

全局最优化的填充修正打洞函数法

李 静

(温州大学数学与信息科学学院, 浙江温州 325035)

摘 要: 研究求解全局最优化问题的算法. 在分析了已有的填充函数法和打洞函数法之后, 吸取了这两类算法的优点, 给出了一种求取非线性最优化问题全局最优解的填充打洞函数算法. 与通常的填充函数法相比, 该算法降低了对其中参数的依赖, 并且具有较好的求解可操作性. 数值试验显示, 计算效果是满意的.

关键词: 全局最优化; 填充函数算法; 打洞函数算法

中图分类号: O221.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1006-0375(2008)06-0001-06

1 全局最优化的有关概念

全局最优化(极小化)问题的一般形式是:

$$\min_{x \in X} f(x) \quad (\text{P})$$

因为 $\max\{f(x) | x \in S\} = -\min\{-f(x) | x \in S\}$, 所以全局极大化问题包含在上面模型中. 全局极小化问题和全局极大化问题统称为全局最优化问题. 对于全局无约束最优化问题, 凸规划具有很好的性质, 这就是: 当目标函数是凸的, 可行域也是凸的时候, 凸规划的每个局部极小点就是全局极小点. 这时, 可以应用求局部极小点的方法, 求得全局极小点, 已有的求局部极小点的算法对它都是有效的. 而对于非凸的、有约束的问题(P), 在求解局部极小点时都会变得很困难, 因此求解全局极小点就更加困难^[1-3].

求全局最优化问题的填充函数法是葛仁溥首先提出的^[4-5]. 填充函数的主要思想是: 如果当前的极小点不是全局极小点的话, 构造填充函数, 通过极小化填充函数, 可以跳出原问题当前的局部极小点, 并到达一个原问题目标函数值比当前原问题的局部极小值还要小的点. 毫无疑问, 从该点出发极小化原问题, 必将得到一个比原问题目标函数值更小的局部极小点.

填充函数的缺点在于, 在函数被证明满足填充函数的定义时, 依赖于对参数的正确选取. 所以算法的成功与否, 严重地依赖这两个参数, 而且在算法执行之前我们不知道这两个参数的合适取值, 只有多次的实验才有可能找到较好的选择. 当前, 填充函数法已成为求解全局最优化问题的一个有效的方法. 许多学者对填充函数的原始定义和最初所出现的缺陷做了大量的改进^[6-10], 取得了较好的计算效果.

打洞函数方法是由文献[11]首先提出的, 仍然考虑求解问题(P). 这里目标函数要求是连续

收稿日期: 2008-04-25

作者简介: 李静(1970-), 女, 山西太原人, 讲师, 博士, 研究方向: 群体决策, 最优化理论与方法

可微的. 该打洞函数法由一系列循环组成, 每个循环包括两阶段: 局部极小化阶段和打洞阶段. 第一阶段: 极小化阶段, 是由一个初始点出发, 应用局部极小化算法, 求得函数 $f(x)$ 的一个局部极小点 x_1^* . 第二阶段: 打洞阶段, 先定义 x_1^* 处的打洞函数:

$$T(x, x_1^*) = \frac{f(x) - f(x_1^*)}{[(x - x_1^*)^T (x - x_1^*)]^\alpha}$$

这里 α 是 $(x - x_1^*)^T (x - x_1^*)$ 的强度. 然后, 寻找 $T(x, x_1^*) \leq 0$ 的点. 即找到 $x_1 \neq x_1^*$ 使得 $f(x_1) \leq f(x_1^*)$. 由 x_1 作为初始点开始下一轮循环, 必将得到一个更好的极小点.

打洞函数法的关键是如何找到使 $T(x, x_1^*) \leq 0$ 的点, 打洞函数算法有如下缺点^[12]:

(1) 极 (pole) 的强度 α 与问题有关, 当强度 α 增大到足够大时, 算法才会有效, 而 α 的增加, 算法必须重新开始, 从而要增加工作量.

(2) 打洞函数法可能找到另一局部极小点 x_1 , 成立 $f(x_1) > f(x_1^*)$, 这样对于第二个局部极小 x_1 , 必须加上另一个极, 打洞过程又要重新开始. 从而又要增加工作量.

