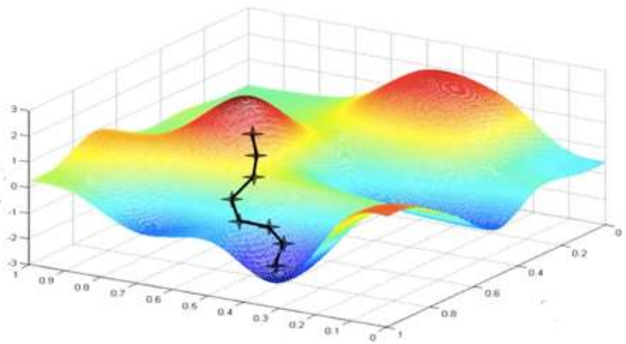
第六章 非线性规划

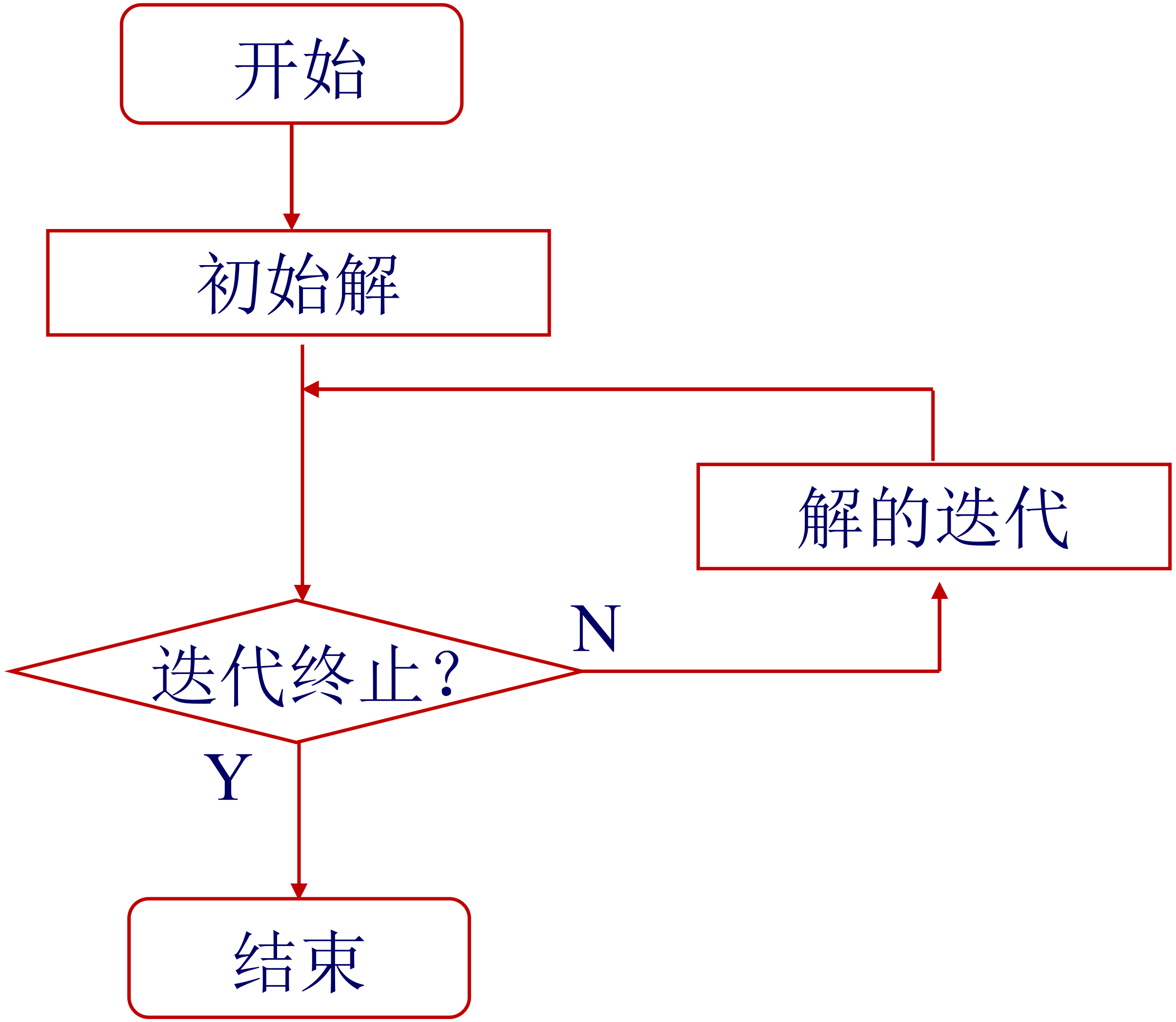
- 非线性规划数值解法
  - 无约束极值问题
    - 下降迭代法
  - 有约束极值问题
    - 可行方向法
    - 制约函数法
    - 逐次逼近法



数值求解的一般思路

- 思想
  - 迭代法
- 方法类型
  - 基于梯度的方法
  - 非梯度的方法（直接法、启发式方法）
- 问题种类
  - 无约束极值问题
  - 有约束极值问题

数值解法的流程图



下降迭代法

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{p}^{(k)} \quad \Longrightarrow \quad f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) < f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

- 迭代方向
  - 基于梯度方法
    - 最速下降法
    - 牛顿法
    - 拟牛顿法
    - 共轭梯度法
  - 直接法
- 步长选择（一维搜索）
  - 基于梯度法
  - 直接法
- 迭代终止准则

1、最速下降法

■ 设计思想：使目标函数值下降

目标函数值：$f(\boldsymbol{x}^{(k)}+\lambda_k \boldsymbol{p}^{(k)})=f(\boldsymbol{x}^{(k)})+\lambda_k \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \boldsymbol{p}^{(k)}+O(\lambda_k)$

可选方向：$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \boldsymbol{p}^{(k)}=\|\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\|_2 \cdot \|\boldsymbol{p}^{(k)}\|_2 \cos\theta<0$ （方向导数）

下降最快方向：$\boldsymbol{p}^{(k)}=-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ 负梯度方向

性质：最优步长时 $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) \perp \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$

优点：计算量小。
缺点：“之”字迭代路径，接近极值点时尤为严重。
应用场合：迭代前期。

极小值点附近的等值面

$$f(\boldsymbol{x})=f(\boldsymbol{x}^*)+\nabla f(\boldsymbol{x}^*)^T(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)+\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)^T\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)+O(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\|^2)$$

极值点： $\nabla f(\boldsymbol{x}^*)=0$ $\Longrightarrow$ $f(\boldsymbol{x})=f(\boldsymbol{x}^*)+\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)^T\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)+O(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\|^2)$

极值点附近等值面

$\boldsymbol{x}^{(k)}\in N(\boldsymbol{x}^*,\varepsilon)$ $f(\boldsymbol{x})=c$ $\Longrightarrow$ $f(\boldsymbol{x})=c\approx f(\boldsymbol{x}^*)+\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)^T\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)$

$\Longrightarrow$ $(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)^T\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)\approx c'=2[c-f(\boldsymbol{x}^*)]$

严格极小点: $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)>0$ $\Longrightarrow$ $\boldsymbol{x}^*$为中心的椭球面

极小点: $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)\geq 0$ $\Longrightarrow$ 降维椭球面

问题：如何加速极值点附近的迭代？

$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{g}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})]$ $\nabla_x \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = \nabla_x \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \nabla_f \boldsymbol{g}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})]$

