МЕТОД 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 по прежнему имеет вид

найти максимум $F(x)$ по $x \in E^n$,

при условиях: $f_i(x) \le 0, \forall i = [1, m]$ (3)

Идея метода штрафных функций, сформулированная 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 $F(x)$, к которой добавлены слагаемые $P(\tau, f_i(x))$, "штрафующие" нарушение каждого из условий $f_i(x) \le 0$, $i = [1, m]$.

Механизм штрафа заключается в том, что эта добавка мала, если соответствующее ограничение не нарушено, но отрицательна и велика по модулю, если $f_i(x) > 0$, $i = [1, m]$ на элементе x.

При использовании метода штрафных функций предполагается, что добавка $P(\tau, s)$, где $\tau > 0$ – некоторый параметр[4], 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".

[4] Обычно $P(\tau, s)$ называют *штрафной функцией*, а параметр τ – *коэффициентом штрафа*.

Примерами штрафных функций могут служить

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

или

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

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 $\{\xi_1, \xi_2\} \in E^2$,

$$\text{\textit{при условиях}:} \begin{cases} \xi_1 \le 2, \\ \xi_2 \le 1. \end{cases} \tag{2}$$

В качестве штрафной функции (1) 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 на элементе $\|\bar{x}\| = \left\| \begin{matrix} \bar{\xi}_1 \\ \bar{\xi}_2 \end{matrix} \right\|$ которой:

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

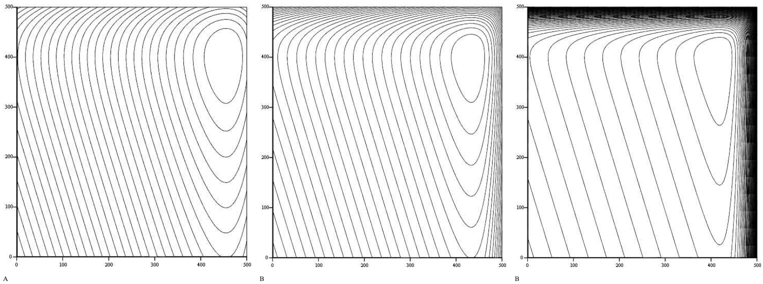
Откуда находим, что

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

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. 1.

На рис. 1 приведены системы изолиний вспомогательной функции для для задачи (2) при значениях коэффициента штрафа

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

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

Рис.2 иллюстрирует изменение вида вспомогательной функции (1) при уменьшении коэффициента штрафа.

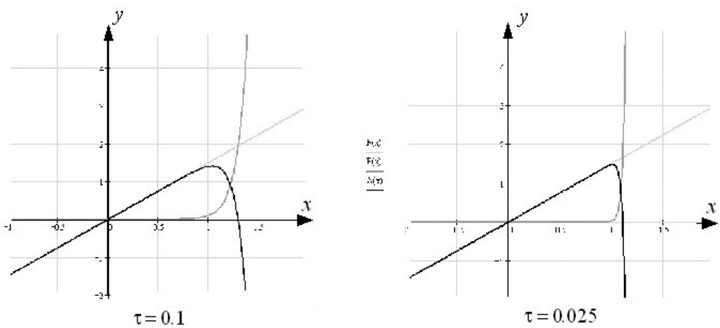


Рис. 2.

Таким образом, решение задачи математического программирования

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

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 $P(r,s)$ удовлетворяет также и неравенствам

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

то, можно показать, что, согласно определению предела по Гейне, данные 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 же $A(\tau, x)$ достаточно гладкий в E^n функционал, имеющий изолированный локальный экстремальный по x элемент, то неявно заданная *элемент-функция* $\bar{x}(\tau)$ определяется равенством:

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

Координатное представление последнего равенства будет иметь вид:

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

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:

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

Как было сказано, метод штрафных функций заключается в замене исходной задачи на условный экстремум 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 $\overline{x}(\tau)$ будут

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

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

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

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 $o(\Delta\tau)$:

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

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

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

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 $\frac{\partial \bar{x}}{\partial \tau}\tau$ 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:

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

получаемой дифференцированием соотношений (5) по параметру τ.

