

Методы оптимизации. Курс лекций ДВГУ-ДВФУ

Е.А. Нурминский

Весенние семестры 2009,2010,2011,2012,2013,2014 гг.
Версия 12 апреля 2015 г.

Аннотация

Рассмотрена теория и вычислительные методы решения задачи минимизации нелинейных функций.

Содержание

1	Введение и основные понятия	4
2	Условия оптимальности	5
2.1	Оптимум без ограничений	5
2.1.1	Необходимые условия	5
2.1.2	Достаточные условия экстремума	6
2.2	Оптимум с ограничениями	8
2.2.1	Седловая точка функции Лагранжа	10
2.2.2	Дифференциальная форма условий оптимальности	15
2.3	Выпуклая оптимизация с точки зрения теории двойственности	17
2.3.1	Достаточные условия для задач с ограничениями	18
2.4	Минимизация на выпуклом множестве	21
3	Методы безусловной оптимизации	23
3.1	Градиентные методы	23
3.2	Скорость сходимости градиентного метода	24
3.2.1	Правило Армихо	25
3.2.2	Загадка $2/\lambda_{\max}$	27
3.3	Методы одномерной минимизации	27
3.3.1	Метод дихотомии	28
3.3.2	Поиск Фибоначчи	28
3.4	Метод Ньютона и его вариации	29
3.4.1	Метод Ньютона для решения систем уравнений	29
3.4.2	Метод Ньютона для решения экстремальных задач	31
3.4.3	Метод Ньютона с шагом	32
3.4.4	Метод доверительных областей	32
3.5	Метод сопряженных градиентов и направлений	34
3.5.1	Системы сопряженных векторов	34
3.5.2	Метод сопряженных градиентов	36

3.5.3	Пример использования метода сопряженных градиентов	38
3.5.4	Варианты метода сопряженных градиентов	38
3.6	Квазиньютоновские методы	39
3.6.1	Одноранговая коррекция	40
3.6.2	Двухранговая коррекция	41
3.6.3	Методы Бroyденoвскoгo типa	42
4	Методы прямого поиска	44
5	Методы решения задач с ограничениями	48
5.1	Методы штрафных и барьерных функций	48
5.2	Методы прямого учета ограничений	50
5.2.1	Метод условного градиента	50
5.2.2	Метод возможных направлений.	51
5.2.3	Метод проекций градиента	51
5.3	Метод модифицированной функции Лагранжа	52
5.3.1	Теория возмущений	55
5.4	Точные штрафные функции	57
5.5	Метод линеаризации	58
6	Двойственные алгоритмы	60
6.1	Сопряженные функции и двойственность	60
6.2	Монотропическая оптимизация	61
6.3	Квадратичное программирование с двойственной точки зрения	62
7	Специальные экстремальные задачи и методы их решения	63
7.1	Метод наименьших квадратов	63
7.2	Динамическое программирование	64
8	Практика решений задач оптимизации на ЭВМ	65
8.1	Представление исходных данных	65
8.2	Программа MINOS решения задач линейного программирования	68
8.2.1	Управление программой	68
8.2.2	Представление результатов	69
8.2.3	Информация о ходе вычислений	70
8.3	MINOS для нелинейной оптимизации	70
8.3.1	Программы пользователя	72
8.3.2	Дополнительная информация в SPECS.DAT	73
8.3.3	Особенности подготовки файла MPS.DAT	74
9	Приложение	76
9.1	Основные определения и обозначения	76
9.2	Выпуклость, отделимость и связанные вопросы	76
9.2.1	Основные определения и свойства	77
9.2.2	Проекция на выпуклое множество	80
9.2.3	Отделимость выпуклых множеств	80
9.2.4	Лемма Фаркаша	81
10	Рекомендуемая литература	83
10.1	Обязательная	83
10.2	Дополнительная	83

11 Тестовые и экзаменационные задачи	84
11.1 Условия оптимальности	84
11.2 Квадратичные задачи оптимизации	84
11.3 Одномерные задачи	85
11.4 Методы второго порядка	86
11.5 Работа с программой MINOS	87
12 Типовые вопросы на экзамене	90
13 Благодарности	91

1 Введение и основные понятия

Будет рассмотрена теория и вычислительные методы решения задачи

$$\min f(x), x \in X. \quad (1)$$

Задача (1) называется *оптимизационной* или *экстремальной*. Функция $f(x)$ называется *целевой* функцией, а множество X — *допустимым* множеством. В дальнейшем мы будем использовать более или менее стандартные обозначения, список которых приведен в Приложении 9.1.

Множество X обычно задается системой равенств или неравенств. Не умаляя общности нам будет удобно считать это множество заданным некоторой системой *неравенств*:

$$X = \{x : g_i(x) \leq 0, i = 1, 2, \dots, M\}. \quad (2)$$

Задачи нелинейного программирования отличаются тем, что либо $f(x)$ нелинейна, либо нелинейна какая-либо из функций $g_i(x), i = 1, 2, \dots, M$.¹

Нелинейное программирование возникло в 50-х годах 20-го века одновременно с появлением быстродействующих вычислительных машин и эти события тесно связаны. Только с появлением быстродействующих вычислителей стало реально возможным выполнять тот громадный объем вычислений, необходимый для решения практически интересных для техники и экономики экстремальных задач. В свою очередь прогресс в области вычислительной техники в значительной степени мотивировался потребностями науки и промышленности в решении подобных задач.

¹Задача (1) всегда может преобразована так, чтобы $f(x)$ была линейна:

$$\min\{f(x), x \in X\} = \min\{v, v \geq f(x), x \in X\} = \min cx', x' = (v, v) \in X' = X \cap (x, v) : f(x) - v \leq 0,$$

где $x' = (x, v)$ — расширенный вектор переменных, cx' — линейная целевая функция с вектором коэффициентов $c = (0_x, 1_v)$. т.е. с нулевыми коэффициентами по x и единичным по v .

2 Условия оптимальности

Один из первых результатов теории экстремальных задач были попытки характеристики точек, которые являются или могут быть решениями различных классов проблем. Такие условия делятся на достаточные (исследуемая точка "является" решением) и необходимые (исследуемая точка "может быть" решением). Естественно, необходимые условия являются менее жесткими и, с точки зрения формулировок, более простыми. Достаточные условия сводятся к необходимым плюс некоторые дополнительные требования к задаче и исследуемой точке.

Формулировки условий оптимальности зависят от классов задач и здесь мы рассмотрим два класса экстремальных задач с дифференцируемыми целевыми функциями и ограничениями. Эти два класса описывают основное деление оптимизационных задач на безусловные (без ограничений) и условные (с существенными ограничениями).

2.1 Оптимум без ограничений

Теория признаков оптимальности без ограничений, хотя и весьма проста, тем не менее может служить неплохим введением в предмет.

2.1.1 Необходимые условия

Необходимые условия оптимальности были, по-видимому, одними из первых результатов, полученных в этой области.

Теорема 1 (*T. Fermat, 1653*) Если точка x^* доставляет минимум дифференцируемой функции $f(x)$:

$$f(x^*) = \min_x f(x),$$

то $f'(x^*) = 0$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Сейчас доказательство этого факта представляет собой легкое упражнение для студентов первого года изучения основ математического анализа. Однако оно предоставляет шанс ввести некоторые полезные понятия и продемонстрировать генезис некоторых обобщений и численных методов.

Определим *производную по направлению*:

$$f'(x, d) = \lim_{h \rightarrow +0} (f(x + hd) - f(x))/h, \quad (3)$$

которая характеризует скорость роста функции f в точке x по направлению d . Элементарные вычисления показывают, что для дифференцируемой функции $f(x)$ с производной (градиентом) $f'(x)$ производная по направлению определяется формулой

$$f'(x, d) = f'(x)d. \quad (4)$$

Положим $x = x^*$. Если $f'(x^*) \neq 0$, то

$$0 > -\|f'(x^*)\|^2 = -f'(x^*)f'(x^*) = f'(x^*, -f'(x^*)).$$

По определению (3) производной по направлению

$$(f(x^* - hf'(x^*)) - f(x^*))/h = f'(x^*, -f'(x^*)) + O(h) = -\|f'(x^*)\|^2 + O(h),$$

где $O(h) \rightarrow 0$ при $h \rightarrow +0$. Следовательно, для достаточно малых $h > 0$ остаточный член $|O(h)| < \|f'(x^*)\|^2/2$ и, соответственно,

$$f(x^* - hf'(x^*)) - f(x^*) < -h\|f'(x^*)\|^2 + h\|f'(x^*)\|^2/2 = -h\|f'(x^*)\|^2/2 < 0$$

если $f'(x^*) \neq 0$. Следовательно $f(x^* - hf'(x^*)) < f(x^*)$ и x^* не может быть точкой минимума. \square

Важные уроки, которые можно извлечь из этого доказательства, заключаются в том, что оно, во-первых, вводит важное понятие производной по направлению и, во-вторых, подсказывает направление ($d = -f'(x)$!), при сдвиге в направлении которого ($x \rightarrow x + hd = x - hf'(x)$) из точки x можно *улучшить* (уменьшить) целевую функцию, если ее градиент $f'(x)$ отличен от нуля.

Первое дает возможность формулировать условия оптимальности и для других классов функций, лишь бы у них существовала производная по направлению: примерами таких функций являются выпуклые, но необязательно дифференцируемые функции, кусочно-гладкие функции и пр. Второе порождает градиентный метод минимизации, все еще используемый в специальных случаях, но в основном вытесненный из массового применения другими, намного более эффективными алгоритмами.

Из оптимальности точки x^* можно получить информацию и о поведении ее вторых производных в этой точке.

Теорема 2 Если точка x^* доставляет минимум дважды дифференцируемой функции $f(x)$:

$$f(x^*) = \min_x f(x),$$

то матрица вторых производных функции f в точке x^* неотрицательно определена: $zf''(x^*)z \geq 0$ для всех z .

Доказательство. Из оптимальности x^* следует, что

$$f(x^*) \leq f(x^* + y) = f(x^*) + \frac{1}{2}yf''(x^*)y + o(\|y\|^2) \quad (5)$$

для всех y , причем $o(\|y\|^2)/\|y\|^2 \rightarrow 0$ при $y \rightarrow 0$.

Разделив неравенство (5) на $\|y\|^2$ и устремив y к 0 так, чтобы $y/\|y\| \rightarrow z$, получим $zf''(x^*)z \geq 0$. \square

Опять же функция может иметь в точке x^* неотрицательно определенную матрицу вторых производных $f''(x^*)$, однако не иметь в этой точке локального минимума. В принципе, она даже может иметь в этой точке максимум, как показывает пример $f(x) = -x^4$ с $x^* = 0$.

2.1.2 Достаточные условия экстремума

Легко видеть, что обращение теоремы 1 неверно: функция $f(x)$, изображенная на рис. 1 в точке x^* имеет нулевую производную, однако эта точка не является ни минимумом, ни максимумом $f(x)$.

Условия, гарантирующие оптимальность некоторой точки, называются *достаточными* условиями экстремума.

Теорема 3 Если в точке x^* выполнены условия:

1. $f'(x^*) = 0$,
2. Матрица вторых производных $f''(x^*)$ положительно определена,

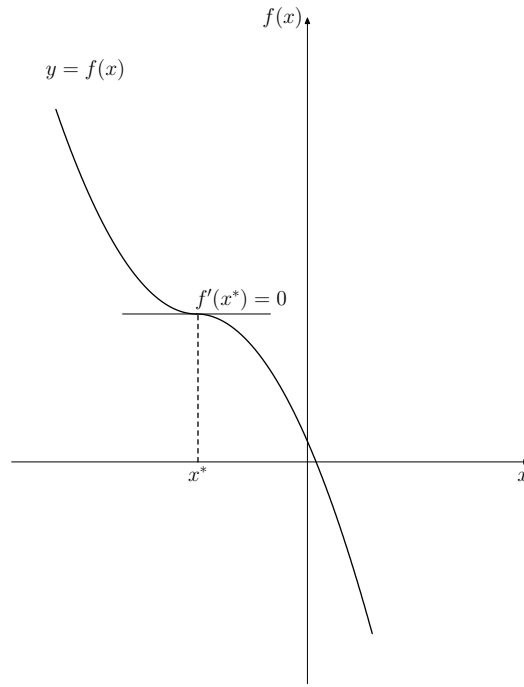


Рис. 1: Необходимые условия экстремума не являются достаточными.

то точка x^* является изолированной² точкой локального минимума.

Доказательство. Положительная определенность $f''(x^*)$ означает, что $zf''(x^*)z > 0$ для $z \neq 0$. Обозначим

$$\gamma = \min_{\|z\|=1} zf''(x^*)z.$$

В силу замкнутости и ограниченности единичной сферы $S = \{z : \|z\| = 1\}$, а также в силу непрерывности квадратичной функции $zf''(x^*)z$ как функции z , величина $\gamma > 0$.

Положим $x = x^* + \lambda z, z \in S$ и оценим

$$f(x) = f(x^* + \lambda z) = f(x^*) + \frac{1}{2}\lambda^2 zf''(x^*)z + o(\lambda^2),$$

где $o(\lambda^2)/\lambda^2 \rightarrow 0$ при $\lambda \rightarrow 0$. Отсюда следует, что

$$f(x) = f(x^*) + \frac{1}{2}\lambda^2(zf''(x^*)z + o(\lambda^2)/\lambda^2) \geq f(x^*) + \lambda^2(\gamma/2 + o(\lambda^2)/\lambda^2) \geq f(x^*) + \lambda^2\gamma/4 = f(x^*) + \lambda^2\gamma'$$

с $\gamma' > 0$ для достаточно малых $\lambda > 0$. Другими словами, существует $\epsilon > 0$ такое, что для всех $0 < \|x - x^*\| = \lambda \leq \epsilon$ выполняется неравенство

$$f(x) \geq f(x^*) + \gamma'\|x - x^*\|^2 > f(x^*)$$

и, следовательно, x^* является изолированной точкой локального минимума. \square

Слабость достаточных условий состоит в том, что их невыполнение в точке x^* еще не говорит о том, что эта точка не является точкой минимума. Простым примером является $f(x) = x^4$: в точке $x^* = 0$ функция имеет изолированный даже глобальный оптимум, однако достаточные условия теоремы 3 в точке x^* не выполнены: $f''(x^*) = 12(x^*)^2 = 0$.

²Изолированность точки локального минимума x^* означает, что существует некоторая окрестность точки x^* такая, что в этой окрестности из $x \neq x^*$ следует $f(x) > f(x^*)$.

2.2 Оптимум с ограничениями

Как бы знаменит результат теоремы 1 не был, он имеет весьма ограниченную практическую ценность. Оптимизационные задачи, возникающие на практике, имеют, как правило, нетривиальные ограничения, а теорема 1 в этом случае неприменима. Дальнейший прогресс в этой области был достигнут другим гигантом математической мысли: Ж. Лагранжем³. Для решения *условных* экстремальных задач с нелинейными ограничениями-равенствами

$$\min_{x \in X} f(x), X = \{x : g_i(x) = 0, i = 1, 2, \dots, m\} \quad (6)$$

им была введена функция

$$L(x, u) = f(x) + \sum_{i=1}^m u_i g_i(x)$$

названная в его честь *функцией Лагранжа*. Эта функция содержит дополнительные переменные $u_i, i = 1, 2, \dots, m$, которые называют *множителями Лагранжа*. Условия оптимальности для задач вида (6) формулируются в виде условий на функцию Лагранжа.

Для ограничений-равенств, как в задаче (6), эти условия имеют простой вид. Для краткости обозначений введем специальное обозначение

$$J_g(x) = \begin{vmatrix} g'_{11}(x) & g'_{12}(x) & \dots & g'_{1n}(x) \\ g'_{21}(x) & g'_{22}(x) & \dots & g'_{2n}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g'_{m1}(x) & g'_{m2}(x) & \dots & g'_{mn}(x) \end{vmatrix}$$

для якобиана вектор-функции $g(x) = (g_1(x), g_2(x), \dots, g_m(x))$. Величина $g'_{ij}(x)$ обозначает частную производную функции $g_i(x)$ по переменной x_j . В этих обозначениях формула Тейлора первого порядка для функции $g(x)$ записывается просто как

$$g(x + y) = g(x) + J_g(x)y + o(y),$$

где $\|o(y)\|/\|y\| \rightarrow 0$ при $y \rightarrow 0$.

Теорема 4 Пусть x^* — решение задачи (6) и $J_g(x^*)$ — матрица полного ранга⁴. Тогда существуют u_1, u_2, \dots, u_m такие, что

$$f'(x^*) + \sum_{i=1}^m u_i g'_i(x^*) = 0. \quad (7)$$

Доказательство. Вводя вектор-строку двойственных переменных $u = (u_1, u_2, \dots, u_m)$ соотношение (7) можно переписать в виде

$$f'(x^*) + u J_g(x^*) = 0.$$

Для его доказательства заметим, что если $g(x^*) = 0$ и $J_g(x^*)d = 0$, то $\|g(x^* + \lambda d)\| < \|o(\lambda)\|$, где $o(\lambda)/\lambda \rightarrow 0$ при $\lambda \rightarrow 0$, что элементарно следует из формулы Тейлора первого порядка. Справедливо и обратное — если $\|g(x^* + \lambda d)\| < \|o(\lambda)\|$ с $o(\lambda)/\lambda \rightarrow 0$ при $\lambda \rightarrow 0$, то $J_g(x^*)d = 0$.

³<http://www-groups.dcs.st-and.ac.uk/~history/Biographies/Lagrange.html>

⁴Так как $m \leq n$, то это означает, что строки матрицы $J_g(x^*)$ линейно независимы, или линейно независимы градиенты ограничений $g'_i(x^*), i = 1, 2, \dots, m$. Такая точка называется еще регулярной.

Пусть x такого, что $g(x) = 0$. Представив x как $x = x^* + \lambda d_\lambda$ с $\lambda = \|x^* - x\|$ и $d_\lambda = (x - x^*)/\|x^* - x\|$ получим, в силу того, что,

$$g(x^* + \lambda d_\lambda) = 0$$

переходя к пределу по $\lambda \rightarrow 0, d_\lambda \rightarrow d$

$$J_g(x^*)d = 0. \quad (8)$$

Оптимальность x^* требует, чтобы $f(x^*) \leq f(x)$ для всех x достаточно близких к x^* и таких, что $g(x) = 0$. Соответственно $f'(x^*)d \leq 0$ для всех d таких, что выполнено (8), а поскольку d и $-d$ одинаково удовлетворяют (8), то

$$f'(x^*)d = 0. \quad (9)$$

Условия (8) и (9) можно представить в виде

$$\begin{vmatrix} J_g(x^*) \\ f'(x^*) \end{vmatrix} d = \bar{J}_g(x^*)d = 0,$$

откуда в силу стандартной линейной алгебры следует линейная зависимость строк матрицы $\bar{J}_g(x^*)$, т.е. существование ненулевого вектора $\bar{u} = (u_0, u)$, такого, что

$$\bar{u}\bar{J}_g(x^*) = u_0 f'(x^*) + u J_g(x^*) = 0. \quad (10)$$

Заметим, что $u_0 \neq 0$ в силу полного ранга $J_g(x^*)$. Разделив (10) на u_0 получим, после переобозначений, утверждение теоремы (7). \square

Необходимые условия экстремума для ограничений-равенств, доказанные только что, проиллюстрированы на Рис. 2. На этом рисунке изображена экстремальная задача с тремя переменными $x = (x_1, x_2, x_3)$ и двумя ограничениями-равенствами $g_1(x) = 0, g_2(x) = 0$, которые определяют одномерное допустимое множество. В оптимальной точке x^* целевая функция $f(x)$ должна иметь градиент $f'(x^*)$, локально ортогональный допустимому множеству, иначе сдвинувшись в направлении проекции антиградиента можно уменьшить значение целевой функции, а это противоречит оптимальности x^* . Но подпространство всех направлений, локально ортогональных допустимому множеству в точке x^* , совпадает с линейной оболочкой градиентов ограничений $g'_1(x^*)$ и $g'_2(x^*)$ и, следовательно, $f'(x^*) \in \text{lin}\{g'_1(x^*), g'_2(x^*)\}$, что собственно говоря и означает, что

$$f'(x^*) = u_1 g'_1(x^*) + u_2 g'_2(x^*)$$

для некоторых u_1, u_2 .

В дальнейшем условия оптимальности были обобщены на случай ограничений-неравенств, эти обобщения также были выполнены в общем-то в рамках формализма Лагранжа, хотя и с использованием другого математического аппарата. В следующем разделе будет рассматриваться задача

$$\min_{x \in X} f(x), \quad X = \{x : g_i(x) \leq 0, i = 1, 2, \dots, m\} \quad (11)$$

т.е. с допустимым множеством

$$X = \{x : g_i(x) \leq 0, i = 1, 2, \dots, m\} = \{x : g(x) \leq 0\}, \quad (12)$$

заданном системой неравенств.

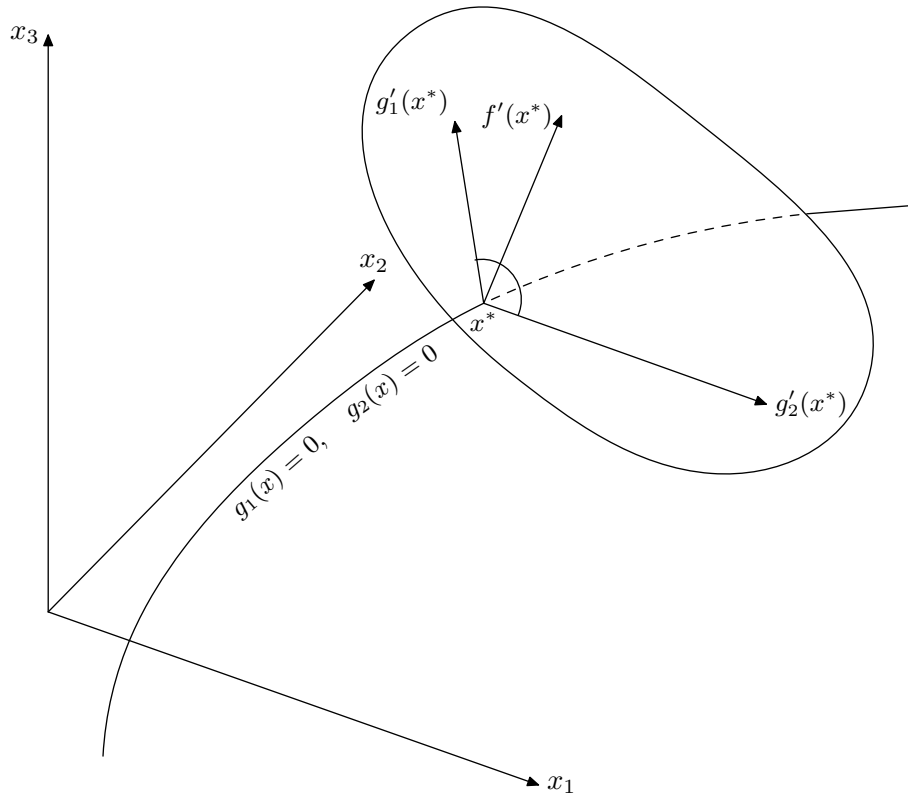


Рис. 2: Иллюстрация необходимых условий оптимума для ограничений-равенств

2.2.1 Седловая точка функции Лагранжа

Для оптимизационных задач с ограничениями-неравенствами существует и другая форма условий экстремума, которая формулируется в виде условий, которым должна удовлетворять функция Лагранжа. Оказывается, существование экстремума тесно связано с наличием у функции Лагранжа так называемой седловой точки.

Определение 5 Точка (x^*, u^*) называется седловой точкой функции $L(x, u)$, если для любых $u \geq 0, x$ выполнены неравенства

$$L(x, u^*) \geq L(x^*, u^*) \geq L(x^*, u). \quad (13)$$

Такая точка называется седловой, поскольку из (13) следует

$$\min_x \max_{u \geq 0} L(x, u) = \max_{u \geq 0} \min_x L(x, u) = L(x^*, u^*).$$

Действительно, непосредственно из (13) следует

$$\min_x L(x, u^*) \geq L(x^*, u^*) \geq \max_{u \geq 0} L(x^*, u).$$

Однако

$$\min_x L(x, u^*) \leq \max_{u \geq 0} \min_x L(x, u)$$

и

$$\max_{u \geq 0} L(x^*, u) \geq \min_x \max_{u \geq 0} L(x, u)$$

следовательно

$$\max_{u \geq 0} \min_x L(x, u) \geq L(x^*, u^*) \geq \min_x \max_{u \geq 0} L(x, u).$$

С другой стороны для произвольных x и $u \geq 0$

$$\min_x L(x, u) \leq L(x, u) \leq \max_{u \geq 0} L(x, u)$$

и следовательно выполнено противоположное неравенство

$$\max_{u \geq 0} \min_x L(x, u) \leq \min_x \max_{u \geq 0} L(x, u)$$

откуда

$$\min_x \max_{u \geq 0} L(x, u) = \max_{u \geq 0} \min_x L(x, u) = L(x^*, u^*).$$

Другими словами, если у функции $L(x, u)$ есть седловая точка, то \min_x и $\max_{u \geq 0}$ у этой функции переставимы, что весьма удобно для функции Лагранжа, где зависимость от двустепенных переменных очень простая.

Связь между седловой точкой функции Лагранжа и решением соответствующей оптимизационной задачей описывается следующими двумя теоремами. Первая из них показывает, что существование седловой точки влечет за собой оптимальность ее x -компоненты:

Теорема 6 Если (x^*, u^*) — седловая точка функции Лагранжа, то $x^* \in X$ и

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x) = \min_{g_i(x) \leq 0, i=1,2,\dots,m} f(x).$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Из правой части (13) следует, что

$$\sum_{i=1}^m u_i^* g_i(x^*) \geq \sum_{i=1}^m u_i g_i(x^*) \quad (14)$$

для любых $u_i \geq 0$. Отсюда ясно, что как минимум $g_i(x^*) \leq 0$, т.е. точка x^* с необходимостью удовлетворяет ограничениям задачи (11-12).

Более того, полагая в (14) $u_i \equiv 0$ получаем

$$0 \geq \sum_{i=1}^m u_i^* g_i(x^*) \geq 0$$

а учитывая то, что все слагаемые этой суммы неположительны, то

$$u_i^* g_i(x^*) = 0, i = 1, 2, \dots m. \quad (15)$$

Эти условия носят название условий дополняющей нежесткости или условий комплементарности.

Из (15) следует, в частности, что для ограничений, выполняющихся как строгие неравенства, соответствующие двойственные переменные равны нулю. При выполнении некоторых дополнительных условий регулярности выполняются и условия строгой дополняющей нежесткости:

$$u_i^* g_i(x^*) = 0, i = 1, 2, \dots m, \quad u_i^* - g_i(x^*) > 0,$$

или условия строгой комплементарности.

Далее, из (13) следует, что

$$f(x^*) = L(x^*, u^*) \leq L(x, u^*) = f(x) + \sum_{i=1}^m u_i^* g_i(x).$$

Если $x \in X$, то $\sum_{i=1}^m u_i^* g_i(x) \leq 0$ и, следовательно,

$$f(x^*) \leq f(x),$$

что доказывает оптимальность x^* . \square

Замечательной особенностью этой теоремы является полное отсутствие каких-либо условий на функции f и $g_i, i = 1, 2, \dots, m$. Все это заставляет предположить, что существование седловой точки у функции Лагранжа — это весьма сильное условие для экстремальной задачи.

И на самом деле гарантировать существование седловой точки у функции Лагранжа можно лишь в так называемом выпуклом случае и при выполнении определенных условий регулярности. Одним из таких широко применяющихся условий является так называемое условие Слейтера.

Определение 7 Система неравенств

$$g_i(x) \leq 0, i = 1, 2, \dots, m$$

с выпуклыми функциями $g_i(\cdot)$ удовлетворяет условию Слейтера, если существует \bar{x} такое, что

$$g_i(\bar{x}) < 0, i = 1, 2, \dots, m$$

Условию Слейтера можно придать и эквивалентную, хотя на первый взгляд и менее ограничительную форму

Определение 8 Система неравенств

$$g_i(x) \leq 0, i = 1, 2, \dots, m$$

с выпуклыми функциями $g_i(\cdot)$ удовлетворяет условию Слейтера, если для каждого i существует \bar{x}^i такое, что

$$g_i(\bar{x}^i) < 0, g_j(\bar{x}^i) \leq 0, i, j = 1, 2, \dots, m, j \neq i$$

Определения 7 и 8 эквивалентны, поскольку если выполнены условия определения 8, то для точки

$$\bar{x} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \bar{x}^i$$

в силу неравенства Йенсена ⁵ Для выпуклых функций

$$g_i(\bar{x}) = g_i\left(\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \bar{x}^j\right) \leq \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m g_i(\bar{x}^j) \leq \frac{1}{m} g_i(\bar{x}^i) < 0$$

⁵Неравенство Йенсена утверждает, для выпуклой функции f

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

для произвольного набора точек x^1, x^2, \dots, x^m и неотрицательных любых неотрицательных λ_i таких, что $\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$.

Биографию Johan Ludwig William Valdemar Jensen можно найти в <http://www-history.mcs.st-andrews.ac.uk/Biographies/Jensen.html>

для всех i и следовательно условия определения 7 также выполнены. Можно показать, что роль условия Слейтера в теории условий экстремума заключается в том, что для выпуклых функций $g_i(\cdot)$, $i = 1, 2, \dots, m$, задающих множество ограничений, это условие простым образом гарантирует отсутствие вырождения градиентов активных ограничений $g'_i(x)$, i такое, что $g_i(x) = 0$, на границе допустимого множества.

Далее мы будем предполагать, что f и g_i , $i = 1, 2, \dots, m$ — выпуклые функции и, следовательно, X — выпуклое множество.

Теорема 9 Если f и g_i , $i = 1, 2, \dots, m$ — выпуклые функции, задача (11) имеет хотя бы одно решение и выполнено условие Слейтера, то существуют двойственные переменные $u^* = (0 \leq u_i^*, i = 1, 2, \dots, m)$, такие, что (x^*, u^*) является седловой точкой функции Лагранжа.