(3) 极的增加会引起打洞函数成为平坦, 这时求极小点成为困难. 同时, 缺乏全局最优性准则同样是该算法难以克服的困难.

2 填充修正打洞函数法

对于问题 (P), 再有下列假设:

假设 1 函数 $f(x)$ 在 x 上连续可微.

假设 2 问题 (P) 只有有限个局部极小点.

令 $L(P)$ 表示目标函数 $f(x)$ 的所有局部极小点的集合, 对于问题 (P) 考虑下列变换函数

$$(T) \min_{x \in X} T(x, x^*, r, q) = [f(x) - f(x^*) + r] \exp\left(\frac{q}{\|x - x^*\| + r}\right) \quad (1)$$

其中 $x^* \in L(P) \subset \text{int } X$, $r > 0$, $q > 0$.

下面给出变换函数 $T(x, x^*, r)$ 的某些性质.

定理 1 设 $x^* \in L(P)$, 那么 x^* 是 $T(x, x^*, r, q)$ 的严格局部极大点, 这里 $q > 0$ 是一个充分大的数.

证明 因为 $x^* \in L(P)$ 是 $f(x)$ 的一个局部极小点, 则存在它的一个邻域 $O(x^*, \delta)$ ($\delta > 0$), 使得对于任意的 $T(x, x^*, r) < T(x^*, x^*, r)$ 并且 $x \neq x^*$, 有 $f(x) \geq f(x^*)$. 当 $f(x) = f(x^*)$ 时, 显然有 $T(x, x^*, r) < T(x^*, x^*, r)$. 因此, 我们仅考虑 $f(x) > f(x^*)$ 的情况,

$$T(x, x^*, r, q) = [f(x) - f(x^*) + r] \exp\left(\frac{q}{\|x - x^*\| + r}\right) \leq [L\|x - x^*\| + r] \exp\left(\frac{q}{\|x - x^*\| + r}\right)$$

这里 L 是李普希斯常数.

令 $K = \max\{\|x_1 - x_2\| : x_1, x_2 \in X\}$, 并且令 $f(t) = (Lt + r) \exp\left(\frac{q}{t + r}\right)$ ($t \geq 0$), 因此有

$$\begin{aligned} f'(t) &= [(Lt+r)\exp(\frac{q}{t+r})]' = L\exp(\frac{q}{t+r}) - (Lt+r)\exp(\frac{q}{t+r})\frac{q}{(t+r)^2} \\ &= \exp(\frac{q}{t+r})[L - (Lt+r)\frac{q}{(t+r)^2}] < \exp(\frac{q}{t+r})[L - rq\frac{1}{(K+r)^2}] \end{aligned}$$

由此当 q 充分大时, $f'(x) < 0$, $f(t)$ 是个减函数, 则有 $f(t) < 0 = r\exp\frac{q}{r}$. 所以

$$T(x, x^*, r, q) \leq f(\|x - x^*\|) < f(0) = r\exp\frac{q}{r} = T(x^*, x^*, r, q)$$

因此, x^* 是 $T(x, x^*, r, q)$ 的严格局部极大点. 显然有下列定理成立.

定理 2 若 $T(x, x^*, r) = 0$ 当且仅当 $f(x) - f(x^*) + r = 0$.

定理 3 如果 $f(x) \geq f(x^*)$, $x \neq x^*$. 那么 $\nabla T(x, x^*, r) \neq \theta$ 这里 $q > 0$ 足够的大.

