УДК 519.3

РЕАЛИЗАЦИЯ АНАЛИТИЧЕСКОГО КОДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ В ПАКЕТЕ MATLAB

М. Ю. Андрамонов[1], Г. Ш. Тамасян[1]

В работе развивается подход к аналитическому анализу формул с негладкими функциями, основанный на кодифференциальном исчислении Демьянова–Рубинова. Составлен пакет прикладных программ в среде MatLab. С их помощью можно находить решения задач математической экономики, математической диагностики, физики твердого тела, и, прежде всего, обучать студентов теории и методам многозначного анализа. Удобный интерфейс позволяет задавать сложное выражение для негладкой функции и получать точный или приближенный кодифференциал в виде совокупности вершин, а в двумерном случае — изображать его на рисунке. Данные программы позволяют эффективно работать со сложными негладкими моделями, а также находить экстремальные точки при решении оптимизационных задач. Работа осуществлена при поддержке РФФИ (код проекта 06–01–00276).

Ключевые слова: негладкий анализ, недифференцируемая оптимизация, субдифференциал, супердифференциал, квазидифференциал, кодифференциал.

1. Введение. В математических моделях физических, биологических и экономических процессов все чаще встречаются недифференцируемые функции и многозначные отображения. Классический аппарат дифференциального и интегрального исчисления недостаточен для решения разнообразных практических задач. Требуется не только использовать кусочно-гладкие решения и склеивать их на границе, но и использовать негладкость как составную, неотъемлемую часть постановки задачи в соответствии с реальным физическим процессом.

В последнее время интенсивно развивается и применяется аппарат негладкого анализа, позволяющий исследовать задачи с негладкими функциями [2 – 5] и находить решения задач недифференцируемой оптимизации [1, 6, 11] и оптимальное управление с учетом негладкости [2, 8, 10, 12]. В ряде случаев функции оказываются выпуклыми или вогнутыми, что позволяет применить мощный аппарат выпуклого анализа и выпуклой оптимизации [3 – 10]. При этом широко используются субдифференциалы выпуклых функций, обобщающие понятие градиента и связывающие классический анализ с многозначным.

Для широкого класса невыпуклых недифференцируемых функций разработано квазидифференциальное и кодифференциальное исчисление [1, 11, 12], позволяющее исследовать негладкую функцию в окрестности любой точки, получать локальные и глобальные условия оптимальности, а также строить эффективные алгоритмы решения оптимизационных задач. Существуют формулы негладкого анализа, позволяющие строить субдифференциалы и квазидифференциалы суммы, произведения, частного суперпозиции функций. При этом возникают сложные вычисления многозначного анализа. Вычислив квазидифференциал (субдифференциал, кодифференциал) функции, можно эффективно решать многие прикладные задачи. Основные результаты негладкого анализа приведены в первом разделе.

Негладкие модели часто встречаются в математической экономике. При исследовании поведения потребителя или производителя оказывается, что функция полезности и, особенно, функции издержек являются негладкими и часто не вогнутыми или не выпуклыми. В результате классические методы математического программирования недостаточно эффективны. Во многих задачах планирования и размещения производства и теории расписаний появляются функции максимума, что сразу ведет к негладкости.

Другим важнейшим приложением негладкого анализа и его численных методов является математическая диагностика и кластерный анализ. В современной медицине чрезвычайно важно исследовать базы данных и разделять множества признаков, что позволяет математически диагностировать заболевание и проверять эффективность лечения данным препаратом.

В теории краевых задач также применяются методы негладкого анализа (в частности, в физике твердого тела или при исследовании изображений с помощью вейвлет-преобразований появляются негладкие функции). Методы негладкого анализа могут дополнять классические разностные схемы.

---

[1] Казанский государственный университет, НИИ математики и механики им. Н. Г. Чеботарева, Университетская ул., 17, 420008, Казань; e-mail: m.andramonov@hotmail.ru; grigoriytamasjan@mail.ru

Вычисление квазидифференциалов и субдифференциалов Кларка [4] является задачей, требующей большого машинного времени, если известны только значения функции и производных по направлениям.

