运筹学第六章：非线性规划

Charles007

October 22, 2020

1 基本概念

1.1 非线性规划的数学模型

非线性规划的数学模型的一般形式是

$$\begin{cases} \min\ f(\boldsymbol{X}) \\ h_i(\boldsymbol{X}) = 0 \quad (i = 1, 2, \cdots, m) \\ g_j(\boldsymbol{X}) \geq 0 \quad (j = 1, 2, \cdots, l) \end{cases} \tag{1}$$

为了让数学模型中不出现等式约束，对于一个等式约束 $g_j(\boldsymbol{X}) = 0$，可以用两个不等式约束代替它：

$$\begin{cases} g_j(\boldsymbol{X}) \geq 0 \\ -g_j(\boldsymbol{X}) \geq 0 \end{cases}$$

于是可以将标准数学模型改写为：

$$\begin{cases} \min\ f(\boldsymbol{X}) & \boldsymbol{X} \in \boldsymbol{R} \subset \boldsymbol{E}_n \\ R = \{\boldsymbol{X} | g_j(\boldsymbol{X}) \geq 0\} & (j = 1, 2, \cdots, l) \end{cases} \tag{2}$$

式 2中 $\boldsymbol{R}$ 为问题的可行域。

1.2 几个定义

下面给出有关局部极小和全局极小的定义。设 $f(\boldsymbol{X})$ 为定义在 n 维欧式空间 E_n 的某一区域 R 上的 n 元实函数 (可记为 $f(\boldsymbol{X}) : R \subset E_n \to E_1$)，对于 $\boldsymbol{X}^* \in R$，如果存在某个 $\varepsilon \geq 0$，使所有与 $\boldsymbol{X}^*$ 的距离小于 ε 的 $\boldsymbol{X} \in R$(即 $\boldsymbol{X} \in R$ 且 $||\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}^*|| \leq \varepsilon$)，都有 $f(\boldsymbol{X}) \geq f(\boldsymbol{X}^*)$，则称 $\boldsymbol{X}^*$ 为 $f(\boldsymbol{X})$ 在 R 上的局部极小点，$f(\boldsymbol{X}^*)$ 为局部极小值。若对于所有 $\boldsymbol{X} \neq \boldsymbol{X}^*$ 且与 $\boldsymbol{X}^*$ 的距离小于 ε 的 $\boldsymbol{X} \in R$，都有 $f(\boldsymbol{X}) > f(\boldsymbol{X}^*)$，则称 $\boldsymbol{X}^*$ 为 $f(\boldsymbol{X})$ 在 R 上的严格局部极小点，$f(\boldsymbol{X}^*)$ 为严格局部极小值。

设 $f(\boldsymbol{X})$ 为定义在 E_n 的某一区域 R 上的 n 元实函数, 若存在 $\boldsymbol{X}^* \in R$, 对所有 $\boldsymbol{X} \in R$ 都有 $f(\boldsymbol{X}) \geq f(\boldsymbol{X}^*)$，则称 $\boldsymbol{X}^*$ 为 $f(\boldsymbol{X})$ 在 R 上的全局极小点，$f(\boldsymbol{X}^*)$ 为全局极小值。若对于所有 $\boldsymbol{X} \in R$ 且 $\boldsymbol{X} \neq \boldsymbol{X}^*$，都有 $f(\boldsymbol{X}) > f(\boldsymbol{X}^*)$，则称 $\boldsymbol{X}^*$ 为 $f(\boldsymbol{X})$ 在 R 上的严格全局极小点，$f(\boldsymbol{X}^*)$ 为严格全局极小值。

如将上述定义中的不等号反向，即可得到相应的极大点和极大值的定义。本文仅就极小点和极小值加以说明，而且注意研究局部极小问题。

1.3 多元函数极值点存在的条件

二阶可微的一元函数 $f(x)$ 极值点存在的条件：$f'(x) = 0$(必要条件)；对极小点，$f'(x) = 0$ 且 $f''(x) > 0$，对极大点，$f'(x) = 0$ 且 $f''(x) < 0$,(充分条件)。对于无约束多元函数，其极值点存在的必要条件和充分条件，与一元函数极值点的相应条件类似。

定理 1 给出了 n 元实函数 $f(\boldsymbol{X})$ 在 $\boldsymbol{X}^*$ 点取得极值的必要条件。

定理 1 设 $\boldsymbol{R}$ 是 n 维欧式空间 E_n 上的某一开集，$f(\boldsymbol{X})$ 在 $\boldsymbol{R}$ 上有连续的一阶偏导数，且在点 $\boldsymbol{X}^* \in \boldsymbol{R}$ 取得局部极值，则必有

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_1} = \frac{\partial f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_2} = \cdots = \frac{\partial f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_n} = 0 \tag{3}$$

或写成

$$\nabla f(\boldsymbol{X}^*) = \boldsymbol{0} \tag{4}$$

此处

$$\nabla f(\boldsymbol{X}^*) = \left(\frac{\partial f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_n}\right)^T \tag{5}$$

