Optimierungsprobleme mit Komplementaritätsnebenbedingungen und ihre numerische Lösung

Sonja Veelken

3. Mai 2005

Teil 1 : Einführung und Diplomarbeit

Kurze Einführung zu MPCCs bzw. MPECs
Optimalitätstheorie für MPCCs
Umformulierung des MPCC
SQP-Verfahren angewandt auf MPCCs
Numerische Ergebnisse

Teil 2: aktuelle Arbeit

Regularisierung durch Parametrisierung
Neue Regularisierung
Eigenschaften der neuen Regularisierung
Konvergenzaussagen
Numerische Ergebnisse

Zusammenfassung und Ausblick

Kurze Einführung zu MPCCs

Betrachtetes Optimierungsproblem mit Komplementaritätsnebenbedingung (MPCC)

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{u.d.N.} & h(x) = 0 \\ & g(x) \geq 0 \\ & 0 \leq x_1 \perp x_2 \geq 0 \end{array}$$

- $x = (x_0, x_1, x_2) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^{2m}$

Erläuterung:

$$\begin{array}{lcl} 0 \leq x_1 \perp x_2 \geq 0 & \Leftrightarrow & x_{1j} \geq 0, \quad x_{2j} \geq 0, \quad x_{1j} x_{2j} = 0 \\ & \Leftrightarrow & x_1 \geq 0, \quad x_2 \geq 0, \quad x_1^T x_2 = 0 \end{array}$$

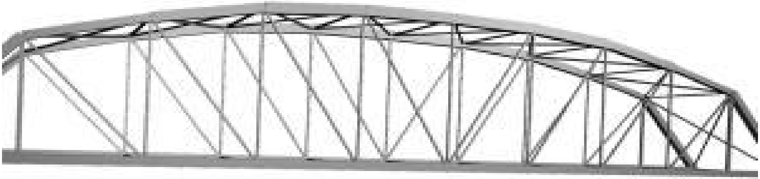
Allgemeines Optimierungsproblem mit Gleichgewichtsnebenbedingung (MPEC)

$$\begin{array}{rrcl} \min & f(x,y) & & \\ \text{u.d.N.} & (x,y) & \in & \mathcal{Z} \\ & y & \in & \mathcal{S}(x) \end{array}$$

- $\mathcal{Z} := \{ (x,y) \in \mathbb{R}^{m \times n} \,|\, h(x,y) = 0\,,\, g(x,y) \leq 0 \}$
- $y \in \mathcal{S}(x)$: Gleichgewichtsnebenbedingung
- $y \in \mathcal{S}(x)$ entspricht der Lösung
  - einer mit x parametrisierten endlich-dimemsionalen Variationsungleichung
  - eines in x parametrisierten Optimierungsproblems (Zweistufenproblem)
- in einigen Fällen entspricht $y \in \mathcal{S}(x)$ einer Komplementaritätsbedingung:

$$y \in \mathcal{S}(x) \quad \Leftrightarrow \quad 0 \leq y \perp F(y,x) \geq 0$$

Anwendungsbeispiel aus der Tragwerkoptimierung



Anwendungsbeispiele aus der Tragwerkoptimierung

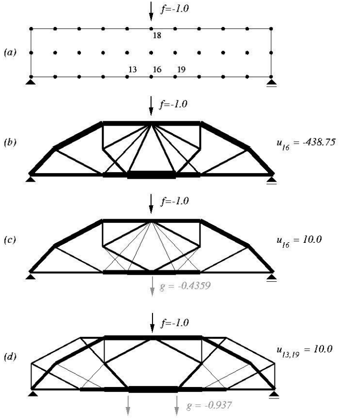


Figure: Michal Kočvara; truss optimization

Anwendungsbeispiel aus der Tragwerkoptimierung

Gesucht: Tragwerk maximaler Steifigkeit

Gegeben:

- äußere Krafteinwirkung f
- Gesamtvolumen V
- Grundstruktur (Knoten der Verbindungsstreben)

Dazu ist folgendes Optimierungsproblem zu lösen:

