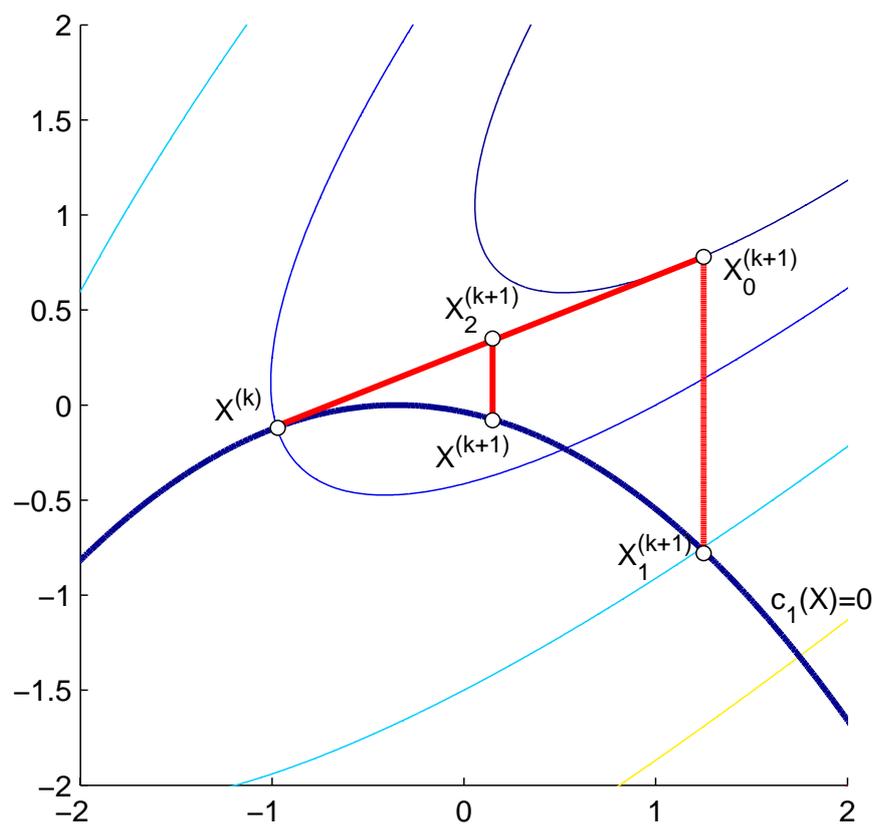


А.В. Иванов

Компьютерные методы оптимизации оптических систем

Учебное пособие



Санкт-Петербург
2010

Министерство образования и науки Российской Федерации
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального
образования

**“САНКТ- ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ,
МЕХАНИКИ И ОПТИКИ”**

Иванов А.В.

**«Компьютерные методы оптимизации оптических
систем»**

Учебное пособие

Санкт-Петербург, 2010 г.

А.В. Иванов. Компьютерные методы оптимизации оптических систем. Учебное пособие. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2010 - 114 с.

Учебное пособие подготовлено на кафедре прикладной и компьютерной оптики СПбГУ ИТМО и предназначено для подготовки магистров по профилю 200200.06 «Компьютерная оптика». В пособии основы и принципы компьютерной оптимизации оптических систем. Подробно излагаются методы условной и безусловной оптимизации и их особенности.

Рекомендовано УМО по образованию в области приборостроения и оптотехники для межвузовского использования, протокол _____ от _____ 20__ г.

Рецензент:



В 2007 году СПбГУ ИТМО стал победителем конкурса инновационных образовательных программ вузов России на 2007–2008 годы. Реализация инновационной образовательной программы «Инновационная система подготовки специалистов нового поколения в области информационных и оптических технологий» позволит выйти на качественно новый уровень подготовки выпускников и удовлетворить возрастающий спрос на специалистов в информационной, оптической и других высокотехнологичных отраслях экономики.

©Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, 2010

Оглавление

Оглавление	1
Глава 1 Общие понятия и принципы компьютерной оптимизации оптических систем	3
1.1 Предмет дисциплины	3
1.2. Стратегия оптимизационного исследования.....	4
1.3. Постановка задачи математического программирования.....	7
1.4. Общие принципы решения оптимизационных задач.....	12
1.5. Условия оптимальности	20
1.5.1. Условия оптимальности в задачах без ограничений.....	21
1.5.2. Условия оптимальности в задачах с линейными ограничениями-равенствами.....	24
1.5.3. Условия оптимальности в задачах с линейными ограничениями-неравенствами.....	29
1.5.4. Условия оптимальности в задачах с нелинейными ограничениями-равенствами.....	36
1.5.5. Условия оптимальности в задачах с нелинейными ограничениями-неравенствами.....	41
1.5.6. Условия оптимальности в задачах математического программирования общего вида	42
1.5.7. Комментарии к разделу «Условия оптимальности»	43
Глава 2 Методы безусловной оптимизации оптических систем	45
2.1. Общая схема реализации методов безусловной оптимизации.....	45
2.2. Критерии сравнения эффективности методов безусловной минимизации	50
2.3. Методы одномерного безусловного поиска	52
2.3.1. Методы одномерной минимизации нулевого порядка	55
2.3.1.1. Методы последовательного сокращения промежутка неопределенности	56
2.3.1.2. Методы, основанные на аппроксимации.....	62
2.3.2. Методы одномерной минимизации первого порядка	66
2.3.2.1. Методы, сводящиеся к решению уравнения.....	66
2.3.2.2. Методы, основанные на аппроксимации.....	73
2.3.3. Методы одномерной минимизации второго порядка	75
Метод Ньютона	75
Регуляризованные методы	76
2.3.4. Методы оценки длины шага.....	76
Правило Гольдстейна.....	77
Правило Армийо	77
Правило Вольфе-Пауэлла.....	77
2.4. Методы многомерной безусловной оптимизации.....	77
2.4.1. Методы нулевого порядка.	78
Метод покоординатного спуска.....	78
Метод Хука и Дживса	80

Метод деформируемого многогранника.....	81
Метод сопряженных направлений	83
2.4.2. Методы безусловной минимизации второго порядка.....	86
Модифицированные методы Ньютона	87
Метод с использованием спектрального разложения	87
Метод Гилла и Мюррея (метод с использованием разложения по Холецкому)	87
Метод Марквардта	88
2.4.3. Методы безусловной минимизации первого порядка.	89
2.4.3.1. Методы общего применения.....	89
Метод градиентного спуска	89
Методы сопряженных градиентов	91
Квазиньютоновские методы	91
Сравнение сходимости градиентных методов	93
2.4.3.2. Решение задач о наименьших квадратах	93
Модифицированные методы Гаусса-Ньютона	95
Глава 3. Методы условной оптимизации оптических систем.....	96
3.1. Методы, основанные на преобразовании задачи.....	96
3.1.1. Классические методы штрафных функций	96
3.1.1.1. Общие идеи	96
3.1.2. Метод модифицированной функции Лагранжа.....	103
3.1.2.1. Случай ограничений равенств.....	103
3.1.2.2. Случай ограничений неравенств.....	107
3.2. Методы типа приведенного градиента	108
3.2.1. Общие идеи (задачи с линейными ограничениями-равенствами)	108
3.2.2. Методы в задачах с линейными ограничениями-неравенствами	110
3.2.3. Методы в задачах с нелинейными ограничениями-равенствами	111
3.2.4. Методы в задачах с нелинейными ограничениями-неравенствами	113
3.2.5. Задача линейного программирования и принципы ее решения	114

Глава 1 Общие понятия и принципы компьютерной оптимизации оптических систем

1.1 Предмет дисциплины

Проблемы оптимизации, то есть поиска наилучшего решения (от лат. *optimum* – наилучшее), естественным образом возникают при рассмотрении самых разнообразных задач. Например, инженер-строитель при проектировании здания должен обеспечить выбор таких материалов, которые бы при ограниченной стоимости обеспечивали максимальную прочность конструкции. Ученый-физик в исследовательской лаборатории занят поиском математической функции, которая бы наилучшим образом описывала результат наблюдаемого эксперимента. Специалист по логистике, перед которым стоит задача организации доставки грузов на объект потребителя, обязан стремиться выбрать наиболее короткий путь, чтобы снизить затраты времени и топлива; при этом на выбор его решения могут оказать влияние некоторые дополнительные факторы, связанные, скажем, с ограничением скорости из-за качества дорожного покрытия.

Математические основы оптимизации были заложены еще в классических трудах Ньютона, Коши, Лагранжа. Однако выделение методов оптимизации в отдельную научную и учебную дисциплину произошло существенно позднее, в 40-х годах прошлого века, практически одновременно с появлением компьютеров. И это не простая историческая случайность. Поскольку компьютеры теоретически позволяли решать задачи, не доступные «ручным» методам, успехи электроники подтолкнули ускоренную разработку теории алгоритмов и вычислительных (численных) методов, применяемых ныне в оптимизации. Таким образом симбиоз достижений техники и математики позволил создать *компьютерные методы оптимизации*, которые в очень короткие сроки получили широчайшее распространение и применение.

Многообразие приложений компьютерных методов оптимизации крайне велико. Без них невозможно современное развитие таких областей человеческой деятельности, как:

- проектирование, конструирование и производство технических объектов различного характера (в том числе, оптических и оптико-электронных систем);
- решение экономических задач на основе макро- и микроэкономических моделей, задач логистики и управления материальными ресурсами;
- планирование и обработка результатов научных экспериментов;
- автоматическое управление сложными системами.

Методы оптимизации во многом носят универсальный характер. Поэтому потребность решения новых задач конкретной предметной области, как правило, не приводит к созданию каких-то новых уникальных способов, а осуществляется на основе выделения и некоторой специализации уже известных методов, эффективность которых обеспечивается путем

тщательного изучения математических моделей улучшаемых объектов и процессов и подтверждается практическими экспериментами.

1.2. Стратегия оптимизационного исследования

Для нахождения наилучшего решения какой-либо задачи с использованием компьютерных методов оптимизации следует прежде всего ответить на два основных вопроса:

- что оптимизировать?
- как оптимизировать?

Ответ на первый вопрос состоит в построении математической модели объекта или процесса, подлежащего улучшению, с позиций оптимизации, то есть построении так называемой *оптимизационной модели* объекта или процесса. Основными компонентами оптимизационной модели являются:

1. Критерий оптимизации - некоторое правило, по которому один вариант решения сравнивается с другим, исходя из необходимости достижения заданной цели. В принципе, критериев оптимизации, как и целей, в каждой проблеме может быть несколько. Например, при разработке нового изделия важными целями являются и улучшение его качественной характеристики, и понижение цены. Однако построение алгоритмов оптимизации, учитывающих сразу несколько критериев, оказывается весьма сложным. Поэтому на практике обычно из всех критериев выбирают один – самый важный, а остальные формулируют в виде дополнительных ограничений задачи. Возможен также путь построения комплексного, интегрального критерия, который бы включал в себя взвешенную сумму частных критериев.

Мы в рамках данного учебного пособия ограничимся классом однокритериальных задач. При этом критерий оптимизации будем формулировать с помощью функции многих переменных, которая называется оценочной, или целевой функцией. Эта функция подбирается таким образом, что лучшему варианту решения задачи будет соответствовать меньшее значение функции. При таком подборе проблема оптимизации сводится к минимизации целевой функции.

2. Параметры оптимизации.

Параметрами оптимизации называются независимые переменные, которые используются для уменьшения значений оценочной функции. Несмотря на то что во многих задачах поиска наилучших решений выбор параметров оптимизации представляется очевидным (скажем, определен сложившейся практикой, соображениями удобства описания и т.д.), часто бывает полезно провести замену переменных, которая бы обеспечила улучшение свойств математической модели.

3. Ограничения

Область изменения параметров оптимизации чаще всего является ограниченной. Ограничения могут иметь самую различную природу. Например, это могут быть:

- математические ограничения (если критерий оптимизации содержит

логарифм некоторой функции от параметров оптимизации, то данная функция должна принимать только положительные значения);

- физические (показатель преломления материала должен быть больше единицы);
- экономические (стоимость изготовления детали не должна превышать определенного предела);
- эксплуатационные (положение заднего фокуса сменных объективов фотоаппарата относительно базовой поверхности должно быть фиксированным);
- конструктивные (габариты изделия не должны превышать максимально допустимые);
- технологические (выбор материалов ограничен известным сортаментом, поэтому ряд параметров или комбинаций параметров получают дискретный характер)

и другие ограничения.

Среди ограничений обычно выделяют следующие группы:

- *ограничения-равенства* – это ограничения, суть которых состоит в том, что некоторая функция от параметров оптимизации должна принимать точно определенное значение (в физической реальности – допуск на отклонение от этого значения является весьма жестким). Примером подобного ограничения может служить равенство увеличения оптической системы заданной величине;

- *ограничения-неравенства* - это ограничения, суть которых заключается в том, что некоторая функция от параметров оптимизации должна принимать значения в заданном интервале (такой интервал, в частности, может быть открытым). Примером такого рода ограничения являются требования к толщине оптической линзы: с одной стороны, она должна быть положительной и достаточной для того, чтобы обеспечивать возможность изготовления; с другой стороны, чрезмерное увеличение толщины линзы приводит к росту габаритов, массы и поглощения энергии;

- *ограничения принадлежности* параметров оптимизации определенному подмножеству, состоящие, как правило, в том, что все или часть переменных могут принимать только *дискретные* значения.

Разбиение ограничений на группы целесообразно с той точки зрения, что для их контроля используются различные методы.

Построение оптимизационной модели является проблемой *объектно-ориентированной*. Это означает, что оно основывается на глубоком изучении свойств процесса или объекта, подлежащих улучшению, их последующей формализации и осуществляется специалистом в конкретной предметной области. При формализации широко используются эвристические подходы (от греческого *heurisko* - отыскиваю, открываю), опирающиеся на совокупность интеллекта, знаний, опыта и интуиции.

К оптимизационной модели предъявляются следующие требования:

1. адекватность - соответствие полученных с использованием модели

- решений задачи оптимизации реальному улучшению естественного процесса, объекта при выбранном уровне детализации его описания (другими словами, при выбранном уровне абстракции для построения математической модели);
2. экономичность – возможность проведения оптимизации в наименьшие сроки, с запросом возможно меньших ресурсов;
 3. точность – степень соответствия вычисляемых характеристик (функций), входящих в компоненты модели, реальным характеристикам оптимизируемого процесса или объекта;
 4. простота – свойство модели, обеспечивающее наиболее простую, по возможности линейную связь параметров оптимизации с оценочной функцией и функциями ограничений. Это свойство важно не только для лучшего понимания и анализа модели, но и с позиции повышения эффективности алгоритмов оптимизации.

Понятно, что перечисленные требования к модели часто входят в противоречие между собой, и задача специалиста, занимающегося моделированием, состоит в нахождении их разумного компромисса.

С позиций кибернетики оптимизационные модели разбиваются на виды, связанные с общей классификацией систем. Один из признаков такой классификации – порядок функционирования, или поведение системы. По данному признаку среди множества систем выделяют: детерминированные, функционирование которых строго определено в настоящем и будущем; вероятностные (непредсказуемые, неопределенные), поведение которых описывается с помощью аппарата теории вероятности; игровые, которые осуществляют разумный выбор своего поведения в будущем на основе оценки ситуаций и предполагаемых способов действий по принятым критериям, а также исходя из неформальных соображений.

Подобным образом можно рассматривать детерминированные, вероятные и игровые оптимизационные модели.

Детерминированная модель отражает поведение системы с позиции полной определенности в настоящем и будущем. Детерминированный подход используют для достижения наивысшего качества в процессе проектирования технических изделий, при оптимизации планирования перевозок, материально - технического снабжения.

Вероятностная модель учитывает влияние случайных факторов на поведение системы и, следовательно, оценивает будущее с позиции вероятности тех или иных событий. Примерами здесь могут служить оптимизация ожидаемых длин очередей в системах массового обслуживания, продолжительностей решения задач мультипрограммной ЭВМ, объемов выпуска сверхплановой продукции производственным участком за день.

Игровая модель дает возможность получить максимальный выигрыш в конфликтных ситуациях, в которых каждая из конфликтующих сторон придерживается своих взглядов, стремится получить информацию о

намерениях "противника" и, возможно, извлечь выгоду из его ошибок, действует сообразно складывающейся обстановке.

В рамках настоящего пособия мы ограничимся рассмотрением только детерминированных систем. Проблема их оптимизации формулируется в виде *задачи математического программирования* (о ней подробно пойдет речь в следующем разделе). Указанное наименование связано с тем, что метод решения задачи заключается в выборе программы действий (от англ. *programming* – составление плана, программы). Словосочетание «математическое программирование» часто заменяется аббревиатурой *МП*.

Ответ на второй вопрос, сформулированный в начале параграфа – как оптимизировать? – сводится к выбору метода нахождения решений, соответствующего построенной оптимизационной модели. Сама реализация методов оптимизации является процедурой в значительной степени *объектно-инвариантной*, поскольку опирается на свойства модели вне зависимости от ее происхождения. И если проблемы в экономике, управлении и технике будут приводить к построению схожих моделей, то их решение можно будет осуществлять одними и теми же методами оптимизации.

Таким образом, оптимизационные алгоритмы имеют универсальный характер. Их настройка на конкретную задачу осуществляется с помощью специализированной процедуры, которую уместно назвать «пробой функций». Эта процедура заключается в вычислении значений целевой функции, функций ограничений, их производных при заданном наборе параметров оптимизации. По сути дела в ней осуществляются элементы анализа конкретной оптимизируемой системы. Если «пробу функций» реализовать в виде сменного программного модуля, то сама программа, решающая проблему оптимизации, станет пригодной для улучшения не одного объекта или процесса, а целого их множества. Переход от одной задачи к другой будет осуществляться лишь подключением нового сменного программного модуля.

1.3. Постановка задачи математического программирования

Рассмотренная в предыдущем разделе оптимизационная модель позволяет сформулировать задачу математического программирования (задачу оптимизации детерминированных систем) в следующем обобщенном виде:

найти величины переменных (параметров оптимизации) x_1, x_2, \dots, x_n из n -мерного множества S евклидова пространства \mathbb{R}^n , для которых вещественная скалярная функция $\varphi(x_1, x_2, \dots, x_n)$ принимает минимальное значение при условии соблюдения следующих ограничений:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ c_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ c_m(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \bar{c}_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0 \\ \bar{c}_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0 \\ \dots \\ \bar{c}_p(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0 \end{array} \right. \quad (0.1)$$

где $c_1, c_2, \dots, c_m, \bar{c}_1, \bar{c}_2, \dots, \bar{c}_p$ - некоторые вещественные скалярные функции.

Может показаться, что задача МП в постановке (0.1) имеет несколько надуманный вид. Например, в правых частях уравнений и неравенств встречаются только нули и все неравенства приведены к требованию неотрицательности функции (отметим, что в литературе часто встречается альтернативное требование неположительности функции). Однако если в реальных проблемах встречаются равенства и неравенства другого типа, то они путем очень несложных преобразований (переобозначения функций) могут быть приведены к (0.1) (читателю рекомендуется рассмотреть вопрос о такого рода преобразованиях самостоятельно). Нетрудно также увидеть, что потребность максимизации φ может быть реализована путем минимизации той же функции, но взятой со знаком минус. Что касается разделения ограничений на равенства, неравенства и ограничения принадлежности подмножеству S , то оно осуществляется из соображений использования различных методов для их удовлетворения и контроля. При этом подмножество S обычно выделяют в \square^n особым образом только в тех случаях, когда одними ограничениями $C(X)=0$ и $\bar{C}(X) \geq 0$ для описания области допустимых значений не обойтись. Например, можно определить, что S является множеством целых чисел (то есть $S = Z^n$), или множеством дискретных точек в \square^n с заданными координатами, или выпуклым множеством и т.д. Во всех остальных случаях принимают, что S и \square^n совпадают.

Задача (0.1) может быть записана в более компактной форме с помощью векторов и условных обозначений:

$$\begin{aligned} \varphi(X) \rightarrow \min, \quad X \in S \subset \square^n, \\ C(X) = 0 \\ \bar{C}(X) \geq 0 \end{aligned} \quad (0.2)$$

где X – вектор параметров оптимизации, состоящий из n элементов x_1, x_2, \dots, x_n ; $C(X)$ – вектор функций, входящих в ограничения-равенства; $\bar{C}(X)$ – вектор функций, входящих в ограничения-неравенства; запись $\varphi(X) \rightarrow \min$ означает, что требуется найти значения параметров оптимизации, которые доставляют минимум оценочной функции; записи $C(X) = 0$ и $\bar{C}(X) \geq 0$, в

которых слева и справа от операндов находятся соответственно векторы функций и нулевые векторы, означают, что соотношения, определяемые операндами, должны поэлементно выполняться для всех составляющих векторов. Здесь и в дальнейшем мы будем обозначать векторы и матрицы полужирным шрифтом, чтобы их было легче отличать от скаляров.

Прежде чем рассматривать какие-либо методы решения (0.2), необходимо определить, что понимается под решением указанной задачи. С этой целью первоначально введем понятие допустимой точки и допустимого множества.

Говорят, что произвольный набор переменных $\mathbf{X} \in S \subset \mathbb{R}^n$ задает точку, или элемент в пространстве параметров оптимизации. Эта точка является *допустимой*, если для нее соблюдаются все ограничения задачи (0.2). В противном случае точка будет *недопустимой*. Множество допустимых точек образует *допустимое множество*, или *допустимую область* задачи.

С учетом введенных понятий, мы будем рассматривать в качестве решения задачи (0.2) точку *локального минимума* в допустимой области, характерную тем, что значение в ней оценочной функции связано определенными соотношениями со значениями оценочной функции в соседних допустимых точках.

Пусть \mathbf{X}^* - допустимая точка, а $\Omega(\mathbf{X}^*, \delta)$ - допустимое множество из ее δ -окрестности (под $\Omega(\mathbf{X}^*, \delta)$ можно понимать n -мерный гипершар радиуса δ). Точку \mathbf{X}^* будем называть точкой *сильного локального минимума*, если существует число $\delta > 0$ такое, что $\varphi(\mathbf{X}) < \varphi(\mathbf{X}^*)$ для всех $\mathbf{X} \in \Omega(\mathbf{X}^*, \delta)$, $\mathbf{X} \neq \mathbf{X}^*$. Точку \mathbf{X}^* будем называть точкой *слабого локального минимума*, если существует число $\delta > 0$ такое, что $\varphi(\mathbf{X}) \leq \varphi(\mathbf{X}^*)$ для всех $\mathbf{X} \in \Omega(\mathbf{X}^*, \delta)$, и при этом \mathbf{X}^* не удовлетворяет условиям сильного локального минимума.

Для иллюстрации понятия локального минимума можно рассмотреть функцию одной переменной, изображенную на рис.1.

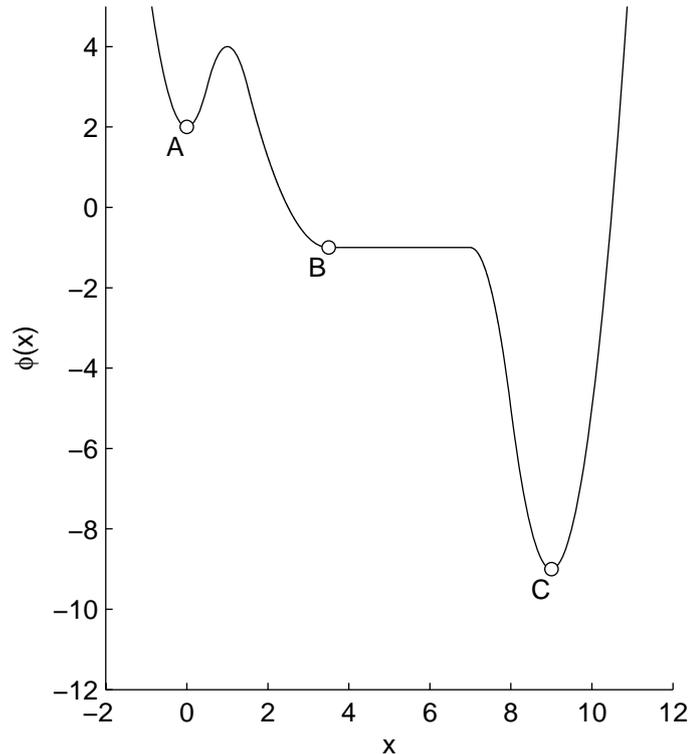


Рис. 1

На рисунке точки А и С являются точками сильного локального минимума, а В – точкой слабого локального минимума. Как видно уже из простейшей иллюстрации, локальных минимумов может быть несколько. Среди них можно выделить такую точку (точки), в которой $\phi(\mathbf{X})$ принимает наименьшее значение среди всех точек допустимой области. Ее называют *глобальным минимумом*.

В связи с рассмотрением глобального минимума резонным становится вопрос о том, почему в качестве решения задачи (0.2) мы определяем точку локального, а не глобального минимума? Ведь в нем значение оценочной функции меньше, чем во всех допустимых точках, а не только в соседних, близлежащих.

Все дело в том, что рассматриваемые нами в дальнейшем методы оптимизации являются методами *локальной минимизации* и, следовательно, решение задачи (0.2) нужно определять именно так, как мы это сделали. Конечно, локальные методы могут привести к глобальному минимуму, но, за исключением ряда специальных случаев, успеха здесь гарантировать нельзя. Что касается методов *глобальной оптимизации*, ориентированных на поиск глобального минимума, то они разработаны только для решения некоторых специфических задач. Универсальных методов глобальной минимизации, пригодных для решения разнообразных многоэкстремальных проблем, попросту не существует.

Возможности разнообразного выбора компонентов оптимизационной модели при решении (0.2) позволяет провести классификацию частных задач

математического программирования и соответствующих им методов оптимизации по ряду классификационных признаков, в частности:

1. По наличию или отсутствию ограничений

Задачи МП разделяются на два вида: задачи безусловной оптимизации (дословно можно прочесть как задачи оптимизации «без условий»), когда ограничения отсутствуют, и задачи условной оптимизации, когда в наличии имеется хотя бы одно ограничение.

2. По линейности или нелинейности функций

Если оценочная функция и функции ограничений в задаче МП линейны, то такая задача называется *задачей линейного программирования (ЛП)*. Если хотя бы одна из функций является нелинейной, то (0.2) называется *задачей нелинейного программирования (НЛП)*.

Разновидностью задачи НЛП является *задача квадратичного программирования*, когда оценочная функция квадратичная, а ограничения линейные (напомним, что квадратичной называется функция вида:

$$\varphi(\mathbf{X}) = \varphi_0 + \mathbf{R}^T \mathbf{X} + \frac{1}{2} \mathbf{X}^T \mathbf{H} \mathbf{X}$$

где \mathbf{R} и \mathbf{H} – соответственно числовые вектор и квадратная матрица, а φ_0 - скаляр).

3. По специальному виду оценочной функции

По данному признаку можно выделить много типов задач. Наиболее часто называют:

- задачу с *сепарабельной целевой функцией*:

$$\varphi(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^n f_i(x_i)$$

- задачу о *наименьших квадратах*:

$$\varphi(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^n f_i^2(\mathbf{X})$$

4. По размерности задачи (числу параметров оптимизации)

По признаку размерности выделяют:

- задачи малой размерности;
- задачи большой размерности.

Данное деление весьма условное, нельзя определить, что при каком-то значении $n > N$ задачи получают большую размерность, а все остальные имеют малую. Суть различий заключается в том, что для решения задач большой размерности применяют специальные численные методы, обеспечивающие работу с гигантскими матрицами неплотного хранения (то есть матрицами, значительная часть которых заполнена нулями), например, ленточными, блочными. Эти матрицы формируются из коэффициентов исходных ограничений или вычисляются в процессе оптимизации.

5. По дискретности или непрерывности переменных

Если параметры оптимизации могут принимать только дискретные значения, то соответствующая задача МП носит название *дискретного программирования*. Ее разновидностью является *задача целочисленного*

программирования, в которой переменные могут быть только целыми числами. Например, когда оптимизируется количество станков на предприятии, то оно не может быть дробным. Если параметры оптимизации могут принимать любые значения в пределах диапазонов их изменения, то соответствующая задача МП относится к *непрерывной оптимизации*.

Методы дискретного программирования сводятся к «разумному» перебору вариантов либо опираются на технику, связанную с использованием результатов решения задачи с непрерывно изменяющимися переменными. В задачах НЛП эта техника становится довольно сложной и не всегда приводят к желаемому результату. Из соображений ограниченности объема настоящего учебного пособия, мы сосредоточимся на рассмотрении задач непрерывной оптимизации, предполагая повсеместно, что $S = \square$ " .

1.4. Общие принципы решения оптимизационных задач

Вообще говоря, существует несколько подходов к решению оптимизационных задач.

Еще из школьного и вузовского курса математики студентам знакомы классические методы дифференциального и вариационного исчисления для решения проблем оптимизации. Например, для нахождения наименьшего значения непрерывной функции одной переменной на заданном отрезке используется известный способ: исходя из необходимых условий оптимальности – равенства нулю производной - определяются все точки экстремумов функции, среди которых определяются точки минимума, далее вычисляются значения функции на границах отрезка, после чего среди найденных «претендентов» выделяется оптимальная точка. Однако данный способ связан с нахождением корней производной целевой функции, что приводит к необходимости решения уравнения. Если это уравнение нелинейное, то определение корней может стать весьма непростой проблемой. Положение усугубляется, если целевая функция зависит от многих переменных. В этой ситуации необходимо, в общем случае, решать систему нелинейных уравнений для частных производных, что является задачей, близкой по уровню сложности к исходной. Поэтому классические методы дифференциального и вариационного исчисления могут с успехом применяться только в тех задачах, когда частные производные оценочной функции линейны относительно переменных или имеют специальный вид, позволяющий найти корни системы уравнений, определяющей экстремальные точки.

Другим подходом к решению экстремальных задач является использование графического способа. Графическое решение предусматривает решение следующих подзадач:

- 1) выбор области изменения переменных, которая бы позволяла произвести визуализацию допустимого множества;
- 2) отображение линий, вдоль которых функции ограничений-равенств ограничений-неравенств равны нулю (назовем их линиями нулевого уровня), чтобы найти графически допустимое множество;

- 3) отображение нескольких линий уровня оценочной функции – кривых, вдоль которых функция имеет постоянное значение, чтобы определить характер изменения оценочной функции внутри допустимой области;
- 4) нахождение оптимальной точки внутри допустимой области.

Поскольку координаты точки локального минимума заранее неизвестны, то для получения графического решения и его уточнения отдельные подзадачи приходится ставить многократно, используя метод проб и ошибок.

Рассмотрим реализацию графического способа на примере. Пусть требуется решить следующую задачу НЛП:

$$\begin{aligned}\varphi(X) &= x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 \rightarrow \min \\ 0.3x_1 + x_2 - 2 &= 0 \\ -x_1^2 + 2x_2 + 2 &\geq 0\end{aligned}$$

Первоначально определим область изменения переменных, для которой будут производиться графические построения. С этой целью можно поступить следующим образом. Зададим диапазон изменения одной переменной, скажем, x_1 , исходя из некоторых начальных предположений о положении точки минимума (если никаких разумных соображений по этому поводу нет, то диапазон выбирается произвольно). Затем определим пределы изменения второй переменной x_2 , приравняв нулю функции ограничений.

Пусть, например, x_1 изменяется от -4 до 4. Имеем:

$$x_2 = -0.3x_1 + 2 \text{ - из первого ограничения.}$$

$$x_2 = 0.5x_1^2 - 1 \text{ - из второго ограничения}$$

Тогда несложно установить, что x_2 имеет пределы изменения от 0.8 до 3.2 для первого ограничения и от -1 до 7 для второго ограничения. Интегрально получаем, что переменная x_2 должна изменяться от -1 до 7.

Далее, опираясь на пределы изменения переменных можно построить линии нулевого уровня ограничений (см. рис. 2)

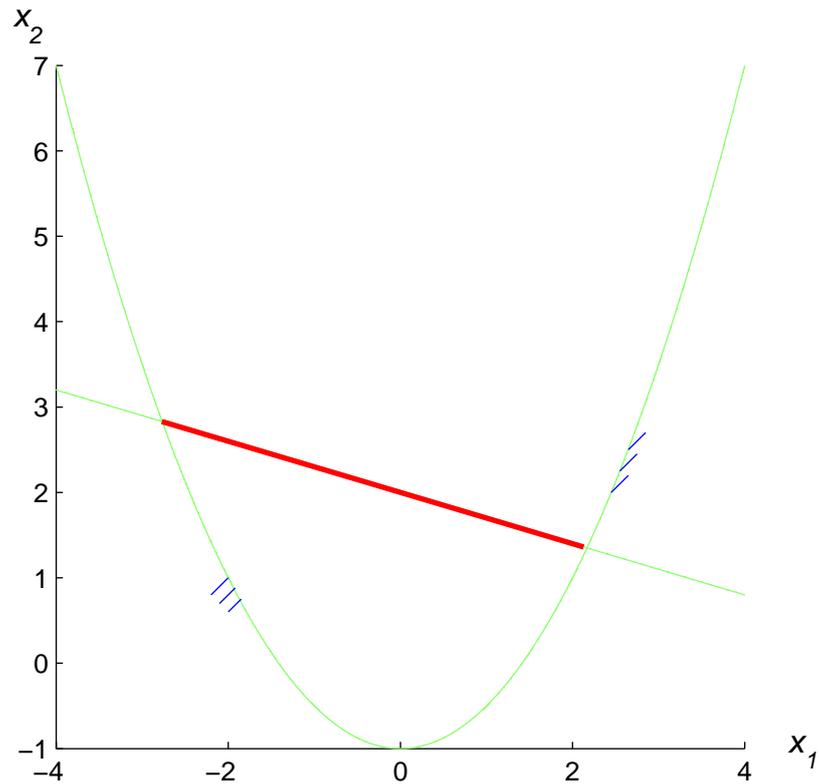


Рис. 2

С целью лучшего понимания рисунка, в области отрицательных значений функции ограничения-неравенства (со стороны недопустимой области в отношении неравенства) нанесены штрихи, примыкающие к линии нулевого уровня.

Из рисунка видно, что допустимая область определяется отрезком прямой, совпадающей с линией нулевого уровня ограничения-равенства. Концы отрезка определяются точками пересечения прямой с ветвями параболы, являющейся линией нулевого уровня ограничения-неравенства. Получив начальное изображение допустимой области, можно изменить диапазон изменения переменной x_2 для улучшения масштаба и большей наглядности, например, уменьшив верхнюю границу до 4 (см. рис. 3):

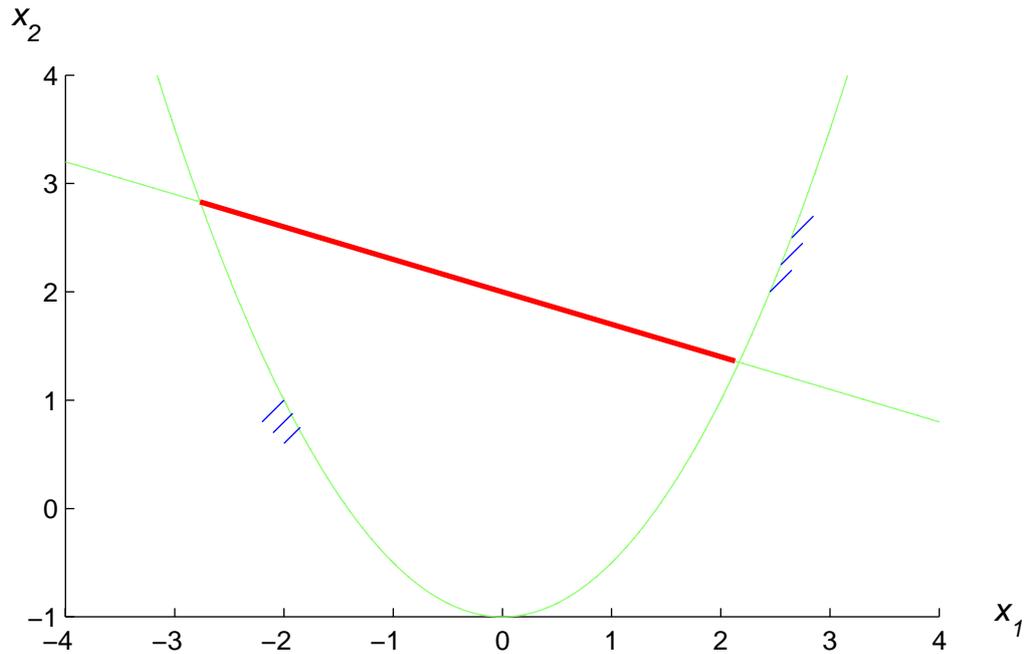


Рис. 3

На следующем этапе отобразим несколько линий уровня оценочной функции. Сначала зададим значения φ , например, равными 1, 5, 10. Для построения контуров линий можно воспользоваться стандартными пакетами программ, которые сканируют пространство переменных и определяют точки перехода через каждую линию уровня. Если доступ к таким программам ограничен, можно определить координаты нескольких точек вдоль каждой линии и провести плавные кривые. Для нахождения координат следует составить уравнения вида:

$$\varphi(X) = x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2 = a,$$

где a – избранное значение целевой функции. Одну переменную, например, x_1 будем считать независимой, тогда другую переменную x_2 можно выразить из соответствующего уравнения.

В результате получим картину, показанную на рис. 4.

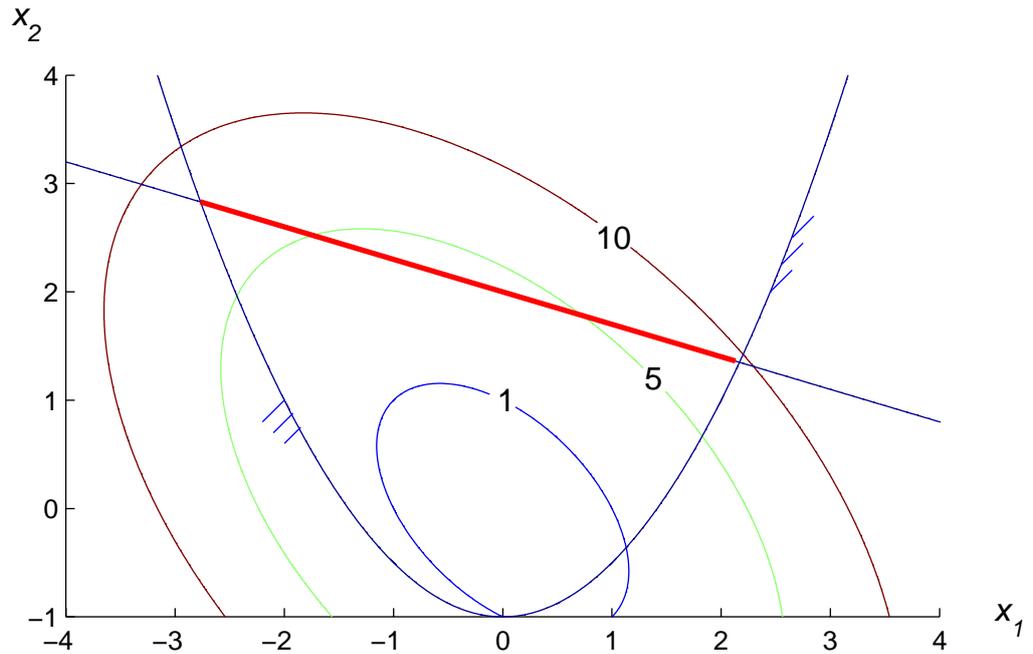


Рис. 4

Анализ рисунка показывает, что оптимальной должна быть точка, которая является точкой касания некоторой воображаемой линии уровня φ и отрезка прямой, содержащего допустимую область. Эта точка будет соответствовать линии уровня с наименьшим значением из всех линий уровня, имеющих общие точки с допустимой областью (пересекающих или касающихся отрезка). Поскольку искомая линия на чертеже отсутствует, ее надо провести, пробуя значения функции. В итоге получим, что с удовлетворительной точностью нам подходит линия уровня $\varphi = 3.8$ (рис. 5)

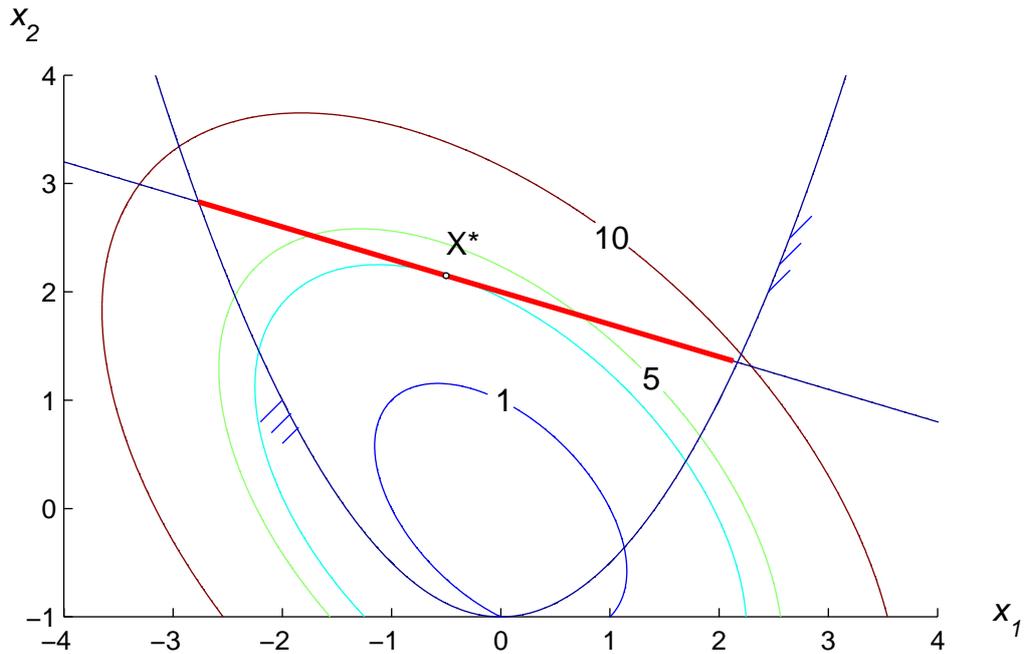


Рис. 5

Точка локального минимума, определенная графически и обозначенная через X^* , имеет координаты $(-0.5, 2.15)$. Заметим, что точное решение задачи дает точку с координатами $(-0.50633, 2.15190)$.

Как видно из приведенного примера, графический способ оптимизации является простым и наглядным при оптимизации функций двух переменных. Однако в случаях, когда размерность вектора параметров становится большой, данный способ становится непригодным. Попытки использования набора сечений оценочной функции по двум разным переменным для оценки характера ее изменения чаще всего приводят к неправильным выводам. Кроме того, графический способ имеет не очень высокую точность.

В ряде задач МП оптимизация может быть осуществлена способом *анализа различных вариантов*. Он сводится к перебору комбинаций параметров оптимизации с возможным отсечением заведомо худших из них - с целью экономии ресурсов времени и памяти компьютера. Однако способ исследования вариантов можно использовать только в дискретной оптимизации, где количество вариантов является конечным, и то при небольших размерностях вектора переменных.