证明 对任意 $x \in X$ 因 $f(x) \geq f(x^*)$, $x \neq x^*$, 那么

$$\nabla T(x, x^*, r, q) = \nabla f(x) \exp(\frac{q}{\|x - x^*\| + r}) - \frac{f(x) - f(x^*) + r}{\|x - x^*\|} \exp(\frac{q}{\|x - x^*\| + r}) \frac{q(x - x^*)}{(\|x - x^*\| + r)^2}$$

由此, 有

$$\begin{aligned} \nabla T(x, x^*, r, q)^T \frac{x - x^*}{\|x - x^*\|} &= \nabla f(x)^T \exp(\frac{q}{\|x - x^*\| + r}) \frac{x - x^*}{\|x - x^*\|} \\ &\quad - \frac{f(x) - f(x^*) + r}{\|x - x^*\|} \exp(\frac{q}{\|x - x^*\| + r}) \frac{q(x - x^*)^T (x - x^*)}{(\|x - x^*\| + r)^2} \\ &= \exp(\frac{q}{\|x - x^*\| + r}) [\nabla f(x)^T \frac{x - x^*}{\|x - x^*\|} - q \frac{f(x) - f(x^*) + r}{(\|x - x^*\| + r)^2}] \\ &< \exp(\frac{q}{\|x - x^*\| + r}) [\nabla_f - qr \frac{1}{(K+r)^2}] < 0. \end{aligned}$$

于是, 当 $q > 0$ 充分的大, 且对任意的 $x \in X$ 有 $\|\nabla f(x)\| \leq \nabla_f$ 时, 得到 $\nabla T(x, x^*, r) \neq \theta$.

定理 4 设 $x^* \in L(P)$ 且 $x^* \notin G(P)$, 这表示 $S_2 = \{x \in X \mid f(x) < f(x^*)\} \subset \text{int } X$ 非空, 那么存在点 $x_1^* \notin S_2$ 使得 x_1^* 是 $T(x, x^*, r, q)$ 的一个局部极小点.

证明 如果 S_2 非空, 那么一定存在 \bar{x} 满足 $f(\bar{x}) < f(x^*)$, 并且存在 $f > 0$ 使得 $f(\bar{x}) < f(x^*) - r$. 因此有 $T(\bar{x}, x^*, r, q) < 0$. 令 ∂X 表示 X 的边界, 因为 $f(x)$ 是强制的, 并且在 X 边界点处的函数值都大于在其内部的函数值, 所以对于任意的 $x \in \partial X$ 都有 $T(x, x^*, r, q) > 0$. 我们有

$$\min_{x \in X} T(x, x^*, r, q) = \min_{x \in X \setminus \partial X} T(x, x^*, r, q) = T(x_1^*, x^*, r, q) \leq T(\bar{x}, x^*, r, q) < 0$$

因 $X \setminus \partial X$ 是开集, 且 $T(x_1^*, x^*, r, q) < 0$, 所以 $x_1^* \in S_2$ 是 $T(x, x^*, r, q)$ 的一个局部极小点.

从上述定理, 可以看到 $T(x, x^*, r, q)$ 不仅是一个填充函数也是一个打洞函数.

上面讨论了修正打洞函数的性质, 现在对该函数给出一种填充修正打洞函数的算法.

在求解全局最优化问题时, 该算法也分为两个阶段的循环, 就是极小化目标函数阶段和极小化修正打洞函数阶段. 在算法描述中, 把它们分别放在外循环和内循环中. 在内循环极小化填充

函数时,一旦发现目标函数值小于当前极小值时,就跳出内循环,以该点为初始点,再外循环极小化目标函数.详细叙述如下:

填充修正打洞函数法步骤:

(1) 初始步

令 $r = 1$, 选取 $0 < r_0 < 1$ 作为终止参数;

令 $q = 10$, 选取 $0 < q_0 < 1$ 和 $M > 0$;

选择 k_0 个方向, 记作 $e_i, i = 1, 2, \dots, k_0$, 一般要求 $k_0 > 2n$;

选取初始点 $x_1^0 \in \Omega$. 令 $k = 1$.

