

МЕТОД ШТРАФНЫХ ФУНКЦИЙ

Неформальное описание метода

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

Этот метод в значительном числе случаев считается наиболее подходящим алгоритмом решения задач математического программирования. При этом он обладает рядом свойств, ограничивающих его применение.

Рассмотрим идею метода. Пусть решаемая задача математического программирования имеет вид

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

Мы будем также считать, что она имеет локальное решение в точке ξ^* со значением целевой функции $F(\xi^*) = F^*$.

Для данной задачи упомянутая вспомогательная функция, которую будем обозначать $A(\tau, x)$, выбирается равной целевой функции исходной задачи $F(x)$, из которой вычитаются m "штрафующих" функций $P(\tau, f_i(x))$ $i = [1, m]$.

"Штраф" состоит в том, что значение $P(\tau, f_i(x))$ близко к нулю, если ограничение $f_i(x) \leq 0$ не нарушено, но положительно и велико по модулю, если $f_i(x) > 0$.

При этом предполагается, что величина "штрафа" зависит от положительного параметра τ так, что

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

то есть значением τ можно регулировать величину "штрафа", налагаемого за нарушение ограничения вида $s \leq 0$ на величину s .

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

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

Пусть ее локальный максимум достигается в точке $\bar{\xi}(\tau)$, а сама вспомогательная функция имеет значение $\bar{A}(\tau, \bar{\xi}(\tau))$. При этом можно предположить, что будут справедливы соотношения

$$\lim_{\tau \rightarrow +0} \bar{A}(\tau, \bar{\xi}(\tau)) = F(\xi^*) \quad \text{и} \quad \lim_{\tau \rightarrow +0} \bar{\xi}(\tau) = \xi^* ,$$

которые аналитически формулируют суть метода штрафных функций.

Обоснованность этих предположений подтверждает следующий пример в E^1 .

$$\begin{array}{ll} \text{Максимизировать} & 2\xi, \\ \text{при условии} & \xi \leq 3 \end{array}$$

со штрафной функцией $P(\tau, s) = e^{\frac{s}{\tau}}$. Его решение очевидно: $\xi^* = 3$ и $F(\xi^*) = 2\xi^* = 6$.

В данном примере $n = 1$, $m = 1$ и $f_1(x) = \xi - 3$. Поэтому

$$A(\tau, \xi) = 2\xi - e^{\frac{\xi-3}{\tau}}.$$

Максимум этой вспомогательной функции при фиксированном $\tau > 0$ достигается в точке $\bar{\xi}(\tau) = 3 - \tau \ln 2\tau$ и равен

$$\bar{A}(\tau, \bar{\xi}) = 6 - 2\tau \ln \frac{2\tau}{e}.$$

Для двух последних формул справедливость предельных переходов

$$\lim_{\tau \rightarrow +0} \bar{\xi}(\tau) = \xi^* \quad \text{и} \quad \lim_{\tau \rightarrow +0} \bar{A}(\tau, \bar{\xi}(\tau)) = F(\xi^*)$$

легко проверяется.

Графики функций $P(\tau, s) = e^{\frac{s}{\tau}}$ и $A(\tau, \xi) = 2\xi - e^{\frac{\xi-3}{\tau}}$ для нескольких значений параметра τ , наглядно иллюстрирующие эффект "штрафа", показаны соответственно на рис. 1 и рис. 2.

