

全局优化方法

● 申培萍 著



科学出版社

www.sciencep.com

全局优化方法

申培萍 著

本书的出版得到河南师范大学学术专著基金资助

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书讨论全局优化问题的研究成果和近期国内外的研究现状,从理论、算法、计算及相关技术等方面系统地介绍了求解几类约束优化问题全局最优解的确定性方法及其相关全局最优的基础理论. 全书内容包括:单变量函数的区间斜率方法,多元多峰函数的区间剪枝方法和非光滑问题的区间方法,一般约束优化问题的拟凸松弛方法,非凸优化问题的凸化、凹化和单调化以及广义几何规划与线性比式和问题等的一些特殊算法.

本书既可作为运筹学、计算数学、应用数学、管理科学、系统科学、信息科学、控制论、计算机科学和工程技术等专业的研究生、高年级本科生教学或辅导用书,也可作为其他相关专业的科研工作者和技术人员的参考书.

图书在版编目(CIP)数据

全局优化方法/申培萍著. —北京:科学出版社, 2006
ISBN 7-03-016496-2

I. 全… II. 申… III. 最佳化—数学理论 IV. O224

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 138051 号

责任编辑:陈玉琢 贾瑞娜/责任校对:张怡君

责任印制:安春生/封面设计:王 浩

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码 100717

<http://www.sciencep.com>

新 蕾 印 刷 厂 印 刷

科学出版社编务公司排版制作

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2006 年 3 月第 一 版 开本 B5 (720×1000)

2006 年 3 月第一次印刷 印张: 16

印数: 1—3 000 字数: 304 000

定价: 38.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换(路通))

前 言

目前求局部极小化的方法相对成熟并有有效的判别准则,而且已有许多教科书和专著.而求全局极小化方法,近年来已有不少进展,但相对于局部极小化方法,它在理论和算法上远没有那么成熟和完善.一般来说,全局最优化都没有判别准则.但是,近年来随着科学技术,特别是信息技术的飞速发展,全局优化在经济模型、固定费用、金融、网络和运输、图像处理、核能和机械设计、化学工程设计、分子生物学以及环境工程等众多领域中的应用越来越广泛,使得在科学、经济和工程中的许多进展都依赖于计算相应优化问题全局最优解的数值技术,因此全局最优化理论和方法值得深入研究.

全局优化研究的是多变量非线性函数在某个约束区域上的全局最优解的特性和构造寻求全局最优解的计算方法,以及求解方法的理论性质和计算表现.由于很可能在一个全局优化问题里存在多个局部最优解,且它们不同于问题的全局最优解,因此人们无法借助于经典的局部优化方法求解这些问题,特别是至今还没有很好的全局性判定准则,使得全局优化的研究极具挑战性.然而,自从 20 世纪 70 年代中后期以来,全局优化以惊人的速度在许多方面取得了长足的进展,许多新的全局优化理论及算法也相继出现,并得到了广泛应用.目前全局优化已作为最优化领域中一个独立的学科分支,引起了国内外学者的广泛重视并掀起了该领域的研究热潮,成为一个强有力的工具,被人们应用于对实际问题进行的建模和分析中.

我国一些学者从 20 世纪七八十年代开始从事全局优化的研究,他们提出的一些算法,如填充函数法、积分水平集法、区间方法等在国际上产生了一定的影响.还有一些科研人员对全局优化问题中的随机性不确定算法,如遗传算法、模拟退火算法等也进行过相当多的研究.然而,目前在国内介绍有关全局优化方法的书籍还很少,除 2003 年由清华大学出版社出版的《全局优化引论》中文译本外,笔者还未见到专门讨论确定性全局优化方法的教材或专著.为及时吸收新近发展成熟并得到广泛应用的成果,并应用于我们的教学科研中,作者参阅了近年来国内外的全局优化理论及算法的有关书籍和研究文献,并结合近几年的教学科研实践编写了本书,书中不少内容是作者近几年在全局优化方面的研究成果.

