Вычислительная технология оценки степени выпуклости многоэкстремальной функции*

А. Ю. Горнов, Т. С. Зароднюк
gornov@icc.ru, tz@icc.ru
Институт динамики систем и теории управления СО РАН, ул. Лермонтова, 134, г. Иркутск, Россия

Предложена методика определения степени выпуклости функции, основанная на ее стохастической аппроксимации на всей исследуемой области. Основной идеей подхода является поточечное исследование выпуклости функции по случайно выбранным направлениям и систематизация полученной информации с целью получения интегральной оценки выпуклости. Эффективность предложенной технологии продемонстрирована на ряде модельных примеров небольших размерностей, для которых построены и визуализированы области выпуклости функций.

Ключевые слова: *выпуклость функции; методы оптимизации; глобальный экстремум*

Computing technology for estimation of convexity degree of the multiextremal function*

A. Yu. Gornov, T. S. Zarodnyuk
Institute for System Dynamics and Control Theory of SB RAS, 134 Lermontov Str., Irkutsk, Russia

Background: Optimization problems arise in the application of mathematical modeling method. Advance in applying of mathematical modeling depends on how successfully the researcher can construct a valid model and, primarily, on the convexity or nonconvexity of the involved functions. It can be argued that the class of convex functions is mathematically well studied. However, the situation greatly changes in the case of nonconvex problems.
Methods and Results: This paper proposes a technique of determining the degree of the function convexity based on its stochastic approximation for the considerable area. The main idea of the approach is the pointwise study of the function convexity on the stochastic selected areas and systematization of this information to obtain an integrated estimate of convexity. The effectiveness of the proposed technology is demonstrated on a number of model examples of small dimensions, for which the areas of convexity are constructed and visualized.
Concluding Remarks: The selection of functional used in the mathematical modeling can be produced to choose more convenient for optimization analysis with the application of the proposed computing technology. This technique allows one to demonstrate "the areas of convexity-nonconvexity" for problems of small dimensions. The algorithm can be easily parallelized. The efficiency of the considered approach is investigated on a number of test and model problems. The obtained numerical results allow to expect for the creation of a new computational software useful in solving practical problems in various scientific and technical fields.
Keywords: *function convexity; optimization methods; global extremum*

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 15-37-20265.

Введение

Задачи оптимизации естественно возникают при применении метода математического моделирования. При этом во многих ситуациях исследователь имеет определенную свободу в выборе модели, при помощи которой целесообразно изучать рассматриваемые явления, процессы или данные. Успех в применении математического моделирования самым серьезным образом зависит от того, насколько удачно удалось сформировать адекватную модель и, в первую очередь, от выпуклости или невыпуклости привлеченных функций.

Свойство выпуклости является, очевидно, одним из самых удобных свойств при практическом анализе и оптимизации функциональных зависимостей. Оптимизации выпуклых функций посвящена необозримая научная литература, созданы эффективные теоретические подходы, разработан и основательно исследован большой набор численных алгоритмов, реализованы программные средства, имеется большой опыт практических применений (см., например, [1–8]). Неявным образом большая часть результатов для выпуклых функций перенесена на близкий класс унимодальных функций, во многих случаях более практически значимый. Можно утверждать, что класс выпуклых и унимодальных функций неплохо освоен математически. Однако ситуация самым существенным образом меняется при рассмотрении невыпуклых задач. Как правило, априори не удается получить эффективных оценок числа локальных экстремумов, осложняется теоретический анализ задач с недифференцируемыми функциями, на несколько порядков растут вычислительные затраты на достижение глобальных решений и т. д. Несмотря на многолетние усилия многих высококвалифицированных специалистов (см., например, [6, 9–14]), на практике, для задач глобальной оптимизации существенных размерностей, решаемых недетерминированными алгоритмами, никогда нет гарантий, что полученные результаты вычислений отражают наилучший из возможных вариантов решения.

