МЕТОДЫ ШТРАФНЫХ ФУНКЦИЙ

Описание алгоритма

Метод штрафных функций в значительном числе случаев считается наиболее подходящим средством решения задач математического программирования алгоритмом, хотя и обладающим рядом свойств, ограничивающих его применение.

Будем считать, что решаемая задача математического программирования имеет вид

$$\begin{array}{ll} \textit{найти максимум} & F(x) \text{ по } x \in E^n, \\ \textit{при условиях}: & f_i(x) \le 0 \quad \forall i = [1, m] \end{array}$$

Идея метода штрафных функций, использованная впервые Р. Курантом в 1943 году, заключается в том, что вместо исходной задачи математического программирования решается *серия задач* поиска экстремума специальной вспомогательной функции *без каких-либо ограничений на* $x \in E^n$.

Эта вспомогательная функция, которую будем обозначать $A(\tau, x)$, выбирается равной целевой функции исходной задачи $F(x)$, из которой вычитаются слагаемые $P(\tau, f_i(x))$, "штрафующие" нарушение каждого из условий $f_i(x) \le 0 \quad i = [1, m]$.

Механизм штрафа заключается в том, что этот штраф мал, если соответствующее ограничение не нарушено, и велик по модулю, если $f_i(x) > 0 \quad i = [1, m]$ на элементе x.

При использовании метода штрафных функций предполагается, что добавка (*штрафная функция*) $P(\tau, s)$, где $\tau > 0$ – *параметр (коэффициент штрафа)*, штрафующая нарушение ограничения вида $s \le 0$, удовлетворяет при каждом фиксированном значении s предельному соотношению

$$\lim_{\tau \to +0} P(\tau, s) = \begin{cases} 0\,, & s < 0, \\ +\infty\,, & s > 0. \end{cases} \tag{1}$$

При этом поиск максимума вспомогательной функции осуществляется при *фиксированном* значении параметра τ, однако его значение можно менять и использовать τ как регулятор меры штрафа за "единицу нарушения ограничения".

Тогда вспомогательная функция $A(\tau, x)$ для исходной задачи будет иметь вид

$$A(\tau, x) = F(x) - \sum_{i=1}^{m} P(\tau, f_i(x)) \;.$$

Примерами штрафных функций могут служить

$$P(\tau,s)=\begin{cases}0, & \text{при } s\le 0,\\ \dfrac{s^2}{2\tau}, & \text{при } s>0,\end{cases}\qquad P(\tau,s)=\begin{cases}-\tau\ln(-s), & \text{при } s<0,\\ +\infty, & \text{при } s\ge 0,\end{cases}$$

или

$$P(\tau,s)=\exp\left(\frac{s}{\tau}\right),\qquad P(\tau,s)=\tau\exp\left(\frac{s}{\tau}\right).,$$

графики двух из них показаны на рис. 1 и на рис 2

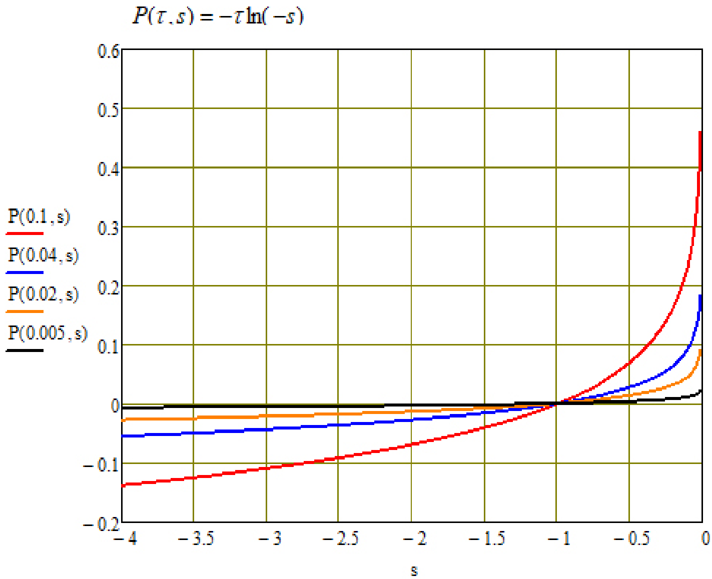

$P(\tau, s) = -\tau \ln(-s)$
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
−0.1
−0.2
P(0.1, s)
P(0.04, s)
P(0.02, s)
P(0.005, s)
−4
−3.5
−3
−2.5
−2
−1.5
−1
−0.5
0
s

