

МОДИФИКАЦИИ МЕТОДА ЗАРЯЖЕННЫХ ШАРИКОВ*

М. Э. Аббасов
abbasov.majid@gmail.com

25 апреля 2019 г.

Аннотация. Базирующийся на физических идеях Метод Заряженных Шариков позволяет решать такие задачи вычислительной геометрии как поиск минимального расстояния от точки до выпуклого замкнутого множества с гладкой границей, поиск минимального расстояния между двумя такими множествами и другие. В данной работе предлагаются несколько новых быстрых модификаций данного метода. На большом количестве случайно сгенерированных модельных задач проводится сравнение этих модификаций с изначальным Методом Заряженных Шариков, а также другими оптимизационными методами.

1°. Постановка задачи и изначальный алгоритм. Рассмотрим задачу

$$\begin{cases} \|x\| \longrightarrow \min \\ x \in X \end{cases} \quad (1)$$

ортогонального проектирования начала координат на множество

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq 0\},$$

где $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ — выпуклая, непрерывно дифференцируемая до второго порядка включительно функция, а $\mathbf{0} \notin X$. Можно считать, что $\nabla f(x) \neq \mathbf{0}$ при всех $x \in \text{bd } X$, где $\text{bd } X$ — граница множества X .

Непрерывный вариант Метода Заряженных Шариков имеет вид [1]:

$$\begin{cases} \dot{x} = z, \\ \dot{z} = p_1 \psi(x) - p_2 z - \chi(x, z), \end{cases} \quad (2)$$

где

$$\psi(x) = -\frac{1}{\|x\|^3}x + \frac{\langle x, \nabla f(x) \rangle}{\|x\|^3 \|\nabla f(x)\|^2} \nabla f(x), \quad \chi(x, z) = \frac{\langle H(x)z, z \rangle}{\|\nabla f(x)\|^2} \nabla f(x),$$

*Семинар по конструктивному негладкому анализу и недифференцируемой оптимизации «CNSA & NDO»: <http://www.apmath.spbu.ru/cnsa/>

$\nabla f(x)$, $H(x)$ — градиент и матрица вторых производных функции f в точке x , а p_1 , p_2 — параметры.

Применяя метод Эйлера для решения системы (2), получаем итерационный алгоритм решения задачи. Выбираем некоторые малые $\delta > 0$, $\varepsilon > 0$. Имея x_0 , $z_0 \neq \mathbf{0}$, запускаем вычисления.

1) Строим

$$\begin{cases} x_{k-1} = x_{k-1} + \delta z_{k-1}, \\ z_k = z_{k-1} + \delta(p_1\psi(x_{k-1}) - p_2 z_{k-1} - \chi(x_{k-1}, z_{k-1})). \end{cases} \quad (3)$$

2) Проверяем критерий останова

$$\|\psi(x_k)\| < \varepsilon. \quad (4)$$

- Если он выполнен, берем в качестве решения x_k , выходим из алгоритма.
- Если не выполнен, увеличиваем k на единицу и возвращаемся к первому шагу.

2°. Модификации метода. Особенностью Метода Заряженных Шариков (3) является то, что положение точки x_k на начальных итерациях изменяется незначительно. Кроме того, точка x_k “проскакивает” решение, совершая в его окрестности затухающие колебания.

Оба эти эффекта связаны с инертностью, приносимой наличием массы (подробнее см. [1]). Для преодоления этих эффектов предлагаются несколько модификаций Метода Заряженных Шариков.

2.1. Алгоритм с нулевой массой. Положив в дифференциальном уравнении движения (2) массу равной нулю, получим систему

$$\begin{cases} \dot{x} = z, \\ 0 = p_1\psi(x) - p_2 z - \chi(x, z), \end{cases} \quad (5)$$

Переход от непрерывного метода (5) к дискретному его варианту можно осуществить с помощью линеаризации второго уравнения полученной системы для пересчета переменной z_k на каждой итерации. Обозначим

$$\Phi(z) = p_1\psi(x) - p_2 z - \chi(x, z).$$

Тогда, имея z_k , следующее приближение z_{k+1} можно найти из соотношения

$$\Phi(z_k) + \Phi'(z_k)(z_{k+1} - z_k) = 0,$$

где

$$\Phi'(z_k) = -p_2 E - 2 \frac{\nabla f(x) z^T H(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|^2},$$