В настоящей статье мы развиваем подход к аналитическому анализу формул с негладкими функциями, основанный на кодифференциальном исчислении Демьянова–Рубинова. Составлен пакет прикладных программ на базе системы MATLAB для удобной работы с недифференцируемыми функциями. В результате можно находить решения сложных задач математической экономики, математической диагностики, физики твердого тела и, прежде всего, обучать студентов теории и методам многозначного анализа. Удобный интерфейс позволяет задавать сложное выражение для негладкой функции и получать точный или приближенный кодифференциал в виде совокупности вершин, а в двумерном случае — изображать его на рисунке. Данные программы позволяют эффективно работать со сложными негладкими моделями и находить их экстремальные значения.

2. Основные результаты негладкого анализа. Предположим, что в математической модели встречаются функции, которые не являются дифференцируемыми, но имеют конечную производную по направлениям в каждой точке. Если некоторая функция $f(x):\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ выпукла и непрерывна, то ее производная по направлению $g\in\mathbb{R}^n$ в точке x_0 имеет вид $f'(x_0,g)\equiv\lim\limits_{\alpha\to+0}\dfrac{f(x_0+\alpha g)-f(x_0)}{\alpha}=\max\limits_{v\in\partial f(x_0)}(v,g)$, где круглые скобки означают скалярное произведение, а множество $\partial f(x_0)$ выпукло, замкнуто, ограничено и называется субдифференциалом функции f в точке x_0. Выпуклый анализ является хорошо разработанной теорией (например, см. [2, 3]). Для суммы, максимума и композиции выпуклых функций существуют известные формулы субдифференцирования [1, 2].

Для локально выпуклых регулярных функций получается аналогичное выражение; в этом случае множество $\partial f(x)$ называется субдифференциалом Кларка. В общем случае субдифференциал Кларка вычисляется с помощью верхней производной по направлению и малопригоден для численной реализации [4].

Весьма общим и наиболее пригодным для негладких функций является квазидифференциальное исчисление [1, 11], которое позволяет находить квазидифференциалы суммы, разности, произведения, частного, сложной функции и неявной функции, а в вычислительном отношении проще.

Определение 1. Функция f квазидифференцируема в точке x_0 евклидова пространства $\mathbb{R}^n$, если для любого g существует конечная производная по направлениям $f'(x,g)$, причем

$$f'(x_0,g)=\max_{v\in\underline{\partial}f(x_0)}(v,g)+\min_{w\in\overline{\partial}f(x_0)}(w,g),\tag{1}$$

где g — произвольное направление из $\mathbb{R}^n$. Пара множеств $Df(x_0)=\big[\underline{\partial}f(x_0),\overline{\partial}f(x_0)\big]$ называется квазидифференциалом функции $f(x)$ в точке x_0 [1, 6], а сами множества — субдифференциалом и супердифференциалом соответственно.

Отметим, что субдифференциал в смысле квазидифференциального исчисления не обязательно совпадает с квазидифференциалом в смысле выпуклого анализа. Совпадение имеет место, если функция выпукла и супердифференциал состоит из нуля.

Определение 2. Функция $f(x)$ называется кодифференцируемой в точке x_0, если найдется такая пара принадлежащих $\mathbb{R}^{n+1}$ множеств $\big[\underline{d}f(x_0),\overline{d}f(x_0)\big]$, что

$$f(x_0+\Delta)=f(x_0)+\max_{[a,v]\in\underline{d}f(x_0)}\big[a+(v,\Delta)\big]+\min_{[b,w]\in\underline{d}f(x_0)}\big[b+(w,\Delta)\big]+o(\Delta),$$

где $o(\Delta)/\|\Delta\|\to0$ при $\|\Delta\|\to0,\Delta\in\mathbb{R}^n$.

Данный подход имеет то преимущество, что можно определять непрерывно кодифференцируемые функции, тогда как квазидифференциальное отображение в общем случае является разрывным.

Отметим, что класс квазидифференцируемых функций совпадает с классом кодифференцируемых функций. Существует ряд методов оптимизации, эффективных для невыпуклых негладких задач, в частности метод гиподифференциального спуска [11, 12].