$\max_{x,t}$	$-f^T x$	maximale Steifigkeit
u.d.N.	$\sum_{s=1}^{S} t_s = V$	Vorgabe des Gesamtvolumens
	$l_s \leq t_s \leq u_s$	Beschränkung einzelner Volumina
	$-f + A(t)x + C^T\lambda = 0$	Kräftegleichgewicht
	$Cx - d \leq 0$	Beschränkung durch festes Hindernis
	$\lambda \geq 0$	positive Gegenkräfte
	$\lambda^T(Cx - d) = 0$	Komplementarität zwischen Gegenkraft und Abstand

Problematik bei MPCCs

- in jedem zulässigen Punkt eines MPCCs ist die Regularitätsbedingung von Mangasarian-Fromowitz nicht erfüllt

$\Rightarrow$
1. die für gewöhnliche NLPs verwendeten KKT-Bedingungen eignen sich nicht zur Beschreibung von stationären Punkten $\longrightarrow$ Einführung neuer Stationaritätsbedingungen
2. die Menge der Lagrangemultiplikatoren ist unbeschränkt $\longrightarrow$ numerische Probleme bei den Verfahren

Optimalitätstheorie für MPCCs

Starke Stationarität für MPCCs

Ein Punkt x^* des MPCC heißt stark stationär, wenn es Multiplikatoren λ, ν_1 und ν_2 gibt, so dass gilt

$$
\begin{aligned}
\nabla f(x^*) - \nabla g(x^*)^T\lambda - \nabla h(x^*)^T\mu - \begin{pmatrix} 0 \\ \nu_1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \nu_2 \end{pmatrix} &= 0 \\
h(x^*) &= 0 \\
g(x^*) \geq 0, \quad \lambda \geq 0, \quad g_i(x^*)\lambda_i &= 0 \\
x_1^* \geq 0, \quad x_2^* \geq 0, \quad x_{1j}^*\nu_{1j} = x_{2j}^*\nu_{2j} &= 0 \\
x_{1j}^* = 0 \ \text{oder} \ x_{2j}^* &= 0 \\
\forall j \in \{\, i \in \{1, ..., p\} \ : \ x_{1i}^* = x_{2i}^* = 0 \,\} \ : \ \nu_{1j} \geq 0 \ \text{und} \ \nu_{2j} &\geq 0
\end{aligned}
$$

Lösungsvergleich:

$$x^* \text{ stark stationär} \quad \Leftrightarrow \quad x^* \text{ KKT-Punkt des relaxierten NLPs zu } x^*$$

Relaxiertes NLP zu $\hat{x}$

RNLP:

$$\begin{array}{llcll} \min & f(x) & & & \\ \text{u.d.N.} & h(x) & = & 0 & \\ & g(x) & \geq & 0 & \\ & x_{1j} & = & 0 & \forall j \in \hat{\mathcal{X}}_2^{\perp} \\ & x_{2j} & = & 0 & \forall j \in \hat{\mathcal{X}}_1^{\perp} \\ & x_{1j} & \geq & 0 & \forall j \in \hat{\mathcal{X}}_2 \\ & x_{2j} & \geq & 0 & \forall j \in \hat{\mathcal{X}}_1 \end{array}$$

- für einen zulässigen Punkt $\hat{x}$ seien dabei die folgenden Mengen definiert:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{X}}_1 &:= \{\, j \in \{1, \dots, p\} \ : \ \hat{x}_{1j} = 0 \,\} \\ \hat{\mathcal{X}}_2 &:= \{\, j \in \{1, \dots, p\} \ : \ \hat{x}_{2j} = 0 \,\} \end{aligned}$$

- MPEC-LICQ: ein MPCC erfüllt diese in $\hat{x}$ genau dann, wenn das zugehörige RNLP die LICQ erfüllt.