本书旨在对全局优化的确定性方法作一系统、全面的介绍.本书覆盖全局优

化方法的应用、典型的全局优化问题、处理这些问题的主要理论和求解算法等方面。尤其对全局优化的区间方法、松弛方法和分支定界方法等作了系统、全面地介绍。全书的内容在确保全局优化基本理论和方法的基础上,力求尽可能多的包含近期新的研究成果,但由于全局优化的内容如此广泛,新的成果如此丰富,做到这一点非作者的能力所及。全书共分 9 章:第 1 章介绍最优化问题的基本概念以及全局最优化的研究概况;第 2 章介绍全局优化区间方法的相关概念以及求单变量函数全局极小的区间斜率方法;第 3 章讨论多元函数全局极小的区间方法,包括多元多峰函数的区间剪枝算法和一类非光滑全局优化问题的区间算法;第 4 章介绍一般约束优化问题的拟凸松弛方法,包括:上、下界函数的构造,拟凸函数的分解技术,优化问题的拟凸松弛的构造,以及利用拟凸松弛求解约束优化问题的分支定界算法;第 5 章说明非凸优化问题的凸化、凹化和单调化方法;第 6 章讨论一类非凸优化问题的辅助函数方法;第 7 章介绍广义几何规划问题的全局优化方法;第 8 章讨论线性比式和问题全局优化方法,包括比式和问题松弛化的构造过程及相关的优化算法;第 9 章讨论几类非线性比式和问题全局优化方法。全书在叙述上力求深入浅出,便于读者理解。除第 1、2 章外,各章内容相对独立,自成体系,读者可以进行跳跃性阅读。

作者在此感谢西安交通大学张可村教授、徐成贤教授给予的悉心指导与良好建议;感谢南京大学何炳生教授与沈祖和教授的指点与帮助;感谢中国科学院袁亚湘研究员、上海大学张连生教授、南京师范大学孙文瑜教授等的关心与支持;感谢科学出版社对本书出版给予的大力支持;感谢与作者一同参与研究工作的有关学生;同时对本书所引用参考文献的作者表示衷心谢意。此外,本书的完成得到了河南省自然科学基金(0511011500)、河南省教育厅自然科学基金(2004110007)、河南省软科学研究计划(0513030920)、河南省高校青年骨干教师资助计划等项目的资助,在此表示衷心感谢。

由于作者水平有限,对书中的不妥与错误之处,诚望读者批评指正!

申培萍

2005 年 7 月于河南师范大学

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 最优化问题的基本概念	1
1.1.1 什么是最优化	1
1.1.2 最优化问题的模型与分类	3
1.1.3 最优化问题解的基本概念	4
1.2 凸 (凹) 包络	7
1.2.1 基本定理	7
1.2.2 特殊函数的凸 (凹) 包络	9
1.2.3 凸 (凹) 包络的应用	16
1.3 全局最优化问题概述	17
1.3.1 几种确定性方法	19
1.3.2 几种随机性方法	32
1.3.3 本书的研究内容	38
本章小结	42
第 2 章 区间计算基础和一元函数的区间斜率方法	43
2.1 区间计算的基本概念	43
2.1.1 区间及其有关运算和基本量	43
2.1.2 区间序列收敛性和区间扩张概念	44
2.2 区间扩张的构造	45
2.2.1 一般函数区间扩张的构造	46
2.2.2 多项式函数区间扩张的构造	53
2.3 单变量函数的区间斜率方法	62
2.3.1 引言	62
2.3.2 单变量函数高阶区间斜率	62
2.3.3 删除原则及算法的构造	64
2.3.4 数值算例	70
本章小结	72
第 3 章 多元函数的区间方法	74

3.1 多元多峰函数的区间剪枝方法	74
3.1.1 引言	74
3.1.2 区间剪枝测试	75
3.1.3 区间剪枝测试算法及其收敛性	80
3.1.4 数值实验	82
3.2 一类非光滑全局优化问题的区间方法	86
3.2.1 拟偏导数定义和预备定理	86
3.2.2 区间算法的构造	88
3.2.3 无穷区域的处理	91
3.2.4 算法的收敛性分析	94
3.2.5 数值算例	97
本章小结	99
第 4 章 一般约束优化问题的拟凸松弛方法	101
4.1 引言	101
4.2 上、下界函数的构造	103
4.2.1 0 阶上、下界函数	103
4.2.2 1 阶上、下界函数	104
4.2.3 2 阶上、下界函数	106
4.3 构造拟凸函数的分解技术	108
4.4 约束优化问题的拟凸松弛	110
4.5 利用拟凸松弛求解约束优化问题的分支定界算法	112
本章小结	113
第 5 章 非凸优化问题的凸化、凹化和单调化	114
5.1 严格单调规划问题的凸化和凹化	114
5.1.1 幂变换下的凸化、凹化	115
5.1.2 指数变换下的凸化、凹化	119
5.2 非单调规划问题的凸化和凹化	122
5.3 非单调规划问题的单调化	128
本章小结	132
第 6 章 一类非凸优化问题的辅助函数法	133
6.1 引言	133
6.2 辅助函数及其性质	133

