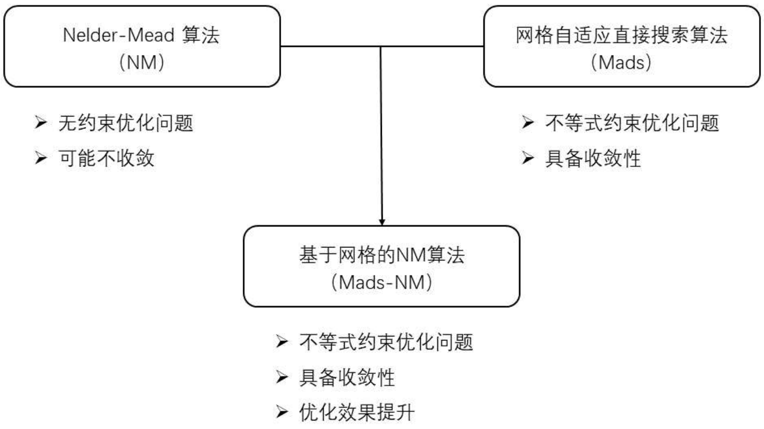
基于网格的NM不等式约束优化算法[1]总结报告

侯力广 521070910043

1.引言

在黑盒优化问题中：Nelder-Mead(NM)算法是一种处理无约束优化问题的算法，通过不断替换单纯性中最差的点来实现下降，但无法保证算法的收敛性；网格自适应方向搜索(Mads)算法是一种常用于处理不等式约束优化问题的算法，该方法有严谨的收敛性证明。在文献[1]中，作者将NM算法与Mads算法进行融合，提出的Mads-NM算法不仅可以解决不等式约束优化问题，具备严谨的收敛性证明，而且相较于NM和Mads均有明显的数值效果提升。



本次报告将分为四部分：NM无约束优化算法、Mads不等式约束优化算法、Mads-NM不等式约束优化算法，以及三种方法的效果比较。

2.NM无约束优化算法

2.1 目标问题

考虑无约束优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$$

其中$f:\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}$为目标函数。

2.2 整体思路

NM算法于1965年被首次提出，其核心思路是：初始化一个有序单纯形并进行迭代，每一步迭代都要用一个更好的点来替换当前单纯形的最差点【详见2.4-NM-1】。随着迭代次数的增加，单纯形会变得越来越好，单纯形的最优点可能会收敛到目标问题的最优解【详见2.4-NM-2】。当迭代满足一定条件（例如相邻两次迭代的最优点函数值之差小于某个容忍值）时，迭代停止，将最终得到的单纯形的最优点作为目标问题的最优解。

2.3 基本概念

♠ **定义2.1 (控制)：** $x,y\in\mathbb{R}^n$，若$f(x)<f(y)$，称x控制y，记作$x\prec y$.

♠ **定义2.2 (更旧)：** 若算法中x在y之前生成，则称x比y旧。定义函数$\mathrm{Older}:\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\longmapsto\mathbb{R}$

$$\mathrm{Older}(x,y)=\begin{cases} x & \text{若 } x \text{ 在 } y \text{ 之前生成} \\ y & \text{其他}\end{cases}$$

$\mathrm{Older}(x,y)$会输出x,y中更旧的那个。

♠ **定义2.3 (更好)：** 定义函数$\mathrm{Best}:\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\longmapsto\mathbb{R}^n$

$$\mathrm{Best}(x,y)=\begin{cases} x & \text{若 } x\prec y \\ y & \text{若 } y\prec x \\ \mathrm{Older}(x,y) & \text{若 } f(x)=f(y)\end{cases}$$

易证Best具有传递性。若$x=\mathrm{Best}(x,y)$，则称x比y更好。

♠ **定义2.4 (有序单纯形)：** 将$\mathbb{R}^n$中$n+1$个仿射无关的点排序为$y^0, y^1, \cdots y^n$，使得$y^{i-1} \prec y^i (i=1,2,\cdots,n)$，则集合

$$\mathbb{Y} = \{y^0, y^1, \cdots, y^n\}$$

称为一个有序单纯形。

♠ **定义2.5 (区域)：** 记$\mathbb{Y} = \{y^0, y^1, \cdots, y^n\}$为$\mathbb{R}^n$上的有一个有序单纯形，测试点$x \in \mathbb{R}^n$

- 若$y^n \prec x$，则x属于内缩区域；
- 其余情况，若$x \prec y^0$，则x属于扩张区域；
- 其余情况，若x至少掌控了$\mathbb{Y}$中的两个点，则x属于反射区域；
- 其余情况，即x掌控了$\mathbb{Y}$中的零或一个点，则x属于外缩区域。

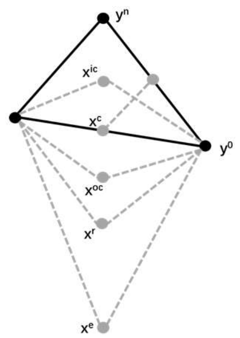
♠ **注释 I：** 定义2.1-2.5仅针对无约束优化的目标问题2.1，对于不等式约束优化的目标问题3.1和4.1，我们会在下文给出新的定义。

2.4 算法细节

♣ **NM-1. 替换最差点的原则**

NM算法的每一步迭代都会将有序单纯形$\mathbb{Y}$中最差的点y^n替换为一个更好的点。现做定义如下：

$x^c = \frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} y^i$	中心
$x^r = x^c + (x^c - y^n)$	反射点
$x^e = x^c + 2(x^c - y^n)$	延长点
$x^{oc} = x^c + \frac{1}{2}(x^c - y^n)$	外缩点
$x^{ic} = x^c - \frac{1}{2}(x^c - y^n)$	内缩点
$\gamma = \frac{1}{2}$	收缩参数



