МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

ПОГОСЯН АРТУР ЛЕВОНОВИЧ

НЬЮТОНОВСКИЕ МЕТОДЫ ДЛЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ С РАСПАДАЮЩИМИСЯ ОГРАНИЧЕНИЯМИ

Специальность 01.01.09 — дискретная математика
и математическая кибернетика

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2011

Работа выполнена на кафедре исследования операций факультета вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, профессор **Измаилов Алексей Феридович.**
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, **Аваков Евгений Рачиевич;** кандидат физико-математических наук, **Карамзин Дмитрий Юрьевич.**
Ведущая организация:	**Российский университет дружбы народов** (г. Москва).

Защита диссертации состоится 28 октября 2011 г. в 11 ч. 00 мин. на заседании диссертационного совета Д 501.001.44 в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, 2-й учебный корпус, факультет ВМК, аудитория 685. Желающие присутствовать на заседании диссертационного совета должны сообщить об этом за два дня по тел. 939-30-10 (для оформления заявки на пропуск).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке факультета ВМК МГУ. С текстом автореферата можно ознакомиться на официальном сайте ВМК МГУ http://cs.msu.ru в разделе «Наука» – «Работа диссертационных советов» – «Д 501.001.44».

Автореферат разослан __ сентября 2011 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
профессор Н.П. Трифонов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Работа посвящена разработке численных методов ньютоновского типа для *задач оптимизации с комплементарными ограничениями* (ЗОКО) и для *задач оптимизации с исчезающими ограничениями* (ЗОИО), которые относятся к объемлющему их классу *задач оптимизации с распадающимися ограничениями.*

Актуальность темы. ЗОКО — относительно хорошо изученный класс трудных оптимизационных задач, который является важным частным случаем так называемых *задач оптимизации с равновесными ограничениями*[1, 2]. Приложения ЗОКО чрезвычайно разнообразны; к ним относятся, например, *двухуровневые задачи оптимизации*[3] (в частности, так называемые игры Штакельберга), задачи нахождения оптимальной формы упругопластических балочных (стержневых) конструкций[4], и др. ЗОИО — новый класс трудных оптимизационных задач[5], привлекающий в последнее время все большее внимание специалистов. Наиболее известным приложением ЗОИО являются задачи нахождения оптимального дизайна топологий механических структур. Задачи рассматриваемых классов проблематичны для анализа и численного решения из-за неизбежной нерегулярности их ограничений, и поэтому для них требуются специальная теория и специальные численные методы. Существуют численные подтверждения высокой эффективности и робастности традиционных методов последовательного квадратичного программирования (ПКП) применительно к ЗОКО[6]. Однако, легко привести примеры, удовлетворяю-

[1] Luo Z.-Q., Pang J.-S., Ralph D. Mathematical programs with equilibrium constraints. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1996.

[2] Outrata J.V., Kocvara M., Zowe J. Nonsmooth approach to optimization problems with equilibrium constraints: Theory, applications and numerical results. Boston: Kluwer Acad. Publ., 1998.

[3] Dempe S. Foundations of bilevel programming. New York, Boston, Dordrecht, Moscow: Kluwer Academic Publishers, 2002.

[4] Ferris M.C., Tin-Loi F. On the solution of a minimum weight elastoplastic problem involving displacement and complementarity constraints // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 1999. V. 174, № 1–2.. P. 108–120.

[5] Achtziger W., Kanzow C. Mathematical programs with vanishing constraints: optimality conditions and constraint qualifications // Math. Program. 2007. V. 114, № 1. P. 69–99.

[6] Fletcher R., Leyffer S. Solving mathematical programs with equilibrium constraints as nonlinear programs // Optim. Methods Softw. 2004. V. 19. P. 15–40.

щие всем естественным в контексте ЗОКО условиям, для которых метод ПКП не будет обладать локальной сверхлинейной сходимостью[7]. Поэтому разработка специальных алгоритмов, учитывающих структуру задач рассматриваемых типов и имеющих гарантированные свойства сходимости и высокой скорости сходимости, является актуальной проблемой.

Таким образом, проблематика данной работы актуальна как в теоретическом плане, так и с точки зрения потенциальных практических приложений.

Целью диссертационной работы является построение эффективных численных методов решения ЗОКО и ЗОИО.

Предмет и объект исследования. Объектом исследования в диссертационной работе являются ЗОКО и ЗОИО. Предмет исследования — построение эффективных численных методов решения задач указанных классов.

Методы исследования. При выполнении диссертационного исследования использовались средства нелинейного анализа, современного негладкого анализа, теории оптимизации, а также методы и подходы современной численной оптимизации.

Научная новизна. В работе уточнены полученные ранее[8] необходимые условия первого и второго порядков оптимальности для ЗОИО в плане ослабления используемых условий регулярности. Предложены новые поднятые переформуировки ЗОКО и ЗОИО, которые обладают меньшей гладкостью, чем использовавшаяся ранее подобная переформулировка для ЗОКО[9], но при этом обладают лучшими свойствами регулярности. Разработаны новые ньютоновские методы для поднятых задач, а также новые методы активного множества для ЗОИО, использующие структуру рассматриваемых задач и обладающие глобальной сходимостью и сверхлинейной скоростью сходимости.

[7]Izmailov A.F., Solodov M.V. On attraction of Newton-type iterates to multipliers violating second-order sufficiency conditions // Math. Program. 2009. V. 117. P. 271–304.