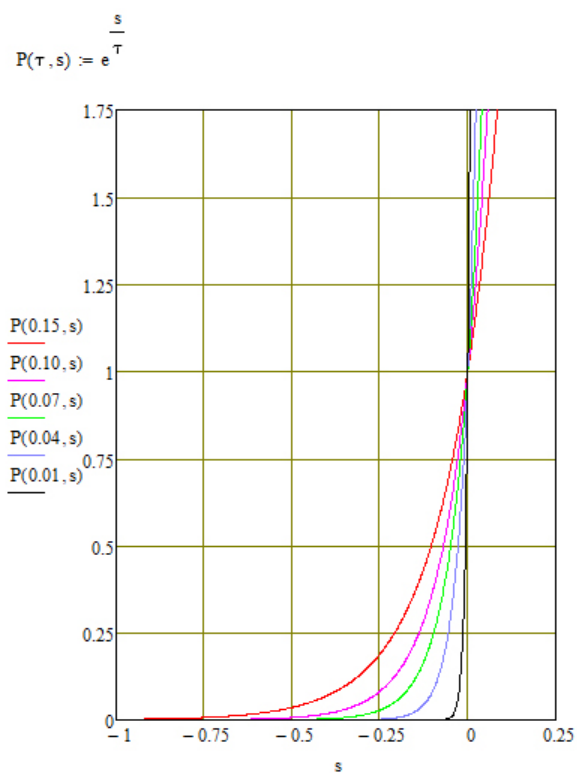


Рис. 1

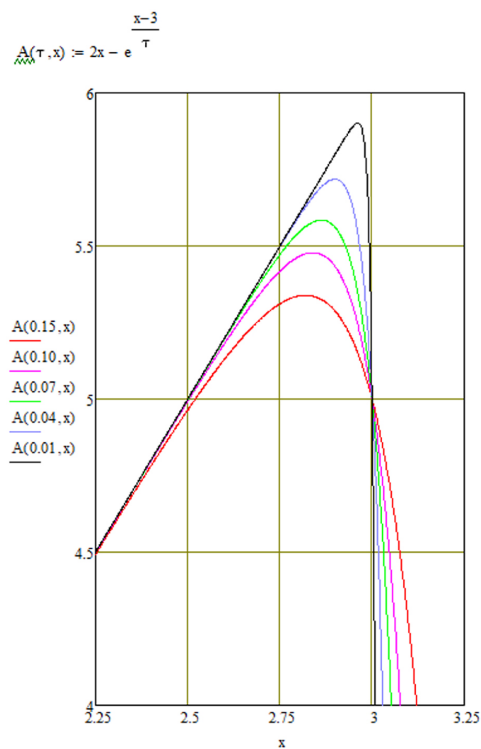


Рис. 2

Отметим, что поиск максимума вспомогательной функции выполняется при *фиксированном* значении параметра τ .

Этот поиск дает приближенное решение задачи. Однако значение параметра τ можно уменьшать (по модулю) и, используя равенства

$$\lim_{\tau \rightarrow +0} \bar{\xi}(\tau) = \xi^* \quad \text{и} \quad \lim_{\tau \rightarrow +0} \bar{A}(\tau, \bar{\xi}(\tau)) = F(\xi^*),$$

получать решения исходной задачи с требуемой точностью.

Понятно, что для корректного использования метода штрафных функций необходимо определить, какие свойства функций $F(x)$, $f_i(x) \leq 0 \quad i = [1, m]$ и $P(\tau, s)$ гарантируют справедливость всех этих утверждений.

Предварительно приведем некоторые вспомогательные сведения о методе штрафных функций, иллюстрирующие его возможности.

Штрафные функции могут быть разными. Их примерами могут служить

$$P(\tau, s) = \frac{(s + |s|)^2}{8\tau} = \begin{cases} 0 & s \leq 0, \\ \frac{s^2}{2\tau} & s > 0, \end{cases}$$

$$P(\tau, s) = \begin{cases} -\tau \ln(-s) & s < 0, \\ +\infty & s \geq 0, \end{cases}$$

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

Или же, использованная в рассмотренном примере $P(\tau, s) = \exp\left(\frac{s}{\tau}\right)$.

Графики второй и третьей из них показаны на рис. 3 и на рис 4 для различных значений параметра τ .