为函数 $f(\boldsymbol{X})$ 在点 $\boldsymbol{X}^*$ 处的梯度。

梯度为 $\boldsymbol{0}$ 的点称为驻点。梯度有两个重要性质：函数 $f(\boldsymbol{X})$ 在某点 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 的梯度 $\nabla f(\boldsymbol{X}^{(0)})$ 必与函数过该点的等值面正交 (设 $\nabla f(\boldsymbol{X}^{(0)})$ 不为零)；梯度向量的方向是函数值 (在该点处) 增加最快的方向，而负梯度方向则是函数值 (在该点处) 减少最快的方向。

二次型 二次型是 $\boldsymbol{X} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$ 的二次齐次函数：

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{X}) = {} & a_{11}x_1^2 + 2a_{12}x_1x_2 + \cdots + 2a_{1n}x_1x_n + a_{22}x_2^2 + 2a_{23}x_2x_3 + \cdots \\ & + 2a_{2n}x_2x_n + \cdots + a_{nn}x_n^2 \end{aligned}$$

一个二次型唯一对应一个对称矩阵；一个对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 也唯一确定一个二次型。实二次型正定的充要条件是它的矩阵的左上角各阶主子式都大于零。实二次型负定的充要条件是它的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左上角各阶主子式负、正相间。

多元函数的泰勒公式：设 n 元实函数 $f(\boldsymbol{X})$ 在 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 的某一邻域内有连续的二阶偏导数，则可写出它在 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 处的泰勒展开如下：

$$f(\boldsymbol{X}) = f(\boldsymbol{X}^{(0)}) + \nabla f(\boldsymbol{X}^{(0)})^T(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}^{(0)}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}^{(0)})^T\nabla^2 f(\boldsymbol{X}^{(0)})(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}^{(0)}) + o(||\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}^{(0)}||^2) \tag{6}$$

由此，可以给出 $\boldsymbol{X}^*$ 是 $f(\boldsymbol{X})$ 的极小点的充分条件——定理 2。

定理 2：设 $\boldsymbol{R}$ 是 n 维欧式空间 E_n 上的某一开集，$f(\boldsymbol{X})$ 在 $\boldsymbol{R}$ 上具有连续二阶偏导数，若 $\nabla f(\boldsymbol{X}^*) = 0$，且 $\nabla^2 f(\boldsymbol{X}^*)$ 正定，则 $\boldsymbol{X}^* \in \boldsymbol{R}$ 为 $f(\boldsymbol{X})$ 的严格局部极小点。此处

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{X}^*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{X}^*)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \tag{7}$$

为 $f(\boldsymbol{X})$ 在 $\boldsymbol{X}^*$ 处的黑塞 (Hesse) 矩阵。若将 $\nabla^2 f(\boldsymbol{X}^*)$ 正定改为负定，定理 2 就变成了 $\boldsymbol{X}^*$ 为 $f(\boldsymbol{X})$ 的严格局部极大点的充分条件。

凸函数和凹函数：凸函数是指下凸函数，凹函数是指上凸函数。用定义来表述，则是：设 $f(\boldsymbol{X})$ 为定义在 n 维欧式空间 E_n 中某个凸集 R_c 上的函数，若对任何实数 $\alpha(0 < \alpha < 1)$ 以及 R_c 中的任意两点 $\boldsymbol{X}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{X}^{(2)}$，恒有

$$f(\alpha\boldsymbol{X}^{(1)} + (1-\alpha)\boldsymbol{X}^{(2)}) \leq \alpha f(\boldsymbol{X}^{(1)}) + (1-\alpha)f(\boldsymbol{X}^{(2)})$$

则称 $f(\boldsymbol{X})$ 为定义在 R_c 上的凸函数。如果把上述公式中的 $\leq$ 变为 $<$，则称 $f(\boldsymbol{X})$ 为定义在 R_c 上的严格凸函数。如果把 $\leq$ 变为 $\geq$ 和 $>$，则得到凹函数和严格凹函数的定义。

凸函数有三个重要性质：

- **性质 1**：设 $f(\boldsymbol{X})$ 为定义在凸集 R_c 上的凸函数，则对任意实数 $\beta \geq 0$, 函数 $\beta f(\boldsymbol{X})$ 也是定义在 R_c 上的凸函数。
- **性质 2**：设 $f_1(\boldsymbol{X})$ 和 $f_2(\boldsymbol{X})$ 为定义在凸集 R_c 上的两个凸函数，则这两个凸函数的和 $f(\boldsymbol{X}) = f_1(\boldsymbol{X}) + f_2(\boldsymbol{X})$ 仍为定义在 R_c 上的凸函数。由上述两个性质可以推得：有限个凸函数的非负线性组合仍为凸函数。
- **性质 3**：设 $f(\boldsymbol{X})$ 为定义在凸集 R_c 上的凸函数，则对每一实数 β，集合 (称为水平集)

  $$S_\beta = \{\boldsymbol{X} | \boldsymbol{X} \in R_c, f(\boldsymbol{X}) \leq \beta\}$$

