

第四章 非线性规划

修贤超

<https://xianchaoxiu.github.io>

- 4.1 基本概念
- 4.2 无约束极值问题
- 4.3 约束极值问题

非线性规划问题的数学模型

■ 一般形式

$$\begin{array}{ll}\min & f(\mathbf{X}) \\ \text{s.t.} & \begin{cases} h_i(\mathbf{X}) = 0 \quad (i = 1, \dots, m) \\ g_j(\mathbf{X}) \geq 0 \quad (j = 1, \dots, l) \end{cases}\end{array}$$

- $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_n)^\top \in \mathbb{R}^n$ 是 n 维欧氏空间中的点 (向量)
- 目标函数 $f(\mathbf{X})$ 和约束函数 $h_i(\mathbf{X})$ 、 $g_j(\mathbf{X})$ 为 \mathbf{X} 的实函数

■ 有时也将非线性规划的数学模型写成

$$\begin{array}{ll}\min & f(\mathbf{X}) \\ \text{s.t.} & g_j(\mathbf{X}) \geq 0 \quad (j = 1, \dots, l)\end{array}$$

局部极小和全局极小

- 给定 $\mathbf{X}^* \in \mathbb{R}^n$, 如果存在某个 $\varepsilon > 0$, 使所有与 \mathbf{X}^* 的距离小于 ε 的 \mathbf{X} 都有 $f(\mathbf{X}) \geq f(\mathbf{X}^*)$, 则称 \mathbf{X}^* 为**局部极小点**, $f(\mathbf{X}^*)$ 为**局部极小值**
- 若对所有 $\mathbf{X} \neq \mathbf{X}^*$ 且与 \mathbf{X}^* 的距离小于 ε 的 \mathbf{X} 都有 $f(\mathbf{X}) > f(\mathbf{X}^*)$, 则称 \mathbf{X}^* 为**严格局部极小点**, $f(\mathbf{X}^*)$ 为**严格局部极小值**
- 给定 $\mathbf{X}^* \in \mathbb{R}^n$, 如果对所有 \mathbf{X} 都有 $f(\mathbf{X}) \geq f(\mathbf{X}^*)$, 则称 \mathbf{X}^* 为**全局极小点**, $f(\mathbf{X}^*)$ 为**全局极小值**
- 若对所有 $\mathbf{X} \neq \mathbf{X}^*$ 都有 $f(\mathbf{X}) > f(\mathbf{X}^*)$, 则称 \mathbf{X}^* 为**严格全局极小点**, $f(\mathbf{X}^*)$ 为**严格全局极小值**
- 如将上述不等号取反向, 即可得到极大点和极大值的定义

必要条件

- **定理 1** 设 $f(\mathbf{X})$ 在 \mathbb{R}^n 上有连续一阶偏导数, 且在点 $\mathbf{X}^* \in \mathbb{R}^n$ 取得局部极值, 则必有函数 $f(\mathbf{X})$ 在点 \mathbf{X}^* 处的梯度

$$\nabla f(\mathbf{X}^*) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_n} \right)^\top = 0$$

称 \mathbf{X}^* 为**稳定点或驻点**

- 函数 $f(\mathbf{X})$ 在某点 \mathbf{X} 的梯度 $\nabla f(\mathbf{X})$ 必与函数过该点的等值面正交
- 梯度向量的方向是函数值增加最快的方向, 而负梯度方向是**减少最快的方向**

二次型

- 二次型是 $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_n)^\top \in \mathbb{R}^n$ 的二次齐次函数

$$\begin{aligned} f(\mathbf{X}) &= a_{11}x_1^2 + 2a_{12}x_1x_2 + \dots + a_{nn}x_n^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}x_ix_j \\ &= \mathbf{X}^\top \mathbf{A} \mathbf{X} \end{aligned}$$