Д о к а з а т е л ь с т в о . Предположим, что x^* — решение задачи (11) и обозначим через $Z \subset E^{m+1} = \mathbb{R} \times E^m$ следующее множество, состоящее из пар $\bar{z} = (\zeta, z)$:

$$Z = \bigcup_{x \in E} \{\zeta \geq f(x) - f(x^*), z \geq g(x)\}$$

Пример такого множества для простейшей задачи

$$\begin{aligned} \min x \\ x^2 - 1 \leq 0 \end{aligned} \tag{16}$$

приведен на рис. 3.

Легко проверить, что, как и в приведенном примере, Z — выпуклое множество при выпуклых функциях f, g и в общем случае. Действительно, пусть $\bar{z}' = (\zeta', z') \in Z$, $\bar{z}'' = (\zeta'', z'') \in Z$, то есть

$$\begin{aligned} \zeta' &\geq f(x') - f(x^*), z' \geq g(x'), \\ \zeta'' &\geq f(x'') - f(x^*), z'' \geq g(x''), \end{aligned} \tag{17}$$

для некоторых $x', x'' \in X$. Умножая эти неравенства на 0.5 и складывая, получаем

$$\begin{aligned} \zeta &= 0.5(\zeta' + \zeta'') \geq 0.5(f(x') + f(x'')) - f(x^*) \geq f(0.5(x' + x'')) - f(x^*) = f(\bar{x}) - f(x^*), \\ z &= 0.5(z' + z'') \geq 0.5(g(x') + g(x'')) \geq g(0.5(x' + x'')) = g(\bar{x}), \end{aligned}$$

то есть $\bar{z} = (\zeta, z) = 0.5(\bar{z}' + \bar{z}'') \in Z$, что доказывает выпуклость Z .

Заметим, что точка $0 = \overbrace{(0, 0, \dots, 0)}^{m+1}$ не принадлежит внутренности Z , как это и показано на рис. 3.

Действительно, если бы $0 \in \text{int } Z$, то для некоторого $\epsilon > 0$ существует $x' \in X$ такое, что

$$g(x') \leq 0, \zeta' = f(x') - f(x^*) \leq -\epsilon < 0$$

или $\min_{x \in X} f(x) \leq f(x') < f(x^*) - \epsilon < f(x^*)$, что означает, что x^* не является решением задачи (11).

Так как $0 \notin \text{int } Z$, то по теореме отделимости 44 (стр. 81) существуют такие $v_* \in \mathbb{R}$ и $u^* \in E^m$, не все равные нулю и такие, что

$$v_* \cdot 0 + u^* 0 = 0 \leq v_* \zeta + u^* z \tag{18}$$

для произвольных $\zeta \geq f(x) - f(x^*), z \geq g(x)$ при каком-либо $x \in X$. Отсюда немедленно следует, что $v_* \geq 0, u^* \geq 0$.

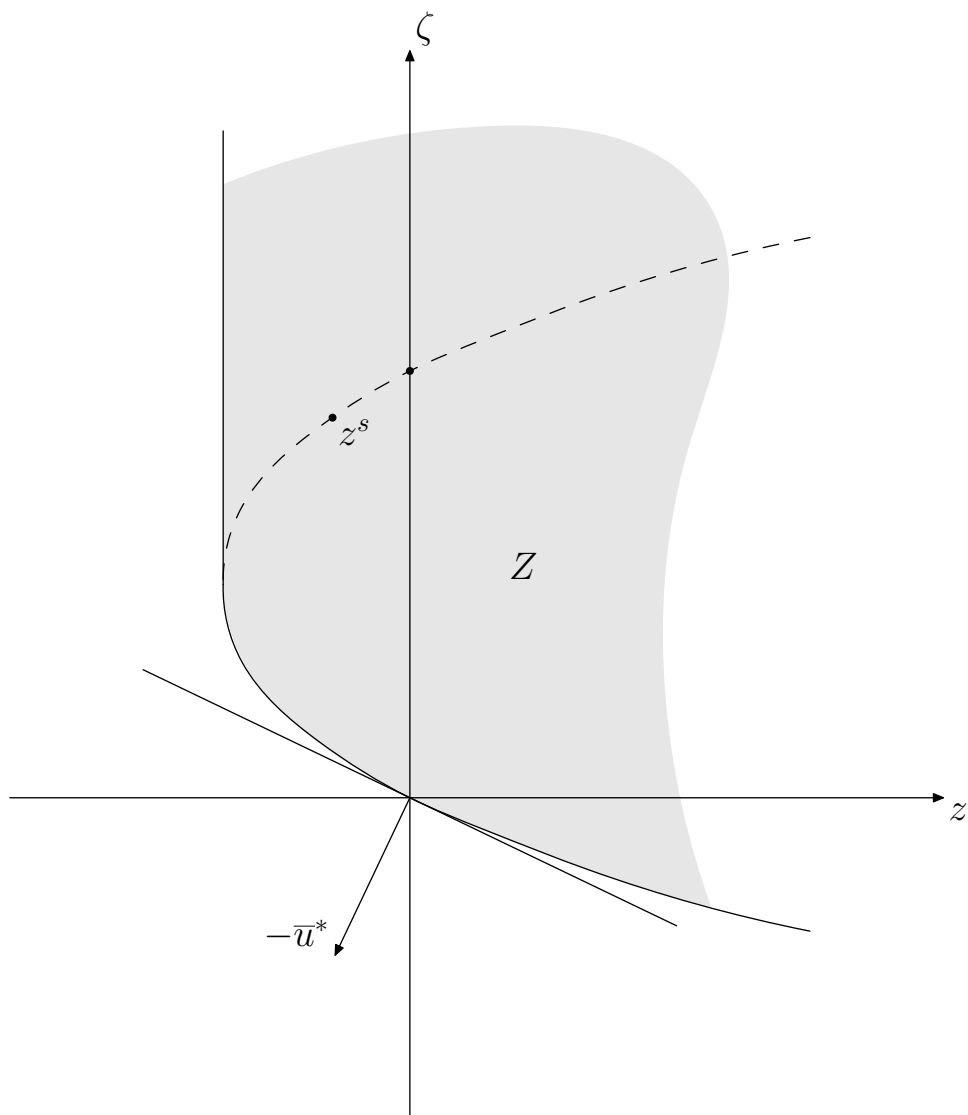


Рис. 3: Пример множества Z для задачи (16). Показаны одна из возможных точек Слейтера (z^S) и опорная плоскость $-\bar{u}^*$, порождающая множители Лагранжа.

Применяя (18) к $\zeta = 0 = f(x^*) - f(x^*)$, $z = g(x^*) \leq 0$ получаем, что

$$u^* g(x^*) = 0$$

или $u_i^* g_i(x^*) = 0, i = 1, 2, \dots, m$. Это условие называется условием комплементарности или условием дополняющей нежесткости.

Взяв в (18) \inf по $\zeta \geq f(x) - f(x^*), z \geq g(x)$ получим

$$v_* f(x^*) \leq v_* f(x) + u^* g(x),$$

где v и u^* не равны нулю одновременно.

Если существует \bar{x} такое, что $g(\bar{x}) < 0$ (условие Слейтера), то $v_* > 0$. Разделив на него и переобозначив u^* получим

$$f(x^*) + u^* g(x^*) = f(x^*) \leq f(x) + u^* g(x)$$

или

$$L(x^*, u^*) \leq L(x, u^*)$$

т.е. правое неравенство в определении седловой точки (13).

Левое неравенство в (13) тривиально, так как для любого $u \geq 0$

$$L(x^*, u) = f(x^*) + u g(x^*) \leq f(x^*) = f(x^*) + \sum_{i=1}^m u_i^* g_i(x^*) = L(x^*, u^*).$$

□.

2.2.2 Дифференциальная форма условий оптимальности

Условия связывающие оптимальность с седловой точкой функции Лагранжа имеют большое теоретическое значение, так как применимы к весьма общим ситуациям. Вместе с тем они недостаточно конструктивны, так как представляют собой по сути дела бесконечную систему неравенств. На практике чаще применяют дифференциальную форму условий оптимальности, известную под названием условий Куна-Таккера. Для формулировки этих условий введем для задачи (11) несколько дополнительных определений.

Определение 10 Множество $I(x)$ индексов ограничений, таких что $g_i(x) = 0$ при $i \in I(x)$ называется множеством активных ограничений.

Для понимания понятия условий оптимальности весьма полезно освоиться с понятием конуса допустимых направлений. Пусть x^* — некоторая (фиксированная) точка.

Определение 11 Для множества X и точки $x^* \in X$ множество $K(x^*)$ направлений d таких, что для каждого d существует $\bar{\lambda} > 0$ такое, что $x^* + \lambda d \in X$ для всех $\lambda \in [0, \bar{\lambda}]$ называется конусом допустимых направлений.

То, что это конус, легко проверить непосредственно. Множество (конус) $K(x^*)$ допустимых направлений можно охарактеризовать следующей леммой.

Лемма 12 Если d такого, что существует $\sigma > 0$ при котором

$$dg'_i(x^*) + \sigma \leq 0, i \in I(x^*),$$

, то d — допустимое направление.

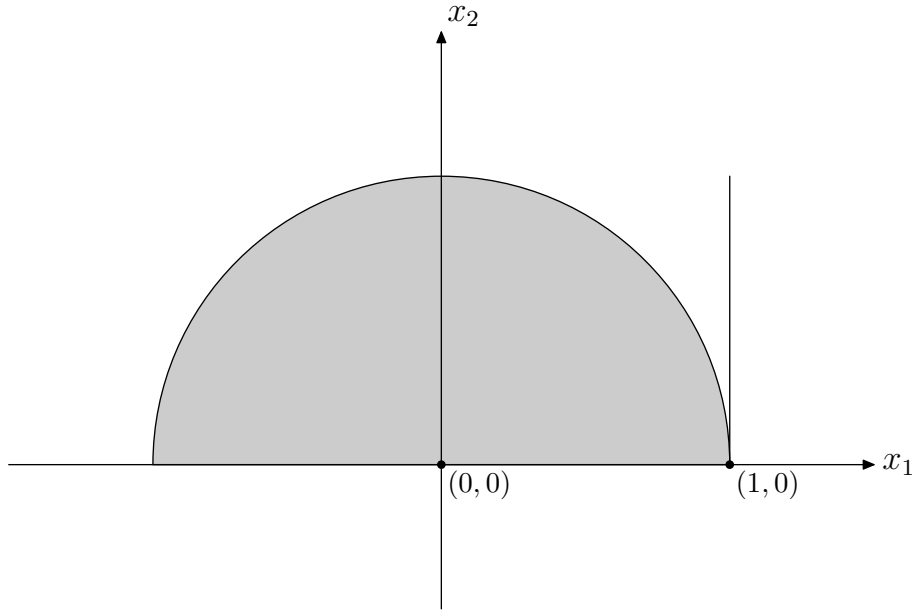


Рис. 4: Конус допустимых направлений

Д о к а з а т е л ь с т в о. Проблему представляют только ограничения группы $I(x^*)$, для остальных любое направление является допустимым. Пусть d и σ удовлетворяют условиям леммы 12 с $\sigma > 0$. Тогда

$$\begin{aligned} g_i(x^* + \lambda d) &= g_i(x^*) + \lambda dg'_i(x^*) + o(\lambda) \leq \\ &-\lambda\sigma + o(\lambda) \leq -\lambda(\sigma - o(\lambda)/\lambda) \leq -\lambda\sigma/2 < 0, \end{aligned}$$

для достаточно малых $\lambda > 0$, т.е. точка $x^* + \lambda d$ будет допустимой. \square Заметим, что указанная лемма характеризует $K(x^*)$ "изнутри":

$$K_0(x^*) = \{d : dg'_i(x^*) + \sigma \leq 0, i \in I(x^*), \sigma > 0\} \subset K(x^*).$$

То, что включение может быть строгое, показывает следующий пример. Пусть $X = \{(x_1, x_2) : x_2 \geq 0, x_1^2 + x_2^2 \leq 1\}$. Точка $x^0 = (1, 0) \in X$ и конус $K(x^0)$ имеет вид:

$$K(x^0) = \{d = (d_1, d_2) : d_1 < 0, d_2 \geq 0\}.$$

Оба ограничения активны в точке x^0 : $I(x^0) = \{1, 2\}$ и

$$K(x^0) \supset \{d : g'_1(x^0)d < 0, g'_2(x^0)d < 0\} = \{d : -d_2 < 0, d_1 < 0\} = \{d : d_1 < 0, d_2 > 0\}$$

и $K(x^0) \subset \{d = (d_1, d_2) : d_1 \leq 0, d_2 \geq 0\}$, причем оба последних включения строгие.

Упражнение. Показать, что если ограничения линейные: $X = \{x : Ax \leq b\}$ то $K_X = K_X^v$. Лемма 12 дает возможность доказать основной результат.

Теорема 13 Если x^* является точкой локального минимума и $g'_i(x^*), i \in I(x^*)$ линейно независимы, то существуют $u_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, m$, такие, что

$$f'(x^*) + \sum_{i=1}^m u_i g'_i(x^*) = 0.$$

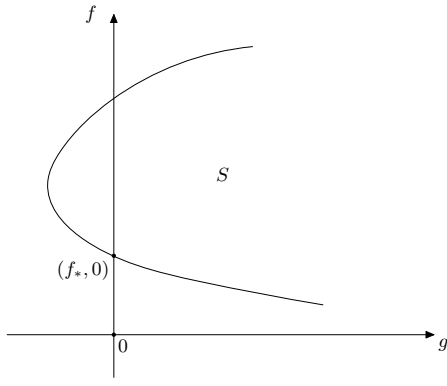


Рис. 5: Задача 1. $\min_{(g,f) \in S} f$

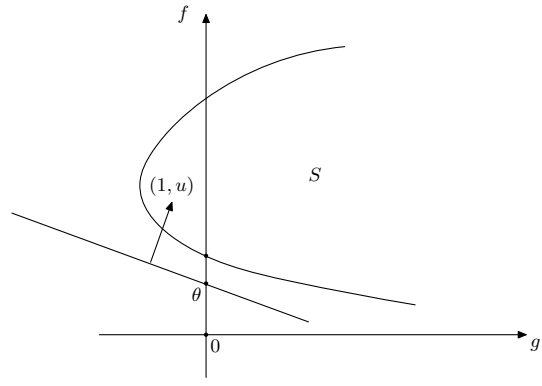


Рис. 6: Задача 2. $\max_{(g,f) \in S} (pg - f)$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Заметим, что если x^* допустима и оптимальна, то система неравенств

$$dg'_i(x^*) + \sigma \leq 0, i \in I(x^*), \quad (19)$$

$$: \quad df'(x^*) + \sigma \leq 0 \quad (20)$$

непрерывно имеет решение с $\sigma \leq 0$. В противном случае направление d является допустимым (лемма 12), а так как

$$f'(x^*, d) = df'(x^*) \leq -\sigma < 0,$$

то, аналогично, и $f(x^* + \lambda d) < f(x^*)$, откуда следует, что x^* не может быть точкой локального минимума.

Таким образом для любой пары $\bar{d} = (d, \sigma)$, удовлетворяющей (19)-(20) $\sigma \leq 0$, что может быть записано как

$$0d + 1\sigma = \bar{d}\bar{p} \leq 0 \quad (21)$$

с $\bar{p} = (0, 1)$. Лемма Фаркаша (см. раздел 9.2.4) при этом утверждает, что существуют $0 \leq u_0, u_i, i \in I(x^*)$ такие, что

$$0 = u_0 f'(x^*) + \sum_{i \in I(x^*)} u_i g'_i(x^*) \quad (22)$$

и

$$1 = u_0 + \sum_{i \in I(x^*)} u_i.$$

Из линейной независимости $g'_i(x^*), i \in I(x^*)$ и того, что в силу последнего равенства все u_i не могут быть одновременно равными нулю следует, что $u_0 > 0$. Нормируя уравнение (22) на u_0 получаем утверждение теоремы. \square

2.3 Выпуклая оптимизация с точки зрения теории двойственности

Две фундаментальные задачи теории двойственности представлены на рис 5 и 6. Пусть

$$f_* = \min_{g(x) \leq 0,} f(x) = \min_{\substack{f(x) \\ g_i(x) \leq 0, \\ i = 1, 2, \dots, m}} f(x) = \min_{x \in X} f(x)$$

Для простоты считаем, что $f_* > -\infty$ для любого x и что существует такое $0 \leq u^* = (u_1^*, u_2^*, \dots, u_m^*)$, что $u^* g(x^*) = 0$ и $f_* = \min L(x, u^*)$. Мы знаем, что для выпуклых f, g, X

и выполнения некоторых условий регулярности существуют множители Лагранжа u^* , такие, что $f_* = \min L(x, u^*)$ и $u^*g(x^*) = 0$. Последнее позволяет определить так называемые геометрические множители Лагранжа как некоторые p^* такие, что 1) $p^* \geq 0$, 2) $f_* = \inf_{x \in X} L(x, p^*)$. Для регулярных случаев, например, при выполнении условия Слейтера геометрические множители Лагранжа существуют, однако они могут существовать и в том случае, когда классических множителей Лагранжа не существует, даже в предположениях выпуклости.

Пример. Рассмотрим задачу $\min \exp(-x), x \geq 0$ с очевидным геометрическим множителем Лагранжа $p^* = 0$. При этом не существует такого $u^* \geq 0$, что задача $\min L(x, u^*) = \min\{\exp(-x) - u^*x\}$ имела бы решение.

2.3.1 Достаточные условия для задач с ограничениями

В этом разделе будут сформулированы достаточные условия экстремума для задачи

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ h(x) = 0 \end{aligned} \quad (23)$$

где ограничения имеют форму равенств с нелинейной вектор-функцией $h : E_n \rightarrow E_m$. Как это типично для достаточных условий мы будем предполагать дважды дифференцируемость f и h .

Под изолированным локальным минимумом в задаче (23) мы будем понимать такую точку x^* , для которой существует окрестность нуля U , такая что $f(x^* + u) > f(x^*)$ для всех $u \in U, u \neq 0$ таких, что $h(x^* + u) = 0$.

Для вывода достаточных условий экстремума потребуется вспомогательная лемма.

Лемма 14 Пусть P и Q — неотрицательно определенные симметричные матрицы и $xPx > 0$ для любого x такого, что $xQx = 0$. Тогда существует такое \bar{c} , что матрица $P + cQ$ является положительно определенной для любого $c \geq \bar{c}$.

Доказательство. Действительно, пусть лемма неверна. Тогда для $k = 1, 2, \dots$ существует последовательность $z^k, k = 1, 2, \dots, z^k \neq 0$, таких, что

$$z^k R z^k + k z^k Q z^k \leq 0. \quad (24)$$

Не умаляя общности можно считать, что $\|z^k\| = 1$ и, следовательно, из последовательности z^k можно извлечь сходящуюся подпоследовательность $z^k \rightarrow \bar{z}$. Разделив (24) на k и переходя к пределу по $k \rightarrow \infty$ получим в частности, что $\bar{z}Q\bar{z} \leq 0$, а учитывая, что $zQz \geq 0$ то $\bar{z}Q\bar{z} = 0$.

Следовательно, $\bar{z}R\bar{z} > 0$ и соответственно $z^k R z^k > 0$ для достаточно больших k , взятых из соответствующей подпоследовательности. При этом $z^k R z^k + k z^k Q z^k > 0$ что противоречит (24) и, значит, доказывает лемму. \square Для лучшего понимания этой леммы рассмотрим следующий пример.

Пример. Пусть матрицы P и Q имеют следующий вид:

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Нуль-пространство матрицы Q имеет вид $N_Q = \{(x_1, x_2) : \{x = (x_1, x_2) : x_1 = x_2\}\}$. На этом подпространстве

$$xPx = \begin{pmatrix} x & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ x \end{pmatrix} = x^2 - \frac{1}{2}x^2 > 0 \text{ для } x \neq 0.$$

Матрица

$$P + kQ = \begin{pmatrix} k+1 & -k \\ -k & k - \frac{1}{2} \end{pmatrix} = R_k$$

Главные миноры первого порядка очевидным образом положительны, так что для проверки полной положительной определенности R_k необходимо лишь вычислить ее определитель:

$$\det R_k = (k+1)(k - \frac{1}{2}) - k^2 = \frac{1}{2}k - \frac{1}{2} > 0$$

для $k > 1$ и, следовательно, $R_k > 0$ для $k > 1$, ч. т. д.

Теперь как и ранее, введем для задачи (23) функцию Лагранжа $L(x, u)$ с дополнительными переменными $u = (u_1, u_2, \dots, u_m)$:

$$L(x, u) = f(x) + uh(x) = f(x) + \sum_{i=1}^m u_i h_i(x).$$

Справедлива следующая теорема:

Теорема 15 Если в точке x^* $h(x^*) = 0$ существует такой вектор u^* , что

$$L'_x(x^*, u^*) = f'(x^*) + u^* h'(x^*) = 0 \quad (25)$$

и

$$z L''_{xx}(x^*, u^*) z > 0$$

для любого $z \neq 0$ такого, что $h'(x^*)z = 0$, то x^* является изолированным локальным решением (23).

Д о к а з а т е л ь с т в о. Рассмотрим модифицированную функцию Лагранжа

$$L_c(x, u) = L(x, u) + c \|h(x)\|^2 = f(x) + \sum_{i=1}^m (u_i + c h_i(x)) h_i(x).$$

Если $x = x^*$, $u = u^*$ то

$$L'_c(x^*, u^*) = L'(x^*, u^*) = 0, L''_c(x^*, u^*) = L''(x^*, u^*) + c \sum_{i=1}^m h'_i(x^*) \times h'_i(x^*) = L''(x^*, u^*) + c Q(x^*),$$

где $Q(x^*) = \sum_{i=1}^m h'_i(x^*) \times h'_i(x^*)$ — неотрицательно определенная матрица.

Если в точке x^* выполнены необходимые и достаточные условия экстремума, то в силу леммы 14 существует такое \bar{c} что $L''_c(x^*, u^*)$ положительно определена для всех $c > \bar{c}$. При этом точка x^* удовлетворяет необходимым условиям экстремума и достаточным условиям существования в x^* изолированного локального минимума функции $L_c(x, u^*)$. При этом, конечно, в этой точке реализуется и изолированный локальный минимум на многообразии $h(x) = 0$, так как

$$f(x^*) = L(x^*, u^*) = L_c(x^*, u^*) < L_c(x, u^*) = f(x)$$

для допустимых $x \neq x^*$, что и требовалось доказать. \square

Последующий пример показывает, что казалось бы естественным условие $z f''(x^*) z > 0$ для всех $z \neq 0$, $h'(x^*)z = 0$ для допустимой точки x^* на самом деле неверно.

Пример. Рассмотрим задачу:

$$\begin{aligned} \min \{x_1^2 + (x_2 - 1)^2\} \\ 4x_1^2 + (x_2 - 1)^2 = 1 \end{aligned} \quad (26)$$

Система необходимых условий экстремума первого порядка

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 - 1 \end{pmatrix} + u \begin{pmatrix} 4x_1 \\ x_2 - 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

приводит к паре соотношений

$$x_1(1 + 4u) = (x_2 - 1)(1 + u) = 0.$$

В зависимости от того, какое из сомножителей равно нулю порождается 3 варианта ⁶, представленные в Табл. 1. Учитывая ограничение $4x_1^2 + (x_2 - 1)^2 = 1$ отбрасываем первый набор

Таблица 1: Следствие необходимых условий экстремума.

$x_1 = 0$	$x_2 = 1$	недопустимая точка
$x_1 = 0$	$u = -1$	
$u = -\frac{1}{4}$	$x_2 = 1$	

как недопустимый, из оставшихся получаем 4 допустимых точки, удовлетворяющих необходимым условиям экстремума, приведенные в Табл. 2 вместе с соответствующими множителями Лагранжа и значениями целевой функции. В частности, в точке $(0, 0)$ выполнены необходимые условия экстремума с множителем Лагранжа $u^* = -1$:

$$\begin{pmatrix} 2x_1^* \\ 2(x_2^* - 1) \end{pmatrix} + u^* \begin{pmatrix} 8x_1^* \\ 2(x_2^* - 1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Касательное подпространство к ограничениям в точке $(0, 0)$ имеет вид $K = \{z = (\xi, 0), \xi \in \mathbb{R}\}$ и квадратичная форма $zf''(x^*)z$ на этом подпространстве строго положительно определена:

$$zf''(x^*)z = (\xi, 0) \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ 0 \end{pmatrix} = 2\xi^2 > 0$$

для $\xi \neq 0$.

⁶Так как $1 + u$ и $1 + 4u$ одновременно нулю не могут быть равны, то вариантов действительно 3.

Таблица 2: Полная таблица точек, удовлетворяющих необходимым условиям экстремума.

Прямые переменные		Множитель Лагранжа	Целевая функция
$x_1 = 0$	$x_2 = 0$	$u = -1$	$f(x) = 1$
$x_1 = 0$	$x_2 = 2$	$u = -1$	$f(x) = 1$
$x_1 = \frac{1}{2}$	$x_2 = 1$	$u = -\frac{1}{4}$	$f(x) = \frac{1}{4}$
$x_1 = \frac{1}{4}$	$x_2 = 1$	$u = -\frac{1}{4}$	$f(x) = \frac{1}{4}$

Однако на ограничении целевая функция равна

$$x_1^2 + (x_2 - 1)^2 = x_1^2 + 1 - 4x_1^2 = 1 - 3x_1^2 < 1 = 0^2 + (0 - 1)^2$$

для $x_1 \neq 0$ и, следовательно, точка $(0, 0)$ не является точкой локального минимума. На самом деле она даже представляет собой локальный максимум!

Действительно, матрица вторых производных функции Лагранжа этой задачи имеет вид

$$f''(0) + u^* h''(0) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} < 0$$

на касательном подпространстве ограничений.

2.4 Минимизация на выпуклом множестве

Важным частным случаем экстремальных задач является задача оптимизации на выпуклом множестве:

$$\min_{x \in X} f(x)$$

где $f(x)$ — дифференцируемая функция с градиентом $f'(x)$, X — выпуклое подмножество n -мерного пространства E . В этом случае можно сформулировать геометрические условия оптимальности, которые в зависимости от способа задания множества X могут принимать различную аналитическую форму. Эти условия имеют форму следующей теоремы.

Теорема 16 Если X — выпуклое множество и точка x^* такова, что $f(x^*) \leq f(x)$ для всех $x \in X$, то

$$f'(x^*)(x - x^*) \geq 0 \quad (27)$$

для всех $x \in X$.

Если f выпуклая функция, то это это условие и достаточно.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть $f'(x^*)(\bar{x} - x^*) < 0$ для некоторой $\bar{x} \in X$. Тогда

$$f(x^* + \epsilon(\bar{x} - x^*)) = f(x^*) + \epsilon f'(x^* + \delta\epsilon(\bar{x} - x^*)(\bar{x} - x^*))$$

для некоторого $\delta \in [0, 1]$ (теорема о среднем). Так как $f'(x^*)(\bar{x} - x^*) < 0$, то и $f'(x^* + \delta\epsilon(\bar{x} - x^*)(\bar{x} - x^*))(\bar{x} - x^*) < 0$ для всех достаточно малых $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$, $\bar{\epsilon} > 0$.

Отсюда получаем (в силу допустимости $x^* + \epsilon(\bar{x} - x^*) \in X$) оценку $f(x^* + \epsilon(\bar{x} - x^*)) < f(x^*)$, что противоречит оптимальности x^* .

Если f выпукла и $0 \leq f'(x^*)(x - x^*)$, то $f(x) - f(x^*) \geq f'(x^*)(x - x^*)$ по выпуклости f и по условию теоремы $f(x) - f(x^*) \geq 0$ для любого $x \in X$, то есть x^* — точка глобального минимума. \square

Пример Оптимизация на симплексе $\Delta_{n-1} = \{x : \sum_{i=1}^n x_i = 1, x_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, n\}$

Рассмотрим задачу

$$\min_{x \in \Delta_{n-1}} f(x) \quad (28)$$

с решением x^* .

Покажем, что в этом случае существует такое δ , что

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} \begin{cases} = \delta & \text{если } x_i^* > 0 \\ \leq \delta & \text{если } x_i^* = 0. \end{cases} \quad (29)$$

Если $f(x)$ - выпукла, то (29) и достаточно.

Действительно, пусть x^* — решение (28) и обозначим

$$\delta = \min_i \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i},$$

Согласно (27) $0 \leq \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i}(x_i - x_i^*)$ для всех $x \in \Delta_{n-1}$. Пусть i такого, что и определим для вектор \bar{x}^j следующим образом

$$\bar{x}_k^j = \begin{cases} 0 & k = 1 \\ x_j^* + x_i^* & k = j \\ x_k^* & k \neq i, k \neq j. \end{cases}$$

Ясно, что $\sum_{k=1}^n \bar{x}_k^j = \sum_{k=1}^n x_k^* = 1$, $\bar{x}_k^j \geq 0$, то есть $\bar{x}^j \in \Delta_{n-1}$.

Поэтому

$$0 \geq \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_j}(\bar{x}_j^j - x_j^*) + \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i}(\bar{x}_i^j - x_i^*) = \left(\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_j} - \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} \right) x_i^*$$

или

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_j} \geq \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i}$$

для всех $j \neq i$. Если $x_j^* > 0$, то должно выполняться и противоположное неравенство

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} \geq \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_j}$$

откуда следует, что для всех i таких, что $x_i^* > 0$

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = \text{const} \leq \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_j}$$

для j таких, что $x_j^* = 0$. Обозначив эту const через δ и получим (29).

