УДК 519.85

Косолап А.И.

ЧИСЛЕННАЯ ЭФФЕКТИВНОСТЬ МЕТОДА ТОЧНОЙ КВАДРАТИЧНОЙ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ

ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет», г. Днепр, Украина

В данной работе рассматриваются методы решения многоэкстремальных задач в конечномерном евклидовом пространстве. Такие задачи возникают при математическом моделировании сложных систем в экономике, финансах, управлении, технологических процессах, информатике, проектировании и других областях. Показано, что к этому классу задач преобразуются дискретные задачи, а также задачи решения нелинейных уравнений. В последние годы приложены значительные усилия исследователей для разработки методов решения многоэкстремальных задач. Разработаны методы ветвей и границ, полуопределенное программирование, двойственные методы, генетические и эволюционные методы и многие другие. В настоящее время для проверки эффективности методов используются разработанные сложные тестовые задачи, а также задачи из различных прикладных областей. Многочисленные эксперименты показывают, что только для некоторых тестовых задач существующие методы позволяют находить оптимальные решения. Во многих случаях эти решения далеки от оптимальных. Будем использовать точную квадратичную регуляризацию для преобразования многоэкстремальных задач к максимизации нормы вектора на выпуклом множестве. Такое преобразование часто сводит исходную многоэкстремальную задачу к одноэкстремальной. Для поиска локального экстремума используем прямо-двойственный метод внутренней точки и метод дихотомии для решения преобразованной задачи. Эти методы позволяют решать многоэкстремальные задачи большой размерности. Проведены значительные численные эксперименты на тестовых задачах для проверки эффективности методов. Практически для всех тестовых задач с неизвестными решениями методом точной квадратичной регуляризации были получены лучшие результаты. Эти результаты легко проверить, подставив найденное оптимальное решение в ограничения и целевую функцию соответствующей тестовой задачи. Проведенные эксперименты показывают значительное преимущество метода точной квадратичной регуляризации над существующими методами решения многоэкстремальных задач.

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

Постановка проблемы и анализ последних исследований и публикаций

Одними из наиболее сложных проблем в численном анализе является решение задач глобальной оптимизации. Несмотря на значительные усилия исследователей в этой области, пока эффективные методы решения таких задач не предложены. Разработаны методы ветвей и границ [1], время решения которыми растет экспоненциально при увеличении размерности задачи. Другие методы для решения задач глобальной оптимизации используют случайный поиск (генетические, эволюционные алгоритмы) [2]. Однако в многомерном пространстве случайный поиск неэффективен, что подтверждается численными экспериментами. Кроме того, такие методы содержат множество настраиваемых параметров, поэтому решение одних и тех же задач этими методами дают различные результаты. Новым направлением в глобальной оптимизации является полуопределенная релаксация для решения квадратичных и полиномиальных задач [3]. В общем случае, такая релаксация позволяет находить только оценки оптимальных решений. Часто найденное решение находится вблизи глобального экстремума, который можно найти локальным методом. Разрабатываются также двойственные методы для решения задач глобальной оптимизации. Разрыв двойственности в многоэкстремальных задачах между значениями целевых функций прямой и двойственной задачи также позволяет, в общем случае, находить только оценки решений. Все эти методы прошли многократную численную проверку при решении тестовых и практических задач. Полученные результаты вынуждают искать новые эффективные методы для решения многоэкстремальных задач. Для оценки эффективности метода используют три подхода: доказательство сходимости метода и определение скорости его сходимости, определение оценки числа итераций для получения e-оптимального решения и проведение численных экспериментов на многочисленных сложных тестовых задачах. Первые два подхода должны учитывать самые неблагоприятные условия задачи, которые могут не представлять практического интереса. Такая ситуация наблюдается при использовании симплекс-метода в линейном программировании. Этот метод теоретически неэффективен, но практически эффективен, что доказано решением сотни тысяч практических задач. Доказательства сходимости методов часто содержат условия, которые сложно проверить при их практической реализации. При оценке числа итераций необходимо учитывать, что сложность этих итераций в различных методах существенно различна. Поэтому в последние годы эффективность методов проверяется при решении множества сложных тестовых задач. Некоторые из этих задач имеют 2^n или n! локальных экстремумов.

