $L(x, \lambda) = -L_1(\lambda, x)$, то умова (5.27) виконується, а це означає, що $\lambda^* = (\mu^*, \bar{\mu}^*)$ – розв'язок задачі (5.25) і

$$(c, x_*) = -(b, \mu^*). - (\bar{b}, \bar{\mu}^*)$$

В останньому випадку допустимі множини X і Λ порожні. ↵

Користуючись результатами попередніх теорем, сформулюємо необхідні і достатні умови існування розв'язку задачі (5.24).

Теорема 5.7. Для того щоб точка $x_* \in X$ була розв'язком задачі (5.24), необхідно і достатньо існування такої точки $\lambda^* = (\mu^*, \bar{\mu}^*) \in \Lambda$, для якої

$$(c, x_*) = -(b, \bar{\mu}^*) - (b, \mu^*). \quad (5.28)$$

Теорема 5.8. Для того щоб точка $x_* \in R^n$ була розв'язком задачі (5.24), необхідно і достатньо існування точки $\lambda^* = (\mu^*, \bar{\mu}^*) \in R^m \times R^s$ такої, що

$$x_{*i} \geq 0, i \in I, \quad Ax_* \leq b, \quad \bar{A}x_* = \bar{b};$$

$$\mu^* \geq 0, \quad (c + A^T \mu^* + \bar{A}^T \bar{\mu}^*)_i \geq 0, \quad i \in I;$$

$$(c + A^T \mu^* + \bar{A}^T \bar{\mu}^*)_i = 0, \quad i \notin I;$$

$$\mu_i^* (Ax_* - b)_i = 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad x_{*i} (c + A^T \mu^* + \bar{A}^T \bar{\mu}^*)_i = 0, \quad i = \overline{1, n}.$$

Теореми 5.7, 5.8 є фактично формулюванням теорем 5.1, 5.4, 5.5 безпосередньо для задачі (5.24). Розглянуті вище теореми суттєво використовують для розробки числових методів розв'язування задач лінійного програмування.

? Запитання для самоперевірки

1. Дайте означення сідової точки функції Лагранжа.
2. Необхідні і достатні умови існування сідової точки (доведіть лему).
3. Взаємозв'язок між сідовою точкою і розв'язком задачі.
4. Наведіть приклад для якого у точці розв'язку не існує сідової точки.
5. Дайте означення регулярної множини.
6. Сформулюйте і доведіть теорему про існування сідової точки у точці розв'язку.
7. Запишіть задачу математичного програмування з використанням функції Лагранжа.
8. Двоїста задача для задачі математичного програмування.
9. При яких умовах мають місце $X_* \neq \theta$, $\Lambda \neq \theta$, $f_* = \Psi^*$.
10. Наведіть приклад коли $f_* = \Psi^*$ а $\Lambda^* = \theta$.
11. Наведіть приклад виконання умов $\Psi^* < f_*$.
12. Двоїста задача до канонічної задачі лінійного програмування.
13. Двоїста задача до основної задачі лінійного програмування.
14. Двоїста задача до загальної задачі лінійного програмування.

15. Які випадки можливі при розв'язуванні прямої і двоїстої задач лінійного програмування

Завдання для самостійної роботи

1. Записати двоїсті задачі до поданих задач:

a) $x_1 + 2x_2 - x_3 \rightarrow \max$

$$\begin{cases} -x_1 + 4x_2 - 2x_3 \leq 10, \\ x_1 + x_2 + 2x_3 \leq 12, \\ 2x_1 - x_2 + 2x_3 \leq 7, \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0. \end{cases}$$

б) $4x_1 + 2x_2 - 3x_3 \rightarrow \max$

$$\begin{cases} -2x_1 + 4x_2 - 2x_3 \leq 5, \\ 3x_1 + 5x_2 - 2x_3 \leq 7, \\ 2x_1 - x_2 + -2x_3 \leq 4, \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0. \end{cases}$$

в) $x_1 + 2x_2 - 3x_3 \rightarrow \max$

$$\begin{cases} 3x_1 - 4x_2 - 4x_3 = 1, \\ 5x_1 + 6x_2 - 2x_3 \geq 2, \\ -7x_1 + 8x_2 + 2x_3 = 3, \\ x_2 \geq 0. \end{cases}$$

г) $4x_1 + 2x_2 - 3x_3 \rightarrow \max$

$$\begin{cases} 3x_1 - 4x_2 - 4x_3 \leq 1, \\ 5x_1 + 6x_2 - 2x_3 \geq 2, \\ -7x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 3, \\ x_1 \geq 0, \quad x_3 \geq 0 \end{cases}$$

д) $3x_1 + 11x_2 + 5x_3 + x_4 \rightarrow \min$

$$\begin{cases} -3x_1 + x_2 + 2x_3 - x_4 \geq 2, \\ 3x_1 + 3x_2 - 5x_3 - 3x_4 \leq 7, \\ x_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, 3. \end{cases}$$

6. ЧИСЛОВІ МЕТОДИ БЕЗУМОВНОЇ МІНІМІЗАЦІЇ

■ План викладу матеріалу:

1. Загальні положення.
2. Градієнтний метод.
3. Метод Ньютона.
4. Метод Ньютона з регулюванням кроку.
5. Рекурсивний аналог методу Ньютона.
6. Метод Стеффенсена.
7. Квазіニュтоонівські методи.
8. Методи спряжених напрямів.
9. Методи нульового порядку

► Ключові терміни розділу

- | | |
|---|--------------------------------------|
| <p>✓ Алгоритми нульового, першого, другого порядків</p> | <p>✓ Методи спряжених градієнтів</p> |
| <p>✓ Напрям і довжина кроку мінімізації</p> | |
| <p>✓ Взаємоспряжені системи векторів</p> | |
| <p>✓ Швидкість збіжності лінійна, надлінійна, квадратична</p> | |
| <p>✓ Метод циклічного покоординатного спуску</p> | |
| <p>✓ Вектор спадання функції</p> | |
| <p>✓ Метод Хука і Джівса</p> | |
| <p>✓ Метод типу яру</p> | |
| <p>✓ Метод Розенброка</p> | |
| <p>✓ Квазіニュтоонівська умова</p> | |
| <p>✓ Процедура Грамма-Шмідта</p> | |

6.1. Загальні положення

Розглянемо задачу безумовної мінімізації

$$f(x) \rightarrow \inf, \quad x \in R^n.$$

6.1)

Будь-який числовий метод розв'язування задачі оптимізації ґрунтуються на точному або наближенному обчисленні певних характеристик (значення функції мети, значення похідних тощо). На основі отриманої інформації будуємо наближення до розв'язку задачі. Це може бути значення x_* , множина значень X_* або значення функції мети $f_* = \min_X f(x)$. Для кожної конкретної задачі питання про характеристики функції, які потрібно брати до уваги під час розв'язування задачі, залежать від властивості функції, а також наявності можливостей зі збереження і обробки інформації. Наприклад, якщо ємність пам'яті ЕОМ мала, то у процесі розв'язування задач високої розмірності не доцільно використовувати алгоритми, в яких є похідні другого порядку, для недиференційованих функцій не можна застосовувати методи, які потребують обчислення градієнта і т. д.

Алгоритми, які використовують лише інформацію про значення мінімізаційної функції, називають *алгоритмами нульового порядку*.

Алгоритми *першого та другого порядків* використовують інформацію, відповідно, про значення перших і других похідних. Розглянемо лише алгоритми нульового, першого та другого порядків або їхні модифікації. Для мінімізації функції багатьох

змінних користуватимемося послідовними алгоритмами, коли вибір наступного наближення залежить від попередніх результатів. У цьому випадку застосовуватимемо алгоритми вигляду

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k, \text{де } \alpha_k \in R, h_k \in R^n, k = 0, 1, \dots$$

6.2)

Конкретний алгоритм визначається заданням початкового наближення x_0 , правилом вибору напряму h_k і чисел α_k залежно від інформації, яку отримали на підставі попередніх обчислень, а також правилом умов зупинки. Вектор h_k визначає напрям $k+1$ -го кроку методу мінімізації, а коефіцієнт α_k - довжину цього кроку.

Серед методів мінімізації можна умовно виділити скінченні і нескінченні. Скінченними методами є такі, які гарантують знаходження розв'язку задачі за скінченну кількість операцій (кrokів, ітерацій). У цьому випадку вважаємо, що обчислення проводимо точно.

Важливою характеристикою нескінченних методів є швидкість збіжності. Вважатимемо, що метод (6.2) збігається, якщо $\rho(x_k, x_*) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0$, де x_* є розв'язком задачі (6.1). Якщо

$f(x_k) \rightarrow f(x_*)$, то іноді також говорять, що метод (6.2) збігається за функцією. У випадку, коли точка x_* не єдина, то під збіжністю послідовності $\{x_k\}$ розуміють збіжність до множини

$$X_* = \{x_* \in R^n : f(x_*) = \min_X f(x)\}, \quad \rho(x_k, X_*) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0. \quad \text{Ефективність}$$

методів можна в певному сенсі охарактеризувати за допомогою поняття швидкості збіжності.

Означення 6.1. Послідовність $\{x_k\}$ збігається до x_* лінійно (з лінійною швидкістю, зі швидкістю геометричної прогресії), якщо існують такі константи $q \in (0,1)$ і $k_0 > 0$, що

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leq q \|x_k - x_*\| \text{ при } k \geq k_0. \quad (6.3)$$

Означення 6.2. Послідовність $\{x_k\}$ збігається до x_* надлінійно (із надлінійною швидкістю), якщо

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leq q_{k+1} \|x_k - x_*\|, \quad q_k \underset{k \rightarrow \infty}{\rightarrow} +0. \quad (6.4)$$

Означення 6.3. Послідовність $\{x_k\}$ збігається до x_* із квадратичною збіжністю, якщо існують такі константи $C > 0$ і $k_0 > 0$, що

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leq C \|x_k - x_*\|^2 \text{ при } k \geq k_0. \quad (6.5)$$

Іноді, зберігаючи таку саму термінологію, нерівності (6.3)–(6.5) можна записати так

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leq C_1 q^{k+1}, \quad 0 < q < 1, \quad C_1 < \infty; \quad (6.3')$$

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leq C_2 q_{k+1} \dots q_1, \quad q_k \underset{k \rightarrow \infty}{\rightarrow} 0, \quad C_2 < \infty \quad (6.4')$$

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leq C_3 q^{2^k + 1}, \quad 0 < q < 1, \quad C_3 < \infty \quad (6.5')$$

Для характеристики збіжності послідовності $f(x_k)$ до $f(x_*)$ використовують аналогічну термінологію. З'ясування факту збіжності й оцінки швидкості збіжності дають суттєву інформацію про вибраний метод мінімізації. Це може стосуватися області застосування методу, вимог до початкового наближення тощо. Водночас реальний обчислювальний процес повинен бути скінченим, отож для такого методу повинна існувати додаткова умова - зупинки алгоритму (критерій зупинки). Найчастіше на практиці використовують такі критерії зупинки:

$$\begin{aligned} \|x_{k+1} - x_k\| &\leq \varepsilon_1 \\ |f(x_{k+1}) - f(x_k)| &\leq \varepsilon_2 \end{aligned} \quad 6.6)$$

$$\|f'(x_{k+1})\| \leq \varepsilon_3, \quad 6.7)$$

6.8)

де $\varepsilon_i > 0$, $i = 1, 2, 3$ – достатньо малі числа.

До початку обчислень вибирають одну з умов (6.6) – (6.8), дві або навіть усі три, якщо це можливо. Поряд з умовами (6.6) – (6.8), які використовують поняття абсолютної похибки, можна застосовувати аналогічні критерії, які враховують поняття відносної похибки:

$$\|x_{k+1} - x_k\| \leq \delta_1 (1 + \|x_{k+1}\|) \quad (6.9)$$

$$|f(x_{k+1}) - f(x_k)| \leq \delta_2 (1 + |f(x_{k+1})|) \quad (6.10)$$

$$\|f'(x_{k+1})\| \leq \delta_3 (1 + |f(x_{k+1})|), \quad (6.11)$$

де $\delta_i > 0$ $i = 1, 2, 3$ – достатньо малі числа.

Зазначимо, що виконання критеріїв (6.6) – (6.8) чи (6.9) – (6.11) або інших, подібних до них, загалом не гарантує досягнення необхідної точності розв’язку.

У випадку використання ітераційних методів важливим є також питання вибору напряму h_k . Багато методів мінімізації належать до методів спуску, на кожному кроці напрям h_k вибирають з числа напрямів спадання мінімізаційної функції.

Означення 6.4. Вектор h задає напрям спадання функції f у точці x , якщо $f(x + \alpha h) < f(x)$ при всіх $\alpha \in (0, \delta)$, де δ достатньо мале число. Множину напрямів спадання $f(x)$ у точці x позначимо через $U(x, f)$.

Лема 6.1. Нехай функція $f(x)$ диференційовна в точці $x \in R^n$. Якщо вектор h задовольняє умову

$$(f'(x), h) < 0, \quad (6.12)$$

то $h \in U(x, f)$. Якщо $h \in U(x, f)$, то

$$(f'(x), h) \leq 0. \quad (6.13)$$

➤ Нехай виконується (6.12), тоді:

$$f(x + \alpha h) - f(x) = (f'(x), \alpha h) + o(\alpha) = \alpha \left[(f'(x), h) + \frac{o(\alpha)}{\alpha} \right] < 0$$

при всіх достатньо малих α , тобто $h \in U(x, f)$.

Нехай $h \in U(x, f)$ і $(f'(x), h) > 0$. Міркуючи, як описано вище, бачимо, що h утворює гострий кут з вектором $f'(x)$, а це направляє зростання. Отже, ми прийшли до протиріччя і виконується (6.13). ◀

Простішим прикладом методу спуску є градієнтний метод, у якому $h_k = -f'(x_k)$. Розглянемо тепер питання вибору параметра $\alpha_k > 0$.

1. Одним з найпростіших варіантів щодо ідеї, а не реалізації вибору α_k є умова

$$f(x_k + \alpha_k h_k) = \min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha h_k), \quad (6.14)$$

тобто $\alpha_k = \arg \min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha h_k)$.

Використання умови (6.14) потребує на кожному кроці одновимірної мінімізації, що значно збільшує обсяг обчислень і дає змогу відшукати загалом лише наближений розв'язок основної задачі. В простіших випадках величину α_k з умови (6.14) вдається знайти у явному вигляді.

Приклад 6.1. Нехай $f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x)$, де A –

симетрична, додатно визначена матриця. Тоді:

$$f(x_k + \alpha h_k) = f(x_k) + \alpha(f'(x_k), h_k) + \frac{\alpha^2}{2}(Ah_k, h_k) \quad (6.15)$$

Як бачимо, $f(x_k + \alpha h_k)$ досягає мінімуму при

$$\alpha_k = -\frac{(Ax_k + b, h_k)}{(Ah_k, h_k)} = -\frac{(f'(x_k), h_k)}{(Ah_k, h_k)} \geq 0.$$

Оскільки при точному визначенні α_k з умови (6.14) значення x_{k+1} отримуємо, зазвичай, наближено, то на практиці обмежуються обчисленням величини α_k наближено. Наприклад, α_k можна вибрати з умови

$$f_k^* \leq f_k(\alpha_k) \leq f_k^* + \delta_k, \quad \delta_k \geq 0, \quad \sum_{k=0}^{\infty} \delta_k = \delta < \infty \quad (6.16)$$

або

$$f_k^* \leq f_k(\alpha_k) \leq (1 - \lambda_k) f_k(0) + \lambda_k f_k^* \quad (6.17)$$

де

$$f_k^* = \inf_{\alpha} f_k(\alpha) = \inf_{\alpha} f(x_k + \alpha h_k).$$

Величини δ_k, λ_k із (6.16), (6.17) характеризують похибку виконання умови (6.14). Чим ближче δ_k , до 0, а λ_k до 1, тим точніше виконується умова (6.14).

Для пошуку α_k можна використовувати умову монотонного спадання функції $f(x)$, яку називають неточним, або наближеним лінійним пошуком

$$f(x_k + \alpha_k h_k) < f(x_k).$$

2. Можна вибрати α_k з умови

$$f(x_k + \alpha_k h_k) - f(x_k) \leq \varepsilon \alpha_k (f'(x_k), h_k) \quad (6.18)$$

де $\varepsilon \in (0,1)$, $h_k \in U(x_k, f)$. Нерівність (6.18) часто використовують для обґрунтування збіжності багатьох методів мінімізації. З (6.18) випливає $f(x_{k+1}) < f(x_k)$ і відповідний метод мінімізації є методом спуску.

Крім того можна використовувати умови Гольдштейна-Армійо, Вольфа та інші.

Лема 6.2. Нехай $f(x) \in C^{1,1}(R^n)$ – диференційовна і перша похідна задовольняє умову Ліпшиця $\|f'(x) - f'(y)\| \leq M \|x - y\|$, $x, y \in R^n$, $M > 0$. Тоді для довільних $x_k \in R^n$, $\varepsilon \in (0,1)$ і h_k , що задовольняє умову $(f'(x_k), h_k) < 0$, умова (6.18) виконується при

$$0 < \alpha_k \leq -\frac{(1-\varepsilon)(f'(x_k), h_k)}{M \|h_k\|^2} \quad (6.19)$$

➤ 3 формули Лагранжа при деякому $\varepsilon \in (0,1)$ маємо

$$\begin{aligned} f(x_k + \alpha_k h_k) - f(x_k) &= (f'(x_k + \theta \alpha_k h_k), \alpha_k h_k) = \alpha_k (f'(x_k), h_k) + \alpha_k (f'(x_k + \\ &+ \theta \alpha_k h_k) - f'(x_k), h_k) \leq \alpha_k (f'(x_k), h_k) + M \alpha_k \|\theta \alpha_k h_k\| \|h_k\| \leq \alpha_k (f'(x_k), h_k) + \\ &+ M \alpha_k^2 \|h_k\|^2 \leq \alpha_k ((f'(x_k), h_k) - (1-\varepsilon)(f'(x_k), h_k)) = \varepsilon \alpha_k (f'(x_k), h_k). \end{aligned}$$

◀

Лема 6.3. Якщо функція $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ і $f''(x)$ задовільняє

умову $(f''(x)h, h) \leq D \|h\|^2 \quad \forall x, h \in \mathbb{R}^n, \exists D > 0$, тоді для довільних

$x_k \in \mathbb{R}^n, \varepsilon \in (0,1)$ і $h_k \in U(x_k, f)$ умова (6.18) виконується при

$$0 < \alpha_k \leq -\frac{2(1-\varepsilon)(f'(x_k), h_k)}{D \|h_k\|^2} \quad (6.20)$$

➤ 3 формули Тейлора маємо

$$\begin{aligned} f(x_k + \alpha_k h_k) - f(x_k) &= (f'(x_k), \alpha_k h_k) + \frac{1}{2} (f''(x_k + \theta \alpha_k h_k) \alpha_k h_k, \alpha_k h_k) \leq \\ &\leq \alpha_k (f'(x_k), h_k) + \frac{\alpha_k^2}{2} D \|h_k\|^2 \leq \alpha_k (f'(x_k), h_k) - (1-\varepsilon) \alpha_k (f'(x_k), h_k) = \\ &= \varepsilon \alpha_k (f'(x_k), h_k). \end{aligned}$$

У випадку, коли $h_k = -f'(x_k)$,

$$0 < \alpha_k \leq \bar{\alpha} = \frac{1-\varepsilon}{M} \quad (6.19')$$

$$0 < \alpha_k \leq \tilde{\alpha} = \frac{2(1-\varepsilon)}{D} \quad \blacktriangleleft \quad (6.20')$$

На жаль, константи M і D часто невідомі й останні дві леми дають малий практичний ефект.

3. На практиці $\alpha_k > 0$ часто вибирають з умови забезпечення монотонності $f(x_{k+1}) < f(x_k)$. У цьому випадку задають $\alpha_k = \alpha$ і перевіряють монотонність. Якщо умова монотонності не виконується, то α дроблять доти, доки ця умова не виконається. Час від часу доцільно збільшувати α зі збереженням монотонності.

4. Можливе апріорне задання величини α_k з умови

$$\alpha_k > 0, \quad k = 0, 1, \dots \quad \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k = \infty, \quad \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k^2 < \infty.$$

Наприклад, $\alpha_k = C(k+1)^{-\alpha}$, де $\frac{1}{2} < \alpha \leq 1$, $C = \text{const}$. Такий вибір простий для реалізації, але не гарантує монотонності $f(x_k)$. На інтуїтивному рівні умова збіжності ряду повинна забезпечити збіжність методу, а розбіжність – досягнення точки x_* навіть у випадку поганого вибору початкового наближення. Розглянуті нами способи вибору довжини кроку не вичерпують усіх можливих варіантів. Дослідимо окремі методи детальніше.

6.2. Градієнтний метод

У градієнтному методі вибираємо $h_k = -f'(x_k)$. Отже, послідовність $\{x_k\}$ визначають з формули

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k f'(x_k), \quad \alpha_k > 0, \quad k = 0, 1, \dots \quad (6.21)$$

Використовуючи нерівність

$$-\|f'(x)\| \|h\| \leq (f'(x), h) \leq \|f'(x)\| \|h\| \quad (6.22)$$

і враховуючи, що ліва рівність виконується у випадку $h_k = -f'(x_k)$, ми стверджуємо, що $f'(x_k)$ є напрямом найшвидшого спадання функції $f(x)$ у точці x_k . Для вибору α_k можемо використовувати різні варіанти, у випадку (6.14) матимемо метод найшвидшого спуску. Розглянемо метод (6.21) з вибором α_k за схемою (6.18). Якщо виконуються умови лем 6.2, 6.3, можна проілюструвати, що існують такі числа $\alpha > 0$, $\bar{\alpha} > 0$, що виконуються умови

$$\alpha_k \geq \alpha \text{ і } \alpha_k \geq \bar{\alpha}.$$

У випадку, коли мінімізаційна функція не опукла, градієнтний метод може забезпечити лише збіжність до множини стаціонарних точок.

Теорема 6.1. Нехай $f(x) \in C^1(\mathbb{R}^n)$ і обмежена знизу на \mathbb{R}^n , а градієнт задовольняє умову Ліпшиця. При довільній початковій точці $x_0 \in \mathbb{R}^n$ для методу (6.21), (6.18) маємо $\lim_{k \rightarrow \infty} f'(x_k) = 0$.

➤ З виразу (6.18)

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) \leq -\varepsilon \alpha_k \|f'(x_k)\|^2 \leq 0, \quad (6.23)$$

тобто послідовність $\{f(x_k)\}$ не зростає. Оскільки $f(x)$ обмежена знизу, то послідовність $\{f(x_k)\}$ збігається і $f(x_k) - f(x_{k+1}) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0$.

З формули (6.23) випливає

$$\|f'(x_k)\|^2 \leq \frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{\varepsilon \alpha_k} \leq \frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{\varepsilon \bar{\alpha}} \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0. \blacktriangleleft$$

Отже, гранична точка x_* є стаціонарною. У випадку, коли $f(x)$ опукла функція, виконується наступна теорема.

Теорема 6.2. Нехай $f(x) \in C^2(R^n)$, сильно опукла на R^n і $f''(x)$ задовольняє умову

$$d\|h\|^2 \leq (f''(x)h, h) \leq D\|h\|^2, \quad 0 < d \leq D; \quad h \in R^n. \quad (6.24)$$

Тоді для довільної початкової точки $x_0 \in R^n$ послідовність $\{x_k\}$ визначена формулами (6.21), (6.18), збігається до точки мінімуму функції $f(x)$ зі швидкістю геометричної прогресії

$$f(x_k) - f(x_*) \leq q^k (f(x_0) - f(x_*)) \quad (6.25)$$

$$\|x_k - x_*\| \leq C(\sqrt{q})^k, \quad (6.26)$$

де $q \in (0,1)$, $C > 0$ – стала.

