Модели и численные методы поисковой условной оптимизации

УСЛОВНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ.

Преобразование задач оптимизации

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

1. *Исключение простых ограничений* $X=\{x : x\in E^n,\ \ x_i\ge 0,\ \ i=1,\ ...,\ n\}$

Замена переменных: $x_i=u_i^2 \ \rightarrow\ \min_{u\in E^n} F(u)$

Пример 1. Провести исключение в задаче $\min_{x\in E^2}(x_1+1)^2+(x_2+1)^2$ при $x_1\ge 0$ ($x^*=(0,-1)$)

Пример 2. Провести исключение в задаче $\min_{x\in E^2}(x_1-1)^2+(x_2+1)^2$ при $x_1\ge 0$ ($x^*=(1,-1)$)

Пример 3. Провести исключение в задаче $\min_{x\in E^2} x_1^{5/2}+(x_2+1)^2$ при $x_1\ge 0$ ($x^*=(0,-1)$)

2. *Исключение неравенств*. Для образованного неравенствами множества допустимых значений:

$$X=\{x : x\in E^n,\ \ g_i(x)\ge 0,\ \ i=1,\ ...,\ m\}$$

введением вспомогательных переменных неравенства превращаются в равенства:

а) $g_i(x)\ge 0$ на $g_i(x)-x_j^2=0$, $j>n$, x_j - вспомогательная переменная,

б) $g_i(x)\ge 0$ на $g_i(x)-x_j=0$, $j>n$, $x_j\ge 0$ - вспомогательная переменная.

3. *Исключение ограничений вида равенств*. Пример.

$$\min_{y\in E^n} f(x) \text{ при } x_n-g(x_1,...,x_{n-1})=0, x_n=g(x_1,...,x_{n-1})\rightarrow \min_{y\in E^{n-1}} f(x_1,...,x_{n-1},g(x_1,...,x_{n-1}))$$

4. *Тригонометрические преобразования*. Пусть задача оптимизации, содержит ограничение в виде гиперсферы:

$$X=\left\{x : x\in E^n,\ \ \sum_{i=1}^n x_i^2=1\right\}.$$

Преобразованием 1:

$$x_1=\sin y_1\cdot ...\cdot \sin y_{n-1},$$

$$x_i=\cos y_{i-1}\cdot \sin y_i\cdot ...\cdot \sin y_{n-1},\quad i=2,\ ...,\ n-2,$$

$$x_n=\cos y_{n-1}$$

исходная задача минимизации сводится к задаче безусловной минимизации $\min_{y\in E^{n-1}} F(y)$.

Недостатками такого преобразования является периодичность новой функции $F(y)$, и при $y_i\approx 0$ функция не зависит от y_i.

Преобразованием 2:

$$a=\pm\left(1+\sum_{i=1}^{n-1} y_i^2\right)^{1/2},$$

$$x_i=\frac{y_i}{a},\quad i=1,\ ...,\ n-1,$$

$$x_n=\frac{1}{a}$$

исходная задача минимизации сводится к задаче безусловной минимизации

$$\min_{y\in E^{n-1}}\min\{F_p(y),\ F_h(y)\},$$

где в a знак ”+” для функции $F_p(y)$ и знак “—” для функции $F_h(y)$.

Метод внешних штрафных функций

$$\min_{x\in X} f(x) \qquad (1)$$

$$\min_{x\in X_0}\Phi_k(x),\quad k=1,\ 2,\ ... \qquad (2)$$

Определение. Последовательность $\{P_k(x)\}$ определенных и неотрицательных функций на множестве X_0, содержащем множество X, называют *штрафом* или *штрафной функцией*, если

$$\lim_{k\to\infty} P_k(x)=\begin{cases}0 & \textit{при}\ \ x\in X,\\ \infty & \textit{при}\ \ x\in X_0\setminus X.\end{cases}$$

Общая схема метода внешних штрафных функций

$$\boxed{\min_{x\in X_0}\Phi_k(x)}\quad \boxed{\Phi_k(x)=f(x)+P_k(x)},\quad k=1,\ 2,\ ... \qquad (3)$$

Пусть $\Phi_k^*=\min_{x\in E^n}\Phi_k(x)>-\infty$, $k=1,\ 2,\ ...$ Если при каждом $k=1,\ 2,\ ...$ $\Phi_k(x)=\Phi_k^*,$ то имеем последовательность минимумов $\{x_k\}$ вспомогательной функции $\Phi_k(x)$. Точно определить точку минимума x_k удается не всегда. Предполагаем, что при каждом $k=1,\ 2,\ ...$ с помощью метода минимизации найдена точка x_k, удовлетворяющая условиям:

$$\Phi_k(x_k)\le\Phi_k^*+\varepsilon_k,\quad \varepsilon_k>0,\quad \lim_{k\to\infty}\varepsilon_k=0. \qquad (4)$$

Поскольку $\lim\limits_{k\to\infty} P_k = \infty$ при $X_0 \setminus X$, то может оказаться, что $\{x_k\} \to X$ и $\lim\limits_{k\to\infty} f(x_k) = \min\limits_{x\in X} f(x) = f^*$.

Рассмотрим задачу: ***найти*** $\min\limits_{x\in X} f(x)$,

$$X = \left\{x : x \in E^n,\ \ g_i(x) \le 0,\ \ i = 1, ..., m,\ \ \ g_i(x) = 0,\ \ \ i = m+1, ..., m'\right\}. \qquad (5)$$

В качестве штрафной функции множества (5) выберем:

$$P_k(x) = A_k \cdot P(x),$$

$$P(x) = \sum_{i=1}^{m} \left(\max\{g_i(x),\ 0\}\right)^S + \sum_{i=m+1}^{m'} \left|g_i(x)\right|^S = \sum_{i=1}^{m'} (g_i^{\oplus}(x))^S, \text{ где } A_k > 0,\ \lim_{k\to\infty} A_k = \infty,\ \ S \ge 1, \qquad (6)$$

$$g_i^{\oplus}(x) = \begin{cases} \max\{g_i(x), 0\} & \textit{при}\ i = 1, ..., m, \\ |g_i(x)| & \textit{при}\ \ i = m+1, ..., m'. \end{cases}$$

Если функции $g_i(x)$ непрерывно дифференцируемы l раз, то при любом $S > l$ $P(x)$ будет l раз непрерывно дифференцируема. Если функции $g_i(x)$ при $i = 1, ..., m$ выпуклы и при $i = m+1, ..., m'$ $g_i(x)$ - линейны, то $P(x)$ - выпукла.

$P(x)$ называют штрафной функцией, а A_k - штрафными коэффициентами.

Приведем несколько вариантов штрафной функции. Следующая конструкция порождает семейство функций:

$$P_k(x) = \sum_{i=1}^{m'} A_{ki} \Psi_i (g_i^{\oplus}(x)), \quad k = 1,\ 2,\ ...,$$

где $A_{ki} > 0$, $\lim\limits_{k\to\infty} A_{ki} = \infty$, $\Psi_i(g_i)$ - функция, определенная при $g_i \ge 0$, при $g_i > 0$, $i = 1, ..., m'$, выполняется $\Psi_i(0) = 0$, $\Psi_i(g_i) > 0$.