Постановка задачи и ее решение

В этой работе рассматривается метод точной квадратичной регуляризации [4] для решения многоэкстремальных задач. В этом методе исходная многоэкстремальная задача:

$$\min\{f_0(x) \mid f_i(x) \le 0, i = 1,\ldots,m, x \in E^n\}, \qquad (1)$$

где все $f_i(x)$ – дважды дифференцируемые функции, а E^n – евклидовое пространство преобразуется к задаче максимума нормы вектора на выпуклом множестве. Задача (1) содержит все квадратичные и полиномиальные задачи. В задаче (1) переменные могут принимать непрерывные, дискретные или булевы значения. Если переменные только целочисленные, то они удовлетворяют условию:

$$\sum_{i=1}^{n}(1-\cos(2\pi x_i)) \le 0.$$

Булевые переменные удовлетворяют ограничениям:

$$\sum_{i=1}^{n} x_i(1-x_i) \le 0, 0 \le x_i \le 1.$$

Иногда переменные принимают только одно из дискретного множества значений $x_i \in \{u_{i1},\ldots,u_{iq}\}$, тогда такие переменные заменяем условиями:

$$x_i = \sum_{j=1}^{q} z_{ij}u_{ij}, \sum_{j=1}^{q} z_{ij} = 1, z_{ij} = 0 \vee 1, i = 1,\ldots,n.$$

Часто ограничения задачи (1) имеют вид равенств:

$$f_i(x) = 0, i = 1,\ldots,m.$$

В этом случае они легко преобразуются к неравенствам:

$$f_i(x) \le 0, i = 1,\ldots,m, -\sum_{i=1}^{m} f_i(x) \le 0$$

или

$$\max\{\sum_{i=1}^{m} f_i(x) \mid f_i(x) \le 0, i = 1,\ldots,m\},$$

если решается нелинейная система уравнений.

Точная квадратичная регуляризация позволяет преобразовать задачу (1) к виду:

$$\max\{\|x\|^2 \mid x \in S(d)\}, \qquad (2)$$

где S – выпуклое множество:

$$S(d) = \{x \mid f_0(x) + s + (r-1)\|x\|^2 \le$$
$$\le d, f_i(x) + r\|x\|^2 \le d, i = 1,\ldots,m\},$$

здесь $\|x\|^2 = x_1^2 + \ldots + x_n^2 + x_{n+1}^2$. Легко убедиться в том, что при фиксированном значении d максимальному допустимому значению $\|x\|^2$ будет соответствовать минимальное значение $f_0(x)$. При увеличении d и максимизации $\|x\|^2$ значение $f_0(x)$ будет убывать. Необходимо определить минимальное значение d при котором с заданной точностью выполнится условие $r\|x\|^2=d$.

Преобразованная задача (2) содержит два параметра и две новых переменных. Параметр $r>0$ выбирается таким, чтобы множество S(d) было выпуклым. Для квадратичных задач значение этого параметра легко найти (матрицы квадратичных слагаемых должны быть с преобладающими диагоналями). Параметр s должен удовлетворять условию:

$$s \geq \| x^* \|^2 - f_0(x^*),$$

где x^* – решение задачи (1). При таком значении s первое ограничение задачи (2) будет активным. Обычно для переменных задачи (1) можно установить двухсторонние ограничения, что позволяет определить значение параметра s.

Задача (2) в общем случае, многоэкстремальная, но может быть и одноэкстремальной, если решение (d_0, x^0) задачи выпуклой оптимизации:

$$\min\{d \mid x \in S, r\| x \|^2 \leq d\}$$

удовлетворяет условию $r\|x^0\|^2=d_0$. Задача (2) легко преобразуется к одноэкстремальной также в других случаях. Например, когда выпуклое множество S является параллелепипедом. Часто сдвиг выпуклого множества S вдоль биссектрисы положительного ортанта также преобразует задачу (2) к одноэкстремальной. Это связано с тем, что в точке максимума кривизна сферы $S_0=\{x|r\|x\|^2=d\}$ будет меньше кривизны выпуклой поверхности ∂S. Если задача (2) многоэкстремальная, то на минимальной дуге, соединяющей два локальных максимума, будет находиться, по крайней мере, один минимум нормы вектора. В этой точке минимума кривизна S_0 будет больше кривизны ∂S. Теперь, если множество S переместить в направлении положительного ортанта, то кривизна ∂S останется неизменной, а кривизна S_0 будет стремится к нулю при увеличении сдвига. Это означает, что существует такой сдвиг множества S(d), что задача:

$$\min\{\| x \|^2 \mid x \in \partial S(d)\}$$

не будет содержать внутренних локальных минимумов. Но тогда задача (2) будет одноэкстремальной.

Для решения задачи (2) использовался прямо-двойственный метод внутренней точки [5] и метод дихотомии по переменной d. В задаче (2) необходимо найти минимальное значение d, при котором ее решение удовлетворяет условию $r\|x\|^2=d$. Это значение d находим методом дихотомии.

Результаты сравнительных численных экспериментов

Для проверки численной эффективности метода точной квадратичной регуляризации использовались известные тестовые задачи, а также многоэкстремальные модели различных прикладных задач. Этим методом решено более 300 сложных тестовых задач число локальных экстремумов в некоторых из них равно 2^n или n! и больше. Много таких тестовых задач представлено на веб-сайте GLOBAL Library: http://www.gamsworld.org/global/globallib.htm (GL). Максимальная размерность решаемых данным методом задач равнялась 150. Но, учитывая то, что локальным поиском решаются задачи до 10 млн. переменных, данный метод можно использовать для решения многоэкстремальных задач такой же размерности.

Тестовые задачи, разработанные для проверки численной эффективности методов можно разбить на классы. Это задачи малой размерности, задачи с тривиальными решениями, задачи с известными решениями и задачи с неизвестными решениями. Для задач с неизвестными решениями существующими методами значение целевых функций постепенно улучшается по мере того, как совершенствуются методы их решения. Но метод точной квадратичной регуляризации показал лучший результат практически по всем этим тестовым задачам. Например, для известной тестовой задачи Rana:

$$\min\left\{\sum_{i=1}^{n-1}\left[\begin{array}{l}\left(x_{i+1}+1\right)\cos\left(\sqrt{|x_{i+1}-x_i+1|}\right)\times\\ \times\sin\left(\sqrt{|x_{i+1}+x_i+1|}\right)+\\ +x_i\cos\left(\sqrt{|x_{i+1}+x_i+1|}\right)\times\\ \times\sin\left(\sqrt{|x_{i+1}-x_i+1|}\right)\end{array}\right] \;\middle|\; -520 \leq x \leq 520\right\} \quad (3)$$

для n=20 лучший результат, полученный другими методами, равняется −9742,310076, а методом точной квадратичной регуляризации получено значение целевой функции задачи (3) равное −9819,53154, что значительно меньше. Далее, для тестовой задачи:

$$\min\left\{\begin{aligned}&10x_1x_4-6x_2^2x_3+x_1^3x_2+9\sin(x_5-x_3)+\\&+x_2^3x_4^2x_5^4 \mid \sum_{i=1}^{5}x_i^2\le 20,\\&x_1^2x_3+x_4x_5\ge -2, x_2^2x_4+10x_1x_5\ge 5\end{aligned}\right\}$$

лучшее решение целевой функции, полученное другими методами равно −2461,115783, а методом точной квадратичной регуляризации получено значение целевой функции равное −5675,620079, что также значительно меньше. Список таких задач можно продолжить. В работе [6] приведено 67 тестовых задач с полученными лучшими результатами методом точной квадратичной регуляризации. В таблице приведены некоторые из полученных результатов.

