УДК 519.893

doi.org/10.15407/fmmit2023.36.126

Розв'язування мультимодальних оптимізаційних задач великої розмірності

Анатолій Косолап[1]

[1] д. ф.-м. н., професор, завідувач кафедри Українського державного хіміко-технологічного університету, просп. Гагаріна, 8, 49005, Дніпро, e-mail: anivkos@ua.fm

У роботі розглядаються мультимодальні оптимізаційні задачі великої розмірності. Такі задачі мають безліч локальних екстремумів. Вони є досить складними для чисельного розв'язування сучасними методами. Але більшість практичних оптимізаційних задач є мультимодальними. Для перевірки ефективності нових методів глобальної оптимізації розроблені бібліотеки тестових та прикладних мультимодальних задач. Виникає проблема, як визначати ефективність методу при розв'язуванні задач з даних бібліотек. Ми пропонуємо простий критерій для визначення ефективності методу оптимізації. Пропонується розглядати тільки задачі з невідомими розв'язками. Тоді кращим буде такий метод, який дає кращі розв'язки для більшої кількості задач з даних бібліотек. В роботі показано, що на сьогодні кращим методом для розв'язування мультимодальних задач великої розмірності є метод точної квадратичної регуляризації.

Ключові слова: мультимодальні оптимізаційні задачі; тестові задачі; метод точної квадратичної регуляризації.

Вступ. Задачі оптимізації виникають майже в кожній сфері людської діяльності. Це такі сфери, як економіка, фінанси, управління, технологічні процеси, проектування, штучний інтелект, інформатика та багато інших. Для розв'язування таких задач будуються оптимізаційні моделі. Як правило, оптимізаційні моделі прикладних задач будуть мультимодальними. Часто такі моделі будуть дискретними (з дискретними змінними), але вони легко перетворюються до неперервних мультимодальних задач. На сьогодні, для розв'язування оптимізаційних задач розроблено безліч методів та комп'ютерних програм. Але такі програми дозволяють ефективно розв'язувати тільки унімодальні оптимізаційні задачі великої розмірності. Для розв'язування мультимодальних оптимізаційних задач теж розроблені комп'ютерні програми, зокрема такі відомі пакети: ANTIGONE, BARON, COUENNE, CPLEX, GUROBI, LINDO, SCIP. Для використання цих пакетів, для розв'язування мультимодальних задач (більшість з них комерційні), потрібно ввести початкові дані. Для цього дані необхідно представити у спеціальній формі або у відомих форматах GAMS та AMPL. На відміні від програмного забезпечення розв'язування унімодальних задач, ці програми потребують для розв'язування мультимодальної задачі досить багато часу, стикаються з проблемою пошуку допустимої точки та не гарантують отримання оптимальних розв’язків. Не дивлячись на значні зусилля [1] проблема ефективного розв’язування мультимодальних задач залишається відкритою.

1. Бібліотеки тестових та прикладних мультимодальних задач

Відомими бібліотеками тестових та прикладних задач, які використовуються для перевірки ефективності нових методів глобальної оптимізації є GlobalLib, MinlpLib та PrincetonLib. Ці бібліотеки містять як задачі малої розмірності з кількістю змінних менше 10, так і великої розмірності з десятками тисяч змінних. Тільки частина задач з цих бібліотек має невідомі розв’язки. Наприклад, з 1224 задач бібліотеки PrincetonLib відомо, що тільки 228 задач мають невідомі розв’язки. Ці бібліотеки були побудовані більше 20 років тому. Їх легко можна знайти в мережі Інтернет за адресами http://minlplib.org/dates.html та http://www.gamsworld.org/performance/princetonlib/ princetonlib.htm. Бібліотека GlobalLib містить тільки задачі умовної оптимізації з неперервними змінними, всього 397 задач. Для більшості її задач оптимальні розв’язки знайдені (знайдені нижні та верхні оцінки розв’язків, які співпадають). Більшість моделей бібліотеки MinlpLib мають змішані змінні (неперервні, булеві та цілі), всього 269 задач. Ця бібліотека також містить тільки задачі умовної оптимізації і для більшості її задач знайдені оптимальні розв’язки. За адресом http://minlplib.org/dates.html приводяться кращі знайдені розв’язки для більшості задач разом з точками мінімуму. Бібліотека PrincetonLib містить задачі безумовної та умовної оптимізації з неперервними змінними. В Інтернеті приводяться кращі знайдені розв’язки бібліотеки PrincetonLib, але точки мінімумів не приводяться.