Можно выбрать функции $\Psi_i(g)$ так, чтобы штрафная функция $P_k(x)$ обладала различными свойствами, такими как, например, непрерывность, гладкость, выпуклость, простота вычисления значений функции и нужных производных и т. п.

Приведем еще две конструкции штрафной функции:

$$P_k(x) = \left(1 + \sum_{i=1}^{m'} (g_i^{\oplus}(x)^{S_i}\right)^{A_k} - 1,\ \ S_i \ge 1,\ \ P_k(x) = A_k^{-1}\left(\sum_{i=1}^{m} e^{A_k \cdot g_i(x)} + \sum_{i=m+1}^{m'} e^{A_k \cdot g_i^2(x)}\right),\ \ A_k > 0,\ \ k = 1, 2, ...,\ \ \lim_{k\to\infty} A_k = \infty.$$

Теорема. Пусть $X_0 \subseteq E^n$ - замкнутое множество, функции $f(x)$, $g_1(x)$,..., $g_m(x)$, $\left|g_{m+1}(x)\right|$,..., $\left|g_{m'}(x)\right|$ полунепрерывны снизу на X_0, $\min\limits_{x\in X_0} f(x) = f^{**} > -\infty$. Пусть последовательность $\{x_k\}$, определяемая условиями (3), (4), (6), имеет хотя бы одну предельную точку. Тогда все предельные точки последовательности $\{x_k\}$ принадлежат множеству X_* точек минимума задачи (1), (5). Если, кроме того, множество:

$$X_\delta = \{x : x \in X_0,\ \ g_i(x) \le \delta,\ \ i = 1, ...,\ \ m,\ \ \ \left|g_i(x)\right| \le \delta,\ \ i = m+1, ...,\ \ m'\}$$

ограничено хотя бы при одном значении $\delta > 0$, то

$$\lim_{k\to\infty} \Phi_k(x_k) = \lim_{k\to\infty} \Phi_k^*(x_k) = \lim_{k\to\infty} f(x_k) = f^*.$$

Ограничения $g_i(x) \le 0$, $i = 1, ..., m$, $g_i(x) = 0$, $i = m+1, ..., m'$, $x \in X_0$ (7)

назовем *согласованными с функцией* $f(x)$ на множестве $x \in X_0$, если для любой последовательности $\{x_k\} \in X_0$, для которой

$$\overline{\lim_{k\to\infty}}\, g_i(x_k) \le 0,\ \ i = 1, ..., m,\ \ \lim_{k\to\infty} g_i(x_k) = 0,\ \ i = m+1, ..., m',$$

имеет место соотношение:

$$\underline{\lim_{k\to\infty}}\, f(x_k) \ge f^* = \min_{x\in X} f(x),$$

где множество X имеет вид (5).

Теорема. Пусть $\Phi_k(x) = f(x) + A_k P(x)$, где $P(x)$ определена (6), пусть $\Phi_k^* = \min\limits_{x\in X_0} \Phi_k(x)$, $k = 1,\ 2,\ ...$ Тогда для того, чтобы

$$\lim_{k\to\infty} \Phi_k^*(x_k) = f^*, \qquad (8)$$

необходимо, чтобы ограничения (7) были согласованы с функцией $f(x)$ на множестве X_0. Если $\min\limits_{x\in X_0} f(x) = f^{**} > -\infty$, то согласованности ограничений с функцией $f(x)$ на X_0 достаточно для справедливости равенства (8).

Метод барьерных (внутренних штрафных) функций

Определение. Функция $B(x)$ называется *барьерной функцией* подмножества $\gamma \subset X$, если она определена, конечна и неотрицательна во всех точках $x \in X \setminus \gamma$ и $\lim\limits_{k\to\infty} B(x_k) = \infty$ для всех последовательностей $\{x_k\} \in X \setminus \gamma$, которые сходятся к какой-либо точке $x \in \gamma$.

Условия возможности построения барьерной функции: $X \setminus \gamma \ne \varnothing$ и, если $\gamma = ГрX$, то $\mathrm{int}X = X \setminus \gamma \ne \varnothing$.

Схема метода

$$\min_{x\in X\setminus\gamma} F_k(x),\ \ k = 1,\ 2,\ ...,$$

$$\boxed{F_k(x) = f(x) + a_k \cdot B(x)},\ \ x \in X \setminus \gamma,$$

где $\{a_k\}$: $a_k \ge 0$, $\lim\limits_{k\to\infty} a_k = 0$.

Обозначим $F_k^* = \min\limits_{x \in X \setminus \gamma} F_k(x)$, $k = 1, 2, \ldots$ Пусть $f^* = \min\limits_{x \in X} f(x) > -\infty$ и $F_k(x) \ge f(x)$ при $x \in X \setminus \gamma$ и $F_k^*(x) \ge f^* > -\infty$. Будем предполагать, что при каждом $k = 1, 2, \ldots$ с помощью метода минимизации найдена точка x_k, удовлетворяющая условиям:

$$F_k(x_k) \le F_k^* + \varepsilon_k, \qquad (9)$$
$$x_k \in X \setminus \gamma, \quad \varepsilon_k \ge 0, \quad \lim_{k \to \infty} \varepsilon_k = 0.$$

Данные условия порождают последовательность оценок минимумов $\{x_k\}$ функции $F_k(x)$.

Предполагается, что функция $f(x)$ конечна во всех точках $x \in X$. Для любой последовательности $\{z_d\} \in X \setminus \gamma$, $\{z_d\} \to z \in \gamma$ при каждом фиксированном $k = 1, 2, \ldots$ справедливо равенство: $\lim\limits_{d \to \infty} F_k(z_d) = 0$.

Конструкции барьерной функции.

Пусть $\gamma = \{x : x \in E^n,\ x \in X,\ g(x) = 0\}$, функция $g(x)$ - непрерывна на X:

$B(x) = |g(x)|^{-1}$, $B(x) = |g(x)|^{-2}$, $B(x) = \max\{-\ln|g(x)|,\ 0\}$.

Пусть множество допустимых значений имеет вид:

$X = \{x:\ x \in E^n,\ g_i(x) \le 0,\ i = 1, \ldots, m\}$, $\gamma = \{x:\ x \in E^n,\ x \in X,\ g_i(x) = 0$ ***хотя бы для одного*** $i\}$,

$X(-0) = \{x:\ x \in E^n,\ g_i(x) < 0,\ i = 1, \ldots, m\}$ - непусто: $X(-0) = X \setminus \gamma \ne \varnothing$:

$$B(x) = \sum_{i=1}^{m} \Psi_i(-g_i(x)), \quad x \in X(-0),$$

где $\Psi_i(z)$ - неотрицательная функция переменной $z > 0$ и при $i = 1, \ldots, m$ $\lim\limits_{z \to +0} \Psi_i(z) = \infty$.

