

УДК 519.853.6

ПРИВЕДЕННЯ ЗАДАЧІ ОПТИМІЗАЦІЇ З ОБМЕЖЕННЯМИ ДО ЗАДАЧІ БЕЗ ОБМЕЖЕНЬ ШЛЯХОМ ПОДВІЙНОГО ПРОСТОРОВОГО ПЕРЕТВОРЕННЯ

Отрох С.І., д-р техн. наук,

2411197@ukr.net, ORCID: 0000-0001-9008-0902

Донець А.Г., канд. фіз.-мат. наук,

ogurman72@gmail.com, ORCID: 0000-0002-8122-051X

Каленюк О.С., канд. техн. наук,

o.kalenuk@kpi.ua, ORCID: 0009-0009-3141-4840

Сірий О.А., канд. техн. наук,

oasiryi@gmail.com, ORCID: 0000-0001-5811-9037

Бордіян А.І., аспірант

bordyanartem@gmail.com, ORCID: 0009-0003-8305-3051

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» (м. Київ, Україна)

В статті розглядається спосіб вирішення задач мінімізації і максимізації з обмеженнями із використанням алгоритмів для розв'язку задач оптимізації без обмежень шляхом побудови відображення з багатовимірного простору на багатовид, утворений обмеженнями задачі оптимізації. Ця конструкція не є опуклою на відміну від симплексу, але тим не менш саме вона є завершеною множиною комбінацій вершин, які утворюють простір варіантів задачі нелінійної оптимізації. Таким шляхом використання такої конструкції дозволяє розглядати задачу без обмежень і використовувати принципи безумовної оптимізації, що компенсує можливі обчислювальні труднощі через використання багатовиду. Фактично стаття є першим етапом до побудови універсальної методики розв'язання таких задач, і у процесі аналізу та класифікації модифікацій цього методу, було описано вимоги до якісних характеристик такого способу вирішення. Приведення задачі оптимізації з обмеженнями до задачі без обмежень шляхом подвійного просторового перетворення здійснюється операціями, які мали більше поширення в галузі комп'ютерної графіки з білінійними перетвореннями, що могло бути причиною недооцінки їх ефективності в задачах нелінійної оптимізації. Таким чином надається «друге дихання» для такого інструменту як метод оптимізації з обмеженнями шляхом лінійної апроксимації (COBYLA), котрий був ще навіть досить нещодавно віднесений до методів другорядних, ефективність яких була апріорі менша ніж звичних методів нелінійної оптимізації – Нелдера-Міда, або градієнтних методів. Амбіційні наміри побудови універсального алгоритма спочатку розглядаються на

задачах невеликого розміру, які проте зовсім не уособлюють собою спрощені випадки. Наводиться приклад такого відображення для двовимірного простору і чотирьох лінійних обмежень, а також аналіз практичного потенціалу такого підходу виконаний для задачі оптимізації квадратичної цільової функції.

Ключові слова: умовна оптимізація; симплекс; COBYLA; штрафний параметр; багатовид; білінійне перетворення; обчислювальна складність; трансформація задач умовної оптимізації.

Постановка проблеми. Різні алгоритми і їх модифікації використовують принципово різні підходи до обмежень. Особливо це стосується нескінченного класу задач безумовної оптимізації. Принципову проблему складає не вибір методу і навіть не обчислювальна складність, а класичний підхід, який базується на моделюванні задачі, тобто так чи інакше спрощеному опису практичної ситуації. Причому в залежності від складності моделі обирається і метод. Спроба якщо не розв'язати, а хоча б зробити процес оптимізації більш стійким, незалежним від конкретного підходу до опису практичних задач, може полягати у розробці універсальної методики, яка буде здійснювати трансформацію задачі з обмеженнями до задачі без обмежень.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Різноманітність методів умовної оптимізації будь-якого типу, які здається охоплюють усі можливі практичні застосування тим не менш не дає можливості виділити якісь універсальні алгоритми, а самі методи обумовлюються низкою обмежень та параметрів застосування. Так, наприклад, класичний алгоритм Нелдера-Міда у імплементації бібліотеки SciPy не дозволяє застосування нелінійних обмежень, але дозволяє обмежувати кожен координату простору пошуку окремо. Координати симплекса при здійсненні пошуку штучно обмежуються шляхом приведення до межі у разі виходу за неї [1].