Рис. 1.

$$P(\tau, s) := \tau\, e^{\frac{s}{\tau}}$$

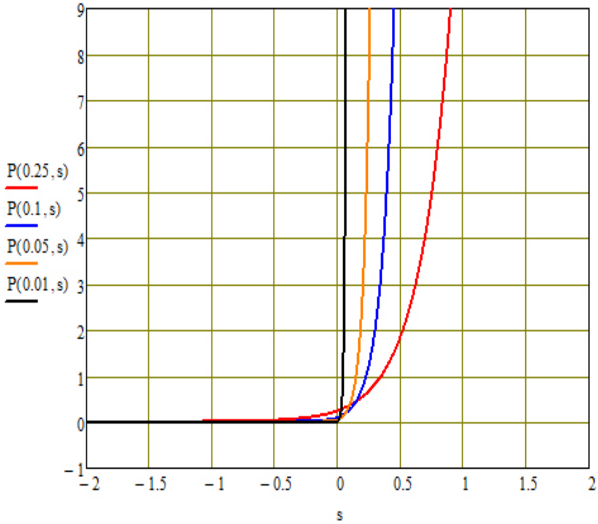


Рис. 2.

Для задачи

$$\begin{array}{ll} \textit{максимизировать} & e^{\xi}, \\ \textit{при условии} & \xi \le 1 \end{array}$$

со штрафной функцией $P(\tau, s) = \dfrac{\left(s + |s|\right)^2}{8\tau}$ графики вспомогательной функции

$$A(\tau, \xi) = e^{\xi} - \frac{1}{8\tau}\left(-1 + \xi + \left|-1 + \xi\right|\right)^2$$

при различных значениях τ, показаны на рис.1.

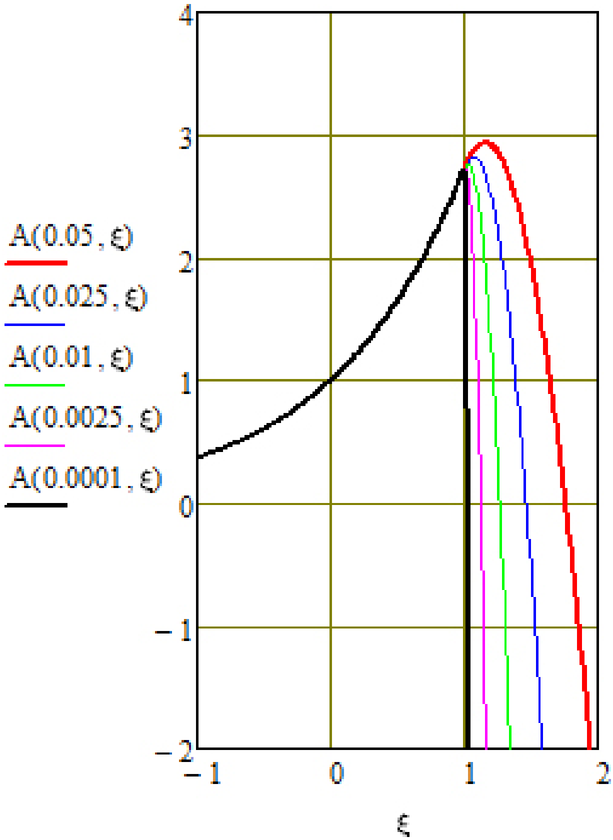


Рис. 3.