Примером барьерных функций могут служить следующие функции:

$$B(x) = -\sum_{i=1}^{m} \frac{1}{g_i(x)}, \quad B(x) = \sum_{i=1}^{m} \left(\max\{-\ln(-g_i(x)),\ 0\}\right)^S, \quad S \ge 1.$$

Теорема. Пусть γ - некоторое подмножество из X, $X \setminus \gamma \ne \varnothing$, и $f^* = f^{**}$, где $f^* = \min\limits_{x \in X} f(x)$, $f^{**} = \min\limits_{x \in X \setminus \gamma} f(x) > -\infty$, $B(x)$ - какая-либо барьерная функция подмножества γ, последовательность $\{x_k\}$ определена условиями (9). Тогда

$$\lim_{k \to \infty} F_k(x_k) = \lim_{k \to \infty} F_k^*(x_k) = \lim_{k \to \infty} f(x_k) = f^*, \quad \lim_{k \to \infty} a_k B(x_k) = 0.$$

Если, кроме того, множество X - компакт (ограничено и замкнуто), а целевая функция $f(x)$ полунепрерывна снизу на X, то последовательность $\{x_k\}$ сходится к множеству X_* точек минимума исходной задачи.

Метод проекции градиента

$$\min_{x \in X} f(x), \quad f(x) \in C^1, \quad X \subset E^n. \qquad (1)$$

Пусть $x_1 \in X$ - некоторая начальная точка. Будем строить последовательность $\{x_k\}$ по правилу:

$$\boxed{x_{k+1} = P_X(x_k - \alpha_k \cdot grad\, f(x_k))}, \quad \alpha_k > 0, \quad k = 1, 2, \ldots, \qquad (10)$$

где $P_X(z)$ - проекция точки z на множество X.

Проекцией точки $z \in E^n$ на множество $X \subset E^n$ называется ближайшая к z точка y (обозначаемая $P_X(z)$) множества X, т. е. точка $y = P_X(z) \in X$, удовлетворяющая условию: $\| z - P_X(y) \| = \min\limits_{x \in X} \| z - x \|$. Если $z \in X$, то $z = P_X(z)$.

Для существования и единственности проекции требуется, чтобы множество X было компактом.

Если X - компакт и определен способ выбора α_k, то последовательность $\{x_k\}$ будет однозначно определяться условием (10). При $X \equiv E^n$ метод проекции градиента (10) превращается в градиентный метод.

Варианты метода проекции градиента.

1. Выбор α_k из условия: $f_k(\alpha_k) = \min\limits_{\alpha \ge 0} f_k(\alpha) = \min\limits_{\alpha \ge 0} f(P_X(x_k - \alpha \cdot grad\, f(x_k)))$.

2. Выбор α_k, обеспечивающего выполнение условия монотонности $f(x_{k+1}) < f(x_k)$.

3. Выбор α_k, обеспечивающего выполнение неравенства

$$f(x_k) - f(P_X(x_k - \alpha_k \cdot grad\, f(x_k))) \ge \varepsilon \cdot \| x_k - P_X(x_k - \alpha_k \cdot grad\, f(x_k) \|^2, \quad \varepsilon > 0.$$

Для определения α_k берут $\alpha_k = \alpha$ и затем дробят его, например, по закону $\alpha_k = \lambda^i \cdot \alpha$, $i = 0, 1, \ldots$, $\lambda \in (0, 1)$.

4. *Программная версия*. Выбор α_k, удовлетворяющего условиям: $: \sum\limits_{k=1}^{\infty} \alpha_k = \infty$, $\sum\limits_{k=1}^{\infty} \alpha_k^2 < \infty$.

Выбирают α_k, например, $\alpha_k = c\, k^{-\alpha}$, $c = const > 0$, $\alpha \in (0.5,\ 1]$. Метод не обеспечивает монотонности убывания $\{f(x_k)\}$.

Иногда для ускорения сходимости метода используют обобщенную версию метода проекции градиента:

$x_{k+1} = x_k + \beta_k \cdot (P_X(x_k - \alpha_k \cdot grad\, f(x_k)) - x_k) = \beta_k \cdot (P_X(x_k - \alpha_k \cdot grad\, f(x_k)) + (1 - \beta_k) \cdot x_k$, где $\beta_k \in (0, 1]$, $\alpha_k > 0$.

Данная версия более сложная, чем обычный метод (10), поскольку приходится определять два параметра α_k и β_k.

Задача определения проекции некоторой точки x_k на множество X является задачей минимизации функции $g(x)$:

$$\min_{x\in X} g(x) = \min_{x\in X}\| x - x_k \|^2 \quad \text{или} \quad \min_{x\in X} g(x) = \min_{x\in X}\| x - x_k \|.$$

Случаи, когда задача проектирования легко решается:

а) пусть X - шар радиуса R с центром x_0 :

$$X = \{ x : x \in E^n, \ \| x - x_0 \| \le R\}, \quad P_X(x) = x_0 + R\cdot (x - x_0)/\| x - x_0 \|;$$

б) пусть X - полупространство: $X = \{ x : x \in E^n, \ (a, x) \le b\}$, $P_X(x) = x + (b - (a, x))\cdot a/\| a\|^2$;

в) пусть X - аффинное множество: $X = \{ x : x \in E^n, \ (a_i, x) \le b_i, \ i = 1, ..., m\}$, $m < n$.

$$P_X(x) = x - A^T\cdot (A\cdot A^T)^{-1}\cdot (A\cdot x - b),$$

где матрица A состоит из строк a_i , $i = 1, ..., m$, b (вектор) состоит из b_i , $i = 1, ..., m$;

г) пусть X - n-мерный параллелепипед: $X = \{ x : x \in E^n, \ a_i \le x_i \le b_i, \ i = 1, ..., n\}$ (множество, образованное простыми ограничениями).

$$P_X(x) = (P_X^1(x), ..., P_X^n(x)),$$

$$P_X^i = \begin{cases} a_i & \textit{при } x_i < a_i, \\ b_i & \textit{при } x_i > b_i, \\ x_i & \textit{при } a_i \le x_i \le b_i. \end{cases}$$

Теорема. Пусть $X \subset E^n$ - выпуклое замкнутое множество, $f(x)$ выпукла, дифференцируема и ограничена снизу:

$$\min_{x\in X} f(x) = f(x^*) = f^* > -\infty.$$

Тогда для последовательности $\{x_k\}$, полученной методом проекции градиента, имеем:

$$\lim_{k\to\infty} f(x_k) = f^*,$$

$$f(x_k) - f^* \le c_0/k, \quad c_0 = const > 0,$$

$$\| x_k - x^*\| = O(1/k).$$

Метод условного градиента (линеаризации)

$$\min_{x\in X} f(x), \quad \text{где } X \subseteq E^n \text{ - выпуклое замкнутое ограниченное множество, } f(x)\in C^1.$$

Пусть $x_1 \in X$ - некоторое начальное приближение. Если известно k-е приближение , $x_k \in X$, то приращение функции $f(x)$ в точке x_k можно представить в виде: $f(x) - f(x_k) = (grad\, f(x_k), x - x_k) + o(\| x - x_k \|)$.