➤ Враховуючи умову теореми, стверджуємо, що точка x_* існує і єдина, а $f'(x_*) = 0$. Отже, можемо записати

$$f(x) - f(x_*) = \frac{1}{2} (f''(x + \xi(x - x_*))(x - x_*), x - x_*).$$

Використавши (6.24), отримаємо

$$\frac{d}{2} \|x - x_*\|^2 \leq f(x) - f(x_*) \leq \frac{D}{2} \|x - x_*\|^2. \quad (6.27)$$

З іншого боку,

$$\begin{aligned} f(x_*) - f(x) &\geq (f'(x), x_* - x) + \frac{d}{2} \|x_* - x\|^2 \geq \\ &\geq -\|f'(x)\| \|x_* - x\| + \frac{d}{2} \|x - x_*\|^2. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Застосувавши ліву нерівність з (6.27) і (6.28), маємо

$$\frac{d}{2} \|x - x_*\|^2 \leq \|f'(x)\| \|x - x_*\| - \frac{d}{2} \|x - x_*\|^2,$$

$$\text{Або } \|x - x_*\| \leq \frac{\|f'(x)\|}{d}.$$

Права нерівність з (6.27) дає

$$\|x - x_*\|^2 \geq \frac{2}{D} (f(x) - f(x_*)).$$

Тепер з (6.28)

$$f(x) - f(x_*) \leq \frac{\|f'(x)\|^2}{d} - \frac{d}{2} \|x - x_*\|^2 \leq \frac{\|f'(x)\|^2}{d} - \frac{d}{D} (f(x) - f(x_*)),$$

звідси

$$\frac{\|f'(x)\|^2}{d} \geq \left(1 + \frac{d}{D}\right) (f(x) - f(x_*)).$$

Використавши таку оцінку, з (6.23) отримаємо

$$\begin{aligned} f(x_{k+1}) - f(x_*) &\leq f(x_k) - f(x_*) - \varepsilon \alpha_k \|f'(x_k)\|^2 \leq f(x_k) - f(x_*) - \\ &- \varepsilon \alpha_k d \left(1 + \frac{d}{D}\right) (f(x_k) - f(x_*)) = \left[1 - \varepsilon \alpha_k d \left(1 + \frac{d}{D}\right)\right] (f(x_k) - f(x_*)) \leq \\ &\leq q(f(x_k) - f(x_*)), \end{aligned}$$

де $q = 1 - \varepsilon \alpha_k d \left(1 + \frac{d}{D}\right)$. Якщо $x_{k+1} \neq x_*$, то бачимо, що $q > 0$, крім

того, очевидно, $q < 1$. Отже, з цієї нерівності випливає (6.25).

Нерівність (6.26) випливає безпосередньо з (6.27) і (6.25), коли

$$C = \sqrt{\frac{2}{d}} \sqrt{f(x_0) - f(x_*)}. \blacktriangleleft$$

Можна довести, що мінімальне значення q отримаємо при $\varepsilon = 1/2$. Якщо α_k в (6.21) вибирати з умови мінімуму функції вздовж напряму антиградієнта, тобто в методі найшвидшого спуску, то послідовність x_k збігається також зі швидкістю геометричної прогресії, причому $q_1 = \frac{D-d}{D+d}$. В обох алгоритмах значення знаменника прогресії буде порівняно малим, якщо d і D мало відрізняються одне від іншого. На жаль, на практиці трапляються випадки, коли $\frac{d}{D} \ll 1$ тоді q і q_1 близькі до 1 і збіжність методів доволі повільна. Розглянемо декілька прикладів.

Приклад 6.2 Знайти розв'язок задачі

$$f(x^1, x^2) = (x^1 - 20)^2 + (x^1 - 2x^2)^2 \rightarrow \min$$

з точністю $\|x_k - x_*\| < 10^{-5}$ методом найшвидшого спуску,

починаючи з точки $x_0 = (0,0)$.

У нашому випадку

$$f'(x) = (2(x^1 - 20) + 2(x^1 - 2x^2), -4(x^1 - 2x^2))^T$$

Ітерація 1

$$f(x_0) = 400, f'(x_0) = (-40, 0)^T.$$

Тоді:

$$x_1 = (0,0)^T - \alpha_0 (-40, 0)^T = (40\alpha_0, 0)^T$$

і розв'язуємо нову задачу

$$f_1(\alpha) = f(40\alpha, 0) = (40\alpha - 20)^2 + (40\alpha)^2 \rightarrow \min_{\alpha}$$

$$f_1'(\alpha) = 80(40\alpha - 20) + 3200\alpha = 0, \quad \alpha_0 = 0.25.$$

$$\text{Тоді } x_1 = (10, 0)^T$$

Результати наступних обчислень записано у таблиці 6.3.

Неважко переконатись, що точний розв'язок задачі є $x^* = (20, 0)$, і значення функції мети $f(x^*) = 0$

Таблиця 6.3

	x_k^1	x_k^2	$f(x_k^1, x_k^2)$	$f'(x_k^1, x_k^2)$	λ	
6	0,0000000	0,0000000	400,0000000	-40,000000; 0,0000000	0,250	
	9,9999999	0,0000000	200,0000000	-0,0000002;-39,999999	0,125	
	10,0000000	5,0000000	100,0000005	-20,000000;-0,0000000	0,250	
	15,0000000	5,0000000	50,0000003	-0,0000001;-20,000000	0,125	
	15,0000000	7,5000000	25,0000003	-10,000000; 0,0000000	0,250	
	...	19,9975586	9,9987793	0,0000060	-0,0048828;0,0000000	0,250
	6	19,9987793	9,9987793	0,0000030	0,00000000; - 0,004883	0,125
	7	19,9999237	9,9999619	0,0000000	-0,0001526; 0,0000000	0,250
	6	19,9999619	9,9999619	0,0000000	0,00000000; -0,000153	0,125
	7					

Приклад 6.3.

Знайти розв'язок задачі

$$f(x^1, x^2) = (2x^1 - x^2)^2 + 3(x^2 - 2)^4 \rightarrow \min$$

з точністю $\|x_k - x_{k-1}\| \leq 10^{-5}$ методом найшвидшого спуску.

Обчислення здійснюємо аналогічно попередньому. Результати обчислень записано у таблиці 6.4.

Приклад 6.4.

Знайти розв'язок задачі

$$f(x^1, x^2) = 100(x^2 - 2x^1)^2 + (1 - x^1)^2 \rightarrow \min$$

з точністю $\|x_k - x_{k-1}\| \leq 10^{-5}$ методом найшвидшого спуску.

Результати обчислень записано у таблиці 6.5.

Таблиця 6.4

	x_k^1	x_k^2	$f(x_k^1)$	$f'(x_k^1, x_k^2)$	λ
0	0,0000000	0,0000000	48,000000	0,0000000;-96,000000	0,0144413
1	0,0000000	1,3863665	2,3473729	-5,5454661;-0,0000021	0,1250000
2	0,6931835	1,3863668	0,4253600	0,0000011;-2,7727321	0,0943652
3	0,6931834	1,6480161	0,1145085	-1,0465969;-0,0000004	0,1250000
40	0,9645132	1,9290264	0,0000761	0,0000000;-0,0042902	0,4594840
41	0,9645132	1,9309976	0,0000719	-0,007885; 0,0000000	0,1250000
758	0,9925287	1,9850574	0,0000001	0,0000000;-0,0000400	0,4980012
759	0,9925287	1,9850774	0,0000001	-0,0000798; 0,0000000	0,1250000

Таблиця 6.5

k	x_k^1	x_k^2	$f(x_k^1)$	$f'(x_k^1, x_k^2)$	λ
0	0,0000000	0,0000000	1,0000000	-2,000000; 0,000000	0,00125
1	0,0024938	0,0000000	0,9975062	0,000001;-0,997507	0,00500
2	0,0024938	0,0049875	0,9950187	-1,995007;-0,000003	0,00125
3	0,0049813	0,0049875	0,9925374	0,000000;-0,995019	0,00500
9	0,0124068	0,0198756	0,9777787	0,000001;-0,987594	0,00500
10	0,0124068	0,0248135	0,9753404	-1,975180;-0,000003	0,00125
731	0,5990226	1,1960404	0,1611848	0,000001;-0,400978	0,00500
732	0,5990226	1,1980453	0,1607828	-0,801949;-0,000003	0,00125
4421	0,9959964	1,9919727	0,0000161	0,000000;-0,004004	0,00500
4422	0,9959964	1,9919927	0,0000160	-0,008007; 0,000000	0,00125

Як бачимо, при розв'язуванні трьох задач з однаковою умовою зупинки ми отримали різну кількість ітерацій, причому із суттєвою різницею. Для вияснення цієї ситуації визначимо значення величин d , D . У прикладі 6.2 отримали:

$$f''(x) = \begin{pmatrix} 4 & -4 \\ -4 & 8 \end{pmatrix}.$$

Для визначення d, D маємо нерівність

$$d\|h\| \leq (f''(x)h, h) \leq D\|h\| \quad \forall h \in R^2 .$$

Легко бачити, що у даному випадку

$$d = 6 - \sqrt{20}, \quad D \leq 6 + \sqrt{20} . \text{ Отже,}$$

$$q \leq \frac{D-d}{D+d} = \frac{\sqrt{5}}{3} < 0.745 .$$

У прикладі 6.4:

$$f''(x) = \begin{pmatrix} 802 & -400 \\ -400 & 200 \end{pmatrix}.$$

$$\text{Тоді із умови } d\|h\| \leq (f''(x)h, h) \leq D\|h\| \quad \forall h \in R^2$$

$$\text{отримаємо } d \leq 0,4, \quad D \geq 1001,6 . \text{ Отже } q \geq \frac{D-d}{D+d} \cong 0.9992 .$$

$$\text{У прикладі 6.3 маємо } f''(x) = \begin{pmatrix} 8 & -4 \\ -4 & 2 + 36(x^2 - 2)^2 \end{pmatrix} \quad \text{i у}$$

точці розв'язку $d = 0$, що суттєво впливає на збіжність методу.

Залежність швидкості збіжності від величин d, D легко пояснити геометрично. З рис. 6.1 і 6.2 бачимо, що чим ближче лінії рівня $f(x) = const$ до кола, тим краща збіжність методу найшвидшого спуску (d/D близьке до 1). Однак метод найшвидшого спуску, а також інші варіанти градієнтного методу повільно збігаються у тих випадках, коли поверхні рівня функції $f(x)$ витягнуті, тобто функції мають так звану властивість яру.

Для таких функцій незначна зміна деяких змінних приводить до значної зміни значення функції.

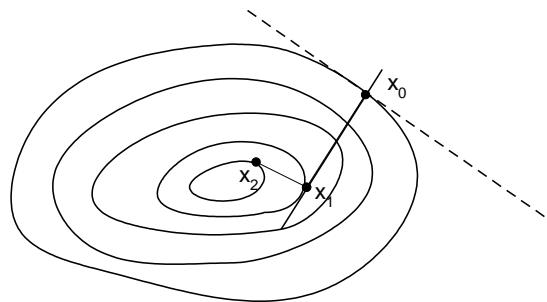


Рис. 6.1

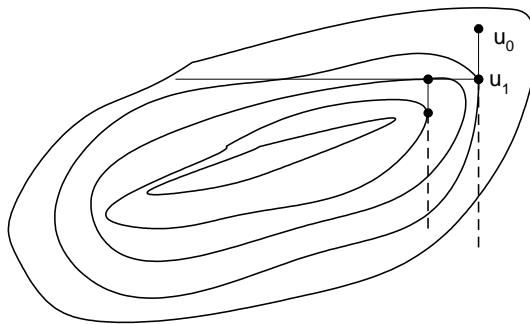


Рис. 6.2

Такі змінні відповідають схилу яру, а для інших змінних, які задають напрям dna яру – функція змінюється повільно, що можна побачити з рис. 6.3. Якщо точка x_k є на схилі яру, то напрям спадання ($-f'(x_k)$) буде майже перпендикулярним до dna яру, і в

результаті обчислень послідовності точок $\{x_k\}$, відшукані за градієнтним методом, будуть то на одному, то на іншому схилі яру. Якщо схили яру достатньо круті, то збіжність методу буде дуже повільною. Поліпшити збіжність методу можна за допомогою евристичного засобу, який іноді називають *методом яру*.

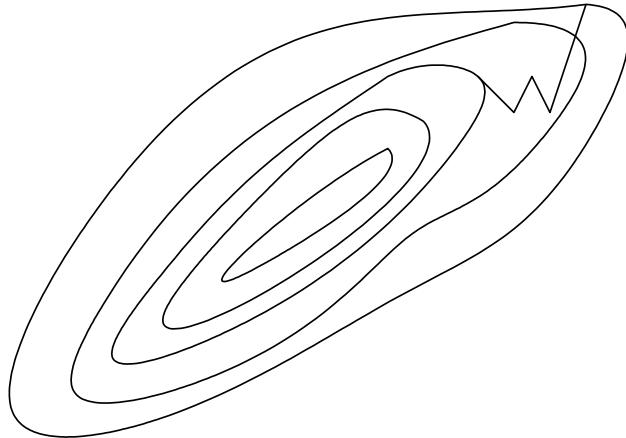


Рис. 6.3

Опишемо цей метод. Виберемо дві точки x_0 , x_1 і, використовуючи один з варіантів градієнтного методу, визначимо нові точки y_0 , y_1 . Потім приймаємо

$$x_2 = y_1 - (y_1 - y_0)h \cdot sign(f(y_1) - f(y_0)) / \|y_1 - y_0\|,$$

де $h > 0$ - додатна змінна, яка є кроком методу. З точки x_2 проведемо спуск одним із відомих градієнтних методів до дна яру і

визначимо точку y_2 і т. д. Якщо відомі точки y_0, y_1, \dots, y_k , $k \geq 2$, то з точки

$$x_{k+1} = y_k - (y_k - y_{k-1}) \|y_k - y_{k-1}\|^{-1} h \cdot \text{sign}(f(y_k) - f(y_{k-1}))$$

виконаємо спуск за допомогою відомого варіанта градієнтного методу і відшукаємо наступну точку y_{k+1} на дні яру. Зазначимо, що спуск з точки x_k в точку y_k може відбуватися за декілька кроків. Величину кроку h підбирають самостійно з урахуванням інформації про мінімізаційну функцію. Ефективність методу може суттєво поліпшитися, якщо крок h вибрati змінним, що даватиме змогу:

по-перше, прямолінійні ділянки яру проходити швидше;
по-друге, на крутих ділянках крок методу суттєво зменшити, що зменшить імовірність викидання наступного наближення з яру;
по-третє, домогтися якомога найменшого відхилення точок x_k від дна яру і зменшити обсяг обчислень для відшукання точки y_k . На практиці h_k вибирають з умови

$$h_{k+1} = h_k c^{\cos \alpha_k - \cos \alpha_{k-1}}, \quad k = 2, 3, \dots$$

де α_k - кут між векторами $x_k - y_{k-1}$, $y_k - y_{k-1}$

$$\cos \alpha_k = (x_k - y_{k-1}, y_k - y_{k-1}) (\|x_k - y_{k-1}\| \|y_k - y_{k-1}\|)^{-1},$$

де $c > 1$ – параметр методу. Величина $\cos \alpha_k - \cos \alpha_{k-1}$ пов'язана з кривиною яру і має властивість зазначати величину зміни кривини.

У процесі переходу з ділянок яру, що мають велику кривину, на прямолінійні ділянки $\cos \alpha_k - \cos \alpha_{k-1} > 0$ і $h_{k+1} > h_k$ крок збільшується. І навпаки, при переході з ділянки яру, що має меншу кривину, на ділянку з більшою кривиною $\cos \alpha_k - \cos \alpha_{k-1} < 0$ і крок $h_{k+1} < h_k$ зменшується. Параметр $c > 1$ регулює чутливість методу до зміни кривини яру. Вираз для кроку методу зручніше записувати так:

$$h_{k+1} = h_k c^{\cos \alpha_k - \cos \alpha_{k-1}} = h_{k-1} c^{\cos \alpha_k - \cos \alpha_{k-2}} = \dots = h_2 c^{\cos \alpha_k - \cos \alpha_1}$$

Отже,

$$h_{k+1} = A c^{\cos \alpha_k}, \quad A = h_2 c^{-\cos \alpha_1} = \text{const} > 0, \quad k = 2, 3, \dots.$$

Інший спосіб прискорення швидкості збіжності полягає у виборі відповідної заміни $x = q(\xi) = (q_1(\xi), \dots, q_n(\xi))$ так, щоб поверхні рівня функції $f(q(\xi)) = G(\xi)$ були близькі до куль. Градієнтний метод є основою і для інших доволі корисних у практичному застосуванні методів.

Суттєвим недоліком градієнтних методів є їхня чутливість до похибки обчислень. Це досить відчутно в околі розв'язку, де норма градієнта мала. Тому градієнтний метод у початковій стадії працює краще, ніж на кінцевому етапі.

Аналогом градієнтного методу для мінімізації опуклих негладких функцій є так званий субградієнтний метод, у якому послідовність точок x_1, x_2, \dots визначається за правилом

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k h_k, \text{ де } h_k \in \partial f(x_k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (6.29)$$

У цьому випадку субградієнт h_k вибирають з множини $\partial f(x_k)$ довільно. Як свідчать теоретичні оцінки та практика обчислень, субградієнтний метод збігається досить повільно і не є ефективним способом мінімізації складних негладких функцій. Крім того, у випадку його використання, можуть виникнути труднощі з обчисленням субградієнта.

6.3. Метод Ньютона

До найефективніших методів розв'язування задач мінімізації (6.1) належить метод Ньютона і його модифікації. Цей метод є мето-дом другого порядку, тобто передбачає обчислення других похідних мінімізуючої функції $f(x)$ на R^n . У його модифікаціях матриця других похідних апроксимується, отож використовують інформацію про значення градієнтів функції $f(x)$. Такі модифікації є методами першого порядку.

Припустимо, що $f(x) \in C^2(R^n)$ і опукла. Нехай відоме деяке наближення x_k до розв'язку задачі мінімізації, тоді функцію $f(x)$ в цій точці можна записати у вигляді

$$f(x) - f(x_k) = (f'(x_k), x - x_k) + \frac{1}{2}(f''(x_k)(x - x_k), x - x_k) + o(\|x - x_k\|^2).$$

Візьмемо квадратичну частину цього приросту

$$f_k(x) = (f'(x_k), x - x_k) + \frac{1}{2}(f''(x_k)(x - x_k), x - x_k) \quad (6.30)$$

і визначимо x_{k+1} як розв'язок задачі $f_k(x) \rightarrow \min_{R^n}$. Зрозуміло, що

$f''(x) = f''(x_k)$. Оскільки $f(x)$ опукла, такою буде і функція $f_k(x)$.

Тому необхідні і достатні умови мінімуму мають вигляд

$$f'(x_k) + f''(x_k)(x - x_k) = 0,$$

звідки отримаємо:

$$x_{k+1} = x_k - (f''(x_k))^{-1} f'(x_k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (6.31)$$

Формула (6.31) визначає метод Ньютона мінімізації функції $f(x)$ і він збігається з методом Ньютона для розв'язування системи рівнянь $f'(x) = 0$.

Теорема 6.3. Нехай $f(x) \in C^2(R^n)$ сильно опукла з константою $\theta > 0$ і $f''(x)$ задовольняє умову Ліпшиця

$$\|f''(x) - f''(y)\| \leq M \|x - y\|, \quad x, y \in R^n, \quad \text{де } M > 0,$$

початкова точка x_0 вибрана так, що $\|f'(x_0)\| \leq 8q\Theta^2/M$, де $q \in (0, 1)$.

Тоді послідовність $\{x_k\}$, визначена за (6.31), збігається до точки x_* і виконується оцінка:

$$\|x_k - x_*\| \leq 4\Theta q^{2^k} / M \quad (6.32)$$

➤ Оскільки $f(x)$ сильно опукла, то точка x_* існує і єдина, крім того виконується умова:

$$(f''(x)h, h) \geq 2\Theta \|h\|^2, \text{ де } x, h \in R^n.$$

Матриця $f''(x)$ додатно визначена, тому невироджена і метод (6.31) коректно визначений. Оскільки виконується нерівність

$$(f'(x) - f'(x_*), x - x_*) \geq 2\Theta \|x - x_*\|^2,$$

то можемо записати

$$\|x_k - x_*\|^2 \leq \frac{1}{2\Theta} \|f'(x_k)\| \|x_k - x_*\|,$$

тобто

$$\|x_k - x_*\| \leq \frac{1}{2\Theta} \|f'(x_k)\|.$$

Враховуючи спiввiдношення

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

отримаємо

$$\begin{aligned}
\|f'(x_{k+1})\| &\leq \left\| \int_0^1 (f''(x_k + \tau(x_{k+1} - x_k)) - f''(x_k)) d\tau \right\| \times \\
&\times \|x_{k+1} - x_k\| \leq \frac{M}{2} \|x_{k+1} - x_k\|^2 = \frac{M}{2} \|[f''(x_k)]^{-1}\|^2 \times \\
&\circ \|f'(x_k)\|^2.
\end{aligned} \tag{6.33}$$

Оцінимо величину $\|[f''(x_k)]^{-1}\|$. Оскільки $(f''(x)h, h) \geq 2\Theta\|h\|^2$,

то прийнявши $h = [f''(x_k)]^{-1}y$, отримуємо:

$$\|[f''(x)]^{-1}y\|^2 \leq \frac{1}{2\Theta} (y, [f''(x)]^{-1}y) \leq \frac{1}{2\Theta} \|y\| \|[f''(x)]^{-1}y\|$$

Отже,

$$\|[f''(x)]^{-1}\| = \max_{\|y\|=1} \frac{\|[f''(x)]^{-1}y\|}{\|y\|} \leq \frac{1}{2\Theta}.$$

Враховуючи цю оцінку, з (6.33) запишемо

$$\|f'(x_{k+1})\| \leq \frac{M}{8\Theta^2} \|f'(x_k)\|^2 \text{ при } k = 0, 1, \dots.$$

Тепер

$$\|f'(x_k)\| \leq \frac{M}{8\Theta^2} \|f'(x_{k-1})\|^2 \leq \left(\frac{M}{8\Theta^2} \right)^{2^{k-1}} \|f'(x_0)\|^{2^k} = \frac{8\Theta^2}{M} q^{2^k},$$

де $q = \frac{M}{8\Theta^2} \|f'(x_0)\|$ і легко отримати оцінку (6.32). \blacktriangleleft

Отже, збіжність методу доведена для доброго початкового наближення.

Приклад 6.5. Розглянемо застосування методу Ньютона до розв'язування задачі

$$f(x) = (x^2 - (x^1)^2)^2 + 2(1 - x^1)^2 \rightarrow \min.$$

За початкове наближення виберемо точку $x_0 = (0.0)^T$, тоді

$$f'(x) = \begin{pmatrix} -4x^1(x^2 + (x^1)^2 - 4(1 - x^1)) \\ 2(x^2 - (x^1)^2) \end{pmatrix};$$

$$f''(x) = \begin{pmatrix} -4x^2 + 12(x^1)^2 + 4 & -4x^1 \\ -4x^1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Ітерація 1. у нашому випадку

$$f'(x_0) = \begin{pmatrix} -4 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad f''(x_0) = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Тепер розв'язуємо систему рівнянь

$$f''(x_0)\Delta x_0 = f'(x_0),$$

розв'язки якої є $\Delta x_0^1 = -1$, $\Delta x_0^2 = 0$. Наступне наближення

запишемо так: $x_1 = x_0 - \Delta x_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, при цьому

$$f(x_1) = 1.$$

Ітерація 2. у даному випадку

$$f'(x_1) = \begin{pmatrix} 4 \\ -2 \end{pmatrix}, \quad f''(x_1) = \begin{pmatrix} 16 & -4 \\ -4 & 2 \end{pmatrix}.$$

Система рівнянь матиме вигляд:

$$\begin{aligned} 16\Delta_1^1 - 4\Delta_1^2 &= 4 \\ -4\Delta_1^1 + 2\Delta_1^2 &= -2 \end{aligned},$$

розв'язками якої є $\Delta_1^1 = 0, \quad \Delta_1^2 = -1$.

$$\text{Тоді: } x_2 = x_1 - \Delta_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad f'(x_2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Задачу розв'язано.

На жаль, така ситуація не завжди виникає, проте при виборі "доброго" (близького до розв'язку) початкового наближення кількість ітерацій для отримання розв'язку незнана.

Зазначимо, що умови, які гарантують збіжність, важко перевірити. Складність у визначенні початкового наближення є одним з недоліків методу Ньютона. Іншим недоліком методу є, у випадку великої розмірності, трудомісткістьожної ітерації. Враховуючи ці зауваження, запропоновано низку модифікацій методу Ньютона, які зберігають позитивні характеристики методу (високу швидкість збіжності) і зменшують трудомісткість та послаблюють вимоги до вибору початкового наближення.

6.4. Метод Ньютона з регулюванням кроку

Метод вигляду

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k, \text{ де } \alpha_k \in (0,1], \quad h_k = -(f''(x_k))^{-1} f'(x_k) \quad (6.34)$$

називають *методом Ньютона з регулюванням кроку*. При $\alpha_k = 1$ він збігається з методом Ньютона. Величину α_k вибирають одним із наведених способів уздовж заданого напряму h_k , при цьому $\alpha_k \leq 1$. Можна довести, що варіант методу (6.34) у випадку сильноопуклих функцій $f(x) \in C^2(\mathbb{R}^n)$ збігається з довільного початкового наближення і збіжність буде локально надлінійна або квадратична (в околі розв'язку α_k набуває значення 1) залежно від властивості функції $f(x)$. Таким шляхом можемо уникнути поганого початкового наближення.

