Квадратичная функция на единичной сфере
Лукашевич Александр
МФТИ 476

1. Постановка задачи

Будем рассматривать квадратичную функцию на единичной сфере без линейной части:

$$\begin{gathered}\underset{x\in S}{min}\, f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax \\ S = \{x \in \mathbb{R}^n \big| \|x\|^2 = 1\}\end{gathered} \tag{1.1}$$

Сразу же отметим, что в конечномерном евклидовом пространстве $\mathbb{R}^n$ единичная сфера является компактным множеством, что говорит о том, что решение задачи существует, поскольку целевая функция непрерывна. Прежде чем приступить к вопросам об условиях экстремума запишем функцию Лагранжа:

$$L(x,\lambda) = \frac{1}{2}x^T Ax + \lambda\big(\|x\|^2 - 1\big). \tag{1.2}$$

2. Условия экстремума,стационарные точки и точки локального минимума

2.1. Необходимые условия

- *Необходимым условием (первого порядка)* того, что точка x_0 является точкой экстремума задачи (1.1), является существование вектора множителей Лагранжа λ_0, такого, что (x_0, λ_0) - стационарная точка функции Лагранжа (7.1):

  $$\nabla L(x_0, \lambda_0) = \vec{0}. \tag{2.1}$$

  В случае квадратичной функции (2.1) выражается следующий образом:

  $$\nabla L(x_0, \lambda_0) = \begin{pmatrix} Ax_0 + 2\lambda_0 x_0 \\ \|x_0\|^2 - 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{0} \\ 0 \end{pmatrix}$$

  Из этого условия явно видно, что выполняется условие допустимости.

- *Необходимым условием (второго порядка)* того, что точка x_0 является точкой экстремума задачи (1.1) является следующее неравенство:

  $$\begin{gathered}\big(L_{xx}(x_0,\lambda_0)s, s\big) = \big((A + 2\lambda_0 E)s, s\big) \geq 0 \\ s \in \mathbb{S} = \{s \big| (2x, s) = 0\},\end{gathered} \tag{2.2}$$

  где $2x$ суть градиент ограничения, отражающего принадлежность точки к сфере.

2.2. Достаточные условия

- *Достаточными условиями второго порядка* для того, чтобы точка x_0 была точкой локального минимума в задаче (1.1) является существование вектора множителей Лагранжа λ_0 такого, что выполнены следующие условия:

  $$\begin{gathered}\nabla L(x_0, \lambda_0) = \vec{0}, \\ \big(L_{xx}(x_0,\lambda_0)s, s\big) = \big((A + 2\lambda_0 E)s, s\big) > 0,\end{gathered} \tag{2.3}$$

  где $s \in \mathbb{S}$, определенном в (2.2)

2.3. Стационарные точки и точки локального минимума

- Эти виды точек в данной задаче определяются условиями (2.1) и (2.3) соответственно. Рассмотрим этот вопрос подробнее.

  – Запишем функцию Лагранжа:

  $$L = \frac{1}{2}x^T Ax + \lambda\big(\|x\|^2 - 1\big). \tag{2.4}$$

  – Необходимое условие первого порядка:

  $$\nabla L = \begin{pmatrix} Ax + 2\lambda x \\ \|x\|^2 - 1 \end{pmatrix} = \vec{0}. \tag{2.5}$$

– Вторая производная L по x:

$$L_{xx} = A + 2\lambda E. \tag{2.6}$$

– Касательное подпространство к $\mathbb{S}$:

$$E_t = \{s \in \mathbb{R}^n : (s, 2x) = 0\}. \tag{2.7}$$

– Условие минимума второго порядка:
Если x^* такова, что

$$\begin{gathered} \nabla L(x^*, \lambda^*) = \begin{pmatrix} Ax^* + 2\lambda^* x^* \\ \|x^*\|^2 - 1 \end{pmatrix} = \vec{0}. \\ \forall s \in E_t \hookrightarrow (L_{xx}(x^*, \lambda^*)s, s) > 0. \end{gathered} \tag{2.8}$$

Тогда x^* - точка локального минимума в задаче (1.1).