а E — единичная матрица. Поэтому, выбрав малое $\delta > 0$ в качестве шага, получаем алгоритм

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + \delta z_k \\ z_{k+1} = z_k - [\Phi(z_k)]^{-1} \Phi(z_k) \end{cases} \quad (6)$$

2.2. Алгоритм с обнулением скорости. Еще одним способом борьбы с эффектами, связанными с наличием массы, является обнуление начальной скорости на каждой итерации. Это приводит к движению по касательному к границе множества направлению, и при этом обязательно нужна процедура корректировки (локального проектирования) для обеспечения принадлежности точки границе множества.

Опишем алгоритм с постоянным шагом $\delta > 0$:

$$\begin{cases} \tilde{x}_{k+1} = x_k + \delta z_k, \\ x_{k+1} = \tilde{x}_{k+1} - \frac{f(\tilde{x}_{k+1})}{\|\nabla f(\tilde{x}_{k+1})\|^2} \nabla f(\tilde{x}_{k+1}), \\ z_{k+1} = \psi(x_{k+1}). \end{cases} \quad (7)$$

Для обеспечения большего шага на каждой итерации можно использовать алгоритм с дроблением шага.

Выберем малое $\varepsilon > 0$, начальный шаг $\hat{\delta} > 0$, дробитель шага $\lambda \in (0, 1)$. Пусть имеются x_k, z_k . Принимаем $\delta = \hat{\delta}$.

1) Проверяем неравенство $\|\psi(x_k)\| > \|\psi(x_k + \delta z_k)\|$

(а) Если оно выполняется, принимаем

$$\begin{cases} \tilde{x}_{k+1} = x_k + \delta z_k, \\ x_{k+1} = \tilde{x}_{k+1} - \frac{f(\tilde{x}_{k+1})}{\|\nabla f(\tilde{x}_{k+1})\|^2} \nabla f(\tilde{x}_{k+1}), \\ z_{k+1} = \psi(x_{k+1}), \end{cases}$$

и переходим к пункту 2 алгоритма.

(б) Если оно не выполняется, дробим шаг $\delta = \lambda \delta$ и возвращаемся к пункту 1 алгоритма.

2) Проверяем критерий остановки $\|\psi(x_{k+1})\| \leq \varepsilon$.

- (a) Если он выполнен, берем x_{k+1} в качестве решения и завершаем вычисления.
- (b) Если он не выполнен, полагаем $\delta = \widehat{\delta}$, увеличиваем k на единицу и переходим к пункту 1 алгоритма.

Отметим, что модификации алгоритма с обнулением начальной скорости на каждой итерации являются методами первого порядка, а алгоритм с нулевой массой является методом второго порядка.

3°. Численные эксперименты и выводы. В этом пункте приводятся результаты численных экспериментов для задачи поиска минимального расстояния от начала координат до эллипсоидов, полуоси которых параллельны осям координат и генерируются с помощью генератора равномерно распределенных на отрезке от 2 до 5 чисел. Центры эллипсоидов получаются с помощью генератора случайной величины, равномерно распределенной на сфере радиуса 5 с центром в начале координат. Для каждой из размерностей 2, 3, 10, 100, 500, 1000 решается 100 тестовых задач, выводится среднее время расчетов. Во всех случаях в качестве критерия остановки выбрано условие (4). Используются следующие обозначения:

- СВМ — исходный Метод Заряженных Шариков (3);
- СВМ_m — модификация Метода Заряженных Шариков с нулевой массой (6);
- СВМ_v — модификация Метода Заряженных Шариков с обнулением скорости на каждой итерации и постоянным шагом (7);
- СВМ_vf — модификация Метода Заряженных Шариков с обнулением скорости на каждой итерации и дроблением шага;
- РМ — метод внешних штрафов с решением задачи безусловной оптимизации на каждой итерации методом Ньютона (см., например, [2]);
- ВМ — быстрый геометрический метод, разработанный и предложенный в [3] для решения задачи проектирования точки на множество.

Вычисления велись в математическом пакете MatLab¹. Для методов были выбраны следующие параметры:

- СВМ $p_1 = 30$, $p_2 = 1$, $\delta = 0.7$,

¹Вычисления проведены студентом факультета Прикладной Математики – Процессов Управления СПбГУ Алиевым Ф.С.