Основным инструментом решения оптимизационных задач в настоящее время являются *численные методы*. Их суть заключается в построении итерационного алгоритма (алгоритма последовательных приближений) для поиска минимума оценочной функции с учетом ограничений. Данный алгоритм требует задания исходного приближения $X^{(0)}$, которое называется стартовой, или начальной точкой оптимизации. Начиная с нее, строится

последовательность точек $\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}, \dots, \mathbf{X}^{(k)}$, которая с ростом k должна сходиться к решению задачи МП – точке \mathbf{X}^* . При этом в одних алгоритмах $\mathbf{X}^{(j)}$ должны всегда удовлетворять ограничениям задачи, в других – могут попадать в недопустимую область.

Каждая итерация, или, как говорят, *шаг оптимизации* состоит из типовых этапов:

Этап 1. Анализ изменения оценочной функции и, возможно, функций ограничений в окрестности исходной точки $\mathbf{X}^{(k-1)}$ данного шага с номером k .

Данный этап состоит в проведении некоторого исследования о характере изменения функций вблизи $\mathbf{X}^{(k-1)}$. Он может заключаться в вычислении производных функций, осуществлении дополнительных проб в соседних точках.

Этап 2. Выбор направления изменения параметров оптимизации.

Данный этап опирается на результаты предыдущего и позволяет построить на шаге *направление, или траекторию локального спуска* – вектор (реже - направленную кривую), перемещение вдоль которого позволяет уменьшить значение оценочной функции. Направление локального спуска должно гарантировать *локальное убывание* или, в крайнем случае, невозрастание оценочной функции в окрестности исходной точки шага для обеспечения сходимости процесса оптимизации. Численные методы, обеспечивающие определение траектории спуска, называют *методами спуска*.

Термин «локальный спуск» связан с интерпретацией двумерной задачи математического программирования как задачи поиска широты и долготы наиболее низкой точки на местности. При этом поверхность оценочной функции воспринимается как рельеф земной поверхности. В свою очередь, некоторые привычные для нас особенности рельефа, например, наличие оврага, могут являться своего рода характеристикой оценочной функции: говорят, что функция может иметь овражный рельеф. В этом случае ее линии уровня вытянуты в одних направлениях и сплюснуты в других.

Известным примером двумерной функции с овражным рельефом является функция Розенброка $\varphi(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$, линии уровня которой изображены на рис. 6.

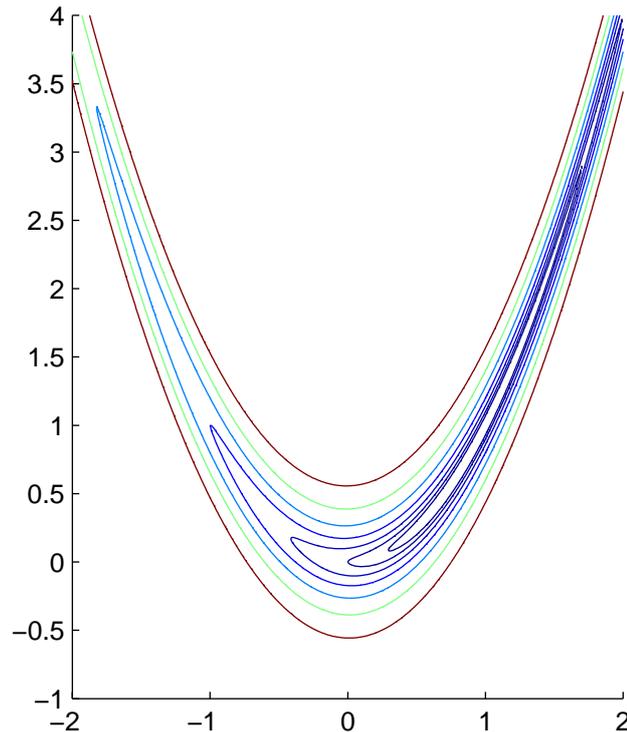


Рис. 6

Этап 3. Определение длины шага вдоль выбранного направления

При выбранной траектории локального спуска положение точки на ней определяется единственным скалярным параметром, который называется *длиной шага*. Изменяя длину шага, или, как говорят, осуществляя ее *одномерный поиск*, можно добиться нахождения такой точки $\mathbf{X}_0^{(k)}$ на траектории, которая бы обеспечила оптимальное убывание оценочной функции при заданной трудоемкости поиска.

Этап 4. Уточнение положения точки, полученной на предыдущем этапе, с целью коррекции нарушенных ограничений.

Этап 4 присущ не всем методам оптимизации и используется только при контроле нелинейных ограничений. Он заключается в том, что вблизи решения $\mathbf{X}_0^{(k)}$, полученного на третьем этапе, ищется точка, удовлетворяющая всем ограничениям задачи. Процесс поиска является довольно сложным, трудоемким и не всегда приводит к успеху. В случае, если допустимую точку отыскать не удастся, осуществляется уменьшение длины шага, полученной на третьем этапе, и процесс повторяется вновь.

В результате выполнения этапа 4 значение оценочной функции может увеличиться по сравнению с этапом 3, но должно быть меньше или равно значению в точке $\mathbf{X}^{(k-1)}$.

Этап 5. Проверка условий останова

Здесь проверяются условия окончания итерационного поиска, которые свидетельствуют о достижении требуемого результата или о фактической

остановке процесса (стагнации). Если подобные условия выполняются, то происходит останов итерационного процесса. В противном случае полученная в результате предыдущих этапов точка принимается за исходную точку следующего шага оптимизации $\mathbf{X}^{(k)}$.

Схематично один шаг оптимизации отображен на рис. 7, где нанесены линии уровня оценочной функции и линия нулевого уровня ограничения-равенства $c_1(\mathbf{X}) = 0$.

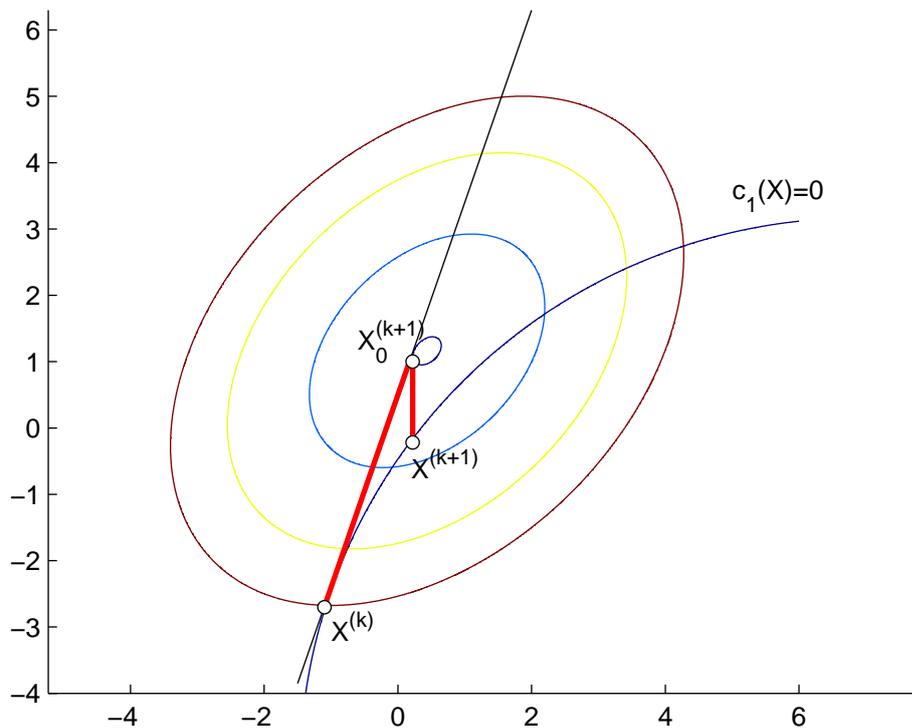


Рис. 7

Значения линий уровня на рисунке не показаны в предположении, что изображается рельеф функции, соответствующий минимуму, а не максимуму (этому предположению мы будем следовать везде в дальнейшем, если иное не оговаривается особо). Траектория, проходящая через $\mathbf{X}^{(k)}$ и $\mathbf{X}_0^{(k+1)}$, соответствует локальному спуску, обеспечивающему убывание оценочной функции. Перемещение от $\mathbf{X}_0^{(k+1)}$ к $\mathbf{X}^{(k+1)}$ необходимо для коррекции нарушенного ограничения-равенства и может сопровождаться локальным возрастанием оценочной функции.

1.5. Условия оптимальности

Построение последовательности шагов оптимизации, суть которых была рассмотрена нами в предыдущем разделе, приводит к некоторой точке, которую следует считать претендентом на решение задачи МП. Однако как убедиться в том, что данная точка действительно является локальным минимумом? С другой стороны, из каких соображений следует строить

траекторию движения в пространстве параметров оптимизации, чтобы достичь точки локального минимума, а не какой-либо другой? Чтобы правильно ответить на поставленные вопросы, требуется определить *условия оптимальности*. Условия оптимальности мы будем применять по отношению к некоторой точке X^* и разделять на необходимые и достаточные.

Если известно, что точка X^* является точкой локального минимума, то в ней необходимо должны соблюдаться условия, которые так и называются - *необходимыми*. Поэтому несоблюдение необходимых условий для произвольной точки пространства параметров оптимизации позволяет утверждать, что эта точка заведомо не является оптимальной. С другой стороны, движение по направлению к точке, в которой выполняются необходимые условия, можно положить в основу построения методов локального спуска.

Проверка достаточных условий осуществляется для точек пространства X^* , в отношении которых не известно точно, соответствуют ли они локальному минимуму. Однако если эти условия соблюдаются в X^* , то этого *достаточно* для утверждения того, что эта точка – локальный минимум.

Как необходимые, так и достаточные условия оптимальности классифицируются по порядку использования в них производных оценочной функции и функций ограничений. Соответственно выделяют условия нулевого порядка (производные не используются), первого порядка (используются первые производные) и второго порядка (используются вторые производные). Для упрощения изучаемых задач оптимизации и методов их решения мы *всюду* будем полагать, что оценочная функция и функции ограничений являются дважды непрерывно дифференцируемыми.

Рассмотрение условий оптимальности мы начнем с простейшего случая задач математического программирования, в которых отсутствуют какие-либо ограничения. В последующем будем усложнять задачу, вводя линейные, а затем нелинейные ограничения. Возможно, этот подход кому-то покажется излишне трудоемким, поскольку условия оптимальности, применяемые в задаче МП общего вида, могут использоваться и в более простых случаях. Однако представляется, что постепенное усложнение задач и поэтапное введение новых понятий будет способствовать лучшему пониманию излагаемого материала, имеющему, пожалуй, наивысшую теоретическую нагрузку в курсе методов оптимизации.

1.5.1. Условия оптимальности в задачах без ограничений

При отсутствии ограничений задача математического программирования формулируется в виде:

$$\varphi(X) \rightarrow \min \quad (0.3)$$

Обычно в курсе высшей математики условия оптимальности изучаются для случая одной переменной. Напомним их без доказательства:

$$\begin{aligned} \text{Необходимые условия: } \varphi'(x^*) &= 0 \\ \varphi''(x^*) &\geq 0 \end{aligned} \quad (0.4)$$

$$\begin{aligned} \text{Достаточные условия: } \varphi'(x^*) &= 0 \\ \varphi''(x^*) &> 0 \end{aligned} \quad (0.5)$$

Довольно схожим образом выглядят условия оптимальности в многомерном случае.

Первоначально рассмотрим необходимые условия.

Необходимые условия минимума в задаче без ограничений:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) &= 0 \\ \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) &\geq 0 \end{aligned} \quad (0.6)$$

В выражениях (0.6) введены следующие обозначения:

$\mathbf{G}(\mathbf{X})$ - вектор градиента оценочной функции; $\mathbf{H}(\mathbf{X})$ - матрица Гессе, или гессиан оценочной функции:

$$\mathbf{G}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} g_1(\mathbf{X}) \\ \dots \\ g_n(\mathbf{X}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi(\mathbf{X})}{\partial x_1} \\ \dots \\ \frac{\partial \varphi(\mathbf{X})}{\partial x_n} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} h_{11} & \dots & h_{1n} \\ \dots & \dots & \dots \\ h_{n1} & \dots & h_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{X})}{\partial x_1 \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{X})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{X})}{\partial x_n \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{X})}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}$$

Как и в разделе 1.3, запись $\mathbf{G}(\mathbf{X}) = 0$, когда слева от операнда равенства располагается вектор, означает, что все его составляющие равны 0 (также равна 0 норма вектора). В выражении $\mathbf{H}(\mathbf{X}) \geq 0$ слева от операнда \geq располагается квадратная матрица. Такая запись означает, что матрица должна быть положительно полуопределенной (напомним, что положительно полуопределенной матрицей называется такая квадратная матрица, у которой все собственные числа больше или равны нулю; по другому определению, это матрица, для которой все значения квадратичной формы $\mathbf{X}^T \mathbf{H} \mathbf{X}$ при любых \mathbf{X} неотрицательны. Значок «т» означает транспонирование)

С целью вывода необходимых условий разложим оценочную функцию в ряд Тейлора в окрестности точки \mathbf{X}^* :

$$\varphi(\mathbf{X}^* + \varepsilon \square \mathbf{X}) = \varphi(\mathbf{X}^*) + \varepsilon \square \mathbf{X}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \square \mathbf{X}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^* + \varepsilon \vartheta \square \mathbf{X}) \square \mathbf{X} \quad (0.7)$$

где ε, ϑ - числа, причем $0 \leq \vartheta \leq 1$, $\square \mathbf{X}$ - вектор размерности n . Не умаляя общности, можно считать, что $\varepsilon > 0$.

Доказательство необходимого условия первого порядка проведем методом от противного. Предположим, что $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) \neq 0$. Тогда, оказывается, существует такой вектор $\square \mathbf{X}$, перемещение вдоль которого от \mathbf{X}^* позволит уменьшить оценочную функцию. Действительно, пусть вектор $\square \mathbf{X}$ удовлетворяет условию:

$$\square \mathbf{X}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) < 0, \quad (0.8)$$

то есть угол между векторами $\square \mathbf{X}$ и $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*)$ является тупым. При достаточно малой величине ε знак суммы второго и третьего слагаемых в правой части (0.7) будет целиком зависеть от знака второго слагаемого, поскольку третье является малой величиной более высокого порядка. Ввиду того, что $\varepsilon \square \mathbf{X}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) < 0$, то при $\varepsilon \leq \bar{\varepsilon}$ получим:

$$\varepsilon \square \mathbf{X}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \square \mathbf{X}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^* + \varepsilon \square \mathbf{X}) \square \mathbf{X} < 0,$$

откуда следует:

$$\varphi(\mathbf{X}^* + \varepsilon \square \mathbf{X}) < \varphi(\mathbf{X}^*)$$

Мы пришли к противоречию, так как точка \mathbf{X}^* при рассмотрении необходимых условий является локальным минимумом и значение в ней оценочной функции должно быть наименьшим среди всех соседних точек. Следовательно, неверным является исходное предположение, и вектор $\mathbf{G}(\mathbf{X})$ должен быть нулевым.

Точка пространства параметров оптимизации, для которой $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = 0$, называется *стационарной*. В общем случае стационарная точка может быть как локальным минимумом, так и локальным максимумом или седловой точкой (в последнем варианте по отдельным направлениям от \mathbf{X}^* оценочная функция будет возрастать, а по другим – убывать).

Для доказательства необходимого условия второго порядка перепишем (0.7) с учетом $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = 0$:

$$\varphi(\mathbf{X}^* + \varepsilon \square \mathbf{X}) = \varphi(\mathbf{X}^*) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \square \mathbf{X}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^* + \varepsilon \square \mathbf{X}) \square \mathbf{X} \quad (0.9)$$

Рассуждая, как и ранее, от противного, будем считать, что матрица $\mathbf{H}(\mathbf{X}^*)$ не является положительно полуопределенной. Возьмем достаточно малую величину ε , при которой, в силу непрерывности вторых производных, $\square \mathbf{X}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^* + \varepsilon \square \mathbf{X}) \square \mathbf{X}$ не сильно отличается от $\square \mathbf{X}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) \square \mathbf{X}$. Тогда найдется такой вектор $\square \mathbf{X}$, что $\square \mathbf{X}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^* + \varepsilon \square \mathbf{X}) \square \mathbf{X} \approx \square \mathbf{X}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) \square \mathbf{X} < 0$, вследствие чего:

$$\varphi(\mathbf{X}^* + \varepsilon \square \mathbf{X}) < \varphi(\mathbf{X}^*)$$

Мы вновь пришли к противоречию, из чего можно сделать вывод о необходимости $\mathbf{H}(\mathbf{X}) \geq 0$.

Рассмотрим теперь достаточные условия оптимальности.

Достаточные условия минимума в задаче без ограничений:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) &= 0 \\ \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) &> 0 \end{aligned} \quad (0.10)$$

В выражении (0.10) запись по отношению к квадратной матрице $\mathbf{H}(\mathbf{X}^*) > 0$ означает, что матрица Гессе должна быть положительно определена в точке \mathbf{X}^* (собственные числа матрицы должны быть строго

положительными, либо все значения квадратичной формы $\mathbf{X}^T \mathbf{H} \mathbf{X}$ при любых $\mathbf{X} \neq 0$ должны быть положительны).

Для доказательства того, что в случае соблюдения (0.10) точка \mathbf{X}^* будет точкой локального минимума, воспользуемся равенством градиента нулевому вектору и обратимся к разложению (0.9). В нем, в силу непрерывности вторых производных и положительной определенности $\mathbf{H}(\mathbf{X}^*)$, при достаточно малых ε $\|\mathbf{X}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^* + \varepsilon \mathbf{X})\| \mathbf{X} \approx \|\mathbf{X}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*)\| \mathbf{X} > 0$ при любых $\|\mathbf{X}\| \neq 0$. Это означает, что $\varphi(\mathbf{X}^* + \varepsilon \mathbf{X}) < \varphi(\mathbf{X}^*)$, то есть \mathbf{X}^* - точка сильного локального минимума.

1.5.2. Условия оптимальности в задачах с линейными ограничениями-равенствами.

При рассмотрении условий оптимальности в задачах с ограничениями мы будем исходить из определения локального минимума, которое было дано в разделе «Постановка задачи математического программирования». Следуя этому определению, нам, во-первых, необходимо описать допустимое множество $\Omega(\mathbf{X}^*, \delta)$, задав правила перемещения к его точкам из допустимой точки \mathbf{X}^* , или, как говорят, правила построения *возможных направлений*. Во-вторых, следует рассмотреть специфические соотношения между значениями оценочной функции в \mathbf{X}^* и иных точках $\Omega(\mathbf{X}^*, \delta)$, чтобы убедиться в свойствах необходимости или достаточности предложенных условий.

Обратимся первоначально к задаче математического программирования с линейными ограничениями в виде равенств, которую удобно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{X}) \rightarrow \min \\ \mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B} \end{aligned} \quad (0.11)$$

где \mathbf{A} – матрица, а \mathbf{B} – вектор известных чисел (коэффициентов). Будем считать, что матрица \mathbf{A} системы линейных уравнений, входящих в задачу (0.11), имеет полный строковый ранг, m строк и n столбцов, причем $m < n$. Последнее неравенство объясняется тем, что в случае $m > n$ не существует даже решения системы уравнений, а при $m = n$ решение может быть единственным; поэтому в этих случаях об оптимизации говорить не приходится. Что касается условия линейной независимости строк, то оно может быть выполнено за счет отбрасывания «лишних» ограничений.

Для построения возможных направлений выберем произвольную точку \mathbf{X}_1 из допустимого множества. Тогда в точках \mathbf{X}^* и \mathbf{X}_1 должны соблюдаться ограничения задачи:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{X}^* &= \mathbf{B} \\ \mathbf{A}\mathbf{X}_1 &= \mathbf{B} \end{aligned}$$

Вычитая вторую систему уравнений из первой, получим:

$$\mathbf{A}\Delta\mathbf{X} = 0 \quad (0.12)$$

где вектор $\Delta\mathbf{X} = \mathbf{X}_1 - \mathbf{X}^*$ является возможным направлением. Поскольку точка \mathbf{X}_1 была выбрана произвольно, то мы получили важный результат: любое возможное направление в задаче (0.11) должно удовлетворять условию (0.12). Верно и обратное: любой вектор $\Delta\mathbf{X}$, удовлетворяющий условию (0.12), является возможным направлением. Действительно, рассмотрим в этом случае точку $\mathbf{X}^* + \Delta\mathbf{X}$. В ней $\mathbf{A}(\mathbf{X}^* + \Delta\mathbf{X}) = \mathbf{A}\mathbf{X}^* + \mathbf{A}\Delta\mathbf{X} = \mathbf{A}\mathbf{X}^* + 0 = \mathbf{B}$. Следовательно, точка $\mathbf{X}^* + \Delta\mathbf{X}$ является допустимой, а вектор $\Delta\mathbf{X}$ соответствует возможному направлению.

Условие (0.12) означает, что все возможные направления ортогональны строкам матрицы \mathbf{A} , то есть ортогональны нормальям к гиперплоскостям ограничений (или, другими словами, они лежат на пересечении гиперплоскостей ограничений). Таким образом, множество возможных направлений образует линейное подпространство в n -мерном евклидовом пространстве \mathbb{R}^n , характерным свойством которого является ортогональность нормальям всех ограничений-равенств. Построим в этом подпространстве базис – линейно независимую систему векторов $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_{n-m}$. Эти базисные векторы удобно составить в одну матрицу \mathbf{Z} , имеющую m строк и $(n-m)$ столбцов:

$$\mathbf{Z} = (\mathbf{Z}_1 | \mathbf{Z}_2 | \dots | \mathbf{Z}_{n-m}) \quad (0.13)$$

Очевидно, что $\mathbf{AZ} = \mathbf{O}$, где справа от операнда стоит нулевая матрица. Любой вектор возможного направления $\Delta\mathbf{X}$ является линейной комбинацией базисных векторов введенного нами подпространства. Это можно записать в виде:

$$\Delta\mathbf{X} = \mathbf{Z}\bar{\mathbf{X}} = \sum_{i=1}^{n-m} \bar{x}_i \mathbf{Z}_i \quad (0.14)$$

где вектор $\bar{\mathbf{X}}$ образован из коэффициентов \bar{x}_i линейной комбинации векторов \mathbf{Z}_i . Выражение (0.14) позволяет описать переход из \mathbf{X}^* к любой точке допустимого множества, поэтому первая часть задачи, связанной с описанием множества $\Omega(\mathbf{X}^*, \delta)$ и сформулированной в начале параграфа, нами решена.

Рассмотрим теперь разложение оценочной функции в ряд Тейлора вдоль по возможному направлению:

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{X}^* + \varepsilon\Delta\mathbf{X}) &= \varphi(\mathbf{X}^* + \varepsilon\mathbf{Z}\bar{\mathbf{X}}) = \varphi(\mathbf{X}^*) + \varepsilon(\mathbf{Z}\bar{\mathbf{X}})^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) + \\ &+ \frac{1}{2} \varepsilon^2 (\mathbf{Z}\bar{\mathbf{X}})^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^* + \varepsilon\theta\mathbf{Z}\bar{\mathbf{X}})(\mathbf{Z}\bar{\mathbf{X}}) = \varphi(\mathbf{X}^*) + \varepsilon\bar{\mathbf{X}}^T \mathbf{Z}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) + \\ &+ \frac{1}{2} \varepsilon^2 \bar{\mathbf{X}}^T \mathbf{Z}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^* + \varepsilon\theta\mathbf{Z}\bar{\mathbf{X}}) \mathbf{Z}\bar{\mathbf{X}} \end{aligned}$$

Введем обозначения:

$$\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}) = \mathbf{Z}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}) \quad \bar{\mathbf{H}}(\mathbf{X}) = \mathbf{Z}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}) \mathbf{Z}$$

Вектор $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X})$ называется спроектированным, или приведенным градиентом, а матрица $\bar{\mathbf{H}}(\mathbf{X})$ - спроектированной, или приведенной матрицей Гессе. Точку \mathbf{X}^* , в которой спроектированный градиент становится нулевым вектором, называют *условно стационарной*.

С учетом принятых обозначений перепишем разложение оценочной функции в виде:

$$\varphi(\mathbf{X}^* + \varepsilon \mathbf{Z} \bar{\mathbf{X}}) = \varphi(\mathbf{X}^*) + \varepsilon \bar{\mathbf{G}}^T(\mathbf{X}^*) \bar{\mathbf{X}} + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{H}}(\mathbf{X}^* + \varepsilon \mathbf{Z} \bar{\mathbf{X}}) \bar{\mathbf{X}} \quad (0.15)$$

Сравнивая (0.15) с (0.7), можно установить формальное сходство выражений (в (0.15) все обозначения матриц, входящих в (0.7), просто снабжены чертой). Пользуясь методом аналогии, несложно получить и доказать необходимые условия оптимальности в рассматриваемой задаче.

Необходимые условия минимума задачи математического программирования с линейными ограничениями-равенствами:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{X}^* &= \mathbf{B} \\ \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^*) &= 0, \text{ или } \mathbf{Z}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = 0 \\ \bar{\mathbf{H}}(\mathbf{X}^*) &\geq 0, \text{ или } \mathbf{Z}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) \mathbf{Z} \geq 0 \end{aligned} \quad (0.16)$$

Покажем, что из условия $\mathbf{Z}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = 0$ вытекает $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{A}^T \boldsymbol{\Lambda}^*$, где $\boldsymbol{\Lambda}^*$ - вектор из m чисел, которые называются множителями Лагранжа.

Для доказательства введем в качестве базиса \square^n m векторов нормалей к ограничениям (ранее мы условились, что они являются линейно независимыми) и $n-m$ ортогональных им векторов, входящих в матрицу \mathbf{Z} . Разложим $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*)$ по данному базису:

$$\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{A}^T \boldsymbol{\Lambda}^* + \mathbf{Z}\mathbf{Y},$$

где $\boldsymbol{\Lambda}^*$ и \mathbf{Y} - векторы коэффициентов в линейной комбинации базисных векторов. Умножим обе части равенства на \mathbf{Z}^T слева:

$$\mathbf{Z}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{Z}^T \mathbf{A}^T \boldsymbol{\Lambda}^* + \mathbf{Z}^T \mathbf{Z}\mathbf{Y}$$

Учитывая, что $\mathbf{Z}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = 0$, $\mathbf{AZ} = \mathbf{O}$, получим:

$$\mathbf{Z}^T \mathbf{Z}\mathbf{Y} = 0.$$

Поскольку матрица $\mathbf{Z}^T \mathbf{Z}$ не вырождена (столбцы образуют базис), то, очевидно, что $\mathbf{Y} = 0$. Отсюда получаем, что $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{A}^T \boldsymbol{\Lambda}^*$.

Данный результат имеет наглядную интерпретацию: вектор градиента в точке локального минимума можно представить в виде линейной комбинации нормалей к ограничениям. Действительно, если обозначить через \mathbf{N}_i векторы нормалей к ограничениям, то $\mathbf{A}^T = (\mathbf{N}_1 | \mathbf{N}_2 | \dots | \mathbf{N}_m)$, и выражение

$\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{A}^T \boldsymbol{\Lambda}^*$ можно переписать в виде: $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \mathbf{N}_i$, где через λ_i^* обозначены элементы вектора $\boldsymbol{\Lambda}^*$. В частности, для случая двух переменных

и одного ограничения-равенства условный экстремум в задаче (0.11) может быть только в точке, где линия уровня оценочной функции касается ограничения (см. рис. 8)

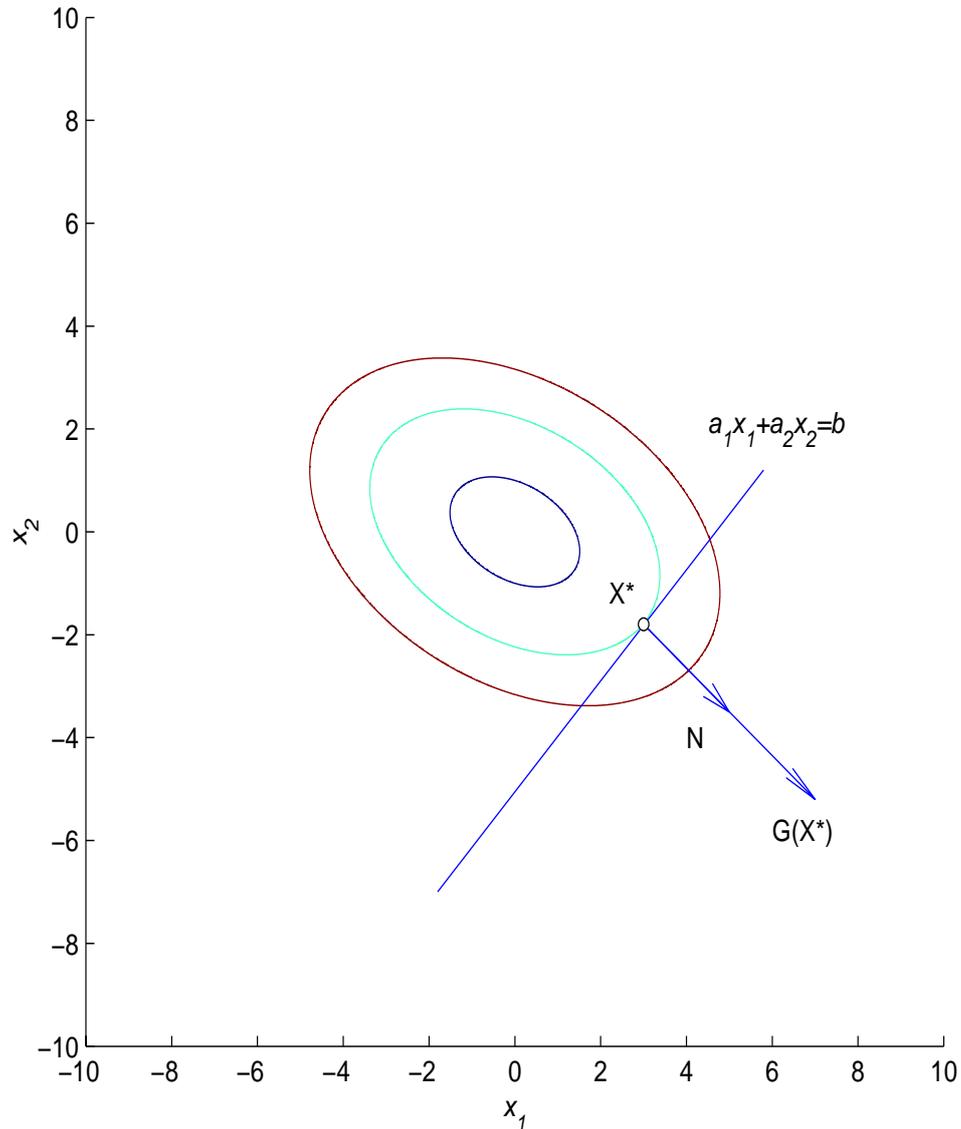


Рис. 8

На рисунке через \mathbf{N} обозначена нормаль к ограничению $a_1x_1 + a_2x_2 = b$. В точке локального минимума \mathbf{X}^* векторы \mathbf{N} и $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*)$ должны быть сонаправленными.

С учетом полученных результатов, условия (0.16) чаще всего записывают в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{X}^* &= \mathbf{B} \\ \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) &= \mathbf{A}^T \boldsymbol{\Lambda}^* \\ \mathbf{Z}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) \mathbf{Z} &\geq 0 \end{aligned} \quad (0.17)$$

Свое название элементы $\boldsymbol{\Lambda}$ получили вследствие того, что они используются в качестве множителей при функциях ограничений в так называемой *функции Лагранжа* (значок «*» (звездочку) при $\boldsymbol{\Lambda}$ мы здесь намеренно опустили, так как она означает, что вектор множителей

ассоциируется с точкой \mathbf{X}^* , а функция Лагранжа существует и в других точках \square^n). Функция Лагранжа конструируется в виде линейной комбинации оценочной функции и функций ограничений-равенств (в данной задаче $\mathbf{C}(\mathbf{X}) = \mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{B}$):

$$L(\mathbf{X}, \Lambda) = \varphi(\mathbf{X}) - \Lambda^T(\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{B}) \quad (0.18)$$

Функция Лагранжа обладает тем интересным свойством, что ее стационарная точка удовлетворяет условиям оптимальности нулевого и первого порядка задачи с ограничениями. Действительно, находя частные производные L сначала по переменным \mathbf{X} , затем по переменным Λ и приравнивая их нулю, получим следующие условия оптимальности первого порядка:

$$\begin{cases} \mathbf{G}(\mathbf{X}) - \mathbf{A}^T \Lambda = 0 \\ -(\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{B}) = 0 \end{cases}$$

откуда следует, что в стационарной точке функции Лагранжа соблюдаются условия нулевого и первого порядка (0.17).

Достаточные условия оптимальности в задаче (0.11) доказываются по аналогии с достаточными условиями в задаче (0.3), и поэтому мы опустим их подробное доказательство.

Достаточные условия минимума задачи математического программирования с линейными ограничениями-равенствами:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{X}^* &= \mathbf{B} \\ \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) &= \mathbf{A}^T \Lambda^* \\ \mathbf{Z}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) \mathbf{Z} &> 0 \end{aligned} \quad (0.19)$$

Для того чтобы убедиться, соблюдаются ли достаточные условия (0.19) в исследуемой точке \mathbf{X}^* , обычно действуют в следующей последовательности:

- проверяют условие нулевого порядка путем подстановки координат \mathbf{X}^* в систему уравнений $\mathbf{A}\mathbf{X}^* = \mathbf{B}$;

- если условие нулевого порядка соблюдено, то вычисляют градиент оценочной функции $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*)$ и находят множители Λ^* , удовлетворяющие системе уравнений $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{A}^T \Lambda^*$. Заметим, что m множителей должны удовлетворить n уравнениям, что при $m < n$ характерно только для условно стационарной точки;

- если условие первого порядка соблюдено, то при $m < n$ строят матрицу \mathbf{Z} (способы построения \mathbf{Z} подробно описаны в разделе 3.2.1 настоящего пособия), вычисляют матрицу Гессе и проверяют на положительность собственные числа матрицы $\mathbf{Z}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) \mathbf{Z}$.

Заметим, что как в необходимых, так и в достаточных условиях оптимальности второго порядка требуется положительная полуопределенность или положительная определенность спроектированной матрицы Гессе. При этом никаких требований к самой матрице Гессе не предъявляется. Однако, если $\mathbf{H} \geq 0$ или $\mathbf{H} > 0$, что соответствует случаю

выпуклой оценочной функции (см раздел 1.5.7), это приводит к автоматическому выполнению условий второго порядка при любых \mathbf{Z} ; поэтому условия первого порядка оптимальности становятся одновременно достаточными.

1.5.3. Условия оптимальности в задачах с линейными ограничениями-неравенствами.

Как и в предыдущем разделе, наряду с общим описанием ограничений $\bar{C}(\mathbf{X}) \geq 0$ будем использовать их специальное представление в виде линейных неравенств. Тогда задача математического программирования получит следующий вид:

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{X}) &\rightarrow \min \\ \mathbf{AX} &\geq \mathbf{B} \end{aligned} \quad (0.20)$$

где по-прежнему \mathbf{A} – матрица размерности $m \times n$, а \mathbf{B} – вектор известных чисел (коэффициентов). В отличие от задачи с ограничениями-равенствами, мы должны допускать уже любое соотношение между числами m и n .

Действовать при выводе условий оптимальности в задаче (0.20) будем, как и в случае с ограничениями-равенствами: сначала опишем допустимую область (множество возможных направлений), а затем будем выбирать на этом множестве оптимальную точку.

С целью решения первой проблемы проанализируем, какие виды возможных направлений мы будем наблюдать в зависимости от координат исследуемой точки \mathbf{X}^* . Если \mathbf{X}^* - точка локального минимума, то в ней по определению должно соблюдаться условие $\bar{C}(\mathbf{X}) = \mathbf{AX} - \mathbf{B} \geq 0$. В этом случае говорят, что все ограничения *не нарушены*. Термин связан с тем, что при перемещении в пространстве параметров оптимизации мы можем *нарушать границы* допустимой области, вследствие чего какие-то функции ограничений-неравенств становятся отрицательными. Соответствующие им ограничения считаются *нарушенными*. Например, на рисунке 9 ограничение-неравенство не нарушено в точках В и С и нарушено в точке А.

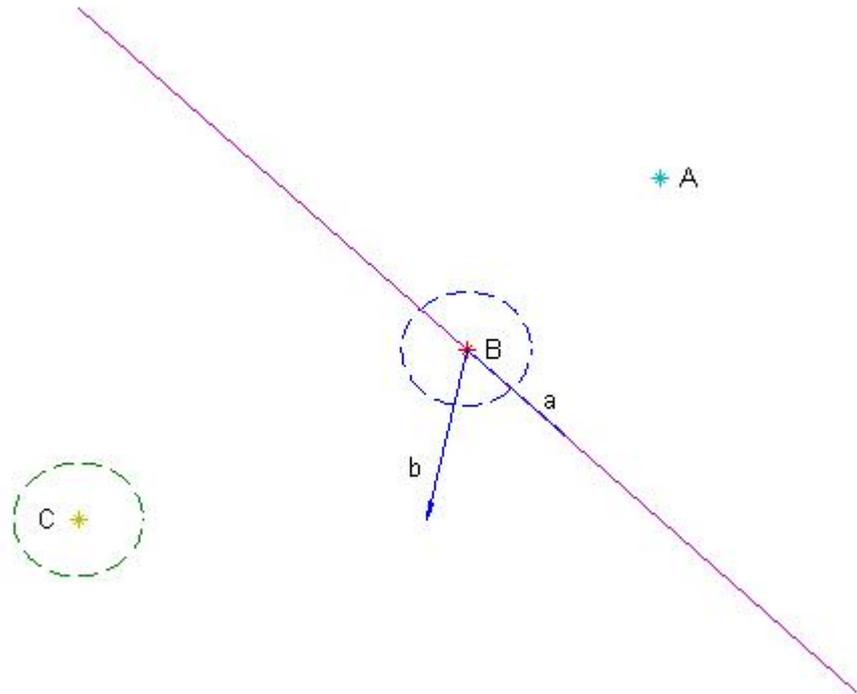


Рис. 9

Ненарушенные ограничения можно разделить на два типа. Ограничения первого типа выполняются как строгие неравенства $\bar{c}_j(\mathbf{X}^*) > 0$. Они называются *пассивными* (их также именуют *неактивными*, или *несдерживающими*, или *ненасыщенными*). Ограничения второго типа соблюдаются как строгие равенства $\bar{c}_k(\mathbf{X}^*) = 0$. Они называются *активными* (*сдерживающими*, *насыщенными*). На рис. 9 отображенное ограничение активно в точке В и пассивно в точке С.

Разбиение ограничений-неравенств на два типа необходимо потому, что только активные ограничения «урезают» множество возможных направлений в точке \mathbf{X}^* . Если ограничение с индексом j пассивно в \mathbf{X}^* , то ненулевой шаг из этой точки можно сделать в любом направлении, *не нарушая данное ограничение и не переводя его в разряд активных*. Другими словами, при любом векторе \mathbf{P} и достаточно малой величине ε будет соблюдено условие $\bar{c}_j(\mathbf{X}^* + \varepsilon\mathbf{P}) > 0$.

Если все ограничения-неравенства в точке \mathbf{X}^* являются пассивными, то из этой точки можно двигаться по произвольному направлению, если только шаг не будет слишком большим. В этом случае все направления перемещений в пространстве параметров оптимизации становятся *возможными* в пределах хотя бы малой ε -окрестности \mathbf{X}^* . С точки зрения условий оптимальности, возникшая ситуация в ε -окрестности \mathbf{X}^* будет неотличима от той, которая наблюдается в задаче без ограничений, и, стало быть, здесь следует применять условия (0.6) или (0.10), несмотря на формальное наличие

ограничений.

Из сказанного следует, что специфические условия оптимальности в задаче (0.11) по отношению к (0.3) будут возникать только в том случае, когда в \mathbf{X}^* имеются активные ограничения. Их удобно выделить в отдельную систему уравнений:

$$\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{X} = \tilde{\mathbf{B}}, \quad (0.21)$$

где $\tilde{\mathbf{A}}$ - матрица размерностью $t \times n$, составленная из строк матрицы \mathbf{A} , соответствующих активным ограничениям; $\tilde{\mathbf{B}}$ - вектор, составленный из t элементов \mathbf{B} , соответствующих активным ограничениям (предполагается, что порядок выборки строк матрицы $\tilde{\mathbf{A}}$ из \mathbf{A} и элементов $\tilde{\mathbf{B}}$ из \mathbf{B} является одинаковым). Строками матрицы $\tilde{\mathbf{A}}$ являются нормали к активным ограничениям:

$$\tilde{\mathbf{A}}^T = (\tilde{\mathbf{N}}_1 | \tilde{\mathbf{N}}_2 | \dots | \tilde{\mathbf{N}}_t)$$

Мы будем предполагать, что все векторы нормалей являются линейно независимыми, поэтому $t \leq n$.

Рассмотрим теперь активное ограничение индексом k . По отношению к нему можно выделить два типа возможных направлений перемещения, не приводящих к выходу за пределы допустимой области (см. рис. 9). При направлении движения типа «а» ограничение продолжает оставаться активным. Подобное направление называется *удерживающим* относительно k -го ограничения. При направлении перемещения типа «b» ограничение переходит в разряд пассивных. Это направление является *неудерживающим* относительно k -го ограничения.

Вектор \mathbf{P} удерживающего направления относительно k -го активного ограничения, очевидно, должен быть ортогонален нормали $\tilde{\mathbf{N}}_k$ к данному ограничению:

$$\tilde{\mathbf{N}}_k^T \mathbf{P} = 0 \quad (0.22)$$

Вектор \mathbf{P} неудерживающего направления относительно k -го активного ограничения, должен составлять острый угол с нормалью к данному ограничению, направленной внутрь допустимой области:

$$\tilde{\mathbf{N}}_k^T \mathbf{P} > 0 \quad (0.23)$$

С учетом (0.22) и (0.23), все возможные направления $\square \mathbf{X}$ должны удовлетворять следующему соотношению:

$$\tilde{\mathbf{A}} \square \mathbf{X} \geq 0 \quad (0.24)$$

При этом направления, удовлетворяющие строгому равенству в (0.24), являются удерживающими относительно всех ограничений и определяют перемещение вдоль границы допустимой области.. Направления, удовлетворяющие строгому неравенству в (0.24), ведут внутрь допустимой области, поскольку $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{X}^* + \square \mathbf{X}) = \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{X}^* + \tilde{\mathbf{A}}\square \mathbf{X} = \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{A}}\square \mathbf{X} > \tilde{\mathbf{B}}$.

Полученное выражение (0.24) позволяет сделать вывод о том, что первая часть задачи построения условий оптимальности для (0.20) решена: мы определили, каким требованиям должен удовлетворять вектор возможного

направления.