Метод оптимізації з обмеженнями шляхом лінійної апроксимації (COBYLA) застосовує додання штрафного параметра для забезпечення зходимості методу всередині обмеженого простору [2]. Алгоритм оптимізації із покоординатними обмеженнями (BOBYQA) [3] покращує оптимізаційні властивості методу COBYLA, але, як і вищезгаданий модифікований метод Нелдера-Міда, не дозволяє обмежень окрім як обмежень кожної координати. Метод оптимізації з обмеженнями шляхом квадратичної оптимізації (COBYQA) додає можливість лінійних і нелінійних обмежень до методу BOBYQA. Для цього він узагальнює підхід Бьорда-Омохокуна (BO) [4, 5] визначений для обмежень рівняннями до обмежень нерівностями [6, 7]. Стратегія метода полягає у додаванні штрафного параметра із одночасним обмеженні росту штрафу. Загалом, введення штрафного параметру є типовим підходом для алгоритмів із областю довіри [8].

Такий підхід застосовується і в алгоритмах на основі оптимізацій

роєм часток (PSO), але разом із ним застосовуються і інші: методи збереження доцільності і діхотомії [9]. Втім, популярний фреймворк для PSO Pyswarm надає можливість лише покоординатних обмежень [10].

Формулювання цілей статті. Глобальною метою даної статті є спроба розвинути ідею універсального методу для задач умовної оптимізації завдяки подвійному просторовому перетворенню класичної задачі з обмеженнями. Метою процесу аналізу та класифікації модифікацій цього методу, що є змістом початкового етапу досліджень було формулювання вимог до характеристик методу у конкретних задачах. В результаті оптимізація стає швидшою, стабільною та стійкою до помилок чи некоректних припущень при побудові моделі. Практична мета полягала у реалізації запропонованого підходу на деяких задачах нелінійного програмування з використанням методів просторового перетворення.

Основна частина.

Розв’язок задачі оптимізації із чотирма лінійними обмеженнями

Нехай є цільова функція $T(\mathbf{x})$, де $\mathbf{x}$ — вектор простору розмірності n . Нехай існують певні обмеження, які обмежують у просторі $\mathbb{R}^n$ певний закритий багатовид C .

Визначимо пару відображень:

$$f_1: \mathbb{R}^n \rightarrow (-1, +1)^n;$$

$$f_2: (-1, +1)^n \rightarrow C.$$

Композиція цих відображень $f: f_2 f_1$ утворює відображення:

$$f: \mathbb{R}^n \rightarrow C.$$

Тепер оптимізація функції $T(f(\mathbf{x}))$ будь-яким методом необмеженої оптимізації визначить точку оптимуму $\mathbf{y}$ у просторі $\mathbb{R}^n$ незалежно від обмежень. А відображення цієї точки $f(\mathbf{y})$ визначить точку оптимуму у C .

Найефективніше з точки зору обчислень, відображення f_1 може бути побудоване раціонально-поліноміальною функцією, але тут і далі для простоти ми визначимо f_1 через арктангенс:

$$f_1(\mathbf{x}) = (\text{atan}(x_1)/(\pi/2), \text{atan}(x_2)/(\pi/2), \dots, \text{atan}(x_n)/(\pi/2)).$$

Кожна координата такого відображення є замкненою у інтервалі $(-1, +1)$, при тому функція перетворення цієї координати з $\mathbb{R}$ на $(-1, +1)$ є неперервною і, на відміну від раціонально-поліноміальної аналогічної функції, нескінченно гладкою. Це дозволяє нам використовувати методи оптимізації, які покладаються на гладкість цільової функції також.