6.3 算法及其收敛性	140
本章小结	143
第 7 章 广义几何规划	144
7.1 引言	144
7.2 利用指数函数 $\exp()$ 的线性化方法	145
7.2.1 线性化过程	145
7.2.2 分支定界算法	148
7.2.3 算法的收敛性分析	150
7.2.4 数值例子	153
7.3 基于反向凸规划的线性化方法	155
7.3.1 反向凸规划的构造	156
7.3.2 松弛线性规划的产生	157
7.3.3 算法及界紧技术	159
7.4 基于凸松弛的全局优化算法	162
本章小结	164
第 8 章 线性比式和问题	165
8.1 线性化方法	165
8.1.1 引言	165
8.1.2 松弛线性规划	166
8.1.3 分支定界算法及其收敛性分析	171
8.1.4 数值实验	173
8.2 利用转化技巧的求解方法	176
8.2.1 含参数的凸规划问题	176
8.2.2 含参数的双凹规划问题	180
8.2.3 含参数的凹极小化问题	185
8.2.4 含参数的原始 - 松弛对偶问题	189
8.3 线性比式和测试问题的构造方法	191
本章小结	194
第 9 章 非线性比式和问题	195
9.1 广义多项式比式和问题	195
9.1.1 引言	195
9.1.2 等价的非凸规划形式	196
9.1.3 松弛线性规划	198

9.1.4	算法步骤、收敛性及算例	201
9.2	凹、凸函数比式和问题的凹包络方法	203
9.2.1	预备知识	203
9.2.2	分支定界算法	207
9.2.3	分支定界算法的两种实现方式	209
9.2.4	算法的收敛性	212
9.2.5	计算问题及数值例子	215
9.3	凹、凸函数比式和问题的凸松弛方法	217
9.3.1	等价的非凸规划问题	217
9.3.2	分支定界过程	220
9.3.3	算法步骤及收敛性	223
9.3.4	数值算例	227
9.4	凸、凹函数比式和问题的凸化方法	230
9.4.1	新的等价问题的产生	231
9.4.2	全局优化算法的形成	233
9.4.3	收敛性及初始化	238
	本章小结	241
	参考文献	242

第 1 章 绪 论

本章主要介绍最优化理论和方法中所涉及的基本概念和基础知识,包括在全局优化中常用的凸包络概念及其构造方法,最后概括全局优化的研究现状,以及本书的主要内容.

1.1 最优化问题的基本概念

本节结合几个实例的数学模型的建立,介绍最优化问题的应用背景和建立模型的思路,引出最优化的各个分支及相应的基本概念.

1.1.1 什么是最优化

最优化是一门应用性强、内容丰富的年轻学科,它讨论决策问题的最佳选择的特性,构造寻求最佳解的计算方法,研究这些计算方法的理论性质及实际表现.最优化广泛应用于工农业、国防、金融、化工、能源、通信等重要领域,而且与分析、几何、代数、概率论,以及计算机科学、系统科学、自动化等学科密切联系,互相促进.如果说“模拟”深刻地改变着人们改造世界的能力,那么“优化”则深刻地改变着人们改造世界的方法和途径.例如,工程设计中怎样选择设计参数,使得设计方案既满足设计要求又能降低成本;资源分配时,怎样分配有限资源,使得分配方案既能满足各方面的要求,又能获得好的经济效益;生产计划安排时,选择怎样的计划方案才能提高产量和利润;原料配比问题中,怎样确定各种成分的比例才能提高产量和利润,降低成本;城建规划中,怎样安排工厂、学校、机关、医院、商店、住户和其他单位的合理布局,才能方便群众,有利于城市各行各业的发展;农田规划中,怎样安排各种农作物的合理布局,才能保证高产稳产,发挥地区优势;军事指挥中,怎样确定最佳作战方案,才能有效地消灭敌人,保存自己,有利于战争的布局;在人类活动的各个领域,此类问题不胜枚举.这些问题在某种程度上都可以称为最优化问题,最优化理论与算法正是为这些问题的解决,提供理论基础和求解方法.下面给出几个最优化问题的例子:

