КОМПЬЮТЕРНАЯ МАТЕМАТИКА

Теория и методы оптимизации

УДК 519.85

Т.А. БАРДАДЫМ, Н.Г. ЖУРБЕНКО, А.В. ИВЛИЧЕВ, А.П. ЛИХОВИД

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ r-АЛГОРИТМА В МЕТОДЕ МОДИФИЦИРОВАННОЙ ФУНКЦИИ ЛАГРАНЖА ДЛЯ ЗАДАЧ С КРИТИЧЕСКИМИ МНОЖИТЕЛЯМИ

Приведены результаты численных экспериментов, связанных с критическими множителями Лагранжа в нерегулярных задачах оптимизации. Результаты показывают, что r-алгоритм Н.З. Шора обеспечивает необходимую точность решения задач безусловной оптимизации при использовании метода модифицированной функции Лагранжа.

Введение. Введенное сравнительно недавно понятие критических множителей Лагранжа детально исследовалось в [1–8]. Такие множители наблюдаются при нарушении условий регулярности в задачах условной оптимизации. Кроме теоретического интереса, который представляют свойства этих множителей, оказалось, что они могут существенно влиять на скорость сходимости вычислительных процедур. В частности, в [2, 8] приведено большое количество примеров, демонстрирующих эффект притяжения двойственных траекторий к критическим множителям Лагранжа. Использованные при этом вычислительные процедуры базируются на методе Ньютона. Цель данной работы – это проверка корректности использования *r*-алгоритма [9] для решения таких задач. Разумеется, использование *r*-алгоритма не устраняет проблему нерегулярности. Вопрос состоит лишь в следующем: обеспечивает ли *r*-алгоритм необходимую точность решения, достаточную для выявления факта наличия критических множителей.

В работе приведены результаты численных экспериментов по решению примеров вырожденных задач из коллекции [10], подготовленных в среде AMPL [11]. Это определило выбор программной реализации *r*-алгоритма: была использована программа AMPLRALG (авторы Н.Г. Журбенко, А.П. Лиховид), предназначенная для работы в указанной среде и доступная по ссылке [12].

Полученные результаты подтверждают эффект притяжения двойственных траекторий к критическим множителям Лагранжа.

Следуя [7], приведем определение критических множителей Лагранжа. Рассматривается задача математического программирования:

$$f(x)\to \min,\quad h(x)=0,\quad g(x)\le 0, \tag{1}$$

где $f: R^n \to R$ – дважды дифференцируемая функция, а $h: R^n \to R^l$ и $g: R^n \to R^m$ – дважды дифференцируемые отображения.

Точка $\bar{x}\in R^n$ называется стационарной точкой задачи (1), если существуют такие $\bar{\lambda}\in R^l$ и $\bar{\mu}\in R^m$, что тройка $(\bar{x},\bar{\lambda},\bar{\mu})$ удовлетворяет системе Каруша – Куна – Таккера (ККТ)

$$\frac{\partial L}{\partial x}(x,\lambda,\mu)=0,\qquad h(x)=0,\quad \mu\ge 0,\quad g(x)\le 0,\quad \langle \mu, g(x)\rangle = 0 \tag{2}$$

этой задачи. Здесь $L: R^n\times R^l\times R^m \to R$ – функция Лагранжа задачи (1):

$$L(x,\lambda,\mu)= f(x)+\langle \lambda, h(x)\rangle + \langle \mu, g(x)\rangle .$$

При этом пара $(\bar{\lambda},\bar{\mu})$ называется множителем Лагранжа, отвечающим стационарной точке $\bar{x}$. Множество таких пар будем обозначать $\mathcal{M}(\bar{x})$.

Определим $A(\bar{x})=\{i=1,\ldots,m \mid \langle \mu, g(x)\rangle = 0\}$ – множество номеров ограничений-неравенств задачи (1), активных в допустимой точке этой задачи. Введем также разбиение множества $A(\bar{x})$ на подмножества $A_+(\bar{\lambda},\bar{\mu})=\{i\in A(\bar{x}) \mid \bar{\mu}_i>0\}$, $A_0(\bar{\lambda},\bar{\mu})=\{i\in A(\bar{x}) \mid \bar{\mu}_i=0\}$ и обозначим также $N(\bar{x})=\{1,\ldots,m\}\setminus A(\bar{x})$.