Рассмотрим (2.8) подробнее. Учитывая (2.6),

$$(L_{xx}(x^*, \lambda^*)s, s) = ((A + 2\lambda^* E)s, s) = s^T As + 2\lambda^* s^T s. \tag{2.9}$$

Рассмотрим A как матрицу некоторого оператора. Так как матрица симметрична, то все собственные значения вещественны, помимо этого, собственные векторы попарно ортогональны.

Из (4.20) следуюет, что

$$Ax^* = -2\lambda^* x^*, \tag{2.10}$$

То есть стационарные точки есть собственные векторы оператора A - $\{h_i\}_{i=1}^n$, соответствующие собственным значениям $\{-2\lambda_i\}_{i=1}^n$.

Поскольку при проверке (2.8) нас будут интересовать лишь $s \in E_t$, рассмотрим это множество подробнее: для фиксированной стационарной точки, E_t представляет собой ортогональное дополнение собственного вектора, соответствующего этой стационарной точке. Поскольку собственные векторы оператора A попарно ортогональны, то s можно разложить по остальным собственным векторам. Пусть стационарной точке соответствует собственный вектор с номером k. Тогда

$$s = \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i h_i + \sum_{i=k+1}^{n} \alpha_i h_i.$$

Чтобы не загромождать запись, будем считать, что $k = n$, что не умаляет общности.

Используя вышесказанное, перепишем (2.9):

$$s^T As + 2\lambda s^T s = \left(\sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i h_i\right)^T A \left(\sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i h_i\right) + 2\lambda^* \left(\sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i h_i\right)^T \left(\sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i h_i\right). \tag{2.11}$$

Поскольку каждый h_i - собственный вектор оператора A, то

$$Ah_i = -2\lambda_i h_i.$$

Итак, (2.11) принимает вид

$$\begin{gathered} \left(\sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i h_i\right)^T \left(\sum_{i=1}^{n-1} (-2\lambda_i)\alpha_i h_i\right) + 2\lambda^* \left(\sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i h_i\right)^T \left(\sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i h_i\right) = \\ = \left(\sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i h_i, \sum_{i=1}^{n-1} (-2\lambda_i)\alpha_i h_i\right) + 2\lambda^* \left(\sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i h_i, \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i h_i\right). \end{gathered} \tag{2.12}$$

Поскольку $\{h_i\}_{i=1}^n$ попарно ортогональны, то (2.12) примет вид

$$\sum_{i=1}^{n-1} 2(-\lambda_i + \lambda^*)\alpha_i^2 (h_i, h_i). \tag{2.13}$$

В силу произвольности вектора $s \in E_t$, для того, чтобы (2.13) было положительным, каждое $(-\lambda_i + \lambda^*)$ должно быть положительно. Таким образом, $\lambda^* > \lambda_i \ \forall i = 1, \ldots, n-1$, $-2\lambda^* < -2\lambda_i$.

Итак, точкой локального минимума будет та точка, множитель Лагранжа которой наибольший, то есть собственный вектор матрица A, с наименьшим собственным значением.

3. Выпуклая функция

Критерий выпуклости второго порядка выражается неравенством :

$$\nabla^2 f(x) = A \succ 0 \iff \forall s \in \mathbb{R}^n \to s^T A s \geq 0.$$

Факт положительной определенности можно установить с помощью критерий Сильвестра.

4. Методы

4.1. Градиентный метод

Рассмотрим градиентный метод для безусловной оптимизации. Общая схема метода выглядит так:

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k - \gamma_k p^k \\ \gamma_k &= const \\ p^k &= \nabla f(x^k) \end{aligned} \tag{4.1}$$

Данный метод сходится при следующих условиях:

- Градиент Липшицев с константой L
- $0 < \gamma < \frac{2}{L}$
- $f(x)$ ограниченая снизу

В таком случае градиент стремится к нулю, а $f(x)$ монотонно убывает на последовательности x^k.

Градиент функции $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x + c$ Липцицев. Действительно:

$$\forall x, y \; \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| = \|Ax + b - (Ay + b)\| = \|A(x - y)\| \leq \|A\| \cdot \|x - y\|$$

То есть константа Липшица есть норма оператора A. Это число, так как в конечномерных пространствах все операторы непрерывны, что эквивалентно ограниченности.

