

Об одном подходе к гибридизации в методе мультистарта

А.Ю. Горчаков¹

Аннотация—В работе предлагается и экспериментально проверяется один из подходов к гибридизации и подбору параметров методов минимизации используемых в методе мульти-старта. Подход заключается в комбинации методов одномерного поиска в зависимости от значений минимизируемой функции получаемых в процессе расчетов. Метод мульти-старта заключается в многократном запуске методов поиска локального минимума из различных стартовых точек. Поэтому можно предположить, что возникающие на каждой итерации метода задачи локальной минимизации, имеют сходные характеристики. За счет использования этой особенности метода мульти-старта удалось обеспечить подбор параметров в процессе работы. Проведены численные эксперименты по определению зависимости быстрейшего действия методов локального спуска в зависимости от параметров и предложен алгоритм выбора оптимального значения параметров. Экспериментально показано, что интервал оптимальности параметров имеет достаточно широкие границы. Численные эксперименты проводились на задаче поиска глобального минимума энергии совокупности атомов фрагмента плоской кристаллической решетки. Для расчетов энергии межатомного взаимодействия применялся потенциал Терсоффа.

Ключевые слова—двумерные кристаллы, методы оптимизации, графеноподобные структуры.

I. ВВЕДЕНИЕ

Методы глобальной оптимизации условно делятся на два типа – с доказательством (детерминированные) и без доказательства оптимальности (не детерминированные). Детерминированные методы позволяют получить решение, отличающееся от оптимального не более чем на заданную величину. К этому классу относятся различные варианты метода ветвей и границ (в частности метод неравномерных покрытий [1]), методы интервального анализа и многие другие. Вычислительная сложность детерминированных методов позволяет использовать их для решения задач небольшой размерности. Методы второго класса, часто называемые эвристическими методами, не гарантируют оптимальности полученного решения. Наиболее известные из них, это модификации метода Монте-Карло, имитации отжига, генетические и роевые алгоритмы. Для повышения эффективности решения практических задач производится либо подбор метода и его параметров, либо используется гибридизация существующих методов [2]. В работе рассматривается метод мульти-старта с гибридизацией методов одномерного поиска. Рассмотрение производилось на примере

задачи оптимизации, состоящей в нахождении минимума энергии совокупности атомов фрагмента плоской кристаллической решетки. Данная задача имеет большое практическое значение, т.к. энергетически минимальные конфигурации решетки соответствуют стабильным состояниям вещества.

II. Описание метода мульти-старта

Рассмотрим задачу поиска минимума с параллелепipedными ограничениями:

$$f(x) \rightarrow \min, \\ x \in R^n, l_i \leq x_i \leq u_i, i = 1, \dots, n$$

Для решения задачи, в случае многоэкстремальной функции, часто применяется широко известный метод мульти-старта [3]–[7]. Схема метода достаточно проста - в заданном параллелепипеде случайным образом выбираются точки, из каждой точки запускается метод локального поиска и в качестве решения берется результат работы метода локального поиска с наименьшим значением. В свою очередь метод локального поиска использует метод одномерного поиска. Схематично метод выглядит следующим образом Рис.1. Приведем формальное описание

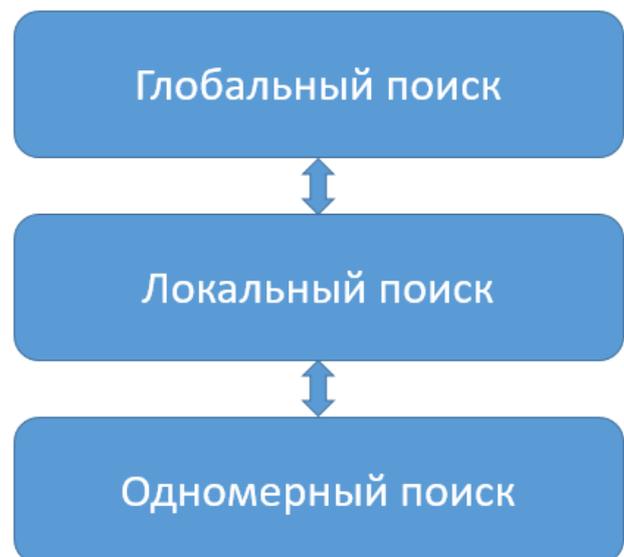


Рис. 1: Схема метода мульти-старта

одной из реализаций метода:

- 1) Вход: $MSTART(f(x), l, u)$, где $f(x)$ - минимизируемая функция, l, u - параллелепipedные ограничения задачи.