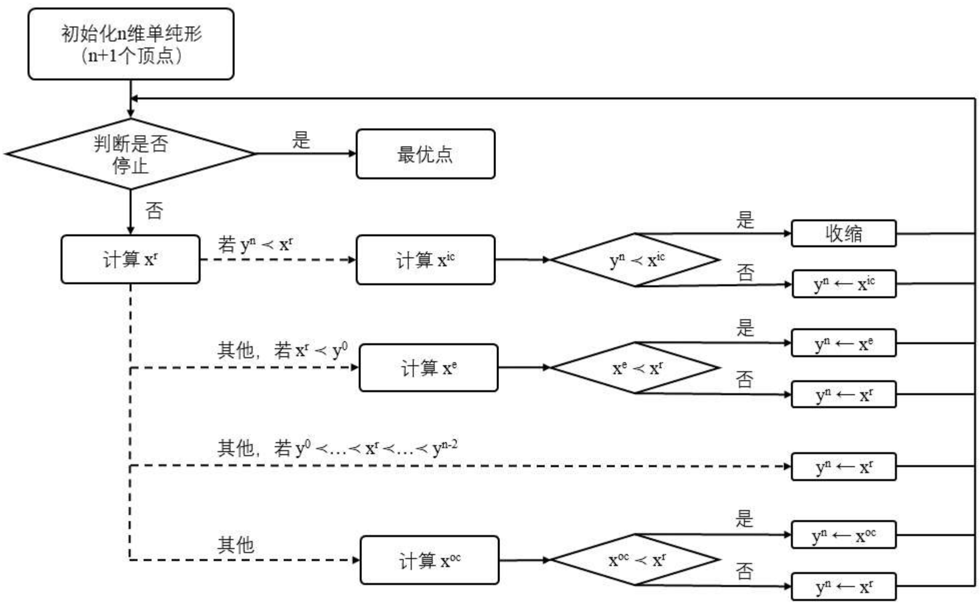
每一步迭代有五种替换方案，要么用x^r, x^e, x^{oc}, x^{ic}中的一个点替换y^n，要么将$y^1, y^2, \cdots, y^n$向y^0的方向收缩，即：

$$\mathbb{Y} \longleftarrow \{y^0, y^0 + \gamma(y^1 - y^0), \cdots, y^0 + \gamma(y^n - y^0)\}. \tag{1}$$

针对不同的情况，NM会选取不同的替换点：

- 若x^r属于内缩区域且x^{ic}属于内缩区域，用公式(1)收缩；
- 若x^r属于内缩区域且x^{ic}不属于内缩区域，用x^{ic}替换y^n；
- 除上述情况，若x^r属于扩张区域，用$\mathrm{Best}(x^r, x^e)$替换y^n；
- 除上述情况，若x^r属于反射区域，用x^r替换y^n；
- 除上述情况，即x^r属于外缩区域，用$\mathrm{Best}(x^r, x^{oc})$替换$y^n$；

NM算法流程图：



♣ **NM-2. 收敛性及相关研究**

正如引言中所指出，NM算法未必能收敛至问题最优解。1998年McKinnon提出了一个$\mathbb{R}$上的光滑的严格凸函数[2]，在该函数上，NM算法产生的实验点序列无法接近唯一的最小值。1998-2012年，人们采用多种方法改进了NM算法，使其在某些限制条件下具备一定的收敛性[1]。本文[1] (2018)则是将NM算法融入了Mads算法，利用Mads的收敛性分析来确保算法收敛。

3.Mads不等式约束优化算法

3.1 目标问题

考虑不等式约束优化问题

$$
\begin{aligned}
&\min_{x\in X\subset \mathrm{R}^n} f(x)\\
&s.t. \quad c(x)\le 0
\end{aligned}
$$

其中$f: X\mapsto \mathrm{R}\cup\infty$，$c: X\mapsto (\mathrm{R}\cup\infty)^m$，$c=(c_1,\cdots,c_m)^T$，$X$是$\mathbb{R}^n$的子集，$f$与$c$的平滑性无要求。

3.2 整体思路

Mads是一种被广泛使用的黑盒优化算法，其核心思路是：在给定区域内初始化一个点，通过不断搜索-轮询来迭代优化当前点，直至满足预先设定的停止条件为止。对于不等式约束优化问题3.1，我们还需要给Mads添加一些“障碍”来满足约束条件，以避免算法在不可行域中浪费太多的时间，并确保最终输出的最优解在可行域中。常用的约束手段有极限障碍(EB)、渐进障碍(PB)等。本文献[1]作者使用了渐进障碍(PB)来处理不等式约束条件。因此Mads每一步迭代的流程为：搜索-轮询-障碍(PB)【详见3.4-Mads-1】。搜索让算法避免落入局部最优解，轮询确保了算法的收敛性，障碍满足了目标问题的约束条件【详见3.4-Mads-2】。

3.3 基本概念

♠ **定义3.1 (正张成集)：** 给定向量空间V，若集合S的元素的非负线性组合可以张成V，则称S为V的正张成集。

♠ **定义3.2 (网格)：** 设$G\in\mathbb{R}^{n\times n}$为可逆矩阵，$Z\in\mathbb{Z}^{n\times p}$满足$Z$的列向量构成一个$\mathbb{R}^n$的正张成集，设$D=GZ$。