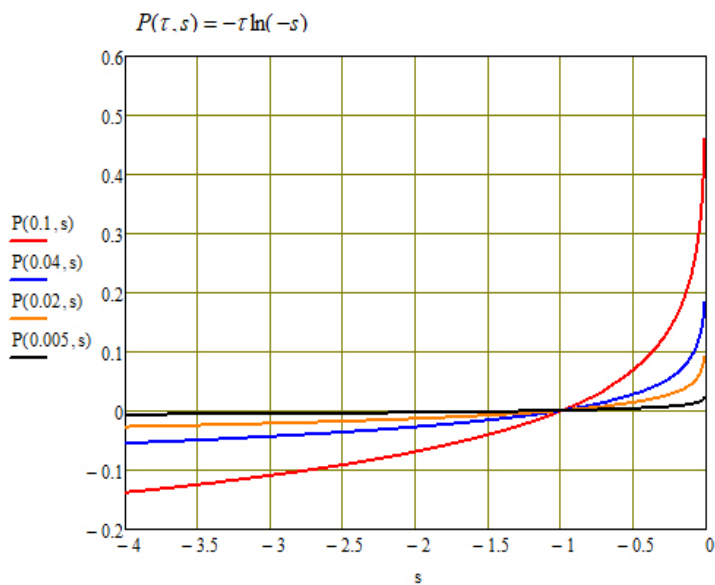


Рис. 3.

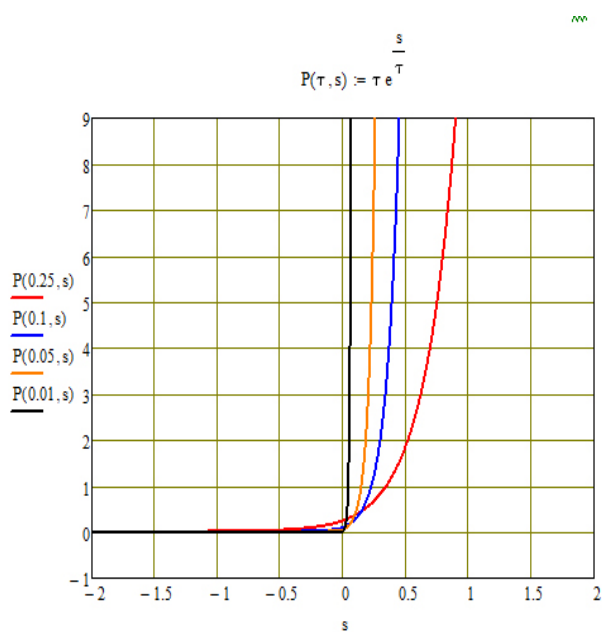


Рис. 4.

Рассмотрим теперь примеры использования метода штрафных с разными видами штрафа.

Вначале для задачи

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

используем часто применяемую в вычислительной практике *квадратичную* функцию штрафа $P(\tau, s) = \frac{(s + |s|)^2}{8\tau}$.

Решение методом штрафных функций в аналитической форме для этой задачи невозможно, однако для его оценки допустимо использование графиков вспомогательной функции

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

которые при различных значениях τ показаны для этой задачи на рис. 5.

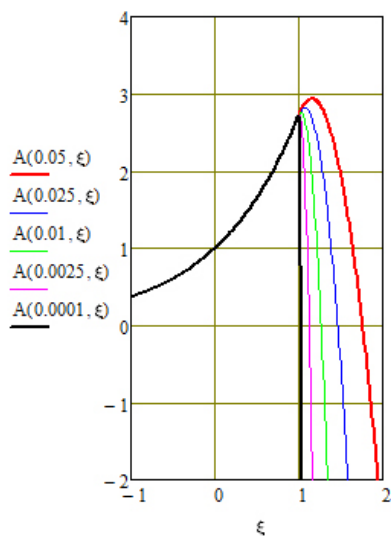


Рис. 5.

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

$$\begin{aligned} &\text{максимизировать } (\xi - 1)^2, \\ &\text{при условии } 0 \leq \xi \leq 3 \end{aligned}$$

$$\text{со штрафной функцией } P(\tau, s) = \frac{(s + |s|)^2}{8\tau}$$

В этой задаче штрафную функцию удобнее записать в такой форме

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

тогда

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

График вспомогательной функции $A(\tau, \xi)$ при $\tau = 0.01$ для этой задачи показан на рис. 6.

