第 35 卷第 3 期
2004 年 6 月
中南大学学报(自然科学版)
J. CENT. SOUTH UNIV. (SCIENCE AND TECHNOLOGY)
Vol. 35 No. 3
June 2004

大规模过程系统优化的序列界约束方法

梁昔明, 李文革

(中南大学 信息科学与工程学院, 湖南长沙, 410083)

摘要: 基于非线性约束极小化的序列无约束方法, 对大规模过程系统稳态优化的序列界约束方法进行了研究。该约束方法的罚函数只包含对等式和/或不等式约束的惩罚项, 不包含对界约束的惩罚项, 通过迭代求解一系列界约束极小化子问题而非无约束极小化子问题获得原问题的解; 算法按 2 层结构实现, 内层结构中主要求解界约束极小化子问题得到下一个迭代点, 外层迭代主要修改乘子向量和罚向量以及检查收敛准则是否满足, 重构下次迭代的界约束子问题, 或在收敛准则满足时终止算法。此外, 给出了求解界约束极小化子问题的修改截断 Newton 法, 并用一类规模可变的约束优化问题和一类最优控制问题对所给方法进行了数值试验, 试验结果表明, 所给序列界约束方法是非常稳定和有效的。

关键词: 过程系统优化; 大规模非线性规划; 序列界约束方法; 数值试验

中图分类号: TP202⁺.7　　**文献标识码:** A　　**文章编号:** 1672-7207(2004)03-0434-04

Successive bound constrained minimization for large-scale process system optimization

LIANG Xi-ming, LI Wen-ge

(College of Information Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract: Based on successive unconstrained programming methods, the successive bound constrained programming algorithms for large-scale process system optimization are studied in this paper. A series of bound constrained sub-problems instead of a series of unconstrained sub-problems are solved is these algorithms. Since Lagrange function only contains the penalty terms for equality and inequality constraints, a modified truncated-Newton algorithm is proposed to solve the bound constrained sub-problems. The successive bound constrained programming algorithms are performed in two stages. The inner stage is the bound constrained minimization of the augmented Lagrange penalty function in which a new set of primal variables is found. The outer stage is performed to update the Lagrange multipliers and penalty parameters, check for convergence and accordingly reinitiate another bound constrained minimization or declare convergence. Numerical experiments are made for two kinds of alterable dimension nonlinear programming problems, which proves the stability and effectiveness of the algorithms for chemical process optimization.

Key words: process system optimization; large-scale nonlinear constrained minimization; successive bound constrained programming algorithms; numerical experiment

---

收稿日期: 2003-08-08

基金项目: 国家"973"重点基础研究项目(2002CB312200); 湖南省自然科学基金资助项目(03JJY3109)

作者简介: 梁昔明(1967-), 男, 湖南汨罗人, 中南大学教授, 博士生导师, 从事工业过程稳态优化控制、大规模优化理论与算法等研究

论文联系人: 梁昔明, 男, 教授; 电话: 0731-8830584-158(O), 13975890220(手机); E-mail: ananxml@mail.csu.edu.cn

在流程工业领域, 基于严格机理模型的开放式方程建模与优化已成为国际公认的主流技术方向。化学工程中的最优化方法要求能够求解几百到数千个变量和约束的非线性问题。目前, 应用最广泛的方法有广义简约梯度法[1-3], 序列二次规划法[4-6]和修改障碍函数法[7-9]等。对于这些基于线性化技巧的方法, 在应用于全空间时, 它们能求解的问题的变量不多, 而在用于简约空间时, 能求解的大规模问题自由度不大。基于有效集策略的序列二次规划法在求解含大量不等式约束和界约束的问题时效率不高; 修改障碍函数法将原约束优化问题的求解转化为对一系列无约束问题的求解, 与古典障碍函数法的渐近收敛性不同, 该方法具有有限收敛性且其罚参数不必在迭代过程中趋于零, 它能有效求解大规模不等式约束优化问题, 然而与其他障碍法一样, 它在求解带等式约束的优化问题时存在局限。