Справді, використовуючи алгоритм (6.34) з вибором α_k , за схемою

$$f(x_k + \alpha_k h_k) - f(x_k) \leq \varepsilon \alpha_k (f'(x_k), h_k) \quad (6.35)$$

легко довести таке: якщо виконуються умови теореми 6.3, то існують такі значення $\alpha_k > 0$, для яких метод (6.34) є методом спуску і локально в околі точки x_* переходить у метод Ньютона:

$$\begin{aligned}
f(x_k + \alpha_k h_k) - f(x_k) &= (f'(x_k), \alpha_k h_k) + \frac{\alpha_k^2}{2} (f''(x_k + \Theta_k \alpha_k h_k) h_k, h_k) \leq \\
&\leq \alpha_k (f'(x_k), h_k) + \frac{\alpha_k^2}{2} \|f''(x_k + \Theta_k \alpha_k h_k) - f''(x_k)\| \|h_k\|^2 + \frac{\alpha_k^2}{2} (f''(x_k) h_k, h_k) = \\
&= \alpha_k \left((f'(x_k), h_k) \left(1 - \frac{\alpha_k}{2} \right) + \frac{\alpha_k}{2} \|f''(x_k + \Theta_k \alpha_k h_k) - f''(x_k)\| \|h_k\|^2 \right) \leq \\
&\leq \varepsilon \alpha_k (f'(x_k), h_k).
\end{aligned}$$

Вважатимемо, що $\varepsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right)$. Зрозуміло, що існує таке значення

$\alpha_k > 0$, для якого умова (6.35) виконується. Якщо x_k близьке до розв'язку, тоді

$$\|f''(x_k + \Theta_k \alpha_k h_k) - f''(x_k)\|_{k \rightarrow \infty} \rightarrow 0$$

і для деякого номера N_0 при $k > N_0$ матимемо, що умова (6.35) виконується для $\alpha_k = 1$. Отже, переходимо до методу Ньютона. Трудомісткість методу можна зменшити, якщо використати рекурсивний аналог Однак такий варіант не завжди ефективний. Кращі перспективи зменшити кількість обчислень маємо тоді, коли будуємо апроксимацію матриці $[f''(x)]^{-1}$ на основі інформації про значення градієнтів $f'(x_k)$, $f'(x_{k-1})$.

6.5. Рекурсивний аналог методу Ньютона

Як бачимо, метод Ньютона з регулюванням кроку вирішує лише проблему з вибором початкового наближення, однак не вирішує проблему трудомісткості. Для того, щоб зберегти високу

швидкість збіжності і послабити трудомісткість алгоритму, використовують рекурсивний аналог методу Ньютона, а саме

$$\begin{aligned} z_k^{i+1} &= z_k^i - f''(x_k)^{-1} f'(z_k^i), \\ x_{k+1} &= z_k^p, \quad z_k^0 = x_k, \quad i = 0, 1, \dots, p-1, \quad k = 0, 1, \dots \end{aligned} \tag{6.36}$$

В даному алгоритмі значення матриці других похідних $f''(x_k)$ залишається незмінним протягом p проміжних кроків.

Алгоритм (6.36) можна переписати у вигляді:

$$x_{k+1} = x_k - \left(f''\left(x_{\left[\frac{k}{p}\right]p}\right)^{-1} f'(x_k) \right), \quad k = 0, 1, \dots,$$

де $\left[a\right]$ – ціла частина числа a .

Теорема 6.4. Нехай:

- Функція $f(x) \in C^2(R^n)$ сильно опукла і для $x \in D, y \in R^n$ виконуються умови $m\|y\|^2 \leq (f''(x)y, y) \leq M\|y\|^2$, де $0 < m \leq M; m, M - \text{const}$,

$$D = \left\{ x : \|x - x_*\| \leq \frac{2}{m} \|f'(x_0)\| \right\}.$$

- $\forall x, y \in D, f''(x)$ задовольняє умову Ліпшиця $\|f''(x) - f''(y)\| \leq L\|x - y\|, \text{ a } L < \infty$.

3. Початкове наближення x_0 вибрано таким, що виконується умова $\mu = C \|x_0 - x_*\| < 1$, де $C = \frac{2L}{m}$.

Тоді послідовність $\{x_k\}$ породжена рекурсивним процесом (6.36), коректно визначена та збігається до x_* і справедлива оцінка

$$\|x_k - x_*\| \leq \left(\mu^p \sqrt{\frac{1}{2}} \right)^{(p+1)^k - 1} \|x_0 - x_*\|.$$

➤ Існування та єдиність розв'язку випливає із властивостей сильно-опуклих функцій [7]. Із сильної опуклості функції випливає оцінка

$$\|f''(x)^{-1}\| \leq \frac{1}{m}.$$

Нехай $x_k \in D$ і $\|x_k - x_*\| \leq \|x_0 - x_*\|$ (що буде проілюстровано нижче). Тоді має місце оцінка

$$\begin{aligned} z_k^1 - x_* &= z_k^0 - x_* - [f''(x_k)]^{-1} \left(f'(z_k^0) - f'(x_*) \right) = \\ &= [f''(x_k)]^{-1} \left(f''(x_k) - f''(x_* + \tau(z_k^0 - x_*)) \right) z_k^0 - x_*. \end{aligned}$$

Використовуючи умови теореми, отримаємо:

$$\begin{aligned}\|z_k^1 - x_*\| &\leq \frac{1}{m} L \|x_k - x_*\| \|z_k^0 - x_*\| = \frac{L}{m} \|z_k^0 - x_*\|^2 = \frac{C}{2} \|z_k^0 - x_*\|^2 \leq \\ &\leq \|z_k^0 - x_*\|.\end{aligned}$$

Аналогічно:

$$\begin{aligned}\|z_k^2 - x_*\| &\leq \|z_k^1 - x_* - [f''(x_k)]^{-1}(f'(z_k^1) - f'(x_*))\| = \\ &= \|[f''(x_k)]^{-1}(f''(x_k)(z_k^1 - x_*) - f''(x_k + \tau(z_k^1 - x_*))(z_k^1 - x_*))\| \leq \\ &\leq \frac{2L}{m} \|z_k^0 - x_*\| \|z_k^1 - x_*\| \leq \frac{C^2}{2} \|z_k^0 - x_*\|^3.\end{aligned}$$

Нехай

$$\|z_k^i - x_*\| \leq \frac{C^i}{2} \|z_k^0 - x_*\|^{i+1}$$

Тоді, використавши метод математичної індукції, маємо

$$\|z_k^{i+1} - x_*\| \leq \frac{L}{m} 2 \|z_k^0 - x_*\| \|z_k^i - x_*\| \leq \frac{C^{i+1}}{2} \|z_k^0 - x_*\|^{i+2} \quad i = \overline{2, p-1}.$$

Отже,

$$\|z_k^p - x_*\| \leq \frac{C^p}{2} \|z_k^0 - x_*\|^{p+1}$$

Або

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leq \frac{C^p}{2} \|x_k - x_*\|^{p+1}.$$

При $k = 0$ маємо:

$$\begin{aligned}\|x_1 - x_*\| &= \|z_0^p - x_*\| \leq \frac{C^p}{2} \|z_0^0 - x_*\|^{p+1} = \frac{(C\|x_0 - x_*\|)^p}{2} \|x_0 - x_*\| \leq \\ &\leq \left(\frac{\mu}{\sqrt[p]{2}} \right)^p \|x_0 - x_*\|\end{aligned}$$

Аналогічно для $k=1$:

$$\begin{aligned}\|x_2 - x_*\| &= \|z_1^p - x_*\| \leq \frac{C^p}{2} \|x_1 - x_*\|^{p+1} = \frac{C^p}{2} \left(\left(\frac{\mu}{\sqrt[p]{2}} \right)^p \|x_0 - x_*\| \right)^{p+1} = \\ &= \frac{C^p}{2} \|x_0 - x_*\|^{p+1} \left(\frac{\mu}{\sqrt[p]{2}} \right)^{p(p+1)} = \left(\frac{\mu}{\sqrt[p]{2}} \right)^{p+p(p+1)} \|x_0 - x_*\| = \\ &= \left(\frac{\mu}{\sqrt[p]{2}} \right)^{(p+1)^2-1} \|x_0 - x_*\|.\end{aligned}$$

Використовуючи метод математичної індукції, отримаємо:

$$\begin{aligned}\|x_k - x_*\| &= \frac{C^p}{2} \|x_{k-1} - x_*\|^{p+1} = \frac{C^p}{2} \left(\left(\frac{\mu}{\sqrt[p]{2}} \right)^{(p+1)^{k-1}-1} \|x_0 - x_*\| \right)^{p+1} = \\ &= \frac{C^p}{2} \|x_0 - x_*\|^{p+1} \left(\frac{\mu}{\sqrt[p]{2}} \right)^{(p+1)^k-p-1} \leq \left(\frac{\mu}{\sqrt[p]{2}} \right)^{(p+1)^k-1} \|x_0 - x_*\|\end{aligned}$$

Теорему доведено. \blacktriangleleft

Тепер можна перейти до визначення оптимальної глибини рекурсії у сенсі обчислювальних затрат на отримання результату.

Позначимо через Q_1 обчислювальні затрати, які йдуть на визначення z_k^1 і через Q_2 обчислювальні витрати, які йдуть на обчислення $z_k^i, i > 1$. Очевидно, $Q_1 > Q_2$. На кожній блочній ітерації методу маємо $Q_1 + (p - 1)Q_2$ обчислювальних затрат.

Для визначення оптимальної глибини нам необхідно знайти розв'язок задачі

$$k(Q_1 + (p - 1)Q_2) \rightarrow \min$$

$$\left(\frac{\mu}{\sqrt[p]{2}} \right)^{(p+1)^k - 1} \frac{1}{m} \|f'(x_0)\| = \varepsilon.$$

Поряд з алгоритмом (6.36) можна використовувати алгоритми із змінною глибиною рекурсії.

6.6. Метод Стеффенсена

У тих випадках, коли обчислення матриці $f''(x)$ вимагає значних обчислювальних затрат, постає питання щодо можливості побудови методу, який за швидкістю і трудомісткістю не гірший, ніж метод Ньютона. Одним із таких методів є метод Стеффенсена. У даному випадку похідна Гессе заміняється різницевим відношенням перших похідних.

У методі Стеффенсена, якщо відоме наближення x_k , то наступні наближення визначають за формулами;

$$x_{k+1} = x_k - (f'(x_k, x_k - \beta_k f'(x_k)))^{-1} f'\{x_k\}, k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.37)$$

β_k - числовий параметр $f'(x, y)$ - поділена різниця, яка апроксимує $f''\{x\}$. Елементи матриці $f'(x, y)$ визначаються за формулами

$$f_{i,j}(x, y) = \begin{cases} \frac{f_{x^i}(x^1, \dots, x^j, y^{j+1}, \dots, y^n) - f_{x^i}(x^1, \dots, x^{j-1}, y^j, \dots, y^n)}{x^j - y^j}, & x^j \neq y^j \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x^1, \dots, x^{j-1}, y^j, \dots, y^n), & x^j = y^j. \end{cases}$$

Теорема 6.5. Нехай

$$S_0 = \left\{ x \in R^n : \|x - x_0\| \leq R = \max \left\{ \frac{2}{\mu} + \beta, \frac{4}{\mu} \right\} \|f'(x_0)\| \right\} \quad |\beta_k| \leq \beta,$$

1. Функція $f(x) \in C^2(S_0)$,

2. $\mu \|x - y\|^2 \leq (f'(x) - f'(y), x - y), \quad \forall x, y \in S_0, \mu > 0$

3. $\|f'(x, y) - f'(y, z)\| \leq K(\|x - y\| + \|y - z\|) \quad \forall x, y, z \in S_0$.

Початкове наближення x_0 вибирають таким, що

$$q = K \left(\frac{2}{\mu} + \beta \right) \frac{2}{\mu} \|f'(x_0)\| < 1 \quad (6.38)$$

Тоді послідовність $\{x_n\}$ визначена за (6.37) збігається до x_* , що є розв'язком задачі (6.1) причому справедлива оцінка

$$\|x_k - x_*\| \leq \frac{1}{\mu} q^{2^k - 1} \|f'(x_0)\| \quad k = 1, 2, \dots \quad (6.39)$$

➤ З умови 2 випливає сильна опуклість функції $f(x)$, а це означає, що існує і єдина точка x_* , що є розв'язком задачі (6.1).

Нехай для деякого $k > 0$ знайдені точки x_k і справедливі умови

$$x_k \in S_0, \quad \|f'(x_k)\| \leq q^{2^k - 1} \|f'(x_0)\| < \|f'(x_0)\|. \quad (6.40)$$

Тоді, використовуючи умову 2 можемо записати:

$$\mu \|x_k - x_0\|^2 \leq 2 \|f'(x_0)\| \|x_k - x_0\|$$

або

$$\|x_k - x_0\| \leq \frac{2}{\mu} \|f'(x_0)\|.$$

Нехай $\tilde{x}_k = x_k - \beta_k f'(x_k)$. Тоді, зважаючи на (6.40), отримаємо:

$$\begin{aligned} \|\tilde{x}_k - x_0\| &\leq \|x_k - x_0\| + |\beta_k| \|f'(x_k)\| \leq \\ &\leq \frac{2}{\mu} \|f'(x_0)\| + \beta \|f'(x_k)\| \leq \left(\frac{2}{\mu} + \beta \right) \|f'(x_0)\| \leq R. \end{aligned}$$

Отже, $\tilde{x}_k \in S_0$. Враховуючи умову (6.39), отримаємо:

$$\|x_k - \tilde{x}_k\| \leq \beta \|f'(x_k)\| \leq \frac{\beta \mu}{2K \left(\frac{2}{\mu} + \beta \right)} \leq \frac{\mu}{2K}.$$

Тепер можна записати:

$$\|f'(x_k, \tilde{x}_k) - f''(x_k)\| = \|f'(x_k, \tilde{x}_k) - f'(x_k, x_k)\| \leq K\|(x_k - \tilde{x}_k)\| \leq \frac{\mu}{2},$$

Використовуючи викладене вище, можемо записати

$$\begin{aligned} \|f'(x_k, \bar{x}_k)\xi, \xi\| &= \|(f''(x_k)\xi, \xi) + ((f'(x_k, \tilde{x}_k) - f''(x_k))\xi, \xi)\| \geq \\ &\geq \mu\|\xi\|^2 - (\mu/2)\|\xi\|^2 = (\mu/2)\|\xi\|^2, \quad \xi \in R^n. \end{aligned} \tag{6.41}$$

А це означає, що матриця $f'(\bar{x}_k, x_k)$ невироджена і алгоритм (6.37) коректно визначений. Використовуючи умову (6.41), легко проілюструвати, що

$$\|f'(x_k, \tilde{x}_k)\| \leq \frac{2}{\mu} \tag{6.42}$$

Для цього необхідно у (6.41) покласти

$$\xi = f'(x_k, \tilde{x}_k)^{-1}z,$$

тоді:

$$\frac{\mu}{2} \|f'(x_k, \tilde{x}_k)^{-1}z\|^2 \leq (z, f'(x_k, \tilde{x}_k)^{-1}z) \leq \|z\| \|f'(x_k, \tilde{x}_k)^{-1}z\|$$

або

$$\|f'(x_k, \tilde{x}_k)^{-1} z\| \leq \frac{2}{\mu} \|z\|, \quad z \in R^n,$$

і звідси випливає (6.42).

Тепер можемо записати:

$$\begin{aligned} \|x_{k+1} - x_0\| &\leq \|x_{k+1} - x_k\| + \|x_k - x_0\| \leq \\ &\leq \frac{2}{\mu} \|f'(x_k)\| + \frac{2}{\mu} \|f'(x_0)\| \leq \frac{4}{\mu} \|f'(x_0)\| \leq R \end{aligned}$$

тобто $x_{k+1} \in S_0$.

Із означення поділених різниць

$$f'(x, y)(x - y) = f'(x) - f'(y), \quad \forall x, y \in R^n$$

можемо записати:

$$\begin{aligned} f'(x_{k+1}) &= f'(x_k) + f'(x_{k+1}, x_k)(x_{k+1} - x_k) = \\ &= [f'(x_k, \tilde{x}_k) - f'(x_{k+1}, x_k)]f'(x_k, \tilde{x}_k)^{-1}f'(x_k) \end{aligned}$$

За припущення індукції (6.40) ми отримаємо:

$$\begin{aligned} \|f'(x_{k+1})\| &\leq K(\|x_{k+1} - x_k\| + \|x_k - \tilde{x}_k\|) \frac{2}{\mu} \|f'(x_k)\| \leq \\ &\leq K \left(\frac{2}{\mu} \|f'(x_k)\| + \beta \|f'(x_k)\| \right) \frac{2}{\mu} \|f'(x_k)\| = K \left(\frac{2}{\mu} + \beta \right) \frac{2}{\mu} \|f'(x_k)\|^2 \leq \\ &\leq K \left(\frac{2}{\mu} + \beta \right) \frac{2}{\mu} \left(q^{2^k-1} \|f'(x_0)\| \right)^2 = q^{2^{k+1}-1} \|f'(x_0)\| \end{aligned}$$

використавши умову

$$\mu \|x_k - x_*\|^2 \leq (f'(x_k) - f'(x_*), x_k - x_*) \leq \|f'(x_k)\| \|x_k - x_*\|$$

отримаємо:

$$\|x_k - x_*\| \leq \frac{\|f'(x_k)\|}{\mu}.$$

Звідси випливає оцінка (6.39) \Leftarrow .

Особливо ефективний метод (6.37) буде тоді, коли β_k вибираємо з умови

$$\beta_k = \arg \min_{\mu} f(x_k - \beta_k f'(x_k)),$$

У даному випадку маємо квадратичну збіжність зі знаменником $q_1 < q\gamma$, де $\gamma < 1$ є знаменником збіжності для градієнтного методу

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k f'(x_k), \quad k = 0, 1, \dots$$

$$\text{у випадку } \alpha_k = \arg \min_{\alpha} f(x_k - \alpha f'(x_k)).$$

Поряд із методом (6.37) можна використати безпосередньо різницевий метод Ньютона, а саме:

$$x_{k+1} = x_k - [f'(x_k, \tilde{x}_k)]^{-1} f'(x_k), \quad k = 0, 1, \dots$$

$$\text{де } f'(x, \tilde{x}) = \left\{ a_{i,j} \right\}_{i,j=1,n},$$

$$a_{ij} = \frac{\frac{\partial f}{\partial x_i}(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_j, x_{j+1}, \dots, x_k) - \frac{\partial f}{\partial x_i}(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_{j-1}, x_j, \dots, x_k)}{\tilde{x}_j - x_j}, \quad i, j = \overline{1, n}$$

6.7. Квазіньютонівські методи

Для зменшення обчислювальних затрат можна використовувати алгоритми, у яких проведено апроксимацію матриці Гессе. До таких алгоритмів зачислено квазіньютонівські методи.

Нехай функція $f(x) \in C^2(R^n)$. Розглянемо метод

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k, \text{ де } h_k = -H_k f'(x_k). \quad (6.43)$$

Матрицю H_k вибираємо так, щоб вона в деякому сенсі апроксимувала матрицю $[f''(x_k)]^{-1}$. Зазначимо, що

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

Якщо $f''(x_{k+1})$ невироджена, то з точністю до членів вищого порядку малості порівняно з $\|x_k - x_{k+1}\|$ матимемо

$$[f''(x_{k+1})]^{-1}(f'(x_{k+1}) - f'(x_k)) \approx x_{k+1} - x_k. \quad (6.44)$$

Якщо $f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x)$, де A – симетрична, додатно

визначена матриця $b \in R^n$, то наближена рівність (6.44) перетворюється у точну

$$(f''(x_{k+1}))^{-1} \Delta y_k = \Delta x_k, \quad \text{де}$$

$$\Delta y_k = f'(x_{k+1}) - f'(x_k), \quad \Delta x_k = x_{k+1} - x_k.$$

На підставі цього матрицю H_k вибираємо з умови

$$H_{k+1} \Delta y_k = \Delta x_k. \quad (6.45)$$

Цю умову називають **квазіньютонівською**. Її використовують для побудови багатьох методів апроксимації $(f''(x))^{-1}$. Відповідні методи мінімізації, для яких використовують співвідношення (6.45), також називають квазіньютонівськими. Нехай на k -ї ітерації маємо деяке наближення H_k для матриці $(f''(x_k))^{-1}$, на наступному кроці наближення H_{k+1} для матриці $(f''(x_{k+1}))^{-1}$ визначатимемо за формулою:

$$H_{k+1} = H_k + \Delta H_k.$$

У цьому випадку матрицю ΔH_k обиратимемо так, щоб виконувалася умова (6.45). З цією метою перепишемо її у вигляді

$$\Delta H_k \Delta y_k = \Delta x_k - H_k \Delta y_k.$$

Ми маємо систему n рівнянь з n^2 невідомими. Цю рівність задовольняє матриця рангу 1, задана формулою

$$\Delta H_k = \frac{1}{(z_k, \Delta y_k)} (\Delta x_k - H_k \Delta y_k) z_k \quad (6.45')$$

де z_k - довільний вектор такий, що $(z_k, \Delta y_k) \neq 0$.

Під добутком векторів u, v розуміємо $u \cdot v^T$ матрицю вигляду

$$u \cdot v = \begin{pmatrix} u_1 v_1 & \dots & u_1 v_n \\ u_2 v_1 & \dots & u_2 v_n \\ \vdots & & \vdots \\ u_n v_1 & \dots & u_n v_n \end{pmatrix}.$$

3 (6.45'), прийнявши, наприклад,

$$z_k = \Delta x_k - H_k \Delta y_k \text{ при } (\Delta x_k - H_k \Delta y_k, \Delta y_k) \neq 0$$

отримаємо для обчислення H_{k+1} формулу:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(\Delta x_k - H_k \Delta y_k)(\Delta x_k - H_k \Delta y_k)}{(\Delta x_k - H_k \Delta y_k, \Delta y_k)} \quad (6.46)$$

Можна використовувати й інші формули, наприклад,

$$H_{k+1} = H_k + \frac{\Delta x_k \cdot \Delta x_k}{(\Delta x_k, \Delta y_k)} - \frac{H_k (\Delta y_k \cdot \Delta y_k) H_k}{(H_k \Delta y_k, \Delta y_k)}, \quad (6.47)$$

що дає метод Девідона-Флетчера-Пауелла [3], або

$$\begin{aligned} H_{k+1} = H_k + & \left(1 + \frac{(H_k \Delta y_k, \Delta y_k)}{(\Delta x_k, \Delta y_k)} \right) \frac{\Delta x_k \cdot \Delta x_k}{(\Delta x_k, \Delta y_k)} - \\ & - \frac{(\Delta x_k \cdot \Delta y_k) H_k}{(\Delta x_k, \Delta y_k)} - \frac{H_k (\Delta y_k \cdot \Delta x_k)}{(\Delta x_k, \Delta y_k)}, \end{aligned} \quad (6.48)$$

Легко показати, що матриці H_k визначені за формулами (6.46)-(6.48) задовільняють умови (6.45). Справді, у випадку (6.46) маємо:

$$\begin{aligned}
H_{k+1}\Delta y_k &= (H_k + \frac{(\Delta x_k - H_k \Delta y_k)(\Delta x_k - H_k \Delta y_k)}{(\Delta x_k - H_k \Delta y_k, \Delta y_k)}) \Delta y_k = \\
&= H_k \Delta y_k + \frac{(\Delta x_k - H_k \Delta y_k)(\Delta x_k - H_k \Delta y_k)}{(\Delta x_k - H_k \Delta y_k, \Delta y_k)} \Delta y_k = \\
&= H_k \Delta y_k + \frac{(\Delta x_k - H_k \Delta y_k)(\Delta x_k - H_k \Delta y_k, \Delta y_k)}{(\Delta x_k - H_k \Delta y_k, \Delta y_k)} = \\
&= H_k \Delta y_k + \Delta x_k - H_k \Delta y_k = \Delta x_k .
\end{aligned}$$

Аналогічно, у випадку (6.47) отримаємо

$$\begin{aligned}
H_{k+1}\Delta y_k &= (H_k + \frac{\Delta x_k \cdot \Delta x_k}{(\Delta x_k, \Delta y_k)} - \frac{H_k (\Delta y_k \cdot \Delta y_k) H_k}{(H_k \Delta y_k, \Delta y_k)}) \Delta y_k = \\
&= H_k \Delta y_k + \frac{\Delta x_k \cdot \Delta x_k}{(\Delta x_k, \Delta y_k)} \Delta y_k - \frac{H_k (\Delta y_k \cdot \Delta y_k) H_k}{(H_k \Delta y_k, \Delta y_k)} \Delta y_k = \\
&= H_k \Delta y_k + \frac{\Delta x_k \cdot \Delta x_k}{(\Delta x_k, \Delta y_k)} \Delta y_k - \frac{H_k (\Delta y_k \cdot \Delta y_k) H_k}{(H_k \Delta y_k, \Delta y_k)} \Delta y_k = \\
&= H_k \Delta y_k + \Delta x_k - H_k \Delta y_k = \Delta x_k .
\end{aligned}$$

Легко також показати виконання умови (6.45) для випадку (6.48).