^{*}Работа выполнена при частичной поддержке поддержке РФФИ, проект 17-07-00493

¹А.Ю. Горчаков — старший научный сотрудник Вычислительного центра им. А.А. Дородницына Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» Российской академии наук. andrgor12@gmail.com

Возвращаемые значения: (x^{rec}, f^{rec}) наилучшее найденное решение.

- 2) В цикле по $k = 1, \dots, K$
 - а) Взять точку $x^k : x_i^k = U(l_i, u_i)$, где $U(l_i, u_i)$ - случайная величина, имеющая непрерывное равномерное распределение на отрезке $[l_i, u_i]$.
 - б) Запустив из точки x_k метод локального поиска, получить локальное решение $(x^*, f^*) = LOCSEARCH(f(x), x^k, l, u)$
 - с) если $k = 1$, то $(x^{rec}, f^{rec}) = (x^*, f^*)$
 - д) если $k > 1$ и $f^* < f^{rec}$, то $(x^{rec}, f^{rec}) = (x^*, f^*)$
- 3) Вернуть (x^{rec}, f^{rec})

Метод локального поиска *LOCSEARCH* - одна из модификаций метода координатного спуска:

- 1) Вход: $LOCSEARCH(f(x), x^0, l, u)$, где $f(x)$ - минимизируемая функция, l, u - параллелепипедные ограничения задачи. x^0 - стартовая точка. Возвращаемые значения: (x^*, f^*) наилучшее найденное решение (локальное).
- 2) Задать параметры метода: h - начальный шаг и ε - константа, используемая в условии останова метода.
- 3) Положить $i = 0, k = 0, (x^*, f^*) = (x^0, f(x^0))$
- 4) Пока выполняется условие $h \geq \varepsilon$:
 - а) Запустить метод одномерного поиска $(x^k, f^k) = LINS(f(x), x^*, f^*, i, l_i, u_i, h)$
 - б) Если $f^k < f^*$, то $(x^*, f^*) = (x^k, f(x^k))$, $h = 1.5h$,
 - с) иначе $h = 0.5h$.
 - д) $k = k + 1, i = i + 1 \text{ mod } n$
- 5) Вернуть (x^*, f^*)

Метод одномерного поиска *LINS* представляет собой комбинацию пробных шагов в точки $x_i \pm h$ и процедуры квадратичной аппроксимации:

- 1) Вход: $LINS(f(x), x^0, f^0, i, l_i, u_i, h)$, где $f(x)$ - минимизируемая функция, l, u - параллелепипедные ограничения задачи, h - шаг, x^0 - стартовая точка. Возвращаемые значения: (x^*, f^*) наилучшее найденное решение задачи одномерной минимизации.
- 2) Вычислить значение функции в точке $x^{+h} = x^0 + h$ $f^{+h} = f(x^0 + h)$
- 3) Если $f^{+h} < f^0$, то вернуть (x^{+h}, f^{+h}) ,
- 4) Вычислить значение функции в точке $x^{-h} = x^0 - h$ $f^{-h} = f(x^0 - h)$
- 5) Если $f^{-h} < f^0$, то вернуть (x^{-h}, f^{-h}) ,
- 6) По трем точкам x^{-h}, x^0, x^{+h} и значениям функции в них f^{-h}, f^0, f^{+h} вычислить x^a , используя квадратичную аппроксимацию:

$$a_1 = \frac{f^0 - f^{-h}}{x^0 - x^{-h}}$$

$$a_2 = \frac{1}{x^{+h} - x^0} \left(\frac{f^{+h} - f^{-h}}{x^{+h} - x^{-h}} - \frac{f^0 - f^{-h}}{x^0 - x^{-h}} \right)$$

$$x^a = p \left(\frac{x^0 + x^{-h}}{2} - \frac{a_1}{2a_2} \right) + (1 - p)x^0,$$

где p параметр метода.