  是凸集。

凸函数的判定：要判定一个函数是不是凸函数，可直接依据定义；对于可微凸函数，也可利用下述两个条件。

- **一阶条件**。设 R_c 为 E_n 上的开凸集，$f(\boldsymbol{X})$ 在 R_c 上可微，则 $f(\boldsymbol{X})$ 为 R_c 上的凸函数的充要条件是：对任意不同两点 $\boldsymbol{X}^{(1)} \in R_c$ 和 $\boldsymbol{X}^{(2)} \in R_c$，恒有

$$f(\boldsymbol{X}^{(2)}) \geq f(\boldsymbol{X}^{(1)}) + \nabla f(\boldsymbol{X}^{(1)})^T(\boldsymbol{X}^{(2)} - \boldsymbol{X}^{(1)}) \tag{8}$$

  如果上式为严格不等式，它就是严格凸函数的充要条件。如将上式中的不等号反向，就可得到凹函数 (严格不等号时为严格凹函数) 的充要条件。

- **二阶条件**。设 R_c 为 E_n 上的开凸集，$f(\boldsymbol{X})$ 在 R_c 上二阶可微，则 $f(\boldsymbol{X})$ 为 R_c 上的凸函数 (凹函数) 的充要条件是：对所有 $\boldsymbol{X} \in R_c$，其黑塞矩阵半正定 (半负定)。若 $f(\boldsymbol{X})$ 的黑塞矩阵对所有 $\boldsymbol{X} \in R_c$ 都是正定 (负定) 的，则 $f(\boldsymbol{X})$ 是 R_c 上的严格凸函数 (严格凹函数)。

凸函数的极值：函数的局部极小值并不一定等于它的最小值。但是对于凸函数来说，它的任一极小值就等于其最小值。而且，它的极小点形成一个凸集。可知这种情况下，$\nabla f(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{0}$ 不仅是极值点存在的必要条件，也是其充分条件。

凸规划：对于标准的非线性规划问题来说，若其中的 $f(\boldsymbol{X})$ 为凸函数，$g_j(\boldsymbol{X})(j = 1, 2, \cdots, l)$ 全是凹函数 (即所有 $-g_j(\boldsymbol{X})$ 全为凸函数)，就称这种规划为凸规划。凸规划具有人们希望的下述很好的性质：

- 可行解集为凸集。
- 最优解集为凸集 (假定最优解存在)。
- 任何局部最优解也是其全局最优解。
- 若目标函数为严格凸函数，且最优解存在，则其最优解必唯一。

不难发现，线性规划也是一种凸规划。

下降迭代算法：迭代法的思路是从一个初始点出发，通过迭代逐步逼近最优点。对于极小化问题，则需要使用下降迭代算法。下降迭代算法的一般迭代格式是：

(1) 选取某一初始点 $\boldsymbol{X}^{(0)}$，令 $k = 0$；

(2) 确定搜索方向。若已得出某一迭代点 $\boldsymbol{X}^{(k)}$，且 $\boldsymbol{X}^{(k)}$ 不是极小点。这时，就从 $\boldsymbol{X}^{(k)}$ 出发确定一搜索方向 $\boldsymbol{P}^{(k)}$，沿这个方向应能找到使目标函数值下降的点。对约束极值问题，有时 (视所用的算法而定) 还要求这样的点是可行点。

(3) 确定步长。沿 $\boldsymbol{P}^{(k)}$ 方向前进一个步长，得新点 $\boldsymbol{X}^{(k+1)}$。即在由 $\boldsymbol{X}^{(k)}$ 出发的射线

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{P}^{(k)}, \lambda \geq 0$$

上，通过选定步长 $\lambda = \lambda_k$，得下一个迭代点

$$\boldsymbol{X}^{(k+1)} = \boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{P}^{(k)}, \lambda \geq 0$$

使得

$$f(\boldsymbol{X}^{(k+1)}) = f(\boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{P}^{(k)}) < f(\boldsymbol{X}^{(k)})$$

(4) 检验新得到的点是否为要求的极小点或近似极小点，如满足要求，迭代停止。否则，令 $k = k + 1$，返回第 (2) 步继续迭代。

在以上步骤中，选定搜索方向对算法起着关键性的作用，各种算法的区分，主要在于确定搜索方向的方法不同。在许多算法中，步长的选定是由使目标函数值沿搜索方向下降最多 (在极小化问题中) 为依据的，即沿射线 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{P}^{(k)}$ 求 $f(\boldsymbol{X})$ 的极小，即选取 λ_k，使

$$f(\boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{P}^{(k)}) = \min_{\lambda} f(\boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{P}^{(k)})$$

由于这一工作是求以 λ 为变量的一元函数 $f(\boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{P}^{(k)})$ 的极小点 λ_k，故称这一过程为一维搜索或线搜索，由此确定的步长称为最佳步长。

上述一维搜索有个重要的性质，就是在搜索方向上所得的最优点处的梯度和该搜索方向正交。这可表述成如下定理。

定理 3：设目标函数 $f(\boldsymbol{X})$ 具有连续一阶偏导数，$\boldsymbol{X}^{(k+1)}$ 按如下规则产生

$$\begin{cases} f(\boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{P}^{(k)}) = \min\limits_{\lambda} f(\boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{P}^{(k)}) \\ \boldsymbol{X}^{(k+1)} = \boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{P}^{(k)} \end{cases}$$