$f(x)$ ограничена снизу на S, поскольку она непрерывна. В нашем случае стоит применить более общий метод - метод проекции градиента:

$$x^{k+1} = P_S(x^k - \gamma_k \nabla f(x^k)) = P_S((E - \gamma A)x^k - \gamma b), \tag{4.2}$$

где $P_S(x) = \underset{s \in S}{argmin} \|x - s\| = \frac{x}{\|x\|}$ - проекция x на S.

Поскольку оператор проектирования $P_S(x)$ обладает свойством Липшица с $L = 1$, то есть $\|P_S(x) - P_S(y)\| \leq \|x - y\|$, то условия сходимости те же, что и для безусловного метода.

4.2. Скорейший спуск

4.2.1. Немного о методе

Этот метод отличается от предыдущего тем, что шаг γ не постоянный, а выбирается в соответствии с определенным правилом, например, в соответсвии с правилом одномерной минимизации, которое будет описано ниже.

Сразу запишем метод для нашей задачи - с ограничением на принадлежность сфере:

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= P_S(x^k - \gamma_k \nabla f(x^k)) \\ \gamma_k &= \underset{\gamma \geq 0}{argmin} f(P_S(x^k - \gamma \nabla f(x^k))) \end{aligned} \tag{4.3}$$

4.2.2. Выбор шага

$$\begin{aligned} x^{k+1} = P_S(x^k - \gamma_k \nabla f(x^k)) &= \frac{x^k - \gamma_k \nabla f(x^k)}{\|x^k - \gamma_k \nabla f(x^k)\|} \\ \gamma_k = \underset{\gamma \geq 0}{argmin} f(P_S(x^k - \gamma \nabla f(x^k))) &= \underset{\gamma \geq 0}{argmin} f\left(\frac{x^k - \gamma \nabla f(x^k))}{\|x^k - \gamma \nabla f(x^k))\|}\right). \end{aligned} \tag{4.4}$$

Учтем вид функции: $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax$ при расчете шага:

$$\gamma_k = \underset{\gamma\geq 0}{argmin}\ \frac{1}{2}\ \Big(\frac{x^k - \gamma Ax^k}{\|x^k - \gamma Ax^k\|}\Big)^T A \frac{x^k - \gamma Ax^k}{\|x^k - \gamma Ax^k\|} = \tag{4.5}$$

$$= \underset{\gamma\geq 0}{argmin}\ \frac{1}{2}\ \frac{(x^k)^T Ax^k - 2\gamma(x^k)^T A^2 x^k + \gamma^2 (x^k)^T A^3 x^k}{< x^k - \gamma Ax^k, x^k - \gamma Ax^k >} = \tag{4.6}$$

$$= \underset{\gamma\geq 0}{argmin}\ \frac{1}{2}\ \frac{(x^k)^T Ax^k - 2\gamma(x^k)^T A^2 x^k + \gamma^2 (x^k)^T A^3 x^k}{(x^k - \gamma Ax^k)^T E(x^k - \gamma Ax^k)} = \tag{4.7}$$

$$= \underset{\gamma\geq 0}{argmin}\ \frac{1}{2}\ \frac{(x^k)^T Ax^k - 2\gamma(x^k)^T A^2 x^k + \gamma^2 (x^k)^T A^3 x^k}{(x^k)^T x^k - 2\gamma(x^k)^T Ax^k + \gamma^2 (x^k)^T A^2 x^k} = \tag{4.8}$$

$$= \underset{\gamma\geq 0}{argmin}\ \frac{1}{2}\ F(x^k, \gamma). \tag{4.9}$$

Поскольку в знаменателе стоит квадрат нормы вектора $x^k - \gamma Ax^k$, то, вводя обозначения $a_i(x^k) = (x^k)^T A^i x^k,\ i = 0, \dots 3$, знаменатель примет следующий вид:

$$a_2(x^k)\gamma^2 - 2\gamma a_1(x^k) + a_0(x^k) > 0. \tag{4.10}$$

Этот трехчлен должен быть строго больше нуля, чтобы сохранить смысл выражения.

Выясним, что нужно для того, чтобы (4.10) выполнялось. Для этого действительных корней не должно быть, а коэффициент при γ^2 должен быть больше нуля:

$$\begin{aligned} &d = (2a_1(x^k))^2 - a_2(x^k)a_0(x^k) < 0, \\ &a_2(x^k) > 0. \end{aligned} \tag{4.11}$$

Заметим, что последнее неравенство означает, что A^2 положительно определена.