- 若 \mathbf{A} 的所有元素都是实数, 则称为**实二次型**
- 一个二次型唯一对应一个对称矩阵 \mathbf{A} , 反之亦成立

二次型

- 正定: $f(\mathbf{X}) = \mathbf{X}^\top \mathbf{A} \mathbf{X} > 0$
- 负定: $f(\mathbf{X}) = \mathbf{X}^\top \mathbf{A} \mathbf{X} < 0$
- 半正定: $f(\mathbf{X}) = \mathbf{X}^\top \mathbf{A} \mathbf{X} \geq 0$
- 半负定: $f(\mathbf{X}) = \mathbf{X}^\top \mathbf{A} \mathbf{X} \leq 0$

- 实二次型 $\mathbf{X}^\top \mathbf{A} \mathbf{X}$ 为正定的充要条件是 \mathbf{A} 的左上角各阶主子式都大于零
- 实二次型 $\mathbf{X}^\top \mathbf{A} \mathbf{X}$ 为负定的充要条件是 \mathbf{A} 的左上角顺序各阶主子式负正相间

多元函数的泰勒 (Taylor) 公式

- 设 $f(\mathbf{X})$ 在 \mathbf{X}^0 的某一邻域内有连续二阶偏导数, 则在 \mathbf{X}^0 的泰勒展开式为

$$f(\mathbf{X}) = f(\mathbf{X}^0) + \nabla f(\mathbf{X}^0)^\top (\mathbf{X} - \mathbf{X}^0) + \frac{1}{2}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^0)^\top \nabla^2 f(\bar{\mathbf{X}})(\mathbf{X} - \mathbf{X}^0)$$

$$\Updownarrow$$

$$f(\mathbf{X}^0 + \mathbf{P}) = f(\mathbf{X}^0) + \nabla f(\mathbf{X}^0)^\top \mathbf{P} + \frac{1}{2}\mathbf{P}^\top \nabla^2 f(\bar{\mathbf{X}})\mathbf{P}$$

$$\Updownarrow$$

$$\begin{aligned} f(\mathbf{X}) = & f(\mathbf{X}^0) + \nabla f(\mathbf{X}^0)^\top (\mathbf{X} - \mathbf{X}^0) + \frac{1}{2}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^0)^\top \nabla^2 f(\mathbf{X}^0)(\mathbf{X} - \mathbf{X}^0) \\ & + o(\|\mathbf{X} - \mathbf{X}^0\|^2) \end{aligned}$$

充分条件

- **定理 2** 设 $f(\mathbf{X})$ 在 \mathbb{R}^n 具有连续二阶偏导数, 若 $\nabla f(\mathbf{X}^*) = 0$ 且黑塞 (Hesse) 矩阵为

$$\nabla^2 f(\mathbf{X}^*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_1 \partial x_3} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_2^2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_2 \partial x_3} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_n \partial x_2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_n \partial x_3} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}^*)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

正定, 则 \mathbf{X}^* 为 $f(\mathbf{X})$ 严格局部极小点

- 若将 $\nabla^2 f(\mathbf{X}^*)$ 正定改为负定, 则 \mathbf{X}^* 为 $f(\mathbf{X})$ 的严格局部极大点

例 1

- 研究函数 $f(\mathbf{X}) = x_1^2 - x_2^2$ 是否存在极值点

分析 由极值点存在的必要条件求出稳定点

$$\frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial x_1} = 2x_1, \quad \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial x_2} = -2x_2$$

令 $f(\mathbf{X}) = 0$, 即 $2x_1 = 0, -2x_2 = 0$, 得稳定点 $\mathbf{X} = (x_1, x_2)^\top = (0, 0)^\top$

再用充分条件进行检验

$$\nabla^2 f(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial x_2^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$$

由于黑塞矩阵 $\nabla^2 f(\mathbf{X})$ 不定, 故 $\mathbf{X} = (0, 0)^\top$ 不是极值点, 而是鞍点

凸函数和凹函数

- 设 $f(\mathbf{X})$ 为定义在凸集 Ω 上的函数, 若对任何实数 α ($0 < \alpha < 1$) 以及 Ω 中的任意两点 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$, 恒有