Рассмотрим главную линейную часть этого приращения: $f_k(x) = (grad\, f(x_k), x - x_k)$ и определим вспомогательное приближение $\bar{x}_k$ из условий:

$$\min_{x\in X} f_k(x) = f_k(\bar{x}_k) = (grad\, f(x_k), \bar{x} - x_k), \quad \bar{x}_k \in X. \tag{11}$$

Так как X замкнуто и ограничено, а линейная функция $f_k(x)$ непрерывна, то точка $\bar{x}_k$ всегда существует. Если функция $f_k(x)$ достигает своей нижней грани на X более чем в одной точке, то в качестве точки $\bar{x}_k$ возьмем любую из них.

Отметим, что если множество X имеет вид:

$$X = \{x:\ x \in E^n,\ x \ge 0,\ (a_i, x) \le b_i,\ i = 1, ..., m,\ (a_i, x) = b_i,\ i = m+1, ..., m'\},$$

то задача (11) превратится в задачу линейного программирования, которая может быть решена известными методами.

Опишем ситуации, когда решение задачи (11) записывается в явном виде.

Пусть X - n-мерный параллелепипед:

$$X = \{x : x = (x^1, ..., x^n), \ a_i \le x^i \le b_i, \ i = 1, ..., n\}.$$

Функция $f_k(x) = \sum_{i=1}^{n} f_{x^i}(x_k)(x^i - x_k^i)$ минимальна на X в точке $\bar{x}_k = (\bar{x}_k^1, ..., \bar{x}_k^n)$, где $\bar{x}_k^i = \begin{cases} a_i & \textit{при } f_{x^i}(x_k) > 0, \\ b_i & \textit{при } f_{x^i}(x_k) < 0. \end{cases}$

При $f_{x^i}(x_k) = 0$ возникает неопределенность, в качестве $\bar{x}_k^i$ можно взять любое число из отрезка $[a_i, b_i]$.

Пусть X - шар радиуса R с центром в точке x_0 :

$$X = \{x : x \in E^n, \ \| x - x_0 \| \le R\}.$$

Точка минимума $\bar{x}_k$ функции $f_k(x)$ определяется по формуле: $\bar{x}_k = x_0 - R\dfrac{grad\, f(x_k)}{\| grad\, f(x_k)\|}$.

Получить вспомогательное приближение в явном виде $\bar{x}_k$ удается не всегда, вместо точного решения задачи (11) приходится определять приближенное решение. В этом случае будем предполагать, что $\bar{x}_k$ определяется из следующих условий:

$$f_k(\bar{x}_k) \le \min_{x\in X} f_k(x) + \varepsilon_k, \tag{12}$$

$$\bar{x}_k \in X,$$

$$\varepsilon_k \ge 0, \quad \lim_{k\to\infty} \varepsilon_k = 0.$$

Пусть имеем точку $\bar{x}_k$, удовлетворяющую (12). Следующее приближение будем искать в виде:

$$\boxed{x_{k+1} = x_k + \alpha_k\cdot (\bar{x}_k - x_k)}, \quad \alpha_k \in [0, 1]. \tag{13}$$

В зависимости от способа выбора величины α_k получаем различные ***варианты метода условного градиента***.

1. Выбор $\alpha_k \in [0,\ 1]$ из решения задачи минимизации: $f_k(\alpha_k) = \min\limits_{\alpha\in[0,\ 1]} f_k(\alpha)$, $f_k(\alpha) = f(x_k + \alpha\cdot(\bar{x}_k - x_k))$.

Можно определять величину α_k из условий:

$$f_k(\alpha_k) \le \min_{\alpha\in[0,\ 1]} f_k(\alpha) + \delta_k, \qquad (14)$$

$$\delta_k \ge 0, \quad \sum_{k=1}^{\infty} \delta_k = \delta < \infty.$$

2. Выбор α_k из условия:

$$\alpha_k = \begin{cases} 0 & при\ \ f_k(\bar{x}_k) > 0, \\ \lambda^{i_0} & при\ \ f_k(\bar{x}_k) \le 0, \end{cases}$$

где i_0 - минимальное натуральное число, при котором выполняется неравенство:

$$f(x_k) - f(x_k - \lambda^i\cdot(\bar{x}_k - x_k)) \ge \varepsilon\cdot\lambda^i\cdot\left|f_k(\bar{x}_k)\right|, \qquad \lambda > 0, \varepsilon < 1.$$

3. *Программная версия*. Выбор α_k, удовлетворяющего условиям: $\lim\limits_{k\to\infty} \alpha_k = \infty, \sum\limits_{k=1}^{\infty} \alpha_k^2 < \infty$.

Например, $\alpha_k = c\ (k+1)^{-\alpha},\ \ c = const > 0,\ \ \alpha \in (0.5,\ 1]$. При данной версии нет монотонного убывания $\{f(x_k)\}$.

4. Выбор α_k из условия монотонного уменьшения $\{f(x_k)\}$ с дроблением α при нарушении монотонности.

Теорема. Пусть $X \subseteq E^n$ - выпуклое, замкнутое и ограниченное множество, функция $f(x)$ непрерывно дифференцируема. Тогда при любом выборе $x_1 \in X$ и для последовательности $\{x_k\}$, определяемой условиями (12), (13), (14), справедливы равенства:

$$\lim_{k\to\infty} (grad\ f(x_k),\ \bar{x}_k - x_k) = 0, \quad \lim_{k\to\infty} \rho(x_k, V_k) = 0,$$

где $\rho(x_k, V^*)$ - расстояние от точки x_k до множества V^* стационарных точек функции $f(x)$ на множестве X:

$$V^* = \{x:\ x \in X,\ (grad\,f(x),\ v - x) = 0\ \ при\ \forall v \in X\}.$$

Если в дополнение к приведенным условиям функция $f(x)$ выпукла на множестве X и

$$\varepsilon_k + \delta_k \le C\cdot k^{-2r}, \quad C = const > 0, \quad r \in (0.5,\ 1],$$

то

$$\lim_{k\to\infty} f(x_k) = f^*, \quad \lim_{k\to\infty} \rho(x_k, X^*) = 0 \ (X^* = \{x^*\}),$$

имеет место оценка:

$$f(x_k) - f^* = \frac{C_0}{k^r}, \quad C_0 = const > 0, \quad k = 1, 2, \ldots$$

Метод возможных направлений

$$\min_{x\in X} f(x), \qquad f(x) \in C^1$$

Определение. Направление $u \ne 0$ называется *возможным* в точке $x \in X$, если $x + t\,u \in X$ при всех $t \in [0,\ t_0]$, где t_0 - положительное число, зависящее от точки x, направления u и структуры множества X. Направление $u \ne 0$ назовем *возможным направлением уменьшения* функции $f(x)$ в точке x на множестве X, если u - возможное направление в точке x и $f(x + \alpha\,u) < f(x)$ при $\forall \alpha \in (0,\ \beta)$, где $0 < \beta \le t_0$.

$$\min_{x\in X} f(x), \quad X = \{x : x \in E^n,\ g_i(x) \le 0,\ i = 1, \ldots, m\}, \qquad (15)$$

где функции $f(x)$, $g_i(x) \le 0$, $i = 1, \ldots, m$, определены на всем пространстве E^n и непрерывно дифференцируемы на X.