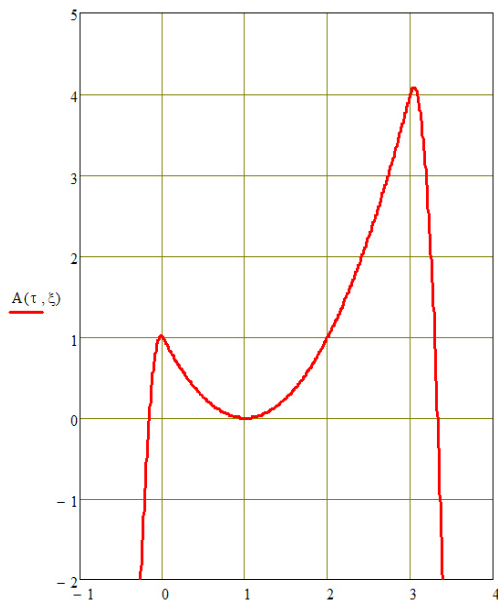


Рис. 6

и задачу

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

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

Здесь вспомогательная функция будет иметь вид

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

график которой показан на рис. 7.

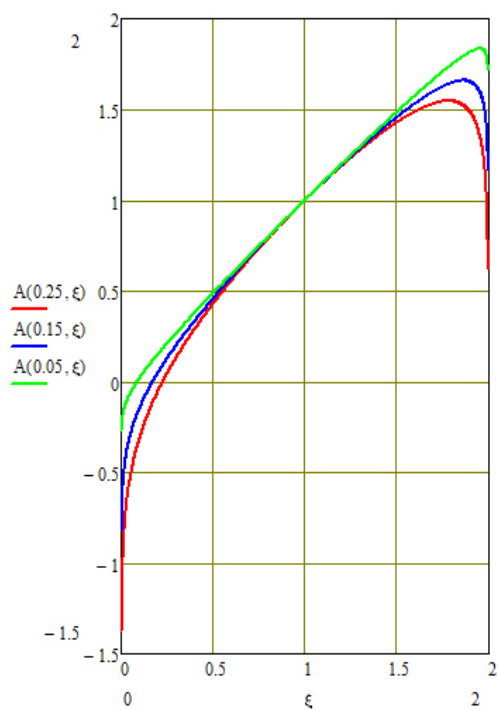


Рис.7

Гладкие штрафные функции

Рассмотрим теперь метод штрафных функций в случае, когда функции $F(x)$, $f_i(x) \leq 0 \quad i = [1, m]$ и $P(\tau, s)$ являются *дважды непрерывно дифференцируемыми* по всем своим аргументам. Для краткости этот вариант метода штрафных функций будем называть методом *гладких штрафных функций*.

Мы установили, что решение задачи математического программирования

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

сводится к максимизации вспомогательной функции

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

без каких-либо ограничений.

Вектор-функция $\bar{x}(\tau)$, на которой вспомогательная функция $A(\tau, x)$ достигает своего максимума, является приближенным решением задачи (1), причем величина погрешности будет стремиться к нулю при $\tau \rightarrow +0$.

Мы будем предполагать, что используемая штрафная функция удовлетворяет неравенствам

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

Тогда можно показать, что в достаточно малой окрестности решения задачи (1) будут справедливы предельные соотношения

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow +0} A(\tau, \bar{x}(\tau)) &= F(x^*), \\ \lim_{\tau \rightarrow +0} \bar{x}(\tau) &= x^*. \end{aligned} \tag{2}$$

Можно также доказать, что, если вспомогательная функция $A(\tau, x)$ имеет при фиксированном $\tau > 0$ изолированную точку локального максимума $\bar{x}(\tau)$, то неявно заданная *вектор-функция* $\bar{x}(\tau)$, согласно теореме о системе неявных функций, определяется векторным уравнением

$$\text{grad}_x A(\tau, \bar{x}(\tau)) = 0. \quad (3)$$

Его координатное представление будет иметь вид системы уравнений

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

Проблема обусловленности

Уравнение (3) оказывается аналитически разрешимым лишь в исключительных случаях. Поэтому для его решения приходится использовать численные методы.

При этом возникает так называемая *проблема обусловленности*. Поясним суть этой проблемы на следующем примере.