Переходя к рассмотрению второй части, которая состоит в выводе самих соотношений, характеризующих оптимальность, выделим первоначально среди множества векторов возможных направлений $\square \mathbf{X}$ только удерживающие относительно всех ограничений, то есть удовлетворяющие соотношению:

$$\tilde{\mathbf{A}} \square \mathbf{X} = 0 \quad (0.25)$$

Поскольку (0.25) по сути совпадает с (0.12), мы фактически пришли к ситуации, когда работа с ограничениями-неравенствами осуществляется так же, как с равенствами. Поэтому в точке \mathbf{X}^* должны соблюдаться необходимые условия оптимальности первого и второго порядка, описанные в предыдущем разделе:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) &= \tilde{\mathbf{A}}^T \boldsymbol{\Lambda}^* \\ \mathbf{Z}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) \mathbf{Z} &\geq 0 \end{aligned} \quad (0.26)$$

где $\boldsymbol{\Lambda}^*$ - вектор множителей, состоящий из t элементов; \mathbf{Z} - матрица линейного подпространства, все векторы которого ортогональны нормальям активных ограничений (строкам матрицы $\tilde{\mathbf{A}}$).

Выражения (0.26) обеспечивают стационарность оценочной функции только вдоль удерживающих направлений. Однако помимо них существуют еще и не удерживающие направления. Поэтому для обеспечения локальной оптимальности к (0.26) следует добавить еще какое-то дополнительное условие. Это условие должно гарантировать, что вдоль любых направлений, удовлетворяющих (0.24), при перемещении из точки \mathbf{X}^* не будет наблюдаться уменьшение оценочной функции.

С учетом (0.8), неубывание целевой функции при движении вдоль $\square \mathbf{X}$ будет выполнено при соблюдении требования:

$$\square \mathbf{X}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) \geq 0 \quad (0.27)$$

Докажем, что одновременные требования (0.24), (0.27) и условий первого порядка (0.26) удовлетворяются, когда $\boldsymbol{\Lambda}^* \geq 0$. Другими словами, точка \mathbf{X}^* не может быть оптимальной, если среди множителей Лагранжа найдутся отрицательные числа.

Подставим выражение для градиента оценочной функции $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \tilde{\mathbf{A}}^T \boldsymbol{\Lambda}^*$, записанное в (0.26), в левую часть (0.27):

$$\square \mathbf{X}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{G}^T(\mathbf{X}^*) \square \mathbf{X} = (\tilde{\mathbf{A}} \boldsymbol{\Lambda}^*)^T \square \mathbf{X} = (\boldsymbol{\Lambda}^*)^T \tilde{\mathbf{A}} \square \mathbf{X} = \sum_{i=1}^t \lambda_i^* \mathbf{N}_i^T \square \mathbf{X} \quad (0.28)$$

Действуя от противного, предположим, что для некоторого индекса k $\lambda_k^* < 0$. Тогда, в силу линейной независимости нормалей к активным ограничениям, найдется вектор не удерживающего направления такой, что:

$$\begin{cases} \mathbf{N}_i^T \square \mathbf{X} = 0, & i \neq k, \\ \mathbf{N}_k^T \square \mathbf{X} > 0 \end{cases} \quad (0.29)$$

Подставляя полученные выражения в (0.28), находим $\square \mathbf{X}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) < 0$, что

противоречит (0.27), а следовательно, исходному посылу о возможности $\lambda_k^* < 0$.

Доказанное нами условие совпадает с результатом, который был впервые получен независимо Фаркашем и Минковским и сформулирован в теореме, носящей их имя.

Обобщая сказанное, мы приходим к необходимым условиям оптимальности в задаче (0.20). Напомним, что эти условия рассматриваются только при наличии активных ограничений. При отсутствии таковых в точке локального минимума нужно использовать условия оптимальности в задаче без ограничений.

Необходимые условия минимума задачи математического программирования с линейными ограничениями-неравенствами:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{X}^* &\geq \mathbf{B}, \quad \text{причем } \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{X}^* = \tilde{\mathbf{B}} \\ \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) &= \tilde{\mathbf{A}}^T \boldsymbol{\Lambda}^*, \quad \boldsymbol{\Lambda}^* \geq 0 \\ \mathbf{Z}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) \mathbf{Z} &\geq 0 \end{aligned} \quad (0.30)$$

Рассмотрим геометрическую интерпретацию полученных необходимых условий нулевого и первого порядка для задачи с двумя переменными (рис. 10).

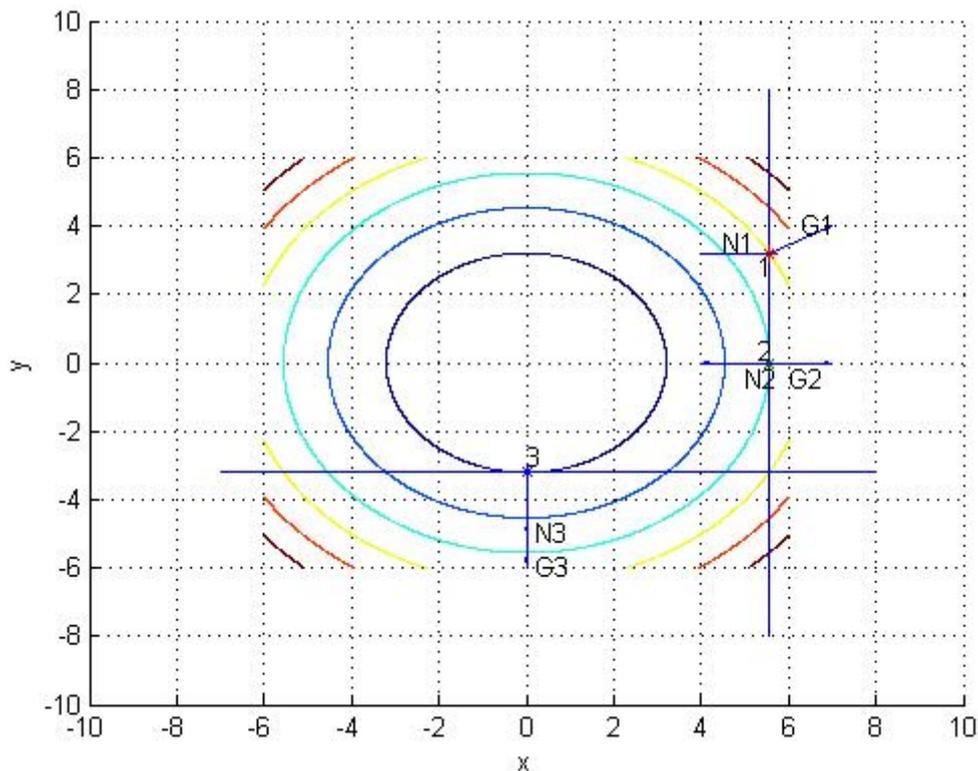


Рис. 10

На рисунке изображены три точки. Точка 1 не может быть оптимальной

так как градиент $\mathbf{G}_1 \neq \lambda_1 \mathbf{N}_1$, то есть не является линейной комбинацией нормалей к активным ограничениям (в данном случае – не лежит на одной прямой с нормалью к единственному активному ограничению). Точка 2 также не может быть оптимальной: хотя $\mathbf{G}_2 = \lambda_2 \mathbf{N}_2$, но $\lambda_2 < 0$ (векторы нормали к активному ограничению и градиента противоположно направлены). И только в точке 3 $\mathbf{G}_3 = \lambda_3 \mathbf{N}_3$, $\lambda > 0$ соблюдаются необходимые условия оптимальности (векторы нормали к активному ограничению и градиента оценочной функции сонаправлены).

Следует заметить, что для задачи с линейными ограничениями-неравенствами, как и для задачи с линейными равенствами, можно построить функцию Лагранжа в виде:

$$L(\mathbf{X}, \Lambda) = \varphi(\mathbf{X}) - \Lambda^T (\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{X} - \tilde{\mathbf{B}})$$

Множители Λ имеют в задаче с ограничениями-неравенствами важное смысловое значение. Возьмем направление $\square \mathbf{X}$, неудерживающее по отношению к k -му активному ограничению и удерживающее ко всем остальным – так, как мы это сделали в (0.29). Тогда (0.28) можно переписать в виде:

$$\square \mathbf{X}^T \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \lambda_k^* \mathbf{N}_k^T \square \mathbf{X}$$

Из разложения оценочной функции в ряд Тейлора (0.7) при $\varepsilon \rightarrow 0$, неизменной точке \mathbf{X}^* и выбранном направлении $\square \mathbf{X}$ вытекает, что:

$$\frac{d\varphi(\varepsilon)}{\varepsilon} = \lambda_k^* \mathbf{N}_k^T \square \mathbf{X}.$$

где $\frac{d\varphi(\varepsilon)}{\varepsilon}$ фактически представляет собой скорость изменения целевой функции. Разлагая аналогично в ряд Тейлора функцию $\bar{c}_k(\mathbf{X})$, получим:

$$\frac{d\varphi(\varepsilon)}{\varepsilon} = \lambda_k^* \frac{d\bar{c}_k(\varepsilon)}{\varepsilon} \quad (0.31)$$

Полученное выражение означает, что в первом приближении (с точностью до линейных членов разложений в ряд Тейлора) скорость изменения оценочной функции вдоль направления, неудерживающего по отношению к k -му активному ограничению и удерживающего ко всем остальным, оказывается пропорциональной множителю Лагранжа λ_k^* . Поэтому при положительном множителе оценочная функция будет возрастать, а при отрицательном – убывать. С другой стороны, из (0.31) следует, что величина множителя λ_k^* характеризует чувствительность оценочной функции к возмущению активного ограничения $\bar{c}_k(\mathbf{X})$, ибо

$$\lambda_k^* = \frac{d\varphi(\varepsilon)}{d\bar{c}_k(\varepsilon)}.$$

Анализ (0.31) также показывает, что при нулевом множителе Лагранжа влияние ограничения ослаблено; говорят, что оно *слабо активно*. Оценочная функция в этом случае ведет себя стационарно, но только *в первом*

приближении. Нулевой множитель не дает информации об истинном знаке изменения оценочной функции, поэтому вывода о том, что функция не начнет уменьшаться при перемещении по направлению $\square \mathbf{X}$ сделать нельзя.

Продemonстрируем это на примере. Рассмотрим задачу математического программирования:

$$\begin{aligned} \varphi(x_1, x_2) &= x_1^2 - x_2^2 \rightarrow \min \\ x_2 &\geq 0 \end{aligned}$$

На рисунке 11 изображены линии уровня оценочной функции и нулевая линия уровня ограничения-неравенства. В точке $\mathbf{X}^* = (0 \ 0)^T$ единственное ограничение является активным и приводится к виду $0 \cdot x_1 + x_2 = 0$. Далее имеем:

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{A} = (0 \ 1); \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \lambda^* \Rightarrow \lambda^* = 0; \quad \mathbf{H} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$$

Матрица \mathbf{Z} имеет $n - m = 2 - 1 = 1$ столбец, поэтому ее можно представить любым вектором, для которого $\mathbf{AZ} = 0$. Например, можно взять $\mathbf{Z} = (1 \ 0)^T$. Тогда:

$$\mathbf{Z}^T \mathbf{H} \mathbf{Z} = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2$$

Как мы видим, все необходимые условия (0.30) соблюдаются. Однако этого не достаточно для утверждения, что выбранная точка является локальным минимумом. И в действительности она таковой не является, поскольку, например, перемещение из нее вдоль положительного направления оси Ox_2 приводит к уменьшению оценочной функции.

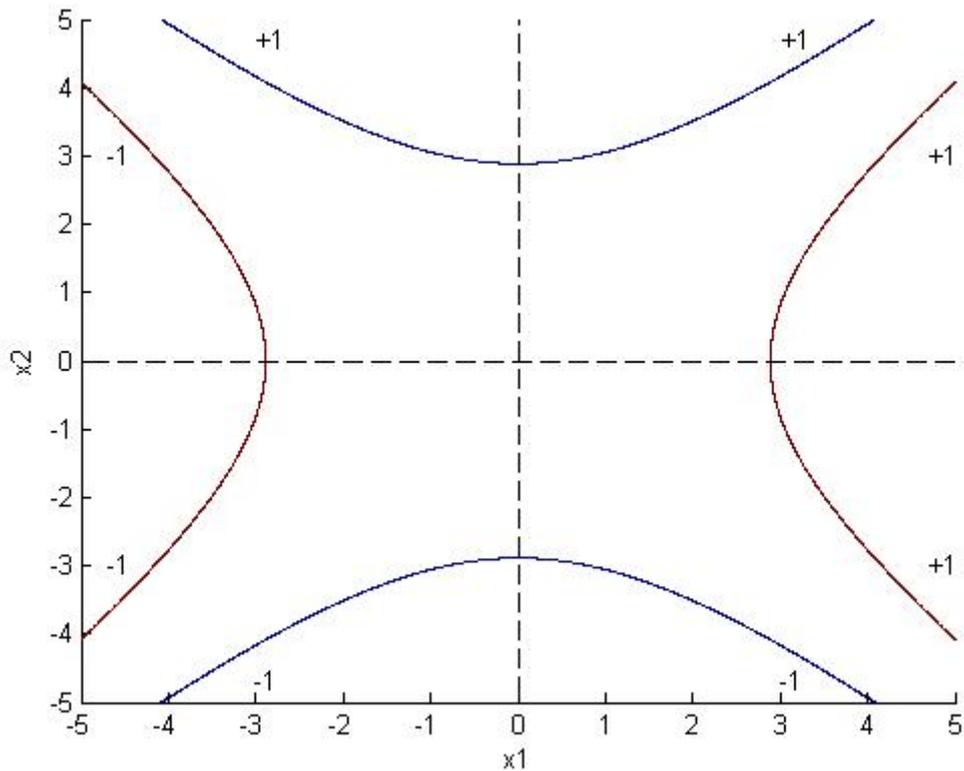


Рис 11

Из сказанного следует, что мы можем построить достаточные условия оптимальности на основе требования положительности множителей Лагранжа активных ограничений. По отношению к (0.30) еще необходимо обеспечить положительную определенность матрицы $\mathbf{Z}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) \mathbf{Z}$ (это вытекает из рассмотрения направлений перемещения, удерживающих относительно всех ограничений, так как полученная задача неотличима от случая линейных ограничений-равенств).

Достаточные условия минимума задачи математического программирования с линейными ограничениями-неравенствами:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A}\mathbf{X}^* &\geq \mathbf{B}, \quad \text{причем } \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{X}^* = \tilde{\mathbf{B}} \\
 \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) &= \tilde{\mathbf{A}}^T \boldsymbol{\Lambda}^*, \quad \boldsymbol{\Lambda}^* > 0 \\
 \mathbf{Z}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) \mathbf{Z} &> 0
 \end{aligned}
 \tag{0.32}$$

1.5.4. Условия оптимальности в задачах с нелинейными ограничениями-равенствами

Рассмотрим задачу математического программирования с нелинейными ограничениями-равенствами

$$\begin{aligned}
 \varphi(\mathbf{X}) &\rightarrow \min \\
 \mathbf{C}(\mathbf{X}) &= 0
 \end{aligned}
 \tag{0.33}$$

Поскольку все функции $c_i(\mathbf{X})$, входящие в (0.33), предполагаются нелинейными, то им соответствуют многомерные поверхности, нулевые уровни которых будут криволинейными. Вследствие этого, и возможные перемещения будут представлять собой направленные кривые в \square^n . Положение точек на них удобно задавать с помощью скалярной переменной – длины шага α . В результате любое возможное направление определяется с помощью векторной функции скалярного аргумента $\mathbf{U}(\alpha)$, $\alpha \geq 0$, которая называется *допустимой дугой*. В контексте рассматриваемой задачи будем считать, что $\mathbf{U}(0) = \mathbf{X}^*$.

В каждой точке допустимой дуги как значение любой функции ограничения, так и величина скорости ее изменения (то есть производная по параметру α) должны быть равны нулю. В частности, при нулевом значении α имеем:

$$\frac{dc_i[\mathbf{U}(\alpha)]}{d\alpha} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

Применяя правило дифференцирования сложной функции, получим:

$$\frac{dc_i[\mathbf{U}(\alpha)]}{d\alpha} = (\nabla c_i[\mathbf{U}(0)])^T \frac{d\mathbf{U}(\alpha)}{d\alpha} = (\nabla c_i(\mathbf{X}^*))^T \square \mathbf{X}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (0.34)$$

где через $\nabla c_i(\mathbf{X}^*)$ обозначен градиент функции $c_i(\mathbf{X})$, а через $\square \mathbf{X}$ – касательный к допустимой дуге вектор в точке \mathbf{X}^* . Вектор $\square \mathbf{X}$, касающийся допустимой дуги, называется *допустимым направлением в точке \mathbf{X}^** (понятно, что это направление может рассматриваться как возможное только в бесконечно малой окрестности \mathbf{X}^*). Выражение (0.34) удобно переписать с помощью матрицы частных производных функций ограничений по параметрам оптимизации (матрицы Якоби), вычисленных в точке \mathbf{X}^* :

$$\mathbf{A}(\mathbf{X}^*) \square \mathbf{X} = 0 \quad (0.35)$$

где через $\mathbf{A}(\mathbf{X})$ обозначена матрица Якоби. Заметим, что формулу (0.35) можно получить и другим путем. Разлагая функции $\mathbf{C}(\mathbf{X})$ в ряд Тейлора по направлению $\square \mathbf{X}$ в окрестности \mathbf{X}^* и оставляя только первые два члена разложения, имеем:

$$\mathbf{C}(\mathbf{X}) = \mathbf{C}(\mathbf{X}^* + \square \mathbf{X}) \approx \mathbf{C}(\mathbf{X}^*) + \mathbf{A}(\mathbf{X}^*) \square \mathbf{X} \quad (0.36)$$

Так как точки \mathbf{X} и \mathbf{X}^* должны быть допустимыми, то $\mathbf{C}(\mathbf{X}) = \mathbf{C}(\mathbf{X}^*) = 0$, откуда получаем (0.35).

Выражение (0.35) сильно напоминает полученную нами формулу для линейных ограничений (0.12), с той лишь разницей, что элементы матрицы \mathbf{A} для нелинейных ограничений являются функциями и зависят от переменных \mathbf{X} . Однако это сходство чисто формальное. В случае с линейными ограничениями вектор $\square \mathbf{X}$ обозначал возможное направление и каждому $\square \mathbf{X}$, удовлетворяющему (0.12), соответствовало такое возможное направление. Для нелинейных ограничений $\square \mathbf{X}$ обозначает касательный к допустимой дуге вектор; из существования допустимой дуги вытекает зависимость (0.35); однако это не означает, что для любого вектора $\square \mathbf{X}$, для которого

справедливо (0.35), существует допустимая дуга. Сказанное иллюстрирует рис. 12.

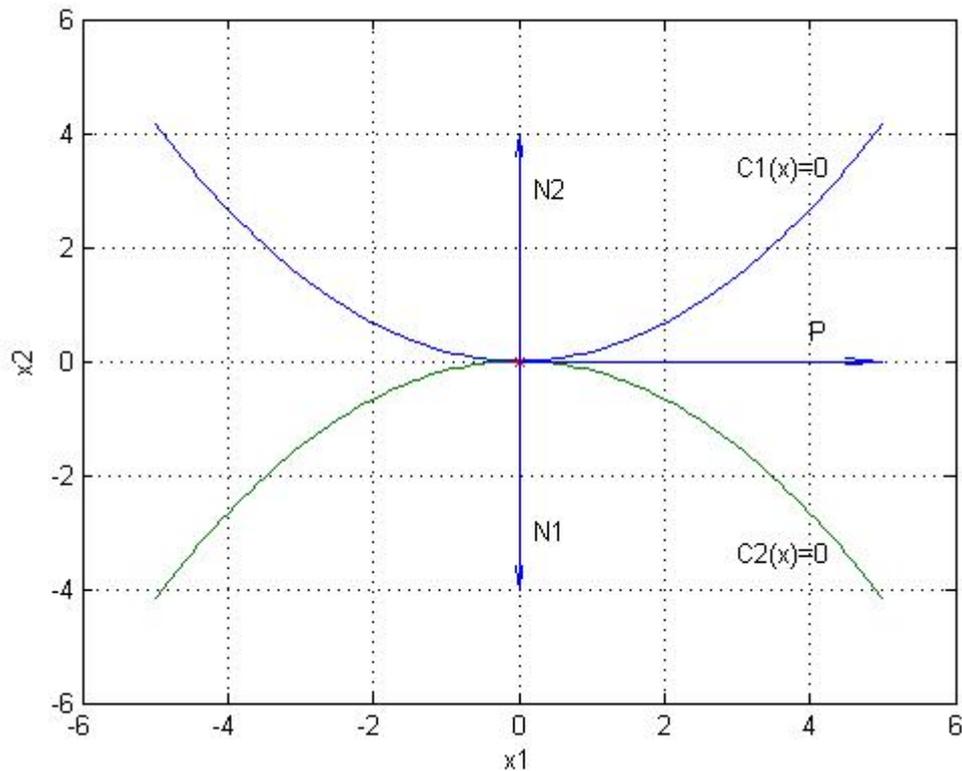


Рис. 12

На рисунке отображены нулевые линии уровня двух функций ограничений-равенств, касающиеся друг друга в точке \mathbf{X}^* , и общий касательный вектор $\square \mathbf{X}$ этих кривых. Очевидно, что $\square \mathbf{X}$ ортогонален нормальям обоим ограничениям, поэтому условие (0.35) соблюдается. Но из точки \mathbf{X}^* не исходит ни одной допустимой дуги, потому что \mathbf{X}^* - это единственная допустимая точка в задаче.

Для того чтобы каждому вектору $\square \mathbf{X}$, удовлетворяющему (0.35), соответствовала допустимая дуга, точки которой необходимы нам для определения оптимальности \mathbf{X}^* , следует ввести дополнительные требования к набору ограничений, входящих в задачу математического программирования. Данные требования называются *условиями регулярности*, или *условиями выделения ограничений*. Выполнение условий регулярности обеспечивает необходимость и достаточность (0.35) для того, чтобы направление $\square \mathbf{X}$ было допустимым в точке \mathbf{X}^* , то есть, чтобы вектор $\square \mathbf{X}$ касался дуги, допустимой в \mathbf{X}^* .

Существует довольно много типов условий регулярности. Однако с практической точки зрения, наиболее важным является достаточное условие регулярности, которое состоит в линейной независимости градиентов функций ограничений (линейной независимости строк матрицы Якоби функций ограничений).

В дальнейшем изложении мы *повсеместно* будем предполагать, что данное достаточное условие регулярности *соблюдается*.

При таком предположении мы можем приступить к выводу необходимых условий первого порядка в задаче (0.33). Если \mathbf{X}^* - точка локального минимума, то функция $\varphi[\mathbf{U}(\alpha)]$ должна быть в ней стационарна. Используя (0.4) и применяя правило дифференцирования сложной функции, для любого $\square \mathbf{X}$, удовлетворяющего (0.35), получим:

$$\frac{d\varphi[\mathbf{U}(\alpha)]}{d\alpha} = (\nabla \varphi[\mathbf{U}(0)])^T \frac{d\mathbf{U}(\alpha)}{d\alpha} = \mathbf{G}^T(\mathbf{X}^*) \square \mathbf{X} = 0 \quad (0.37)$$

По аналогии со случаем линейных ограничений-равенств, для описания множества векторов, удовлетворяющих (0.35), мы можем построить базис подпространства векторов, ортогональных строкам $\mathbf{A}(\mathbf{X}^*)$ (нормалям к ограничениям), и составить его в виде столбцов матрицы $\mathbf{Z}(\mathbf{X}^*)$. Тогда любой вектор допустимого направления представляется в виде:

$$\square \mathbf{X} = \mathbf{Z}(\mathbf{X}^*) \square \bar{\mathbf{X}} \quad (0.38)$$

Подставляя (0.38) в (0.37) и замечая то, что полученное соотношение должно соблюдаться для любых векторов $\square \bar{\mathbf{X}}$, можно сделать вывод о том, что:

$$\mathbf{Z}^T(\mathbf{X}^*) \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = 0, \quad (0.39)$$

то есть, спроектированный вектор градиента $\mathbf{Z}^T(\mathbf{X}^*) \mathbf{G}(\mathbf{X}^*)$ должен быть нулевым, как и при линейных ограничениях. Из (0.39) вытекает:

$$\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{A}^T(\mathbf{X}^*) \boldsymbol{\Lambda}^* \quad (0.40)$$

Полученное условие соответствует стационарной точке функции Лагранжа, которая для данной задачи имеет вид:

$$L(\mathbf{X}, \boldsymbol{\Lambda}) = \varphi(\mathbf{X}) - \boldsymbol{\Lambda}^T \mathbf{C}(\mathbf{X}) \quad (0.41)$$

Перейдем теперь к рассмотрению необходимых условий второго порядка. Найдем приращения оценочной функции и функций ограничений при перемещении из \mathbf{X}^* в допустимую точку $\mathbf{X}^* + \varepsilon \mathbf{P}$, расположенную на допустимой дуге с длиной шага α , разложив все функции в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} \square \varphi(\mathbf{X}^*) &= \varphi(\mathbf{X}^* + \varepsilon \mathbf{P}) - \varphi(\mathbf{X}^*) = \\ &= \varepsilon \mathbf{G}^T(\mathbf{X}^*) \mathbf{P} + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \mathbf{P}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) \mathbf{P} + O(\varepsilon \mathbf{P}) \end{aligned} \quad (0.42)$$

$$\begin{aligned} \square c_i(\mathbf{X}^*) &= c_i(\mathbf{X}^* + \varepsilon \mathbf{P}) - c_i(\mathbf{X}^*) = \\ &= \varepsilon \mathbf{N}_i^T(\mathbf{X}^*) \mathbf{P} + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \mathbf{P}^T \mathbf{H}_i(\mathbf{X}^*) \mathbf{P} + O(\varepsilon \mathbf{P}) \end{aligned} \quad (0.43)$$

$i = 1, 2, \dots, m$

где через $\mathbf{N}_i(\mathbf{X}^*)$, $\mathbf{H}_i(\mathbf{X}^*)$ обозначены соответственно градиенты и матрицы Гессе функций ограничений-равенств в точке \mathbf{X}^* ; $O(\varepsilon \mathbf{P})$ - условно обозначены члены высших порядков по $\varepsilon \mathbf{P}$. Умножая разложения (0.43) на λ_i^* и вычитая их из (0.42), получим:

$$\begin{aligned} \square \varphi(\mathbf{X}^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \square c_i(\mathbf{X}^*) &= \varepsilon [\mathbf{G}^T(\mathbf{X}^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \mathbf{N}_i^T(\mathbf{X}^*)] \mathbf{P} + \\ &+ \frac{1}{2} \varepsilon^2 [\mathbf{P}^T (\mathbf{H}(\mathbf{X}^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \mathbf{H}_i(\mathbf{X}^*)) \mathbf{P}] + O(\varepsilon \mathbf{P}) \end{aligned}$$

Так как точки \mathbf{X}^* и $\mathbf{X}^* + \varepsilon \mathbf{P}$ допустимые, то $\square c_i(\mathbf{X}^*) = 0, i = 1, 2, \dots, m$.

Кроме того, $\mathbf{G}^T(\mathbf{X}^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \mathbf{N}_i^T(\mathbf{X}^*) = 0$ в силу (0.40). Тогда полученное выражение преобразуется к виду:

$$\square \varphi(\mathbf{X}^*) = \frac{1}{2} \varepsilon^2 [\mathbf{P}^T (\mathbf{H}(\mathbf{X}^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \mathbf{H}_i(\mathbf{X}^*)) \mathbf{P}] + O(\varepsilon \mathbf{P})$$

Если теперь $\alpha \rightarrow 0$, то $\varepsilon \rightarrow 0$, а $\mathbf{P} \rightarrow \square \mathbf{X}$. Пренебрегая членами высших порядков малости и заменяя \mathbf{P} на $\square \mathbf{X}$, приходим к следующей зависимости:

$$\square \varphi(\mathbf{X}^*) = \frac{1}{2} \varepsilon^2 [\square \mathbf{X}^T (\mathbf{H}(\mathbf{X}^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \mathbf{H}_i(\mathbf{X}^*)) \square \mathbf{X}]$$

или, с учетом (0.38):

$$\square \varphi(\mathbf{X}^*) = \frac{1}{2} \varepsilon^2 [\square \bar{\mathbf{X}}^T \mathbf{Z}^T (\mathbf{H}(\mathbf{X}^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \mathbf{H}_i(\mathbf{X}^*)) \mathbf{Z} \square \bar{\mathbf{X}}]$$

Если \mathbf{X}^* - точка локального минимума, то необходимо $\square \varphi(\mathbf{X}^*) \geq 0$. Поскольку данное неравенство должно соблюдаться при любых $\square \bar{\mathbf{X}}$, то из этого следует, что $\mathbf{Z}^T(\mathbf{X}^*) (\mathbf{H}(\mathbf{X}^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \mathbf{H}_i(\mathbf{X}^*)) \mathbf{Z}(\mathbf{X}^*) \geq 0$. Замечая, что слева от операнда стоит спроектированная матрица Гессе функции Лагранжа, мы приходим к окончательной формулировке необходимых условий оптимальности в задаче (0.33):

Необходимые условия минимума задачи математического программирования с нелинейными ограничениями-равенствами:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}(\mathbf{X}^*) &= 0 \\ \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) &= \mathbf{A}^T(\mathbf{X}^*) \mathbf{\Lambda}^* \\ \mathbf{Z}^T(\mathbf{X}^*) \mathbf{W}(\mathbf{X}^*, \mathbf{\Lambda}^*) \mathbf{Z}(\mathbf{X}^*) &\geq 0 \end{aligned} \quad (0.44)$$

где через $\mathbf{W}(\mathbf{X}^*, \mathbf{\Lambda}^*)$ обозначена матрица Гессе функции Лагранжа, вычисляемая путем нахождения вторых частных производных по параметрам оптимизации функции (0.41) при $\mathbf{X} = \mathbf{X}^*, \mathbf{\Lambda} = \mathbf{\Lambda}^*$.

Используя принципы доказательства, рассмотренные выше, можно получить достаточные условия оптимальности в задаче (0.33).

Достаточные условия минимума задачи математического программирования с нелинейными ограничениями-равенствами:

$$\begin{aligned}
C(\mathbf{X}^*) &= 0 \\
\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) &= \mathbf{A}^T(\mathbf{X}^*)\boldsymbol{\Lambda}^* \\
\mathbf{Z}^T(\mathbf{X}^*)\mathbf{W}(\mathbf{X}^*, \boldsymbol{\Lambda}^*)\mathbf{Z}(\mathbf{X}^*) &> 0
\end{aligned}
\tag{0.45}$$

1.5.5. Условия оптимальности в задачах с нелинейными ограничениями-неравенствами

В данном разделе нас будет интересовать задача математического программирования вида:

$$\begin{aligned}
\varphi(\mathbf{X}) &\rightarrow \min \\
\bar{C}(\mathbf{X}) &\geq 0
\end{aligned}
\tag{0.46}$$

При выводе условий оптимальности в (0.46) по аналогии используются понятия, введенные нами в предыдущих разделах пособия. В частности, среди всех ненарушенных ограничений выделяются активные и пассивные. Возможности перемещения вблизи точки \mathbf{X}^* сдерживаются только активными ограничениями, а пассивные допускают любые достаточно малые движения относительно этой точки. Если все ограничения пассивны, то необходимо использовать условия оптимальности при отсутствии ограничений. Вывод условий оптимальности опирается на понятия удерживающих и недерживающих направлений, а также допустимой дуги. На этой основе рассматриваются перемещения вдоль удерживающих и недерживающих дуг. Для активных ограничений предполагается соблюдение требований регулярности, достаточным условием которых является полный строковый ранг их матрицы Якоби.

Исходя из того, что в целом ход доказательства понятен, мы сразу приведем необходимые, а затем достаточные условия оптимальности в задаче (0.46).

Необходимые условия минимума задачи математического программирования с нелинейными ограничениями-неравенствами:

$$\begin{aligned}
\bar{C}(\mathbf{X}^*) &\geq 0, \text{ причем } \tilde{C}(\mathbf{X}^*) = 0 \\
\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) &= \tilde{\mathbf{A}}^T(\mathbf{X}^*)\boldsymbol{\Lambda}^*, \boldsymbol{\Lambda}^* \geq 0 \\
\mathbf{Z}^T(\mathbf{X}^*)\mathbf{W}(\mathbf{X}^*, \boldsymbol{\Lambda}^*)\mathbf{Z}(\mathbf{X}^*) &\geq 0
\end{aligned}
\tag{0.47}$$

где $\tilde{C}(\mathbf{X}^*)$ - вектор функций активных ограничений в точке \mathbf{X}^* ; $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{X}^*)$ - матрица Якоби функций активных ограничений; $\mathbf{Z}(\mathbf{X}^*)$ - матрица базиса подпространства векторов, ортогональных нормальям активных ограничений; $\mathbf{W}(\mathbf{X}^*, \boldsymbol{\Lambda}^*)$ - вычисленная при $\mathbf{X}=\mathbf{X}^*$, $\boldsymbol{\Lambda}=\boldsymbol{\Lambda}^*$ матрица Гессе функции Лагранжа, которая имеет вид:

$$L(\mathbf{X}, \boldsymbol{\Lambda}) = \varphi(\mathbf{X}) - \boldsymbol{\Lambda}^T \tilde{C}(\mathbf{X})$$

Достаточные условия оптимальности приводятся с учетом требования

положительности множителей Лагранжа, так как это было в случае линейных ограничений-неравенств.

Достаточные условия минимума задачи математического программирования с нелинейными ограничениями-неравенствами:

$$\begin{aligned}\bar{C}(\mathbf{X}^*) &\geq 0, \text{ причем } \tilde{C}(\mathbf{X}^*) = 0 \\ \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) &= \tilde{\mathbf{A}}^T(\mathbf{X}^*)\Lambda^*, \Lambda^* > 0 \\ \mathbf{Z}^T(\mathbf{X}^*)\mathbf{W}(\mathbf{X}^*, \Lambda^*)\mathbf{Z}(\mathbf{X}^*) &> 0\end{aligned}\quad (0.48)$$

1.5.6. Условия оптимальности в задачах математического программирования общего вида

В завершении разделов, посвященных условиям оптимальности, мы рассмотрим задачу МП общего вида (0.2). Условия оптимальности в этой задаче можно записать как обобщение полученных ранее выражений (0.44), (0.45), (0.47) и (0.48). Обозначим через Λ_1 и Λ_2 множители Лагранжа соответственно функций ограничений-равенств и функций активных ограничений-неравенств; $\mathbf{A}(\mathbf{X}^*)$ - матрицу Якоби, составленную из частных производных по параметрам оптимизации функций ограничений-равенств (верхние строки) и функций активных ограничений-неравенств (нижние строки); $\mathbf{Z}(\mathbf{X}^*)$ - матрицу базиса подпространства векторов, ортогональных строкам $\mathbf{A}(\mathbf{X}^*)$; $\mathbf{W}(\mathbf{X}^*, \Lambda^*)$ - вычисленную при $\mathbf{X}=\mathbf{X}^*$, $\Lambda^T = (\Lambda_1^{*T} | \Lambda_2^{*T})$ матрицу Гессе функции Лагранжа, которая имеет вид:

$$\begin{aligned}L(\mathbf{X}, \Lambda_1, \Lambda_2) &= \varphi(\mathbf{X}) - \Lambda_1^T \mathbf{C}(\mathbf{X}) - \Lambda_2^T \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{X}) = \varphi(\mathbf{X}) - \begin{pmatrix} \Lambda_1 \\ \Lambda_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \mathbf{C}(\mathbf{X}) \\ \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{X}) \end{pmatrix} = \\ &= \varphi(\mathbf{X}) - \Lambda^T \begin{pmatrix} \mathbf{C}(\mathbf{X}) \\ \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{X}) \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (0.49)$$

Предполагая соблюдение условий регулярности ограничений, мы будем также требовать полный строковый ранг в матрице $\mathbf{A}(\mathbf{X}^*)$. С учетом сказанного, приходим к построению необходимых и достаточных условий оптимальности.

Необходимые условия минимума задачи математического программирования (общий случай)

$$\begin{aligned}\mathbf{C}(\mathbf{X}^*) &= 0 \\ \bar{C}(\mathbf{X}^*) &\geq 0, \text{ причем } \tilde{C}(\mathbf{X}^*) = 0\end{aligned}$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{A}^T(\mathbf{X}^*) \begin{pmatrix} \Lambda_1^* \\ \Lambda_2^* \end{pmatrix}, \Lambda_2^* \geq 0 \quad (0.50)$$

$$\mathbf{Z}^T(\mathbf{X}^*) \mathbf{W}(\mathbf{X}^*, \Lambda^*) \mathbf{Z}(\mathbf{X}^*) \geq 0$$

Достаточные условия минимума задачи математического программирования
(общий случай)

$$\mathbf{C}(\mathbf{X}^*) = 0$$

$$\bar{\mathbf{C}}(\mathbf{X}^*) \geq 0, \text{ причем } \tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{X}^*) = 0$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{A}^T(\mathbf{X}^*) \begin{pmatrix} \Lambda_1^* \\ \Lambda_2^* \end{pmatrix}, \Lambda_2^* > 0 \quad (0.51)$$

$$\mathbf{Z}^T(\mathbf{X}^*) \mathbf{W}(\mathbf{X}^*, \Lambda^*) \mathbf{Z}(\mathbf{X}^*) > 0$$

1.5.7. Комментарии к разделу «Условия оптимальности»

Подводя итог условиям оптимальности, необходимо сделать ряд замечаний, касающихся их описания в литературе, вследствие различия терминов и подходов, применяемых авторами.

1. Необходимые условия оптимальности первого порядка в задаче МП с ограничениями общего вида были впервые получены Вильямом Карушем, а также независимо от него Гарольдом Куном и Альбертом Таккером. Поэтому часто в литературных источниках они в совокупности с условиями нулевого порядка именуется условиями Каруша-Куна-Таккера, или условиями Куна-Таккера. Кроме того, множители Лагранжа также нередко называют множителями Куна-Таккера, а условно стационарную точку – точкой Куна-Таккера.

2. При определении функции Лагранжа следует обращать внимание на постановку задачи математического программирования. Многие авторы в стандартной постановке задачи МП ограничения-неравенства записывают в виде $\bar{\mathbf{C}}(\mathbf{X}) \leq 0$ в отличие от рассмотренных нами $\bar{\mathbf{C}}(\mathbf{X}) \geq 0$. Тогда все слагаемые в функции Лагранжа выбирают со знаком «плюс». Например, (0.49) переписывается следующим образом:

$$L(\mathbf{X}, \Lambda_1, \Lambda_2) = \varphi(\mathbf{X}) + \Lambda_1^T \mathbf{C}(\mathbf{X}) + \Lambda_2^T \bar{\mathbf{C}}(\mathbf{X})$$

При этом в условиях оптимальности сохраняется требование положительности или неотрицательности множителей, соответствующих ограничениям-неравенствам, а знак ограничений-равенств безразличен и выбирается из соображений удобства.

3. Во многих монографиях и учебных пособиях множители Лагранжа вводят не только для ограничений-равенств и активных ограничений-неравенств, а для всех ограничений, налагая при этом дополнительно так называемые условия дополняющей нежесткости:

$$\lambda_i c_i(\mathbf{X}^*) = 0 \quad \forall i$$

$$\lambda_j \bar{c}_j(\mathbf{X}^*) = 0 \quad \forall j$$

Очевидно, что если ограничение-неравенство пассивно, то ему приписывается нулевой множитель.

4. В литературе довольно редко встречается описание множества направлений, ортогональных градиентам активных ограничений, с помощью матриц базиса \mathbf{Z} . Поэтому авторы вынуждены использовать в условиях оптимальности термины типа «для любого вектора, ортогонального градиентам активных ограничений, необходимо...». Представляется, однако, что такой способ имеет меньшую практическую ценность, поскольку не отвечает на вопрос, как найти *все* такие векторы. Вычисление же матриц базиса \mathbf{Z} основано на известных алгоритмах, которые реализованы практически в любых популярных пакетах программ, связанных с решением задач матричной и линейной алгебры.

5. Условия Каруша-Куна-Таккера часто рассматривают для задач *выпуклого программирования*, в которых подлежит минимизации выпуклая функция на выпуклом множестве ограничений (в этой связи вначале напомним несколько определений и свойств, известных из курса высшей математики:

- множество называется *выпуклым*, если оно содержит вместе с любыми двумя точками соединяющий их отрезок;

- *выпуклой* (или *выпуклой вниз*) называется функция одной переменной f , определенная на выпуклом множестве \mathbf{S} , если для любых двух точек \mathbf{X} , \mathbf{Y} из этого множества и для любого числа t , принадлежащего отрезку $[0,1]$, выполняется неравенство:

$$f(t\mathbf{X} + (1-t)\mathbf{Y}) \leq tf(\mathbf{X}) + (1-t)f(\mathbf{Y}) \quad (0.52)$$

- если неравенство (0.52) строгое, то функция называется *строго выпуклой*;

- если выполняется обратное неравенство, то функция называется *вогнутой*, или *выпуклой вверх*;

- если ограничения, входящие в (0.2), являются *вогнутыми* функциями, то они образуют *выпуклое* множество).

Интерес к задачам выпуклого программирования связан с тем, что в них локальный минимум является одновременно глобальным. Необходимые условия Каруша-Куна-Таккера в задаче выпуклого программирования являются в то же время достаточными условиями оптимальности.

6. В задачах выпуклого программирования глобальному решению \mathbf{X}^* задачи (0.2) всегда соответствует *седловая точка* функции Лагранжа (0.49), в которой при фиксированных значениях $\Lambda = \Lambda^*$ эта функция имеет минимум по \mathbf{X} , а при фиксированных значениях $\mathbf{X} = \mathbf{X}^*$ и $\Lambda \geq 0$ - максимум по Λ . Поэтому решение задачи МП можно сформулировать как поиск седловой точки функции Лангранжа.

В реальных задачах условие выпуклости является довольно обременительным. Однако для получения достаточного условия оптимальности можно довольствоваться условием локальной выпуклости.

Например, если в окрестности точки \mathbf{X}^* оценочная функция локально строго выпукла, а функции ограничений – локально вогнуты, то матрица Гессе оценочной функции $\mathbf{H}(\mathbf{X}^*)$ будет положительно определенной, а матрицы Гессе функций ограничений $\mathbf{H}_i(\mathbf{X}^*)$ – отрицательно полуопределенными. Поэтому при неотрицательных множителях Лагранжа матрица вторых частных производных по параметрам оптимизации функции Лагранжа становится положительно определенной:

$$\mathbf{W}(\mathbf{X}^*, \Lambda^*) = \mathbf{H}(\mathbf{X}^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \mathbf{H}_i(\mathbf{X}^*) > 0,$$

что приводит к автоматическому выполнению условий второго порядка в (0.51).

7. При анализе условий оптимальности могут встречаться ситуации, когда суммарное количество ограничений-равенств и активных ограничений-неравенств совпадает с количеством параметров оптимизации. Тогда, очевидно, базис \square^n можно полностью построить с помощью линейно независимых векторов нормалей к этим ограничениям. Множество векторов, ортогональных нормальям, является пустым (матрица \mathbf{Z} не содержит ни одного столбца), а удерживающие направления отсутствуют. В этом случае условия нулевого и первого порядка становятся достаточными условиями оптимальности, если только все множители Лагранжа активных ограничений-неравенств являются положительными числами (это требование обеспечивает возрастание оценочной функции при движении по неудерживающим направлениям внутрь допустимой области).