对于当前最优解$x^k\in\mathbb{R}^n$，以x^k为中心，尺寸为δ^k的网格定义为

$$M^k=\{x^k+\delta^k Dy \quad y\in\mathbb{N}^p\}\subset\mathbb{R}^n$$

其中δ^k称为网格尺寸参数。

♠ **定义3.3 (框架)：** 设$G\in\mathbb{R}^{n\times n}$为可逆矩阵，$Z\in\mathbb{Z}^{n\times p}$满足$Z$的列向量构成一个$\mathbb{R}^n$的正张成集，设$D=GZ$。

对于网格尺寸参数δ^k，取Δ^k满足$\Delta^k\ge\delta^k$，则以x^k为中心，尺寸为Δ^k的框架定义为

$$F^k=\{x\in M^k \quad ||x-x^k||_\infty\le\Delta^k b\}$$

其中$b=max\{||d'||_\infty : d'\in\mathbb{D}\}$，$\mathbb{D}$表示矩阵$D$的列向量构成的集合；$\Delta^k$称为框架尺寸参数。

♠ **定义3.4 (违约函数)：** 设约束条件的索引集$J=\{1,2,\cdots,m\}$，定义违约函数

$$h(x)=\begin{cases}\sum_{j\in J}\left(\max\{c_j(x),0\}\right)^2 & \text{若 } x\in X\\ \infty & \text{其他}\end{cases}$$

$h(x)$总是非负的，$h(x)=0\iff x$在问题的可行域中，即$x\in\Omega=\{x\in X: c(x)\le 0\}$.

♠ **定义3.5 (控制)：** $x,y\in\mathbb{R}^n$，若

- x,y均可行，且$f(x)<f(y)$；或
- x,y均不可行，且$f(x)\le f(y)$，$h(x)\le h(y)$，且两不等式中至少一个满足严格不等号

则称x控制y，记作$x\prec y$.

♠ **定义3.6 (更好)：** 定义函数$\mathrm{Best}:\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\longmapsto\mathbb{R}^n$

$$\mathrm{Best}(x,y)=\begin{cases} x & \text{若 } x\prec y\text{或 } h(x)<h(y)\\ y & \text{若 } y\prec x\text{或 } h(y)<h(x)\\ \mathrm{Older}(x,y) & \text{若 } f(x)=f(y)\text{且 } h(x)=h(y)\end{cases}$$

易证Best具有传递性。若$x=\mathrm{Best}(x,y)$，则称x比y更好。

♠ **注释Ⅱ：** 这里针对不等式约束优化的目标问题3.1给出了新的“控制”和“更好”定义。

3.4 算法细节

♣ Mads-1. 搜索-轮询-障碍(PB)

为了方便读者理解，我们先不设置障碍(PB)，仅通过无约束优化问题2.1介绍Mads的搜索-轮询过程；进而考虑不等式约束优化问题3.1，介绍Mads的搜索-轮询-障碍(PB)过程。

● Mads-1-1. 无约束优化：搜索-轮询

对于无约束优化的目标问题2.1，我们沿用定义2.1-2.3“控制”、“更旧”和“更好”。初始化参数

$x^0 \in X$	迭代起点，必须在$f(x)$的定义域X中；
$D = GZ$	预先设置的正张成矩阵，用于生成网格和框架；
$\Delta^0 \in (0,\infty)$	框架尺寸参数初值；
$\tau \in (0,1)$	网格尺寸调整参数；
$\epsilon_{stop} \in [0,\infty)$	允许停止条件。

Step1. (更新参数) 对于第k步迭代得到的最优点x^k，取网格参数$\delta^k = min\{\Delta^k, (\Delta^k)^2\}$，生成网格

$$M^k = \{x^k + \delta^k Dy \quad y \in \mathbb{N}^p\} \subset \mathbb{R}^n$$

Step2. (搜索) 用一种启发式算法（文献[1][3]并未言明）在M^k上取一个有限子集S^k，

- 若$\exists t \in S^k$，使得$f(t) < f(x^k)$，则$x^{k+1} \leftarrow t$，$\Delta^{k+1} \leftarrow \tau^{-1}\Delta^k$，进行Step4;
- 否则进行Step3.

Step3. (轮询) 随机选取$\mathbb{D}$的一个子集$\mathbb{D}^k_\Delta$，以x^k为中心，生成轮询集

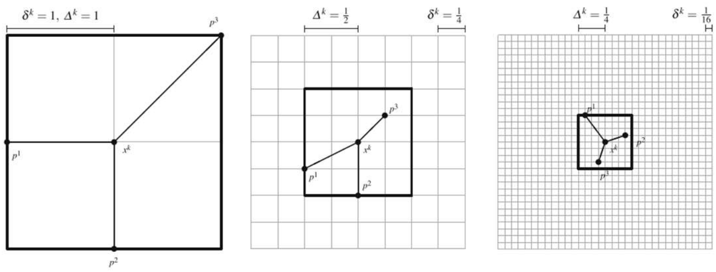
$$P^k = \{x^k + \delta d \quad d \in \mathbb{D}^k_\Delta\} \subset F^k$$

- 若$\exists t \in P^k$，使得$f(t) < f(x^k)$，则$x^{k+1} \leftarrow t$，$\Delta^{k+1} \leftarrow \tau^{-1}\Delta^k$;
- 否则$x^{k+1} \leftarrow x^k$，$\Delta^{k+1} \leftarrow \tau\Delta^k$.

