ОЦЕНКА ЧИСЛЕННОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ МЕТОДОВ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Косолап А.И. докт. физ.-мат. наук, проф.

Украинский государственный химико-технологический университет, Украина

Введение. Задачи оптимизации возникают в любой сфере человеческой деятельности. Решение таких задач позволяет проектировать и создавать оптимальные сложные системы с минимальным расходованием ресурсов. Такие задачи ставились и решались еще до нашей эры. Интенсивность исследований в области оптимизации сильно возросла во второй половине прошлого века. Для решения задач оптимизации было разработано большое число различных методов. Однако эти методы позволяли находить только локальные экстремумы в задачах оптимизации. Это вынуждало исследователей строить только унимодальные модели, что значительно сужало область применения оптимизации. Практика требовала решения многих задач, которые были мультимодальными. Это вынудило исследователей заняться разработкой методов для решения мультимодальных задач. Эти исследования начались только в конце прошлого века. К этому времени методы решения для решения унимодальных задач почти себя исчерпали. При построении методов глобальной оптимизации наметилось два основных подхода детерминированный и стохастический. Вначале детерминированный подход ориентировался на разработку методов ветвей и границ [1]. В этих методах область поиска разбивалась на части и на каждой части локальными методами искалась верхняя и нижняя оценка. Если эти оценки не совпадали, то такая часть разбивалась на меньшие части. Этот подход был заимствован из области дискретной оптимизации и для решения задач с булевыми переменными он является доминирующим сегодня. Однако методы ветвей и границ оказались не эффективными для решения мультимодальных задач. Это связано с размерностью решаемых задач. Уже при размерности задачи больше десяти число разбиений области решений становится очень большим. Столкнувшись со значительными вычислительными проблемами, исследователи начали разрабатывать стохастические методы для решения задач глобальной оптимизации [2]. Этот процесс продолжается и в наше время, хотя, по мнению автора, это направление себя исчерпало. Генетические, эволюционные и другие стохастические методы иногда позволяют находить приближенные решения в тестовых задачах, но во многих случаях они находят решения далекие от оптимальных. В наше время превалируют методы получения хороших оценок решений с последующей локальной оптимизацией. Для этого используется полуопределенная или выпуклая релаксация, решение двойственных задач [3]. Этот подход преимущественно используется в программных пакетах для решения задач глобальной оптимизации. Хотя такие методы не гарантируют получение глобального экстремума, но как показали численные эксперименты на тестовых задач, эти методы позволяют находить решения близкие к оптимальным.

Результаты исследований. Иной подход предложен автором, который разработал метод точной квадратичной регуляризации для решения мультимодальных задач [4]. В этом методе задача мультимодальной оптимизации преобразуется к эквивалентной, но более простой задаче максимума нормы вектора на выпуклом множестве. Простота преобразованной задачи заключается в том, что во многих случаях она становится унимодальной. Для ее решения достаточно программы локальной оптимизации.