Определение [7]. Множитель $(\bar{\lambda},\bar{\mu})\in\mathcal{M}(\bar{x})$, называется критическим, если существует набор $(\xi,\eta,\zeta)\in R^n\times R^l\times R^m$ такой, что $\xi\ne 0$, и выполнены соотношения

$$\begin{gathered}\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(\bar{x},\bar{\lambda},\bar{\mu})\xi+(h'(\bar{x}))^T\eta+(g'(\bar{x}))^T\zeta=0,\qquad h'(\bar{x})\xi=0,\qquad g'_{A_+(\bar{x},\bar{\mu})}(\bar{x})\xi=0,\\ \zeta_{A_0(\bar{x},\bar{\mu})}\ge 0,\quad g'_{A_0(\bar{x},\bar{\mu})}(\bar{x})\xi\le 0,\quad \zeta_i\langle g'_i(\bar{x}),\xi\rangle=0,\quad i\in A_0(\overline{x,\mu}),\quad \zeta_{N(\bar{x})}=0\end{gathered} \tag{3}$$

и некритическим в противном случае.

Несколько проще это понятие интерпретируется при отсутствии ограничений-неравенств: множитель $\bar{\lambda}\in\mathcal{M}(\bar{x})$ является критическим, если существует элемент $\xi\in\ker h'(\bar{x})\setminus\{0\}$ такой, что

$$\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(\bar{x},\bar{\lambda})\xi\in \operatorname{im}(h'(\bar{x}))^T .$$

При этом множитель $\bar{\lambda}$ будет некритическим, если для него выполнено достаточное условие оптимальности второго порядка:

$$\left\langle \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(\bar{x},\bar{\lambda})\xi,\ \xi\right\rangle > 0\quad \forall \xi\in\ker h'(\bar{x})\setminus\{0\}. \tag{4}$$

В работах [1–8] детально исследована связь между достаточными условиями оптимальности второго порядка, условиями регулярности ограничений и наличием критических множителей. Отмечается тенденция притяжения двойственных последовательностей к критическим множителям. При этом скорость сходимости в задачах с вырожденными ограничениями оказывается существенно хуже, чем теоретически обоснованная скорость сходимости для невырожденного случая.

Для численных экспериментов был взят алгоритм из работы [4], в которой рассматриваются возможные сценарии асимптотического поведения двойственных траекторий метода множителей в случаях неединственности множителей Лагранжа.

Определим семейство модифицированных функций Лагранжа задачи (1):

$$L_c(x,\lambda,\mu) = f(x) + \langle \lambda, h(x) \rangle + \frac{c}{2} \| h(x) \|^2 + \frac{1}{2c} \sum_{i=1}^{m} ((\max\{0, cg_i(x) + \mu_i\})^2 - \mu_i^2),$$

где $c > 0$ – параметр штрафа. Базовый вариант метода множителей состоит в следующем.

Алгоритм 1 [4]. Выбираем $(x^0, \lambda^0, \mu^0) \in R^n \times R^l \times R^m$, фиксируем $c_0 > 0$ и полагаем $k = 0$.

Шаг 1. Вычисляем $x^{k+1} \in R^n$ как стационарную точку задачи безусловной оптимизации

$$L_{c_k}(x,\lambda,\mu) \to \min, \qquad x^{k+1} \in R^n. \tag{5}$$

Шаг 2. Полагаем

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + c_k h(x^{k+1}), \quad \mu^{k+1} = \max\{0, \mu^k + c_k g(x^{k+1})\}, \tag{6}$$

где максимум берется покомпонентно.

Шаг 3. Выбираем $c_{k+1} \geq c_k$, увеличиваем номер итерации k на 1 и переходим к шагу 1.