Приведем основные формулы квазидифференциального исчисления и условия оптимальности для квазидифференцируемых функций. Для кодифференцируемых функций формулы исчисления могут быть найдены в основополагающей работе [11]. Нашей же целью является эффективное аналитическое кодифференцирование для приложений на основе кодифференциального исчисления.

Лемма 1. *Если функция $f(x)$ — квазидифференцируема в точке x_0, то и функция $f_1(x)=cf(x)$, где $c\in\mathbb{R}$, также квазидифференцируема в точке x_0, причем*

$$\mathcal{D}f_1(x_0)=c\mathcal{D}f(x_0)=\begin{cases}\big[c\,\underline{\partial}f(x_0),c\,\overline{\partial}f(x_0)\big], & c\geqslant0,\\ \big[-|c|\,\overline{\partial}f(x_0),-|c|\,\underline{\partial}f(x_0)\big], & c<0.\end{cases}$$

Лемма 2. *Если функции $f_1(x)$ и $f_2(x)$ квазидифференцируемы в точке x_0, то и функция $f(x) = f_1(x) + f_2(x)$ квазидифференцируема в точке x_0, причем*

$$\mathcal{D}f(x_0) = \mathcal{D}f_1(x_0) + \mathcal{D}f_2(x_0) = \left[\underline{\partial} f_1(x_0) + \underline{\partial} f_2(x_0), \overline{\partial} f_1(x_0) + \overline{\partial} f_2(x_0)\right].$$

Лемма 3. *Если функции $f_1(x)$ и $f_2(x)$ квазидифференцируемы в точке x_0, то функция $f(x) = f_1(x)f_2(x)$ квазидифференцируема в точке x_0, причем*

$$\mathcal{D}f(x_0) = f_1(x_0)\mathcal{D}f_2(x_0) + f_2(x_0)\mathcal{D}f_1(x_0).$$

Лемма 4. *Если функции $f_1(x)$ и $f_2(x)$ квазидифференцируемы в точке x_0 и $f_2(x_0) \neq 0$, то и функция $f(x) = \dfrac{f_1(x)}{f_2(x)}$ также квазидифференцируема в точке x_0, причем*

$$\mathcal{D}f(x_0) = \frac{f_2(x_0)\mathcal{D}f_1(x_0) - f_1(x_0)\mathcal{D}f_2(x_0)}{f_2^2(x_0)}.$$

Лемма 5. *Если функции $f_1(x)$, …, $f_k(x)$ квазидифференцируемы в точке x_0, то и функция $f(x) = \max\limits_{i\in 1:k} f_i(x)$ квазидифференцируема в точке x_0, причем $\mathcal{D}f(x_0) = \left[\underline{\partial} f(x_0), \overline{\partial} f(x_0)\right]$, где*

$$\underline{\partial} f(x_0) = \mathrm{co}\left\{\underline{\partial} f_k(x_0) - \sum_{\substack{i\in R(x_0),\\ i\neq k}} \overline{\partial} f_i(x_0) \;\middle|\; k \in R(x_0)\right\}, \quad \overline{\partial} f(x_0) = \sum_{i\in R(x_0)} \overline{\partial} f_i(x_0).$$

Теорема 1. *Для того чтобы квазидифференцируемая на $\mathbb{R}^n$ функция $f(x)$ достигала в точке $x^* \in \mathbb{R}^n$ своего наименьшего (наибольшего) на $\mathbb{R}^n$ значения, необходимо, чтобы $-\overline{\partial} f(x_0) \subset \underline{\partial} f(x_0)$ и $-\underline{\partial} f(x_0) \subset \overline{\partial} f(x_0)$.*

3. Общие черты алгоритма. Для программной реализации нам потребовались процедуры для работы со строками и матрицами и символьные вычисления, основанные на встроенной в MatLab библиотеке пакета Maple, а так же визуальная среда GUIDE, предназначенная для создания приложений с графическим интерфейсом, и ToolBox Optimization.

Алгоритм решения поставленной задачи состоит из двух этапов. На первом этапе анализируется введенная пользователем функция и конструируется дерево, а на втором этапе строится искомый квазидифференциал на основе построенного дерева. Рассмотрим каждый из этапов отдельно.

