

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие ко второму изданию	6
Введение	8
Список обозначений	13
Гл а в а 1. Э л е м е н т ы т е о р и и оптимизации	15
§ 1.1. Начальные сведения о задачах оптимизации	15
1.1.1. Постановка и классификация задач оптимизации (15). 1.1.2. Существование глобального решения (18).	
§ 1.2. Прямые условия оптимальности	22
1.2.1. Касательный конус. Прямые условия оптимальности (22). 1.2.2. Условия оптимальности в задаче безусловной оптимизации (25).	
§ 1.3. Задача с ограничениями-равенствами	28
1.3.1. Теорема о неявной функции. Теорема Люстерника (28). 1.3.2. Принцип Лагранжа (31). 1.3.3. Условия второго порядка оптимальности (34).	
§ 1.4. Задача со смешанными ограничениями	36
1.4.1. Леммы о линейных системах (38). 1.4.2. Условия Каруша–Куна–Таккера (40). 1.4.3. Условия второго порядка оптимальности (46).	
Гл а в а 2. Н а ч а л ь н ы е с в е д е н и я о м е т о д а х оптимизации	50
§ 2.1. Общее понятие о методах оптимизации	50
2.1.1. Классификация методов оптимизации. Понятия сходимости (50). 2.1.2. Оценки скорости сходимости. Правила остановки (53).	
§ 2.2. Методы одномерной оптимизации	57
2.2.1. Метод перебора на равномерной сетке (58). 2.2.2. Метод дихотомии. Метод золотого сечения (59).	
Гл а в а 3. М е т о д ы б e з у с л o в н o й оптимизации	64
§ 3.1. Методы спуска	64
3.1.1. Общая схема методов спуска (64). 3.1.2. Градиентные методы (72).	

§3.2. Метод Ньютона. Квазиньютоновские методы	85
3.2.1. Метод Ньютона для уравнений (85). 3.2.2. Метод Ньютона для задачи безусловной оптимизации (89).	
3.2.3. Квазиньютоновские методы (92).	
§3.3. Методы сопряженных направлений	98
3.3.1. Методы сопряженных направлений для квадратичных функций (99). 3.3.2. Метод сопряженных градиентов (102).	
§3.4. Методы нулевого порядка	105
Г л а в а 4. Методы условной оптимизации	109
§4.1. Методы решения задач с простыми ограничениями	109
4.1.1. Методы проекции градиента (109). 4.1.2. Возможные направления и методы спуска (115). 4.1.3. Методы условного градиента. Условные методы Ньютона (117).	
§4.2. Методы возможных направлений	119
§4.3. Методы решения задач с ограничениями-равенствами	123
4.3.1. Методы решения системы Лагранжа (123). 4.3.2. Метод квадратичного штрафа (126). 4.3.3. Модифицированные функции Лагранжа и точные гладкие штрафные функции (134).	
§4.4. Последовательное квадратичное программирование	142
4.4.1. Ограничения-равенства (142). 4.4.2. Смешанные ограничения (145).	
§4.5. Методы решения системы Каруша–Куна–Таккера	155
4.5.1. Эквивалентные переформулировки системы Каруша–Куна–Таккера (156). 4.5.2. Элементы негладкого анализа и обобщенный метод Ньютона (159). 4.5.3. Обобщенный метод Ньютона для системы Каруша–Куна–Таккера (165).	
§4.6. Идентификация активных ограничений	173
4.6.1. Идентификация, основанная на оценках расстояния (174). 4.6.2. Оценки расстояния (178).	
§4.7. Штрафы и модифицированные функции Лагранжа для задачи со смешанными ограничениями	180
4.7.1. Штрафы (180). 4.7.2. Модифицированные функции Лагранжа (191). 4.7.3. Точные штрафы (194).	
Г л а в а 5. Стратегии глобализации сходимости	201
§5.1. Одномерный поиск	201
§5.2. Методы доверительной области	205
§5.3. Продолжение по параметру	213
5.3.1. Конечные алгоритмы продолжения (214). 5.3.2. Продолжение посредством решения начальной задачи (218).	
§5.4. Глобализация сходимости методов последовательного квадратичного программирования	221
5.4.1. Глобализация сходимости (221). 5.4.2. Восстановление сверхлинейной скорости сходимости (229).	