Метод точной квадратичной регуляризации использовался также для решения известных прикладных задач. Это задачи минимизации потенциальной энергии атомов. Уже для системы из 5 атомов минимальная потенциальная энергия точно неизвестна. Автором решена задача с 30 и 50 атомами. Решались сложные задачи упаковки шаров, в частности, задача нахождения контактного числа. Методом точной квадратичной регуляризации были найдены координаты центров 24 единичных шаров в 4-х мерном пространстве, касающиеся одного шара. Решались задачи наиболее плотной упаковки шаров в квадраты и шары. Очень сложными для численного решения являются задачи теории расписаний. Для этого класса задач получены первые обнадеживающие результаты. Решены несколько задач оптимизации конструкций. Получены первые результаты по оптимальному раскрою материалов. Много задач решено по оптимизации надежности сложных систем управления. В некоторых случаях данным методом получены лучшие показатели надежности, чем другими методами. Круг сложных прикладных задач, решаемых методом точной квадратичной регуляризации, постоянно расширяется. Все это говорит о том, что этот метод на сегодня является наиболее эффективным для решения многоэкстремальных задач.

Сравнительные численные эксперименты

№ п/п	Задача	n	m	Метод EQR Значение глобального минимума	Лучшее известное значение глобального минимума	Источник
1	Ex4.6	20	0	–3,3137889	–0,3827	[7]
2	Egg Holder	20	0	–17313,8055	–14371,8	[8]
3	Rana	20	0	–9819,531542	–9742,310076	[8]
4	LJ_30	90(30)	0	–135,1146	–128.286571	[9]
5	LJ_50	150(50)	0	–247,36484	–244,549926	[9]
6	DropWave	50	0	–0,936245328	0.0194	[10]
7	Ex. 4.2	10	0	–368,91465	–367,73255	[11]
8	meanvar	9	2	–28,78870202	5,2434	GL
9	ODIRS	14	15	0,0311596	0,057406	[12]
10	GTCD	4	1	2964375,495	2964377,63	[12]
11	Ex7_3_3	5	8	–5	–0,817529	GL
12	PC55	16	21	156,2196293	174,788	[13]
13	house	8	8	–4500	–2625	GL
14	GGP9	10	6	0,97888325	1,1437	[14]
15	GGP6	4	3	0,00398785	0,032615	[14]
16	Ex6_1_2	3	1	–83,27457479	–83,25349567	GL
17	chance	4	3	23,85531631	29,8943782	GL
19	Ex7_2_10	12	9	0	0,1	GL
20	Ex2_1_7	20	10	–4150,40992	–4105,2779	GL
22	Ex5.3	5	3	–5675,620079	–2461,115783	[15]
23	Ex2_1_8	24	10	15639	15990	GL
24	Ex6_1_1	8	6	–1,00905	–0,0202	GL
25	Ex7_3_5	13	15	7,68E–06	1,2065255	GL
26	Ex8_4_7	63	41	26,99430909	29,0473	GL
27	Harker	20	7	–987,7592744	–986,513	GL