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

则称 $f(\mathbf{X})$ 为定义在 Ω 上的**凸函数**

- 若对每一个 α ($0 < \alpha < 1$) 和任意两点 $\mathbf{X}^{(1)} \neq \mathbf{X}^{(2)} \in \Omega$, 恒有

$$f(\alpha\mathbf{X}^{(1)} + (1 - \alpha)\mathbf{X}^{(2)}) < \alpha f(\mathbf{X}^{(1)}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{X}^{(2)})$$

则称 $f(\mathbf{X})$ 为定义在 Ω 的**严格凸函数**

- 反之可得到凹函数和严格凹函数的定义

凸函数的性质

- **性质 1** 设 $f(\mathbf{X})$ 为定义在凸集 Ω 上的函数, 则对任意实数 $\beta \geq 0$, 函数 $\beta f(\mathbf{X})$ 也是定义在 Ω 上的凸函数
- **性质 2** 设 $f_1(\mathbf{X})$ 和 $f_2(\mathbf{X})$ 为定义在凸集 Ω 上的函数, 则这两个凸函数的和 $f(\mathbf{X}) = f_1(\mathbf{X}) + f_2(\mathbf{X})$ 仍为定义在 Ω 上的凸函数
- **性质 3** 有限个凸函数的非负线性组合 $\beta_1 f_1(\mathbf{X}) + \beta_2 f_2(\mathbf{X}) + \cdots + \beta_m f_m(\mathbf{X})$ 仍为凸函数
- **性质 4** 设 $f(\mathbf{X})$ 为定义在凸集 Ω 上的函数, 则对实数 β , 集合 (称为水平集) $S_\beta = \{\mathbf{X} \mid \mathbf{X} \in \Omega, f(\mathbf{X}) \leq \beta\}$ 是凸集

凸函数的判定

- **一阶条件** 设 $f(\mathbf{X})$ 为定义在凸集 Ω 上的可微函数, 则 $f(\mathbf{X})$ 是凸函数的充要条件是: 对任意两点 $\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)} \in \Omega$, 恒有

$$f(\mathbf{X}^{(2)}) \geq f(\mathbf{X}^{(1)}) + \nabla f(\mathbf{X}^{(1)})^\top (\mathbf{X}^{(2)} - \mathbf{X}^{(1)})$$

- **二阶条件** 设 $f(\mathbf{X})$ 为定义在凸集 Ω 上的二阶可微函数, 则 $f(\mathbf{X})$ 是凸函数的充要条件是: 对所有 $\mathbf{X} \in \Omega$ 有

$$\nabla^2 f(\mathbf{X}) \geq 0$$

进一步, 若 $\nabla^2 f(\mathbf{X}) > 0$, 则 $f(\mathbf{X})$ 是 Ω 上的严格凸函数

例 2

- 证明函数 $f(\mathbf{X}) = x_1^2 + x_2^2$ 为严格凸函数

分析 由二阶条件得到

$$\nabla^2 f(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X})}{\partial x_2^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

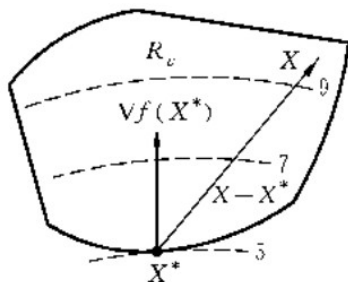
因 $\nabla^2 f(\mathbf{X})$ 正定, 故 $f(\mathbf{X})$ 为严格凸函数

凸函数的极值

- 设 $f(\mathbf{X})$ 为定义在凸集 Ω 上的可微凸函数, 如果存在点 $\mathbf{X}^* \in \Omega$, 使得对于所有的 $\mathbf{X} \in \Omega$, 都有

$$\nabla f(\mathbf{X}^*)^\top (\mathbf{X} - \mathbf{X}^*) \geq 0$$

则 \mathbf{X}^* 是 $f(\mathbf{X})$ 在 Ω 上的最小点 (全局极小点)