Г л а в а 6. Методы негладкой выпуклой оптимизации	241
§6.1. Элементы выпуклого анализа и двойственные методы	242
6.1.1. Элементы субдифференциального исчисления (242). 6.1.2. Двойственная релаксация (243).	
§6.2. Субградиентные методы. Кусочно линейная аппроксимация	248
6.2.1. Субградиентные методы (248). 6.2.2. Методы кусочно линейной аппроксимации (252).	
§6.3. Многошаговые методы с квадратичными подзадачами	255
Г л а в а 7. Специальные задачи оптимизации	271
§7.1. Элементы теории линейного программирования	271
7.1.1. Общие свойства линейных задач (271). 7.1.2. Теория двойственности для линейных задач (277).	
§7.2. Симплекс-метод	281
7.2.1. Общая схема симплекс-метода (281). 7.2.2. Итерация симплекс-метода (284).	
§7.3. Методы решения задач квадратичного программирования	290
7.3.1. Особые точки (291). 7.3.2. Метод особых точек (293).	
§7.4. Методы внутренней точки	296
7.4.1. Барьеры (296). 7.4.2. Некоторые замечания о трудоемкости алгоритмов (300). 7.4.3. Прямые методы внутренней точки для линейных задач (302). 7.4.4. Прямоугольные методы внутренней точки для линейных задач (308).	
Список литературы	314
Предметный указатель	317

ПРЕДИСЛОВИЕ КО ВТОРОМУ ИЗДАНИЮ

Первое издание этой книги увидело свет в 2003 г. и имело определенный успех у читателей, что в значительной степени и подвигло авторов на подготовку переработанного второго издания. За это время авторы выпустили два учебника по различным аспектам *теории оптимизации* — на португальском языке¹⁾ и на русском [20]. Зачем вообще нужна теория оптимизации? С одной стороны, это чрезвычайно достойная и богатая на открытия область математической деятельности, находящаяся в постоянном развитии и весьма привлекательная для каждого, кто способен оценить красоту и нетривиальность теоретических построений. С другой стороны, опосредовано, через *численные методы оптимизации*, теория оптимизации находит применения для практического (читай: численного) решения реальных задач, возникающих в приложениях, и, по мнению авторов данной книги, именно второе предназначение теории оптимизации является главным.

Например, те или иные необходимые условия оптимальности принято сравнивать между собой по их тонкости (близости к достаточным), а также по тому, насколько обременительны предположения (условия гладкости, условия регулярности ограничений), гарантирующие справедливость данных необходимых условий. Вместе с тем, следует оценивать необходимые условия оптимальности еще и с точки зрения их потенциальной практической полезности, т. е. возможности построения на их основе новых (либо обоснования и анализа свойств известных) численных методов. Самые тонкие и, казалось бы, гармоничные необходимые условия оптимальности иногда остаются совершенно невостребованными в численной оптимизации, в то время как более грубые условия находят многочисленные вычислительные приложения.

Упомянутая выше книга на португальском языке является первым томом, за которым последовал второй²⁾, посвященный численной оптимизации. В книге [20] большое внимание уделено приложениям

теории чувствительности именно в численной оптимизации. Что же касается настоящей книги, то одной из ее отличительных особенностей является то, что элементы теории оптимизации излагаются в ней действительно в минимально необходимом объеме (только то, что требуется для изложения и обоснования представленных здесь численных методов).

Во втором издании полностью переписаны и значительно расширены п. 3.2.3 и § 6.3, ввиду чрезвычайной практической важности рассматриваемых в них методов. На сегодняшний день квазиньютоновские методы следует считать наиболее эффективным подходом к решению гладких задач безусловной оптимизации, а методы семейства bundle — наиболее эффективным подходом к решению негладких выпуклых задач. На самом деле, если иметь ввиду лишь вычислительную практику, а не теорию, то другие методы для соответствующих классов задач можно было бы и не рассматривать, по крайней мере в деталях. В § 5.4 добавлен материал о преодолении эффекта Маратоса для методов последовательного квадратичного программирования (SQP) за счет использования так называемых поправок второго порядка, что на сегодняшний день является наиболее распространенным практическим подходом к данной проблеме.

Кроме того, имеется множество других исправлений и дополнений, большинство из которых носит характер комментариев, призванных, в частности, усилить акценты и еще яснее обозначить, какие методы действительно составляют state-of-the-art численной оптимизации, а какие представляют в основном исторический интерес, либо продолжают использоваться лишь благодаря простоте идеи и/или реализации, или в результате того, что пользователи просто не знают о наличии лучших альтернатив.