1) 选址问题

设有 n 个市场,第 j 个市场的位置为 (a_j, b_j) ,对某种货物的需要量为 q_j , $j = 1, \dots, n$. 现计划建立 m 个货栈,第 i 个货栈的容量为 c_i , $i = 1, \dots, m$. 试确定

货栈的位置, 使各货栈到各市场的运输量与路程乘积之和最小.

现在来建立数学模型. 设第 i 个货栈的位置为 (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, m$. 第 i 个货栈供给第 j 个市场的货物量为 W_{ij} , $i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$. 第 i 个货栈到第 j 个市场的距离为 d_{ij} , 一般定义为

$$d_{ij} = \sqrt{(x_i - a_j)^2 + (y_i - b_j)^2}.$$

我们的目标是运输量与路程乘积之和最小, 即使

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n W_{ij} \sqrt{(x_i - a_j)^2 + (y_i - b_j)^2}$$

最小. 约束条件是:

- (1) 每个货栈向各个市场提供的货物量之和不能超过它的容量;
- (2) 每个市场从各个货栈得到的货物量之和应等于它的需要量;
- (3) 运输量不能为负数.

因此, 问题的数学模型如下:

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n W_{ij} \sqrt{(x_i - a_j)^2 + (y_i - b_j)^2}, \\ \text{s. t.} \quad & \sum_{j=1}^n W_{ij} \leq c_i, \quad i = 1, \dots, m, \\ & \sum_{i=1}^m W_{ij} = q_j, \quad j = 1, \dots, n, \\ & W_{ij} \geq 0, \quad i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n, \end{aligned}$$

这里 s.t. 是 subject to 的缩写.

2) 多参数曲线拟合问题

已知热敏电阻 R 依赖于温度 t 的函数关系为

$$R(t) = x_1 \exp\left(\frac{x_2}{t + x_3}\right), \quad (1.1.1)$$

其中 x_1 , x_2 和 x_3 是待定的参数. 通过实验, 测得一组数据 $\{(t_i, R_i) \mid i = 1, \dots, n\}$. 问题是如何确定参数 x_1 , x_2 和 x_3 .

可以设想, 任意给定参数 x_1 , x_2 和 x_3 的一组数值, 就由式 (1.1.1) 确定了 R 关于 t 的一个函数关系式. 在几何上, 它对应于一条曲线, 这条曲线不一定正

好通过那些测量点,一般都要产生误差.通常用最小平方和误差来度量曲线拟合的好坏,即误差 $\sum_{i=1}^n [R_i - R(t_i)]^2$ 越小,说明曲线拟合得越好,参数选得越合理.于是求解问题的数学模型为

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=1}^n [R_i - R(t_i)]^2, \\ \text{s. t.} \quad & (x_1, x_2, x_3) \in \mathbf{R}^3. \end{aligned}$$

这是一个典型的非线性最小二乘问题.

3) 生产成本问题

在数量经济学中,常常用生产函数来描述经济行为的规律,设 x_1 是作为资本的货物, x_2 为劳动力,则有著名的 Cobb-Douglas 市场函数

$$Q(x_1, x_2) = Ax_1^\alpha x_2^\beta,$$

其中 Q 为产出产量; A 为生产技术水平; α 和 β 为参数.已知工资率为 w , 资本报酬率为 r ,则由经济学可知生产成本为 $C = rx_1 + wx_2$. 生产成本问题是在产量不低于某水平 Q_0 的条件下,极小化生产成本.它对应的数学模型为

$$\begin{aligned} \min \quad & C = rx_1 + wx_2, \\ \text{s. t.} \quad & Ax_1^\alpha x_2^\beta \geq Q_0, \\ & x_1 \geq 0, \\ & x_2 \geq 0. \end{aligned}$$