Цілий клас формул для обчислення матриці H_{k+1} запропонував Бройден, а саме:

$$H_{k+1}(\varphi_k) = H_k + \frac{\Delta x_k \cdot \Delta x_k}{(\Delta x_k, \Delta y_k)} - \frac{H_k (\Delta y_k \cdot \Delta y_k) H_k}{(H_k \Delta y_k, \Delta y_k)} + \varphi_k (\Delta y_k, H_k \Delta y_k) (v_k, v_k),$$

$$\text{де } v_k = \frac{\Delta x_k}{(\Delta x_k, \Delta y_k)} - \frac{H_k y_k}{(\Delta y_k, H_k \Delta y_k)}, \quad \varphi_k = \varphi_k(\theta_k) = \frac{1 - \theta_k}{1 + \theta_k (\beta_k \gamma_k - 1)},$$

$$\beta_k = \frac{(\Delta y_k, H_k \Delta y_k)}{(\Delta x_k, \Delta y_k)}, \quad \gamma_k = \frac{(\Delta x_k, H_k \Delta x_k)}{(\Delta x_k, \Delta y_k)}, \quad \theta_k \in R.$$

Найбільш вживані значення для θ_k такі:

$$1) \quad \theta_k = \frac{(\Delta y_k, \Delta x_k)}{(\Delta y_k, \Delta x_k) - (\Delta x_k, H_k \Delta x_k)} - \text{отримуємо метод SR-1};$$

2) $\theta_k = 1$ – отримуємо метод Девідона-Флетчера-Пауелла (DFP);

3) $\theta_k = 0$ – отримуємо метод BFGS.

Запропоновано низку інших формул вибору матриці H_k .

Використовуючи формули (6.43), ми повинні задати H_0 . За H_0 можна вибрати довільну додатно визначену симетричну матрицю. На практиці часто вибирають $H_0 = I$. Довжину кроку в квазіньютонівських методах вибирають з умови

$$f(x_k + \alpha_k h_k) = \min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha h_k) \tag{6.49}$$

Іноді розглядають інші способи вибору α_k , наприклад, $\alpha_k \equiv 1$ як у класичному методі Ньютона, або α_k ж обирають у процесі дроблення кроку. Виявляється, що для квадратичної функції, методи (6.43), (6.46) – (6.49) при довільному початковому

наближенні $x_0 \in R^n$ генерують ту саму послідовність x_1, x_2, \dots, x_k , причому

$$H_n = [f''(x_n)]^{-1}, \quad x_n = x_* = -A^{-1}b = \arg \min_{x \in R^n} f(x).$$

Тобто квазіньютонівські методи дають змогу відшукати мінімум квадратичної функції за n кроків. Для неквадратичних функцій ця умова не виконується. Однак можна довести, що з відповідними припущеннями

$$H_k - (f''(x_k))^{-1} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0.$$

У цьому випадку швидкість збіжності надлінійна.

Приклад 6.6. Розв'язати задачу

$$(x^1 - 2)^2 + 2(x^2 - 1)^2 \rightarrow \min$$

з використанням алгоритму (6.43), (6.46) при початковому наближенні

$$x_0 = (0, 0)^T \text{ і } H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

$$\text{Визначимо } f'(x) = \begin{pmatrix} 2(x^1 - 2) \\ 4(x^2 - 1) \end{pmatrix}.$$

$$\text{Ітерація 1. У нашому випадку } f'(x_0) = \begin{pmatrix} -4 \\ -4 \end{pmatrix}, \text{ тоді}$$

$$x_1 = x_0 - \alpha_0 f'(x_0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \alpha_0 \begin{pmatrix} -4 \\ -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4\alpha_0 \\ 4\alpha_0 \end{pmatrix}.$$

Для визначення α_0 маємо задачу

$$f_1(\alpha) = (4\alpha - 2)^2 + 2(4\alpha - 1)^2 \rightarrow \min$$

$$\text{У даному випадку } f_1'(\alpha) = 8(4\alpha - 2) + 16(4\alpha - 1) = 0$$

$$\alpha_0 = \frac{1}{3}.$$

$$\text{Отже, } x_1 = \begin{pmatrix} 4/3 \\ 4/3 \end{pmatrix}.$$

Ітерація 2. У даному випадку

$$f'(x_1) = \begin{pmatrix} -4 \\ 3 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix};$$

$$\Delta x_0 = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} \\ \frac{4}{3} \end{pmatrix}; \quad \Delta y_0 = \begin{pmatrix} -4 \\ 3 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -4 \\ -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{8}{3} \\ \frac{16}{3} \end{pmatrix}.$$

$$\Delta H_0 = \left(\frac{(\Delta x_0 - H_0 \Delta y_0)(\Delta x_0 - H_0 \Delta y_0)^T}{((\Delta x_0 - H_0 \Delta y_0), \Delta y_0)} \right) = \frac{\frac{16}{9} \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 9 \end{pmatrix}}{\frac{-224}{9}} = -\begin{pmatrix} 1/14 & 3/14 \\ 3/14 & 9/14 \end{pmatrix}.$$

$$\text{Тоді: } H_1 = H_0 + \Delta H_0 = \begin{pmatrix} 13/14 & -3/14 \\ 3/14 & 5/14 \end{pmatrix}$$

$$x_2 = x_1 - \begin{pmatrix} \frac{13}{14} & -\frac{3}{14} \\ -\frac{3}{14} & \frac{5}{14} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{4}{3} \\ \frac{4}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} + \alpha \frac{32}{21} \\ \frac{4}{3} - \alpha \frac{16}{21} \end{pmatrix}.$$

Аналогічно, як на першій ітерації, визначаємо $\alpha_1 = \frac{7}{16}$.

Остаточно маємо: $x_2 = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} + \frac{32}{21} \cdot \frac{7}{16} \\ \frac{4}{3} - \frac{16}{21} \cdot \frac{7}{16} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Задачу розв'язано.

Квазіньютонівські методи називають також методами змінної метрики. Це пов'язано з тим, що будь-яка симетрична додатно визначена матриця H_k задає скалярний добуток $(u, v)_k = (H_k u, v)$ і відповідну з ним метрику. Оскільки лінійна частина приросту $f(x_k + \Delta x_k) - f(x_k)$ має вигляд

$$(f'(x_k), \Delta x_k) = (H_k H_k^{-1} f'(x_k), \Delta x_k) = (H_k^{-1} f'(x_k), \Delta x_k)_k,$$

то вектор $H_k^{-1} f'(x_k)$ можна розглядати як градієнт функції $f(x)$ в точці x_k у просторі зі скалярним добутком $(., .)_k$. Отже, метод (6.43) є узагальненням градієнтного методу на випадок простору зі змінною метрикою.

Квазіньютонівські методи є ефективними для розв'язування задач безумовної мінімізації. Вони мають надлінійну збіжність, не потребують обчислення другої похідної та оберненої матриці, або розв'язування системи лінійних рівнянь. Однак

квазіньютонівським методам потрібна велика оперативна пам'ять для зберігання і побудови матриць H_k . Такого недоліку не мають методи спряжених напрямів.

6.8. Метод спряжених напрямів

Побудова методу спряжених напрямів зумовлена ідеєю відшукати розв'язок задачі мінімізації квадратичної функції за скінченну кількість ітерацій. У методах спряжених напрямів треба знайти такі напрями h_0, h_1, \dots, h_{n-1} , що послідовність не більше n одновимірних мінімізацій уздовж цих напрямів приводить до відшукання мінімуму квадратичної функції

$$f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x) \rightarrow \min, \quad x \in R^n. \quad (6.50)$$

Тобто, $f(x_n) = \min_{x \in R^n} f(x)$ при будь-якому $x_0 \in R^n$,

$$\text{де } x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k \quad (6.51)$$

$$f(x_k + \alpha_k h_k) = \min_{\alpha \in R} f(x_k + \alpha h_k) \quad k = 0, 1, \dots$$

Такі властивості має система взаємно спряжених щодо матриці A напрямів.

Означення 6.5. Нехай A – симетрична, додатно визначена матриця розмірності $n \times n$. Вектори $h' \neq 0$ і $h'' \neq 0$ називаються спряженими щодо матриці A , якщо вони задовольняють умову $(Ah', h'') = 0$. Вектори h_0, h_1, \dots, h_{k-1} називаються взаємно

спряженими (щодо матриці A), якщо всі вони не дорівнюють нулю і $(Ah_i, h_j) = 0, i \neq j, 0 \leq i, j \leq k$.

Лема 6.4. Нехай вектори h_0, h_1, \dots, h_{k-1} взаємно спряжені щодо A , тоді вони лінійно незалежні.

➤ Припустимо, що лема неправильна, тобто при деякому i $h_i = \sum_{j \neq i} \lambda_j h_j$. Тоді $(Ah_i, h_i) = \sum_{j \neq i} \lambda_j (Ah_j, h_i) = 0$, що можливо тільки при $h_i = 0$, оскільки A додатно визначена. ◀

Розглянемо задачу (6.50) і застосуємо метод (6.51). Якщо вектори $h_i, i = 0, 1, \dots, n-1$ взаємно спряжені, то метод (6.51) називають методом спряжених напрямів.

Теорема 6.4. Якщо вектори h_k в методі (6.51) взаємно спряжені $k = \overline{0, m-1}$, то для функції $f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x)$

$$f(x_m) = \min_{x \in X_m} f(x), \quad x_m \in X_m,$$

де $X_m = x_0 + \text{lin}\{h_0, \dots, h_{m-1}\}$. $\text{lin}\{\dots\}$ – лінійний підпростір, натягнутий на зазначені вектори.

➤ Враховуючи (6.51) і (6.50) і умову $x_k = x_0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i h_i$, отримаємо

$$\begin{aligned}
 f(x_k + \lambda_k h_k) &= \frac{1}{2} (A(x_k + \lambda_k h_k), x_k + \lambda_k h_k) + (b, x_k + \lambda_k h_k) = f(x_k) + \\
 &+ \lambda_k (Ax_k + b, h_k) + \frac{1}{2} \lambda_k^2 (Ah_k, h_k) = f(x_k) + \lambda_k (Ax_0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i Ah_i + b, h_k) + \\
 &+ \frac{1}{2} \lambda_k^2 (Ah_k, h_k) = f(x_k) + \lambda_k (Ax_0 + b, h_k) + \frac{1}{2} \lambda_k^2 (Ah_k, h_k).
 \end{aligned}$$

Звідси:

$$\lambda_k (Ax_0 + b, h_k) + \frac{1}{2} \lambda_k^2 (Ah_k, h_k) = f(x_k + \lambda_k h_k) - f(x_k).$$

Тепер можна записати:

$$\begin{aligned}
 f\left(x_0 + \sum_{k=0}^{m-1} \lambda_k h_k\right) &= \frac{1}{2} \left(A\left(x_0 + \sum_{k=0}^{m-1} \lambda_k h_k\right), x_0 + \sum_{k=0}^{m-1} \lambda_k h_k \right) + \left(b, x_0 + \sum_{k=0}^{m-1} \lambda_k h_k \right) = \\
 &= f(x_0) + \sum_{k=0}^{m-1} \left(\lambda_k (Ax_0 + b, h_k) + \frac{1}{2} \lambda_k^2 (Ah_k, h_k) \right) = \\
 &= f(x_0) + \sum_{k=0}^{m-1} [f(x_k + \lambda_k h_k) - f(x_k)].
 \end{aligned}$$

Отже,

$$\begin{aligned}
 \min_{\lambda_i} f(x) &= \min_{\lambda_i} f\left(x_0 + \sum_{k=0}^{m-1} \lambda_k h_k\right) = f(x_0) + \sum_{k=0}^{m-1} \min_{\lambda_k \in R} [f(x_k + \lambda_k h_k) - f(x_k)] = \\
 &= f(x_0) + \sum_{k=0}^{m-1} [f(x_k + \alpha_k h_k) - f(x_k)] = f\left(x_0 + \sum_{k=0}^{m-1} \alpha_k h_k\right) = f(x_m).
 \end{aligned}$$

Наслідок 6.1. Якщо вектори h_k , $k = \overline{0, n-1}$, в методі (6.51) взаємно спряжені то для функції $f(x)$, заданої формулою (6.50) і довільної

точки $x_0 \in R^n$, $f(x_n) = \min_{x \in R^n} f(x)$.

Отже, метод (6.51) дає змогу відшукати точку мінімуму квадратичної функції (6.50) не більше, ніж через n кроків. Твердження безпосередньо випливає з теореми, оскільки $x_n \in R^n$, вектори h_i , $i = \overline{0, n-1}$ лінійно незалежні. Для побудови конкретних алгоритмів мінімізації треба задати способи побудови взаємно спряжених напрямів.

Метод спряжених градієнтів. Спочатку опишемо алгоритм спряжених градієнтів. Розглянемо, як і раніше, квадратичну задачу (6.50), де A – симетрична, додатно визначена матриця, $b \in R^n$. Ми маємо $f'(x) = Ax + b$, $f''(x) = A$, отже, $f(x)$ сильно опукла і досягає мінімального значення на R^n в точці $x_* = -A^{-1}b$. Візьмемо довільну точку x_0 і виберемо напрям $h_0 = -f'(x_0)$. Якщо $f'(x_0) = 0$, то задача розв'язана, x_0 є розв'язок, інакше x_1 обчислюємо за формулою

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 h_0, \quad \alpha_0 \geq 0 \tag{6.52}$$

$$\text{i } f_0(\alpha_0) = \min_{\alpha} f_0(\alpha), \text{ де } f_0(\alpha) = f(x_0 + \alpha h_0).$$

Оскільки $f_0(\alpha)$ сильно опукла, α_0 існує і визначається однозначно, при цьому $\alpha_0 > 0$, $f'_0(0) = (f'(x_0), h_0) = -\|f'(x_0)\|^2 < 0$, то

$$0 = f'_0(\alpha_0) = (f'(x_0 + \alpha_0 h_0), h_0) = (f'(x_1), h_0) = -(f'(x_1), f'(x_0)).$$

Вважатимемо $f'(x_1) \neq 0$, інакше $x_1 = x_*$, і задача (6.50) розв'язана. Оскільки $h_0 \neq 0$, то $Ah_0 \neq 0$ і множина $\Gamma_1 = \{x \in R^n : (Ah_0, x - x_1) = 0\}$ є гіперплошиною розмірності $n - 1$, яка проходить через точку x_1 . Шукана точка x_* належить Γ_1 . Справді,

$$(Ah_0, x_* - x_1) = (Ah_0, -A^{-1}b - x_1) = (h_0, -b - Ax_1) = -(h_0, f'(x_1)) = 0.$$

Надалі точку x_2 шукатимемо в множині Γ_1 . Виберемо напрям h_1 , який паралельний до Γ_1 у вигляді

$$h_1 = -f'(x_1) + \beta_1 h_0, \quad \beta_1 = \text{const.} \quad (6.53)$$

Умова паралельності дає змогу вибрати β_1 :

$$(Ah_0, h_1) = (Ah_0, -f'(x_1) + \beta_1 h_0) = 0,$$

тобто $\beta_1 = (Ah_0, f'(x_1)) / (Ah_0, h_0)$.

Оскільки $f'(x_1) \neq 0$, то $h_1 \neq 0$. Якщо б $h_1 = 0$, то $f'(x_1) = \beta_1 h_0$ і згідно з (6.53), суперечить умові $f'(x_1) \neq 0$. З умови $h_1 \neq 0$ випливає, що $Ah_1 \neq 0$. Приймемо $x_2 = x_1 + \alpha_1 h_1$, $\alpha_1 \geq 0$, де α_1 визначатиметься з умови $f_1(\alpha_1) = \min_{\alpha \geq 0} f_1(x_1 + \alpha h_1)$.

Використавши рівність (6.53), отримаємо:

$$f'_1(0) = (f'(x_1), h_1) = (f'(x_1), -f'(x_1) + \beta_1 h_0) = -\|f'(x_1)\|^2 < 0,$$

отже, $\alpha_1 > 0$ і

$$f'_1(\alpha_1) = 0 = (f'(x_1 + \alpha_1 h_1), h_1) = (f'(x_2), h_1).$$

Зазначимо, що

$$f'(x_1) - f'(x_2) = Ax_1 + b - Ax_2 - b = -\alpha_1 Ah_1,$$

і з урахуванням (6.53)

$$(f'(x_2), f'(x_0)) = (f'(x_2), h_0) = (f'(x_1) + \alpha_1 Ah_1, h_0) = 0.$$

Звідси випливає:

$$(f'(x_2), f'(x_1)) = (f'(x_2), -h_1 + \beta_1 h_0) = 0.$$

Отже, перші дві ітерації методу спряжених градієнтів для задачі (6.50) описані й виконуються умови:

$$\begin{aligned} (f'(x_1), h_0) &= (f'(x_1), f'(x_0)) = (Ah_0, h_1) = (f'(x_2), h_1) = \\ &= (f'(x_2), h_0) = (f'(x_2), f'(x_1)) = (f'(x_2), f'(x_0)) = 0. \end{aligned} \tag{6.54}$$

Окрім того, нагадаємо, що Ah_0, Ah_1 лінійно незалежні.

Зробимо індуктивне припущення. Нехай при деякому $k \geq 2$ уже знайдені точки x_0, x_1, \dots, x_k , $x_{i+1} = x_i + \alpha_i h_i$ ($i = 0, 1, \dots, k-1$), де $h_i = -f'(x_i) + \beta_i h_{i-1} \neq 0$, $\beta_i = (f'(x_i), Ah_{i-1}) / (Ah_{i-1}, h_{i-1})$, а величини $\alpha_i > 0$ визначені з умови

$$f_i(\alpha_i) = \min_{\alpha > 0} f_i(\alpha), \quad f_i(\alpha) = f(x_i + \alpha h_i), \quad i = \overline{0, k-1},$$

виконуються також умови

$$(Ah_i, h_j) = 0, \quad i \neq j, \quad 0 \leq i, \quad j \leq k-1, \quad (6.55)$$

$$(f'(x_i), h_j) = 0, \quad 0 \leq j < i \leq k, \quad (6.56)$$

$$(f'(x_i), f'(x_j)) = 0, \quad i \neq j, \quad 0 \leq i, \quad j \leq k. \quad (6.57)$$

Окрім того, нехай $f'(x_i) \neq 0, \quad i = 0, 1, \dots, k$, і система векторів (Ah_0, \dots, Ah_{k-1}) лінійно незалежна (у випадку $f'(x_i) = 0$ покладаємо $x_i = x_*$ - задача розв'язана). Тоді множина

$$\Gamma_k = \{x \in R^n : (Ah_i, x - x_{i+1}) = 0, \quad i = 0, 1, \dots, k-1\}$$

є гіперплощиною – афінною множиною розмірності $n-k$. Легко показати, що x_k і x_* належать Γ_k . Справді, використавши (6.56), отримаємо:

$$(Ah_i, x_k - x_{i+1}) = (h_i, Ax_k - Ax_{i+1}) = (h_i, f'(x_k) - f'(x_{i+1})) = 0,$$

для всіх $i = 0, 1, \dots, k-1$, тобто $x_k \in \Gamma_k$. Аналогічно покажемо, що $x_* \in \Gamma_k$

$$\begin{aligned} (Ah_i, x_* - x_{i+1}) &= (Ah_i, -A^{-1}b - x_{i+1}) = (h_i, -b - Ax_{i+1}) = \\ &= -(h_i, f'(x_{i+1})) = 0, \quad \forall i < k. \end{aligned}$$

Продовжимо пошук x_* у множині Γ_k . Спершу знайдемо напрям h_k , паралельний до Γ_k . З цією метою виберемо:

$$h_k = -f'(x_k) + \beta_k h_{k-1}. \quad (6.58)$$

У нашому випадку виконується рівність

$$f'(x_i) - f'(x_{i+1}) = Ax_i - Ax_{i+1} = -\alpha_i Ah_i \quad i = 0, 1, \dots, k-1. \quad (6.59)$$

З (6.55), (6.58) і (6.59) отримаємо:

$$\begin{aligned} (Ah_i, h_k) &= (Ah_i, -f'(x_k) + \beta_k h_{k-1}) = (Ah_i, -f'(x_k)) + \beta_k (Ah_i, h_{k-1}) = \\ &= -(f'(x_i) - f'(x_{i+1}), -f'(x_k)) \alpha_i^{-1} = 0 \end{aligned}$$

для всіх $i = 0, 1, \dots, k-2$ при довільному β_k . Отож залишається β_k обирати так, щоб виконувалась умова $(Ah_{k-1}, h_k) = 0$. Для визначення β_k маємо

$$(Ah_{k-1}, -f'(x_k) + \beta_k h_{k-1}) = (Ah_{k-1}, -f'(x_k)) + \beta_k (Ah_{k-1}, h_{k-1}) = 0,$$

Отже,

$$\beta_k = \frac{(Ah_{k-1}, f'(x_k))}{(Ah_{k-1}, h_{k-1})}. \quad (6.60)$$

Зазначимо, що $h_k \neq 0$, оскільки в протилежному випадку $f'(x_k) = \beta_k h_{k-1}$ і тоді $\|f'(x_k)\|^2 = \beta_k (f'(x_k), h_{k-1}) = 0$, що суперечить припущення. Отже, тепер маємо

$$(Ah_i, h_j) = 0, \quad i \neq j, \quad 0 \leq i, \quad j \leq k.$$

Тоді $x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k$ $\alpha_k > 0$ і α_k визначається з умови

$$f_k(\alpha_k) = \min_{\alpha \geq 0} f_k(\alpha), \quad f_k(\alpha) = f(x_k + \alpha h_k).$$

Як і раніше, легко показати, що $\alpha_k > 0$ і $(f'(x_{k+1}), h_k) = 0$. У цьому випадку

$$\begin{aligned} 0 &= (Ax_{k+1} + b, h_k) = (Ax_k + \alpha_k Ah_k + b, h_k) = \\ &= (f'(x_k), h_k) + \alpha_k (Ah_k, h_k). \end{aligned}$$

Оскільки $h_k \neq 0$, то $(Ah_k, h_k) \neq 0$ і

$$\alpha_k = -\frac{(f'(x_k), h_k)}{(Ah_k, h_k)} = \frac{(f'(x_k), f'(x_k) - \beta_k h_{k-1})}{(Ah_k, h_k)} = \frac{\|f'(x_k)\|^2}{(Ah_k, h_k)}.$$

Далі маємо

$$(f'(x_{k+1}), h_i) = (f'(x_k) + \alpha_k Ah_k, h_i) = 0, \quad i = 0, 1, \dots, k-1.$$

Зібравши всі нерівності, можемо записати:

$$(f'(x_i), h_j) = 0, \quad 0 \leq j < i \leq k+1 \tag{6.61}$$

Враховуючи (6.61) і припущення індукції, маємо

$$(f'(x_{k+1}), f'(x_i)) = (f'(x_{k+1}), -h_i + \beta_i h_{i-1}) = 0, \quad i = \overline{1, k},$$

$$(f'(x_{k+1}), f'(x_0)) = (f'(x_{k+1}), h_0) = 0.$$

Отже, виконується умова

$$(f'(x_i), f'(x_j)) = 0, \quad i \neq j, \quad 0 \leq i, j \leq k+1.$$

Усі етапи індукції ми перевірили і побудували $k+1$ наближення x_{k+1} . Якщо $f'(x_{k+1})=0$, то $x_{k+1}=x_*$, а у випадку $f'(x_{k+1})\neq 0$ процес можна продовжити. Використовуючи результати попередньої теореми, бачимо, що розв'язок задачі, за умови точних обчислень, можна отримати за скінченну, не більше n , кількість кроків. Знайдеться такий номер $k \leq n$, що $f'(x_k)=0$. Тоді $x_k=x_*$ – розв'язок задачі. Отже, метод спряжених градієнтів для розв'язування задачі

$$f(x) = \frac{1}{2} (Ax, x) + (b, x) \rightarrow \min_{R^n}$$

можна записати у вигляді

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k, \quad f(x_k + \alpha_k h_k) = \min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha h_k),$$

$$h_k = -f'(x_k) + \beta_k h_{k-1}, \quad h_0 = -f'(x_0),$$

$$\beta_k = \frac{(f'(x_k), Ah_{k-1})}{(Ah_{k-1}, h_{k-1})}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \tag{6.62}$$

Приклад 6.7 Розв'язати задачу

$$(x^1 - 2)^2 + 2(x^2 - 1)^2 \rightarrow \min$$

методом спряжених градієнтів.