Глава 2 Методы безусловной оптимизации оптических систем

Изучив условия оптимальности в задачах математического программирования, мы можем уже перейти к непосредственному рассмотрению алгоритмов оптимизации, поскольку часть из них напрямую связана с необходимыми условиями существования минимума. При построении алгоритмов мы будем опираться на принципы численной оптимизации, изложенные в разделе 1.4, предусматривающие разделение каждого шага итерационного процесса на несколько отдельных этапов. Вначале рассмотрим общую схему реализации этапов, относящихся к оптимизации без ограничений.

2.1. Общая схема реализации методов безусловной оптимизации

На первом этапе произвольного k -го шага итерационного процесса безусловной минимизации решается задача исследования поведения оценочной функции в окрестности исходной точки шага $\mathbf{X}^{(k-1)}$. Эта исходная, начальная точка получается автоматически как результат предыдущей итерации. И лишь в самом начале оптимизации имеется потребность в ее

непосредственном задании. Стартовая точка $\mathbf{X}^{(0)}$ в многоэкстремальных задачах обычно определяется посредством специального исследования объекта оптимизации, для того чтобы потенциально из нее можно было добраться до глобального минимума. Например, при создании сложных технических систем $\mathbf{X}^{(0)}$ находится в итоге выполнения специфической проектной процедуры, называемой *синтезом*. При отсутствии априорной информации об объекте оптимизации стартовая точка задается наудачу, но в этом случае надеяться на достижение глобального минимума, конечно, не приходится. Однако можно с уверенностью сказать, что в результате локальной оптимизации при правильно построенной оптимизационной модели объект должен быть улучшен при запуске практически из любой стартовой точки. Другое дело, что такое улучшение, может быть, окажется незначительным.

Характер исследования оценочной функции в окрестности исходной точки шага зависит от выбранного метода построения траектории локального спуска. Если метод предусматривает использование частных производных оценочной функции φ по параметрам оптимизации \mathbf{X} , то основное исследование производится в бесконечно малой окрестности $\mathbf{X}^{(k-1)}$ и состоит в вычислении градиента и, возможно, матрицы Гессе φ . Если производные не используются, что характерно для так называемых *методов прямого поиска*, то обычно производятся пробные вычисления оценочной функции. Опять-таки, в зависимости от метода локального спуска, пробные вычисления могут производиться: путем изменения одного из параметров оптимизации, чтобы определить направление убывания φ вдоль соответствующей координатной оси; в вершинах правильного многогранника, генерируемых вблизи $\mathbf{X}^{(k-1)}$ (в качестве правильного многогранника обычно используют гиперкуб или *регулярный симплекс* – многогранник с равноудаленными $n+1$ вершинами в n -мерном пространстве \square^n); наконец, в точках, выбранных случайным образом. На отдельных итерациях методы локального спуска могут использовать информацию, накопленную на предыдущих шагах оптимизации, таким образом расширяя область исследования оценочной функции.

Как следует из сказанного, методы безусловной оптимизации отличаются между собой по использованию или, наоборот, недопущению использования производных функции φ . На первый взгляд, это кажется странным: почему бы не вычислить производные? И это представляется странным вдвойне, так как, оказывается, чем выше порядок используемых производных, тем, как правило, эффективнее работают методы оптимизации.

Дело в том, что во многих задачах оптимизации, не абстрактных, а взятых из физической реальности, точное вычисление первых, а тем более вторых производных сопряжено с большой трудоемкостью процесса, а иногда просто недоступно (например, когда значения оценочной функции вычисляются с помощью сложного алгоритма). Численное же вычисление

производных по приближенной разностной формуле:

$$\frac{\partial \varphi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n)}{\partial x_i} \approx \frac{\varphi(x_1, x_2, \dots, x_i + h_i, \dots, x_n) - \varphi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_n)}{h_i}$$

или даже с использованием известных схем двусторонних разностей нередко дает плохой результат *при неправильном выборе приращений аргументов* $h_i, i = 1, 2, \dots, n$, когда может резко себя проявить или методическая погрешность (погрешность линеаризации функции), или погрешность округления, характерная для арифметики с плавающей запятой. Кроме того, имеется достаточно обширная группа задач, в которых φ является недифференцируемой, и тогда ничего не остается, как использовать только значения целевой функции.

Исторически максимальный порядок используемых производных оказался настолько важной ресурсной характеристикой при выборе эффективного способа построения локального спуска, что даже лег в основу классификации методов безусловной оптимизации. Согласно данному классификационному признаку, методы минимизации без ограничений разделяют на *методы нулевого* (без производных), *первого* и *второго* порядка.

Ради справедливости надо отметить, что в большинстве практических задач замена точных первых производных на вычисленные приближенным способом не сильно сказывается на эффективности метода оптимизации, и поэтому порядок метода можно считать первым вне зависимости от того, аналитически или численно рассчитаны производные. При этом для минимизации методической погрешности и погрешности округления разностных схем производится подбор наилучших приращений h_i . Он обеспечивает, чтобы приращения не были как слишком большими (тогда велика методическая погрешность), так и слишком маленькими (тогда велика погрешность округления). Процедура вычисления h_i обычно организуется только в начале, реже – дополнительно по ходу процесса оптимизации.

Что касается вторых производных, то их нахождение с помощью разностных схем связано со значительным риском потери точности и поэтому осуществляется достаточно редко.

Исследование поведения оценочной функции в окрестности исходной точки шага оптимизации позволяет определить вектор приращений параметров оптимизации $\square \mathbf{X}^{(k)}$, вдоль которого, по крайней мере в малой окрестности $\mathbf{X}^{(k-1)}$, обеспечивается убывание оценочной функции. Способ вычисления $\square \mathbf{X}^{(k)}$ определяется конкретным методом локального спуска, задающим общее название *метода многомерной минимизации* (то есть, минимизации, осуществляемой в пространстве многих измерений общей размерностью n).

На следующем этапе шага оптимизации решается задача определения скалярной переменной длины шага α . Поскольку на данном этапе происходит поиск величины α в пространстве единичной размерности,

который обеспечивает уменьшение оценочной функции по сравнению со значением в начальной точке шага (иначе процесс оптимизации становится расходящимся), уместно назвать этот процесс *одномерным безусловным поиском*. С общих позиций многомерной минимизации суть одномерного безусловного поиска состоит в следующем.

Если траектория локального спуска $\square \mathbf{X}^{(k)}$ корректно определена на втором этапе k -го шага оптимизации и является прямолинейной, то положение точки \mathbf{X} на ней находится с помощью α следующим образом:

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}^{(k-1)} + \alpha \square \mathbf{X}^{(k)}, \alpha \geq 0 \quad (0.53)$$

Ввиду того, что в пределах шага $\mathbf{X}^{(k-1)}$ и $\square \mathbf{X}^{(k)}$ не меняются, все переменные \mathbf{X} становятся зависимыми от единственного параметра α ($\mathbf{X} = \mathbf{X}(\alpha)$), а оценочная функция по сути становится функцией одной переменной: $\varphi = \varphi[\mathbf{X}(\alpha)] \rightarrow \varphi = \varphi(\alpha)$.

Если траектория локального спуска криволинейна, то она задается в виде $\square \mathbf{X}(\alpha)$, причем $\square \mathbf{X}(0) = 0$, вследствие чего положение точки \mathbf{X} на ней находится просто в виде суммы векторов:

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}^{(k-1)} + \square \mathbf{X}^{(k)}(\alpha), \alpha \geq 0 \quad (0.54)$$

И здесь оценочная функция выражается через единственную переменную $\varphi = \varphi(\alpha)$.

Задача одномерного поиска формулируется в нахождении такой величины α^* , которая бы обеспечивала убывание оценочной функции вдоль траектории локального спуска $\varphi(\alpha^*) < \varphi(0)$ (заметим, что в точке локального минимума многомерной задачи $\alpha^* = 0$ и данное неравенство переходит в тривиальное равенство). Таким образом, одномерный поиск приводит к улучшению стартового решения и в этом смысле является *одномерной безусловной оптимизацией*. Другое дело, что часто бывает неизвестно, насколько тщательно эту оптимизацию нужно производить. Поэтому методы одномерной безусловной оптимизации разделяют на две различных группы. Одна группа – назовем ее просто *методами одномерной минимизации* – позволяет находить локальный минимум задачи $\varphi(\alpha) \rightarrow \min$ с заданной степенью точности. Другая группа – группа *методов оценки (или выбора) длины шага* – лишь позволяет дать оценку значения α^* , исходя из некоторых разумных предположений.

Завершающим этапом шага оптимизации является проверка условий выхода из итерационной последовательности приближений к решению задачи математического программирования. С позиций теории здесь следовало бы проверить выполнение достаточных условий оптимальности (0.10). Однако на практике такая проверка сопряжена с рядом проблем.

Во-первых, в методах нулевого порядка недоступны для вычисления $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{X}^*)$, а в методах первого порядка – $\mathbf{H}(\mathbf{X}^*)$, что делает невозможным проверку достаточных условий.

Во-вторых, условие $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = 0$ при использовании арифметики с

плавающей запятой практически никогда соблюдено не будет. Можно говорить только об удовлетворении этого условия с заданной степенью точности:

$$\|\mathbf{G}(\mathbf{X}^*)\| \leq \varepsilon_1, \quad (0.55)$$

где ε_1 - заданная числовая константа, а знаком $\|\cdot\|$ обозначена норма вектора (заметим, что в методах оптимизации для векторов чаще всего используется евклидова норма $\|\mathbf{G}(\mathbf{X}^*)\|_2 = \sqrt{g_1^2(\mathbf{X}^*) + g_2^2(\mathbf{X}^*) + \dots + g_n^2(\mathbf{X}^*)}$ и норма Чебышёва $\|\mathbf{G}(\mathbf{X}^*)\|_\infty = \max_i |g_i(\mathbf{X}^*)|$. По умолчанию мы будем всегда использовать евклидову норму). Однако выбор ε_1 для получения требуемой по задаче точности часто произвести довольно сложно, так как он связан с общим масштабом $\|\mathbf{G}(\mathbf{X})\|$, который нередко заранее неизвестен. Поясним это на примере. Пусть оценочная функция $\varphi(\mathbf{X}) = x_1^2 + x_2^2$, а $\varepsilon = 10^{-5}$. Тогда $\mathbf{G}(\mathbf{X}) = (2x_1 \quad 2x_2)$, и при использовании нормы Чебышёва критерий (0.55) будет соблюдаться, если, например, $x_1 = 0.5 \cdot 10^{-5}$, $x_2 = 0.5 \cdot 10^{-5}$. Данная точка может считаться неплохим приближением к локальному минимуму, находящемуся в начале координат. Однако если $\varphi(\mathbf{X}) = 10^{-20}(x_1^2 + x_2^2)$, то $\mathbf{G}(\mathbf{X}) = (2 \cdot 10^{-20}x_1 \quad 2 \cdot 10^{-20}x_2)$, и критерий (0.55) «сработает» уже для точки $x_1 = 0.5 \cdot 10^{15}$, $x_2 = 0.5 \cdot 10^{15}$, которая, скажем так, довольно далеко отстоит от точки истинного локального минимума. Предсказать масштаб вектора градиента можно лишь путем дополнительных исследований, причем он меняется в зависимости от области исследуемых значений переменных.

Исходя из сказанного, условия оптимальности непосредственно в качестве *абсолютного* критерия останова итераций (критерия, связанного с исследованием абсолютных значений функций) используют редко. Сначала применяют другие критерии, которые свидетельствуют о стационарности сходящегося итерационного процесса, а уже затем исследуют соблюдение достаточных условий оптимальности с заданной степенью точности. Достижение стационарности процесса оптимизации могут характеризовать *относительные* критерии, которые не зависят от масштаба переменных или функций. Такими критериями могут выступать:

а) критерий малости изменения параметров оптимизации:

$$\frac{\|\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}^{(k-1)}\|}{\|\mathbf{X}^{(k-1)}\| + \delta} \leq \varepsilon_2 \quad (0.56)$$

где δ - некоторая «страховочная» константа, позволяющая избежать деления на нуль (в данном случае, если $\|\mathbf{X}^{(k-1)}\| = 0$). Практически (0.56) устанавливает, в каком знаке мантиссы должны изменяться параметры оптимизации для завершения процесса оптимизации;

б) критерий малости изменения оценочной функции:

$$\frac{\varphi(\mathbf{X}^{(k-1)}) - \varphi(\mathbf{X}^{(k)})}{|\varphi(\mathbf{X}^{(k-1)})| + \delta} \leq \varepsilon_3 \quad (0.57)$$

(предполагается, что сходимость обеспечена и $\varphi(\mathbf{X}^{(k-1)}) > \varphi(\mathbf{X}^{(k)})$).

Чаще всего, критерии (0.56) и (0.57) используют совместно, чтобы обеспечить стационарность как по значениям функции, так и по ее параметрам.

Рассмотренные нами этапы шага безусловной минимизации позволяют от точки $\mathbf{X}^{(k-1)}$ перейти к точке $\mathbf{X}^{(k)}$, в которой $\varphi(\mathbf{X}^{(k)}) < \varphi(\mathbf{X}^{(k-1)})$ (данное неравенство именуют *условием спуска*). Таким образом, в процессе безусловной оптимизации строится последовательность точек с убывающими значениями оценочной функции, которая называется *релаксационной*. Ей соответствует *монотонно убывающая числовая последовательность* $\{\varphi(\mathbf{X}^{(k)})\}$.

Однако само существование $\{\varphi(\mathbf{X}^{(k)})\}$ не означает, что эта последовательность вообще сойдется в точке локального минимума \mathbf{X}^* или не будет сходиться сколь угодно медленно (так, что на практике получить решение не удастся). Чтобы обеспечить реальную сходимость, следует предъявить дополнительные требования как к самой задаче, так и к методам локального спуска. В рамках настоящего курса мы потребуем для гарантии сходимости, чтобы оценочная функция была дважды непрерывно дифференцируема, а множество точек, в которых $\varphi(\mathbf{X}) \leq \varphi(\mathbf{X}^{(0)})$ было замкнуто и ограничено (этим условием мы отбрасываем задачи типа минимизации функции e^{-x}). Что касается методов оптимизации, то они должны обеспечивать на каждом шаге существенное, а не крайне малое убывание φ . Существенное уменьшение оценочной функции достигается за счет рационального выбора длины шага α , при которой норма градиента φ в точке $\mathbf{X}(\alpha)$ заметно меньше, чем при $\alpha = 0$, а также за счет построения вектора спуска $\square \mathbf{X}$ таким образом, чтобы он образовывал с градиентом тупой угол, заметно отличающийся от прямого.

При соблюдении перечисленных условий алгоритм безусловной оптимизации будет генерировать последовательность точек $\{\mathbf{X}^{(k)}\}$, для которой $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)})\| = 0$. Сходимость такого рода называется *глобальной*, поскольку она не предполагает близости $\mathbf{X}^{(0)}$ к стационарной точке (не следует путать между собой глобальную сходимость и сходимость к глобальному минимуму).

2.2. Критерии сравнения эффективности методов безусловной минимизации

В настоящее время разработано уже довольно значительное количество методов безусловной оптимизации. Вполне вероятно, что в будущем их число

еще более возрастет. Чтобы осознанно ориентироваться в таком многообразии методов как в процессе изучения, так и в процессе практического применения, необходимо руководствоваться определенными критериями для их сравнения. Наибольшую важность при этом представляют критерии, позволяющие определить сравнительные характеристики методов с точки зрения основной цели их функционирования, то есть, эффективности процесса нахождения локального минимума в различных задачах математического программирования.

Среди критериев эффективности выделяют *теоретические* и *практические*. Суть первых связана с исследованием скорости сходимости последовательности точек $\{\mathbf{X}^{(k)}\}$, генерируемой в ходе итераций. Оценку скорости можно дать, сравнивая между собой расстояния от точек $\mathbf{X}^{(k)}$ и $\mathbf{X}^{(k+1)}$ до точки локально минимума \mathbf{X}^* . В этой связи вводят понятие *порядка сходимости*, под которым понимают максимальное число r , для которого:

$$0 \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^*\|}{\|\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}^*\|^\mu} < +\infty \quad (0.58)$$

Порядок сходимости может принимать как целые, так и дробные значения. При $\mu=1$ говорят, что последовательность сходится линейно, а метод оптимизации, генерирующий такую последовательность, называют имеющим *линейную скорость сходимости*. При $\mu=2$ последовательность сходится квадратично, а методу присваивают *квадратичную скорость сходимости*. Сама величина предела в (0.58) называется *асимптотическим параметром ошибки*, или *коэффициентом сходимости*. Мы будем обозначать его ν .

Если $\mu=1$, то для гарантированной сходимости необходимо $0 \leq \nu < 1$. При $\nu=0$ последовательность называют *сходящейся сверхлинейно*, или *суперлинейно* (метод оптимизации имеет соответствующую скорость сходимости).

Чтобы как-то представить, чем квадратичная сходимость последовательности отличается от линейной и сверхлинейной, можно дать такую грубую сравнительную оценку: при квадратичной сходимости число правильных цифр в мантиссе переменных удваивается с каждым шагом. При сверхлинейной сходимости на каждом шаге в мантиссе появляется верная значащая цифра. При линейной сходимости через какое-то число шагов в мантиссе появляется верная значащая цифра.

Теоретические оценки μ и ν важны в том плане, что они позволяют в отсутствие какой-либо другой исходной информации предсказать, какому из методов оптимизации следует отдать предпочтение, а какие из методов оптимизации могут работать плохо. Например, метод, обладающий квадратичной скоростью сходимости, теоретически должен работать быстрее чем тот, у которого скорость сходимости линейная; если при $\mu=1$ *асимптотический параметр ошибки близок к единице*, то метод может

сходиться *сколь угодно медленно*. Однако это отнюдь не означает, что в какой-то конкретной задаче данное позитивнее или негативнее свойство себя обязательно проявит.

При использовании готовых оценок порядка сходимости и асимптотического параметра ошибки нужно проявлять определенную осторожность. Заметим, в частности, что величины μ и ν связаны с вычислением предела при $k \rightarrow \infty$, то есть рассчитываются вблизи точки локального минимума. Иными словами, обе они носят *асимптотический характер*. На больших расстояниях от X^* (на начальных итерациях с небольшими значениями k) использование μ и ν для оценки эффективности работы метода оптимизации будет некорректным.

Кроме того, надо иметь в виду, что теоретический вывод значений μ и ν для конкретных методов оптимизации бывает довольно сложным, вследствие чего он часто основывается на различного рода допущениях. В реальных численных экспериментах эти допущения подтверждаются далеко не всегда. Поэтому, если теория предсказывает, что метод сходится сверхлинейно, то вполне может оказаться, что для тех задач, которые решаете вы, сходимость будет только линейной.

Выбрать лучшие методы оптимизации для конкретного класса проблем можно с использованием практических критериев эффективности. Для этого между методами устраивают своеобразное соревнование на время решения специально подобранных задач. Естественно, что в этом соревновании должны быть обеспечены равные условия: один и тот же компьютер, одна и та же платформа, одинаковая техника программирования, одинаковая стартовая точка, тождественные условия сходимости и т.п.

Вместо времени решения часто в качестве критерия эффективности используют количество вычислений оценочной функции и ее производных (число обращений к процедуре «проба»). Делается это из тех соображений, что именно на вычисления функций обычно уходит львиная доля машинного времени в *реальных* задачах. При решении же тестовых примеров весьма существенными могут оказаться другие факторы (например, скорость выполнения матричных операций, решения систем уравнений и т.д.).

Подобным образом для практического сравнения методов безусловной минимизации можно применять еще один критерий – число шагов локального спуска до достижения заданных условий сходимости. Данный критерий опирается на квантование общего процесса оптимизации по шагам, каждый из которых осуществляется по типовой схеме. Если при решении тестовых примеров один метод дает количество шагов существенно меньше другого, то подобного результата можно ожидать и в случае задач оптимизации реальных объектов.

2.3. Методы одномерного безусловного поиска

Непосредственное рассмотрение методов безусловной оптимизации целесообразно начать с простейшей задачи одномерного безусловного

поиска, сформулированной в разделе 2.1. Напомним, что суть этой задачи состоит в нахождении параметра длины шага α , обеспечивающего существенное убывание оценочной функции φ на траектории локального спуска. При этом одномерный поиск проводится только при неотрицательных значениях переменной α в расчете на то, что траектория локального спуска, представляющая собой направленную кривую или луч, построена корректно и нет надобности поворачивать по ней «вспять» для уменьшения φ . Напротив, при небольшом изменении α в положительную сторону траектория спуска должна обеспечить убывание оценочной функции.

Вводя ограничение неотрицательности α , мы несколько сужаем возможность применения методов одномерного поиска для решения *любых самостоятельных задач* оптимизации функции одной переменной на произвольном отрезке. Однако данный факт представляется несущественным, ибо можно произвести замену переменной таким образом, чтобы на левой границе отрезка новая переменная обращалась в нуль.

Другое ограничение в процессе одномерного поиска мы наложим на свойства функции $\varphi(\alpha)$. Мы станем предполагать, что эта функция является *униmodalной*, то есть имеющей один единственный экстремум (минимум). Может показаться, что требование униmodalности является довольно обременительным: откуда, спрашивается, следует, что у $\varphi(\alpha)$ вообще есть минимум или, наоборот, что таких минимумов у нее не может быть множество? Однако здесь надо учесть следующие обстоятельства. Выбором траектории локального спуска мы обеспечиваем убывание φ при малых α , а от минимизации всюду убывающих функций мы отказались при обсуждении модельной схемы (см раздел 2.1). Поэтому мы вправе рассчитывать на наличие хотя бы одного минимума $\varphi(\alpha)$. В случае же возможности существования нескольких экстремумов (то есть при минимизации *полиmodalных* функций), можно настроить алгоритмы оптимизации на одномерный поиск ближайшего к нулю локального минимума $\varphi(\alpha)$ (подобная настройка предусматривает контроль соблюдения свойств униmodalности на поисковом отрезке $[0, \alpha_{\max}]$, где α_{\max} - некоторая фиксированная величина; если свойство униmodalности не соблюдается, о чем судят по значениям оценочной функции и ее производных, вычисляемым в ходе одномерного поиска, то величина α_{\max} уменьшается).

Свойство униmodalности можно определить следующим образом. Функция $\varphi(\alpha)$ называется униmodalной на отрезке $[\alpha_n, \alpha_k]$, если на этом отрезке она имеет минимум в точке α^* и если для любых $\alpha_1, \alpha_2 \in [\alpha_n, \alpha_k]$, удовлетворяющих неравенству $\alpha_1 < \alpha_2$, справедливо:

$$\begin{cases} \text{если } \alpha_2 \leq \alpha^*, \text{ то } \varphi(\alpha_1) > \varphi(\alpha_2) \\ \text{если } \alpha_1 \geq \alpha^*, \text{ то } \varphi(\alpha_1) < \varphi(\alpha_2) \end{cases}$$

(другими словами, функция строго монотонно убывает слева от α^* и строго

монотонно возрастает справа от α^*). Из определения следует, что, во-первых, унимодальная функция не обязательно должна быть гладкой и даже непрерывной - она может быть изломанной (недифференцируемой) или разрывной. Однако мы для упрощения материала будем считать, что $\varphi(\alpha)$ является непрерывной, а в тех случаях, когда для нахождения ее минимума используются производные, еще и непрерывно дифференцируемой (или даже дважды непрерывно дифференцируемой – при использовании вторых производных). Во-вторых, если мы вычисляем оценочную функцию в четырех точках сегмента $[\alpha_n, \alpha_k]$, например, на краях отрезка в точках α_n, α_k и в двух точках внутри интервала (α_n, α_k) , то всегда существует подынтервал, который не содержит оптимума (это свойство легко доказывается методом от противного).

Одномерный безусловный поиск осуществляется с помощью численных итерационных методов на основе выбранной стратегии построения последовательности $\{\alpha_i\}$ длин шага, служащих для отыскания или оценки оптимального значения α^* . Стратегия *пассивного поиска* предусматривает наличие правила, по которому все точки $\alpha_i, i=1, \dots, N$ могут быть заранее определены вне зависимости от функции $\varphi(\alpha)$. Стратегия *последовательного поиска* исходит из того, что величина α_k вычисляется путем анализа информации о всех предшествующих точках, то есть о значениях $\alpha_i, \varphi(\alpha_i), i=1, \dots, k-1$. При этом общее количество точек заранее неизвестно, а выбирается в ходе реализации алгоритма с использованием избранного критерия его останова.

Задачу одномерного поиска мы вначале попытаемся решить наилучшим образом, то есть найти минимум унимодальной функции $\varphi(\alpha)$:

$$\begin{aligned} \varphi(\alpha) &\rightarrow \min \\ \alpha &\geq 0 \end{aligned} \quad (0.59)$$

Решение (0.59) чаще всего осуществляется в два этапа:

1. Нахождение отрезка $[\alpha_n, \alpha_k]$, на котором локализована точка минимума (то есть, известно что $\alpha^* \in [\alpha_n, \alpha_k]$), но точное ее положение не определено. Такой отрезок называется *начальным промежутком (или интервалом) неопределенности*.

2. Уточнение положения точки минимума $\varphi(\alpha)$.

Отдельные методы одномерной безусловной минимизации теоретически не требуют выполнения первого этапа, им достаточно одной точки для запуска алгоритма. Однако такие методы, увы, могут расходиться. Для обеспечения большей надежности, их комбинируют с другими, предполагающими знание начального промежутка неопределенности.

Изложение методов одномерной безусловной минимизации мы будем производить, придерживаясь классификации, связанной с использованием производных.

2.3.1. Методы одномерной минимизации нулевого порядка

Существует две группы методов одномерной безусловной минимизации первого порядка: *методы сокращения промежутка неопределенности* (их еще называют *методами исключения интервалов*) и *методы, основанные на аппроксимации (интерполяции)*.

Обе группы требуют нахождения начального промежутка неопределенности для точного решения (0.59). Заметим, однако, что методы исключения интервалов при запуске их на отрезке $[\alpha_n, \alpha_k]$, не содержащем точку минимума, благополучно отработают, находя точку с наименьшим значением $\varphi(\alpha)$. Методы же аппроксимации в этом случае либо вообще не найдут приближенного решения, либо оно будет крайне неточным.

Самым простым способом нахождения начального промежутка неопределенности в методах нулевого порядка является *равномерный поиск*. Зададим $\alpha_1 = 0, \alpha_2 = \alpha_1 + \Delta\alpha$, где $\Delta\alpha$ - фиксированная константа. Если никакой информации о вероятном положении точки минимума нет, то можно положить $\Delta\alpha = 1$. Если $\varphi(\alpha_1) \leq \varphi(\alpha_2)$, то на отрезке $[\alpha_1, \alpha_2]$ имеется минимум в силу свойства унимодальности $\varphi(\alpha)$. При $\varphi(\alpha_1) > \varphi(\alpha_2)$ поиск продолжается, для чего вычисляется координата $\alpha_3 = \alpha_2 + \Delta\alpha$. Если теперь $\varphi(\alpha_2) \leq \varphi(\alpha_3)$, то отрезок $[\alpha_1, \alpha_3]$ локализует положение минимума $\varphi(\alpha)$. В противном случае следует положить $\alpha_1 = \alpha_2, \alpha_2 = \alpha_3, \alpha_3 = \alpha_2 + \Delta\alpha$ и продолжить работу алгоритма с анализа неравенства $\varphi(\alpha_2) \leq \varphi(\alpha_3)$. Так как функция унимодальна, то данный алгоритм завершит свою работу за конечное число шагов.

Изложенная стратегия проста в реализации, однако от нее часто отказываются вследствие того, что при неудачном выборе $\Delta\alpha$, когда величина $\Delta\alpha$ оказывается слишком маленькой, равномерный поиск может быть очень трудоемким. Если на этапе уточнения положения точки минимума работают достаточно эффективные алгоритмы, то выгоднее производить *неравномерный поиск* начального промежутка неопределенности с помощью увеличивающихся шагов. В этом случае смещение вдоль оси длины шага определяется в зависимости от номера итерации поиска k . Чаще сего используют схему «золотого сечения»:

$$\alpha_3 = \alpha_2 + \eta^{k-1} \Delta\alpha$$

где $\eta = 1.618$, или схему двукратного увеличения длины шага поиска (*метод Свенна*):

$$\alpha_3 = \alpha_2 + 2^{k-1} \Delta\alpha$$

Как равномерный, так и неравномерный поиск имеют в основе пассивную стратегию.

Уточнение положения точки минимума на начальном промежутке неопределенности строится по разным принципам в методах последовательного сокращения промежутка неопределенности и в методах

аппроксимации, но в любом случае осуществляется на основе последовательной стратегии. Последовательный поиск в данном случае позволяет в полной мере учитывать информацию, накопленную в ходе отыскания α^* , и за счет этого имеет серьезные преимущества по скорости перед пассивным поиском.

2.3.1.1. Методы последовательного сокращения промежутка неопределенности

Как уже указывалось, из определения унимодальной функции вытекает, что при задании четырех точек на сегменте один из трех полученных подынтервалов заведомо не содержит точку минимума. Следовательно, этот подынтервал может быть удален из последующего рассмотрения. Данный простой принцип как раз и лег в основу методов группы сокращения интервалов неопределенности.

Пусть для минимизации оценочной функции $\varphi(\alpha)$ выбран начальный промежуток неопределенности $[\alpha_1, \alpha_2]$, на котором сгенерированы внутренние точки α_3, α_4 . Если при $\alpha_3 < \alpha_4$ $\varphi(\alpha_3) > \varphi(\alpha_4)$, как показано на рис. 13, то отбрасывается левый полуинтервал $[\alpha_1, \alpha_3)$, в противном случае – правый $(\alpha_4, \alpha_2]$ (заметим, что при строгом равенстве $\varphi(\alpha_3) = \varphi(\alpha_4)$ можно отбросить оба крайних полуинтервала, но такое равенство при использовании на компьютере арифметики с плавающей запятой практически не встречается).

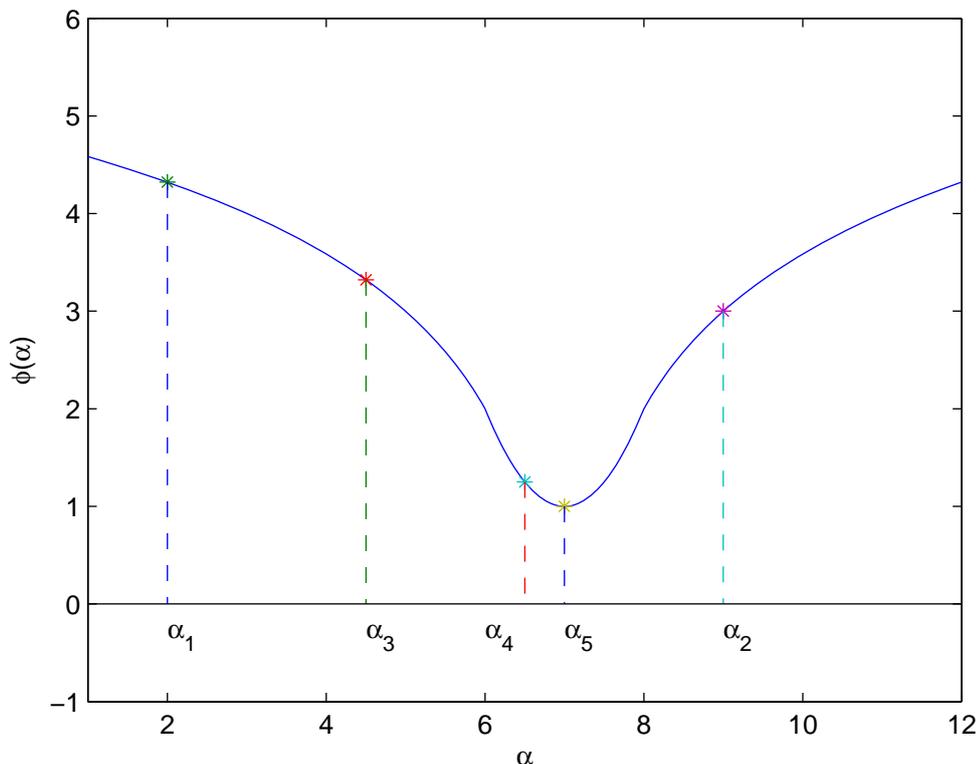


Рис.13

Оставшийся промежуток имеет меньшую длину, чем исходный. Его можно продолжить усекавать, сгенерировав одну дополнительную внутреннюю точку α_5 (вторая точка α_4 или α_3 - в зависимости от того, левый или правый интервал отсекался, - остается с предыдущей итерации). Для случая, показанного на рисунке, исключению на второй итерации вновь подлежит левый полуинтервал $[\alpha_3, \alpha_4)$, так как $\varphi(\alpha_4) > \varphi(\alpha_5)$. Таким образом можно действовать, пока не исчерпается лимит вычислений функции либо полученный промежуток неопределенности не уменьшится до наперед заданной величины.

Конкретные методы сокращения промежутка неопределенности отличаются между собой только способами вычисления координат внутренних точек и будут рассмотрены ниже.

Метод Фибоначчи.

Пусть N – число вычислений оценочной функции во внутренних точках начального промежутка неопределенности. Идея метода Фибоначчи состоит в том, чтобы использовать эти N вычислений *оптимальным образом* для относительного сокращения промежутка неопределенности, независимо от вида оценочной функции. Для этого необходимо на каждом этапе одномерного поиска исключать возможно больший полуинтервал.

Пусть, как и ранее (см. рис. 13), $[\alpha_1, \alpha_2]$ - начальный промежуток неопределенности, а α_3, α_4 - его внутренние точки. Длина начального промежутка равна $\Delta^{(1)} = \alpha_2 - \alpha_1$. Если на первом этапе процесса исключается $[\alpha_1, \alpha_3)$, то остается $[\alpha_3, \alpha_2]$; если исключается $(\alpha_4, \alpha_2]$ - то $[\alpha_1, \alpha_4]$. Чтобы длина оставшегося отрезка не зависела от конкретной минимизируемой функции, необходимо, чтобы $\Delta^{(2)} = \alpha_4 - \alpha_1 = \alpha_2 - \alpha_3$, то есть точки α_3, α_4 были симметричны относительно середины начального промежутка.

Предположим далее, что $[\alpha_1, \alpha_3)$ исключен. Тогда точки α_4, α_5 должны быть симметричны относительно середины $[\alpha_3, \alpha_2]$, а оставшийся после второй итерации отрезок будет иметь длину $\Delta^{(3)} = \alpha_5 - \alpha_3 = \alpha_2 - \alpha_4$. Нетрудно заметить, что

$$\alpha_2 - \alpha_1 = (\alpha_3 - \alpha_1) + (\alpha_2 - \alpha_3) = (\alpha_2 - \alpha_4) + (\alpha_2 - \alpha_3),$$

то есть

$$\Delta^{(1)} = \Delta^{(2)} + \Delta^{(3)}$$

Обобщая рассуждения, получим для произвольного $k \in [1, N]$:

$$\Delta^{(k)} = \Delta^{(k+1)} + \Delta^{(k+2)}. \quad (0.60)$$

Введем числа F_1, \dots, F_N , удовлетворяющие соотношению:

$$\Delta^{(k)} = F_{N-k+1} \Delta^{(N)} \quad (0.61)$$

Разделим обе части (0.61) на $\Delta^{(N)}$:

$$\frac{\Delta^{(k)}}{\Delta^{(N)}} = \frac{\Delta^{(k+1)}}{\Delta^{(N)}} + \frac{\Delta^{(k+2)}}{\Delta^{(N)}},$$

откуда получим:

$$F_{N-k+1} = F_{N-k+2} + F_{N-k+3}$$

или, обозначив $t = N - k + 1$:

$$F_t = F_{t-1} + F_{t-2}, \quad t = 3, 4, \dots, N. \quad (0.62)$$

Для вычисления всех элементов F_t требуется найти элементы F_1 и F_2 . Если положить $k = N$, то из (0.61) следует, что $F_1 = 1$. Величину F_2 следует подобрать таким образом, чтобы минимизировать $\Delta^{(N)}$ при фиксированной длине отрезка $\Delta^{(N-1)}$. Из того же соотношения при $k = N - 1$ имеем:

$$\Delta^{(N)} = \frac{1}{F_2} \Delta^{(N-1)}$$

Несложно заметить, что чем больше F_2 , тем меньше $\Delta^{(N)}$. Однако величина $\Delta^{(N-1)}$ должна быть меньше $2 \cdot \Delta^{(N)}$. Окончательно принимаем $F_2 = 2$.

Таким образом, последовательность чисел $\{F_t\}$ полностью определена:

$$F_1 = 1; F_2 = 2; F_t = F_{t-1} + F_{t-2}, \quad t = 3, 4, N \quad (0.63)$$

Последовательность, заданную рекуррентной формулой (0.63), именуют последовательностью Фибоначчи. Она и дала название методу одномерной безусловной минимизации.

Координаты внутренних точек $\alpha_2, \alpha_3, \dots$ можно вычислить через отрезки $\Delta^{(k)}$, которые с помощью (0.61) выражаются через $\Delta^{(1)}$ следующим образом:

$$\Delta^{(k)} = \frac{F_{N-k+1}}{F_N} \Delta^{(1)} \quad (0.64)$$

Для вычисления координат введем масштабный коэффициент:

$$M = \frac{\Delta^{(1)}}{F_N}$$

Тогда на k -том этапе исключения интервалов исходная длина промежутка неопределенности будет $\Delta^{(k)} = MF_{N-k+1}$, а внутренние точки при $k < n$ будут располагаться на следующих расстояниях от левого конца этого промежутка:

$$\Delta^{(k+1)} = \frac{F_{N-k}}{F_N} \Delta^{(1)} = MF_{N-k} \quad \text{и} \quad \Delta^{(k)} - \Delta^{(k+1)} = \frac{F_{N-k+1} - F_{N-k}}{F_N} \Delta^{(1)} = \frac{F_{N-k-1}}{F_N} \Delta^{(1)} = MF_{N-k-1},$$

причем координаты одной из точек будут определены еще на предыдущем этапе поиска (здесь мы пренебрегаем накопленными ошибками вычислений). Из анализа полученных формул следует, что при $k = N - 1$ для вычисления координат одной из точек необходимо доопределить последовательность Фибоначчи (0.63) элементом F_0 . Очевидно, что свойству последовательности

(0.62) удовлетворяет $F_0 = 1$, и тогда последовательность Фибоначчи записывается в виде:

$$F_0 = 1; F_1 = 2; F_t = F_{t-1} + F_{t-2}, \quad t = 3, 4, N \quad (0.65)$$

В этом случае расчетные координаты двух внутренних точек на последнем этапе одномерного поиска совпадают, что лишает нас возможности выделить заключительный промежуток неопределенности длиной $\Delta^{(N)}$. Чтобы этого не происходило, расстояние до внутренней точки от правого конца определяют как $M(F_0 + \varepsilon)$, где ε - некоторое малое число.

В качестве приближенного решения задачи (0.59) можно взять середину последнего полученного промежутка неопределенности (длиной $\Delta^{(N)}$), в которой, однако, оценочная функция еще не вычислялась. Во избежание дополнительных вычислений в качестве решения задачи (0.59) следует взять середину предпоследнего промежутка неопределенности (длиной $\Delta^{(N-1)}$).

Выражение (0.64) позволяет определить необходимое количество вычислений φ , если задается конечная относительная величина промежутка неопределенности. Пусть известна константа $\varepsilon = \frac{\Delta^{(N-1)}}{\Delta^{(1)}}$. Тогда

$$\varepsilon = \frac{1}{F_{N-1}}$$

Например, если $\varepsilon = 10^{-3}$, то $F_{N-1} \geq 10^3$, что дает $N \approx 16$.

Метод золотого сечения

Метод золотого сечения, как и метод Фибоначчи, основан на генерации внутренних точек, симметричных относительно середины промежутка неопределенности. Однако длины последовательных интервалов неопределенности берутся в фиксированном отношении:

$$\frac{\Delta^{(1)}}{\Delta^{(2)}} = \frac{\Delta^{(2)}}{\Delta^{(3)}} = \dots = \frac{\Delta^{(k)}}{\Delta^{(k+1)}} = \frac{\Delta^{(k+1)}}{\Delta^{(k+2)}} \dots = \tau \quad (0.66)$$

В этом случае на $(k+1)$ этапе исключения интервалов относительное расположение внутренних точек будет подобным тому, что и на предыдущих k этапах. Разделим обе части равенства (0.60) на $\Delta^{(k+1)}$ (соотношение (0.60) соблюдается, как и в методе Фибоначчи, в силу симметрии внутренних точек на каждом этапе исключения):

$$\frac{\Delta^{(k)}}{\Delta^{(k+1)}} = 1 + \frac{\Delta^{(k+2)}}{\Delta^{(k+1)}}$$

и подставим (0.66):

$$\tau = 1 + \frac{1}{\tau}$$

Полученное уравнение имеет корень, определяющий золотое сечение:

$$\tau = \frac{\sqrt{5} + 1}{2} \approx 1.618.$$

На k -том этапе исключения интервалов исходная длина промежутка неопределенности будет $\Delta^{(k)} = \frac{\Delta^{(1)}}{\tau^{k-1}}$, а внутренние точки будут располагаться на следующих расстояниях от левого конца этого промежутка:

$$\Delta^{(k+1)} = \frac{\Delta^{(k)}}{\tau} \approx 0.618 \cdot \Delta^{(k)} \text{ и } \Delta^{(k)} - \Delta^{(k+1)} = \Delta^{(k)} \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) \approx 0.382 \cdot \Delta^{(k)},$$

причем координаты одной из точек будут вычислены еще на предыдущем этапе поиска (здесь следует заметить, что неточное задание величины $\sqrt{5}$ на компьютере уже при достаточно небольшом количестве итераций может приводить к накопленным погрешностям и потере точки минимума, так как она выпадает из интервала неопределенности. Поэтому, вообще говоря, при реализации алгоритма возможность такой ситуации должна быть предусмотрена).

Из изложенного следует, что метод золотого сечения имеет линейную скорость сходимости с асимптотическим параметром ошибки $\nu = \frac{1}{\tau} \approx 0.618$.

Любопытно отметить, что метод золотого сечения при $N \rightarrow \infty$ дает то же расположение внутренних точек на начальном промежутке неопределенности, что и метод Фибоначчи, так как оказывается, что

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F_N}{F_{N-1}} = \tau$$

Поэтому золотое сечение можно интерпретировать как предельный случай поиска Фибоначчи.

Метод дихотомии (нулевого порядка)

Метод дихотомии (деления пополам) является самым простым в реализации, но далеко не самым оптимальным методом сокращения промежутка неопределенности. В нем:

$$\Delta^{(k+1)} = \frac{\Delta^{(k)}}{2}$$

Метод дихотомии предполагает наличие на k -том этапе исключения интервалов сразу трех внутренних точек, которые делят промежуток неопределенности длиной $\Delta^{(k)}$ на четыре равные части. С учетом унимодальности оценочной функции исключению подлежат два из четырех образовавшихся интервалов. На каждой итерации $k > 1$ требуется дополнительная генерация двух внутренних точек.

