УДК 517.2+519.977.58+519.8

В.И. НОРКИН

ОБОБЩЕННЫЕ ГРАДИЕНТЫ В ЗАДАЧАХ ДИНАМИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ, ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ[1]

Аннотация. Рассмотрены негладкие невыпуклые задачи динамической оптимизации, оптимального управления (в дискретном времени), в том числе управления с обратной связью, и машинного обучения. Прослежена аналогия между задачами управления дискретными динамическими системами и задачами обучения многослойных нейронных сетей с негладкими целевыми функционалами и связями. Обоснованы методы вычисления обобщенных градиентов для таких систем на основе функций Гамильтона–Понтрягина. Градиентные (стохастические) алгоритмы оптимального управления и обучения распространяются на невыпуклые негладкие динамические системы.

Ключевые слова: динамическая оптимизация, оптимальное управление, машинное обучение, многослойные нейронные сети, глубокое обучение, негладкая невыпуклая оптимизация, стохастическая оптимизация, стохастический обобщенный градиент, стохастическое сглаживание.

ВВЕДЕНИЕ

Нелинейные задачи оптимального управления с дискретным временем можно рассматривать как задачи оптимизации большой размерности, для решения которых применяются методы градиентного типа. Для этого необходимы формулы и правила вычисления градиентов целевого функционала по управлениям. Такие формулы для задачи со свободным правым концом получены, например, в [1–5] методом множителей Лагранжа в предположении непрерывной дифференцируемости входящих в задачу функций (ссылки на другие и более ранние работы приведены в [6, разд. 5.5]. В [2, 3] эти результаты распространены на задачи стохастического дискретного оптимального управления. Для негладких выпуклых задач оптимального управления с линейными уравнениями движения аналогичные формулы вычисления субградиентов целевого функционала получены в [2–4]. При нелинейных уравнениях движения зависимость целевого функционала от управлений может быть невыпуклой. В [3] эти формулы также обоснованы для случая слабо выпуклого [7] целевого функционала и гладких уравнений движения. Данные формулы используют процедуры прямого расчета траектории движения и обратного расчета вспомогательных сопряженных переменных, по сути, заимствованные из принципа максимума Понтрягина [8, 9]. Подобные процедуры вычисления градиентов в пространстве весов широко применяются в системах обучения многослойных нейронных сетей [6, 10–12]. Однако проблема заключается в том, что функции качества обучения являются не только невыпуклыми, но часто оказываются негладкими функциями параметров модели. Негладкость, в частности, может быть обусловлена применением негладких функций активации нейронов сети. В настоящей статье эти результаты (по вычислению обобщенных градиентов) обобщены на негладкие невыпуклые задачи дискретного оптимального управления и задачи обучения с так называемыми обобщенно-диф-

[1]Работа частично поддержана грантом CPEA-LT-2016/10003 Норвежского агентства по международному сотрудничеству и повышению качества в высшем образовании (the Norwegian Agency for International Cooperation and Quality Enhancement in Higher Education (Diku)).

ференцируемыми функциями [13]. Причем негладкие функции могут входить как в целевой функционал, так и в уравнения движения.

Негладкие задачи оптимального управления с недифференцируемым целевым функционалом возникают, например, при использовании в качестве целевой функции нормы отклонения от цели, применении негладких штрафных функций для устранения дифференциальных связей [14] и фазовых ограничений, а также наличии операций максимума и минимума в формулировке задачи. Негладкие уравнения движения имеются, например, при ограниченности области движения, пороговых ограничениях на траекторию движения, таких как условия неотрицательности запаса и ограниченности склада в теории запасов [15], условия неразорения в теории процессов риска [16]. Негладкие задачи оптимального управления, в частности общие необходимые условия экстремума для таких задач, изучались в работах [4, 14, 17–21] и др. Обзор итерационных градиентных и близких к ним методов для нахождения оптимальных управлений дан в [1–5, 22].

Заметим, что многослойную нейронную сеть можно формально трактовать как динамическую систему, которая постепенно (послойно) преобразует входной сигнал в выходной [23]. Задача машинного обучения состоит в идентификации параметров модели, например весов многослойной нейронной сети, с помощью набора примеров вида «вход–выход». Негладкие задачи машинного обучения имеют место при использовании негладких показателей качества обучения (типа модуля), применении негладких функций регуляризации, а также негладких (например, кусочно-линейных) функций активации в многослойных нейронных сетях. Для решения гладких задач обучения нейронных сетей широко используется метод обратного распространения ошибки — BackProp-метод [6, 10–12, 23, 24], т.е. специальный метод вычисления градиентов целевого функционала качества обучения по разнообразным и многочисленным параметрам. История разработки, развития и применений BackProp-метода детально исследована в [6]. Однако в прикладных системах глубокого обучения нейронных сетей наряду с гладкими сигмоидальными функциями активации нейронов также часто используются негладкие функции линейной ректификации (например, $f(x) = \max\{0, x\}$) [12, разд. 6.3.1; 24, разд. 3.3]. Такие функции порождают существенно невыпуклые негладкие функционалы качества обучения.

Существует еще одна область вычислительной математики, которая разрабатывает и изучает способы вычисления производных и градиентов сложных композитных целевых функций, — теория автоматического дифференцирования, представленная, например, в работах [5, 25]. В таком подходе алгоритмический процесс вычисления целевой функции приведен в виде сетевого графика, в исходных вершинах которого находятся элементарные функции от переменных оптимизации с известными градиентами, а в промежуточных вершинах — операторы композиции функций с известными правилами вычисления градиентов композиции. При прямом проходе графика вычисляется значение сложной целевой функции, при обратном удается вычислить градиенты целевой функции по переменным оптимизации. Применительно к нейронным сетям метод автоматического дифференцирования, который воспроизводит BackProp-метод, реализован в многочисленных программных библиотеках [24, разд. 2.6; 25]. Однако и в этом случае существует проблема обоснования метода для невыпуклых негладких функций, которая обсуждается лишь на неформальном уровне [25].

Методы обучения гладких моделей нейронных сетей рассматриваются в работах [10–12, 23, 24, 26–29]. В основном это метод стохастических градиентов и его модификации, заимствованные из теории стохастической аппроксимации [30] и теории выпуклого стохастического программирования [2, 31, 32], поскольку только они реально применимы для обучения глубоких нейронных сетей. Данный метод можно обосновать и для оптимизации невыпуклых негладких функций [33–35], тем самым восполняя пробел в теории обучения негладких нейронных сетей. Таким образом, разработка и обоснование эффективных способов вычисления обобщенных градиентов для негладких задач оптимального управления и обучения расширяет круг численно решаемых задач и открывает широкое поле применения численных методов невыпуклой негладкой оптимизации, развитых в [2, 36–48]. В частности, для так называемых обобщенно-дифференцируемых функций, для которых в настоящей статье обосновываются правила вычисления обобщенных градиентов, в работах [33–35, 42, 48–50] рассмотрены разнообразные методы локальной оптимизации градиентного типа. Отметим, что обобщенно-дифференцируемые функции включают в себя выпуклые, вогнутые, слабо выпуклые, слабо вогнутые [7], полугладкие [36, 39] и кусочно-гладкие [51] функции и замкнуты по отношению к конечным операциям максимума, минимума, суперпозиции и вычисления математического ожидания [13, 48, 50, 52].

ОБОБЩЕННО-ДИФФЕРЕНЦИРУЕМЫЕ ФУНКЦИИ

Определение 1 [13, 50]**.** Функция $f\colon \mathrm{R}^n \to \mathrm{R}^1$ называется обобщенно-дифференцируемой в точке $x \in \mathrm{R}^n$, если в некоторой окрестности x определено полунепрерывное сверху в x многозначное отображение ∂f с замкнутыми выпуклыми компактными значениями и такое, что

$$f(y) = f(x) + \langle g, y - x \rangle + o(x, y, g), \tag{1}$$

где $\langle \cdot, \cdot \rangle$ обозначает скалярное произведение двух векторов, $g \in \partial f(y)$ и остаточный член $o(x, y, g)$ удовлетворяет условию

$$\lim_{k\to\infty} o(x, y^k, g^k)/\|y^k - x\| = 0$$

для любых последовательностей $g^k \in \partial f(y^k)$, $y^k \to x$. Функция f называется обобщенно-дифференцируемой, если она обобщенно-дифференцируема в каждой точке $x \in \mathrm{R}^n$; ∂f называется обобщенно-градиентным отображением функции f, $\partial f(x)$ — обобщенным градиентным множеством функции $f(\cdot)$ в точке x, векторы $g \in \partial f(x)$ называются обобщенными градиентами функции $f(\cdot)$ в точке x.

Любая обобщенно-дифференцируемая функция $f(x)$ липшицева и ее субдифференциал Кларка $\partial_C f(x)$ [19] является минимальным по включению обобщенно-градиентным отображением для $f(x)$. Для почти всех $x \in \mathrm{R}^n$ имеет место $\partial f(x) = \partial_C f(x)$ [42]. Класс обобщенно-дифференцируемых функций содержит непрерывно-дифференцируемые, выпуклые, вогнутые, полугладкие [36] и некоторые другие кусочно-гладкие функции [51] и замкнут относительно операций максимума, минимума, суперпозиции и вычисления математического ожидания [13, 42, 48, 50, 52]. В [53] понятие обобщенно-дифференцируемых функций расширено на векторнозначные функции. Подобный подход к дифференцированию функций использован в [54, с. 175, 444], где функция называется дифференцируемой в точке x, если справедливо представление $f(y) = f(x) + \langle \varphi(y), y - x \rangle$ с некоторой непрерывной в x вектор-функцией $\varphi(y)$. В отличие от этого определения в разложении (1) имеется малое дополнительное слагаемое, а также допускается многозначность градиента (как и в близких работах [51, 55, 56]). Эти модификации значительно расширяют класс рассматриваемых функций.