Далее представлены результаты применения для решения подзадач (5) *r*-алгоритма Шора [9] для двух тестовых примеров. Первый тестовый пример ([1], пример 8) заимствован из коллекции DEGEN [10], в которой собраны тестовые примеры задач математического программирования с нерегулярными ограничениями. По ссылке [10] эти задачи доступны в виде моделей AMPL. Там же указано, в каких статьях использовался тот или иной пример. Второй тестовый пример взят из работы [2] (Example 3.4). Для этих примеров были реализованы AMPL-коды, реализующие алгоритм 1. В качестве солвера для решения подзадач (5) использовалась программная реализация *r*-алгоритма Н.З. Шора – программа AMPLRALG [12].

Пример 1 ([1], пример 8); ([10], модель 20203). Здесь $n = 2, l = 2, m = 0$, $f(x) = -x_1^2 - x_2^2$, $h(x) = (x_1^2 - x_2^2, x_1 x_2)$. Единственной допустимой точкой (а значит, и решением) задачи (1) является точка $\bar{x} = 0$, а критическими – множители, удовлетворяющие равенству $4\lambda_1^2 + \lambda_2^2 = 4$ (эллипс на рис. 1).

Начальная точка для метода множителей (модифицированных функций Лагранжа) выбиралась с помощью функции равномерного распределения системы AMPL из интервала [–10, 10]. На первой итерации значение коэффициента штрафа c выбиралось равным единице, а затем пересчитывалось по формуле $c = 2^k$, где k – номер итерации метода.

На 30-й итерации метод нашел решение с точностью $1.e-4$ по компонентам x, а двойственные переменные попали в окрестность точки $\lambda = (0,-2)$, которая является критическим множителем. Результаты эксперимента (рис. 1) демонстрируют, что двойственная траектория имеет две предельные точки: $\lambda = (0,-2)$ и $\lambda = (0,2)$, причем оба эти множителя являются критическими. В процессе вычислений наблюдались поочередные переходы из окрестности одной критической точки в другую. Такое поведение подтверждает отмеченный в ([1], пример 8) факт, что эти две точки обладают устойчивостью к исследованным возмущениям.

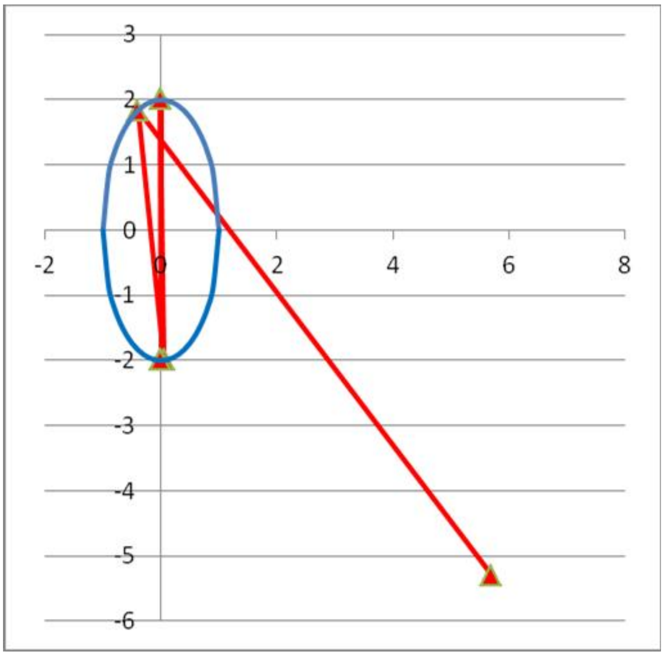

РИС. 1

Пример 2 (Example 3.4 [2]). Задано

$$n = 2, l = 0, m = 2, \quad f(x) = x_1,\ g(x) = (-x_1,\ (x_1 - 2)^2 + x_2^2 - 4).$$

Решением задачи (1) является точка $\bar{x} = 0$, а критическим множителем Лагранжа точка $\mu = (1,0)$; множество $\mathcal{M}(\bar{x})=\{\bar{\mu}_1 = 1 - 4\bar{\mu}_2,\ 0 \le \bar{\mu}_2 \le 1/4\}$.