Выводы

В работе приведены сравнительные численные эксперименты по проверке эффективности метода точной квадратичной регуляризации при решении множества сложных тестовых задач. Эти эксперименты показывают значительное преимущество данного метода. Полученные лучшие результаты при решении тестовых задач легко проверить. Приведенные данные решения тестовых задач могут быть использованы для улучшения существующих методов решения задач глобальной оптимизации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Horst R., Tuy H.* Global Optimization: Deterministic Approaches. 3rd ed. – Berlin: Springer-Verlag, 1996. – 727 p.
2. *Kenneth V.P., Storn R.M., Lampinen J.A.* Differential Evolution. A Practical Approach to Global Optimization. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2005. – 542 p.
3. *Ye Y.* Semidefinite programming. – Stanford University, 2003. – 161 p.
4. *Косолап А.И.* Глобальная оптимизация. Метод точной квадратичной регуляризации. – Днепропетровск: ПГАСА, 2015. – 164 с.
5. *Nocedal J., Wright S.J.* Numerical optimization. – Springer, 2006. – 685 p.
6. *Косолап А.И.* Глобальная оптимизация. Численные эксперименты. – Днепр, ПГАСА, 2015. – 112 с.
7. *Nie J.* Regularization Methods for Sum of Squares Relaxations in Large Scale Polynomial Optimization. – California:University of California, 2009. – 31 p.
8. *Piotrowski A.P., Napiyrkowski J.J.* The grouping differential evolution algorithm for multi-dimensional optimization problems // Control and Cybernetics. – 2010. – vol. 39. – No. 2. – P.527-550.
9. *Reviews* in Computational Chemistry. Volume 18. Edited by K.B. Lipkowitz, D.B. Boyd. – John Wiley & Sons, Inc. – 2002. – 238 p.
10. *Neri F., Tirronen V.* Recent advances in differential evolution: a survey and experimental analysis // Artif. Intell. Rev. – 2010. – vol. 33. – P.61-106.
11. *Malek A., Hosseinipour-Mahani N.* Solving a class of non-convex quadratic problems based on generalized kkt conditions and neurodynamic optimization technique // Kybernetika. – 2015. – vol. 51. – Num. 5. – P.890-908.
12. *Pant M., Thangaraj R., Singh V.P.* Optimization of Mechanical Design Problems Using Improved Differential Evolution Algorithm // International Journal of Recent Trends in Engineering. – 2009. – vol. 1. – No. 5. – P.21-25.
13. *A branch* and cut algorithm for nonconvex quadratically constrained quadratic programming / C. Audet, P. Hansen, B. Jaumard, G. Savard // Math. Program. – 2000. – Ser. A 87. – P.131-152.
14. *General* variable neighborhood search for the continuous optimization/ N. Mladenovic, M. Drazic, V. Kovacevic-Vujcic, M. Cangalovic // European Journal of Operational Research. – 2008. – No. 191. – P.753-770.
15. *A Nonlinear* Optimization Program in MATLAB / By editor Yinyu Ye. – Iowa City: University of Iowa. – 1989. – 19 p.

Поступила в редакцию 17.10.2017

ЧИСЕЛЬНА ЕФЕКТИВНІСТЬ МЕТОДУ ТОЧНОЇ КВАДРАТИЧНОЇ РЕГУЛЯРИЗАЦІЇ

Косолап А.І.

У даній роботі розглядаються методи розв'язування багатоекстремальних задач в скінченномірному евклідовому просторі. Такі задачі виникають при математичному моделюванні складних систем в економіці, фінансах, управлінні, технологічних процесах, інформатиці, проектуванні і інших областях. Показано, що до цього класу задач перетворюються дискретні задачі, а також задачі розв'язання нелінійних рівнянь. В останні роки докладено значних зусиль дослідників для розробки методів розв'язування багатоекстремальних задач. Розроблено методи меж та границь, напіввизначене програмування, двоїсті методи, генетичні та еволюційні методи і багато інших. В даний час для перевірки ефективності методів використовуються розроблені складні тестові задачі, а також задачі з різних прикладних областей. Багаточисельні експерименти показують, що тільки для деяких тестових задач існуючі методи дозволяють знаходити оптимальні розв'язки. У багатьох випадках ці розв'язки далекі від оптимальних. Будемо використовувати точну квадратичну регуляризацію для перетворення багатоекстремальних задач до максимуму норми вектора на опуклій множині. Таке перетворення часто зводить початкову багатоекстремальну задачу до одноекстремальної. Для пошуку локального екстремуму використовуємо прямо-двоїстий метод внутрішньої точки і метод дихотомії для розв'язування перетвореної задачі. Ці методи дозволяють розв'язувати багатоекстремальні задачі великої розмірності. Проведено значні чисельні експерименти на тестових задачах для перевірки ефективності методів. Практично для всіх тестових задач з невідомими розв'язками методом точної квадратичної регуляризації були отримані кращі результати. Ці результати легко перевірити, підставивши знайдений оптимальний розв'язок в обмеження і цільову функцію відповідної тестової задачі. Проведені експерименти показують значну перевагу методу точної квадратичної регуляризації над існуючими методами розв'язування багатоекстремального задач.

Ключові слова: багатоекстремальні задачі, тестові задачі, глобальна оптимізація, метод точної квадратичної регуляризації.

THE NUMERICAL EFFICIENCY OF THE METHOD OF EXACT QUADRATIC REGULARIZATION

Kosolap A.I.

