Метод штрафных функций для задач условной оптимизации

1 Постановка задачи

Рассматривается задача условной оптимизации вида

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} J(x) \quad \text{при условиях} \quad g_i(x) \le 0,\ i = 1,\dots,m, \qquad h_j(x) = 0,\ j = 1,\dots,p, \tag{1}$$

где $J(x)$ — целевая функция, $g_i(x)$ — неравенства, $h_j(x)$ — равенства. Обозначим допустимое множество

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n : g_i(x) \le 0,\ i = 1,\dots,m;\ h_j(x) = 0,\ j = 1,\dots,p\}.$$

2 Идея метода штрафных функций

Метод штрафных функций сводит задачу (1) к последовательности задач безусловной оптимизации:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} F(x,r) = J(x) + r\,\Phi(x), \tag{2}$$

где $r > 0$ — параметр штрафа, а $\Phi(x) \ge 0$ — штрафная функция, которая обращается в ноль на допустимом множестве и положительна вне его.

2.1 Штраф для неравенств

Для одного неравенства $g(x) \le 0$ типичный выбор:

$$\Phi(x) = \big(\max\{0, g(x)\}\big)^2. \tag{3}$$

Тогда:

$$g(x) \le 0 \ \Rightarrow\ \Phi(x) = 0, \qquad g(x) > 0 \ \Rightarrow\ \Phi(x) = g(x)^2.$$

Для нескольких неравенств обычно берут сумму:

$$\Phi(x) = \sum_{i=1}^{m} \big(\max\{0, g_i(x)\}\big)^2.$$

2.2 Штраф для равенств

Для равенства $h(x) = 0$ стандартный выбор:

$$\Phi(x) = h(x)^2, \tag{4}$$

и, аналогично, для нескольких равенств берут сумму квадратов.

3 Сходимость и связь с условиями оптимальности

Метод штрафа в рассматриваемой реализации относится к *внешним* штрафам: минимизация (2) может проводиться как из допустимых, так и из недопустимых точек, а рост r заставляет решения приближаться к Ω.

Замечание 1 (Интуиция)**.** *При фиксированном r задача* (2) *является обычной задачей безусловной оптимизации. При увеличении r любое нарушение ограничений становится всё дороже, и минимум $F(x,r)$ смещается к границе/внутрь допустимой области.*

Для задач с достаточно гладкими функциями при выполнении регулярности ограничений оптимальное решение $x^\star$ удовлетворяет условиям ККТ (Каруша–Куна–Таккера): существуют множители Лагранжа $\lambda_i \geq 0$ и μ_j такие, что

$$\nabla J(x^\star) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x^\star) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j \nabla h_j(x^\star) = 0, \tag{5}$$

$$g_i(x^\star) \leq 0, \quad h_j(x^\star) = 0, \quad \lambda_i \geq 0, \tag{6}$$

$$\lambda_i g_i(x^\star) = 0 \quad (i = 1, \ldots, m). \tag{7}$$

Методы штрафа являются одним из способов приближённо находить решения, удовлетворяющие (5)–(7), через последовательность безусловных задач.

4 Алгоритм (как реализовано в коде)

В коде используется следующая схема:

1. Задаётся начальная точка $x^{(0)}$, точность ε, начальный штраф r_0.
2. На k-й итерации решается безусловная задача:
$$x^{(k+1)} \in \arg\min_x \; F(x, r_k) = J(x) + r_k \Phi(x).$$
3. Проверяется критерий близости к ограничениям. В коде используется условие вида
$$|g(x^{(k+1)})| < \varepsilon$$
(для равенств аналогично).
4. Если критерий не выполнен, штраф увеличивается (геометрический рост): $r_{k+1} = 2r_k$.

Замечание 2 (Практический смысл параметров)**.** *Большие r сильнее «прижимают» к ограничениям, но делают задачу плохо обусловленной: минимум $F(x,r)$ становится узкой «канавкой» вдоль допустимого множества, и численной оптимизации сложнее. Поэтому штраф наращивают постепенно.*

5 Эксперименты и постановки

Далее рассматриваются три конкретные задачи (ровно те, что реализованы).

5.1 Задача 1: квадратичная функция и линейное неравенство

Постановка.

$$\min\ J(x,y) = x^2 + y^2 \quad \text{при} \quad -x - y + 1 \le 0 \quad (\Leftrightarrow x + y \ge 1).$$

Штраф:

$$\Phi(x,y) = \big(\max\{0,\, -x - y + 1\}\big)^2, \quad F(x,y;r) = x^2 + y^2 + r\,\Phi(x,y).$$

Геометрическая интерпретация. Линия $x+y=1$ является границей допустимой области $x+y \ge 1$. Минимизируется расстояние до начала координат, но точка $(0,0)$ недопустима, поэтому решение лежит на границе $x+y=1$ (минимальная норма при данном линейном ограничении).