$\left[\frac{d(\boldsymbol{k}^T \boldsymbol{x})}{d\boldsymbol{x}}\right]^T = \boldsymbol{k}$

$\left[\frac{d\left(\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}\right)}{d\boldsymbol{x}}\right]^T = 2A\boldsymbol{x}$

2、牛顿法

- 设计思想：近似为二次问题。

$$f(\boldsymbol{x}) \approx f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)})^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)})$$

驻点条件 $\Longrightarrow$ $\nabla f(\boldsymbol{x}) \approx \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)}) \approx 0$

迭代公式 $\Longrightarrow$ $\boldsymbol{x}^{(k+1)} \approx \boldsymbol{x}^{(k)} - [\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$

迭代方向 $\Longrightarrow$ $\boldsymbol{p}^{(k)} = -[\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ 牛顿方向

优点：极值点附近收敛速率快。

缺点：计算量大，需要求二阶导数和**Hessian**矩阵逆。

远离极值点时，不一定是下降方向，需采用进一步修正。

应用场合：二次目标函数或极值点附近。

二次函数的极小点

- 设A为对称矩阵，二次函数 $f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}^T \boldsymbol{x} + c$

- 驻点方程： $\nabla f(\bar{\boldsymbol{x}}) = \boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{b} = 0$

□ 有解：$rank\boldsymbol{A} = rank[\boldsymbol{A}\ \boldsymbol{b}]$

□ 无解：$rank\boldsymbol{A} \neq rank[\boldsymbol{A}\ \boldsymbol{b}]$

例：抛物面

$f(\boldsymbol{x}) = x_1^2 + x_2 + c$

无界解（无驻点解）

➢ **Hessian**矩阵：$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}$

(1) $\boldsymbol{A} > 0$ 椭球面： $\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ 唯一极小点

(2) $\boldsymbol{A} \geq 0$ & $rank\boldsymbol{A} < n$ 椭球柱面/平行超平面：

$f(\boldsymbol{x}) = x_1^2$ 无穷多个极小点

(3) $\boldsymbol{A} \leq 0$ （降维）椭球面： 无界解（极大点）

(4) $\boldsymbol{A}$不定 （高维）马鞍面： $f(\boldsymbol{x}) = x_1^2 - x_2^2$ 无界解（鞍点解）

问题：如何修正牛顿法的迭代方向？

Levenberg-Marquardt修正

- 设计思想：将 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ 变为正定矩阵，保证$\boldsymbol{p}$是下降方向

L-M修正方向： $\boldsymbol{p}^{(k)} = -[\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \mu_k \boldsymbol{I}]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - [\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \mu_k \boldsymbol{I}]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

$\mu_k > |\lambda_{\min}^{-}|$ $\lambda^{-}_{\min}$为 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})$最小负特征值

$\mu \to 0$： 牛顿法

$\mu \to \infty$： 最速下降法

如果不求特征值，可以从较小的μ值试探

3、拟牛顿法

- 设计思想：数值法求**Hessian**矩阵的逆。

$$f(x)\approx f(x^{(k+1)})+\nabla f(x^{(k+1)})^T(x-x^{(k+1)})+\frac{1}{2}(x-x^{(k+1)})^T\nabla^2 f(x^{(k+1)})(x-x^{(k+1)})$$

在$x^{(k+1)}$展开

求导

$$\nabla f(x)\approx \nabla f(x^{(k+1)})+\nabla^2 f(x^{(k+1)})(x-x^{(k+1)})$$

$x=x^{(k)}$

$$\nabla f(x^{(k)})\approx \nabla f(x^{(k+1)})+\nabla^2 f(x^{(k+1)})(x^{(k)}-x^{(k+1)})$$

Hessian矩阵的数值关系

$$\nabla f(x^{(k)})-\nabla f(x^{(k+1)})\approx \nabla^2 f(x^{(k+1)})(x^{(k)}-x^{(k+1)})$$

Hessian逆的数值关系

$$x^{(k+1)}-x^{(k)}\approx[\nabla^2 f(x^{(k+1)})]^{-1}[\nabla f(x^{(k+1)})-\nabla f(x^{(k)})]$$

$$\delta_k \triangleq x^{(k+1)}-x^{(k)}$$

$$H_k\approx\left[\nabla^2 f(x^{(k)})\right]^{-1}$$

$$\gamma_k \triangleq \nabla f(x^{(k+1)})-\nabla f(x^{(k)})$$

$$\delta_k = H_{k+1}\gamma_k$$

拟牛顿条件

变尺度法

◆ 目标：数值法求解**Hessian矩阵的逆**

由**Davidon**提出，**Fletcher**和**Powell**改进，也称**DFP算法**。

迭代方向：

$$\boldsymbol{p}^{(k)} = -\boldsymbol{H}_k \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

$$\boldsymbol{p}^{(k)} = -[\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

$$\boldsymbol{H}_{k+1} = \boldsymbol{H}_k + \Delta \boldsymbol{H}_k \qquad \boldsymbol{H}_1 = \boldsymbol{I}$$

$$\Delta \boldsymbol{H}_k = \frac{\boldsymbol{\delta}_k \boldsymbol{\delta}_k^T}{\boldsymbol{\delta}_k^T \boldsymbol{\gamma}_k} - \frac{\boldsymbol{H}_k \boldsymbol{\gamma}_k \boldsymbol{\gamma}_k^T \boldsymbol{H}_k}{\boldsymbol{\gamma}_k^T \boldsymbol{H}_k \boldsymbol{\gamma}_k}$$

$$\boldsymbol{\delta}_k \triangleq \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}$$

$$\boldsymbol{\gamma}_k \triangleq \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

可以证明：1、$\boldsymbol{H}_k$满足拟牛顿条件，为Hessian矩阵的逆。

2、当目标函数为严格凸二次函数时，可经有限步迭代收敛于极值（二次终止性）。为什么不是1步？

4、共轭梯度法

■ 共轭方向定义：若A正定，且$p^{(1)}$和$p^{(2)}$满足$p^{(1)T} A p^{(2)}=0$，则$p^{(1)}$、$p^{(2)}$关于A共轭。（共轭是正交概念的推广）

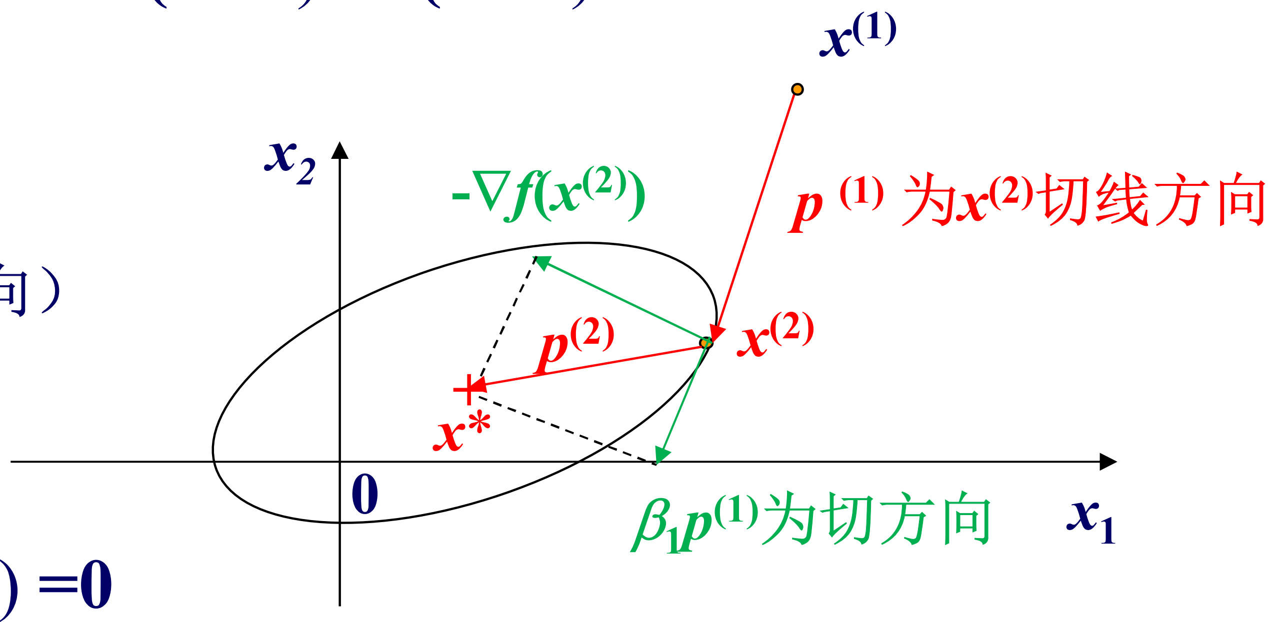
$\Rightarrow$若$p^{(1)}$、$p^{(2)}$称关于A共轭，则$p^{(1)}$和$Ap^{(2)}$正交。