Достаточность (29) следует из того, что для любого $x \in \Delta_{n-1}$ выполняется $0 = \sum_{i=1}^n (x_i - x_i^*)$ и, следовательно

$$0 = \sum_{i=1}^n \delta(x_i - x_i^*) \leq \sum_{i: x_i > x_i^*} \delta(x_i - x_i^*) + \sum_{i: x_i \leq x_i^*} \delta(x_i - x_i^*) \leq \sum_{i: x_i > x_i^*} \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_i - x_i^*) + \sum_{i: x_i < x_i^*} \delta(x_i - x_i^*)$$

где

$$\delta = \min_i \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i}.$$

Из $0 \leq x_i < x_i^*$ следует, что

$$\delta = \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i}.$$

для i таких, что $x_i < x_i^*$ и, следовательно,

$$\sum_{i: x_i > x_i^*} \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_i - x_i^*) + \sum_{i: x_i < x_i^*} \delta(x_i - x_i^*) = \sum_{i: x_i > x_i^*} \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_i - x_i^*) + \sum_{i: x_i < x_i^*} \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i}(x_i - x_i^*) = f'(x^*)(x - x^*) \geq 0.$$

Отсюда в силу теоремы 16 x^* является точкой глобального оптимума.

3 Методы безусловной оптимизации

Хотя теория необходимых условий экстремума в оптимизационных задачах без ограничений почти тривиальна, методы поиска решений этих задач — далеко нет.

3.1 Градиентные методы

Одним из простейших методов является градиентный, идею которого можно проследить к доказательству теоремы 1. Сам метод состоит в построении последовательности точек $\{x^k\}$ по следующей схеме:

$$x^{k+1} = x^k - \lambda_k f'(x^k), k = 0, 1, \dots, \quad (30)$$

$\lambda_k > 0$ — шаговый множитель, x^0 — некоторое начальное приближение, которое выбирается за пределами метода.

Простейший вариант метода имеет $\lambda_k = \lambda = \text{constant}$.

Теорема 17 Пусть $f'(x)$ удовлетворяет условию Липшица с константой L :

$$\|f'(y) - f'(x)\| \leq L\|y - x\|,$$

множества линий уровня

$$M(C) = \{x : f(x) \leq C\}$$

функции $f(x)$ ограничены: и $\lambda < 1/L$. Тогда последовательность $\{x^k\}$ сходится к некоторой предельной точке x^* , $f'(x^k) \rightarrow 0$ и $f'(x^*) = 0$.

Доказательство. Покажем прежде всего монотонность $\{f(x^k)\}$. По теореме о среднем для некоторого $\theta \in [0, 1]$

$$\begin{aligned} f(x^{k+1}) - f(x^k) &= f'(x^k + \theta(x^{k+1} - x^k))(x^{k+1} - x^k) = \\ &= -(f'(x^k) - f'(x^k + \theta(x^{k+1} - x^k)))\lambda f'(x^k) = \\ &= -\lambda\|f'(x^k)\|^2 - \lambda f'(x^k)(f'(x^k + \theta(x^{k+1} - x^k)) - f'(x^k)) \leq \\ &= -\lambda\|f'(x^k)\|^2 + \lambda\|f'(x^k)\|\|f'(x^k + \theta(x^{k+1} - x^k)) - f'(x^k)\| \leq \\ &= -\lambda\|f'(x^k)\|^2 + \lambda L\|f'(x^k)\|\|x^k + \theta(x^{k+1} - x^k) - x^k\| \leq \\ &= -\lambda\|f'(x^k)\|^2 + \lambda\theta L\|f'(x^k)\|\|x^{k+1} - x^k\| \leq \\ &= -\lambda\|f'(x^k)\|^2 + \lambda L\|f'(x^k)\|\lambda\|f'(x^k)\| = -\lambda\|f'(x^k)\|^2 + \lambda^2 L\|f'(x^k)\|^2 = \\ &= -\lambda\|f'(x^k)\|^2(1 - \lambda L) = -\lambda\gamma\|f'(x^k)\|^2 \leq 0, \end{aligned}$$

с $\gamma = 1 - \lambda L > 0$.

Откуда следует, что $\{f(x^k)\}$ не возрастает и если не останавливается в некоторой точке с $f'(x^k) = 0$, то строго монотонно убывает. Следовательно x^k принадлежат ограниченному множеству $M(f(x^0))$, и, следовательно, у $\{x^k\}$ имеется по крайней мере одна предельная точка x^* .

Из монотонности $\{f(x^k)\}$ следует, что $f(x^k) \rightarrow f(x^*)$, а из

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) \leq -\lambda\gamma\|f'(x^k)\|^2 \leq 0$$

предельным переходом по $k \rightarrow \infty$ получаем $f'(x^*) = 0$. \square

Так как ключевым моментом доказательства являлась демонстрация монотонного убывания $f(x^k)$, то немедленно возникает идея выбирать λ_k из условия

$$f(x^k - \lambda_k f'(x^k)) = \min_{\lambda > 0} f(x^k - \lambda f'(x^k)), \quad (31)$$

которое это убывание только усилит.

Такой метод носит название метода наискорейшего спуска и хотя этот метод не дает особенного ускорения сходимости он свободен от параметров и на практике может дать некоторый выигрыш, особенно на начальных итерациях.

Задача (31) сама по себе достаточно сложна и интересна. Для ее решения применяются методы так называемой одномерной минимизации, которые будут рассмотрены ниже. Однако прежде мы ознакомимся с таким важным понятием, как *скорость сходимости*.

В вычислительной практике большое значение имеет не только сам факт сходимости метода к решению задачи, но и то, насколько быстро он достигает приемлемую точность решения. Точность решения при этом можно измерять отклонением вычисляемого значения целевой функции от минимума:

$$\delta_k^f = f(x^k) - f(x^*)$$

или отклонением самой точки от истинного положения оптимума:

$$\delta_k^x = \|x^k - x^*\|$$

Если $\delta_k^f \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$ то говорят, что имеет место сходимость по функционалу, а если $\delta_k^x \rightarrow 0$, то говорят, что имеет место сходимость по решению.

Величины δ_k^f , δ_k^x могут убывать как геометрические прогрессии:

$$\delta_k^f \leq Cq_f^k, \quad \delta_k^x \leq Cq_x^k, \quad k = 1, 2, \dots$$

для некоторых констант C, q_f, q_x . В этом случае говорят о линейной скорости сходимости и эффективность определяется значениями множителей q_f, q_x . Для дважды дифференцируемых функций в окрестности минимума q_f обычно оценивается как $q_x^2 = q^2$, в силу квадратичного характера поведения f в этой окрестности.

Если q близко к 0, то сходимость быстрая, если q близко к 1 (как это к несчастью чаще всего и бывает), то реальная сходимость может быть довольно медленной.

Некоторые высокоэффективные численные методы обладают и более высокой скоростью сходимости, например

$$\delta_k^f \leq Cq^{2^k} \text{ или } \delta_{k+1}^f \leq (\delta_k^f)^2$$

В этом случае сходимость называют *квадратичной*. Как легко видеть, при этом количество точных знаков на каждой итерации удваивается.

Квадратичную сходимость имеют методы Ньютоновского типа, с которыми мы ознакомимся позднее, а пока исследуем скорость сходимости простейших вариантов градиентных методов.

3.2 Скорость сходимости градиентного метода

Теорема 18 Пусть $f(x)$ — дважды дифференцируемая функция с положительно определенной матрицей вторых производных $f''(x)$, удовлетворяющей неравенствам $mE \leq f''(x) \leq ME$.⁷ Тогда градиентный метод с постоянным шагом

$$x^{k+1} = x^k - \lambda f'(x^k), \quad k = 0, 1, \dots$$

имеет следующую оценку скорости сходимости:

$$\delta_k^x = \|x^k - x^*\| \leq Cq^k,$$

где $q \leq \max\{|1 - \lambda m|, |1 - \lambda M|\}$.

⁷Матричное неравенство $A \leq B$ означает, что $B - A$ неотрицательно определена, E — единичная матрица.

Доказательство. В силу дважды дифференцируемости $f(x)$

$$f'(x^k) = \int_0^1 f''(x^* + \theta(x^k - x^*))(x^k - x^*)d\theta = A_k(x^k - x^*),$$

где очевидно $mE \leq A_k \leq ME$.

Далее

$$\begin{aligned} \delta_{k+1}^x &= \|x^{k+1} - x^*\| = \|x^k - x^* - \lambda f'(x^k)\| = \\ &= \|(E - \lambda A_k)(x^k - x^*)\| \leq \|(E - \lambda A_k)\| \|x^k - x^*\|. \end{aligned} \quad (32)$$

Для оценки нормы $E - \lambda A_k$ используем определение нормы

$$\|E - \lambda A_k\|^2 = \max_{|z|^2=1} \|z - \lambda A_k z\|^2$$

Симметричная матрица λA_k имеет ортогональные собственные векторы, которые, не умаляя общности, можно считать нормированными. Вектор z можно разложить по этим векторам и тогда

$$z = \sum_{i=1}^n \xi_i x^i, \quad \lambda A_k z = \sum_{i=1}^n \lambda \theta_i \xi_i x^i,$$

где x^i — собственные векторы, а θ_i — собственные числа A_k . Учитывая ортогональность x^i получаем эквивалентную задачу

$$\|E - \lambda A_k\|^2 = \max_{\sum_{i=1}^n \xi_i^2 = 1} \sum_{i=1}^n (1 - \lambda \theta_i)^2 \xi_i^2 = \max_{\sum_{i=1}^n v_i = 1, v_i \geq 0} \sum_{i=1}^n (1 - \lambda \theta_i)^2 v_i,$$

которая имеет очевидное решение

$$\|E - \lambda A_k\|^2 = \max_{i=1,2,\dots,n} (1 - \lambda \theta_i)^2 = (\max\{|1 - \lambda m|, |1 - \lambda M|\})^2$$

где $M = \max_{i=1,2,\dots,n} \theta_i$, $m = \min_{i=1,2,\dots,n} \theta_i$. Подставляя эту оценку в (32), получаем утверждение теоремы. \square

Выбирая в условиях теоремы 18 шаг λ так, что бы минимизировать оценку множителя q получаем следующую оценку

Следствие 19 В условиях теоремы 18 при $\lambda = 2/(m + M)$ градиентный метод с постоянным шагом сходится линейно с множителем $q \leq (M - m)/(M + m)$.

Может создаться впечатление, что выбирая шаг градиентного метода из условий полной релаксации (31) можно ускорить сходимость. К сожалению, это не так. Даже если сходимость действительно несколько улучшается на начальных итерациях метода, оценка асимптотической скорости сходимости имеет для метода (31) точно такой же вид [2, стр. 65].

3.2.1 Правило Армихо

На самом деле для сходимости методов типа скорейшего спуска не нужно точно решать задачу одномерной минимизации $\min_{\lambda} f(x^k - \lambda f'(x^k))$. Оказывается, одномерную минимизацию можно заменить на условие

$$f(x^k - \lambda_0 \beta^{m_k} f'(x^k)) \leq f(x^k) - \sigma \lambda_0 \beta^{m_k} \|f'(x^k)\|^2, \quad (33)$$

где $\sigma \in (0, \frac{1}{2})$, $\beta \in (0, 1)$, а m_k подбирается как минимальное целое число, такое, что (33) выполняется. Это широко используемое правило выбора шага получило название правило

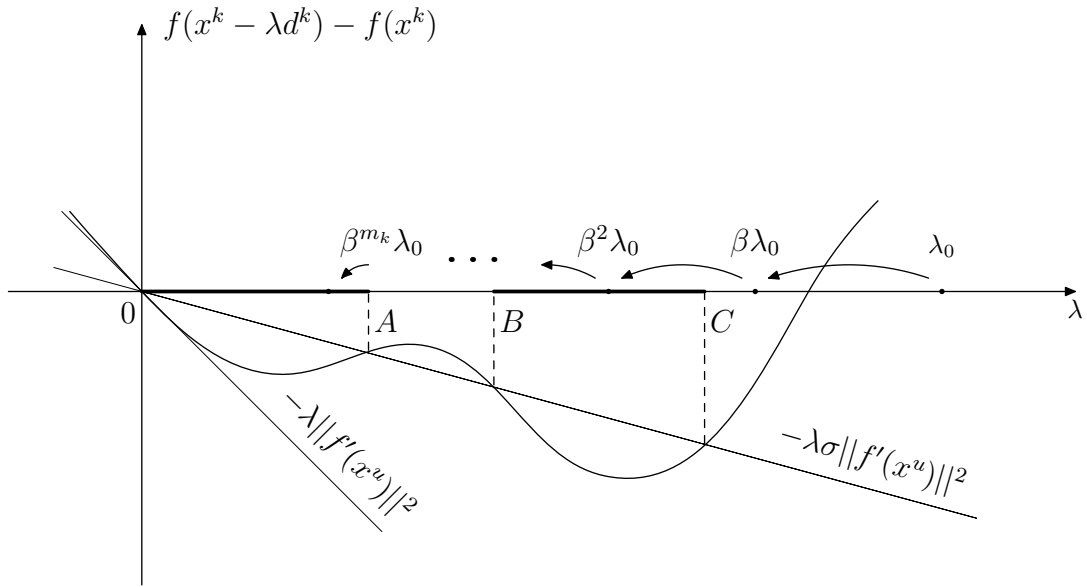


Рис. 7: Принцип действия правила Армихо.

Армихо (см. [9], цитируется по [5]). Из предыдущего анализа сходимости градиентного метода легко понять, что для выполнения (33) достаточно, чтобы $1 - \sigma \geq \lambda_0 \beta^{m_k} L$, где L — константа Липшица для градиента, т.е., последовательно подставляя в (33) значения $m_k = 0, 1, \dots$ мы рано или поздно удовлетворим этому неравенству, как это продемонстрировано на Рис. 7.

Покажем, что при этом мы действительно обеспечим сходимость градиентного метода

$$x^{k+1} = x^k - \lambda_k f'(x^k), k = 0, 1, \dots$$

с $\lambda_k = \sigma \lambda_0 \beta^{m_k}$, где m_k удовлетворяет (33). Для упрощения обозначений в дальнейшем мы опустим зависимость m_k от k и будем писать просто m .

Умножая неравенство (33) на $-\lambda_0 \beta^m \|f'(x^k)\|^2$ получим

$$\sigma \lambda_0 \|f'(x^k)\|^2 \geq -\lambda_0 \beta^m \|f'(x^k)\| (1 - \lambda_0 \beta^m L) \geq -\lambda_0 \|f'(x^k)\|^2 + \lambda_0 \beta^m \|f'(x^k)\| L \lambda_0 \|f'(x^k)\| = f'(x^k)(x^{k+1} - x^k) + \|x^{k+1} - x^k\| L \|x^{k+1} - x^k\| \geq f'(x^k)(x^{k+1} - x^k) + \|x^{k+1} - x^k\| L \|z - x^k\|$$

для любого $z \in [x^k, x^{k+1}]$.

Отсюда

$$-\lambda_0 \beta^m \|f'(x^k)\|^2 \geq f'(x^k)(x^{k+1} - x^k) + (f'(z) - f'(x^k))(x^{k+1} - x^k) = f'(z)(x^{k+1} - x^k).$$

Выбрав $z \in [x^k, x^{k+1}]$ таким, что

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) = f'(z)(x^{k+1} - x^k),$$

получим

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) \leq -\sigma \lambda_0 \beta^m \|f'(x^k)\|^2$$

при или соответственно

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) \leq -\frac{\sigma(1 - \sigma)}{L} \beta \|f'(x^k)\|^2$$

откуда следует сходимость.

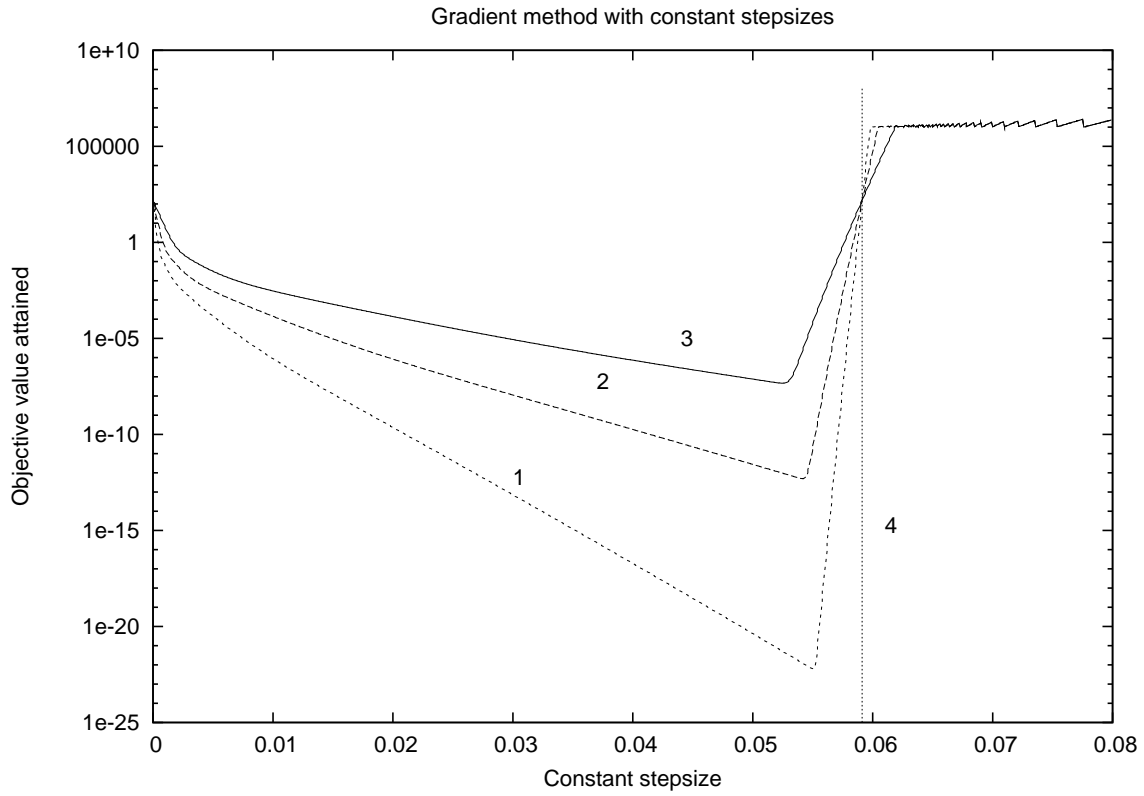


Рис. 8: Финальное значение целевой функции, как функция длины шага. (1) — 50 итераций, (2) — 100 итераций, (3) — 200 итераций. Вертикальная линия с отметкой (4) соответствует значению $2/\lambda_{\max}$, где λ_{\max} — максимальное собственное число матрицы H .

3.2.2 Загадка $2/\lambda_{\max}$

Градиентный метод достаточно хорошо исследован, однако и в его поведении есть еще открытые вопросы.

Рассмотрим, например, поведение градиентного метода (30) с постоянным шагом $\lambda_k = \lambda > 0$ для решения простейшей экстремальной задачи

$$\min \frac{1}{2} x H x$$

со строго положительной матрицей H . Зададимся вопросом: при заданном количестве итераций N как будет зависеть величина $f(x^N)$ от размера шага λ ? Экспериментальное поведение метода представлено на рис. 8. Замечательной особенностью поведения метода является наличие хорошо выраженного оптимума по длине шага, вопрос в том, чем эта оптимальная длина шага определяется и чему она равна? Интересно отметить, что все итерации метода дают в итоге одно и то же значение целевой функции по-видимому при $\lambda = 2/\lambda_{\max}$, но это опять-таки неизвестно почему.

3.3 Методы одномерной минимизации

Задача одномерной минимизации состоит в нахождении минимума функции одной переменной $\phi(\lambda) : R \rightarrow R$, обычно на некотором интервале: $l \leq \lambda \leq u$ или при выполнении одностороннего ограничения $l \leq \lambda$.

Определение 20 Функция $\phi(\lambda)$ называется унимодальной, если существует такое λ_* , что из $\lambda_* < \lambda_1 < \lambda_2$ следует

$$\phi(\lambda_*) < \phi(\lambda_1) < \phi(\lambda_2)$$

а из $\lambda_* > \lambda_2 > \lambda_1$ следует

$$\phi(\lambda_*) < \phi(\lambda_2) < \phi(\lambda_1)$$

Другими словами, слева от λ_* функция $\phi(\cdot)$ монотонно убывает, а справа — возрастает.

Точка λ_* является единственным минимумом $\phi(\cdot)$ и, следовательно, задача

$$\min_{\lambda} \phi(\lambda) \tag{34}$$

хорошо определена для унимодальных функций. Далее мы будем предполагать унимодальность, не оговаривая это особо.

Для задачи (34) вводится понятие интервала неопределенности $[\lambda_l, \lambda_r]$, относительно которого можно утверждать, что $\lambda_* \in [\lambda_l, \lambda_r]$. Разность $\epsilon = \lambda_r - \lambda_l$ определяет точность решения задачи (34).

Методы одномерной минимизации обычно строят последовательность вложенных интервалов неопределенности, сходящихся к λ_* .

3.3.1 Метод дихотомии

Если ϕ — дифференцируема, то решение (34) эквивалентно поиску корня уравнения

$$\phi'(\lambda) = 0$$

Тогда при известном начальном интервале неопределенности $[\lambda_l^0, \lambda_r^0]$ с $\phi'(\lambda_l^0) < 0, \phi'(\lambda_r^0) > 0$ он может рекуррентно пересчитываться следующим образом:

1. положим $\lambda_k = (\lambda_l^k + \lambda_r^k)/2$,
2. вычислим $\phi_k = \phi'(\lambda_k)$
3. если $\phi_k < 0$, то $\lambda_l^{k+1} = \lambda_k, \lambda_r^{k+1} = \lambda_r^k$ иначе $\lambda_l^{k+1} = \lambda_l^k, \lambda_r^{k+1} = \lambda_k$.
4. $k \rightarrow k + 1$.

Видно, что этот метод программируется буквально "в одну строку" и обеспечивает гарантированное убывание интервала неопределенности вдвое на каждом шаге, независимо от характеристик ϕ таких, например, как скорость роста или убывания ϕ , порядок значений вторых производных и пр. Это является одновременно и сильными и слабыми сторонами метода: с одной стороны он чрезвычайно надежен, с другой стороны его скорость сходимости невелика и он не использует возможного "хорошего" поведения ϕ в окрестности λ_* .

3.3.2 Поиск Фибоначчи

Если вычисление производной функции $\phi(\cdot)$ затруднено, то возникает интересная задача построения эффективного метода решения (34), используя лишь значения функции. Если в качестве показателя эффективности метода считать длину интервала неопределенности после вычисления заданного числа значений целевой функции, оптимальным является метод использующий так называемые *числа Фибоначчи*, впервые рассмотренные в XIII веке итальянским математиком Фибоначчи.

Эти числа образуют последовательность $\{F_k\}$, построенную по следующим правилам:

$$F_0 = F_1 = 1, \quad F_{k+2} = F_{k+1} + F_k, \quad k = 0, 1, \dots$$

Пусть N — количество вычислений функции $\phi(\cdot)$, которые мы можем себе позволить. Отмасштабировав соответствующим образом начальный интервал неопределенности, такой, что мы уверены в том, что он содержит искомую точку минимума, можно считать, что этот интервал имеет исходную длину, равную F_N . Мы покажем, что после $N + 4$ вычислений длина интервала неопределенности может быть сделана равной $1 = F_0$.

В качестве первого шага вычислим ϕ в точках $0, F_{N-2}, F_{N-1}, F_N$. В зависимости от результатов интервал неопределенности можно уменьшить либо до $[0, F_{N-1}]$ (см. рис. 1) или до $[F_{N-2}, F_N]$ (см. рис. 2). Поскольку $F_{N-2} - F_N = F_{N-1}$, то второй случай сдвигом координат приводится к первому. Следовательно, в любом случае длина интервала неопределенности уменьшается до F_{N-1} .

Более того, внутри этого интервала находится уже вычисленная точка F_{N-2} (в первом случае) или $F_{N-1} - F_{N-2} = F_{N-3}$ (во втором). Дополнительно вычислив ϕ в F_{N-3} или F_{N-2} , восстанавливаем ситуацию начального интервала, лишь с заменой N на $N - 1$. Прделав $N - 2$ таких шагов, получим интервал неопределенности, равный $F_2 = 2$ с вычисленной внутри точкой $F_1 = 1$. Так как $F_0 = 1$, то можно вычислить ϕ в точках $1 \pm \epsilon$ для достаточно малого ϵ и сузить интервал неопределенности до 1. Количество вычислений функции ϕ при этом составляет $4 + N - 2 + 2 = N + 4$.

Асимптотическая (при $N \rightarrow \infty$) скорость сходимости поиска Фибоначчи зависит от того, как быстро растут числа Фибоначчи. Представив F_N в виде $C\lambda^N$ и используя рекуррентное соотношение для чисел Фибоначчи получим для λ характеристическое уравнение

$$\lambda^2 - \lambda - 1 = 0$$

с корнями

$$\lambda_1 = (1 + \sqrt{5})/2, \quad \lambda_2 = (1 - \sqrt{5})/2.$$

Так как

$$\lambda_1 = 1.61803398874989484820 \dots > 1 \text{ а } |\lambda_2| = 0.61803398874989484820 \dots < 1,$$

то асимптотически числа Фибоначчи растут как λ_1^N и следовательно, точность метода увеличивается как $1/F_N \approx 0.61803398874989484820 \dots^N$.

3.4 Метод Ньютона и его вариации

3.4.1 Метод Ньютона для решения систем уравнений

В первую очередь метод Ньютона появился как средство численного решения систем уравнений вида

$$F(x) = 0, \quad F : E_n \rightarrow E_n \quad (35)$$

и использует очень распространенную идею линеаризации нелинейной системы (35). Если известна некоторая точка \bar{x} , которую можно считать определенным приближением к решению системы (35), то это решение можно подправить с помощью решения линеаризированной версии этой системы

$$F(x) = F(\bar{x} + x - \bar{x}) \approx F(\bar{x}) + J_F(\bar{x})(x - \bar{x}) = 0, \quad (36)$$

где $J_F(\bar{x})$ — якобиан отображения $F(\cdot)$ в точке \bar{x} . Решение системы (36) имеет вид

$$x = \bar{x} - J_F^{-1}(\bar{x})F(\bar{x}),$$

что дает новое приближение к истинному корню нелинейной системы (35). При определенных предположениях это решение будет более точно удовлетворять системе (35). Эти предположения формулируются в следующей теореме.

Теорема 21 Пусть x^* — решение (35), $F(\cdot)$ дифференцируема в окрестности x^* и $J_F(\cdot)$ непрерывно в x^* и имеет в этой точке полный ранг. Тогда для x^0 достаточно близких к x^* последовательность итераций

$$x^{k+1} = x^k - J_F^{-1}(x^k)F(x^k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (37)$$

корректно определена и $x^k \rightarrow x^*$, причем скорость сходимости сверхлинейная

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq q_k \|x^k - x^*\|, \quad k = 0, 1, \dots \quad (38)$$

где $q_k \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$.

Если $J_F(\cdot)$ непрерывен в окрестности x^* и удовлетворяет там условию Липшица, то скорость сходимости квадратичная:

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq C \|x^k - x^*\|^2, \quad k = 0, 1, \dots$$

Д о к а з а т е л ь с т в о . По непрерывности существует такая окрестность нуля U и константа M , что

$$\det(J_F(x)) \neq 0, \quad \|J_F^{-1}(x)\| \leq M$$

для всех $x \in x^* + U$. Если $x^k \in x^* + U$, то

$$\begin{aligned} \|x^{k+1} - x^*\| &= \|x^k - J_F^{-1}(x^k)F(x^k) - x^*\| = \|J_F^{-1}(x^k)J_F(x^k)(x^k - x^*) - J_F^{-1}(x^k)F(x^k)\| \leq \\ &M \|J_F(x^k)(x^k - x^*) - F(x^k)\| = M \|J_F(x^k)(x^k - x^*) - F(x^k) + F(x^*)\|. \end{aligned}$$

По теореме о среднем существует $\theta_k \in [0, 1]$ такое, что

$$F(x^k) - F(x^*) = J_F(x^k + \theta_k(x^* - x^k))(x^k - x^*)$$

и следовательно, благодаря Коши и Буняковскому

$$\begin{aligned} \|x^{k+1} - x^*\| &\leq M \|J_F(x^k + \theta_k(x^* - x^k)) - J_F(x^k)\| \|x^k - x^*\| \leq \\ \sup_{\theta_k \in [0,1]} M \|J_F(x^k + \theta_k(x^* - x^k)) - J_F(x^k)\| \|x^k - x^*\| &= q_k \|x^k - x^*\|, \end{aligned}$$

где $q_k \rightarrow 0$ если $x^k \rightarrow x^*$.

Поэтому можно выбрать такую окрестность U , что из $x^k \in x^* + U$ следует $x^{k+1} \in x^* + U$. Выбрав $x^0 \in x^* + U$ получим что все $x^k \in x^* + U$ и более того $\|x^{k+1} - x^*\| \leq q_k \|x^k - x^*\|$, $k = 0, 1, \dots$; $q_k \rightarrow 0$, что доказывает первую часть теоремы.

Если J_F удовлетворяет условию Липшица с константой L то

$$q_k \leq M \sup_{\theta_k \in [0,1]} \|J_F(x^k + \theta_k(x^* - x^k)) - J_F(x^k)\| \leq ML \|x^k - x^*\|$$

и, следовательно,

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq ML \|x^k - x^*\|^2, \quad k = 0, 1, \dots$$

что завершает доказательство теоремы. \square

3.4.2 Метод Ньютона для решения экстремальных задач

Медленная сходимость градиентного метода заставила вычислителей искать новые походы. Для ускорения сходимости очень естественной представляется идея использовать более точную квадратичную аппроксимацию

$$f(x+y) = f(x) + f'(x)y + \frac{1}{2}yf''(x)y + R(x,y)$$

в которой остаточный член $R(x,y)$ имеет порядок малости $o(\|y\|^2)$, т.е.

$$R(x,y)/\|y\|^2 \rightarrow 0 \text{ при } y \rightarrow 0.$$

Задача минимизации $f(x+y)$ по y при заданном x в квадратичном приближении замещается на задачу вида

$$\min_y f'(x)y + \frac{1}{2}yf''(x)y$$

которая имеет аналитическое решение,

$$y = -(f''(x))^{-1}f'(x).$$

Рассматривая $x+y$ как очередное приближение, приходим к итеративному методу

$$x^{k+1} = x^k - (f''(x^k))^{-1}f'(x^k), \quad (39)$$

который носит имя метода Ньютона. Фундаментальное исследование этого метода провел В.Л. Канторович [6]. Теория этого метода весьма интересна, а его глобальное поведение до сих пор не вполне изучено, но здесь мы ограничимся лишь локальным исследованием.