Начальная точка x_0 для метода множителей (модифицированных функций Лагранжа) выбиралась с помощью функции равномерного распределения системы AMPL из интервала [–2, 2], начальная точка μ_1 – из интервала [0, 2], а начальная точка μ_2 – из интервала [0, 0.5]. На первой итерации значение коэффициента штрафа c выбиралось равным единице, а затем пересчитывалось по формуле $c = 2^k$, где k – номер итерации метода. Вычисления прекращались после 10 итераций метода.

На рис. 2 показаны результаты для различных начальных точек: для начальной точки $\mu_1 = 1$, $\mu_2 = 0.5$ двойственная траектория сошлась к решению, которое не является критическим множителем; аналогичная картина наблюдалась для начальной точки $\mu_1 = 0.8$, $\mu_2 = 0.25$.

А из начальных точек $\mu_1 = 1.43534$, $\mu_2 = 0.0544326$, $\mu_1 = 1.45534$ и $\mu_2 = 0.31000$ она сошлась к решению, которое является критическим множителем (1, 0) (две линии в правой части рис. 2). Такое поведение характерно и для других начальных точек, в которых $\mu_1 > 1$, $\mu_2 > 0$.

Аналогичные результаты получены также для примеров 20107.mod, 20204.mod, 20210.mod, 20302.mod, 20303.mod, 20304.mod, 20307.mod из коллекции вырожденных задач [10].

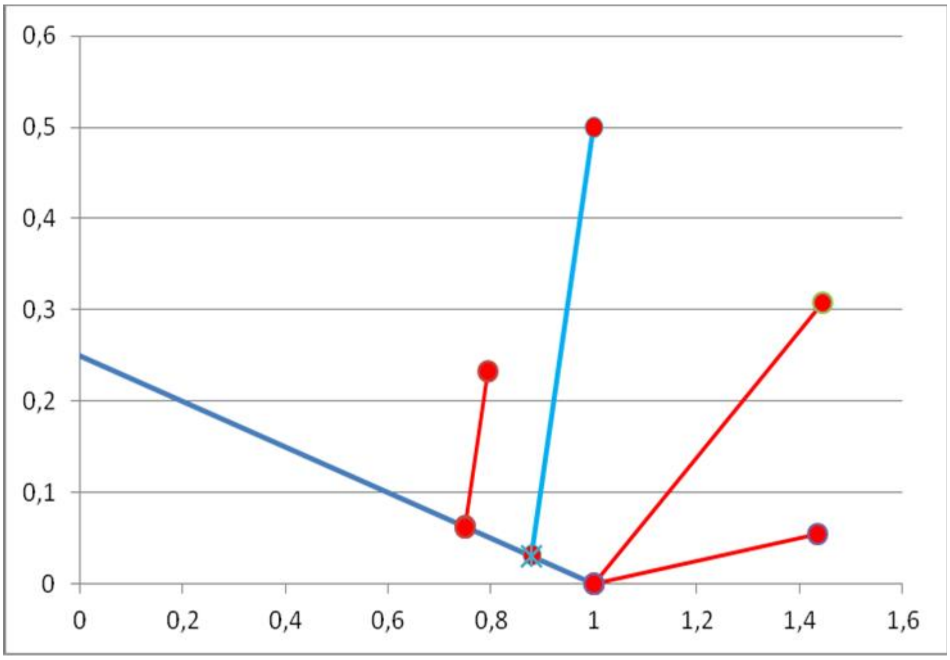

РИС. 2

Выводы. Результаты проведенных экспериментов демонстрируют, что при использовании метода модифицированной функции Лагранжа для решения вырожденных условных задач оптимизации r-алгоритм Н.З. Шора обеспечивает необходимую точность решения подзадач (5). Таким образом, r-алгоритм может использоваться для исследования траекторий поведения двойственных переменных в ситуации наличия критических множителей [1–8].