对一般形式的过程系统优化问题:

$$\min f(\boldsymbol{x}); \tag{1}$$

$$\text{s.t.}\quad c_i(\boldsymbol{x}) = 0,\quad i = 1, 2, \cdots, m_e; \tag{2}$$

$$c_i(\boldsymbol{x}) \geqslant 0,\ i = m_e + 1, \cdots, m; \tag{3}$$

$$\boldsymbol{l} \leqslant \boldsymbol{x} \leqslant \boldsymbol{u}。 \tag{4}$$

对应增广 Lagrange 罚函数为:

$$P(\boldsymbol{x}, \lambda, \sigma) = f(\boldsymbol{x}) - \sum_{i=1}^{m_e}[\lambda_i c_i(\boldsymbol{x}) - \frac{1}{2}\sigma_i(c_i(\boldsymbol{x}))^2] - \sum_{i=m_e+1}^{m}\tilde{P}_i(\boldsymbol{x}, \lambda, \sigma); \tag{5}$$

$$\tilde{P}_i(\boldsymbol{x}, \lambda, \sigma) = \begin{cases} \lambda_i c_i(\boldsymbol{x}) - \dfrac{1}{2}\sigma_i(c_i(\boldsymbol{x}))^2, \\ \qquad 若\ \lambda_i - \sigma_i c_i(\boldsymbol{x}) > 0; \\ \dfrac{1}{2}\lambda_i^2/\sigma_i,\ 否则。 \end{cases}$$

其中: $\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{u}$ 是 n 维已知向量; $\boldsymbol{l} \leqslant \boldsymbol{x} \leqslant \boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{l}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}$ 三者按分量取值; λ 为乘子向量; σ 为罚向量。在增广 Lagrange 乘子法和修改障碍函数法中, 界约束式(4)化为 $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{l} \geqslant 0$ 和 $\boldsymbol{u} - \boldsymbol{x} \geqslant 0$, 并按约束式(3)处理, 这在很大程度上增加了每次迭代所求无约束子问题的规模和计算工作量, 当问题规模增大时, 情况更趋复杂。为此, 作者用序列界约束方法来处理一般形式的过程系统优化问题。在第 k 步, 用修改截断牛顿法求解如下界约束子问题:

$$\begin{cases} \min P(\boldsymbol{x}, \lambda^k, \sigma^k), \\ \text{s.t.}\quad \boldsymbol{l} \leqslant \boldsymbol{x} \leqslant \boldsymbol{u}。 \end{cases} \tag{6}$$

其中: $P(\boldsymbol{x}, \lambda, \sigma)$ 由式(5)定义; λ^k 和 σ^k 分别为第 k 步的乘子向量和罚向量。

1　序列界约束方法

序列界约束方法按 2 层结构实现: 内层结构主要求解界约束极小化子问题式(6)以得到下一个迭代点; 外层迭代主要修改乘子向量和罚向量, 检查收敛准则是否满足, 重构下次迭代的界约束子问题或在收敛准则满足时终止算法。方法中的乘子向量 λ 和罚向量 σ 主要用来使方法的迭代点向原问题驻点靠近, 其中 λ 的初始化有 2 种选择:

a. 将 λ^0 设定为任意正向量;

b. 将 λ^0 设定为用户预先对每个约束的乘子的初始估计, 在每次迭代中进行如下修正:

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k - \sigma_i^k c_i(\boldsymbol{x}^k),\ i = 1, 2, \cdots, m_e;$$

$$\lambda_i^{k+1} = \max\{\lambda_i^k - \sigma_i^k c_i(\boldsymbol{x}^k), 0\},\ i = m_e + 1, \cdots, m。$$

罚向量 σ 可以任意正向量初始化, 通常设为 $\sigma^0 = \sigma_0(1, 1, \cdots, 1)^{\mathrm{T}}$, $\sigma_0 = 10$ 或 $\sigma_0 = 100$, 在每次迭代中增加罚向量 σ 的分量值, 即

$$\sigma^{k+1} = \gamma\sigma^k。 \tag{7}$$

其中: γ 为大于 1 的常数, 通常取 $\gamma = 10$ 或 $\gamma = 100$, 也可采用如下修正程序:

a. 在修正式(7)中, 当

$$\|\bar{c}(\boldsymbol{x}^{k+1})\|_2 \leqslant \zeta \|\bar{c}(\boldsymbol{x}^k)\|_2$$

时取 $\gamma = 1$, 否则取 $\gamma > 1$。其中,

$$\|\bar{c}(\boldsymbol{x})\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{m_e}[c_i(\boldsymbol{x})]^2 + \sum_{i=m_e+1}^{m}[\min(c_i(\boldsymbol{x}), 0)]^2}$$