Для этого понадобится дополнительное определение.

Определение 22 *Функция f называется сильно выпуклой с константой сильной выпуклости l если для всех x и y*

$$f(y) - f(x) \geq f'(x)(y-x) + l\|x-y\|^2. \quad (40)$$

Сильно выпуклые функции обладают рядом полезных свойств, в частности их градиенты убывают не менее чем линейно при приближении к оптимуму. Действительно, из (40) легко получить, что при $f'(x^*) = 0$

$$\|f'(x)\|\|x-x^*\| \geq f'(x)(x-x^*) \geq f(x) - f(x^*) \geq l\|x-x^*\|^2,$$

откуда $\|f'(x^*)\| \geq l\|x-x^*\|$.

Что касается скорости сходимости метода Ньютона, то справедлива следующая теорема.

Теорема 23 *Пусть f — дважды дифференцируемая функция и f'' удовлетворяет условию Липшица (в евклидовой норме) с константой L . Тогда, если f — сильно выпуклая функция с константой сильной выпуклости l и начальная точка x^0 удовлетворяет соотношению*

$$Ll^{-2}\|f'(x^0)\| < 1,$$

то последовательность (39) сходится к точке минимума x^ с квадратичной скоростью, то есть, для некоторой константы C и $q < 1$*

$$\|x^k - x^*\| < Cq^{2^k}.$$

Доказательство. Из условия Липшица и теоремы о среднем получаем для некоторого $z \in [x, y]$

$$\|f'(x+y) - f'(x) - f''(x)y\| = \|f''(z)y - f''(x)y\| \leq \|f''(z) - f''(x)\| \|y\| \leq L\|z - x\| \|y\| \leq L\|y\|^2. \quad (41)$$

Полагая $x = x^k, y = x^{k+1} - x^k$ из (41) получаем

$$\|f'(x^{k+1})\| \leq L\|(f''(x))^{-1}\| \|f'(x^k)\|^2$$

Из сильно выпуклости следует, что $f''(x^k) \geq lI$, в том смысле, что $zf''(x^k)z \geq l\|z\|^2$ для любого z . Положив $z = (f''(x^k))^{-1/2}x$ получим $\|x\|^2 \geq lx(f''(x^k))^{-1}x \geq l\|(f''(x^k))^{-1}\| \|x\|^2$. Отсюда $\|(f''(x))^{-1}\| \leq l^{-1}$, т.е.

$$\|f'(x^{k+1})\| \leq Ll^{-2}\|f'(x^k)\|^2.$$

Итерируя, получаем

$$\|f'(x^{k+1})\| \leq (Ll^{-2}\|f'(x^0)\|)^{2^k} \leq q^{2^k}$$

с $q = Ll^{-2}\|f'(x^0)\| < 1$. С другой стороны для сильно выпуклых функций

$$\|f'(x^{k+1})\| \geq l\|x^{k+1} - x^*\|,$$

что завершает доказательство. \square

Приведенная теорема утверждает сходимость метода Ньютона лишь при достаточно хорошем начальном приближении. Полученная в ней оценка для этого приближения приводит к курьезным результатам при решении плохо обусловленных задач. Рассмотрим, например, применение метода барьеров для решения простейшей задачи

$$\min_{x \geq 0} x$$

Метод логарифмического барьера рекомендует решение безусловной задачи

$$\min_x \{x - r \ln x\}$$

с малым параметром $r > 0$ и решение этой задачи $x_r^* = r \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$. Константы L, l оцениваются в окрестности минимума как $L \approx 2/r^2$ и $l \approx 1/r$ (глобальная оценка этих констант лишь ухудшит ситуацию). Применение условий теоремы потребует выполнения для начального приближения неравенства

$$2/r^2 \cdot r^2 \|1 - r/x^0\| \leq 1,$$

т.е. $2r/3 \leq x^0 \leq 2r$. Иначе говоря, начальное приближение должно быть порядка точности окончательного решения !

3.4.3 Метод Ньютона с шагом

3.4.4 Метод доверительных областей

Для того, чтобы стабилизировать метод Ньютона, применяется также и иной подход, получивший название методов доверительных областей или в англоязычной терминологии trust region methods. В этом методе на k -ой итерации, при текущем приближении x^k так же, как и в методе Ньютона минимизируется вспомогательная функция

$$f_k(d) = f(x^k) + f'(x^k)d + \frac{1}{2}df''(x^k)d,$$

однако при дополнительном ограничении, локализирующем поиск в достаточно малой окрестности точки x^k . Решение задачи

$$\min_{\|d\| \leq \delta_k} f_k(d) = f_k(d^k)$$

используется затем, чтобы переопределить приближенное решение $x^{k+1} = x^k + d^k$ и процесс очевидным образом повторяется. Как видно из вышеизложенного, в этом разделе мы предполагаем непрерывную дважды дифференцируемость $f(x)$.

На метод доверительных областей можно смотреть как на попытку регуляризовать решение подзадачи метода Ньютона. Действительно, ограничение $\|d\| \leq \delta_k$ можно заменить на $\|d\|^2 \leq \delta_k^2$ при это функция Лагранжа модифицированной задачи $\min_{\|d\|^2 \leq \delta_k^2} f_k(d) = f_k(d^k)$ становится равной

$$L(u, d) = f_k(d) + u(\|d\|^2 - \delta_k^2)$$

и приобретает сильную выпуклость по d , что, во-первых, гарантирует единственность решения задачи

$$\min_d L(u, d) = L(u, d_u)$$

и, во-вторых, гладкую зависимость решения от двойственной переменной u .

Сама задача поиска d при известной двойственной компоненте u^* седловой точки (u^*, d^k) функции Лагранжа приобретает вид

$$\min_d \{f_k(d) + u^*(\|d\|^2 - \delta_k^2)\} = \min_d \{f(x^k) + f'(x^k)d + \frac{1}{2}d(f''(x^k) + 2u^*I)d\}$$

и представляет собой задачу безусловной квадратичной минимизации с "улучшенной" матрицей квадратичной формы $f''(x^k) + 2u^*I$, гарантированно обладающей при достаточно больших u^* свойствами сильной выпуклости. Действительно, поскольку

$$f'(x^k) + (f''(x^k) + 2u^*)d^k = 0$$

в силу необходимых условий экстремума и $\|d^k\| \leq \delta_k$ с необходимостью $u^* \rightarrow \infty$ при $\delta_k \rightarrow +0$ и условия "достаточно больше" можно всегда добиться, уменьшая δ_k .

В результате можно показать, что метод доверительных областей в случае, когда в текущем приближении x^k не выполнены необходимые условия оптимальности первого или второго порядка, то при достаточно малых δ_k алгоритм обязательно уменьшает целевую функцию.

Теорема 24 Если $f'(x^k) \neq 0$ или $f''(x^k)$ не является положительно полуопределенной, то существует достаточно малое $\bar{\delta}_k$ такое, что при всех $0 < \delta_k \leq \bar{\delta}_k$ решение задачи

$$\min_{\|d\| \leq \delta_k} \{f(x^k) + f'(x^k)d + \frac{1}{2}df''(x^k)d\} = f(x^k) + f'(x^k)d^k + \frac{1}{2}d^k f''(x^k)d^k \quad (42)$$

удовлетворяет условию $f(x^k + d^k) < f(x^k)$.

Доказательство. Поскольку $\|d\| \leq \delta_k$, то

$$f(x^k + d^k) = f(x^k) + f'(x^k)d^k + \frac{1}{2}d^k f''(x^k)d^k + o(\delta_k^2) = f_k(d^k) + o(\delta_k^2).$$

Рассмотрим сначала случай $f'(x^k) \neq 0$. Тогда

$$f_k(d^k) = f(x^k) + \min_{\|d\| \leq \delta_k} \{f'(x^k)d + \frac{1}{2}df''(x^k)d\} \leq f(x^k) + \min_{\|d\| \leq \delta_k} f'(x^k)d + \max_{\|d\| \leq \delta_k} \frac{1}{2}df''(x^k)d = f(x^k) - \|f'(x^k)\|\delta_k + \frac{\delta_k^2}{2}\lambda_{\max}(f''(x^k)) \leq f(x^k) - \|f'(x^k)\|\delta_k/2$$

для достаточно малых δ_k и, следовательно,

$$f(x^k + d^k) \leq f(x^k) - \|f'(x^k)\|\delta_k/2 + o(\delta_k^2) \leq f(x^k) - \|f'(x^k)\|\delta_k/4 < f(x^k),$$

что завершает рассмотрение этого случая.

Если $f'(x^k) = 0$, но $f''(x^k)$ не является положительно полуопределенной матрицей, то существует направление z^k с $\|z^k\| = 1$, такое, что $\frac{1}{2}z^k f''(x^k)z^k = -\gamma_k < 0$.

Тогда

$$f_k(d^k) \leq f_k(\delta_k z^k) = f(x^k) - \gamma_k \delta_k^2$$

и, следовательно,

$$f(x^k + d^k) = f_k(d^k) + o(\delta_k^2) < f(x^k) - \gamma_k \delta_k^2 + o(\delta_k^2) \leq f(x^k) - \gamma_k \delta_k^2/2 < f(x^k),$$

что завершает доказательство. \square

3.5 Метод сопряженных градиентов и направлений

Одной из замечательных попыток ускорить сходимость градиентных методов, сохранив при этом минимальные требования к памяти и объему вычислений на каждой итерации, являлся метод сопряженных градиентов. Этот метод был предложен в 1952 г Hesten и Stiefel [12] для решения систем линейных уравнений

$$Ax = b \tag{43}$$

с положительно определенной симметричной матрицей A . Такие матрицы возникают, например, при дискретизации эллиптических уравнений математической физики и порождают линейные системы большой или очень большой размерности. Для этих систем характерно также большое количество нулевых элементов в матрице системы A , а стандартная процедура исключения Жордана-Гаусса вызывает рост заполненности матрицы и достаточно быстро требования к памяти начинают превосходить даже возможности современных компьютеров. Кроме этого, процедура Жордана-Гаусса исключает возможность легкого рестарта, при котором можно было бы уточнять предыдущее, возможно уже достаточно неплохое, решение. В стремлении преодолеть указанные недостатки и был предложен метод сопряженных градиентов, который является одной из разновидностей более общей схемы сопряженных направлений.

В основе этого метода лежит следующее простое наблюдение: если $A > 0$ то решение системы $Ax = b$ эквивалентно задаче минимизации квадратичной функции $Q(x) = \frac{1}{2}xAx - bx$:

$$\min \left\{ \frac{1}{2}xAx - bx \right\} = \min_x Q(x), \tag{44}$$

это то, что физики называют вариационным принципом. Задача (43) с несимметричной, но невырожденной матрицей A сводится к эквивалентной системе $A'Ax = A'b$, если не принимать во внимание тот факт, что умножение на A' разрушает возможные структурные особенности матрицы A и существенно увеличивает количество ненулевых элементов.

3.5.1 Системы сопряженных векторов

Метод сопряженных градиентов использует понятие системы сопряженных векторов.

Определение 25 Вектора p^1, p^2, \dots, p^k называются сопряженными (относительно положительно определенной матрицы A , указанной явно или подразумеваемой) если

$$p^i A p^i > 0, i = 1, 2, \dots, k; p^i A p^j = 0, i, j = 1, 2, \dots, k, i \neq j.$$

Система сопряженных векторов является линейно независимой: если

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i p^i = 0, \quad (45)$$

то умножая (45) справа на $Ap^j, j = 1, 2, \dots, k$ получаем $\alpha_j p^j Ap^j = 0, j = 1, 2, \dots, k$ и учитывая то, что $p_j Ap^j > 0$, все $\alpha_j = 0$.

При этом квадратная матрица P , составленная из n строк — сопряженных векторов p^1, p^2, \dots, p^n является невырожденной. и, следовательно, система уравнений $Pz = x$ для любого x имеет единственное решение z . Тогда задачу (44) можно эквивалентно переписать в виде

$$\min_x \left\{ \frac{1}{2} z P' A P z - b P z \right\} = \min_z \left\{ \frac{1}{2} z D z - q z \right\}. \quad (46)$$

В силу сопряженности p^1, p^2, \dots, p^n матрица D является диагональной

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & & d_n \end{pmatrix}$$

где $d_i = p^i A p^i > 0$ и поэтому решение последней части задачи (46) тривиально:

$$\begin{aligned} \min_z \left\{ \frac{1}{2} z D z - q z \right\} &= \min \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{1}{2} d_i z_i^2 - q_i z_i \right\} = \\ \sum_{i=1}^n \min_{z_i} \left\{ \frac{1}{2} d_i z_i^2 - q_i z_i \right\} &= \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{1}{2} d_i z_i^{*2} - q_i z_i^* \right\} \end{aligned} \quad (47)$$

с $z^* = (z_1^*, z_2^*, \dots, z_n^*)$; $z_i^* = q_i / d_i, i = 1, 2, \dots, n$ и соответственно $x^* = P z^*$ решает задачу (44). Приведенные рассуждения не означают, конечно, что мы с помощью таких простых формул можем решить любую задачу квадратичного программирования — просто вся проблема свелась к нахождению системы сопряженных векторов.

В теории, систему сопряженных векторов можно получить с помощью процедуры Грамма-Шмидта при наличии некоторой линейно независимой системы векторов a^1, a^2, \dots, a^n :

1. Положим $k = 1$ и $p^1 = a^1$.
2. Если построены k сопряженных векторов p^1, p^2, \dots, p^k , то $k + 1$ -ый вектор может быть получен как

$$p^{k+1} = a^{k+1} + \sum_{i=1}^k \mu_i p^i$$

при соответствующих коэффициентах μ_i , которые определяются из условий сопряжения

$$p^{k+1} A p^j = 0, j = 1, 2, \dots, k.$$

Легко видеть, что при этом

$$\mu_i = -a^{k+1} A p^i / p^i A p^i$$

и можно переходить к вычислению следующего сопряженного вектора.

Особенностью этой процедуры является то, что для каждого k наборы векторов a^1, a^2, \dots, a^k и p^1, p^2, \dots, p^k порождают одни и те же линейные подпространства:

$$\text{lin}\{a^1, a^2, \dots, a^k\} = \text{lin}\{p^1, p^2, \dots, p^k\},$$

где

$$\text{lin}\{p^1, p^2, \dots, p^k\} = \{x = \sum_{i=1}^k z_i p^i\},$$

что легко показать по индукции.

3.5.2 Метод сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов сочетает построение сопряженной системы векторов p^1, p^2, \dots с рекуррентным построением линейно независимой системы векторов a^1, a^2, \dots и делает это с минимальными затратами ресурсов.

Для этого в начальной точке x^0 вычисляется градиент квадратичного функционала задачи (44) :

$$a^1 = Q'(x^0) = Ax^0 - b.$$

Если $a^1 = 0$, то x^0 — решение задачи (44) и процесс вычислений может быть остановлен немедленно. Если $a^1 \neq 0$, то система из единственного вектора a^1 линейно независима и сопряжена, так что можно положить $p^1 = a^1$.

На следующем этапе решается задача

$$\min_{\lambda} Q(x^0 + \lambda p^1) = Q(x^0 + \lambda_1 p^1) = Q(x^1) \quad (48)$$

и полагается $a^2 = Q'(x^1)$. Заметим, что при этом был определен минимум функции $Q(x)$ на аффинном подпространстве $x^0 + \text{lin}\{a^1\} = x^0 + \text{lin}\{p^1\}$. Опять же если $a^2 = 0$, то x^1 — решение задачи (44) и процесс вычислений может быть остановлен немедленно.

Поэтому в нетривиальном случае $a^2 \neq 0$, а поскольку $p^1 a^2 = a^1 a^2 = 0$ то вектора a^1 и a^2 линейно независимы. Поэтому можно построить вектор p^2 , сопряженный p^1 :

$$p^2 = a^2 + \mu_1 p^1.$$

Из условия сопряжения $\mu_1 = -a^2 A p^1 / p^1 A p^1$, однако мы тут же сталкиваемся с проблемой вычисления $A p^1$!

К счастью, эта проблема легко преодолима:

$$a^2 - a^1 = Q'(x^1) - Q'(x^0) = A(x^1 - x^0) = \lambda_1 A p^1$$

и, следовательно,

$$\mu_1 = -a^2(a^2 - a^1)/p^1(a^2 - a^1) = -a^2(a^2 - a^1)/a^1(a^2 - a^1).$$

Учитывая то, что $a^2 a^1 = 0$ окончательно получаем замечательно простое выражение для μ_1 :

$$\mu_1 = \|a^2\|^2 / \|a^1\|^2.$$

Заметим, что при этом $p^2(a^2 - a^1) = 0$, что легко проверяется прямой подстановкой.

Для продолжения процесса необходим очередной вектор a^3 , линейно независимый от a^1 и a^2 . Такой вектор можно получить в результате решения задачи

$$\min_{\lambda} Q(x^1 + \lambda p^2) = Q(x^1 + \lambda_2 p^2) = Q(x^2),$$

положив $a^3 = Q'(x^2)$. При этом a^3 ортогонален как a^2 так и a^1 !

Действительно, поскольку x^1 получено в результате решения оптимизационной задачи (48), то

$$\begin{aligned} \min_{\lambda} Q(x^1 + \lambda p^2) &= \min_{\lambda_2} \min_{\lambda_1} Q(x^0 + \lambda_2 p^2 + \lambda_1 p^1) = \\ \min_{z \in \text{lin}\{p^1, p^2\}} Q(x^0 + z) &= \min_{z \in \text{lin}\{a^1, a^2\}} Q(x^0 + z) = Q(x^2). \end{aligned}$$

Из условий оптимальности $a^3 a^i = Q'(x^2) a^i = a^3 p^i = 0, i = 1, 2$, что и требовалось доказать.

Предполагая $a^3 \neq 0$ для того, чтобы избежать тривиальности, можно построить сопряженный вектор p^3 :

$$p^3 = a^3 + \sum_{i=1}^2 \mu_i p^i$$

Коэффициенты μ_1 и μ_2 должны удовлетворять соотношениям сопряженности

$$\begin{aligned} p^3 A p^1 &= a^3 A p^1 + \sum_{i=1}^2 \mu_i p^i A p^1 = a^3 A p^1 + \mu_1 p^1 A p^1 = 0 \\ p^3 A p^2 &= a^3 A p^2 + \sum_{i=1}^2 \mu_i p^i A p^2 = a^3 A p^2 + \mu_2 p^2 A p^2 = 0, \end{aligned}$$

однако $\lambda_1 A p^1 = Q'(x^1) - Q'(x^0) = a^2 - a^1$ и, следовательно, $a^3 A p^1 = a^3(a^2 - a^1)/\lambda_1 = 0$, откуда $\mu_1 = 0$.

Окончательно получаем

$$\mu_2 = -a^3 A p^2 / p^2 A p^2 = -a^3(a^3 - a^2)/p^2(a^3 - a^2) = \|a^3\|^2/p^2 a^2 = \|a^3\|^2/\|a^2\|^2,$$

поскольку $p^2 a^2 = (a^2 + \theta a^1)a^2 = \|a^2\|^2$ для некоторой константы θ . Следовательно,

$$p^3 = a^3 + \|a^3\|^2/\|a^2\|^2 p^2.$$

Легко доказать по индукции, что действительно для любых k

$$p^{k+1} = a^{k+1} + (\|a^{k+1}\|^2/\|a^k\|^2) p^k. \quad (49)$$

Заметим, что из условий оптимальности для любых k

$$Q'(x^{k+1}) = a^{k+1} \in \text{lin}_{\perp}\{p^1, p^2, \dots, p^k\} = \text{lin}_{\perp}\{a^1, a^2, \dots, a^k\}, \quad (50)$$

где $\text{lin}_{\perp}\{\dots\}$ обозначает ортогональное дополнение соответствующей линейной оболочки.

Тогда по построению

$$p^{k+1} = a^{k+1} + \sum_{i=1}^k \mu_i p^i$$

и условия сопряжения $p^{k+1} A p^j = 0, j = 1, 2, \dots, k$ дают систему уравнений

$$0 = a^{k+1} A p^j + \mu_j p^j A p^j.$$

Умножая каждое из уравнений на $\lambda_j > 0$ и учитывая, что $\lambda_j A p^j = Q'(x^j) - Q'(x^{j-1}) = a^j - a^{j-1}$ получаем

$$0 = a^{k+1}(a^{j+1} - a^j) + \mu_j p^j(a^{j+1} - a^j).$$

Из (50) следует, что $a^{k+1}(a^{j+1} - a^j) = 0$ для $j = 1, 2, \dots, k-1$ и, следовательно, $\mu_j = 0$ для $j = 1, 2, \dots, k-1$.

В свою очередь

$$\mu_k = -\|a^{k+1}\|^2/p^k(a^{k+1} - a^k) = \|a^{k+1}\|^2/p^k a^k.$$

Так как $p^k = a^k + \mu_{k-1} p^{k-1}$ и $p^{k-1} a^k = 0$, то $p^k a^k = \|a^k\|^2$ и окончательно получаем

$$p^{k+1} = a^{k+1} + (\|a^{k+1}\|^2/\|a^k\|^2) p^k$$

что и требовалось доказать.

3.5.3 Пример использования метода сопряженных градиентов

В качестве примера приведем решение задачи аппроксимации функции $\sin(t)$ полиномом небольшой степени $P(x, t) = \sum_{i=1}^m x_i t^{i-1}$ на отрезке $[0, \pi]$.

В дискретном варианте ошибка аппроксимации является квадратичной функцией коэффициентов полинома $x_i, i = 1, 2, \dots, m$:

$$Q(x) = \sum_{k=1}^N (\sin(t_k) - P(x, t_k))^2,$$

где N — количество узлов дискретизации задачи, $t_k = \pi \frac{k-1}{N-1}$. Поскольку $P(x, t)$ — линейная функция переменных x , функция $Q(x)$ квадратична и имеет легко вычисляемый градиент $Q'(x)$.

Применяя метод сопряженных градиентов для этой задачи с параметрами $m = 4, N = 100$, получаем следующие результаты:

Итер.	Целевая функция	Норма градиента	Ортогональность
1	2.10238365e+01	1.6157e+04	1.0186e-10
2	2.91778684e+00	1.4635e+02	-3.6522e-12
3	7.38476165e-01	4.2995e+00	-3.2752e-15
4	6.42588803e-03	9.6896e-04	3.2006e-16
5	6.42570225e-03	4.5545e-02	-4.0625e-15
6	7.58891855e-06	2.1184e-13	4.3534e-17

В последней колонке таблицы приведено скалярное произведение текущего сопряженного направления и градиента целевой функции в точке, полученной линейной оптимизацией.

Полученная оптимальная точка имеет следующие координаты:

$$x = 0.0011256 \ 0.9834432 \ 0.0533952 \ -0.2332797 \ 0.0371276.$$

3.5.4 Варианты метода сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов сам по сути дела является вариантом более общей идеи, называемой методами сопряженных направлений. Действительно, существенным элементов метода, изложенного выше, была система сопряженных направлений p^1, p^2, \dots , которая могла бы быть получена и иными способами. Среди популярных вариантов этих методов часто можно встретить так называемый

Метод сопряженных градиентов с предобуславливанием. Этот метод решает задачу (44), сделав предварительно замену переменных $x = By$, в результате чего она превращается в

$$\min_y \tilde{Q}(y) = \min_y \left\{ \frac{1}{2} y B A B y - b B y \right\}. \quad (51)$$

Применяя к этой задаче метод сопряженных градиентов по переменным y , получим рекуррентную схему вида

$$y^{k+1} = y^k + \alpha_k \tilde{p}^k, \quad k = 1, 2, \dots$$

где сопряженные вектора подсчитываются по формулам (49)

$$\tilde{p}^{k+1} = \tilde{Q}'(y^{k+1}) + \tilde{\beta}_k \tilde{p}^k. \quad (52)$$

где

$$\tilde{\beta}_k = \|\tilde{Q}'(y^{k+1})\|^2 / \|\tilde{Q}'(y^k)\|^2.$$

Поскольку $\tilde{Q}'(y) = BQ'(x)$, то, обозначив $p^k = B\tilde{p}^k$, последнее соотношение можно эквивалентно переписать в терминах первоначальных переменных x :

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

где p^k удовлетворяют соотношениям

$$p^k = HQ'(x^k) + \beta_k p^{k-1}$$

с $H = B^2$ и

$$\beta_k = Q'(y^k)HQ'(y^k)/Q'(y^{k-1})HQ'(y^{k-1}),$$

а α_k вычисляется из условия скорейшего спуска. Матрица H в этом случае имеет смысл масштабирующего множителя, направленного на улучшение обусловленности задачи.

Можно увидеть, что направления p^1, p^2, \dots сопряжены относительно A . Действительно, \tilde{p}^k сопряжены относительно BAB , по построению. Тогда

$$0 = \tilde{p}^i BAB \tilde{p}^j = p^i A p^j \text{ для } i \neq j,$$

что и требовалось доказать.

3.6 Квазиньютоновские методы

Для многих задач, где оптимизируемая функция имеет сложное строение, вычисление матрицы вторых производных $f''(x^k)$ может оказаться чрезмерно трудоемким, что препятствует применению метода Ньютона. С другой стороны метод сопряженных градиентов показал себя недостаточно устойчивым, особенно при минимизации функций, сильно отличающихся от квадратичных. Для таких случаев подходящей альтернативой могут быть квазиньютоновские (кн-)методы, определяемые по формуле, напоминающей метод Ньютона:

$$x^{k+1} = x^k + \lambda_k d^k, \quad d^k = -D_k f'(x^k), \quad (53)$$

где матрица D_k заменяет $(f''(x^k))^{-1}$, а параметр шага λ_k выбирается из условий точного или приближенного минимума вдоль направления d^k :

$$f(x^{k+1}) \approx \min_{\lambda} f(x^k + \lambda d^k).$$

Последовательность матриц определяется исходя из следующих соображений. Для квадратичной функции $f(x) = \frac{1}{2}xAx + bx$ с положительно определенной и, следовательно, невырожденной матрицей A

$$f'(x) = Ax + b, \quad f''(x) = A.$$

Тогда для любых x, y

$$f'(x) - f'(y) = f''(x)(x - y),$$

что можно переписать в виде

$$(f''(x))^{-1}(f'(x) - f'(y)) = x - y.$$

Обозначив $p^i = x^{i+1} - x^i$, $q^i = f'(x^{i+1}) - f'(x^i)$, $i = 0, 1, \dots, k-1$ для квадратичной функции получим соотношения

$$(f''(x^k))^{-1}q^i = p^i, \quad i = 0, 1, \dots, k-1, \quad (54)$$

которым удовлетворяет $A = f''(x^k)$. По аналогии с (54) для матриц D_k можно потребовать выполнения соотношений

$$D_k q^i = p^i, \quad i = 0, 1, \dots, k-1 \quad (55)$$

которые называются квазиньютоновскими условиями, выполняющимися на траектории оптимизационного процесса (53).

Если квазиньютоновские условия выполнены для $k = n$ то в квадратичном случае для матрицы D_n получим набор условий,

$$D_n Q = P \quad (56)$$

где Q — матрица, столбцами которой являются вектора q^0, q^1, \dots, q^{n-1} , а P — матрица со столбцами p^0, p^1, \dots, p^{n-1} . Для квадратичной функции $Q = AP$ и если вектора p^0, p^1, \dots, p^{n-1} линейно независимы, то матрица P обратима и уравнение (56) дает $D_n = A^{-1}$. При этом

$$x^{n+1} = x^n - D_n f'(x^n) = x^n - A^{-1}(Ax^n + b) = -A^{-1}b$$

будет являться точным решением задачи минимизации квадратичной функции

$$\min_x \frac{1}{2} xAx + bx$$

Теоретически можно сразу выписать условия (56) для некоторого линейно-независимого множества направлений p^0, p^1, \dots, p^{n-1} с соответствующими q^0, q^1, \dots, q^{n-1} , однако это потребовало бы трехкратных затрат памяти под D_n, P, Q . Кроме этого потребуется принять специальные меры по обеспечению линейной независимости q^0, q^1, \dots, q^{n-1} , которые гарантировали бы вычислимость. Поэтому имеет смысл постепенно приближаться к выполнению условий (56) на каждом шагу вычисляя новые вектора $p^k, q^k, k = 0, 1, \dots$ таким образом, что сохраняется их линейная независимость и ассимилировать эту информацию в последовательность матриц, удовлетворяющих условиям (54).

Последовательность D_k , удовлетворяющую соотношениям (55) можно построить различными способами, которые можно представить в виде

$$D_{k+1} = D_k + \Delta_k,$$

где Δ_k — матрица коррекции.

3.6.1 Одноранговая коррекция

Простейший вид матрицы Δ_k — это матрица ранга 1, которая при условии симметричности имеет вид:

$$\Delta_k = v^k \times v^k,$$

где для векторов-столбцов a, b произведение $a \times b = ab'$ дает квадратную матрицу $\dim(E) \times \dim(E)$.

Применяя формулу пересчета $D_{k+1} = D_k + v^k \times v^k$ на k -ой итерации получаем соотношение

$$(D_k + v^k \times v^k) q^k = p^k$$

или

$$\gamma_k v^k = p^k - D_k q^k = r^k, \quad (57)$$

где $\gamma_k = v^k q^k$. Умножив (57) справа на q^k получим $\gamma_k^2 = r^k q^k$ и, следовательно,

$$D_{k+1} = D_k + \frac{r^k \times r^k}{r^k q^k}.$$

В принципе для выполнения квазиньютоновского условия (55) матрица коррекции необязательно должна быть симметричной и может иметь вид $\Delta_k = u^k \times v^k$. Из квазиньютоновского условия (55) так же, как и для симметричной одноранговой коррекции следует, что u^k коллинеарен r^k и, следовательно,

$$\Delta_k = \gamma_k r^k \times v \quad (58)$$

с $\gamma_k = 1/v^k q^k, v^k q^k \neq 0$, является допустимой коррекцией.