1.1.2 最优化问题的模型与分类

基于上面的讨论,我们给出最优化问题的数学模型

$$\begin{cases} \min & f(x), \\ \text{s. t.} & g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ & h_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, l, \end{cases} \quad (1.1.2)$$

其中,函数 $f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ 称为目标函数, $g_i(x)$ ($i = 1, \dots, m$), $h_j(x)$ ($j = 1, \dots, l$) 称为约束函数; $S = \{x \in \mathbf{R}^n \mid g_i(x) \geq 0, i = 1, \dots, m; h_j(x) = 0, j = 1, \dots, l\} \subseteq \mathbf{R}^n$ 称为可行域, S 中的任意点称为可行点; $h_j(x) = 0$ ($j = 1, \dots, l$) 称为等式约束, $g_i(x)$ ($i = 1, \dots, m$) 称为不等式约束.

下面我们对最优化问题做一简单的分类.

(1) 根据可行域划分. 若 $S = \mathbf{R}^n$, 即 x 是自由变量, 则称问题 (1.1.2) 为无约束优化问题; 否则, $S \subset \mathbf{R}^n$, 称问题 (1.1.2) 为约束优化问题.

(2) 根据函数的性质划分. 若目标函数和约束函数都是线性的, 则称问题 (1.1.2) 为线性规划; 若目标函数和约束函数中至少有一个是非线性的, 则称问题 (1.1.2) 为非线性规划. 进一步, 若目标函数是二次的, 约束是线性的, 则称问题 (1.1.2) 为二次规划; 若目标函数是凸的, 可行域是非空闭凸集, 则称问题 (1.1.2) 为凸规划.

(3) 根据可行域的性质划分. 若可行域内的点是有限的, 则称 (1.1.2) 为离散最优化问题; 若可行域内含有无穷多个不可数的点, 且可行域内的点可以连续变化, 则称 (1.1.2) 为连续最优化问题. 对于离散优化问题, 若变量均为整数, 则称其为整数规划问题; 若部分变量为整数, 而另一部分变量连续变化, 则称其为混合整数规划问题.

(4) 根据函数的可微性质划分. 若目标函数及约束函数都是连续可微的, 则称 (1.1.2) 为光滑优化问题; 若目标函数及约束函数中至少有一个是不连续可微的, 则称 (1.1.2) 为非光滑优化问题.

(5) 根据函数的向量性质划分. 若目标函数为向量函数时, 则称 (1.1.2) 为多目标规划问题; 若目标函数为数量函数时, 则称 (1.1.2) 为单目标规划问题.

(6) 根据规划问题有关信息的确定性划分. 若目标函数或约束函数具有随机性, 也就是问题的表述形式随时间的变化而变化, 具有不确定性, 这样的优化问题称为随机规划; 相应地, 另外一类即目标函数和可行域都是确定的, 这样的规划问题称为确定性规划问题. 本书主要讨论确定性规划问题.

1.1.3 最优化问题解的基本概念

对非线性规划问题 (1.1.2), 我们给出 (1.1.2) 的解的定义.

(1) 称 $x^* \in S$ 为 (1.1.2) 的可行解, 若 $x^* \in S$.

(2) 称 $x^* \in S$ 为 (1.1.2) 的全局最优解 (全局极小点), 若对任意 $x \in S$, 有 $f(x^*) \leq f(x)$, 其对应的目标函数值称为全局最优值 (最小值); 称 $x^* \in S$ 为 (1.1.2) 的严格全局最优解, 若对任意 $x \in S$, $x \neq x^*$, 有 $f(x^*) < f(x)$. 这时, 我们记 $x^* = \arg \min_{x \in S} f(x)$.

(3) 称 $x^* \in S$ 为 (1.1.2) 的局部最优解 (局部极小点), 若存在 x^* 点的一个邻域 $N(x^*, \delta)$, $\delta > 0$, 使得对任意 $x \in N(x^*, \delta) \cap S$, 有 $f(x^*) \leq f(x)$; 称 $x^* \in S$

为 (1.1.2) 的严格局部最优解, 若存在 x^* 点的一个邻域 $N(x^*, \delta)$, $\delta > 0$, 使得对任意 $x \in N(x^*, \delta) \cap S$, $x \neq x^*$, 有 $f(x^*) < f(x)$.