Рассмотрим еще два примера, для которых приведем лишь графики вспомогательных функцицй (аналитические решения найдите самостоятельно)

$$\begin{array}{ll} \textit{максимизировать} & (\xi-1)^2, \\ \textit{при условии} & 0 \le \xi \le 3 \end{array}$$

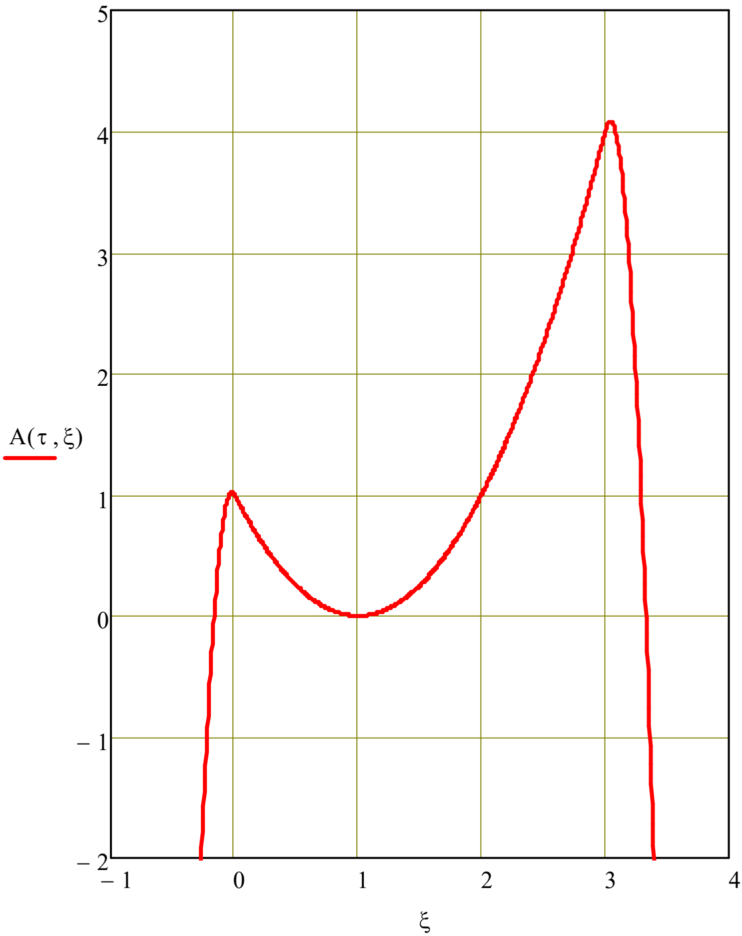
со штрафной функцией $P(\tau, s) = \dfrac{\left(s+|s|\right)^2}{8\tau}$

В этой задаче вспомогательную функцию удобнее записать в такой форме

$$P(\tau,\xi) = \begin{cases} (\xi-1)^2 - \dfrac{\xi^2}{2\tau} & \text{при } \xi \le 0, \\ (\xi-1)^2 & \text{при } 0 < \xi < 3, \\ (\xi-1)^2 - \dfrac{(\xi-3)^2}{2\tau} & \text{при } \xi \ge 3. \end{cases}$$