■ 考虑非线性规划

$$\begin{array}{ll}\min & f(\mathbf{X}) \\ \text{s.t.} & g_j(\mathbf{X}) \geq 0 \quad (j = 1, \dots, l)\end{array}$$

若其中的 $f(\mathbf{X})$ 为凸函数, $g_j(\mathbf{X})$ 全是凹函数, 则称为凸规划

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

例 3

■ 验证下式为凸规划

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{X}) = x_1^2 + x_2^2 - 4x_1 + 4 \\ \text{s.t.} \quad & \begin{cases} g_1(\mathbf{X}) = x_1 - x_2 + 2 \geq 0 \\ g_2(\mathbf{X}) = -x_1^2 + x_2 - 1 \geq 0 \\ g_3(\mathbf{X}) = x_1 \geq 0 \\ g_4(\mathbf{X}) = x_2 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

下降迭代算法

- 从初始点 $\mathbf{X}^{(0)}$ 出发, 按照一定的规则, 先找一个比 $\mathbf{X}^{(0)}$ 更好的点 $\mathbf{X}^{(1)}$, 再找比 $\mathbf{X}^{(1)}$ 更好的点 $\mathbf{X}^{(2)}$... 如此继续就产生了一个序列 $\{\mathbf{X}^{(k)}\}$ 。若序列有一极限点 \mathbf{X}^* , 即

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}^*\| = 0$$

则称序列 $\{\mathbf{X}^{(k)}\}$ **收敛于 \mathbf{X}^***

- 对于极小化问题, 序列 $\{\mathbf{X}^{(k)}\}$ 对应的目标函数值 $\{f(\mathbf{X}^{(k)})\}$ 应是逐步减小的, 即

$$f(\mathbf{X}^{(0)}) > f(\mathbf{X}^{(1)}) > \dots > f(\mathbf{X}^{(k)}) > \dots$$

具有这种性质的算法称为**下降迭代算法**

下降迭代算法的一般迭代格式

- **选取初始点:** $\mathbf{X}^{(0)}$, 令 $k := 0$
- **确定搜索方向:** 若已得出某一迭代点 $\mathbf{X}^{(k)}$, 且 $\mathbf{X}^{(k)}$ 不是极小点。从 $\mathbf{X}^{(k)}$ 出发确定一搜索方向 $\mathbf{P}^{(k)}$, 沿这个方向能找到使目标函数值下降的点
- **确定步长:** 沿 $\mathbf{P}^{(k)}$ 方向前进得新点 $\mathbf{X}^{(k+1)}$, 即在由 $\mathbf{X}^{(k)}$ 出发的射线

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

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

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} + \lambda_k \mathbf{P}^{(k)}$$

使得

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

- **检验是否最优:** 如满足则停止, 否则令 $k := k + 1$, 返回第 (2) 步继续迭代

下降迭代算法的一般迭代格式

- 步长应使目标函数值沿搜索方向下降最多，即

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

这一过程称为(最优) 一维搜索或线搜索，由此确定的步长称为最佳步长

- **定理 3** 设目标函数 $f(\mathbf{X})$ 具有连续一阶偏导数， $\mathbf{X}^{(k+1)}$ 按下述规则产生

$$\begin{cases} f(\mathbf{X}^{(k)} + \lambda_k \mathbf{P}^{(k)}) = \min_{\lambda} f(\mathbf{X}^{(k)} + \lambda \mathbf{P}^{(k)}) \\ \mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} + \lambda_k \mathbf{P}^{(k)} \end{cases}$$