由以上最优解的定义可以看出, x^* 是局部极小点是指在 S 的以 x^* 为中心的某个邻域内, $f(x)$ 在 x^* 处取到最小值. 而 x^* 是全局极小点是指在整个可行域 S 上, $f(x)$ 在 x^* 处取到最小值. 局部极小点不一定是全局极小点, 但全局极小点一定是局部极小点. 当 $f(x)$ 是凸函数, S 是凸集时, 每个局部极小点一定是全局极小点. 对于一些广义凸的目标函数, 这个性质仍然成立; 但对拟凸的目标函数, 它不再成立. 对于非凸的非线性规划问题, 可能会遇到许多局部极小点, 其函数值不同于全局极小值.

一般来说, 最优化问题的 (全局或局部) 最优解是指 (全局或局部) 极小值解. 需要说明的是, 在问题 (1.1.2) 中, 存在任意阶连续可微的函数, 有最小值但不一定有最小值点. 考虑函数 $f(x) = (x_1 x_2 - 1)^2 + (x_1)^2$, 其最优值为 0, 但无最优解. 因此, 人们有时将最优化问题 (1.1.2) 写成下面的形式:

$$\begin{array}{ll} \inf & f(x) \\ \text{s. t.} & x \in S. \end{array}$$

另外, 当问题 (1.1.2) 中的可行域 S 无界或非闭, 以及 (或) 函数 f 不连续时, 其全局极小值也不一定存在. 例如, 在 $\mathbf{R}$ 内考虑下面 4 个例子:

$$(1) f(x) = x, S = \mathbf{R};$$

$$(2) f(x) = e^{-x}, S = \mathbf{R}_+ = \{x \mid x > 0, x \in \mathbf{R}\};$$

$$(3) f(x) = x, S = (0, 1);$$

$$(4) f(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}, & x = 0, \\ x, & x \in (0, 1], \end{cases} \quad S = [0, 1].$$

由于不同的原因, 上述 4 个例子的全局极小值都不存在. 对于例 (1), 有 $\inf\{f(x) : x \in S\} = -\infty$; 对于例 (2), 有 $\inf\{f(x) : x \in S\} = 0$, 但是无法在 S 上取到. 例 (3)、(4) 与例 (2) 类似.

函数 f 在 S 上的下确界 $\inf\{f(x) : x \in S\}$ 是 f 在 S 上的最大下界. 若 f 在 S 上不是下有界, 则记 $\inf\{f(x) : x \in S\} = -\infty$. 若 S 是空集, 则置 $\inf\{f(x) : x \in S\} = +\infty$. 若 $\inf\{f(x) : x \in S\}$ 是有限的, 则 $\inf\{f(x) : x \in S\} = \min\{f(x) : x \in S\}$ 的充要条件是在某点 $x^* \in S$ 取到此下确界 (对于 $\sup$ 和 $\max$ 情况类似). 在微积分中, 存在下面的基本结果:

定理 1.1.1 (Weierstrass 定理) 若 $S \subseteq \mathbf{R}^n$ 是一非空紧集, $f(x)$ 是 S 上的连续函数, 则 $f(x)$ 在 S 上至少有一个全局极小点 (极大点).

可以看出, 在定理 1.1.1 中, 若将 f 的连续性替换成下半连续性, 则定理仍成立. 类似地, 在非空紧集上, 若函数 f 是上半连续的, 则 f 在 S 上存在全局极大值.

下面给出一些关于局部和全局极小点特征的结果, 这里不妨假定问题 (1.1.2) 中目标函数 $f(x)$, 约束函数 $g_i(x), i = 1, \dots, m$ 和 $h_j(x), j = 1, \dots, l$ 均为连续可微函数, 详细内容参考文献 [1], [4]~[6].

(1) 稳定点. $x^* \in S$ 称为问题 (1.1.2) 的稳定点, 若对任意的 $x \in S$ 成立

$$\nabla f(x^*)^T(x - x^*) \geq 0.$$

显然, 若 $S = \mathbf{R}^n$, 则稳定点条件变为 $\nabla f(x^*) = 0$. 对于凸规划问题, 稳定点总是全局极小点.