Скорость сходимости этого метода линейна, а асимптотический параметр ошибки равен $\nu = \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0.7$ (на каждые две точки приближения приходится двукратное уменьшение интервала неопределенности).

Сравнение эффективности методов сокращения промежутка

неопределенности при заданной величине N

Несложно показать, что, при заданном количестве вычислений N оценочной функции во внутренних точках, относительное уменьшение промежутка неопределенности для методов рассматриваемой группы будет выражаться следующими зависимостями:

- метод Фибоначчи: F_N^{-1} ;

- метод золотого сечения: $\left[0.5(\sqrt{5}-1)\right]^{N-1}$;

- метод дихотомии (нулевого порядка): $2^{-0.5(N-1)}$, N – нечетное число

Вычисленные значения относительного уменьшения промежутка неопределенности для разных методов приведены в таблице 1. Для подтверждения преимущества стратегии последовательного поиска во второй колонке таблицы приведены данные пассивного поиска, осуществленного в точках, которые равномерно расположены по начальному промежутку неопределенности.

Табл. 1

N	Равномерный поиск	Метод Фибоначчи	Метод золотого сечения	Метод дихотомии
3	0.500	0.333	0.382	0.500
5	0.333	0.125	0.146	0.250
7	0.250	0.048	0.056	0.125
9	0.200	0.0182	0.00213	0.0625
11	0.167	0.00694	0.00813	0.0312
13	0.143	0.00265	0.00311	0.0156
15	0.125	0.00101	0.00119	0.00781
17	0.111	0.000387	0.000453	0.00391
19	0.100	0.000148	0.000173	0.00195

Любопытно сравнить сходимость методов Фибоначчи и золотого сечения при $N \rightarrow \infty$.

Используя формулу Бине

$$F_N = \frac{\tau^{N+1} - (-\tau)^{-(N+2)}}{\sqrt{5}},$$

найдем предел отношения относительных промежутков неопределенности, которые дают метод Фибоначчи и метод золотого сечения после N вычислений оценочной функции во внутренних точках:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\tau^{N+1} - (-\tau)^{-(N+2)}}{\tau^{N-1} \sqrt{5}} = \frac{\tau^2}{\sqrt{5}} \approx 1.17.$$

Таким образом, при больших N метод Фибоначчи оказывается приблизительно на 17% эффективнее метода золотого сечения. При этом оба метода обладают линейной скоростью сходимости.

2.3.1.2. Методы, основанные на аппроксимации

Методы данной группы основаны на *аппроксимации* (приближении) на отрезке $[\alpha_n, \alpha_k]$ оценочной функции $\varphi(\alpha)$ гладкой функцией $\bar{\varphi}(\alpha)$ известного вида с тем, чтобы в качестве хорошего приближения к точке α^* локального минимума $\varphi(\alpha)$ взять точку $\bar{\alpha}^*$ локального минимума $\bar{\varphi}(\alpha)$. Такую операцию можно осуществлять многократно, на каждом шаге уточняя $\bar{\varphi}(\alpha)$ за счет уменьшения отрезка $[\alpha_n, \alpha_k]$ с использованием полученной точки $\bar{\alpha}^*$.

Вид функции $\bar{\varphi}(\alpha)$ можно подобрать, исследуя характер зависимости $\varphi(\alpha)$ для ряда прикладных задач оптимизации, подлежащих решению. Например, могут быть использованы полиномы, дробно-линейные, логарифмические функции и т.п. Если характер зависимости $\varphi(\alpha)$ определить не удастся, то обычно в качестве $\bar{\varphi}(\alpha)$ применяют многочлен.

Для того чтобы $\bar{\varphi}(\alpha)$ была достаточно близка к $\varphi(\alpha)$, у аппроксимирующей функции вычисляются свободные (неопределенные) коэффициенты. Вычисление таких коэффициентов производится исходя из заданного критерия приближения. В методах оптимизации, не использующих производных, обычно используют критерий приближения, состоящий в точном совпадении значений $\varphi(\alpha)$ и $\bar{\varphi}(\alpha)$ в ряде точек, называемых *узлами интерполяции*, при этом саму аппроксимацию именуют *интерполяцией*.

Для обеспечения точности интерполяции нельзя располагать все узлы интерполяции по одну сторону от α^* (в этом случае интерполяция превращается в *экстраполяцию*, состоящую в предсказании поведения функции за пределами исследованного интервала). Поэтому крайние узлы интерполяции рационально располагать на концах начального промежутка неопределенности, методика нахождения которого описана в разделе 2.3.1. Кроме того, для возможности нахождения неопределенных коэффициентов никакие два узла не должны быть близки друг к другу.

Рассмотрим реализацию данного подхода на примере метода квадратичной интерполяции.

Метод квадратичной интерполяции

Метод квадратичной, или параболической интерполяции предусматривает аппроксимацию $\varphi(\alpha)$ полиномом второго порядка, то есть параболой, имеющей три подлежащих определению коэффициента (см. рис. 14).

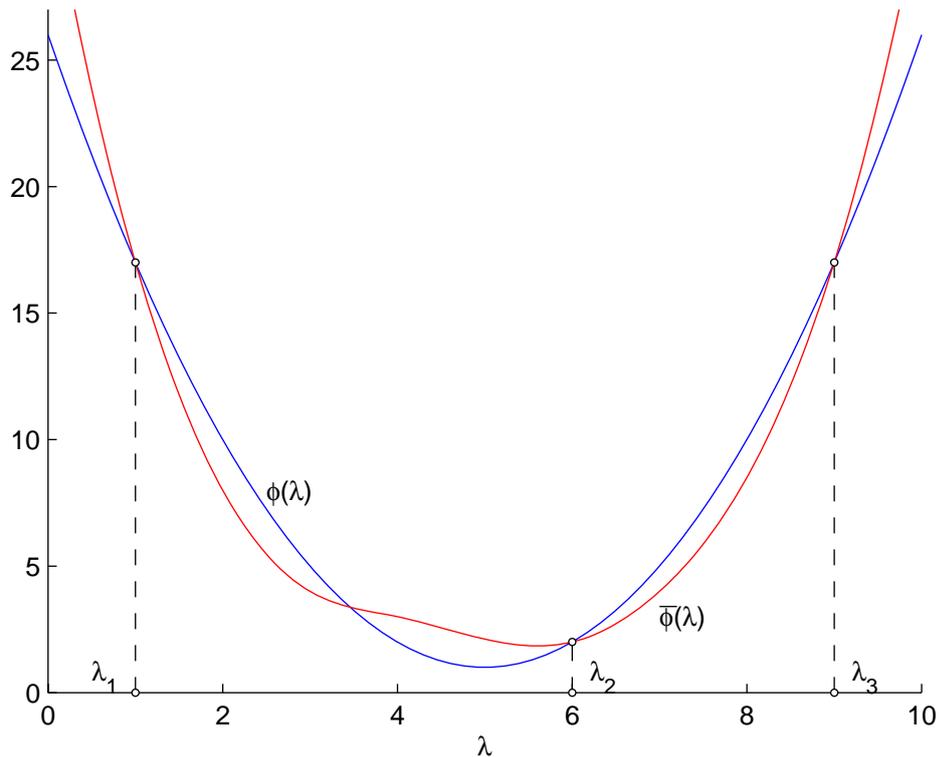


Рис. 14

Для нахождения данных коэффициентов нужно составить и решить относительно них систему трех уравнений, выражающих совпадение значений $\varphi(\alpha)$ и $\bar{\varphi}(\alpha)$ в трех узлах интерполяции.

Поскольку исходно расположение узлов неизвестно, то реализация метода параболической интерполяции начинается с поиска их координат, с учетом принципов, изложенных в предыдущем разделе. Для нахождения узлов интерполяции можно воспользоваться пассивным поиском начального промежутка неопределенности, описанным в разделе 2.3.1. Если на первой итерации данного поиска $\varphi(\alpha_1) > \varphi(\alpha_2)$, то полученные в результате работы алгоритма последние значения $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ могут быть использованы в качестве узлов интерполяции. Если же начальный промежуток неопределенности находится уже на первой итерации ввиду соблюдения условия $\varphi(\alpha_1) \leq \varphi(\alpha_2)$, то необходимо определить еще координату среднего узла. Для этого сначала с целью единообразия расположения узлов положим $\alpha_3 = \alpha_2$, а затем вычислим $\alpha_2 = 0.5(\alpha_1 + \alpha_3)$. Если $\varphi(\alpha_1) \geq \varphi(\alpha_2)$, то поиск узлов можно прекратить. В противном случае следует урезать промежуток неопределенности до $[\alpha_1, \alpha_2]$ для сокращения интервала, на котором производится интерполяция, и вернуться к началу алгоритма нахождения среднего узла.

В результате мы получим три точки $\alpha_1 < \alpha_2 < \alpha_3$, которые удовлетворяют всем требованиям к узлам интерполяции, причем $\varphi(\alpha_1) \geq \varphi(\alpha_2)$, $\varphi(\alpha_3) \geq \varphi(\alpha_2)$, то есть значение функции в среднем узле меньше, чем значения функции в крайних узлах.

Опишем квадратный трехчлен $\bar{\varphi}(\alpha)$ в удобном для вычисления коэффициентов a_0, a_1, a_2 виде:

$$\bar{\varphi}(\alpha) = a_0 + a_1(\alpha - \alpha_1) + a_2(\alpha - \alpha_1)(\alpha - \alpha_2).$$

Составим для трех узлов уравнения относительно неизвестных коэффициентов:

$$a_0 + a_1(\alpha_j - \alpha_1) + a_2(\alpha_j - \alpha_1)(\alpha_j - \alpha_2) = \varphi(\alpha_j), \quad j = 1, 2, 3.$$

Решим эти уравнения совместно. После упрощения система уравнений выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} a_0 = \varphi(\alpha_1) \\ a_0 + a_1(\alpha_2 - \alpha_1) = \varphi(\alpha_2) \\ a_0 + a_1(\alpha_3 - \alpha_1) + a_2(\alpha_3 - \alpha_1)(\alpha_3 - \alpha_2) = \varphi(\alpha_3) \end{cases}.$$

Из этой системы нетрудно определить:

$$\begin{cases} a_0 = \varphi(\alpha_1) \\ a_1 = \frac{\varphi(\alpha_2) - a_0}{(\alpha_2 - \alpha_1)} \\ a_2 = \frac{\varphi(\alpha_3) - a_0 - a_1(\alpha_3 - \alpha_1)}{(\alpha_3 - \alpha_1)(\alpha_3 - \alpha_2)} \end{cases} \quad (0.67)$$

Для нахождения точки минимума $\bar{\varphi}(\alpha)$ приравняем нулю первую производную этой функции:

$$\frac{d\bar{\varphi}}{d\alpha} = a_1 + a_2[(\alpha - \alpha_1) + (\alpha - \alpha_2)] = 0,$$

откуда

$$\bar{\alpha}^* = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} - \frac{a_1}{2a_2}$$

Эта точка является минимумом, поскольку выпуклость вниз функции $\bar{\varphi}(\alpha)$ обеспечена выбором узлов.

В грубом приближении одну из точек α_2 и $\bar{\alpha}^*$, в которой $\varphi(\alpha)$ принимает наименьшее значение, можно принять за решение задачи (0.59). При необходимости, процесс итераций можно продолжить. В этом случае точка $\alpha_4 = \bar{\alpha}^*$ принимается за узел интерполяции на следующем этапе минимизации, а один из прежних узлов отбрасывается. Отбрасывание узла происходит с таким расчетом, чтобы в оставшихся соблюдалось правило, ранее установленное нами: значение функции в среднем узле должно быть меньше значений в крайних узлах.

Метод параболической интерполяции достигает сверхлинейной скорости сходимости, поскольку вблизи точки минимума квадратичная аппроксимация достаточно хорошо описывает реальную оценочную функцию. На начальных итерациях погрешность нахождения решения (0.59) может быть достаточно

большой. В этой связи метод параболической интерполяции иногда комбинируют с поиском по методу Фибоначчи или золотого сечения. При этом сначала используют метод сокращения промежутка неопределенности, а на последующих итерациях, когда данный промежуток становится малым, для минимизации оценочной функции запускают метод аппроксимации.

Метод интерполяции многочленом четвертой степени

Точность аппроксимации оценочной функции полиномом можно улучшить, повысив его степень. Однако при этом, в общем случае, необходимо увеличить и количество узлов интерполяции для нахождения неопределенных коэффициентов, то есть увеличить количество вычислений оценочной функции на начальном этапе реализации метода одномерной минимизации. Другим негативным моментом, связанным с возрастанием степени аппроксимирующего многочлена, является усложнение решения системы уравнений для его коэффициентов. Поэтому при одномерной минимизации редко используются интерполяционные полиномы высокой степени.

Тем не менее, существует класс задач, когда применение их полностью оправданно, ибо сопряжено с крайне незначительным увеличением трудоемкости. К такому классу относятся задачи о наименьших квадратах, когда оценочная функция может быть представлена в виде суммы квадратов других функций:

$$\varphi(\alpha) = \sum_{i=1}^m f_i^2(\alpha) \rightarrow \min$$

Для аппроксимации такой функции первоначально найдем три узла интерполяции $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ точно так же, как это было сделано в случае параболической (квадратичной) интерполяции. Далее построим приближения $\bar{f}_i(\alpha)$ функций $f_i(\alpha)$ в виде:

$$\bar{f}_i(\alpha) = a_{0i} + a_{1i}(\alpha - \alpha_1) + a_{2i}(\alpha - \alpha_1)(\alpha - \alpha_2).$$

С целью нахождения неопределенных коэффициентов следует решить m систем линейных уравнений по аналогии с методом параболической интерполяции. Воспользовавшись (0.67), получим:

$$\begin{cases} a_{0i} = f_i(\alpha_1) \\ a_{1i} = \frac{f_i(\alpha_2) - a_{0i}}{(\alpha_2 - \alpha_1)} \\ a_{2i} = \frac{f_i(\alpha_3) - a_{0i} - a_{1i}(\alpha_3 - \alpha_1)}{(\alpha_3 - \alpha_1)(\alpha_3 - \alpha_2)} \end{cases}$$

Тогда аппроксимация $\varphi(\alpha)$ может быть найдена в виде многочлена четвертой степени:

$$\bar{\varphi}(\alpha) = \sum_{i=1}^m \bar{f}_i^2(\alpha) = \sum_{i=1}^m (a_{0_i} \alpha^2 + a_{1_i} \alpha + a_{2_i})^2$$

Для нахождения точки минимума $\bar{\varphi}(\alpha)$ следует найти корни производной этой функции и выбрать подходящий, соответствующий минимальному значению $\bar{\varphi}(\alpha)$. В общем случае функция производной $\bar{\varphi}'(\alpha)$ будет являться многочленом третьей степени. Для отыскания ее корней можно использовать формулы Кардано или использовать какой-либо численный метод. Поскольку численный метод не связан с вычислением самой оценочной функции и ее производных, а требует лишь значений $\bar{\varphi}'(\alpha)$ или $\bar{\varphi}''(\alpha)$, то его реализация будет осуществляться весьма быстро.

Метод интерполяции многочленом четвертой степени может достигать квадратичной скорости сходимости, что обусловлено использованием специфики оценочной функции.

2.3.2. Методы одномерной минимизации первого порядка

Методы одномерной безусловной минимизации первого порядка можно разделить на две группы: методы, сводящиеся к решению уравнения, и методы, основанные на аппроксимации (интерполяции). Рассмотрим первоначально первую группу.

2.3.2.1. Методы, сводящиеся к решению уравнения

Идея методов данной группы заключается в том, что при условии унимодальности $\varphi(\alpha)$ задача ее минимизации эквивалентна нахождению корня производной оценочной функции:

$$\varphi'(\alpha) = 0 \quad (0.68)$$

Уравнение (0.68) обычно является нелинейным, и для его решения можно использовать известные численные методы. Некоторые из них, нашедшие наиболее широкое применение при одномерном безусловном поиске, мы рассмотрим ниже.

Метод дихотомии (первого порядка)

Метод дихотомии (деления пополам) первого порядка, называемый еще *методом средней точки*, основан на использовании свойства непрерывной функции: если непрерывная функция на концах отрезка имеет разные знаки, то на этом отрезке она имеет по меньшей мере один корень (теорема Больцано-Коши). Применительно к задачам (0.68) и (0.59) это означает, что единственная точка минимума унимодальной оценочной функции α^* необходимо принадлежит отрезку $[\alpha_n, \alpha_k]$, $\alpha_n < \alpha_k$, если:

$$\begin{cases} \varphi'(\alpha_n) \leq 0 \\ \varphi'(\alpha_k) \geq 0 \end{cases} \quad (0.69)$$

Пусть найден начальный промежуток неопределенности $[\alpha_n, \alpha_k]$, который удовлетворяет (0.69). Возьмем в нем некоторую точку $\alpha_c \in (\alpha_n, \alpha_k)$.

Тогда, если

$$\varphi'(\alpha_c) \geq 0,$$

то полуинтервал $(\alpha_c, \alpha_k]$ минимума не содержит и, следовательно, может быть исключен из дальнейшего рассмотрения. Если же

$$\varphi'(\alpha_c) < 0$$

то исключению подлежит уже полуинтервал $[\alpha_n, \alpha_k)$. Оставшийся промежуток неопределенности вновь содержит крайние точки, в которых производная оценочной функции имеет разные знаки. Продолжая действия аналогичным образом, можно найти точку минимума с наперед заданной точностью.

В методе дихотомии внутренняя точка α_c всегда выбирается в середине текущего промежутка неопределенности:

$$\alpha_c = 0.5(\alpha_n + \alpha_k).$$

Сама реализация метода осуществляется в два этапа. Первый носит название *отделения*, или *изоляция корня*, а второй именуют *уточнением корня производной*.

Задача первого этапа состоит в поиске начального отрезка, для которого соблюдается условие (0.69). С этой целью можно воспользоваться процедурой, описанной в разделе 2.3.1 и предназначенной для пассивного поиска промежутка неопределенности по значениям унимодальной функции $\varphi(\alpha)$. Этот промежуток будет содержать корень производной $\varphi'(\alpha)$. Если вычисление производной не представляет большой проблемы, то процедуру пассивного поиска можно организовать по-другому. Пусть $\alpha_1 = 0$ и задана величина $\square\alpha$ (последняя может быть взята равной единице, если никаких других соображений нет). Вычислим $\alpha_2 = \alpha_1 + \square\alpha$ и проверим, соблюдается ли условие:

$$\varphi'(\alpha_2) \leq 0.$$

Если указанное условие выполняется, то $\alpha^* \in [\alpha_1, \alpha_2]$. В противном случае можно положить $\alpha_1 = \alpha_2$, вновь найти $\alpha_2 = \alpha_1 + \square\alpha$ и т.д.

При отделении корня, как и в методах нулевого порядка, можно построить процедуру неравномерного пассивного поиска (см. раздел 2.3.1):

$$\alpha_2 = \alpha_1 + \eta^{k-1} \square\alpha$$

или

$$\alpha_2 = \alpha_1 + 2^{k-1} \square\alpha,$$

где k – номер итерации поиска, а параметр η равен 1.618.

На этапе уточнения корня производной осуществляется последовательная генерация внутренней точки α_c посередине имеющегося промежутка неопределенности и отбрасывание полуинтервала, не содержащего корня, как это было описано выше (см. рис. 15).

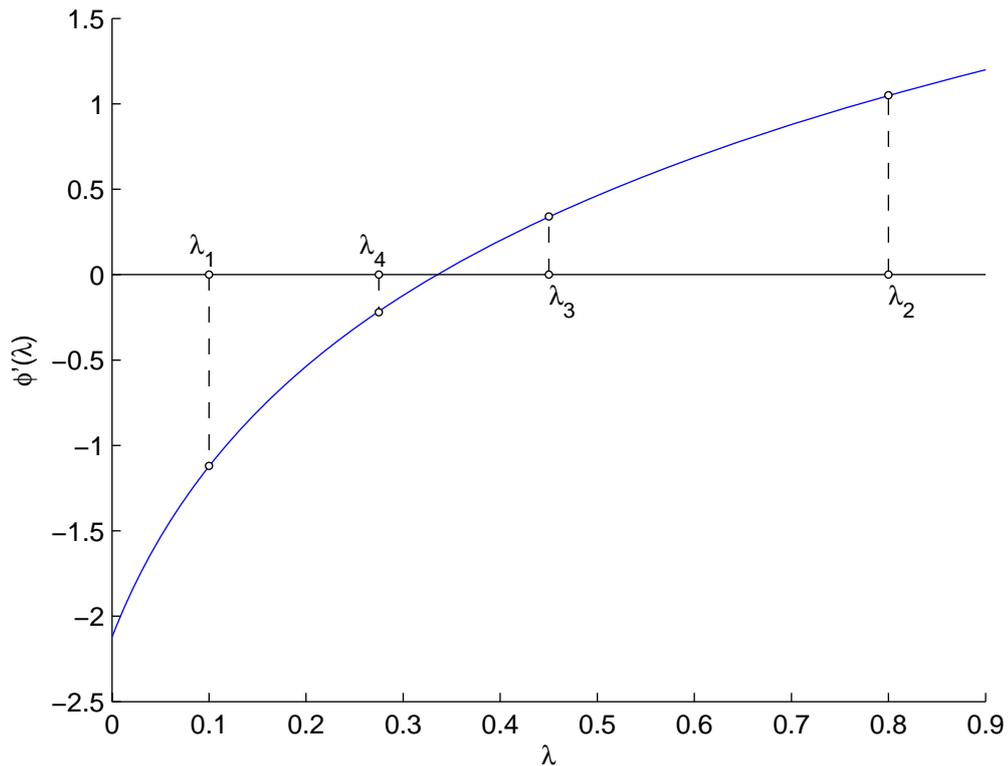


Рис. 15

Поиск минимума оценочной функции продолжается до тех пор, пока промежуток неопределенности и/или модуль производной $\varphi'(\alpha)$ не достигнут наперед заданных величин.

Метод средней точки напоминает метод дихотомии нулевого порядка, однако обладает лучшей скоростью сходимости. Относительное уменьшение промежутка неопределенности составляет 2^{-N} , где N – число сгенерированных внутренних точек на промежутке. То есть метод сходится линейно, а асимптотический параметр ошибки равен 0.5.

Достоинством метода дихотомии первого порядка является стабильная сходимость на этапе уточнения корня вне зависимости от вида непрерывной функции $\varphi'(\alpha)$.

Метод хорд

Метод хорд, называемый также *методом ложного положения* и *методом секущих*, как и метод дихотомии первого порядка, предполагает наличие этапов отделения и уточнения корня. Первый этап реализуется по схеме предыдущего раздела. На втором этапе внутренняя точка определяется как пересечение хорды, стягивающей точки графика $\varphi'(\alpha)$ с координатами α_n, α_k , с осью абсцисс:

$$\alpha_c = \alpha_k - \frac{\varphi'(\alpha_k)(\alpha_k - \alpha_n)}{\varphi'(\alpha_k) - \varphi'(\alpha_n)}$$

Хорда по сути выступает линейной аппроксимацией функции $\varphi'(\alpha)$ на

отрезке α_n, α_k . Если оказывается, что $\varphi'(\alpha_c) \geq 0$, то отбрасывается полуинтервал $(\alpha_c, \alpha_k]$, в противном случае - полуинтервал $[\alpha_n, \alpha_c)$, после чего заново вычисляется координата α_c (см рис. 16)

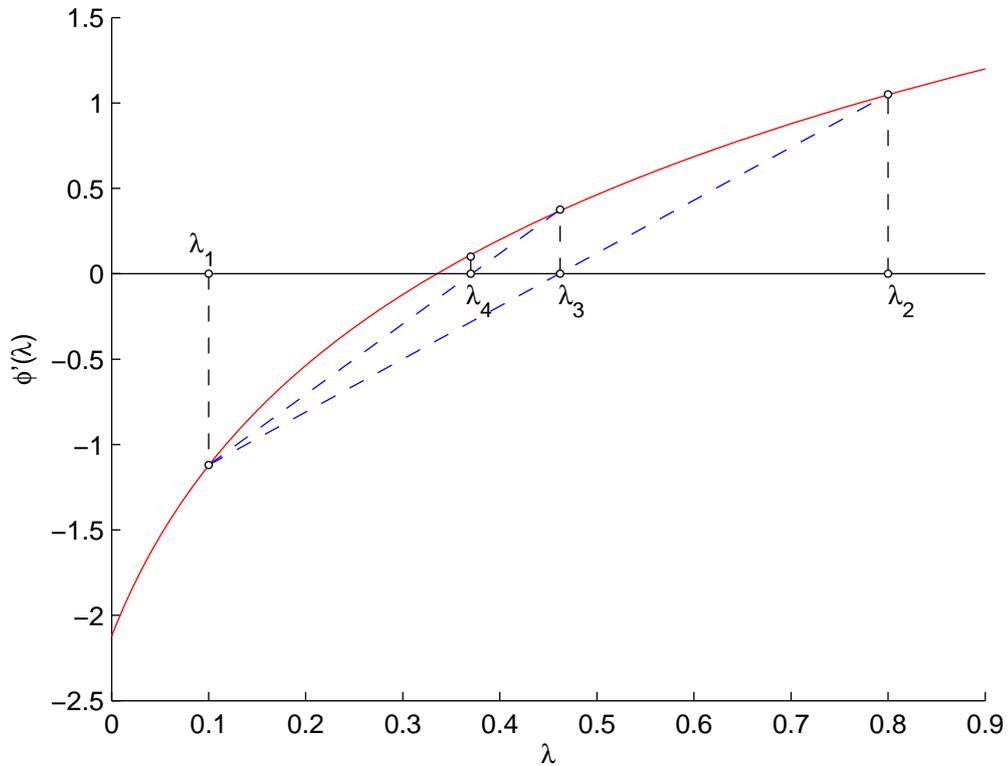


Рис. 16

Как и метод средней точки, метод хорд сходится линейно и стабильно, однако его асимптотический параметр ошибки может быть близким к единице. Последнее утверждение иллюстрирует рис. 17.

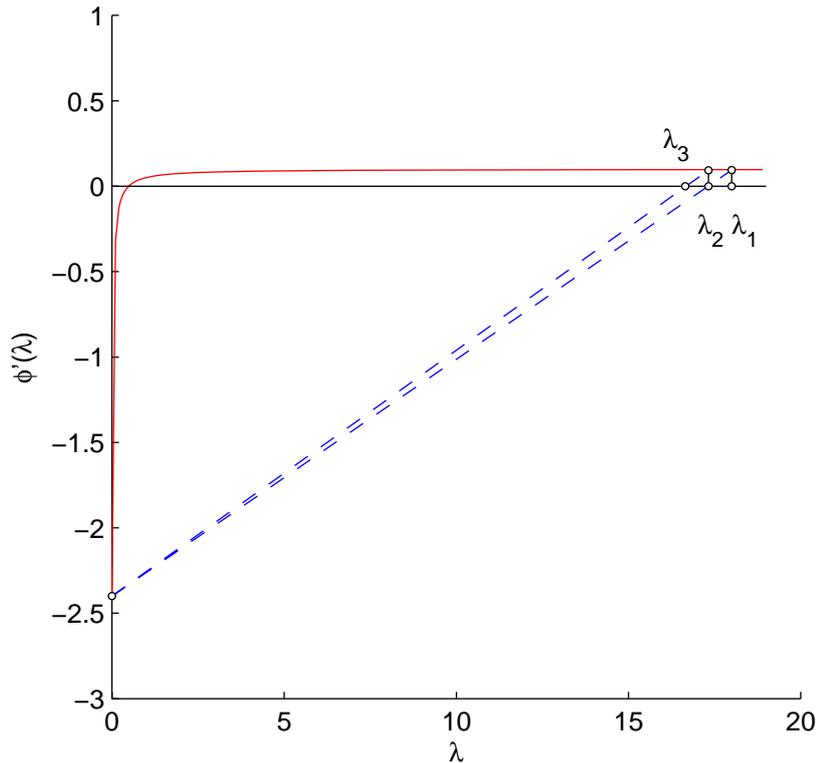


Рис. 17

Метод секущих

Метод секущих, как и метод хорд, основан на идее линейной аппроксимации функции $\varphi'(\alpha)$. Пусть известны два приближения к корню этой функции α_i и α_{i+1} . Тогда следующее приближение рассчитывается по формуле:

$$\alpha_{i+2} = \alpha_{i+1} - \frac{\varphi'(\alpha_{i+1})(\alpha_{i+1} - \alpha_i)}{\varphi'(\alpha_{i+1}) - \varphi'(\alpha_i)}, \quad (0.70)$$

то есть как координата пересечения секущей, соединяющей две последовательно полученные точки графика $\varphi'(\alpha)$, с осью абсцисс (рис. 18).

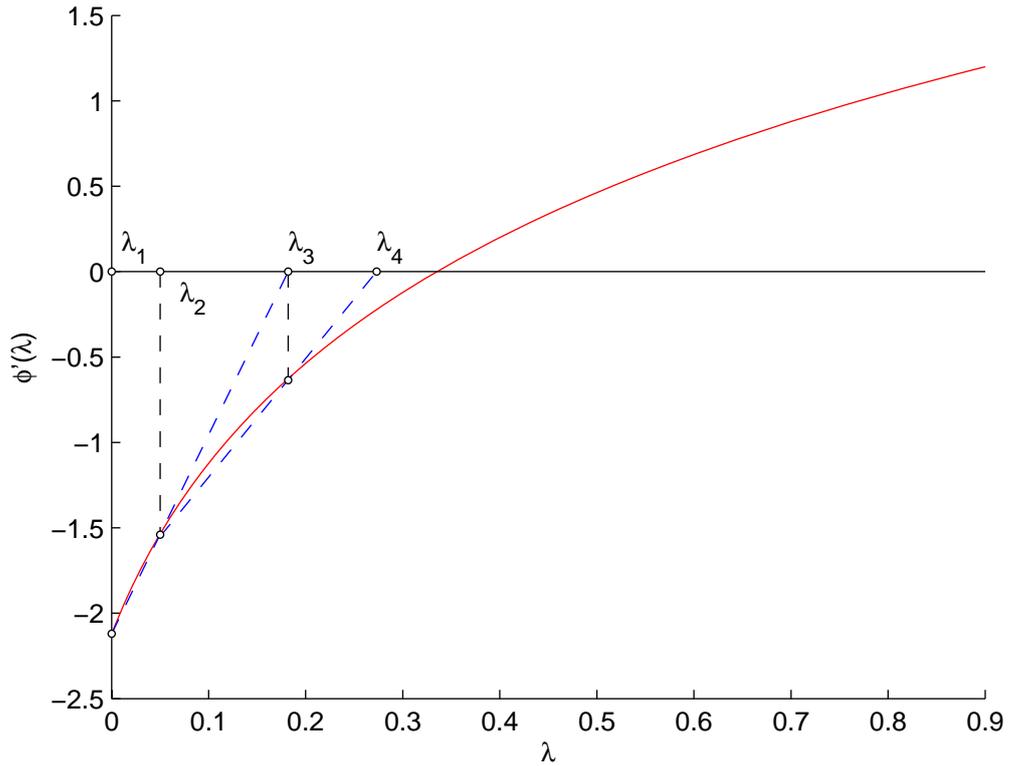


Рис. 18

В качестве начальных двух точек можно взять $\alpha_1 = 0$ и $\alpha_2 = \alpha_1 + \Delta\alpha$, где $\Delta\alpha$ - относительно небольшая величина, позволяющая построить первую секущую как приближение к касательной в точке $\alpha_1 = 0$.

Метод секущих порождает оценки корня $\varphi'(\alpha)$, а не интервалы неопределенности, за счет чего может достигать сверхлинейной скорости сходимости. Однако потеря контроля промежутка, содержащего корень, оборачивается возможностью расходимости метода (см. рис. 19)

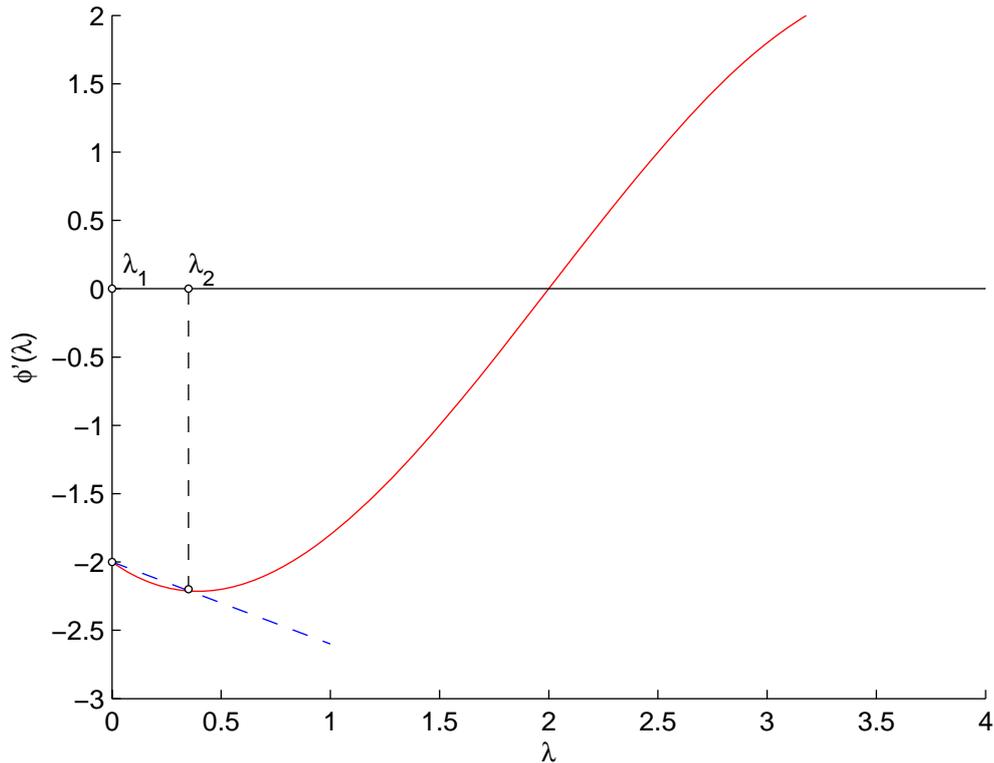


Рис. 19.

Регуляризованные методы

Для того чтобы избежать опасности расходимости, метод секущих применяют в комбинации с другим методом, который обладает, возможно, более медленной, но зато стабильной сходимостью (например, дихотомии первого порядка). Подобный прием называется *регуляризацией*. Сама же комбинация теоретически «быстрого», но ненадежного метода с теоретически «медленным», но надежным получила название *регуляризованного метода*. Регуляризованные алгоритмы считаются лучшими среди существующих численных способов отыскания корня функции. Они позволяют в благоприятных ситуациях использовать преимущества «быстрого» метода, а в «плохих» работают ненамного хуже, чем гарантированные по сходимости процедуры.

Рассмотрим реализацию регуляризованного метода на основе методов секущих и средней точки. Первоначально найдем промежуток неопределенности $[\alpha_1, \alpha_2]$ так, как это было описано в разделе 2.3.2. Две найденные при этом точки с координатами α_1, α_2 являются стартовыми для работы метода. Сгенерированные последующие приближения анализируются по знаку производной, что позволяет уменьшить начальный промежуток неопределенности. Пусть к началу очередной итерации он равен $[\alpha_n, \alpha_k]$. Построим секущую, используя в (0.70) последние полученные с помощью описываемого метода приближения α_i и α_{i-1} к корню $\varphi'(\alpha)$ (заметим, что возможна также модификация метода, когда вместо точки α_{i-1} выбирается

«лучшая» точка α_j , $1 \leq j < i$, в которой модуль производной принимает наименьшее значение). Предположим, что эта секущая пересечет ось абсцисс в точке α_c . Для обеспечения сходимости убедимся в том, что полученное приближение α_c является «разумным». К требованиям «разумности» можно отнести:

- α_c принадлежит текущему промежутку неопределенности $[\alpha_n, \alpha_k]$;
- величина расстояния от $\alpha_c \in [\alpha_n, \alpha_k]$ до «лучшей» из точек α_n, α_k не превышает половины длины $[\alpha_n, \alpha_k]$ (в противном случае деление промежутка неопределенности пополам вероятнее всего даст большее его сокращение);
- координата точки α_c численно существенно отличается от координаты α_i (или другой «лучшей» точки, по которой будет строиться секущая на следующем шаге) – в противном случае линейная аппроксимация на следующей итерации может оказаться бессмысленной из-за ошибок округления.

Если хотя бы одно из перечисленных требований не выполняется, то точка α_c за очередное приближение не принимается. При несоблюдении одного из двух первых условий в качестве очередного приближения принимается середина $[\alpha_n, \alpha_k]$. Если же нарушается третье условие, то вместо α_c обычно берут точку, лежащую по ту же сторону от α_i , что и α_c , но отстоящую от нее на фиксированное малое расстояние δ . При этом величина δ не должна превосходить половины допуска на длину окончательного интервала неопределенности.

Аналогично к описанному алгоритму можно построить регуляризованный метод на основе сочетания методов секущих и хорд. В этом случае второе требование «разумности» α_c не проверяется, а при несоблюдении первого условия в качестве очередного приближения принимают точку пересечения с осью абсцисс хорды, стягивающей точки графика $\varphi'(\alpha)$ с координатами α_n и α_k .

2.3.2.2. Методы, основанные на аппроксимации

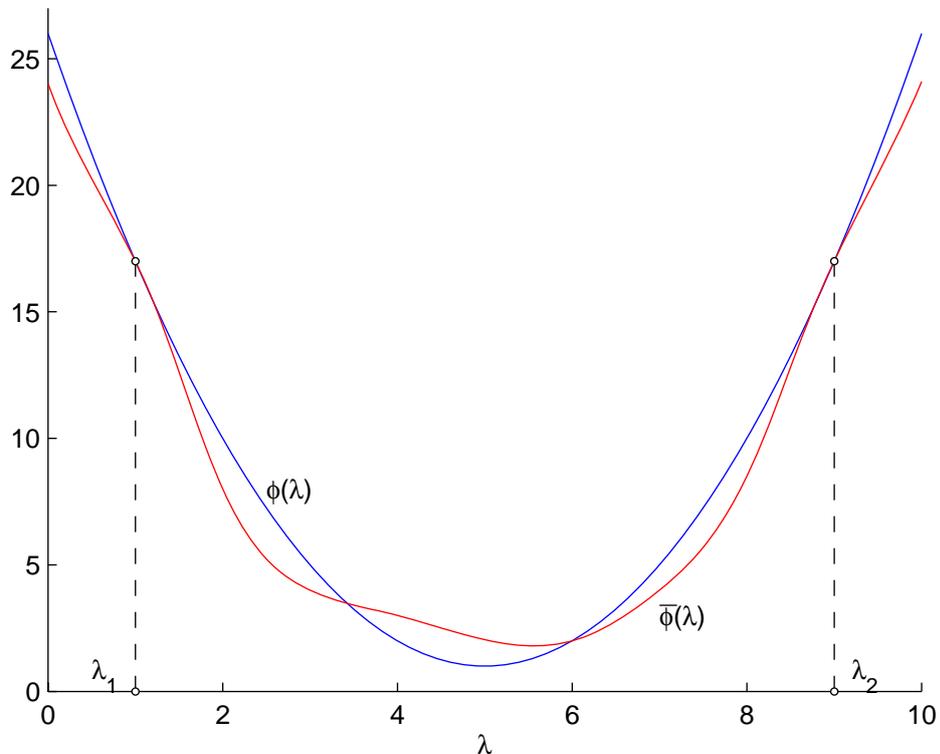
Идеи методов одномерной минимизации нулевого порядка, использующих интерполяцию (см. раздел 2.3.1.2), оказываются столь же плодотворными и при построении методов первого порядка. При этом возможность вычисления производных позволяет получить высокую точность интерполяции при небольшом количестве узлов.

Рассмотрим реализацию одного из таких методов, получившего название *метода кубической интерполяции*.

Метод предполагает наличие двух узлов интерполяции α_1 и α_2 , в которых принимаются совпадающими как значения оценочной функции $\varphi(\alpha)$ и ее аппроксимации $\bar{\varphi}(\alpha)$, так и значения производных этих функций $\varphi'(\alpha)$ и

$\bar{\varphi}'(\alpha)$:

$$\begin{cases} \varphi(\alpha_i) = \bar{\varphi}(\alpha_i) \\ \varphi'(\alpha_i) = \bar{\varphi}'(\alpha_i) \end{cases}, i = 1, 2.$$



Для поиска узлов можно организовать процедуру отыскания начального промежутка неопределенности, описанную в разделе 2.3.2, после чего в качестве узлов выбрать точки его граничные точки α_1 и α_2 (это гарантирует нахождение точки минимума оценочной функции между узлами).

Саму аппроксимирующую функцию удобно выбрать в виде интерполяционного многочлена Эрмита:

$$\bar{\varphi}(\alpha) = a_0 + a_1(\alpha - \alpha_1) + a_2(\alpha - \alpha_1)(\alpha - \alpha_2) + a_3(\alpha - \alpha_1)^2(\alpha - \alpha_2)$$

При таком выборе коэффициенты a_0, a_1, a_2, a_3 находятся рекурсивно:

$$\begin{cases} a_0 = \varphi(\alpha_1) \\ a_1 = \frac{\varphi(\alpha_2) - a_0}{\alpha_2 - \alpha_1} \\ a_2 = \frac{a_1 - \varphi'(\alpha_1)}{\alpha_2 - \alpha_1} \\ a_3 = \frac{\varphi'(\alpha_2) - a_1 - a_2(\alpha_2 - \alpha_1)}{(\alpha_2 - \alpha_1)^2} \end{cases}$$

Для отыскания точки минимума аппроксимирующей функции $\bar{\alpha}^*$

следует решить квадратное уравнение $\bar{\varphi}'(\alpha) = 0$ и выбрать единственный корень, принадлежащий отрезку $[\alpha_1, \alpha_2]$ (по условиям интерполяции функция $\bar{\varphi}'(\alpha)$ является квадратичной и на краях $[\alpha_1, \alpha_2]$ имеет разные знаки. Поэтому по теореме о непрерывной функции внутри этого промежутка имеется единственный корень. Данный корень соответствует минимуму оценочной функции, так как производная меняет свой знак с минуса на плюс). Далее процедура минимизации оценочной функции может быть продолжена по аналогии с методом квадратичной интерполяции.

2.3.3. Методы одномерной минимизации второго порядка

Методы одномерной минимизации второго порядка основаны на решении уравнения (0.68) с использованием первых и вторых производных оценочной функции.