Согласно необходимому условию экстремума, γ_k должно быть решением уравнения $\nabla_\gamma F(x^k, \gamma) = 0$:

$$\left(\frac{\gamma^2 a_3 - 2\gamma a_2 + a_1}{a_2\gamma^2 - 2\gamma a_1 + a_0}\right)' = 2\frac{\gamma^2(a_2^2 - a_3 a_1) + \gamma(a_3 a_0 - a_2 a_1) + \overbrace{(a_1^2 - a_0 a_2)}^{<0,(4.11)}}{(a_2\gamma^2 - 2\gamma a_1 + a_0)^2} = 0 \tag{4.12}$$

$$\gamma_k = \frac{(a_2 a_1 - a_3 a_0) \pm \sqrt{(a_2 a_1 - a_3 a_0)^2 - 4(a_2^2 - a_3 a_1)(a_1^2 - a_0 a_2)}}{2(a_2^2 - a_3 a_1)}. \tag{4.13}$$

В случае, когда $(a_2^2 - a_3 a_1) = 0$, получим одно решение

$$\gamma = \frac{a_1^2 - a_0 a_2}{a_3 a_0 - a_2 a_1}$$

Заметим, что первый множитель в (4.13) во втором слагаемом под корнем есть произведение детерминантов квадратных уравнений в (4.9). Итак, получены две стационарные точки. Теперь нужно выяснить какая из них даёт минимум. Для этого нужно определить каков знак второй производной в каждой из стационарных точек. Точка с положительной второй производной будет точкой минимума:

$$F'' = \frac{\gamma^3(-2a_2\widehat{a_2}) + \gamma^2(-3a_2\widehat{a_1}) + \gamma(2\widehat{a_2}a_0 - 4a_2\widehat{a_0} + 2a_1\widehat{a_1}) + \widehat{a_1}a_0 + 4a_1\widehat{a_0}}{(\gamma^2 a_2 - 2\gamma a_1 + a_0)^3}, \tag{4.14}$$

где $\widehat{a_2} = a_2^2 - a_3 a_1,\ \widehat{a_1} = a_3 a_0 - a_2 a_1,\ \widehat{a_0} = a_1^2 - a_0 a_2$ Можно указать промежутки положительности F'' используя, например, формулу Кардано (напомним, что знаменатель положителен, см. (4.10), поэтому рассматриваем только числитель):

- Сперва приведем числитель к каноническому виду $y^3 + py + q$:

  Сделаем замену $\gamma = y - \frac{b}{3a} = y - \frac{3a_2\widehat{a_1}}{6a_2\widehat{a_2}}$.

  Тогда

$$p = \frac{6a_2\widehat{a_2}(2\widehat{a_2}a_0 - 4a_2\widehat{a_0} + 2a_1\widehat{a_1}) - (3a_2\widehat{a_1})}{(6a_2\widehat{a_2})}$$

$$q = \frac{2(-3a_2\widehat{a_1})^3 - 9(-2a_2\widehat{a_2})(-3a_2\widehat{a_1})(2\widehat{a_2}a_0 - 4a_2\widehat{a_0} + 2a_1\widehat{a_1}) + 27(-2a_2\widehat{a_2})^2(\widehat{a_1}a_0 + 4a_1\widehat{a_0})}{27(-2a_2\widehat{a_2})^3}$$

- Вычислим $Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2$ и определим его знак:

  $Q > 0$: один вещественный корень и два сопряженных комплексных корня,

  $Q = 0$: один однократный вещественный корень и один двукратный, или, если p = q = 0, то один трёхкратный вещественный корень,

  $Q < 0$ три вещественных корня.

- Введем обозначения:

$$\alpha = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}}$$

$$\beta = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}}$$

  Тогда корни уравнения выражаются следующим образом:

$$\begin{gathered} y_1 = \alpha + \beta, \\ y_{2,3} = -\frac{\alpha+\beta}{2} \pm i\frac{\alpha-\beta}{2}\sqrt{3}. \end{gathered} \tag{4.15}$$

  Переходя к исходной переменной:

$$\begin{gathered} \gamma_1 = \alpha + \beta - \frac{3a_2\widehat{a_1}}{6a_2\widehat{a_2}}, \\ \gamma_{2,3} = -\frac{\alpha+\beta}{2} \pm i\frac{\alpha-\beta}{2}\sqrt{3} - \frac{3a_2\widehat{a_1}}{6a_2\widehat{a_2}}. \end{gathered} \tag{4.16}$$

Считая, что имеет место случай $Q < 0$, а так же считая, что корни упорядочены по возрастанию, промежутки выпуклости будут следующими: $(-\inf,\ \gamma_1)\ \cup (\gamma_2,\ \gamma_3)$

Итак, найдя стационарные точки, нужно будет проверить их на принадлежнoть вышеуказанным интервалам.