Hinreichende Bedingung zweiter Ordnung

x^*: stark stationär, MPEC-LICQ und SSOSC gelten in x^*:
SSOSC:

$$d^T \nabla_x^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \mu^*, \hat{\nu}_1, \hat{\nu}_2)\, d > 0$$

gilt, für jedes $d = (d_0, d_1, d_2) \neq 0$ mit

$$\begin{aligned} \nabla g_i(x^*)^T d &= 0, & i: \quad & \lambda_i^* > 0, \\ \nabla h(x^*) d &= 0, & & \\ d_{1j} &= 0, & j: \quad & \hat{\nu}_{1j} \neq 0, \\ d_{2k} &= 0, & k: \quad & \hat{\nu}_{2k} \neq 0\,. \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ x^* ist striktes lokales Minimum des MPCC

Umformulierung des MPCC

Umformulierung des MPCC mittels einer NCP-Funktion

Eine Funktion $\phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ heißt NCP-Funktion, falls gilt:

$$\phi(a,b) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad a \geq 0,\ b \geq 0,\ ab = 0$$

Beispiel

1. *Minimumfunktion :* $\phi_{min}(a,b) := \min\{a,b\}$
2. *Fischer-Burmeister-Funktion :* $\phi_{FB}(a,b) := a + b - \sqrt{a^2 + b^2}$
3. *Bilinearform :* $\phi_{BL}(a,b) := ab.$
4. *Chen-Chen-Kanzow-Funktion :*
   $\phi_{CCK}(a,b) := \lambda\phi_{FB}(a,b) + (1-\lambda)a_+b_+,$
   mit $a_+ := \max\{0,a\}$, $b_+ := \max\{0,b\}$, *und* $\lambda \in (0,1)$ *beliebig, aber fest.*

Umformuliertes MPCC

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{u.d.N.} & h(x) \; = \; 0 \\ & g(x) \; \geq \; 0 \\ & x_1, x_2 \geq 0 \\ & \phi(x_{1j}, x_{2j}) = 0 \quad (j = 1, ..., p) \end{array}$$

Lösungsvergleich:

x^* stark stationärer Punkt $\Leftrightarrow$ x^* KKT-Punkt des umformulierten NLPs, wenn $\nabla\phi(0,0) = 0$

SQP-Verfahren angewandt auf MPCCs

Allgemeines SQP-Verfahren

(S.0) Wähle $(x^0, \lambda^0, \mu^0) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^s$, und setze $k := 0$.

(S.1) Ist (x^k, λ^k, μ^k) ein KKT-Punkt vom NLP: STOP.

(S.2) Berechne eine Lösung $(d^k, \lambda^{k+1}, \mu^{k+1}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^s$ von

$$\begin{array}{ll} \min_d & \nabla f(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2_{xx} \mathcal{L}(x^k, \lambda^k, \mu^k) d \\ \text{u.d.N.} & h_i(x^k) + \nabla h_i(x^k)^T d = 0 \\ & g_j(x^k) + \nabla g_j(x^k)^T d \leq 0\,. \end{array}$$

wähle die zu $(0, \lambda^k, \mu^k)$ nächstgelegene Lösung $(d^k, \lambda^{k+1}, \mu^{k+1})$.

(S.3) Setze $x^{k+1} := x^k + d^k$ und $k \leftarrow k + 1$, gehe zurück zu (S.1).

Lokale Konvergenz des SQP-Verfahrens angewandt auf NLPs

Voraussetzungen: KKT-Punkt (x^*, λ^*, μ^*) erfüllt

1. strikte Komplementarität: $\forall j \,:\, g_j(x^*) + \lambda_j^* \neq 0$
2. LICQ in x^*
3. Hinreichende Bedingung 2. Ordnung

$\Rightarrow \quad \exists\, \varepsilon > 0 \;: \forall\, (x^0, \lambda^0, \mu^0) \in \mathcal{U}_\varepsilon(x^*, \lambda^*, \mu^*)$:

1. $(x^k, \lambda^k, \mu^k) \rightarrow (x^*, \lambda^*, \mu^*), \quad k \rightarrow \infty$ Konvergenz
2. $\nabla^2 f, \nabla^2 g_j$ und $\nabla^2 h_i$ lokal Lipschitz-stetig,
   $w^k = (x^k, \lambda^k, \mu^k)$

   $\Rightarrow \|w^{k+1} - w^*\|_2 = \mathcal{O}(\|w^k - w^*\|_2^2)$

   quadratische Konvergenz

Voraussetzungen für die lokale Konvergenz bei MPCCs

1. strikte Komplementarität für folgende Nebenbedingungen:

$$\mu_i^* \neq 0, \quad \forall\, i\,, \qquad \lambda_r^* > 0, \quad \forall\, r \in \mathcal{I}_g(x^*),$$

   und

$$\nu_{1j}^* > 0 \quad \textit{und} \quad \nu_{2j}^* > 0, \quad \forall\, j \in \mathcal{X}_1^* \cap \mathcal{X}_2^*$$