Теорема 1 (обобщенная дифференцируемость составных функций) [50]. Пусть $f_0(z)$, $z \in \mathrm{R}^m$, и $f_i(x)$, $x \in \mathrm{R}^n$, $i = 1, \ldots, m$, — обобщенно-дифференцируемые функции с обобщенно-градиентными отображениями $\partial_z f_0(\cdot)$ и $\partial f_i(\cdot)$. Тогда функции максимума и минимума $f(x) = \max\{f_1(x), \ldots, f_m(x)\}$ и $f(x) = \min\{f_1(x), \ldots, f_m(x)\}$ обобщенно-дифференцируемы с обобщенно-градиентным отображением $\partial f(x) = \mathrm{conv.\,hull}\{\partial f_i(x) : f_i(x) = f(x)\}$, а сложная функция $f(x) = f_0(z(x)) = f_0(f_1(x), \ldots, f_m(x))$ также обобщенно-дифференцируема и ее обобщенно-градиентное отображение вычисляется с помощью цепного правила

$$\partial f(x) = \mathrm{conv.\,hull}\{g = [g_1 \ldots g_m] g_0 : g_0 \in \partial_z f_0(z(x)),\ g_i \in \partial f_i(x),\ i = 1, \ldots, m\},$$

где $[g_1 \ldots g_m]$ — матрица, составленная из векторов-столбцов $g_1, \ldots, g_m$, $\mathrm{conv.\,hull}$ — выпуклая оболочка, $\partial_z f_0(z(x))$ — обобщенно-градиентное множество функции $f_0(z)$ в точке $z(x) = (f_1(x), \ldots, f_m(x))$.

Таким образом, для вычисления обобщенных градиентов суммы, произведения, частного и других сложных функций применимы обычные правила дифференцирования сложных функций.

Теорема 2 (обобщенная дифференцируемость математического ожидания) [52]. Предположим что справедливы следующие условия:

— функция $f(x, \theta)$ обобщенно-дифференцируема по $x \in V$ и интегрируема по $\theta \in \Theta$, где V — открытое подмножество R^n, а θ — элементарное событие вероятностного пространства $(\Theta, \Sigma, \mathrm{P})$;

— обобщенно-градиентное отображение $\partial_x f(x, \theta)$ функции $f(\cdot, \theta)$ измеримо по θ для любого $x \in \mathrm{R}^n$;

— для открытого множества $V \subset \mathrm{R}^n$ существует интегрируемая функция $L_V(\theta)$ такая, что

$$\sup\{\|g\| : g \in \partial_x f(x, \theta), x \in V\} \le L_V(\theta).$$

Тогда функция математического ожидания $F(x) = \mathrm{E} f(x, \theta) = \int_\Theta f(x, \theta) \mathrm{P}(d\theta)$ обобщенно-дифференцируема на V с обобщенно-градиентным отображением $\partial F(x) = \mathrm{E} \partial_x f(x, \theta)$.

Таким образом, при дифференцировании математического ожидания (интеграла Лебега) в условиях теоремы 2 можно вносить оператор дифференцирования под знак интеграла. Здесь интеграл $\mathrm{E} \partial_x f(x, \theta)$ от многозначного отображения $\theta \to \partial_x f(x, \theta)$ понимается как множество интегралов от измеримых по θ селекторов этого отображения (при фиксированном x).

Пример 1 (эволюция запасов). Эволюция запаса на складе описывается рекуррентным динамическим соотношением

$$x_{t+1} = \max\{0, x_t + u_t - \theta_t\},\ t = 0, 1, \ldots, m,\ x_0 = a,$$

где x_t — уровень запаса в начале периода времени $[t, t+1]$, u_t — заявка на пополнение запаса в начале периода времени $[t, t+1]$, θ_t — случайный спрос на товар в период времени $[t, t+1)$, M — максимальный объем склада, a — начальный запас на складе. Качество функционирования склада при программном управлении $u = \{u_0, \ldots, u_m\}$ опишем критерием

$$F(a, u) =$$
$$= \mathrm{E}\left(\sum_{t=0}^{m} \max\{\alpha(x_t - \theta_t), \beta(\theta_t - x_t)\} + \max\{\alpha(x_{m+1} - b), \beta(b - x_{m+1})\}\right) \to \min_u,$$

где α, β — штрафные коэффициенты за избыток и недостачу товара в период времени $[t, t+1)$, b — желаемый уровень товара на складе в конце планового периода, E — знак математического ожидания.

Здесь сложная случайная функция

$$\varphi(a, u, \theta_0, \ldots, \theta_k) = \sum_{t=0}^{m} \max\{\alpha(x_t - \theta_t), \beta(\theta_t - x_t)\} + \max\{\alpha(x_{m+1} - b), \beta(b - x_{m+1})\}$$

обобщенно-дифференцируема по своим аргументам (a, u) и в условиях теоремы 2 функция математического ожидания $F(a, u)$ также является обобщенно-дифференцируемой по своим переменным.

ОБОБЩЕННО-ГРАДИЕНТНЫЕ МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ НЕВЫПУКЛЫХ НЕГЛАДКИХ ФУНКЦИЙ

Недостаточно уметь вычислять обобщенные градиенты негладких функций, необходимо обосновать возможность их применения для анализа и оптимизации этих функций.

Обобщенно-градиентный и стохастический обобщенно-градиентный методы для минимизации обобщенно-дифференцируемых функций обоснованы в [13, 16, 33, 35, 42, 48–50, 52]. Они являются обобщениями на невыпуклый негладкий случай методов обобщенного градиентного спуска [2, 40, 57] и метода стохастических квазиградиентов [2], предназначенных для решения задач выпуклой оптимизации.

Рассмотрим задачу

$$F(x) \to \min_{x \in X} \tag{2}$$

минимизации обобщенно-дифференцируемой функции $F(x)$ на компактном множестве $X \subset \mathrm{R}^n$, заданном с помощью некоторой обобщенно-дифференцируемой функции $G(x)$, т.е.

$$X = \{x \in \mathrm{R}^n : G(x) \le 0\}. \tag{3}$$

Необходимое условие экстремума для задачи (2), (3) имеет вид $0 \in \partial F(x) + N_X(x)$, где конус нормалей $N_X(x)$ к множеству X в точке $x \in X$ задается соотношениями $N_X(x) = \{\lambda g : g \in \partial G(x), \lambda \ge 0\}$, если $G(x) = 0$, и $N_X(x) = 0$, если $G(x) < 0$. В случае выпуклого множества X конус $N_X(x)$ совпадает с конусом нормалей к X в точке x.

Базовый итерационный обобщенно-градиентный метод решения задачи (2), (3) имеет вид

$$x^{k+1} \in \Pi_X(x^k - \rho_k d^k), \; d^k \in \partial F(x^k), \; x^0 \in X, \; k = 0, 1, \ldots, \tag{4}$$

где $\Pi_X(\cdot)$ — (многозначный) оператор проектирования на невыпуклое допустимое множество X; неотрицательные величины ρ_k удовлетворяют условиям

$$\lim_{k \to \infty} \rho_k = 0, \; \sum_{k=0}^{\infty} \rho_k = +\infty. \tag{5}$$

В другой форме метод (4) имеет вид

$$x^{k+1} \in \Pi_X(x^k - \rho_k d^k) = \arg\min_{x \in X} ||x - (x^k - \rho_k d^k)||^2 =$$

$$= \arg\min_{x \in X} (||x - x^k||^2 + 2\rho_k \langle d^k, x - x^k \rangle) =$$

$$= \arg\min_{x \in X} \left(\langle d^k, x - x^k \rangle + \frac{1}{2\rho_k} ||x - x^k||^2 \right). \tag{6}$$

В случае отсутствия ограничений метод (4)–(6) преобразуется в обычный обобщенный градиентный спуск

$$x^{k+1}=x^k-\rho_k d^k,\ d^k\in\partial F(x^k),\ x^0\in X,\ k=0,1,\ldots$$

Теорема 3 (сходимость невыпуклого обобщенного градиентного метода) [33]. При условиях (5) минимальные (по функции F) предельные точки последовательности $\{x^k\}$ принадлежат множеству $X^*=\{x\in X: 0\in\partial F(x)+N_X(x)\}$ точек, удовлетворяющих необходимым условиям экстремума, и все предельные точки числовой последовательности $\{F(x^k)\}$ составляют интервал в множестве $F^*=F(X^*)$. Если множество F^* не содержит интервалов (например, конечно или счетно), то все предельные точки последовательности $\{x^k\}$ принадлежат связанному подмножеству из X^* и существует предел $\lim\limits_{k\to\infty}F(x^k)\in F^*$.

Заметим, что множество $F^*=\{F(x): 0\in\partial F(x)\}$ не содержит интервалов для достаточно гладких функций в силу теоремы Сарда [58, разд. 2.3].

Аналогичные результаты о сходимости обобщенного градиентного метода для невыпуклых негладких функций с использованием субградиентов Кларка получены в работах [34, 35].