Як і у прикладі 6.6 виберемо початкове наближення

$$x_0 = (0, 0)^T, \quad h_0 = -f'(x_0).$$

Ітерація 1 Обчислення проводимо аналогічно, як у прикладі 6.6, тоді

$$x_1 = x_0 - \alpha_0 f'(x_0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \alpha_0 \begin{pmatrix} -4 \\ -4 \end{pmatrix} = -\frac{1}{3} \begin{pmatrix} -4 \\ -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cancel{\frac{4}{3}} \\ \cancel{\frac{4}{3}} \end{pmatrix}$$

Ітерація 2 У даному випадку $f'(x_1) = \begin{pmatrix} -\cancel{\frac{4}{3}} \\ \cancel{\frac{4}{3}} \end{pmatrix}$, тоді

$$h_1 = -f'(x_1) + \beta h_0 = \begin{pmatrix} \cancel{\frac{4}{3}} + 4\beta \\ -\cancel{\frac{4}{3}} + 4\beta \end{pmatrix} \quad i$$

$$\beta_1 = \frac{\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\cancel{\frac{4}{3}} \\ \cancel{\frac{4}{3}} \end{pmatrix} \right)}{\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix} \right)} = \frac{1}{9}.$$

$$\text{Тоді } h_1 = \begin{pmatrix} \cancel{\frac{4}{3}} + 4\beta_1 \\ -\cancel{\frac{4}{3}} + 4\beta_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 16 \\ -9 \end{pmatrix}, \quad x_2 = \begin{pmatrix} \cancel{\frac{4}{3}} + \frac{16}{9}\alpha \\ \cancel{\frac{4}{3}} - \frac{8}{9}\alpha \end{pmatrix}.$$

Для визначення α розв'яжемо таку задачу

$$f_\alpha(x_2) = (-\cancel{\frac{2}{3}} + \frac{16}{9}\alpha)^2 + (\cancel{\frac{1}{3}} - \frac{8}{9}\alpha)^2 \rightarrow \min$$

З рівняння $f'_\alpha(x_2) = 0$ отримаємо $\alpha = \frac{3}{8}$. Отож

$$x_2 = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} + \frac{16}{9} \cdot \frac{3}{8} \\ \frac{4}{3} - \frac{8}{9} \cdot \frac{3}{8} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}. \text{ Задачу розв'язано}$$

Чи можна застосувати метод спряжених градієнтів для розв'язування задач вигляду

$$f(x) \rightarrow \inf, \quad x \in R^n,$$

де $f(x) \in C^1(R^n)$ і $f(x)$ не є квадратичною функцією? Для цього передусім треба перетворити формулу (6.62), а саме: замість (6.62) можна використовувати такі формули:

$$\beta_k = -\frac{(f'(x_k), f'(x_k) - f'(x_{k-1}))}{\|f'(x_{k-1})\|^2}, \quad (6.63)$$

$$\beta_k = -\frac{\|f'(x_k)\|^2}{\|f'(x_{k-1})\|^2}, \quad (6.64)$$

$$\beta_k = \frac{(f''(x_k)h_{k-1}, f'(x_k))}{(f''(x_k)h_{k-1}, h_{k-1})}. \quad (6.65)$$

Для квадратичної функції усі три формули (6.63)–(6.65) дають те саме значення β_k . Якщо ж $f(x)$ не квадратична функція, то ці формули даватимуть загалом різні значення β_k , а методи (6.51), (6.58), (6.63)–(6.65) у цьому випадку перестануть бути скінченими. Отримані вектори h_0, h_1, \dots, h_{k-1} не є взаємно спряжені,

крім того параметр α_k доводиться визначати методом одновимірної мінімізації або одним із варіантів мінімізації функцій однієї змінної, які розглянуті вище. Якщо зважити, що обчислення виконуємо наближено, то навіть у випадку квадратичних функцій вектори h_0, h_1, \dots, h_{k-1} не є взаємно спряженими, отож для загальної функції $f(x)$ в методі спряжених градієнтів вводять процедуру “оновлення” процесу. Окремі з коефіцієнтів β_k приймають такими, що дорівнюють нулю. У цьому випадку $h_k = -f'(x_k)$, наприклад, для $k = n, 2n, 3n, \dots$. Така модифікація дає змогу зменшити вплив похибок розв'язування одновимірних задач мінімізації. В цьому варіанті метод спряжених градієнтів набуває вигляду:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k, \quad f(x_k + \alpha_k h_k) = \min_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha h_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

$$h_0 = -f'(x_0), \quad h_k = -f'(x_k) + \beta_k h_{k-1},$$

$$\beta_k = \begin{cases} -\frac{(f'(x_k), f'(x_k) - f'(x_{k-1}))}{\|f'(x_{k-1})\|^2}, & k \notin \{n, 2n, 3n, \dots\}, \\ 0 & k \in \{n, 2n, 3n, \dots\}. \end{cases} \quad (6.66)$$

Можна показати, що у випадку застосування методу (6.66) для мінімізації обмеженої знизу функції, градієнт якої задовольняє умову Ліпшица, для довільної точки $x_0 \in R^n$ маємо $\|f'(x_k)\| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$.

Для сильно опуклої гладкої функції, яка задовольняє деякі

додаткові обмеження, послідовність $\{x_k\}$ визначена за (6.66) збігається до точки мінімуму x_* із надлінійною швидкістю, причому виконуються оцінки

$$\|x_{k+pn} - x_*\| \leq C \|x_k - x_*\|^{2^p}, \text{ де } C < \infty.$$

Зазначимо, що з практичного погляду методи спряжених напрямів доволі ефективні. Сьогодні таких методів та їхніх варіантів чимало. Однак не можна вважати, що методи спряжених напрямів дають змогу вирішувати проблему мінімізації функції багатьох змінних.

Ще раз зазначимо, що перш ніж вибрати метод розв'язування задачі мінімізації, необхідно врахувати характеристичні дані функції, наявність технічних можливостей і вимоги до кінцевого результату.

Примітка. Розглядаючи визначення ефективності квазіньютонівських методів і методів спряжених напрямів, ми зазначали, про що йдеться і в літературі, що вони дають розв'язок квадратичної задачі через скінченну кількість кроків. Класичний метод Ньютона дає цей самий розв'язок за одну ітерацію, хоча більш трудомістку, ніж окремі ітерації перелічених методів. Загальна кількість обчислень при мінімізації квадратичної функції загалом, у класичному методі буде меншою, ніж у згаданих варіантах. Тому факт скінченної кількості кроків не повинен відігравати головної ролі при визначенні ефективності окремих

модифікацій методу Ньютона. Як свідчить практика, ефективність квазіニュтонівських методів і методів спряжених напрямів є доволі високою. Ці методи на практиці використовують частіше, ніж класичний метод Ньютона. На нашу думку, переваги цих методів треба шукати в іншому, тоншому дослідженні.

6.9. Методи нульового порядку

На практиці виникають ситуації, коли застосувати методи, які використовують похідні, неможливо або недоцільно. Наприклад: значення функції мети обчислюють зі значними похибками, інформація про її властивості недостатня, немає потреби в забезпеченні високої точності розв'язку задачі тощо. Такі задачі доцільно розв'язувати за методами нульового порядку, які здебільшого евристичні. Ці методи прості в реалізації. Крім того, у деяких випадках вони дають змогу отримати задовільний розв'язок задачі (у випадку неопуклих функцій йдеться про локальний розв'язок).

6.9.1. Метод циклічного покоординатного спуску. В цьому методі за напрям пошуку використовують координатні орти e_1, e_2, \dots, e_n , де e_j - вектор розмірності n , усі компоненти якого, за винятком j , дорівнюють нулю, j - та компонента дорівнює 1. Під час шукання мінімуму в напрямі e_j змінюється тільки змінна x_j , решта змінних є сталою.

Метод циклічного покоординатного спуску складається з послідовності циклів і реалізується так. На k -му циклі задана точка x_k і система напрямів e_i , $i = \overline{1, n}$ – орт. На початку циклу приймаємо біжуче значення точки $t_1 = x_k$ і виконуємо почергово мінімізацію функції $f(x)$ у напрямах e_1, e_2, \dots, e_n . Мінімізація $f(x)$ у напрямі e_i полягає в обчисленні значення $f(t_i + \lambda_i e_i) = \min_{\lambda} f(t_i + \lambda e_i)$ і визначенні $t_{i+1} = t_i + \lambda_i e_i$.

Якщо $i < n$, то замінюємо i на $i + 1$ і продовжуємо обчислення; при $i = n$ приймаємо $x_{k+1} = t_{n+1}$ і, якщо виконується умова $\|x_{k+1} - x_k\| < \varepsilon$, припиняємо обчислення, а x_{k+1} приймаємо за розв'язок задачі, або ж виконуємо новий $k + 1$ -й цикл.

Якщо функція $f(x)$:

- 1) диференційовна;
- 2) мінімум $f(x)$ уздовж будь-якого напряму e_i єдиний;
- 3) значення x_k з послідовності $\{x_k\}$, яку генерує процес, містяться в компактній множині простору R^n , то $\{x_k\}$ збігається до розв'язку задачі.

Приклад 6.8 Знайти розв'язок задачі

$$(2x^1 - x^2)^2 + 3(x^2 - 2)^2 \rightarrow \min$$

методом покоординатного спуску з точністю $\|x_k - x_{k-1}\| < 10^{-2}$.

Ортогональними напрямами слугуватимуть координатні орти $d_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $d_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Виберемо початкову точку $x_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ тоді $t_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $f(x_0) = 12$. Проведемо мінімізацію вздовж напряму d_1 .

$$f(t_1 + \alpha_1 d_1) = \min f(t_1 + \alpha d_1)$$

$$f(t_1 + \alpha_1 d_1) = f(\lambda, 0) = (2\alpha)^2 + 12 \geq 12 \Rightarrow \lambda = 0 ..$$

$$\text{Отже } t_2 = t_1 = (0, 0)^T. \quad \text{Тоді } t_3 = t_2 + \lambda_2 d_2 = (0, \lambda)^T,$$

$$f(t_3) = \min f(0, \lambda) = \min(\lambda^2 + 3(\lambda - 2)^2) = \min(4\lambda^2 - 12\lambda + 12)$$

$$\text{. Розв'язком задачі є } \lambda = 1,5. \text{ Отже } t_3 = (0; 1,5)^T = x_1, \quad f(x_1) = 3,0.$$

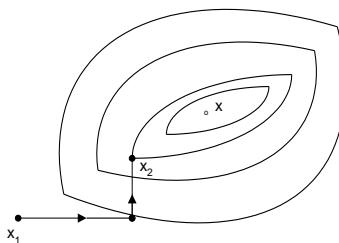
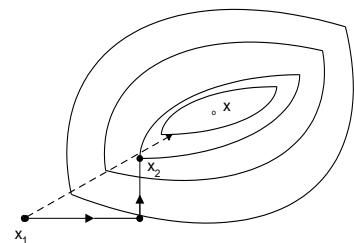
Наступні результати обчислень подано у таблиці 6.7.

Таблиця 6.7

	$x_k, f(x_k)$	i	d_i	t_i	λ_i	t_{i+1}
0,0	0,0	1	(1,0)	(0,0; 0,0)	0,0	(0,0; 0,0)
12		2	(0,1)	(0,0; 0,0)	1,5	(0,0; 1,5)
0,0	1,5	1	(1,0)	(0,0; 1,5)	0,75	(0,75; 1,50)
3		2	(0,1)	(0,75; 1,5)	$\frac{3}{8}$	(0,75; 1.875)
0,75; 1,875		1	(1,0)	(0,75; 1.875)	$\frac{3}{16}$	(0,9375; 1,875)
0,390625		2	(0,1)	(0,9375; 1,875)	$\frac{3}{32}$	(0,9375; 1,9688)

	0,9375 1,9688	1	(1,0)	(0,9375; 1,9688)	$\frac{3}{64}$	(0,9894; 1,9688)
	0,01162	2	(0,1)	(0,9844; 1,96575)	$\frac{3}{128}$	(0,98438; 1,9922)
	0,9894; 1,9922	1	(1,0)	(0,9844; 1,9922)	$\frac{3}{256}$	(0,9961; 1,9922)
	0,00036	2	(0,1)	(0,9961; 1,9922)	$\frac{3}{512}$	(0,9961; 1,9981)

У випадку, коли $f(x)$ недиференційовна, то гранична точка послідовності $\{x_k\}$ може і не бути розв'язком задачі. Як проілюстровано на рис. 6.5, пошук вздовж довільної осі не приводить до покращення функції мети й обчислювальний процес припиняється. Таких труднощів здебільшого можна уникнути, використовуючи процес мінімуму вздовж напряму $x_2 - x_1$, що видно з рис. 6.6. Пошук уздовж напряму $x_{k+1} - x_k$ часто використовують у процедурах циклічного покоординатного спуску, навіть якщо функція мети диференційовна. Така модифікація методу циклічного покоординатного спуску часто прискорює збіжність, передусім, якщо послідовність точок утворює зигзагоподібну траєкторію вздовж дна яру. Такий крок, звичайно, називають прискорювальним.

Рис. 6.5. Зупинка в точці x_2 Рис. 6.6. Пошук продовжується вздовж напряму $x_2 - x_1$

6.9.2. Метод Хука і Джівса. Хук і Джівс запропонували метод, який не містить одновимірної мінімізації. Ми спершу розглянемо неперервний варіант методу, коли використано мінімізацію вздовж координатних напрямів e_1, e_2, \dots, e_n і допоміжного напряму. Нехай задано початкову точку x_1 і напрями e_1, e_2, \dots, e_n . Виконаємо повний цикл методу циклічного покоординатного спуску, починаючи з точки $y_1 = x_1$, у результаті отримаємо точку x_2 . Якщо $\|x_2 - x_1\| < \varepsilon$, ε - точність розв'язку), то припиняємо обчислення і x_2 приймаємо за розв'язок, або ж визначаємо новий напрям спуску $d = x_2 - x_1$.

Знаходимо $\bar{\lambda} = \arg \min_{\lambda} f(x_2 + \lambda d)$ і приймаємо $y_2 = x_2 + \bar{\lambda}d$.

Наступний крок починаємо з точки y_2 . Виконуємо повний цикл за методом циклічного покоординатного спуску, отримуємо точку x_3 , перевіряємо умову зупинки. Якщо ця умова не виконується, то

обчислюємо $\bar{\lambda} = \arg \min_{\lambda} f(x_3 + \lambda d)$, ($d = x_3 - x_2$) і приймаємо

$y_3 = x_3 + \bar{\lambda}d$. Потім процес повторюємо.

Якщо функція $f(x)$ диференційовна, мінімум $f(x)$ уздовж довільного напряму єдиний і $\Lambda = \{x : f(x) \leq f(x_1)\}$ – компакт, то послідовність $\{x_k\}$, отримана за розглянутим методом, збігається.

Початково в методі Хука і Джівса не використовувалася одновимірна мінімізація. Одномірний пошук замінювалася проста схема, яка охоплювала обчислення функцій. Алгоритм був таким.

На початковому етапі задаємо $\lambda > 0$ – прискорювальний множник, $x_1 = y_1^1$ – початкове наближення, початковий крок $\Delta > \varepsilon$, покладаємо $k = j = 1$.

Приклад 6.9. Знайти розв'язок задачі

$$(2x^1 - x^2)^2 + 3(x^2 - 2)^2 \rightarrow \min$$

методом Хука-Джівса з точністю $\|x_k - x_{k-1}\| < 10^{-2}$.

Як і вище виберемо $x_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $d_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $d_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Виконавши повний цикл за методом покоординатного спуску

отримаємо $x_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1,5 \end{pmatrix}$. Оскільки $\|x_2 - x_1\| \geq 10^{-2}$ то визначаємо

напрям

$$d = x_2 - x_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1,5 \end{pmatrix} \quad i \quad \text{точку}$$

$$y_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1,5 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0 \\ 1,5 \end{pmatrix} = (1 + \lambda) \begin{pmatrix} 0 \\ 1,5 \end{pmatrix}$$

де $\lambda = \arg \min_{\lambda} f(y_2)$. Провівши відповідні математичні викладки

отримаємо $\lambda = 0$. Отже, $y_2 = x_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1,5 \end{pmatrix}$.

Тепер проводимо знову повний цикл методу покоординатного спуску. Ми отримаємо $x_3 = \begin{pmatrix} 0,750 \\ 1,875 \end{pmatrix}$ і

переходимо до обчислення y_3 . У даному випадку

$d = x_3 - x_2 = \begin{pmatrix} 0,75 \\ 0,375 \end{pmatrix}$ і, відповідно, $y_3 = \begin{pmatrix} 0,75(1 + \lambda) \\ 1,875 + \lambda 0,375 \end{pmatrix}$. Із

умови $\lambda = \arg \min_{\lambda} f(y_3)$ отримаємо $\lambda = \frac{1}{3}$. Відповідно

$$y_3 = \begin{pmatrix} 0,75(1 + \frac{1}{3}) \\ 1,875 + \frac{1}{3} 0,375 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1,0 \\ 2,0 \end{pmatrix}, \text{ що є розв'язком задачі.}$$

Початково в методі Хука і Джівса не використовували одновимірну мінімізацію. Одномірний пошук замінювалася проста схема, яка охоплювала обчислення функцій. Алгоритм був таким.

На початковому етапі задаємо $\lambda > 0$ – прискорювальний множник, $x_1 = y_1^1$ – початкове наближення, початковий крок $\Delta > \varepsilon$, покладаємо $k = j = 1$.

Основний цикл.

Нехай обчислено x_k , y_k^j , $1 \leq j < n$. Якщо виконується умова $f(y_k^j + \Delta e_j) < f(y_k^j)$, то крок вдалий, і приймаємо $y_k^{j+1} = y_k^j + \Delta e_j$. В іншому випадку, за умови, що $f(y_k^j + \Delta e_j) \geq f(y_k^j)$, крок невдалий і розглядаємо протилежний напрям. Якщо ж виконується умова $f(y_k^j - \Delta e_j) < f(y_k^j)$, то спроба вдала і приймаємо $y_k^{j+1} = y_k^j - \Delta e_j$. Або ж приймаємо $y_k^{j+1} = y_k^j$. Як тільки отримали y_k^{j+1} ($j < n$), приймаємо $j = j + 1$ і обчислення y_k^j повторюємо. Як тільки $j = n$ та $f(y_k^{n+1}) < f(x_k)$ приймаємо $x_{k+1} = y_k^{n+1}$, $y_{k+1}^1 = x_{k+1} + \lambda(x_{k+1} - x_k)$, $j = 1$, замінююємо k на $k + 1$, і повторюємо основний цикл. Якщо виконується умова $f(y_k^{n+1}) = f(x_k)$, і $\Delta \leq \varepsilon$, то обчислення припиняємо і x_k буде розв'язком задачі. Якщо ж $f(y_k^{n+1}) = f(x_k)$, а $\Delta > \varepsilon$, то замінююємо Δ на $\Delta/2$, k на $k + 1$, приймаємо $y_{k+1}^1 = x_{k+1} = x_k$, і переходимо на початок основного циклу. Метод можна модифікувати так, що у

різних напрямах будуть використовуватимуть різні кроки Δ_i . Таку модифікацію можна використовувати з метою масштабування.

6.9.3. Метод Розенброка. В початковому варіанті методу, як і в методі Хука і Джівса, не використовували одновимірну мінімізацію за напрямами. Наведемо неперервний варіант методу з застосуванням такої одновимірної мінімізації. В методі Розенброка на кожній ітерації (циклі) виконуємо ітераційний процес уздовж n лінійно незалежних і ортогональних напрямів. Якщо отримана нова точка в кінці циклу, а результату розв'язку задачі ще немає, то будуємо нову множину ортогональних векторів. Розглянемо процес побудови нових n лінійно незалежних ортогональних векторів $\bar{d}_1, \bar{d}_2, \dots, \bar{d}_n$. Нехай вектори d_1, d_2, \dots, d_n ортонормовані, тобто $(d_i, d_j) = 0, i \neq j, (d_i, d_i) = 1$. Нехай, виконуючи мінімізацію вздовж напрямів d_1, \dots, d_n , ми з точки x_k перейшли в нову точку x_{k+1} , де $x_{k+1} = x_k + \sum_{j=1}^n \lambda_j d_j$, λ_j - довжина кроку в напрямі d_j ,

$$\lambda_j = \arg \min_{\lambda} f\left(x_k + \sum_{i=1}^{j-1} \lambda_i d_i + \lambda d_j\right), \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Новий набір напрямів $\bar{d}_1, \bar{d}_2, \dots, \bar{d}_n$ будуємо за допомогою процедури Грама-Шмідта [3], а саме:

$$a_i = \begin{cases} d_i & \text{якщо } \lambda_3 = 0, \\ \sum_{j=1}^n \lambda_j d_j & \text{якщо } \lambda_3 \neq 0, \end{cases}$$

$$b_i = \begin{cases} a_1 & \text{і}\delta\text{є } i=1 \\ a_i - \sum_{j=1}^{i-1} (a_j, \bar{d}_j) \bar{d}_j & \text{і}\delta\text{є } i\geq 2, \end{cases} \quad (6.67)$$

$$\bar{d}_i = b_i / \|b_i\|.$$

Лема 6.5. Нехай вектори d_1, d_2, \dots, d_n лінійно незалежні і взаємно ортогональні. Тоді напрями $\bar{d}_1, \bar{d}_2, \dots, \bar{d}_n$ визначені за (6.67) також лінійно незалежні і взаємно ортогональні для довільної множини $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Крім того, якщо $\lambda_i = 0$, то $d_i = \bar{d}_i$

Доведення леми наведено в [3].

Практично, використовуючи лему 6.5, достатньо обчислити лише ті \bar{d}_i , для яких $\lambda_i \neq 0$. Наведемо тепер алгоритм Розенброка, який використовує одновимірну мінімізацію за напрямами. На початковому кроці вибираємо $x_1 = y_1^1$, напрями d_1, \dots, d_n – координатні орти. Приймемо $k = 1$, $j = 1$ і переходимо до основного етапу.

Основний етап.

Нехай уже визначено x_k , y_k^j . Шукаємо

$\lambda_j = \arg \min_{\lambda} f(y_k^j + \lambda d_j)$ і обчислюємо $y_k^{j+1} = y_k^j + \lambda_j d_j$. Якщо

$j < n$, то замінюємо j на $j+1$ і повторюємо обчислення y_k^j . В іншому випадку, ($j = n$) приймаємо $x_{k+1} = y_k^{n+1}$ і, якщо

виконується умова $\|x_{k+1} - x_k\| < \varepsilon$ (ε - точність обчислень), припиняємо обчислення, x_{k+1} є розв'язком задачі.

Якщо умова зупинки алгоритму не виконується, то потрібно замінити k на $k + 1$, прийняти $j = 1$, $y_{k+1}^1 = x_{k+1}$, побудувати новий набір напрямів згідно з (6.67), які знову позначити через d_1, \dots, d_n і перейти до повторного ($k + 1$) виконання основного етапу. Можна показати, що послідовність $\{x_k\}$, отримана за методом Розенброка з використанням одновимірної мінімізації, збігається до стаціонарної точки, якщо:

- 1) мінімум функції $f(x)$ у довільному напрямі в R^n єдиний;
- 2) послідовність точок, яку генерує метод Розенброка, міститься в компактній множині простору R^n .

Розглянемо тепер алгоритм з дискретним кроком, який запропонував Розенброк. У цьому випадку вздовж напряму виконуються дискретні кроки, довжина яких змінюється залежно від значення функції в обчислених точках. На початковому етапі вибираємо $\varepsilon > 0$ для зупинки алгоритму, коефіцієнт розтягнення $\alpha > 1$ і коефіцієнт стискання $\beta \in (-1, 0)$, напрями d_1, \dots, d_n , які є координатними ортами, величини $\bar{\Delta}_1, \dots, \bar{\Delta}_n > 0$ – початкові довжини кроку вздовж кожного з напрямів, а також точку x_1 .