Рассмотрим упрощенный вариант метода возможных направлений для задачи (15). Пусть известна точка $x_k \in X$, введем множество номеров: $I_k = \{i:\ \ 1 \le i \le m,\ \ g_i(x_k) = 0\}$.

Возможна ситуация, когда $I_k = \varnothing$, что означает, что $g_i(x) < 0$ для всех $i = 1, \ldots, m$, т. е. $x_k \in \mathrm{int}X$.

В пространстве переменных $z = (u, \sigma) = (u^1, \ldots, u^n, \sigma) \in E^{n+1}$ рассмотрим вспомогательную задачу линейного программирования:

$$\min_{z\in Z_k} \sigma, \qquad (16)$$

$$Z_k = \{z : z = (u,\sigma) \in E^{n+1},\ (grad\ f(x_k), u) \le \sigma,\ (grad\ g_i(x_k), u) \le \sigma,\ i \in I_k,\ \|u\| \le 1\}$$

Пусть найденное решение задачи (16) $(u_k, \sigma_k) \in Z_k$ такое, что $\sigma_k = \min\limits_{Z_k} \sigma \le 0$.

Сначала рассмотрим случай $\sigma_k < 0$. В этом случае направление u_k, полученное из задачи (16), является возможным направлением уменьшения $f(x)$ в точке x_k. Действительно, из условия $(u_k, \sigma_k) \in Z_k$ следует, что

$$(grad\,f(x_k),\ u_k) \le \sigma_k < 0, \quad (grad\,g_i(x_k),\ u_k) \le \sigma_k < 0, \quad i \in I_k.$$

Отсюда видно, что $u_k \ne 0$ и для любого номера $i \in I_k$ имеем:

$$g_i(x_k + \alpha\,u_k) = g_i(x_k + \alpha\,u_k) - g_i(x_k) = \alpha\,(grad\,g_i(x_k),\ u_k) + o(\alpha) \le \alpha\,[\sigma_k + o(\alpha)/\alpha] < 0 \quad при\ \forall \alpha \in (0,\ \alpha_i).$$

Если $i \notin I_k$, т. е. $g_i(x_k) < 0$, то в силу непрерывности функции $g_i(x)$ неравенство $g_i(x_k + \alpha\,u_k) < 0$ сохранится при всех $\alpha \in (0,\ \alpha_i)$, где α_i - достаточно малое число. Положим $\alpha_0 = \min\{\alpha_1, \ldots, \alpha_m\} > 0$. Тогда

$g_i(x_k+\alpha u_k)<0$, $i=1, ..., m$, $\alpha\in(0, \alpha_0)$,

т. е. u_k - возможное направление множества X в точке x_k.

Далее, взяв число α_0 еще меньшим, можно добиться выполнения неравенства:

$f(x_k+\alpha u_k)-f(x_k)=\alpha(grad\, f(x_k),\, u_k)+o(\alpha)\le\alpha[\sigma_k+o(\alpha)/\alpha]<0$ при $\forall\alpha\in(0, \alpha_0)$.

Итак, показано, что если (u_k, σ_k) решение задачи (16) и $\sigma_k<0$, то u_k - возможное направление уменьшения функции $f(x)$ в точке x_k на множестве X.

Используя найденное таким образом направление u_k, следующую точку метода определим как:

$$\boxed{x_{k+1}=x_k+\alpha_л u_k},\quad \alpha_k\in(0, \beta_k], \tag{17}$$

где $\beta_k=\sup\{\alpha: x_k+t\,u_k\in X,\ \ t\in[0, \alpha]\}>0$.

Версии метода возможных направлений.

1) Величина α_k выбирается из условий:

$f_k(\alpha_k)=\min\limits_{\alpha\in(0,\beta_k]} f_k(\alpha)=f_k^*$, $f_k(\alpha)=f(x_k+\alpha u_k)$, $\alpha_k\in(0, \beta_k]$.

2) Величина α_k выбирается из условий:

$$f_k(\alpha_k)=f_k^*+\delta_k,\quad \delta_k\ge 0,\quad \sum_{k=1}^{\infty}\delta_k=\delta<\infty,\quad \alpha_k\in(0, \beta_k]. \tag{18}$$

3) Величина α_k выбирается из условий:

$f(x_k)-f(x_k+\alpha_k u_k)\ge\varepsilon\,\alpha_k\left|\sigma_k\right|$, $\alpha_k\in(0, \beta_k]$, $\varepsilon\in(0, 0.5)$.

4) Величина α_k выбирается из условий, $x_k+\alpha_k u_k\in X$ и $f(x_k+\alpha_k u_k)<f(x_k)$.

Один шаг метода возможных направлений для задачи (15) в случае $\sigma_k<0$ описан.

Рассмотрим случай, когда в решении (u_k, σ_k) задачи (16) координата $\sigma_k=0$. Это может случиться, например, при $grad\, f(x_k)=0$ или $grad\, g_i(x_k)=0$ для некоторого номера $i\in I_k$. При $\sigma_k=0$ уже нельзя гарантировать, что u_k будет возможным направлением убывания. В этом случае итерационный процесс прекращается. При $\sigma_k=0$ точка x_k является стационарной точкой задачи (15), в точке x_k выполняются необходимые условия минимума.

Описанный вариант метода возможных направлений не стоит применять на практике. В случае, когда в решении (u_k,σ_k) задачи (16) координата $\sigma_k<0$ мала по абсолютной величине, направление u_k, теоретически являясь возможным направлением уменьшения в точке x_k, практически может обладать указанными свойствами в весьма слабой форме. Это означает, что либо при некотором $i\in I_k$ $(grad\, g_i(x_k),\ u_k)\approx\sigma_k\approx 0$ и направление u_k почти “касается” множества X, не ведет внутрь X, а величина β_k может оказаться очень малой, либо $(grad\, f(x_k), u_k)\approx\sigma_k\approx 0$, т. е. вдоль u_k функция $f(x)$ в точке x_k убывает слишком медленно. В результате длина шага α_k в (17) может получиться очень малой даже вдали от стационарной точки и сходимость метода может оказаться очень медленной.

Чтобы как-то избежать таких неприятных явлений, можно попытаться варьировать множество номеров I_k в (16) и осуществлять спуск из точки x_k только в том случае, когда получаемое из (16) направление u_k обладает достаточно ярко выраженными свойствами возможного направления уменьшения.

Опишем один из таких подходов. Пусть известна точка (x_k, ε_k), $x_k\in X$, $\varepsilon_k>0$. Определим множество номеров:

$$I_k=\{i:\ 1\le i\le m,\ \ -\varepsilon_k\le g_i(x_k)\le 0\} \tag{19}$$

и решим вспомогательную задачу (16) при таком I_k. Задача (16) будет задачей линейного программирования и будет обладать хотя бы одним решением (u_k, σ_k) с $\sigma_k=\min\limits_{Z_k}\sigma\le 0$.

