УСКОРЕНИЕ СИМПЛЕКСНЫХ МЕТОДОВ ЛИПШИЦЕВОЙ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

***Ю. Жилинскас*[1], *Д.Е. Квасов*[2,3], *Р. Паулавичюс*[1], *Я.Д. Сергеев*[2,3]**

[1]*Вильнюсский университет, Литва*

[2]*Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского*

[3]*Калабрийский университет, Ренде, Италия*

Предлагается ряд подходов к ускорению работы алгоритмов липшицевой глобальной оптимизации на основе симплексного разбиения области поиска и множественных оценок константы Липшица. Приводятся результаты численного сравнения новых методов с известными алгоритмами глобальной оптимизации на классах тестовых функций GKLS-генератора.

Введение

В настоящей работе рассматриваются задачи принятия оптимальных решений, которые характеризуются многоэкстремальностью целевых функций (так называемые задачи глобальной оптимизации) и высокой вычислительной стоимостью определения их локальных характеристик. Отмеченные особенности отличают системы, вычисление критериев качества которых связано со сложными и длительными численными расчетами (выполнением компьютерного имитационного моделирования, численным решением сложных систем дифференциальных уравнений и т.п.).

Возможность построения адаптивных схем поиска глобального решения подобных многомерных задач, отличных от переборных схем, связана с наличием неких априорных предположений о свойствах задач. Для многих важных прикладных задач (таких как, например, решение нелинейных уравнений и неравенств, регулирование сложных нелинейных систем и т.д.) типичным является предположение о липшицевости функций (см., например, [1,4,5,7,11,13,19,23,25-27]).

1. Липшицева глобальная оптимизация

Задача поиска глобального минимума многомерной многоэкстремальной функции, удовлетворяющей в допустимой области $D\subset \mathrm{R}^n$ условию Липшица с константой Липшица $0 < L < \infty$, может быть сформулирована следующим образом:

$$\min f(x),\ x\in D, \qquad (1)$$

$$|\,f(x') - f(x'')\,| \le L\,\|x'-x''\|,\ x', x''\in D, \qquad (2)$$

где $\|\cdot\|$ есть евклидова норма, а допустимая область D задается в виде

$$D = \{x\in \mathrm{R}^n : a_i \le x_i \le b_i,\ i=1,\ldots,n\}. \qquad (3)$$

В литературе рассматривается множество различных алгоритмов решения задачи (1)-(3) (см. [1–27]). Они могут быть разделены на четыре группы в зависимости от способа получения оценки константы Липшица L из (2). К первой группе относятся алгоритмы, в которых применяется оценка L, заданная априори (см. [5,6,23]). Вторая группа включает алгоритмы, адаптивно оценивающие в ходе поиска глобальную константу Липшица во всей области D (адаптивная глобальная оценка, см. [1,8,13,20,23,27]). Алгоритмы с использованием адаптивных локальных оценок L_i в различных подобластях D_i поисковой области (см. [10,11,16,25–27]) входят в третью группу. Наконец, к четвертой группе принадлежат алгоритмы, в которых оценка константы Липшица выбирается из некоторого множества возможных значений (см. [3,9,14,15,21,24]). В силу своей относительной простоты методы последней группы нашли достаточно широкое применение при решении практических задач (см. [9,11,19,25]) и привлекли внимание многих исследователей. Именно этой группе методов уделено основное внимание в данной работе.

Для упрощения выбора новых точек испытаний и получения нижних границ значений функции $f(x)$ в области D во многих многомерных методах применяется техника адаптивного разбиения области поиска D на множество подобластей D_i, а теоретическое исследование алгоритмов разбиения может быть проведено в рамках единых схем (см. [4,11,13,23,27]). Например, применяются разбиения области D на гиперинтервалы с вычислением функции в их центральных точках [6,15,23]. Широко используются также разбиения с проведением испытаний функции в вершинах, соответствующих главной диагонали каждого гиперинтервала (диагональные схемы разбиения, [8,11,12,23,24]). В настоящей работе рассматриваются более сложные стратегии разбиения, основанные на симплексах [2,4,19,21,22,23]. Для ряда прикладных задач симплексные разбиения могут оказаться более эффективными по сравнению с другими техниками [4,19,21].