В работе предлагается простая методика определения степени выпуклости функции, основанная на ее стохастической аппроксимации на всей исследуемой области:

$$f(x) \to \min, a \leqslant x \leqslant b,$$

где $f(x) : R^n \to R$, $f(x)$ — непрерывно дифференцируема и в общем случае невыпукла, $a, b \in R^n$.

Основной идеей подхода является поточечное исследование выпуклости функции по случайно выбранным направлениям и систематизация полученной информации с целью получения интегральной оценки выпуклости. Эффективность предложенной технологии демонстрируется на ряде модельных примеров небольших размерностей, для которых построены и визуализированы области выпуклости функций.

Алгоритм поиска областей выпуклости функции

1. Задаются алгоритмические параметры: ns – число стохастических проб; np —- число направлений, по которым осуществляется оценка степени выпуклости; h — шаг для оценки степени выпуклости; C – параметр, отвечающий за учитываемый порог выпуклости функции; N^1_{vip} — число случайных направлений, по которым функция оказалась выпуклой в выбранной точке; N^2_{vip} — число точек, в которых степень выпуклости функции равна 1 (стартовое значение $N^2_{\text{vip}} = 0$).
   Для всех $k = \overline{1, \text{ns}}$
2. Выбирается значение независимой переменной $x^k_i = \widehat{x}^k_i$, где $\widehat{x}^k_i$ — случайное значение из заданного отрезка $[\overline{x}^k_i, \underline{x}^k_i]$, $N^1_{\text{vip}} = 0$, $i = \overline{1, n}$.

3. Вычисляется значение минимизируемой функции в данной точке $\widehat{f}^k = f(\widehat{x}^k)$.
   Для всех $j = \overline{1, \text{np}}$:
   (а) выбираются случайные параметры p_i^j и соответствующие точки $\overline{y}_i^j = \widehat{x}_i^k + p_i^j h$ и $\underline{y}_i^j = \widehat{x}_i^k - p_i^j h$, $i = \overline{1, n}$;
   (б) вычисляются значения функции в полученных точках $\overline{f} = f(\overline{y}^j)$ и $\underline{f} = f(\underline{y}^j)$;
   (в) выполняется оценка степени выпуклости функции в исследуемой точке $S_{\widehat{x}^k}^j = \overline{f} + \underline{f} - 2\widehat{f}^k$: если $S_{\widehat{x}^k}^j < 0$, то f по выбранному направлению является вогнутой, иначе — выпуклой ($N_{\text{vip}}^1 = N_{\text{vip}}^1 + 1$).
4. Вычисляется общая степень выпуклости функции $S_{\widehat{x}^k} = N_{\text{vip}}^1/\text{np}$ в точке $\widehat{x}_i^k$.

   (а) Если $S_{\widehat{x}^k} > C$, то запоминаем исследуемую точку.
   (б) Если $S_{\widehat{x}^k} = 1$, то функция f является выпуклой в точке $\widehat{x}_i^k$ по всем рассмотренным направлениям ($N_{\text{vip}}^2 = N_{\text{vip}}^2 + 1$).
5. Итоговая степень выпуклости функции во всей допустимой области $S_f = N_{\text{vip}}^2/\text{ns}$.
6. Выполняется графическая визуализация картины выпуклости функции.
   Алгоритм завершен.

Одним из результатов работы алгоритма является значение степени выпуклости функции S_f, позволяющее оценить ее сложность. Степень выпуклости естественным образом зависит от размеров допустимой области.

Для задач небольшой размерности информативна получаемая картина выпуклости функции, на которую напрямую влияет параметр C. При нулевом его значении вся область определения функции будет заполнена (никакие из рассматриваемых точек не будут отброшены). С увеличением этого параметра все больше точек перестают достигать требуемой степени выпуклости. При выборе крайнего значения ($C = 100\%$) отображаются только точки, в которых ни по одному случайному направлению не нарушалось свойство выпуклости исследуемой функции.

Вычислительные эксперименты

Проведено тестирование предложенного алгоритма, в результате которого выбраны значения основных алгоритмических параметров, устранены неточности его программной реализации. В статье представлены результаты исследования 10-ти тестовых задач небольшой размерности. Произведена оценка степени выпуклости S_f и построены картины выпуклости для рассматриваемых многоэкстремальных функций, соответствующие разным значениям параметра C, фиксирующего учитываемый порог выпуклости (рис. 1–10).