[8]Izmailov A.F., Solodov M.V. Mathematical programs with vanishing constraints: optimality conditions, sensitivity, and a relaxation method // J. Optim. Theory Appl. 2009. V. 142, № 3. P. 501–532.

[9]Stein O. Lifting mathematical programs with complementarity constraints // Math. Program., 2010. DOI 10.1007/s10107-010-0345-y.

Достоверность полученных в диссертации результатов обусловлена строгостью математических доказательств, использованием апробированных научных методов и средств, и подтверждается результатами вычислительного эксперимента.

Теоретическая и практическая значимость работы. В отличие от традиционных методов нелинейного программирования, разработанные в диссертации методы обладают теоретически обоснованной глобальной сходимостью и сверхлинейной скоростью сходимости в естественных для ЗОКО и ЗОИО предположениях. Вычислительный эксперимент демонстрирует преимущества разработанных специальных методов перед оптимизационными алгоритмами общего назначения на указанных классах задач. Таким образом, разработанные методы могут быть полезными для решения многочисленных прикладных задач, моделируемых как ЗОКО или ЗОИО.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности. В диссертации проведено исследование сложных оптимизационных задач и разработаны методы для их решения, что соответствует паспорту специальности 01.01.09.

Апробация результатов. Результаты, полученные в диссертации, докладывались и обсуждались на VIII всемирном конгрессе по структурной и междисциплинарной оптимизации «WCSMO-8» (Лиссабон, Португалия, 2009), ежегодных научных конференциях «Ломоносовские чтения» (Москва, 2009, 2010), ежегодных научных конференциях «Тихоновские чтения» (Москва, 2009, 2010), 52-ом симпозиуме «Нелинейная оптимизации, вариационные неравенства и равновесные задачи» (Эриче, Италия, 2010), VI Московской международной конференции по исследованию операций «ORM2010» (Москва, 2010), ежегодных международных научных конференциях студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2010», «Ломоносов-2011» (Москва, 2010, 2011), на VIII конгрессе международного общества анализа, его приложений и вычислений «ISAAC» (Москва, 2011).

Кроме того, результаты обсуждались на семинаре кафедры исследования операций факультета ВМК МГУ.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 11 работ, список которых приведен в конце автореферата. В число указанных работ входят статьи [1]–[4], опубликованные в журналах из списка ВАК РФ. Кроме того, результаты диссертации содержатся еще в одной статье в журнале из списка ВАК [12] и в одной статье в сборнике ВЦ РАН [13], которые находятся в печати.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, двух приложений, заключения и списка литературы, включающего 73 наименования. Общий объем диссертации 149 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении приведены постановки ЗОКО и ЗОИО, приведены некоторые приложения рассматриваемых типов задач, обоснована актуальность исследования, описана методика исследования, коротко изложено содержание диссертационной работы, отражена научная новизна работы, сформулированы основные положения, выносимые на защиту, и приведена информация об апробации результатов.

Первая глава посвящена теоретическому анализу ЗОКО и ЗОИО.

В разд. 1.1 приводятся необходимые теоретические сведения о ЗОКО

$$f(x) \to \min, \quad G(x) \geq 0, \quad H(x) \geq 0, \quad \langle G(x),\, H(x) \rangle = 0, \tag{1}$$

где $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — гладкая функция, а $G,\, H\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^s$ — гладкие отображения. Ограничения задачи (1) могут также включать в себя «обычные» равенства и неравенства. Такое обобщение не вызывает серьезных дополнительных трудностей и в работе не рассматривается. Развивается техника сведения задач указанного типа к так называемым поднятым задачам оптимизации с обычными гладкими ограничениями-равенствами

$$f(x) \to \min, \quad (\min\{0,\, y\})^2 - G(x) = 0, \quad (\max\{0,\, y\})^2 - H(x) = 0, \tag{2}$$

где $y \in \mathbb{R}^s$ — дополнительная переменная, а также устанавливаются связи поднятых задач с исходными. Заметим, что ограничения задачи (2) дифференцируемы лишь один раз.

В разд. 1.2 приводятся необходимые теоретические сведения о ЗОИО

$$f(x) \to \min, \quad h(x) = 0, \quad g(x) \le 0,$$
$$H_i(x) \ge 0, \quad G_i(x)H_i(x) \le 0, \quad i = 1, \ldots, s, \tag{3}$$

где $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — гладкая функция, а $h\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^l$, $g\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, $G,\ H\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^s$ — гладкие отображения. А именно, приводятся условия регулярности, концепции стационарности, а также уточняются некоторые условия первого и второго порядков оптимальности (в плане ослабления используемых условий регулярности). Предлагается способ сведения задач указанного типа к поднятым задачам оптимизации с обычными ограничениями-равенствами и неравенствами

$$f_c(x,\, y) = f(x) + \sum_{i=1}^{s} \left((\max\{0,\, y_i\})^4 - c(\max\{0,\, y_i\})^2 \right) \to \min,$$
$$h(x) = 0, \quad g(x) \le 0, \tag{4}$$
$$(\min\{0,\, y\})^2 - H(x) = 0, \quad G(x) - (\max\{0,\, y\})^2 \le 0,$$

где $y \in \mathbb{R}^s$ — дополнительная переменная, а $c > 0$ играет роль параметра штрафа. Устанавливаются связи поднятых задач с исходными.

Результаты главы 1 опубликованы в работах [1, 2, 3, 10].