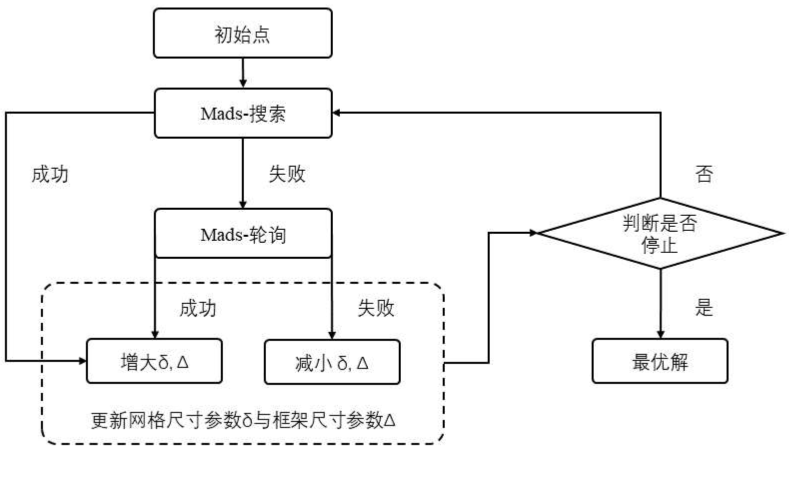
Step4. (检验) 判断是否满足停止条件

- 若$\Delta^{k+1} \geq \epsilon_{stop}$，则$k+1 \leftarrow k$，重复Step1;
- 否则输出x^{k+1}

为了方便理解，下图绘制了三组不同的Δ^k, δ^k对应的网格图像，其中灰色网格的交点构成网格M^k，黑色框架及内部的格点构成框架F^k，$P = \{p^1, p^2, p^3\}$构成一个轮询集。



无约束优化Mads流程图



- **Mads-1-2. 不等式约束优化：搜索-轮询-障碍(PB)**

对于不等式约束优化的目标问题3.1，我们使用定义3.5-3.6“控制”和“更好”。问题要求Mads找到的最优解在可行域中，渐进障碍(PB)对此的处理思路是：令Mads的第k步迭代尽可能输出两个点，即可行域中当前最优点x^k_{inf}和不可行域中$h(x)$值较小且$f(x)$值更小的最优点x^k_{inf}。换言之，每一步迭代中Mads除了在可行域Ω中寻找x^k_{feas}，满足

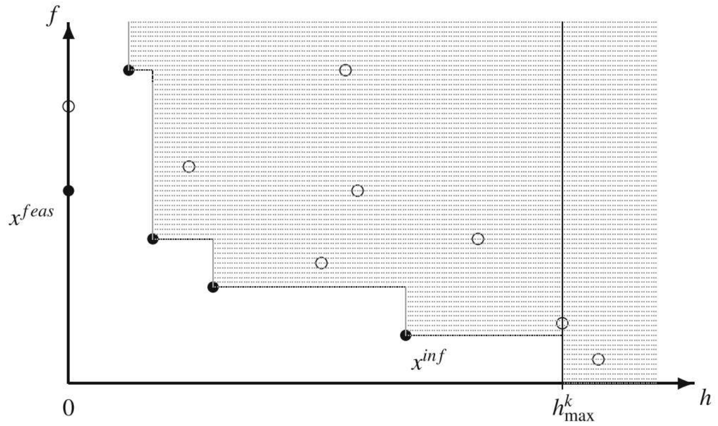
$$x^k_{feas} \prec x^{k-1}_{feas}$$

还会更新一个逐渐变小的违约函数障碍阈值h^k_{max}，并在$X \setminus \Omega$中搜索x^k_{inf}，满足

$$h(x^k_{inf}) \le h^k_{max} \quad f(x^k_{inf}) < f(x^k_{feas}) \quad (x^k_{inf} \prec x^{k-1}_{inf},\text{ 若 } x^{k-1}_{inf}\text{存在 })$$

若存在这样的x^k_{inf}，则输出x^k_{feas}和x^k_{inf}，否则只输出x^k_{feas}。

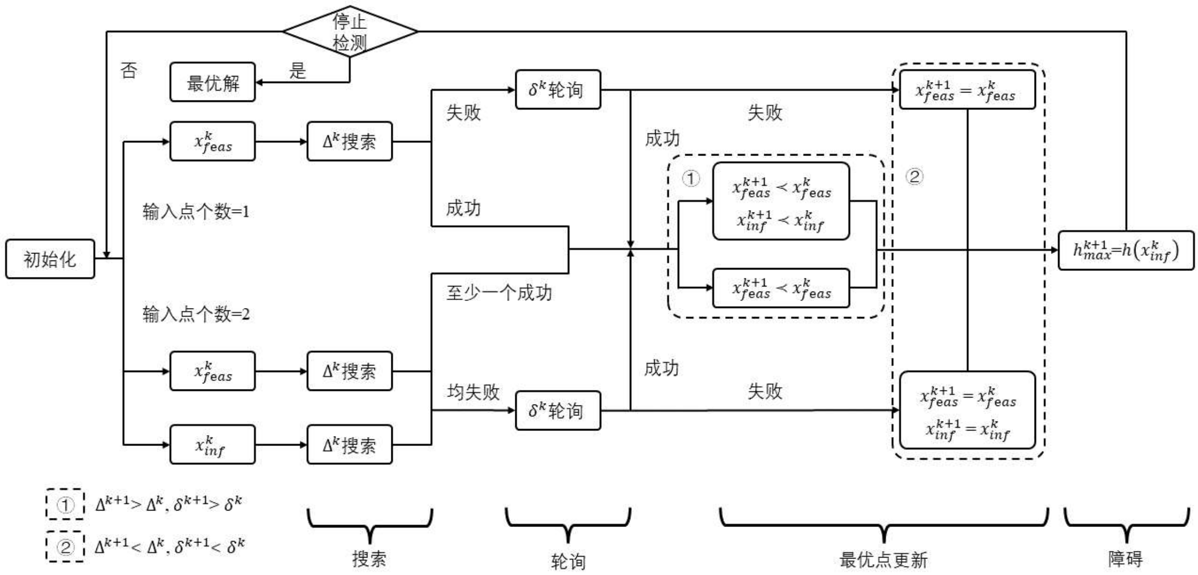
下图直观地展示了搜索-轮询-障碍(PB)的原理，13个圆圈表示第k步搜索-轮询评估过的13个点。图上有2个可行点，位于$h=0$的纵轴上，f值最小的那个用深色圆圈表示，记为x^{feas};共有11个不可行点，其中6个被其他点控制，1个违约函数的值超过了h^k_{max}，其余4个未被支配的点显示为深色圆圈。在这4个点中，f值最小的不可行记作x^{inf}。则本次迭代输出结果为$x^k_{feas}=x^{feas}$，$x^k_{inf}=x^{inf}$.