则有

$$\nabla f(\boldsymbol{X}^{(k+1)})^T \boldsymbol{P}^{(k)} = 0 \tag{9}$$

由于函数 $f(\boldsymbol{X})$ 在某点的梯度和过该点的等值面的切线正交，从而一维 (最优) 搜索的搜索方向和其上最优点处函数的等值面相切。因真正的极值点 $\boldsymbol{X}^*$ 事先并不知道，故在实用上只能根据相继两次迭代得到的计算结果的变化来判断是否已达到要求，从而建立中止迭代计算的准则。常用的中止迭代准则有以下几种

(1) 根据相继两次迭代结果的绝对误差

$$||\boldsymbol{X}^{(k+1)} - \boldsymbol{X}^{(k)}|| \le \varepsilon_1$$

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

(2) 根据相继两次迭代结果的相对误差

$$\frac{||\boldsymbol{X}^{(k+1)} - \boldsymbol{X}^{(k)}||}{||\boldsymbol{X}^{(k)}||} \le \varepsilon_3$$

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

以上两个判断准则都要求分母不等于和不接近于零。

(3) 根据函数梯度的模足够小

$$||\nabla f(\boldsymbol{X}^{(k)})|| \le \varepsilon_5$$

2 一维搜索

一维搜索用于求解单变量的无约束极值问题，它同时也为求解后面各节中更复杂的问题提供基础。一维搜索的方法很多，这里仅介绍斐波那契法和 0.618 法。虽然后面的内容都用不到这两种方法，但是在某些不好直接求取最佳步长的情况下可以使用一维搜索方法来确定最佳步长。

2.1 斐波那契法

利用斐波那契法计算 n 次函数值所能得到的最大缩短率 (缩短后的区间长度与原区间长度之比) 为 $1/F_n$。要想把区间 $[a_0, b_0]$ 的长度缩短为原来区间长度的 $\delta(\delta < 1)$ 倍或更小，即缩短后的区间长度

$$b_{n-1} - a_{n-1} \le (b_0 - a_0)\delta$$

只要 n 足够大，能使下式成立即可：

$$F_n \ge \frac{1}{\delta}$$

上式中 δ 为区间缩短的相对精度。有时给出区间缩短的绝对精度 η，即要求

$$b_{n-1} - a_{n-1} \le \eta$$

显然 δ 和 η 应有如下关系：

$$\eta = (b_0 - a_0)\delta$$

现将斐波那契法缩短区间的步骤总结如下：

(1) 确定试点的个数 n。根据缩短率 δ 算出 F_n，然后查表确定最小的 n。

(2) 选取前两个试点的位置。第一次缩短的两个试点的位置为

$$\begin{cases} t_1 = a_0 + \frac{F_{n-2}}{F_n}(b_0 - a_0) = b_0 + \frac{F_{n-1}}{F_n}(a_0 - b_0) \\ t_1' = a_0 + \frac{F_{n-1}}{F_n}(b_0 - a_0) \end{cases}$$

它们在区间内的位置是对称的。

(3) 计算函数值 $f(t_1)$ 和 $f(t_1')$，并比较它们的大小。若 $f(t_1) < f(t_1')$，则取

$$a_1 = a_0, \quad b_1 = t_1', \quad t_2' = t_1$$

并令

$$t_2 = b_1 + \frac{F_{n-2}}{F_{n-1}}(a_1 - b_1)$$

否则，取

$$a_1 = t_1, \quad b_1 = b_0, \quad t_2 = t_1'$$

并令

$$t_2' = a_1 + \frac{F_{n-2}}{F_{n-1}}(b_1 - a_1)$$

(4) 计算 $f(t_2)$ 或 $f(t_2')$(其中的一个已经算出)，如第 (3) 步那样一步步迭代。计算试点的一般公式为

$$\begin{cases} t_k = b_{k-1} + \frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}}(a_{k-1} - b_{k-1}) \\ t_k' = a_{k-1} + \frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}}(b_{k-1} - a_{k-1}) \end{cases}$$

其中 $k = 1, 2, \cdots, n-1$

(5) 当进行至 $k = n-1$ 时

$$t_{n-1} = t_{n-1}' = \frac{1}{2}(a_{n-2} + b_{n-2})$$

这就无法借比较函数值 $f(t_{n-1})$ 和 $f(t_{n-1}')$ 的大小以确定最终区间，为此，取

$$\begin{cases} t_{n-1} = \frac{1}{2}(a_{n-2} + b_{n-2}) \\ t_{n-1}' = a_{n-2} + \left(\frac{1}{2} + \varepsilon\right)(b_{n-2} - a_{n-2}) \end{cases}$$

其中 ε 为任意小的数。在 t_{n-1} 和 t_{n-1}' 这两点中，以函数值较小者为近似极小点，相应的函数值为近似极小值。并得最终区间 $[a_{n-2}, t_{n-1}']$ 或 $[t_{n-1}, b_{n-2}]$。

斐波那契法使用对称搜索的方法，逐步缩短所考察的区间，它能以尽量少的函数求值次数，达到预定的某一缩短率。

2.2 0.618 法

由上节的论述可知，当用斐波那契法以 n 个试点来缩短某一区间时，区间长度的第一次缩短率为 F_{n-1}/F_n，其后各次分别为

$$\frac{F_{n-2}}{F_{n-1}}, \quad \frac{F_{n-3}}{F_{n-2}}, \quad , \cdots, \quad \frac{F_1}{F_2}$$