则有

$$\nabla f(\mathbf{X}^{(k+1)})^{\top} \mathbf{P}^{(k)} = 0$$

终止迭代准则

- 根据相继两次迭代结果的绝对误差

$$\|\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}\| \leq \varepsilon_1$$

$$|f(\mathbf{X}^{(k+1)}) - f(\mathbf{X}^{(k)})| \leq \varepsilon_2$$

- 根据相继两次迭代结果的相对误差

$$\frac{\|\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}\|}{\|\mathbf{X}^{(k)}\|} \leq \varepsilon_3$$

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

- 根据函数梯度的模足够小

$$\|\nabla f(\mathbf{X}^{(k)})\| \leq \varepsilon_5$$

小结

- 非线性规划的数学模型
- 局部极小和全局极小
- 多元函数的极值点存在的条件
- 凸函数和凹函数
- 凸规划
- 下降迭代算法
- 课后作业: P183, 习题 6.10

- 4.1 基本概念
- 4.2 无约束极值问题
- 4.3 约束极值问题

无约束极值问题

- 无约束极值问题可表述为

$$\min f(\mathbf{X})$$

- 不要求函数的解析性质，仅利用函数值，称为直接法
- 利用函数的解析性质，如一阶导数或二阶导数，称为解析法
 - 梯度法（最速下降法）
 - 牛顿法

梯度法

- 给定初始点 $\mathbf{X}^{(0)}$, 令 $k := 0$
- 计算 $f(\mathbf{X}^{(k)})$ 和 $\nabla f(\mathbf{X}^{(k)})$, 若 $\|\nabla f(\mathbf{X}^{(k)})\|^2 \leq \varepsilon$, 停止迭代, 得近似极小点 $\mathbf{X}^{(k)}$ 和近似极小值 $f(\mathbf{X}^{(k)})$; 否则, 转下一步
- 做一维搜索

$$\lambda_k : \min_{\lambda} f(\mathbf{X}^{(k)} - \lambda \nabla f(\mathbf{X}^{(k)}))$$

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

- 设 $f(\mathbf{X})$ 具有二阶连续偏导数, 将 $f(\mathbf{X}^{(k)} - \lambda \nabla f(\mathbf{X}^{(k)}))$ 在 $\mathbf{X}^{(k)}$ 作泰勒展开

$$\begin{aligned} f(\mathbf{X}^{(k)} - \lambda \nabla f(\mathbf{X}^{(k)})) &\approx f(\mathbf{X}^{(k)}) - \nabla f(\mathbf{X}^{(k)})^\top \lambda \nabla f(\mathbf{X}^{(k)}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \lambda \nabla f(\mathbf{X}^{(k)})^\top \nabla^2 f(\mathbf{X}^{(k)}) \lambda \nabla f(\mathbf{X}^{(k)}) \end{aligned}$$

- 对 λ 求导并令其等于零, 即可得近似最佳步长的计算公式

$$\lambda_k = \frac{\nabla f(\mathbf{X}^{(k)})^\top \nabla f(\mathbf{X}^{(k)})}{\nabla f(\mathbf{X}^{(k)})^\top \nabla^2 f(\mathbf{X}^{(k)}) \nabla f(\mathbf{X}^{(k)})}$$

例 1

- 用梯度法求函数 $f(\mathbf{X}) = x_1^2 + 5x_2^2$ 的极小点, 取允许误差 $\varepsilon = 0.7$

分析 取 $\mathbf{X}^{(0)} = (2, 1)^\top$, 计算

$$\nabla f(\mathbf{X}^{(0)}) = (4, 10)^\top, \nabla^2 f(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_0 = \frac{\begin{bmatrix} 4 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} 4 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix}} = 0.1124$$

例 1

于是

$$\mathbf{X}^{(1)} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} - 0.1124 \begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.5504 \\ -0.1240 \end{bmatrix}$$

此时

$$\nabla f(\mathbf{X}^{(1)}) = \begin{bmatrix} 3.1008 \\ -1.2400 \end{bmatrix}$$

检查误差

$$\|\nabla f(\mathbf{X}^{(1)})\|^2 = 11.1526 > \varepsilon$$

继续迭代直至满足误差 $\varepsilon = 0.7$

- 考虑正定二次函数

$$f(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}\mathbf{X}^\top \mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{B}^\top \mathbf{X} + c$$