Відображення f_2 очевидно залежить від характеру обмежень цільової функції і форми багатовиду C відповідно. У прикладній геометрії добре відомі класи задач побудови багатовидів певної форми шляхом відображення одиничного куба. Теоретично, будь-який однозв’язний багатовид може бути представлений відображенням одиничного куба. Такими відображеннями можуть бути лінійні відображення, наприклад

поворот і масштабування у декартових координатах, або проективне відображення у координатах гомогенних. Поліноміальні відображення: n -лінійні, n -квадратні, n -кубічні, тощо. Раціональні, або полікоординатні відображення. Фактично будь-який багатовид, який ми можемо побудувати засобами конструктивної або деформативної геометрії, є зрештою множиною відображень одиничних кубів.

В даній роботі ми розглядаємо 4 лінійних обмеження 2-вимірної цільової функції:

$$y < a_1x + b_1;$$

$$x < a_2y + b_2;$$

$$y > a_3x + b_3;$$

$$x > a_4y + b_4.$$

Ці обмеження, утворюють на площині R^2 чотирикутник (рис 1):

$$C^2 = ((x_{min1}, y_{min1}), (x_{min2}, y_{max2}), (x_{max3}, y_{max3}), (x_{max4}, y_{min4}))$$

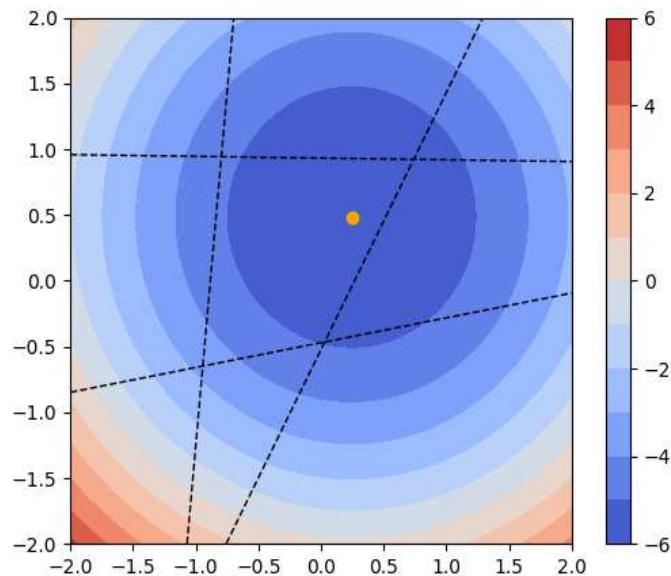


Рис. 1. Лінії рівня цільової функції, її оптимум, і 4 лінійних обмеження

Нехай f_2 буде білінійним перетворенням:

$$f_2(x, y) = (a_xxy + b_xy + c_x x + d_x, a_yxy + b_yy + c_y y + d_y).$$

Внутрішній простір прямокутника $(-1, 1)^2$ перетворюється на внутрішній простір C^2 таким чином, що:

$$f_2(-1, -1) = (x_{min1}, y_{min1});$$

$$f_2(-1, +1) = (x_{min2}, y_{max2});$$

$$f_2(+1, +1) = (x_{max3}, y_{max3});$$

$$f_2(+1, -1) = (x_{max4}, y_{min4}).$$

Це дає нам по чотири лінійних рівняння для кожної координати: x та y . Розв'язок системи цих рівнянь визначить коефіцієнти $a_x, b_x, c_x, d_x, a_y, b_y, c_y, d_y$, і білінійне перетворення f_2 для відповідно.