2. MPEC-LICQ in x^*
3. Hinreichende Bedingung 2.Ordnung für MPECs
4. f und g, h sind zweimal Lipschitz-stetig differenzierbar
5. QP-Löser wählt immer linear unabhängige Basis

Lokale Konvergenzanalyse bei MPCC (1.Teil)

Zusatzvoraussetzung:

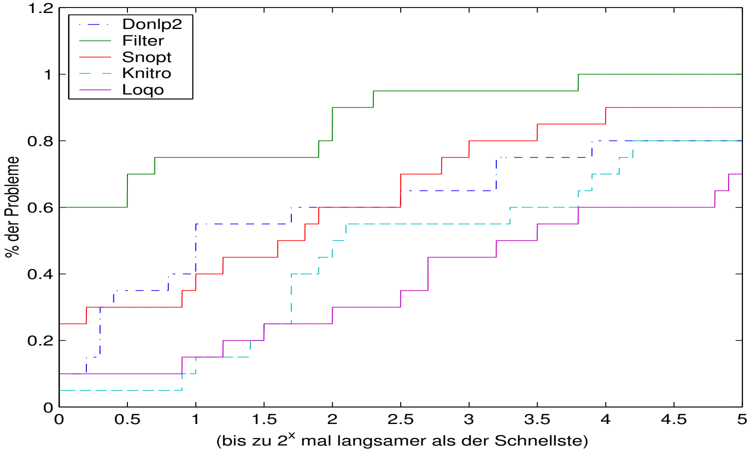
- Für aktuelles (x^k, π^k) gilt $\phi(x^k_{1j}, x^k_{2j}) = 0,\ (j = 1, ..., p)$ und (x^k, π^k) nahe genug an einem stark stationären (x^*, π^*).
  π^k : zusammengefasster Lagrangemultiplikator

$\Rightarrow$

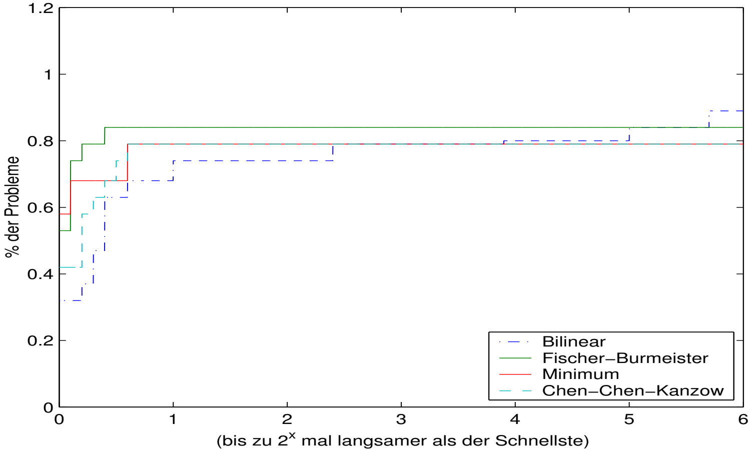
1. erzeugte Folge $\{(x^l, \pi^l)\}_{l>k}$ konvergiert quadratisch gegen einen stark stationären Punkt (x^*, π^*)
2. $\{x^l\}_{l>k}$ konvergiert superlinear gegen x^*
3. $\phi(x^l_{1j}, x^l_{2j}) = 0,\ (j = 1, ..., p)$ für alle $l \geq k$.

Numerische Ergebnisse

Vergleich der Löser



Vergleich der NCP-Funktionen



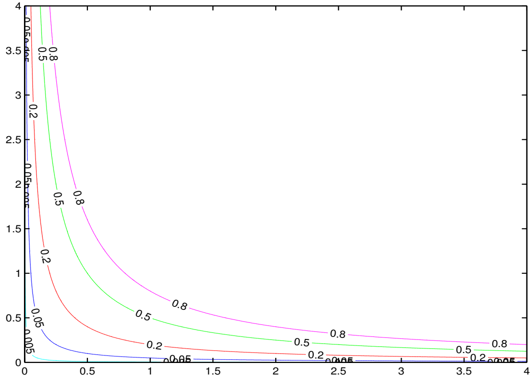
2.Teil

Regularisierung durch Parametrisierung

Das parametrisierte Problem $NLP(t)$

$$
NLP(t) \qquad \begin{array}{rrcll} \min & f(x) & & & \\ \text{u.d.N.} & h(x) & = & 0 & \\ & g(x) & \geq & 0 & \\ & x_1, x_2 & \geq & 0 & \\ & x_{1j}x_{2j} & \leq & t & \qquad j = 1, .., p \end{array}
$$