$\tau = 0.01$

$$A(\tau, \xi) := (\xi - 1)^2 - P(\tau, -\xi) - P(\tau, \xi - 3)$$



и задачу

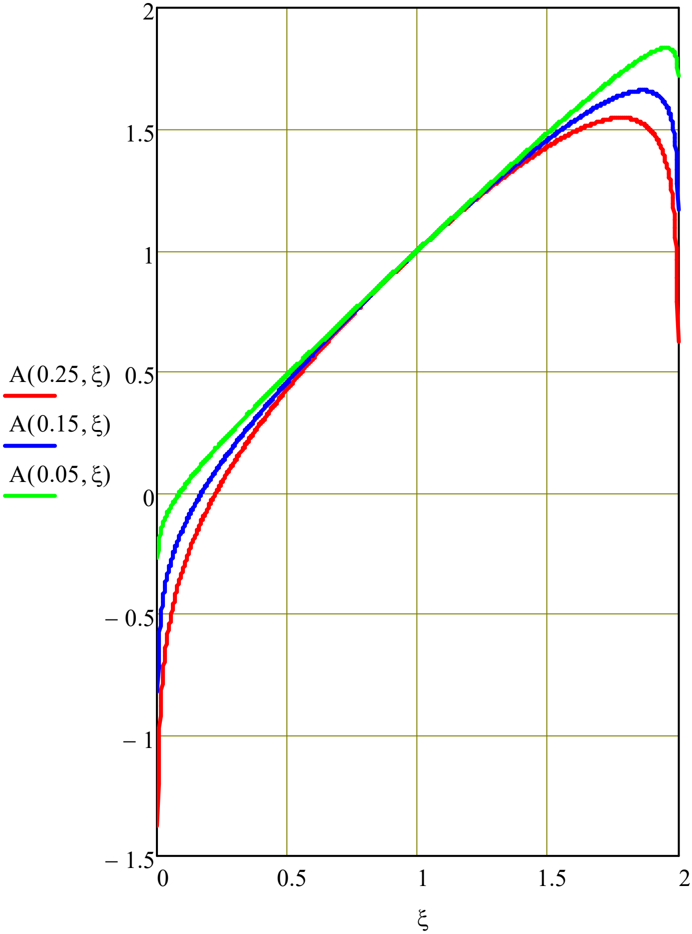
$$\begin{array}{ll} \textit{максимизировать} & \xi, \\ \textit{при условии} & 0 \le \xi \le 2 \end{array}$$

со штрафной функцией $P(\tau, s) = -\tau \ln(-s)$

Здесь вспомогательная функция будет иметь вид

$$P(\tau, \xi) = \xi + \tau \ln \xi + \tau \ln(2 - \xi).$$

$P(\tau, s) := -\tau \cdot \ln(-s)$ $\quad\quad$ $A(\tau, \xi) := \xi - P(\tau, -\xi) - P(\tau, \xi - 2)$



Проблема точности

При использовании метода гладких штрафных функций возникает так называемая проблема точности. Поясним суть этой проблемы на следующем примере.

Рассмотрим задачу: *найти максимум* $3\xi_1 + 2\xi_2$ на $\{\xi_1, \xi_2\} \in E^2$,

$$\text{\textit{при условиях}:} \quad \begin{cases} \xi_1 \le 2, \\ \xi_2 \le 1. \end{cases} \qquad (2)$$

В качестве штрафной функции (1) выберем $P(\tau, s) = \tau\, e^{\frac{s}{\tau}}$, тогда вспомогательная функция будет иметь вид (см. рис. 3)

$$A(\tau, \xi_1, \xi_2) = 3\xi_1 + 2\xi_2 - \tau\, e^{\frac{-2+\xi_1}{\tau}} - \tau e^{\frac{-1+\xi_2}{\tau}},$$

условия стационарности на элементе $\left\| \bar{x} \right\| = \left\| \begin{matrix} \bar{\xi}_1 \\ \bar{\xi}_2 \end{matrix} \right\|$ которой:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial A}{\partial \xi_1} = 3 - e^{\frac{\bar{\xi}_1 - 2}{\tau}} = 0, \\ \dfrac{\partial A}{\partial \xi_2} = 2 - e^{\frac{\bar{\xi}_2 - 1}{\tau}} = 0. \end{cases}$$

Откуда находим, что

$$\bar{\xi}_1 (\tau) = 2 + \tau \ln 3 \qquad \text{и} \qquad \bar{\xi}_2 (\tau) = 1 + \tau \ln 2 ,$$

и, следовательно,

$$\xi_1^* = \lim_{\tau \to +0} \bar{\xi}_1 (\tau) = 2 ; \qquad \xi_2^* = \lim_{\tau \to +0} \bar{\xi}_2 (\tau) = 1 ,$$

а точное экстремальное значение функционала на этом элементе равно 8. Таким образом, для данной задачи метод штрафных функций дает решение с погрешностью порядка величины параметра τ.