Метод Ньютона

Рассмотрим некоторую стартовую точку α_1 (обычно выбирают $\alpha_1 = 0$). Разложим функцию $\varphi'(\alpha)$ в ряд Тейлора в окрестности α_1 :

$$\varphi'(\alpha) = \varphi'(\alpha_1) + \varphi''(\alpha_1)(\alpha - \alpha_1) + \dots$$

Ограничившись первыми двумя членами разложения, получим следующее соотношение для отыскания корня производной:

$$\varphi'(\alpha_1) + \varphi''(\alpha_1)(\alpha - \alpha_1) = 0,$$

Откуда:

$$\alpha = \alpha_1 - \frac{\varphi'(\alpha_1)}{\varphi''(\alpha_1)}$$

Полученная формула позволяет построить итерационную последовательность приближений к корню производной:

$$\alpha_{i+1} = \alpha_i - \frac{\varphi'(\alpha_i)}{\varphi''(\alpha_i)}.$$

Описанный алгоритм получил наименование *метода Ньютона (Ньютона-Рафсона)*, или *метода касательных*. Второе название связано с тем, что очередное приближение α_{i+1} определяется на графике $\varphi'(\alpha)$ как точка пересечения касательной в точке α_i с осью абсцисс (см. рис. 20)

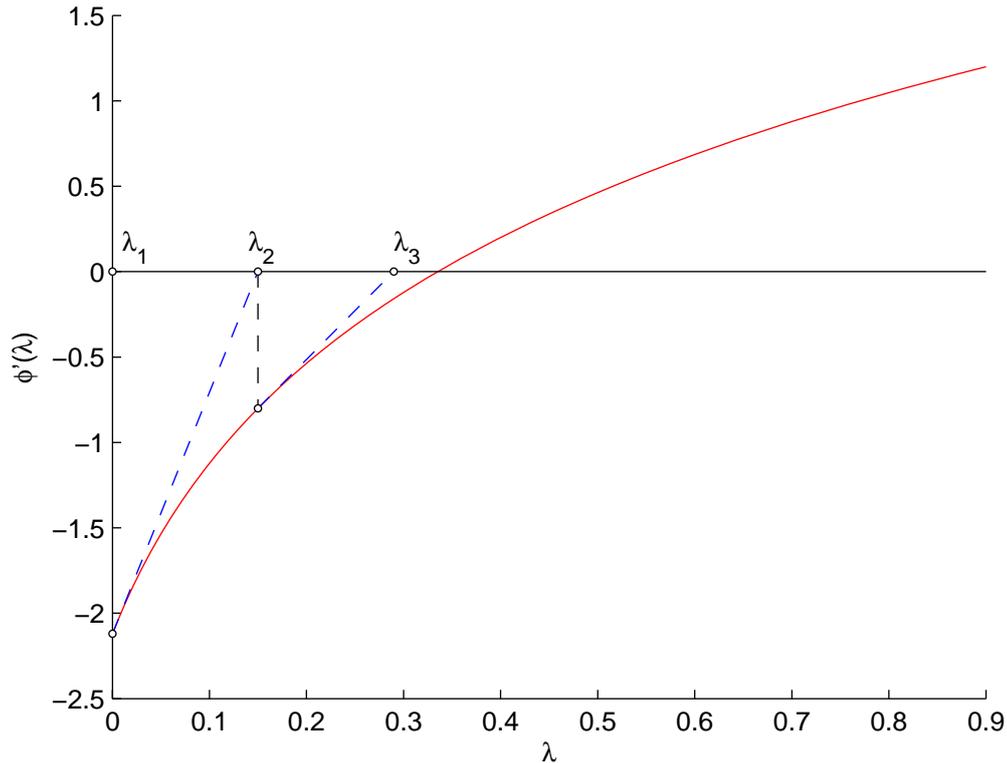


Рис. 20

Метод Ньютона достигает квадратичной скорости сходимости, когда стартовая точка достаточно близка к корню производной. Однако на практике скорость сходимости существенным образом зависит от выбора стартовой точки. В частности, при неудачном выборе исходной позиции метод может расходиться.

Регуляризованные методы

Для обеспечения надежности работы алгоритма второго порядка используют регуляризацию - по аналогии с тем, как это практикуется в методах первого порядка. Обычно применяется комбинация метода Ньютона и одного из стабильных методов первого порядка (дихотомии или хорд). Общая схема регуляризации не отличается от изложенной ранее, с той лишь разницей, что вместо секущей используется касательная.

2.3.4. Методы оценки длины шага

Рассмотренные в предыдущих разделах методы одномерного поиска преследовали цель получить более или менее точное приближение к точке оптимума $\varphi(\alpha)$ при решении подзадачи многомерной оптимизации (см. раздел 2.1). На самом деле сходимость многих алгоритмов многомерной оптимизации может быть получена без трудоемкой процедуры «точного» определения длины шага, а обеспечивается лишь его разумной оценкой. Все подобного рода оценки исходят из двух принципов:

- величина длины шага α не должна быть слишком большой (иначе

алгоритм локального спуска начинает осциллировать);

- величина длины шага α не должна быть слишком маленькой (иначе алгоритм локального спуска может сходиться очень медленно).

Рассмотрим некоторые распространенные правила оценки длины шага, которые часто именуют «экономичным» или «наилучшим» поиском.

Правило Гольдстейна

Правило Гольдстейна состоит в соблюдении условий:

$$\begin{cases} \varphi(\alpha) \leq \varphi(0) + m_1 \alpha \varphi'(0) \\ \varphi(\alpha) \geq \varphi(0) + m_2 \alpha \varphi'(0) \end{cases}$$

где $m_1 \in (0, 1)$ (обычно $m_1 = 0.1$); $m_2 \in (m_1, 1)$. Отметим, что первое из условий обеспечивает общее условие локального спуска (см. раздел 2.1).

Правило Армийо

По правилу Армийо

$$\begin{cases} \varphi(\alpha) \leq \varphi(0) + m_1 \alpha \varphi'(0) \\ \varphi(\alpha) \geq \varphi(0) + m_1 M \alpha \varphi'(0) \end{cases}$$

где $M > 1$ (обычно выбирается в пределах от 5 до 10).

Правило Вольфе-Пауэлла

В правиле Вольфе-Пауэлла предполагается использование производной оценочной функции:

$$\begin{cases} \varphi(\alpha) \leq \varphi(0) + m_1 \alpha \varphi'(0) \\ \varphi'(\alpha) \geq m_3 \varphi'(0) \end{cases}$$

где $m_3 \in (m_1, 1)$ (обычно $m_3 = 0.7$).

Нахождение величин α , удовлетворяющих изложенным правилам, достаточно просто. Рассмотрим возможный алгоритм на примере правила Гольдстейна.

Положим $\alpha_{\min} = 0$, α_{\max} - константа, выражающая бесконечность. Выберем α из промежутка $[\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$. Если первое условие по правилу не соблюдается, то нужно положить $\alpha_{\max} = \alpha$ и вернуться к выбору α . В противном случае следует проверить второе условие. Если оно не соблюдается, то нужно положить $\alpha_{\min} = \alpha$ и вернуться к выбору α . В итоге получим точку α , удовлетворяющую правилу Гольдстейна.

Начальный выбор α на втором и последующих шагах локального спуска можно осуществлять с учетом информации, полученной на предыдущих итерациях.

2.4. Методы многомерной безусловной оптимизации.

При изучении методов многомерной оптимизации мы будем исходить из непрерывности оценочной функции, а в случае использования производных также будем считать их непрерывными.

Сформулируем задачу оптимизации в виде (0.3) и обратимся первоначально к рассмотрению методов нулевого порядка, или *методов прямого поиска*.

2.4.1. Методы нулевого порядка.

В методах нулевого порядка (прямого поиска) используют информацию только о значениях целевой функции. Многие из этих методов не имеют строгого теоретического обоснования и построены на основе логических рассуждений. Поэтому оценки скорости сходимости для них часто отсутствуют.

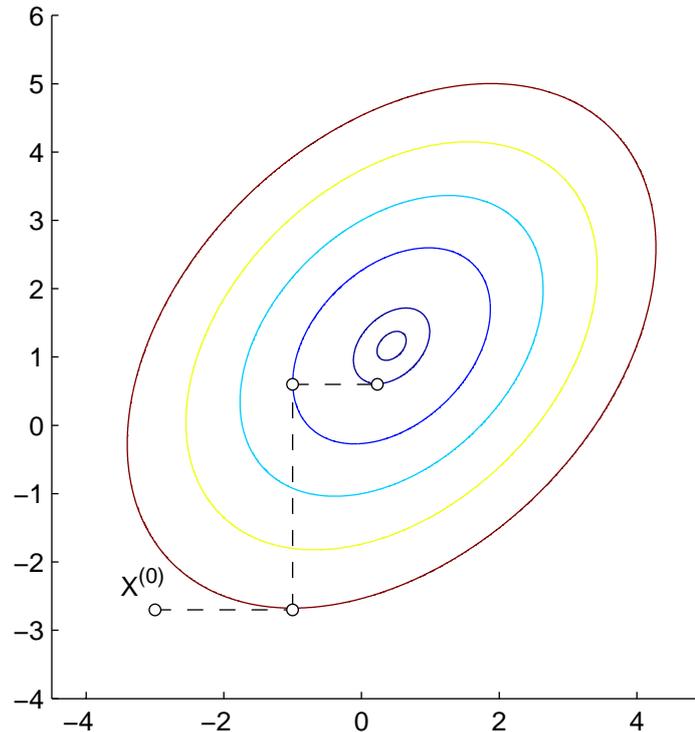
Методы прямого поиска не относятся к числу самых эффективных, так как знание первых, а тем более вторых производных оценочной функции позволяет существенно увеличить скорость сходимости. Однако безусловным достоинством методов прямого поиска является возможность решения таких задач оптимизации, когда оценочная функция недифференцируема или когда вычисление градиента и матрицы Гессе затруднено (такие случаи часто встречаются на практике).

Наиболее простым способом минимизации целевой функции с использованием только ее значений является поочередное изменение переменных. Подобный подход получил название *метода покоординатного спуска*.

Метод покоординатного спуска

Метод покоординатного спуска состоит в том, чтобы, исходя из стартовой точки $\mathbf{X}^{(0)}$, минимизировать оценочную функцию $\varphi(\mathbf{X})$ сначала по переменной x_1 , зафиксировав остальные, затем только по переменной x_2 и т.д. Для этого можно использовать методы одномерной минимизации или оценки длины шага, изложенные в разделе 2.3.4. Для определения направления поиска вдоль текущей координатной оси можно осуществить пробное вычисление оценочной функции вблизи начального значения соответствующей переменной.

После того как каждая переменная будет использована, поиск возобновляют вновь циклическим образом (вследствие этого, описанный метод иногда называют *циклическим методом релаксации*).



Можно доказать, что метод покоординатного спуска сходится при условии непрерывной дифференцируемости $\varphi(\mathbf{X})$. Высокая скорость сходимости наблюдается при решении задач с сепарабельной оценочной функцией (см. раздел 3) или когда переменные слабо связаны между собой.

В иных случаях скорость сходимости может оказаться весьма медленной. Хотя общих оценок сходимости метода покоординатного спуска не получено, исследование квадратичного случая показывает, что если линии уровня оценочной функции вытягиваются вдоль направления, непараллельного координатным осям, то скорость сходимости резко снижается (см. рис. 21)

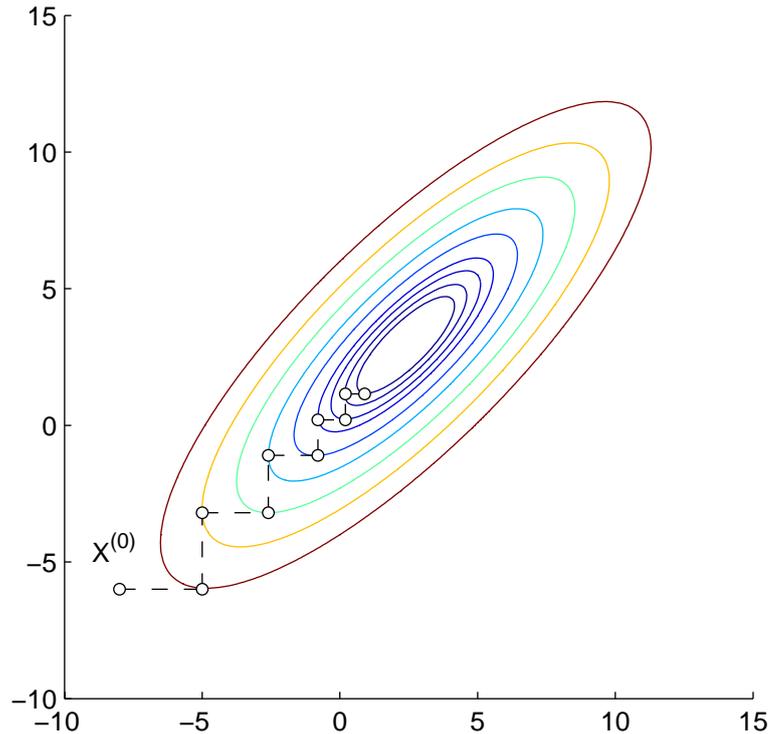


Рис. 21

Для некоторых типов функций полученная по методу покоординатного спуска точка может не оказаться локальным минимумом. В частности, такой случай наблюдается при останове на «ребре» функции, не являющейся всюду дифференцируемой, если ребро не параллельно координатным осям.

Метод Хука и Дживса

Данный метод является развитием идей покоординатного спуска. В нем поиск состоит из последовательности шагов *исследующего поиска* вдоль координатных осей, за которым в случае успеха следует *поиск по образцу*.

Примем исходную точку k -го шага $\mathbf{X}^{(k-1)}$ за так называемую *базовую точку*, вокруг которой осуществляется исследующий поиск. Этот поиск не предполагает проведения одномерной минимизации, а переменные x_i последовательно изменяются на величину Δx_i . Если при изменении x_i на Δx_i не происходит уменьшения оценочной функции, то эта переменная возмущается на величину $-\Delta x_i$. Когда и такое возмущение оказывается неудачным, переменную x_i фиксируют на исходной величине и приступают к вариации x_{i+1} .

В результате изменения всех переменных получим точку $\mathbf{X}^{(k)}$. В случае если $\mathbf{X}^{(k)} = \mathbf{X}^{(k-1)}$, то есть уменьшения оценочной функции не было

достигнуто, исследование повторяется вокруг исходной базовой точки, но с уменьшенными значениями $\square x_i$ (например, в 10 раз). Если $\mathbf{X}^{(k)} \neq \mathbf{X}^{(k-1)}$, то точка $\mathbf{X}^{(k)}$ считается удачным «образцом», и по направлению $\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}^{(k-1)}$ находится новая базовая точка:

$$\mathbf{X}_p^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} + \alpha(\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}^{(k-1)}), \quad (0.71)$$

где $\alpha > 0$ - «ускоряющий» множитель. Хук и Дживс использовали $\alpha = 1$, однако в дальнейшем предлагались разные способы задания «ускоряющего» множителя, вплоть до проведения по нему одномерной минимизации оценочной функции.

Вокруг $\mathbf{X}_p^{(k+1)}$ проводится исследующий поиск, в результате которого определяется точка $\mathbf{X}^{(k+1)}$. Если $\varphi(\mathbf{X}^{(k+1)}) \geq \varphi(\mathbf{X}^{(k)})$, то $\mathbf{X}^{(k)}$ принимается за исходную точку следующего шага оптимизации, при этом приращения параметров оптимизации уменьшаются в заданное число раз. Если же $\varphi(\mathbf{X}^{(k+1)}) < \varphi(\mathbf{X}^{(k)})$, то следует положить $\mathbf{X}^{(k-1)} = \mathbf{X}^{(k)}$, $\mathbf{X}^{(k)} = \mathbf{X}^{(k+1)}$ и вернуться к определению координат очередной базовой точки по формуле (0.71).

Метод деформируемого многогранника

Метод деформируемого многогранника, называемый еще *методом Нелдера-Мида* или поиском с использованием *регулярного симплекса*, предполагает построение в окрестности стартовой точки оптимизации $\mathbf{X}^{(0)}$ правильного многогранника (регулярного *симплекса*) с $(n+1)$ вершиной, где n - число параметров оптимизации. Координаты вершин \mathbf{Y}^i , $i=1,2,\dots,n+1$ можно определить различными способами, например, рассчитать по формуле:

$$\mathbf{Y}^1 = \mathbf{X}^{(0)}, \quad y_j^i = \begin{cases} x_j^{(0)} + \frac{\sqrt{n+1}-1}{n\sqrt{2}}l, & i = j+1 \\ x_j^{(0)} + \frac{\sqrt{n+1}+n-1}{n\sqrt{2}}l, & i \neq j+1 \end{cases}$$

где i - номер вершины, j - номер элемента в соответствующем векторе, l - длина ребра многогранника. После построения симплекса в его вершинах вычисляют значения оценочной функции и запоминают координаты точек $\mathbf{Y}^h, \mathbf{Y}^g, \mathbf{Y}^m$, которым соответствуют наибольшее, следующее за ним по величине и наименьшее значение оценочной функции. После этого можно найти центр масс \mathbf{X}_0 системы n материальных точек одинаковой массы, размещенных в вершинах симплекса, за исключением вершины \mathbf{Y}^h :

$$\mathbf{X}_0 = \frac{1}{n} \sum_{i \neq h} \mathbf{Y}^i$$

Вектор, соединяющий \mathbf{X}_0 и \mathbf{Y}^h , задает траекторию локального спуска.

Выбор точки на ней осуществляется с помощью одной из трех типовых операций: *отражения, растяжения, сжатия*.

В первую очередь выполняется отражение, которое определяет положение точки \mathbf{X}_r с помощью следующего отношения:

$$\mathbf{X}_r = \mathbf{X}_0 + \alpha(\mathbf{X}_0 - \mathbf{Y}^h),$$

где α - заданный коэффициент отражения (обычно $\alpha = 1$, что соответствует *нормальному* отражению). Если окажется, что $\varphi(\mathbf{X}_r) < \varphi(\mathbf{Y}^m)$, то точка \mathbf{X}_r является лучшей среди всех иных и имеет смысл двигаться дальше по избранной траектории, выполнив операцию растяжения:

$$\mathbf{X}_p = \mathbf{Y}^h + \gamma(\mathbf{X}_r - \mathbf{Y}^h)$$

где коэффициент растяжения $\gamma > 1$ (рекомендуется $\gamma = 2$). Из двух точек \mathbf{X}_p и \mathbf{X}_r выбирается лучшая (с меньшим значением оценочной функции), которая заменяет \mathbf{Y}^h в симплексе на следующем шаге оптимизации.

Если $\varphi(\mathbf{Y}^m) \leq \varphi(\mathbf{X}_r) \leq \varphi(\mathbf{Y}^g)$, то точка \mathbf{X}_r является лучшей (или, по крайней мере, не худшей) по сравнению с двумя точками $\mathbf{Y}^h, \mathbf{Y}^g$, вследствие чего целесообразно заменить в симплексе вершину \mathbf{Y}^h на \mathbf{X}_r .

В случае $\varphi(\mathbf{X}_r) > \varphi(\mathbf{Y}^g)$ разумно выполнить операцию сжатия для нахождения точки \mathbf{X}_c . При сжатии могут встретиться две ситуации:

$$1) \varphi(\mathbf{X}_r) > \varphi(\mathbf{Y}^h)$$

Здесь разумно выполнить сжатие по схеме:

$$\mathbf{X}_c = \mathbf{X}_0 + \beta(\mathbf{Y}^h - \mathbf{X}_0), \quad (0.72)$$

причем $0 < \beta < 1$ (рекомендуется $\beta = 0.5$);

$$2) \varphi(\mathbf{Y}^g) < \varphi(\mathbf{X}_r) \leq \varphi(\mathbf{Y}^h)$$

Здесь первоначально заменим в симплексе точку \mathbf{Y}^h на \mathbf{X}_r , введя соответствующее переобозначение \mathbf{X}_r на \mathbf{Y}^h , а затем выполним сжатие по (0.72).

После получения точки \mathbf{X}_c необходимо сравнить значение вычисленной в ней оценочной функции со значением в \mathbf{Y}^h . Если $\varphi(\mathbf{X}_c) < \varphi(\mathbf{Y}^h)$, то заменим \mathbf{Y}^h в симплексе на \mathbf{X}_c и продолжим оптимизацию на следующем шаге. В противном случае получается, что все попытки уменьшения оценочной функции закончились неудачей. Тогда необходимо уменьшить размерность симплекса, задав вершины относительно точки \mathbf{Y}^m следующим образом:

$$\mathbf{Y}^i = \mathbf{Y}^i + \delta(\mathbf{Y}^i - \mathbf{Y}^m)$$

- и продолжить поиск до выполнения условий сходимости. Операция уменьшения размера симплекса называется *редукцией*. Коэффициент редукции δ обычно принимают равным 0.5.

Метод сопряженных направлений

Метод сопряженных направлений, предложенный Пауэллом, является одним из наиболее эффективных методов прямого поиска. Сам метод был разработан для оптимизации квадратичных функций. Однако он с успехом применяется и для других задач, поскольку в окрестности точки оптимума любую нелинейную функцию можно аппроксимировать квадратичной.

Основная идея метода сопряженных направлений состоит в том, что если квадратичная функция n переменных приведена к виду суммы полных квадратов, то ее оптимум может быть найден в результате n одномерных поисков вдоль преобразованных координатных осей.

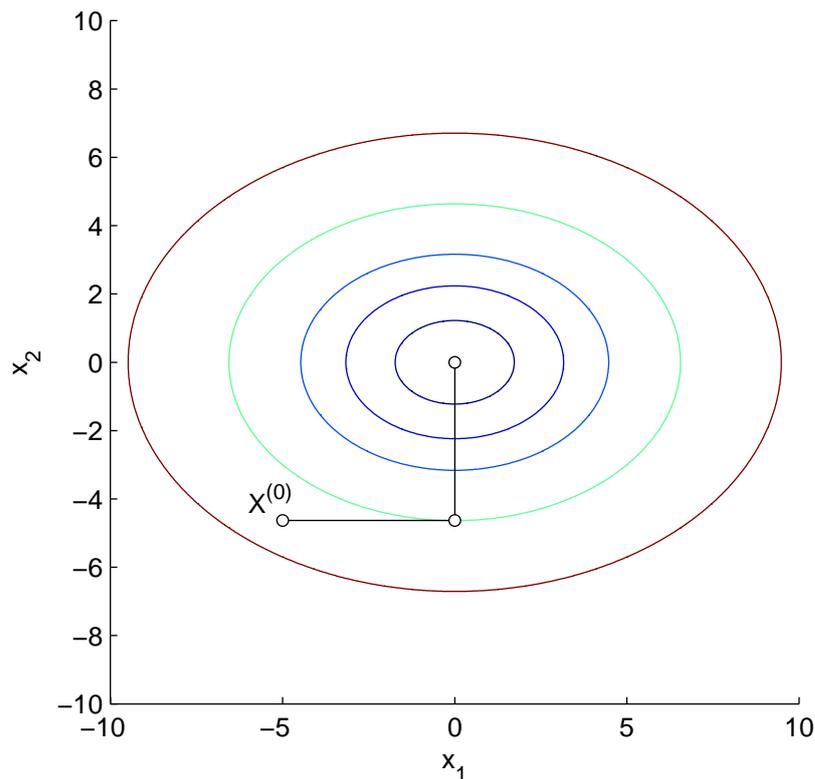


Рис.

Рассмотрим квадратичную целевую функцию:

$$\varphi(\mathbf{X}) = \varphi_0 + \mathbf{R}^T \mathbf{X} + \frac{1}{2} \mathbf{X}^T \mathbf{H} \mathbf{X} \quad (0.73)$$

Произведем замену переменных \mathbf{X} на \mathbf{Y} с таким расчетом, чтобы в выражении $\varphi(\mathbf{Y})$ отсутствовали смешанные произведения переменных $y_i y_j$, $i \neq j$:

$$\varphi(\mathbf{Y}) = \varphi_0 + \mathbf{R}_1^T \mathbf{Y} + \frac{1}{2} \mathbf{Y}^T \mathbf{D} \mathbf{Y}, \quad (0.74)$$

где \mathbf{D} - диагональная матрица, \mathbf{R}_1 - вектор коэффициентов. В отличие от (0.73), функция (0.74) является сепарабельной и может быть легко минимизирована методом покоординатного спуска.

Центральной проблемой замены переменных является преобразование

квадратичной формы

$$\mathbf{Q} = \mathbf{X}^T \mathbf{H} \mathbf{X}$$

к виду:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Y}^T \mathbf{D} \mathbf{Y}, \quad (0.75)$$

С этой целью положим:

$$\mathbf{X} = \mathbf{S} \mathbf{Y}, \quad (0.76)$$

где \mathbf{S} – квадратная невырожденная матрица преобразования. Тогда

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Y}^T \mathbf{S}^T \mathbf{H} \mathbf{S} \mathbf{Y},$$

откуда

$$\mathbf{D} = \mathbf{S}^T \mathbf{H} \mathbf{S}. \quad (0.77)$$

Обозначим столбцы матрицы \mathbf{S} через \mathbf{S}_i . Из (0.77) следует, что:

$$\mathbf{S}_i^T \mathbf{H} \mathbf{S}_j = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ d_{ii}, & i = j \end{cases} \quad (0.78)$$

Векторы \mathbf{S}_i , удовлетворяющие (0.78), называются *сопряженными направлениями относительно матрицы \mathbf{H}* . Эти векторы по сути задают новую систему координат $Oy_1y_2\dots y_n$ вместо исходной системы $Ox_1x_2\dots x_n$. Действительно, в системе $Ox_1x_2\dots x_n$ каждая точка \mathbf{X} определяется как линейная комбинация ортов \mathbf{E}_i , $i = 1, 2, \dots, n$, направленных вдоль координатных осей Ox_1, Ox_2, \dots, Ox_n :

$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^n x_i \mathbf{E}_i$$

Используя (0.76), мы можем ту же точку \mathbf{X} определить как линейную комбинацию новых линейно независимых базисных векторов \mathbf{S}_i :

$$\mathbf{X} = \mathbf{S} \mathbf{Y} = \sum_{i=1}^n y_i \mathbf{S}_i.$$

Следовательно, в новой системе координат $Oy_1y_2\dots y_n$ в качестве координатных осей выступают векторы \mathbf{S}_i . В силу диагональности матрицы \mathbf{D} в (0.75) главные полуоси эллиптических линий уровня оценочной функции $\varphi(\mathbf{Y})$ будут параллельны новым осям координат. Поэтому последовательный координатный поиск вдоль \mathbf{S}_i , $i = 1, 2, \dots, n$ позволит достигнуть минимума квадратичной функции $\varphi(\mathbf{Y})$.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что движение по n линейно независимым сопряженным направлениям позволяет отыскать минимум квадратичной функции n переменных из любой стартовой точки, при условии выполнения точной одномерной минимизации оценочной функции вдоль этих направлений.

Остается, однако, нерешенным вопрос о том, как построить сопряженные направления. Если функция квадратичная и известна ее матрица \mathbf{H} , что для этих целей легче всего использовать факторизацию (разложение на множители) матрицы \mathbf{H} по Холецкому:

$$\mathbf{H} = \mathbf{P}^T \mathbf{D} \mathbf{P}. \quad (0.79)$$

Сравнивая (0.77) и (0.79), получим:

$$\mathbf{S} = \mathbf{P}^{-1}.$$

К сожалению, при применении методов оптимизации нулевого порядка предполагается, что использовать элементы матрицы \mathbf{H} нельзя (вторые производные недоступны или сложно вычисляются). Поэтому сопряженные направления определяют другим образом, но с таким расчетом, чтобы соотношения (0.78) соблюдались и без вычисления вторых производных.

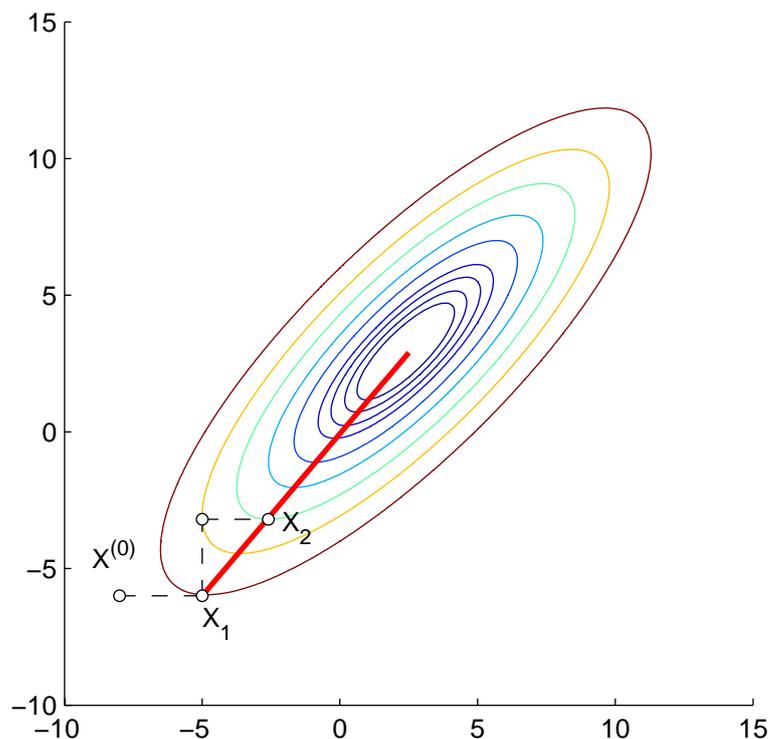
Рассмотрим данный способ. Пусть известно некоторое направление локального спуска \mathbf{V} . Проведем точную одномерную минимизацию вдоль по данному направлению из двух различных точек \mathbf{X}_1 и \mathbf{X}_2 , получив точки локального минимума, соответственно, \mathbf{X}_1^{\min} и \mathbf{X}_2^{\min} . Очевидно, что градиент оценочной функции в точках локального минимума должен быть ортогонален \mathbf{V} :

$$\begin{cases} \mathbf{V}^T (\mathbf{H} \mathbf{X}_1^{\min} + \mathbf{R}) = 0 \\ \mathbf{V}^T (\mathbf{H} \mathbf{X}_2^{\min} + \mathbf{R}) = 0 \end{cases}.$$

Из полученных соотношений следует, что

$$\mathbf{V}^T \mathbf{H} (\mathbf{X}_2^{\min} - \mathbf{X}_1^{\min}) = 0,$$

то есть направления \mathbf{V} и $(\mathbf{X}_2^{\min} - \mathbf{X}_1^{\min})$ оказываются сопряженными. Таким образом, два сопряженных направления построить достаточно просто. В качестве \mathbf{V} можно взять первую координатную ось, а точку \mathbf{X}_2 можно получить из \mathbf{X}_1 путем одномерного поиска вдоль другой координатной оси.



Это построение легко обобщается на случай задач более высокой размерности. В частности, нетрудно показать, что если точка \mathbf{X}_1^{\min} получена в результате поиска из точки \mathbf{X}_1 вдоль каждого из $m, m < n$ сопряженных направлений $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_m$, а точка \mathbf{X}_2^{\min} получена в результате поиска из точки \mathbf{X}_2 по тем же направлениям, то вектор $(\mathbf{X}_2^{\min} - \mathbf{X}_1^{\min})$ задает направление, сопряженное со всеми $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_m$.

Данное свойство позволяет организовать построение сопряженных направлений по следующей схеме. Сначала поиск осуществляется вдоль координатных осей, затем эти направления последовательно заменяются вновь построенными сопряженными направлениями. Например, в трехмерном случае из стартовой точки $\mathbf{X}^{(0)}$ выполняют одномерный поиск вдоль координатной оси Ox_3 - получаем точку $\mathbf{X}^{(1)}$, затем вдоль Ox_2, Ox_1 , затем вновь вдоль Ox_3 . В результате получаем точку $\mathbf{X}^{(4)}$. Направления Ox_3 и $\mathbf{X}^{(4)} - \mathbf{X}^{(1)}$ сопряжены. Направление Ox_1 заменяется на $\mathbf{X}^{(4)} - \mathbf{X}^{(1)}$. Далее повторяется серия поисков вдоль $\mathbf{X}^{(4)} - \mathbf{X}^{(1)}$ - получается точка $\mathbf{X}^{(5)}$, Ox_2, Ox_3 , снова $\mathbf{X}^{(4)} - \mathbf{X}^{(1)}$. В результате имеем точку $\mathbf{X}^{(8)}$. Новое направление $\mathbf{X}^{(8)} - \mathbf{X}^{(5)}$ оказывается сопряженным с Ox_3 и $\mathbf{X}^{(4)} - \mathbf{X}^{(1)}$. Следовательно, если провести поиск вдоль $\mathbf{X}^{(8)} - \mathbf{X}^{(5)}$, мы найдем минимум квадратичной функции трех переменных, поскольку поиск последовательно осуществлялся по трем взаимно сопряженным направлениям.

Метод Пауэлла отличается столь же высокой надежностью, как и другие методы прямого поиска. В то же время его скорость сходимости достигает сверхлинейной. Поэтому проблема выбора метода нулевого порядка часто обоснованно решается в пользу метода Пауэлла.

2.4.2. Методы безусловной минимизации второго порядка

Методы безусловной минимизации второго порядка с методических позиций целесообразно рассмотреть вслед за алгоритмами прямого поиска, поскольку ряд методов первого порядка основывается на аппроксимации матрицы Гессе.

Для изложения основных концепций разложим $\varphi(\mathbf{X})$ в ряд Тейлора в окрестности точки $\mathbf{X}^{(0)}$

$$\varphi(\mathbf{X}) = \varphi(\mathbf{X}^{(0)} + \Delta \mathbf{X}) = \varphi(\mathbf{X}^{(0)}) + \mathbf{G}^T(\mathbf{X}^{(0)}) \Delta \mathbf{X} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{X}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^{(0)}) \Delta \mathbf{X} + \dots$$

Предположим, что первые три члена разложения достаточно точно описывают поведение оценочной функции. Тогда стационарная точка полученной модельной функции определяется соотношением:

$$\mathbf{H}(\mathbf{X}^{(0)}) \Delta \mathbf{X} + \mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)}) = 0$$

откуда

$$\mathbf{H}(\mathbf{X}^{(0)}) \Delta \mathbf{X} = -\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)}) \quad (0.80)$$

Если система линейных уравнений (0.80) имеет единственное решение, то оно может быть записано в виде:

$$\square \mathbf{X} = -\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{X}^{(0)})\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)}) \quad (0.81)$$

Алгоритм, определяемый последовательным применением (0.81), получил название *метода Ньютона*. Данный метод достигает квадратичной скорости сходимости. Однако на пути его реализации имеются две существенных проблемы:

- тупой угол между направлением движения и градиентов обеспечивается только при условии:

$$\mathbf{G}^T(\mathbf{X}^{(0)})\square \mathbf{X} = -\mathbf{G}^T(\mathbf{X}^{(0)})\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{X}^{(0)})\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)}) < 0, \quad \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{X}^{(0)}) > 0;$$

- если точка $\mathbf{X}^{(0)}$ стационарная точка, то

$$\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)}) = 0, \quad \square \mathbf{X} = -\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{X}^{(0)})\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)}) = 0$$

Для решения указанных проблем используются модифицированные методы Ньютона.

Модифицированные методы Ньютона

Основная идея методов заключается в следующем.

Сходимость обеспечивается, когда:

$$\square \mathbf{X} = -\bar{\mathbf{H}}^{-1}\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)}), \quad \bar{\mathbf{H}}^{-1} > 0$$

Если в некоторой стартовой точке $\mathbf{X}^{(0)}$ не соблюдается условие $\mathbf{H}(\mathbf{X}^{(0)}) > 0$, то нужно матрицу Гессе \mathbf{H} временно заменить на $\bar{\mathbf{H}} > 0$. При этом желательно, чтобы $\bar{\mathbf{H}}$ не сильно отличалась от матрицы \mathbf{H} , поскольку в благоприятной ситуации \mathbf{H} обеспечивает квадратичную скорость сходимости.

Метод с использованием спектрального разложения

Спектральное разложение \mathbf{H} имеет вид:

$$\mathbf{H} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}^T,$$

$\mathbf{\Lambda}$ — диагональная матрица собственных чисел

\mathbf{U} - ортогональная матрица, её столбцы - собственные векторы.

Для модификации поступим следующим образом.

Если $\lambda_i > \delta$, то $\bar{\lambda}_i = \lambda_i$;

если $\lambda_i < \delta$, то $\bar{\lambda}_i = \delta$.

$$\bar{\mathbf{H}} = \mathbf{U}\bar{\mathbf{\Lambda}}\mathbf{U}^T,$$

где $\bar{\mathbf{\Lambda}}$ - диагональная матрица с диагональными числами $\bar{\lambda}_i$.

Если $\lambda_i > \delta \forall i$, то $\mathbf{H} > 0$, $\bar{\mathbf{H}} = \mathbf{H}$

Метод Гилла и Мюррея (метод с использованием разложения по Холецкому)

Разложение матрицы Гессе имеет вид:

$$\mathbf{H} = \mathbf{LDL}^T$$

\mathbf{L} - нижняя треугольная единичная матрица; \mathbf{D} — диагональная матрица. Если столбцы матрицы \mathbf{L} с номерами от 1 до $(j-1)$ известны, то j -й столбец вычисляется по формуле:

$$d_{jj} = h_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} d_{kk} l_{jk}^2, \quad l_{ij} = \frac{1}{d_{jj}} (h_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} d_{kk} l_{jk} l_{ik})$$

Свойство разложения: если $\mathbf{H} > 0$, то $d_{jj} > 0$, $\forall j$.

Если при разложении на j -том этапе $d_{jj} < \delta$, то $\bar{d}_{jj} = \delta$, иначе $\bar{d}_{jj} = d_{jj}$.

Далее

$$l_{ij} = \frac{1}{\bar{d}_{jj}} (h_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \bar{d}_{kk} l_{jk} l_{ik})$$

$$\mathbf{H} = \bar{\mathbf{L}}\bar{\mathbf{D}}\bar{\mathbf{L}}^T$$

где матрица $\bar{\mathbf{L}}$ содержит элементы l_{ij} , рассчитанные с учетом модификации элементов \mathbf{D} .

Метод Марквардта

Модифицированная матрица Гессе здесь ищется в виде:

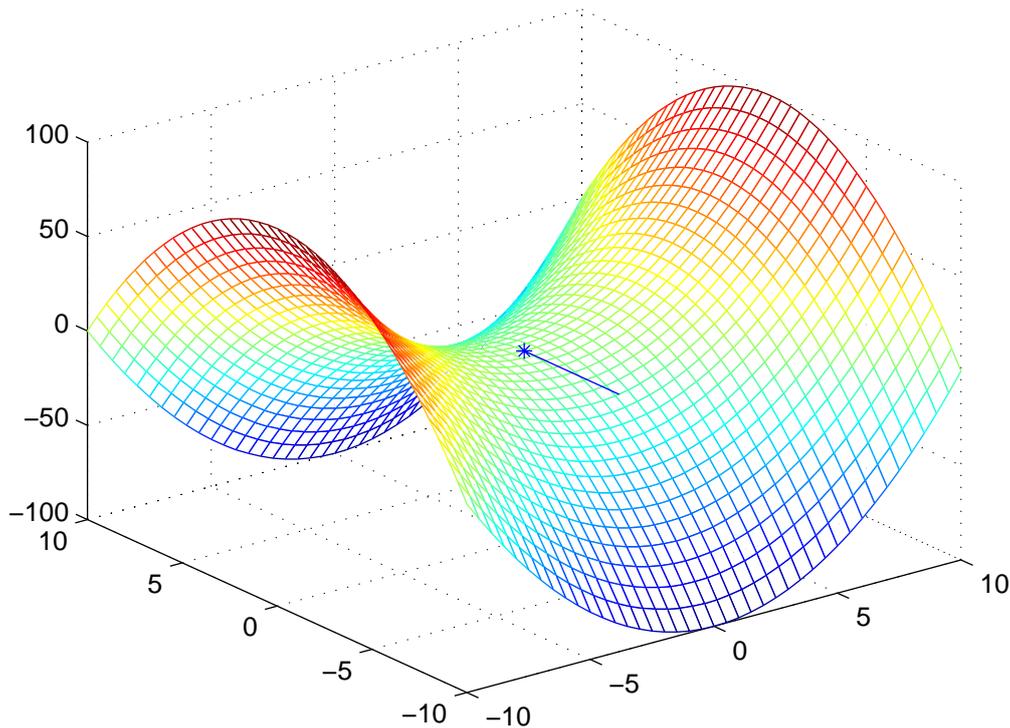
$$\bar{\mathbf{H}} = \mathbf{H}(\mathbf{X}^{(k)}) + p^{(k)}\mathbf{I}, \quad p^{(k)} \geq 0$$

В стартовой точке $p^{(0)}$ - большое число (существенно большее максимального диагонального элемента $\mathbf{H}(\mathbf{X}^{(0)})$).

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} - (\mathbf{H}(\mathbf{X}^{(k)}) + p^{(k)}\mathbf{I})^{-1} \mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)})$$

Если $\varphi(\mathbf{X}^{(k+1)}) < \varphi(\mathbf{X}^{(k)})$, то положим $p^{(k+1)} = p^{(k)} / \beta$, $\beta > 1$ и перейдем к следующему шагу; иначе $p^{(k+1)} = p^{(k)} \beta$ и повторим текущий шаг.

При $p^{(k)} \rightarrow \infty$ направление поиска стремится к $-\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)})$



Решение проблемы стартовой стационарной точки

Может случиться, что в стартовой точке:

$$\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)}) = 0$$

Тогда можно использовать спектральное разложение:

$$\mathbf{H} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}^T$$

Если $\lambda_i > \delta \forall i$, то $\mathbf{H}(\mathbf{X}^{(0)}) > 0$ и точка $\mathbf{X}^{(0)}$ - локальный минимум. В противном случае выбираем λ_k - максимальное по модулю отрицательное собственное число.

$$\square \mathbf{X} = \mathbf{U}_k$$

2.4.3. Методы безусловной минимизации первого порядка.