Визначимо матрицю A як:

$$A = \begin{bmatrix} +1 & -1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 \end{bmatrix}.$$

Визначимо B_x як:

$$B_x = [x_{min1}, x_{min2}, x_{max3}, x_{max4}],$$

і B_y як:

$$B_y = [y_{min1}, y_{max2}, y_{max3}, y_{min4}].$$

Тепер розв'язок рівняння $A[a_x, b_x, c_x, d_x] = B_x$ надасть нам коефіцієнти a_x, b_x, c_x, d_x , а розв'язок $A[a_y, b_y, c_y, d_y] = B_y$ — коефіцієнти a_y, b_y, c_y, d_y відповідно.

Білінійне відображення обмежень перетворює їх у обмеження виду $-1 \leq x \leq 1, -1 \leq y \leq 1$, а також перетворює цільову функцію (рис 2). При тому оптимум перетвореної цільової функції відповідатиме перетвореному оптимуму цільової функції до перетворення.

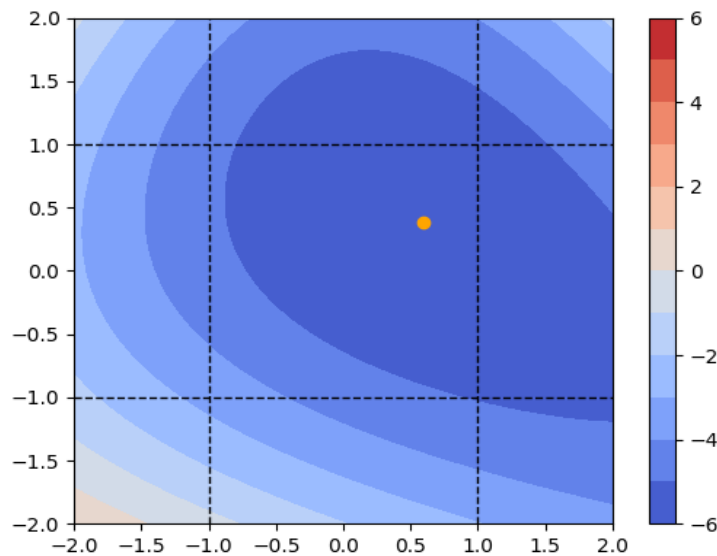


Рис. 2. Цільова функція із оптимумом і обмеженнями після білінійного перетворення

Введемо арктангенсальне перетворення f_1 :

$$f_1(x, y) = (\text{atan}(x)/(\pi/2)).$$

Це перетворення ставить у відповідність кожній точці числової осі точку на відкритому інтервалі $(-1, 1)$. Комбінація білінійного і арктангенсального відображення дозволяє побудувати таку функцію на основі початкової цільової функції, що будучи визначеною на $\mathbf{R}^2$

перетворення її області визначення співпадатиме із просторі, який обмежений лінійними обмеженнями C^2 (рис 3).