Вторая глава посвящена разработке обобщенных (полугладких) ньютоновских методов для задач оптимизации с распадающимися ограничениями, а именно, разработке полугладкого метода Ньютона для поднятой ЗОКО и разработке полугладких методов ПКП для поднятой ЗОКО и поднятой ЗОИО.

В разд. 2.1 для решения ЗОКО (1) предлагается полугладкий метод Ньютона для следующей системы Лагранжа поднятой ЗОКО (2):

$$\frac{\partial L}{\partial x}(x,\, y,\, \lambda) = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial y}(x,\, y,\, \lambda) = 0,$$
$$(\min\{0,\, y\})^2 - G(x) = 0, \quad (\max\{0,\, y\})^2 - H(x) = 0, \tag{5}$$

где $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^s$, $\lambda = (\lambda_G,\, \lambda_H) \in \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s$,

$$\frac{\partial L}{\partial x}(x,\, y,\, \lambda) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}(x,\, \lambda),$$

$$\frac{\partial L}{\partial y_i}(x,\, y,\, \lambda) = 2(\lambda_G)_i \min\{0,\, y_i\} + 2(\lambda_H)_i \max\{0,\, y_i\}, \quad i = 1, \ldots, s.$$

Здесь

$$\mathcal{L}(x,\, \lambda) = f(x) - \langle \lambda_G,\, G(x)\rangle - \langle \lambda_H,\, H(x)\rangle$$

— *ЗОКО-функция Лагранжа* задачи (1) в точке $(x,\, \lambda)$, а

$$L(x,\, y,\, \lambda) = f(x) + \langle \lambda_G,\, (\min\{0,\, y\})^2 - G(x)\rangle + \langle \lambda_H,\, (\max\{0,\, y\})^2 - H(x)\rangle$$

— функция Лагранжа поднятой ЗОКО (2) в точке $(x,\, y,\, \lambda)$. Полугладкий метод Ньютона для системы (5) заключается в решении на каждой итерации линейной системы

$$\Lambda_k(u - u^k) = -\Phi(u^k), \quad \Lambda_k \in \partial_B \Phi(u^k),$$

где в произвольной точке $u = (x,\, y,\, \lambda) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \times (\mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s)$ отображение $\Phi\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \times (\mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s) \to \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s$ определяется формулой

$$\Phi(u) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}(x,\, \lambda) \\ \dfrac{\partial L}{\partial y}(x,\, y,\, \lambda) \\ (\min\{0,\, y\})^2 - G(x) \\ (\max\{0,\, y\})^2 - H(x) \end{pmatrix}, \tag{6}$$

а $\partial_B \Phi(u)$ — так называемый B-дифференциал[10] отображения Φ в точке u, который состоит из всех матриц вида

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2}(x,\, \lambda) & 0 & -(G'(x))^T & -(H'(x))^T \\ 0 & 2A(y,\, \lambda) & 2B_{\min}(y) & 2B_{\max}(y) \\ -G'(x) & 2B_{\min}(y) & 0 & 0 \\ -H'(x) & 2B_{\max}(y) & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь $A(y,\, \lambda) = \operatorname{diag}(a(y,\, \lambda))$,

$$B_{\min}(y) = \operatorname{diag}(\min\{0,\, y\}), \quad B_{\max}(y) = \operatorname{diag}(\max\{0,\, y\}), \tag{7}$$

а вектор $a(y,\, \lambda) \in \mathbb{R}^s$ определяется следующим образом:

$$a_i = \begin{cases} (\lambda_G)_i, & \text{если } y_i < 0, \\ (\lambda_G)_i \text{ или } (\lambda_H)_i, & \text{если } y_i = 0, \\ (\lambda_H)_i, & \text{если } y_i > 0, \end{cases} \qquad i = 1,\, \ldots,\, s. \tag{8}$$

[10]Измаилов А.Ф., Солодов М.В. Численные методы оптимизации. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Физматлит, 2008.

Под $\mathrm{diag}(u)$ понимается диагональная $s \times s$-матрица с диагональю u, где $u \in \mathbb{R}^s$.

Для рассматриваемого метода обоснована локальная сверхлинейная сходимость. Проведен сравнительный анализ локальных свойств сходимости разработанного метода с некоторыми альтернативными методами для ЗОКО. Кроме того, осуществлена глобализация сходимости локального полугладкого метода Ньютона, основанная на одномерном поиске для квадрата невязки $\varphi\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \times (\mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s) \to \mathbb{R}$,

$$\varphi(u) = \frac{1}{2}\|\Phi(u)\|_2^2,$$

системы Лагранжа (5) поднятой ЗОКО (2), и обоснованы свойства глобальной сходимости полученного метода.

В разд. 2.2 для решения ЗОКО (1) предлагается полугладкий метод ПКП и его специальная квазиньютоновская версия для поднятой ЗОКО (2), учитывающая структуру этой задачи. Полугладкий метод ПКП для поднятой ЗОКО (2) локально совпадает с полугладким методом Ньютона для этой задачи и состоит в решении на каждом шаге задачи квадратичного программирования

$$\begin{gathered}
\langle f'(x^k),\, x - x^k\rangle + \frac{1}{2}\left\langle \mathcal{H}_k \begin{pmatrix} x - x^k \\ y - y^k \end{pmatrix},\, \begin{pmatrix} x - x^k \\ y - y^k \end{pmatrix} \right\rangle \to \min, \\
(\min\{0,\, y^k\})^2 - G(x^k) - G'(x^k)(x - x^k) + 2B_{\min}(y^k)(y - y^k) = 0, \\
(\max\{0,\, y^k\})^2 - H(x^k) - H'(x^k)(x - x^k) + 2B_{\max}(y^k)(y - y^k) = 0,
\end{gathered}$$

где $\mathcal{H}_k$ — симметричная $(n+s) \times (n+s)$-матрица.