Рассмотрим задачу: найти максимум $3\xi_1 + 2\xi_2$ на $\{\xi_1, \xi_2\} \in E^2$,
при условиях:
$$\begin{cases} \xi_1 \leq 2, \\ \xi_2 \leq 1. \end{cases} \quad (4)$$

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

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

Условия стационарности этой функции в точке $\|\bar{X}\| = \left\| \begin{pmatrix} \bar{\xi}_1 \\ \bar{\xi}_2 \end{pmatrix} \right\|$ имеют вид

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial \bar{\xi}_1} = 3 - e^{\frac{\bar{\xi}_1 - 2}{\tau}} = 0, \\ \frac{\partial A}{\partial \bar{\xi}_2} = 2 - e^{\frac{\bar{\xi}_2 - 1}{\tau}} = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Откуда удастся аналитически найти, что

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

и, следовательно,

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

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 .

Заметим, что, если использовать численный метод решения системы (4), например, используя линейную тейлоровскую аппроксимацию, то потребовалось бы решать систему линейных уравнений

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 A}{\partial \xi_i \partial \xi_j} d\xi = -\frac{\partial^2 A}{\partial \xi_j \partial \tau} d\tau \quad \forall j = [1, n]. \quad (5)$$

Основная матрица этой системы есть матрица Гессе для вспомогательной функции $A(\tau, \xi_1, \xi_2)$. Конкретно, для рассматриваемого примера эта система имеет следующий матричный вид

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau} e^{\frac{\xi_1 - 2}{\tau}} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\tau} e^{\frac{\xi_2 - 1}{\tau}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\xi_1 \\ d\xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{d\tau}{\tau^2} e^{\frac{\xi_1 - 2}{\tau}} \\ -\frac{d\tau}{\tau^2} e^{\frac{\xi_2 - 1}{\tau}} \end{pmatrix},$$

где, согласно теореме Тейлора, $d\tau$ есть малое положительное число.

Проблема обусловленности состоит в том, что детерминант основной матрицы стремится к бесконечности, хотя система (5) очевидно имеет конечные решения. И это не случайность, в "врожденное" свойство метода штрафных функций.

Заметьте, что в рассмотренных ранее одномерных примерах все вспомогательные функции при любом положительном τ имеют производные *любого* порядка. В то время как *предельная* функция, к которой $A(\tau, x)$ сходится поточечно при $\tau \rightarrow +0$, хотя и непрерывна, но *недифференцируема*. В двумерном случае для примера (4) это свойство иллюстрирует рис. 8.

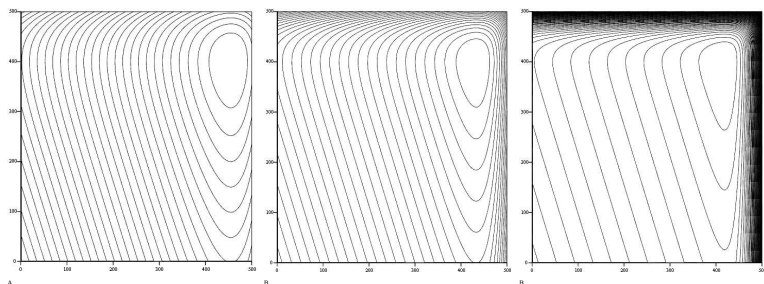


Рис. 8.

На рис. 8 приведены *системы изолиний* вспомогательной функции 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 $\tau \rightarrow +0$.

Раскрытие возникающей в методе штрафных функций неопределенности выполняется в задаче (4) очевидным образом лишь потому, что для нее удалось найти решение в аналитической форме.

Отмеченную выше проблему можно, казалось бы, легко преодолеть и в общем случае, 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:

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

В этой задаче ограничения типа "равенство", поэтому функцию штрафа выберем $P(\tau, s) = \frac{s^2}{2\tau}$. 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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial A}{\partial \xi_1} = 2\bar{\xi}_1 + \frac{2(2\bar{\xi}_1 + \bar{\xi}_2 - 3)}{\tau} + \frac{\bar{\xi}_1 + 3\bar{\xi}_3 - 4}{\tau} = 0, \\ \frac{\partial A}{\partial \xi_2} = 4\bar{\xi}_2 + \frac{2\bar{\xi}_1 + \bar{\xi}_2 - 3}{\tau} = 0, \\ \frac{\partial A}{\partial \xi_3} = 6\bar{\xi}_3 + \frac{3(\bar{\xi}_1 + 3\bar{\xi}_3 - 4)}{\tau} = 0 \end{array} \right.$$