Возможно, дабы не погрязть в комплексных корнях, проще будет просто подставить найденные стационарные точки в (4.14) и посмотреть знак выражения.

4.2.3. Сходимость

Покажем, что метод сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем

$$q = \underset{0\leq\gamma\leq\gamma_3}{sup}\ \|E + \gamma A\|, \tag{4.17}$$

Где γ_3 - максимальное значение γ из (4.16).

Напомним вид метода:

$$x^{k+1} = P_S(x^k - \gamma A x^k) = \frac{x^k - \gamma A x^k}{\|x^k - \gamma A x^k\|}, \tag{4.18}$$

S - единичная сфера,

$$\gamma_k = \underset{\gamma\geq 0}{argmin}\ \frac{1}{2}\left(\frac{x^k - \gamma A x^k}{\|x^k - \gamma A x^k\|}\right)^T A \frac{x^k - \gamma A x^k}{\|x^k - \gamma A x^k\|} \tag{4.19}$$

Пусть x^* - стационарная точка. Тогда для нее верно, что

$$(\nabla f(x^*), x - x^*) = (Ax^*, x - x^*)\ \forall x \in S. \tag{4.20}$$

Это условие эквивалентно следующему:

$$x^* = P_S(x^* - \gamma A x^*)\ \forall \gamma > 0. \tag{4.21}$$

Действительно, исходя из геометрического смысла: (4.20) эквивалентно тому, что

$S \cap Q = \{x \in \mathbb{R}^n : (\nabla f(x^*), x - x^*) < 0\} = \emptyset$. То есть множество направлений локального убывания не пересекается с множеством S. Допустим, что $x^* \in riS$ (относительная внутренность). В таком случае $\nabla f(x^*) = 0$ и $x^* = P_S(x^* - \gamma\nabla f(x^*)) = P_S(x^*) = x^*$. Пусть $x^* \in clS \setminus riS$. Предположим, что утверждение неверно. Тогда $\exists y \in S : y \neq x^*$ и $y = P_S(x^* - \gamma\nabla f(x^*)$. Тогда $(\nabla f(x^*), y - x^*) = (\nabla f(x^*), P_S(x^* - \gamma\nabla f(x^*) - x^*) \overset{(*)}{<} (\nabla f(x^*), x^* - \gamma\nabla f(x^*) - x^*) = -\gamma(\nabla f(x^*), \nabla f(x^*)) < 0$. Неравенство при использовании липшицевости $(*)$ строгое, в силу структуры множества Q. Это означает, что $y \in Q$, то есть $y \notin S$ - противоречие.

Итак, воспользуемся (4.21):

$$\|x^{k+1} - x^*\| = \|P_S(x^k - \gamma_k A x^k) - P_S(x^* - \gamma_k A x^k)\| \leq$$
$$\leq \|x^k - \gamma_k A x^k - x^* + \gamma_k A x^k\| = \|(E + \gamma_k A)(x^k - x^*)\| \leq$$
$$\leq \|x^k - x^*\| \cdot \|E + \gamma_k A\| \leq \|x^k - x^*\| \cdot q.$$

Таким образом $\|x^k - x^*\| \leq \|x^0 - x^*\| q^k$, $q = \underset{0 \leq \gamma \leq \gamma_3}{sup} \|E + \gamma A\|$.

5. Метод сопряженных градиентов и метод тяжелого шарика

Немного поясним смысл этих методов. В методах, описанных выше, никак не использовалась информация о том, что проделывал метод ранее. В следующих методах учитывается предыдущий шаг. Можно провести физическую аналогию с учётом информации с предыдущего шага: добавляется инерция, которая улучшает сходимость.