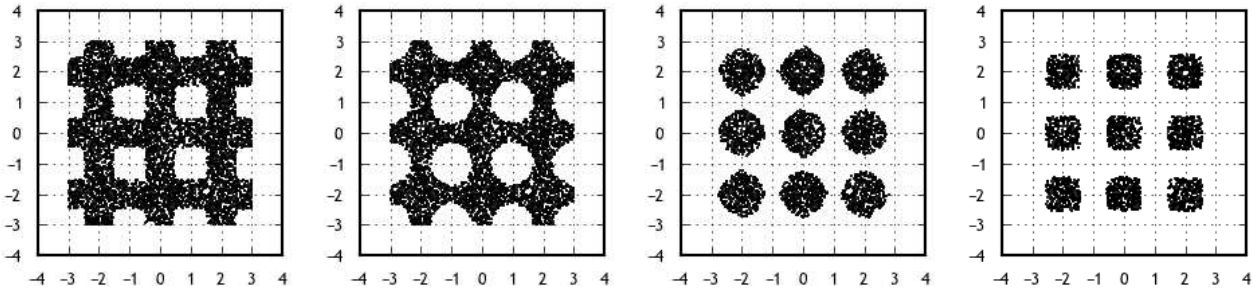
Тестовый пример 1

$f_1(x) = \sin(\pi x_1 - 0{,}5\pi) + \sin(\pi x_2 - 0{,}5\pi) + 0{,}1(x_1^2 + x_2^2) \to \min$, $x_1, x_2 \in [-3, 3]$.

Степень выпуклости данной функции S_{f_1}, полученная в результате работы алгоритма, равна 0,259.

В табл. 1 отображен фрагмент результатов проведенных вычислительных экспериментов для тестовой функции $f_1(x)$. Представлены случайные точки из допустимой области $\widehat{x}^k$, $k = \overline{1, 20}$, и значения степеней выпуклости для каждой из них $S_{\widehat{x}^k}^j$. При увеличении значения параметра C все большее число точек перестает достигать выбранного порога выпуклости функции, что естественным образом отображается на рис. 1.

Тестовый пример 2 (функция Растригина)



(а) (б) (в) (г)

Рис. 1. Области выпуклости тестовой функции 1 при разных значениях параметра: (а) $C = 20$; (б) 40; (в) 60; (г) 80

Таблица 1. Результат работы алгоритма для первых случайных проб в тестовом примере 1

k	$\widehat{x}_1^k$	$\widehat{x}_2^k$	$C = 0$	$C = 0{,}20$	$C = 0{,}40$	$C = 0{,}60$	$C = 0{,}80$
1	0,62414	2.3488	0,00	—	—	—	—
2	−1,7029	2,3488	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
3	1,8136	−2,5077	0,97	0,97	0,97	0,97	0,97
4	−1,2763	−1,3144	0,00	—	—	—	—
5	1,9267	−2,1066	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
6	1,72630	0,20775	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
7	1,8399	2,0492	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
8	2,7546	−1,0509	0,00	—	—	—	—
9	−1,9680	−0,51916	0,89	0,89	0,89	0,89	0,89
10	1,5229	0,75407	0,21	0,21	—	—	—
11	−0,77342	1.,152	0,00	—	—	—	—
12	−2,0478	−1,4416	0,79	0,79	0,79	0,79	–
13	−2,7265	−0,40888	0,38	0,38	—	—	—
14	0,75612	−2,8267	0,00	—	—	—	—
15	2,3304	−2,8998	0,36	0,36	—	—	—
16	1,2342	0,88662	0,00	—	—	—	—
17	−2,5920	1,0757	0,00	—	—	—	—
18	−0,16534	−1,8077	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
19	0,34112	0,041409	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
20	2,0490	−1,0385	0,49	0,49	0,49	—	—

$f_2(x) = x_1^2 + x_2^2 - \cos 18x_1 - \cos 18x_2 \to \min$, $x_j \in [-1, 1]$, $j = 1, 2$.