$$f_2(x, y) = (a_x xy + b_x y + c_x x + d_x, a_y xy + b_y y + c_y x + d_y);$$

$$f_1(x, y) = (\text{atan}(x)/(\pi/2), \text{atan}(y)/(\pi/2));$$

$$f(x, y) = f_1(f_2(x, y)).$$

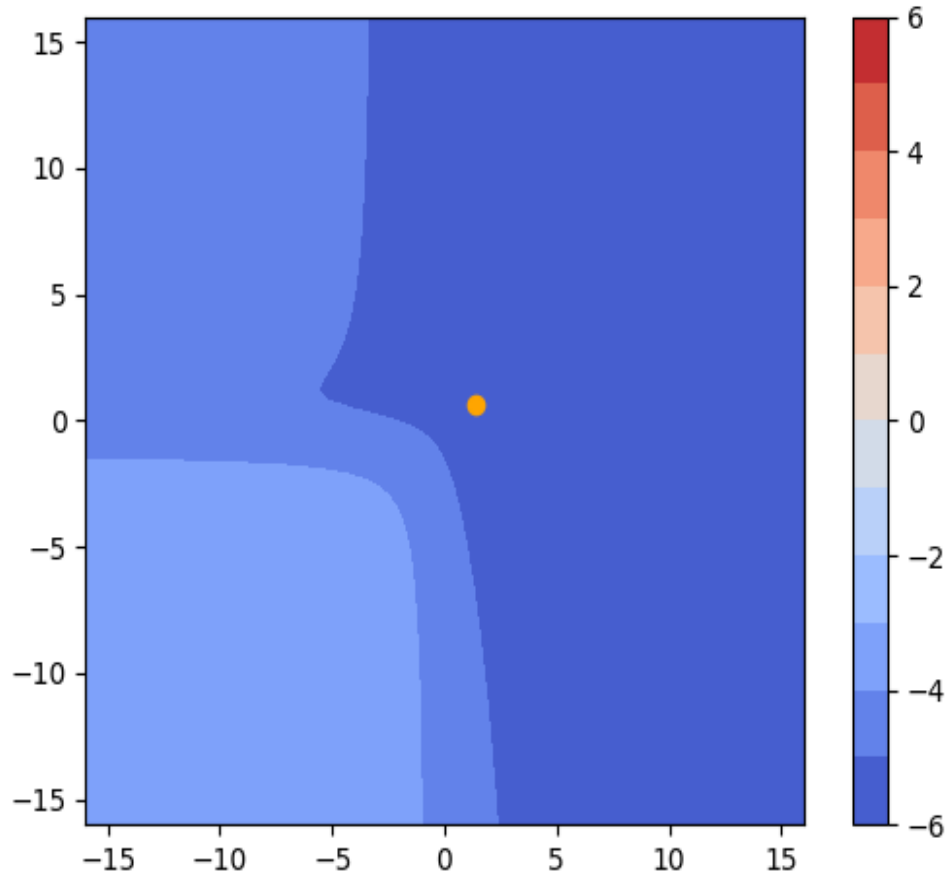


Рис. 3. Цільова функція із оптимумом після комбінації перетворень

Якщо функціонал $D: g(x, y) \rightarrow (x_o, y_o)$ знаходить оптимум (x_o, y_o) на бінарній функції $g(x, y)$ без врахування обмежень, то оптимум $T(x, y)$ у просторі обмеженим C^2 визначатиметься як $f(D(T(f(x, y))))$.

Отже, композиція арктангенсального і білінійного відображень надає нам можливість вирішити задачу оптимізації із лінійними обмеженнями будь-яким способом, який не бере до уваги обмежень.

Обчислювальні експерименти.

Чи має запропонований спосіб якісь переваги перед традиційними способами вирішення задачі оптимізації з обмеженнями? Для відповіді на це запитання, ми поставили серію обчислювальних експериментів де $T_i(x, y)$ — це квадратична функція виду:

$$T_i(x, y) = (x_i - x)^2 + (y_i - y)^2$$

для $i = 1 \dots 10000$, де (x_i, y_i) — множина точок рандомізованих на квадраті $[-1, 1]^2$.

Обмежуючий прямокутник створюється із:

- (x_{i1}, y_{i1}) рандомізованих на квадраті $[-1, 0]^2$;
- (x_{i2}, y_{i2}) рандомізованих на квадраті $[-1, 0] \times [0, +1]$;
- (x_{i3}, y_{i3}) рандомізованих на квадраті $[0, +1]^2$;
- (x_{i4}, y_{i4}) рандомізованих на квадраті $[0, +1] \times [-1, 0]$;

Отже, було розв'язано 10000 задач із рандомізованою цільовою функцією і рандомізованими обмеженнями. Новітній метод Powell's nonlinear derivative-free constrained optimization COBYLA (Constrained Optimization BY Linear Approximation) [6] порівнювався із методом Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno [11], який оперував на трансформованій цільовій функції без обмежень, за точністю визначення точки оптимуму і кількістю обчислень цільової функції (кількістю ітерацій).

В ході експерименту було визначено, що:

1. В середньому, метод COBYLA з обмеженнями потребує приблизно втричі менше обчислень цільової функції ніж BFGS із перетворенням f .