Приймаємо $y_1^1 = x_1$, $k = j = 1$, $\Delta_j = \bar{\Delta}_j$ для всіх $j = \overline{1, n}$ і переходимо до основного етапу.

Основний етап.

Крок 1. Припустимо, що x_k і y_k^j вже обчислено. Якщо $f(y_k^j + \Delta_j d_j) < f(y_k^j)$, то крок в j -му напрямі успішний. Приймемо $y_k^{j+1} = y_k^j + \Delta_j d_j$ і замінимо Δ_j на $\alpha \Delta_j$. У випадку, коли $f(y_k^j + \Delta_j d_j) \geq f(y_k^j)$, то крок невдалий, приймемо $y_k^{j+1} = y_k^j$ і Δ_j замінимо на $\beta \Delta_j$. Якщо $j < n$, то замінюємо j на $j+1$ і повторюємо крок 1. У випадку $j = n$ переходимо на крок 2.

Крок 2. Приймаємо знову $z_k^1 = y_k^{n+1}$, $j=1$ і повторюємо повністю крок 1 із заміною $z_k^j = y_k^j$. Якщо $f(z_k^{n+1}) < f(x_k)$, то принаймні один вдалий спуск був на першому або другому кроці.

Крок 3. Приймаємо $x_{k+1} = z_k^{n+1}$ і, якщо $\|x_{k+1} - x_k\| < \varepsilon$, та $|\Delta_i| < \varepsilon$, $i = \overline{1, n}$, то припиняємо обчислення, x_{k+1} – наближений розв’язок задачі. В іншому випадку обчислюємо $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, зі

співвідношення $x_{k+1} - x_k = \sum_{i=1}^n \lambda_i d_i$, будуємо нові напрями згідно з

(6.67), позначаємо їх через d_1, \dots, d_n , приймаємо $\Delta_j = \bar{\Delta}_j$ для всіх

j , $y_{k+1}^1 = x_{k+1}$, замінюємо k на $k+1$ і переходимо до кроку 1.

У випадку, коли $f(z_k^{n+1}) = f(x_k)$, тобто не було жодного вдалого спуску в напрямах і $|\Delta_j| < \varepsilon$ для всіх j , то x_k можна

вважати розв'язком задачі. Якщо ж ця умова не виконується, то приймаємо $y^1_{k+1} = z_k^{n+1}$ і переходимо до кроку 1. Отже, в цьому алгоритмі дискретні кроки вибираються вздовж n незалежних напрямів. Якщо спроба виявилася невдалою, то це зумовлює до зсуву в оберненому напрямі вздовж j -го вектора на наступній реалізації кроку 1. Зазначимо, що крок 1 повторюється доти, доки невдача буде під час спуску в кожному з напрямів пошуку й умова $|\Delta_i| \geq \varepsilon$ виконується хоча б для одного i .

Примітка. З наведеного бачимо, що кількість методів або їхніх модифікацій розв'язування задач безумовної мінімізації фактично необмежена. Під час розв'язування конкретної задачі важливу роль відіграє вміння вибрати метод, який буде найоптимальнішим для отримання бажаного результату. Для досягнення мети треба враховувати властивості мінімізаційної функції, можливості техніки, вимоги до кінцевого результату тощо.

؟ Запитання для самоперевірки

1. Дайте визначення алгоритму нульового, першого, другого порядку
2. Дайте визначення швидкості збіжності для алгоритму.
3. Що таке напрям спадання функції.
4. Правило визначення кроку методу.
5. Градієнтний метод.

6. Метод Ньютона.
7. Недоліки і переваги градієнтного методу і методу Ньютона
8. Евристичний метод типу яру.
9. Метод Ньютона з регульюванням кроку.
10. Квазіニュтонівська умова.
11. Ідея побудови квазіニュтонівських методів, метод Бройдена.
12. Дайте визначення спряжених векторів.
13. Ідея побудови спряжених напрямів.
14. Метод циклічного покоординатного спуску.
15. Метод Хука і Джівса.
16. Метод Розенброка.
17. Рекурсивний аналог методу Ньютона.
18. Метод Стеффенсена.

Завдання для самостійної роботи

Задачі нелінійного програмування та їхні розв'язки

Задача I.

$$f(x) = (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \rightarrow \min$$

$$x_* = (1 \quad 1), \quad f(x_*) = 0,$$

початкове наближення $x_0 = (-1 \quad 2)$.

Задача 2.

$$\begin{aligned} f(x) &= (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4 \rightarrow \min \\ x_* &= (0 \quad 0 \quad 0 \quad 0), \quad f(x_*) = 0, \end{aligned}$$

початкове наближення

$$I: x_0 = (3 \quad -1 \quad 0 \quad 1); \quad II: x_0 = (1 \quad 1 \quad 1 \quad 1).$$

Задача 3.

$$f(x) = (x_1 x_2)^2 (1 - x_1)^2 \left[1 - x_1 - x_2 (1 - x_1)^5 \right]^2 \rightarrow \min$$

$$x_* = \{(1, \text{дов. знач.}); (0, \text{дов. знач.}); (\text{дов. знач.}, 0)\}, \quad f(x_*) = 0$$

$$\text{початкове наближення } x_0 = (-1, 2 \quad 1).$$

Задача 4.

$$f(x) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2 \rightarrow \min$$

$$x_* = \{(3,58443 \quad -1,84813); (3 \quad 2)\}, \quad f(x_*) = 0$$

$$\text{початкове наближення } x_0 = (1 \quad 1).$$

Задача 5.

$$\begin{aligned} f(x) &= (x_1^2 + 12x_2 - 1)^2 + (49x_1^2 + 49x_2^2 + 84x_1 + 2324x_2 - 681)^2 \rightarrow \min \\ \text{локальний мінімум } x_* &= (0.28581 \quad 0.27936), \quad f(x_*) = 5.9225; \end{aligned}$$

$$x_* = (-21,026653 \quad -336,7660090), \quad f(x_*) = 0$$

$$\text{початкове наближення } x_0 = (1 \quad 1).$$

II. Знайти розв'язок задач 6-10 одним із квазіньютонівських методів:

Задача 6.

$$f(x) = 100 \left[x_3 - \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right)^2 \right]^2 + (1 - x_1)^2 + (1 - x_2)^2 \rightarrow \min$$

$$x_* = (1 \quad 1 \quad 1), \quad f(x_*) = 0$$

початкове наближення $x_0 = (-1,2 \quad 2 \quad 0)$.

Задача 7.

$$f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 + \frac{0.04}{g(x)} + \frac{h^2(x)}{0.2} \rightarrow \min,$$

$$\text{де } g(x) = -\frac{x_1^2}{4} - x_2^2 + 1, \quad h(x) = x_1 - 2x_2 + 1,$$

$$x_* = (1,7954 \quad 1,3779), \quad f(x_*) = 0,16904 \text{ – локальний мінімум}$$

початкове наближення $x_0 = (2 \quad 2)$.

Задача 8.

$$f(x) = 10^4 \sum_{i=1}^7 \frac{\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 a_i^2}{1 + x_4^2 a_i} - b_i}{b_i} \rightarrow \min,$$

де величини a_i, b_i задано в таблиці

i	a_i	b_i	i	a_i	b_i
1	0,0	7,391	5	0,00209	22,20
2	0,000428	11,18	6	0,00348	24,02
3	0,00100	16,44	7	0,00525	31,32
4	0,00161	16,20			

$$x_* = (2,714 \quad 140,4 \quad 1707 \quad 31,51), \quad f(x_*) = 318,572,$$

$$\text{початкове наближення } x_0 = (2,7 \quad 90 \quad 1500 \quad 10).$$

Задача 9.

$$f(x) = 100 \left\{ \left[x_3 - 10\theta(x_1, x_2) + \left[(x_1^2 + x_2^2)^{1/2} - 1 \right]^2 \right]^2 \right\} + x_3^2 \rightarrow \min$$

$$\theta(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{x_2}{x_1} + \frac{1}{4} (1 - \operatorname{sign} x_1)$$

$$x_* = (1 \quad 0 \quad 0), \quad f(x_*) = 0;$$

$$\text{початкове наближення } x_0 = (-1 \quad 0 \quad 0).$$

Задача 10.

$$f(x) = u_1^2 + u_2^2 + u_3^2,$$

де

$$u_i = c_i - x_1(1 - x_2^i), \quad c_1 = 1,5, \quad c_2 = 2,25, \quad c_3 = 2,625,$$

$$x_* = (3 \quad 0,5), \quad f(x_*) = 0.$$

$$\text{початкове наближення } x_0 = (2 \quad 0,2).$$

III. Знайти розв'язок задач 11-13 методом спряжених напрямів.

Задача 11.

$$f(x) = x_1 + 2x_2^2 + e^{x_1^2 + x_2^2} \rightarrow \min$$

$$x_* = (0 \quad 0), \quad f(x_*) = 1,$$

початкове наближення $x_0 = (1 \quad 0)$.

Задача 12.

$$f(x) = (x_1 - x_2 + x_3)^2 + (-x_1 + x_2 + x_3)^2 + (x_1 + x_2 - x_3)^2 \rightarrow \min$$

$$x_* = (0 \quad 0 \quad 0), \quad f(x_*) = 0,$$

початкове наближення $x_0 = (0,5 \quad 1 \quad 0,5)$.

Задача 13.

$$f(x) = 4x_1^2 + 4x_2^2 - 4x_1x_2 - 12x_2$$

$$x_* = (1 \quad 2), \quad f(x_*) = -12$$

початкове наближення $x_0 = (-2 \quad -1)$.

7. ЧИСЛОВІ МЕТОДИ УМОВНОЇ МІНІМІЗАЦІЇ

☰ План викладу матеріалу:

1. Метод проекції градієнта.
2. Метод умовного градієнта.
3. Методи розв'язування задач квадратичного програмування.
4. Метод лінеаризації.
5. Метод модифікованих функцій Лагранжа.
6. Метод штрафних функцій.

➡ Ключові терміни розділу:

✓Методи умовної мінімізації ✓Умова Слейтера.

✓Методи лінійної	✓Квадратична апроксимація
апроксимації функції мети	функції

✓Умовний антиградієнт	✓Модифіковані функції
функції	Лагранжа

✓Функція Лагранжа	✓Штрафні функції
-------------------	------------------

7.1. Метод проекції градієнта

Розглянемо задачу

$$f(x) \rightarrow \min, \quad x \in X,$$

(7.1)

де X – замкнута опукла множина в R^n , $f(x)$ – диференційовна функція на X . Метод проекції градієнта є модифікацією методу

градієнтів для безумовних задач мінімізації, розглянутого вище, на випадок задач умовної мінімізації. Як і раніше проекцію точки y на множину X позначимо через $P_X(y)$.

Лема 7.1. Нехай X – замкнута, опукла множина в R^n , тоді для будь-яких точок $a_1, a_2 \in R^n$ справджується нерівність

$$\|P_X(a_1) - P_X(a_2)\| \leq \|a_1 - a_2\| \quad (7.2)$$

тобто оператор проектування має властивість нерозтягнення відстані.

➤ З огляду властивості проекції точки, можемо записати:

$$(P_x(a_1) - a_1, P_x(a_2) - P_x(a_1)) \geq 0,$$

$$(P_x(a_2) - a_2, P_x(a_1) - P_x(a_2)) \geq 0,$$

Додавши ці нерівності, отримаємо

$$(P_x(a_1) - a_1 - P_x(a_2) + a_2, P_x(a_2) - P_x(a_1)) \geq 0,$$

а з огляду на нерівність Коші-Буняковського маємо

$$\|P_x(a_1) - P_x(a_2)\|^2 \leq \|P_x(a_2) - P_x(a_1)\| \|a_2 - a_1\|,$$

і звідси випливає оцінка (7.2). ◀

Лема 7.2. Нехай множина X – опукла і замкнута, функція f – опукла на X і диференційовна в точці $x_* \in X$. Точка x_* є розв'язком задачі (7.1) тоді і тільки тоді, якщо

$$x_* = P_X(x_* - \alpha f'(x_*)) \quad (7.3)$$

при довільному $\alpha > 0$.

➤ Згідно з властивостями проекції точки рівність (7.3) еквівалентна умові

$$(x_* - (x_* - \alpha f'(x_*)), x - x_*) \geq 0, \quad \forall x \in X,$$

тобто виконується умова

$$(f'(x_*), x - x_*) \geq 0, \quad x \in X,$$

а це необхідна і достатня умова мінімуму в точці x_* для опуклої функції. ◀

Метод проекції градієнта записують так:

$$x_{k+1} = P_X(x_k - \alpha_k f'(x_k)), \quad k = 0, 1, \dots \quad (7.4)$$

Коефіцієнт $\alpha_k \geq 0$ можна вибрати за тими самими правилами, що вже розглянуті у випадку методу градієнтів.

Теорема 7.1. Нехай множина X опукла і замкнута, функція $f(x)$ диференційовна на X і сильно опукла зі сталою $\theta > 0$, градієнт задовольняє умову Ліпшиця:

$$\|f'(x) - f'(y)\| \leq M \|x - y\|, \quad \forall x, y \in X. \quad (7.5)$$

Тоді послідовність $\{x_k\}$, отримана з (7.4), де x_0 - довільна точка з X , а $\alpha \equiv \alpha \in (0, 4\theta/M^2)$, збігається до розв'язку x_* задачі (7.1) зі швидкістю геометричної прогресії:

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leq q \|x_k - x_*\|,$$

де $q = \sqrt{1 - 4\theta\alpha + \alpha^2 M^2} \in (0, 1)$.

➤ Введемо відображення $A : X \rightarrow X$ вигляду

$$Ax = P_x(x - \alpha f'(x)).$$

Покажемо таке: якщо виконуються умови теореми, то відображення A є стискуючим. Використавши лему 7.1, умову (7.5) і властивість опуклих функцій, отримаємо

$$\begin{aligned} \|Ax - Ax'\|^2 &= \|P_x(x - \alpha f'(x)) - P_x(x' - \alpha f'(x'))\|^2 \leq \\ &\leq \|(x - x') - \alpha(f'(x) - f'(x'))\|^2 = \\ &= \|x - x'\|^2 + \alpha^2 \|f'(x) - f'(x')\|^2 - 2\alpha(f'(x) - \\ &\quad - f'(x'), x - x') \leq (1 + \alpha^2 M^2 - 4\theta\alpha) \times \|x - x'\|^2. \end{aligned}$$

Звідси безпосередньо випливає, що $1 - 4\theta\alpha + \alpha^2 M^2 > 0$ і

$$\|Ax - Ax'\| \leq q \|x - x'\|. \quad 7.6)$$

скільки $\alpha < 4\theta/M^2$, то $q \in (0, 1)$ і відображення A - стискуюче. У нашому випадку X є повною метричною множиною, тоді для процесу (7.4) у вигляді $x_{k+1} = Ax_k$ маємо $x_k \rightarrow x_*$ при

$k \rightarrow \infty$, де $x_* \in X$ нерухома точка відображення A , тобто $x_* = Ax_*$. Отже, за лемою 7.2 точка x_* є розв'язком задачі (7.1). Із нерівності (7.6) випливає оцінка

$$\|x_{k+1} - x_*\| = \|Ax_k - Ax_*\| \leq q\|x_k - x_*\| \leftarrow$$

З використанням запропонованого методу нам на кожній ітерації доводиться розв'язувати задачу вигляду

$$\varphi(x) = \|x - a\|^2 \rightarrow \min_X . \quad (7.7)$$

В окремих випадках її можна розв'язати досить легко (X - куля, координатний паралелепіпед, поліедр, невід'ємний ортант та ін.). Якщо X задається за допомогою складніших систем рівнянь і нерівностей, то метод проекції градієнтів неефективний, оскільки задача (7.7) практично не є простішою, ніж задача (7.1). Дуже часто використовують модифікації цього методу, коли проектування на X замінюють проектуванням на лінійні багатовиди (поліедри), які апроксимують X в околі чергової точки. Зазначимо, що в сформульованій теоремі використано константи M , θ , які, зазвичай, невідомі, що утруднює відшукання α . Тоді доцільно застосувати інші способи вибору довжини кроку. Якщо використовувати ідею процесу проектування, то інші методи безумовної оптимізації можна застосувати до розв'язування задач

умовної оптимізації, а саме – метод Ньютона, спряжених градієнтів та ін.

Примітка. Хоча розглянутий метод (проекції градієнта) на практиці використовують зрідка, однак його ідею доволі часто застосовують для побудови інших методів розв'язування задач умовної оптимізації, зокрема, досить ефективних.

7.2. Метод умовного градієнта

Іноді метод умовного градієнта називають *методом лінійної апроксимації (лінеаризації) функції мети*. Розглянемо задачу:

$$f(x) \rightarrow \min, \quad x \in X.$$

Метод умовного градієнта вкладається в загальну схему методів спуску, його будують за рекурентною формулою

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k, \quad k=0,1,\dots \quad (7.8)$$

де вектор h_k є водночас вектором спадання функції $f(x)$ і можливим напрямом стосовно X у точці $x_k \in X$, а число $\alpha_k > 0$ вибране з умови

$$f(x_{k+1}) < f(x_k), \quad x_{k+1} \in X.$$

Для вибору h_k на k -му кроці розв'язують задачу мінімізації на X лінійної апроксимації функції f у точці x_k , тобто:

$$f_k(x) = f(x_k) + (f'(x_k), x - x_k) \rightarrow \min, \quad x \in X,$$

що еквівалентно задачі

$$(f'(x_k), x - x_k) \rightarrow \min, \quad x \in X. \quad (7.9)$$

Нехай

$$\bar{x}_k = \arg \min_X (f'(x_k), x - x_k),$$

у цьому випадку $\eta_k = (f'(x_k), \bar{x}_k - x_k)$ – значення мінімуму.

Оскільки X – компакт, то існує \bar{x}_k , при цьому $\bar{x}_k \in X$ і $\eta_k \leq 0$.

Отже, можливі два випадки $\eta_k < 0$, $\eta_k = 0$. Якщо $\eta_k = 0$, то $(f'(x_k), x - x_k) \geq \eta_k = 0$, для всіх $x \in X$, тобто точка x_k є стаціонарною точкою задачі (7.1). Тоді виконання алгоритму закінчується і треба провести додаткове дослідження щодо оптимальності. (Якщо $f(x)$ – опукла функція, то x_k є розв'язком (7.1)). Нехай тепер $\eta_k < 0$, тоді у формулі (7.8) приймаємо $h_k = \bar{x}_k - x_k$, і цей вектор називають умовним антиградієнтом функції f у точці x_k . Зазначимо, що в цьому випадку вектор h_k є вектором спуску, оскільки $(f'(x_k), h_k) < 0$. Крім того, для довільного $\alpha \in (0,1)$ $x_k + \alpha h_k = \alpha x_k + (1-\alpha)x_k \in X$, тобто вектор h_k є допустимим щодо X . Коефіцієнт α_k вибирають з півінтервалу $(0,1]$ так, щоб виконувалася умова $x_{k+1} \in X$. Конкретне α_k можна вибирати за різними правилами, описаними вище. Ми розглянемо варіант методу з вибором α_k за правилом дроблення

$$f(x_k + \alpha h_k) \leq f(x_k) + \varepsilon \alpha \eta_k. \quad (7.10)$$

Лема 7.3. Нехай X – опуклий компакт, функція f – диференційовна на X , а градієнт задовольняє умову Ліпшиця:

$$\|f'(x) - f'(y)\| \leq M \|x - y\|, \quad x, y \in X$$

Якщо $\eta_k < 0$, то для довільного $\varepsilon \in (0,1)$ нерівність (7.10) виконується при

$$0 < \alpha \leq \min\left\{ (1 - \varepsilon) \frac{\eta_k}{M \|h_k\|^2}, 1 \right\}. \quad (7.11)$$

Доведення цієї леми випливає із леми 6.2 та умови $\alpha \in (0,1]$

У рамках умов леми 7.3 величину α_k вибираємо у такому вигляді: $\alpha_k = \lambda^{i_k}$, де $\lambda \in (0,1)$. Наприклад, $\lambda = 1/2$, причому α_k – максимальне число, для якого виконується умова

$$f(x_{k+1}) = f(x_k + \alpha_k h_k) \leq f(x_k) + \varepsilon \alpha_k \eta_k \quad (7.12)$$

Тут можливі два випадки $i_k = 0$, ($\alpha_k = 1$), або $i_k > 0$. Якщо $i_k > 0$, то число $\alpha = \lambda^{i_k - 1} = \alpha_k / \lambda$ ще не задовольняє умову (7.12) і одночасно не виконується умова (7.11). Отже, виконується одна з двох умов

$$\alpha_k = 1 \text{ або } 1 > \alpha_k > -\lambda(1-\varepsilon) \frac{\eta_k}{M \|h_k\|^2}. \quad (7.13)$$

Тепер оцінимо властивості послідовності $\{x_k\}$, отриманої за формулою (7.8), де x_0 – довільна точка з X , h_k визначається за формулою $h_k = \bar{x}_k - x_k$, а α_k задовольняє умови (7.12), (7.13). Вважатимемо, що $\eta_k < 0$ при всіх $k = 0, 1, \dots$

Теорема 7.2. Нехай X – опуклий компакт, f – диференційовна функція на X , градієнт якої задовольняє умову Ліпшиця. Тоді довільна гранична точка x_* послідовності $\{x_k\}$, отриманої за методом умовного градієнта, є стаціонарною точкою задачі (7.1), тобто $(f'(x_*), x - x_*) \geq 0$ для всіх $x \in X$, якщо $f(x)$ – опукла на X , то x_* – розв’язок задачі (7.1) і $\lim_{n \rightarrow \infty} f(x_k) = f_*$, де $f_* = \min_X f(x)$ – мінімальне значення $f(x)$ на множині X . Крім того, справджується оцінка

$$f(x_k) - f_* \leq c/k, \quad (7.14)$$

де $c > 0$ – деяка стала.

➤Доведення теореми див. у [19].

Звичайно, застосування цього методу виправдане лише тоді, коли задача (7.9) проста для розв’язування. У випадку, коли X – куля або паралелепіпед, розв’язок задачі (7.9) легко записати у явному вигляді, якщо ж X – поліедр, то задача (7.9) є задачею

лінійного програмування. У випадку, якщо X має складну структуру, то задача (7.9) практично такої самої складності, як і початкова. Крім того, оцінка (7.14) точна саме у випадках, коли застосування методу виправдано. Отже, швидкість збіжності низька, і в такому варіанті застосування методу недоцільне. Однак цей метод у найпростішому вигляді виражає ідею лінійної апроксимації (лінеаризації) [17], яку з успіхом використовують для побудови інших методів лінеаризації [7,12]. Ідея лінійної апроксимації також приводить до ідеї квадратичної апроксимації. Так можна побудувати метод, коли послідовність $\{\bar{x}_k\}$ обчислюють за такими самими формулами, як і в методі умовного градієнта, але \bar{x}_k є розв'язком задачі

$$(f'(x), x - x_*) + \frac{1}{2}(f''(x_k)(x - x_k), x - x_k) \rightarrow \min, \quad x \in X \quad (7.15)$$

тобто як точка мінімуму на X квадратичної апроксимації функції $f(x)$ у точці x_k [12]. Коефіцієнт α_k можна вибирати по-різному. Фактично маємо модифікацію узагальненого методу Ньютона на випадок умовних задач оптимізації. Він ефективний у випадку, коли функція $f(x)$ опукла, а множина X – поліедр. Тоді задача (7.15) є задачею квадратичного програмування. Зазначимо, що методи, які ґрунтуються на квадратичній апроксимації, часто мають переваги навіть у випадку неопуклих функцій, але з лінійними обмеженнями.