(2) Fritz John 条件.

定理 1.1.2 设 x^* 为问题 (1.1.2) 的可行点, f 和 $g_i, i = 1, \dots, m$ 在点 x^* 处可微, $h_j, j = 1, \dots, l$ 在点 x^* 处具有一阶连续偏导数. 若 x^* 为问题 (1.1.2) 的局部极小点, 则存在不全为零的数 $u_0, u_i (i = 1, \dots, m), v_j (j = 1, \dots, l)$, 且 $u_0 \geq 0, u_i \geq 0 (i = 1, \dots, m)$, 使

$$\begin{cases} u_0 \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i \nabla g_i(x^*) - \sum_{j=1}^l v_j \nabla h_j(x^*) = 0, \\ u_i g_i(x^*) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{cases} \quad (1.1.3)$$

上述系统 (1.1.3) 称为 Fritz John 条件, 满足 Fritz John 条件的点称为 Fritz John 点. 对 Fritz John 条件, 若 $u_0 = 0$, 则这个条件变得无意义; 若 $u_0 \neq 0$, 则 Fritz John 条件就是下面的 KKT 条件.

(3) KKT 条件.

定理 1.1.3 设 x^* 为问题 (1.1.2) 的可行点, f 和 $g_i, i = 1, \dots, m$ 在点 x^* 处可微, $h_j, j = 1, \dots, l$ 在点 x^* 处具有一阶连续偏导数, 且向量组

$$\nabla g_i(x^*) \quad (i = 1, \dots, m), \quad \nabla h_j(x^*) \quad (j = 1, \dots, l)$$

线性无关. 若 x^* 为问题 (1.1.2) 的局部极小点, 则存在数 $u_i \geq 0 (i = 1, \dots, m)$ 和 $v_j (j = 1, \dots, l)$, 使

$$\begin{cases} \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m u_i \nabla g_i(x^*) - \sum_{j=1}^l v_j \nabla h_j(x^*) = 0, \\ u_i g_i(x^*) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{cases} \quad (1.1.4)$$

上述系统 (1.1.4) 称为约束优化问题 (1.1.2) 的 KKT 条件, 有时也称 KT 条件, 满足 KKT 条件的点 x^* 称为 KKT 点.

对于凸规划问题, 上述 KKT 条件也是全局最优性的充分条件, 但是, 对于非凸情形, 充分性无法得到保证, 且 KKT 点还可能不是局部极小点. 因此, 对于非凸优化问题, 求解和验证全局最优解是一件非常棘手的事情.

1.2 凸 (凹) 包络

在非凸全局优化的研究中, 为了充分利用凸规划的局部最优就是全局最优的性质, 人们通常用到一个重要的概念, 即凸包络. 它是一种重要的逼近工具, 构造凸包络和凹包络在分析和解决大量的优化问题中起很重要的作用, 尤其在全局优化问题中, 它可用于构造最优值的上界或下界. 下面我们将引入函数的凸 (凹) 包络概念, 并通过恰当的例子推导出一个一般性的结论, 该结论能给出一种构造凸包络和凹包络的思想. 在此基础上, 给出比式函数和双线性函数在约束四边形上的凸包络和凹包络的构造方法, 并介绍这些结论如何应用于分支定界过程中.

1.2.1 基本定理

定义 1.2.1 假设 $S \subseteq \mathbf{R}^n$ 是一个非空紧凸集, f 是定义在 S 上的一个实值函数. 函数 $f_S : S \rightarrow \mathbf{R}$ ($f^S : S \rightarrow \mathbf{R}$) 称为 f 在 S 上的凸包络 (凹包络), 当且仅当满足下列条件:

- (i) f_S (f^S) 是定义在 S 上的凸函数 (凹函数);
- (ii) 对所有的 $x \in S$, 有 $f_S(x) \leq f(x)$ ($f^S(x) \geq f(x)$);
- (iii) 不存在函数 $g : S \rightarrow \mathbf{R}$ 满足条件 (i) 和 (ii), 且对某个 $\bar{x} \in S$, 有 $f_S(\bar{x}) < g(\bar{x})$ ($f^S(\bar{x}) > g(\bar{x})$).