5.1. Метод тяжелого шарика

Рассмотрим метод тяжелого шарика для безусловной минимизации:

$$x^{k+1} = x^k - \alpha \nabla f(x^k) + \beta(x^k - x^{k-1}), \quad \alpha > 0, \quad b \geq 0. \tag{5.1}$$

Слагаемое $\beta(x^k - x^{k-1})$ отражает ту самую "инерцию". Физически она проявляется в следующем: метод при больших β ("инерции") будет проскакивать незаметные, то есть неглубокие локальные (а может и не локальные) минимумы и идти дальше. Перейдем к вопросам о сходимости:

Если x^* - невырожденная точка минимума, то есть в ней выполнено достаточное условие точки минимума второго порядка (2.3), помимо этого выполнены следующие условия:

- $0 \leq \beta < 1$
- $0 < \alpha < 2\frac{1+\beta}{L}$
- $lE \leq \nabla^2 f(x^*) \leq LE$

тогда $\exists \varepsilon : \forall x^0, x^1 : \|x^0 - x^*\| < \varepsilon, \ \|x^1 - x^*\| < \varepsilon$ метод сходится к x^* со скоростью геометрической прогрессии. Здесь l и L - наименьшее и наибольшее собственные значения матрицы Гессе соответственно.

В случае, когда мы работаем на сфере, метод стоит переписать следующим образом:

$$x^{k+1} = P_S(x^k - \alpha \nabla f(x^k) + \beta(x^k - x^{k-1})), \quad \alpha > 0, \quad b \geq 0. \tag{5.2}$$

5.2. Метод сопряженных градиентов

Метод запишем сразу для работы на сфере:

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= P_S(x^k - \alpha_k p^k) \\ \alpha_k &= \underset{\alpha}{arminf}(P_S(x^k + \alpha p^k)), \ x_0 \in S \\ p^k &= P_S(-\nabla f(x^k) - \beta_k p^{k-1}), \ p^0 = -P_S(\nabla f(x^0)) \\ \beta_k &= \|P_S(\nabla f(x^k))\|^2 / \|P_S(\nabla f(x^{k-1}))\|^2 \end{aligned} \tag{5.3}$$

6. Метод Ньютона

$$\begin{gathered} x^{k+1} = \underset{x \in S}{argmin} f_k(x) \\ f_k(x) = f(x^k) + (\nabla f(x^k), x - x^k) + \frac{1}{2}(\nabla^2 f(x^k)(x - x^k), x - x^k) \end{gathered} \tag{6.1}$$

Метод сходится при следующих условиях:

- Функция $f(x)$ достигаем минимум на S в точке x^*
- В окрестности x^* функция $f(x)$ - дважды дифференцируема
- Матрица Гессе $\nabla^2 f(x)$ - удовлетворяет условиям Липшица и положительно определена.

Перепишем второе уравнение для квадратичной функции:

$$\begin{aligned}f_k(x) = \frac{1}{2}x^{k^T}Ax^k + b^Tx^k + c + (Ax+b, x-x^k) + \frac{1}{2}A(x-x^k), x-x^k) =\\ = \frac{1}{2}x^{k^T}Ax^k + b^k + c + x^TAx - x^TAx^k + b^Tx -\\ -b^Tx^k + \frac{1}{2}x^TAx - \frac{1}{2}x^{k^T}Ax - \frac{1}{2}x^TAx^k + \frac{1}{2}x^kAx^k =\\ = x^{k^T}Ax^k - \frac{3}{2}x^TAx^k - \frac{1}{2}x^{k^T}Ax + \frac{3}{2}x^TAx + b^Tx + c.\end{aligned}$$

Решить задачу (6.1) можно с помощью метода множителей Лагранжа. Запишем функцию Лагранжа для (6.1):

$$L = x^{k^T}Ax^k - \frac{3}{2}x^TAx^k - \frac{1}{2}x^{k^T}Ax + \frac{3}{2}x^TAx + b^Tx + c + \lambda(\|x\|^2 - 1) \tag{6.2}$$

Условия оптимальности на функцию Лагранжа будут выглядеть так:

$$\begin{aligned}3Ax = 2Ax^k - b + 2\lambda x,\\ \|x\|^2 - 1 = 0.\end{aligned}$$

Помимо этого стоит потребовать положительной определенности матрицы, задающей вторую производную по x функции Лагранжа:

$$\forall s \in \mathbb{S}\ s^TL_{xx}s > 0.$$

Отсюда можно найти требуемый x.