7.3. Методи розв'язування задач квадратичного програмування

Задачі квадратичного програмування часто трапляються на практиці і, крім того, їх використовують як допоміжні для розв'язування задач складнішого вигляду. Виявляється, що для задач квадратичного програмування можна будувати скінченні методи. Розглянемо задачу

$$f(x) = \frac{1}{2}(Cx, x) + (d, x) \rightarrow \min_X \quad (7.16)$$

$$X = \{x \in R^n : (a_i, x) \leq b_i, i = \overline{1, m}\},$$

де C – додатно визначена симетрична матриця розмірності $n \times n$, $d, a_i, i = \overline{1, m}$ – задані вектори з R^n , $b_i, i = \overline{1, m}$ – задані числа. Введемо позначення $I(x) = \{i : (a_i, x) = b_i, 1 \leq i \leq m\}$ – множина номерів активних обмежень у точці $x \in X$. Для побудови методу розв'язування задачі (7.16) доводиться розв'язувати простіші задачі квадратичного програмування вигляду

$$f(x) \rightarrow \min$$

$$(a_i, x) = b_i, i \in I \quad (7.17)$$

де $I \subset \{1, \dots, m\}$ – підмножина така, що ця система рівнянь сумісна. Для розв'язування задачі (7.17) використаємо методи, які дають

розв'язок за скінченну кількість ітерацій. Якщо $I = \emptyset$, то (7.17) можна розв'язувати, наприклад, методом спряжених градієнтів. Якщо $I \neq \emptyset$, то задачу (7.17) можна звести до задачі безумовної мінімізації квадратичної функції. Один з таких способів (двоїстий метод) полягає у тому, що ми переходимо до двоїстої задачі, яка має вигляд

$$\psi(y) = -\varphi(y) = \frac{1}{2}(C^{-1}(d + yA_I), d + yA_I) + (y, \bar{b}) \rightarrow \min_{R^n} .$$

Тут y — вектор з координатами y_i ($i \in I$); A_I — матриця з рядками a_i ($i \in I$); \bar{b} — вектор з координатами b_i ($i \in I$). Якщо розв'язок $\bar{y} = (\bar{y}_i)$, $i \in I$ цієї двоїстої задачі уже знайдено, то розв'язок задачі (7.17) можна записати так [19]:

$$x = -C^{-1}(d + \bar{y}A_I) = -C^{-1}(d + \sum_{i \in I} y_i a_i).$$

У випадку, коли $C = I$ — одинична матриця, запропонований метод доволі ефективний.

Коротко розглянемо інший метод зведення задачі (7.17) до безумовної мінімізації квадратичної опуклої функції (*метод проектування*) [17]. Нехай $\Pi(y)$ — проекція точки $y \in R^n$ на допустиму множину задачі (7.17). Легко можна показати, що функція $F(y) = f(\Pi(y))$ є квадратичною та опуклою на R^n .

Очевидно таке: якщо y_* — точка мінімуму функції F на R^n , то

$x_* = y_*$ – розв’язок задачі (7.17). Отже, задача зводиться до мінімізації F на R^n . Звичайно, тут є деякі проблеми, пов’язані з обчисленням проекції $\Pi(y)$. Однак цей метод можна застосовувати й у випадку, коли матриця C лише невід’ємно визначена, тобто коли f просто опукла.

Тепер переходимо до розв’язування задачі (7.16).

Означення 7.1. Допустиму точку задачі (7.16) називають *особливою*, якщо вона є розв’язком задачі вигляду (7.17) при деякому $I \subset \{1, 2, \dots, m\}$ (випадок $I = \emptyset$ також враховується).

Теорема 7.3. Кількість особливих точок задачі (7.16) скінчена, причому її розв’язок є особливою точкою.

➤ Оскільки задача (7.17) має не більше одного розв’язку, а кількість таких задач скінчена, то задача (7.16) має скінченну кількість особливих точок. Нехай x_* – розв’язок задачі (7.16). Тоді, очевидно, x_* – глобальний розв’язок задачі

$$f(x) \rightarrow \min,$$

$$(a_i, x) \leq b_i, \quad i \in I(x_*).$$

Тому x_* буде також розв’язком задачі

$$f(x) \rightarrow \min,$$

$$(a_i, x) = b_i, \quad i \in I(x_*)$$

Отже, x_* – особлива точка задачі (7.16). ◀

Як бачимо, для відшукання розв'язку задачі (7.16) нам достатньо знайти всі особливі точки, обчислити значення функції $f(x)$ у цих точках і вибрати ту точку, для якої $f(x)$ набуває мінімального значення. З метою відшукання особливих точок необхідно для кожної множини $I \subset \{1, \dots, m\}$ знайти розв'язок \bar{x} задачі (7.17), а потім перевірити умову $\bar{x} \in X$. Однак цей варіант неефективний. Як і в симплекс-методі, використовуватимемо упорядкований перебір, що є основною ідеєю запропонованого методу, який складається з двох рекурентних алгоритмів, які повторюються. Перший алгоритм за заданою допустимою точкою для задачі (7.16) знаходить особливу точку, в якій функція $f(x)$ набуває не більшого значення, ніж у допустимій точці. Другий алгоритм визначає, чи є знайдена особлива точка розв'язком, якщо ні, то відшукує точку $x \in X$, в якій f набуває меншого значення. Перший і другий алгоритми працюють послідовно один за одним, у результаті чого будується послідовність особливих точок, на яких функція f строго спадає. Обчислюватимемо лише частину особливих точок, тобто частину зі скінченної кількості. Це означає, що процес генерування таких точок припиниться, тобто трапиться випадок, коли обчислена особлива точка є розв'язком задачі (7.16). Принципову схему алгоритму сформульовано, потрібно описати згадані два алгоритми.

Алгоритм переходу від заданої допустимої точки до особливої точки з небільшим значенням функції мети. Нехай

задана точка $x_0 \in X$. Знайти особливу точку \bar{x} , для якої $f(\bar{x}) \leq f(x_0)$. Побудуємо послідовність точок $x_k \in X$, $k=1,2,\dots$ і $\bar{x}_k \in R^n$ ($k=0,1,\dots$) за таким правилом. Якщо при заданому $k=0,1,\dots$ точку $x_k \in X$ знайдено, то \bar{x}_k визначають як розв'язок задачі

$$f(x) \rightarrow \min$$

$$(a_i, x) = b_i \quad i \in I(x_k). \quad (7.18)$$

Відшукати x_k можна за скінченну кількістю кроків згідно з розглянутими методами. У цьому випадку:

$$f(\bar{x}_k) \leq f(x_k) \quad (7.19)$$

оскільки x_k – допустима точка задачі (7.18). Можливі два випадки: $\bar{x}_k \in X$ або $\bar{x}_k \notin X$. Якщо $\bar{x}_k \in X$, то \bar{x}_k особлива точка (7.16). Нехай $\bar{x}_k \notin X$, тоді побудуємо точку

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k (\bar{x}_k - x_k), \quad (7.20)$$

де

$$\lambda_k = \max\{\lambda \geq 0: x_k + \lambda(\bar{x}_k - x_k) \in X\} < 1. \quad (7.21)$$

Причому існує явна формула, яка дає змогу обчислити цей параметр за скінченну кількість операцій. З (7.19), (7.20), враховуючи опуклість $f(x)$, випливає

$$f(x_{k+1}) \leq \lambda_k f(\bar{x}_k) + (1 - \lambda_k) f(x_k) \leq f(x_k). \quad (7.22)$$

Крім того,

$$I(x_k) \subset I(x_{k+1}), \quad I(x_k) \neq I(x_{k+1}).$$

Справді, для $i \in I(x_k)$, $(a_i, \bar{x}_k) = b_i = (a_i, x_k)$, тоді $(a_i, x_{k+1}) = b_i$, $i \in I(x_{k+1})$, тобто $I(x_k) \subset I(x_{k+1})$.

Припустимо, що $I(x_k) = I(x_{k+1})$, а це означає $(a_i, x_k + \lambda_k(\bar{x}_k - x_k)) < b_i$ для всіх $i \notin I(x_k)$. Тоді, очевидно, не виконується умова (7.21) та існує число $\varepsilon > 0$ таке, що

$$(a_i, x_k + (\lambda_k + \varepsilon)(\bar{x}_k - x_k)) \leq b_i$$

при всіх $i = \overline{1, m}$, тобто ми одержали суперечливість. Отже, $I(x_{k+1})$ містить хоча б один елемент більше, ніж $I(x_k)$. Звідси зрозуміло, що настане момент, коли умова $x_k \notin X$ буде неможлива і трапиться випадок $x_k \in X$, тобто на деякій k -тій ітерації буде отримана особлива точка $\bar{x} = \bar{x}_k$. У цьому випадку, з огляду на (7.19), (7.22), маємо:

$$f(\bar{x}) \leq f(x_k) \leq \dots \leq f(x_0).$$

Алгоритм переходу від заданої особливої точки до допустимої точки з меншим значенням функції мети. Нехай задана особлива точка $\bar{x} \in X$ (\bar{x} може бути довільною), отримана на попередньому етапі. Треба переконатися, що \bar{x} – розв'язок за–дачі, або знайти допустиму точку $x_0 \in X$, для якої $f(x_0) < f(\bar{x})$. Це можна зробити, Виконавши один крок за методом умовного градієнта. Ми дещо модифікуємо цю ітерацію і розглянемо задачу

$$(f'(\bar{x}), h) \rightarrow \min,$$

$$(a_i, h) \leq 0, \quad i \in I(\bar{x}), \quad -1 \leq h_j \leq 1, \quad j = 1, \dots, n \quad (7.23)$$

(обмеження задачі (7.16), які виконуються як строгі в (7.23), не враховуємо). Нехай \bar{h} - розв'язок задачі (7.23), знайдений, наприклад, за симплекс-методом, а $\bar{\eta} = (f'(\bar{x}), \bar{h})$ - значення функції мети. Оскільки $h = 0$ - допустима точка задачі (7.23), то можливі випадки $\bar{\eta} < 0$, $\bar{\eta} = 0$. Якщо $\bar{\eta} = 0$ то \bar{x} – розв'язок задачі (7.16). Справді, для довільного $x \in X$ ($x \neq \bar{x}$) приймемо $h = (x - \bar{x})/\gamma$, де

$$\gamma = \sum_{j=1}^n |x_j - \bar{x}_j| > 0, \quad \text{тоді} \quad |h_j| \leq 1 \quad \text{при всіх} \quad j = \overline{1, n}. \quad \text{Крім того, для}$$

довільного $i \in I(\bar{x})$ маємо

$$(a_i, h) = \frac{1}{\gamma} (a_i, x - \bar{x}) = \frac{1}{\gamma} ((a_i, x) - b_i) \leq 0.$$

Отже, h - допустима точка задачі (7.23). З огляду на властивість опуклих функцій і визначене η , маємо

$$f(x) - f(\bar{x}) \geq (f'(\bar{x}), x - \bar{x}) = \gamma(f'(\bar{x}), h) \geq \gamma\eta = 0,$$

звідки \bar{x} – розв’язок (7.16).

Нехай $\bar{\eta} < 0$, тоді h – напрям спадання функції f у точці \bar{x} .

Для всіх достатньо малих $\alpha > 0$

$$f(\bar{x} + \alpha h) < f(\bar{x}) \quad (7.24)$$

для всіх $i \in I(\bar{x})$ і $\alpha \geq 0$

$$(a_i, \bar{x} + \alpha h) = b_i + \alpha(a_i, h) \leq b_i, \quad (7.25)$$

а для $i \notin I(\bar{x})$ і достатньо малих $\alpha > 0$ справджується нерівність,

$(a_i, \bar{x} + \alpha h) \leq b_i$, оскільки $(a_i, \bar{x}) < b_i$. Конкретне число $\alpha > 0$ можна знайти за скінченну кількість кроків, наприклад, за правилом дроблення $\alpha = \lambda^k$, де $\lambda \in (0,1)$ k – найменше число, для якого виконується (7.24), (7.25). Після того, як число α знайдено, будуємо точку $x_0 = \bar{x} + \alpha h$, у цьому випадку $f(x_0) < f(\bar{x})$ і $x_0 \in X$.

Тепер розпочинаємо виконання першого алгоритму. Об’єднавши ці два алгоритми, отримаємо метод, який дає змогу одержати розв’язок задачі за скінченну кількість операцій. Зазначимо, що цей метод працює, починаючи з точки $x_0 \in X$. Щоб знайти таку точку

або переконатися, що $X = \emptyset$, достатньо розв'язати таку задачу лінійного програмування щодо x і $u = (u_1, \dots, u_m)$:

$$\sum_{i=1}^m u_i \rightarrow \min,$$

$$(a_i, x) \leq b_i + u_i, \quad i = \overline{1, m},$$

$$u_i \geq 0, \quad i = \overline{1, m}.$$

Нехай \bar{x}, \bar{u} - розв'язок цієї задачі, причому він завжди існує.

Тоді очевидно:, якщо $\bar{u} = 0$, то $\bar{x} \in X$, якщо $\bar{u} \neq 0$, то $X = \emptyset$.

Можна зробити такі зауваження, що стосуються цього методу.

По-перше, на практиці використовують економнішу схему. Якщо розв'язок допоміжної задачі виходить за межі X , то доводиться виконувати операцію “повернення”. Детально цей варіант розглянуто в [17].

По-друге, у другому алгоритмі нема потреби обчислювати точний розв'язок. Якщо виявиться, що вектор h задовольняє систему

$$(f'(x), h) < 0,$$

$$(a_i, h) \leq 0, \quad i \in I(\bar{x}),$$

то можна прийняти $\bar{h} = h$ і перейти до визначення x_0 .

По-третє, запропонований метод суттєво спрощується для задач спеціального квадратичного програмування;

$$f(x) \rightarrow \min ,$$

$$X = \{x \in R^n, x \geq 0\}.$$

Можна розглянути й інші модифікації цього методу, які поліпшують його ефективність під час розв'язування конкретних задач.

7.4. Метод лінеаризації

Розглянемо основи методу лінеаризації – одного з ефективних методів розв'язування задач математичного програмування. Він є розвитком методу умовного градієнта, водночас містить якісно нові моменти. У цьому методі до лінійної частини у випадку апроксимації функції мети додають квадратичний член, отож допоміжні задачі стають задачами квадратичного програмування.

Розглянемо задачу математичного програмування:

$$f(x) \rightarrow \min$$

$$X = \{x \in R^n, q_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m}\}, \quad (7.26)$$

де $f(x), q_1(x), \dots, q_m(x)$, – диференційовні, а $q_1(x), \dots, q_m(x)$, крім того, опуклі функції. Вважатимемо, що допустима множина задачі (8.26) непорожня ($X \neq \emptyset$). Довільній точці $x \in R^n$ поставимо у відповідність таку задачу квадратичного програмування:

$$(f'(x), h) + \frac{1}{2} \|h\|^2 \rightarrow \min,$$

$$(q'_i(x), h) + q_i(x) \leq 0, \quad i = \overline{1, m}. \quad (7.27)$$

Її сформульовано на базі лінійних частин розкладу відповідних функцій з додаванням до функції мети квадратичного члена $\frac{1}{2} \|h\|^2$, а стала $f(x)$ відкинуто. З огляду на властивість опуклих функцій, а також умову $X \neq \emptyset$, можемо записати:

$$(q'_i(x), \bar{x} - x) + q_i(x) \leq q_i(\bar{x}) \leq 0, \quad i = \overline{1, m},$$

де \bar{x} – довільна точка X . Отож вектор $h = \bar{x} - x$ задовольняє обмеження задачі (7.27) і допустима множина задачі (7.27) непорожня. Оскільки функція мети сильно опукла, то задача (7.27) має розв'язок, причому єдиний. Позначимо цей розв'язок через $h(x)$. У методі лінеаризації послідовність наближень $\{x_k\}$ обчислюють за формулою

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (7.28)$$

де h_k – розв'язок задачі (7.27) при $x = x_k$, тобто $h_k = h(x_k)$; параметр α_k можна обирати одним з уже відомих способів.

Розглянемо випадок, коли $\alpha_k = \alpha = \text{const}$. Послідовність $\{x_k\}$ не обов'язково належить X , а послідовність $\{f(x_k)\}$ спадає.

Теорема 7.4. Нехай функції $f, q_i, i = \overline{1, m}$ диференційовні на R^n , їхні градієнти задовольняють на R^n умову Ліпшиця, функції $q_i, i = \overline{1, m}$, крім того, опуклі на R^n та існує точка $\bar{x} \in R^n$ така, що $q_i(\bar{x}) < 0$ для всіх $i = \overline{1, m}$ (умова Слейтера). Нехай $x_0 \in X$, причому множина

$$N_0 = \{x \in R^n : f(x) \leq f(x_0)\}$$

обмежена. Тоді існує число $\bar{\alpha} > 0$ таке, що будь-яка гранична точка x_* послідовності $\{x_k\}$, визначена за формулою (7.28), де $h_k = h(x_k)$, $\alpha_k \equiv \alpha \in (0, \bar{\alpha}]$ x_0 -початкова точка, є стаціонарною для задачі (7.26), тобто $x_* \in X$ і

$$f'(x_*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* q'_i(x_*) = 0, \quad (7.29)$$

$$\lambda_i^* q_i(x_*) = 0, \quad i = \overline{1, m} \quad (7.30)$$

Тут $\lambda_i^* \geq 0, i = \overline{1, m}$ множники Лагранжа. Якщо у цьому випадку функція $f(x)$ опукла на R^n , то x_* - розв'язок задачі (7.26).

➤ Зазначимо, що умова обмеженості N_0 забезпечується, наприклад, умовою сильної опукlostі функції $f(x)$ або умовою

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} f(x) = \infty.$$

Перш ніж довести теорему, розглянемо додатково дві леми, Крім того, зауважимо таке: оскільки $h(x)$ – розв'язок задачі (7.27), то існують множники Лагранжа $\lambda_1(x) \geq 0, \dots, \lambda_m(x) \geq 0$ такі, що

$$f'(x) + h(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i(x) q'_i(x) = 0,$$

$$\lambda_i(x)(q'_i(x), h(x)) + q_i(x) = 0 \quad i = \overline{1, m}. \quad (7.31)$$

Лема 7.4. У припущеннях теореми 7.4 множники Лагранжа для сім'ї задач (7.27) рівномірно обмежені на N_0 , тобто

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i(x) \leq C \text{ при всіх } x \in N_0, \quad (7.32)$$

де $C > 0$ – деяка стала.

➤ Оскільки $f'(x)$ задовольняє умову Ліпшиця, то на компакті N_0 $\|f'(x)\| \leq K$ для всіх $x \in N_0$. Отже, для довільних $x \in N_0$ і $h \in R^n$

$$(f'(x), h) + \frac{1}{2} \|h\|^2 \geq -\|f'(x)\| \|h\| + \frac{1}{2} \|h\|^2 \geq -\frac{1}{2} K^2,$$

а це означає, що розв'язок задачі (7.27) при $x \in N_0$ рівномірно обмежений знизу. Якщо врахувати властивість сідлової точки, то можемо записати ($h(x)$ - розв'язок задачі (7.27))).

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}K^2 \leq & (f'(x), h(x)) + \frac{1}{2}\|h(x)\|^2 \leq (f'(x), h) + \frac{1}{2}\|h\|^2 + \\ & + \sum_{i=1}^m \lambda_i(x)[(g'(x), h) + q_i(x)] \end{aligned} \quad (7.33)$$

при всіх $h \in R^n$. Для точки \bar{x} з формулювання теореми 7.4 можна знайти число $\gamma > 0$ таке, що $q_i(\bar{x}) \leq -\gamma$ при всіх $i = \overline{1, m}$. Приймемо $h = x - \bar{x}$, тоді з (7.33), враховуючи опуклість функцій, отримаємо:

$$-\frac{1}{2}K^2 - (f'(x), x - \bar{x}) - \frac{1}{2}\|x - \bar{x}\|^2 \leq \sum_{i=1}^m \lambda_i(x)q_i(\bar{x}) \leq -\gamma \sum_{i=1}^m \lambda_i(x) \quad (7.34)$$

при всіх $x \in N_0$. Тепер з (7.34), з огляду на рівномірну обмеженість її лівої частини, маємо (7.32). \blacktriangleleft

Розглянемо функцію

$$\Phi(x, C) = f(x) + Cq(x), \quad (7.35)$$

де

$$q(x) = \max \{0, q_1(x), \dots, q_m(x)\}. \quad (7.36)$$

Лема 7.5. Нехай виконується припущення теореми 7.4. При будь-якому $\varepsilon \in (0, 1)$, приймемо

$$\bar{\alpha} = \min \left\{ 1, \frac{1 - \varepsilon}{(1 + C)M} \right\} \quad (7.37)$$

де C – стала з (7.32), а M – стала Ліпшиця для градієнтів f', q'_1, \dots, q'_m . Тоді для довільних $x \in N_0$ і $\alpha \in (0, \bar{\alpha}]$ справджується нерівність $\Phi(x + \alpha h, C) \leq \Phi(x, C) - \alpha \varepsilon \|h\|^2$, де $h = h(x)$ – розв'язок задачі (7.27).

➤ Нехай $x \in N_0$ і $\alpha \in (0, \bar{\alpha}]$. Використовуючи формулу Лагранжа, нерівність Коші-Буняковського й умову Ліпшиця для f' при деякому $\xi \in (0,1)$, отримуємо

$$\begin{aligned} f(x + \alpha h) - f(x) &= (f'(x + \xi \alpha h), \alpha h) = \alpha(f'(x), h) + \\ &+ \alpha[(f'(x + \xi \alpha h), h) - (f'(x), h)] \leq \alpha(f'(x), h) + \alpha^2 M \|h\|^2 \end{aligned} \quad (7.38)$$

У цьому випадку, врахувавши, (7.31), (7.32), (7.36), маємо:

$$(f'(x), h) = -\sum_{i=1}^m \lambda_i(x)(q'_i(x), h) - \|h\|^2 = \sum_{i=1}^m \lambda_i(x) q'_i(x) - \|h\|^2 \leq C q(x) - \|h\|^2.$$

Отже,

$$f(x + \alpha h) \leq f(x) + \alpha C q(x) - \alpha \|h\|^2 + \alpha^2 M \|h\|^2 \quad (7.39)$$

За аналогією з (7.38) для довільного i

$$q_i(x + \alpha h) \leq q_i(x) + \alpha(q'_i(x), h) + \alpha^2 M \|h\|^2,$$

$$(q'_i(x), h) \leq -q_i(x), \quad i = \overline{1, m},$$

оскільки вектор h , як розв'язок задачі (7.27), задовільняє обмеження задачі. Тому:

$$q_i(x + \alpha h) \leq (1 - \alpha)q_i(x) + \alpha^2 M \|h\|^2, \quad (7.40)$$

де враховано, що $\alpha \leq 1$. З формул (7.35), (7.37), (7.39) і (7.40) н умови $\alpha \in (0, \bar{\alpha}]$ випливає

$$\Phi(x + \alpha h, C) \leq \Phi(x, C) - \alpha(1 - \alpha(1 + C)M) \|h\|^2 \leq \Phi(x, C) - \alpha \varepsilon \|h\|^2.$$

↖

Тепер можемо безпосередньо довести теорему.

По-перше, покажемо, що твердження теореми задовольняє $\bar{\alpha}$ з (7.37). Справді, оскільки $x_0 \in X$, то $q(x_0) = 0$, отож з урахуванням леми 7.5 для точки x_1 маємо:

$$f(x_1) \leq \Phi(x_1, C) \leq \Phi(x_0, C) - \alpha \varepsilon \|h_0\|^2 \leq \Phi(x_0, C) = f(x_0),$$

тобто $x_1 \in N_0$. Аналогічно, використовуючи метод математичної індукції, отримуємо

$$\Phi(x_{k+1}, C) \leq \Phi(x_k, C) - \alpha \varepsilon \|h_k\|^2, \text{ для всіх } k = 0, 1, \dots \quad (7.41)$$

Отже, послідовність $\{\Phi(x_k^*, C)\}$ монотонно незростаюча і, крім того, обмежена, оскільки неперервна функція $\Phi(x, C)$ при заданому C обмежена на компакті N_0 . Це означає, що ця послідовність має межу.

Звідси і з (7.41)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|h_k\| = 0.$$

Нехай тепер x_* – довільна гранична точка послідовності $\{x_k\}$. Така точка існує, оскільки N_0 – компакт. За лемою 7.1 послідовність $\{\lambda_i(x_k)\}$, $i = \overline{1, m}$ обмежена. Крім того, можна вважати, що

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x_*, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_i(x_k) = \lambda_i^* \geq 0, \quad i = \overline{1, m}.$$

Згідно з (7.31):

$$f'(x_k) + h_k + \sum_{i=1}^m \lambda_i(x_k) q'_i(x_k) = 0,$$

$$\lambda_i(x_k) [(q'_i(x_k), h_k) + q_i(x_k)] = 0, \quad i = \overline{1, m}.$$

Крім того, вектор h_k як розв'язок задачі (7.27) задовольняє обмеження

$$(q'_i(x_k), h_k) + q_i(x_k) \leq 0, \quad i = \overline{1, m}.$$

Переходячи у виписаних співвідношеннях до границі, бачимо, що твердження теореми виконуються, тобто правильними є (7.29), (7.30) і $x_* \in X$.