- 7) Вычислить значение функции в точке x^a , $f^a = f(x^a)$

- 8) Если $f^a < f^0$, то вернуть (x^a, f^a) , иначе вернуть (x^0, f^0)

Использование метода предполагает первоначальный подбор параметра p . На интервал, предположительно содержащий оптимальные значения $p - [0, 1]$, накладывается равномерная сетка. Для каждого узла сетки запускаем метод *MSTART* с небольшим значением K и определяем количество вычислений функции $f(x)$. После этого определяем интервал, содержащий оптимальные значения параметра p , и увеличив K запускаем *MSTART* для получения окончательного результата.

III. Постановка оптимизационной задачи

Плоские кристаллы привлекают большое внимание исследователей последнее время, т.к. многие подобные структуры [8], например, графен, фосфорен, силицен, обладают рядом уникальных свойств. В работе рассматривается задача условной оптимизации, состоящей в нахождении минимума энергии совокупности атомов фрагмента плоской кристаллической решетки, при ограничениях типа неравенств. Данная задача имеет большое практическое значение, т.к. энергетически минимальные конфигурации решетки соответствуют стабильным состояниям вещества. Для вычисления энергии применяются эмпирические потенциалы межатомного взаимодействия. Потенциалы аппроксимируют энергию взаимодействия совокупности атомов, положения которых в случае плоского кристалла заданы координатами в двумерном пространстве. В работе рассматривается постановка задачи с фрагментом фиксированной длины. При этом функция энергии, как показано в работе [7], является разрывной. Модель накладывает ряд ограничений на структуру слоев:

- расстояния между соседними атомами в одном слое одинаковы, но в разных слоях они могут отличаться;
- в рассматриваемой системе выделяется группа из K параллельных слоев, которая периодически повторяется в направлении оси y ;
- число атомов в каждом слое и общее число слоев считается потенциально неограниченным.

На Рис. 2 представлен пример модели, состоящей из четырех слоев. В рамках данной модели положение атомов

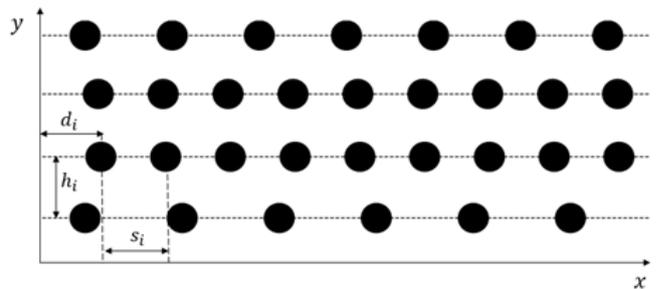


Рис. 2: Двумерная модель кусочно-однородного материала

определяется следующими параметрами:

- $h_i, i = 1, \dots, K$ - расстояние между слоем с номером i и предыдущим слоем;
- $d_i, i = 1, \dots, K$ - смещение первого атома в слое i с положительной абсциссой относительно нулевой отметки;

- $s_i, i = 1, \dots, K$ – расстояние между атомами в слое i ;
- $d_1 = 0, d_i < s_i, i = 2, \dots, K$

Совокупность значений перечисленных параметров будем называть *конфигурацией*. Требуется определить конфигурацию, соответствующую минимальной энергии взаимодействия атомов, входящих в моделируемый фрагмент материала. Минимизируется энергия $E(x)$ совокупности атомов, расположенных на K соседних слоях. Параметрами оптимизационной задачи являются переменные $x = (h_1, d_1, s_1, \dots, h_K, d_K, s_K)$, составляющие вектор размерности $n = 3K$. Решаемая задача оптимизации математически формулируется следующим образом:

$$\begin{cases} E(x) \rightarrow \min, \\ l_i \leq x_i \leq u_i, i = 1, 3, 4, \dots, 3K, \\ x_2 = 0, \\ x_{3j+2} < x_{3j+3}, j = 0, \dots, K - 1 \end{cases}$$

В моделируемую совокупность входят атомы, абсцисса которых лежит в заданном интервале $[0, L]$. При этом, в зависимости от значений параметров, задающих конфигурацию, число и состав атомов, входящих в моделируемую совокупность, могут меняться. Энергия решетки рассчитывается с помощью потенциалов взаимодействия. В данной статье рассматривается только случай потенциала Терсоффа [9].