Связь с методом множителей Лагранжа

Из предположений о свойствах (в данном случае, непрерывной дифференцируемости) штрафной функции следует существование пределов

$$\lim_{\tau \to +0} \frac{\partial P(\bar{x}(\tau))}{\partial f_i}, \quad \forall i = [1, m].$$

Если теперь сопоставить условие (5), записанное в форме

$$\operatorname{grad} F(x) - \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial P}{\partial f_i} \right) \operatorname{grad} f_i = o$$

с утверждением теоремы Каруша–Куна–Таккера, то из предположения о существовании и единственности множителей Лагранжа

$$\lambda_i^*, \forall i = [1, m],$$

можно прийти к заключению, что для изолированного локального решения x^* справедливы следующие предельные соотношения:

$$\lim_{\tau \to +0} \frac{\partial P(\bar{x}(\tau))}{\partial f_i} = -\lambda_i^* \quad \forall i = [1, m] \tag{9}$$

Иначе говоря, пределы вида $\lim\limits_{\tau \to +0} \dfrac{\partial P(\bar{x}(\tau))}{\partial f_i}$ совпадают со значениями множителей Лагранжа на оптимальном элементе, когда последние существуют и единственны.

Следовательно, величины $\dfrac{\partial P(\bar{x}(\tau))}{\partial f_i}$ можно использовать для оценки величин множителей Лагранжа.

В качестве примера рассмотрим задачу, двойственную к задаче (2):

$$\textit{найти минимум } 2\lambda_1 + \lambda_2 \textit{, при условиях: } \begin{cases} \lambda_1 \geq 3, \\ \lambda_2 \geq 2, \end{cases}$$

решение которой $\begin{cases} \lambda_1^* = 3, \\ \lambda_2^* = 2, \end{cases}$ можно выразить также и при помощи предельных соотношений (9) и решения задачи (2).

$$\begin{cases} \lim\limits_{\tau \to +0} e^{\frac{\bar{\xi}_1(\tau) - 2}{\tau}} = 3, \\ \lim\limits_{\tau \to +0} e^{\frac{\bar{\xi}_2(\tau) - 1}{\tau}} = 2 \end{cases}$$

с экстремальным значением двойственного функционала

$$2\lambda_1^* + \lambda_2^* = 8.$$

Метод штрафных функций в задачах параметрического программирования

Рассмотрим задачу параметрического прогаммирования:

$$\begin{gathered} \textit{найти максимум } F(x,u) \text{ по } x \in E^n, \\ \textit{при условиях: } f_i(x,u) \le 0, \forall i = [1,m] \\ \textit{где } u \in \Omega \subseteq E^k. \end{gathered} \tag{10}$$

Обозначим решение этой задачи при фиксированном u как x_u^*. Как постановка, так и процедура решения задачи (10) *могут* осложняться следующими свойствами зависимости x_u^*.

1. Практической *невозможностью* (за исключением, быть может, некоторых тривиальных случаев) аналитического решения задачи (10)
2. Несовпадением в общем случае области определения зависимости x_u^* и множества Ω, поскольку система условий задачи (10 может оказаться *противоречивой* для некоторых $u \in \Omega \subseteq E^l$.
3. *Нефункциональностью* (неоднозначностью) зависимости x_u^* для тех $u \in \Omega \subseteq E^l$, при которых задача (10) имеет решение, но не единственное.
4. *Негладкостью* зависимости x_u^* , как следствия наличия ограничений типа неравенства в условии задачи (10).

Использование метода штрафных функций позволяет преодолевать указанные затруднения. Продемонстрируем это на следующем примере.

Максимизировать 3ξ при условиях $0 \le \xi \le u \quad \forall u \in \mathbf{R}$.

Построим вспомогательную функцию, использовав экспоненциальную штрафную функцию:

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

Условие стационарности по ξ для этой вспомогательной функции будет иметь вид

$$3 + e^{-\frac{\xi}{\tau}} - e^{\frac{\xi-u}{\tau}} = 0$$

что дает $$\bar{\xi}(\tau,u) = \tau \cdot \ln \frac{2}{\sqrt{9+4e^{-\frac{u}{\tau}}} - 3}.$$

Проверьте самостоятельно, что

1) при $u < 0 \quad \lim\limits_{\tau \to +0} \bar{\xi}(\tau,u) = \dfrac{u}{2}$,

2) при $u > 0 \quad \lim\limits_{\tau \to +0} \bar{\xi}(\tau,u) = u$

и дайте содержательную интерпретацию этого результата.