А.Ф. Измаилов, Москва
М.В. Солодов, Рио-де-Жанейро
Апрель 2008 г.

¹⁾ Izmailov A.F., Solodov M.V. Otimização. V. 1. Condições de otimalidade, elementos de análise convexa e de dualidade.—Rio de Janeiro: IMPA, 2005.

²⁾ Izmailov A.F., Solodov M.V. Otimização. V. 2. Métodos computacionais.—Rio de Janeiro: IMPA, 2007.

ВВЕДЕНИЕ

Наука о численных методах оптимизации весьма молода; она сформировалась во второй половине прошлого века и продолжает активно развиваться. Изначально предназначенная в основном для обслуживания исследования операций (или, более общим образом, науки о принятии решений), сейчас она представляет собой самостоятельную область деятельности на стыке теории и приложений, со своими традициями, языком и широким международным сообществом специалистов. В мире издается множество журналов по оптимизации (исключение составляет Россия, в которой в силу определенных причин никогда не существовало и не существует по сей день специализированного научного журнала по этой тематике). Все возрастающая востребованность результатов в данной области объясняется как наличием множественных естественных оптимизационных процессов в природе, так и естественным стремлением человека к оптимальной организации своей деятельности. С другой стороны, стремительное развитие численной оптимизации именно в последние десятилетия привело к появлению алгоритмов и программного обеспечения, пригодных для решения реальных прикладных задач (в том числе задач большой размерности), тем самым по-настоящему сблизив эту науку с областью ее возможных приложений.

К настоящему моменту различными авторами опубликовано множество (в том числе прекрасных) руководств и учебников по численным методам оптимизации (см., например, [1, 4, 6, 7, 9, 10, 13, 16, 17, 19, 23, 26, 28, 30–33, 36, 38, 40, 41, 44–46, 48]; здесь намеренно не упоминаются более ранние и явно устаревшие издания). Однако, как видно из приведенного списка, несмотря на чрезвычайно активное развитие этого предмета, с начала 90-х годов издавались лишь единичные курсы такого рода. В современной западной литературе по оптимизации часто цитируются книги [41, 50], но широкому кругу российских читателей они недоступны. Давно ожидаемым событием стал выход фундаментального труда [8], однако авторы надеются, что и настоящая книга займет достойное место в отечественной литературе по методам оптимизации.

В любом случае появление нового курса по методам оптимизации должно сопровождаться разъяснениями, чем данный курс отличается

от существующих и какие цели преследовались при его подготовке. Предмет этот чрезвычайно обширен, поэтому важно обозначить основные принципы, которыми руководствовались авторы при отборе материала, и, прежде всего, какие вопросы и почему не нашли отражения в курсе.

Главный объект изучения в данном курсе — гладкая задача конечномерного математического программирования без каких-либо предположений о выпуклости. Тем самым, во-первых, сознательно сводится к минимуму рассмотрение чрезвычайно важного класса негладких задач и задач с недостаточной гладкостью. Это объясняется лишь неизбежной ограниченностью объема курса. Элементы негладкого анализа и соответствующие методы обсуждаются ниже главным образом как средства решения изначально гладких задач. Такое естественное возникновение негладкости при работе с гладкими задачами наблюдается нередко. Например, множество решений системы гладких неравенств обычно негладко (в некотором интуитивном смысле).

Во-вторых, важной отличительной чертой основной части данного курса является сознательный отказ от использования аппарата выпуклого анализа. При обосновании и сравнительном анализе численных методов оптимизации в большинстве известных руководств этот аппарат используется систематически. Это удобно, поскольку наличие выпуклой структуры существенно упрощает анализ и дает возможность довести его до конца. Тем самым, получается единая картина методов оптимизации, но лишь для весьма специального класса задач с очень существенными структурными ограничениями. Можно, видимо, утверждать, что подавляющее большинство задач оптимизации, возникающих в приложениях, не являются выпуклыми (а если и являются выпуклыми, то не являются гладкими). Кроме того, представляется весьма интересным выяснить, насколько далеко можно продвинуться в обосновании методов оптимизации, не привлекая по существу предположений о выпуклости. Одной из важнейших задач авторов при подготовке этого курса была демонстрация того, что продвинуться можно достаточно далеко.

Тем не менее, негладкие выпуклые задачи не могли быть полностью исключены из рассмотрения ввиду несомненной важности и актуальности этой проблематики. Обзор некоторых современных методов решения таких задач вынесен в отдельную главу.