3.6.2 Двухранговая коррекция

Коррекции ранга 2 и более можно получить, суммируя корректирующие слагаемые ранга 1, т.е.

$$D_k = D_{k-1} + \Delta_k^{(1)} + \Delta_k^{(2)} + \dots$$

При этом если $\Delta_k^{(s)} = z^s \times w^k, s > 1$, где $w^k q^i = 0$, то

$$D_k q^k = (D_{k-1} + \Delta_k^{(1)}) q^k = D_{k-1} q^k$$

т.е. поправка $\Delta_k^{(1)}$ не будет влиять на удовлетворение квазиньютоновских условий, хотя саму матрицу квазиньютоновского метода она будет изменять.

Как мы видели в одноранговой формуле (58) (необязательно симметричной) вектор v^k является свободным параметром, лишь бы $v^k q^k \neq 0$. Проблема с этой корректировкой является ее несимметричность. Симметризируя получаем

$$U_k^{(1)} = \frac{1}{2v^k q^k} (r^k \times v^k + v^k \times r^k)$$

однако $D_k^{(1)} = D_{k-1} + \Delta_k^{(1)}$ не удовлетворяет квазиньютоновскому условию (55). Обозначим $y^k - D_k^{(1)} q^k = r^k$ и снова скорректируем:

$$D_k^{(2)} = D_k^{(1)} + \Delta_k^{(2)},$$

где

$$\Delta_k^{(2)} = \frac{1}{r^k p^k} r^k \times v$$

Затем снова симметризуем, скорректируем и т.д. Как не удивительно, у этой последовательности есть предел

$$D_k = D_{k-1} + \frac{1}{v^k q^k} (r^k \times v^k + v^k \times r^k) - \frac{r^k p^k}{(v^k p^k)^2} v^k \times v^k,$$

При $v^k = r^k$ получаем одноранговую коррекцию, рассмотренной выше:

$$D_k = D_{k-1} + \frac{1}{r^k q^k} (r^k \times r^k + r^k \times r^k) - \frac{r^k p^k}{(r^k p^k)^2} r^k \times r^k = D_{k-1} + \frac{r^k p^k}{(r^k p^k)^2} r^k \times r^k.$$

При $v = p^k$ получим формулу Пауэла-Бройдена (PSD), при этом

$$D_k q^k = D_{k-1} q^k + \frac{p^k q^k}{p^k q^k} r^k + \left(\frac{r^k p^k}{p^k q^k} - \frac{(r^k p^k)(p^k q^k)}{(p^k q^k)^2} \right) = D_{k-1} q^k + r^k = p^k.$$

При $v = q^k$ получаем формулу, известную как формула Давидона-Флечера-Пауэла (DFP).

3.6.3 Методы Бroyденoвскoгo типa

После многочисленных исследований Бroyденом была предложена общая формула пересчета для кн-метoдoв

$$D_k = D_{k-1} + \frac{p^k \times p^k}{p^k q^k} - \frac{z^k \times z^k}{q^k z^k} + \xi_k \tau_k v^k \times v^k, \quad (59)$$

где

$$\begin{aligned} p^k &= x^{k+1} - x^k, \quad q^k = f'(x^{k+1}) - f'(x^k), \\ z^k &= D_{k-1} q^k v^k = p^k - z_k / \tau_k. \end{aligned}$$

Параметр ξ_k может быть выбран произвольным образом из интервала $[0, 1]$, а скалярный множитель $\tau_k = \frac{q^k z^k}{p^k q^k}$.

Для лучшего понимания этой формулы стоит заметить, что

$$v^k q^k = q^k p^k - q^k z^k / \tau_k = q^k p^k - q^k z^k \frac{q^k p^k}{q^k z^k} = q^k p^k - q^k p^k = 0,$$

следовательно, $(v^k \times v^k) q^k = 0$ и поэтому последнее слагаемое не сказывается на выполнении квазиньютоновских условий, хотя в силу $x(v^k \times v^k)x = (xv^k)^2 \geq 0$ улучшает обусловленность D_k .

Теорема 26 Пусть оптимизируемая функция квадратична $f(x) = \frac{1}{2}xAx + bx$ и шаг α_k определяется из условия $\min_{\alpha} f(x^k + \alpha d^k)$, где $d^k = -D_k f'(x^k)$. Тогда, если ни одна из точек x^0, x^1, \dots, x^k не является оптимальной, то d^0, d^1, \dots, d^k — сопряженные (относительно A) направления.

Доказательство. Покажем что $D_{k+1}q^k = p^k$. Подставив выражение для D_{k+1} получим

$$D_{k+1}q^k = D_k q^k + p^k \frac{p^k q^k}{p^k q^k} - D_k q^k \frac{q^k D_k q^k}{q^k D_k q^k} + \xi_k \tau_k v^k (v^k q^k) = p^k,$$

поскольку $v^k q^k = 0$.

Покажем индукцией по k , что

$$d^i A d^j = 0, 0 \leq i < j \leq k \quad (60)$$

$$D_{k+1} q^i = p^i. \quad (61)$$

Для $k = 0$ необходимо проверить лишь $D_1 q^0 = p^0$, но мы это фактически выше доказали.

Предполагая соотношения (60), (61) для всех $k \leq m$ выполненными, рассмотрим

$$f'(x^{m+1}) - f'(x^{i+1}) = A(x^{m+1} - x^{i+1}) = A \sum_{j=i+1}^m (x^{j+1} - x^j) = A \sum_{j=i+1}^m p^j = A \sum_{j=i+1}^m \lambda_j d^j.$$

Умножив последнее соотношение на $p^i, i < m$ получим

$$p^i f'(x^{m+1}) - p^i f'(x^{i+1}) = p^i f'(x^{m+1}) = A \sum_{j=i+1}^m p^i \lambda_j d^j = \sum_{j=i+1}^m d^i \lambda_j A d^j \lambda_i = \sum_{j=i+1}^m \lambda_j \lambda_i d^i A d^j = 0,$$

где мы использовали то, что $p^i = \lambda_i d^i$, предположение индукции, а также то, что $p^i f'(x^{i+1}) = 0$ для всех $i = 0, 1, \dots, m-1$ в силу точной одномерной оптимизации. Также в силу одномерной минимизации и $p^m f'(x^{m+1}) = 0$.

Таким образом $p^i f'(x^{m+1}) = 0$ для всех $i = 0, 1, \dots, m$. Отсюда следует, что

$$0 = p^i f'(x^{m+1}) = f'(x^{m+1}) D_{m+1} q^i$$

в силу предположений индукции. Учитывая то, что $q^i = Ap^i = Ad^i \lambda_i$ получаем

$$f'(x^{m+1}) D_{m+1} Ad^i \lambda_i = 0,$$

а поскольку $D_{m+1} f'(x^{m+1}) = d^{m+1} / \lambda_{m+1}$, то

$$d^{m+1} Ad^i = 0 \text{ для всех } i = 1, 2, \dots, m.$$

что и требовалось доказать. \square

Также, как и для метода сопряженных градиентов, отсюда следует, что $D_n = A^{-1}$ и, следовательно, точка x^n является минимумом $f(x) = \frac{1}{2}aAx + bx$.

4 Методы прямого поиска

К таким методам относят алгоритмы минимизации, не использующие в своей работе производные целевой функции или ограничений. В данном разделе мы рассмотрим продолжающийся оставаться весьма популярным симплекс-метод, предложенный в 1965 году двумя британскими статистиками John Nelder и Roger Mead, работавшими в Национальной исследовательской станции овощеводства (National Vegetable Research Station). Совпадение в названии с известным симплекс-методом линейного программирования не означает, что эти методы похожи, симплекс-метод Нелдера-Мида основан на совершенно других идеях и скорее напоминает алгоритмы симплицальных разбиений, используемые для поиска неподвижных точек.

В качестве основного объекта в этом алгоритме рассматривается симплекс

$$\Delta_n(x^0, x^1, \dots, x^n) = \text{co}\{x^0, x^1, \dots, x^n\},$$

построенный на аффинно-независимых точках x^0, x^1, \dots, x^n . В вершинах этого симплекса вычисляются значения минимизируемой функции $f_i = f(x^i), i = 0, 1, \dots, n$ и определяются "наилучшее" f_{\min} и "наихудшее" f_{\max} значения $f_{\min} = \min_i f_i$ и $f_{\max} = \max_i f_i$. и вершины x^{\min} и x^{\max} , где эти значения достигаются.

Итерация метода состоит в замене x^{\max} на более подходящую точку \bar{x}^{\max} с $f(\bar{x}^{\max}) < f(x^{\max}) = f_{\max}$. Построение этой точки осуществляется одним из нескольких вариантов, где используется пробная точка \bar{x} , полученная центрально-симметричным отражением наихудшей точки x^{\max} относительно x^c — центра грани исходного симплекса, не содержащей x^{\max} :

$$\bar{x} = x^{\max} + 2(x^c - x^{\max}) = 2x^c - x^{\max},$$

где

$$x^c = \frac{1}{n} \sum_{i \neq i_{\max}} x^i.$$

Операция отражения может считаться предварительным этапом построения нового симплекса и мы ее опишем в алгоритмической схеме 1. Собственно алгоритм Нелдера-Мида

Data: Начальный симплекс

Result: Вспомогательные данные для начала итерационного процесса

Инициализация: Задать начальный симплекс $\Delta_0 = \{x^0, x^1, \dots, x^n\}$ и вычислить $F = \{f_0, f_1, \dots, f_n\}$, где $f_i = f(x^i), i = 0, 1, \dots, n$; Найти

$$\min_{i=0,1,\dots,n} f_i = f_{\min} = f_{i_{\min}}, \max_{i=0,1,\dots,n} f_i = f_{\max} = f_{i_{\max}},$$

и $\max_{i=0,1,\dots,n; i \neq i_{\max}} f_i = f_{\text{mix}} = f_{i_{\text{mix}}}$.

Algorithm 1: Метод Нелдера-Мида. Предварительная подготовка

представлен в общем виде на схеме 2

Более наглядно основные операции метода Нелдера-Мида представлены на Рис. 9. Для демонстрации вычислительной эффективности далее приведены результаты численного эксперимента с использованием метода Нелдера-Мида для минимизации функции Розенброка (Банана Розенброка) в ее простейшем варианте $f(x_1, x_2) = (x_1 - 1)^2 + 100 * (x_2 - x_1^2)^2$. Значение минимума этой функции равно нулю и достигается в точке (1, 1).

На графике 10 показана сходимость значений f_{\min}, f_{\max} для последовательных симплексов, генерируемых методом Нелдера-Мида. Хорошо видна линейная скорость сходимости,

Data: Начальный симплекс

Result: Уменьшенный симплекс

Применить операцию *Отражение* и получить точку $x^r = x^{\max} + \alpha(x^c - x^{\max})$ (см. Рис. 9). Вычислить в ней значение целевой функции $f_r = f(x^r)$; В зависимости от значения f_r определить следующую операцию;

Возможные варианты: *Отражение, Растяжение, Внешнее или Внутреннее Сжатие, Масштабирование*;

switch f_r **do**

case $f_{\min} \leq f_r < f_{\max}$ построить отраженный симплекс

 | Изменить в исходном симплексе точку $x^{\max} : x^{\max} = x^r$.

end

case $f_r < f_{\min}$ растянуть симплекс в перспективном направлении

 | Определить перспективную точку $x^e = x^c + \beta(x^r - x^c)$ и вычислить $f_e = f(x^e)$.

 | В зависимости от того, что меньше, f_e или f_r заменить x^{\max} на x^e или x^r .

end

case $f_{\min} \leq f_r < f_{\max}$ осуществить внешнее сжатие

 | Определить перспективную точку $x^{oc} = x^c + \gamma(x^r - x^c)$ и вычислить $f_{oc} = f(x^{oc})$. Если $f_{oc} \leq f_r$ положить $x^{\max} = x^{oc}$, иначе осуществить *Масштабирование*.

end

case $f_r \geq f_{\max}$ осуществить внутреннее сжатие

 | Определить перспективную точку $x^{ic} = x^{\max} - \gamma(x^r - x^c)$ и вычислить $f_{ic} = f(x^{ic})$. Если $f_{ic} \leq f_{\max}$ положить $x^{\max} = x^{ic}$, иначе осуществить *Масштабирование*.

end

endsw

Операция *Масштабирование* представляет собой пропорциональное уменьшение симплекса в направлении вершины с минимальным значением целевой функции:

$$x^i = (1 - \delta)x^{\min} + \delta x^i, i = 0, 1, \dots, n.$$

Algorithm 2: Метод Нелдера-Мида. Итерация

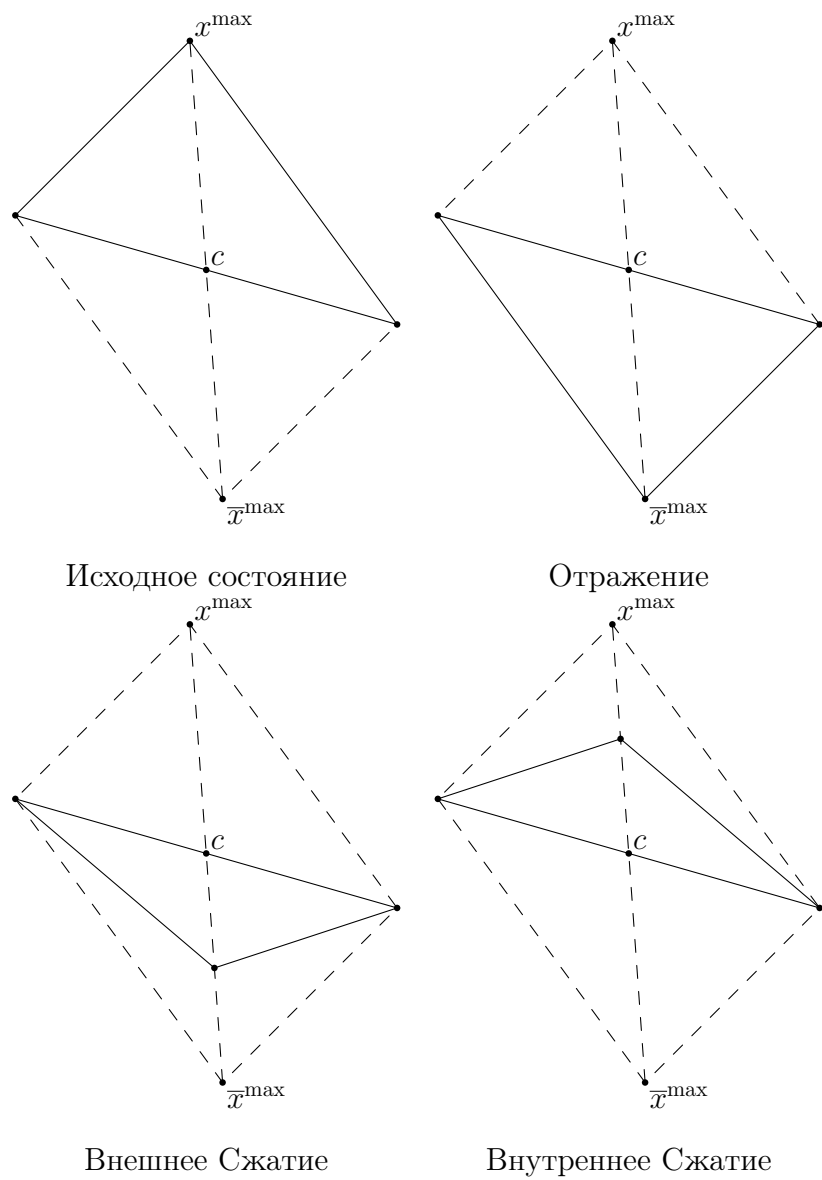


Рис. 9: Основные операции метода Нелдера-Мида

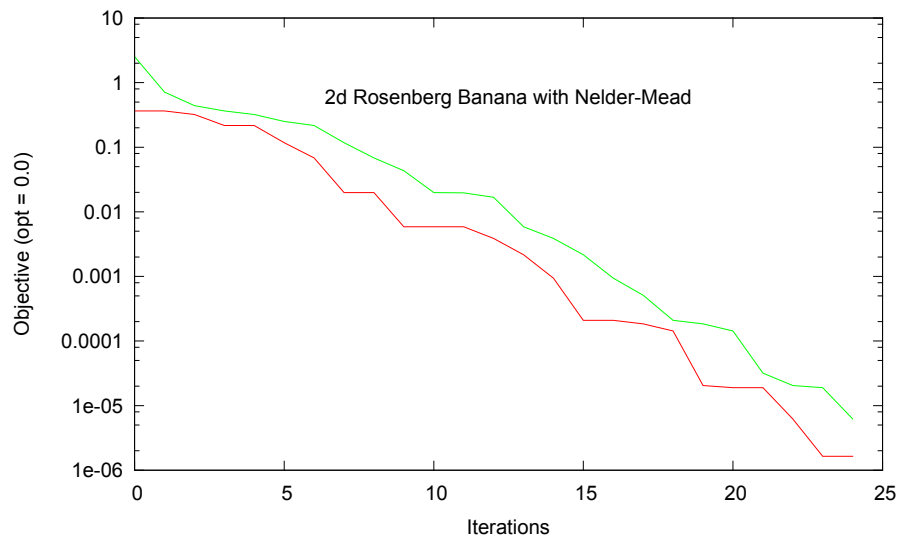


Рис. 10: Минимизация функции Розенброка

что характеризует этот метод в общем-то с положительной стороны. Вместе с тем для этого метода были построены примеры, когда он сходил к неоптимальной точке даже для строго выпуклых целевых функций с единственным минимумом.

5 Методы решения задач с ограничениями

В этом разделе мы рассмотрим задачу

$$\begin{aligned} \min_{x \in X} f(x) &= \min_{\substack{f(x) \\ g_i(x) \leq 0 \\ i = 1, 2, \dots, m}} f(x) \end{aligned} \quad (62)$$

где X — допустимое множество для переменных задачи, а $g_i(x) \leq 0, i = 1, 2, \dots, m$ — система вообще говоря нелинейных неравенств, которая задает это множество.

5.1 Методы штрафных и барьерных функций

Одной из первых идей в условной оптимизации было сведение, пусть и приближенное, задачи (62) к безусловной, без особых ограничений на переменную x .

Так возникла идея методов штрафных и барьерных функций. В методе штрафных функций вместо (62) рассматривается задача

$$\min_x \left\{ f(x) + \frac{1}{r} \Psi_X(x) \right\} = f(x_r) + \frac{1}{r} \Psi_X(x_r) \quad (63)$$

где

$$\Psi_X(x) = \begin{cases} 0 & x \in X \\ > 0 & \text{в противном случае} \end{cases}$$

штрафная функция, а $r > 0$ — параметр штрафа.

Для простоты мы будем далее предполагать, что множество X ограничено. Также предположим, что $f(x)$ не слишком сильно убывает по сравнению с $\Psi_X(x)$, так что (63) имеет решение. Достаточно предположить, например, что для некоторого $\rho > 0$ множество $\{x : f(x) + \frac{1}{\rho} \Psi_X(x) \leq C\}$ ограничено при некотором C .

Что касается решения x_r задачи (63) можно доказать несколько простых утверждений.

Утверждение 27

$$f(x_r) + \frac{1}{r} \Psi_X(x_r) \leq \min_{x \in X} f(x).$$

Доказательство. Следует из

$$f(x_r) + \frac{1}{r} \Psi_X(x_r) \leq \min_{x \in X} f(x) + \frac{1}{r} \Psi_X(x) \leq \min_{x \in X} f(x).$$

□

Утверждение 28 Все предельные точки последовательности x_r при $r \rightarrow +0$ принадлежат X .

Доказательство. Действительно, если $\Psi_X(x_r) \geq \delta > 0$ для некоторых сколь угодно малых $r > 0$ то

$$\min_{x \in X} f(x) \geq f(x_r) + \frac{1}{r} \Psi_X(x_r) \geq f(x_r) + \delta/r \rightarrow \infty$$

при $r \rightarrow +0$, поскольку x_r для достаточно малых $(0 < r < \rho)$ ограничены в совокупности.

□

Окончательно получаем

Теорема 29 При сделанных выше предположениях $f(x_r) \rightarrow \min_{x \in X} f(x)$ и $\Psi_X(x_r)/r \rightarrow 0$ при $r \rightarrow +0$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Из утверждения 28 следует, что для любого $\epsilon > 0$ при достаточно малых r будет выполняться неравенство

$$\min_{x \in X} f(x) - \epsilon \leq f(x_r)$$

Тогда из оценок

$$\min_{x \in X} f(x) - \epsilon \leq f(x_r) \leq f(x_r) + \frac{1}{r} \Psi_X(x_r) \leq \min_{x \in X} f(x)$$

следует, что $f(x_r) \rightarrow \min_{x \in X} f(x)$ и $\Psi_X(x_r)/r \rightarrow 0$ при $r \rightarrow +0$. \square

Основным достоинством этого подхода является то, что для решения (63) можно применить высокоэффективные методы безусловной оптимизации, рассмотренные выше. Однако, на этом пути встречаются и некоторые проблемы, как демонстрирует приведенный ниже пример.

Пример. Рассмотрим простейшую задачу

$$\min_{x \geq 0} x$$

с тривиальным решением $x^* = 0$. В качестве штрафной функции возьмем $\Psi_X(x) = x_-^2 = (\max\{0, -x\})^2$, очевидно имеющую все необходимые свойства. Решение задачи (63) имеет вид:

$$\min_x \{x + \frac{1}{r} x^2\} = -r/4, x_r = -r/2 < 0$$

и очевидно это подтверждает утверждения 1,2.

Обратим внимание, однако, что $f''(x_r) = 2/r \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow 0$ и в соответствие с критерием гарантированной квадратичной сходимости $\|f''(x^0)\| \cdot \|f'(x^0)\| < 1$ для метода Ньютона начальное приближение должно быть порядка r ! Однако это соответствует самой точности решения, полученного при помощи метода штрафных функций и возникает парадоксальная ситуация — для того, чтобы эффективно вычислить с помощью метода штрафных функций решение задачи (62), начальное приближение должно быть в той же степени близко к самому решению.

Приведенный пример демонстрирует основную проблему метода штрафных функций — ухудшение вычислительных свойств задачи при повышении требований к точности решения.

В подходе, основанном на барьерных функциях также вместо (62) рассматривается задача безусловной оптимизации

$$\min_x \{f(x) + r\Phi_X(x)\} = f(x_r) + r\Phi_X(x_r) \quad (64)$$

где барьерная функция $\Phi_X(x)$ имеет следующие свойства: $\Phi_X(x) > 0$ для x , принадлежащих внутренности множества $\text{int}(X)$, $\Phi_X(x) \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow \partial X$, границе множества X . Как следует из определения барьерной функции, для применимости этого метода необходимо, чтобы X имело непустую внутренность, что, кстати, исключает ограничения-равенства.

По построению

$$f(x_r) \leq f(x_r) + r\Phi_X(x_r) \leq f(x) + r\Phi_X(x)$$

для любого $x \in \text{int}(X)$ и переходя к пределу по $r \rightarrow +0, x_r \rightarrow x^\bullet$ получаем, что $f(x^\bullet) \leq f(x)$ для любого x^\bullet и $x \in \text{int}(X)$. По непрерывности $f(x^\bullet) \leq f(x)$ для любого $x \in X$ и, следовательно, каждая из предельных точек последовательности $\{x_r\}$ реализует минимум функции $f(x)$ на X .

Популярными примерами барьерных функций для системы ограничений $X = \{x : g_i(x) \geq 0, i = 1, 2, \dots, m\}$ являются

$$\Phi_X(x) = \sum_{i=1}^m 1/g_i(x); \quad \Phi_X(x) = \sum_{i=1}^m \log(g_i(x)).$$

В подробностях с развиваемыми подходами, основанными на методах штрафных и барьерных функций можно ознакомиться по монографиям [4] и [10].

5.2 Методы прямого учета ограничений

Другим направлением решения задач вида (62) является непосредственный учет ограничений в виде выделения допустимых направлений поиска.

Определение 30 Направление d в точке $x \in X$ называется допустимым, если существует такое $\bar{\alpha} > 0$, что $x + \alpha d \in X$ для всех $\alpha \in [0, \bar{\alpha})$.

Среди допустимых направлений особый интерес представляют возможные направления, то есть те, смещение вдоль которых вызывает уменьшение целевой функции (в задаче минимизации). Если направление d является возможным в точке x , то для дифференцируемой целевой функции $f(\cdot)$ с необходимостью $f'(x)d \leq 0$.

Легко убедиться в том, что множество возможных направлений представляет собой конус. Для случая выпуклых ограничивающих функций $g_i(x) \leq 0$ $i = 1, 2, \dots, m$ этот конус выпуклый, хотя, возможно и незамкнутый. Более того легко показать, что в этом случае для конуса K_x допустимых направлений в точке x выполняется включения

$$\{d : g'_i(x)d < 0, i \in I(x),\} \subset K_x \subset \{d : g'_i(x)d \leq 0, i \in I(x),\}$$

где $I(x) = \{i : g_i(x) = 0, 1 \leq i \leq m\}$, так что мы имеем достаточно плотные (на самом деле неупущаемые) границы для K_x .

Поиск допустимых и возможных направлений можно производить различным образом и здесь мы рассмотрим метод условного градиента (сведение к последовательности задач линейного программирования) и метод возможных направлений.

5.2.1 Метод условного градиента

Этот метод удобно применять, когда ограничения в задаче линейны, т.е.

$$X = \{x : Ax \leq b\}$$

Тогда при линеаризации целевой функции $f(x) \sim f(x^0) + f'(x^0)(x - x^0)$ в окрестности начальной точки x^0 и отбрасывании постоянных членов получаем аппроксимирующую задачу

$$\begin{aligned} \min f'(x^0)x &= f'(x^0)\bar{x}^0, \\ Ax &\leq b \end{aligned}$$

решение которой используется для задания направления оптимизирующего шага:

$$f(x^0 + \lambda_0(\bar{x}^0 - x^0)) = \min_{0 < \lambda \leq 1} f(x^0 + \lambda(\bar{x}^0 - x^0)).$$

Полагая затем $x^1 = x^0 + \lambda_0(\bar{x}^0 - x^0)$ повторяем процедуру линеаризации в точке x^1 и т.д.

Метод хорошо работает, если решение задачи (62) находится в крайней точке допустимого множества X . В противном случае его сходимость в окрестности решения сильно замедляется.

Достоинством метода является также то, что он использует хорошо развитый вычислительный аппарат линейного программирования и применим соответственно к задачам большой размерности. Кроме этого, во многих специальных случаях линеаризованная подзадача имеет специальный вид и для нее могут быть применены специализированные алгоритмы, что дополнительно повышает его эффективность.

5.2.2 Метод возможных направлений.

Метод основан на следующем замечании: если $g_i(x), i = 1, 2, \dots, m$ — выпуклые дифференцируемые функции и направление d такого, что для некоторого $\delta > 0$ выполнено $g'_i(x^0)d \leq -\delta$ для тех i , что $g_i(x^0) \geq -\epsilon$, то существует $\bar{\tau} > 0$ такое, что для $\tau \in [0, \bar{\tau}]$ имеет место $x^0 + \tau d \in X$.

Тогда, решая задачу линейного программирования

$$\begin{aligned} \min \sigma \\ f'(x^0)d - \sigma \leq 0, \\ g'_i(x^0)d - \sigma \leq 0, \\ i \in I_\epsilon = \{i : g_i(x^0) \geq -\epsilon\} \end{aligned} \tag{65}$$

относительно переменных σ и $d : \|d\| \leq 1$ и получив решение σ^* и d^* в случае $\sigma^* < 0$ получим релаксационное направление d^* , ведущее из x^0 к уменьшению целевой функции и сохраняющее допустимость.

Стоит обратить внимание на параметр $\epsilon > 0$ в этой задаче. Его роль заключается в учете не только ограничений, активных в точке, но и "почти активных". Если их игнорировать, возможна ситуация застревания метода в точке, не являющейся оптимальной, поэтому ϵ строго положительно. С другой стороны оно не должно быть слишком велико, чтобы не ограничивать чрезмерно выбор релаксационных направлений.

5.2.3 Метод проекций градиента

В отличие от двух предыдущих алгоритмов, которые стремятся двигаться по внутренней допустимой области, метод проекций градиента скорее генерирует последовательность точек на ее границе. В этом методе последовательность приближений $\{x^k, k = 0, 1, \dots\}$ определяется соотношением

$$x^{k+1} = \Pi_X(x^k - \lambda_k f'(x^k)), k = 0, 1, \dots, \tag{66}$$

где $\Pi_X(\cdot)$ — оператор проекции, определяемый как

$$z = \Pi_X(y) \in X, \|z - y\| \leq \|x - y\| \text{ для любого } x \in X.$$

Другими словами, $\Pi_X(y)$ — это точка в множестве X , ближайшая к y . Практическая реализуемость этого метода сильно зависит от того, насколько эффективно может быть реализована операция проекции.

В методе проекций градиента часто комбинируют операцию проектирования и одномерную минимизацию на отрезке, соединяющим начальную точку k -ой итерации x^k и точку

проекции градиентного шага. В этом случае k -ая итерация алгоритма состоит из двух шагов:

$$\begin{aligned}\bar{x}^{k+1} &= \Pi_X(x^k - \lambda_k f'(x^k)), \\ x^{k+1} &= x^k + \alpha_k(\bar{x}^{k+1} - x^k),\end{aligned}$$

где α_k выбирается в результате одномерной минимизации:

$$f(x^{k+1}) = f(x^k + \alpha_k(\bar{x}^{k+1} - x^k)) = \min_{\alpha \geq 0} f(x^k + \alpha(\bar{x}^{k+1} - x^k)).$$

Одномерный минимум может быть также использован и вдоль проекционной траектории

$$\begin{aligned}x^k(\lambda) &= \Pi_X(x^k - \lambda f'(x^k)), \lambda \geq 0, \\ f(x^{k+1}) &= f(x^k + \lambda_k f'(x^k)) = \min_{\lambda \geq 0} f(x^k(\lambda)).\end{aligned}\tag{67}$$

Такая одномерная оптимизация может иметь преимущество в том, что x^{k+1} автоматически находится на границе допустимой области, как и решение условной оптимизационной задачи, что типично для задач с ограничениями.

Второе преимущество такого подхода менее очевидно и проявляется себя в случае полиэдрального множества X , задаваемого системой линейных неравенств вида

$$X = \{x : A_i x \leq \beta_i, i = 1, 2, \dots, m, \}$$

где A_i — i -ая строка матрицы A ограничений $Ax \leq b$, b — вектор правых частей ограничений с компонентами β_i , $i = 1, 2, \dots, m$.

При решении задач с ограничениями вида (68) большое значение имеет правильное определение множества активных ограничений $I(x^*)$ в оптимальной точке x^* :

$$I(x^*) = \{i : A_i x^* = \beta_i\}.\tag{69}$$

Если это множество определено правильно, то

$$\begin{aligned}\min_{Ax \leq b} f(x) &= \min_{A_i x = \beta_i, i \in I(x^*)} f(x)\end{aligned}\tag{70}$$

и система (68) может быть использована для исключения зависимых переменных и сведения (70) к безусловной оптимизационной задаче. При этом для решения этой задачи могут быть использованы высокоэффективные методы безусловной оптимизации, поскольку аналитические свойства $f(x)$ при таком исключении принципиально не ухудшаются.

Так вот, замечательной особенностью алгоритма (67) является то, что для полиэдральных множеств (68) после выполнения *конечного* числа итераций множество активных ограничений в оптимуме определяется точно $I(x^*) = I(x^k)$ для достаточно большого k ! Правда, оценка этого "достаточно большого" может быть достаточно большой ...

5.3 Метод модифицированной функции Лагранжа

Одним из наиболее развитых методов условной оптимизации является в настоящее время метод модифицированной функции Лагранжа или точнее целый класс методов этого направления. В настоящем разделе мы рассмотрим этот метод на характерном примере экстремальной задачи

$$\begin{aligned}\min f(x) &= f(x^*) \\ h(x) &= 0\end{aligned}\tag{71}$$

с ограничениями-равенствами $h : E^n \rightarrow E^m$. Мы будем предполагать выполнение в точке x^* , являющейся решением задачи (71), выполнение необходимых:

$$f'(x^*) + u^* J_h(x^*) = 0 \quad (72)$$

для некоторого набора множителей Лагранжа u^* , и достаточных условий раздела 2.3.1:

$$z(f''(x^*) + \sum_{i=1}^m u_i^* h_i''(x^*))z > 0 \quad (73)$$

для $z \neq 0$ таких, что $h'(x^*)z = 0$.

При использовании этого подхода возникают по крайней мере два вопроса:

1. Если u^* известно, дает ли

$$\min_x L(x, u^*) = L(x^*, u^*)$$

такое x^* , которое решает (71)?

2. Как найти u^* ?

К сожалению (72 - 73) не гарантируют то, что x^* минимизирует $L(x, u^*)$. В подтверждение рассмотрим следующий пример экстремальной задачи с двумя переменными:

Пример.

$$\min_{h(x)=0} f(x) = \min_{x_1=0} -\frac{1}{2}(x_1 - 1)^2 + \frac{1}{2}x_2^2 \quad (74)$$

Функция Лагранжа в этой задаче имеет вид

$$L(x, u) = -\frac{1}{2}(x_1 - 1)^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + ux_1.$$

Система необходимых условий оптимальности дает $x_1^* = x_2^* = 0, u^* = -1$.

Конус допустимых направлений $K(x^*)$ в оптимальной точке $x^* = (0, 0)$ состоит из векторов вида $d = (0, z), z \in \mathbb{R}$ и поскольку

$$f''(x^*) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

то $y f''(x^*) y > 0$ для всех $y \in K(x^*), y \neq 0$ и, следовательно, в этой точке выполнены даже достаточные условия оптимальности.

Вместе с тем точка $(0, 0)$ отнюдь не является минимумом

$$L(x, -1) = -\frac{1}{2}(x_1 - 1)^2 + \frac{1}{2}x_2^2 - x_1 = \frac{1}{2}(-x_1^2 + x_2^2 + 1) + \frac{1}{2}x_2^2.$$

Этот пример показывает, что в общем случае (72-73) не сводятся к минимизации $L(x, u)$ и, следовательно, являются весьма сложной задачей решения системы нелинейных уравнений, для которой пока нет и повидимому не существует общих методов решения.

Альтернативой необходимым условиям экстремума являются прямой метод штрафных функций. Для квадратичного штрафа задача (74) сводится к минимизации

$$\Phi_r(x) = -\frac{1}{2}(x_1 - 1)^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + \frac{1}{r}x_1^2$$

являющейся выпуклой для $r < 1$. Поэтому задача $\min_x \Phi_r(x)$ хорошо определена, но ее решение $x_1 = -\frac{r}{2-r}, x_2 = 0$, однако, удовлетворяет ограничениям лишь приближенно. Опять же условия оптимальности для штрафной функции $\Phi_r(x)$ заведомо невозможно сопоставить с необходимыми условиями экстремума вида (72).

Доказательство теоремы 15 из раздела 2.3.1 подсказывает, что для того, чтобы преодолеть недостатки этих подходов (классической функции Лагранжа и штрафных функций) можно определить модифицированную функцию Лагранжа:

$$L_c(x, u) = f(x) + uh(x) + \frac{1}{2}c\|h(x)\|^2 = L(x, u) + \frac{1}{2}c\|h(x)\|^2.$$

Идея этой модификации функции Лагранжа заключается в том, чтобы удовлетворить классическим необходимым условиям экстремума за счет обычной функции Лагранжа, а прибавлением $\|h(x)\|^2$ улучшить обусловленность матрицы вторых производных по x в подпространстве, ортогональном касательному подпространству допустимого множества.

Действительно, если $h(x^*) = 0$, то

$$L'_c(x^*, u^*) = f'(x^*) + uh'(x^*) + ch(x^*)h'(x^*) = L'(x^*, u^*) = 0.$$

С другой стороны, $(\|h(x)\|^2)'' = h'(x) \times h'(x) \geq 0$ так что добавка $c\|h(x)\|^2$ улучшает или, по крайней мере, не ухудшает знакоопределенность матрицы вторых производных $L''(x, u)$.

Напомним, что положительная обусловленность $L''_c(x^*, u^*)$ гарантирует то, что x^* является изолированным локальным минимумом $L_c(x, u^*)$.

То, что такое c на самом деле существует, гарантируется леммой 14 раздела 2.3.1, стр. 18. Для пояснения эффекта улучшения обусловленности матрицы вторых производных рассмотрим пример.

Пример.

$$\min_{h(x)=0} f(x) = \min_{x_1 - x_2 = 0} x_1^2 - \frac{1}{2}x_2^2 \quad (75)$$

С точки зрения классической функции Лагранжа $L(x, u) = x_1^2 - \frac{1}{2}x_2^2 - u(x_1 - x_2)$ система необходимых условий оптимальности имеет вид

$$\begin{aligned} 2x_1 - u &= 0 \\ -x_2 + u &= 0 \\ x_1 - x_2 &= 0, \end{aligned}$$

откуда следует, что $x^*_1 = x^*_2 = u^* = 0$. Однако при этом $L(x, 0) = x_1^2 - \frac{1}{2}x_2^2$ не имеет минимума в точке $(0, 0)$, что связано со знаконеопределенностью матрицы вторых производных по x функции $L(x, 0)$.

При этом

$$f''(x^*) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad J_h(x^*) = (1, -1), \quad J_h^T(x^*)J_h(x^*) = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Нуль-пространство матрицы $J_h^T(x^*)J_h(x^*)$ (совпадающее с нуль пространством матрицы $J_h(x^*)$) имеет вид $N_h = \{(x_1, x_2) : \{x = (x_1, x_2) : x_1 = x_2\}\}$. На этом подпространстве для $x = (z, z)$ имеет место строгая положительность матрицы $f''(x^*)$:

$$xf'(x^*)x = \begin{pmatrix} z & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z \\ z \end{pmatrix} = z^2 - \frac{1}{2}z^2 > 0 \text{ для } z \neq 0,$$

так что для \bar{h} и \bar{c} выполнены все условия леммы 14 и матрица

$$f''(x^*) + cJ_h^T(x^*)J_h(x^*) = \begin{pmatrix} c+1 & -c \\ -c & c-\frac{1}{2} \end{pmatrix} = R_c$$

должна быть положительно определена для достаточно больших c .

И действительно, главные миноры первого порядка очевидным образом положительны для $c > 1/2$, так что для проверки полной положительной определенности R_c необходимо лишь потребовать положительности ее определителя:

$$\det R_c = (c+1)(c-\frac{1}{2}) - c^2 = \frac{1}{2}c - \frac{1}{2} > 0$$

для $c > 1$ и, следовательно, $R_c > 0$ для $c > 1$.

С точки зрения теории экстремальных задач R_c есть матрица вторых производных (по x) функции

$$L_c(x, u) = (x_1^2 - \frac{1}{2}x_2^2) + u(x_1 - x_2) + c(x_1 - x_2)^2,$$

которая является модифицированной функцией Лагранжа для задачи (75).

Матрица вторых производных по x модифицированной функции Лагранжа $L_c^{xx}(x^*, 0) = f''(x^*) + cJ_h^T(x^*)J_h(x^*) = R_c$ будет положительно определена при $c > 1$ и задача

$$\min x_1^2 - \frac{1}{2}x_2^2 + c(x_1 - x_2)^2$$

будет хорошо определена и иметь единственное решение $x^* = (0, 0)$, совпадающее в силу

$$f(x^*) = L_c(x^*, 0) < L_c(x, 0) = f(x) \text{ для } h(x) = 0,$$

с решением задачи (75).

5.3.1 Теория возмущений

Ключевую роль в исследовании метода модифицированных функций Лагранжа играет *возмущенная* задача

$$\begin{aligned} \phi(y) = \min & f(x) \\ & h(x) = y \end{aligned} \quad (76)$$

где y лежит в некоторой окрестности нуля. Такая функция возмущения для задачи (75) легко вычисляется:

$$\phi(y) = \min_{x_1 - x_2 = y} x_1^2 - \frac{1}{2}x_2^2 = y^2 + \min_{x_2} (\frac{1}{2}x_2^2 + 2x_2y = -y^2). \quad (77)$$

Как видим, эта функция оказывается вогнутой по y и в исходной точке $y = 0$ имеет глобальный максимум ! Тем не менее решение задачи (77) $x_1(y) = -y$, $x_2(y) = -2y$ единственно, непрерывно зависит от y и эта зависимость даже гладкая.

Как оказывается, все это является следствием выполнения условий регулярности ограничений и достаточных условий оптимальности при $y = 0$. То, что это имеет место в общем случае, подтверждается следующей теоремой.

Теорема 31 Если в точке x^* для задачи (71) выполнены достаточные условия оптимальности и регулярности, то существует окрестность нуля U такая, что (76) имеет единственные оптимальные $x(y)$ для всех $y \in U$.

Доказательство. Покажем, что матрица

$$H = \begin{vmatrix} L^{xx}(x^*, u^*) & J_h^T(x^*) \\ J_h(x^*) & 0 \end{vmatrix}$$

невырожденная, что эквивалентно тому, что из $H\bar{z} = 0$ следует $\bar{z} = 0$. Действительно, если $H\bar{z} = 0$, то, предполагая $\bar{z} = (\bar{x}, \bar{u})$ и расписывая эту систему по-компонентно, получим

$$\begin{aligned} L^{xx}(x^*, u^*)\bar{x} + J_h^T(x^*)\bar{u} &= 0 \\ J_h(x^*)\bar{x} &= 0 \end{aligned}$$

Умножая первое уравнение на \bar{x} получим

$$\bar{x}L^{xx}(x^*, u^*)\bar{x} + \bar{x}J_h^T(x^*)\bar{u} = 0 = \bar{x}L^{xx}(x^*, u^*)\bar{x} + (J_h(x^*)x^*)^T\bar{u}$$

Так как $J_h(x^*)\bar{x} = 0$, то, следовательно, $\bar{x}L^{xx}(x^*, u^*)\bar{x} = 0$. Поскольку в силу достаточных условий оптимальности $L^{xx}(x^*, u^*)$ положительно определена, то отсюда следует, что $\bar{x} = 0$.

Из первого уравнения при этом следует, что $J_h^T(x^*)\bar{u} = 0$, а поскольку в силу условия регулярности градиенты ограничений h линейно независимы, то $\bar{u} = 0$. Следовательно, $\bar{z} = (\bar{x}, \bar{u}) = 0$, откуда следует невырожденность H .

Теперь рассмотрим для некоторого y условие оптимальности первого порядка

$$f'(x) + uJ_h(x) = 0; h(x) = y,$$

решением которой является, например, $x(y), u(y)$. Якобиан этой системы (по x, u) в точке (x^*, u^*) при $y = 0$ совпадает с H и, следовательно невырожден. По теореме о неявной функции существуют непрерывно дифференцируемые решения $x(y), u(y)$ такие, что

$$f'(\bar{x}) + \bar{u}J_h(\bar{x}) = 0; h(\bar{x}) = y \quad (78)$$

при $\bar{x} = x(y), \bar{u} = u(y)$.

При этом $x(y), u(y)$ по непрерывности будут удовлетворять достаточным условиям оптимальности, что гарантирует их единственность. \square

Полезным продуктом приведенной теоремы является исследование чувствительности решения задачи (76) к изменениям y . Умножая (78) на $x'(0)$ — производную $x(y)$ по y при $y = 0$ получим

$$(f'(x^*) + u^*J_h(x^*))x'(0) = \frac{d}{dy}(f(x(y)) + u^*h(x(y)))|_{y=0} = (\phi'(y) + u^*\frac{d}{dy}h(x(y)))|_{y=0} = 0,$$

Дифференцируя $h(x(y))$ получаем

$$\frac{d}{dy}h(x(y)) = \frac{d}{dy}y = I.$$

Следовательно

$$\phi'(y)|_{y=0} = -u^*, \quad (79)$$

важный результат в теории чувствительности экстремальных задач.

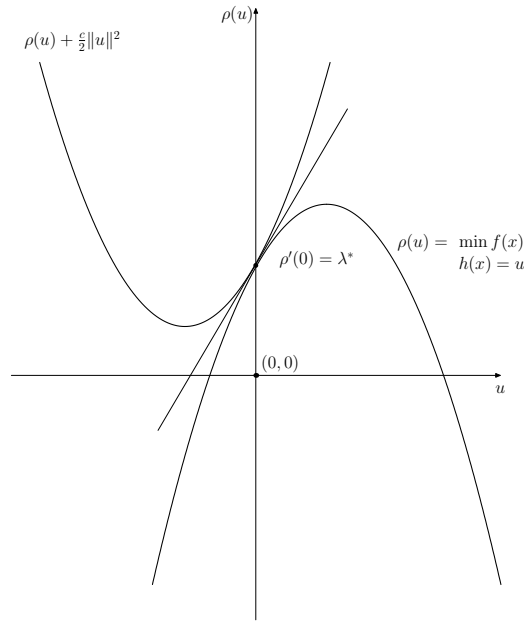


Рис. 11: Улучшенная функция возмущения (76).

5.4 Точные штрафные функции

В этом разделе мы рассмотрим возможности решения условных оптимизационных задач с помощью так называемых точных штрафных функций, дающих точное решение исходной задачи при конечных значениях параметра штрафа.

Вначале мы рассмотрим задачу с равенствами

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ h(x) = 0 \end{aligned} \quad (80)$$

и сопоставим ей безусловную оптимизационную задачу

$$\min \{f(x) + cP(x)\} \quad (81)$$

где $c > 0$, а $P(x) = \max_{i=1,2,\dots,m} \{|h_i(x)|\} = \|h(x)\|_\infty$ — так называемая точная штрафная функция.

Основным результатом этого раздела является следующая теорема.

Теорема 32 Пусть в задаче (80) выполняются достаточные условия оптимальности раздела 2.1.2 и x^* — ее строгий локальный минимум, который удовлетворяет этим условиям. Тогда существует $\bar{c} > 0$ такое, что x^* является строгим локальным минимумом задачи безусловной оптимизации 81.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Аналогично предыдущему определим

$$\phi(y) = \min_{h(x)=y, x \in x^* + U} f(x), \quad (82)$$

где окрестность нуля U достаточно мала с тем, чтобы эта задача имела единственное решение. Тогда

$$\min_{x \in x^* + U} \{f(x) + cP(x)\} = \min_{y \in h(x^* + U)} \{f(x) + c\|y\|_\infty\} = \min_{y \in h(x^* + U)} \phi_c(y),$$

где $\phi_c(y) = \phi(y) + c\|y\|_\infty$.

В силу результатов раздела 5.3.1 функция $\phi(y)$ дифференцируема в некоторой окрестности нуля V и, следовательно, по теореме о среднем можно написать

$$\phi(y) = \phi(0) + \phi'(0)y + \frac{1}{2}y\phi''(\bar{y})y$$

для некоторого $\bar{y} = \gamma y, \gamma \in [0, 1]$ и соответственно

$$\phi_c(y) = \phi(0) + \phi'(0)y + \frac{1}{2}y\phi''(\bar{y})y + c\|y\|_\infty.$$

По доказанному ранее $\phi'(0) = -u^*$, где u^* — существующие в силу условий регулярности множители Лагранжа, отвечающие решению x^* . В силу элементарных оценок $|u^*y| \leq \|u^*\|_\infty\|y\|_\infty$ и если $c \geq \|u^*\|_\infty + \delta$, где $\delta > 0$ то

$$c\|y\|_\infty - u^*y \geq c\|y\|_\infty - \|u^*\|_\infty\|y\|_\infty \geq \delta\|y\|_\infty$$

и, следовательно,

$$\phi_c(y) \geq \phi(0) + \delta\|y\|_\infty + \frac{1}{2}y\phi''(\bar{y})y \geq \phi(0) + \delta\|y\|_\infty - L\|y\|^2$$

для $y \in V$.

Поскольку $\|y\| \leq \sqrt{n}\|y\|_\infty$, то

$$\phi_c(y) \geq \phi(0) + \delta\|y\|_\infty - L\|y\|^2 \geq \phi(0) + \delta\|y\|_\infty(1 - \frac{nL}{\delta}\|y\|_\infty) \geq \phi(0) + \delta/2\|y\|_\infty$$

для $\|y\|_\infty < \frac{\delta}{nL}$. Отсюда следует, что $\phi_c(y) > \phi(0)$ для всех $\|y\|_\infty < \frac{\delta}{nL}, y \in V$. Не умаляя общности можно считать, что $\{y : \|y\|_\infty < \frac{\delta}{nL}\} \cap V$ имеет место для всех $y = h(x), x \in x^* + U$ и, следовательно

$$f(x) + cP(x) \geq \min_{y \in h(x^*+U)} \phi_c(y) \geq \min_{y \in h(x^*+U)} \{\phi(0) + \delta/2\|y\|_\infty\} = \phi(0) = \min_{h(x)=0} f(x)$$

для $x \in x^* + U$. Следовательно, точка x^* является строгим локальным минимумом $f(x) + cP(x)$ для достаточно больших c , что доказывает теорему. \square

Эквивалентность задач (80) и (81) весьма привлекательна, но на пути ее практического применения находятся две серьезные проблемы: трудность определения подходящего значения для штрафной константы c и недифференцируемость точной штрафной функции $P(x) = \|h(x)\|_\infty$. Некоторый подход для преодоления этих проблем рассмотрен в следующем разделе, посвященном методу линеаризации, предложенному Б.Н. Пшеничным.

5.5 Метод линеаризации

Метод точных штрафных функций требует пусть и однократного, но все же решения достаточно сложной экстремальной задачи

$$\min_x \{f(x) + cP(x)\}. \quad (83)$$

Основная сложность этой задачи заключается в ее недифференцируемости, однако заданная структура функции $P(x)$ позволяет предложить достаточно эффективные методы, среди которых неплохой вычислительной репутацией пользуется метод линеаризации.

В этом разделе мы рассмотрим этот метод на примере задачи с ограничениями $g(x) \leq 0$, для которых $P(x) = \max\{0, g_i(x), i = 1, 2, \dots, m\}$. Метод строит рекуррентную последовательность $\{x^k\}, k = 0, 1, \dots$ в соответствии с соотношением

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k,$$

где d^k определяется решением задачи

$$\begin{aligned} \min \quad & f'(x^k)d + \frac{1}{2}dH_kd + c\sigma \\ & g_i(x^k) + g'_i(x^k)d \leq \sigma, i \in I_\delta(x^k) \end{aligned} \quad (84)$$

В задаче H_k — некоторые симметричные положительно определенные матрицы, такие, что

$$0 < \gamma \leq \min \lambda(H_k) \leq \max \lambda(H_k) \leq \Gamma < \infty,$$

а $I_\delta(x^k)$ — индексные множества, включающие активные ограничения ”с некоторым запасом” :

$$I_\delta(x^k) = \{i : g_i(x^k) \geq P(x^k) - \delta\}.$$

Шаг α_k выбирается либо из условия полной релаксации

$$f(x^k + \alpha_k d^k) + cP(x^k + \alpha_k d^k) = \min_{\alpha} \{f(x^k + \alpha d^k) + cP(x^k + \alpha d^k)\}$$

либо по правилу Армихо, гарантирующему так называемое достаточное убывание

$$f(x^k + \alpha_k d^k) + cP(x^k + \alpha_k d^k) \leq f(x^k) + cP(x^k) - \gamma \alpha_k \|d^k\|.$$

6 Двойственные алгоритмы

Интересный класс алгоритмов возникает при сведении нелинейных оптимизационных задач к их двойственным эквивалентам.

6.1 Сопряженные функции и двойственность

В качестве простого примера этого подхода рассмотрим задачу: найти

$$f_{\star} = \min_{x \in X_1 \cap X_2} \{f_1(x) + f_2(x)\}. \quad (85)$$

Для того, чтобы избежать схоластических усложнений предположим, что решение этой задачи существует и $f_{\star} > -\infty$.

Разделив переменные, мы получим эквивалентную задачу

$$f_{\star} = \min_{\substack{x^1 \in X_1, x^2 \in X_2, \\ x^1 = x^2}} \{f_1(x^1) + f_2(x^2)\}. \quad (86)$$

Введем для последнего ограничения двойственную переменную u и запишем соответствующую функцию Лагранжа:

$$L(x^1, x^2, u) = f_1(x^1) + f_2(x^2) + u(x^1 - x^2).$$

Вычисляя минимум функции Лагранжа по x^1, x^2 , получим двойственную функцию:

$$h(u) = \min_{x^1 \in X_1} \{f_1(x^1) + ux^1\} + \min_{x^2 \in X_2} \{f_2(x^2) - ux^2\} = -h_1(-u) - h_2(u),$$

где $h_i(u) = \max_{x \in X_i} \{ux - f_i(x)\}$, $i = 1, 2$ — сопряженные функции к соответствующим $\tilde{f}_i(x) = f_i(x) + \text{Ind}_{X_i}(x)$, где через $\text{Ind}_{X_i}(x)$ как обычно обозначаем индикаторные функции множеств $X_i, i = 1, 2$:

$$\text{Ind}_Z(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \in Z \\ \infty & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Обозначим для $i = 1, 2$

$$U_i = \text{dom } h_i = \{u : h_i(u) < \infty\}.$$

Двойственная задача заключается в том, чтобы найти

$$\max_{u \in (-U_1) \cap U_2} h(u) = - \min_{u \in (-U_1) \cap U_2} \{h_1(-u) + h_2(u)\}. \quad (87)$$

В предположении выпуклости разрыва двойственности нет, если $x^{\star}, u^{\star} : x^{\star} \in X_1 \cap X_2, u^{\star} \in U_1 \cap U_2$.

$$x^{\star} \in \text{argmax} \{xu^{\star} - f_1(x)\}, \quad x^{\star} \in \text{argmin} \{xu^{\star} - f_2(x)\}$$

6.2 Монотропическая оптимизация

Этот раздел теории оптимизации имеет дело с задачами вида

$$f_{\star} = \min_{\substack{x \in \bigcap_{i=1}^n X_i, X_i \subset \mathbb{R} \\ x \in L}} \sum_{i=1}^n f_i(x_i) \quad (88)$$

где X_i — выпуклое подмножество вещественной оси \mathbb{R} , а L — линейное или аффинное подпространство.

Для того, чтобы применить двойственный подход, описанный выше, положим $f_1(x) = \sum_{i=1}^n f_i(x_i)$, $f_2(x) = \text{Ind}_L(x)$.

При этом

$$h_1(u) = \sup \left\{ \sum_{i=1}^n x_i u_i - \sum_{i=1}^n f_i(x_i) \right\} = \sum_{i=1}^n h_i(x_i),$$

где

$$h_i(u_i) = \sup_{\xi} \xi u_i - f_i(\xi), \text{dom } h_i = \mathbb{R},$$

а

$$h_2(u) = \sup_{x \in L} xu = \text{Ind}_{L^{\perp}}(u),$$

где L^{\perp} — ортогональное дополнение L .

Тогда двойственная задача (87) выглядит как

$$\min_{u \in L^{\perp}} \sum_{i=1}^n h_i(u_i)$$

и разрыва двойственности нет, если $L \cap X_1 \cap X_2 \dots \cap X_n \neq \emptyset$.

Условия оптимальности:

$$x_i^{\star} \in \text{argmax}_{x_i \in X_i} \{x_i u_i^{\star} - f_i(x_i)\}$$

или $u_i^{\star} = f_i'(x_i^{\star})$, если $x_i^{\star} \in \text{int} X_i$.

Оптимизация сетей Пусть задан граф $G = (V, E)$ где V — множество вершин, $E \subset V \times V$ — множество ребер. Для $e \in E$ определим переменные x_e , представляющие собой потоки по ребрам $e \in E$.

Задача о потоке минимальной стоимости заключается в том, чтобы найти

$$\min \sum_{e \in E} f_e(x_e)$$

при соблюдении балансовых ограничений

$$\sum_{e \in E_i^+} x_e - \sum_{e \in E_i^-} x_e = 0, E_i^+ = E \cap \{V \times \{i\}\}, E_i^- = E \cap \{\{i\} \times V\} \quad (89)$$

и условий на источник (и сток ?). Если на потоки наложено условие неотрицательности. то

$$h(u_e) = \max_{x_e \geq 0} \{u_e x_e - f_e(x_e)\}.$$

Двойственная задача:

$$\min_{u_e \in L_\perp} \sum_{e \in E} h(u_e).$$

Ортогональное пространство к уравнениям (89) может быть построено исходя из соображений, что если $L = \{x : Ax = 0\}$, то $p \in L_\perp$ тогда, когда $px = 0$ для любого $x : Ax = 0$. В данном случае

$$L_\perp = \{u : u_e = p_i - p_j, e = (i, j) \in E\}$$

Действительно, проверим, что при этом

$$\sum_{e \in E} u_e x_e = 0$$

при потоках, удовлетворяющих условию баланса. Подставив $u_e = p_i - p_j$, $x_e = x_{ij}$ получим

$$\sum_i \sum_j (p_i - p_j) x_{ij} = \sum_i \sum_j p_i x_{ij} - \sum_i \sum_j p_j x_{ij} = 0.$$

6.3 Квадратичное программирование с двойственной точки зрения

Задачи квадратичного программирования представляют особый интерес с двойственной точки зрения, поскольку тут возможно гарантировать гладкость сопряженных функций.

Рассмотрим задачу

$$\min_{Ax \leq b} \frac{1}{2} x' Q x + p x \quad (90)$$

с положительно определенной матрицей квадратичной формы Q .

Обычным образом можно ввести функцию Лагранжа

$$L(x, u) = \frac{1}{2} x' Q x + p x + u(Ax - b),$$

для которой существует седловая точка (x^*, u^*) с $u^* \geq 0$. Точка x^* решает задачу (90) и может быть получена минимизацией $L(x, u^*)$ по x для оптимальных двойственных переменных u^* .

Оптимальные двойственные переменные u можно получить, максимизируя двойственную функцию

$$q(u) = \min_x \left\{ \frac{1}{2} x' Q x + p x + u(Ax - b) \right\} = -ub + \min_x \left\{ \frac{1}{2} x' Q x + (p + uA)x \right\} \quad (91)$$

по $u \geq 0$.

Поскольку Q положительно определена, то внутренняя задача легко разрешима и ее решение x_u имеет вид

$$x_u = -Q^{-1}(p' + A'u').$$

Подставляя это решение в (91) получаем

$$q(u) = -\frac{1}{2} u A Q^{-1} A' u' - (p Q^{-1} A' + b) u' = -\frac{1}{2} u P u' - r u',$$

где $P = A Q^{-1} A'$, $r = p Q^{-1} A' + b$. Поскольку диагональные элементы матрицы положительноны: $p_{ii} = A_i Q^{-1} A'_i > 0$, где A_i — это i -ая строка матрицы A , то $q(u)$ строго (и даже сильно) выпукла по отдельным переменным u_i и, следовательно, для ее решения можно применить покоординатный спуск, что хорошо с точки зрения параллельных вычислений.

7 Специальные экстремальные задачи и методы их решения

Существует ряд задач нелинейной оптимизации которые заслужили специальных методов для их решения.

7.1 Метод наименьших квадратов

Предполагается, что рассматриваемое явление описывается некоторой зависимостью $y = f(x, a)$ между задаваемыми или известными условиями x и наблюдаемым результатом y . Функциональный вид такой зависимости определяется заранее, исходя из тех или иных модельных соображений, однако параметры a этой зависимости должны быть определены по наблюдаемым данным, возможно содержащим и неконтролируемые ошибки.