Relaxation der Komplementaritätsnebenbedingung



Neue Regularisierung

Ein neues, relaxiertes Problem $R(t)$

$$
R(t) \qquad \begin{array}{rrcl} \min & f(x) & & \\ \text{u.d.N.} & h(x) & = & 0 \\ & g(x) & \geq & 0 \\ & x_1, x_2 & \geq & 0 \\ & \Gamma_t(x_1, x_2) & \leq & 0\,, \end{array}
$$

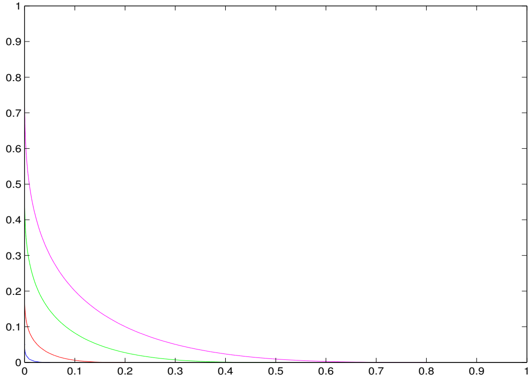
wobei

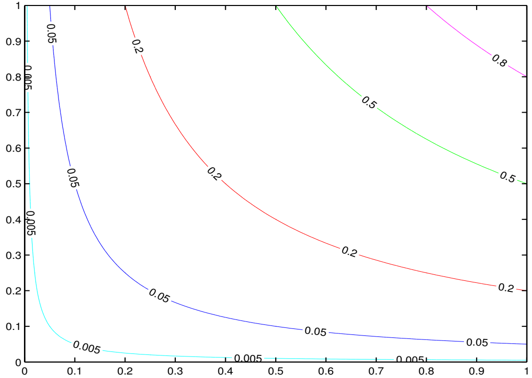
$$
\Gamma_t(x_1, x_2) := x_1 + x_2 - s_t(x_1, x_2)
$$

und

$$
s_{j,t}(x_1, x_2) := \begin{cases} |x_{1j} - x_{2j}| & |x_{1j} - x_{2j}| \geq t \\ \frac{2t}{\pi} \sin\left((x_{1j} - x_{2j})\frac{\pi}{2t} + \frac{3\pi}{2}\right) + t & |x_{1j} - x_{2j}| < t \end{cases}
$$

Neue Relaxation der Komplementaritätsnebenbedingung




0.005
0.05
0.2
0.5
0.8

Eigenschaften der Neuen Regularisierung

KKT-Bedingungen von $R(t)$

$$\begin{aligned}
\nabla f(x) - \nabla g(x)^T \lambda - \nabla h(x)^T \mu - \begin{pmatrix} 0 \\ \nu_1 \\ \nu_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla_{x_1} \Gamma_t(x)^T \xi \\ \nabla_{x_2} \Gamma_t(x)^T \xi \end{pmatrix} &= 0 \\
h(x) &= 0 \\
g(x) &\geq 0 \\
\lambda &\geq 0 \\
g_i(x)\lambda_i &= 0 \\
x_1, x_2 &\geq 0 \\
\Gamma_t(x_1, x_2) &\leq 0 \\
\nu_{1j}\nu_{2j} &\geq 0 \\
\xi &\geq 0 \\
x_{1j}\nu_{1j} = x_{2j}\nu_{2j} &= 0 \\
\xi^T \Gamma_t(x_1, x_2) &= 0
\end{aligned}$$