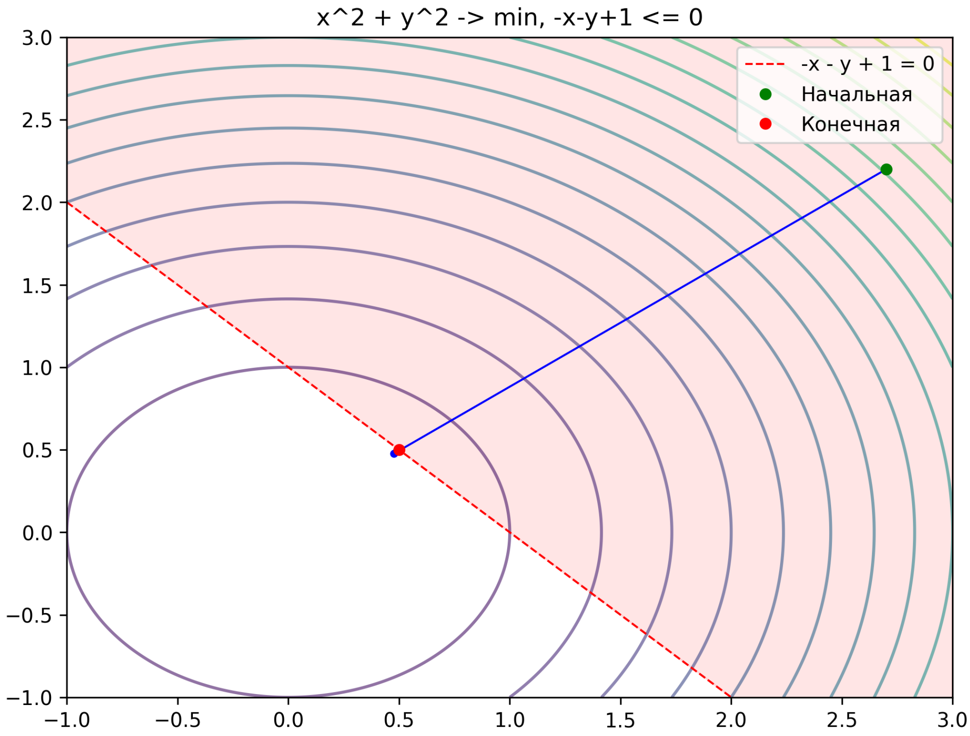

Рис. 1: Траектория метода штрафа для задачи 1: уровни x^2+y^2 и ограничение $x+y \ge 1$.

5.2 Задача 2: билинейная функция и ограничение окружностью

Постановка.

$$\min\ J(x,y) = xy \quad \text{при} \quad x^2 + y^2 = 25.$$

В коде ограничение задано как

$$g(x,y) = x^2 + y^2 - 25,$$

и применяется штраф квадрата (как для равенства, хотя в обозначениях использован g):

$$\Phi(x,y) = g(x,y)^2 = (x^2 + y^2 - 25)^2, \quad F(x,y;r) = xy + r(x^2 + y^2 - 25)^2.$$

Интуиция решения. На окружности радиуса 5 величина xy минимальна, когда x и y противоположных знаков и по модулю равны (точки близкие к направлению $(-1, 1)$). Это согласуется с параметризацией $x = 5\cos\theta$, $y = 5\sin\theta$, где $xy = \frac{25}{2}\sin(2\theta)$ минимально при $\sin(2\theta) = -1$.

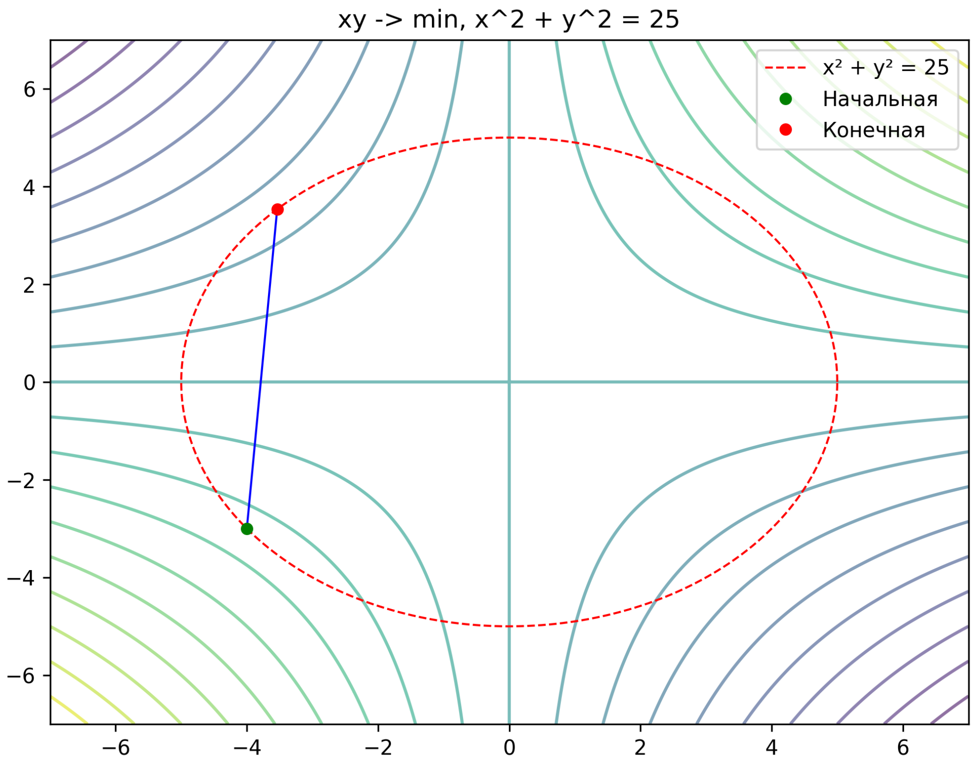

Рис. 2: Метод штрафа для задачи 2: уровни xy и ограничение $x^2 + y^2 = 25$.