Обозначая набор имеющихся наблюдений через $\bar{y} = \{y_i, i = 1, 2, \dots, y_m\}$ произведенных при известных соответствующих условиях $\bar{x} = \{x_i, i = 1, 2, \dots, x_m\}$ для неизвестных параметров a в принципе должна выполняться система уравнений

$$y_i = f(x_i, a), \quad i = 1, 2, \dots, y_m \quad (92)$$

или в векторном виде

$$\bar{y} = \bar{f}(\bar{x}, a)$$

с соответствующей вектор-функцией $\bar{f}(\bar{x}, a) = \{f(x_i, a), i = 1, 2, \dots, m\}$

Однако поскольку измерения y_i могут содержать ошибки, то уравнения (92) вообще говоря не выполняются. В этом случае часто имеет смысл определять параметр a так чтобы минимизировать суммарные невязки в системе (92) в форме суммы квадратов отклонений наблюдений от предсказаний:

$$\min_a \|\bar{y} - \bar{f}(\bar{x}, a)\|^2 = \min_a \sum_{i=1}^m \|y_i - f(x_i, a)\|^2 = \sum_{i=1}^m \|y_i - f(x_i, a^*)\|^2. \quad (93)$$

Некоторое обоснование этому имеется в математической статистике, где показывается, что при линейной зависимости функции f от параметров a оценка, полученная в соответствии с задачей (93), является в определенном смысле оптимальной.

Представляет особый интерес так называемые нейронные сети или многослойные персептроны. В этом случае выходные сигналы k -го слоя $x_k^i, i = 1, 2, \dots, n_k$ преобразуются в соответствии с некоторой коммуникационной схемой во входные сигналы $k + 1$ -го слоя:

$$y_{k+1}^i = u_k^{0s} + \sum_{j=1}^{n_k} u_k^{sj} x_k^j, \quad i = 1, 2, \dots, n_{k+1}.$$

В этих формулах n_k и n_{k+1} — количества центров активации (нейронов) на k и $k + 1$ -ом слоях.

Входные сигналы $k + 1$ -го слоя преобразуются в выходные сигналы x_i^{k+1} :

$$x_i^{k+1} = \phi(y_i^{k+1})$$

с помощью функции возбуждения $\phi(\cdot)$.

Функции возбуждения ϕ имитируют реакцию нейронов на поступающий сигнал, которая имеет пороговый характер:

$$\phi(z) = \frac{1}{1 + \exp -z}, \quad \phi(z) = \text{th}(z) = \frac{\exp z - \exp -z}{\exp z + \exp -z}$$

и другие.

Задача обучения нейронных сетей заключается в настройке коммуникационных параметров u по заданному набору входных сигналов, поступающих на 1-й слой нейронной сети с тем, чтобы на конечном слое получить сигнал, соответствующий правильному распознаванию класса входного сигнала.

Пример

$$\phi(z) = \text{th}(z) = \frac{\exp z - \exp -z}{\exp z + \exp -z}, x_1 = u_0 + u_1 y_0,$$

7.2 Динамическое программирование

Метод динамического программирования применяется для решения задач с сепарабельной целевой функцией

$$\Phi(x) = \sum_{t=0}^T \phi_t(x_t)$$

где на переменные x_t наложены некоторые связывающие ограничения $x = (x_0, x_1, \dots, x_T) \in X$.

Обозначим $x^t = (x_0, x_1, \dots, x_t)$. Зафиксировав первые $t + 1$ переменных получаем ограничения на x_{t+1} , которые можно записать в виде

$$x_{t+1} \in X_{t+1} = \{x_{t+1} : x_{t+2}, x_{t+3}, \dots, x_T \text{ такие, что } (x_0, x_1, \dots, x_t, x_{t+1}, x_{t+2}, x_{t+3}, \dots, x_T) \in X\}$$

Задачу

$$\min \Phi(x), x \in X$$

можно соответственно переписать в виде

$$\min_{x_0 \in X_0} \min_{x_1 \in X_1(x^0)} \min_{x_2 \in X_2(x^1)} \dots \min_{x_T \in X_T(x^{T-1})} \Phi(x^T)$$

Практическая эффективность этого подхода зависит от сложности этой цепочки операций. Если каждое из x_t — n -мерный вектор, то B_{T-1} представляет собой функцию $(T-1)n$ аргументов, заданную неявно, как результат соответствующей минимизации. При расчете этой функции на сетке с дискретностью ϵ и диапазоном изменения переменных L необходимо вычислить $\left(\frac{L}{\epsilon}\right)^{(T-1)n}$ значений, т.е. решить соответствующее количество непростых задач оптимизации. Последнее представляет значительную сложность даже для вычислительных машин суперкомпьютерного класса. Не зря автор этого подхода — американский математик Беллман назвал эту проблему "проклятием размерности".

Ситуация, однако, сильно упрощается, если множество X и следовательно X_t имеют простую структуру. В частности, если

$$X_t(x^{t-1}) = \{x = x_{t-1} + u_t, x_{t-1} \in X_{t-1}(x^{t-2}), u_t \in U_t\}$$

то

$$B_{t-1}(x^{t-1}) = \min_{x_t = x_{t-1} + u_t} \{\phi(x_t) + B_t(x^t)\}$$

и если $B_t(x^t) = B_t(x_t)$, т.е. зависит только от "последнего" состояния x_t , а не от предыстории x^t , то

$$B_{t-1}(x^{t-1}) = \min_{x_t = x_{t-1} + u_t} \{\phi(x_t) + B_t(x_t)\} = B_{t-1}(x_{t-1})$$

и, следовательно, $B_{t-1}(\cdot)$ также зависит только от x_{t-1} . По индукции в обратном времени получаем, что каждая из функций Беллмана B_t является функцией лишь "своего" состояния x_t .

8 Практика решений задач оптимизации на ЭВМ

Для решения задач линейного и нелинейного программирования (далее ЛП/НЛП-задач) на ЭВМ разработано разнообразное и высокоэффективное программное обеспечение. Достаточно подробный обзор состояния дел с программным обеспечением, распространяемым как на коммерческой, так и на бесприбыльной основе можно найти в Интернет по адресу

<http://www.skypoint.com/subscribers/ashbury/linear-programming-faq.html>

а также в различных разделах специализированного сайта по вычислительной математике и методам оптимизации:

<http://www.netlib.org>

Здесь мы остановимся подробнее на технологии решения ЛП/НЛП-задач в практических ситуациях. Процедура решения ЛП/НЛП-задач с использованием современных программных средств содержит, как правило, следующие этапы:

1. Подготовка данных, описывающих задачу.
2. Подготовка инструкций программе для ее запуска.
3. Собственно счет.
4. Анализ полученных результатов.

Этапы 2,3 сильно зависят от используемой программы и в этом случае необходимо детально ознакомиться с руководством пользователя и следовать ему.

Как правило, значительная часть соотношений (ограничений и целевой функции) является в практических задачах линейной и описывается специальным образом с использованием формата, предназначенного для описания ЛП-задач. Далее мы представим этот формат, используемый и в нелинейном оптимизаторе MINOS, а также опишем способ представления и нелинейной части задачи.

Способ представления ЛП-задачи в виде машинно-читаемого файла данных представляет собой некоторый стандарт, который все промышленные программы-оптимизаторы как правило понимают и используют. В крайнем случае в составе вашего программного обеспечения наверняка найдется программа-перекодировщик, которая преобразует стандартный формат к виду, используемому вашей системой.

8.1 Представление исходных данных

В стандартном формате ЛП-задача описывается с помощью текстового файла, состоящего, как минимум, из 4 разделов:

ROWS	—	описание ограничений
COLUMNS	—	описание переменных и матрицы ограничений
RHS	—	описание правой части системы ограничений
BOUNDS	—	описание простых границ на переменные и типов переменных

Начинается файл-описание задачи строкой вида

NAME	XXXXXXXXXX	имя задачи
		15

которая дает возможность идентифицировать решаемую задачу. Имя задачи должно начинаться с 15-й позиции и не превышать определенного количества символов, зависящего от системы. Типично это 8 символов. В приведенном формате строки NAME и далее символ \square обозначает пробел.

Секция ROWS содержит декларации ограничений задачи в виде строк

$$\square\square \left| \begin{array}{l} \text{тип ограничения} \\ 3 \end{array} \right| \square \left| \begin{array}{l} \text{имя ограничения} \\ 5 \end{array} \right| 13$$

или

$$\square \left| \begin{array}{l} \text{тип ограничения} \\ 3 \end{array} \right| \square\square \left| \begin{array}{l} \text{имя ограничения} \\ 5 \end{array} \right| 13$$

где *тип ограничения* — это одна из букв L, E, G, N, а имя ограничения — это набор из 8 символов, обычно мнемонически связанный со смысловым значением данного ограничения.

Тип ограничения L соответствует ограничению \leq , E — равенству $=$, G — неравенству \geq . Тип N представляет собой учетные или нейтральные ограничения.

Секция COLUMNS содержит описание ненулевых элементов матрицы ограничений в виде строк типа

$$\square\square\square\square \left| \begin{array}{l} \text{имя переменной} \\ 5 \end{array} \right| \square\square \left| \begin{array}{l} \text{имя ограничения} \\ 13 \end{array} \right| \square\square \left| \begin{array}{l} \text{значение коэффициента} \\ 21 \end{array} \right| 33$$

Значение коэффициентов матрицы ограничений представляются как 12-значное число в любом допустимом формате. Коэффициенты матрицы ограничений, относящиеся к одной переменной, должны быть собраны вместе. Это соответствует обходу матрицы ограничений по столбцам.

Секция RHS описывает вектор правых частей системы ограничений. Строки этой секции имеют вид

$$\square\square\square\square \left| \begin{array}{l} \text{имя правой части} \\ 5 \end{array} \right| \square\square \left| \begin{array}{l} \text{имя ограничения} \\ 13 \end{array} \right| \square\square \left| \begin{array}{l} \text{значение правой части} \\ 21 \end{array} \right| 33$$

В описываемом формате имеется возможность проведения многовариантных расчетов с различными правыми частями. Имя правой части дает возможность различить эти варианты.

Секция BOUNDS описывает так называемые простые границы на переменные. В современных алгоритмах ограничения на отдельные переменные вида $l_i \leq x_i \leq u_i$ обрабатываются специальным образом, поэтому эти ограничения также вынесены в специальную секцию. Строки этой секции имеют вид

$$\square\square \left| \begin{array}{l} \text{тип границы} \\ 3 \end{array} \right| \square\square \left| \begin{array}{l} \text{имя набора границ} \\ 5 \end{array} \right| \square\square \left| \begin{array}{l} \text{имя переменной} \\ 13 \end{array} \right| \square\square \left| \begin{array}{l} \text{значение границы} \\ 21 \end{array} \right| 33$$

Указатель *тип границы* представляет собой двухбуквенный идентификатор. Основные типы приведены в табл. 3. Помимо этих типов, существуют еще ряд и других, ориентированных на специальные задачи. С такими типами границ лучше знакомиться по руководствам

Таблица 3: Основные типы границ на переменные

UP	верхняя граница на переменную
LO	нижняя
FX	фиксирование переменной на <i>значении границы</i>
FR	указание на неограниченность переменной по знаку
MI	указание на то, что переменная отрицательна

пользователя для программ решения соответствующих задач линейного программирования.

В заключение приведем описание одной задачи линейного программирования в стандартной математической постановке и в виде машиночитаемого файла.

- *Математическая постановка*

$$\begin{aligned}
 \min \quad & -x_1 - 2x_2 \\
 x_1 - x_2 \geq & -2 \\
 x_1 + x_2 \leq & 5 \\
 x_1 \geq 0, 0 \leq x_2 \leq & 3
 \end{aligned}$$

- *Машиночитаемый файл*

```

NAME          EXAMPLE
ROWS
  G CONSTR.1
  L CONSTR.2
  N OBJ..CTV
COLUMNS
  x.....1 CONSTR.1  1.
  x.....1 CONSTR.2  1.
  x.....1 OBJ..CVT -1.
  x.....2 OBJ..CVT -2.
  x.....2 CONSTR.1 -1.
  x.....2 CONSTR.2  1.
RHS
  rhs....0 CONSTR.1 -2.
  rhs....0 CONSTR.2  5.
BOUNDS
  UP bnd....0 x.....2  3.
ENDATA

```

В машинночитаемой форме задачи обратите внимание на то, что описание задачи заканчивается строкой `ENDATA`.

8.2 Программа MINOS решения задач линейного программирования

Популярная и достаточно свободно распространяемая программа MINOS, разработанная в Стенфордском университете известным специалистом в области практической оптимизации М. Saunders [11], может служить хорошим примером промышленного решателя задач линейного программирования. Она отличается хорошим качеством реализации, современным алгоритмическим арсеналом и надежно решает задачи линейного программирования большого объема. Помимо того, что она принимает стандартный формат входных данных ее вывод также близок по стилю к другим программным продуктам.

В простейшем варианте программа использует 2 входных файла с фиксированными именами: `SPECS.DAT` — управляющий файл программы и `MPS.DAT` — файл данных задачи линейного программирования⁸. Файл данных задачи линейного программирования, за некоторыми исключениями, связанными с решением нелинейных экстремальных задач, соответствует промышленному стандарту. Некоторые возможности по управлению программой MINOS, которые возможно реализовать с помощью файла `SPECS.DAT` описаны ниже.

8.2.1 Управление программой

Этот файл начинается строкой со словом `BEGIN` и заканчивается строкой со словом `END`. Между этими строками находятся директивы управления, представляющие собой пары ключ-значение.

С помощью ключей `ROWS`, `COLUMNS`, `ELEMENTS` можно описать количество строк (ограничений), столбцов (переменных) и ненулевых элементов матрицы ограничений. Например

```
ROWS 1000
COL 5000
ELEM 13000
```

настраивает MINOS на решение задачи с не более чем 1000 ограничениями, 5000 переменных и 13000 ненулевых элементов в матрице ограничений. Как видно из примера, ключевые слова можно сокращать до 3-х (в некоторых случаях до 4-х) начальных символов.

Полезной командой является команда управления печатью:

```
LIST LIMIT 1000
```

указывает на то, что 1000 строк исходных данных из файла `MPS.DAT` будут распечатаны в выходном протоколе работы программы.

Для запуска процесса решения задачи необходимо указать максимальное число итераций алгоритма линейного программирования. Это делается с помощью ключевого слова `ITERATION`. По умолчанию MINOS минимизирует, если необходимо максимизировать, в `SPECS.DAT` используется ключевое слово `MAXIMIZE`.

И, наконец, если вы правильно подготовили исходные данные, командный файл и пр., ваша задача судя по всему успешно решилась и вы хотите увидеть собственно решение, то простейший вариант – это включить в `SPECS.DAT` строку вида

```
SOLUTION YES
```

что укажет MINOS на необходимость распечатать решение в протоколе своей работы (`MINOS.RES` для версии 4.0). С помощью директивы

⁸В последних версиях этой программы имена изменены на `MINOS.SPC` и `MINOS.MPS` соответственно.

Таблица 4: Столбцы печати секции строк

NUMBER	номер дополнительной переменной
ROW	имя ограничения
AT	статус дополнительной переменной
ACTIVITY	значение ограничения
SLACK ACTIVITY	значение дополнительной переменной
LOW LIMIT	нижняя граница для дополнительной переменной
UPPER LIMIT	верхняя граница для дополнительной переменной
DUAL ACTIVITY	значение двойственной переменной
I	номер строки печати

Таблица 5: Соотношение между типом ограничения, его стоимости и статусом дополнительной переменной.

AT	Дополнительная переменная	Ограничение	Возможный тип
BS	входит в базис	неактивно	N, G, L, E
LL	находится на нижней границе	активно	G
UU	находится на верхней границе	активно	L
EQ	фиксирована	активно	E
++	превосходит верхнюю границу	нарушено	L
-	меньше нижней границы	нарушено	G

SOLUTION FILE 9

можно направить решение задачи по фортрановскому каналу вывода номер 9.

8.2.2 Представление результатов

В связи с этим мы рассмотрим представление решения, полученного промышленной программой оптимизации на примере именно MINOS. Некоторые отличия или расширенные возможности вывода результатов, имеющиеся в других пакетах, после знакомства с базовым вариантом особых сложностей не вызывают.

В результате работы программы в файле, определяемом инструкцией **SOLUTION FILE**, находится решение, представленное в виде двух секций: строк и столбцов.

В секции строк приводится информация об ограничении задачи. Для правильной интерпретации этой информации следует иметь в виду, что для каждого ограничения программа вводит дополнительную переменную с тем же именем, что и ограничение. Правые части системы ограничения преобразуются при этом в простые границы для этих переменных.

Введенные переменные участвуют в процессе оптимизации на равных правах со структурными переменными, однако при печати решения выделяются в отдельную секцию строк.

Поименованные столбцы печати содержат следующую информацию, представленную в табл. 4. Статус дополнительной переменной позволяет судить о состоянии соответствующего ограничения, при этом возможны следующие варианты, описанные в табл. 5.

Из таблицы видно, что возможны лишь определенные сочетания состояний дополнительных переменных и типов ограничений.

Таблица 6: Столбцы печати секции столбцов.

NUMBER	номер переменной
COLUMNS	имя переменной
AT	статус переменной
ACTIVITY	значение переменной
OBJ GRADIENT	значение производной целевой функции по этой переменной
LOW LIMIT	нижняя граница для переменной
UPPER LIMIT	верхняя граница для переменной
RED COST	значение приведенного градиента
I	номер строки печати

Таблица 7: Возможный статус столбцов.

AT	Переменная
BS	входит в базис
LL	находится на нижней границе
UU	находится на верхней границе
EQ	фиксирована
++	превосходит верхнюю границу
-	меньше нижней границы

В секции столбцов приводится информация о переменной задачи. Поименованные столбцы печати содержат следующую информацию, определяемую таблицей 6. Статус переменной может иметь следующие значения, приведенные в таблице 7. Последние две строки таблицы 9. соответствуют обычно случаю обнаруженной программой MINOS недопустимости данной задачи.

8.2.3 Информация о ходе вычислений

Ход вычислительного процесса можно анализировать по сопровождающей печати, которая содержит следующую информацию (под соответствующими заголовками), приведенную в табл. 8.

8.3 MINOS для нелинейной оптимизации

Для описания нелинейных компонент оптимизационной задачи необходимо скомбинировать то программное обеспечение, которое будучи в составе MINOS реализует алгоритмы нелинейной оптимизации и пользовательские программы, реализующие нелинейные части задачи пользователя. Это сильно системно-зависимая процедура и мы ее опишем так, как она происходит под управлением Linux — одной из UNIX-подобных ОС.

Таблица 8: Столбцы печати секции строк

INT	номер текущей итерации
PH	номер фазы = 1 означает поиск допустимого точки в линейной части задачи = 2 означает оптимизацию в линейной части задачи = 3 несимплексный шаг = 4 означает оптимизацию по подмножеству базисных и супербазисных переменных
PP	индикатор частичного оценивания =1 если частичное оценивание не используется
NOPT	количество не "оптимизированных" переменных
DJ/RG	для линейной части - модифицированные стоимости для нелинейной части - приведенный градиент
+SBS	номер переменной, становящейся супербазисной
-SBS	номер переменной, выводимой из множества супербазисных
-BS	номер переменной, выводимой из базиса
STEP	шаг по направлению оптимизации
PIVOT	исключающий элемент
NSPK	количество спаек
L	количество не нулевых элементов в д-факторе
U	количество не нулевых элементов в г-факторе
NINF	количество нарушаемых ограничений
SINF/OBJECTIVE	сумма невязок (при nint>0) или значение целевой функции
NFG	количество вычислений целевой функции или ее градиента

8.3.1 Программы пользователя

Предположим, как это и будет на самом деле, что общие процедуры MINOS предкомпилированы в файл, который называется `minos.o`, находящийся в общедоступной директории `/usr/local/lib`. MINOS написан на ФОРТРАНе так что для работы с ним необходим компилятор ФОРТРАНа. Текущая версия одного из таких компиляторов под LINUX называется `gfortran` и подготовка исполняемого файла производится командой

где `user.f` — файл с ФОРТРАН-текстами программ пользователя. Как минимум, это должны быть программы вычисления нелинейной части целевой функции и ограничений (при их наличии).

Для иллюстрации приведем самоочевидный пример вычисления значения функции Розенброка

$$f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (x_1 - 1)^2$$

и ее по переменным x_1, x_2 .

C

```
SUBROUTINE CALCFG( MODE, N, X, F, G, NSTATE, NPROB )
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
REAL*8      X(N), G(N)
```

C

```
F = 100.*(X(2) - X(1)**2)**2 + (X(1) - 1)**2
G(1) = -400*(X(2) - X(1)**2)*X(1) + 2*(X(1) - 1)
G(2) = 200*(X(2) - X(1)**2)
RETURN
END
```

Следует обратить внимание на переменную `NSTATE` — она позволяет отличить первый вызов процедуры `CALCFG` от каких-либо других. Во время первого вызова могут быть выполнены необходимые инициализирующие операции — чтение данных из внешних файлов и сохранение их в глобальной или локальной памяти, вспомогательные вычисления параметров и пр. В момент первого вызова переменная `NSTATE = 1`.

Также `NSTATE` принимает специальное значений `NSTATE = 2` после завершения процесса оптимизации. В управляющем файле `SPECS.DAT` с помощью ключевого слова `CALL` можно указать необходимость дополнительного обращения к процедуре `CALCFG` после оптимизации. Используя то, что `NSTATE` в этот момент имеет специальное значение можно заказать выполнение дополнительных операций постоптимального анализа.

Во всех остальных случаях вызов процедуры `CALCFG` происходит со значением переменной `NSTATE = 0`.

А это пример вычисления значений и якобиана системы ограничений:

$$\begin{aligned} x_1^2 + x_2^2 &\leq 5 \\ x_2 - (x_1 - 0.5)^2 &\leq 0. \end{aligned}$$

C

```
SUBROUTINE CALCON( MODE, M, N, NJAC, X, F, G, NSTATE, NPROB )
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
REAL*8      X(N), F(M), G(M, N)
```

C

```
F(1) = X(1)**2 + X(2)**2
```



```

F(2) = X(2) - (X(1) - 0.5)**2
G(1,1) = 2*X(1)
G(1,2) = 2*X(2)
G(2,1) = 2*(X(1) - 0.5)
G(2,2) = 1
RETURN
END

```

Заметим, что в этой программе никак не указаны правые части и типы ограничений — эта информация находится в файле `MPS.DAT` так же, как и в случае задачи чисто линейного программирования.

Программа `main.f` может быть очень простой и фактически выполнять единственную функцию выделения памяти под данные и рабочие массивы

```

C      THE MAIN PROGRAM FOLLOWS.
C      IT JUST PROVIDES THE NECESSARY CORE.
C
      PROGRAM MAIN
      REAL*8      Z(50000)
      DATA  NWCORE/50000/
C
      CALL GO( Z,NWCORE )
      STOP
C      END OF MAIN
      END

```

По умолчанию в результате в текущей директории будет создан исполняемый файл `a.out`.

8.3.2 Дополнительная информация в `SPECS.DAT`

Для полного описания нелинейной части задачи MINOSy необходима дополнительная информация, которую он получает из файла `SPECS.DAT`. К таковой относится:

- количество нелинейных ограничений;
- количество переменных, входящих в нелинейную часть задачи;
- тип заполнения якобиана ограничений;
- метод оптимизации.

Эта информация передается в `SPECS.DAT` с помощью соответствующих ключевых слов и может иметь, например такой вид:

```

NONLINEAR CONSTRAINTS    47
NONLINEAR VARIABLES      123
JACOBEAN                  DENSE
CONJUGATE GRADIENT

```

8.3.3 Особенности подготовки файла MPS.DAT

Значительная часть информации об нелинейной экстремальной задаче находится, как и в линейном случае, в файле MPS.DAT.

В первую очередь в секции ROWS должны быть описаны и нелинейные ограничения задачи, то есть указаны их типы (L, G, E) и имена. Нелинейные ограничения должны открывать список ограничений в секции ROWS и идти в том же порядке, как они пронумерованы в функции CALCON. Аналогично, нелинейные переменные должны открывать список переменных в секции COLUMNS и идти в том же порядке, как они описаны в функциях CALCFG и CALCON. Если переменная не входит ни в одно из линейных ограничений, то в секции COLUMNS ей будет соответствовать строка, содержащая лишь имя этой переменной, расположенное в позициях 5-12.

Секция RHS имеет обычный синтаксис, а в секции BOUNDS появляется возможность задать начальные значения переменных для начала процесса нелинейной оптимизации. Для этого используется специальное имя набора границ INITIAL, где в качестве типа границы указывается FX, а числовое значение задает начальное значение переменной.

В качестве примера приведем вариант подготовки файла MPS.DAT для задачи поиска минимума функции Розенберга с начальным приближением $x^0 = (-1.7, 5.3)$:

```
NAME          BANANA
ROWS
  N BANANA
COLUMNS
  X.....1
  X.....2
RHS
BOUNDS
  FR BNDSET_1  X.....1
  FR BNDSET_1  X.....2
  FX INITIAL   X.....1  -1.7
  FX INITIAL   X.....2   5.3
ENDATA
```

Отметим в этом файле отмену ограничений неотрицательности переменных x_1, x_2 , которая, хотя и не влияет на окончательное решение задачи, но позволяет, например, использовать указанную начальную точку.

Список литературы

- [1] Пшеничный Б.Н. Необходимые условия экстремума, М.:Наука.-1982 г.
- [2] Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию, М.:Наука.-1983 г.
- [3] Иоффе А.Д., Тихомиров В.М. Теория экстремальных задач, М.: Наука, 1974, 479 С.
- [4] Фиакко А., Мак-Кормик Г. Нелинейное программирование, М.:Мир, 1972 г.
- [5] Бертсекас Д. П. Условная оптимизация и методы множителей Лагранжа М.: Радио и связь, 1987, 400 С.
- [6] Канторович В.Л., Акилов Функциональный анализ
- [7] Карманов В.Г. Математическое программирование, М.: Издательская группа URSS, 2008. 264 с
- [8] Галеев, Тихомиров Введение в выпуклый анализ
- [9] Armijo L. Minimization of functions having continious partial derivatives // Pacific J. Math., 1966, v. 16, pp. 1-3.
- [10] Федоров В.В. Численные методы максимина.- М.: Наука, 1979 г.- 280 с.
- [11] M. Saunders MINOS, Stanford University, 1983.
- [12] Hesten, M.R., Stiefel E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems // Journal of Research of the National Bureau of Standards, 1952, v. 49 (6), 409–436.

9 Приложение

В этом приложении приведены некоторые математические сведения, которые используются для доказательства основных результатов теории экстремальных задач.

9.1 Основные определения и обозначения

Основные события данной работы будут происходить в конечномерном евклидовом пространстве E . Размерность указанного пространства будем обозначать $\dim(E)$, так что его элементы будут представлять собой вектора-наборы из $\dim(E)$ вещественных чисел-координат: $x = (x_1, x_2, \dots, x_{\dim(E)})$.

В этом пространстве стандартным образом определим скалярное произведение векторов x, y

$$xy = \sum_{i=1}^{\dim(E)} x_i y_i$$

и норму $\|x\| = \sqrt{xx}$. Отличие от умножения вектора x на скалярный множитель α ($\alpha x = (\alpha x_1, \alpha x_2, \dots, \alpha x_{\dim(E)})$) обычно ясны из контекста. Через \mathbb{R} будем обозначать вещественную ось, а через \mathbb{R}_+ множество неотрицательных вещественных чисел.

Замкнутые и открытые множества определяются обычным образом, под окрестностью нуля U будем понимать произвольное открытое множество, содержащее начало координат. Конечно, такое множество содержит шар $B_\rho = \{x : \|x\| \leq \rho\}$ достаточно малого радиуса $\rho > 0$.

Линейной оболочкой $\text{lin}\{A\}$ множества векторов $A = \{a^1, a^2, \dots, a^k\}$ будем считать

$$\text{lin}\{A\} = \{x = \sum_{i=1}^k \alpha_i a^i, \alpha_i \in \mathbb{R}\}$$

Легко проверить, что $\text{lin}\{A\}$ сама по себе представляет собой линейное пространство.

Это определение легко обобщается и на множества A с бесконечным количеством векторов:

$$\text{lin}\{A\} = \{x = \sum_{i=1}^k \alpha_i a^i, \alpha_i \in \mathbb{R}, a^i \in A, k = 1, 2, \dots\}$$

Такое множество также является линейным пространством.

9.2 Выпуклость, делимость и связанные вопросы

Фундаментальное значение в математическом программировании имеет свойство выпуклости и полиэдральности допустимых множеств и функций. Это свойство дает возможность качественно охарактеризовать решение задачи математического программирования и изучить много характерных свойств их решений.

С формальной точки зрения выпуклость представляет собой простое геометрическое свойство подмножеств линейного пространства, в котором определены операции сложения элементов этого пространства (векторов) и умножения их на вещественные числа, причем эти операции удовлетворяют стандартным условиям дистрибутивности и ассоциативности.

Однако это простое свойство приводит к весьма общим и глубоким результатам как в теории выпуклых множеств, так и в исследованиях по свойствам экстремальных задач.

При этом оказывается, что выпуклые множества можно полностью описать с помощью множеств простейшей структуры — полупространств, отождествляемых с линейными функциями.

Если такое описание конечно, т.е. множества описываются с помощью конечного числа полупространств, то теоретические результаты могут быть существенно усилены. Отсюда возникает совокупность результатов, известных под названием теории двойственности в математическом программировании.

9.2.1 Основные определения и свойства

Определение 33 Множество X называется выпуклым, если из того, что

$$x', x'' \in X; \lambda \in [0, 1]$$

следует

$$\lambda x' + (1 - \lambda)x'' \in X.$$

Важное значение имеет следующее свойство выпуклых множеств.

Лемма 34 Пересечение выпуклых множеств выпукло.