В базовом методе ПКП матрица $\mathcal{H}_k$ выбирается как матрица Гессе функции Лагранжа решаемой задачи. Однако, в данном случае такой выбор невозможен, поскольку ограничения задачи (2) дифференцируемы лишь один раз. Вместе с тем, производные целевой функции и ограничений этой задачи являются полугладкими, и поэтому базовый выбор матрицы $\mathcal{H}_k$ заменяется следующим:

$$\mathcal{H}_k \in (\partial_B)_{(x,\, y)} \frac{\partial L}{\partial(x,\, y)}(x^k,\, y^k,\, \lambda^k),$$

где в правой части стоит B-дифференциал градиентного отображения $(x,\, y) \to \dfrac{\partial L}{\partial (x,\, y)}(x,\, y,\, \lambda^k) : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \to \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s$. Непосредственными вычислениями можно показать, что $(\partial_B)_{(x,y)} \dfrac{\partial L}{\partial (x,\, y)}(x^k,\, y^k,\, \lambda^k)$ состоит из всех матриц вида

$$\mathcal{H}_k = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2}(x^k,\, \lambda^k) & 0 \\ 0 & 2\,\mathrm{diag}(a(y^k,\, \lambda^k)) \end{pmatrix}, \tag{9}$$

где для $y \in \mathbb{R}^s$ и $\lambda = (\lambda_G,\, \lambda_H) \in \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s$ вектор $a(y,\, \lambda)$ определен в (8).

Однако, матрицы $\mathcal{H}_k$, вычисленные согласно (9), не обязательно будут положительно определены, и их непосредственное использование при глобализации сходимости вряд ли возможно. Значит, матрицы $\mathcal{H}_k$ должны быть соответствующим образом модифицированы. Можно использовать стандартные квазиньютоновские аппроксимации для матриц $\mathcal{H}_k$, однако эти аппроксимации разрушают полезную диагональную структуру в (9). Более того, в негладком случае стандартные квазиньютоновские аппроксимации, вообще говоря, могут разрушать и локальную сверхлинейную скорость сходимости метода ПКП. Поэтому наиболее разумным представляется сохранение и использование специальной структуры поднятой ЗОКО (2). Идея состоит в том, чтобы использовать стандартные квазиньютоновские формулы только для $\dfrac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2}(x^k,\, \lambda^k)$ в (9), а элементы $a(y^k,\, \lambda^k)$ при необходимости заменять положительными числами, причем так, чтобы вся матрица $\mathcal{H}_k$ была положительно определенной и асимптотически возмущение диагонали $a(y^k,\, \lambda^k)$ исчезало. А именно, будем переопределять $\mathcal{H}_k$ следующим образом:

$$\mathcal{H}_k = \begin{pmatrix} H_k & 0 \\ 0 & 2\,\mathrm{diag}(a^k_{\max}) \end{pmatrix},$$

где H_k — некоторая симметричная положительно определенная аппроксимация матрицы Гессе $\dfrac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2}(x^k,\, \lambda^k)$ (скажем, по формуле Бройдена–Флетчера–Голдфарба–Шэнно (БФГШ) с модификацией Пауэлла[11]), а вектор

[11] Nocedal J., Wright S.J. Numerical optimization. New York, Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2006.

$a^k_{\max} \in \mathbb{R}^s$ определяется следующим образом:

$$(a^k_{\max})_i = \max\{a_i(y^k,\, \lambda^k),\, \rho(\sigma(x^k,\, y^k,\, \lambda^k))\}, \quad i = 1,\, \ldots,\, s.$$

Здесь для произвольной точки $(x,\, y,\, \lambda) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \times (\mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s)$ элементы $a_i(y,\, \lambda)$ определены в (8), $\rho : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ некоторая непрерывная функция такая, что $\rho(0) = 0$ и $\rho(t)$ отделено от 0 при t отделенных от 0, а $\sigma : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \times (\mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s) \to \mathbb{R}_+$ — невязка системы Лагранжа (5):

$$\sigma(x,\, y,\, \lambda) = \|\Phi(x,\, y,\, \lambda)\|,$$

где отображение Φ определено в (6).

Для полугладкого метода ПКП обосновывается локальная сверхлинейная сходимость в прямых и прямодвойственных переменных. Осуществляется глобализация сходимости данного метода за счет одномерного поиска для негладкой точной штрафной функции $\varphi_\beta : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$,

$$\varphi_\beta(x,\, y) = f(x) + \beta\psi(x,\, y),$$

где $\beta > 0$ — параметр штрафа, а $\psi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \to \mathbb{R}_+$,

$$\psi(x,\, y) = \left\| \begin{pmatrix} (\min\{0,\, y\})^2 - G(x) \\ (\max\{0,\, y\})^2 - H(x) \end{pmatrix} \right\|_1,$$

— l_1-штраф для ограничений задачи (2). Такая стратегия глобализации может выгодно сравниваться со стратегией глобализации, использующей невязку системы Лагранжа. В частности, глобализация, использующая штрафные функции, является более «оптимизационной» и должна иметь преимущества в смысле качества получаемого результата: эта стратегия имеет более слабую тенденцию притягиваться к неоптимальным стационарным точкам.