Выбор основного класса задач, рассматриваемого в курсе, во многом определяет круг обсуждаемых (и соответственно не обсуждаемых) численных методов: главным образом речь будет идти о методах общего назначения, ориентированных на решение гладких задач математического программирования без какой-либо специальной структуры. При этом, с одной стороны, обсуждаются методы, важные в идейном отношении, анализируются их сравнительные достоинства

и недостатки, что позволяет сделать изложение связным, показав взаимосвязь различных методов. С другой стороны, авторы надеются, что курс позволяет составить представление о state-of-the-art численной оптимизации, о тех методах, которые наиболее активно обсуждаются в современной литературе. Более того, некоторые излагаемые ниже результаты (см., например, § 3.1, 4.5, 5.4) в монографической литературе публикуются, по-видимому, впервые.

Подчеркнем, что этот курс освещает методы оптимизации с точки зрения математика, а не практика: многочисленные тонкости реализации и практического использования излагаемых методов (например, масштабирование, применимость методов к задачам большой размерности, автоматическое дифференцирование) здесь почти не обсуждаются. Нужно, однако, понимать, что для практика такие тонкости и эвристические приемы, основанные на большом опыте применения методов, зачастую значительно важнее абстрактных теорем о сходимости. В этом смысле прекрасными «руководствами пользователя» являются, например, книги [13, 42, 46, 47, 49, 50]. Много внимания вопросам реализации методов уделено также в более ранних изданиях [32, 39], однако содержащаяся в них информация по методам условной оптимизации с современной точки зрения явно недостаточна.

Совершенно не затронут в курсе еще один круг вопросов — устойчивость методов к разного рода возмущениям и, в частности, влияние неточного решения вспомогательных задач на конечный результат работы метода. Важность этих вопросов несомненна, но за ответами на них читателю следует обратиться к другим изданиям.

В книге отсутствует раздел, содержащий предварительные и вспомогательные сведения, необходимые для ее чтения. Дело в том, что такие сведения минимальны: требуется лишь знакомство читателя с линейной алгеброй и математическим анализом в объеме начальных курсов, включая дифференциальное исчисление функций многих переменных. Весьма желательно также знакомство с основами выпуклого анализа. Впрочем, в соответствии со сказанным выше, в большей части курса (по сути дела, за исключением главы 6) выпуклый анализ если и привлекается, то лишь на уровне базовых понятий и простейших результатов этой науки.

Избранные факты из анализа, которые играют в курсе особенно важную роль, приводятся по ходу изложения, иногда без доказательств (к ним относятся, например, теорема Вейерштрасса, теорема о неявной функции, теорема Радемахера). Кроме того, многие используемые понятия и результаты комментируются в сносках.

Отсутствие в книге иллюстраций объясняется тем, что, по мнению авторов, будет полезнее, если читатель сам по возможности проиллюстрирует приводимые сведения рисунками (обычно двумерными).

Подчеркнем, что авторство излагаемых ниже результатов указывается лишь в некоторых случаях. Дело в том, что вопрос об авторстве

часто бывает весьма непростым и спорным и вряд ли является важным для большинства читателей. Соответственно в списке литературы нет оригинальных журнальных статей, а приведены только монографии. Историческим вопросам много внимания уделено, например, в [6, 41].

Вообще, целью авторов было написание максимально компактного (без лишней информации) и, вместе с тем, достаточно полного введения в современную численную оптимизацию. За более детальной информацией, касающейся отдельных классов методов, читателю следует обратиться к соответствующей специальной литературе, ссылки на которую имеются в тексте.

В тексте содержится большое количество задач. Некоторые просты и даже рутинны (хотя авторы старались избегать тривиальных задач), а в некоторых приводятся вполне содержательные утверждения, являющиеся неотъемлемой частью излагаемого материала, или постановки проблем, которые могут послужить основой даже для курсовых и дипломных работ. Ряд задач и примеров заимствованы из [3, 10, 37, 41] и других источников.

Общепринятые обозначения специально не оговариваются, их пояснение вынесено в список обозначений. Для удобства ссылок в книге применяется следующая система нумерации ее разделов. Номер параграфа состоит из двух цифр, первая из которых обозначает номер главы, в которой находится этот параграф. Аналогично, номер пункта состоит из трех цифр, первые две из которых составляют номер параграфа, в котором находится этот пункт. Нумерация объектов (формул, определений, теорем и т. п.) в каждом параграфе независимая. При ссылке на объект извне параграфа используется номер, состоящий из трех цифр, первые две из которых составляют номер параграфа, а последняя — номер объекта в параграфе. Под «условиями» того или иного утверждения (теоремы, предложения, леммы) всегда понимается все то, что сказано в этом утверждении до слова «Тогда».