Тестовый пример 3 (функция Розенброка)

$f_3(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \to \min$, $x_1 \in [-5, 10]$, $x_2 \in [0, 15]$.

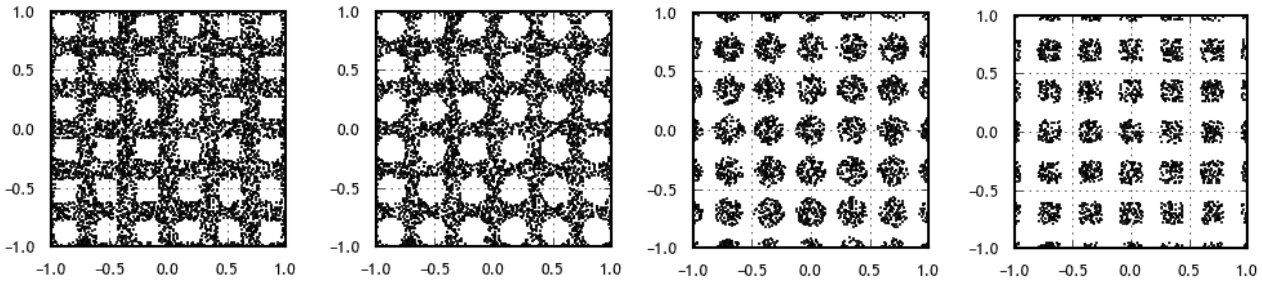
Тестовый пример 4 (функция Camel)

$$f_4(x) = \left(4 - 2{,}1x_1^2 + \frac{1}{3}x_1^4\right) x_1^2 + x_1x_2 + 4x_2^2(x_2^2 - 1) \to \min,\ x_1 \in [-2, 2],\ x_2 \in [-1, 1].$$

Тестовый пример 5

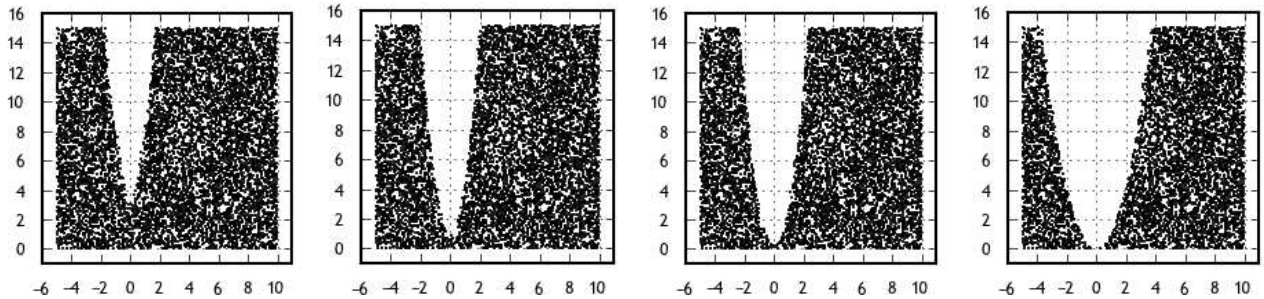
$f_5(x) = \cos x_1 \cos x_2 e^{-(x_1-\pi)^2-(x_2-\pi)^2} \to \min$, $x_j \in [-10, 10]$, $j = 1, 2$.