IV. Результаты численного эксперимента

Эксперименты проводились на персональном компьютере с процессором Intel Core i7-6700, 3.4 GHz, 16Gb оперативной памяти. Использовался параллелепипед со следующими границами $0.5 \leq h_i \leq 1; d_1 = 0; 0 \leq d_i \leq 4; 0.4 \leq s_i \leq 4; i = 1, \dots, 4$.

Для начальных запусков метода *MSTART* параметр $K = 200$. Параметр $p \in [0, 1]$, с шагом 0.2. Зависимость количества вычислений функции от значения p приведена на Рис.3. Как видно на рисунке параметра p

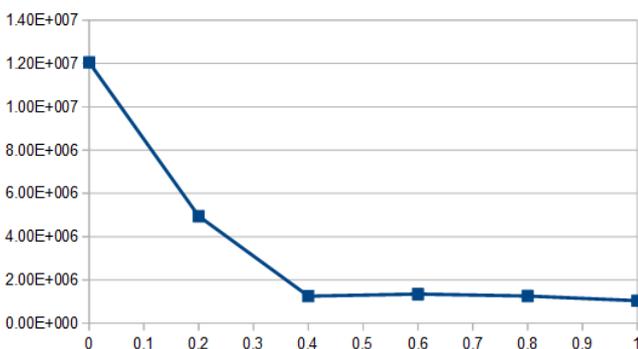


Рис. 3: Зависимость количества вычислений функции от параметра p .

принимает оптимальные значения на интервале $[0.4; 1.0]$. Помимо этого в процессе начальных запусков были найдены наилучшие значения функции. Их можно увидеть на Рис.4. После начальных запусков метода *MSTART* и определения интервала оптимальности p , задаем $K = 2000, p = 0.7$ (середина интервала $[0.4; 1.0]$) и запускаем *MSTART* снова. В результате было найдено значение энергии фрагмента кристаллической решетки -419.4169.

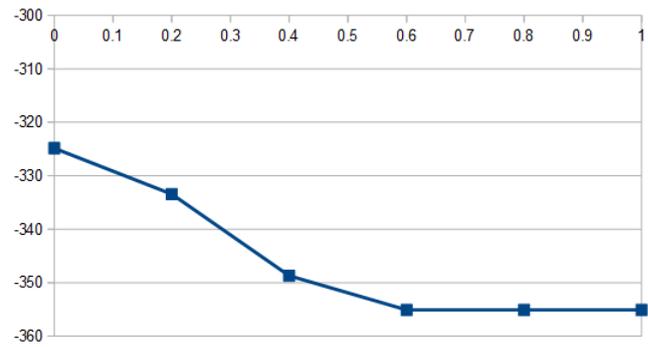


Рис. 4: Наилучшие найденные значения функции.

V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе был предложен и экспериментально проверен один из подходов к гибридизации и подбору параметров методов минимизации используемых в методе мульти-старта. Численные эксперименты проведенные на практической задаче поиска минимума фрагмента кристаллической решетки показали эффективность данного подхода. Параметр предложенного метода имеет широкий интервал оптимальности. Подбор параметра позволяет увеличить быстродействие метода мульти-старта в 5-6 раз. В планах дальнейших исследований проведение масштабного численного эксперимента с использованием библиотеки тестовых функций [10] с целью выделения классов задач, для которых рассматриваемый алгоритм наиболее эффективен.