■ 二次严格凸函数：$f(x)=1/2*(x-x^*)^T A\ (x-x^*)$

$\Rightarrow$ $\nabla f(x)=A(x-x^*)$

$p^{(1)} := p_t$（$x^{(2)}$点切线方向）

$p^{(2)} := -(x^{(2)}-x^*)$



$\Rightarrow$ $p^{(1)T}Ap^{(2)} = -p_t^{\ T}\nabla f(x^{(2)}) =0$

问题：如何保证$p^{(1)}$为$x^{(2)}$的切线方向？

Fletcher-Reeves法

■ 设计思想：利用梯度构造共轭方向进行迭代

迭代方向： $\boldsymbol{p}^{(k+1)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) + \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)}$ $\quad \boldsymbol{p}^{(1)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(1)})$

$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda_k^* \boldsymbol{p}^{(k)}$

将$\boldsymbol{p}^{(k+1)}$代入 共轭方程 $\boldsymbol{p}^{(k)T} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \boldsymbol{p}^{(k+1)} = 0$

$$\Rightarrow \quad -\boldsymbol{p}^{(k)T} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) + \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)T} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \boldsymbol{p}^{(k)} = 0$$

$$\Rightarrow \quad \beta_k = \frac{\boldsymbol{p}^{(k)T} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})}{\boldsymbol{p}^{(k)T} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \boldsymbol{p}^{(k)}}$$

Fletcher-Reeves法

注意： **n>2时，$\boldsymbol{p}^{(1)}$ 的共轭方向不止1个， $-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(2)})+\beta_1 \boldsymbol{p}^{(1)}$ 未必指向$\boldsymbol{x}^*$**

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda_k^* \boldsymbol{p}^{(k)}$$

二次终止性

- 共轭方向组：若A是n阶正定矩阵，且$\boldsymbol{p}^{(1)}, \boldsymbol{p}^{(2)} \ldots \boldsymbol{p}^{(k)}$为$k$个关于$A$两两共轭的方向，$k \le n$，则称这组方向关于$A$共轭。

◆ 性质1：k≤n，则A的k个非零共轭方向线性无关。（反证法）

线性相关 $\sum_{i=1}^{k} \alpha_i \boldsymbol{p}^{(i)} = 0 \xrightarrow{1\le \forall j \le k} \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \boldsymbol{p}^{(i)T} A \boldsymbol{p}^{(j)} = \alpha_j \boldsymbol{p}^{(j)T} A \boldsymbol{p}^{(j)} = 0 \xrightarrow{A正定} \alpha_j = 0$ 矛盾

◆ 性质2：若$f(x)$为严格凸二次函数，则 $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})^T \boldsymbol{p}^{(j)} = 0 \quad 1 \le j \le k \le n$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) = A\boldsymbol{x}^{(k+1)} + \boldsymbol{b} = A\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{b} + \lambda_k^* A\boldsymbol{p}^{(k)} = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \lambda_k^* A\boldsymbol{p}^{(k)} \Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})^T \boldsymbol{p}^{(k-1)} = 0$$

- 定理：沿着A的n个非零共轭方向依次做一维最优步长搜索，则最多经过n步可找到二次严格凸函数的极小值。

性质2 $\Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})^T \boldsymbol{p}^{(j)} = 0, \; 1 \le j \le k \le n \Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}^{(n+1)})^T \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{p}^{(i)} \right) = 0$

性质1 $\Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}^{(n+1)}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{p}^{(i)}$

$\Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}^{(n+1)}) = \boldsymbol{0}$

等价公式

- 目的：避免求取二阶导数

共轭梯度法迭代方向：

$$\boldsymbol{p}^{(k+1)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) + \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)}$$

Crowder-Wolfe公式：

$$\beta_k = \frac{\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})^T [\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})]}{\boldsymbol{p}^{(k)T} [\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})]}$$

Fletcher-Reeves公式：

$$\beta_k = \frac{\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})^T \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})}{\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})}$$

Polak-Ribiere公式：

$$\beta_k = \frac{\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})^T [\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})]}{\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})}$$

自动重置

- 目的：保证一般$f(x)$下算法的收敛性

$$\beta_k = \frac{\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})^T[\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})]}{\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})}$$

Polak-Ribiere公式：

$$\beta_k \leftarrow \max\{\beta_k, 0\}$$

自动重置

$$\boldsymbol{p}^{(k+1)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) + \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)}$$

共轭梯度法的性能介于最速下降法和牛顿法之间！

下降迭代法

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{p}^{(k)} \quad \Longrightarrow \quad f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) < f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

- 迭代方向
  - 基于梯度方法
    - 最速下降法
    - 牛顿法
    - 拟牛顿法
    - 共轭梯度法
  - 直接法
- 步长选择（一维搜索）
  - 基于梯度法
  - 直接法
- 迭代终止准则

最优迭代步长

- 设计思想：沿搜索方向的目标函数值最小

$$\lambda_k = \arg\min_{\lambda} f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{p}^{(k)})$$

- 基于梯度方法
- 直接法
  - **Fibonacci**斐波那契法
  - **0.618**法

基于梯度方法

◆ 目标： $\lambda_k = \arg\min_{\lambda} f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{p}^{(k)})$

$$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{p}^{(k)}) = f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \lambda \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \boldsymbol{p}^{(k)} + \frac{1}{2}\lambda^2 \boldsymbol{p}^{(k)T} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \boldsymbol{p}^{(k)} + O(\lambda^2)$$

极小值

$$\Rightarrow \quad \frac{df(\boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{p}^{(k)})}{d\lambda} \approx \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \boldsymbol{p}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{p}^{(k)T} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \boldsymbol{p}^{(k)} = 0$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\lambda^* = \frac{-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \boldsymbol{p}^{(k)}}{\boldsymbol{p}^{(k)T} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \boldsymbol{p}^{(k)}}}$$

特点：**1**、解析解，不需迭代

2、需求**Hessian**矩阵

3、$\boldsymbol{x}^{(k)}+\lambda \boldsymbol{p}^{(k)}$未必是极小值

$h(\boldsymbol{x}) = g[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})]$ $\nabla_x \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = \nabla_x \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \nabla_f \boldsymbol{g}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})]$