Ukrainian State University of Chemical Technology, Dnipro, Ukraine

In this paper we consider methods for solving the multi-extreme problems in Euclidean finite-dimensional space and compare their efficiency at the solution of test problems. Such multi-extreme problems arise at mathematical modeling of various difficult systems in economics and finance, management, technological processes, computer science, design and others. We show that this class of problems contains discrete problems and also problems of solution of nonlinear equations. Recently considerable efforts have been made to find effective methods of solving multi-extreme problems. Nowadays researchers use such methods as: semidefinite programming, methods of branches and bounds, dual, genetic, evolutionary and other methods. Complex testing problems are used for the analysis of the efficiency of offered methods. Test problems of constrained and unconstrained optimization include also complex of applied problems. Numerous experiments prove that known methods find the optimal solution for a limited number of test problems. In this paper we consider the method of exact quadratic regularization. It can be used to transform multi-extreme problems into problems of searching maximum norm of a vector on a convex set. It is a very simple transformation. Such transformation often reduces the initial multi-extreme problem to the one-extreme one. For solving the transformed problem we use the primal-dual interior point method and bisection method. These methods allow solving high-dimensional multi-extreme problems. A large number of numerical experiments were performed for checking the efficiency of offered method. By implementing the method of exact quadratic regularization we have obtained better results for most test problems with unknown solutions. Comparative numerous experiments prove the substantial advantage of offered method of exact quadratic regularization over widely used optimization methods.

Keywords: multi-extreme problems, test problems, global optimization, method of exact quadratic regularization.

REFERENCES

1. Horst R., Tuy H. *Global Optimization: Deterministic Approaches. 3rd ed.*, Springer-Verlag, Berlin, 1996. 727 p.

2. Kenneth V.P., Storn R.M., Lampinen J.A. *Differential Evolution. A Practical Approach to Global Optimization*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2005. 542 p.

3. Ye Y. Semidefinite programming. Stanford University, 2003. 161 p.

4. Kosolap A.I. *Globalnaya optimizatsiya. Metod tochnoy qvadratichnoy regulyarizatsyi* [Global optimization. A method of exact quadratic regularization]. Dnipropetrovsk, PGASA [PSAES], 2015. 164 p. *(in Russian).*

5. Nocedal J., Wright S.J. *Numerical optimization*. Springer, 2006. 685 p.

6. Kosolap A.I. *Globalnaya optimizatsiya. Chislennye eksperimenty* [Global optimization. Numerical experiments]. Dnipro, PGASA [PSAES], 2015. 112 p. *(in Russian).*

7. Nie J. *Regularization Methods for Sum of Squares Relaxations in Large Scale Polynomial Optimization. University of California*, California, 2009. 31 p.

8. Piotrowski A.P., Napiorkowski J.J. The grouping differential evolution algorithm for multi-dimensional optimization problems. *Control and Cybernetics*, 2010, vol. 39, No. 2, pp. 527-550.

9. *Reviews in Computational Chemistry*. Volume 18. Edited by K.B. Lipkowitz and D.B. Boyd. John Wiley & Sons, Inc. 2002. 238 p.

10. Neri F., Tirronen V. Recent advances in differential evolution: a survey and experimental analysis. *Artif. Intell. Rev.*, 2010, vol. 33, pp. 61-106.

11. Malek A., Hosseinipour-Mahani N. Solving a class of non-convex quadratic problems based on generalized kkt conditions and neurodynamic optimization technique. *Kybernetika*, 2015, vol. 51, no. 5, pp. 890-908.

12. Pant M., Thangaraj R., Singh V.P. Optimization of Mechanical Design Problems Using Improved Differential Evolution Algorithm. *International Journal of Recent Trends in Engineering*, 2009, vol. 1, no. 5, pp. 21-25.

13. Audet C, Hansen P., Jaumard B., Savard G. A branch and cut algorithm for nonconvex quadratically constrained quadratic programming. *Math. Program.*, 2000, ser. A 87, pp. 131-152.

14. Mladenovic N., Drazic M., Kovacevic-Vujcic V., Cangalovic M. General variable neighborhood search for the continuous optimization. *European Journal of Operational Research*, 2008, no. 191, pp. 753-770.

15. A Nonlinear Optimization Program in MATLAB. By editor Yinyu Ye. University of Iowa, Iowa City, 1989. 19 p.