Для проверки эффективности методов глобальной оптимизации разработано большое число тестовых и прикладных задач. Эти тестовые функции и задачи легко найти в Internet. Число тестовых задач превышает тысячу, их размерность доходит до нескольких тысяч. Две большие базы тестовых задач можно найти по адресам https://www.minlplib.org и https://www.gamsworld.org. Большинство тестовых задач (особенно первой базы) даны с решениями, полученными различными программными пакетами глобальной оптимизации BARON, ANTIGONE, COUENNE, LINDO, SCIP и другими. Эти результаты могут использоваться для сравнительной эффективности методов. Однако эффективность этих тестовых задач условной глобальной оптимизации для проверки методов не очень высокая. Это связано с тем, что точность решения задачи зависит от точности выполнения ограничений. Для задач условной оптимизации очень малые изменения точности выполнения ограничений часто приводят к существенным изменениям значения целевой функции задачи. В этом случае, более информативными для численной проверки эффективности методов глобальной оптимизации являются тестовые задачи безусловной оптимизации. В Internet также можно найти тестовые функции порядка двухсот. Часть из них имеют размерность n, что позволяет решать задачи произвольной размерности. Некоторые задачи имеют прикладной характер, например, задача минимизации потенциальной энергии атома, результаты решений которой даны до 1000 атомов включительно. К сожалению, большинство тестовых задач безусловной оптимизации имеют тривиальные решения. Это затрудняет проверку эффективности методов, так как программы глобальной оптимизации могут модифицироваться до получения заданного точного решения задачи. Более информативными являются задачи с неизвестными решениями. Это такие, например, как тестовые функции Rana и Egg Holder. Для этих функций получение лучших решений будет свидетельствовать о большей эффективности метода. Автор предлагает увеличить число таких тестовых задач с неизвестными решениями. Мы обобщили многие несепарабельные тестовые задачи двух переменных на задачи n переменных. Это, например, такие тестовые функции, как Bird, Adjman, Trefethen, Mishra 6 и другие. Также большое число тестовых задач предложено в работах J. Nie [5], которые еще не включены в списки для обязательного тестирования. Решение в этих задачах неизвестно, поэтому они эффективны для численной проверки эффективности методов глобальной оптимизации. Автор предлагает для проверки эффективности методов использовать размерность задач n = 100. В большинстве публикациях приводятся результаты численных экспериментов для малых размерностей, что не является информативным.

Автор при помощи метода точной квадратичной регуляризации решил большинство нетривиальных тестовых задач. Результаты этих экспериментов убедительно свидетельствуют в значительной эффективности этого метода. Практически для всех задач с неизвестными решениями были получены лучшие решения. В частности, для функции Rana n = 100 найдено решение $f(x^*)$ = -50865,131, что значительно превосходит результат $f(x^*)$ = -47332, полученный другими методами. И это при том, что эта задача решается разными методами уже более 25 лет. Некоторые результаты численных экспериментов приведены в табл. 1 (постановка задач в [6]).

Таблица 1 – Результаты решений тестовых задач

№ п/п	Задача	n	Метод EQR	Лучшее известное решение
1	Egg Holder	100	**-89948,532**	-89938
2	Rana	100	**-50865,131**	-47332
3	Trefethen	100	**-237,73323**	-135,6185154
4	Mishra 6	100	**-289,8371385**	-279,5928(python)
5	Adjman	100	**-23,95135**	-23,30464(python)
6	Scahffer 4	100	**28,95141**	48,951266(python)
7	M. Zakharov	100	**-255133,9934**	-254808,9343(python)
8	Scahffer 4	100	**28,95141**	48,951266(python)

В книге автора [4] приведены результаты решения 350 тестовых задач методом точной квадратичной регуляризации, которые сравниваются с лучшими решениями этих задач, полученных другими методами. Все решения автора приведены с ответами, по которым легко проверить истинность решений.

Выводы. В работе приведен анализ существующих тестовых задач для проверки численной эффективности методов глобальной оптимизации. Автор предлагает модификацию и расширение этих тестовых задач, упрощающих проверку эффективности методов. Для сравнительной численной эффективности методов использовался метод точной квадратичной регуляризации, разработанный автором. Этот метод показал значительное численное преимущество при решении большинства тестовых задач.

Література

1. Horst R. Global Optimization: Deterministic Approaches. 3rd ed./ R. Horst, H. Tuy. – Berlin: Springer–Verlag, 1996. – 727 p.
2. Kenneth V. P. Differential Evolution. A Practical Approach to Global Optimization / V. P. Kenneth, R. M. Storn, J. A. Lampinen. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2005. – 542 p.
3. Ye Y. Semidefinite programming /Y. Ye. – Stanford University, 2003. – 161 p.
4. Kosolap A. Practical Global Optimization/A. Kosolap. – Dnipro: Bila K.O., 2020. – 196 p.
5. Nie J. Regularization methods for SDP relaxations in large-scale polynomial optimization / J. Nie, L.Wang // SIAM Journal on Optimization, Vol. 22, 2012, pp. 408–428.
6. Jamil M. A literature survey of benchmark functions for global optimization problems / M. Jamil, XS. Yang // Int. J. Math. Model Numer. Optim., Vol. 4, No. 2, 2013, pp. 150–194.