现将以上数列分为奇数项和偶数项，则可以证明，这两个数列收敛于同一个极限——0.618033...。

以不变的区间缩短率 0.618 代替斐波那契法每次不同的缩短率，就得到了 0.618 法。用 0.618 法时，计算 n 个试点的函数值可以把原区间 $[a_0, b_0]$ 连续缩短 $n-1$ 次，由于每次的缩短率均相同，为 μ，故最后的区间长度为

$$b_{n-1} - a_{n-1} = (b_0 - a_0)\mu^{n-1}$$

0.618 法是一种等速对称消去区间的方法，每次的试点均取在区间相对长度的 0.618 和 0.382 处。它的好处是方便，不用查表，每一步的计算量也比斐波那契法小一点，比较实用。而缺点则是区间缩短效率比斐波那契法低。

3 无约束极值问题

无约束极值问题可表述为

$$\min f(\boldsymbol{X}), \boldsymbol{X} \in E_n \tag{10}$$

在求解上述问题时常使用迭代法。迭代法大体可分为两大类：一类要用到函数的一阶导数和 (或) 二阶导数，由于用到了函数的解析性质，故称为解析法；另一类在迭代过程中仅用到函数值，而不要求函数的解析性质，这类方法称为直接法。一般来说，直接法的收敛速度较慢，只是在变量少时才适用。而解析法需要函数具备解析性质。这里介绍两种基本的解析法。

3.1 梯度法 (最速下降法)

假定问题 10的目标函数 $f(\boldsymbol{X})$ 具有一阶连续偏导数，它存在极小点 $\boldsymbol{X}^*$。则用梯度法求函数 $f(\boldsymbol{X})$ 的极小点的步骤为:

(1) 给定初始点 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 和允许误差 $\varepsilon > 0$，令 $k = 0$。

(2) 计算 $f(\boldsymbol{X}^{(k)})$ 和 $\nabla f(\boldsymbol{X}^{(k)})$，若 $||\nabla f(\boldsymbol{X}^{(k)})||^2 \leq \varepsilon$，停止迭代，得近似极小点 $\boldsymbol{X}^{(k)}$ 和近似极小值 $f(\boldsymbol{X}^{(k)})$；否则，转下一步。

(3) 做一维搜索或直接根据函数解析性质求出最佳步长。最佳步长

$$\lambda_k = \frac{\nabla f(\boldsymbol{X}^{(k)})^T \nabla f(\boldsymbol{X}^{(k)})}{\nabla f(\boldsymbol{X}^{(k)})^T \nabla^2 f(\boldsymbol{X}^{(k)}) \nabla f(\boldsymbol{X}^{(k)})} \tag{11}$$

计算 $\boldsymbol{X}^{(k+1)} = \boldsymbol{X}^{(k)} - \lambda_k \nabla f(\boldsymbol{X}^{(k)})$，然后令 $k = k+1$，转回第 (2) 步。

3.2 牛顿法

先把目标函数写成以下形式

$$f(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{X} + \boldsymbol{B}^T \boldsymbol{X} + c \tag{12}$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 是 $f(\boldsymbol{X})$ 的黑塞矩阵，它必然是对称的。但要使用牛顿法，还要求它是正定的。如果满足 $\boldsymbol{A}$(黑塞矩阵) 正定的条件，则从任意初始点出发，可直接求取最优解。

$$\boldsymbol{X}^* = \boldsymbol{X}^{(0)} - \boldsymbol{A}^{-1} \nabla f(\boldsymbol{X}^{(0)}) \tag{13}$$

书上还介绍了阻尼牛顿法，我不清楚它比牛顿法好在哪里，但这里还是记录一下。阻尼牛顿法迭代公式如下:

$$\begin{cases} \boldsymbol{P}^{(k)} = -[\nabla^2 f(\boldsymbol{X}^{(k)})]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{X}^{(k)}) \\ \lambda_k : \min\limits_{\lambda} f(\boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda \boldsymbol{P}^{(k)}) \\ \boldsymbol{X}^{(k+1)} = \boldsymbol{X}^{(k)} + \lambda_k \boldsymbol{P}^{(k)} \end{cases} \tag{14}$$

4 约束极值问题

4.1 最优性条件

可行方向: 假定 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 是问题 2的一个可行解，它满足所有约束条件。对某一个约束条件 $g_j(\boldsymbol{X}) \geq 0$ 来说，$\boldsymbol{X}^{(0)}$ 满足它有两种情况: 一种情况是 $g_j(\boldsymbol{X}^{(0)}) > 0$，这时，$\boldsymbol{X}^{(0)}$ 不在由这个约束条件形成的可行域边界上，我们称这一约束为 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 点的不起作用约束 (或无效约束)；另一种情况是 $g_j(\boldsymbol{X}^{(0)}) = 0$，这时，$\boldsymbol{X}^{(0)}$ 点处于由这个约束条件形成的可行域边界上，对 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 点的进一步摄动来说，这一约束起到了某种限制作用，故称它为 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 点的起作用约束 (或有效约束)。显然，等式约束条件对所有可行点都是起作用约束。