Имеются две возможности:

1. $\sigma_k\le-\varepsilon_k$. В этом случае считаем, что u_k является достаточно хорошим возможным направлением уменьшения в точке x_k, и полагаем

$$x_{k+1}=x_k+\alpha_л u_k,\quad \alpha_k\in(0, \beta_k],\quad \varepsilon_{k+1}=\varepsilon_k, \tag{20}$$

где выбор α_k может быть осуществлен одним из описанных выше способов.

2. $-\varepsilon_k<\sigma_k\le 0$. В этом случае считаем, что направление u_k не обладает ясно выраженным свойством возможного направления в точке x_k, и полагаем

$$x_{k+1}=x_k,\quad \varepsilon_{k+1}=\lambda\cdot\varepsilon_k,\quad \lambda\in(0, 1) \tag{21}$$

и снова переходим к рассмотрению задачи (16) с заменой множества I_k на множество

$I_{k+1}=\{\ i:\ \ 1\le i\le m,\ \ -\varepsilon_{k+1}=-\lambda\cdot\varepsilon_{k+1}\le g_i(x_k)\le 0\}$,

надеясь на то, что на более широком множестве (при сужении I_k множество Z_k, вообще говоря, расширяется) удастся найти лучшее возможное направление убывания и т. д.

Описание одной итерации метода возможных направлений для задачи (15) закончено. В методе возможных направлений имеются параметры $\varepsilon_1, \varepsilon_2, ...$, удачным выбором которых можно улучшить выбор направлений u_k на каждой итерации, ускорить сходимость метода.

Теорема. Пусть функции $f(x)$, $g_i(x)$, $i=1, ..., m$, определены, непрерывно дифференцируемы и выпуклы на E^n, множество X из (15) регулярно, $\max\limits_{1\le i\le m}\max\limits_{x\in X}\left\|grad\, g_i(x)\right\|<\infty$. Пусть задача (15) имеет решение, т. е. $f^*>-\infty$, $x^{N+1,1}$, и начальная точка $x_1\in X$ такова, что множество: $M_\delta(x_1)=\{x: x\in X,\ \ f(x)\le f(x_1)+\delta\}$ - ограничено. Тогда при любом выборе $\varepsilon_1>0$ для последовательности $\{x_k\}$, определяемой условиями (16) - (21), справедливы равенства:

$$\lim_{k\to\infty} f(x_k)=f^*,\quad \lim_{k\to\infty}\rho(x_k,\ X^*)=0.$$

Специальные методы решения задач условной оптимизации.

Метод зеркальных построений

$$\min_{x\in X} f(x), \quad X = \{x : x \in E^n, \ \ g_i(x) \ge 0, \ \ i = 1, ..., \ m_1\}. \qquad (22)$$

Предполагается, что множество X выпуклое. В частном случае ограничения $g_i(x)$ линейны:

$$g_i(x) = (a^i, x) + b_i \ge 0, \quad a^i \in E^n, \quad b_i \in E^1. \qquad (23)$$

Рассмотрим случай, когда есть одно линейное активное ограничение $g_1(x) \ge 0$ и на N -м шаге одна вершина нарушила ограничение. Пусть на N -м шаге отображают $m + l$ вершин комплекса S_N и пусть вершина $x^{N+1,1}$ нового комплекса S_{N+1} нарушила ограничение, т. е.

$$g_1(x^{N+1,1}) = (a^1, x^{N+1,1}) + b_1 < 0.$$

В этом случае предлагается провести следующие операции.

1. Построить проекцию точки $x^{N+1,\,1}$ на активное ограничение, т. е. найти такую точку $y^{N+1,\,1} \in E^n$, что $g_1(y^{N+1,\,1}) = 0$ и

$$\left\| y^{N+1,\,1} - x^{N+1,\,1} \right\| = \min_{z\in X} \left\| z - x^{N+1,\,1} \right\|.$$

Проекция $y^{N+1,\,1}$ определяется по формуле:

$$y^{N+1,\,1} = x^{N+1,\,1} + ((a^1, x^{N+1,\,1}) + b_1)\, a^1 / \left\| a^1 \right\|^2. \qquad (24)$$

2. Построить точку $x_*^{N+1,\,1}$, симметричную точке $x^{N+1,\,1}$ относительно активного ограничения:

$$x_*^{N+1,\,1} = 2y^{N+1,\,1} - x^{N+1,\,1}. \qquad (25)$$

3. В точке $x_*^{N+1,1}$ измерить значение $f(x_*^{N+1,\,1})$ и далее считать, что $f(x^{N+1,\,1}) = f(x_*^{N+1,\,1})$.

4. В остальных $m - 1 + l$ новых вершинах комплекса (симплекса) S_{N+1} произвести измерение значений функции $f(x)$ и далее действовать по правилам исходного алгоритма безусловной минимизации.

Рассмотрим задачу минимизации с несколькими линейными ограничениями, т. е. когда множество X (22) образовано ограничениями (23) ($m_1 > 1$). Пусть на N -м шаге отображенная вершина $x^{N+1,\,1}$ комплекса S_{N+1} нарушила r ограничений ($r > 1$). Тогда предлагается провести следующие операции.

1. Построить проекцию вершины $x^{N+1,\,1}$ на каждое из r нарушенных ограничений и в качестве проекции $y^{N+1,\,1}$ выбрать точку, удовлетворяющую всем ограничениям, т.е. должно выполняться условие $y^{N+1,\,1} \in X$. Если ни одна из проекций не является допустимой, то ищутся проекции вершины на парные пересечения нарушенных ограничений и проекция $y^{N+1,\,1} \in X$. Этот процесс продолжают до определения проекции вершины на пересечении r ограничений, если все ранее полученные точки не являлись допустимыми. Существование и единственность проекции точки на множество X следует из выпуклости множества X.

Проекция $y^{N+1,\,1}$ вершины $x^{N+1,\,1}$ на пересечение d ограничений $g_i = 0$ ($i = 1, ..., \ d$) определяется по формуле:

$$y^{N+1,\,1} = x^{N+1,\,1} - A^T (AA^T)^{-1} (Ax^{N+1,\,1} + B), \qquad (26)$$

где строками матрицы A являются d векторов a^i, элементами вектора B являются скалярные величины b_i, описывающие нарушенные ограничения: $g_i = (a^i, x) + b_i$.

2. Строится точка $x_*^{N+1,\,1}$, симметричная вершине $x^{N+1,\,1}$ относительно пересечения тех ограничений, для которых найдена точка $y^{N+1,\,1}$. Точка $x_*^{N+1,\,1}$ определяется по формуле (25). Если точка $x_*^{N+1,\,1} \in X$, то в этой точке измеряется значение $f(x_*^{N+1,\,1})$, которое приписывается вершине $x^{N+1,\,1}$. Если точка $x_*^{N+1,\,1} \notin X$, то вершина $x^{N+1,\,1}$ считается недопустимой, возвращаются к комплексу S_N и сокращают длину N -го шага.