最速下降法的性质

- 性质：最优步长时 $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) \perp \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$
- 证明

$$
\begin{aligned}
& \frac{df(\boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{p}^{(k)})}{d\lambda} \\
&= \left(\frac{df(\boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{p}^{(k)})}{d(\boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{p}^{(k)})} \right)^T \frac{d(\boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{p}^{(k)})}{d\lambda} \\
&= \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})^T \boldsymbol{p}^{(k)} \\
&= -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})^T \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

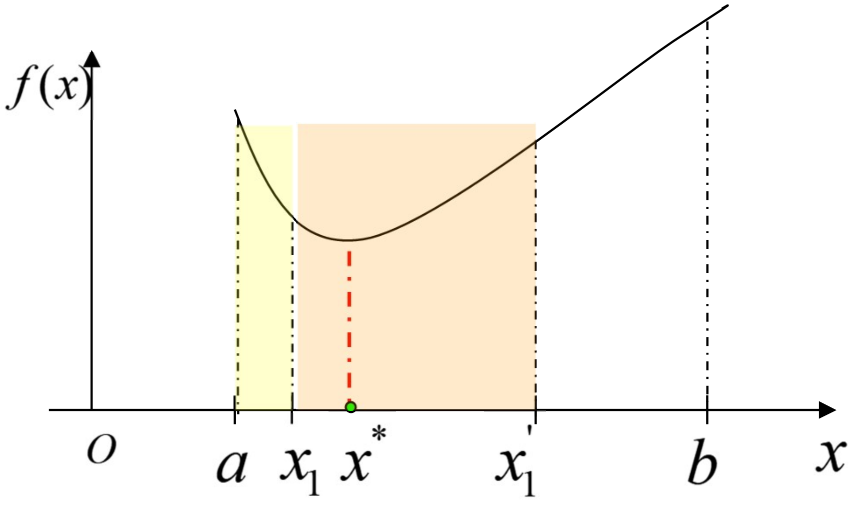
下降迭代法

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{p}^{(k)} \quad \Longrightarrow \quad f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) < f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

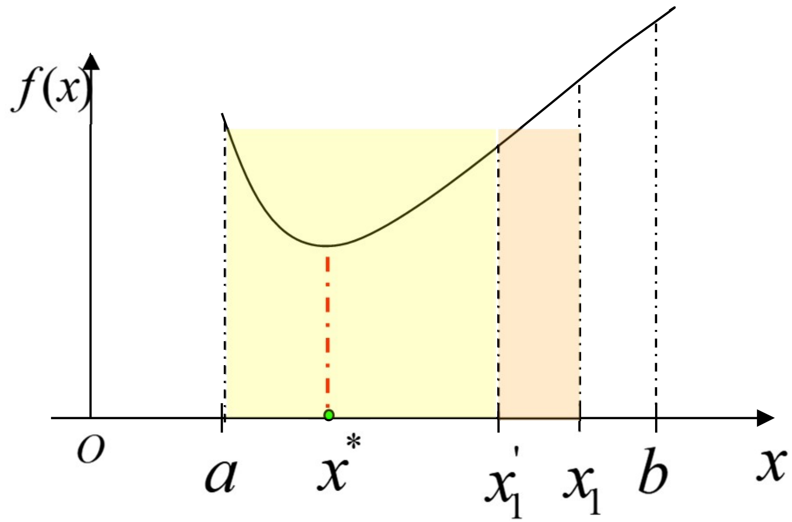
- 迭代方向
  - 基于梯度方法
    - 最速下降法
    - 牛顿法
    - 拟牛顿法
    - 共轭梯度法
  - 直接法
- 步长选择（一维搜索）
  - 基于梯度法
  - 直接法
- 迭代终止准则

分数法

- 假设：$f(x)$在$[a,b]$区间内单峰或无峰。假设是否合理？
- 特点：取x_1，$x'_1 \in (a, b)$，将$[a,b]$分为3个区间。则最小值x^*必定位于x_1、x'_1两点中目标函数值较小一点所在的两个相邻区间内。
- 算法思想：将x_1、x'_1两点中目标函数值大的点作为新的边界，不断缩小最优值所在区间的范围。