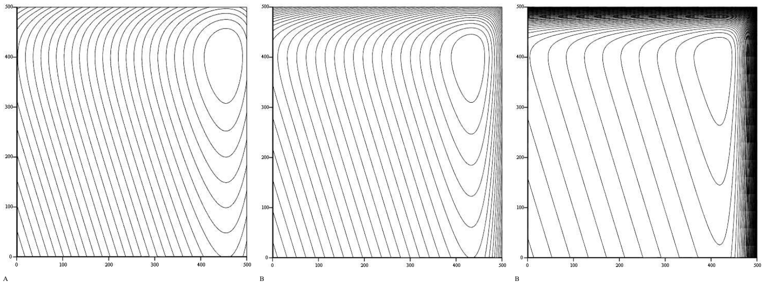


Рис. 2.

На рис. 2 приведены системы изолиний вспомогательной функции для для задачи (2) при значениях коэффициента штрафа

$$\tau = 0.5\ ,\ \tau = 0.3\ \text{ и }\ \tau = 0.17\ .$$

Поскольку густота изолиний пропорциональна норме градиента, то данный рисунок наглядно демонстрирует увеличение "штрафа" за нарушение ограничений при $\tau \to +0$.

Таким образом, решение задачи математического программирования

$$\begin{aligned} &\textit{найти максимум } F(x) \text{ по } x \in E^n, \\ &\textit{при условиях: } f_i(x) \le 0, \ \forall i = [1, m] \end{aligned} \qquad (3)$$

сводится к максимизации вспомогательной функции

$$A(\tau, x) = F(x) - \sum_{i=1}^{m} P(\tau, f_i(x))$$

без каких-либо ограничений.

Элемент $\overline{x}(\tau)$, на котором вспомогательная функция $A(\tau, x)$ достигает своего максимума, является приближенным решением задачи (3), причем величина погрешности будет стремиться к нулю при $\tau \to +0$.

Иначе говоря, в силу (1), для *любой* числовой последовательности положительных чисел $\{\tau_k\} \to +0$ при $k \to +\infty$, $k \in N$, будут выполняться предельные равенства:

$$\lim_{k \to +\infty} A(\tau_k, \overline{x}(\tau_k)) = F(x^*),$$
$$\lim_{k \to +\infty} \overline{x}(\tau_k) = x^*,$$

где $\overline{x}(\tau_k)$ – экстремальный по x элемент функционала $A(\tau, x)$ при фиксированном, положительном значении параметра $\tau = \tau_k$.

Если достаточно гладкая штрафная функция удовлетворяет также и неравенствам

$$\frac{\partial P}{\partial s} > 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial^2 P}{\partial s^2} > 0 \quad \forall s,$$

то, можно показать, что указанные предельные соотношения равносильны условиям

$$\begin{aligned} &\lim_{\tau \to +0} A(\tau, \bar{x}(\tau)) = F(x^*), \\ &\lim_{\tau \to +0} \bar{x}(\tau) = x^*. \end{aligned} \tag{4}$$

Если $A(\tau, x)$ достаточно гладкая в E^n функция, имеющая при фиксированном $\tau > 0$ изолированную точку локального максимума $\bar{x}(\tau)$, то неявно заданная *функция* $\bar{x}(\tau)$ определяется равенством:

$$\operatorname{grad}_x A(\tau, \bar{x}(\tau)) = o \quad (5)$$

Координатное представление последнего равенства будет иметь вид:

$$\frac{\partial A}{\partial \xi_k} = 0 \qquad \forall k = [1, n],$$

Проблема сходимости

Отмеченную выше проблему погрешности можно, казалось бы, легко решить, используя (4), то есть, полагая значение коэффициента штрафа в процедуре максимизации вспомогательной функции достаточно малым.

Однако, следующий пример наглядно демонстрирует возникающие при этом осложнения.

Пусть требуется решить задачу математического программирования:

найти минимум $F(x) = \xi_1^2 + 2\xi_2^2 + 3\xi_3^2$ *по* $\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\}$,
при условиях:

$$\begin{aligned} 2\xi_1 + \xi_2 &= 3, \\ \xi_1 + 3\xi_3 &= 4. \end{aligned} \qquad (6).$$

Как было сказано, метод штрафных функций заключается в замене исходной задачи на поиск условного экстремума последовательностью задач без ограничений, экстремальные элементы которых сходятся к решению исходной задачи.