Далее повторяются описанные операции. В случае нарушения несколькими вершинами ограничений для каждой вершины ищется симметричная точка в допустимой области.

Метод скользящего допуска

$$\min_{x\in X} f(x), \quad X = \left\{x: \ x \in E^n, \ g_i(x) \ge 0, \ \ i = 1, ..., m_1, \ \ g_i(x) = 0, \ \ i = m_1 + 1, ..., m_2\right\}. \qquad (27)$$

Исходная задача минимизации заменяется на задачу минимизации функции $f(x)$ при ограничении:

$$a \cdot T_N - T(x) \ge 0, \quad N = 1, \ 2, \ ..., \qquad (28)$$

где T_N - значение критерия скользящего допуска на N -й итерации; α - параметр, определяющий жесткость условия; $T(x)$ - положительно определенный функционал над множеством функций, задающих ограничения (27), имеющий вид:

$$T(x) = \left[\sum_{i=1}^{m_1} U_i \cdot g_i^2(x) + \sum_{i=m_1+1}^{m_2} g_i^2(x) \right]^{1/2}, \qquad (29)$$

где U_i - оператор Хевисайда: $U_i = \begin{cases} 0 & \textit{при} \ \ g_i \ge 0, \\ 1 & \textit{при} \ \ g_i < 0. \end{cases}$

Введенный функционал $T(x)$ (29) характеризует величину нарушения ограничений (27). При $x \in X$ этот функционал равен нулю. Если сумма $g_i^2(x)$ ($i = m_1 + 1, ..., m_2$) является выпуклой и функции $g_i(x)$ ($i = 1, ..., \ m_1$) вогнуты, то функционал $T(x)$ - выпуклая функция, достигающая минимума $T(x) = 0$ при $x \in X$.

В ограничение (28) введен критерий скользящего допуска T_N, величина которого задает разрешаемое отклонение $T(x)$ от нуля. Критерий T_N выбирают так, чтобы с ростом номера итерации N его величина монотонно убывала, приближаясь к нулю:

$$T_1 \geq T_2 \geq \ldots \geq T_N \geq 0 . \qquad (30)$$

При $T_N = 0$ условие (28) превращается в условие $T(x) \leq 0$, которое удовлетворяется при $T(x) = 0$, так как $T(x) \geq 0$. Конкретный вид критерия T_N, удовлетворяющий условию (30), может быть самым разным. При поиске экстремума будем использовать симплексы, состоящие из $n+1$ вершин. Выберем критерий T_N, зависящим от размера симплекса:

$$T_1 = A ,$$

$$T_N = \min\left\{T_{N-1},\ \frac{1}{n+1}\sum_{i=1}^{n+1}\left\| x^{N,\,i} - x^N \right\|\right\},$$

где A - начальное значение критерия.

В качестве основного алгоритма минимизации выберем алгоритм с деформируемым симплексом.

Рассмотрим операцию минимизации $T(x)$. Пусть на N -й итерации вершина $x^{N,\,j}$ симплекса S_N не удовлетворяет условию (27). Тогда решается задача минимизации $T(x)$ с помощью алгоритма безусловной минимизации с деформируемым симплексом. В качестве начального симплекса для решения задачи минимизации $T(x)$ строится правильный симплекс S_1' с центром в точке $x^{N,\,j}$ и размером ребра $L_1^1 = 0.05T_N$. Далее производится спуск из точки до тех пор, пока хотя бы одна вершина симплекса не удовлетворит условию (27). Если таких вершин будет несколько, то выбирается вершина с меньшим значением $T(x)$. Эта вершина принимается за вершину $x^{N,\,j}$ симплекса S_N.

После того как все вершины симплекса S_N будут удовлетворять условию (27), в новых вершинах симплекса S_N измеряются значения минимизируемой функции $f(x)$; по критерию локальной оптимальности определяется число $m^N + l^N$ отображаемых вершин, производится отображение этих вершин с коэффициентом $\alpha = 2$ и строится симплекс S_{N+1}. Далее каждая из отображенных вершин проверяется на допустимость, т. е. определяется, удовлетворяет ли вершина условию (27). Если не удовлетворяет, то для каждой вершины производится минимизация $T(x)$ до достижения точки x, в которой выполняется (27). Эта точка заменяет вершину, нарушившую ограничение. Затем в каждой новой вершине симплекса S_{N+1} измеряется значение функции $f(x)$, после которого начинается этап адаптации размера и формы симплекса S_{N+1}. На этом этапе каждая из отображенных вершин $x^{N+1,\,j}$ ($j = 1,\ \ldots,\ m^N + l^N$) сравнивается с соответствующей вершиной симплекса S_N и проверяется правило успешности для каждой вершины отдельно. Если для вершины $x^{N+1,\,j}$ выполнено условие успешности, то производится операция растяжения с коэффициентом $\gamma = 2$ по формуле:

$$x_*^{N+1,\,j} = 2\,x^{N+1,\,j} - \frac{1}{n+1-m^N-l^N}\sum_{i=m^N+l^N}^{n+1} x^{N,\,i} ,$$

где второй член правой части равенства определяет центр неотображенных вершин. В вершине $x_*^{N+1,\,j}$ производят измерения значения $f(x)$, в качестве вершины $x^{N+1,\,j}$ выбирают вершину из $x^{N+1,\,j}$, $x_*^{N+1,\,j}$ с минимальным значением функции. Если для вершины $x^{N+1,\,j}$ не выполнено условие успешности, то производят стягивание вершины к центру неотображаемых вершин:

$$x^{N+1,\,j} = \frac{1}{2}x^{N+1,\,j} - \frac{1}{2(n+1-m^N-l^N)}\sum_{i=m^N+l^N}^{n+1} x^{N,\,i} ,$$

измеряют значение $f(x)$ в новой вершине и проверяют условие успешности шага. Если шаг удачен, то полученную вершину принимают за вершину симплекса S_{N+1}; если шаг неудачен, то переходят к симплексу S_N и определяют новую вершину, смещая ее к центру неотображенных вершин по формуле:

$$x^{N+1,\,j} = \frac{\gamma+1}{\gamma\,(n+1-m^N-l^N)}\sum_{i=m^N+l^N}^{n+1} x^{N,\,i} - \frac{1}{\gamma}x^{N+1,\,j} ,$$

где $\gamma = 2$. В новой вершине измеряют значение функции $f(x)$ и проверяют выполнение условия успешности. Если условие выполняется, то эта вершина принимается за новую вершину симплекса S_{N+1}, если условие не выполняется, то удваивают величину γ и вычисляют $x^{N+1,\,j}$ по последней формуле. Этот процесс продолжают до выполнения условия успешности.

