DOI 10.34185/1562-9945-3-134-2021-04
УДК 519.893

А.И. Косолап

ОЦЕНКА ЧИСЛЕННОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ МЕТОДОВ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Аннотация. В данной статье мы анализируем тестовые задачи глобальной оптимизации на численную эффективность методов их решения. Автор предлагает модификации этих тестовых задач, которые упростят проверку численной эффективности методов. Проведено сравнение существующих методов глобальной оптимизации с методом точной квадратичной регуляризации, предложенным автором. Этот метод показал наилучшие результаты при решении большинства тестовых задач. В частности, лучшие решения были получены для тестовых задач с неизвестными решениями. Этот метод позволяет решать мультимодальные задачи большой размерности и для его реализации требуется только программа локального поиска.

Ключевые слова: глобальная оптимизация, численные методы, тестовые задачи, метод точной квадратичной регуляризации.

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. Более актуальной является задача разработки эффективных методов для решения мультимодальных задач.

Постановка задачи и цель исследования. В задачах глобальной оптимизации необходимо найти минимальное или максимальное значение функции многих переменных при заданных ограничениях на эти переменные в виде неравенств или равенств. Такие задачи, как правило, имеют много экстремальных значений и называются мультимодальными. В данной статье показано, что метод точной квадратичной регуляризации, предложенный автором для решения мультимодальных задач на сегодняшний день является наиболее эффективным.

Анализ последних исследований и публикаций. 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 размерностях 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, 4]. 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 [5]. В этом методе задача мультимодальной оптимизации преобразуется к эквивалентной, но более простой задаче максимума нормы вектора на выпуклом множестве. Простота преобразованной задачи заключа-

ISSN 1562-9945 (Print)
ISSN 2707-7977 (Online)

ется в том, что во многих случаях преобразованная задача 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 порядка двухсот тестовых функций, на которых проверяется эффективность методов. 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 настройкой параметров до получения заданного точного решения задачи. Такие алгоритмы как генетический, эволюционный и другие содержат большое число (больше 10) настраиваемых параметров. При известном решении задачи выбор параметров можно подобрать таким образом, чтобы алгоритм достиг оптимального решения. 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, Scahffer 4 и другие. Также большое число тестовых задач полиномиальной оптимизации предложено в работах J. Nie [6], которые еще не включены в списки для обязательного тестирования. Решение в этих задачах неизвестно, поэтому они эффективны для численной проверки 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 о значительно большей 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. Ниже в табл. 1 приведены 10 тестовых функций для проверки эффективности методов глобальной оптимизации.

Таблица 1

Список тестовых функций мультимодальной оптимизации

№	Название	Тестовая функция
1	Rana	$\min\{\sum_{i=1}^{n-1}[(x_{i+1}+1)\cos(\sqrt{\lvert x_{i+1}-x_i+1\rvert})\sin(\sqrt{\lvert x_{i+1}+x_i+1\rvert})+ x_i\cos(\sqrt{\lvert x_{i+1}+x_i+1\rvert})\sin(\sqrt{\lvert x_{i+1}-x_i+1\rvert})] \mid -520\le x\le 520\}$
2	Egg Holder	$\min\{\sum_{i=1}^{n-1}[-x_i\sin(\sqrt{\lvert x_i-x_{i+1}-47\rvert})-(x_{i+1}+47)\sin(\sqrt{\lvert x_{i+1}+x_i/2+47\rvert})], -512\le x\le 512\}.$
3	Adjman	$\min\{\sum_{i=1}^{n-1}\cos(x_i)\sin(x_{i+1})+\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i}{x_{i+1}^2+1} \mid x\in[-1,1]\}$
4	Bird	$\min\{\sum_{i=1}^{n-1}[\sin(x_i)e^{(1-\cos(x_{i+1}))^2}+\cos(x_{i+1})e^{(1-\sin(x_i))^2}+(x_i-x_{i+1})^2] \mid x\in[-2\pi,2\pi]\}$
5	Trefethen	$\min\{\sum_{i=1}^{n-1}[e^{\sin(50x_i)}+\sin(60x_{i+1})+\sin(70\sin(x_i))+\sin(\sin(80x_{i+1}))- \sin(10(x_i+x_{i+1}))+0.25(x_i^2+x_{i+1}^2)^2] \mid x\in[-10,10]\}.$
6	Mishra6	$\min\{\sum_{i=1}^{n-1}-\ln[\sin^2(\cos(x_i)+\cos(x_{i+1}))^2-\cos^2(\sin(x_i)+\sin(x_{i+1})+x_i]^2+ 0.001((x_i-1)^2+(x_{i+1}-1)^2)\}$