初始化参数

$x^0 = x^0_{feas} = x^0_{inf} \in X$	迭代起点，必须在$f(x)$的定义域X中;
$D = GZ$	预先设置的正张成矩阵，用于生成网格和框架;
$\Delta^0 \in (0, \infty)$	框架尺寸参数初值;
$\tau \in (0, 1)$	网格尺寸调整参数;
$h^0_{max} = \infty$	障碍阈值初值;
$\epsilon_{stop} \in [0, \infty)$	允许停止条件。

由于搜索-轮询-障碍的过程较为复杂，这里仅绘制流程图阐述



♣ **Mads-2. 收敛性分析**

收敛性的严格论证较为复杂，文献[1]仅给出结论：如果测试点序列属于一个有界集，且更新方向集合足够丰富，则存在一个聚点x^*：

- 若x^*可行，则x^*在可行域Ω的每个超切线方向d上，广义Clarke方向导数$f^o(x^*;d)$是非负的；
- 若x^*不可行，则x^*在集合X的每个超切线方向d上，广义Clarke方向导数$h^o(x^*;d)$是非负的。

只要确保每一次搜索时S^k是网格M^k的有限子集，Mads的收敛性就与搜索步骤无关[1]。

4.Mads-NM不等式约束优化算法

4.1 目标问题

考虑不等式约束优化问题（同3.1）

$$\min_{x\in X\subset \mathrm{R}^n} f(x)$$
$$s.t.\quad c(x)\le 0$$

其中$f:X\mapsto \mathrm{R}\cup\infty$，$c:X\mapsto (\mathrm{R}\cup\infty)^m$，$c=(c_1,\cdots,c_m)^T$，$X$是$\mathbb{R}^n$的子集，$f$与$c$的平滑性无要求。

4.2 整体思路

文献[1]融合NM与Mads的思路是，将Mads每一步迭代的直接搜索替换为NM搜索，即：第k步最优点x^k【详见Mads-NM-1】$\longrightarrow$Mads生成网格$M^k\longrightarrow$网格上生成单纯形$\mathbb{Y}^k$【详见Mads-NM-2】$\longrightarrow$NM执行Mads搜索【详见Mads-NM-3】$\longrightarrow$Mads轮询$\longrightarrow$Mads障碍$\longrightarrow$第$k+1$步最优点x^{k+1}。每次迭代NM评估的点集S^k是M^k的有限子集，故Mads-NM具备收敛性【详见Mads-NM-4】。

4.3 基本概念

♠ **定义4.1 (舍入点)** NM执行Mads搜索过程中，x^r,x^e,x^{oc},x^{ic}可能不在网格上,此时用最近的网格点舍入

$$x^r_\oplus,x^e_\oplus,x^{oc}_\oplus,x^{ic}_\oplus\longleftarrow x^r,x^e,x^{oc},x^{ic}$$

下标$\oplus$表示该点位于网格上。中心点x^c无需对网格进行舍入，因为NM不评估x^c的函数值。此外，NM执行Mads搜索的过程中并不会进行收缩操作，因为收缩可能会引入大量的舍入步骤，增大Mads搜索的成本。

♠ **定义4.2 (支配/被支配集)** 根据定义3.5“支配”关系，定义$\mathbb{Y}^0$和$\mathbb{Y}^n$

$$\mathbb{Y}^0=\{y\in\mathbb{Y}:\quad \nexists x\in\mathbb{Y},\ x\prec y\}$$
$$\mathbb{Y}^n=\{y\in\mathbb{Y}:\quad \nexists x\in\mathbb{Y},\ y\prec x\}$$

$\mathbb{Y}^0$包含了不被任何其他顶点支配的所有顶点，$\mathbb{Y}^n$包含了不支配其他任何顶点的所有顶点。$\mathbb{Y}^0$与$\mathbb{Y}^n$均非空，但可能有交集。

♠ **定义4.3 (区域)** NM执行Mads搜索时，由于引入了$\mathbb{Y}^0,\mathbb{Y}^n$和违约函数$h(x)$，“区域”的定义需要调整。设$\mathbb{Y}=\{y^0,y^1,\cdots,y^n\}$为$R^n$上的有序单纯形，$\mathbb{Y}^0,\mathbb{Y}^n$为$\mathbb{Y}$的子集，测试点$x\in\mathbb{R}^n$