В качестве правила останова поиска используется условие:

$$T_N \leq \varepsilon_1 , \qquad (31)$$

где ε_1 - заранее выбранная положительная величина. При выполнении (31) поиск прекращается. Критерий T_N определяет среднее расстояние от центра симплекса S_N до его вершин, умноженное на некоторый коэффициент, и, следовательно, поиск прекращается при малых размерах симплекса, определяемых величиной ε_1.

В качестве базовых алгоритмов можно выбрать алгоритмы с деформируемыми комплексами.

Теорема. Пусть минимизируемая функция $f(x)$ выпуклая и выполнены условия:

1) $\left\| grad\ f(x) - grad\ f(y) \right\| \leq L\left\| x-y \right\|,\quad x, y \in E^n,\ L - const$,

2) $\left\| grad\ f(x) \right\| \leq k$,

3) множество Лебега $M(x) = \left\{x : f(x) \leq f(x^1)\right\}$ ограничено,

4) X - выпуклое замкнутое множество.

Тогда последовательность центров симплексов $\left\{x^N\right\}$, порожденная алгоритмом скользящего допуска, позволяет решить задачу минимизации с заданной точностью ε_1:

$$f(x^N) - f_{\min} \leq \varepsilon_1 ,\quad \varepsilon_1 > 0 .$$

Комбинированный метод проектирования и штрафных функций

Рассматривается задача минимизации функции $f(x)$ при $x \in X \subset E^n$, где X - выпуклое замкнутое множество вида (27). Предлагается вместо решения задачи условной минимизации решать задачу безусловной минимизации функции:

$$\Phi(x) = f(P_X(x)) + r(\| x - P_X(x) \| \to \min, \qquad (32)$$

где $\| \cdot \|$ - евклидова норма, $r(\delta)$ - непрерывная, строго монотонно возрастающая функция неотрицательного скалярного аргумента $\delta \in E^1$, для которой выполняется:

$$r(\delta_1) > r(\delta_2) \text{ при } \delta_1 > \delta_2, \ \delta_1, \delta_2 \in E_1, \qquad (33)$$

$$r(0) = 0,$$

$P_X(x)$ - проекция точки x на множество X, удовлетворяющая условию:

$$\delta = \| x - P_X(x) \| = \min_{x' \in X} \| x - x' \|. \qquad (34)$$

Введенная функция $\Phi(x)$ совпадает с функцией $f(x)$ при $x \in X$, а при $x \notin X$ она равна сумме значений $f(P_X(x))$ и $r(\delta)$, где δ - расстояние от точки x до множества X. Функция $r(\delta)$ является штрафом за нарушение ограничений, который прибавляется к значению функции на границе множества X. Для определения значения функции $\Phi(x)$ в точке $x \notin X$ нужно найти проекцию $P_X(x)$ точки x на множество X, измерить значение функции $f(P_X(x))$, определить расстояние от точки x до множества X, вычислить значение функции $r(\| x - P_X(x) \|$ и просуммировать полученные значения. Из выпуклости и замкнутости множества X следует существование единственной проекции точки x на множество X.

Первый вопрос, который возникает, связан с корректностью замены исходной задачи условной минимизации на задачу безусловной минимизации функции $\Phi(x)$. На этот вопрос отвечает следующая теорема.

Теорема.

1. Пусть X - выпуклое множество из E^n, $f(x)$ - непрерывная в X и ограниченная сверху на границе множества X функция, $r(\delta)$ - непрерывная, строго монотонно возрастающая функция, удовлетворяющая условиям (33), тогда

$$\min_{x \in E^n} \Phi(x) = \min_{x \in X} f(x).$$

2. Пусть в дополнение к предположениям п. 1 X - компакт,

множество $X^* = \{x : x \in X, \ f(x) = \min_{x' \in X} f(x') = f^*\}$ - непусто,

тогда $X^* = X^{**}$, где

$$X^{**} = \{x : x \in E^n, \ \Phi(x) = \min_{x' \in E^n} \Phi(x') = f^*\}.$$

Справедливость утверждений теоремы следует из того, что для любой точки $x \notin X$ найдется точка $x' \in X$, такая, что $\Phi(x) > \Phi(x')$.

Это означает, что минимальные значения функция $\Phi(x)$ принимает на множестве X, где $\Phi(x) = f(x)$.

Из теоремы следует эквивалентность решения задачи минимизации функции $f(x)$ на множестве X (27) решению задачи безусловной минимизации $\Phi(x)$ при довольно слабых предположениях о $f(x)$.

Сложность решения задачи безусловной минимизации функции $\Phi(x)$ в первую очередь связана со сложностью определения проекции точки x на множество X и зависит от вида X. В частных случаях проекция точки x на множество X может быть записана в явном виде.

В случае нелинейных ограничений проекция точки x на множество X ищется путем минимизации функции (34). Выбор метода минимизации для определения проекции точки на множество допустимых значений зависит от специфики решаемой задачи. Если функции, образующие ограничения, заданы в явном виде, то минимизацию можно проводить одним из градиентных методов или методом более высокого порядка. Когда ограничения не заданы в явном виде либо имеют сложный вид, не допускающий вычисление градиента, минимизацию следует вести методом прямого поиска, например симплексным методом. Возможен вариант, в котором производится линеаризация ограничений и проекция точки ищется для линеаризованных ограничений.

При минимизации непрерывной функции $f(x)$ функция $\Phi(x)$ будет также непрерывной, что следует из ее построения. В общем случае градиент функции $\Phi(x)$ претерпевает разрывы на границе множества X даже в случае гладкости функции $f(x)$. Для упрощения решения задачи безусловной минимизации (32) следует выбирать вид и параметры функции $r(\delta)$, наделяющие $\Phi(x)$ желаемыми свойствами. Если $f(x)$ выпукла на множестве X и норма ее градиента ограничена сверху, то соответствующим выбором функции $r(\delta)$ можно достичь того, что функция $\Phi(x)$ будет также выпуклой.

Например, функция $\Phi(x)$ будет выпуклой, если $r(\delta) = k\delta$, где $k \geq \| grad\ f(x') \|$, $x' \in X$ (предполагается, что $f(x)$ выпуклая при $x \in X$) Выбирая большее или меньшее k, можно управлять процессом поиска экстремума, давая возможность проводить поиск вне множества X либо на множестве X.

Отметим некоторые особенности замены решения задачи условной минимизации решением задачи (32). Прежде всего, предлагаемая замена приводит к решению задачи безусловной минимизации вместо решения более сложной задачи с ограничениями типа равенств и неравенств, образующими множество X. В отличие от метода внешних штрафных функций вместо последовательности решения задач безусловной минимизации для нахождения решения исходной задачи с ограничениями достаточно решить задачу безусловной минимизации функции $\Phi(x)$. В процессе поиска минимума функции $\Phi(x)$ используется информация о значениях исходной функции $f(x)$ только на множестве допустимых значений X. Поэтому останов процесса поиска на любом шаге дает возможность определить значение функции $f(x)$ на множестве X даже в случае, когда $x \notin X$, и тем самым получить некоторое допустимое приближение решения исходной задачи условной минимизации. Минимизацию функции $\Phi(x)$ можно проводить стандартными методами безусловной минимизации.