В разд. 2.3 для решения ЗОИО (3) предлагается полугладкий метод ПКП и его специальная квазиньютоновская версия для поднятых ЗОИО (4), учитывающая структуру этой задач. Полугладкий метод ПКП для поднятой ЗОИО (4) заключается в решении на каждом шаге задачи квадратичного программирования

$$\left\langle f_c'(x^k,\, y^k),\, \begin{pmatrix} x-x^k \\ y-y^k \end{pmatrix} \right\rangle + \frac{1}{2}\left\langle \mathcal{H}_k \begin{pmatrix} x-x^k \\ y-y^k \end{pmatrix},\, \begin{pmatrix} x-x^k \\ y-y^k \end{pmatrix} \right\rangle \to \min$$

$$h(x^k)+h'(x^k)(x-x^k)=0, \quad g(x^k)+g'(x^k)(x-x^k)\leq 0,$$

$$(\min\{0,\, y^k\})^2 - H(x^k) - H'(x^k)(x-x^k) + 2B_{\min}(y)(y-y^k) = 0,$$

$$G(x^k) - (\max\{0,\, y^k\})^2 + G'(x^k)(x-x^k) - 2B_{\max}(y)(y-y^k) \leq 0,$$

где $B_{\min}(y)$ и $B_{\max}(y)$ определены в (7),

$$f_c'(x^k,\, y^k) = (f'(x^k),\, 4(\max\{0,\, y^k\})^3 - 2c\max\{0,\, y^k\}).$$

Поскольку и целевая функция, и ограничения задачи (4) дифференцируемы лишь один раз, а их производные являются полугладкими, то базовый выбор матрицы $\mathcal{H}_k$ состоит в следующем:

$$\mathcal{H}_k \in (\partial_B)_{(x,\, y)} \frac{\partial L_c}{\partial(x,\, y)}(x^k,\, y^k,\, \lambda^k),$$

где для $x\in\mathbb{R}^n$, $y\in\mathbb{R}^s$ и $\lambda=(\lambda^h,\, \lambda^g,\, \lambda^H,\, \lambda^G)\in\mathbb{R}^l\times\mathbb{R}^m\times\mathbb{R}^s\times\mathbb{R}^s$

$$L_c(x,\, y,\, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^{s}\left((\max\{0,\, y_i\})^4 - c(\max\{0,\, y_i\})^2\right) + \langle\lambda^h,\, h(x)\rangle +$$
$$+\langle\lambda^g,\, g(x)\rangle + \langle\lambda^H,\, (\min\{0,\, y\})^2 - H(x)\rangle + \langle\lambda^G,\, G(x)-(\max\{0,\, y\})^2\rangle$$

— функция Лагранжа задачи (4). В данном случае B-дифференциал вычисляется явно и состоит из матриц вида

$$\mathcal{H}_k = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2\mathcal{L}}{\partial x^2}(x^k,\, \lambda^k) & 0 \\ 0 & 2\,\mathrm{diag}(a_c(y^k,\, \lambda^k)) \end{pmatrix}, \tag{10}$$

где

$$\mathcal{L}(x,\, \lambda) = f(x) + \langle\lambda^h,\, h(x)\rangle + \langle\lambda^g,\, g(x)\rangle - \langle\lambda^H,\, H(x)\rangle + \langle\lambda^G,\, G(x)\rangle$$

— *ЗОИО-функция Лагранжа* задачи (3) в точке $(x,\, \lambda)$, а для $y\in\mathbb{R}^s$ и $\lambda\in\mathbb{R}^l\times\mathbb{R}^m\times\mathbb{R}^s\times\mathbb{R}^s$

$$a_c(y,\, \lambda) = 6(\max\{0,\, y\})^2 + b_c(y,\, \lambda), \tag{11}$$

$$(b_c(y,\, \lambda))_i = \begin{cases} \lambda_i^H, & \text{если } y_i<0, \\ \lambda_i^H \text{ или } -\lambda_i^G - c, & \text{если } y_i=0, \\ -\lambda_i^G - c, & \text{если } y_i>0, \end{cases} \quad i=1,\, \ldots,\, s. \tag{12}$$

Заметим, что матрицы $\mathcal{H}_k$, вычисляемые согласно (10)–(12), положительно определенными могут не быть. Поэтому будем определять $\mathcal{H}_k$ следующим образом:

$$\mathcal{H}_k = \begin{pmatrix} H_k & 0 \\ 0 & 2\,\mathrm{diag}(a^k_{\min}) \end{pmatrix},$$

где H_k — симметричная положительно определенная $n \times n$-матрица, получаемая с помощью квазиньютоновских аппроксимаций (скажем, по формуле БФГШ с модификацией Пауэлла) $\dfrac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2}(x^k,\, \lambda^k)$, а вектор $a^k_{\min} \in \mathbb{R}^s$ вычисляется по формуле

$$(a^k_{\min})_i = \min\{\max\{(a_c(y^k,\, \lambda^k))_i,\, \rho(\sigma_c(x^k,\, y^k,\, \lambda^k))\},\, M\}, \quad i = 1,\, \ldots,\, s.$$

Здесь:

— $\rho\colon \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ — такая функция, что $\rho(t)$ отделено от нуля положительной константой при t отделенных от нуля, и $\rho(t) \to 0$ при $t \to 0+$;