Тестовый пример 6



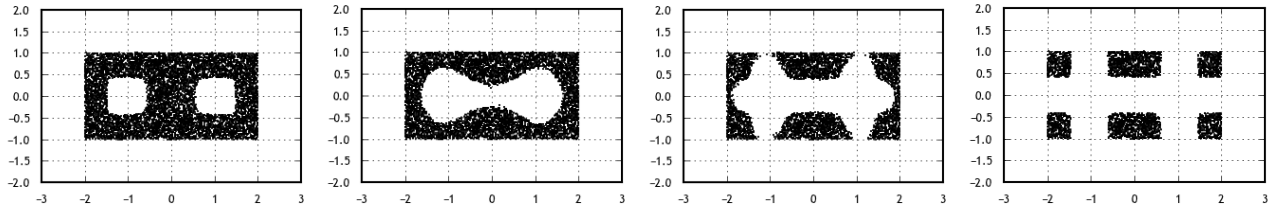
(а) (б) (в) (г)

Рис. 2. Области выпуклости тестовой функции 2 ($S_{f_2} = 0{,}229$) при разных значениях параметра: (а) $C = 20$; (б) 40; (в) 60; (г) 80



(а) (б) (в) (г)

Рис. 3. Области выпуклости тестовой функции 3 ($S_{f_3} = 0{,}649$) при разных значениях параметра: (а) $C = 20$; (б) 40; (в) 60; (г) 99



(а) (б) (в) (г)

Рис. 4. Области выпуклости тестовой функции 4 ($S_{f_4} = 0{,}334$) при разных значениях параметра: (а) $C = 20$; (б) 60; (в) 80; (г) 99

$$f_6(x) = 0{,}5 + \left(\frac{\sin(\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + 1})^2 - 0{,}5}{(1 + 0{,}001(x_1^2 + x_2^2))^2} \right) \to \min,\ x_j \in [-4, 4],\ j = 1, 2.$$

Тестовый пример 7

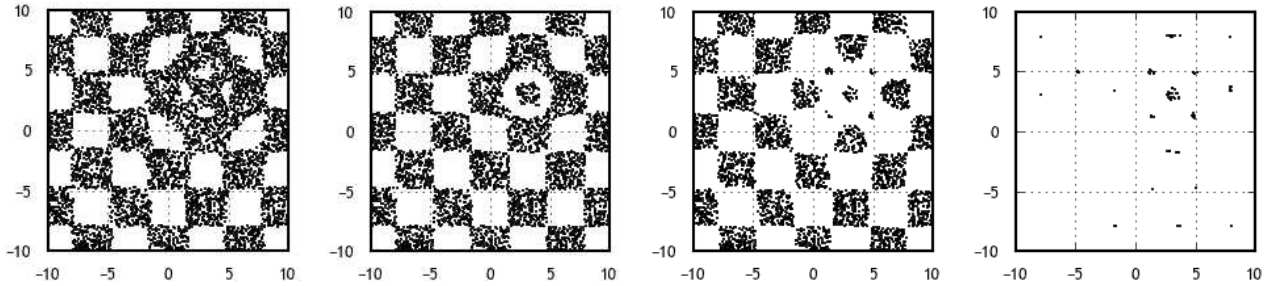
$f_7(x) = x_1^2 \dfrac{x_2}{x_1^4 + x_2^2} \to \min,\ x_j \in [-4, 4],\ j = 1, 2.$

Тестовый пример 8

$f_8(x) = \sin x_1 x_2 \to \min,\ x_j \in [-6, 6],\ j = 1, 2.$

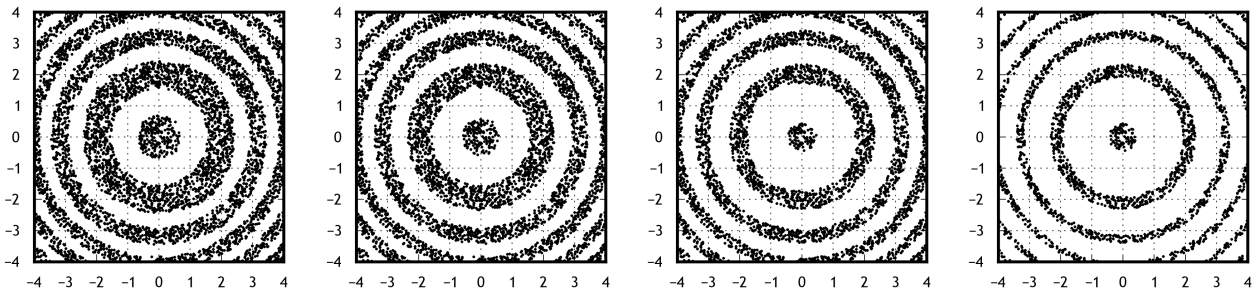
Тестовый пример 9

$f_9(x) = 3(1-x_1)^2 e^{-x_1^2-(x_2+1)^2} - 10(0{,}2x_1 - x_1^3 - x_2^3)e^{-x_1^2-x_2^2} - e^{-(x_1+1)^2 x_2^2/3} \to \min,\ x_j \in [-4, 4],$ $j = 1, 2.$