Необходимо отметить, что использование только глобальной информации о поведении целевой функции в ходе ее минимизации может замедлить сходимость алгоритма к точке глобального минимума. Одним из способов преодоления такой сложности является (см. ссылки в [1,4,11,25]) остановка метода глобального поиска и запуск некоего локального алгоритма, призванного улучшить найденное решение. При этом, однако, возникает непростой вопрос об определении момента завершения глобального алгоритма: его преждевременная остановка может привести к потере глобального решения, в то время как поздняя остановка существенно замедляет поиск.

Именно поэтому столь важным аспектом в методах глобальной оптимизации является учет локальной информации о поведении целевой функции. Например, в работах [10,11,27] была предложена схема локальной настройки, основная идея которой заключается в сопряжении локальной и глобальной информации при адаптивном оценивании локальных констант Липшица в различных подобластях поисковой области. Использование локальной настройки позволяет значительно ускорить работу методов липшицевой глобальной оптимизации. Наличие информации о производных целевой функции также даёт очень важную локальную информацию о характере функции (см. [11,16,17,18,27]). Весьма перспективными представляются также техника уточнения полученного в ходе поиска текущего оптимального решения (см. [17,18,26]) и двухфазная схема поиска глобального минимума (см. [11,24,26]).

2. Двухфазные симплексные методы глобальной оптимизации с множественными оценками константы Липшица

В докладе рассматриваются варианты ускорения симплексных методов DISIMPL-C и DISIMPL-V [21] с множественными оценками константы Липшица в рамках двухфазной схемы поиска [11,24]. В методе DISIMPL (DIviding SIMPLices, по аналогии с названием метода DIRECT – DIviding RECTangles [15]) с суффиксом (-C) целевая функция вычисляется в центрах получаемых в ходе разбиения симплексов, в то время как в методе DISIMPL с суффиксом (-V) испытания функции проводятся в вершинах симплексов, избегая возможного дублирования информации при помощи специально поддерживаемой базы вершин (см. рис. 1). На каждой итерации методов определяются недоминируемые симплексы (см. [11,15,21]), некоторые из которых подвергаются дальнейшему разбиению с последующими новыми испытаниями целевой функции. В работе [21] проведен теоретический и экспериментальный анализ обоих методов.