Первый этап. Выполняется анализ заданной пользователем функции для построения дерева. Полученное выражение может представлять собой всевозможные суперпозиции функций “max”, “min”, гладких функций от любого количества переменных, а также четырех арифметических операций $(+, -, *, /)$ и операции возведения в степень натурального числа $(\cdot)^n$. Сам алгоритм получения дерева имеет ряд тонкостей, поэтому рассмотрим данный этап на примере.

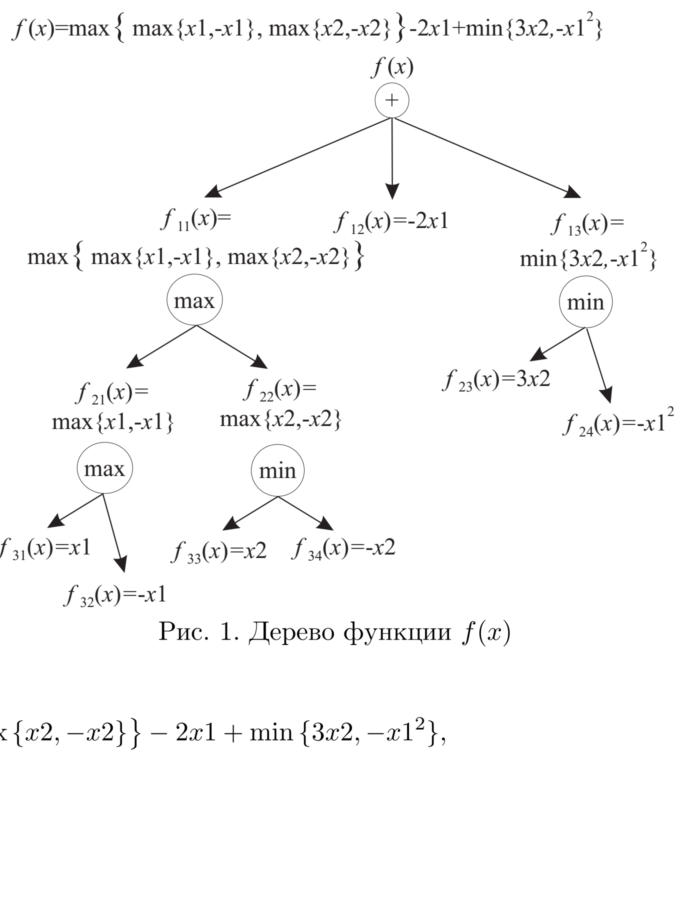

Рис. 1. Дерево функции $f(x)$

Пусть

$$f(x) = \max\left\{\max\{x1, -x1\}, \max\{x2, -x2\}\right\} - 2x1 + \min\{3x2, -x1^2\},$$

где $x = (x1, x2) \in \mathbb{R}^2$.