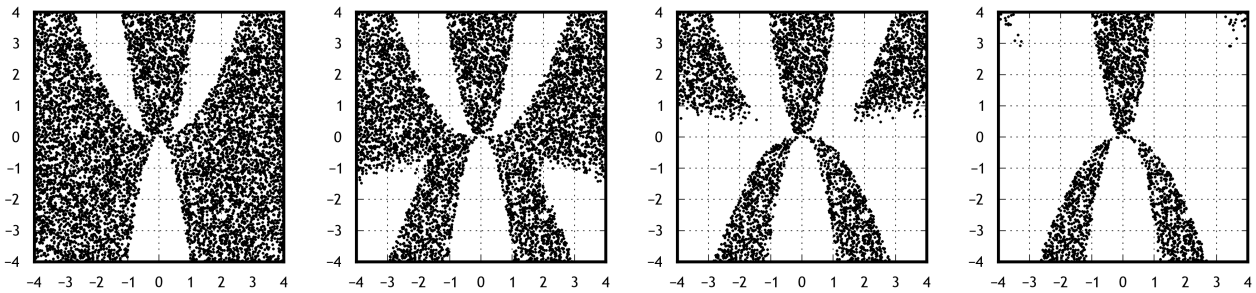
(а) (б) (в) (г)

Рис. 5. Области выпуклости тестовой функции 5 ($S_{f_5} = 0{,}008$) при разных значениях параметра: (а) $C = 20$; (б) 40; (в) 80; (г) 99



(а) (б) (в) (г)

Рис. 6. Области выпуклости тестовой функции 6 ($S_{f_6} = 0{,}250$) при разных значениях параметра: (а) $C = 20$; (б) 40; (в) 80; (г) 99



(а) (б) (в) (г)

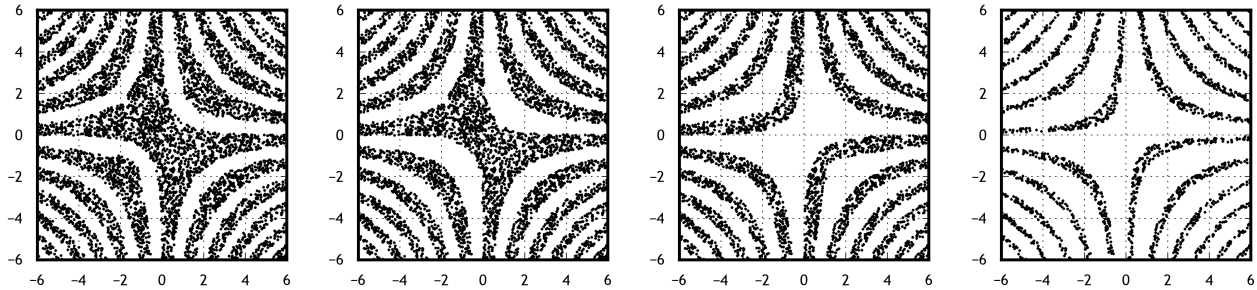
Рис. 7. Области выпуклости тестовой функции 7 ($S_{f_7} = 0{,}075$) при разных значениях параметра: (а) $C = 20$; (б) 40; (в) 60; (г) 80

Тестовый пример 10

$f_{10}(x) = x_1^3 x_2^2 + \sin x_1 - \ln|x_2| + 10 \to \min,\ x_j \in [-8, 8],\ j = 1, 2.$