— $\sigma_c\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \times (\mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^m_+ \times \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s_+) \to \mathbb{R}$ — некоторая невязка системы Каруша–Куна–Таккера (ККТ)

$$\begin{gathered}
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}(x,\, \lambda) = 0,\\
2(\max\{0,\, y_i\})^3 - c(\max\{0,\, y_i\}) + \\
+\lambda^H_i \min\{0,\, y_i\} - \lambda^G_i \max\{0,\, y_i\} = 0, \quad i = 1,\, \ldots,\, s,\\
h(x) = 0,\\
\lambda^g \geq 0, \quad g(x) \leq 0, \quad \langle \lambda^g,\, g(x) \rangle = 0,\\
(\min\{0,\, y\})^2 - H(x) = 0,\\
\lambda^G \geq 0, \quad G(x) - (\max\{0,\, y\})^2 \leq 0, \quad \langle \lambda^G,\, G(x) - (\max\{0,\, y\})^2 \rangle = 0
\end{gathered}$$

задачи (4), т.е. такая функция, которая обращается в ноль в точках, удовлетворяющих этой системе, и положительна в других точках;

— $M > 0$ — верхняя граница на элементы a^k, в качестве которой разумно брать «большое» число (наличие такой границы требуется при обосновании свойств глобальной сходимости, а для сохранения сверхлинейной скорости сходимости достаточно выполнения условия $M > 2c$).

Для этих методов обосновываются свойства локальной сверхлинейной сходимости в прямых и прямодвойственных переменных. Кроме того, осуществляется глобализация сходимости локального полугладкого квазиньютоновского метода ПКП посредством одномерного поиска для точной штрафной функции $\varphi_{c,\,\beta} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \to \mathbb{R}$,

$$\varphi_{c,\,\beta}(x,\,y) = f_c(x,\,y) + \beta\psi(x,\,y),$$

где $\beta > 0$ — параметр штрафа, а $\psi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \to \mathbb{R}$,

$$\psi(x,\,y) = \|h(x)\|_1 + \|(\min\{0,\,y\})^2 - H(x)\|_1 + \\ + \sum_{j=1}^{m} \max\{0,\,g_j(x)\} + \sum_{i=1}^{s} \max\{0,\,G_i(x) - (\max\{0,\,y_i\})^2\},$$

— l_1-штраф для ограничений задачи (4).

Результаты главы 2 опубликованы в работах [2, 3, 4, 6, 7, 8, 9].

В третьей главе для решения ЗОИО предлагаются ньютоновские методы активного множества. Обосновываются свойства локальной сверхлинейной сходимости этих методов. Кроме того, предлагаются две различные стратегии гибридной глобализации методов активного множества и обосновываются свойства глобальной сходимости полученных концептуальных алгоритмов. Приводятся три конкретные реализации разработанных алгоритмов с соответствующими уточнениями свойств сходимости.

В разд. 3.1 разрабатываются кусочный метод ПКП и методы активного множества. Кусочный метод ПКП для ЗОИО имеет в своей основе ту же общую идею, что и соответствующий метод для ЗОКО[12]. Идея состоит в том, чтобы идентифицировать любую кусочную задачу

$$f(x) \to \min, \quad h(x) = 0, \quad g(x) \le 0, \\ -H_{I_{0+} \cup I_2}(x) = 0, \quad -H_{I_1 \cup I_{0-}}(x) \le 0, \quad G_{I_{+0} \cup I_1}(x) \le 0,$$

отвечающую искомому решению $\bar{x}$ ЗОИО (3), и применить к этой задаче

[12]Ralph D. Sequential quadratic programming for mathematical programs with linear complementarity constraints // Computational Techniques and Applications: CTAC95. Singapore: World Scientific, 1996. P. 663–668.

метод ПКП. Здесь множества индексов определяются по формулам

$$
\begin{gathered}
I_+ = I_+(\bar{x}) = \{i = 1, \, \ldots, \, s \mid H_i(\bar{x}) > 0\}, \\
I_0 = I_0(\bar{x}) = \{i = 1, \, \ldots, \, s \mid H_i(\bar{x}) = 0\}, \\
I_{+0} = I_{+0}(\bar{x}) = \{i \in I_+ \mid G_i(\bar{x}) = 0\}, \\
I_{+-} = I_{+-}(\bar{x}) = \{i \in I_+ \mid G_i(\bar{x}) < 0\}, \\
I_{0+} = I_{0+}(\bar{x}) = \{i \in I_0 \mid G_i(\bar{x}) > 0\}, \\
I_{00} = I_{00}(\bar{x}) = \{i \in I_0 \mid G_i(\bar{x}) = 0\}, \\
I_{0-} = I_{0-}(\bar{x}) = \{i \in I_0 \mid G_i(\bar{x}) < 0\},
\end{gathered}
$$

а $(I_1, \, I_2)$ — произвольное разбиение множества I_{00}, такое, что $I_1 \cup I_2 = I_{00}$, $I_1 \cap I_2 = \emptyset$.