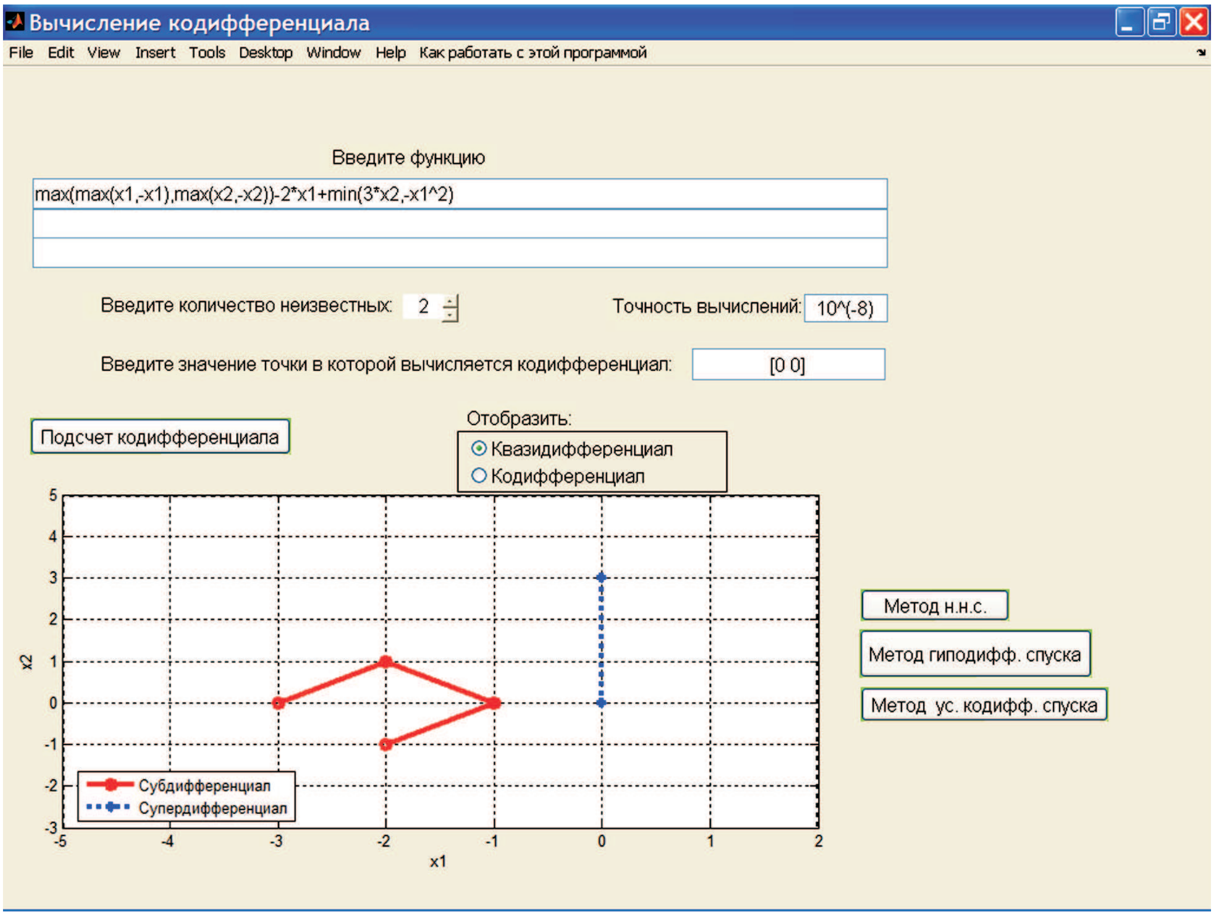

Рис. 2. Интерфейс программы

Наша цель состоит в том, чтобы разложить выражение на *простейшие элементы* с использованием операций $\max, \min, +, -, *, /, (\cdot)^n$. Здесь под простейшими элементами подразумевается дифференцируемые функции.

Указанное выше выражение $f(x)$ разбивается на слагаемые операцией "+", таким образом получаем первые три ветви (рис. 1):

$$f_{11}(x) = \max\{\max\{x1, -x1\}, \max\{x2, -x2\}\}, \quad f_{12}(x) = -2x1, \quad f_{13}(x) = \min\{3x2, -x1^2\}.$$

Теперь каждую ветвь анализируем по отдельности. Из первой ветви после применения операции "max" образуется еще две ветви $f_{21}(x) = \max\{x1, -x1\}$ и $f_{22}(x) = \max\{x2, -x2\}$. Вторая ветвь $f_{12}(x)$ заканчивается, так как она представляет из себя дифференцируемую функцию. Из третьей ветви после операции "min" исходят еще две: $f_{23}(x) = 3x2$ и $f_{24}(x) = -x1^2$; заметим, что они на этом заканчиваются, так как являются дифференцируемыми функциями. После применения операции "max" каждая из ветвей $f_{21}(x)$ и $f_{22}(x)$ образует еще по две ветви $f_{31}(x) = x1$, $f_{32}(x) = -x1$ и $f_{33}(x) = x2$, $f_{34}(x) = -x2$ соответственно. На этом процесс построения дерева заканчивается, поскольку наше выражение было разложено до дифференцируемых функций.