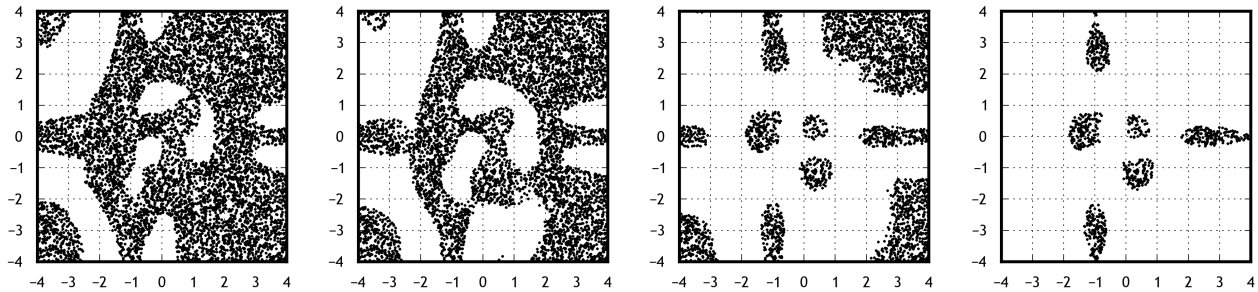
Заключение

С применением предлагаемой вычислительной технологии возможно производить селекцию используемых при моделировании функциональных зависимостей с целью выбора более удобных для последующего оптимизационного анализа. Для задач небольших размерностей технология позволяет выполнить визуализацию «областей выпуклости-



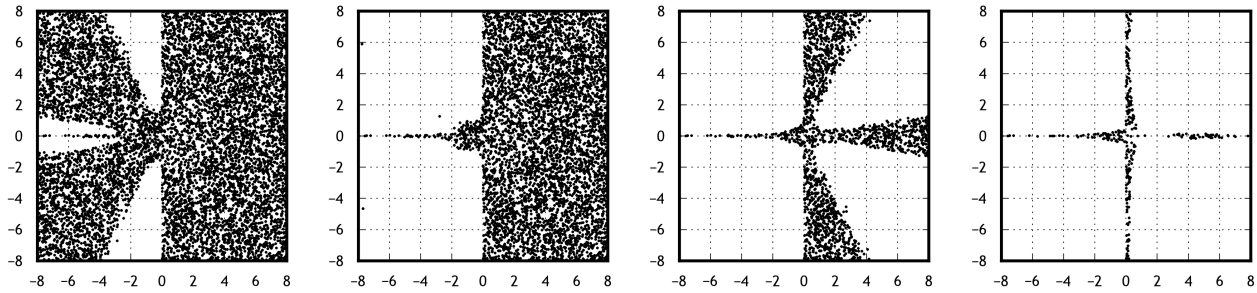
(а) (б) (в) (г)

Рис. 8. Области выпуклости тестовой функции 8 ($S_{f_8} = 0{,}219$) при разных значениях параметра: (а) $C = 20$; (б) 40; (в) 80; (г) 99



(а) (б) (в) (г)

Рис. 9. Области выпуклости тестовой функции 9 ($S_{f_9} = 0{,}080$) при разных значениях параметра: (а) $C = 20$; (б) 40; (в) 80; (г) 99



(а) (б) (в) (г)

Рис. 10. Области выпуклости тестовой функции 10 ($S_{f_{10}} = 0{,}026$) при разных значениях параметра: (а) $C = 20$; (б) 40; (в) 80; (г) 99

невыпуклости». Алгоритм может быть легко распараллелен. Работоспособность предложенного подхода исследована на ряде тестовых и модельных задач. Полученные результаты численных экспериментов позволяют надеяться на создание нового вычислительного инструмента, полезного при решении практических задач из различных научно-технических областей.

Литература

[1] *Скоков В. А.* Пакет анализа оптимизационных экономических моделей ППП «ПАОЭМ ЕС ЭВМ». М.: ЦЭМИ, 1981. 117 с.

[2] *Поляк Б. Т.* Введение в оптимизацию. М.: Наука, 1983. 384 с.