(2) 主程序

Step1 以 x_k^0 为初始点, 应用已有局部下降算法求得问题 (P) 的一个局部极小点, 记作 x_k^* . 令 $i = 1, q = 10$;

Step2 如果 $i \leq k_0$, 那么, 转到 step8; 否则, 转到 step3;

Step3 如果 $r \leq r_0$, 那么终止迭代, x_k^* 认为是问题 (P) 的一个全局极小点; 否则, 转到 step4;

Step4 如果 $q > q_0$, 那么, 令 $r = r/2, q = 10$, 转到 step5; 否则, 令 $q = 10q, i = 1$, 转到 step5;

Step5 $\bar{x}_k^* = x_k^* + \delta e_i$ (这里 δ 是一个充分小的整数). 如果 $f(\bar{x}_k^*) < f(x_k^*)$, 那么, 令 $k = k + 1, x_k^0 = \bar{x}_k^*$, 转到 step1; 否则, 转到 step6;

Step6 令 $T(x, x^*, r, q) = [f(x) - f(x^*) + r] \exp\left(\frac{q}{\|x - x^*\| + r}\right)$ 令 $y_0 = \bar{x}_k^*$, 进入内循环.

(3) 内循环

Step1 令 $m = 0$;

Step2 应用局部下降算法 (例如, 拟牛顿法、共轭梯度法等) 以 y_0 为初始点极小化填充函数 $F(x, x^*, q, r)$, 令 $\{y_m\}$ 表示其迭代点列;

Step3 如果 $\|y_{m+1} - x_1^0\| \geq M$, 那么, 令 $i = i + 1$, 转到主程序 step2; 否则, 转下一步 step4;

Step4 如果 $f(y_{m+1}) \leq f(x_k^*)$, 那么, 令 $k = k + 1, x_k^0 = y_{m+1}$, 转到主程序 Step1; 否则, 令 $m = m + 1$, 转到 step2.

现在解释一下该算法思想. 关于算法的终止准则, 是这样设计的: 首先, 在初始化阶段令 $r = 1$ 和 $q = 10$ 进入主程序. 然后, 在内循环连续 k_0 次没有找到目标函数值小于当前极小值的点的情况下, 令 $q = 10q$, 重新进入内循环搜索目标函数值小于当前极小值的点, 如果依然在连续 k_0 次没有找到, 重复上述的过程, 直到 $q > q_0$. 如果依然没有找到目标函数值小于当前极小值的点, 那么令 $r = r/2, q = 10$, 再进入内循环后, 重复上述的过程. 在内循环中, 要么找到了这样的点, 要么没找到并使得 $q > q_0$, 如果依然没有找到目标函数值小于当前极小值的点, 那么令 $r = r/2, q = 10$, 再进入内循环, 重复上述过程, 直到 $0 < r < r_0$, 这时我们认为当前极小点已

经是全局极小点了, 算法终止. 由于定理 1、定理 2 和定理 3 仅仅告诉我们存在一个充分大的正数 q' , 当 $q > q'$ 时, $T(x, x^*, r, q)$ 是一个填充函数, 至于 q' 到底是多少没有明确给出, 所以才让其逐次上升. 让 r 逐次下降是为了找到满足 $0 < r < \max_{x^*, x_1^* \in L(P)} (f(x_1^*) - f(x^*))$ 的 r . 其实在算法

$$f(x^*) < f(x_1^*)$$

开始前只要给出充分小的 r , 无需进行针对于 r 的循环即可减少算法的计算量, 同时得到的结果与全局极小值仅仅有不超过 r 的误差.

3 算法的数值试验

最后, 应用填充修正打洞算法对算例 1 和算例 2 进行求解. 用 fortran95 编程, 在硬件环境如下的机器上运行: cpu: 赛扬 1.7G, 内存: 256M. 运算结果分别列于表 1、表 2.

算例 1 (2-dimensional 函数)

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = [1 - 2x_2 + c \sin(4\pi x_2) - x_1]^2 + [x_2 - 0.5 \sin(2\pi x_1)]^2 \\ \text{s.t.} \quad & 0 \leq x_1 \leq 10 \\ & -10 \leq x_2 \leq 0 \end{aligned}$$

这里 $c = 0.2, 0.5, 0.05$. 对不同的 c 有若干个不同的局部极小点. 但全局极小点都是: $x^* = (0, 0)^T$, $f(x^*) = 0$.