其中 \mathbf{A} 为对称正定阵, \mathbf{B} 和 \mathbf{X} 为向量, c 为常数

- 假定极小点是 \mathbf{X}^* , 则必有

$$\nabla f(\mathbf{X}^*) = \mathbf{A} \mathbf{X}^* + \mathbf{B} = 0$$

对任一点 $\mathbf{X}^{(0)}$, 函数在该点的梯度

$$\nabla f(\mathbf{X}^{(0)}) = \mathbf{A} \mathbf{X}^{(0)} + \mathbf{B}$$

消去 \mathbf{B} , 得到 $\nabla f(\mathbf{X}^{(0)}) = \mathbf{A} \mathbf{X}^{(0)} - \mathbf{A} \mathbf{X}^*$, 由此解出

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

例 2

- 用牛顿法求函数 $f(\mathbf{X}) = x_1^2 + 5x_2^2$ 的极小点, 取允许误差 $\varepsilon = 0.7$

分析 取 $\mathbf{X}^{(0)} = (2, 1)^\top$ 算出

$$\nabla f(\mathbf{X}^{(0)}) = (4, 10)^\top$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}, \mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/10 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^* &= \mathbf{X}^{(0)} - \mathbf{A}^{-1} \nabla f(\mathbf{X}^{(0)}) \\ &= \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

可知 \mathbf{X}^* 确实为极小点

牛顿法

- 考虑一般 n 元实函数 $f(\mathbf{X})$, 具有连续二阶偏导数, 在 $\mathbf{X}^{(k)}$ 附近取二阶泰勒多项式逼近

$$f(\mathbf{X}) \approx f(\mathbf{X}^{(k)}) + \nabla f(\mathbf{X}^{(k)})^\top \Delta \mathbf{X} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{X}^\top \nabla^2 f(\mathbf{X}^{(k)}) \Delta \mathbf{X}$$

其中 $\Delta \mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{X}^{(k)}$

- 近似函数的极小点应满足一阶必要条件, 即

$$\nabla f(\mathbf{X}^{(k)}) + \nabla^2 f(\mathbf{X}^{(k)}) \Delta \mathbf{X} = 0$$

- 设 $\nabla^2 f(\mathbf{X}^{(k)})$ 的逆阵存在, 可得

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}^{(k)} - [\nabla^2 f(\mathbf{X}^{(k)})]^{-1} \nabla f(\mathbf{X}^{(k)})$$

牛顿法

- 为求 $f(\mathbf{X})$ 的极小点, 可令

$$-[\nabla^2 f(\mathbf{X}^{(k)})]^{-1} \nabla f(\mathbf{X}^{(k)})$$

为搜索方向 (牛顿方向), 按下述公式进行迭代

$$\begin{cases} \mathbf{P}^{(k)} = -[\nabla^2 f(\mathbf{X}^{(k)})]^{-1} \nabla f(\mathbf{X}^{(k)}) \\ \lambda_k : \min_{\lambda} f(\mathbf{X}^{(k)} + \lambda \mathbf{P}^{(k)}) \\ \mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} + \lambda_k \mathbf{P}^{(k)} \end{cases}$$

这就是**阻尼牛顿法 (广义牛顿法)**, 可用于求解非正定二次函数的极小点

小结

- 梯度法

- 下降方向
- 搜索步长

- 牛顿法

- 正定二次函数
- 一般多元实函数

- 课后作业: P183, 习题 6.13

- 4.1 基本概念
- 4.2 无约束极值问题
- 4.3 约束极值问题

约束极值问题

- 考虑约束极值问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{X}) \\ \text{s.t.} \quad & g_j(\mathbf{X}) \geq 0 \quad (j = 1, \dots, l) \end{aligned}$$