[3] *Гилл Ф., Мюррей У., Райт М.* Практическая оптимизация. М.: Мир, 1985. 509 с.

[4] *Деннис Дж., Шнабель Р.* Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. М.: Мир, 1988. 440 с.

[5] *Murray W., Gill P. E., Saunders M. A.* SNOPT: An SQP algorithm for large-scale constrained optimization // *SIAM J. Optim.*, 2002. No. 12. P. 979–1006.

[6] Encyclopedia of optimization / Eds. C. A. Floudas, P. M. Pardalos. 2nd ed. Springer, 2009. 4646 p.

[7] *Нестеров Ю. Е.* Введение в выпуклую оптимизацию. М.: МЦНМО, 2010. 280 с.

[8] *Sachsenberg B., Schittkowski K.* NLPIP: A Fortran implementation of an SQP-IPM algorithm for solving large-scale nonlinear optimization problems. *User's guide, Version 2.0.* Department of Computer Science, University of Bayreuth, 2013. Report. 29 p.

[9] *Евтушенко Ю. Г.* Методы решения экстремальных задач и их применение в системах оптимизации. М.: Наука, 1982. 432 p.

[10] *Shary S. P.* A surprising approach in interval global optimization // *Reliable Computing*, 2001. Vol. 7, no. 6. P. 497–505.

[11] *Pardalos P., Romeijn E.* Handbook of global optimization. Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 2002. Vol. 2. 569 p.

[12] *Zhigljavsky A. A., Zilinskas A. G.* Stochastic global optimization. Berlin: Springer, 2008. 362 p.

[13] *Сергеев Я. Д., Квасов Д. Е.* Диагональные методы глобальной оптимизации. М.: Физматлит, 2008. 352 p.

[14] *Rios L. M., Sahinidis N. V.* Derivative-free optimization: A review of algorithms and comparison of software implementations // *J. Global Optim.*, 2013. No. 56. P. 1247–1293.

References

[1] *Skokov V. A.* 1981. *Software for optimization analysis of economic models SAP "POAEM ES EVM".* M.: CEMI. 117 p.

[2] *Polyak B. T.* 1983. *Introduction to optimization.* M.: Nauka. 384 p.

[3] *Gill F., Murray D., Wright M.* 1985. *Practical optimization.* M.: Mir. 509 p.

[4] *Dennis J., Schnabel R.* 1988. *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations.* M.: Mir. 440 p.

[5] *Murray W., Gill P. E., Saunders M. A.* 2002. SNOPT: An SQP algorithm for large-scale constrained optimization *SIAM J. Optim.* 12:979–1006.

[6] *Floudas C. A., Pardalos P. M., eds.* 2009. *Encyclopedia of optimization*, 2nd ed. Springer. 4646 p.

[7] *Nesterov Yu. E.* 2010. *Introduction to convex optimization.* M.: MCCME. 280 p.

[8] *Sachsenberg B., Schittkowski K.* 2013. NLPIP: A Fortran implementation of an SQP-IPM algorithm for solving large-scale nonlinear optimization problems. *User's guide, Version 2.0.* Department of Computer Science, University of Bayreuth. Report. 29 p.

[9] *Evtushenko Yu. G.* 1982. *Methods for solving extremal problems and their applications in optimization systems.* M.: Nauka. 432 p.

[10] *Shary S. P.* 2001. A surprising approach in interval global optimization *Reliable Computing* 7(6):497–505.

[11] *Pardalos P., Romeijn E.* 2002. *Handbook of global optimization.* Dordrecht: Kluwer Acad. Publ. Vol. 2. 569 p.

[12] *Zhigljavsky A. A., Zilinskas A. G.* 2008. *Stochastic global optimization.* Berlin: Springer. 362 p.

[13] *Sergeev J. D., Kvasov D. E.* 2008. *Diagonal global optimization methods.* M.: Fizmatlit, 352 p.

[14] *Rios L. M., Sahinidis N. V.* 2013. Derivative-free optimization: A review of algorithms and comparison of software implementations. *J. Global Optim.* 56:1247–1293.