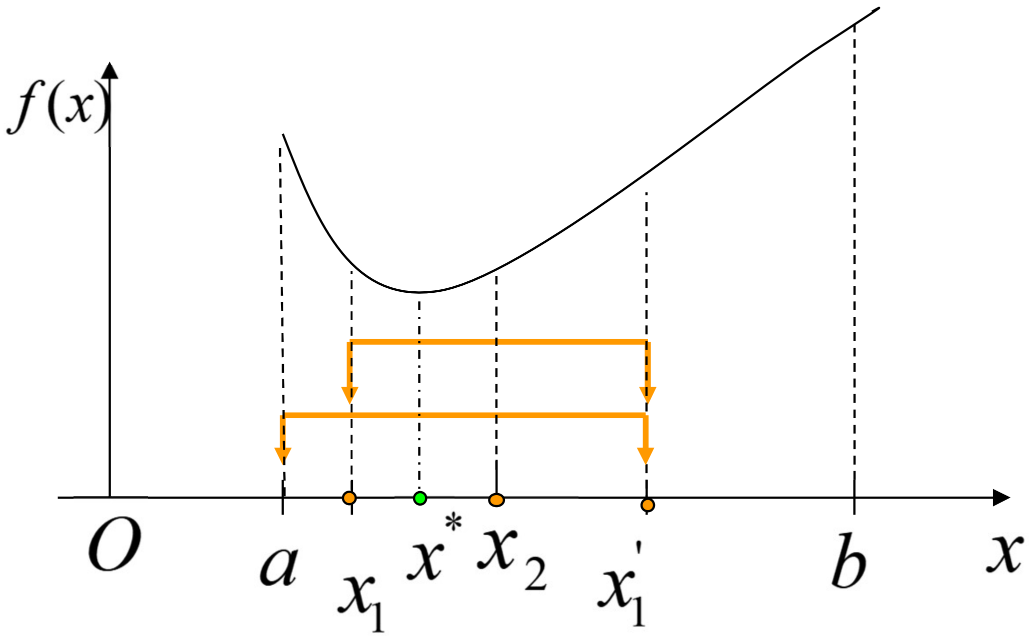
$x^* \in [a, x'_1]$



$x^* \in [a, x_1]$

搜索点选取

- 目标：计算量最小
- 技巧：当前目标区的搜索点可直接用于下一次搜索



单峰函数

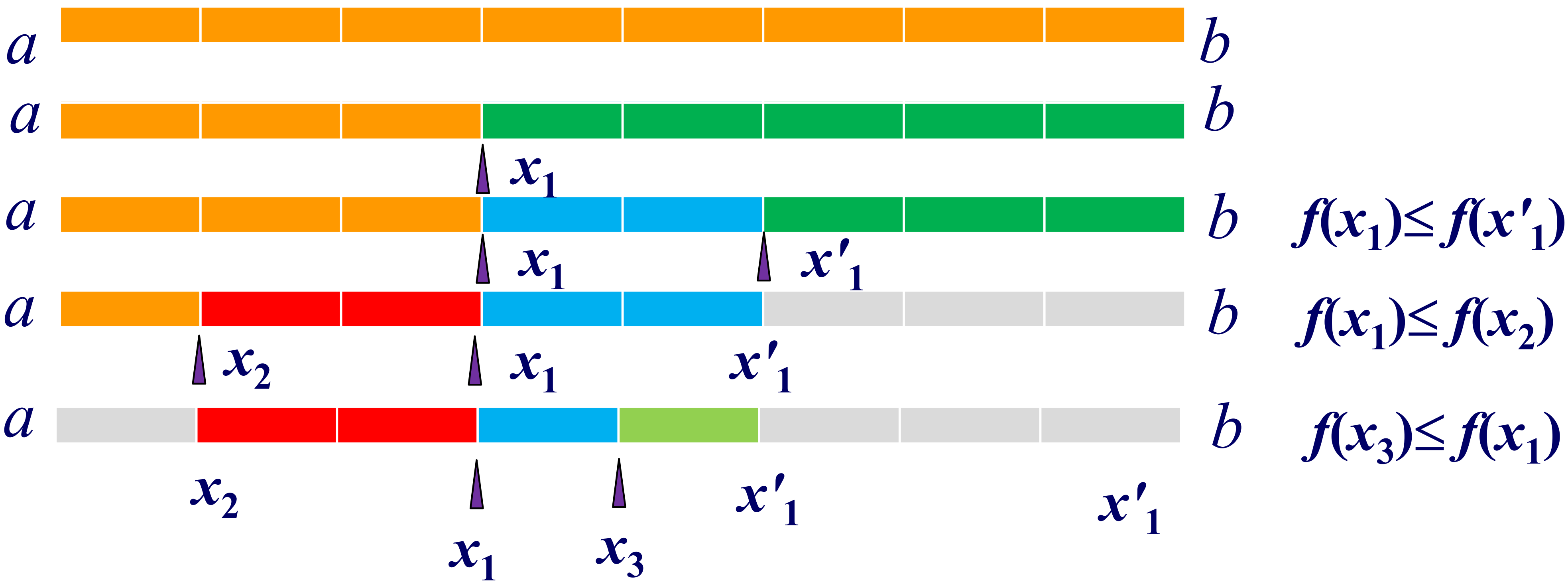
问题：如果单峰点是最大值会怎样？

斐波那契法

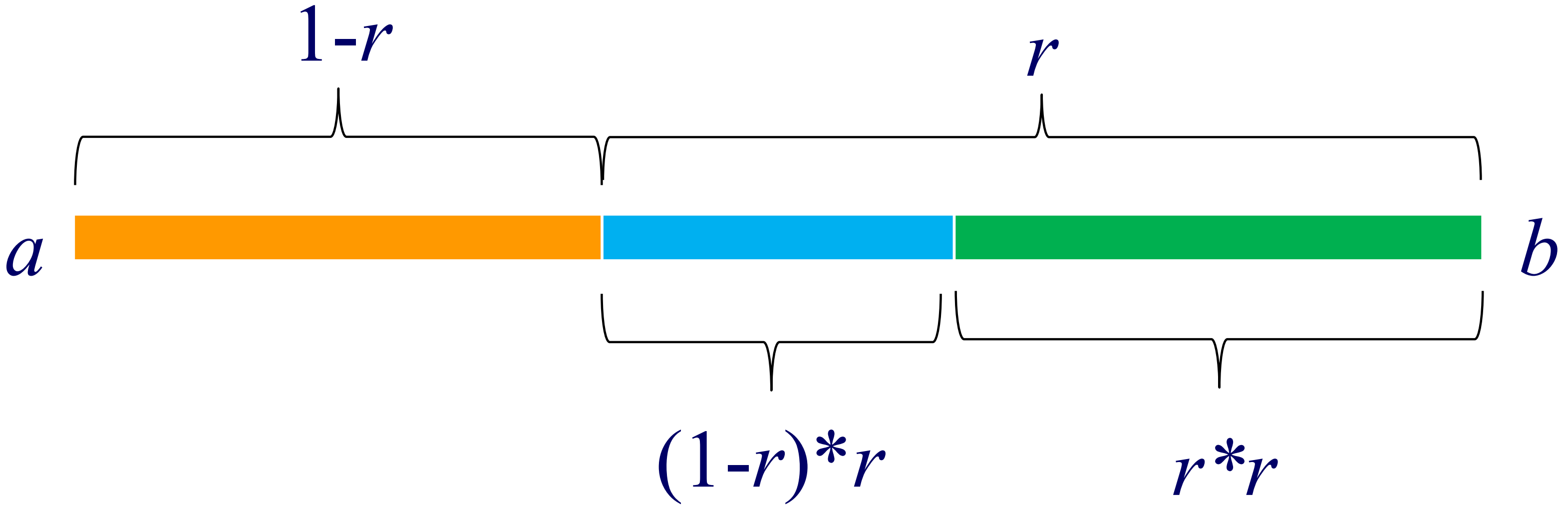
- **Fibonacci数列**

$$F_n = F_{n-1} + F_{n-2}, \quad n \geq 2 \quad F_0 = 1 \quad F_1 = 1$$

n	0	1	2	3	4	5
Fn	1	1	2	3	5	8



0.618法（黄金分割点法）



$r*r=1-r \Rightarrow r^2+r-1=0 \Rightarrow r=0.618$

可以证明：$\lim\limits_{n\to\infty}\frac{F_{n-1}}{F_n}=r=0.618$

下降迭代法

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{p}^{(k)} \quad \Rightarrow \quad f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) < f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

- 迭代方向
  - 基于梯度方法
    - 最速下降法
    - 牛顿法
    - 拟牛顿法
    - 共轭梯度法
  - 直接法
- 步长选择（一维搜索）
  - 基于梯度法
  - 直接法
- 迭代终止准则

迭代终止准则

- 迭代收敛准则
  - 绝对误差准则

$$\| \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)} \| \le \varepsilon_1 \qquad | f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - f(\boldsymbol{x}^{(k)}) | \le \varepsilon_2$$

  - 相对误差准则

$$\frac{\| \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)} \|}{\| \boldsymbol{x}^{(k)} \|} \le \varepsilon_3 \qquad \frac{| f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - f(\boldsymbol{x}^{(k)}) |}{| f(\boldsymbol{x}^{(k)}) |} \le \varepsilon_4$$

- 梯度模准则**(first-order optimality measure)**

$$\| \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \| \le \varepsilon_5 \qquad \frac{\| \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \|}{\| \nabla f(\boldsymbol{x}^{(0)}) \|} \le \varepsilon_6$$

完整算法举例

1、设置初始点$\boldsymbol{x}^{(1)}$、迭代终止阈值ε，k=1；

2、如果 $\|\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\| \le \varepsilon$，$\boldsymbol{x}^{*}=\boldsymbol{x}^{(k)}$，迭代结束。

3、否则继续迭代

$$\boldsymbol{p}^{(k)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

最速下降法

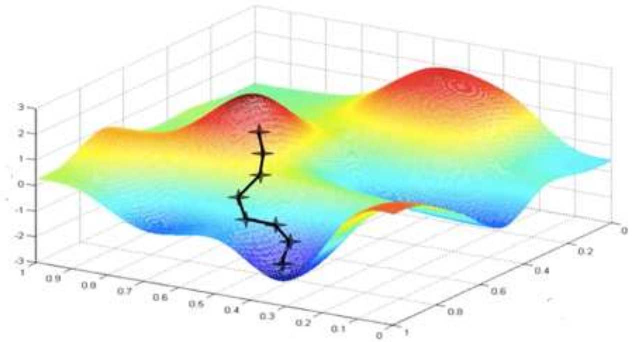
$$\lambda_k = \arg\min_{\lambda} f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{p}^{(k)})$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{p}^{(k)}$$