Эта книга написана на основе курсов лекций, которые авторы на протяжении ряда лет читали на факультете ВМиК МГУ им. М.В.Ломоносова, на факультете физико-математических и естественных наук РУДН, а также в Instituto de Matemática Pura e Aplicada (Рио-де-Жанейро, Бразилия). Авторы чрезвычайно признательны IMPA, ставшему «базой» для их сотрудничества в последние годы. Особую благодарность авторы выражают Claudia Sagastizábal за ее постоянную профессиональную и личную помощь и поддержку. Мы признательны О.А. Брежневой, а также нашим студентам и аспирантам, которые способствовали устраниению неточностей и опечаток, присутствовавших в первоначальном варианте рукописи.

Авторы посвящают эту книгу памяти Владимира Георгиевича Карманова. Его замечательный учебник «Математическое программирование» сыграл выдающуюся роль в становлении и развитии отечественной численной оптимизации. Своебразие стиля и подхода к излагаемому материалу обеспечивают этому учебнику популярность у студентов и специалистов и по сей день (первое издание увидело свет еще в 1975 г., а последнее — в 2008 г. [24]). Долгие годы Владимир Георгиевич принимал активное участие в деятельности российского оптимизационного сообщества и в подготовке кадров для него, в том числе на кафедре исследования операций факультета ВМиК МГУ, выпускниками которой являются оба автора настоящей книги. Личное удовольствие и профессиональная польза от общения с Владимиром Георгиевичем, а также его многолетняя прямая и косвенная поддержка — неоценимый вклад в эту книгу.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

- \mathbf{R} — множество вещественных чисел.
 \mathbf{R}_+ — множество неотрицательных вещественных чисел.
 \mathbf{R}^n — n -мерное арифметическое пространство, снабженное евклидовым скалярным произведением и соответствующей нормой.
 $\mathbf{R}(m, n)$ — пространство вещественных $m \times n$ -матриц, снабженное нормой, подчиненной нормам в \mathbf{R}^n и \mathbf{R}^m .
 x_1, \dots, x_n — компоненты вектора $x \in \mathbf{R}^n$ в стандартном базисе пространства \mathbf{R}^n (если не оговорено иное).
 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ — евклидово скалярное произведение.
 $|\cdot|$ — евклидова норма вектора (аналогичное обозначение используется для количества элементов конечного множества).
 $|\cdot|_p$ — норма вектора, определяемая как корень степени p из суммы введенных в степень p модулей его компонент (в частности, $|\cdot| = |\cdot|_2$).
 $|\cdot|_\infty$ — норма вектора, определяемая как максимум из модулей его компонент.
 $B(\bar{x}, \delta) = \{x \in \mathbf{R}^n \mid |x - \bar{x}| < \delta\}$ — открытый шар радиуса δ с центром в точке $\bar{x} \in \mathbf{R}^n$.
 $\overline{B}(\bar{x}, \delta) = \{x \in \mathbf{R}^n \mid |x - \bar{x}| \leq \delta\}$ — замкнутый шар радиуса δ с центром в точке $\bar{x} \in \mathbf{R}^n$.
 $\text{dist}(x, X) = \inf_{\xi \in X} |x - \xi|$ — расстояние от точки x до множества X .
 $\{x^k\} = \{x^0, x^1, \dots, x^k, \dots\}$ — последовательность.
 $\{x^k\} \rightarrow x$ ($k \rightarrow \infty$) — последовательность $\{x^k\}$ сходится к элементу x (для числовых последовательностей $\{a_k\}$ используются также обозначения $a_k \rightarrow a$ ($k \rightarrow \infty$) или $\lim_{k \rightarrow \infty} a_k = a$).
 $\liminf_{k \rightarrow \infty} a_k$ ($\limsup_{k \rightarrow \infty} a_k$) — нижний (верхний) предел числовой последовательности $\{a_k\}$.
 $\text{int } X$ — внутренность множества X .
 $\text{cl } X$ — замыкание множества X .
 $\text{span } X$ — линейная оболочка множества X (минимальное линейное подпространство, содержащее X).
 $\text{conv } X$ — выпуклая оболочка множества X (минимальное выпуклое множество, содержащее X).