- 若$\exists y^i\in\mathbb{Y}^n$使得$y^i\prec x$，或$h(x)>h(y^n)$，则$x$属于内缩区域；
- 其余情况，若$\exists y^i\in\mathbb{Y}^0$使得$x\prec y^i$，则$x$属于扩张区域；
- 其余情况，若x至少掌控了$\mathbb{Y}$中的两个点，则x属于反射区域；
- 其余情况，即x掌控了$\mathbb{Y}$中的零或一个点，则x属于外缩区域。

4.4 算法细节

♣ **Mads-NM-1. 迭代输入**

在渐进障碍法(PB)，中，每一步迭代最多有两个当前最优解：一个是算法迄今为止发现的最佳可行解，称为主轮询中心；另一个是h值最小的不可行解，称为次轮询中心。在Mads-NM算法中，我们只考虑主轮询中心。即第k步迭代的输出（第$k+1$步迭代的输入）为：当前最优解（主轮询中心）x^k，框架尺寸参数Δ^k，违约函数障碍阈值h^k_{max}，以及截至第k步迭代为止算法评估过的点集V^k。

♣ **Mads-NM-2. 生成单纯形**

Mads-NM开始前，设置参数$\pi_{radius}\ge 1,\pi_{svd}>0$，对于第$k+1$次迭代，定义采样集

$$\mathbb{T}_{\pi_{radius}}=\{x\in V^k:\ |x_i-x_i|^k\le \pi_{radius}\Delta^k_i,\ i\in\{1,2,\cdots,n\}\}$$

根据定义3.6将$\mathbb{T}_{\pi_{radius}}$中的点排序，使得$x_{i-1}=\mathrm{Best}(x_{i-1},x_i)$，$(i=1,2,\cdots,p_k)$，

$$\mathbb{T}_{\pi_{radius}}=\{x_0,x_1,\cdots,x_{p_k}\}$$

注意到$x_0 = x^k$，根据定义3.2“网格”可知$\mathbb{T}_{\pi_{radius}} \subset M^k$.

step1. (添加顶点) 初始化$\mathbb{Y} = \{x_0\}$，i从1到p_k进行如下循环：

生成矩阵$A = \{y - x_0: \ y \in \mathbb{Y}, \ y \neq x_0\} \cup \{x_i - x_0\}$，

- 若$diag(\Delta^k)^{-1}A$的奇异值$\geq \pi_{svd}$，则$\mathbb{Y} \leftarrow \mathbb{Y} \cup \{x_i\}$;
- 否则$\mathbb{Y} \leftarrow \mathbb{Y}$.

step2. (输出单纯形) 判断生成单纯形$\mathbb{Y}$的顶点个数

- 若$|\mathbb{Y}| = n + 1$，则输出$\mathbb{Y}$;
- 否则输出$\mathbb{Y} = \emptyset$.

根据生成的单纯形的输出结果$\mathbb{Y}$，NM会在M^k上执行Mads搜索，进而进入Mads轮询。

♣ Mads-NM-3. NM执行Mads搜索

在第$k+1$步Mads-NM迭代中，对于生成的单纯形$\mathbb{Y} \subset V^k$

step1. (更新单纯形)

- 若$\mathbb{Y}$不是一个单纯形，进行Step4;
- 否则排序$\mathbb{Y} = \{y^0, y^1, \cdots, y^n\}$并计算$\mathbb{Y}^0$和$\mathbb{Y}^n$.

step2. (寻找新顶点)

- 若$x_\oplus^r$属于内缩区域且$x_\oplus^{ic}$属于内缩区域，则进行Step4；
- 若$x_\oplus^r$属于内缩区域且$x_\oplus^{ic}$不属于内缩区域，取$t = x_\oplus^{ic}$;
- 除上述情况，若$x_\oplus^r$属于扩张区域，取$t = \mathrm{Best}(x_\oplus^r, x_\oplus^e)$;
- 除上述情况，若$x_\oplus^r$属于反射区域，取$t = x_\oplus^r$;
- 除上述情况，即$x_\oplus^r$属于外缩区域，取$t = \mathrm{Best}(x_\oplus^r, x_\oplus^{oc})$;

step3. (替换最差点)

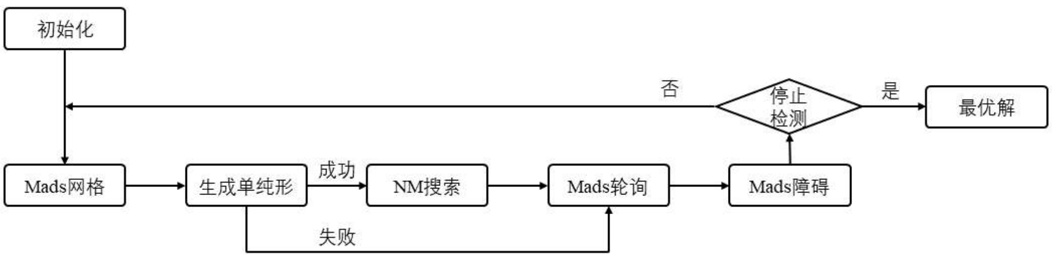
- 若$t \in V^k$，进行Step4;
- 否则用t替换y^n，进行步骤Step1.

step4. (停止NM迭代) 输出Step2访问过的测试点集

NM停止可能有以下原因：

（1）输入Mads的单纯形为空集，跳过Mads搜索直接进入轮询；
（2）由于对NM的替换点进行了舍入操作，替换顶点y^n后$\mathbb{Y}$不再是一个单纯形，此时NM终止；
（3）替代顶点的建议值t可能是之前访问过的网格点($t \in V^k$)，为了防止出现循环，NM将终止；
（4）由于收缩会增大搜索步骤的成本，当原本的NM需要收缩时，NM将终止；
（5）算法启动前设置参数$\pi_{eval} \in \mathbb{N}$，每次NM搜索可执行的函数求值次数不能超过$\pi_{eval}$，否则NM将终止。