$k \leftarrow k+1$，返回第2步。

第六章 非线性规划

- 非线性规划数值解法
  - 无约束极值问题
    - 下降迭代法
  - 有约束极值问题
    - 可行方向法
    - 制约函数法
    - 逐次逼近法



约束极值问题的数值解法

- 可行方向法
  - **Zoutendijk**可行方向法
- 制约函数法
  - 外点法
  - 内点法
  - 混合法
- 逐次逼近法（近似规划法）
  - **SLP (Sequential Linear Programming)**
  - **SQP (Sequential Quadratic Programming)**

Zoutendijk可行方向法

- 可行下降方向

$$\begin{cases} \nabla f(\boldsymbol{x}^{k})^T \boldsymbol{p} < 0 \\ -\nabla g_j(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \boldsymbol{p} < 0 \quad j \in J(\boldsymbol{x}^{k}) \end{cases} \quad \overset{(1)}{\Longleftrightarrow} \quad \begin{cases} \nabla f(\boldsymbol{x}^{k})^T \boldsymbol{p} \le \eta \\ -\nabla g_j(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \boldsymbol{p} \le \eta \\ \eta < 0 \end{cases}$$

$$\overset{(2)}{\Longleftrightarrow} \quad \boxed{\begin{aligned} &\min \eta \\ s.t. \quad &\nabla f(\boldsymbol{x}^{k})^T \boldsymbol{p} \le \eta \\ &-\nabla g_j(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \boldsymbol{p} \le \eta \quad j \in J(\boldsymbol{x}^{k}) \\ &-1 \le \boldsymbol{p} \le 1 \end{aligned}}$$

η<0: 可行下降方向

η=0: 迭代结束！

η>0: 不会出现

问题：Zoutendijk法迭代结束时找到的一定是极小点吗？

约束极值问题的数值解

- 可行方向法
  - **Zoutendijk**可行方向法
- 制约函数法
  - 外点法
  - 内点法
  - 混合法
- 逐次逼近法（近似规划法）
  - **SLP (Sequential Linear Programming)**
  - **SQP (Sequential Quadratic Programming)**

制约函数法

- 思想：化为无约束极值问题求解，
- 名称：也称为序列无约束极小化技术，**SUMT(Sequential Unconstrained Minimization Technique)**
- 制约函数法的种类
  - 外点法
    - 从可行域外部逼近极值
  - 内点法
    - 从可行域内部逼近极值
  - 混合法
    - 内点法和外点法的结合

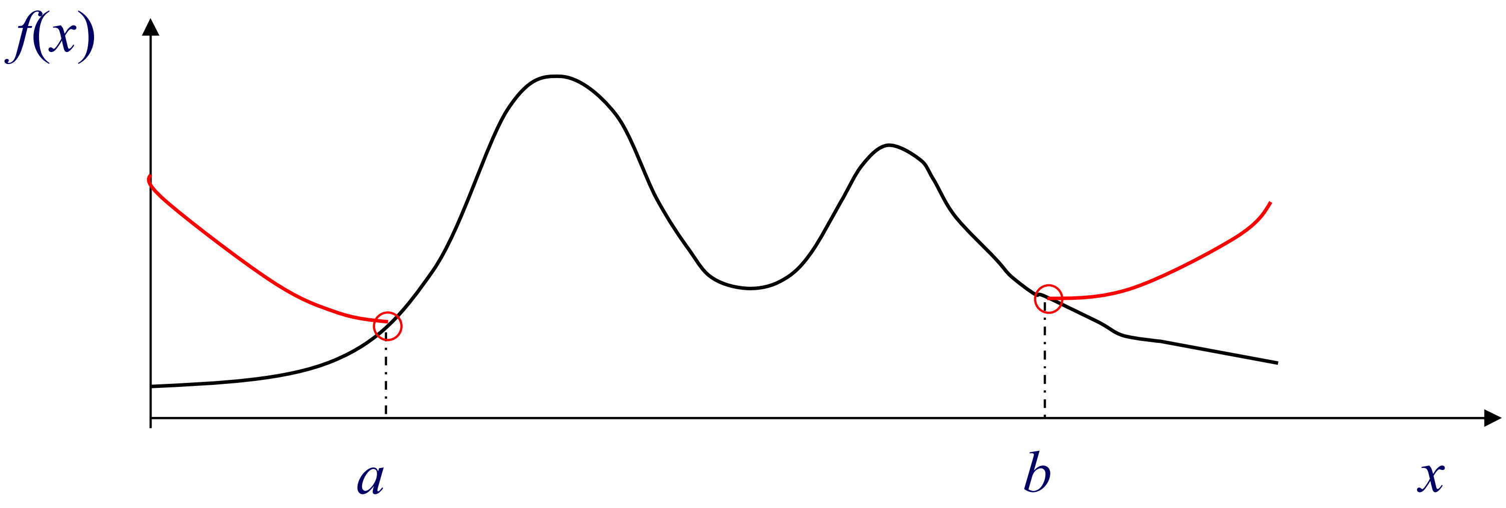
1、外点法

- 思想：构造罚函数，惩罚可行域外的迭代点

$$\min P(\boldsymbol{x}, M) = f(\boldsymbol{x}) + M\sum_{i=1}^{m} h_i^2(\boldsymbol{x}) + M\sum_{j=1}^{l}[\min(0, g_j(\boldsymbol{x}))]^2$$

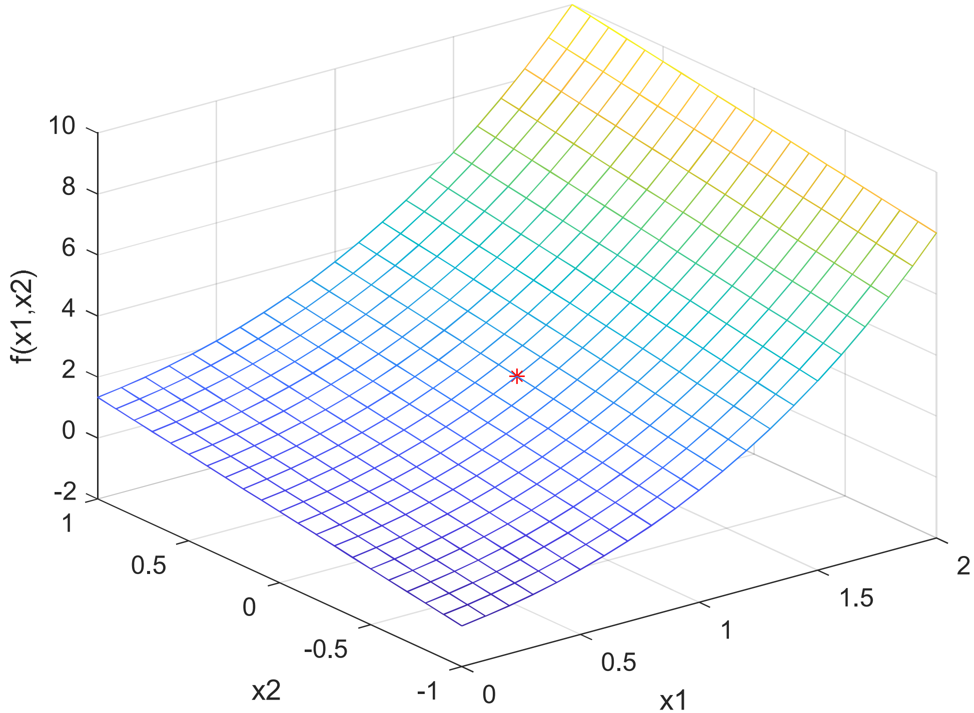
Courant罚函数

M*>0**为罚因子，当M***趋向无穷时，***x****为原问题约束极值解。



解析分析举例

$$\min f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{3}(x_1 + 1)^3 + x_2$$



s.t. $x_1 - 1 \geq 0$

$x_2 \geq 0$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} (x_1 + 1)^2 \\ 1 \end{bmatrix} \neq 0$$

