求解全局优化问题的两阶段模式搜索算法

孙 莉[1,2],王传伟[1],潘 浩[1]

1. 山东农业大学 信息科学与工程学院, 山东 泰安 271018
2. 山东农业大学 农业资源与环境博士后科研流动站, 山东 泰安 271018

摘 要: 将 Matlab 中全局优化工具箱中的模式搜索求解器与割峰函数结合，提出一个两阶段模式搜索算法。首先通过模式搜索求解器求解包含多个极小值的优化问题，返回结果后，在当前迭代点处定义割峰函数，继而采用模式搜索求解器进一步极小化辅助函数寻找比当前结果更好的下降点。该算法简单易行，数值结果表明新算法提高了模式搜索求解器获得全局解的效率。

关键词: 全局优化工具箱; 模式搜索求解器; 割峰函数; 全局优化问题

中图法分类号: O221;TP312　　**文献标识码**: A　　**文章编号**: 1000-2324(2016)03-0465-04

The Method of Two Stage Pattern Search for Bound Constrained Global Optimization

SUN Li[1,2], WANG Chuan-wei[1], PAN Hao[1]

1. *College of Information Science and Engineering/Shandong Agricultural University, Taian* 271018, *China*
2. *The Post-doctorate Research Station of Agricultural Resources and Environment/Shandong Agricultural University, Taian* 271018, *China*

Abstract: We presented a two stage pattern search method, which combined the cut-peak function and the pattern search solver in Matlab. A simple cut-peak function and choice function were defined at solution returned by pattern search solver. By minimizing the choice function, a global descent of the original objective function was assured. Since the pattern search method did not require the gradient of the choice function, smoothing technique was not employed. The new algorithm was simple to implement and numerical results indicated that the new method improved the efficiency of finding the global minimization.

Keywords: Global optimization toolbox; pattern search solver; cut peak function; global optimization

1 引 言

全局优化问题中有多个局部极小点，因此不能简单用通常意义下的局部极小化方法求解。目前 Matlab 全局优化工具箱中设计了 5 个求解器处理这类问题，包含全局搜索和多初始点求解器，遗传算法求解器，多目标遗传算法求解器，模式搜索求解器和模拟退火求解器。其中模式搜索求解器(patternsearch)的求解过程无需目标函数的梯度信息，适合于求解工程中常见的目标函数不可微甚至不连续的具体问题。另一方面，多初始点和模式搜索求解器易于并行[1,2]，使得这类算法更加适合于求解大规模的优化问题。由于至今仍没有很好的全局性判断准则，因此提高现有算法获知全局最优解的效率意义重大。

本文考虑如下界约束全局最优化问题，

$$\min f(x) \qquad s.t.\ x \in \Omega, \tag{1}$$

其中，$\Omega = \left\{ x \in R^n \,\middle|\, l \le x \le u \right\}, l \le u \in R^n$ 为已知向量， $f(x): \Omega \to R$ 为连续可微的函数。

经测试，模式搜索求解器在一些算例中被局部极小值所限，未能在全局搜寻更好的解。本文提出的两阶段模式搜索算法，在模式搜索终止前，于返回解 x_k^* 处定义割峰函数 $f(x_k^*)$，随后再次利用模式搜索求解器寻求选择函数 $F(x_k^*, x) = \min\left\{ f(x), f(x_k^*) \right\}$ 的极小点，若返回解仍为 x_k^*，则算法终止。否则，将获得新的函数值下降点 x_{k+1}，此时 $f(x_{k+1}) < f(x_k^*)$ 且为目标函数 $f(x)$ 新的局部极

收稿日期: 2014-02-23　　**修回日期**: 2014-03-05
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10901094,11301307)；山东省优秀中青年科学家科研奖励基金资助项目(BF2011SF024, BF2012SF025)
作者简介: 孙 莉(1980-),女,泰安人,副教授,博士,研究方向为最优化算法与理论. E-mail:sunlishi@hotmail.com
数字优先出版:2016-04-30 http://www.cnki.net

小值点。随后在 $x_{k+1}^* = x_{k+1}$ 处构造新的割峰函数和选择函数，继续求解选择函数的极小值点，迭代如此重复进行直至满足终止条件。新算法数值表现良好，尤其适合于求解界约束问题。由于选择函数 $F(x_k^*, x)$ 在 $f(x_k^*)$ 和 $f(x)$ 的交点处往往不可微，所以无法采用常见的梯度型算法进行求解，而模式搜索法恰好克服了这一困难。

论文结构如下：第二部分给出割峰函数的定义，并提出两阶段模式搜索算法，第三部分通过数值测试验证新算法的有效性。

2　两阶段模式搜索算法

2.1　割峰函数

下面给出与本文算法相关的定义，文献[3]中的割峰函数定义如下，

定义 1 (割峰函数)