Локальная идентификация ветви допустимого множества не требует никаких затрат. А именно, достаточно идентифицировать такое разбиение $(J_1, \, J_2)$ множества $\{1, \, \ldots, \, s\}$, что

$$
I_{0+} \subset J_2, \quad I_+ \cup I_{0-} \subset J_1. \tag{13}
$$

Как только это будет сделано, можно определить кусочную задачу следующим образом:

$$
\begin{gathered}
f(x) \to \min, \quad h(x) = 0, \quad g(x) \leq 0, \\
-H_{J_2}(x) = 0, \quad -H_{J_1}(x) \leq 0, \quad G_{J_1}(x) \leq 0.
\end{gathered}
$$

Из определения множеств I_+, I_{0+} и I_{0-} очевидно следует, что для $x \in \mathbb{R}^n$, близкого к $\bar{x}$, разбиение $(J_1, \, J_2)$, удовлетворяющее (13), может быть идентифицировано, например, следующим образом:

$$
\begin{gathered}
J_1 = J_1(x) = \{i = 1, \, \ldots, \, s \mid G_i(x) < H_i(x)\}, \\
J_2 = J_2(x) = \{i = 1, \, \ldots, \, s \mid G_i(x) \geq H_i(x)\}.
\end{gathered}
$$

Кусочный метод ПКП для ЗОИО (3) заключается в решении на каждой итерации задачи квадратичного программирования

$$
\begin{gathered}
\langle f'(x^k), \, x - x^k \rangle + \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2}(x^k, \, \mu^k)(x - x^k), \, x - x^k \right\rangle \to \min, \\
h(x^k) + h'(x^k)(x - x^k) = 0, \quad g(x^k) + g'(x^k)(x - x^k) \leq 0, \\
-H_{J_2}(x^k) - H'_{J_2}(x^k)(x - x^k) = 0, \quad -H_{J_1}(x^k) - H'_{J_1}(x^k)(x - x^k) \leq 0, \\
G_{J_1}(x^k) + G'_{J_1}(x^k)(x - x^k) \leq 0,
\end{gathered}
$$

где для $x \in \mathbb{R}^n$ и $\mu = (\mu^h,\, \mu^g,\, \mu^H,\, \mu^G) \in \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s$

$$\mathcal{L}(x,\, \mu) = f(x) + \langle \mu^h,\, h(x)\rangle + \langle \mu^g,\, g(x)\rangle - \langle \mu^H,\, H(x)\rangle + \langle \mu^G,\, G(x)\rangle$$

— *ЗОИО-функция Лагранжа.*

Идея предлагаемых в диссертации методов активного множества для ЗОИО состоит в том, чтобы идентифицировать *суженную задачу математического программирования* (СЗМП)

$$\begin{gathered} f(x) \to \min, \quad h(x) = 0, \quad g(x) \le 0, \\ -H_{I_{0+}\cup I_{00}}(x) = 0, \quad -H_{I_{0-}}(x) \le 0, \quad G_{I_{+0}\cup I_{00}}(x) \le 0, \end{gathered} \tag{14}$$

отвечающую искомому решению, и применить к этой задаче метод ПКП, в котором на каждой итерации решается задача квадратичного программирования

$$\begin{gathered} \langle f'(x^k),\, x - x^k\rangle + \frac{1}{2}\left\langle \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2}(x^k,\, \mu^k)(x - x^k),\, x - x^k\right\rangle \to \min, \\ h(x^k) + h'(x^k)(x - x^k) = 0, \quad g(x^k) + g'(x^k)(x - x^k) \le 0, \\ -H_{I_{0+}\cup I_{00}}(x^k) - H'_{I_{0+}\cup I_{00}}(x^k)(x - x^k) = 0, \\ -H_{I_{0-}}(x^k) - H'_{I_{0-}}(x^k)(x - x^k) \le 0, \\ G_{I_{+0}\cup I_{00}}(x^k) + G'_{I_{+0}\cup I_{00}}(x^k)(x - x^k) \le 0. \end{gathered}$$

Идентифицировать СЗМП (14) — значит идентифицировать множества индексов I_{+0}, I_{0+}, I_{00} и I_{0-}, и при определенных (очень слабых) предположениях такая идентификация локально может быть осуществлена без серьезных вычислительных затрат на основе оценок расстояния до множества прямодвойственных решений.

Для кусочного метода ПКП и методов активного множества при весьма слабых предположениях обосновывается локальная сверхлинейная сходимость. Кроме того, проводится анализ этих методов с точки зрения перспектив глобализации сходимости.

В разд. 3.2 предлагаются гибридные подходы к глобализации сходимости методов активного множества (для кусочного метода ПКП такая глобализация вряд ли возможна), использующие метод внешней фазы, который, в принципе, может быть любым методом с разумными свойствами глобальной сходимости. Его роль — получить достаточно хорошее приближение к стационарной точке ЗОИО и отвечающему ей множителю Лагранжа. После каждого шага метода внешней фазы совершается попытка переключиться на шаги метода активного множества, которые принимаются в случае выполнения теста на линейное убывание невязки системы ККТ этой задачи.

В одном из предлагаемых подходов в тесте на линейное убывание значение невязки системы ККТ на каждом шаге сравнивается с ее значением на предыдущем шаге. Если впоследствии этот тест нарушается, то происходит возврат к последней точке, сгенерированной методом внешней фазы, из которой делается очередной шаг этого метода, и так далее. Таким образом, итерации, осуществляемые методом активного множества, могут впоследствии отбрасываться, и, конечно же, общая эффективность алгоритма во многом зависит от количества таких бесполезных вычислений.

В другом подходе реализован альтернативный способ сравнения, в котором нет необходимости отбрасывать сделанные ранее шаги метода активного множества. В нем значение невязки системы ККТ сравнивается на каждом шаге не с предыдущим значением, а с наименьшим достигнутым ее значением на предыдущих итерациях.

Кроме того, на основе этих двух подходов предлагаются конкретные методы внешней фазы, а именно, полугладкий метод Ньютона для переформулированной с помощью функции Фишера–Бурмейстера системы ККТ исходной ЗОИО, снабженный процедурой одномерного поиска для квадрата невязки этой системы, и метод ПКП для исходной ЗОИО с одномерным поиском для точной штрафной функции.