Рандомизированный обобщенный градиентный метод задается следующими соотношениями:

$$x^{k+1}\in\Pi_X(x^k-\rho_k\widetilde{d}^k),\ \widetilde{d}^k\in\partial F(\widetilde{x}^k),\ ||\widetilde{x}^k-x^k||\le\delta_k,\ x^0\in X,\ k=0,1,\ldots,\quad(7)$$

где $\widetilde{x}^k$ — случайно (например, равномерно) выбранная точка в δ_k-окрестности точки x_k. Обозначим $X_C^*=\{x\in X: 0\in\partial_C F(x)+N_X(x)\}\subseteq X^*$, где $\partial_C F(x)$ — субдифференциал Кларка функции F в точке x. Заметим, что $\partial F(x)=\partial_C F(x)$ почти для всех x [42], поэтому в рандомизированном методе (7) почти всегда используются субградиенты Кларка обобщенно-дифференцируемой функции $F(\cdot)$. Аналогичная идея рандомизации алгоритма обобщенного градиентного спуска используется в работе [59].

Теорема 4 (сходимость рандомизированного обобщенного градиентного метода) [16, 33, 49]. При условиях (5) и $\lim\limits_{k\to\infty}\delta_k=0$ почти для всех траекторий $\{x^k\}$ процесса (7) минимальные (по функции F) предельные точки последовательности $\{x^k\}$ принадлежат множеству X_C^* точек, удовлетворяющих необходимым условиям экстремума Кларка, и все предельные точки числовой последовательности $\{F(x^k)\}$ составляют интервал в множестве $F_C^*=F(X_C^*)$. Если множество F_C^* не содержит интервалов (например, конечно или счетно), то все предельные точки последовательности $\{x^k\}$ принадлежат связанному подмножеству из X_C^* и существует предел $\lim\limits_{k\to\infty}F(x^k)\in F_C^*$.

Таким образом, рандомизированный метод сходится, вообще говоря, к более узкому множеству критических точек X_C^*, чем X^*, поскольку $\partial_C F(\cdot)\subseteq\partial F(\cdot)$.

Рандомизированный субградиентный метод допускает также следующую интерпретацию. Введем так называемые сглаженные функции

$$F_k(x)=\frac{1}{V_{\delta_k}}\int\limits_{\{\widetilde{x}:||\widetilde{x}-x||\le\delta_k\}}F(\widetilde{x})d\widetilde{x},\quad(8)$$

где V_{δ_k} — объем δ_k-окрестности нуля. Если ввести случайный вектор $\widetilde{x}^k$, равномерно распределенный в δ_k-окрестности точки x, то сглаженную функцию $F_k(x)$ и ее градиент $\nabla F_k(x)$ можно представить соответственно в виде $F_k(x) = \mathrm{E} F(\widetilde{x}^k)$ и $\nabla F_k(x) = \mathrm{E} \partial F(\widetilde{x}^k)$, где E — математическое ожидание по $\widetilde{x}^k$, $\mathrm{E}\partial F(\widetilde{x}^k)$ — математическое ожидание случайного многозначного отображения $\widetilde{x}^k \to \partial F(\widetilde{x}^k)$.

Таким образом, рандомизация в методе (7) имеет тройное значение: она позволяет сузить множество сходимости обобщенного градиентного метода до множества $X_C^* \subseteq X^*$; придает методу (7) некоторые глобальные свойства за счет того, что в нем фактически минимизируется последовательность сглаженных функций (8); кроме того, рандомизация обеспечивает незастревание метода в критических точках, которые не являются локальными минимумами. При $\delta_k = \delta$ рандомизированный обобщенный градиентный метод (7) представляет собой стохастический градиентный метод минимизации одной и той же сглаженной функции $F_k(x)$. Для усиления глобальных свойств метода (7) в нем можно использовать оценку градиента сглаженной функции по нескольким независимым реализациям случайной точки $\widetilde{x}$ из δ_k-окрестности текущей точки x^k.

Рассмотрим теперь аналог методов (4), (7) для минимизации обобщенно-дифференцируемой функции математического ожидания

$$F(x) = \mathrm{E}_\theta f(x, \theta) \to \min_{x \in X} \tag{9}$$

на невыпуклом множестве X (заданном в (3)):

$$x^{k+1} \in \Pi_X (x^k - \rho_k d(\widetilde{x}^k, \theta^k)),\ d(\widetilde{x}^k, \theta^k) \in \partial_x f(\widetilde{x}^k, \theta^k), \tag{10}$$

$$\| \widetilde{x}^k - x^k \| \le \delta_k,\ k = 0, 1, \ldots$$

Здесь $\Pi_X(\cdot)$ — (многозначный) оператор проектирования на невыпуклое допустимое множество X; $d(x, \theta)$ — (x, θ)-измеримое сечение отображения $\partial_x f(x, \theta)$ обобщенно-дифференцируемой случайной функции $f(\cdot, \theta)$; θ^k — независимые одинаково распределенные наблюдения случайной величины θ; точки $\widetilde{x}^k$ случайно равномерно выбираются из множеств $\{x: \| x - x^k \| \le \delta_k\}$; неотрицательные величины ρ_k, δ_k измеримы относительно σ-алгебры $\sigma\{x^0, \ldots, x^k\}$ и с вероятностью единица удовлетворяют условиям

$$\lim_{k\to\infty} \delta_k = \lim_{k\to\infty} \rho_k = 0,\ \sum_{k=0}^{\infty} \rho_k = +\infty,\ \sum_{k=0}^{\infty} \rho_k^2 < +\infty. \tag{11}$$

Теорема 5 (сходимость с вероятностью единица невыпуклого метода стохастических обобщенных градиентов при решении задачи (9)) [33, 48, 49]. Почти для всех траекторий $\{x^k\}$ метода (10), (11) имеют место утверждения теоремы 4.

Если в алгоритме (10), (11) все $\delta_k \equiv 0$, то утверждение теоремы 5 выполняется для множества $X^* = \{x \in X : 0 \in \partial F(x) + N_X(x)\}$.

В [42] рассмотрен ряд других стохастических методов невыпуклой негладкой оптимизации (методы с усреднением траектории, усреднением обобщенных градиентов, методы овражного шага, приведенного градиента, тяжелого шарика и другие).

ВЫЧИСЛЕНИЕ ОБОБЩЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ В ДИНАМИЧЕСКИХ ЗАДАЧАХ ОПТИМИЗАЦИИ

Рассмотрим следующую задачу оптимизации динамической системы со свободным конечным состоянием в дискретном времени:

$$J(u)=\sum_{i=0}^{m} F_i(x_i, u)+\Phi(x_{m+1}) \to \min_{u\in U} \tag{12}$$

при условиях

$$x_{i+1}=G_i(x_i, u),\ i=0,1,\ldots,m,\ x_0\in \mathrm{R}^{n_0}, \tag{13}$$

где индекс $i=0,1,\ldots,m+1$ обозначает дискретное время; $x_i=(x_i^1,\ldots,x_i^{n_i})^{\mathrm{T}}\in \mathrm{R}^{n_i}$ — состояние управляемой системы в момент i; $u=(u^1,\ldots,u^l)^{\mathrm{T}}\in \mathrm{R}^l$ — вектор оптимизируемых параметров динамической системы; функции $G_i=(G_i^1,\ldots,G_i^{n_{i+1}})^{\mathrm{T}}$, F_i, Φ заданы; U — заданное множество в R^l; $m\ge 1$ — натуральное число; x_0 — начальная точка в R^{n_0}. Задачи с ограничениями на конечное состояние или траекторию можно свести к виду (12) с помощью негладких штрафов. Отметим, что в (12), (13) допускается изменение размерности n_i фазового пространства с течением дискретного времени $i=0,1,\ldots,m$.

Задачи типа (12), (13) имеют место, например, при оптимизации систем с обратной связью, в которых в стандартное уравнение движения $x_{i+1}=G_i(x_i, u_t)$ подставляется управление $u_t=g(x_t, y)$ определенного функционального вида $g(\cdot,\cdot)$, зависящее от текущего состояния системы x_t и конечномерного вектора искомых параметров y, подлежащих оптимизации. Подобные постановки также возникают в задачах обучения рекуррентных нейронных сетей (с одними и теми же весами для всех слоев сети) [11; 12, гл. 10; 24, гл. 6].

Введем обозначения [4]:

$$G_{ix}=\begin{pmatrix} G^1_{ix^1} & \ldots & G^1_{ix^n}\\ \ldots & \ldots & \ldots\\ G^n_{ix^1} & \ldots & G^n_{ix^n}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} G^1_{ix}\\ \ldots\\ G^n_{ix}\end{pmatrix},\quad G_{iu}=\begin{pmatrix} G^1_{iu^1} & \ldots & G^1_{iu^l}\\ \ldots & \ldots & \ldots\\ G^n_{iu^1} & \ldots & G^n_{iu^l}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} G^1_{iu}\\ \ldots\\ G^n_{iu}\end{pmatrix},$$

$$(F_{ix})^{\mathrm{T}}=(F_{ix^1},\ldots,F_{ix^n}),\ (F_{iu})^{\mathrm{T}}=(F_{iu^1},\ldots,F_{iu^l}),\ (\Phi_x)^{\mathrm{T}}=(\Phi_{x^1},\ldots,\Phi_{x^n}),$$

где $(F_{ix}, F_{iu})^{\mathrm{T}}$, $(G^j_{ix}, G^j_{iu})^{\mathrm{T}}$ — некоторые обобщенные градиенты (субградиенты) по (x,u) функций F_i, G_i^j; Φ_x — некоторый обобщенный градиент функции Φ; A^{T} обозначает транспонирование матрицы A.

Теорема 6. Пусть функции F_i, G_i, Φ в задаче (12), (13) обобщенно-дифференцируемы по совокупности своих аргументов при $x_i\in \mathrm{R}^{n_i}$, $u\in V$, где V — открытая окрестность множества U, $i=0,1,\ldots,m$. Тогда функция $J(x_0,u)$ обобщенно-дифференцируема по $(x_0,u)\in \mathrm{R}^{n_0}\times V$, причем векторы $(J_{x_0}, J_u)^{\mathrm{T}}=$ $=(J_{x_0^1},\ldots,J_{x_0^{n_0}}, J_{u^1},\ldots,J_{u^l})^{\mathrm{T}}$ с компонентами

$$J_{x_0^j}=H_{0x_0^j}(x_0,\psi_0,u),\ J_{u^j}=\sum_{i=0}^{m} H_{iu^j}(x_i,\psi_i,u) \tag{14}$$

являются обобщенными градиентами функции $J(x_0,u)$ в точке (x_0,u), где $H_i(x_i,\psi_i,u_i)=F_i(x_i,u_i)+G_i^{\mathrm{T}}(x_i,u_i)\,\psi_i$, $i=0,1,\ldots,m$, — дискретная функция

Гамильтона–Понтрягина; $x=(x_0,\ldots,x_{m+1})$ — дискретная траектория процесса (13), соответствующая выбранному параметру $u\in U$; последовательность вспомогательных (сопряженных) вектор-функций $(\psi_m,\ldots,\psi_0)=\psi$ определяется из условий (обратного счета)

$$\psi_{i-1}=H_{ix_i}(x_i,\psi_i,u)=F_{ix_i}(x_i,u)+G^{\mathrm{T}}_{ix_i}(x_i,u)\,\psi_i=F_{ix_i}(x_i,u)+\sum_{j=1}^{n_i}G^j_{ix_i}(x_i,u)\psi_i^j,$$
$$\psi_m=\Phi_{x_{m+1}}(x_{m+1})=(\Phi_{x^1_{m+1}}(x_{m+1}),\ldots,\Phi_{x^{n_{m+1}}_{m+1}}(x_{m+1}))^{\mathrm{T}},\ \ i=m,m-1,\ldots,1. \tag{15}$$

Доказательство. Имеем

$$x_1=x_1(x_0,u)=G_0(x_0,u),$$
$$x_2=x_2(x_0,u)=G_1(x_1,u)=G_1(G_0(x_0,u),u),$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$
$$x_{m+1}=G_m(x_m,u)=G_m(G_{m-1}(\ldots G_1(G_0(x_0,u),u),\ldots,u),u);$$
$$J(x_0,u)=J(x_0,u)=F_0(x_0,u)+F_1(x_1,u)+F_2(x_2,u)+\ldots+F_m(x_m,u)+\Phi(x_{m+1})=$$
$$=F_0(x_0,u)+F_1(G_0(x_0,u),u)+F_2(G_1(G_0(x_0,u),u),u)+\ldots$$
$$\ldots+F_m(G_{m-1}(G_{m-2}(\ldots G_1(G_0(x_0,u),u),\ldots,u),u),u)+$$
$$+\Phi(G_m(G_{m-1}(\ldots(G_0(x_0,u),u),\ldots,u),u),u).$$

Введем обозначения: $(F_{ix_i},F_{iu})^{\mathrm{T}}$ и $(G^j_{ix_i},G^j_{iu})^{\mathrm{T}}$, $j=1,\ldots,n_i$, — какие-либо обобщенные градиенты функций F_i и G_i^j, $j=1,\ldots,n_i$, в точке (x_i,u), $i=1,\ldots,m$; $\Phi_{x_{m+1}}(x_{m+1})$ — какой-либо обобщенный градиент функции Φ в точке x_{m+1}; $\{x_0,x_1,\ldots,x_{m+1}\}$ — траектория процесса (13) при заданных (x_0,u).

В силу теоремы 1 сложные (вектор) функции $x_1,x_2,\ldots,x_m$ и целевая функция J (покомпонентно) обобщенно-дифференцируемы по своим (векторным) аргументам (x_0,u), причем согласно правилам (теорема 1) обобщенного дифференцирования сложных функций векторы $(J_{x_0},J_u)^{\mathrm{T}}=(J_{x_0^1},\ldots,J_{x_0^{n_0}},J_{u^1},\ldots,J_{u^l})^{\mathrm{T}}$ являются некоторыми обобщенными градиентами функции J в точке (x_0,u), где компоненты $J_{x_0^i}$, $i=1,\ldots,n_0$, вычисляются следующим образом:

$$J_{x_0^i}=F_{0x_0^i}(x_0,u)+$$
$$+\sum_{j_1=1}^{n_1}F_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)G^{j_1}_{0x_0^i}(x_0,u)+\sum_{j_2=1}^{n_2}F_{x_2^{j_2}}(x_2,u)\sum_{j_1=1}^{n_1}G^{j_2}_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)G^{j_1}_{0x_0^i}(x_0,u)+\ldots$$
$$\ldots+\sum_{j_m=1}^{n_m}F_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)\sum_{j_{m-1}=1}^{n_{m-1}}G^{j_m}_{(m-1)x_{m-1}^{j_{m-1}}}(x_{m-1},u)\sum_{j_{m-2}=1}^{n_{m-2}}\ldots\sum_{j_1=1}^{n_1}G^{j_2}_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)G^{j_1}_{0x_0^i}(x_0,u)+$$
$$+\sum_{j_{m+1}=1}^{n_{m+1}}\Phi_{x_{m+1}^{j_{m+1}}}(x_{m+1})\sum_{j_m=1}^{n_m}G^{j_{m+1}}_{mx_{m-1}^{j_m}}(x_m,u)\sum_{j_{m-1}=1}^{n_{m-1}}\ldots\sum_{j_1=1}^{n_1}G^{j_2}_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)G^{j_1}_{0x_0^i}(x_0,u).$$

Меняя порядок суммирования в произведениях и вынося за скобки общие множители, получаем

$$J_{x_0^i}=F_{0x_0^i}(x_0,u)+\sum_{j_1=1}^{n_1}G^{j_1}_{0x_0^i}(x_0,u)\left(F_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)+\sum_{j_2=1}^{n_2}G^{j_2}_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)\left(F_{2x_2^{j_2}}(x_2,u)+\ldots\right.\right.$$

$$\left.\left.\ldots+\sum_{j_m=1}^{n_m}G^{j_m}_{(m-1)x_{m-1}^{j_m}}(x_{m-1},u)\left(F_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)+\sum_{j_{m+1}=1}^{n_{m+1}}G^{j_{m+1}}_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)\Phi_{x_{m+1}^{j_{m+1}}}(x_{m+1})\right)\ldots\right)\right).$$

Последовательно используя векторы $\{\psi_m,\psi_{m-1},\ldots,\psi_0\}$ из (15), получаем окончательный результат для $J_{x_0^i}$:

$$J_{x_0^i}=F_{0x_0^i}(x_0,u)+\sum_{j_1=1}^{n_1}G^{j_1}_{0x_0^i}(x_0,u)\left(F_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)+\sum_{j_2=1}^{n_2}G^{j_2}_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)\left(F_{2x_2^{j_2}}(x_2,u)+\ldots\right.\right.$$

$$\left.\left.\ldots+\sum_{j_m=1}^{n_m}G^{j_m}_{(m-1)x_{m-1}^{j_{m-1}}}(x_{m-1},u)\left(F_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)+G^T_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)\,\psi_m\right)\ldots\right)\right)=$$

$$=F_{0x_0^i}(x_0,u)+\sum_{j_1=1}^{n_1}G^{j_1}_{0x_0^i}(x_0,u)\left(F_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)+\sum_{j_2=1}^{n_2}G^{j_2}_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)\left(F_{2x_2^{j_2}}(x_2,u)+\ldots\right.\right.$$

$$\ldots+\sum_{j_{m-1}=1}^{n_{m=1}}G^{j_{m-1}}_{(m-2)x_{m-2}^{j_{m-2}}}(x_{m-2},u)\times$$

$$\left.\left.\times\left(F_{(m-1)x_{m-1}^{j_{m-1}}}(x_{m-1},u)+G^T_{(m-1)x_{m-1}^{j_{m-1}}}(x_{m-1},u)\,\psi_{m-1}\right)\ldots\right)\right)=$$

$$=\ldots=F_{0x_0^i}(x_0,u)+\sum_{j_1=1}^{n_1}G^{j_1}_{0x_0^i}(x_0,u)\left(F_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)+G^T_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)\,\psi_1\right)=$$

$$=F_{0x_0^i}(x_0,u)+G^T_{0x_0^i}(x_0,u)\,\psi_0=H_{0x_0^i}(x_0,\psi_0,u).$$

Компоненты J_{u^i}, $i=1,\ldots,m$, вычисляются по правилам (теорема 1) обобщенного дифференцирования сложных функций:

$$J_{u^i}=F_{0u^i}(x_0,u)+F_{1u^i}(x_1,u)+\sum_{j_1=1}^{n_1}F_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)G^{j_1}_{0u^i}(x_0,u)+$$

$$+F_{2u^i}(x_2,u)+\sum_{j_2=1}^{n_2}F_{2x_2^{j_2}}(x_2,u)G^{j_2}_{1u^i}(x_1,u)+$$

$$+\sum_{j_2=1}^{n_2}F_{2x_2^{j_2}}(x_2,u)\sum_{j_1=1}^{n_1}G^{j_2}_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)G^{j_1}_{0u_i}(x_0,u)+\ldots$$

$$\ldots+F_{mu^i}(x_m,u)+\sum_{j_m=1}^{n_m}F_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)G^{j_m}_{(m-1)u^i}(x_{m-1},u)+$$

$$+\sum_{j_m=1}^{n_m}F_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)\sum_{j_{m-1}=1}^{n_{m-1}}G^{j_m}_{(m-1)x_{m-1}^{j_{m-1}}}(x_{m-1},u)G^{j_{m-1}}_{(m-2)u^i}(x_{m-2},u)+\ldots$$

$$\ldots+\sum_{j_m=1}^{n_m} F_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)\sum_{j_{m-1}=1}^{n_{m-1}} G^{j_m}_{(m-1)x_{m-1}^{j_{m-1}}}(x_{m-1},u)\sum_{j_{m-2}=1}^{n_{m-2}} G^{j_{m-1}}_{(m-2)x_{m-2}^{j_{m-2}}}(x_{m-2},u)\times\ldots$$

$$\ldots\times\sum_{j_1=1}^{n_1} G^{j_2}_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)G^{j_1}_{0u^i}(x_0,u)+\sum_{j_{m+1}=1}^{n_{m+1}}\Phi_{x_{m+1}^{j_{m+1}}}(x_{m+1})G^{j_{m+1}}_{mu^i}(x_m,u)+$$

$$+\sum_{j_{m+1}=1}^{n_{m+1}}\Phi_{mx_{m+1}^{j_{m+1}}}(x_{m+1},u)\sum_{j_m=1}^{n_m} G^{j_{m+1}}_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)G^{j_m}_{(m-1)u^i}(x_{m-1},u)+\ldots$$

$$\ldots+\sum_{j_{m+1}=1}^{n_{m+1}}\Phi_{mx_{m+1}^{j_{m+1}}}(x_{m+1},u)\sum_{j_m=1}^{n_m} G^{j_m}_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)\sum_{j_{m-1}=1}^{n_{m-1}} G^{j_m}_{(m-1)x_{m-1}^{j_{m-1}}}(x_{m-1},u)\times\ldots$$

$$\ldots\times\sum_{j_1=1}^{n_1} G^{j_2}_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)G^{j_1}_{0u^i}(x_0,u).$$

Переставляя знаки суммирования во всех произведениях вида $\sum\limits_{j_s=1}^{n_s}\ldots\times\sum\limits_{j_{s-1}=1}^{n_{s-1}}\ldots\times\ldots$ $\ldots\times\sum\limits_{j_1=1}^{n_1}\ldots$ в обратном порядке, группируя суммы с первым суммированием по j_1, затем суммы с первым суммированием по j_2 и т.д., вынося за скобки общие множители, получаем

$$J_{u^i}=F_{0u^i}(x_0,u)+\sum_{j_1=1}^{n_1} G^{j_1}_{0u^i}(x_0,u)\left(F_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)+\sum_{j_2=1}^{n_2} G^{j_2}_{1x_1^{j_1}}(x_1,u)\left(F_{2x_2^{j_2}}(x_2,u)+\ldots\right.\right.$$

$$\left.\left.\ldots+\sum_{j_k=1}^{n_k} G^{j_k}_{(k-1)x_{k-1}^{j_k}}(x_{k-1},u)\left((F_{kx_k^{j_k}}(x_k,u)+\sum_{j_{k+1}=1}^{n_{k+1}} G^{j_{k+1}}_{kx_k^{j_k}}(x_k,u)\Phi_{x_{k+1}^{j_{k+1}}}(x_{k+1})\right)\ldots\right)\right)+$$

$$+F_{1u^i}(x_1,u)+\sum_{j_2=1}^{n_2} G^{j_2}_{1u^i}(x_1,u)\left(F_{2x_2^{j_2}}(x_2,u)+\sum_{j_3=1}^{n_3} G^{j_3}_{3x_3^{j_2}}(x_3,u)\left(F_{3x_3^{j_3}}(x_3,u)+\ldots\right)\right)+$$

$$\ldots+F_{(m-1)u^i}(x_m,u)+$$

$$+\sum_{j_m=1}^{n_m} G^{j_m}_{(m-1)u^i}(x_{m-1},u)\left(F_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)+\sum_{j_{m+1}=1}^{n_{m+1}} G^{j_{m+1}}_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)\Phi_{x_{m+1}^{j_{m+1}}}(x_{m+1})\right)+$$

$$+F_{mu^i}(x_m,u)+\sum_{j_{m+1}=1}^{n_{m+1}} G^{j_{m+1}}_{mu^i}(x_m,u)\Phi_{x_{m+1}^{j_{m+1}}}(x_{m+1}).$$

Теперь последовательно используя векторы $\{\psi_m,\psi_{m-1},\ldots,\psi_0\}$ из (15), получаем окончательный результат для J_{u^i}:

$$J_{u^i}=\ldots+F_{mu^i}(x_m,u)+\sum_{j_{m+1}=1}^{n_{m+1}} G^{j_{m+1}}_{mu^i}(x_m,u)\Phi_{x_{m+1}^{j_{m+1}}}(x_{m+1})=$$

$$=\ldots+F_{mu^i}(x_m,u)+G^{T}_{mu^i}(x_m,u)\psi_m=\ldots+F_{(m-1)u^i}(x_m,u)+$$

$$+\sum_{j_m=1}^{n_m} G^{j_m}_{(m-1)u^i}(x_{m-1},u)\left(F_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)+G^T_{mx_m^{j_m}}(x_m,u)\psi_m\right)+H_{mu^i}(x_m,\psi_m,u)=$$

$$=\ldots+F_{(m-1)u^i}(x_m,u)+\sum_{j_m=1}^{n_m} G^{j_m}_{(m-1)u^i}(x_{m-1},u)\psi^{j_m}_{m-1}+H_{mu^i}(x_m,\psi_m,u)=$$

$$=\ldots+F_{(m-1)u^i}(x_m,u)+G^T_{(m-1)u^i}(x_m,u)\psi_{m-1}+H_{mu^i}(x_m,\psi_m,u)=$$

$$=\ldots+H_{(m-1)u^i}(x_{m-1},\psi_{m-1},u)+H_{mu^i}(x_m,\psi_m,u)=$$

$$=\ldots=H_{0u^i}(x_0,\psi_0,u)+\ldots+H_{mu^i}(x_m,\psi_m,u).$$

Теорема доказана.

ВЫЧИСЛЕНИЕ ОБОБЩЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ В ЗАДАЧАХ УПРАВЛЕНИЯ

Рассмотрим следующую задачу оптимального управления (задачу Лагранжа) в дискретном времени [1–5]:

$$J(x_0,u)=\sum_{i=0}^{m}F_i(x_i,u_i)+\Phi(x_{m+1})\to\min_u \tag{16}$$

при условиях

$$x_{i+1}=G_i(x_i,u_i),\ i=0,1,\ldots,m,\ x_0\in\mathrm{R}^{n_0}, \tag{17}$$

$$u=(u_0,\ldots,u_m),\ u_i\in U_i\subset\mathrm{R}^{l_i},\ i=0,1,\ldots,m,$$

где индекс $i=0,1,\ldots,m$ — дискретное время; $x_i=(x_i^1,\ldots,x_i^{n_i})^{\mathrm{T}}\in\mathrm{R}^{n_i}$ — состояние управляемой системы в момент i; $u_i=(u_i^1,\ldots,u_i^{l_i})^{\mathrm{T}}\in\mathrm{R}^{l_i}$ — управление в момент i; функции $G_i=(G_i^1,\ldots,G_i^{n_{i+1}})^{\mathrm{T}}$, F_i, Φ заданы; U_i — заданные множества в R^{l_i}; $m\ge 0$ — натуральное число; x_0 — заданная точка в R^{n_0}.

Теорема 7. Пусть функции F_i, G_i, Φ обобщенно-дифференцируемы по совокупности своих аргументов при $x_i\in\mathrm{R}^{n_i}$, $u_i\in V_i$, где V_i — открытая окрестность множества U_i, $i=0,1,\ldots,m$. Тогда функция $J(x_0,u)$ обобщенно-дифференцируема по $(x_0,u_0,u_1,\ldots,u_m)\in\mathrm{R}^{n_0}\times V_0\times\ldots\times V_m$, причем векторы

$$(H_{0x_0}(x_0,\psi_0,u_0),H_{0u_0}(x_0,\psi_0,u_0),\ldots,H_{mu_m}(x_m,\psi_m,u_m))^{\mathrm{T}}=$$

$$=(H_{0x_0^1}(x_0,\psi_0,u_0),\ldots,H_{0x_0^{n_0}}(x_0,\psi_0,u_0),$$

$$H_{0u_0^1}(x_0,\psi_0,u_0),\ldots,H_{0u_0^{l_0}}(x_0,\psi_0,u_0),\ldots$$

$$\ldots,H_{mu_m^1}(x_m,\psi_m,u_m),\ldots,H_{mu_m^{l_m}}(x_m,\psi_m,u_m))^{\mathrm{T}} \tag{18}$$

являются обобщенными градиентами функции $J(x_0,u)$ в точке (x_0,u), где $H_i(x_i,\psi_i,u_i)=F_i(x_i,u_i)+G_i^{\mathrm{T}}(x_i,u_i)\,\psi_i$, $i=0,1,\ldots,m$, — дискретная функция Гамильтона–Понтрягина; $x=(x_0,\ldots,x_{m+1})$ — дискретная траектория процесса, соответствующая выбранному управлению $u\in U=U_0\times U_1\times\ldots\times U_m$; последовательность вспомогательных (сопряженных) вектор-функций $(\psi_0,\ldots,\psi_m)=\psi$ определяется из условий (обратного счета)

$$\psi_{i-1} = H_{ix_i}(x_i, \psi_i, u_i) = F_{ix_i}(x_i, u_i) + G^{\mathrm{T}}_{ix_i}(x_i, u_i)\,\psi_i, \;\; i = m, m-1, \ldots, 1,$$

$$\psi_m = \Phi_{x_{m+1}}(x_{m+1}).$$

Доказательство. Данная теорема является следствием теоремы 6 в силу того, что задачу (16), (17) можно трактовать как задачу (12), (13) с векторной переменной $u = (u_0, u_1, \ldots, u_m) \in U = U_0 \times \ldots \times U_m$. Так как функция Гамильтона–Понтрягина $H_i(x_i, \psi_i, u)$ при этом фактически зависит только от u_i, компоненты $J_{x_0^j} = H_{0x_0^j}(x_0, \psi_0, u_0)$ обобщенного градиентного множества функции $J(x_0, u)$ вычисляются так же, как в теореме 6, а при вычислении компонент $J_{u_i^j}$ по формуле (14) остается только одно слагаемое $H_{iu_i^j}(x_i, \psi_i, u_i) = J_{u_i^j}$.

Теорема доказана.

Замечание 1. В работах [1–5] формула (18) получена как следствие правил дифференцирования сложных гладких функций. Для негладких выпуклых задач оптимального управления с линейными уравнениями движения аналогичные формулы вычисления субградиентов целевого функционала получены в [2–4]. В [3] эти формулы обоснованы также для случая слабо выпуклого [7] целевого функционала и гладких уравнений движения. В теореме 7 обобщаем эти результаты на значительно более широкий класс негладких невыпуклых задач оптимального управления, в том числе с негладкими уравнениями движения.

ВЫЧИСЛЕНИЕ СТОХАСТИЧЕСКИХ ОБОБЩЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ В ЗАДАЧЕ СТОХАСТИЧЕСКОГО ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ

Рассмотрим следующую задачу стохастического оптимального управления в дискретном времени [2, 3]:

$$J(a_0, u) = \mathbf{E}\left(\sum_{i=0}^{m} f_i(x_i, u_i, \theta) + \varphi(x_{m+1}, \theta) \right) \to \min_u \tag{19}$$

при условиях

$$x_{i+1} = g_i(x_i, u_i, \theta), \;\; i = 0, 1, \ldots, m, \;\; x_0 = (a_0, b_0(\theta)), \tag{20}$$

$$u = (u_0, \ldots, u_m)^{\mathrm{T}}, \;\; u_i \in U_i, \;\; i = 0, 1, \ldots, m, \tag{21}$$

где $x_i = (x_i^1, \ldots, x_i^{n_i}) \in \mathrm{R}^{n_i}$; $u_i = (u_i^1, \ldots, u_i^{l_i}) \in \mathrm{R}^{l_i}$; функции $g_i = (g_i^1, \ldots, g_i^{n_{i+1}})$, f_i, φ заданы; U_i — заданные множества в R^{l_i}; $m \ge 1$ — натуральное число; $a_0 \in \mathrm{R}^{n_0}$ — заданный детерминированный вектор; $b_0(\theta)$ — случайный вектор; θ — элементарный исход в вероятностном пространстве $(\Theta, \Sigma, \mathrm{P})$; $\mathbf{E}$ — знак математического ожидания по мере P. Последовательность $u = (u_0, \ldots, u_m)^{\mathrm{T}}$ называется программным управлением случайным процессом (20).

Введем обозначения: $F_i(x_i, u_i) = \mathbf{E} f_i(x_i, u_i, \theta)$, $G_i(x_i, u_i) = \mathbf{E} g_i(x_i, u_i, \theta)$;

$$g_{ix} = \begin{pmatrix} g^1_{ix^1} & \cdots & g^1_{ix^n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ g^n_{ix^1} & \cdots & g^n_{ix^n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g^1_{ix} \\ \cdots \\ g^n_{ix} \end{pmatrix}, \;\; g_{iu} = \begin{pmatrix} g^1_{iu^1} & \cdots & g^1_{iu^m} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ g^n_{iu^1} & \cdots & g^n_{iu^m} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g^1_{iu} \\ \cdots \\ g^n_{iu} \end{pmatrix},$$

$$(f_{ix})^{\mathrm{T}} = (f_{ix^1}, \ldots, f_{ix^n}), \;\; (f_{iu})^{\mathrm{T}} = (f_{iu^1}, \ldots, f_{iu^m}), \;\; (\varphi_x)^{\mathrm{T}} = (\varphi_{x^1}, \ldots, \varphi_{x^n}),$$

где $(f_{ix}, f_{iu})^{\mathrm{T}}$, $(g_{ix}^j, g_{iu}^j)^{\mathrm{T}}$ — некоторые обобщенные градиенты по (x_i, u_i) функций $f_i(\cdot,\cdot,\theta)$, $g_i^j(\cdot,\cdot,\theta)$ при фиксированном параметре θ; $\varphi_x(\cdot,\theta)$ — некоторый обобщенный градиент функции φ при фиксированном θ; $(\cdot)^{\mathrm{T}}$ обозначает транспонирование матрицы $(\cdot)$.

Предположение А. 1. Пусть в задаче (19)–(21) функции $f_i(x_i, u_i, \theta)$, $g_i^j(x_i, u_i, \theta)$ и $\varphi(x_{m+1}, \theta)$ обобщенно-дифференцируемы по совокупности аргументов (x_i, u_i) и x_{m+1} для $x_i \in \mathrm{R}^{n_i}$, $u_i \in V_i$ при каждом фиксированном θ и измеримы по θ при фиксированных (x_i, u_i) и x_{m+1}, $i = 0, 1, \ldots, m$. 2. Пусть для каждой точки (x_i, u_i) и x_{m+1} существуют окрестности $O_i \times V_i$ и O_{m+1}, в которых функции $f_i(\cdot,\cdot,\theta)$, $g_i^j(\cdot,\cdot,\theta)$ и $\varphi(\cdot,\theta)$ липшицевы с интегрируемыми константами Липшица. 3. Многозначные обобщенно-градиентные отображения $\partial_{(x_i,u_i)} f_i(\cdot,\cdot,\theta)$, $\partial_{(x_i,u_i)} g_i^j(\cdot,\cdot,\theta)$ и $\partial_{x_{m+1}} \varphi(\cdot,\theta)$ измеримы по θ; например, это могут быть субдифференциалы Кларка функций $f_i(\cdot,\cdot,\theta)$, $g_i^j(\cdot,\cdot,\theta)$ и $\varphi(\cdot,\theta)$ (вопросы измеримости субдифференциальных и обобщенно-градиентных отображений рассматриваются в [42, 52]).

Из теорем 1, 2 аналогично теореме 7 вытекает следующее утверждение.

Теорема 8. В условиях предположения А целевая функция $J(a_0, u)$ задачи (19)–(21) обобщенно-дифференцируема по $(a_0, u = (u_0, \ldots, u_m))$, случайная целевая функция $f(a_0, u, \theta) = \sum_{i=0}^{m} f_i(x_i, u_i, \theta) + \varphi(x_{m+1}, \theta)$ задачи (19)–(21) измерима и интегрируема по θ и обобщенно-дифференцируема по $(a_0, u = (u_0, \ldots, u_m))$, причем векторы

$$\begin{aligned} h_{a_0,u}(a_0, u, \theta) &= (h_{0a_0}(x_0, \psi_0, u_0, \theta), h_{u_0}(x_0, \psi_0, u_0, \theta), \ldots, h_{u_m}(x_m, \psi_m, u_m, \theta))^{\mathrm{T}} = \\ &= (h_{0a_0^1}(x_0, \psi_0, u_0, \theta), \ldots, h_{0a_0^{n_0}}(x_0, \psi_0, u_0, \theta), \\ &\quad h_{0u_0^1}(x_0, \psi_0, u_0, \theta), \ldots, h_{0u_0^{l_0}}(x_0, \psi_0, u_0, \theta), \ldots \\ &\quad \ldots, h_{mu_m^1}(x_m, \psi_m, u_m, \theta), \ldots, h_{mu_m^{l_m}}(x_m, \psi_m, u_m, \theta))^{\mathrm{T}} \end{aligned} \tag{22}$$

являются при фиксированном θ обобщенными градиентами функции $f(\cdot,\cdot,\theta)$ в точке (x_0, u), где $h_i(x_i, \psi_i, u_i, \theta) = f_i(x_i, u_i, \theta) + g_i^{\mathrm{T}}(x_i, u_i, \theta)\psi_i$, $i = 0, 1, \ldots$ $\ldots, m$, — стохастическая дискретная функция Гамильтона–Понтрягина; $x = (x_0, \ldots, x_{m+1})$ — дискретная случайная траектория процесса (20), соответствующая выбранному управлению $u \in U = U_0 \times U_1 \times \ldots \times U_m$; последовательность вспомогательных (сопряженных) вектор-функций $(\psi_0, \ldots, \psi_m) = \psi$ определяется из условий (обратного счета)

$$\psi_m = \varphi_{x_{m+1}}(x_{m+1}, \theta),$$

$$\psi_{i-1} = h_{ix_i}(x_i, \psi_i, u_i, \theta) = f_{ix_i}(x_i, u_i, \theta) + g_{ix_i}^{\mathrm{T}}(x_i, u_i, \theta)\psi_i, \; i = m, m-1, \ldots, 1.$$

Следовательно, векторы $h_{a_0,u}(a_0, u, \theta)$ являются стохастическими обобщенными градиентами функции $J(a_0, u)$ такими, что $\mathbf{E}h_{a_0,u}(a_0, u, \theta) \in \partial_{a_0,u} J(a_0, u)$, и их можно использовать в стохастических градиентных методах минимизации $J(a_0, u)$.

Замечание 2. Для гладких задач, а также выпуклых задач стохастического оптимального управления формулы вычисления стохастических градиентов целевого функционала, подобные (22), получены в работах [2, 3].

Пример 2 (эволюция запасов, продолжение примера 1). Рассмотрим параметрическую стратегию пополнения запаса

$$u_t(x_t, \gamma, y) = \min\{M, \max\{0, \gamma(y - x_t)\}\},$$

где искомые параметры $\gamma \geq 0$ и $y \geq 0$ таковы, что $0 \leq \gamma \leq 1$, $0 \leq y \leq M$. Качество функционирования склада при таком управлении (с обратной связью) можно описать критерием

$$F(a, \gamma, y) =$$

$$= \mathrm{E}\left(\sum_{t=0}^{m} \max\{\alpha(x_t - \theta_t), \beta(\theta_t - x_t)\} + \max\{\alpha(x_{m+1} - b), \beta(b - x_{m+1})\}\right) \to \min_{\gamma, y},$$

где α, β — штрафные коэффициенты за избыток и недостачу товара в период времени $[t, t+1)$; Е — знак математического ожидания.

Здесь случайная функция

$$\varphi(a, \gamma, y, \theta_0, \ldots, \theta_m) =$$

$$= \sum_{t=0}^{m} \max\{\alpha(x_t - \theta_t), \beta(\theta_t - x_t)\} + \max\{\alpha(x_{m+1} - b), \beta(b - x_{m+1})\}$$

обобщенно-дифференцируема по своим аргументам (a, γ, y) и в условиях теоремы 8 функция математического ожидания $F(a, \gamma, y)$ также обобщенно-дифференцируема по своим переменным (a, γ, y).

Обозначим

$$f(x_t, \theta_t) = \max\{\alpha(x_t - \theta_t), \beta(\theta_t - x_t)\},$$

$$\Phi(x_{m+1}) = \max\{\alpha(x_{m+1} - b), \beta(b - x_{m+1})\},$$

$$g_t(x_t, \gamma, y, \theta_t) = \max\{0, x_t + \min\{M, \max\{0, \gamma(y - x_t)\}\} - \theta_t\} =$$

$$= \max\{0, \min\{x_t - \theta_t + M, \max\{x_t - \theta_t, \gamma(y - x_t) + x_t - \theta_t\}\}\},$$

$$\psi_m = \begin{cases} \alpha, & x_{m+1} > b, \\ -\beta, & x_{m+1} \leq b, \end{cases} \quad f_{x_t}(x_t, \theta_t) = \begin{cases} \alpha, & x_t > \theta_t, \\ -\beta, & x_t \leq \theta_t. \end{cases}$$

Обобщенный градиент $(g_{tx_t}, g_{t\gamma}, g_{ty})$ случайной функции $g_t(x_t, \gamma, y, \theta_t)$ вычисляется согласно теореме 1 с помощью следующего алгоритма:

$$\begin{array}{l}
\textit{if } (x_t + \min\{M, \max\{0, \gamma(y - x_t)\}\} - \theta_t < 0) \textit{ then} \\
\quad g_{tx_t} = g_{t\gamma} = g_{ty} = 0, \\
\textit{else if } (x_t - \theta_t + M < \max\{x_t - \theta_t, \gamma(y - x_t) + x_t - \theta_t\}) \textit{ then} \\
\quad g_{tx_t} = 1, g_{t\gamma} = g_{ty} = 0, \\
\quad \textit{else if } (x_t - \theta_t > \gamma(y - x_t) + x_t - \theta_t) \textit{ then} \\
\qquad g_{tx_t} = 1, g_{t\gamma} = g_{ty} = 0, \\
\qquad \textit{else } g_{tx_t} = 1 - \gamma, g_{t\gamma} = y - x_t, g_{ty} = \gamma.
\end{array}$$

Рекуррентно вычислим

$$\psi_{t-1} = f_{x_t}(x_t, \theta_t) + \psi_t g_{tx_t}, \quad t = m, m-1, \ldots, 1.$$

Тогда в силу теоремы 4, с учетом $f_\gamma(x_t,\theta_t)=f_y(x_t,\theta_t)=0,$ получим

$$\varphi_a(a,\gamma,y,\theta_0,\dots,\theta_m)=f_{x_0}(x_0,\theta_0)+\psi_0(\theta_0,\dots,\theta_m)g_{0x_0}(x_0,\theta_0),$$
$$\varphi_\gamma(a,\gamma,y,\theta_0,\dots,\theta_m)=\sum_{t=0}^{m}\psi_t g_{t\gamma},\ \varphi_y(a,\gamma,y,\theta_0,\dots,\theta_m)=\sum_{t=0}^{m}\psi_t g_{ty}.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе теория обобщенного дифференцирования негладких функций распространена на недифференцируемые функционалы негладких дискретных динамических систем. Получены формулы вычисления обобщенных градиентов этих функционалов на основе дискретных функций Гамильтона–Понтрягина и процедур прямого моделирования траекторий и обратного пересчета сопряженных переменных. Прослежена связь между задачами управления дискретными динамическими системами и задачами обучения многослойных нейронных сетей, при этом динамика в многослойных сетях трактуется как послойное распространение и преобразование входного сигнала в выходной и обратное распространение градиентной информации от выхода сети к входу. Полученные результаты позволяют рассматривать более общие негладкие задачи управления и обучения, расширяют область применения методов негладкой и стохастической оптимизации.

В последующей статье BackProp-метод будет расширен на негладкие невыпуклые задачи обучения многослойных нейронных сетей, сформулирован в терминах обобщенных градиентов негладких функций Гамильтона–Понтрягина, а также рассмотрен его важный вариант для обучения так называемых рекуррентных нейронных сетей, т.е. сетей с обратными связями и памятью.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брайсон А., Хо Ю-Ши. Прикладная теория оптимального управления. Оптимизация, оценка и управление. Москва: Мир, 1972. 544 с.
2. Ермольев Ю.М. Методы стохастического программирования. Москва: Наука, 1976. 240 с.
3. Ермольев Ю.М., Гуленко В.П., Царенко Т.И. Конечно-разностный метод в задачах оптимального управления. Киев: Наук. думка, 1978. 164 с.
4. Васильев Ф.П. Методы решения экстремальных задач. Москва: Наука, 1981. 400 с.
5. Евтушенко Ю.Г. Оптимизация и быстрое автоматическое дифференцирование. Москва: ВЦ имени А.А. Дородницына РАН, 2013. 144 с. http://dx.doi.org/10.1016/j.neunet.2014.09.003.
6. Schmidhuber J. Deep learning in neural networks: An overview. *Neural Networks*. 2015. Vol. 61. P. 85–117. http://dx.doi.org/10.1016/j.neunet.2014.09.003.
7. Нурминский Е.А. Численные методы решения стохастических минимаксных задач. Киев: Наук. думка, 1979. 176 с.
8. Понтрягин Л.С., Болтянский В.Г., Гамкрелидзе Р.В., Мищенко Е.Ф. Математическая теория оптимальных процессов. Москва: Физматгиз, 1961. 391 с.
9. Болтянский В.Г. Оптимальное управление дискретными системами. Москва: Наука, 1973. 448 с.
10. Rumelhart D.E., Hinton G.E., and Williams R.J. Learning representations by Back-Propagating errors. *Nature*. 1986. Vol. 323. P. 533–536. https://doi.org/10.1038/323533a0.
11. LeCun Y., Bengio Y., and Hinton G. Deep learning. *Nature*. 2015. Vol. 521. P. 436–444. https://doi.org.10.1038/nature14539.
12. Гудфеллоу Я., Бенджио И., Курвилль А. Глубокое обучение. Пер. с англ. 2-е изд., испр. Москва: ДМК Пресс, 2018. 652 с.
13. Норкин В.И. Обобщенно-дифференцируемые функции. *Кибернетика*. 1980. № 1. С. 9–11.

14. Демьянов В.Ф. Условия экстремума и вариационное исчисление. Москва: Высш. шк., 2005. 335 с.
15. Дадуна Г., Кнопов П.С., Тур Л.П. Оптимальные стратегии для системы запасов с функциями стоимости общего вида. *Кибернетика и системный анализ*. 1999. № 4. С. 106–123.
16. Ermoliev Yu.M. and Norkin V.I. Stochastic generalized gradient method with application to insurance risk management. Interim Report IR-97-021. Int. Inst. for Appl. Syst. Anal. Laxenburg, Austria, 1997. 19 p. URI: http://pure.iiasa.ac.at/5270.
17. Пшеничный Б.Н. Необходимые условия экстремума. 2-е изд., перераб. и доп. Москва: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1982. 144 с. (1-е изд., 1969.)
18. Негладкие задачи теории оптимизации и управления. Под ред. Демьянова В.Ф. Ленинград: Изд-во Ленинград. ун-та, 1982. 322 с.
19. Кларк Ф. Оптимизация и негладкий анализ. Москва: Наука, 1988. 280 с.
20. Мордухович Б. Ш. Методы аппроксимаций в задачах оптимизации и управления. Москва: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988. 360 с.
21. Rockafellar R.T., Wets R.J-B. Variational analysis. Berlin; Heidelberg: Springer, 1998. 734 p.
22. Ahn H-S., Moore K.L., Chen YQ. Iterative learning control. Robustness and monotonic convergence for interval systems. London: Springer-Verlag, 2007. 230 p.
23. Aubin J-P. Neural networks and qualitative physics. Cambridge: Cambridge University Press, 1996. 283 p.
24. Николенко С., Кадурин А., Архангельская Е. Глубокое обучение. СПб.: Питер, 2018. 480 с.
25. Griewank A., Walther A. Evaluating derivatives. Principles and techniques of algorithmic differentiation. Sec. Ed. Philadelphia: Soc. for Industr. and Appl. Mathematics, 2008. 438 p.
26. Hardt M., Recht B., Singer Y. Train faster, generalize better: Stability of stochastic gradient descent. *Proceedings of Machine Learning Research.* 2016. Vol. 48. P. 1225–1234.
27. Zhang C., Liao Q., Rakhlin A., Miranda B., Golowich N., Poggio T. Theory of deep learning IIb: Optimization Properties of SGD. CBMM Memo No. 072. McGovern Institute for Brain Research. Cambridge: Massachusetts Institute of Technology, 2018. 9 p. arXiv:1801.02254v1 [cs.LG] 7 Jan 2018.
28. Soudry D., Hoffer E., Nacson M.S., Gunasekar S., Srebro N. The implicit bias of gradient descent on separable data. arXiv:1710.10345v3 [stat.ML] 21 Mar 2018.
29. Bottou L., Curtisy F.E., Nocedalz J. Optimization methods for large-scale machine learning. *SIAM Review*. 2018. Vol. 60, N 2. P. 223–311. https://doi.org.10.1137/16m1080173.
30. Robbins H. and Monro S. A stochastic approximation method. *The Annals of Mathematical Statistics*. 1951. Vol. 22, N 3. P. 400–407.
31. Nemirovski A., Juditsky A., Lan G., and Shapiro A. Robust stochastic approximation approach to stochastic programming. *SIAM Journal on Optimization*. 2009. Vol. 19, N 4. P. 1574–1609. https://doi.org/10.1137/070704277.
32. Shapiro A., Dentcheva D., and Ruszczyński A. Lectures on stochastic programming: modeling and theory. Philadelphia: SIAM, 2009. 442 p.
33. Ермольев Ю.М., Норкин В.И. Стохастический обобщенный градиентный метод для решения невыпуклых негладких задач стохастической оптимизации. *Кибернетика и системный анализ*. 1998. № 2. С. 50–71.
34. Davis D., Drusvyatskiy D., Kakade S., and Lee J.D. Stochastic subgradient method converges on tame functions. *Found. Comput. Math*. 2019. P. 1–36. https://doi.org/10.1007/s10208-018-09409-5.
35. Ruszczyński A. Convergence of a stochastic subgradient method with averaging for nonsmooth nonconvex constrained optimization. arXiv Preprint, 2019. arXiv:1912.07580v1 [math.OC] 16 Dec 2019. 10 p. https://arxiv.org/abs/1912.07580.
36. Mifflin R. An algorithm for constrained optimization with semi-smooth functions. *Math. Oper. Res*. 1977. Vol. 2, N 2. P. 191–207. URL: www.jstor.org/stable/3689654.
37. Mifflin R. Semismooth and semiconvex functions in constrained optimization. *SIAM J. Contr. Opt*. 1977. Vol. 15, N 6. P. 959–972. https://doi.org/10.1137/0315061.
38. Гупал А.М. Стохастические методы решения негладких экстремальных задач. Киев: Наук. думка, 1979. 150 с.

39. Mifflin R. A modification and an extension of Lemarechal's algorithm for nonsmooth minimization. In: *Nondifferential and Variational Techniques in Optimization.* Part 2. Sorensen D.C., Wets J.B. (Eds.). *Math. Prog. Study*. 1982. Vol. 17. P. 77–90.
40. Shor N.Z. Minimization methods for nondifferentiable functions. Berlin; Heidelberg: Springer, 1985. 164 p.
41. Дорофеев П.А. О некоторых свойствах обобщенного градиентного метода. *Журн. вычисл. математики и мат. физики*. 1985. Т. 25, № 2. С. 181–189.
42. Михалевич В.С., Гупал А.М., Норкин В.И. Методы невыпуклой оптимизации. Москва: Наука, 1987. 280 с.
43. Завриев С.К., Перевозчиков А.Г. Стохастический метод обобщенного градиентного спуска для решения минимаксных задач со связанными переменными. *Журн. вычисл. математики и мат. физики*. 1990. Т. 30, № 4. С. 491–500.
44. Урясьев С.П. Адаптивные алгоритмы стохастической оптимизации и теории игр. Москва: Наука, 1990. 184 с.
45. Hiriart-Urruty J.-B., Lemarechal C. Convex analysis and minimization algorithms. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 1993. Vol. II. 346 p.
46. Fukushima M., Qi L. (Eds.) Reformulation: Nonsmooth, piecewise smooth, semismooth and smoothing methods. Dordrecht; Boston; London: Kluwer Acad. Publ., 1999. 442 p.
47. Стецюк П.И. Теория и программные реализации *r*-алгоритмов Шора. *Кибернетика и системный анализ*. 2017. Т. 53, № 5. С. 43–57.
48. Норкін В. І. Стохастичні методи розв'язання задач неопуклого стохастичного програмування та їх застосування: автореф. дис. ... д-ра фіз.-мат. наук. Ін-т кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України. Київ, 1998. 32 с. URL: http://library.nuft.edu.ua/ebook/file/01.05.01%20Norkin%20VI.pdf.
49. Ермольев Ю.М., Норкин В.И. Методы решения невыпуклых негладких задач стохастической оптимизации. *Кибернетика и системный анализ*. 2003. № 5. С. 89–106.
50. Норкин В.И. Нелокальные алгоритмы минимизации недифференцируемых функций. *Кибернетика*. 1978. № 5. С. 44–48.
51. Bolte J., Daniilidis A., Lewis A. Tame functions are semismooth. *Math. Program., Ser. B*. 2009. Vol. 117. P. 5–19. https://doi.org.10.1007/s10107-007-0166-9.
52. Норкин В.И. Случайные обобщенно-дифференцируемые функции в задаче невыпуклой негладкой стохастической оптимизации. *Кибернетика*. 1986. № 6. С. 98–102.
53. Mirică S. A note on the generalized differentiability of mappings. *Nonl. Anal. Theory, Methods, Applications*. 1980. Vol. 4, N 3. P. 567–575. https://doi.org/10.1016/0362-546x(80)90092-9.
54. Ляшко І.І., Ємельянов В.Ф., Боярчук О.К. Математичний аналіз. Київ: Вища школа, 1992. Частина I. 495 с.
55. Qi L., Sun J. A nonsmooth version of Newton's method. *Mathematical Programming*. 1993. Vol. 58. P. 353–368. https://doi.org/10.1007/bf01581275.
56. Qi L. Convergence analysis of some algorithms for solving nonsmooth equations. *Mathematics of Operations Research*. 1993. Vol. 18. P. 227–244. https://doi.org/10.1287/moor.18.1.227.
57. Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. Москва: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1983. 384 с.
58. Стернберг С. Лекции по дифференциальной геометрии. Москва: Мир, 1970. 412 с.
59. Burke J., Lewis A. & Overton M. A robust gradient sampling algorithm for nonsmooth nonconvex optimization. *SIAM J. on Opt*. 2005. Vol. 15, N 3. P. 751–779. https://doi.org/10.1137/030601296.

Надійшла до редакції 22.08.2018

В.І. Норкін

УЗАГАЛЬНЕНІ ГРАДІЄНТИ В ЗАДАЧАХ ДИНАМІЧНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ, ОПТИМАЛЬНОГО КЕРУВАННЯ ТА МАШИННОГО НАВЧАННЯ

Анотація. Розглянуто негладкі неопуклі задачі динамічної оптимізації, оптимального керування (у дискретному часі), зокрема керування зі зворотним зв'язком, і машинного навчання. Простежено аналогію між задачами керування дискретними динамічними системами та задачами навчання багатошарових нейронних мереж з негладкими цільовими функціоналами та зв'язками. Обґрунтовано методи обчислення узагальнених градієнтів для таких систем на основі функцій Гамільтона–Понтрягіна. Градієнтні (стохастичні) алгоритми оптимального керування і навчання поширюються на неопуклі негладкі динамічні системи.

Ключові слова: динамічна оптимізація, оптимальне керування, машинне навчання, багатошарові нейронні мережі, глибоке навчання, негладка неопукла оптимізація, стохастична оптимізація, стохастичний узагальнений градієнт, стохастичне згладжування.

V.I. Norkin

GENERALIZED GRADIENTS IN DYNAMIC OPTIMIZATION, OPTIMAL CONTROL, AND MACHINE LEARNING PROBLEMS

Abstract. Problems of nonsmooth nonconvex dynamic optimization, optimal control (in discrete time), including feedback control, and machine learning are considered from a common point of view. An analogy between controlling discrete dynamical systems and multilayer neural networks learning problems with nonsmooth functionals and connections is traced. Methods for computing subgradients for such systems based on the Hamilton–Pontryagin functions are developed. Gradient (stochastic) algorithms for optimal control and learning are extended to nonconvex nonsmooth systems.

Keywords: dynamic optimization, optimal control, machine learning, multilayer neural networks, deep learning, nonsmooth noncovex optimization, stochastic optimization, stochastic generalized gradient, stochastic smoothing.

Норкин Владимир Иванович,
доктор физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Института кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины; профессор кафедры Национального технического университета Украины «Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского», Киев, e-mail: vladimir.norkin@gmail.com.