如果含有正参数 r 的函数 $w(r, x_k^*, x)$ 满足以下条件：

(i)　x_k^* 是函数 $w(r, x_k^*, x)$ 的最大值点，并且 $w(r, x_k^*, x_k^*) = f(x_k^*)$；

(ii) 对于任何方向 $d \in R^n$，$w(r, x_k^*, x_k^* + \lambda d)$ 关于步长 λ 严格单调减小，并且

$$\lim_{\lambda \to +\infty} w(r, x_k^*, x_k^* + \lambda d) = f(x_k^*) - c(r) > -\infty ,$$

则称 $w(r, x_k^*, x)$ 为当前局部极小值点 x_k^* 处的割峰函数。$c(r)$ 为依赖于参数 r 的正数，称之为割峰函数 $w(r, x^{(k)}, x)$ 的最大割。

定义 1 给出的割峰函数截去了 $f(x)$ 位于 $w(r, x_k^*, x)$ 上方的超平面，被截掉的部分直接用 $w(r, x_k^*, x)$ 代替，这是将其命名为割峰函数的原因。

定义 2 (选择函数)

在当前局部极小值点 x_k^* 处，令 $\varphi_k(x) = \min\left\{f(x), w(r, x_k^*, x)\right\}$，称 $\varphi_k(x)$ 为选择函数。

2.2　新的割峰函数

考虑到具体应用中，迫切需要简单、易操作的全局优化算法，我们对文献[3]中的割峰函数法进行改进，将其与 Matlab 全局优化包中的模式搜索求解器结合起来。

本文中的割峰函数定义如下：

$$w(x_k^*, x) = f(x_k^*) , \tag{2}$$

此时，选择函数 $F(x_k^*, x) = \min\left\{f(x), f(x_k^*)\right\}$。易知，新的割峰函数不满足定义 1 的第 2 个条件，但是数值结果中新的函数表现良好，且两阶段模式搜索算法中，利用割峰函数帮助迭代跳出当前局部极小点，进而寻求更好的下降点，算法的有效性可通过模式搜索算法的全局收敛性加以保证。

图 1 给出了与本文密切相关的三个函数：目标函数(*l*)、割峰函数(*w*)、选择函数(*F*)的关系。图中目标函数为 $f(x) = -e^x \sin(2\pi x)$，割峰函数 $w(x_k^*, x) = f(x_k^*) = f(1.275)$。

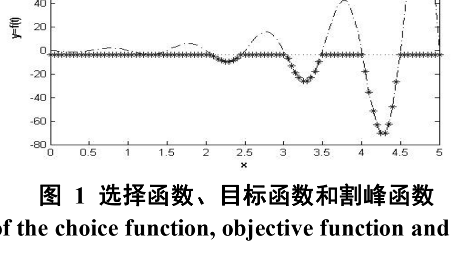

图 1　选择函数、目标函数和割峰函数

Fig.1 Relation of the choice function, objective function and cut peak function

2.3　两阶段模式搜索算法

步 0 选取初始点 x_0，置 $k:=0$。

步 1 (第一阶段)

以 x_k 为初始点，利用模式搜索求解器获得问题(1)的局部极小点 x_k^*。

步 2 (第二阶段)

在 x_k^* 处构造割峰函数 $w(x_k^*,x)=f(x_k^*)$，以及选择函数 $F(x_k^*,x)=\min\left\{f(x),f(x_k^*)\right\}$，进一步利用模式搜索求解器获得 $F(x_k^*,x)$ 的局部极小点 $\mathring{x}_k$。若 $f(\mathring{x}_k)=f(x_k^*)$，则停止计算。若 $f(\mathring{x}_k)<f(x_k^*)$，则置 $x_{k+1}^*:=\mathring{x}_k$，$k:=k+1$，转步 2。

注：由选择函数 $F(x_k^*,x)$ 的定义可知，该函数局部极小点 $\mathring{x}_k$ 满足 $f(\mathring{x}_k)=f(x_k^*)$ 或者 $f(\mathring{x}_k)<f(x_k^*)$，若为前者，说明割峰过程没有帮助模式搜索求解器获知更好的下降点，此时算法终止；若为后者，说明割峰过程提高了现有求解器获知全局解的效率。

3　数值测试

这一部分给出方向割峰函数算法的数值试验结果。我们引用全局优化问题中的 4 个经典算例进行测试，同一算例采用相同的初始点，分别通过 MATLAB 2010a 中的 patternsearch solver(PS)以及两阶段模式搜索算法求解(TSPS)求解。

下列表格中的 IT 表示总体迭代次数，IF 表示目标函数值的计算次数，IW 表示割峰次数，FP 表示最优点，FF 表示最优解处的函数值。

算例 1 Six-hump Camel-back Function

$$f(x)=4x_1^2-2.1x_1^4+\frac{x_1^6}{3}+x_1x_2-4x_2^2+4x_2^4,l=(-3,-3)^T,u=(3,3)^T$$，全局最优点为

$(-0.0898,0.7126)^T$，最优值为-1.031628.