Доказательство. Немедленно следует из определения. \square

Выпуклость сохраняют и другие преобразования множеств: масштабирование, сложение Минковского, проекция. Здесь мы приведем определения этих операций, оставив доказательства свойств сохранения выпуклости в качестве самостоятельного упражнения,

Определение 35 Результатом масштабирования множества A с коэффициентом λ является множество B , определяемое как

$$B = \{b = \lambda a, a \in A\}.$$

Определение 36 Суммой Минковского множеств A и B является множество C :

$$C = \{c = a + b, a \in A, b \in B\}.$$

Определение 37 Пусть $A \subset X \times Y$, где X и Y — некоторые линейные векторные подпространства. Определим проекцию множества A на подпространство X как

$$Pr_X(A) = \{x : (x, y) \in A \text{ для некоторого } y\}.$$

Выпуклые множества часто получают в результате применения операции построения выпуклой оболочки. Выпуклой оболочкой $\text{co}\{A\}$ множества векторов $A = \{a^1, a^2, \dots, a^k\}$ будем считать

$$\text{co}\{A\} = \left\{x = \sum_{i=1}^k \alpha_i a^i, \alpha_i \in \mathbb{R}_+, \sum_{i=1}^k \alpha_i = 1.\right\}$$

Легко проверить, что $\text{co}\{A\}$ выпукло. Так же, как и в случае линейной оболочки, понятие выпуклой оболочки легко обобщается на случай множества A , содержащего бесконечное число векторов:

$$\text{co}\{A\} = \left\{x = \sum_{i=1}^k \alpha_i a^i, a^i \in A, \alpha_i \in \mathbb{R}_+, \sum_{i=1}^k \alpha_i = 1, k = 1, 2, \dots\right\}$$

С выпуклостью множеств связана выпуклость функций. Пусть f - некоторая функция. Надграфиком $\text{epi } f$ функции f называется множество

$$\text{epi } f = \{(\mu, x) : f(x) \leq \mu\}.$$

Заметим, что если x является элементом пространства E , то надграфик - это подмножество $R \times E$ где R - пространство вещественных чисел.

Определение 38 Функция f называется выпуклой, если ее надграфик — выпуклое множество.

Из данного определения легко следует неравенство Йенсена: для любых x, x' и $\lambda \in [0, 1]$

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)x') \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(x').$$

Легко проверить, что линейная функция $f(x) = cx$ является выпуклой, так как ее надграфик

$$\text{epi } f = \{(\mu, x) : cx - \mu \leq 0\}$$

представляет собой полупространство в $n + 1$ - мерном пространстве $R \times E$.

Для выпуклой функции f множество уровня

$$X_C = \{x : f(x) \leq C\} \tag{94}$$

является выпуклым. Линии уровней линейных функций являются также полупространствами, но в E .

Выпуклыми функциями являются также квадратичные функции вида $f(x) = \frac{1}{2}xAx + bx$ с положительно полуопределенными матрицами A .

Менее традиционными являются выпуклые функции, определенные лишь на нетривиальных подмножествах E . Часто используемой в выпуклом анализе является, например индикаторная функция $\text{Ind}_A(x)$ определяемая как

$$\text{Ind}_A(x) = \begin{cases} 0 & \text{если } x \in A, \\ \infty & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Надграфик этой функции представляется собой цилиндр $\mathbb{R} \times A \subset \mathbb{R} \times E$ и является выпуклым множеством, если A выпукло. Соответственно Ind_A является выпуклой функцией.

Из выпуклости допустимого множества и целевой функции для задачи математического программирования сразу следует отсутствие в этой задаче локальных экстремумов. Точнее, любой локальный минимум в задаче математического программирования при выполнении условий выпуклости является глобальным.

Действительно, пусть задача математического программирования имеет конечный минимум f_* :

$$-\infty < f_* = \min_{x \in X} f(x)$$

и x^* - некоторая точка, такая, что

$$f_* = f(x^*), x^* \in X.$$

Пусть x^0 — некоторая произвольная допустимая точка и $f(x^0) < f_*$. Тогда

$$x_\lambda = \lambda x^* + (1 - \lambda)x^0 = x^0 + \lambda(x^* - x^0)$$

также в силу выпуклости множества X является допустимой для всех $\lambda \in [0, 1]$ и сколь угодно близка к x^0 при малых $\lambda > 0$. При этом

$$f(x_\lambda) \leq \lambda f(x^0) + (1 - \lambda)f(x^*) < \lambda f(x^0) + (1 - \lambda)f(x^0) = f(x^0)$$

для $\lambda > 0$ и, следовательно, точка x^0 не может быть точкой локального минимума.

Выпуклые множества часто порождаются операцией, называемой взятием выпуклой оболочки.

Определение 39 *Выпуклой оболочкой конечного множества точек*

$$X = \{x^1, x^2, \dots, x^k\}$$

называется множество

$$\text{co } X = \left\{x = \sum_{i=1}^k \lambda_i x^i, \sum_{i=1}^k \lambda_i = 1, \lambda_i \geq 0\right\}.$$

Это определение распространяется и на бесконечные множества X :

Определение 40 *Выпуклой оболочкой множества X называется множество*

$$\text{co } X = \left\{x = \sum_{i=1}^k \lambda_i x^i, \sum_{i=1}^k \lambda_i = 1, \lambda_i \geq 0, x^i \in X, k = 1, 2, \dots\right\}.$$

Существует эквивалентное "внешнее" определение выпуклой оболочки.

Определение 41 *Выпуклой оболочкой множества X называется множество*

$$X = \{\cap Y : X \subset Y, Y - \text{выпукло}\}$$

Принципиальным является то, что произвольные выпуклые множества в этом определении можно заменить на полупространства:

$$\text{co } X = \{\cap H : X \subset H, H - \text{полупространство}\}$$

Непосредственно из определений следует, что для выпуклого множества X

$$\text{co } X = X,$$

однако с помощью операции взятия выпуклой оболочки выпуклое множество можно воспроизвести и из некоторого его подмножества, которое может быть существенно уже.

В выпуклом множестве можно выделить точки, имеющие важное значение для получения этого множества с помощью операции взятия выпуклой оболочки.

Определение 42 *Точка x называется крайней точкой множества X , если из того, что*

$$x = \lambda x' + (1 - \lambda)x''; x', x'' \in X, \lambda \in (0, 1)$$

следует

$$x' = x'' = x.$$

Существенным здесь является нетривиальность выпуклой комбинации, то есть то, что $0 < \lambda < 1$.

Ограниченное замкнутое выпуклое множество совпадает с выпуклой оболочкой своих крайних точек.

9.2.2 Проекция на выпуклое множество

В алгоритмах решения условных оптимизационных задач для поддержания допустимости приближенных решений часто используется операция проекции $\Pi_X : E \rightarrow X$ на множество X , определяемая как решение задачи

$$\min_{x \in X} \|x - a\| = \|\Pi_X(a) - a\| \quad (95)$$

поиска в множестве X точки, ближайшей к заданной точке a . Типичным примером такого метода является метод проекций градиента, рассмотренный в разделе 5.2.3. Операция проекции используется также и во многих теоретических исследованиях, линейной алгебре, теории условий оптимальности и пр.

Заметим, что из различных вычислительных соображений для вычисления оператора проекции на самом деле решают эквивалентную квадратичную задачу

$$\min_{x \in X} \|x - a\|^2 = \|\Pi_X(a) - a\|^2, \quad (96)$$

являющуюся сильно выпуклой с единичной константой сильной выпуклости.

Операция проекции для выпуклых множеств X имеет следующие основные свойства:

1. Оператор $\Pi_X(a)$ непрерывен по a . Следует из его полунепрерывности сверху как минимизирующего отображения и однозначности в силу единственности решения (96).

2.

$$(\Pi_X(a) - a)(x - \Pi_X(a)) \geq 0 \text{ для любого } x \in X,$$

если не так, то расстояние $\|\Pi_X(a) - a\|$ можно уменьшить.

3.

4. Оператор $\Pi_X(\cdot)$ нерасширяющий:

$$\|\Pi_X(a) - \Pi_X(a')\| \leq \|a - a'\|$$

Применяя (2) для получим

Складывая эти неравенства получим

Используя неравенство Коши-Буняковского получим

что и требовалось доказать.

9.2.3 Отделимость выпуклых множеств

Выпуклые множества обладают важным свойством отделимости: для выпуклых множеств X, Y с пустым пересечением существует вектор p , не равный нулю, такой, что $px \leq py$ для любых $x \in X, y \in Y$. Точнее, в дальнейшем нам потребуется следующая теорема отделимости.

Теорема 43 Если X - выпуклое замкнутое множество, а $a \notin X$, то существует $p \neq 0$ и β такие, что $pa < \beta \leq px$, для всех $x \in X$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Теорему легко доказать, рассматривая задачу

$$\min_{x \in X} \|a - x\|^2$$

Действительно, обозначим $p = x_a - a$. Для любого $x \in X$ и $\lambda \in [0, 1]$

$$\begin{aligned} \|x_a - a\|^2 &\leq \|\lambda x + (1 - \lambda)x_a - a\|^2 = \|x_a - a + \lambda(x - x_a)\|^2 = \\ &= \|x_a - a\|^2 + \lambda^2\|x - x_a\|^2 + 2\lambda(x_a - a)(x - x_a), \end{aligned}$$

откуда

$$\lambda 2(x_a - a)(x - x_a) + \lambda^2\|x - x_a\|^2 \geq 0$$

Сократив на $\lambda > 0$ получим $2(x_a - a)(x - x_a) + \lambda\|x - x_a\|^2 \geq 0$ для любого $\lambda > 0$, что означает на самом деле, что

$$(x_a - a)(x - x_a) = p(x - x_a) \geq 0$$

или

$$px \geq px_a = p(p + a) = \|p\|^2 + pa$$

отсюда для $\beta = pa + \frac{1}{2}\|p\|^2$ получим $px \geq \beta, pa < \beta$, что и требовалось доказать. \square

Теперь можно показать, что отделимость сохраняется, правда в более слабой форме и для точек, лежащих на границе X :

Теорема 44 Если X - выпуклое замкнутое множество, а $a \notin \text{int}(X)$, то существует $p \neq 0$ такое, что $pa \leq px$, для всех $x \in X$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Если $a \notin X$ то теорема справедлива в силу ранее доказанной теоремы 43. Пусть теперь $a \in \partial X$. Тогда существует последовательность точек $a^m, m = 1, 2, \dots$, сходящаяся к a , такая, что $a^m \notin X$. При этом для каждой a^m существует вектор p^m такой, что $p^m a^m \leq p^m x$ для всех $x \in X$. Не умаляя общности можно считать, что $\|p^m\| = 1$ и, следовательно, из последовательности $p^m, m = 1, 2, \dots$ можно выбрать подпоследовательность $p^{m_k}, k = 1, 2, \dots$, сходящуюся к некоторому $\bar{p} = \lim_{k \rightarrow \infty} p^{m_k}$. Норма $\|\bar{p}\| = 1$ поэтому $\bar{p} \neq 0$. С другой стороны для каждого k и любого $x \in X$ выполняется неравенство $p^{m_k} a^{m_k} \leq p^{m_k} x$, переход к пределу в котором дает

$$\bar{p}a \leq \bar{p}x,$$

что и требовалось доказать. \square

Отсюда для задачи математического программирования следует ряд результатов, известных под общим названием теории двойственности.

9.2.4 Лемма Фаркаша

В исследованиях по теории экстремальных задач часто используется та или иная форма утверждения, известного как "лемма Фаркаша". Мы будем использовать ее в следующей форме.

Лемма 45 Для того чтобы любая точка, удовлетворяющая системе неравенств $Ax \leq 0$, удовлетворяла неравенству $px \leq 0$ необходимо и достаточно существование такого $u \geq 0$, что $p = uA$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. В формулировке леммы A — некоторая матрица, x, p и u вектора соответствующих размерностей.

Достаточность очевидна, так что займемся необходимостью. Обозначим через Q множество $\{q = uA, u \geq 0\}$. Очевидно, что Q — выпуклое и замкнутое множество. Если $p \notin Q$, то p и Q отделимы и, следовательно, существует \bar{x} такой, что для некоторого α

$$q\bar{x} \leq \alpha < p\bar{x}.$$

Так как $0 \in Q$, то $\alpha \geq 0$, а поскольку по определению Q для любого $u \geq 0$ имеет место $uA\bar{x} \leq 0$, то $A\bar{x} \leq 0$. Соответственно получаем противоречие с условием леммы, так как нашлось \bar{x} такое, что $A\bar{x} \leq 0$, но $p\bar{x} > 0$. \square Применяя лемму Фаркаша для двух наборов условий:

1. из $Ax \leq 0$ следует $px \leq 0$;
2. из $-Ax \leq 0$ следует $-px \leq 0$

получаем, что и извлечет

10 Рекомендуемая литература

10.1 Обязательная

1. Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию, М.:Наука.-1983 г., стр. 384
2. Карманов В.Г. Математическое программирование, М.: Издательская группа URSS, 2008. 264 с
3. Магарил-Ильяев Г.Г., Тихомиров В.М. Выпуклый анализ и его приложения.- М.: Издательская группа URSS, 2000. 176 pages
4. Измаилов А.Ф. Численные методы оптимизации. Учебное пособие для ВУЗов М: Физматлит, 2008 г., 320 стр.

10.2 Дополнительная

1. Тихомиров В.М. Рассказы о максимумах и минимумах. 2-е изд., исправленное. — М.: МЦНМО, 2006. — 200 с.
2. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация.- М.: Мир, 1985 г.- 509 с.
3. Бертсекас Д.П. Условная оптимизация и методы множителей Лагранжа.- М.: Радио и связь, 1987 .- 400 с.
4. M. Saunders MINOS, Stanford University, 1983.
5. Фиакко А., Мак-Кормик Г. Нелинейное программирование.-М.: Мир, 1972.
6. Ахмеров Р.Р. Методы минимизации гладких функций.- [Электронный ресурс] <http://www.sbras.ru>
Федоров В.В. Численные методы максимина.- М.: Наука, 1979 г.- 280 с.
7. Hesten, M.R., Stiefel E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems // Journal of Research of the National Bureau of Standards, 1952, v. 49 (6), 409–436.

11 Тестовые и экзаменационные задачи

11.1 Условия оптимальности

1. Найти стационарные точки функций

(a) $x_1 x_2 \log(x_1^2 + x_2^2)$

(b) $\exp(2x_1 + 3x_2)(8x_1^2 - 6x_1 x_2 + 3x_2^2)$

11.2 Квадратичные задачи оптимизации

1. Задана точка x^0 и вектор d . Для квадратичной функции $q(x) = \frac{1}{2}xHx + bx$ определить значение τ_* скалярного параметра τ такое, что

$$q(x^0 + \tau_* d) = \min_{\tau} q(x^0 + \tau d).$$

2. Найти расстояние между двумя прямыми, заданными в параметрической форме $l_1 = \{x(t) = x^1 + td^1, t \in \mathbb{R}\}$ и $l_2 = \{x(t) = x^2 + td^2, t \in \mathbb{R}\}$.

3. Найти коэффициенты $x = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ полинома

$$p_x(t) = t^4 + x_4 t^3 + x_3 t^2 + x_2 t + x_1,$$

имеющего минимальную $L_2([-1, 1])$ -норму:

$$\|p_x\|_2([-1, 1]) = \int_{-1}^1 p_x(t)^2 dt \rightarrow \min.$$

4. Дано 2-мерное линейное подпространство L_2 4-мерного евклидова пространства E_4 заданное уравнениями

$$\begin{aligned} 5.3x_1 + 4.8x_2 - 8.1x_3 + 6.7x_4 &= 0 \\ 3.5x_1 + 2.4x_2 - 1.8x_3 - 7.6x_4 &= 0 \end{aligned}$$

Найти проекцию точки $z = (1.2, 3.4, 5.6, 7.8)$ на подпространство L_2 , т.е. точку $x^* \in L_2$, такую, что

$$\|x^* - z\| = \min_{x \in L_2} \|x - z\|$$

5. Используя метод множителей Лагранжа решить задачу

$$\min \sum_{i=1}^4 (x_i - a_i)^2$$
$$\sum_{i=1}^4 b_i x_i = 1, \quad x_i \geq 0, \quad i = 1, 2, 3, 4$$

Параметры задачи приведены в таблице:

i	1	2	3	4
a_i	-1.0	2.0	-3.0	4.0
b_i	2.0	1.0	3.0	1.0

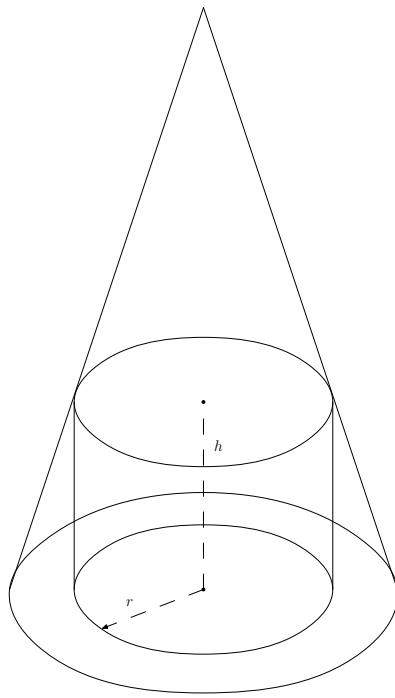


Рис. 12: Конус вокруг цилиндра

11.3 Одномерные задачи

1. Вокруг кругового цилиндра с радиусом основания r и высотой h описан соосный круговой конус минимального объема (см. Рис 12). Определить отношение объемов конуса и цилиндра.
2. Задана функция $q(x) = \frac{1}{2}xHx$ с положительно определенной матрицей H . Для решения задачи $\min_x q(x)$ (имеющей тривиальное решение $x = 0$) используется градиентный метод с постоянным шагом

$$x^{k+1} = x^k - \lambda q'(x^k), k = 0, 1, \dots$$

стартующий из начальной точки $x^0 = (1, 1, \dots, 1)$.

Найти "оптимальную" длину шага λ_* такую, что после 50 итераций градиентного метода с этим шагом достигается минимальное (по сравнению с любым другим λ) значение целевой функции.

3. Найти глубину провисания цепочки, состоящей из 4-х шарнирно соединенных звеньев единичной длины, концы которой также шарнирно закреплены в точках $(0, 0)$ и $(2, 0)$. Силу тяжести считать везде постоянной.

Описать эту задачу в виде проблемы нахождения расположения цепочки, минимизирующего суммарную потенциальную энергию и найти провисание цепочки с точностью 10^{-5} , используя метод Фибоначчи.

4. Из точки $(0, -30)$ в точку $(20, 30)$ (все в километрах) необходимо провести линию электропередач.

Территория прокладки линии делится на 2 зоны — лесную и полевую, граница между которыми представляет собой линию

$$y(x) = 4 - 0.02(x - 7)^3.$$

Лесная часть территории располагается ниже этой линии, полевая — выше.

Стоимость прокладки 1 км линии по лесистой зоне составляет 800 тыс. руб/км, полевой 500 тыс. руб/км.

Требуется найти оптимальный (минимальный по стоимости) вариант прокладки линии.

5. Фирма с объемом основных средств $K = 500$ млн. руб и фондом оплаты труда $L = 800$ млн. руб планирует инвестировать 10 млн. руб в основные фонды δK или привлечение новых рабочих δL , максимизируя при этом прирост производства продукции. Зависимость объема производства от основных фондов и трудозатрат описывается классической функцией Кобба-Дугласа $F(K, L) = K^\alpha L^{1-\alpha}$ с эластичностью $\alpha = 0.6$.
6. Аналитики производственного объединения *HeavyMetal* определили, что производственная функция их фирмы хорошо аппроксимируется выражением

$$F(K, L, E) = CK^\alpha L^\beta E^\gamma$$

где K — объем (стоимость) основных фондов, L — количество используемых трудовых ресурсов (измеренных как стоимость оплаты труда), E — объем (стоимость) используемых энергетических ресурсов. Эластичности α, β, γ и соответственно определены как $\alpha = 0.5, \beta = 0.3, \gamma = 0.2$. На текущий день факторы K, L, E имеют значения $K = 400, L = 500, E = 100$, при этом объем производства составляет 1800. Математики предлагают перераспределить средства, выделяемые под производственные факторы без привлечения внешнего капитала так, чтобы максимизировать объем производства.

Найти оптимальное распределение средств по производственным факторам и определить соответствующий выпуск продукции.

7. Коварные гуроны произвели подземный ядерный взрыв, эхо которого обнаружено ирокезами, могиканами и сименолами в своих вигвамах, расположенных по оси Ox в точках $x_1 = 100, x_2 = 350$ и $x_3 = 610$ в моменты времени $t_1 = 1631.38, t_2 = 592.52$ и $t_3 = 1148.47$ после восхода луны.

Определить точное время взрыва и глубину залегания заряда. Земля считается плоской и однородной, скорость звука в материале Земли — 1000 м/сек.

8. Определить угол прицеливания, при котором снаряд, выпущенный из пушки, пролетает максимальное расстояние. Масса снаряда — 50 кг, поперечное сечение — $0.5 m^2$, сила сопротивления воздуха задается формулой $\rho(h)S\|v\|^2$, где $v = (v_x, v_y), \|v\| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ — скорость снаряда и направлена строго против движения снаряда. Плотность воздуха $\rho(h)$ на высоте h описывается формулой $\rho(h) = \rho_0 \exp(-\gamma h)$, где константа γ определяется из условия убывания плотности в 2 раза на высоте 10000 м. Плотность ρ_0 на уровне моря — 0.013 кг/м^3 . Ускорение земного притяжения постоянно и равно 9.8 м/сек^2 , начальная скорость снаряда — 800 м/сек .

11.4 Методы второго порядка

1. Для функции $f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$ (Банана Розенброка) провести 100 или менее итераций метода Ньютона для поиска ее минимума, начиная из точек области $[-3, +3] \times [0, 5]$ с дискретностью 100 по каждому измерению. Для каждой начальной точки проверить сходимость с точностью до 10^{-8} по норме градиента. Если

эта точность получена менее чем за 100 итераций, процесс оптимизации для данной начальной точки прекращать. При обнаружении несходимости (норма градиента на какой-то итерации превышает 10^4) данную начальную точку отмечать как особую и выводить на печать.

2. Реализовать обобщенную процедуру Грамма-Шмидта для построения по заданному набору линейно независимых векторов и положительно определенной симметричной матрицы A систему векторов, сопряженных относительно A .
3. Имеется квадратичная функция, заданная в виде программы на языке `octave`

```
function [ f g ] = qufun(x)
y = zeros(size(x)); n = rows(y);
y(1) = x(1);
y(2:n) = x(1:n-1) - x(2:n);
z = [ 1:n ]' .* y;
f = y'*z + sum(y);
g = [ 2*z(1) + 2*z(2) + 2; 2*(z(3:n) - z(2:n-1)); -2*z(n) - 1];
endfunction
```

которая при заданом значении входного вектора x вычисляет значение $f(x)$ и градиента $f'(x)$ как выходных параметров `f` и `g` соответственно.

Написать программу квазиньютоновского алгоритма с симметричной одноранговой коррекцией и решить с ее помощью задачу поиска минимума $f(x)$ с точностью до 6-ти десятичных знаков. Для контроля приводится решение с точностью до 2 десятичных знаков для размерности вектора переменных 7.

```
xsol = -0.50 -0.25 -0.08 0.04 0.14 0.23 0.30
fopt = -0.65
```

11.5 Работа с программой MINOS

1. Используя MINOS, решить задачу квадратичного программирования

$$\min_{x \in X} xHx + gx,$$

где матрица H и вектор g имеют вид

$$H = \begin{vmatrix} 24.0278 & 17.2083 & 22.5532 & 17.8616 & 15.2469 & 19.6722 \\ 17.2083 & 21.9170 & 19.4742 & 14.2207 & 16.1542 & 19.3798 \\ 22.5532 & 19.4742 & 30.6996 & 24.8684 & 22.8820 & 24.4343 \\ 17.8616 & 14.2207 & 24.8684 & 24.8044 & 19.5897 & 17.5231 \\ 15.2469 & 16.1542 & 22.8820 & 19.5897 & 20.4700 & 20.4021 \\ 19.6722 & 19.3798 & 24.4343 & 17.5231 & 20.4021 & 31.4451 \end{vmatrix},$$

$$g = (7.2979, 64.8210, 98.6423, 124.5543, 113.2421, 58.2740)$$

Допустимое множество X задано условиями: $Ax \leq b$, где

$$A = \begin{vmatrix} 8.3019 & 3.2054 & 7.5889 & 2.5604 & 6.8386 & 2.7008 \\ 8.3099 & 3.8013 & 3.0299 & 4.7130 & 2.0751 & 9.3899 \\ 5.5501 & 8.7803 & 6.7632 & 8.7536 & 9.1550 & 8.3963 \end{vmatrix},$$

$$b = (16.8880, 9.5333, -39.0698).$$

$x_2 \geq 0, x_4 \geq 0, x_5 \geq 0$, остальные переменные не ограничены по знаку.

2. Найти глубину провисания цепочки, состоящей из 6,7,8 и т.д. шарнирно соединенных звеньев единичной длины, концы которой также шарнирно закреплены в точках $(0, 0)$ и $(2, 0)$. Силу тяжести считать везде постоянной.

Описать эту задачу в виде проблемы нахождения расположения цепочки, минимизирующего суммарную потенциальную энергию и, используя программу MINOS, решить эту задачу.

3. При проектировании цифровых устройств возникает задача воспроизведения П-образных импульсов волновыми пакетами. С точки зрения математики эта задача сводится в непрерывной постановке к минимизации функции вида

$$f(x, y) = \int_0^{2\pi} \left(\sum_{m=1}^n (x_m \sin((m-1)\tau) + y_m \cos((m-1)\tau)) - \theta(\tau - t_1) + \theta(\tau - t_2) \right)^2 d\tau,$$

где n — порядок генератора пакетов (заданный конструктив), $0 < t_1 < t_2 < 2\pi$ — границы П-образного импульса (заданы), $\theta(t)$ — функция Хевисайда:

$$\theta(t) = \begin{cases} 0 & \text{для } t < 0, \\ 1 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

В дискретизированной по времени постановке интеграл заменяется на сумму и целевая функция приобретает вид

$$f_a(x, y) = \sum_{k=1}^N \left(\sum_{m=1}^n (x_m \sin((m-1)\tau_k) + y_m \cos((m-1)\tau_k)) - \theta(\tau_k - t_1) + \theta(\tau_k - t_2) \right)^2,$$

где $\tau_k = 2\pi \frac{k-1}{N-1}$, $k = 1, 2, \dots, N$, N - характеристика несущей частоты (достаточно взять, например, $N = 1024$).

Итого получаем простую задачу безусловной минимизации для $2n$ переменных:

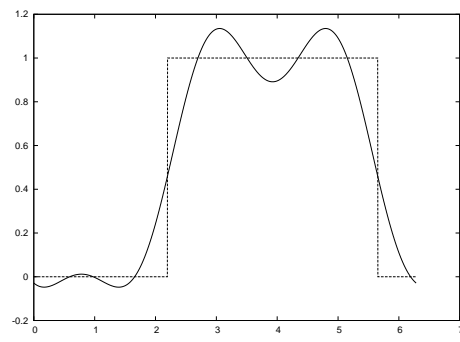
$$\min_{x, y} f_a(x, y) = f_a(x^*, y^*).$$

Задачу решить методом сопряженных градиентов при $n = 8$, $N = 1024$, $t_1 = 0.75$, $t_2 = 1.8$.

В качестве отчета предъявить:

- программу на octave (оригинальную, копии взаимно уничтожаются),
- численные значения x^* , y^* с убедительным доказательством их оптимальности,
- график $\psi(t) = \sum_{m=1}^n (x_m^* \sin((m-1)t) + y_m^* \cos((m-1)t))$, $t \in [0, 2\pi]$ при вычисленных значениях $x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$, $y^* = (y_1^*, y_2^*, \dots, y_n^*)$.
- (**самое важное !**) ясное понимание того, как задача решалась.

В качестве примера, рассчитанного с помощью программы MINOS, привожу результат воспроизведения П-образного импульса с помощью пакета из 4-х гармоник.



12 Типовые вопросы на экзамене

- Вопросы на 2 балла:

1. Это вы все время разговаривали на лекциях ?
2. Вы правда думаете, что этот предмет вам не нужен ?
3. А вы знаете, что сдаете ?

- Для некоторых специальностей линейная и нелинейная оптимизация объединялась в один довольно, а точнее слишком, краткий курс. Соответственно упрощались вопросы на экзамен.

Вопросы на 3 балла:

1. Задача линейного программирования. Каноническая форма, сведение к ней.
2. Крайние точки допустимого множества в задаче линейного программирования. связь с решением задачи.
3. Определяющие соотношения для крайних точек допустимого множества задачи линейного программирования. Их вариант для канонической формы.
4. Симплекс-метод решения задачи линейного программирования при старте с допустимого базиса.
5. Понятие о двойственных ЗЛП. Первая и вторая теоремы двойственности.
6. Задача нелинейной безусловной минимизации (ЗНБМ). Необходимые и достаточные условия экстремума.
7. Градиентный метод решения ЗНБМ. Регулировка шага, доказательство сходимости.
8. Метод Ньютона для решения ЗНБМ. Оценка скорости сходимости.
9. Понятие о сопряженной системе векторов. Построение сопряженной системы векторов.
10. Метод сопряженных градиентов для квадратичной функции. Доказательство конечной сходимости.

- Вопросы на 4 балла:

1. Необходимые и достаточные условия экстремума в задаче безусловной оптимизации.
2. Необходимые и достаточные условия экстремума в задаче условной оптимизации с ограничениями-равенствами.
3. Метод сопряженных градиентов для квадратичных функций.
- 4.

- Вопросы на 5 баллов:

1. Условия регулярности в задаче условной оптимизации.
2. Правило Армихо выбора шаговых множителей в градиентном методе. Линейная скорость сходимости градиентного метода с использованием этого шага.
3. Метод сопряженных градиентов для неквадратичных функций.

Будут накапливаться.

13 Благодарности

Всем большое спасибо.

Предметный указатель

допустимое направление, 50
геометрические множители Лагранжа, 18
изолированный локальный минимум, 18
конус допустимых направлений, 15
линейная оболочка, 76
окрестность нуля, 76
оператор проекции, 51
регулярная точка, 8
седловая точка, 10
сопряженная функция, 60
условие Слейтера, 18
выпуклая оболочка, 77
возможные направления, 50