ISSN 1562-9945 (Print)
ISSN 2707-7977 (Online)

7	Scahffer4	$\min\{\sum_{i=1}^{n-1}(0{,}5+\frac{\cos^2(\sin(x_i^2-x_{i+1}^2)-0.5}{1+0.001(x_i^2+x_{i+1}^2)^2})\mid x\in[-100{,}100]\}$
8	MZak-harov	$\min\{-\sum_{i=1}^{n}x_i-(0.5\sum_{i=1}^{n}ix_i)^2+(0.5\sum_{i=1}^{n}ix_i)^4\mid x\in[-5{,}10]\}$
9	Nie1	$\min\{\sum_{i=1}^{n}x_i+\sum_{1\le i<j\le n}^{n}x_ix_j+\sum_{1\le i<j<k\le n}^{n}x_ix_jx_k+\sum_{1\le i<j<k<l\le n}^{n}x_ix_jx_kx_l\mid \|x\|^2\le 1\},$
10	Nie2	$\min\{\sum_{1\le i<j\le n}(x_ix_j+x_i^2x_j-x_j^3-x_i^2x_j^2)\mid -1\le x\le 1\},$

Такие функции как Rana и Egg Holder считались много раз различными методами, в том числе и для размерности n = 100. Функции 3–7 рассчитывались только для n = 2 и обобщены автором на размерность n. Функция 8 является модификацией известной тестовой функции Zakharov, предложенной автором. Значение глобального минимума для модифицированной функции неизвестно, в то время как для функции Zakharov оно тривиально.

Приведенные в табл. 1 функции рассчитывались автором методом точной квадратичной регуляризации, и результаты расчета сравнивались с лучшими результатами, полученными всеми другими методами, которые можно найти в Internet. Для тестовых функций, предложенных автором, расчеты для сравнения производились при помощи эволюционного поиска из библиотеки Python. Решение приведенных тестовых задач методом точной квадратичной регуляризации проводилось с использованием программы OpenSolver. Эта программа реализует прямо-двойственный метод внутренней точки для локальной оптимизации. Она является надстройкой Excel, что упрощает ввод исходных данных и формул, для вычисления функций. Для рассматриваемых тестовых функций достаточно ввести одну формулу и скопировать ее на 99 ячеек.

Каждая тестовая задача преобразовывалась квадратичной регуляризацией к виду

$$\max\{\|x\|^2\mid f_0(x)+s+(r-1)\|x\|^2\le d,x\in E^{n+1}\},\qquad(1)$$

где $f_0(x)$ – тестовая функция, $\|x\|^2$ – квадрат евклидовой нормы вектора, $\|x\|^2 = x_1^2 + \ldots + x_n^2 + x_{n+1}^2$. Задача (1) содержит два параметра s и r. Параметр s выбирается таким, чтобы ограничение задачи (1) в точке максимума было активным, а значения r > 0 должно быть таким, чтобы ограничения задачи (1) было выпуклым. Выбор этих параметров обычно не представляет затруднений. Так, для предложенных в табл. 1 функций достаточно положить $r = 100$, а значение s в зависимости от получаемого решения на каждой итерации.

Задача (1) решается следующим образом. Для каждого возрастающего значения d решается задача (1) программой OpenSolver. Полученные решения проверяются на выполнения условия $r||x||^2 = d$ с заданной точностью. Если это условие выполнено для минимального значения d, то решение задачи (1) совпадает с решением исходной задачи. Обычно требуется порядка 50 решений задачи (1) при разных значениях d. Поиск оптимального значения d осуществляется методом дихотомии.

В табл. 2 приведены результаты сравнительных численных экспериментов для рассмотренных тестовых функций. Из приведенных результатов видим, что метод точной квадратичной регуляризации (EQR) показал существенно лучшие результаты для всех тестовых задач. Полученные результаты могут быть использованы для проверки численной эффективности новых методов глобальной оптимизации.

Таблица 1.

Сравнительные численные 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)
9	Nie1	50	**-0,9775492**	-0,88776
10	Nie2	50	**-94**	-26

В книге автора [5] приведены результаты решения 350 других тестовых задач методом точной квадратичной регуляризации, которые сравниваются с

ISSN 1562-9945 (Print)
ISSN 2707-7977 (Online)

лучшими решениями этих задач, полученных другими методами. Все решения автора приведены с ответами, по которым легко проверить истинность решений. Много задач решено из приведенных выше баз данных.