Результаты главы 3 опубликованы в работах [1, 5, 10, 11], а также содержатся в [12, 13].

В приложениях представлены результаты вычислительного эксперимента с разработанными алгоритмами для ЗОКО на 38 задачах из тестовой коллекции MacMPEC[13], и для ЗОИО на собственной тестовой коллекции из 23 задач, взятых из всех доступных автору публикаций, ка-

[13]Leyffer S. MacMPEC: AMPL collection of Mathematical Programs with Equilibrium Constraints. http://wiki.mcs.anl.gov/leyffer/index.php/MacMPEC.

сающихся ЗОИО. Поведение разработанных алгоритмов сравнивалось со стандартными методами и между собой.

Результаты вычислительного эксперимента опубликованы в работах [2, 3, 4], а также содержатся в [12, 13].

В заключении сформулированы основные результаты и выводы, полученные в диссертации.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ, ВЫНОСИМЫЕ НА ЗАЩИТУ

1. Предложенная в работе поднятая переформулировка ЗОКО имеет лучшие свойства регулярности, чем использовавшаяся ранее, хотя и обладает меньшей гладкостью. Разработана поднятая переформулировка ЗОИО. Установлены связи исходных и поднятых задач. Уточнены условия первого и второго порядков оптимальности для ЗОИО.

2. Для поднятых ЗОКО и ЗОИО разработаны и обоснованы сверхлинейно сходящиеся локальные методы, а также осуществлена глобализация сходимости этих методов. Проведен вычислительный эксперимент, продемонстрировавший конкурентоспособность разработанных методов.

3. Для исходной ЗОИО предложены кусочный метод ПКП и методы активного множества, и при весьма слабых предположениях обоснована локальная сверхлинейная сходимость этих методов. Для методов активного множества осуществлена гибридная глобализация сходимости и проведен вычислительный эксперимент, продемонстрировавший эффективность данного подхода.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. *Измаилов А.Ф., Погосян А.Л.* Условия оптимальности и ньютоновские методы для задач оптимизации с исчезающими ограничениями // ЖВМиМФ. 2009. Т. 49, № 7. С. 1184–1196.

2. *Измаилов А.Ф., Погосян А.Л.* Полугладкий метод последовательного квадратичного программирования для поднятых задач оптимизации

с исчезающими ограничениями // ЖВМиМФ. 2011. Т. 51, № 6. С. 983–1006.

3. *Izmailov A.F., Pogosyan A.L., Solodov M.V.* Semismooth Newton method for the lifted reformulation of mathematical programs with complementarity constraints // Comput. Optim. Appl. 2010. DOI 10.1007/s10589-010-9341-7

4. *Izmailov A.F., Pogosyan A.L., Solodov M.V.* Semismooth SQP method for equality-constrained optimization problems with an application to the lifted reformulation of mathematical programs with complementarity constraints // Optim. Meth. Software. 2011. DOI 10.1080/10556788.2011.557727.

5. *Измаилов А.Ф., Погосян А.Л.* О методах активного множества для задач оптимизации с исчезающими ограничениями // Тематический сборник «Теоретические и прикладные задачи нелинейного анализа». М.: ВЦ РАН, 2009. С. 18–49.

6. *Измаилов А.Ф., Погосян А.Л.* Полугладкий метод последовательного квадратичного программирования для поднятых задач оптимизации с исчезающими ограничениями // Научная конференция «Тихоновские чтения» (Москва, 25–29 октября 2010). М.: МАКС Пресс, 2010. С. 10.

7. *Измаилов А.Ф., Погосян А.Л., Солодов М.В.* Полугладкие ньютоновские методы для задач оптимизации с комплементарными ограничениям // Труды VI Московской международной конференции по исследованию операций (ORM2010: Москва, 19–23 октября 2010). М.: МАКС Пресс, 2010. 237-239.

8. *Погосян А.Л.* Ньютоновские методы для задач оптимизации с комплементарными ограничениями // Сборник тезисов 17-ой Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2010» (Москва, 12–15 апреля 2010). Секция «Вычислительная математика и кибернетика». М.: МАКС Пресс, 2010. С. 148–149.

9. *Погосян А.Л.* Ньютоновские методы для поднятых задач оптимизации с исчезающими ограничениями // Сборник тезисов 18-ой Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2011» (Москва, 11–15 апреля 2011). Секция «Вычислительная математика и кибернетика». М.: МАКС Пресс, 2011. С. 43–44.

10. *Izmailov A.F., Pogosyan A.L.* Newton-type methods for mathematical programs with vanishing constraints // Proceedings of the Eighth World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization (WCSMO-8: June 1-5, 2009, Lisbon, Portugal). Paper 1045. P. 1–9.

11. *Izmailov A.F., Pogosyan A.L.* Active-set Newton methods for mathematical programs with vanishing constraints // Abstracts of the 8$^{\text{th}}$ Congress of the International Society for Analysis, its Applications, and Computation (ISAAC: August 22-27, 2011, Moscow). M.: PFUR, 2011. P. 390.

12. *Izmailov A.F., Pogosyan A.L.* Active-set Newton methods for mathematical programs with vanishing constraints // Comput. Optim. Appl. To appear.

13. *Погосян А.Л.* Численное сравнение ньютоновских методов для задач оптимизации с исчезающими ограничениями // Тематический сборник «Теоретические и прикладные задачи нелинейного анализа». В печати.