или

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

Отметим, что переход к пределу при $\tau \rightarrow +0$ здесь невозможен, ибо тогда 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 $\bar{\xi}_1(\tau)$, подставив выражения для $\bar{\xi}_2(\tau)$ и $\bar{\xi}_3(\tau)$ через $\bar{\xi}_1(\tau)$ в первое уравнение. Тогда

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

что для $\bar{\xi}_1(\tau)$ даст

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

И вот теперь, переходя к пределу при $\tau \rightarrow +0$, получаем, что

$$\xi_1^* = \frac{10}{7}. \text{ Аналогично находим, что } \xi_2^* = \frac{1}{7} \text{ и } \xi_3^* = \frac{6}{7}.$$

Линейная экстраполяция

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

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

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

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

Последнее соотношение означает, что вектор $\bar{x}^+(0) = \bar{x}(\tau) - \frac{\partial \bar{x}}{\partial \tau} \tau$

можно принять за *уточненное* решение с погрешностью по порядку малости τ^2 при условии, что вектор-функция $\bar{x}(\tau)$ непрерывно дифференцируема по τ .

Иначе говоря, вектор-функция $\frac{\partial \bar{x}}{\partial \tau} \tau$ в формуле (8) может рассматриваться как корректирующая поправка, уменьшающая погрешность метода гладких штрафных функций *без уменьшения* значения параметра τ .

Значения производных в формуле коррекции являются решением следующей системы линейных уравнений:

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

получаемой дифференцированием соотношений (5) по параметру τ .

Барьерные и квазибарьерные штрафные функции

Мы видели, что на практике можно использовать варианты метода штрафных функций, в которых штрафуются не выход из допустимой области, а приближение к ее границе.

Примером может служить рассмотренная ранее *логарифмическая* штрафная функция (см. рис. 3)

$$P(\tau, s) = \begin{cases} -\tau \ln(-s) & s < 0, \\ +\infty & s \geq 0, \end{cases}$$

для которой также справедливы равенства (см. рис. 7)

$$\lim_{\tau \rightarrow +0} \bar{\xi}(\tau) = \xi^* \quad \text{и} \quad \lim_{\tau \rightarrow +0} \bar{A}(\tau, \bar{\xi}(\tau)) = F(\xi^*) \quad (9)$$

В этом случае $\frac{\partial P}{\partial s}(\tau, s) = \frac{\tau}{s}$ и расчеты несколько упрощаются по

сравнению с другими видами штрафных функций. Однако здесь существенным оказывается предположение о существовании непустой допустимой области исходной задачи (1).

Выполнения равенств (9) можно добиться и для функций $P(\tau, s)$, имеющих *конечные* предельные при $\tau \rightarrow +0$ значения, но удовлетворяющих условию

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

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:

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

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

Здесь $s = -2 + \xi$ и вспомогательная функция, графики которой показаны на рис. 9, будет иметь вид

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

С условием стационарности

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

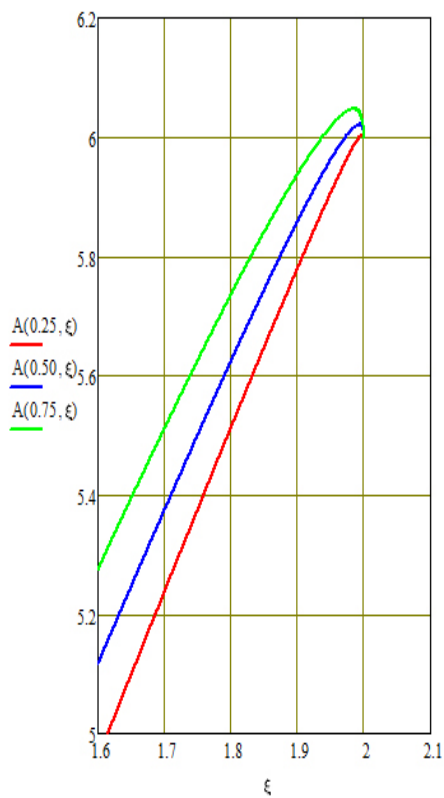


Рис. 9