称为可行性度量, $0 < \zeta < 1$, 通常取 $\zeta = 0.25$。

b. 取常数 $\gamma > 1$, 如 $\gamma = 10$ 或 $\gamma = 100$, 且 $k = 0, 1, 2, \cdots$。令:

$$\sigma_i^{k+1} = \begin{cases} \sigma_i^k,\ 若|c_i(\boldsymbol{x}^{k+1})| \leqslant \zeta|c_i(\boldsymbol{x}^k)| \\ \qquad (当\ i = 1, \cdots, m_e\ 时) \\ \qquad 或|\min\{c_i(\boldsymbol{x}^{k+1}), 0\}| \leqslant \\ \qquad |\zeta|\min\{c_I(\boldsymbol{x}^k), 0\}| \\ \qquad (当\ i = m_e + 1, \cdots, m\ 时); \\ \max\{\gamma\sigma_i^k, k^2\},\ 否则。 \end{cases}$$

在上面修正程序中,可引进一个上界 δu,以阻止罚向量 σ 取很大的值。

产生的迭代序列 $\{\boldsymbol{x}^k\}$ 满足 $\boldsymbol{l} \leqslant \boldsymbol{x}^k \leqslant \boldsymbol{u}$, $k = 1, 2, \cdots$。对给定容许误差 ε,可取终止准则为:若 $\|\bar{c}(\boldsymbol{x}^{k+1})\|_2 \leqslant \varepsilon$,则第 k 个界约束极小化子问题式(6)的解 $\boldsymbol{x}^{k+1}$ 是原问题的近似解。

2 界约束子问题的求解

对第 k 个界约束极小化子问题式(6)的求解,可以采用基于投影的方法[10]、拟牛顿方法[11]、信赖域方法[12, 13]、修改障碍法[14]、有效集牛顿法[15]或子空间有限内存拟牛顿方法[16]等。截断牛顿法[17, 18]是求解无约束优化问题的有效方法之一,它采用共轭梯度法来近似求解牛顿方程得到搜索方向,不需存储矩阵,适于求解大规模无约束优化问题。对子问题式(6),先用求解无约束问题 $\min P(\boldsymbol{x}, \lambda^k, \sigma^k)$ 的截断牛顿法得 $\boldsymbol{d}^k$,再按如下修正公式得搜索方向:

$$d_i^k = \begin{cases} 0, \text{若 } x_i^k = l_i, d_i^k < 0 \text{ 或 } x_i^k = u_i, d_i^k > 0; \\ d_i^k, \text{否则}。 \end{cases}$$

然后,在区间 $(0, \alpha_0^k)$ 进行非精确线搜索确定搜索步长。其中:

$$\alpha_0^k = \min\{1, \min\{\frac{l_i - x_i^k}{d_i^k}: d_i^k < 0\},$$

$$\min\{\frac{u_i - x_i^k}{d_i^k}: d_i^k > 0\}\}。$$

收敛准则采用 V. S. Vassiliadis 等求解界约束极小化问题的终止准则[8-10]:

$$\|\boldsymbol{x}^k - \mathrm{Proj}(\boldsymbol{x}^k - \nabla f(\boldsymbol{x}^k))\| \leqslant \varepsilon_k。$$

其中:$\varepsilon_k = \max\{\varepsilon, 10^{-(k+r-1)}\}$,为对第 k 个界约束极小化子问题求解的容许误差;ε 为用户所需的求解精度,$r = \frac{1}{2}\lg \varepsilon$。

3 数值试验

用文献[8]中的 2 个大规模约束优化问题对方法进行数值试验,并与其中修改障碍函数法 MBFSOL 进行数值比较,算法程序用 MATLAB 5.1 语言编写,所有数值试验均在 AMD-K6-2 计算机上完成,方法中参数设置如下:

$$\varepsilon = 10^{-6}, \ \sigma_u = 10^{10}, \ \gamma = 10, \ \zeta = 0.25,$$

$$\lambda^0 = (1, \cdots, 1)^{\mathrm{T}}, \ \sigma^0 = (10, \cdots, 10)^{\mathrm{T}}。$$

试验结果如表 1 所示。其中:N 为变量个数;O 为方法的迭代次数;I 为方法求解界约束子问题的总迭代次数;F 为函数估值总数;G 为梯度估计总数;t 为方法求解问题所用计算机 CPU 时间;F_1 和 G_1 分别为文献[8]中算法 MBFSOL 的函数估值总数及梯度估计总数。

由表 1 可看出,序列界约束方法只需较少迭代次数,且不随着问题规模的增大而增加迭代次数。对问题 1,内层迭代次数的变化不明显,同时函数估值次数和梯度估计次数均比文献[8]中算法 MBFSOL 相应次数少得多;对问题 2,界约束子问题求解次数适宜,而函数估值次数与梯度估计次数和文献[8]中算法 MBFSOL 的相应次数一样,均较多,但当 N 由 200 增大到 400 时,方法的函数估值次数与梯度估计次数的增加量均比文献[8]中算法 MBFSOL 相应增加量少得多。由此可知,序列界约束方法具有明显的稳定性,比算法 MBFSOL 具有更强的有效性。