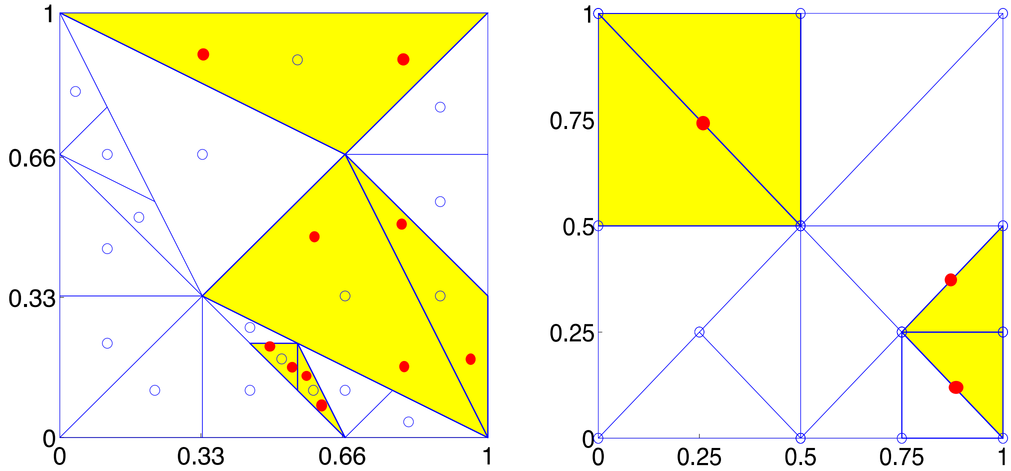

Рис. 1. Разбиения области поиска $[0,1]^2$ при помощи методов DISIMPL-C (слева) и DISIMPL-V (справа): желтым цветом выделены симплексы для нового разбиения и красным – новые точки вычисления целевой функции после проведения разбиений

Использование двухфазной схемы поиска позволяет значительно ускорить работу обоих методов и приводит к построению двух новых алгоритмов, Gb-DISIMPL-C и Gb-DISIMPL-V (префикс Gb- означает «глобально-ориентированный» от англ. Globally-biased). При достижении достаточного уровня разбиения симплексов около точки текущего минимального значения функции методы переключаются на исследование больших подобластей, которые могут содержать лучшее решение. Так как около текущей лучшей точки проводится большое число разбиений, ее окрестность содержит лишь малые симплексы, в то время как большие могут находиться только далеко от нее. Тем самым по сравнению с методами DISIMPL-C и DISIMPL-V из [21] предлагаемые в работе алгоритмы балансируют глобальную и локальную информацию более совершенным образом с целью обеспечения скорейшей сходимости к точкам глобального минимума сложных многоэкстремальных функций.

В табл. 1–3 и на рис. 2 приведены результаты численного сравнения методов Gb-DISIMPL-C и Gb-DISIMPL-V с их первоначальными версиями из [21] и с методами DIRECT и DIRECT*l*, широко используемыми (в силу их простоты) при решении прикладных задач глобальной оптимизации. Сравнение проведено на двухстах функциях из двух дифференцируемых GKLS-классов «простой» и «сложной» структуры (см. [11, гл.5] для детального описания техники проведения экспериментов с тестовыми классами на основе GKLS-генератора). Как видно из табл. 1–3, новые методы при значительно меньшем числе испытаний функций (табл. 1 и 2) обеспечивают весьма хороший уровень исследования области поиска (табл. 3).

Таблица 1. Среднее число испытаний на двумерных GKLS-классах

Класс	DIRECT	DIRECT*l*	DISIMPL-C	Gb-DISIMPL-C	DISIMPL-V	Gb-DISIMPL-V
«Простой»	198.89	292.79	200.80	187.72	192.93	173.09
«Сложный»	1063.78	1267.07	1189.60	701.28	1003.56	535.95

Таблица 2. Максимальное число испытаний на двумерных GKLS-классах

Класс	DIRECT	DIRECT*l*	DISIMPL-C	Gb-DISIMPL-C	DISIMPL-V	Gb-DISIMPL-V
«Простой»	1159	2318	960	938	773	418
«Сложный»	3201	3414	6696	2624	2683	1745

Таблица 3. Максимальное число подобластей на двумерных GKLS-классах

Класс	DIRECT	DIRECTl	DISIMPL-C	Gb-DISIMPL-C	DISIMPL-V	Gb-DISIMPL-V
«Простой»	1159	2318	960	938	1419	735
«Сложный»	3201	3414	6696	2624	5085	3281

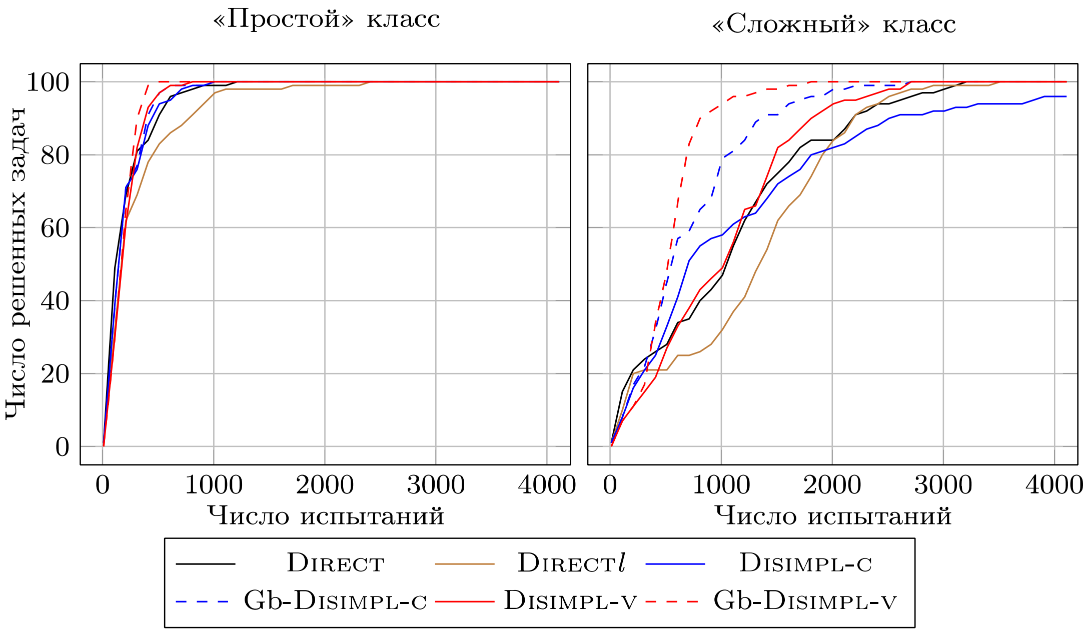

Рис. 2. Операционные характеристики [4,13,27] сравниваемых методов при решении задач «простого» и «сложного» GKLS-классов размерности n=2

По результатам проведенных экспериментов можно заключить, что при решении сложных многомерных многоэкстремальных задач наблюдается значительное преимущество методов с использованием двухфазной стратегии поиска по отношению к глобальным алгоритмам без использования подобной стратегии ускорения. С ростом размерности задач ожидается еще более существенное преимущество данной стратегии поиска глобального минимума. Кроме того, рассмотренная симплексная стратегия разбиения может быть успешно распараллелена (см. [1,22,27]), что дает дополнительные возможности для ускорения поиска.

Работа Д.Е. Квасова и Я.Д. Сергеева выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России, государственное соглашение о предоставлении гранта № 14.B37.21.0878. Постдокторантура Р. Паулавичюса финансируется проектом Структурных фондов Европейского союза «Внедрение Постдокторантуры в Литве».

Литература

1. Гергель В.П., Стронгин Р.Г., Городецкий С.Ю., Гришагин В.А., Маркина М.В. Современные методы принятия оптимальных решений. – Н. Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2002.
2. Городецкий С.Ю. Многоэкстремальная оптимизация на основе триангуляции области // Вестник ННГУ: Математическое моделирование и оптимальное управление. – 1999. – Т. 2, № 21. – С. 249–268.
3. Городецкий С.Ю. Несколько подходов к обобщению метода Direct на задачи с функциональными ограничениями // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2013. – № 6. – В печати.