由定义 1.2.1 知, f 在 S 上的凸包络 f_S (凹包络 f^S) 是指, 对所有的 $x \in S$ 和所有的凸函数 (凹函数) $g(x)$, 满足 $g(x) \leq f(x)$ ($g(x) \geq f(x)$), $f_S(\bar{x}) \geq g(\bar{x})$ ($f^S(\bar{x}) \leq g(\bar{x})$). 另外, 一个函数的凸包络和凹包络不一定存在, 依赖于 S 和 f . 可以证明 f 在 S 上的凸包络 (凹包络) 能定义为 f 在 S 上所有下估计的分段仿射函数的上确界 (下确界).

对于具有凸可行域的非凸优化问题, 通过目标函数的凸包络, 能够建立一个与之具有相同最优值的凸规划问题, 见下面的定理 1.2.2.

定理 1.2.2 设 S 是 $\mathbf{R}^n$ 内的紧凸集, 令 f_S 是函数 $f(x)$ 在 S 上的凸包络.

考虑问题 $\min_{x \in S} f(x)$, 则

$$f^* = \min\{f(x) : x \in S\} = \min\{f_S(x) : x \in S\},$$

$$\{x \in S : f(x) = f^*\} \subseteq \{x \in S : f_S(x) = f^*\}.$$

证明 由凸包络的定义, 有

$$\min\{f_S(x) : x \in S\} \leq f^*.$$

常函数 $h(x) = f^*$ 是 f 的一个下估计函数. 再由凸包络的定义, 对于任意 $x \in S$, 有 $f_S(x) \geq f^*$, 于是

$$\min\{f_S(x) : x \in S\} \geq f^*.$$

下面用反证法证明第二部分. 令 x^* 是 $f(x)$ 在 S 上的一个全局极小点. 假定 x^* 不是 $f_S(x)$ 在 S 上的一个全局极小点, 而 y^* 是 $f_S(x)$ 在 S 上的一个全局极小点, 则 $f_S(y^*) < f_S(x^*) \leq f^*$. 这与 $f_S(y^*) = f^*$ 矛盾. 定理 1.2.2 得证.

定理 1.2.2 表明, 为了求解非凸优化问题, 通过凸包络可以尝试着求解相应的凸规划问题. 然而, 在通常情况下, 找到一个函数的凸包络是件不容易的事情. 下面, 我们针对约束四边形 S 上的一些特殊函数, 讨论相应的凸包络和凹包络的构造方法.

定理 1.2.3 设 $S \subseteq \mathbf{R}^2$ 是一个约束四边形, 顶点为 A, B, C, D , 其中 A 与 C 相对, B 与 D 相对. 设 f 是定义在集合 M 上的实函数, 其中 $M \subseteq \mathbf{R}^2$, 且 $M \supset S$. 令 S_1 和 S_2 是 S 的一条对角线分 S 所得到的两个三角形. 假设 h_1, h_2 都是定义在 $\mathbf{R}^2$ 上, 并且满足在 $S_i (i = 1, 2)$ 的顶点处 h_i 与 f 的函数值相等. 还假设:

- (i) h_1 和 h_2 是 f 在 S 上的下估计 (上估计);
- (ii) 对所有的 $(x_1, x_2) \in S_1$, $\max\{h_1(x_1, x_2), h_2(x_1, x_2)\} = h_1(x_1, x_2)$ (对所有的 $(x_1, x_2) \in S_1$, $\min\{h_1(x_1, x_2), h_2(x_1, x_2)\} = h_1(x_1, x_2)$);
- (iii) 对所有的 $(x_1, x_2) \in S_2$, $\max\{h_1(x_1, x_2), h_2(x_1, x_2)\} = h_2(x_1, x_2)$ (对所有的 $(x_1, x_2) \in S_2$, $\min\{h_1(x_1, x_2), h_2(x_1, x_2)\} = h_2(x_1, x_2)$).

则 f 在 S 上的凸包络 f_S (f 在 S 上的凹包络 f^S) 为

$$f_S(x_1, x_2) = \max\{h_1(x_1, x_2), h_2(x_1, x_2)\},$$

$$(f^S(x_1, x_2) = \min\{h_1(x_1, x_2), h_2(x_1, x_2)\}).$$