В основному методі на кожній ітерації потрібно розв'язувати задачу квадратичного програмування (7.27). З цією метою можна використовувати розглянуті вище методи. З методами лінеаризації і модифікаціями цього методу детальніше можна ознайомитися в [19]. Метод лінеаризації без труднощів можна перенести на загальну задачу математичного програмування вигляду

$$f(x) \rightarrow \min$$

$$X = \{x \in X_0 : q_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m}, q_i(x) = 0, i = \overline{m+1, s}\}.$$

У цьому випадку задачу (7.27) замінить задача

$$(f'(x), h) + \frac{1}{2} \|h\|^2 \rightarrow \min,$$

$$(q_i(x), h) + q_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m},$$

$$(q_i(x), h) + q_i(x) = 0, i = \overline{m+1, s}, h \in X_0 - x.$$

В іншому метод не змінюється, причому його можна модифікувати. При виконанні відповідних умов збіжність запропонованого алгоритму легко можна визначити.

7.5. Метод модифікованих функцій Лагранжа

Розглянемо задачу

$$f(x) \rightarrow \min_X$$

$$x \in X = \{x \in X_0 : q_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m}, q_i(x) = 0, i = \overline{m+1, s}\}, \quad (7.42)$$

де $f(x), q_i(x), i = \overline{1, s}$ – задані функції на множині X_0 . Нехай $f_* > -\infty, X_* \neq \emptyset$.

За певних умов опукості і регулярності в задачі (7.42) було з'ясовано (у розділі 5), що для довільної точки $x_* \in X_*$ знайдуться множники Лагранжа

$$\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_s^*), \lambda^* \in \Lambda_0 = \{\lambda \in R^s, \lambda_i \geq 0, i = \overline{1, m}\}$$

такі, що точка (x_*, λ^*) є сідовою точкою функції Лагранжа

$$L(x_*, \lambda) \leq L(x_*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*), \quad x \in X_0, \lambda \in \Lambda_0, \quad (7.43)$$

де

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^s \lambda_i q_i(x), \quad x \in X_0, \lambda \in \Lambda_0 \quad (7.44)$$

Було доведено і зворотне твердження: якщо $(x_*, \lambda^*) \in X_0 \times \Lambda_0$ є сідовою точкою функції (7.44), то $x_* \in X$. Опираючись на ці факти, можна запропонувати різні методи знаходження сідової точки функції Лагранжа, що еквівалентно відшуканню розв'язку задачі (7.42). Наприклад,

$$x_{k+1} = P_{X_0}(x_k - \alpha_k L_x(x_k, \lambda_k)), \quad (7.45)$$

$$\lambda^{k+1} = P_{\Lambda_0}(\lambda^k + \alpha_k L_\lambda(x_k, \lambda^k)) = P_{\Lambda_0}(\lambda^k + \alpha_k q(x_k)), \quad k = 0, 1, \dots, \quad (7.46)$$

де $L_x(x) = (L_{x_1}(x, \lambda), \dots, L_{x_n}(x, \lambda))$,

$$L_\lambda(x) = (L_{\lambda_1}(x, \lambda), \dots, L_{\lambda_n}(x, \lambda)) = (q_1(x), \dots, q_n(x)) = q(x).$$

Запропонований алгоритм є проекцією градієнта за змінними x та λ (спадання за x , зростання за λ). Крок α_k можна обирати аналогічно, як це роблять в інших методах. Зазначимо, що проекцію $\lambda \in R^s$ на Λ_0 обчислити доволі просто $P_{\Lambda_0}(\lambda) = (\mu^1, \dots, \mu^s)$, де

$$\mu_i = \lambda_i^* = \max\{\lambda_i, 0\}, \quad i = \overline{1, m}, \quad \mu_i = \lambda_i, \quad i = \overline{m+1, s}.$$

Замість (7.45) можна використовувати й інші методи, наприклад, метод Ньютона. Якщо задачу мінімізації функції $L(x, \lambda)$ за x при сталому λ розв'язати просто, то можна запропонувати, наприклад, такий алгоритм:

$$L(x_{k+1}, \lambda_k) = \inf_{x \in X} L(x, \lambda_k), \quad \lambda_{k+1} = P_{\Lambda_0}(\lambda_k + \alpha_k q(x_{k+1})), \quad k = 0, 1, \dots$$

Зазначимо, що збіжність запропонованих алгоритмів не завжди можна виявити. Це вдалось довести при доволі жорстких обмеженнях на функції в задачі (7.42).

Розглянемо простий приклад опуклої задачі:

$$f(x) = 0, \quad X = \{x \in R, q(x) = x = 0\}.$$

Тоді $f_* = 0$, $x_* = \{0\}$, функція Лагранжа $L(x, \lambda) = \lambda x$ на $R \times R$ має сідлову точку $(0, 0)$, оскільки

$$L(0, \lambda) = 0 \cdot \lambda = 0 = L(0, 0) = L(x, 0) = 0.$$

Процес (7.45), (7.46) має вигляд

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \lambda_k,$$

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + \alpha_k x_k, \quad k = 0, 1, \dots$$

Як бачимо,

$${x_{k+1}}^2 + {\lambda_{k+1}}^2 = ({x_k}^2 + {\lambda_k}^2)(1 + {\alpha_k}^2) \geq {x_k}^2 + {\lambda_k}^2, \quad k = 0, 1, \dots$$

і для початкової точки $(x_0, \lambda_0) \neq 0$ з будь-яким вибором параметра α_k процес розбігається. Щоб уникнути таких випадків, використовують модифіковані функції Лагранжа, які мають ті самі сідлові точки, проте кращі властивості. Існують різні підходи до побудови таких функцій. Розглянемо один із них на прикладі задачі

$$f(x) \rightarrow \inf, \quad x \in X = \{x \in X_0 : q_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m}\} \quad (7.47)$$

де $f(x), q_i(x), i = \overline{1, m}$ – задані функції з $C^1(X_0)$. Візьмемо модифіковану функцію Лагранжа

$$M(x, \lambda) = f(x) + \frac{1}{2A} [(\lambda + Aq(x))^+]^2 - \frac{1}{2A} \|\lambda\|^2, \quad (7.48)$$

де $x \in X_0, \lambda \in \Lambda_0 = \{\lambda \in R^m, \lambda \geq 0\}, A > 0$ – довільна фіксована стала, $a^+ = P_{R_i^m}(a) = (a_1^+, \dots, a_m^+)$, $a_i^+ = \max\{0, a_i\}, i = \overline{1, m}$, проекція точки a на невід'ємний октант $R_+^m = \{a \in R^m : a \geq 0\}$. Як бачимо, функція $M(x, \lambda)$ неперервно диференційовна за x і λ

$$\frac{\partial M}{\partial x} = M_x(x, \lambda) = f'(x) + (q'(x))^T (\lambda + Aq(x))^+,$$

$$\frac{\partial M}{\partial \lambda} = M_\lambda(x, \lambda) = \frac{1}{A} [(\lambda + Aq(x))^+ - \lambda], x \in X_0; \lambda \in \Lambda_0,$$

де $q'(x)$ – матриця розмірності $m \times n$.

$$q'(x) = \left\{ \frac{\partial q_i(x)}{\partial x_j} \quad i = \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, n} \right\}.$$

Легко показати, що у випадку опуклої множини X_0 , опуклих на X_0 функцій $f(x)$, $q_i(x)$, $i = \overline{1, m}$, буде опуклою функція $M(x, \lambda)$ за x на множині X_0 при довільному фіксованому λ . Крім того, $M(x, \lambda)$ буде ввігнутою вгору за λ при сталому x .

Метод розв'язування задачі (7.47) реалізують так. Нехай знайдено деякі наближення $x_0, x_1, \dots, x_k; \lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_k, (x_0, \lambda_0)$ задані довільними, $x_k \in X_0, \lambda_k \in \Lambda_0$. Запишемо функцію

$$\Phi_k(x) = \frac{1}{2} \|x - x_k\|^2 + \alpha M(x, \lambda_k), \quad x \in X_0,$$

де $\alpha > 0$ – деяке число, параметр методу. За $(k+1)$ -ше наближення приймаємо точку x_{k+1} таку, що

$$x_{k+1} \in X_0, \quad \Phi_k(x_{k+1}) \leq \inf \Phi_k(x) + \delta_k^2 / 2$$

$$\|q(x_{k+1}) - q(x_k)\| \leq \delta_k, \tag{7.49}$$

де $\delta_k \geq 0$, $\lim_{k \rightarrow \infty} \delta_k = 0$. Для визначення x_{k+1} розв'язуємо задачу

$\Phi_k(x) \rightarrow \min_{X_0}$, за допомогою будь-якого методу мінімізації. Якщо

маємо ефективний метод відшукання x_{k+1} , для якого виконується умова (7.49), то після визначення x_{k+1} точку λ_{k+1} знаходимо за формуловою

$$\lambda_{k+1} = (\lambda_k + Aq(x_{k+1}))^+.$$

Правила обчислення $(k+1)$ -го наближення визначені. Потрібно ще задати умову зупинки алгоритму. Повне дослідження методу описано в [7]. Можна розглядати й інші варіанти методу модифікованих функцій Лагранжа [7].

7.6. Метод штрафних функцій

Метод штрафних функцій є одним з простих і найбільше використовуваних методів розв'язування задач умовної оптимізації. Нехай задана задача

$$f(x) \rightarrow \min_X \quad (7.50)$$

Основна ідея методу полягає у зведенні задачі (7.50) до послідовності задач мінімізації

$$\Phi_k(x) \rightarrow \inf, \quad x \in X_0, \quad k = 0, 1, \dots \quad (7.51)$$

де $\Phi_k(x)$ – допоміжна функція, а $X \subset X_0$, причому X_0 вибирають так, щоб задачу (7.51) при кожному k можна легко розв'язати і X_0 містить множину X . Функції $\Phi_k(x)$ вибирають так, що зі зростанням k $\Phi_k(x)$ мало відрізняється від функції $f(x)$ на множині X і швидко зростає на множині $X_0 \setminus X$, а саме

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \Phi_k(x) = \begin{cases} f(x), & x \in X, \\ \infty, & x \in X_0 \setminus X. \end{cases}$$

Можна очікувати, що при великих k нижня межа $\Phi_k(x)$ на X_0 буде досягнута в точках, близьких до X , і розв'язок задачі (7.51) наближатиметься до розв'язку задачі (7.50). Крім того, є широкий вибір функцій $\Phi_k(x)$ і множини X_0 , що дає підстави використовувати простіші методи мінімізації.

Означення 7.2. Послідовність функцій $\{P_k(x), k = 0, 1, \dots\}$, визначених і невід'ємних на X_0 , називають штрафом, або штрафною функцією множини X на X_0 , якщо

$$\lim_{k \rightarrow \infty} P_k(x) = \begin{cases} 0, & x \in X, \\ \infty, & x \in X_0 \setminus X. \end{cases}$$

Отже, при великих k доводиться “платити” штраф за порушення умови $x \in X$. Якщо ця умова виконується, то штрафна функція є нескінченно малою. Виявляється, що для довільної множини $X \in R^n$ можна побудувати велику кількість штрафних функцій. Наприклад, нехай $\{A_k\}$ – додатна послідовність така, що

$\lim_{k \rightarrow \infty} A_k = \infty$, тоді можна прийняти:

$$P_k(x) = A_k \rho(x, X), \quad x \in R^n \equiv X_0, \quad k = 0, 1, \dots,$$

де $\rho(x, X) = \inf_{y \in X} \|x - y\|$ – відстань від точки x до множини X

(вважають, що множина X замкнута), або:

$$P_k(x) = \begin{cases} 0, & x \in X, \\ A_k \|x - \bar{x}\|, & x \notin X, \quad k = 0, 1, \dots, \end{cases}$$

де \bar{x} – довільна точка з X .

Розглянемо тепер випадок, коли

$$X = \{x \in X_0 : q_i(x) \leq 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad q_i(x) = 0, \quad i = \overline{m+1, s}\},$$

де X_0 задана множина в R^n , при цьому $x \in X_0$. Функції $f(x)$,

$q_i(x), \quad i = \overline{1, s}$ визначені на X_0 . За штрафну функцію можна взяти

$$P_k(x) = A_k P(x).$$

$$\text{Тут } P(x) = \sum_{i=1}^s q_i^+(x)^p, \quad x \in X_0,$$

$A_k > 0 \quad (k = 0, 1, \dots), \quad \lim_{k \rightarrow \infty} A_k = \infty, \quad p \geq 1$ – фіксоване число,

$$q_i^+(x) = \max\{0, q_i(x)\} \quad \text{для } i = \overline{1, m},$$

$$q_i^+(x) = |q_i(x)| \quad \text{для } i = \overline{m+1, s}.$$

Показник p вибирають з умови, щоб зберегти диференційовність функції $\Phi_k(x)$. Якщо функції $f(x)$, $q_i(x), \quad i = \overline{1, s}$, r разів неперервно диференційовні, то при $p > r$, $\Phi_k(x)$ буде r разів диференційовна.

Можна і в інших варіантах вибирати штрафні функції. Наприклад

$$P_k(x) = \sum_{i=1}^s A_{k_i} (q_i^+(x))^{p_i}, \quad x \in X_0, \quad k = 0, 1, \dots,$$

де $p_i \geq 1$, $A_{k_i} > 0$, $\lim_{k_i \rightarrow \infty} A_{k_i} = \infty$, ($i = \overline{1, s}$),

або

$$P_k(x) = \sum_{i=1}^s A_{k_i} \varphi_i(q_i^+(x)), \quad x \in X_0, \quad k = 0, 1, \dots .$$

Тут $\varphi_i(q)$ – довільна функція, така що $\varphi_i(0) = 0$, $\varphi_i(q) > 0$ при $q > 0$ ($i = \overline{1, s}$). $\varphi_i(q)$ можна обирати так, щоб штрафна функція мала різні позитивні властивості. Штрафну функцію можна обирати у вигляді

$$P_k(x) = \left(1 + \sum_{i=1}^s (q_i^+(x))^{p_i} \right)^{A_k} - 1, \quad p_i \geq 1,$$

або

$$P_k(x) = A_k^{-1} \left(\sum_{i=1}^m e^{A_k q_i(x)} + \sum_{i=m+1}^s e^{(A_k q_i^2(x))} \right), \quad x \in X_0, \text{ де}$$

$$A_k > 0 \quad (k = 0, 1, \dots) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} A_k = \infty \text{ та ін.}$$

Припустимо, що маємо послідовність задач

$$\Phi_k(x) = f(x) + P_k(x), \rightarrow \min_x, \quad x \in X_0, \quad k = 0, 1, \dots$$

Нехай $\Phi_k^* = \inf_{X_0} \Phi_k(x) > -\infty$, $k = 0, 1, \dots$. Якщо нижня межа

досягається, то умови

$$\Phi_k(x_k) = \Phi_{k^*}, \quad x_k \in X_0 \quad (7.52)$$

визначають послідовність $\{x_k\}$. Однак точно визначити x_k з (7.52) не завжди вдається, а для окремих k x_k може взагалі не існувати. Іноді це вимагає значних обчислювальних затрат, тому на практиці x_k визначають з умови

$$x_k \in X_0, \quad \Phi_k(x_k) \leq \Phi_{k^*} + \varepsilon_k, \quad (7.53)$$

де $\{\varepsilon_k\}$ — деяка задана послідовність, $\varepsilon_k > 0$, $k = 0, 1, \dots$, $\lim_{k \rightarrow \infty} \varepsilon_k = 0$.

Зазначимо, що можливий випадок, коли $x_k \notin X$. Фактично метод штрафних функцій описано. Використовуючи його, треба враховувати, що метод розв'язування задач (7.53) повинен бути досить ефективним. Важливе значення також має вибір величини ε_k і множини X_0 . При доволі малих ε_k задачі (7.53) трудомісткі, а при порівняно великому ε_k метод штрафних функцій може не збігатися.

Наприклад, знайдемо розв'язок задачі

$$f(x) = e^{-x} \rightarrow \inf,$$

$$x \in X = \{x \in R, q(x) = xe^{-x} = 0\},$$

де $X = \{0\} = X_*$, $f_* = 1$. Розглянемо штрафну функцію $p_k(x) = kq^2(x) = kx^2e^{-2x}$ і приймемо $\Phi_k(x) = e^{-x} + kx^2e^{-2x}$, $x \in R$.

Оскільки $\Phi_k(x) > 0, \forall k \in \mathbb{N}, x \in R$, $\lim_{x \rightarrow \infty} \Phi_k(x) = 0$, то

$\Phi_{k^*} = \inf_R \Phi_k(x) = 0$. За точку x_k , яка задовільняє умову (7.53) при $\varepsilon_k = e^{-k} + k^2 e^{-2k} > 0$ можна взяти $x_k = k$ ($k = 1, 2, \dots$). Тоді отримуємо

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k) = 0 < f_* = 1 \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \rho(x_k, x_*) = \infty.$$

Отже, з'ясовано, що метод штрафних функцій розбігається, тому вибір функцій $P_k(x)$ і послідовності ε_k має важливе значення для розв'язування задач умовної мінімізації. Детальніше метод штрафних функцій описано в [7].

Ідею методу штрафних функцій можна використати для розробки методів розв'язування задачі (7.51), які даватимуть змогу побудувати таку мінімізаційну послідовність $\{x_k\} \in X$, кожний член якої лежить зовні деякої забороненої підмножини $\gamma \in X$. Наприклад, такою множиною може бути межа області X або будь-яка її частина. У цьому випадку можна розглядати метод бар'єрних функцій [7].

؟ Запитання для самоперевірки

1. Властивість оператора проектування.
2. Необхідна і достатня умова для точки розв'язку.
3. Теорема про збіжність методу проекції градієнта.
4. Теорема про збіжність методу умовного градієнта.
5. Теорема про кількість особливих точок задачі квадратичного програмування.
6. Алгоритм переходу до особливої точки.
7. Алгоритм переходу до допустимої точки з меншим значенням функції мети.
8. Алгоритм методу лінеаризації (ідея побудови).
9. Теорема про стаціонарну точку при реалізації методу лінеаризації.
10. Побудова алгоритму розв'язування задачі математичного програмування на базі функції Лагранжа.
11. Побудова модифікованої функції Лагранжа і її застосування.
12. Побудова штрафних функцій для задачі математичного програмування.
13. Розв'язування задачі математичного програмування з використанням штрафних функцій.

■ Завдання для самостійної роботи

Знайти розв'язок задач 1-5 методом штрафних функцій з використанням методу Ньютона

Задача I.

$$f(x) = (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \rightarrow \min ;$$

$$x_1^2 + x_2^2 \geq 3.$$

Задача II.

$$f(x) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4 \rightarrow \min$$

$$;$$

$$x_1^2 - x_2^2 + x_4 \leq 3,$$

$$x_3 + x_4 = 1.$$

Задача III.

$$f(x) = (x_1 x_2)^2 (1 - x_1)^2 [1 - x_1 - x_2 (1 - x_1)^5] \rightarrow \min ;$$

$$x_1^2 + x_2^2 \geq 4,$$

$$x_1 + x_2 = 1.$$

Задача IV. $f(x) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2 \rightarrow \min ;$
 $x_1^2 + x_2^2 = 13,$
 $x_1 + x_2 \geq 5.$

Задача V.

$$f(x) = (x_1^2 + 12x_2 - 1)^2 + (49x_1^2 + 49x_2^2 + 84x_1 + 2324x_2 - 681)^2 \rightarrow \min$$

$$;$$

$$x_1^2 + x_2^2 \geq 1,$$

$$x_1 + x_2 \leq 3.$$

Знайти розв'язок задач 6-10 з використанням методу штраф-них функцій і квазіньютонівських методів

Задача VI.

$$f(x) = 100 \left[x_3 - \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right)^2 \right]^2 + (1 - x_1)^2 + (1 - x_2)^2 \rightarrow \min;$$

$$x_1^2 + x_2^2 \geq 1,$$

$$x_1 + x_2 \leq 3.$$

Задача VII.

$$f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 + \frac{0.04}{g(x)} + \frac{h^2(x)}{0.2} \rightarrow \min;$$

де $g(x) = -\frac{x_1^2}{4} - x_2^2 + 1, \quad h(x) = x_1 - 2x_2 + 1,$

$$x_1^2 - x_2^2 + x_4 \leq 3,$$

$$x_3 + x_4 = 1.$$

Задача VIII.

$$f(x) = 10^4 \sum_{i=1}^7 \frac{\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 a_i^2}{1 + x_4^2 a_i} - b_i}{b_i} \rightarrow \min,$$

$$a_i x_1^2 + x_2^2 \geq 4$$

$$x_1 + b_i x_2 = 1.$$

де величини a_i, b_i задано в таблиці

i	a_i	b_i	i	a_i	b_i
1	0,0	7,391	5	0,00209	22,20
2	0,000428	11,18	6	0,00348	24,02
3	0,00100	16,44	7	0,00525	31,32
4	0,00161	16,20			

Задача IX

$$f(x) = x_1 + 2x_2^2 + e^{x_1^2 + x_2^2} \rightarrow \min;$$

$$x_1^2 - x_2^2 + x_4 \leq 3,$$

$$x_3 + x_4 = 1.$$

Задача X.

$$f(x) = (x_1 - x_2 + x_3)^2 + (-x_1 + x_2 + x_3)^2 + (x_1 + x_2 - x_3)^2 \rightarrow \min$$

$$;$$

$$x_1 x_2 x_3^2 + x_2^2 + 4x_1^2 \geq 2$$

БІБЛІОГРАФІЧНИЙ СПИСОК

1. *Акоф Р.* Основы исследования операций /Р. Акоф., М. Сасиени; пер. с англ. – М.– Мир, 1971.
2. *Ашманов С.А.* Линейное программирование /С.А. Ашманов. – М. : Наука, 1981.
3. *Базара М.* Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы /М. Базара, К. Шетти– М. : Мир, 1982.
4. *Беллман Р.* Процессы регулирования с адаптацией /Р. Беллман– М. : Наука, 1964.
5. *Бейко И.В.* Методы и алгоритмы решения задач оптимизации /И.В. Бейко, Б.Н. Бублик, П.Н. Зинько– К. : Вища шк., 1983.
6. *Бертsekas Д.* Условная оптимизация и методы множителей Лагранжа /Д. Бертsekas– М. : Радио и связь, 1987.
7. *Васильев Ф.П.* Численные методы решения экстремальных задач /Васильев Ф.П.–М. : Наука, 1988.
8. *Габасов Р.* Методы оптимизации /Р. Габасов , Ф.М. Кирилова – Минск: Изд-во БГУ, 1981..
9. *Ермольев Ю.М., Ляшко И.И., Михалевич В.С., Тюптя В.И.* Математические методы исследования операций / Ю.М Ермольев., И.И. Ляшко, В.С. Михалевич, В.И. Тюптя. – Киев, Выща школа, 1979.
10. *Деннис Дж.* Численные методы безусловной оптимизации и решение нелинейных уравнений /Дж. Деннис., Р. Шнабель; пер. с англ. – М.: Мир, 1988.
11. *Зайченко Ю.П.* Дослідження операцій /Ю.П Зайченко. К. ВІПОЛ, 2000.
12. *Карманов В.Г.* Математическое программирование/В.Г. Карманов. – М. : Наука, 1986.
13. *Козицький В.А.* Опуклі структури. Методи оптимізації та їхнє застосування в економічному аналізі /В.А. Козицький. –Львів. ЛНУ імені Івана Франка, 2008.
14. *Мойсеев Н.И.,* Методы оптимизации/Н.И. Мойсеев, Ю.П Иванилов., Е.М. Столяров –М. : Наука, 1978.

-
15. Полак Э. Численные методы оптимизации. Единый подход /Э. Полак. – М. : Мир, 1974.
 16. Пшеничный Б.Н. Метод линеаризации/Б.Н. Пшеничный. –М. : Наука, 1983.
 17. Пшеничный Б.Н. Численные методы в экстремальных задачах / Б.Н Пшеничный, Ю.М. Данилин – М.: Наука, 1975.
 18. Реклейтис Г. Оптимизация в технике /Г. Реклейтис., А. Рейвиндра., К. Рэгсдел. – Т. 1,2. –М. : Мир, 1986.
 19. Сухарев А.Г., Тимохов А.В., Федоров В.В. Курс методов оптимизации/ А.Г. Сухарев, А.В. Тимохов., В.В. Федоров. –М.: Наука, 1986.
 20. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование / Д. Химмельблау. – М. : Мир, 1975.
 21. Хедли Дж. Нелинейное и динамическое программирование/ Дж. Хедли. – М. : Мир, 1967..
 22. Цегелик Г.Г. Лінійне програмування /Цегелик Г.Г. –Львів : Світ, 1995.
 23. Цегелик Г.Г. Чисельні методи /Цегелик Г.Г. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка,2004.
 24. Численные методы условной оптимизации / Под ред. Ф. Гилла, У. Миоррея. – М : Мир, 1977.
 25. Шор Н.З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложение/ Н.З. Шор. – К.: Наук. думка, 1979.