2. При тому середня похибка BFGS із перетворенням f складає 0.016, що, зважаючи на те, що точка оптимуму визначена на квадраті зі стороною 2, навряд чи є задовільною точністю для більшості практичних задач.

Але при тому, аналіз кореляцій показав, що і похибка, і складність обчислення корелюють із тим, чи лежить точка оптимуму всередині обмежуючого прямокутника чи ні. Якщо точка оптимуму знаходиться всередині обмеженого простору, то середня похибка BFGS із перетворенням f складає лише ~ 0.00015 , а середня кількість обчислень падає в півтора рази.

При тому, помітна позитивна кореляція між похибкою і кількістю обчислень навіть із точкою оптимізації у C^2 . Чим менше обчислень, тим менша результуюча похибка. У деяких випадках, кількість ітерацій BFGS із перетворенням f є меншою ніж кількість обчислень методу COBYLA з обмеженнями, але у всіх цих випадках точка оптимуму знаходиться всередині C^2 . Вірогідно, це пов'язано із тим, що арктангенсальне відображення створює плато у околі обмежень, що підвищує і похибку, і кількість ітерацій BFGS.

Висновки. В цілому, спосіб розв'язку задачі оптимізації з обмеженнями шляхом перетворення $\mathbb{R}^n$ на багатовид утворений обмеженнями, не показує очевидних переваг перед існуючими способами розв'язку подібних задач. При тому, у деяких окремих випадках, наприклад, якщо очікується що для конкретної задачі оптимізації у

переважній більшості випадків точка оптимуму не виходить за обмеження, його застосування може бути виправдане.

Література

1. Gao, F. and Han, L. Implementing the Nelder-Mead simplex algorithm with adaptive parameters. 2012. *Computational Optimization and Applications*. 51:1, pp. 259-277.
2. M. J. D. Powell. "A direct search optimization method that models the objective and constraint functions by linear interpolation." In: *Advances in Optimization and Numerical Analysis*. Edited by S. Gomez and J. P. Hennart. Dordrecht, NL: Springer, 1994, pages 51–67.
3. M. J. D. Powell. The BOBYQA algorithm for bound constrained optimization without derivatives. Technical report DAMTP 2009/NA06. Cambridge, UK: Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, University of Cambridge, 2009. 39p.
4. R. H. Byrd. "Robust trust region methods for constrained optimization." In: *The Third SIAM Conference on Optimization*. 1987.
5. E. O. Omojokun. "Trust Region Algorithms for Optimization with Nonlinear Equality and Inequality Constraints." Ph.D. thesis. Boulder, CO, US: University of Colorado Boulder, 1989. 24p.
6. T. M. Ragonneau. "Model-Based Derivative-Free Optimization Methods and Software." PhD thesis. Hong Kong, China: Department of Applied Mathematics, The Hong Kong Polytechnic University, 2022. URL: <https://theses.lib.polyu.edu.hk/handle/200/12294>.
7. T. M. Ragonneau and Z. Zhang, "PDFO: A Cross-Platform Package for Powell's Derivative-Free Optimization Solver", arXiv preprint 2023. arXiv:2302.13246
8. Conn, A. R., Gould, N. I., & Toint, P. L. Trust region methods. 2000. Siam. pp. 19.
9. M. S. Innocente, J. Sienz. Constraint-Handling Techniques for Particle Swarm Optimization Algorithms, 2021. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2101.10933>
10. Miranda L.J.,. PySwarms: a research toolkit for Particle Swarm Optimization in Python. *Journal of Open Source Software*, 2018. 3(21), 433, <https://doi.org/10.21105/joss.00433>.
11. Fletcher, Roger, Practical Methods of Optimization (2nd ed.), New York: John Wiley & Sons, 1987. ISBN 978-0-471-91547-8.