Работа выполнена при поддержке Volkswagen Foundation (грант N 90 306 – авторы Т.А. Бардадым, Н.Г. Журбенко, А.В. Ивличев) и НАН Украины (проект № 0116U004558, автор А.П. Лиховид).

ВИКОРИСТАННЯ r-АЛГОРИТМУ В МЕТОДІ МОДИФІКОВАНОЇ ФУНКЦІЇ ЛАГРАНЖА ДЛЯ ЗАДАЧ З КРИТИЧНИМИ МНОЖНИКАМИ

Наведено результати чисельних експериментів, пов’язаних з критичними множниками Лагранжа. Результати показують, що r-алгоритм Н.З. Шора забезпечує необхідну точність розв’язання задач безумовної оптимізації при використанні методу модифікованої функції Лагранжа.

T.O. Bardadym, M.G. Zhurbenko, A.V. Ivlichev, O.P. Lykhovyd

THE USE OF r-ALGORITHM IN THE AUGMENTED LAGRANGIAN METHOD FOR THE PROBLEMS WITH CRITICAL MULTIPLIERS

The results of numerical experiments related to critical Lagrange multipliers are reported. The results demonstrate that the r-algorithm of N.Z. Shor provides necessary accuracy for solving the unconstrained optimization problems using augmented Lagrangian method.

1. Измаилов А.Ф. Об аналитической и вычислительной устойчивости критических множителей Лагранжа. *Вычислительная математика и математическая физика*. 2005. Т. 45, № 6. С. 966 – 982.
2. Izmailov A.F., Solodov M.V. Examples of dual behaviour of Newton-type methods on optimization problems with degenerate constraints. *Comput. Optim. Appl.* 2009. Vol. 42. P. 231 – 264.
3. Izmailov A.F., Solodov M.V. On attraction of Newton-type iterates to multipliers violating second-order sufficiency conditions. *Math. Program.* 2009. Vol. 117. P. 271 – 304.
4. Измаилов А.Ф. О предельных свойствах двойственных траекторий метода множителей Лагранжа. *Вычислительная математика и математическая физика.* 2011. Т. 51, № 1. С. 3 – 23.
5. Izmailov A.F., Solodov M.V. On attraction of linearly constrained Lagrangian methods and of stabilized and quasi-Newton SQP methods to critical multipliers. *Math. Program*. 2011. Vol. 126. P. 231 – 257.
6. Izmailov A.F., Solodov M.V. Stabilized SQP revisited. *Math. Program*. 2012. Vol. 122, N 1. P. 93 – 120.
7. Измаилов А.Ф., Усков Е.И. О влиянии критических множителей Лагранжа на скорость сходимости метода множителей. *Вычислительная математика и математическая физика.* 2012. Т. 52, № 12. С. 1959 – 1975.

8. Izmailov A.F., Solodov M.V. Critical Lagrange multipliers: what we currently know about them, how they spoil our lives, and what we can do about it. *TOP*. 2015. Vol. 23, Issue 1. P. 1 – 26.
9. Шор Н.З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их применение. К.: Наук. думка, 1979. 200 с.
10. DEGEN Collection [Електронний ресурс]: http://w3.impa.br/~optim/DEGEN_collection.zip
11. Fourer R., Gay D.M., Kernighan B.W. AMPL: A Modeling Language for Mathematical Programing. Duxbury Press/Brookas/Cole Publishing Co., 2nd editiom, 2003. ([Електронний ресурс]: http://www.ampl.com/index.html)
12. AMPL-oriented programs of nonsmooth optimization, test problems, comparative analysis [Електронний ресурс]: http://www.incyb.kiev.ua/file/NonDiffOpt_Nurm/index_r.htm

Получено 27.10.2017

Об авторах:

Бардадым Тамара Алексеевна,
кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины,
E-mail: tbardadym@gmail.com

Журбенко Николай Георгиевич,
кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины,
E-mail: zhurbnick@gmail.com

Ивличев Андрей Владимирович,
аспирант
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины,
E-mail: ivlichev1990@gmail.com

Лиховид Алексей Петрович,
научный сотрудник
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины.