# АЛГОРИТМЫ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ФУНКЦИЙ ПРИ НАЛИЧИИ ОГРАНИЧЕНИЙ НЕРАВЕНСТВ

А. В. Кузнецов, А. И. Рубан

А. В. Кузнецов

Сибирский федеральный университет

e-mail: kuaw26@mail.ru

А. И. Рубан

e-mail: ai-rouban@mail.ru

Представлены идея, алгоритмы и программный комплекс поиска глобального минимума многоэкстремальных функций многих непрерывных переменных при учёте ограничений неравенств. Поход к синтезу алгоритмов оптимизации основан на селективном усреднении координат, минуя усреднение оптимизируемой функции. На численных примерах продемонстрирована эффективность работы алгоритмов.

*Ключевые слова*: глобальная оптимизация, селективное усреднение координат.

## Введение

Одной и частых проблем при решении прикладных задач является многоэкстремальный характер поведения целевых функций (так называемые задачи глобальной оптимизации). Интерес к таким задачам объясняется как большим числом многоэкстремальных задач требующих решения, так и быстрым развитием вычислительных мощностей, которые позволяют подступиться к решению таких задач. При этом зачастую целевая функция и наложенные на нее ограничения представлены в виде «черного ящика», являются недифференцируемыми, сложными с вычислительной точки зрения и могут быть искажены помехами. Также ограничения, накладываемые на целевую функцию, сами по себе могут представлять сложную проблему, например, ограничения задающие допустимую область сложной формы или узкую область в форме жгута. В связи с этим разработка эффективных алгоритмов и их программных реализаций для решения различных задач глобальной оптимизации при наличии ограничений неравенств является актуальным направлением научных исследований.

В докладе представлен путь отыскания глобального экстремума основанный на селективном усреднении искомых координат целевой функции. Такой способ предложен в работах [1-3], его развивают авторы данного доклада [4-5].

## Постановка задачи

Необходимо отыскать глобальный минимум функции многих переменных:

$$I(x) = \min_{x \in X}, \quad x = (x_1, \ldots, x_m). \tag{1}$$

Допустимая область $X$ определяется системой ограничений неравенств

$$\varphi_j(x) \le 0, \ j = \overline{1, m_1}. \tag{2}$$

Ограничения сужают область поиска экстремума. Целевая функция $I(x)$ может быть многоэкстремальной, разрывной, недифференцируемой, а также может быть искажена помехой. Функции ограничений также могут быть невыпуклыми и недифференцируемыми.

Поиск глобального экстремума осуществляется только на основе измерений или вычислений указанных функций: $I(x)$; $\varphi_j(x)$, $j=\overline{1,\, m_1}$.

**Алгоритмы глобальной оптимизации**

Исследователь задает: 1) исходную гиперпрямоугольную область варьирования $\Pi^0$ (с центром в $x^0$ и интервалами $\Delta x^0$), которая должна накрывать искомый глобальный минимум; 2) количество пробных точек $n$, равномерно размещаемых внутри области варьирования на каждой итерации алгоритма; 3) вид ядра и степень его селективности $s$, используемых при поиске глобального минимума.

Было разработано три способа активного учета ограничений при поиске глобального минимума.

*Первый способ* самый простой в плане программной реализации, но он самый затратный по количеству вычислений целевой функции и ограничений – на каждом шаге последовательно генерируются пробные точки в области варьирования и из них оставляются только те точки, которые удовлетворяют ограничениям неравенствам. Чем меньше объём допустимой области или чем больше число ограничений, тем больше число безрезультатных проб. В этом основной недостаток данного способа учёта ограничений неравенств и соответственно первого алгоритма поиска главных минимумов.

*Второй способ* позволяет учесть нарушаемые ограничения за счёт расширения нормированного ядра в алгоритме расчёта рабочего шага и размеров области варьирования путем добавления дополнительного ядра (в виде произведения) для относительных величин нарушаемых ограничений. Исследователю необходимо настраивать вид и степень селективности для этого дополнительного ядра.

*Третий способ* базируется на изменении минимизируемой функции в пробных точках. Во-первых, она берётся в относительных величинах, а во-вторых, к ней добавляется штрафная компонента (тоже в относительных величинах), построенная по функциям $\varphi_j(x)$, входящим в левую часть ограничений неравенств, в тех точках, где ограничения нарушены. Исследователь настраивает штрафной коэффициент $\alpha$.

Опишем *первый алгоритм* движения к минимуму на $(l+1)$-м шаге, если на предыдущем шаге был получен вектор искомых переменных $x^l$, построенный на основе метода усреднения координат, имеет вид:

$$
\begin{gathered}
x_\nu^{l+1} = x_\nu^l + \Delta x_\nu^l u_\nu,\; u_\nu = \sum_{i=1}^{n} u_\nu^{(i)} \bar{p}_s^{(i)},\; \nu=\overline{1,\, m},\\
\bar{p}_s^{(i)} = \frac{p_s(g^{(i)})}{\sum_{j=1}^{n} p_s(g^{(j)})},\; g^{(i)} = \frac{I^{(i)}-\widehat{I}_{\min}}{\widehat{I}_{\max}-\widehat{I}_{\min}} \qquad (3)\\
\Delta x_\nu^{l+1} = \gamma_q \cdot \Delta x_\nu^l \cdot \left( \sum_{i=1}^{n} | u_\nu^{(i)} |^q \bar{p}_s^{(i)} \right)^{1/q},\; \nu=\overline{1,\, m},\; l=0,\,1,\,2,\,\cdots;\\
0<\gamma_q,\; q\in\{1,2,\cdots\},\; 0<s\,.
\end{gathered}
$$

Здесь: $\widehat{I}_{\min} = \min\{I^{(i)},\, i=\overline{1,\, n}\}$, $\widehat{I}_{\max} = \max\{I^{(i)},\, i=\overline{1,\, n}\}$; $s$ – коэффициент селективности ядра $p_s(\cdot)$; в переменных $u_\nu^{(i)}$, $\bar{p}_s^{(i)}$ для упрощения записи опущен номер итерации $l$; всегда $0 \le g^{(i)} \le 1$. Ядра $\overline{p}_s^{(i)}$ нормированы на системе $n$ пробных точек: $\sum_{i=1}^{n} \overline{p}_s^{(i)} = 1$.

Перед совершением $(l+1)$-го рабочего шага при получении пробных точек $x^{(i)}$, $i = \overline{1, n}$, последовательно генерируются точки (равномерно распределённые) в прямоугольной области $\Pi^l$ с центром в точке $x^l$:

$$x_\nu^{(i)} = x_\nu^l + \Delta x_\nu^l \cdot u_\nu^{(i)},\ u_\nu \in [-1;\,1],\ \nu = \overline{1, m},\ i = 1, 2, \cdots$$

и из них оставляется $n$ точек, попадающих в допустимую область $X$. В пробных точках вычисляется минимизируемая функция $I^{(i)}$, $i = \overline{1, n}$, и на основе этих экспериментальных данных [ $x_\nu^{(i)}$, $\nu = \overline{1, m}$, $I^{(i)}$, $i = \overline{1, n}$ ] совершается вышеприведённое рабочее движение и пересчитываются размеры области поиска (3).

Критерием останова процесса поиска обычно служит условие уменьшения размера области варьирования $\Delta x^l$ до заданной величины: $\max\{|\,\Delta x_\nu^l\,|,\ \nu = \overline{1, m}\} \le \varepsilon$.

Ядра $p_s(g)$ на интервале изменения $0 \le g \le 1$ являются неотрицательными и убывающими. Выбор формы и коэффициента $s$ селективности ядра существенно влияет на характеристики поиска глобального минимума. Чаще всего используется степенное ядро $p_s(g) = (1 - g^r)^s, r = 1,2,3,\ldots$. Коэффициент $s$ для степенных ядер лежит в широком диапазоне целых положительных чисел и подбирается сравнительно просто.

Опишем *второй алгоритм*. На каждой итерации в области $\Pi^l$ равномерно размещается $n$ пробных точек и в них вычисляются функция $I^{(i)}$ и функции $\varphi_j$ ограничений: $I(x^{(i)}) = I^{(i)},\ \varphi_j(x^{(i)}),\ j = \overline{1, m},\ i = \overline{1, n}$. Далее формируются нормированные ядра $\overline{p}_s^{(i)}$:

$$\overline{p}_s^{(i)} = \frac{p_{1,s}(g^{(i)}) \prod_{j \in J^{(i)}} p_{2,s}(g_j^{(i)})}{\sum_{\mu=1}^{n} p_{1,s}(g^{(\mu)}) \prod_{j \in J^{(\mu)}} p_{2,s}(g_j^{(\mu)})}. \tag{4}$$

Здесь: множество $J^{(i)}$ включает только номера тех функций ограничений, для которых ограничения нарушены: при $j \in J^{(i)} \in \overline{1, m_1}$ всегда $0 < \varphi_j(x^{(i)})$; $g^{(i)} = \dfrac{I^{(i)} - \widehat{I}_{\min}}{\widehat{I}_{\max} - \widehat{I}_{\min}}$, а также $g_j^{(i)} = \dfrac{\varphi_j(x^{(i)}) - \varphi_{j,\min}}{\varphi_{j,\max} - \varphi_{j,\min}}$, $j = \overline{1, m_1}$; $p_{1,s}$ – ядро по оптимизируемой функции; $p_{2,s}$ – ядро по ограничениям; $\widehat{I}_{\min} = \min\{I^{(i)},\ i = \overline{1, n}\}$, $\widehat{I}_{\max} = \max\{I^{(i)},\ i = \overline{1, n}\}$; для каждого фиксированного $j$: $\varphi_{j\min} = \min\{\varphi_j(x^{(i)}), i : 0 < \varphi_j(x^{(i)})\}$, $\varphi_{j\max} = \max\{\varphi_j(x^{(i)}), i : 0 < \varphi_j(x^{(i)})\}$.

Если при некотором $j = l$ множество $\{i:\ 0 < \varphi_j(x^{(i)})\}$ состоит из одного элемента, то аргумент ядра $p_{2,s}$ полагаем равным 0.75. Это значение было получено экспертным путем. Если во всех пробных точках неравенства не нарушены, то ядра становятся одномерными и зависят только от оптимизируемой функции: $\overline{p}_s^{(i)} = p_{1,s}(g^{(i)}) \Big/ \sum_{\mu=1}^{n} p_{1,s}(g^{(\mu)})$.

Далее поиск минимума производится также как и в первом алгоритме, но вместо размещения точек только в допустимой области $X$, точки размещаются равномерно по всей текущей области поиска $\Pi^l$ и расчет нормированных ядер $\overline{p}_s^{(i)}$ производится по формуле (4).

Опишем *третий алгоритм*. Сформируем штрафную функцию:

$$\widetilde{I}(x^{(i)}) = \frac{I^{(i)} - \widehat{I}_{\min}}{\widehat{I}_{\max} - \widehat{I}_{\min}} + \alpha \cdot \max\left\{ \frac{\varphi_j(x^{(i)}) - \varphi_{j\min}}{\varphi_{j\max} - \varphi_{j\min}},\ j \in J^{(i)} \in \overline{1, m_1} \right\}, \tag{5}$$

$i = \overline{1, n}$; $\alpha > 0$.

Здесь: $\widehat{I}_{\max}$, $\widehat{I}_{\min}$, $\varphi_{j,\max}$, $\varphi_{j,\min}$ для каждого фиксированного $j$, а также множество $J^{(i)}$ те же, что и во втором алгоритме.

Если при некотором $j = l$ множество $\{i : 0 < \varphi_l(x^{(i)})\}$ пустое, то этот номер $l$ не входит во множество $J^{(i)}$ (для каждого фиксированного $i$). Для пробных точек, в которых ни одно неравенство не нарушено (т.е. множество $J^{(i)}$ пустое) штрафная добавка берётся равной нулю.

Если при некотором $j = l$ множество $\{i : 0 < \varphi_l(x^{(i)})\}$ состоит из одного элемента, то соответствующий элемент в (4), входящий под оператор $\max\{\}$, полагаем равным 1: $[\varphi_l(x^{(i)}) - \varphi_{l\min}] / [\varphi_{l\max} - \varphi_{l\min}] = 1$.

Далее поиск минимума производится также как и в первом алгоритме, но пробные точки размещаются равномерно по всей области $\Pi^l$ (а не только в её допустимой части) и вместо исходной функции $I^{(i)}$ используется штрафная функция $\widetilde{I}^{(i)}$ (5).

**Численный пример**

Представленные алгоритмы показали высокую эффективность поиска на большом количестве различных тестовых примеров. Рассмотрим один из них при наличии помех. Все примеры были рассчитаны в программном комплексе глобальной оптимизации «Global optimizer 2.0».

Многоэкстремальная двумерная функция, построена как сумма шести гиперболических потенциалов:

$$z_1(\vec{x}) = \frac{1}{2|x_1 + 1.5|^2 + 2|x_2 + 1.5|^2 + 0.1}; \qquad z_2(\vec{x}) = \frac{1}{3|x_1|^{1.8} + 3|x_2|^{1.8} + 0.5};$$

$$z_3(\vec{x}) = \frac{1}{3|x_1 - 1.5|^{1.6} + 2|x_2 - 1.5|^{1.6} + 0.2}; \qquad z_4(\vec{x}) = \frac{1}{3|x_1 - 2.5|^{0.9} + 3|x_2 - 2.5|^{0.9} + 0.3};$$

$$z_5(\vec{x}) = \frac{1}{3|x_1 + 1| + 3|x_2 - 2| + 0.4}; \qquad z_6(\vec{x}) = \frac{1}{3|x_1 - 2|^2 + 2|x_2 + 1|^2 + 0.6};$$

$$I(\vec{x}) = -\sum_{i=1}^{6} z_i(\vec{x}). \tag{6}$$

Ее вид показан на рисунках 1 и 2. Она имеет шесть не симметрично расположенных минимумов, координаты которых хорошо видно на линиях равных уровней. Минимум в точке (-1.5; -1.5) является глобальным.

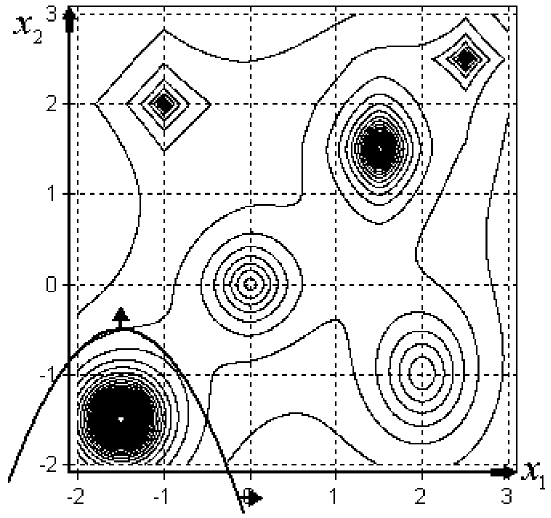


Рисунок 1. Линии равных уровней функции (6) и ограничения (7)

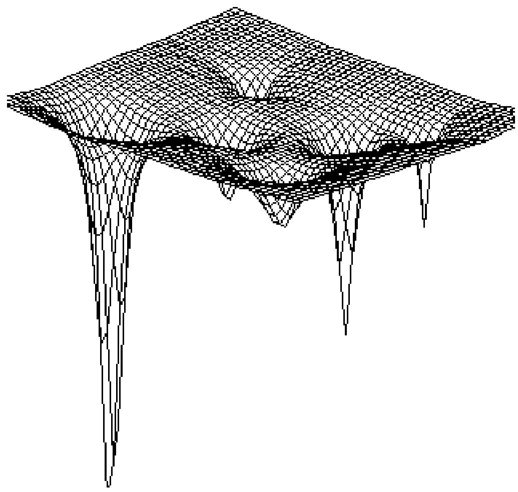

Рисунок 2. Пространственный вид функции (6)

Ограничение:

$$-(x_1+1.5)^2 - x_2 - 0.5 \le 0 \qquad (7)$$

отсекает глобальный минимум и выделяет допустимую область вне параболы.

Начальная точка старта (-2; -2) находится в недопустимой области. Исходная область варьирования $(\Delta x_1 = 6;\ \Delta x_2 = 6)$ охватывает все минимумы функции. Все три представленных алгоритма легко отыскивают решение за 7-8 итераций при следующих параметрах: $n = 100$, $\gamma_q = 1.1$, ядро параболическое при $s = 300$.

Добавим к функции (6) равномерно распределенную случайную помеху $R[-\theta;\ \theta] \equiv \theta \cdot R[-1;\ 1]$, принадлежащую интервалу $[-\theta;\ \theta]$:

$$I(x) = \text{функция (6)} + \theta \cdot R[-1;\ 1]. \qquad (8)$$

Регулируя величину $\theta$ можно задавать уровень помехи, исходя из амплитуды изменения функции качества в допустимой области (в данном случае она равна 5.6), таким образом, при $\theta = 2.8$ помеха будет 100%, а при $\theta = 5.6$ – 200%.

Для иллюстрации силы искажения функции качества помехой на рисунке 3 показаны сечения функции (8) при $x_2 = x_1$ для 100% и 200% помехи.

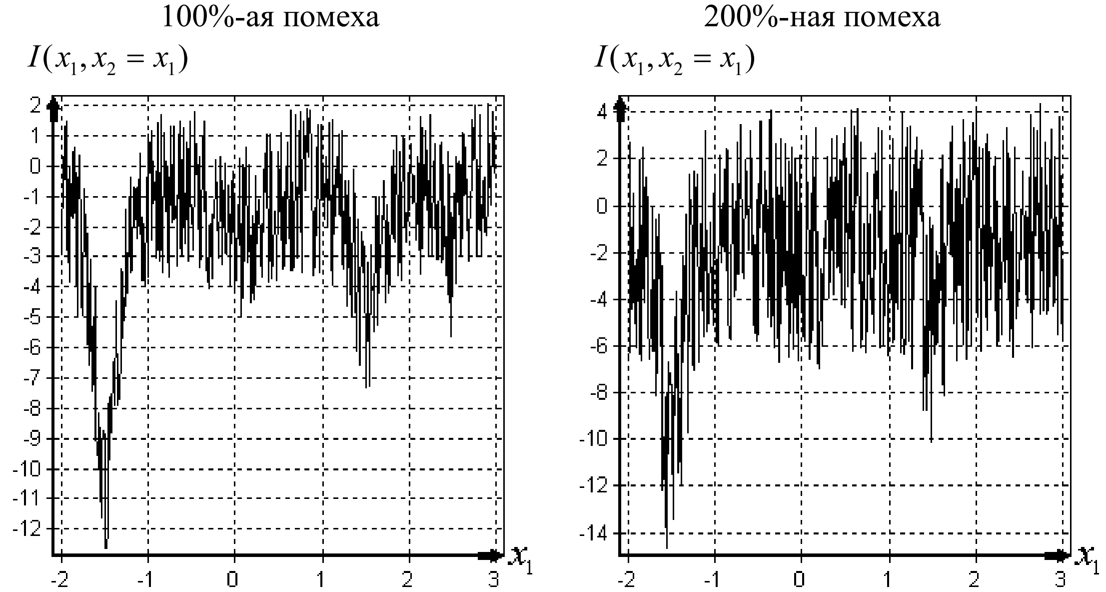


Рисунок 3. Сечение функции (8) при $x_2 = x_1$

При 100%-ом уровне помехи все алгоритмы успешно отыскивают условный глобальный экстремум (с оценкой вероятности примерно 0.95) при следующих настройках: $n = 500$, $\gamma_q = 1.1$, ядро степенное параболическое при $s = 300$, совершая при этом в среднем 9 – 12 итераций.

При 200%-ом уровне помехи все алгоритмы успешно отыскивают условный глобальный экстремум (с оценкой вероятности примерно 0.9) при следующих настройках: $n = 1000$, $\gamma_q = 1.2$, ядро степенное параболическое при $s = 300$, совершая при этом в среднем 15 – 20 итераций. По сравнению с задачей со 100%-ой помехой, количество пробных точек увеличено, так как чем выше уровень помехи, тем больше нужно экспериментальных данных для качественного усреднения.

**Программная реализация алгоритмов**

Представленные алгоритмы включены в состав пакета глобальной оптимизации «Global Optimizer v2.0». Алгоритмы и программы пакета основаны на идее усреднения координат. Пакет реализован на языке Delphi с использованием среды визуального программирования Delphi XE фирмы Embarcadero Technologies и функционирует в операционных системах семейства Windows 2000/XP/Vista/7.

При проектировании программных алгоритмов поиска главных минимумов был использован объектно-ориентированный подход. Вся необходимая информация (описание исследуемых функций, параметры алгоритмов и т.п.) сохраняется в базе данных. Пакет имеет развитые средства визуализации и позволяет стоить одномерные, двумерные и трехмерные срезы для исследуемых функций (например, рисунки 1-3). Реализован модуль для проведения пакетных исследований свойств алгоритма, путем перебора значений его параметров в указанных диапазонах.

**Заключение**

Представленные алгоритмы привлекают своей простотой в реализации, сравнительно небольшими вычислительными затратами, высокими точностными показателями и работоспособностью при наличии аддитивных помех. Также эти алгоритмы просты в настройке и для них сравнительно легко подбираются значения параметров, которые в свою очередь лежат в широких диапазонах. Перспективным направлением дальнейшего развития алгоритмов является их модификация для выполнения в параллельных вычислительных средах.

## ЛИТЕРАТУРА

[1]. Медведев А. В, Цыкунова И. М. Об алгоритмах случайного поиска // Применение вычислительных машин в системах управления непрерывными производствами / Сб. статей. Фрунзе: Изд-во Илим, 1975. 81-92.

[2]. Рубан А. И. Метод непараметрической оптимизации стохастических объектов // Системы управления: Сб. научных работ. Вып. 1. Томск: Изд-во ТГУ, 1975. 101-107.

[3]. Алексеев В. И. и др. Экстремальная радионавигация. М.: Наука, 1978.

[4]. Рубан А. И. Глобальная оптимизация методом усреднения координат: Монография. Красноярск: ИПЦ КГТУ. 2004.

[5]. Кузнецов А. В., Рубан А. И. Алгоритмы метода усреднения координат при поиске главных минимумов многоэкстремальных функций // Вестник СибГАУ. 2010. Вып. 5(31). 36-41.

# GLOBAL OPTIMIZATION ALGORITHMS FOR FUNCTIONS WITH INEQUALITIES

Alexey V. Kuznetsov, Anatoly I. Rouban

Presented the idea, algorithms and software for searching of global minimum of multiextremal functions of many continuous variables with inequalities. On numerical examples the overall effectiveness of algorithms is shown.

*Keywords*: global optimization, selective averaging of coordinates