7. Квадратичная функция с линейной частью

7.1. Постановка задачи

Минимизируем квадратичную функцию с линейной частью на единичной сфере.

$$\begin{aligned}\min_{x\in S} f(x) = \frac{1}{2}x^TAx + b^Tx,\\ S = \{x \in \mathbb{R}^n : \|x\|^2 = 1\}.\end{aligned}$$

7.2. Стационарные точки

Выясним какие точки являются стационарные. Запишем функцию Лагранжа:

$$L = \frac{1}{2}x^TAx + b^Tx + \lambda(\|x\|^2 - 1). \tag{7.1}$$

Используем необходимое условие первого порядка:

$$\nabla L = \begin{pmatrix} Ax + b + 2\lambda x \\ \|x\|^2 - 1 \end{pmatrix} = \vec{0}. \tag{7.2}$$

Отсюда следует, что стационарные точки удовлетворяют:

$$\begin{aligned}(A + 2\lambda E)x = -b,\\ x \in S.\end{aligned} \tag{7.3}$$

Теперь займемся вопросом о том, какая стационарная точка дает минимум. Для этого зафиксируем x^*, удовлетворяющий (7.3). Определим множество $Et = Et(x^*) = \{s \in \mathbb{R}^n : (s, 2x^*) = 0\}$. Тогда x^* - точка минимума, если

$$(L_{xx}s, s) = ((A + 2\lambda E)s, s) > 0\ \forall s \in Et. \tag{7.4}$$

Вспомним, что каждое решение СЛАУ представимо в следующем виде:

$$x = y_0 + y, \tag{7.5}$$

где y_0 - решение однородной системы, а y - какое-либо решение неоднородной.

Рассмотрим y_0 подробнее:

$$\begin{aligned}(A + 2\lambda E)y_0 = 0\\ Ay_0 = -2\lambda y_0.\end{aligned} \tag{7.6}$$

Таким образом решение однородной системы - собственный вектор оператора A, соответствующий собственному значению -2λ. Без ограничения общности, будем считать, что это собственный вектор с номером n. Обратимся к (7.4). Поскольку A - симметричный, то существует *ортонормированный базис из собственных векторов* A: $\{h_i\}_{i=1}^n$. Разложим s по собственным векторам: $s = \sum_{i=1}^n \alpha_i h_i$.

$$\begin{aligned}
\Big((A+2\lambda_n)s, s\Big) &= \left((A+2\lambda_n)\sum_{i=1}^{n}\alpha_i h_i, \sum_{i=1}^{n}\alpha_i h_i\right) = \\
&= \left(A\sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i h_i, \sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i h_i\right) + 2\lambda_n\left(\sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i h_i, \sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i h_i\right) + \alpha_n^2((A+\underset{=0}{\lambda_n} E)h_n, h_n) = \\
&= \left(\sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i(-2\lambda_i) h_i, \sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i h_i\right) + 2\lambda_n\left(\sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i h_i, \sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i h_i\right) = \\
&= \left(\sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i(-2\lambda_i) h_i, \sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i h_i\right) + 2\lambda_n\left(\sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i h_i, \sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i h_i\right) = \\
&= -2\sum_{i=1}^{n-1}\lambda_i\alpha_i^2(h_i, h_i) + 2\sum_{i=1}^{n-1}\lambda_n\alpha_i^2(h_i, h_i) = \\
&= 2\sum_{i=1}^{n-1}\alpha_i^2(h_i, h_i)(\lambda_n - \lambda_i) > 0.
\end{aligned} \tag{7.7}$$

Для того, чтобы неравенство было верным, $\lambda_n > \lambda_i \; \forall i = 1, \ldots, n-1$.

Таким образом минимумом является решение (7.3), где λ - наименьшее собственное значение A, помимо этого решение складывается из собственного вектора, отвечающего наименьшему собственному значению A и частного решения системы. И, безусловно, вектор должен быть единичным.

Рассуждения, приведенные выше, дают знание о том, из чего складывается решение, но на деле толку от этого мало. На практике же стоит сразу решать задачу численно, ибо (7.3). Аналитического решения не имеет.