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. Это преимущество заключается в том, что для задач с неизвестными решениями методом EQR получены лучшие результаты (меньшее значение целевой функции), чем всеми другими методами.

ЛІТЕРАТУРА / ЛИТЕРАТУРА

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. Floudas C. A. A review of recent advances in global optimization / C. A. Floudas, C. E. Gounaris //J. Glob. Optim. – 2009, v. 45, no. 1. – pp. 3–38.
5. Kosolap A. Practical Global Optimization/A. Kosolap. – Dnipro: Bila K.O., 2020. – 196 p.
6. Nie J. Regularization methods for SDP relaxations in large-scale polynomial optimization / J. Nie, L.Wang // SIAM Journal on Optimization. – 2012, vol. 22. – pp. 408–428.

REFERENCE

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. Floudas C. A. A review of recent advances in global optimization / C. A. Floudas, C. E. Gounaris //J. Glob. Optim. – 2009, v. 45, no. 1. – pp. 3–38.

5. Kosolap A. Practical Global Optimization/A. Kosolap. – Dnipro: Bila K.O., 2020. – 196 p.
6. Nie J. Regularization methods for SDP relaxations in large-scale polynomial optimization / J. Nie, L.Wang // SIAM Journal on Optimization. – 2012, vol. 22. – pp. 408–428.
Received 05.03.2021.
Accepted 09.03.2021.

Оцінка чисельності ефективності методів глобальної оптимізації

У даній статті ми аналізуємо тестові завдачі глобальної оптимізації на чисельну ефективність методів їх розв'язування. Автор пропонує модифікації цих тестових задач, які спростять перевірку чисельної ефективності методів. Проведено порівняння існуючих методів глобальної оптимізації з методом точної квадратичної регуляризації, запропонованим автором. Цей метод показав кращі результати при розв'язуванні більшості тестових задач. Зокрема, кращі розв'язки були отримані для тестових задач з невідомими розв'язками. Цей метод дозволяє розв'язувати мультимодальні задачі великої розмірності і для його реалізації потрібна тільки програма локального пошуку.

Estimation of the numerical efficiency of global optimization methods

Currently, test problems are used to test the effectiveness of new global optimization methods. In this article, we analyze test global optimization problems to test the numerical efficiency of methods for their solution. At present, about 200 test problems of unconditional optimization and more than 1000 problems of conditional optimization have been developed. We can find these test problems on the Internet. However, most of these test problems are not informative for testing the effectiveness of global optimization methods. The solution of test problems of conditional optimization, as a rule, has trivial solutions. This allows the parameters of the algorithms to be tuned before these solutions are obtained. In test problems of conditional optimization, the accuracy of the fulfillment of constraints is important. Often, small errors in the constraints lead to a significant change in the value of an objective function.

Construction of a new package of test problems to test the numerical efficiency of global optimization methods and compare the exact quadratic regularization method with existing methods.

The author suggests limiting oneself to test problems of unconstrained optimization with unknown solutions. A package of test problems of unconstrained optimization is proposed, which includes known test problems with unknown solutions and modifications of some test problems proposed by the author. We also propose to include in this package J. Nie polynomial functions with unknown solutions. This package of test problems will simplify the verification of the numerical effectiveness of methods. The more effective methods will be those that provide the best solutions. The paper compares existing global optimization methods with the exact quadratic regularization method proposed by the author.

This method has shown the best results in solving most of the test problems. This paper presents some of the results of the author's numerical experiments. In particular, the best solu-

ISSN 1562-9945 (Print)
ISSN 2707-7977 (Online)

tions were obtained for test problems with unknown solutions. This method allows solving multimodal problems of large dimensions and only a local search program is required for its implementation.

Косолап Анатолий Иванович – докт. физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрою специализированных компьютерных систем ДВНЗ «Украинский государственный химико-технологический университет».

Косолап Анатолій Іванович – доктор фіз.-мат. наук, професор, завідувач кафедрою спеціалізованих комп'ютерних систем ГВУЗ «Український державний хіміко-технологічний університет».

Kosolap Anatolii Ivanovich – Dr. phys.-mat. sci., professor, head of the Department of Specialized Computer Systems, SHEI "Ukrainian State University of Chemical Technology".