Не дивлячись на те, що задачі умовної оптимізації є досить важливими, порівняння розв’язків для таких задач є складною задачею. Це пов’язано з точністю виконання обмежень задачі. Автор рахує, що ця точність не повинна бути менша 1E-10. Крім перерахованих бібліотек, існує також відомий список тестових функцій [2]. Ці тестові функції мають безліч локальних екстремумів (n! і більше), але майже всі вони мають відомі розв’язки. Тільки для функцій Egg holder та Rana точки глобальних мінімумів невідомі. Функції з даного списку мають, як правило, розмірність два, або довільну розмірність. Автор узагальнив ці функції розмірності два на довільну розмірність. Зокрема, це такі функції, як Bird, Trefethen, Adjman, Scahffer 4, M. Zakarov, M. Keane, NewFunction03, siam, liang’s. Для розмірностей цих функцій 100 і вище, значення глобального мінімуму невідоме. Для порівняння обчислювальних експериментів автор для розв’язування цих задач використовував метод еволюційного пошуку з бібліотеки python та інші програми.

Таким чином, для перевірки ефективності методів глобальної оптимізації ми можемо обмежитись тільки задачами мультимодальної оптимізації з невідомими розв’язками (точками глобальних мінімумів).

2. Перевірка ефективності методів глобальної оптимізації

Будемо порівнювати метод точної квадратичної регуляризації (EQR) [3] з усіма існуючими методами. Як відомо, точна квадратична регуляризація дозволяє перетворити загальну задачу нелінійної оптимізації

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

до послідовності задач максимізації евклідової норми вектору на опуклій множині

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

де $z = (x_1,\dots, x_n, x_{n+1})$, параметр r обираємо таким, щоб множина задачі (2) стала опуклою, а параметр s повинен задовольняти умові $s \ge \|x^*\|^2 - f_0(x^*)$, x^* – розв'язок задачі (1). Що дає таке перетворення задачі (1) до задачі (2)? По-перше, локальні максимуми задачі (2) упорядковані в порядку зростання скалярної величини d, так що при мінімальному значенню d, розв'язок задачі (2) співпадає з розв'язком задачі (1). Крім того, при фіксованому значенні d і максимізації $\|z\|^2$, значення виразу $r\|z\|^2 - d$ по абсолютній величині буде наближатися до нуля [3]. Таким чином, в задачі (2) необхідно знайти мінімальне значення скалярної змінної d, для якої розв'язок задачі (2) буде задовольняти умові $r\|z\|^2 = d$. Тоді цей розв'язок буде також розв'язком задачі (1). Ми використовуємо для розв'язування задачі (2) тільки програму локальної оптимізації, а для знаходження оптимального значення d – метод дихотомії. Це дозволяє розв'язувати задачі мільтимодальної оптимізації великої розмірності також легко, як і задачі опуклої оптимізації.

Алгоритм розв'язування задачі (2) наступній.

Крок 1. Обираємо значення параметрів r та s, які задовольняють приведеним вище умовам, і початкову точку z (наприклад, $z = (1,\dots,1)$).

Крок 2. Розв'язуємо задачу опуклої оптимізації

$$\min\{ d \mid f_0(x) + s + (r-1)\| z\|^2 \le d,\ f_i(x) + r\| z\|^2 \le d, i = 1,\dots,m, x \in E^{n+1}\}$$

і знаходимо мінімальне та допустиме значення d. Як правило, для цього значення d маємо $r\|z\|^2 = d$. Інакше задача (2), а разом з тим і задача (1) буде розв'язана.

Крок 3. Будемо збільшувати значення d на відповідну величину і для кожного фіксованого значення d розв'язувати задачу (2) до тих пір, доти не виконається умова $r\|z\|^2 = d$ з заданою точністю (максимізація $\|z\|^2$ при фіксованому значенні d буде зменшувати абсолютну величину різниці $r\|z\|^2 - d$ на кожній ітерації).