- СВМ_m $p_1 = 10, p_2 = 1, \delta = 0.8,$
- СВМ_v $\delta = 8,$
- СВМ_vf $\lambda = 50, \delta = 50,$
- РМ коэффициент штрафа $r = 1000$ на каждой итерации увеличивался в 10 раз.

Таблица 1. Среднее время расчетов для задач различной размерности dim.

dim	СВМ	СВМ_m	СВМ_v	СВМ_vf	РМ	ВМ
2	$10.3 \cdot 10^{-5}$	$9.6 \cdot 10^{-5}$	$2.7 \cdot 10^{-5}$	$15.4 \cdot 10^{-5}$	$23.7 \cdot 10^{-5}$	$6.8 \cdot 10^{-5}$
3	$11.5 \cdot 10^{-5}$	$13.6 \cdot 10^{-5}$	$3.3 \cdot 10^{-5}$	$19.1 \cdot 10^{-5}$	$28.5 \cdot 10^{-5}$	$8.5 \cdot 10^{-5}$
10	$18.4 \cdot 10^{-5}$	$27.6 \cdot 10^{-5}$	$5.9 \cdot 10^{-5}$	$22.3 \cdot 10^{-5}$	$51.9 \cdot 10^{-5}$	$14.5 \cdot 10^{-5}$
100	$200.8 \cdot 10^{-5}$	$419.2 \cdot 10^{-5}$	$56.9 \cdot 10^{-5}$	$191.1 \cdot 10^{-5}$	$543.3 \cdot 10^{-5}$	$173.4 \cdot 10^{-5}$
500	0.13066	0.20174	0.026856	0.092295	0.19271	0.06949
1000	0.71287	1.0857	0.10403	0.35232	0.75328	0.2993

На рис. 1 приведена графическая иллюстрация полученных результатов.

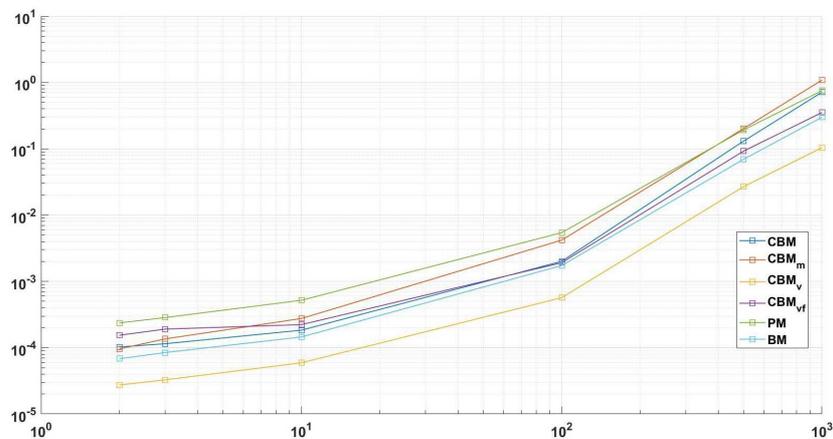


Рис. 1. Зависимость среднего времени расчетов от размерности задач для исследуемых методов.

Можно утверждать, что быстрее всего работает метод СВМ_v. Хуже всех проявляет себя метод РМ.

Остальные методы показывают сопоставимое время расчетов. Отдельно из этой группы можно выделить лишь метод СВМ_m, который на размерностях

больше 100 начинает работать заметно медленнее и показывает результаты сравнимые с РМ. Объясняется это тем, что оба алгоритма на каждой итерации используют метод Ньютона, а, значит, требуют довольно трудоемких (при больших размерностях) вычислений, связанных с обращением матриц вторых производных.

4°. Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 18-71-00006).

ЛИТЕРАТУРА

1. М. Э. Аббасов. *Метод заряженных шариков для решения некоторых задач вычислительной геометрии* // Вестник СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия. Т. 4 (62). Вып. 3. С. 359–369, 2017 г.
2. М. Мину Математическое программирование. Теория и алгоритмы. М.: Наука, 1990. 488 с.
3. A. Lin, S. P. Han *On the distance between two ellipsoids*. SIAM J. Optim., Vol. 13., P. 298–308, 2002.