2.4.3.1. Методы общего применения

Метод градиентного спуска

Метод градиентного спуска:

$$\square \mathbf{X} = -\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)}) - \text{антиградиент.}$$

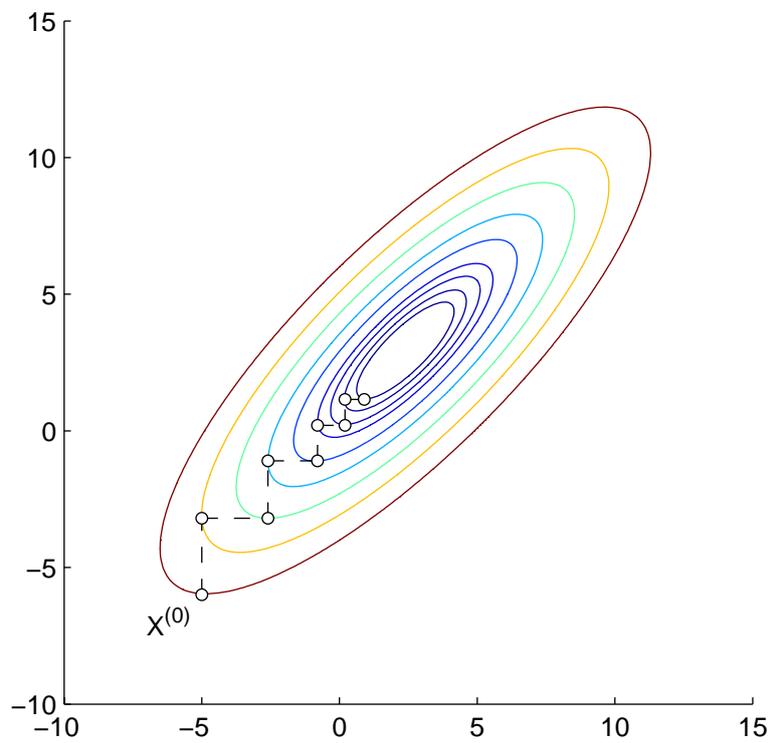
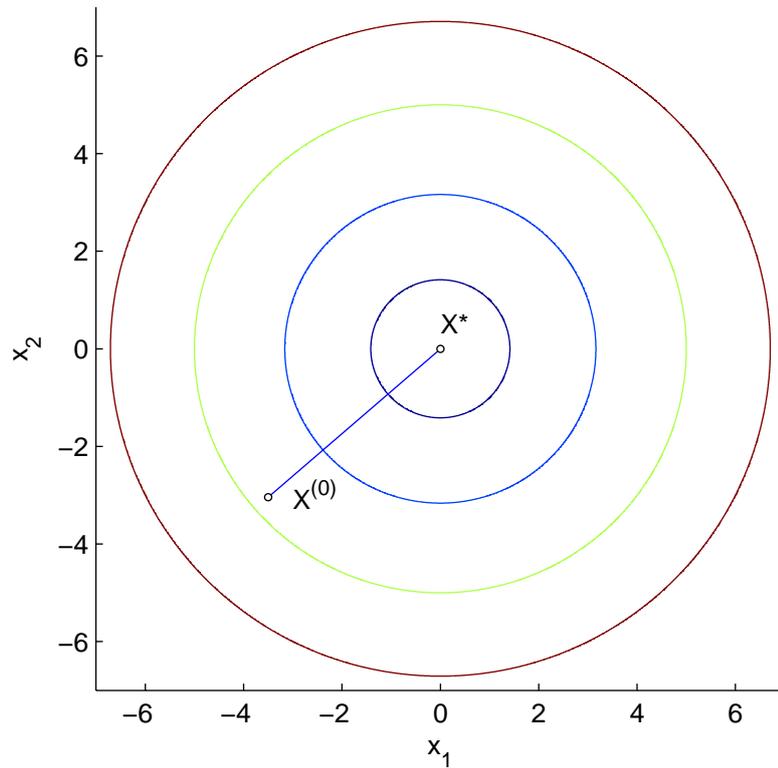
$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} - \alpha \mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)})$$

Если α выбирается с помощью одномерной минимизации, то метод называется методом наискорейшего спуска.

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} - \alpha \frac{\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)})}{\sqrt{\mathbf{G}^T(\mathbf{X}^{(k)})\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)})}}, \mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)}) \neq 0$$

Метод обладает линейной скоростью сходимости, но может сходиться

сколь угодно медленно, что иллюстрируют два рисунка:



Если линии уровня вытянуты вдоль направления, не совпадающего с осями координат, то сходимость резко ухудшается.

Методы сопряженных градиентов

В методах данной группы градиенты используются для построения сопряженных направлений.

Рассмотрим квадратичную функцию: $\varphi(\mathbf{X}) = \varphi_0 + \mathbf{R}^T \mathbf{X} + \frac{1}{2} \mathbf{X}^T \mathbf{H} \mathbf{X}$

Введем обозначения:

$$\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)}) = \mathbf{G}_k; \quad \square \mathbf{G}_k = \mathbf{G}_{k+1} - \mathbf{G}_k$$

Первое сопряженное направление:

$$\mathbf{S}_0 = -\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)}) = -\mathbf{G}_0$$

Тогда нахождение очередной точки производится по формуле:

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} - \alpha_k \mathbf{S}_k$$

α_k - длина шага, найденная одномерной минимизацией.

Построение следующего сопряженного направления осуществляется в виде линейной комбинации градиента и предыдущего сопряженного градиента:

$$\mathbf{S}_{k+1} = -\mathbf{G}_{k+1} + \beta_k \mathbf{S}_k$$

Умножая на $\mathbf{S}_k^T \mathbf{H}$ слева:

$$\mathbf{S}_k^T \mathbf{H} \mathbf{S}_{k+1} = -\mathbf{S}_k^T \mathbf{H} \mathbf{G}_{k+1} + \beta_k \mathbf{S}_k^T \mathbf{H} \mathbf{S}_k = 0$$

$$\beta_k = \frac{\mathbf{S}_k^T \mathbf{H} \mathbf{G}_{k+1}}{\mathbf{S}_k^T \mathbf{H} \mathbf{S}_k}$$

Данную формулу нельзя использовать в методах первого порядка. Поэтому используют другие формулы:

Метод Флетчера-Ривза:
$$\beta_k = \frac{\mathbf{G}_{k+1}^T \mathbf{G}_{k+1}}{\mathbf{G}_k^T \mathbf{G}_k}$$

Метод Полака-Рибьера:
$$\beta_k = \frac{\mathbf{G}_{k+1}^T \square \mathbf{G}_k}{\mathbf{G}_k^T \mathbf{G}_k}$$

Квазиньютоновские методы

Метод Ньютона порождает последовательность точек:

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} - \alpha_k \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{X}^{(k)}) \mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)})$$

Аппроксимируем $\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{X}^{(k)})$ матрицей \mathbf{A}_k :

$$\mathbf{A}_0 = \mathbf{I}, \quad \mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{A}_k + \square \mathbf{A}_k$$

(метод переменной метрики). К матрице \mathbf{A}_{k+1} предъявляют следующие требования:

1. Симметричность
2. Положительная определенность
3. Правильное описание кривизны квадратичной функции (квадратичной модели) на предшествующем шаге

Для квадратичной функции $\varphi(\mathbf{X}) = \varphi_0 + \mathbf{R}^T \mathbf{X} + \frac{1}{2} \mathbf{X}^T \mathbf{H} \mathbf{X}$:

$$\nabla \varphi(\mathbf{X}^{(k)}) = \mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)}) = \mathbf{H} \mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{R}, \quad \nabla \varphi(\mathbf{X}^{(k+1)}) = \mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k+1)}) = \mathbf{H} \mathbf{X}^{(k+1)} + \mathbf{R}$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}) = \mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k+1)}) - \mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)})$$

Пусть $\Delta \mathbf{X}_k = \mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}$ и по-прежнему $\Delta \mathbf{G}_k = \mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k+1)}) - \mathbf{G}(\mathbf{X}^{(k)})$.

Тогда $\mathbf{H} \Delta \mathbf{X}_k = \Delta \mathbf{G}_k$. Для неквадратичных функций по аналогии:

$$\mathbf{H}(\mathbf{X}^{(k)}) \Delta \mathbf{X}_k = \Delta \mathbf{G}_k, \quad \Delta \mathbf{X}_k = \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{X}^{(k)}) \Delta \mathbf{G}_k$$

Это условие называется ньютоновским. Для правильного описания кривизны вводим квазиньютоновское условие:

$$\Delta \mathbf{X}_k = \mathbf{A}_{k+1} \Delta \mathbf{G}_k$$

Определим поправку к матрице переменной метрики:

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{A}_k + \Delta \mathbf{A}_k$$

$$\Delta \mathbf{X}_k = (\mathbf{A}_k + \Delta \mathbf{A}_k) \Delta \mathbf{G}_k$$

$$\Delta \mathbf{A}_k \Delta \mathbf{G}_k = -\mathbf{A}_k \Delta \mathbf{G}_k + \Delta \mathbf{X}_k$$

Полученному уравнению удовлетворяет решение:

$$\Delta \mathbf{A}_k = \frac{\Delta \mathbf{X}_k \mathbf{Y}^T}{\mathbf{Y}^T \Delta \mathbf{G}_k} - \frac{\mathbf{A}_k \Delta \mathbf{G}_k \mathbf{Z}^T}{\mathbf{Z}^T \Delta \mathbf{G}_k}$$

\mathbf{Y} , \mathbf{Z} - некоторые векторы (выбор обуславливается свойствами симметричности и положительной определенности матрицы \mathbf{A}_{k+1})

Поправочная матрица представляет матрицу ранга 1 или 2 (дефектного ранга) – один шаг дает информацию о кривизне вдоль одного направления

Рассмотрим варианты выбора векторов \mathbf{Y} , \mathbf{Z}

1. Метод Дэвидона – Флетчера – Пауэлла

$$\mathbf{Y} = \Delta \mathbf{X}_k, \quad \mathbf{Z} = \mathbf{A}_k \Delta \mathbf{G}_k$$

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{A}_k + \frac{\Delta \mathbf{X}_k \Delta \mathbf{X}_k^T}{\Delta \mathbf{X}_k^T \Delta \mathbf{G}_k} - \frac{\mathbf{A}_k \Delta \mathbf{G}_k \Delta \mathbf{G}_k^T \mathbf{A}_k}{\Delta \mathbf{G}_k^T \mathbf{A}_k \Delta \mathbf{G}_k}$$

2. Метод Бройдена

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Z} = \Delta \mathbf{X}_k - \mathbf{A}_k \Delta \mathbf{G}_k$$

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{A}_k + \frac{(\Delta \mathbf{X}_k - \mathbf{A}_k \Delta \mathbf{G}_k)(\Delta \mathbf{X}_k - \mathbf{A}_k \Delta \mathbf{G}_k)^T}{(\Delta \mathbf{X}_k - \mathbf{A}_k \Delta \mathbf{G}_k)^T \Delta \mathbf{G}_k}$$

3 Метод Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шэнно

В данном методе сначала находится аппроксимация прямой матрицы Гессе:

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_k &\cong \mathbf{H}_k \\
\mathbf{B}_{k+1} \square \mathbf{X}_k &= \square \mathbf{G}_k \\
\mathbf{B}_{k+1} &= \mathbf{B}_k + \square \mathbf{B}_k \\
\square \mathbf{B}_k &= \frac{\square \mathbf{G}_k \mathbf{Y}^T}{\mathbf{Y}^T \square \mathbf{X}_k} - \frac{\mathbf{B}_k \square \mathbf{X}_k \mathbf{Z}^T}{\mathbf{Z}^T \square \mathbf{X}_k} \\
\mathbf{Y} &= \square \mathbf{G}_k; \quad \mathbf{Z} = \mathbf{B}_k \square \mathbf{X}_k; \\
\mathbf{B}_{k+1} &= \mathbf{B}_k + \frac{\square \mathbf{G}_k \square \mathbf{G}_k^T}{\square \mathbf{G}_k^T \square \mathbf{X}_k} - \frac{\mathbf{B}_k \square \mathbf{X}_k \square \mathbf{X}_k^T \mathbf{B}_k}{\square \mathbf{X}_k^T \mathbf{B}_k \square \mathbf{X}_k}
\end{aligned}$$

Можно найти соотношение между обратными матрицами вследствие дефекта ранга поправочных матриц. Обозначая $\mathbf{A}_k = \mathbf{B}_k^{-1}$, $\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{B}_{k+1}^{-1}$

$$\mathbf{A}_{k+1} = \left(\mathbf{I} - \frac{\square \mathbf{X}_k \square \mathbf{G}_k^T}{\square \mathbf{X}_k^T \square \mathbf{G}_k} \right) \mathbf{A}_k \left(\mathbf{I} - \frac{\square \mathbf{X}_k \square \mathbf{G}_k^T}{\square \mathbf{X}_k^T \square \mathbf{G}_k} \right) + \frac{\square \mathbf{X}_k \square \mathbf{X}_k^T}{\square \mathbf{X}_k^T \square \mathbf{G}_k}$$

Сравнение сходимости градиентных методов

1. Метод наискорейшего спуска: обладает линейной сходимостью, ν может быть сколь угодно близким к единице, если матрица \mathbf{H} плохо обусловлена

2. Методы сопряженных градиентов: достигается сверхлинейная сходимость по n шагам, а при определенных требованиях к \mathbf{H} – квадратичная по n шагам, при условии достаточно точной одномерной минимизации

3. Квазиньютоновские методы имеют сходимость такую же, как методы сопряженных градиентов. По сравнению с последними имеют невысокие требования к точности одномерной минимизации, но предполагают существенные затраты памяти ($\square n^2$) и значительный объем промежуточных вычислений ($\square n^2$).

2.4.3.2. Решение задач о наименьших квадратах

Рассмотрим специализированные методы решения задачи о наименьших квадратах:

$$\varphi(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^m f_i^2(\mathbf{X}) \rightarrow \min$$

Основная идея методов состоит в том, что проводится линеаризация функций \mathbf{F} . В результате получаем квадратичную модель для $\varphi(\mathbf{X})$. Пусть

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{X}) \\ f_2(\mathbf{X}) \\ \vdots \\ f_m(\mathbf{X}) \end{bmatrix}$$

$$\varphi(\mathbf{X}) = \mathbf{F}^T(\mathbf{X})\mathbf{F}(\mathbf{X}) \rightarrow \min$$

Разложим в ряд Тейлора все функции \mathbf{F} :

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}) = \mathbf{F}(\mathbf{X}^{(0)} + \Delta \mathbf{X}) = \mathbf{F}_0 + \mathbf{J}(\mathbf{X}^{(0)}) \Delta \mathbf{X} + \dots$$

где $\mathbf{F}_0 = \mathbf{F}(\mathbf{X}^{(0)})$, $\mathbf{J}(\mathbf{X})$ - матрица Якоби. Обозначим $\mathbf{J} = \mathbf{J}(\mathbf{X}^{(0)})$

$$\varphi(\mathbf{X}) = \mathbf{F}^T(\mathbf{X})\mathbf{F}(\mathbf{X}) \approx (\mathbf{F}_0 + \mathbf{J} \Delta \mathbf{X})^T (\mathbf{F}_0 + \mathbf{J} \Delta \mathbf{X}) = \mathbf{F}_0^T \mathbf{F}_0 + 2 \Delta \mathbf{X}^T \mathbf{J}^T \mathbf{F}_0 + \Delta \mathbf{X}^T \mathbf{J}^T \mathbf{J} \Delta \mathbf{X}$$

Найдем стационарную точку квадратичной модели:

$$2\mathbf{J}^T \mathbf{J} \Delta \mathbf{X} + 2\mathbf{J}^T \mathbf{F}_0 = 0$$

$$(\mathbf{J}^T \mathbf{J}) \Delta \mathbf{X} = -\mathbf{J}^T \mathbf{F}_0$$

Если система имеет единственное решение, то получаем траекторию:

$$\Delta \mathbf{X} = -(\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{F}_0$$

С использованием полученного метода *Гаусса-Ньютона*, или *метода наименьших квадратов* достигается квадратичная сходимость при небольшой $\|\mathbf{F}_0\|$.

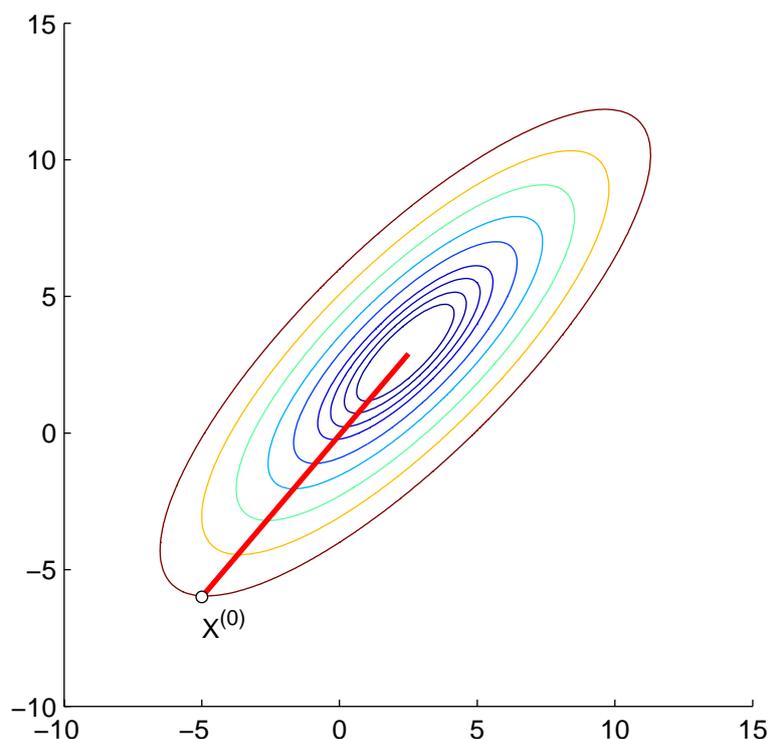
Матрица $(\mathbf{J}^T \mathbf{J})$ может быть вырождена или плохо обусловлена

Матрица $(\mathbf{J}^T \mathbf{J})$ вырождена, например, если число m функций \mathbf{F} меньше числа n параметров \mathbf{X} или, при $m \geq n$, есть линейно зависимые градиенты \mathbf{F} .

В случае плохой обусловленности $(\mathbf{J}^T \mathbf{J})$ модельная квадратичная функция приобретает овражный рельеф. Линии уровня модельной функции вытягиваются, стационарная точка удаляется от начальной точки шага. При $\text{cond}(\mathbf{J}^T \mathbf{J}) \rightarrow \infty$ линии уровня становятся параллельными.

$$\|\Delta \mathbf{X}\| \rightarrow \infty$$

Принятая линейная модель для \mathbf{F} становится бессмысленной



Для решения проблем с вырожденной или плохо обусловленной матрицей ($\mathbf{J}^T \mathbf{J}$) используются модифицированные методы Гаусса-Ньютона.

Модифицированные методы Гаусса-Ньютона

Подходы к модификации метода Гаусса-Ньютона применяются по аналогии с методом Ньютона:

1. Метод с использованием спектрального разложения ($\mathbf{J}^T \mathbf{J}$)
2. Метод с использованием разложения Холецкого ($\mathbf{J}^T \mathbf{J}$)
3. Метод Левенберга-Марквардта (демпфированный метод наименьших квадратов)

$$\Delta \mathbf{X} = -(\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \rho \mathbf{I})^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{F}_0$$

ρ – демпфер, или демпфирующий множитель.

Рассмотрим интерпретацию демпфера. Рассмотрим оценочную функцию:

$$\varphi_1(\mathbf{X}) = \mathbf{F}^T(\mathbf{X}^{(0)} + \Delta \mathbf{X})\mathbf{F}(\mathbf{X}^{(0)} + \Delta \mathbf{X}) + \rho \Delta \mathbf{X}^T \Delta \mathbf{X} \rightarrow \min$$

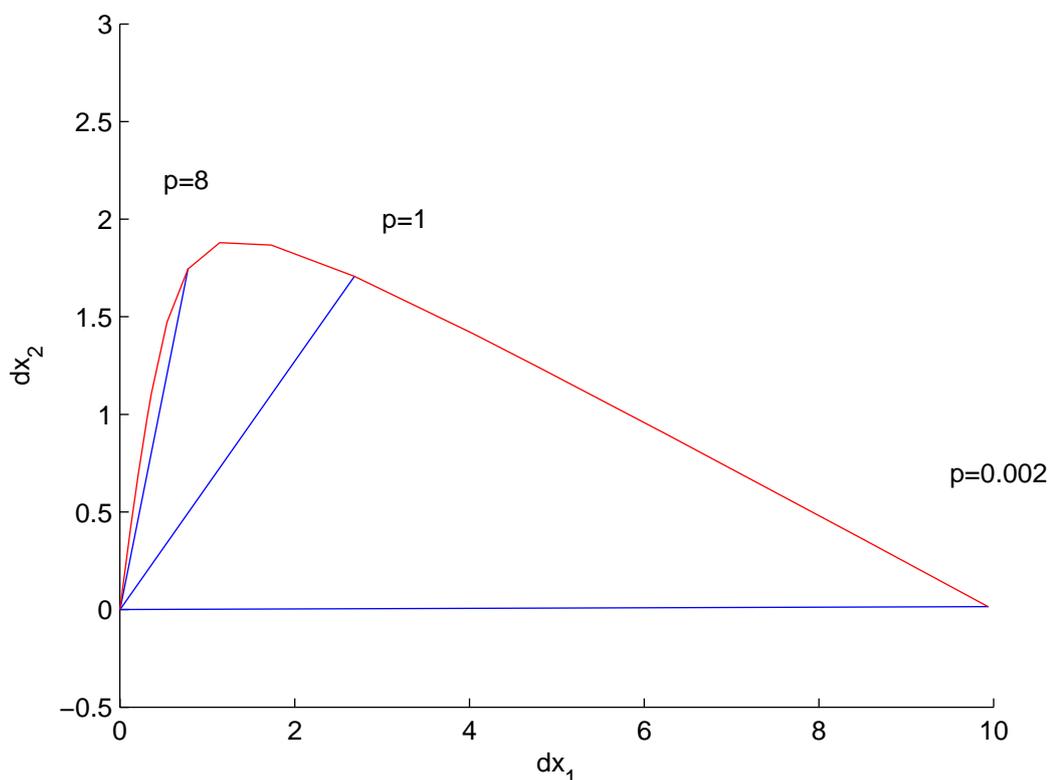
По-прежнему $\mathbf{F}(\mathbf{X}) = \mathbf{F}(\mathbf{X}^{(0)} + \Delta \mathbf{X}) = \mathbf{F}_0 + \mathbf{J}(\mathbf{X}^{(0)})\Delta \mathbf{X} + \dots$

Стационарная точка определяется системой уравнений:

$$2\mathbf{J}^T \mathbf{J} \Delta \mathbf{X} + 2\rho \Delta \mathbf{X}^T \Delta \mathbf{X} + 2\mathbf{J}^T \mathbf{F}_0 = 0$$

$$(\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \rho \mathbf{I}) \Delta \mathbf{X} = -\mathbf{J}^T \mathbf{F}_0$$

Следовательно, демпфер имеет смысл весового коэффициента при $\|\Delta \mathbf{X}\|^2$. Увеличение демпфера приводит к повороту и уменьшению длины $\Delta \mathbf{X}$.

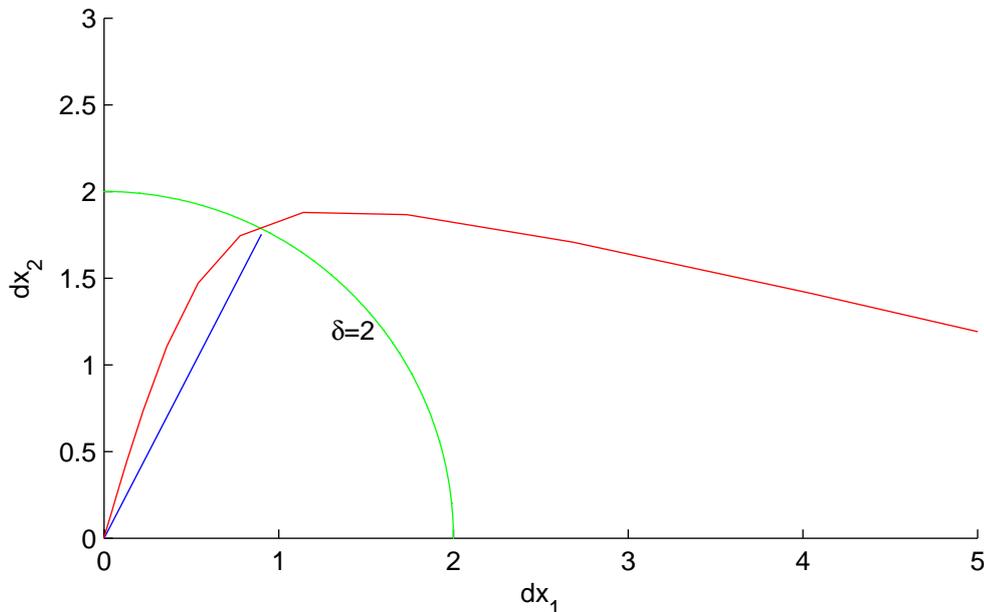


Существует несколько способов выбора демпфера.

Метод доверительной окрестности

В этом методе демпфер определяется путем решения нелинейного уравнения:

$$\|\square \mathbf{X}(p)\| \leq \delta$$



Выбор оптимального демпфера

$$\square \mathbf{X} = -\left(\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \frac{p_0}{\alpha} \mathbf{I}\right)^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{F}_0$$

Метод слежения за областью линейности

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} - \alpha \left(\mathbf{J}^T \mathbf{J} + p^2 \mathbf{I}\right)^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{F}_0$$

1) $p = p_0$. Расчет α

2) Если $0.9 \leq \alpha \leq 1.1$ то модель близка к линейной; тогда на следующий шаг p сохраняется.

Если $\lambda > 1.1$, то на следующий шаг демпфер p уменьшается в k раз.

Если $0.3 \leq \lambda < 0.9$, то на следующий шаг демпфер p увеличивается в k раз.

Если $\lambda < 0.3$ то демпфер p увеличивается в k раз, вернуться к началу шага.

Глава 3. Методы условной оптимизации оптических систем

3.1. Методы, основанные на преобразовании задачи

3.1.1. Классические методы штрафных функций

3.1.1.1. Общие идеи

Основная идея этих методов состоит в том, что исходная задача условной

оптимизации преобразовывается в эквивалентную последовательность задач безусловной минимизации (ибо в одну задачу).

Каждая подзадача состоит в минимизации *обобщенной присоединенной, или расширенной функции*:

$$\psi(\mathbf{X}, \rho_1, \bar{\rho}_2) = \varphi(\mathbf{X}) + \rho_1^{(t)} \sum_i P[c_i(\mathbf{X})] + \bar{\rho}_2^{(t)} \sum_j W[\bar{c}_j(\mathbf{X})] \rightarrow \min$$

$\rho_1, \bar{\rho}_2$ - весовые коэффициенты (или штрафные параметры); P, W - штрафные функции; t - номер подзадачи.

При нарушении ограничений функции P, W увеличивают свое значение, «штрафуя» функцию ψ .

Принципы выбора штрафных функций следующий:

1. Контроль ограничений равенств:

$$P[c_i(\mathbf{X})] \rightarrow 0 \text{ при } c_i(\mathbf{X}) \rightarrow 0$$

2. Контроль ограничений-неравенств:

2.1. Методы внешней точки

$$W[\bar{c}_i(\mathbf{X})] \rightarrow 0 \text{ при } \bar{c}_i(\mathbf{X}) \rightarrow 0 -$$

2.2. Методы внутренней точки (барьерных функций)

$$W[\bar{c}_i(\mathbf{X})] \rightarrow \infty \text{ при } \bar{c}_i(\mathbf{X}) \rightarrow 0 +$$

Сходимость обеспечивается, если:

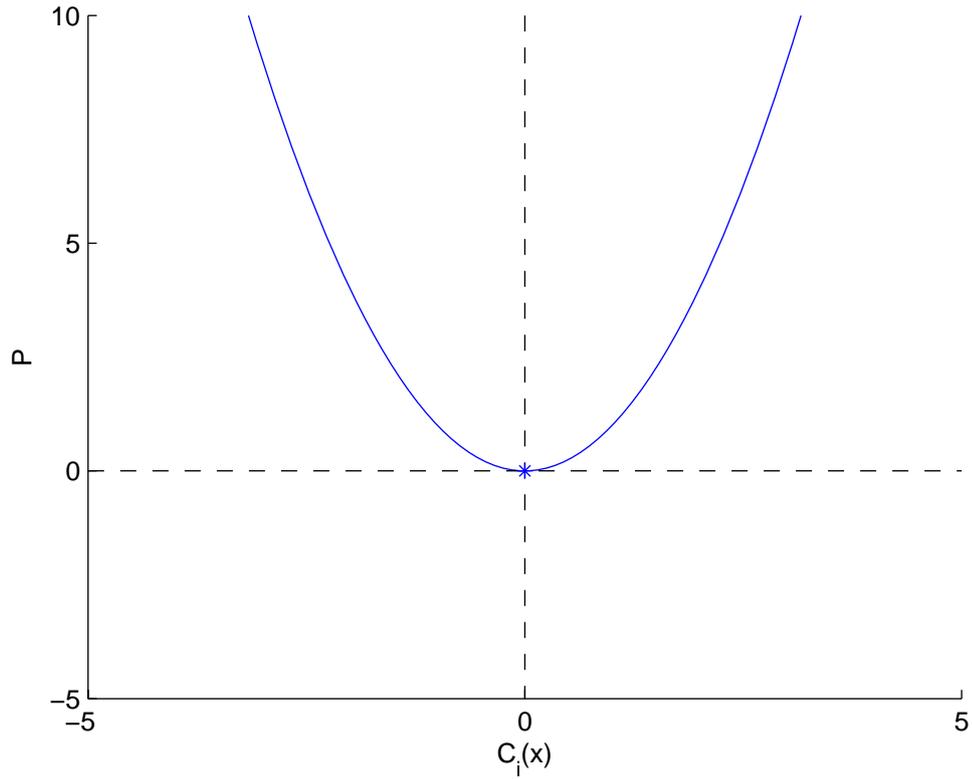
$$\lim_{t \rightarrow \infty} (\rho_1^{(t)} P(c_i(\mathbf{X}^{*(t)}))) = \lim_{t \rightarrow \infty} (\bar{\rho}_2^{(t)} W(\bar{c}_j(\mathbf{X}^{*(t)}))) = 0 \quad \forall i, j$$

Виды штрафов

1. Контроль ограничений равенств

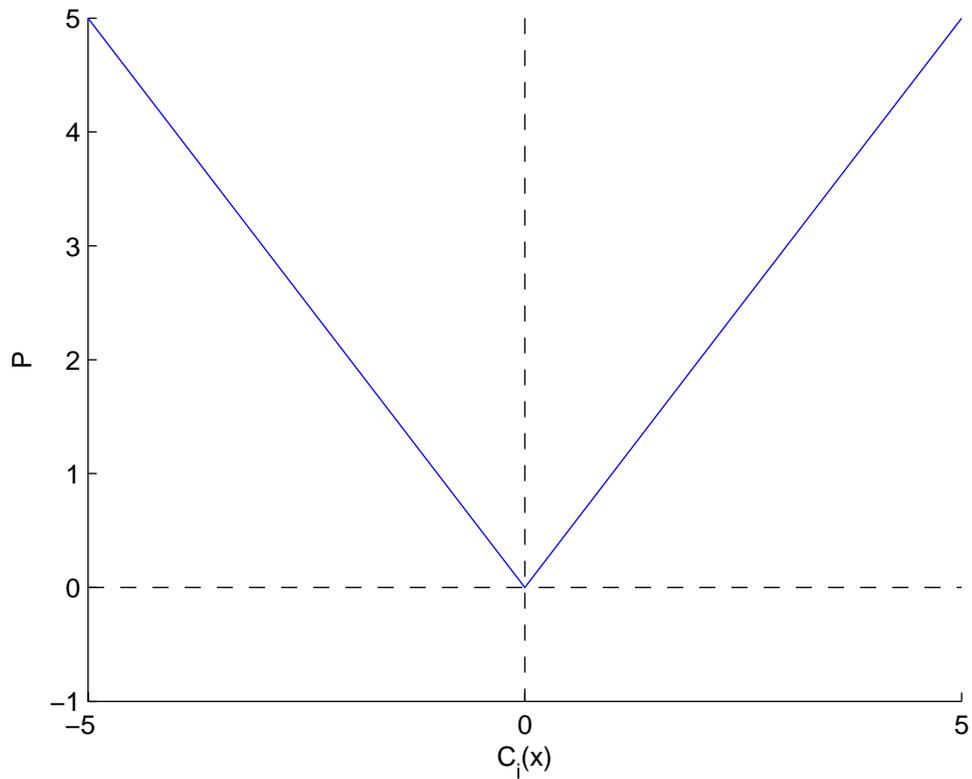
Квадратичный штраф:

$$P[c_i(\mathbf{X})] = c_i^2(\mathbf{X})$$



Точная штрафная функция:

$$P[c_i(\mathbf{X})] = |c_i(\mathbf{X})|$$



Точная штрафная функция позволяет добиться минимума при конечном

значении ρ . Рассмотрим пример:

$$\varphi(x) = x^2 \rightarrow \min$$

При ограничении $x - 1 = 0$

Расширенная функция:

$$\psi(x, \rho) = x^2 - \rho|x - 1|$$

Анализ показывает, что минимум достигается при любых $\rho > 2$

2. Контроль ограничений-неравенств.

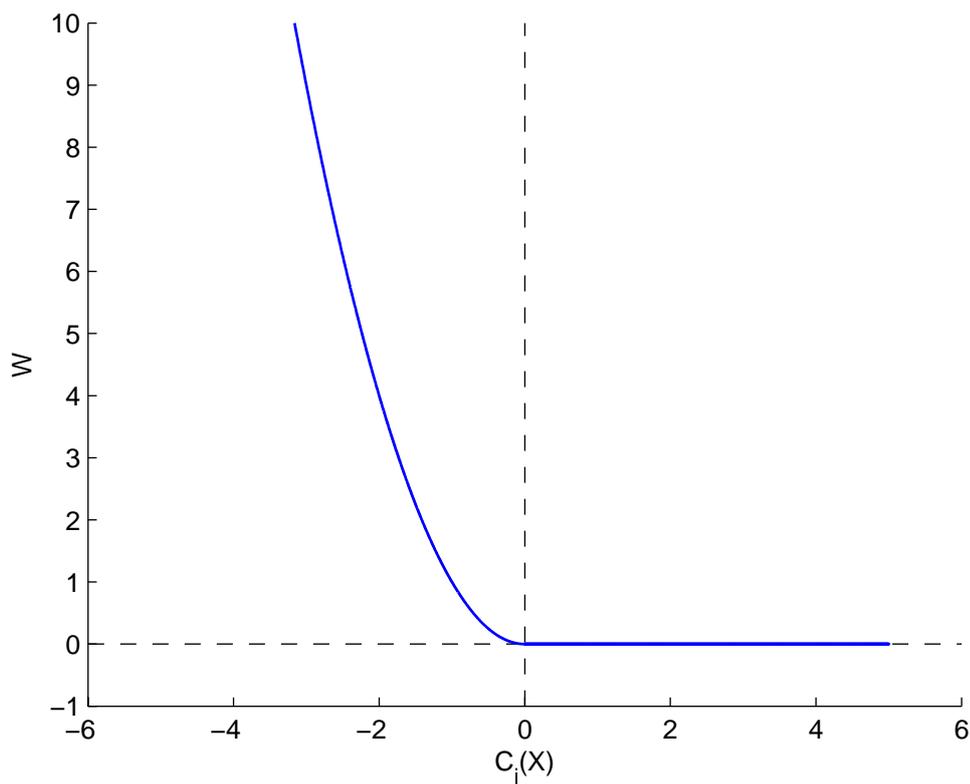
При реализации метода внешней точки

$$W[c_j(\mathbf{X})] = [c_j(\mathbf{X})]_-$$

Оператор срезки работает следующим образом:

$$[a]_- = \begin{cases} 0, & \text{при } a \geq 0 \\ a, & \text{при } a < 0 \end{cases}$$

$$[a]_-^2 = \begin{cases} 0, & \text{при } a \geq 0 \\ a^2, & \text{при } a < 0 \end{cases}$$



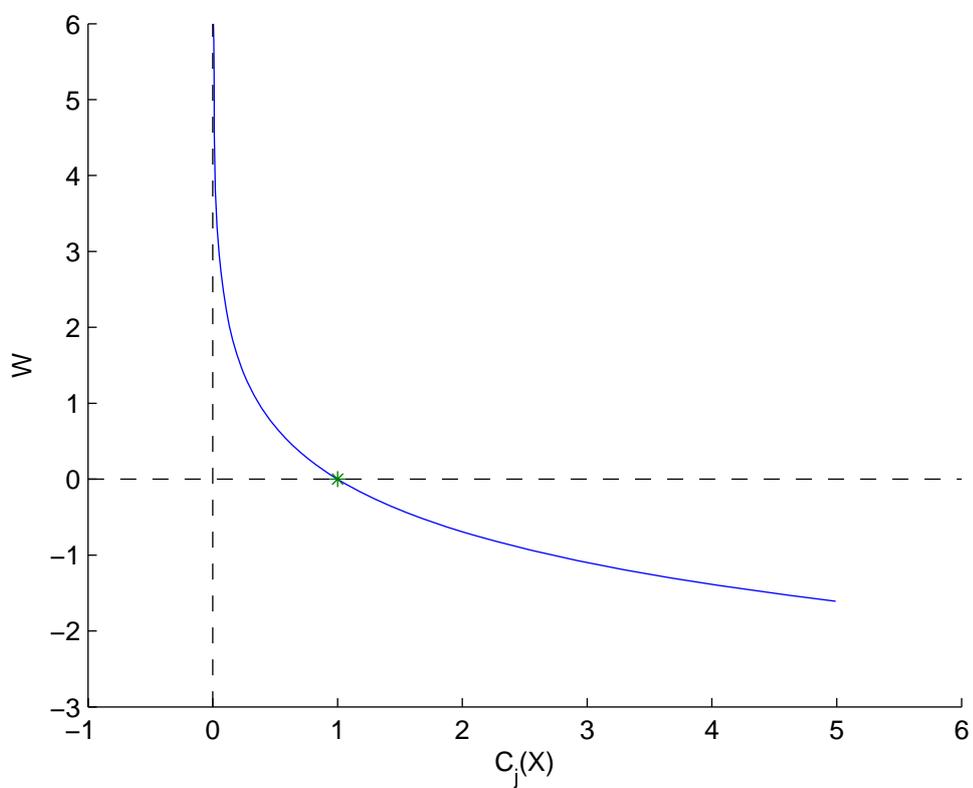
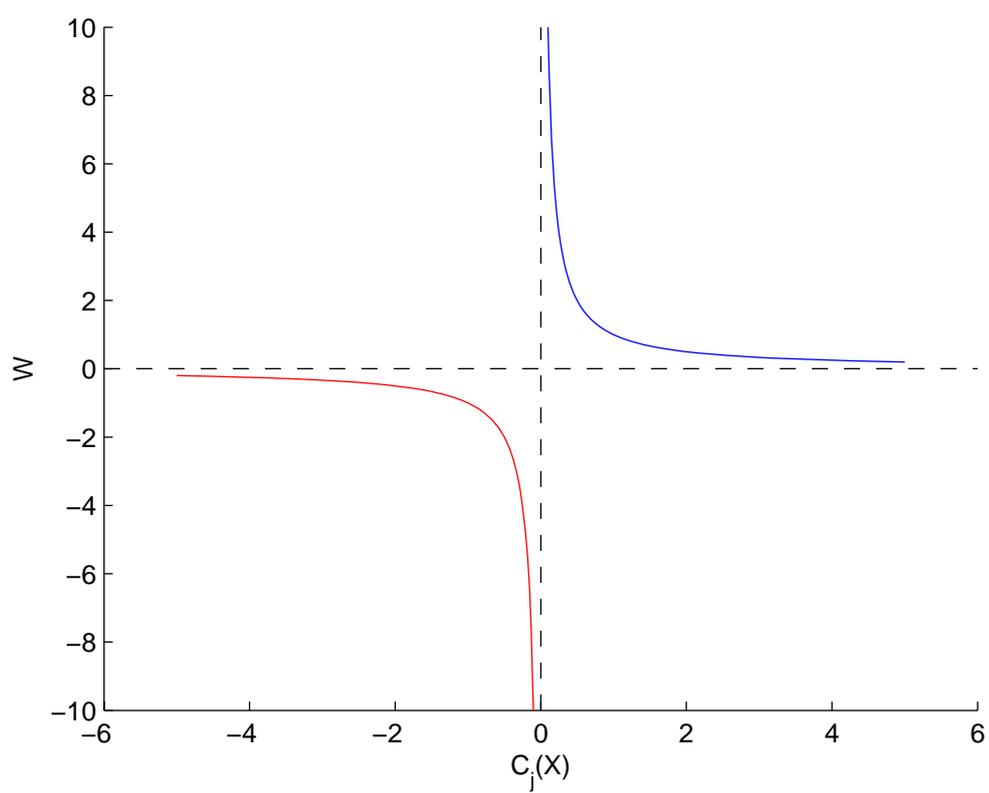
При реализации методов внутренней точки используются:

- обратная функция

$$W[\bar{c}_j(\mathbf{X})] = \frac{1}{\bar{c}_j(\mathbf{X})}$$

- логарифмическая функция

$$W[\bar{c}_j(\mathbf{X})] = -\ln \bar{c}_j(\mathbf{X})$$



Алгоритм метода штрафных функций

Алгоритм метода штрафных функций заключается в реализации последовательности следующих шагов:

1. Назначение начальных весовых коэффициентов

$$\rho_1 = \rho_1^{(0)}; \rho_2 = \rho_2^{(0)};$$

Метод внешней точки: $\bar{\rho}_2 = \rho_2$

Метод внутренней точки: $\bar{\rho}_2 = 1/\rho_2$

2. Безусловная минимизация ψ по \mathbf{X}

3. Проверка условий сходимости

4. Если условия не соблюдаются, то пересчет коэффициентов:

$$\rho_1^{(t+1)} = k\rho_1^{(t)}; \rho_2^{(t+1)} = k\rho_2^{(t)}; k > 1 (k = 10)$$

и продолжение алгоритма:

$$\mathbf{X}^{(0)(t)} = \mathbf{X}^{*(t-1)}$$

иначе – завершение работы алгоритма.