表 1 算例 1 的测试结果

Table 1 Numerical results of problem 1

算法 Algorithm	初始点 Initial point	IT	IF	IW	FP	FF
PS	$(1,1)^T$	54	186	0	$(0.898,-0.7127)^T$	-1.0316
TSPS	$(1,1)^T$	54	199	1	$(0.898,-0.7127)^T$	-1.0316

算例 2 Shubert I Function(n=2)

$$f(x)=\left\{\sum_{i=1}^{5}i\cos(i+1)x_1+i\right\}\left\{\sum_{i=1}^{5}i\cos((i+1)x_2+i)\right\},l=(-10,-10)^T,u=(10,10)^T$$,全局最优

点$(-1.42513, -0.80032)^T$，最优值 $f(x^*)=-186.730909$.

表 2 算例 2 的测试结果

Table 2 Numerical results of problem 2

算法 Algorithm	初始点 Initial point	IT	IF	IW	FP	FF
PS	$(2,2)^T$	54	186	0	$(-7.0835, 10.0000)^T$	-48.5068
TSPS	$(2,2)^T$	66	219	1	$(4.8581,-0.8003)^T$	-186.7309

算例 3 Shubert II Function(n=2)

$$f(x)=\left\{\sum_{i=1}^{5} i\cos(i+1)x_1+i\right\}\left\{\sum_{i=1}^{5} i\cos((i+1)x_2+i)\right\}+\frac{1}{2}[(x_1+1.42513)^2+(x_2+0.80032)^2],$$

$l=(-10,10)^T, u=(10,10)^T$.全局最优点、最优值同算例 2.

表 3 算例 3 的测试结果

Table 3 Numerical results of problem 3

算法 Algorithm	初始点 Initial point	IT	IF	IW	FP	FF
PS	$(2,2)^T$	54	186	0	$(-7.0835, 10.0000)^T$	-48.5068
TSPS	$(2,2)^T$	66	219	1	$(-0.8005, 4.8568)^T$	-170.5306

算例 4 Shubert III Function(n=2)

$$f(x)=\left\{\sum_{i=1}^{5} i\cos(i+1)x_1+i\right\}\left\{\sum_{i=1}^{5} i\cos((i+1)x_2+i)\right\}+(x_1+1.42513)^2+(x_2+0.80032)^2,$$

$l=(-10,10)^T, u=(10,10)^T$.全局最优点、最优值同算例 2.

表 4 算例 4 的测试结果

Table 4 Numerical results of problem 4

算法 Algorithm	初始点 Initial point	IT	IF	IW	FP	FF
PS	$(2,2)^T$	54	186	0	$(-7.0809,4.8556)^T$	-122.7247
TSPS	$(2,2)^T$	66	219	1	$(-0.1960, -0.8003)^T$	-122.0653

数值结果表明，在局部最优点处定义的割峰函数可有效判断当前点是否为全局最优解，它的引入提高了原有模式搜索求解器获知全局最优解的效率。

4 结 论

本文提出的两阶段模式搜索算法，原理简单，易操作，为工程应用中的全局优化问题提供了新的有效方法。下一步我们将针对具体问题的特性，通过调整割峰函数的形式，提高优化问题的求解精度。

参考文献

[1] 黄利国,孙 莉,韩丛英.整体异步的并行转换算法[J].计算机工程,2008,34(21):54-58

[2] 黄利国,韩丛英,孙 莉.基于变量转换的并行优化算法[J].计算机工程,2010,36(23):34-35

[3] Wang YC, Fang WW, Wu TJ. A cut-peak function method for global optimization[J]. J. Comput. Appli. Math, 2009,230:135-142

[4] Yang YJ, Shang YL. A new filled function method for unconstrained global optimization[J]. Appli. Math. Comput, 2006,173(1):510-512

[5] Yao Y. Dynamic tunneling algorithm for global optimization[J]. IEEE Trans. System Man Cybernet, 1989,19(5):1222-1230

[6] 孙 莉,贺国平,房 亮.基于求解大规模界约束问题的三种有效集识别策略的比较[J].数值计算与计算机应用,2009,30(1):41-47

[7] 张煜东,吴乐南,王水花.基于遗传算法与模式搜索的混合优化算法[J].南京信息工程大学学报:自然科学版,2012(1):34-39