Второй этап. Используя построенное на первом этапе дерево, найдем квазидифференциал нашей функции. Во-первых, найдем квазидифференциалы *простейших элементов*, например в точке $x = x_0 = (0,0) = 0_2$, в зависимости от того, в какие композиции (суперпозиции) функций "max" или "min" они входили:

$$\begin{aligned}
&Df_{12}(x_0) = [f'_{12}(x), 0_2] = [(-2,0), 0_2]; && Df_{23}(x_0) = [0_2, f'_{23}(x)] = [0_2, (0,3)];\\
&Df_{24}(x_0) = [0_2, f'_{24}(x)] = [0_2, 0_2]; && Df_{31}(x_0) = [f'_{31}(x), 0_2] = [(1,0), 0_2];\\
&Df_{32}(x_0) = [f'_{32}(x), 0_2] = [(-1,0), 0_2]; && Df_{33}(x_0) = [f'_{33}(x), 0_2] = [(0,1), 0_2];\\
&Df_{34}(x_0) = [f'_{34}(x), 0_2] = [(0,-1), 0_2].
\end{aligned} \tag{2}$$

Теперь, используя найденные квазидифференциалы (2), дерево и данные, полученные при его построении, а также применяя аппарат квазидифференциального исчисления, мы найдем квазидифференциал функции $f(x)$ в точке $x = x_0$. Зная квазидифференциалы функций $f_{31}(x)$ и $f_{32}(x)$, найдем квазидифференциал функции $f_{21}(x)$: $Df_{21}(x_0) = \Big[\mathrm{co}\,\big\{(1,0),(-1,0)\big\}, 0_2\Big]$. По той же схеме последовательно находим

$$Df_{22}(x_0) = \Big[\mathrm{co}\,\big\{(0,1),(0,-1)\big\}, 0_2\Big];$$
$$Df_{11}(x_0) = \Big[\mathrm{co}\,\big\{(1,0),(-1,0),(0,1),(0,-1)\big\}, 0_2\Big];$$
$$Df_{13}(x_0) = \Big[0_2, \mathrm{co}\,\big\{(0,3),(0,0)\big\}\Big];$$
$$Df(x_0) = Df_{11}(x_0) + Df_{12}(x_0) + Df_{13}(x_0) = \Big[\mathrm{co}\,\big\{(-1,0),(-3,0),(-2,1),(-2,-1)\big\}, \mathrm{co}\,\big\{(0,3),(0,0)\big\}\Big].$$

Замечание. В примере был рассмотрен алгоритм построения квазидифференциала. В действительности программа сперва вычисляет кодифференциал, а затем из него выделяет квазидифференциал.

4. Заключение. Данный пакет программ (пример интерфейса приведен на рис. 2) позволяет находить экстремумы у широкого класса негладких функций, а также решать задачи условной оптимизации на основе аппарата точных штрафов [12].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Demyanov V.F., Rubinov A.M.* Constructive non-smooth analysis. Peter Lang: Frankfurt, 1995.
2. *Иоффе А.Д., Тихомиров В.М.* Теория экстремальных задач. М.: Наука, 1974.
3. *Rockafellar R.T.* Convex analysis. Princeton University Press: Princeton, 1971.
4. *Кларк Ф.* Оптимизация и негладкий анализ. М.: Наука, 1988.
5. *Hiriart-Urruty J.B., Lemarechal C.* Convex analysis and minimization algorithms. Vol. 2. Springer-Verlag: Berlin, 1993.
6. *Shor N.Z.* Methods of minimizing nondifferentiable functions. Springer-Verlag: Berlin, 1985.
7. *Shor N.Z.* Dual estimates in multiextremal problems // J. of Global Optimization. 1995. **7**. 75–91.
8. *Евтушенко Ю.Г.* Методы решения экстремальных задач и их применение в системах оптимизации. М.: Наука, 1982.
9. *Нестеров Ю.Е.* Эффективные методы в нелинейном программировании. М.: Радио и связь, 1989.
10. *Пшеничный Б.Н.* Выпуклый анализ и экстремальные задачи. М.: Наука, 1980.
11. *Демьянов В.Ф., Рубинов А.М.* Основы негладкого анализа и квазидифференциальное исчисление. М.: Наука, 1990.
12. *Демьянов В.Ф.* Условия экстремума и вариационное исчисление. М.: Высшая школа, 2005.

Поступила в редакцию
18.09.2006