表 1 数值试验结果

Table 1 Experimental results

	N	O	I	F	G	t/s	F_1	G_1
问题 1	1 000	7	11	26	24	6.25	51	194
	5 000	8	13	32	28	64.68	828	1452
	10 000	8	17	50	36	133.52	374	1 058
	20 000	7	16	149	50	490.14	460	1 288
问题 2	100	3	41	1 494	1 363	26.67	560	1 269
	200	4	118	4 351	4 207	165.30	3 541	5 408
	400	3	132	4 370	4 327	473.53	18 977	23 326

4 结 论

a. 给出了求解大规模过程系统优化的序列界约束方法。数值试验结果表明所给方法是稳定和有效的。

b. 与简约 SQP 方法要求问题自由度较小不同,序列界约束方法对问题的自由度没有限制。所得方法在将约束优化问题转化为序列界约束子问题时,对各个约束等同处理,增加和减少的约束量只对应

Lagrange 乘子数的增加量与减少量。对同样数目的约束, 不论其自由度大小, 对应的 Lagrange 乘子维数一样。因此, 该方法的计算量不会因自由度的增加而增大。

参考文献:

[1] Murtagh B A, Saunder M A. MINOS5.0 users guide[R]. SOL83-20, California: Systems Optimization Laboratory, Department of Operation Research, Stanford University, 1988.

[2] Smith S, Lasdon L. Solving large sparse nonlinear programming using GRG [J]. ORSA Journal on Computing, 1992, 4(1): 2-15.

[3] Drud A S. CONOPT-A large-scale GRG code [J]. ORSA Journal on Computing, 1994, 6 (2): 207-216.

[4] Lucia A, Xu J. Chemical process optimization using Newton- like methods[J]. Computers Chem Engng, 1990, 14(2): 119-138.

[5] Facchinei F, Judice J. An active set Newton algorithm for large-scale nonlinear programs with box constraints [J]. SIAM J Optim, 1998, 8 (1): 158-186.

[6] Vasantharajan S, Viswanathan J, Biegler L T. Reduced successive quadratic programming implementation for large-scale optimization problems with smaller degrees of freedom [J]. Computers Chem Engng, 1990, 14(8): 907-915.

[7] Polyak R. Modified barrier functions (theory and methods) [J]. Mathematical Programming, 1992, 54(2): 177-222.

[8] Vassiliadis V S, Floudas C A. The modified barrier function approach for large-scale optimization [J]. Computers Chem Engng, 1997, 21 (8): 855-874.

[9] Vassiliadis V S, Brooks S A. Application of the modified barrier method in large-scale quadratic programming problems [J]. Computers Chem Engng, 1998, 22(9): 1197-1205.

[10] Pytlak R. An efficient algorithm for large-scale nonlinear programming problems with simple bounds on the variables [J]. SIAM J Optimization, 1998, 8(2): 532-560.

[11] Byrd R H, Lu P, Nocedal J, *et al*. A limited memory algorithm for bound constrained optimization [J]. SIAM J Sci Comput, 1995, 16 (8): 1190-1208.

[12] Liang X M, Xu C X. A trust region algorithm for bound constrained minimization [J]. Optimization, 1997, 41(3): 279-289.

[13] Conn A R, Gould N I M. Global convergence of a class of trust region algorithm for optimization with simple bounds [J]. SIAM J Numer Anal, 1988, 25(2): 433-460.

[14] Nash S G, Polyak R. A numerical comparison of barrier and modified barrier methods for large-scale bound-constrained optimization [A]. Hager W W. Large Scale Optimization: State of the Art [C]. Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 1994, 319-338.

[15] Ternet D J, Biegler L T. Recent improvements to a multiplier-free reduced Hessian successive quadratic programming algorithm [J]. Computers Chem Engng, 1998, 22(7-8): 963-978.

[16] Ni Q, Yuan Y. A subspace limited memory quasi-Newton algorithm for large-scale nonlinear bound constrained optimization [J]. Math Comp, 1997, 66(220): 1 509-1 520.

[17] Dembo R S, Steihaug T. Truncated-Newton algorithms for large-scale unconstrained optimization [J]. Math Prog, 1983, 26(2): 190-212.

[18] Nash S G. A survey of truncated-Newton methods [J]. Journal on Computational and Applied Mathematics, 2000, 124(1): 45-59.