4. Городецкий С.Ю., Гришагин В.А. Нелинейное программирование и многоэкстремальная оптимизация. – Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2007.
5. Евтушенко Ю.Г. Методы решения экстремальных задач и их применение в системах оптимизации. – М.: Наука, 1982.
6. Евтушенко Ю.Г., Посыпкин М.А. Применение метода неравномерных покрытий для глобальной оптимизации частично целочисленных нелинейных задач // Журн. вычисл. мат. и матем. физ. – 2011. – Т. 51, № 8. – С. 1376–1389.
7. Жиглявский А.А., Жилинскас А.Г. Методы поиска глобального экстремума. – М.: Наука, 1991.
8. Квасов Д.Е., Сергеев Я.Д. Многомерный алгоритм глобальной оптимизации на основе адаптивных диагональных кривых // Журн. вычисл. мат. и матем. физ. – 2003. – Т. 43, № 1. – С. 42–59.
9. Квасов Д.Е., Сергеев Я.Д. Методы липшицевой глобальной оптимизации в задачах управления // Автоматика и телемеханика. – 2013. – №9. – С. 3–19.
10. Сергеев Я.Д. Одномерный детерминированный алгоритм глобальной минимизации // Журн. вычисл. мат. и матем. физ. – 1995. – Т. 35, № 5. – С. 705–717.
11. Сергеев Я.Д., Квасов Д.Е. Диагональные методы глобальной оптимизации. – М.: Физматлит, 2008.
12. Сергеев Я.Д., Квасов Д.Е. Адаптивные диагональные кривые и их программная реализация // Вестник ННГУ. Математическое моделирование и оптимальное управление. – 2001. – Т. 2, № 24. – С. 300–317.
13. Стронгин Р.Г. Численные методы в многоэкстремальных задачах. Информационно-статистический подход. – М.: Наука, 1978.
14. Gablonsky J.M., Kelley C.T. A locally-biased form of the DIRECT algorithm // J. Global Optim. – 2001. – Vol. 21, № 1. – P. 27–37.
15. Jones D.R., Perttunen C.D., Stuckman B.E. Lipschitzian optimization without the Lipschitz constant //J. Optim. Theory Appl. – 1993. – Vol. 79, № 1. – P. 157–181.
16. Kvasov D.E., Sergeyev Ya.D. Univariate geometric Lipschitz global optimization algorithms // Numer. Algebra Contr. Optim. – 2012. – Vol. 2, № 1. – P. 69–90.
17. Kvasov D.E., Sergeyev Ya.D. Lipschitz gradients for global optimization in a one-point-based partitioning scheme // J. Comput. Appl. Math. – 2012. – 236(16) – P. 4042–4054.
18. Lera D., Sergeyev Ya.D. Acceleration of univariate global optimization algorithms working with Lipschitz functions and Lipschitz first derivatives // SIAM J. Optim. – 2013. – Vol. 23, № 1. – P. 508–529.
19. Paulavičius R., Žilinskas J. Simplicial Global Optimization. – N.Y.: Springer, 2013.
20. Paulavičius R., Žilinskas J. Influence of Lipschitz bounds on the speed of global optimization // Technological Econ. Developm. of Economy. – 2012. – 18(1). – P. 54–66.
21. Paulavičius R., Žilinskas J. Simplicial Lipschitz optimization without the Lipschitz constant // J. Global Optim. – 2013. – In Press.
22. Paulavičius R., Žilinskas J., Grothey A. Investigation of selection strategies in branch and bound algorithm with simplicial partitions and combination of Lipschitz bounds // Optim. Lett. – 2010. – Vol. 4, № 2. – P. 173–183.
23. Pintér J.D. Global Optimization in Action. – Dordrecht: Kluwer Publishers, 1996.
24. Sergeyev Ya.D., Kvasov D.E. Global search based on efficient diagonal partitions and a set of Lipschitz constants // SIAM J. Optim. – 2006. – Vol. 16, № 3. – P. 910–937.
25. Sergeyev Ya.D., Kvasov D.E. Lipschitz global optimization // In Wiley Encyclopedia of Operations Research and Management Science (Ed. by Cochran J.J. et al.). – New York: Wiley, 2011. – Vol. 4. – P. 2812–2828.
26. Sergeyev Ya.D., Strongin R.G., Lera D. Introduction to Global Optimization Exploiting Space-Filling Curves. – N.Y.: Springer, 2013.

27. Strongin R.G., Sergeyev Ya.D. Global Optimization with Non-Convex Constraints. Sequential and Parallel Algorithms. – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2000.