没有内点极值

求解

构造罚函数：

$$P(\boldsymbol{x}, M) = \frac{1}{3}(x_1 + 1)^3 + x_2 + M[\min(0, x_1 - 1)]^2 + M[\min(0, x_2)]^2$$

根据一阶驻点条件，有

$$\frac{\partial P}{\partial x_1} = (x_1 + 1)^2 + 2M[\min(0, x_1 - 1)] = 0$$

$$\frac{\partial P}{\partial x_2} = 1 + 2M[\min(0, x_2)] = 0$$

如果$x_1 \geq 1 \Rightarrow x_1 = -1$，矛盾

如果$x_2 \geq 0 \Rightarrow 1 = 0$，不成立

所以考虑$x_1 < 1$, $x_2 < 0$区域的驻点。（可行域外的点）

$$\frac{\partial P}{\partial x_1} = (x_1 + 1)^2 + 2M(x_1 - 1) = 0$$

$$\frac{\partial P}{\partial x_2} = 1 + 2Mx_2 = 0$$

可得：

$$\begin{cases} x_1 = -1 - M \pm \sqrt{M^2 + 4M} \\ x_2 = -\dfrac{1}{2M} \end{cases} \xRightarrow{M \to +\infty} \begin{cases} x_1^* = 1 \\ x_2^* = 0 \end{cases}$$

$$\nabla^2 P(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 2(x_1 + 1) + 2M & 0 \\ 0 & 2M \end{bmatrix} > 0$$

故为极小值

外点法的数值解法

- 构造罚函数

$$\min P(\boldsymbol{x}, M_k) = f(\boldsymbol{x}) + M_k P(\boldsymbol{x}) \qquad P(\boldsymbol{x}) \triangleq \sum_{i=1}^{m} h_i^2(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{l} [\min(0, g_j(\boldsymbol{x}))]^2$$

1、 取M_1>0（通常M_1=1），允许误差ε>0，k:=1

2、 求min$P$(x,M_k)，得$x^{(k)}$。

3、 if $M_k P(x^{(k)}) > \varepsilon$

　　$M_{k+1}=cM_k$ (c>1，通常取5或10），

　　k:= k+1

　　转第2步继续迭代。

　else

　　$x^*=x^{(k)}$

　　迭代结束

$$\nabla f(\boldsymbol{X}^*) - \sum_{i=1}^{m} \gamma_i^* \nabla h_i(\boldsymbol{X}^*) - \sum_{g_j(\boldsymbol{X}^*)=0} \mu_j^* \nabla g_j(\boldsymbol{X}^*) = \boldsymbol{0}$$

外点法收敛性分析

- 罚函数

$$P(\boldsymbol{x}, M_k) = f(\boldsymbol{x}) + M_k \sum_{i=1}^{m} h_i^2(\boldsymbol{x}) + M_k \sum_{j=1}^{l} [\min(0, g_j(\boldsymbol{x}))]^2$$

- 第**k**步罚函数的局部极小值满足

$$\nabla P(\boldsymbol{x}^{(k)}, M_k) = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + 2M_k \sum_{i=1}^{m} h_i(\boldsymbol{x}^{(k)}) \nabla h_i(\boldsymbol{x}^{(k)}) + 2M_k \sum_{g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) \le 0} g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) \nabla g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) = 0$$

$$\nabla P(\boldsymbol{x}^{(k)}, M_k) = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i(k) \nabla h_i(\boldsymbol{x}^{(k)}) - \sum_{g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) \le 0} \mu_j(\boldsymbol{x}_k) \nabla g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) = 0$$

$$\lambda_i(k) = -2M_k h_i(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

$$\mu_i^*(k) = -2M_k g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) \ge 0$$

- $\boldsymbol{x}^{(k)}$迭代收敛时

$$\nabla P(\boldsymbol{x}^*, M) = \nabla f(\boldsymbol{x}^*) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* \nabla h_i(\boldsymbol{x}^*) - \sum_{g_j(\boldsymbol{x}^*) \to 0} \mu_j^* \nabla g_j(\boldsymbol{x}^*) = 0$$

KKT条件！

如果$\boldsymbol{x}^{(k)}$是$\min P(\boldsymbol{x}, M_k)$的全局极小值，则外点法收敛到全局最优解！

外点法特点

1、只有$M_k \to \infty$，才保证$\lambda^*(k) \to \lambda^*$、$\mu^*(k) \to \mu^*$， $x^{(k)} \to x^*$。

2、M_k过大，有可能导致Hessian矩阵病态（条件数很大），极小值将位于狭长的深谷，导致目标函数值对搜索方向敏感。

$$cond(\boldsymbol{H}) = \|\boldsymbol{H}\| \cdot \|\boldsymbol{H}^{-1}\| \geq \lambda_{\max} / \lambda_{\min}$$

3、改进策略

1）设计**精确罚函数**（例如l_1罚函数），令有限M_k的$P(x,M_k)$驻点恰好为x^*。

2）构造**增广Lagrange函数**对罚函数进行修正，在有限M_k时也能使$x^{(k)}$逼近最优解x^*。

2、内点法

- 算法思想：构造障碍函数，阻止迭代点离开可行域。

$$\min_{x\in R_0} \bar{P}(\boldsymbol{x},r)=f(\boldsymbol{x})+r\sum_{j=1}^{l}\frac{1}{g_j(\boldsymbol{x})}$$

或

$$\min_{x\in R_0} \bar{P}(\boldsymbol{x},r)=f(\boldsymbol{x})-r\sum_{j=1}^{l}\log g_j(\boldsymbol{x})$$