以 J 记 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 点所有起作用约束下标的集合，即

$$J = \{j | g_j(\boldsymbol{X}^{(0)}) = 0, \quad 1 \leq j \leq l\}$$

那么由泰勒公式可知

$$g_j(\boldsymbol{X}^{(0)} + \lambda \boldsymbol{P}) = g_j(\boldsymbol{X}^{(0)}) + \lambda \nabla g_j(\boldsymbol{X}^{(0)})^T \boldsymbol{P} + o(\lambda)$$

对 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 点的所有起作用约束，当 $\lambda > 0$ 足够小时，只要

$$\nabla g_j(\boldsymbol{X}^{(0)})^T \boldsymbol{P} > 0 \quad j \in J \tag{15}$$

就有

$$g_j(\boldsymbol{X}^{(0)} + \lambda \boldsymbol{P}) \geq 0 \quad j \in J$$

此外，对 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 点的所有不起作用约束，$g_j(\boldsymbol{X}^{(0)}) > 0$，由 $g_j(\boldsymbol{X})$ 的连续性，当 $\lambda > 0$ 足够小时，亦有

$$g_j(\boldsymbol{X}^{(0)} + \lambda \boldsymbol{P}) \geq 0 \quad j \overline{\in} J$$

从而，只要方向 $\boldsymbol{P}$ 满足式 (15)，即可保证它为 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 点的可行方向。

下降方向：由泰勒展开式

$$f(\boldsymbol{X}^{(0)}+\lambda\boldsymbol{P})=f(\boldsymbol{X}^{(0)})+\lambda\nabla f(\boldsymbol{X}^{(0)})^T\boldsymbol{P}+o(\lambda)$$

可知，当 λ 足够小时，只要

$$\nabla f(\boldsymbol{X}^{(0)})^T\boldsymbol{P}<0 \tag{16}$$

就有 $f(\boldsymbol{X}^{(0)}+\lambda\boldsymbol{P})<f(\boldsymbol{X}^{(0)})$。这说明，只要方向 $\boldsymbol{P}$ 满足式 (16)，即可保证它为 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 点的下降方向。

可行下降方向：由前述可知，只要方向 $\boldsymbol{P}$ 同时满足式 (15) 和式 (16)，它就是 $\boldsymbol{X}^{(0)}$ 点的可行下降方向。

库恩-塔克条件：设 $\boldsymbol{X}^*$ 是标准非线性规划问题的局部极小点，$f(\boldsymbol{X})$ 和 $g_j(\boldsymbol{X})(j=1,2,\cdots,l)$ 在点 $\boldsymbol{X}^*$ 处有一阶连续偏导数，而且 $\boldsymbol{X}^*$ 处的所有起作用约束的梯度线性无关，则存在数 $\mu_1^*,\mu_2^*,\cdots,\mu_l^*$ 使

$$\begin{cases}\nabla f(\boldsymbol{X}^*)-\sum\limits_{j=1}^{l}\mu_j^*\nabla g_j(\boldsymbol{X}^*)=0 & \\ \mu_j^*g_j(\boldsymbol{X}^*)=0 & (j=1,2,\cdots,l)\\ \mu_j^*\geq 0 & (j=1,2,\cdots,l)\end{cases} \tag{17}$$

这就是库恩-塔克条件 (简称 K-T 条件)，满足这个条件的点称为库恩-塔克点。

现在考虑非线性规划

$$\begin{cases}\min f(\boldsymbol{X})\\ h_i(\boldsymbol{X})=0 \quad (i=1,2,\cdots,m)\\ g_j(\boldsymbol{X})\geq 0 \quad (j=1,2,\cdots,l)\end{cases} \tag{18}$$

其中，目标函数和每个约束条件都具有一阶连续偏导数。对每一个 i，我们以

$$\begin{cases}h_i(\boldsymbol{X})\geq 0\\ -h_i(\boldsymbol{X})\geq 0\end{cases}$$

代替 $h_i(\boldsymbol{X})=0$，这样一来，可以按照之前的方法得到库恩-塔克条件，整理之后可表述如下：

若 $\boldsymbol{X}^*$ 是非线性规划 (18) 的极小点，且 $\boldsymbol{X}^*$ 的所有起作用约束的梯度 $\nabla h_i(\boldsymbol{X}^*)(i=1,2,\cdots,m)$ 和 $\nabla g_j(\boldsymbol{X}^*)(j\in J)$ 线性无关，则存在向量 $\mathit{\Gamma}^*=(\gamma_1^*,\gamma_2^*,\cdots,\gamma_m^*)^T$ 和 $M^*=(\mu_1^*,\mu_2^*,\cdots,\mu_l^*)^T$ 使下述条件成立

$$\begin{cases}\nabla f(\boldsymbol{X}^*)-\sum\limits_{i=1}^{m}\gamma_i^*\nabla h_i(\boldsymbol{X}^*)-\sum\limits_{j=1}^{l}\mu_j^*\nabla g_j(\boldsymbol{X}^*)=0 & \\ \mu_j^*g_j(\boldsymbol{X}^*)=0 & (j=1,2,\cdots,l)\\ \mu_j^*\geq 0 & (j=1,2,\cdots,l)\end{cases} \tag{19}$$