Функцию штрафа выберем $P(\tau,s)=\dfrac{s^2}{2\tau}$, тогда вспомогательный функционал для рассматриваемой демонстрационной задачи будет иметь вид

$$A(\tau,x)=\xi_1^2+2\xi_2^2+3\xi_3^2+\frac{(2\xi_1+\xi_2-3)^2}{2\tau}+\frac{(\xi_1+3\xi_3-4)^2}{2\tau}.$$

Соответственно, условия его стационарности по $\{\xi_1,\xi_2,\xi_3\}$ на элементе $\bar{x}(\tau)$ будут

$$\begin{cases} \dfrac{\partial A}{\partial \xi_1}=2\bar{\xi}_1+\dfrac{2(2\bar{\xi}_1+\bar{\xi}_2-3)}{\tau}+\dfrac{\bar{\xi}_1+3\bar{\xi}_3-4}{\tau}=0, \\ \dfrac{\partial A}{\partial \xi_2}=4\bar{\xi}_2+\dfrac{2\bar{\xi}_1+\bar{\xi}_2-3}{\tau}=0, \\ \dfrac{\partial A}{\partial \xi_3}=6\bar{\xi}_3+\dfrac{3(\bar{\xi}_1+3\bar{\xi}_3-4)}{\tau}=0 \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} (5+2\tau)\overline{\xi}_1 + 2\overline{\xi}_2 + 3\overline{\xi}_3 = 10, \\ 2\overline{\xi}_1 + (1+4\tau)\overline{\xi}_2 = 3, \\ \overline{\xi}_1 + (3+\tau)\overline{\xi}_3 = 4. \end{cases} \qquad (7)$$

Отметим, что переход к пределу при $\tau \to +0$ здесь невозможен, ибо в этом случае основная матрица системы выродится.

Более того, чем меньше значение положительного параметра штрафа τ, тем ближе к нулю детерминант основной матрицы этой системы и тем значительнее вычислительные затруднения при ее решении – в первую очередь необходимость повышения точности вычислений, например, при использовании теоремы Крамера или метода Гаусса.

Преодолеть эти затруднения можно, используя формулу Тейлора. Из системы линейных уравнений (7) найдем $\overline{\xi}_1(\tau)$, подставив выражения для $\overline{\xi}_2(\tau)$ и $\overline{\xi}_3(\tau)$ через $\overline{\xi}_1(\tau)$ в первое уравнение. Тогда

$$(5+2\tau)\overline{\xi}_1 + 2\frac{3-2\overline{\xi}_1}{1+4\tau} + 3\frac{4-\overline{\xi}_1}{3+\tau} = 10\ ,$$

что для $\overline{\xi}_1(\tau)$ дает

$$\overline{\xi}_1(\tau) = \frac{\frac{80}{3}\tau + o(\tau)}{\frac{56}{3}\tau + o(\tau)} \qquad \text{или} \qquad \overline{\xi}_1(\tau) = \frac{10 + \frac{o(\tau)}{\tau}}{7 + \frac{o(\tau)}{\tau}} = \frac{10}{7} + \frac{o(\tau)}{\tau}\ .$$

И вот теперь, переходя к пределу при $\tau \to +0$, получаем, что $\xi_1^* = \frac{10}{7}$. Аналогично находим, что $\xi_2^* = \frac{1}{7}$ и $\xi_3^* = \frac{6}{7}$.