- 将约束极值问题转化为无约束极值问题来求解，称为**序列无约束极小化技术**

- 罚函数法 (外点法)
- 障碍函数法 (内点法)

■ 构造函数

$$\varphi(t) = \begin{cases} 0, & \text{当 } t \geq 0 \\ \infty, & \text{当 } t < 0 \end{cases}$$

■ 将约束问题转化为无约束形式

$$\min f(\mathbf{X}) \quad \text{s.t. } g_j(\mathbf{X}) \geq 0 \quad (j = 1, \dots, l) \quad (1)$$

\Downarrow

$$\min f(\mathbf{X}) + \sum_{j=1}^l \varphi(g_j(\mathbf{X})) \quad (2)$$

■ 若 \mathbf{X}^* 是 (2) 的极小点, 同时也是 (1) 的极小点

罚函数法

- 但函数 $\varphi(t)$ 在 $t = 0$ 处不连续, 更没有导数, 于是将该函数做如下修改

$$\varphi(t) = \begin{cases} 0, & \text{当 } t \geq 0 \\ t^2, & \text{当 } t < 0 \end{cases}$$

- 通过罚函数法转化为无约束问题

$$\min P(\mathbf{X}, M) = f(\mathbf{X}) + M \sum_{j=1}^l \varphi(g_j(\mathbf{X})) \quad (3)$$

$$\Downarrow$$

$$\min P(\mathbf{X}, M) = f(\mathbf{X}) + M \sum_{j=1}^l [\min(0, g_j(\mathbf{X}))]^2 \quad (4)$$

- 当罚因子 M 足够大时, (3) 和 (4) 的极小点也是 (1) 的极小点

■ 对于等式约束问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{X}) \\ \text{s.t.} \quad & h_i(\mathbf{X}) = 0 \quad (i = 1, \dots, m) \end{aligned}$$

采用以下形式的罚函数

$$\min P(\mathbf{X}, M) = f(\mathbf{X}) + M \sum_{j=1}^m [h_j(\mathbf{X})]^2$$

■ 对于一般非线性规划问题, 罚函数为

$$\min P(\mathbf{X}, M) = f(\mathbf{X}) + M \sum_{j=1}^m [h_j(\mathbf{X})]^2 + M \sum_{j=1}^l [\min(0, g_j(\mathbf{X}))]^2$$

罚函数法的迭代步骤

- 取第一个罚因子 $M_1 > 0$, 允许误差 $\varepsilon > 0$, 并令 $k := 1$
- 求下述无约束极值问题的最优解

$$\mathbf{X}^{(k)} = \arg \min P(\mathbf{X}, M)$$

- 若存在某一个 j ($1 \leq j \leq l$), 有

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

或存在某一个 i ($1 \leq i \leq m$), 有

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

则取 $M_{k+1} > M_k$, 并令 $k := k + 1$, 转回第 (2) 步。否则, 停止迭代

例 1

■ 用罚函数法求解

$$\begin{aligned}\min f(x) &= (x - 1/2)^2 \\ \text{s.t. } x &\leq 0\end{aligned}$$

分析 构造罚函数

$$\begin{aligned}\min P(x, M) &= f(x) + M \sum_{j=1}^l [\min(0, g_j(x))]^2 \\ &= (x - 1/2)^2 + M[\min(0, -x)]^2\end{aligned}$$

对于固定的 M , 令

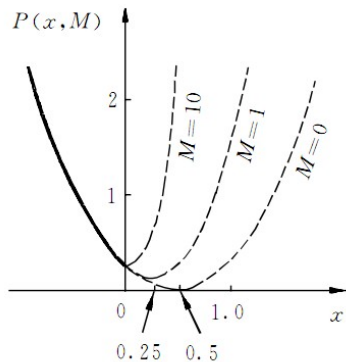
$$\begin{aligned}\frac{dP(x, M)}{dx} &= 2(x - 1/2) - 2M[\min(0, -x)] = 0 \\ &\Downarrow \\ 2(x - 1/2) - 2Mx &= 0\end{aligned}$$