这就是具有等式约束时的库恩-塔克条件。需要说明的是，条件中 γ_i^* 并没有大于等于 0 的限制，它可以是任意实数。如果要用这个条件来求解最优点，会发现自由变量的数目多于约束条件，多出来的自由变量恰好是 γ_i^*，这时需要在库恩-塔克条件中引入原问题的等式约束 $h_i(\boldsymbol{X})=0$ 才能求解。

库恩-塔克条件是确定某点为最优点的必要条件，但一般来说并不是充分条件。只有在问题是凸规划时，库恩-塔克条件才是最优点存在的充要条件。

4.2 制约函数法

制约函数法是通过构造某种制约函数，并将它加到非线性规划的目标函数上，从而将原来的约束极值问题，转为无约束极值问题来求解。由于这里介绍的方法需要求解一系列无约束问题，故称为序列无约束极小化技术 (SUMT)。下面介绍其中最基本的两种：罚函数法 (也称外点法) 和障碍函数法 (也称内点法)。

4.2.1 罚函数法 (外点法)

对于式 (18) 这样的非线性规划问题，其罚函数可以写为

$$P(\boldsymbol{X},M)=f(\boldsymbol{X})+M\sum_{i=1}^{m}[h_i(\boldsymbol{X})]^2+M\sum_{j=1}^{l}[\min(0,g_j(\boldsymbol{X}))]^2 \tag{20}$$

罚函数法的迭代步骤如下

(1) 取第一个罚因子 $M_1>0$(例如说取 $M_1=1$)，允许误差 $\varepsilon>0$，并令 $k=1$。

(2) 求下述无约束极值问题的最优解：

$$\min P(\boldsymbol{X},M_k)$$

利用梯度法、牛顿法或其他方法求解。设求解出的极小点为 $\boldsymbol{X}^{(k)}$。

(3) 若存在某一个 $j(1\le j\le l)$，有

$$-g_j(\boldsymbol{X}^{(k)})>\varepsilon$$

或 (和) 存在某一个 $i(1\le i\le m)$，有

$$|h_i(\boldsymbol{X}^{(k)})|>\varepsilon$$

则取 $M_{k+1}>M_k$(例如，$M_{k+1}=cM_k$，$c=5$ 或 $c=10$)，并令 $k=k+1$。然后，转回第 (2) 步。否则，停止迭代，得所要的点 $\boldsymbol{X}^{(k)}$

4.2.2 障碍函数法

障碍函数法并不能处理等式约束的情况，因此暂时不考虑等式约束，假定约束条件都是不等式。考虑式 (2) 所示的非线性规划问题，则其新目标函数可以写为

$$\overline{P}(\boldsymbol{X},r_k)=f(\boldsymbol{X})+r_k\sum_{j=1}^{l}\frac{1}{g_j(\boldsymbol{X})} \tag{21}$$

或

$$\overline{P}(\boldsymbol{X},r_k)=f(\boldsymbol{X})-r_k\sum_{j=1}^{l}lg(g_j(\boldsymbol{X})) \tag{22}$$

其中，$r_k>0$。$\boldsymbol{X}\in R_0$ 为所有严格内点的集合，即

$$R_0=\{\boldsymbol{X}|g_j(\boldsymbol{X})>0\quad j=1,2,\cdots,l\}$$

目标函数中，与 r_k 相关的项称为障碍项，r_k 称为障碍因子。函数 $\overline{P}(\boldsymbol{X},r_k)$ 称为障碍函数。

障碍函数的迭代步骤如下：

(1) 取第一个障碍因子 $r_1>0$(例如取 $r_1=1$)，允许误差 $\varepsilon>0$，并令 $k=1$。

(2) 构造障碍函数，障碍项可采用倒数函数，也可采用对数函数。

(3) 对障碍函数进行无约束极小化 (注意，迭代点必须在 R_0 内。这要求在迭代时要检查点，控制步长)，设所得极小解为 $\boldsymbol{X}^{(k)}\in R_0$

(4) 检查是否满足收敛准则：

$$r_k\sum_{j=1}^{l}\frac{1}{g_j(\boldsymbol{X}^{(k)})}\le\varepsilon$$

或

$$|r_k\sum_{j=1}^{l}\lg[g_j(\boldsymbol{X}^{(k)})]|\le\varepsilon$$

如果满足此准则，则以 $\boldsymbol{X}^{(k)}$ 为原约束问题的近似极小解，停止迭代；否则，取 $r_{k+1}<r_k$(例如取 $r_{k+1}=\frac{r_k}{10}$ 或 $\frac{r_k}{5}$)，令 $k=k+1$，转回第 (3) 步进行迭代。

前已述及，内点法的迭代过程必须由某个严格内点开始，在处理实际问题时，如果凭直观即可找到一个初始内点，这当然十分方便；如果找不到，则可使用下述方法：

先任找一点 $\boldsymbol{X}^{(0)}\in E_n$，如果它以严格不等式满足所有约束，则可以把它作为初始内点。若该点以严格不等式满足一部分约束，而不能以严格不等式满足另外的约束，则以不能严格满足的这些约束函数为假拟目标函数，而以严格满足的那些约束函数形成障碍项，构成一无约束性质的问题。求解这一问题，可得一新点 $\boldsymbol{X}^{(1)}$，若 $\boldsymbol{X}^{(1)}$ 仍不为内点，就如上继续进行，并减小障碍因子，直至求出一个初始内点为止。