不等式约束优化Mads-NM流程图



♣ Mads-NM-4. 收敛性分析

对Mads算法而言，只要确保每一次搜索时S^k是网格M^k的有限子集，收敛性就与搜索步骤无关[1]。而每一次NM搜索的采样集$\mathbb{T}_{\pi_{radius}}$都是有限的，且算法保证了NM搜索不会循环卡死，故Mad-NM算法仍适用Mads的收敛性证明。

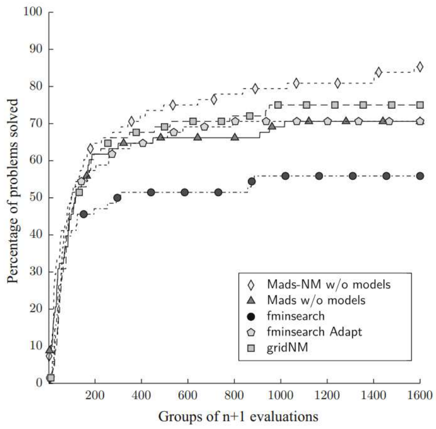
5.数值实验效果比较

经过一系列调参实验，文献[1]确定Mads-NM一组比较好的参数为：$\pi = (\pi_{svd}, \pi_{eval}, \pi_{radius}) = (0.01, 80n, 8)$

5.1 无约束优化问题的比较

对于无约束优化问题，文献[1]使用了Mads-NM、Mads，以及应用了NM的fminsearch、fminsearch Adapt、grid NM共5种算法，在68个不同的测试问题上进行了比较。

Fig. 4 Data profiles using Mads-NM, Mads, fminsearch, fminsearch Adapt, and gridNM with a convergence tolerance of $\tau = 10^{-5}$ on one replication of 68 test problems without constraints other than bounds



对无约束优化问题的数值实验表明，由此产生的Mads-NM算法优于Matlab实现的NM算法（fminsearch和fminsearch Adapt）、gridNM算法以及Mads算法。

5.2 有约束优化问题的比较

对于无约束优化问题，文献[1]使用了Mads-NM与Mads算法，在3个黑盒测试问题（LOCKWOOD、MDO、STYRENE）上进行了比较。

(1) LOCKWOOD

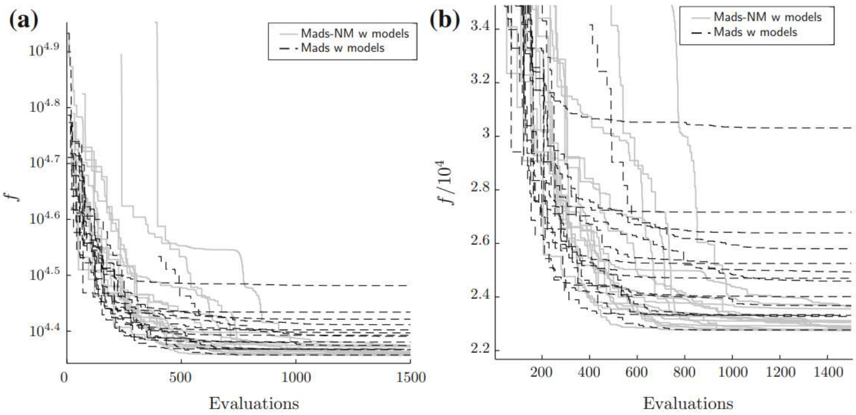


Fig. 5 Optimization history on 20 LOCKWOOD problems (right plot is a zoom on low objective values)

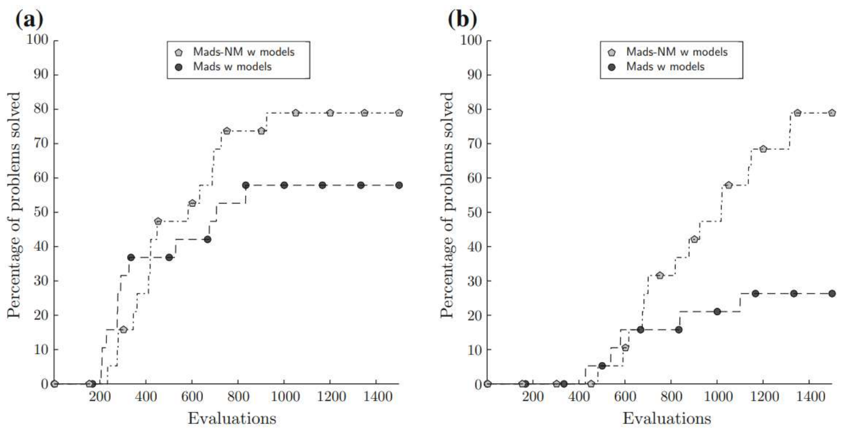


Fig. 6 Data profiles obtained with convergence tolerance τ on 20 LOCKWOOD problems. **a** $\tau = 10^{-1}$ and **b** $\tau = 10^{-2}$