Преимущества метода штрафных функций

К преимуществам методов штрафных функций относят:

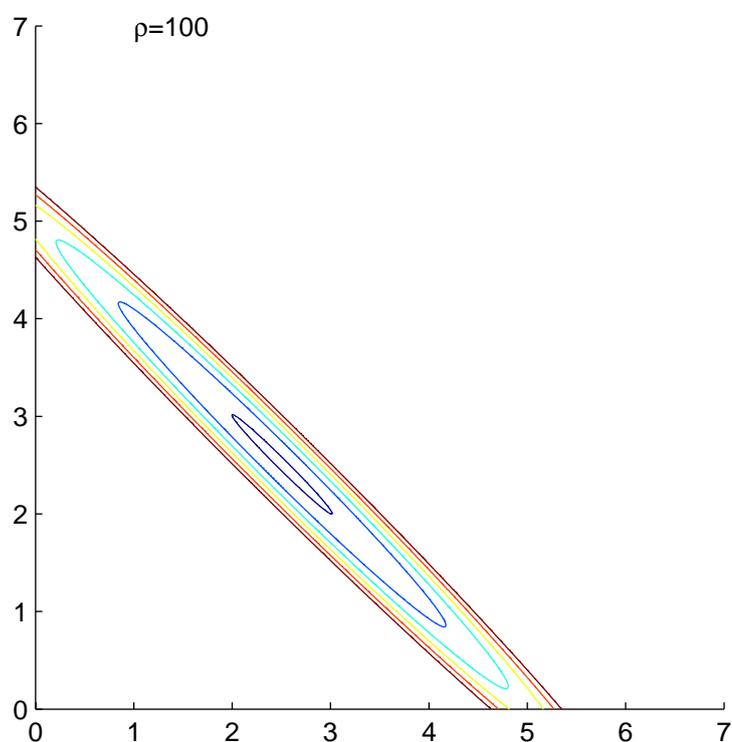
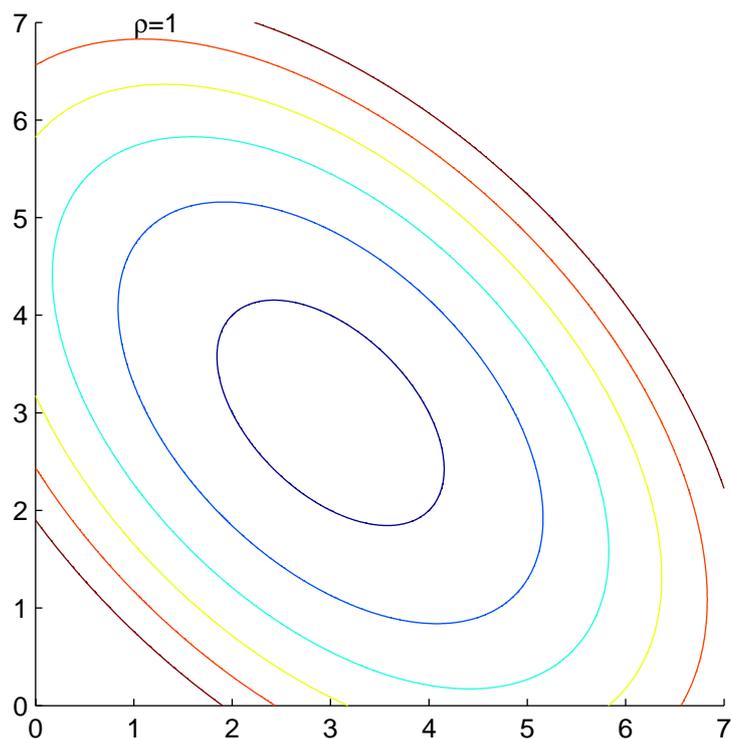
1. Устойчивость работы алгоритма (достижение точек, в которых не соблюдаются условия Куна-Таккера)
2. Простота реализации
3. Простота оценки множителей Лагранжа

Недостатки метода штрафных функций

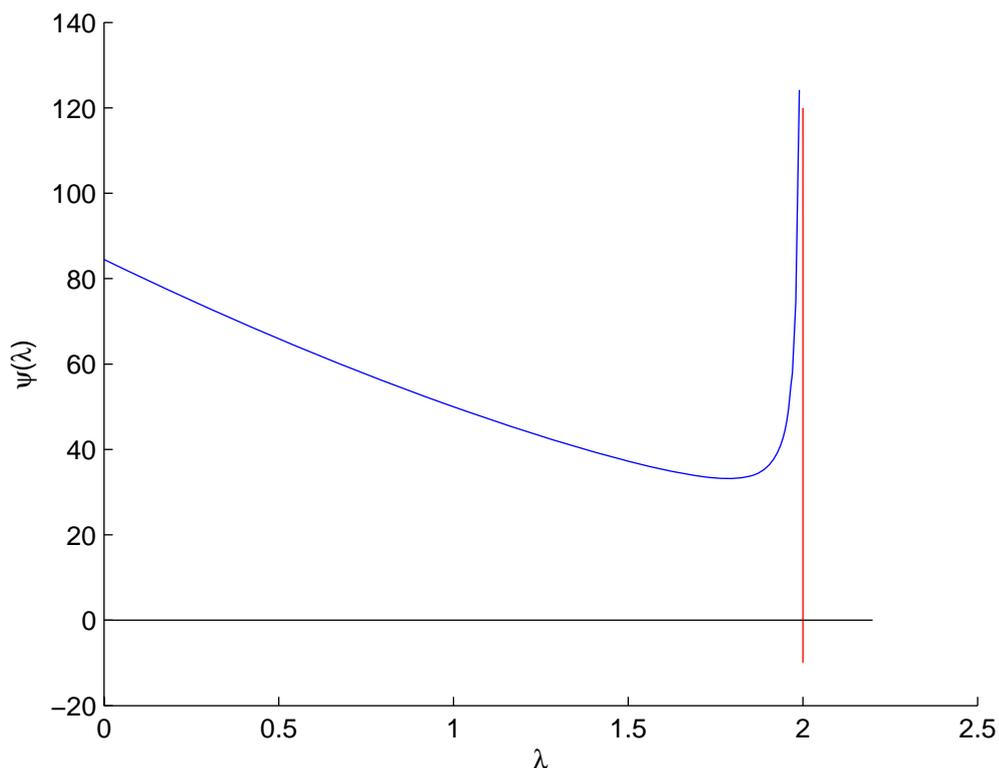
Недостатками методов штрафных функций являются:

1. Плохая обусловленность при больших значениях ρ_1, ρ_2

Функция $\varphi(x_1, x_2) = (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 4)^2$, ограничение $x_1 + x_2 = 5$



2. Неопределенность в величине k пересчета весовых коэффициентов
3. Проблемы одномерной минимизации в методе внутренней точки
 - а) разрыв функций
 - б) сильная нелинейность функции ψ вблизи барьера



3.1.2. Метод модифицированной функции Лагранжа

3.1.2.1. Случай ограничений равенств

Рассмотрим задачу

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{X}) &\rightarrow \min \\ \text{при ограничениях} \quad \mathbf{C}(\mathbf{X}) &= 0 \end{aligned}$$

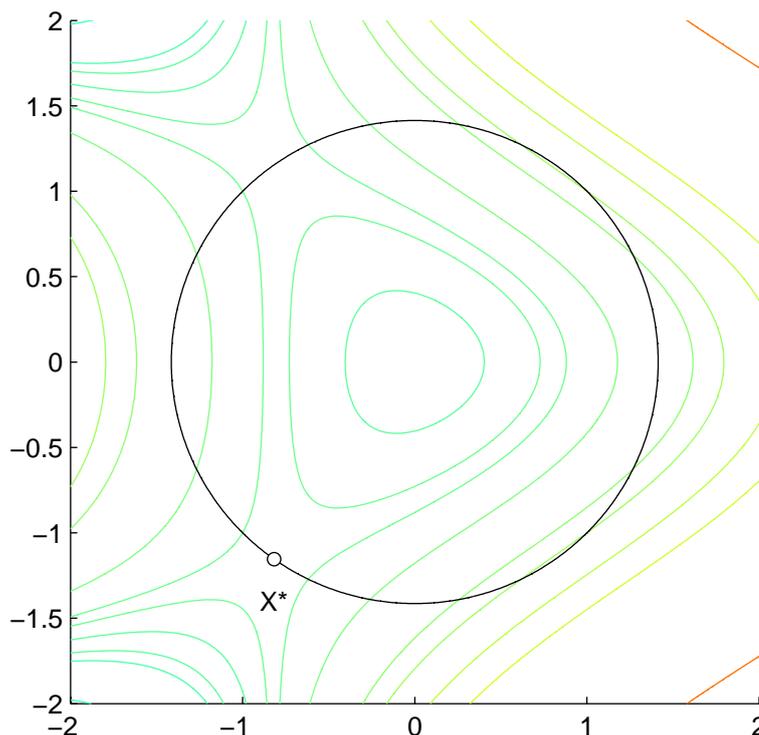
Стационарная точка функции Лагранжа для этой задачи определяется соотношениями:

$$\begin{aligned} L(\mathbf{X}, \Lambda) &= \varphi(\mathbf{X}) - \Lambda^T \mathbf{C}(\mathbf{X}) \\ \begin{cases} \mathbf{C}(\mathbf{X}^*) = 0 \\ \mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{A}^T(\mathbf{X}^*) \Lambda^* \end{cases} \end{aligned}$$

В общем случае даже при $\Lambda = \Lambda^*$ стационарная точка не является точкой локального минимума по \mathbf{X}

Пример: $\varphi(\mathbf{X}) = x_1 x_2^2 \rightarrow \min$ при ограничении $x_1^2 + x_2^2 \leq 2$

Стационарная точка: $\mathbf{X} = (-0.8165; -1.1547)^T$; $\lambda^* = -0.8166$



Для решения проблемы знаконеопределенности матрицы Гессе функции Лагранжа последнюю модифицируют.

Хестенс предложил модификацию в виде:

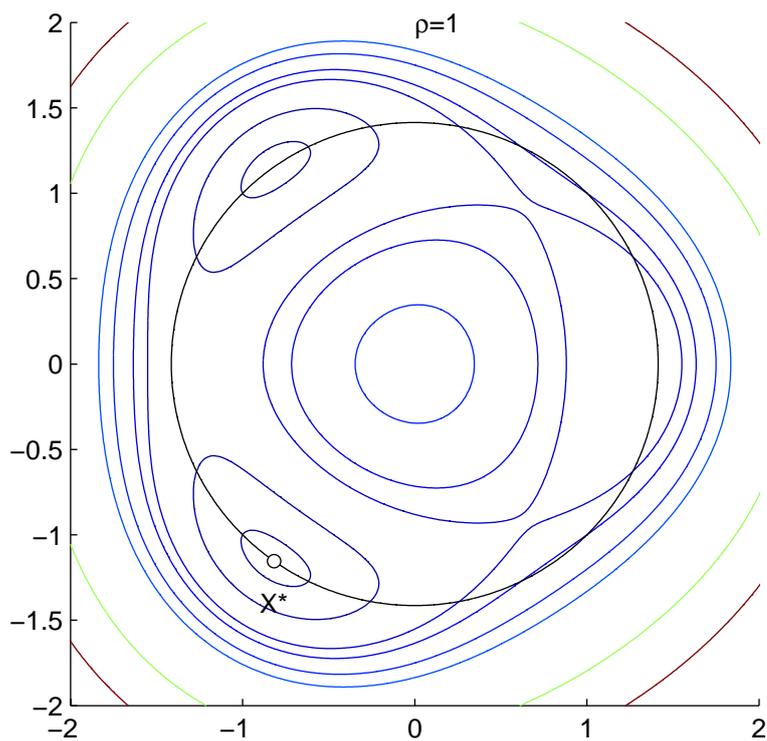
$$L_M(\mathbf{X}, \Lambda, \rho) = \varphi(\mathbf{X}) - \Lambda^T \mathbf{C}(\mathbf{X}) + \frac{1}{2} \rho \mathbf{C}^T(\mathbf{X}) \mathbf{C}(\mathbf{X})$$

Стационарные точки функции Лагранжа и модифицированной функции Лагранжа совпадают ($\mathbf{C}(\mathbf{X}^*) = 0$).

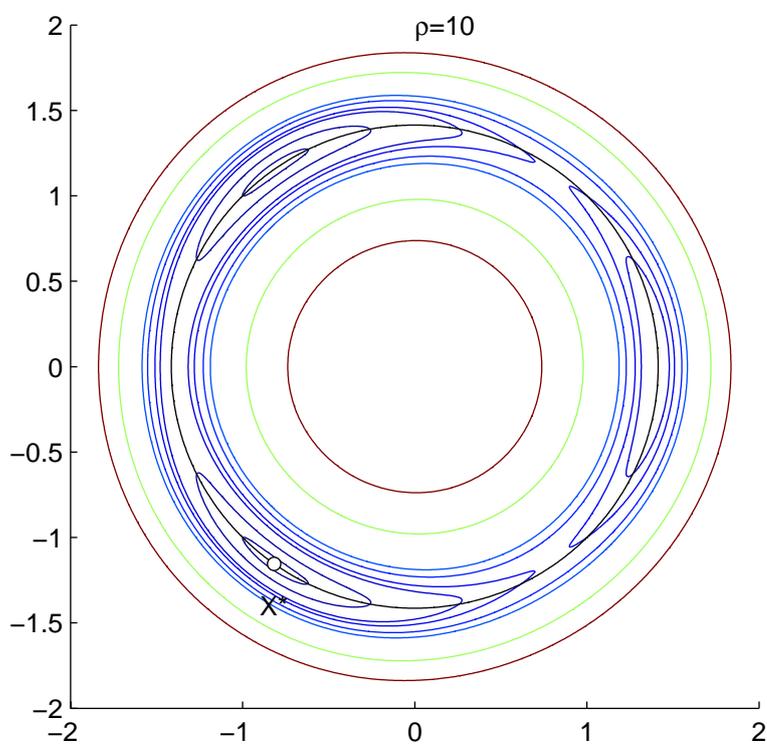
При $\rho > \rho_{\text{порог}}$ соблюдается условие:

$$\nabla_{xx}^2 L_M = W(\mathbf{X}, \Lambda) > 0$$

Рассмотрим предыдущий пример. Пусть $\rho = 1$



При $\rho = 10$:



Расчет множителей Лагранжа

Стационарная точка модифицированной функции Лагранжа описывается соотношениями:

$$\begin{aligned}\nabla_x L_M(\mathbf{X}, \Lambda) &= \mathbf{G}(\mathbf{X}) - \mathbf{A}^T(\mathbf{X})\Lambda + \rho \mathbf{A}^T(\mathbf{X})\mathbf{C}(\mathbf{X}) = 0 \\ \mathbf{G}(\mathbf{X}) &= \mathbf{A}^T(\mathbf{X})(\Lambda - \rho \mathbf{C}(\mathbf{X}))\end{aligned}$$

В точке оптимума

$$\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \mathbf{A}^T(\mathbf{X}^*)\Lambda^*$$

Сравнивая выражения, строим итерационную процедуру (метод простой итерации):

$$\Lambda^{(t+1)} = \Lambda^{(t)} - \rho \mathbf{C}(\mathbf{X}^{*(t)})$$

$\mathbf{X}^{*(t)}$ - точка локального минимума подзадачи с номером t .

В качестве стартовой точки можно принять $\Lambda^{(0)} = 0$

Алгоритм пересчета множителей обладает линейной скоростью сходимости.

Пауэлл предложил модификацию функции Лагранжа в виде:

$$L_M(\mathbf{X}, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m) = \varphi(\mathbf{X}) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sigma_i (c_i(\mathbf{X}) - \theta_i)^2$$

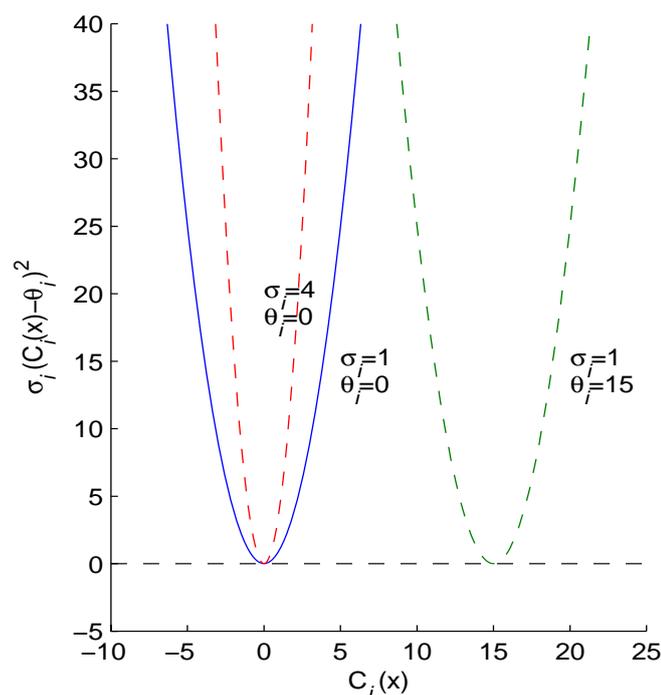
σ_i - параметры веса. θ_i - параметры сдвига.

Связь параметров модифицированной функции Лагранжа (ММФЛ) в форме Хестенса и в форме Пауэлла:

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \dots = \sigma_m = \rho, \quad \lambda_i = \sigma_i \theta_i, \quad \forall i$$

Очевидно, что модифицированные функции Лагранжа в форме Хестенса и в форме Пауэлла отличаются членом, не зависящим от \mathbf{X} .

Параметры модифицированной функции Лагранжа в виде Пауэлла обладают интерпретацией увеличения «крутизны» и «сдвига» штрафа:



Пауэлл предложил алгоритм пересчета параметров ММФЛ. Его основные этапы – следующие:

- 1) $\theta_i^{(t+1)} = \theta_i^{(t)} - c_i(\mathbf{X}^{*(t)})$
- 2) $\frac{\|\mathbf{C}(\mathbf{X}^{*(t)})\|_\infty}{\|\mathbf{C}(\mathbf{X}^{*(t-1)})\|_\infty} < 0,25$? Если «да», то пересчет коэффициентов не производится. Если «нет», то проверяются условия:
- 3) $\frac{|c_i(\mathbf{X}^{*(t)})|}{\|\mathbf{C}(\mathbf{X}^{*(t-1)})\|_\infty} < \delta$? (обычно $\delta = 0.25$)

Если «да», то пересчет коэффициента σ_i не производится.

Если «нет», то $\sigma_i^{(t+1)} = \sigma_i^{(t)}k$. Поскольку $\sigma_i\theta_i = \lambda_i$, то $\theta_i^{(t+1)} \leftarrow \frac{\theta_i^{(t+1)}}{k}$

3.1.2.2. Случай ограничений неравенств

Сформулируем задачу оптимизации в виде:

$$\varphi(\mathbf{X}) \rightarrow \min$$

при ограничениях $\bar{\mathbf{C}}(\mathbf{X}) \geq 0$

Рокафеллар предложил для этой задачи модифицировать функцию Лагранжа в виде:

$$L_M(\mathbf{X}, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_p, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p) = \varphi(\mathbf{X}) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m \sigma_j (\bar{c}_j(\mathbf{X}) - \theta_j)^2$$

Алгоритм пересчета параметров ММФЛ имеет следующие особенности:

- 1 $\theta_i^{(t+1)} = \theta_i^{(t)} - \min\{\bar{c}_i(\mathbf{X}^{*(t)}), \theta_i^{(t)}\}$
- 2 $\frac{\|\tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{X}^{*(t)})\|_\infty}{\|\tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{X}^{*(t-1)})\|_\infty} < 0,25$?

$$\text{где } \tilde{c}_i(\mathbf{X}^{*(t)}) = \begin{cases} \bar{c}_i(\mathbf{X}^{*(t)}), & \text{если } \bar{c}_i(\mathbf{X}^{*(t)}) < \theta_i^{(t)} \\ 0, & \text{если } \bar{c}_i(\mathbf{X}^{*(t)}) \geq \theta_i^{(t)} \end{cases}$$

Если «да», то пересчет коэффициентов не производится. Если «нет», то проверяются условия:

- 3 $\frac{|\tilde{c}_i(\mathbf{X}^{*(t)})|}{\|\tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{X}^{*(t-1)})\|_\infty} < \delta$

Общая характеристика ММФЛ

ММФЛ - один из наиболее лучших методов условной оптимизации. Не приводит к бесконечному ухудшению обусловленности задачи, сохраняя все достоинства традиционных штрафных функций

Вместе с тем, он также имеет определенные проблемы:

1. Функция $L_M(\mathbf{X}, \Lambda, \rho)$ может оказаться неограниченной снизу при любых ρ . Однако обычно удается подобрать такое значение ρ , что область «притяжения» \mathbf{X}^* становится очень широкой и неограниченность L_M себя не проявляет.

2. Трудность выбора начального значения ρ (плохая обусловленность как при малых ρ вследствие наличия близких к нулю собственных чисел матрицы Гессе, так и при больших ρ вследствие наличия больших собственных чисел матрицы Гессе).

3.2. Методы типа приведенного градиента

3.2.1. Общие идеи (задачи с линейными ограничениями-равенствами)

Пусть задача оптимизации сформулирована в виде:

$$\varphi(\mathbf{X}) \rightarrow \min$$

при ограничениях $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B}$

Представим вектор параметров оптимизации в виде:

$$\mathbf{X} = \mathbf{Y}\mathbf{X}_Y + \mathbf{Z}\mathbf{X}_Z$$

\mathbf{Y}, \mathbf{Z} - матрицы базиса размерностью $n \times m$ и $n \times (n - m)$, $\mathbf{X}_Y, \mathbf{X}_Z$ - векторы из m и n элементов. В силу $\mathbf{A}\mathbf{Z} = \mathbf{O}$:

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{A}\mathbf{Y}\mathbf{X}_Y = \mathbf{B}$$

Поскольку $\mathbf{A}\mathbf{Y}$ - невырожденная, то m параметров оптимизации оказываются зафиксированными. Свободными остаются $(n - m)$ параметров.

Проведем сравнение разложений оценочной функции при наличии и отсутствии ограничений:

Разложение вдоль по возможному направлению $\square \mathbf{X} = \mathbf{Z}\square \bar{\mathbf{X}}$:

$$\varphi(\mathbf{X}^* + \varepsilon \mathbf{Z}\square \bar{\mathbf{X}}) = \varphi(\mathbf{X}^*) + \varepsilon \bar{\mathbf{G}}^T(\mathbf{X}^*)\square \bar{\mathbf{X}} + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \square \bar{\mathbf{X}}^T \bar{\mathbf{H}}(\mathbf{X}^* + \varepsilon \mathcal{G}\square \bar{\mathbf{X}})\square \bar{\mathbf{X}}$$

Разложение при отсутствии ограничений:

$$\varphi(\mathbf{X}^* + \varepsilon \square \mathbf{X}) = \varphi(\mathbf{X}^*) + \varepsilon \mathbf{G}^T(\mathbf{X}^*)\square \mathbf{X} + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \square \mathbf{X}^T \mathbf{H}(\mathbf{X}^* + \varepsilon \mathcal{G}\square \mathbf{X})\square \mathbf{X}$$

Из проведенного анализа можно сделать вывод о том, что методы безусловного спуска могут быть использованы при условной оптимизации для нахождения $\square \bar{\mathbf{X}}$ путем замены $\mathbf{G}(\mathbf{X}^*), \mathbf{H}(\mathbf{X}^*)$ на $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^*), \bar{\mathbf{H}}(\mathbf{X}^*)$.

Траектории методов типа приведенного градиента

Безусловная оптимизация	Условная оптимизация
ГМ: $\Delta \mathbf{X} = -\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)})$	$\Delta \bar{\mathbf{X}} = -\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^{(0)})$, $\Delta \mathbf{X} = -\mathbf{Z}\mathbf{Z}^T\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)})$ - метод приведенного градиента
МН: $\Delta \mathbf{X} = -\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{X}^{(0)})\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)})$	$\Delta \bar{\mathbf{X}} = -\bar{\mathbf{H}}^{-1}(\mathbf{X}^{(0)})\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^{(0)})$ $\Delta \mathbf{X} = -\mathbf{Z}(\mathbf{Z}^T\mathbf{H}(\mathbf{X}^{(0)})\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}^T\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)})$ - метод <i>типа</i> приведенного градиента
.....	$\Delta \mathbf{X} = -\mathbf{Z}(\mathbf{Z}^T\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}^T\mathbf{G}(\mathbf{X}^{(0)})$ - метод проекции градиента; $\mathbf{Z}(\mathbf{Z}^T\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}^T$ - проектирующая матрица
.....

Заметим, что в рассмотренных методах стартовая точка должна быть допустимой

Способы построения траекторий

1. Метод проекции градиента

$$\mathbf{Z}(\mathbf{Z}^T\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}^T = \mathbf{I} - \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{A}$$

2. Метод исключения переменных.

Возможное направление имеет вид $\Delta \mathbf{X} = \mathbf{Z}\Delta \bar{\mathbf{X}}$. При этом $\mathbf{A}\Delta \mathbf{X} = 0$

$$\text{Пусть } \mathbf{A} = (\mathbf{A}_1 \quad \mathbf{A}_2); \quad \Delta \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{X}_1 \\ \Delta \mathbf{X}_2 \end{pmatrix};$$

\mathbf{A}_1 - квадратная $m \times m$ невырожденная матрица.

$$\mathbf{A}_1\Delta \mathbf{X}_1 + \mathbf{A}_2\Delta \mathbf{X}_2 = 0$$

$$\Delta \mathbf{X}_1 = -\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2\Delta \mathbf{X}_2$$

$$\Delta \mathbf{X} = \begin{pmatrix} -\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2 \\ \mathbf{I} \end{pmatrix} \Delta \mathbf{X}_2, \text{ откуда } \mathbf{Z} = \begin{pmatrix} -\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{A}_2 \\ \mathbf{I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S} \\ \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

Такой выбор матрицы базиса позволяет осуществить прямое нахождение спроектированного градиента и спроектированной матрицы Гессе через матрицу \mathbf{Q} :

$$\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}) = \mathbf{Z}^T\mathbf{G}(\mathbf{X}) = (\mathbf{S}^T \quad \mathbf{I}) \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(\mathbf{X}) \\ \mathbf{G}_2(\mathbf{X}) \end{pmatrix} = \mathbf{S}^T\mathbf{G}_1(\mathbf{X}) + \mathbf{G}_2(\mathbf{X})$$

$$\bar{\mathbf{H}}(\mathbf{X}) = \mathbf{Z}^T\mathbf{H}(\mathbf{X})\mathbf{Z} = (\mathbf{S}^T \quad \mathbf{I}) \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{11} & \mathbf{H}_{12} \\ \mathbf{H}_{12}^T & \mathbf{H}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{S} \\ \mathbf{I} \end{pmatrix} =$$

$$= \mathbf{S}^T\mathbf{H}_{11}\mathbf{S} + \mathbf{S}^T\mathbf{H}_{12} + (\mathbf{S}^T\mathbf{H}_{12})^T + \mathbf{H}_{22}$$

3. Метод ортогонализации

$$\mathbf{A}\mathbf{Q} = (\mathbf{L} \quad \mathbf{O})$$

\mathbf{Q} - ортонормальная матрица $n \times n$; \mathbf{L} - невырожденная нижняя треугольная матрица $m \times m$.

\mathbf{Q} строится как произведение n элементарных матриц Хаусхолдера (в итоге получается *преобразование Хаусхолдера*):

$$\mathbf{I} - \frac{1}{\beta} \mathbf{W} \mathbf{W}^T$$

\mathbf{W} - специально подбираемый вектор, $\beta = 0.5 \|\mathbf{W}\|_2^2$ - нормирующий коэффициент.

$$\mathbf{Q} = (\mathbf{Q}_1 \quad \mathbf{Q}_2); \quad \mathbf{A}(\mathbf{Q}_1 \quad \mathbf{Q}_2) = (\mathbf{L} \quad \mathbf{O})$$

$$\begin{cases} \mathbf{A} \mathbf{Q}_1 = \mathbf{L} \\ \mathbf{A} \mathbf{Q}_2 = \mathbf{O} \end{cases}; \quad \mathbf{Z} = \mathbf{Q}_2$$

Следовательно, в качестве \mathbf{Z} можно взять последние $(n - m)$ столбцов ортонормальной матрицы \mathbf{Q} .

3.2.2. Методы в задачах с линейными ограничениями-неравенствами

Задача оптимизации: $\varphi(\mathbf{X}) \rightarrow \min$

при ограничениях $\bar{\mathbf{C}}(\mathbf{X}) = \mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{B} \geq 0$

Рассмотрим условия оптимальности нулевого и первого порядка:

$$\mathbf{A}\mathbf{X}^* \geq \mathbf{B}, \quad \text{причем } \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{X}^* = \tilde{\mathbf{B}}$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{X}^*) = \tilde{\mathbf{A}}^T \mathbf{\Lambda}^*, \quad \mathbf{\Lambda}^* \geq 0$$

Если бы список ограничений, активных в \mathbf{X}^* , был известен, то с ними можно было работать как с ограничениями-равенствами. Однако он заранее неизвестен. Тем не менее, можно прогнозировать данный список, уточняя прогноз по ходу оптимизации.

Прогнозный набор активных ограничений называется *рабочим списком*, или *активным набором*, а сам подход именуется *методикой рабочего списка*.

Стартовая точка предполагается допустимой.

Методика рабочего списка. Основные компоненты

Основными компонентами методики являются:

1. Формирование начального рабочего списка

В рабочий список записывают все ограничения, для которых

$$c_i(\mathbf{X}^{(0)}) \approx 0 \quad (0 \leq c_i(\mathbf{X}^{(0)}) \leq \varepsilon)$$

2. Вывод ограничений из рабочего списка

Вывод ограничений основан на анализе знаков оценок $\hat{\mathbf{\Lambda}}$ множителей $\mathbf{\Lambda}^*$. Оценки $\hat{\mathbf{\Lambda}}$ находятся как решение задачи:

$$\|\mathbf{G}(\mathbf{X}) - \mathbf{A}^T(\mathbf{X})\mathbf{\Lambda}\|_2^2 \rightarrow \min$$

Правило: из всех ограничений с отрицательными $\hat{\lambda}_i$ выводится *только одно*, с максимальной величиной $|\hat{\lambda}_i|$. Это правило позволяет избежать заикливания (*Zig - Zag*). Исключение: только простые ограничения на переменные.

3. Перемещение в пространстве параметров оптимизации

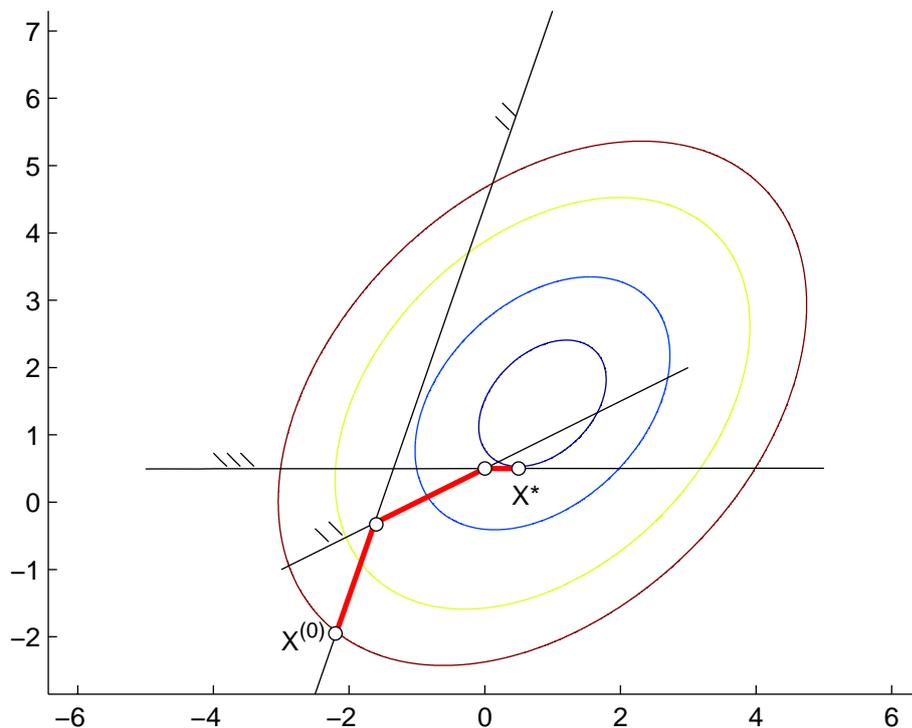
Если рабочий список непустой, то все попавшие в него ограничения контролируются как равенства. Для локального спуска используется метод типа приведенного градиента.

4. Ввод новых ограничений в рабочий список

Если при одномерном поиске получена точка, в которой хотя бы одно из ограничений нарушено, то следует уменьшить длину шага до величины $\alpha_{пред.}$, чтобы выйти на границу *ближайшего* нарушенного ограничения, обеспечив убывание оценочной функции.

При линейной траектории $\alpha_{пред.} = \min_i \frac{b_i - \mathbf{N}_i^T \mathbf{X}^{(0)}}{\mathbf{N}_i^T \square \mathbf{X}}$, где \mathbf{N}_i - нормаль к ограничению, $\square \mathbf{X}$ - траектория спуска, $\mathbf{X}^{(0)}$ - исходная точка шага.

Данное ограничение включается в рабочий список.



3.2.3. Методы в задачах с нелинейными ограничениями-равенствами

Задача оптимизации: $\varphi(\mathbf{X}) \rightarrow \min$

при ограничениях $\mathbf{C}(\mathbf{X}) = 0$

$$C(\mathbf{X}^{(k)}) = 0$$

$$C(\mathbf{X}) = C(\mathbf{X}^{(k)} + \Delta \mathbf{X}) = C(\mathbf{X}^{(k)}) + \mathbf{A}(\mathbf{X}^{(k)}) \Delta \mathbf{X} + \dots = 0$$

Пренебрегая членами высших порядков:

$$\mathbf{A}(\mathbf{X}^{(k)}) \Delta \mathbf{X} = 0$$

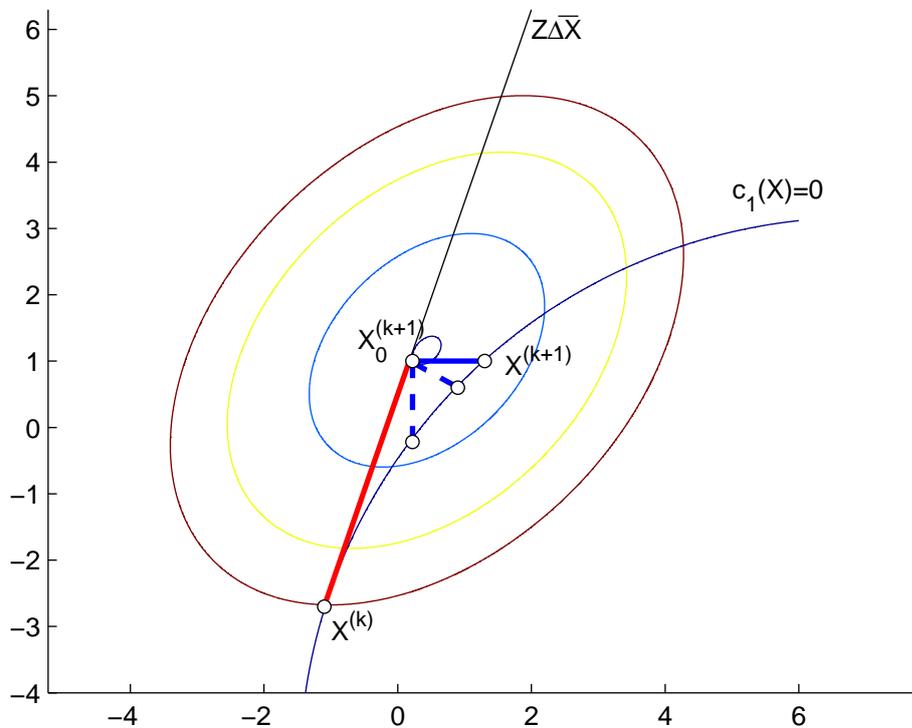
В первом приближении

$$\Delta \mathbf{X} = \mathbf{Z}(\mathbf{X}^{(k)}) \Delta \bar{\mathbf{X}}$$

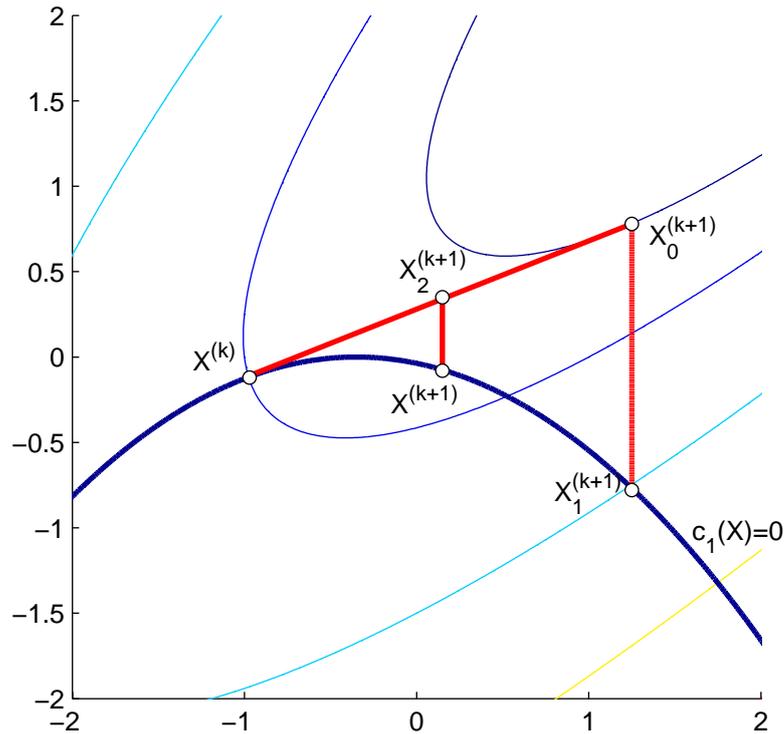
С учетом одномерного поиска и коррекции ограничений:

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} + \alpha \mathbf{Z}(\mathbf{X}^{(k)}) \Delta \bar{\mathbf{X}} + \mathbf{Y} \mathbf{P}$$

\mathbf{Y} – матрица, задающая траекторию коррекции; \mathbf{P} – вектор переменных
Возможные траектории метода изображены на рисунке:



При коррекции нарушенных ограничений оценочная функция не контролируется, а поэтому может увеличиться:



В этом случае следует вернуться на траекторию $\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{Z}(\mathbf{X}^{(k)}) \square \bar{\mathbf{X}}$, уменьшить шаг и повторить коррекцию ограничений.

3.2.4. Методы в задачах с нелинейными ограничениями-неравенствами

В этих задачах, как и в линейном случае, используется методика рабочего списка.

Проблемы контроля ограничений состоят в следующем:

- 1) трудности коррекции ограничений, помещенных в рабочий список (как в случае «чистых» ограничений-равенств)
- 2) проблемы нахождения точек пересечения траектории $\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{Z}(\mathbf{X}^{(k)}) \square \bar{\mathbf{X}}$ с ограничениями (при включении в рабочий список);
- 3) возможность нарушения ограничений-неравенств на этапе движения по траектории \mathbf{YR}

Методика искусственных переменных

Для этой методики используется преобразование задачи.

Задача оптимизации: $\varphi(\mathbf{X}) \rightarrow \min$

при ограничениях $\bar{\mathbf{C}}(\mathbf{X}) \geq 0$

преобразуется к виду:

$$\varphi(\mathbf{X}) \rightarrow \min$$

$$\mathbf{C}(\mathbf{X}) = \bar{\mathbf{C}}(\mathbf{X}) + \mathbf{Y} = 0$$

$$\mathbf{Y} \geq 0$$

Преимущество состоит в том, что контроль прямых ограничений на переменные осуществляется достаточно просто.

Недостаток: увеличивается число контролируемых ограничений

Способы получения начального допустимого решения

1. Коррекция нарушенных ограничений-равенств

Задача о наименьших квадратах:

$$\mathbf{C}^T(\mathbf{X})\mathbf{C}(\mathbf{X}) \rightarrow \min$$

2. Пошаговая коррекция нарушенных ограничений-неравенств

J_1 - множество индексов ненарушенных ограничений

J_2 - множество индексов нарушенных ограничений

$$-\sum_j \bar{c}_j(\mathbf{X}) \rightarrow \min, \quad j \in J_2$$

При ограничениях: $\mathbf{C}(\mathbf{X}) = 0$

$$c_j(\mathbf{X}) \geq 0, \quad j \in J_1$$

Контролируется длина шага. После каждого шага множества индексов пересматриваются

Общие рекомендации по применению методов типа приведенного градиента

Основанные на линеаризации ограничений, методы хорошо справляются с задачами, когда ограничений линейны или близки к линейным.

При наличии нелинейных ограничений возникает много трудно устранимых проблем

3.2.5. Задача линейного программирования и принципы ее решения

Все многообразие постановок задач линейного программирования обычно сводится к *стандартному*, или *каноническому* виду:

$$\varphi(\mathbf{X}) = \mathbf{R}^T \mathbf{X}$$

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B}$$

$$\mathbf{X} \geq 0$$

Решение предполагается ограниченным и единственным.

m связей накладывают ограничения-равенства

$(n - m)$ связей – ограничения-неравенства (активные)

Поэтому $(n - m)$ переменных равны 0

Два подхода к решению:

1) перебор

2) применение методики рабочего списка

В 2007 году СПбГУ ИТМО стал победителем конкурса инновационных образовательных программ вузов России на 2007–2008 годы. Реализация инновационной образовательной программы «Инновационная система подготовки специалистов нового поколения в области информационных и оптических технологий» позволит выйти на качественно новый уровень подготовки выпускников и удовлетворить возрастающий спрос на специалистов в информационной, оптической и других высокотехнологичных отраслях экономики.

КАФЕДРА ПРИКЛАДНОЙ И КОМПЬЮТЕРНОЙ ОПТИКИ

Кафедра прикладной и компьютерной оптики – одна из крупнейших кафедр российских ВУЗов, занимающихся задачами современной оптической науки

Кафедра возникла при слиянии двух кафедр оптического факультета: теории оптических приборов и кафедры оптических приборов и компьютерной оптики. Поэтому на кафедре учат специалистов, имеющих самое широкое представление об оптике в целом, от проектирования оптических систем самого разного назначения до компьютерной обработки изображений и интерферограмм .

Овладение такими разнообразными знаниями невозможно без практической работы с приборами, и кафедра имеет в своем составе несколько учебно-исследовательских лабораторий.

В лаборатории оптических измерений и контрольно-измерительных приборов студенты получают знания и навыки в области метрологии, учатся измерять характеристики оптических систем и параметры деталей и материалов.

Лаборатория микроскопов и медицинских оптических приборов знакомит с различными типами микроскопов (поляризационными,

биологическими, метрографическими), методами наблюдения микрообъектов и т.п., а также с приборами, применяемыми офтальмологами для диагностики зрения.

Лаборатория геодезических приборов позволяет получить начальные навыки работы с теодолитами, дальномерами другими приборами, применяемыми в геодезии и картографии, узнать особенности проектирования различных их узлов и конструкции.

В лабораториях компьютерных средств контроля оптики и исследования качества оптического изображения занимаются проблемами контроля качества оптических поверхностей оптической системы в целом, а также компьютеризации и автоматизации этих процессов.

В учебном процессе используются научный потенциал и лабораторная база крупнейшего в России научного центра в области оптики – ВНЦ ГОИ им. С.И.Вавилова, ведущего оптического предприятия – ОАО "ЛОМО".

Достижения кафедры отмечены двумя Ленинскими премиями, пятью Государственными премиями, премией Совета Министров, премией французской Академии Наук. Кроме того, работы, выполненные на кафедре, отмечались многочисленными медалями и дипломами международных и российских выставок, медалями С.П.Королева, Ю.А.Гагарина, премиями Минвуза.

За период существования кафедры было подготовлено более 150 кандидатов наук, из них 30 иностранцев, а также 16 докторов наук. Большинство научных и производственных подразделений в области прикладной оптики в России, а также многие в США, Израиле и Китае возглавляют ученики нашей научной школы.

В настоящее время кафедра прикладной и компьютерной оптики факультета Оптико-информационных систем и технологий является одним из крупнейших подразделений Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики, ориентированным на выпуск высококвалифицированных специалистов в области оплотехники.

**А.В. Иванов. Компьютерные методы оптимизации оптических систем.
Учебное пособие. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2010 - 114 с.**

В авторской редакции

Редакционно-издательский отдел Санкт-Петербургского государственного
университета информационных технологий, механики и оптики.

Зав. редакционно-издательским отделом

Н.Ф. Гусарова

Лицензия ИД № 00408 от 05.11.99

Подписано к печати _____

Заказ № _____

Тираж _____ экз.

Отпечатано на ризографе

РЕДАКЦИОННО-ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ОТДЕЛ

Санкт-Петербургского государственного
университета информационных технологий,
механики и оптики
197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49