Даним алгоритмом були розв'язані майже всі задачі з бібліотек GlobalLib, MinlpLib та PrincetonLib за виключенням задач малої розмірності, задач досить великої розмірності ($n > 3000$), а також унімодальних задач. Загалом було розв'язано біля 300 задач. В якості програми локальної оптимізації використовувалась надбудова OpenSolver для Excel. Деякі з задач великої розмірності з даних бібліотек мають до 200 сторінок формул цільової функції. Введення такого обсягу даних є проблемою, тому автором була написана програма VBA для Excel, яка дозволяє в інтерактивному режимі ввести формули в Excel за декілька хвилин.

Таблиця 1

Розв'язки тестових задач безумовної оптимізації з PrincetonLib

№ п/п	Задача	*n*	Метод EQR кращий min	Кращий відомий min
1	bdqrtic	1000	3983.818	3983.818
2	biggsb1	1000	0.015	0.015
3	bratu1d	1003	**–8.53368E-05**	–8.519E-05
4	broudn7d	1000	**28.1325**	365.96887349
5	chainwoo	999	**0**	1
6	chenhark	1000	–2	–2
7	dual3	111	0.13575583	0.13575583
8	edensch	2000	12003.28459	12003.28459
9	eg2	1000	**-999.5**	-998.94739
10	eigenbls	110	0	0
11	errinros	50	39.90415	39.90415
12	explin	120	–723756.2655	–723756.26549
13	expquad	120	–3624599.888	–3624599.888
14	fletcbv2	100	–0.514006786	–0.51400679
15	flosp2th	691	**0.01**	0.01922788
16	genrose	500	1	1
17	hadamals	100	25.3164	25.3164
18	indef	1000	–495.8594	–495.8594
19	noncvxu2	1000	**0.0023168**	0.00231789
20	noncvxun	1000	0.0023168	0.0023168
21	nonmsqrt	9	**0.75180028**	0.75180042
22	osborneb	11	0.04013774	0.04013774
23	penalty1	1000	0.009686	0.009686
24	pentdi	1000	-0.75	–0.75
25	probpenl	500	2E-07	2E-07
26	qrtquad	120	–3648088.364	–3648088.364
27	scon1dls	1002	**0**	2.89278401
28	sineali	20	**1901**	1900.96

Автором отримані наступні результати методом EQR. Для задач з бібліотеки PrincetonLib були покращені розв'язки більше ніж для 30% задач, для інших задач цієї бібліотеки розв'язки співпадають з кращими розв'язками, отриманими всіма іншими методами за більш ніж 20 років обчислювальних експериментів. Для бібліотеки GlobalLib кращі розв'язки були отримані методом

EQR для 15%, для інших задач розв'язки співпадають, а для бібліотеки MinlpLib кращі розв'язки отримані для 60% задач, для інших задач розв'язки теж співпадають.

Наведемо приклад розв'язування задач безумовної оптимізації з бібліотеки PrincetonLib в табл. 1, де *n* означає кількість змінних.

Висновки. Приведені результати свідчать, що метод EQR дозволяє ефективно розв'язувати мультимодальні оптимізаційні задачі великої розмірності. Причому цей метод дозволяє знайти абсолютно кращі результати, для перелічених тестових та прикладних задач, ніж всі існуючі методи глобальної оптимізації і це при тому, що розглянуті тестові та прикладні задачі розв'язуються уже понад 20 років різними методами.

Література

[1] *Locatelli, M., Schoen, F.* (Global) Optimization: Historical notes and recent Developments // EURO Journal on Computational Optimization, vol. 9, 2021. – pp. 1–15.
[2] *Jamil, M, Yang, XS*. A literature survey of benchmark functions for global optimization problems // Int. J. Math. Model Numer. Optim. Vol. 4, No. 2, 2013, pp. 150–194.
[3] *Kosolap A.* Practical Global Optimization. – Dnipro.: Publisher Bila K.O., 2020. – 192 p.

Solving large-scale multimodal optimization problems

Anatolii Kosolap

This paper considers large-scale multimodal optimization problems. Such problems have many local extrema. These problems are quite difficult to solve with modern methods. But most practical optimization problems are multimodal. The libraries of test and applied multimodal problems have been developed to test the effectiveness of new methods of global optimization. There is a problem with how to determine the effectiveness of the method when solving the problems from these libraries. We propose a simple criterion for determining the effectiveness of the optimization method. It is proposed to consider only problems with unknown solutions. Then it is better to consider such a method that gives better solutions for a larger number of problems from these libraries. The paper shows that today the best method for solving large-scale multimodal problems is the method of exact quadratic regularization.

Отримано 14.03.23