5.3 Задача 3: негладкая долина и равенство $x = a$

Постановка.

$$\min\ J(x, y) = x^2 + (1 - xy)^2 \quad \text{при} \quad x = a.$$

Ограничение записано как $g(x, y) = x - a$, а штраф (как для равенства):

$$\Phi(x, y) = (x - a)^2, \quad F(x, y; r) = x^2 + (1 - xy)^2 + r(x - a)^2.$$

Комментарий. При фиксированном $x = a$ задача сводится к одномерной по y:

$$J(a, y) = a^2 + (1 - ay)^2,$$

и минимум по y достигается при $ay = 1$, то есть $y^\star = 1/a$.

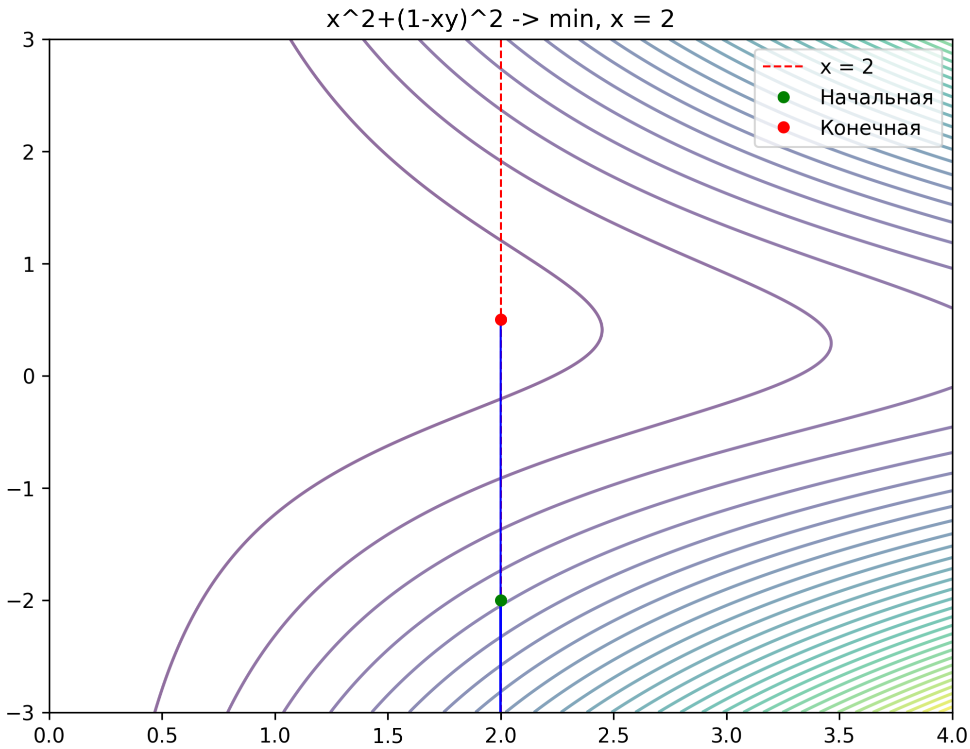

Рис. 3: Метод штрафа для задачи 3: уровни $x^2 + (1 - xy)^2$ и ограничение $x = a$.

6 Замечания к реализации

1. В задачах 1 и 2 используется «квадрат положительной части» $\big(\max(0, g)\big)^2$ для неравенств. Это создаёт негладкость по границе $g = 0$ (из-за max), но на практике для численных методов часто приемлемо.

2. В задаче 2 ограничение является равенством $x^2+y^2 = 25$, однако код применяет структуру как в неравенствах, но затем проверяет $|g(x)| < \varepsilon$. Фактически это штраф для равенства, и это корректно.

3. Остановка по условию $|g(x)| < \varepsilon$ является эвристикой. Более строгий критерий для неравенств: $\max(0, g(x)) < \varepsilon$.

4. Увеличение штрафа $r \leftarrow 2r$ даёт быстрый рост. Иногда полезно ограничивать r сверху или адаптивно выбирать шаг роста, чтобы не «сломать» численную оптимизацию.

7 Вывод

Метод штрафных функций превращает условную задачу в последовательность безусловных, добавляя штраф за нарушение ограничений. В экспериментах видно, что траектории итераций приближаются к допустимому множеству, а затем движутся вдоль него к точке минимума исходной задачи.