Линейная экстраполяция

Чтобы оценить порядок величины вносимой погрешности рассмотрим разложение функции $\bar{x}(\tau)$ по формуле Тейлора в окрестности некоторого $\tau > 0$ до $\mathrm{o}(\Delta\tau)$:

$$\bar{x}(\tau + \Delta\tau) = \bar{x}(\tau) + \frac{\partial \bar{x}}{\partial \tau}\Delta\tau + \mathrm{o}(\Delta\tau),$$

из которого следует оценка при $\Delta\tau \to -\tau$ сверху:

$$\bar{x}(0) = \bar{x}(\tau) - \frac{\partial \bar{x}}{\partial \tau}\tau + \mathrm{o}(\tau). \tag{8}$$

Последнее соотношение означает, что погрешность метода по порядку малости будет совпадать с τ при условии, что вектор-функция $\bar{x}(\tau)$ непрерывно дифференцируема по τ.

С другой стороны, вектор-функция $\dfrac{\partial \bar{x}}{\partial \tau}\tau$ в формуле (8) может рассматриваться как корректирующая поправка, уменьшающая порядок погрешности, вносимой методом гладких штрафных функций. Компоненты этой вектор-функции являются решением следующей системы линейных уравнений:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 A}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \frac{\partial \bar{\xi}_i}{\partial \tau} = -\frac{\partial^2 A}{\partial \xi_j \partial \tau} \qquad \forall j = [1, n],$$

получаемой дифференцированием соотношений (5) по параметру τ.

Метод квазибарьерных функций

Будем считать, что решаемая задача математического программирования по-прежнему имеет вид

$$\begin{aligned} &\textit{найти максимум } F(x) \text{ по } x \in E^n, \\ &\textit{при условиях}: \quad f_i(x) \le 0 \quad \forall i = [1, m] \end{aligned}$$

Напомним идею *метода штрафных функций*, в котором из целевой функции $F(x)$ вычитается функция $P(\tau, s)$, являющаяся "штрафом" за нарушение ограничения вида $s \le 0$. Эффект штрафа обеспечивается тем, что $P(\tau, s)$ удовлетворяет при каждом фиксированном значении s предельному соотношению

$$\lim_{\tau \to +0} P(\tau, s) = \begin{cases} 0\,, & s < 0, \\ +\infty\,, & s > 0. \end{cases}$$

При этом поиск максимума вспомогательной функции осуществляется при *фиксированном* положительном значении параметра τ, однако его значение можно менять и использовать τ как регулятор меры штрафа за "единицу нарушения ограничения".

Тогда исходная задача математического программирования сводится к максимизации вспомогательная функция $A(\tau, x)$

$$A(\tau, x) = F(x) - \sum_{i=1}^{m} P\big(\tau, f_i(x)\big)\ .$$

Если $A(\tau,x)$ достаточно гладкая в E^n функция, имеющая при фиксированном $\tau>0$ изолированную точку локального максимума $\bar{x}(\tau)$, то эта точка определяется равенством:

$$\operatorname{grad}_x A(\tau,\bar{x}(\tau)) = o\,,$$

координатное представление которого будет иметь вид:

$$\frac{\partial A}{\partial \xi_k}(\tau,\bar{x}(\tau)) = 0 \qquad \forall k=[1,n]\,.$$

В этом случае

$$\lim_{\tau\to+0} A(\tau,\bar{x}(\tau)) = F(x^*), \qquad \lim_{\tau\to+0} \bar{x}(\tau) = x^*,$$

что позволяет использовать $A(\tau,\bar{x}(\tau))$ и $\bar{x}(\tau)$ как приближенные решения исходной задачи математического программирования.

Основой метода штрафных функций служит равенство

$$\lim_{\tau \to +0} P(\tau, s) = \begin{cases} 0\,, & s < 0, \\ +\infty\,, & s > 0. \end{cases}$$

Однако, оно является *достаточным, но не необходимым* элементом алгоритма.

На самом деле для предельных соотношений

$$\lim_{\tau \to +0} A(\tau, \overline{x}(\tau)) = F(x^*), \qquad \lim_{\tau \to +0} \overline{x}(\tau) = x^*,$$

необходимо выполнение равенства

$$\operatorname{grad}_x A(\tau, \overline{x}(\tau)) = o\ .$$

Последнее равенство можно получить и для функций $P(\tau, s)$, имеющих *конечные* предельные при $\tau \to +0$ значения, но удовлетворяющих условию

$$\lim_{\tau \to +0} \frac{\partial P}{\partial s}(\tau, s) = \begin{cases} 0\,, & s < 0, \\ +\infty\,, & s > 0. \end{cases}$$

Примером такой функции, называемой *квазибарьерной*, может послужить

$$P(\tau, s) = \begin{cases} -\tau(-s)^{\frac{1}{r}}\,, & s < 0, \text{ при } r > 1 \\ +\infty, & s > 0. \end{cases}$$

В качестве иллюстрации рассмотрим задачу:

$$\begin{array}{ll} \textit{максимизировать} & 3\,\xi, \\ \textit{при условии} & \xi \le 2 \end{array}$$

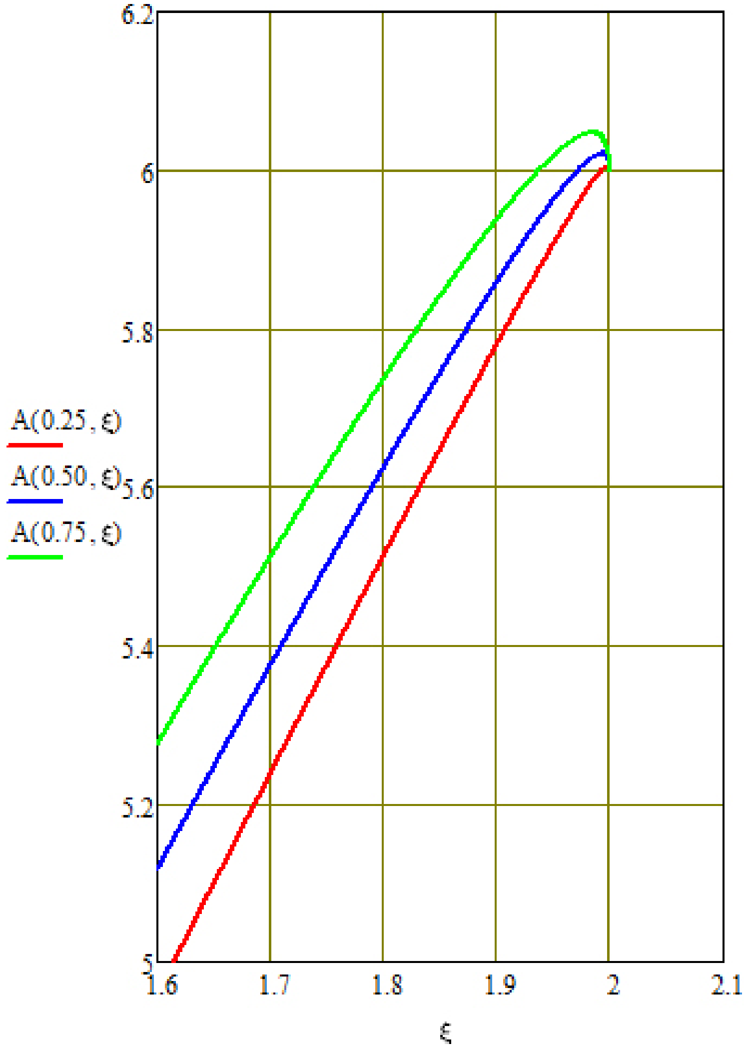
с квазибарьерной функцией $P(\tau, s) = -\tau\sqrt{-s}$

Здесь $s = -2 + \xi$ и вспомогательная функция будет иметь вид

$$A(\tau, \xi) = 3\xi + \tau\sqrt{2-\xi},$$

условие стационарности которой

$$\frac{\partial A}{\partial \xi} = 3 - \frac{\tau}{2\sqrt{2-\overline{\xi}}} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \overline{\xi}(\tau) = 2 - \frac{\tau^2}{36} \ .$$


6.2
6
5.8
5.6
5.4
5.2
5
1.6
1.7
1.8
1.9
2
2.1
ξ
A(0.25, ξ)
A(0.50, ξ)
A(0.75, ξ)