Eigenschaften zulässiger Punkte

- x : zulässig für das MPCC $\Rightarrow$ x zulässig für $R(t)$ für alle $t \geq 0$
- die Gradienten von $\Gamma_{jt}(x_1, x_2) \leq 0$ und $x_{1j} \geq 0$ sind für $j \in \{1, .., p\}$ mit $x_{2j} \geq t$ und $x_{1j} = 0$ positiv linear abhängig
- x : zulässig für $R(t)$ $\Rightarrow$ für $j \in \{1, .., p\}$ mit $x_{1j}, x_{2j} < t$ ist höchstens eine der Nebenbedingungen $\Gamma_{jt}(x_1, x_2) \leq 0$ oder $x_{1j} \geq 0$ bzw. $x_{2j} \geq 0$ aktiv

Eigenschaften der Lösungen von $R(t)$ bzw. des MPCC

- x^* : stark stationärer Punkt mit Multiplikatoren $\lambda^*, \mu^*, \hat{\nu}_1, \hat{\nu}_2$

  $\Rightarrow$ für alle $t \geq 0$, klein genug existieren ν_1^*, ν_2^*, ξ^* mit $(x^*, \lambda^*, \mu^*, \nu_1^*, \nu_2^*, \xi^*)$ erfüllt KKT-Bedingungen von $R(t)$

- (t_k) : positive, monoton fallende Nullfolge
  $x^*(t_k)$: stationärer Punkt von $R(t_k)$ mit $x_{1j}^*(t_k)x_{2j}^*(t_k) = 0$ für alle $j = 1, .., p$

  $\Rightarrow x^*(t_k)$ ist stationärer Punkt von $R(t_{k+1})$

Zulässigkeit im Grenzwert

(t_k) : positive, monoton fallende Nullfolge

$x^*(t_k)$: stationäre Punkte von $R(t_k)$ für die ein $j \in \{1, .., p\}$ existiert mit $x^*_{1j}(t_k)x^*_{2j}(t_k) > 0$ für alle $k \in \mathbb{N}$

$\Rightarrow x^*_{1j}(t_k) \longrightarrow 0$ und $x^*_{2j}(t_k) \longrightarrow 0$

Konvergenzaussagen

Konvergenz in der Nähe eines stark stationären Punktes

x^* : B-stationärer Punkt des MPCC, für den gilt

1. in x^* gilt die MPEC-LICQ und die SSOSC
2. die entsprechenden Multiplikatoren erfüllen strikte Komplementarität:
   a) $\lambda_i^* > 0$ für alle $i \in I_g(x^*)$
   b) $\hat{\nu}_{1i} \neq 0$ für alle $i \in I_1(x^*)$ und
   $\hat{\nu}_{2i} \neq 0$ für alle $i \in I_2(x^*)$.

$\Rightarrow$ es ex. Umgebungen von $t_0 = 0$ und von x^* für die eine eind. $\mathcal{C}^1$-Funktion $y(t) := [x(t), \lambda(t), \mu(t), \nu_1(t), \nu_2(t), \gamma_1(t), \gamma_2(t))]$ ex. für die gilt:

- $x(t)$ sind strikte lokale Minima von $R(t)$
- $x(t)$ sind zulässig für das MPCC

$\Rightarrow$ es ex. eine Umgebung von x^* für die $x(t) = x^*$ für kleine t

Stationarität eines HP der Folge $(x^*(t_k))$

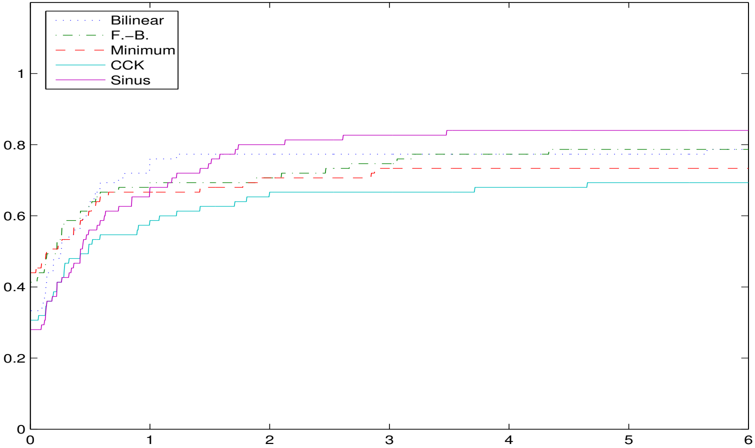
(t_k) : positive, monoton fallende Nullfolge
x_k : stationäre Punkte von $R(t_k)$ mit $x_k \longrightarrow \bar{x}$
MPEC-LICQ sei gültig in $\bar{x}$