(2）MDO

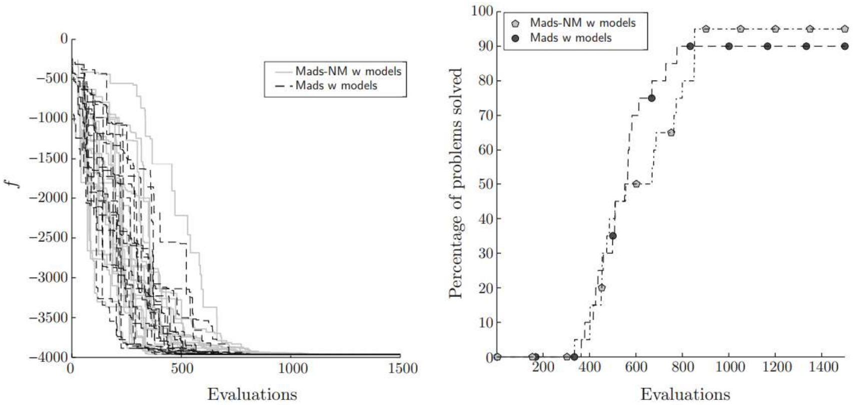
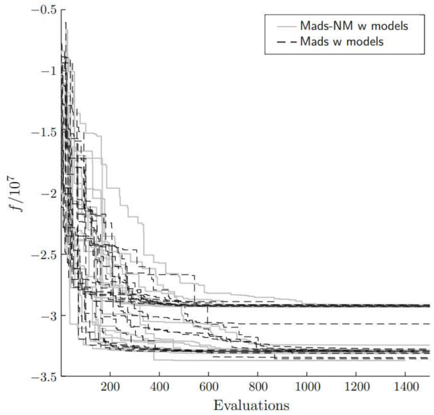


Fig. 7 Mads and Mads-NM with quadratic models on 20 MDO problems. **a** Optimization history and **b** Data profiles with $\tau = 10^{-2}$

(3）STYRENE

Fig. 8 Optimization history on 20 STYRENE problems



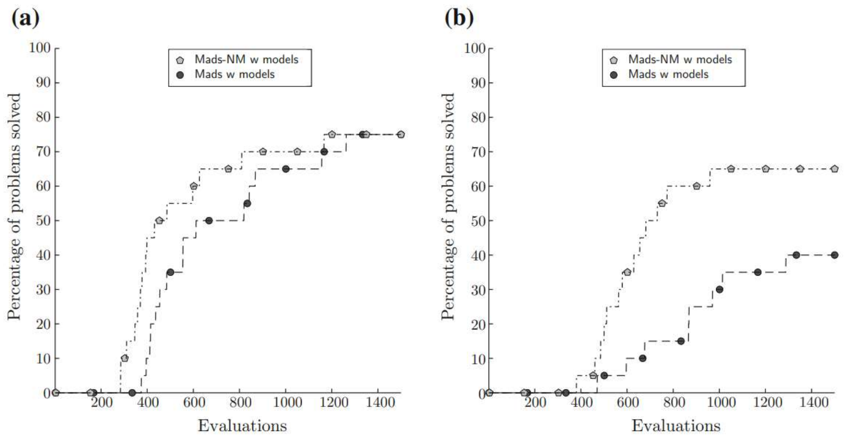


Fig. 9 Data profiles obtained with two convergence tolerances on 20 STYRENE problems. **a** $\tau = 10^{-2}$ and **b** $\tau = 10^{-3}$

在三个有约束工程问题上的实验表明，Mads-NM算法和Mads算法在最初的数百次函数求值过程中表现相当，但随着函数求值次数的增加，Mads-NM算法通常比Mads算法更能找到更好的可行解。解决问题百分比的差异方面：对于MDO问题($\tau = 10^{-2}$)差距约为5%；对于STYRENE问题($\tau = 10^{-3}$)差距约为25%；对于LOCKWOOD问题($\tau = 10^{-2}$)差距超过50%.

6. 参考文献

[1]Audet, C., Tribes, C. Mesh-based Nelder–Mead algorithm for inequality constrained optimization. Comput Optim Appl 71, 331–352 (2018).

[2]McKinnon, K.I.M.: Convergence of the Nelder–Mead simplex method to a nonstationary point. SIAMJ. Optim. 9(1), 148–158 (1998)

[3]Audet, C., Hare, W. (2017). Mesh Adaptive Direct Search. In: Derivative-Free and Blackbox Optimization. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer, Cham.

7. 后记

在本学期最后两周里，我围绕论文Mesh-based Nelder–Mead algorithm for inequality constrained optimization展开学习，制作PPT汇报并书写了总结报告。这是一次非常难得的经历，让我对21世纪的黑盒优化算法研究有了一定的了解。

学习过程中我曾遇到过困难：论文对Mads算法的搜索-轮询迭代以及渐进障碍(PB)的介绍均十分简略，对理解Mads-NM算法造成了很大的阻碍。但令人欣喜的是，查阅资料时我发现论文作者之一Charles Audet曾参与教材Derivative-Free and Blackbox Optimization的编写。汇报结束后，我花费了一周时间阅读此教材的第五章(Mesh Adaptive Direct Search)和第十二章(Variables and Constraints)，充分理解了PB障碍的Mads算法，并在本报告的第三节绘制了流程图进行总结。这本教材是我在学习中的意外收获，对于黑盒优化算法论述详实，值得我继续研读。

其他同学的文献汇报也让给我受益良多，文献11-13让我看到了Mads算法的不同变体，其余文献针对不同问题也引入了新的思想。

最后，衷心感谢范金燕老师和助教曹慧琳老师。在前14周的课程中我学到了许多下降方法，在15-16周的研讨中我了解到了21世纪的优化算法研究，在未来的道路上我相信也会经常需要把学到的优化知识学以致用。再次对你们的付出表示衷心的感谢。