REDUCTION OF A CONSTRAINED OPTIMIZATION PROBLEM TO AN UNCONSTRAINED PROBLEM BY DOUBLE SPATIAL TRANSFORMATION

Sergii Otrokh, Andrii Donets, Oleksandr Kalenyuk, Oleksandr Siryi,
Artem Bordiian

The article considers a method of solving minimization and maximization problems with constraints using algorithms for solving optimization problems without constraints by constructing a mapping from a multidimensional space to a manifold formed by the constraints of an optimization problem. This construction is not convex, unlike the simplex, but nevertheless it is the complete set of combinations of vertices that form the space of options for the nonlinear optimization problem. Thus, using such a construction allows us to consider the problem without restrictions and use the principles of unconditional optimization, which compensates for possible computational difficulties due to the use of a manifold.

In fact, the article is the first stage in building a universal methodology for solving such problems, and in the process of analyzing and classifying modifications of this method, the requirements for the qualitative characteristics of such a solution method were described.

The reduction of a constrained optimization problem to an unconstrained problem by means of a double spatial transformation is carried out by operations that were more widespread in the field of computer graphics with bilinear transformations, which could be the reason for the underestimation of their effectiveness in nonlinear optimization problems. This gives a second breath to such a tool as the constrained optimization method by linear approximation (COBYLA), which was even quite recently classified as a secondary method, the efficiency of which was a priori less than the usual nonlinear optimization methods - Nelder-Mead, or gradient methods. Ambitious intentions to build a universal algorithm are initially considered on small-sized problems, which, however, do not represent simplified cases at all.

An example of such a mapping for a two-dimensional space and four linear constraints is presented, as well as an analysis of the practical potential of such an approach is performed for the problem of optimizing a quadratic objective function.

Keywords: conditional optimization; simplex; COBYLA; penalty parameter; multivariate; bilinear transformation; computational complexity; transformation of conditional optimization problems.

References

1. Gao, F. and Han, L. (2012) Implementing the Nelder-Mead simplex algorithm with adaptive parameters. *Computational Optimization and Applications*. 51:1, pp. 259-277.
2. M. J. D. Powell (1994) "A direct search optimization method that models the objective and constraint functions by linear interpolation." In: *Advances in Optimization and Numerical Analysis*. Edited by S. Gomez and J. P. Hennart. Dordrecht, NL: Springer, pages 51–67.
3. M. J. D. Powell (2009) The BOBYQA algorithm for bound constrained optimization without derivatives. Technical report DAMTP 2009/NA06. Cambridge, UK: Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, University of Cambridge. 39p.
4. R. H. Byrd (1987) "Robust trust region methods for constrained optimization." In: *The Third SIAM Conference on Optimization*.
5. E. O. Omojokun (1989) "Trust Region Algorithms for Optimization with Nonlinear Equality and Inequality Constraints." Ph.D. thesis. Boulder, CO, US: University of Colorado Boulder, 24p.
6. T. M. Ragonneau (1992) "Model-Based Derivative-Free Optimization Methods and Software." PhD thesis. Hong Kong, China: Department of Applied Mathematics, The Hong Kong Polytechnic University. Retrieved from: <https://theses.lib.polyu.edu.hk/handle/200/12294>.
7. T. M. Ragonneau and Z. Zhang (2023) "PDFO: A Cross-Platform Package for Powell's Derivative-Free Optimization Solver", arXiv preprint 2023. arXiv:2302.13246
8. Conn, A. R., Gould, N. I., & Toint, P. L. (2000) Trust region methods. Siam. pp. 19.
9. M. S. Innocente, J. Sienz. (2021) Constraint-Handling Techniques for Particle Swarm Optimization Algorithms. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2101.10933>
10. Miranda L.J. (2018) PySwarms: a research toolkit for Particle Swarm Optimization in Python. *Journal of Open Source Software*. 3(21), 433, <https://doi.org/10.21105/joss.00433>.
11. Fletcher, Roger (1987) *Practical Methods of Optimization* (2nd ed.), New York: John Wiley & Sons, 1987. ISBN 978-0-471-91547-8.