$\Rightarrow$ $\bar{x}$ ist ein C-stationärer Punkt des MPCC mit eindeutigen Multiplikatoren $\bar{\lambda}, \bar{\mu}, \bar{\gamma}_1$ und $\bar{\gamma}_2$, für die gilt:

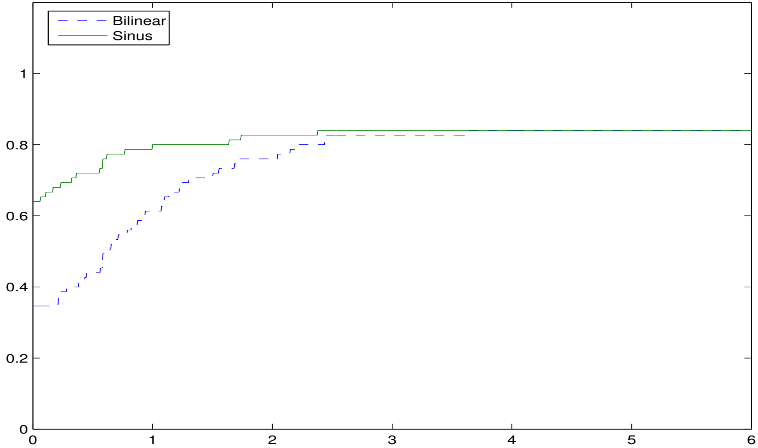
$$\begin{array}{rcll} \bar{\lambda}_i & = & \lim\limits_{k\to\infty} \lambda_i^k \geq 0 & i \in I_g(\bar{x}) \\ \bar{\mu}_j & = & \lim\limits_{k\to\infty} \mu_j^k & j \in I_h(\bar{x}) \\ \bar{\gamma}_{1m} & = & \lim\limits_{k\to\infty} (\nu_{1m}^k - \xi_m^k \alpha_m^k) & m \in I_1(\bar{x}) \\ \bar{\gamma}_{2m} & = & \lim\limits_{k\to\infty} (\nu_{2m}^k - \xi_m^k \beta_m^k) & m \in I_2(\bar{x}) \end{array}$$

Numerische Ergebnisse

Vergleich mit den NCP-Funktionen



Vergleich mit der Bilinear-Parametrisierung



Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassung

- 1.Teil
  - Einführung in die Thematik von MPCCs bzw. MPECs
  - Umformulierung ein MPCCs mittels NCP-Funktion
  - Lokal quadratische Konvergenz des SQP-Verfahrens angewandt auf das umformulierte Problem
  - Numerische Ergebnisse
- 2. Teil
  - Vorstellung einer neuen Regularisierung
  - Eigenschaften dieser Regularisierung
  - Konvergenzaussagen
  - Numerische Ergebnisse

Ausblick

- Theoretisch:
  - Abschwächung der Voraussetzungen
  - Stärkere Aussagen mit ähnlichen Voraussatzungen
  - Andere Funktionen anstelle von $s_t(x_1, x_2)$
- Numerisch:
  - Wirkung eines entsprechenden Strafterms in der Zielfunktion
  - Neue Regularisierung und Innere-Punkte-Verfahren
  - Strategie zur Aufdatierung des Parameters

Literatur

[1] R.Fletcher, S.Leyffer, D.Ralph, S.Scholtes, *Local Convergence of SQP-methods for Mathematical Programs with Equilibrium Constraints*

[2] S.Leyffer, *Complementarity Constraints as Nonlinear Equations: Theory and Numerical Experience*

[3] Z.Q.Luo, J.S.Pang, und D.Ralph, *Mathematical Programs with Equilibrium Constraints*

[4] H.Scheel, und S.Scholtes, *Mathematical Programs with Complementarity Constraints: Stationarity, Optimality and Sensitivity*

[5] S.Scholtes,*Convergence Properties of a Regularization Scheme for Mathematical Programs with Complementarity Constraints*