例 1

从而求得其极小点

$$x(M) = \frac{1}{2(1+M)}$$

- 当 $M = 0$ 时, $x(M) = 1/2$
- 当 $M = 1$ 时, $x(M) = 1/4$
- 当 $M = 10$ 时, $x(M) = 1/22$
- 当 $M \rightarrow \infty$ 时, $x(M) \rightarrow 0$



- 考虑非线性规划

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{X}) \\ \text{s.t.} \quad & g_j(\mathbf{X}) \geq 0 \quad (j = 1, \dots, l) \end{aligned}$$

- 取实数 $r_k > 0$, 通过障碍函数法转化为无约束问题

$$\min \quad \bar{P}(\mathbf{X}, r_k) = f(\mathbf{X}) + r_k \sum_{j=1}^l \frac{1}{g_j(\mathbf{X})}$$

$$\Updownarrow$$

$$\min \quad \bar{P}(\mathbf{X}, r_k) = f(\mathbf{X}) - r_k \sum_{j=1}^l \log(g_j(\mathbf{X}))$$

- 上式要求 $g_j(\mathbf{X}) > 0$

障碍函数法的迭代步骤

- 取第一个障碍因子 $r_1 > 0$, 允许误差 $\varepsilon > 0$, 并令 $k := 1$
- 构造障碍函数, 障碍项可采用倒数函数, 也可采用对数函数
- 求下述无约束极值问题的最优解 (满足内点要求)

$$\mathbf{X}^{(k)} = \arg \min \bar{P}(\mathbf{X}, r_k)$$

- 检查是否满足收敛准则

$$r_k \sum_{j=1}^l \frac{1}{g_j(\mathbf{X})} \leq \varepsilon, \quad \left| r_k \sum_{j=1}^l \log(g_j(\mathbf{X})) \right| \leq \varepsilon$$

如果满足, 则以 $\mathbf{X}^{(k)}$ 为原约束问题的近似极小解, 停止迭代; 否则取 $r_{k+1} < r_k$, 并令 $k := k + 1$, 转回第 (3) 步

例 2

■ 用障碍函数法求解

$$\begin{aligned} \min f(x) &= x - 2 \\ \text{s.t. } x &\geq 0 \end{aligned}$$

分析 构造障碍函数

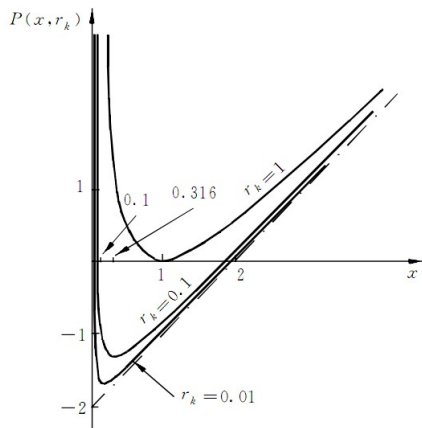
$$\begin{aligned} \bar{P}(\mathbf{X}, r_k) &= f(\mathbf{X}) + r_k \sum_{j=1}^l \frac{1}{g_j(\mathbf{X})} \\ &= x - 2 + \frac{r_k}{x} \end{aligned}$$

对于固定的 r_k , 令

$$\frac{d\bar{P}(\mathbf{X}, r_k)}{dx} = 1 - \frac{r_k}{x^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{X} = \pm\sqrt{r_k}$$

例 2

令 $r_k \rightarrow 0$, 并考虑到约束条件, 即可得该问题的极小点 $\mathbf{X}^* = 0$



小结

- 罚函数法

- 罚函数

- 罚因子

- 障碍函数法

- 障碍函数

- 障碍因子

- 混合法

- 课后作业: P184, 习题 6.19, 6.22(2)

Q&A

Thank you!

感谢您的聆听和反馈