表 1 算例 1 的运行结果

Table 1 The Result of Example 1

k	x_k^0	x_k^*	$f(x_k^*)$
1	(3, 3)	(-5.728 150 E-06, 1.769 778 E-05)	69.065 43
2	(-2.750 551, 1.865 924)	(-2.722 921, 1.376 518)	1.001 870
3	(4.795 631 E-02, 0.296 607 0)	(0.230 017 3, 0.554 120 6)	3.938 106 4E-03
4	(-0.911 648 2, 0.805 844 5)	(0.102 525 0, 0.300 503 6)	5.370 603 5E-08

算例 2 (Six-hump back camel 函数)

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = 4x_1^2 - 2.1x_1^4 + \frac{1}{3}x_1^6 - x_1x_2 - 4x_2^2 + 4x_2^4 \\ \text{s.t.} \quad & -3 \leq x_1 \leq 3 \\ & -3 \leq x_2 \leq 3 \end{aligned}$$

算例 2 在可行域里面有若干个局部极小点, 但只有两个全局极小点:

$x^* = (0.089 842 013 100 3, 0.712 654 030 21)$ 或 $(-0.089 844 201 310 03, -0.712 654 030 21)$.

全局极小值为 $f(x^*) = -1.031 628 453 49$.

表 2 算例 2 的运行结果

Table 2 The Result of Example 2

k	x_k^0	x_k^*	$f(x_k^*)$
1	(-2, -1)	(-1.928 296, -0.805 952 5)	0.510 634 3
2	(-0.643 298 5, -0.972 639 9)	(-0.668 487 0, -0.780 686 4)	-7.606 080 E-02
3	(-0.377 616 4, 0.553 934 6)	(9.448 850 2E-02, 0.711 201 0)	-1.031 520

参考文献

- [1] Horst R, Pardalos P M. Handbook of Global Optimization [M]. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1995: 128-130.
- [2] Jean P A, Laurent N. The Montagne Russe algorithm global optimization [J]. Mathematical Methods of Operations Research, 1998, 48(3): 153-168.
- [3] Rockafellar R T. Convex Analysis [M]. Princeton: Princeton University Press, 1970: 263-273.
- [4] Ge R P, Qin Y F. A Class of Filled Functions for Finding a Global Minimizer of a Function of Several Variables [J]. Journal of Optimization Theory and Applications, 1987, 54(2): 241-252.
- [5] Ge R P. A Filled Function Method for Finding a Global Minimizer of a Function of Several Variables [J]. Mathematical Programming, 1990, 46(5): 191-204.
- [6] Lucidi S, Piccialli V. New Classes of Globally Convexized Filled Functions for Global Optimization [J]. Journal of Global Optimization, 2002, 24(3): 219-236.
- [7] Zhang L S, Gao F, Zhu W X. Nonlinear Integer Programming and Global Optimization [J]. Journal of Computational Mathematic, 1999, 17(2): 179-190.
- [8] Zhang Q, Zhang L S. Global Minimization of Constrained Problems with Discontinuous Penalty Functions [J]. Computers and Mathematics with Applications, 1999, 37(3): 41-58.
- [9] Zhang L S, Ng C K, Li D, et al. A New Filled Function Method for Global Optimization [J]. Journal of Global Optimization, 2004, 28(4): 17-43.
- [10] Zhang L S. A Sufficient and Necessary Condition for a Globally Exact Penalty Function [J]. Chinese Journal of Contemporary Mathematics, 1997, 18(4): 415-424.
- [11] Levy A V, Montalvo A. The Tunneling Algorithm for the Global Minimization of Functions [J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1985, 6(1): 15-29.
- [12] Oblow E M. A Stochastic Tunneling Algorithm for Global Optimization [J]. Journal of Global Optimization, 2001, 20(2): 191-208.

Filled Modified Tunneling Function Algorithm for Nonlinear Global Optimization

LI Jing

(School of Mathematics and Information Science, Wenzhou University, Wenzhou, China 325035)

Abstract: This paper focuses on the global optimization problem. Combining the advantages of filled function algorithm and tunneling function algorithm, a filled modified tunneling function algorithm for nonlinear global optimization is introduced. This algorithm depends less on the parameters than normal filled function algorithm and that has been shown in numerical tests.

Key words: Global optimization; Filled function algorithm; Tunneling function algorithm

(编辑: 王一芳)