Список литературы

- [1] Евтушенко ЮГ, Посыпкин МА. Варианты метода неравномерных покрытий для глобальной оптимизации частично-целочисленных нелинейных задач // Доклады Академии наук / Федеральное государственное унитарное предприятие Академический научно ... — Vol. 437. — 2011. — P. 168–172.
- [2] Антух АЭ, Карпенко АП. Глобальная оптимизация на основе гибридизации методов роя частиц, эволюции разума и клональной селекции // Машиностроение и компьютерные технологии. — 2012. — no. 08.
- [3] Hickernell Fred J, Yuan Ya-xiang. A simple multistart algorithm for global optimization. — 1997.
- [4] Multi-start methods / Rafael Martí, Jose A Lozano, Alexander Mendiburu, Leticia Hernando // Handbook of Heuristics. — 2016. — P. 1–21.
- [5] Martí R, Moreno-Vega J Marcos, Duarte A. Advanced multi-start methods // Handbook of metaheuristics. — Springer, 2010. — P. 265–281.
- [6] Intelligent multi-start methods / Rafael Martí, Ricardo Aceves, Maria Teresa León et al. // Handbook of Metaheuristics. — Springer, 2019. — P. 221–243.
- [7] Горчаков Андрей Юрьевич, Посыпкин Михаил Анатольевич. Эффективность методов локального поиска в задаче минимизации энергии плоского кристалла // Современные информационные технологии и ИТ-образование. — 2017. — Vol. 13, no. 2.
- [8] Two-dimensional materials from data filtering and ab initio calculations / Sébastien Lebègue, T Björkman, Mattias Klintonberg et al. // Physical Review X. — 2013. — Vol. 3, no. 3. — P. 031002.
- [9] Tersoff JJPRB. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems // Physical review B. — 1989. — Vol. 39, no. 8. — P. 5566.
- [10] Posypkin Mikhail, Usov Alexander. Implementation and verification of global optimization benchmark problems // Open Engineering. — 2017. — Vol. 7, no. 1. — P. 470–478.

On one approach to hybridization in the multi-start method

Andrei Y. Gorchakov

Abstract—One of the approaches to hybridization and selection of parameters of minimization methods used in the multi-start method is proposed and experimentally tested. The approach consists in a combination of one-dimensional search methods depending on the values of the minimized function obtained in the calculation process. The multi-start method consists in repeatedly launching the methods of searching for a local minimum from various starting points. Therefore, we can assume that the problems of local minimization arising at each iteration of the method have similar characteristics. By using this feature of the multi-start method, it was possible to ensure the selection of parameters in the process of work. Numerical experiments were carried out to determine the dependence of the speed of local descent methods on the parameters and an algorithm was proposed for choosing the optimal parameter value. It has been experimentally shown that the interval of optimality of parameters has wide enough boundaries. Numerical experiments were carried out on the problem of finding the global minimum of the energy of a set of atoms of a fragment of a flat crystal lattice. To calculate the interatomic interaction energy, the Tersoff potential was used.

Keywords—two-dimensional crystals, optimization methods, graphene-like structures.

[9] Tersoff JJPRB. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems // Physical review B.— 1989.— Vol. 39, no. 8.— P. 5566.

[10] Posypkin Mikhail, Usov Alexander. Implementation and verification of global optimization benchmark problems // Open Engineering.—2017.— Vol. 7, no. 1.— P. 470–478

REFERENCES

[1] Evtushenko Yu.G., Posypkin M.A. Versions of the method of nonuniform coverings for global optimization of mixed integer nonlinear problems.// Doklady Mathematics. — Vol. 437. — 2011.— P. 168–172.

[2] Antukh A.E., Karpenko A.P., Global optimization based on methods of particle swarm, mind evolution and clonal selection. // Engineering and computer technology.— 2012.— no. 08.

[3] Hickernell Fred J, Yuan Ya-xiang. A simple multistart algorithm for global optimization.— 1997.

[4] Multi-start methods / Rafael Martí, Jose A Lozano, Alexan-der Mendiburu, Leticia Hernando // Handbook of Heuristics.—2016.— P. 1–21.

[5] Martí R, Moreno-Vega J Marcos, Duarte A. Advanced multi-start methods // Handbook of metaheuristics.— Springer, 2010.— P. 265–281.

[6] Intelligent multi-start methods / Rafael Martí, Ricardo Aceves, Maria Teresa León et al. // Handbook of Metaheuristics.— Springer, 2019.— P. 221–243.

[7] Gorchakov A.Ju., Posypkin M.A. The effectiveness of local search methods in the problem of finding the minimum energy of a 2-D crystal.// Modern Information Technology and IT-education.— 2017.— Vol. 13, no. 2.

[8] Two-dimensional materials from data filtering and ab initio calculations / Sébastien Lebègue, T Björkman, Mattias Klintonberg et al. //Physical Review X.— 2013.— Vol. 3, no. 3.— P. 031002.