求初始内点的迭代步骤如下：

(1) 任取一点 $\boldsymbol{X}^{(1)}\in E_n$，$r_1>0$(例如取 $r_1=1$)，令 $k=1$。

(2) 确定指标集 T_k 和 $\overline{T}_k$：

$$T_k = \{j | g_j(\boldsymbol{X}^{(k)}) > 0, 1 \le j \le l\}$$

$$\overline{T}_k = \{j | g_j(\boldsymbol{X}^{(k)}) \le 0, 1 \le j \le l\}$$

(3) 检查 $\overline{T}_k$ 是否为空集，若为空集，则取 $\boldsymbol{X}^{(k)}$ 为初始内点，迭代停止；否则，转下一步。

(4) 构造函数

$$\widetilde{P}(\boldsymbol{X}, r_k) = -\sum_{j \in \overline{T}_k} g_j(\boldsymbol{X}) + r_k \sum_{j \in T_k} \frac{1}{g_j(\boldsymbol{X})} \quad (r_k > 0)$$

以 $\boldsymbol{X}^{(k)}$ 为初始点，求解

$$\min_{X \in \widetilde{R}_k} \widetilde{P}(\boldsymbol{X}, r_k)$$

其中，$\widetilde{R}_k = \{\boldsymbol{X} | g_j(\boldsymbol{X}) > 0, j \in T_k\}$。

设求出的极小点为 $\boldsymbol{X}^{(k+1)}$，则 $\boldsymbol{X}^{(k)} \in \widetilde{R}_k$。令 $0 < r_{k+1} < r_k$(例如说 $r_{k+1} = \frac{r_k}{10}$)，$k = k+1$，转回第 (2) 步。

前已述及，当要求在迭代过程中始终满足某些约束条件时，就需要使用内点法；然而，内点法不能处理等式约束。因此，人们自然希望将外点法和内点法结合起来使用。即对等式约束和当前不被满足的不等式约束，使用罚函数法；对所满足的那些不等式约束，使用障碍函数法。这就是所谓的混和法。

5 制约函数法使用示例

用罚函数法求解问题

$$\begin{cases} \min\ f(\boldsymbol{X}) = -x_1 \\ g_1(\boldsymbol{X}) = 2 - x_2 - (x_1 - 1)^3 \ge 0 \\ g_2(\boldsymbol{X}) = x_2 - 2 - (x_1 - 1)^3 \ge 0 \\ g_3(\boldsymbol{X}) = x_1 \ge 0 \\ g_4(\boldsymbol{X}) = x_2 \ge 0 \end{cases} \tag{23}$$

解：不难发现，这是一个标准的非线性规划问题。不妨假设初始点不满足所有约束条件，于是罚函数可以写为

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

对于固定的 M，可得罚函数的偏导数为

$$\frac{\partial P(\boldsymbol{X}, M)}{\partial x_1} = -1 + 2M\{6(x_1 - 1)^5 + x_1\}$$

$$\frac{\partial P(\boldsymbol{X}, M)}{\partial x_2} = 2M\{2(x_2 - 2) + x_2\}$$

令这两个偏导数为 0，得到

$$\{6(x_1 - 1)^5 + x_1\} = \frac{1}{2M}$$

$$x_2 = \frac{4}{3}$$

当 $M- > \infty$ 时，求得的解应该趋近于最优解，可知

$$0 < x_1^* < 1 \quad x_2^* = \frac{4}{3}$$

此解满足约束条件 g_1, g_3, g_4。g_2 是否满足说不好。因此，需要修改罚函数。根据刚才的计算结果，去掉 g_3, g_4，得到新的罚函数为

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

求得此时的最优解为 $\boldsymbol{X}^* = (1, 2), \min\ f(\boldsymbol{X}) = -1$。这个解既是罚函数的收敛值，又符合原问题的所有约束条件，因此就是原问题的最优解。

用混合法求解问题

$$\begin{cases} \min\ f(\boldsymbol{X}) = (x_1-1)^2 + (x_2-2)^2 \\ x_2 - x_1 = 0 \\ x_1 + x_2 \le 2 \\ x_1, x_2 \ge 0 \end{cases} \tag{24}$$

写出这个问题的罚函数

$$P(\boldsymbol{X}, M, r_k) = (x_1-1)^2 + (x_2-2)^2 + M[x_2-x_1]^2 + r_k\{\frac{1}{2-x_1-x_2} + \frac{1}{x_1} + \frac{1}{x_2}\}$$

现在，可以仿照内点法来求解这个问题。选择一个严格内点为初始点，求解过程中控制步长，使得到的解始终是严格内点。如果某一步 $M[x_2-x_1]^2 + r_k\{\frac{1}{2-x_1-x_2} + \frac{1}{x_1} + \frac{1}{x_2}\} < \varepsilon$ 则中止迭代。否则，令 $M_{k+1} = 10M_k, r_{k+1} = \frac{r_k}{10}$，然后重新求取最优解。