其中 $R_0=\{\boldsymbol{x}\mid g_j(\boldsymbol{x})>0, j=1,2,\cdots,l\}$ 严格内点

r>0为障碍因子，其在迭代中的取值会不断减小，趋向于**0**，使$\boldsymbol{x}$可趋向于边界。

解析分析举例

$$\min f(\boldsymbol{x}) = x_1 + x_2$$

s.t. $-x_1^2 + x_2 \geq 0$

$x_1 \geq 0$

求解

构造障碍函数：

$$\overline{P}(\boldsymbol{x},r)=x_1+x_2-r\cdot[\log(-x_1^2+x_2)+\log(x_1)]$$

根据驻点一阶条件，有

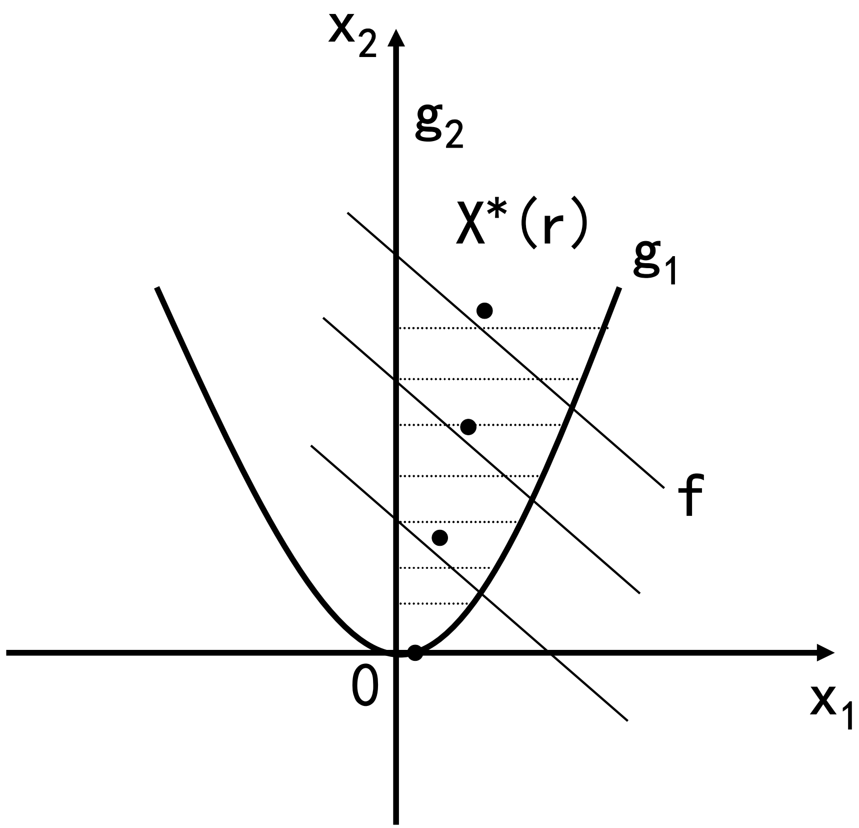
$$\frac{\partial\overline{P}}{\partial x_1}=1-r\cdot\frac{-2x_1}{-x_1^2+x_2}-r\cdot\frac{1}{x_1}=0$$

$$\frac{\partial\overline{P}}{\partial x_2}=1-r\cdot\frac{1}{-x_1^2+x_2}=0$$

求解得到：

$$x_1 = \frac{\sqrt{1+8r}-1}{4}$$

$$x_2 = \frac{3}{2}r - \frac{\sqrt{1+8r}-1}{8}$$



$r \to \mathbf{0}$时，有

$$\begin{cases} x_1^* = 0 \\ x_2^* = 0 \end{cases}$$

数值解法

- 构造障碍函数

$$\min_{X\in R_0} \overline{P}(\boldsymbol{x},r_k)=f(\boldsymbol{x})-r_k\sum_{j=1}^{l}\log g_j(\boldsymbol{x})$$

1、 取$r_1>0$（通常$r_1=1$），允许误差$\varepsilon>0$，$k:=1$

2、 求$\min P(x,r_k)$，得$x^{(k)}\in R_0$（须保证是内点）

3、 if $\left| r_k\sum_{j=1}^{l}\log g_j(\boldsymbol{x}^{(k)})\right| > \varepsilon$

$r_{k+1}=r_k/c$，（c>1,通常取5或10）

$k:=k+1$转第2步重新求解。

else

$x^*=x^{(k)}$

停止迭代。

内点法收敛性分析

- 障碍函数

$$\bar{P}(\boldsymbol{x}, r_k) = f(\boldsymbol{x}) - r_k \sum_{j=1}^{l} \log g_j(\boldsymbol{x})$$

- 第k步障碍函数局部极小值满足

$$\nabla \bar{P}(\boldsymbol{x}^{(k)}, r_k) = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) - r_k \sum_{j=1}^{l} \frac{1}{g_j(\boldsymbol{x}^{(k)})} \nabla g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) = 0$$

$$\nabla \bar{P}(\boldsymbol{x}^{(k)}, r_k) = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) - \sum_{j=1}^{l} \mu_j(k) \nabla g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) = 0 \qquad \mu_j(k) = \frac{r_k}{g_j(\boldsymbol{x}^{(k)})} \geq 0$$

- $\boldsymbol{x}_k$*迭代收敛时

KKT条件！

$$\nabla \bar{P}(\boldsymbol{x}^*, r) = \nabla f(\boldsymbol{x}^*) - \sum_{j=1}^{l} \mu_j^* \nabla g_j(\boldsymbol{x}^*) = 0 \qquad \mu_j^* = \frac{r}{g_j(\boldsymbol{x}^*)} \geq 0 \qquad \mu_j^* g_j(\boldsymbol{x}^*) = r \to 0$$

如果$\boldsymbol{x}^{(k)}$是min$P(x,r_k)$的全局极小值，则内点法收敛到全局最优解！

混合法

- 内点法不能处理等式约束问题
- 外点法不能处理目标函数在可行域外不存在的问题
- 对等式约束和当前不被满足的不等式约束，使用罚函数法，对满足的不等式约束，使用障碍函数法。

约束极值问题的数值解

- 可行方向法
  - **Zoutendijk**可行方向法
- 制约函数法
  - 外点法
  - 内点法
  - 混合法
- 逐次逼近法（近似规划法）
  - **SLP (Sequential Linear Programming)**
  - **SQP (Sequential Quadratic Programming)**

逐次逼近法

- 思想：**Taylor**展开近似为简单规划问题
- 序贯线性规划法**SLP (Sequential Linear Programming)**
- 序贯二次规划法**SQP (Sequential Quadratic Programming)**

一般约束极值问题

$$\min f(\boldsymbol{x})$$

s.t. $h_i(\boldsymbol{x}) = 0 \qquad i = 1, 2, \ldots, m$

$$g_j(\boldsymbol{x}) \geq 0 \qquad j = 1, 2, \ldots, l$$

$$\boldsymbol{x} \in R^n$$

求解思路：通过低阶近似，化为容易求解的规划问题

序贯线性规划法SLP

$$\min f(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{(k)})$$

s.t.

$$h_i(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla h_i(\boldsymbol{x}^{(k)})^T(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{(k)}) = 0 \qquad i=1,2,\ldots,m$$

$$g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla g_j(\boldsymbol{x}^{(k)})^T(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{(k)}) \geq 0 \qquad j=1,2,\ldots,l$$

$$|x_s - x_s^{(k)}| \leq \delta_s^{(k)} \qquad s=1,2,\ldots,n$$

$\delta_s^{(k)}$是步长限制量

设第k步线性规划的最优解为$\boldsymbol{x}^{*(k)}$

当$\boldsymbol{x}^{*(k)}$是可行解时，取 $\delta_s^{(k+1)}=\delta_s^{(k)}$ ，$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{*(k)}$ 继续迭代；

当$\boldsymbol{x}^{*(k)}$不是可行解时，取 $\delta_s^{(k)}=\beta\delta_s^{(k)}$ ，$\beta<1$ ，重新寻优；

当$|\delta_s^{(k)}|<\varepsilon, \forall s=1,2,\cdots,n$ 或 $\|\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\|<\varepsilon$ 时，迭代结束。

序贯二次规划法SQP

起作用约束集法序贯求解如下近似问题

$$\min f(\Delta \boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \Delta \boldsymbol{x} + \frac{1}{2} \Delta \boldsymbol{x}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \Delta \boldsymbol{x}$$

s.t. $\quad h_i(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla h_i(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \Delta \boldsymbol{x} = 0 \qquad i = 1, 2, \ldots, m$

$$g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla g_j(\boldsymbol{x}^{(k)})^T \Delta \boldsymbol{x} \geq 0 \qquad j = 1, 2, \ldots, l$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \Delta \boldsymbol{x}^*$$