DOI.

УДК 519.85

Преобразование координат в задачах глобальной оптимизации

А. И. Косолап, А. А. Романчук

Украинский государственный химико-технологический университет, проспект Гагарина, 8, г. Днепр, 49005, Україна

e-mail: anivkos@ua.fm

Актуальность. Рассматривается задача глобальной оптимизации в евклидовом конечномерном пространстве. Такие задачи возникают при математическом моделировании сложных систем в технике, управлении, экономике, технологических процессах, проектировании, искусственном интеллекте, информатике и других областях знаний. Они относятся к классу NP-сложных. Для таких задач еще не разработаны эффективные численные методы. ***Цель.*** Использовать преобразование пространства и точную квадратичную регуляризацию для численного решения задач глобальной оптимизации. ***Методы исследования***. Мы используем метод точной квадратичной регуляризации для решения многоэкстремальных задач. Это метод сводит решение задачи к максимуму нормы вектора на выпуклом множестве. Для численной эффективности метода точной квадратичной регуляризации в задачах глобальной оптимизации предлагается преобразование координат, которое заключается в смещении допустимой области в направлении биссектрисы положительного ортанта. ***Результаты.*** Смещение координат часто приводит исходную многоэкстремальную задачу к одноэкстремальной. Для решения полученной задачи используется эффективный прямо-двойственный метод внутренней точки. В общем случае, необходимо использовать также метод дихотомии. ***Выводы.*** Разработана новая методика для решения многоэкстремальных задач. Сравнительные численные эксперименты подтверждают эффективность данного преобразования при решении множества тестовых задач глобальной оптимизации. Практически для всех известных тестовых задач глобальной оптимизации данная методика показала лучшие численные результаты в сравнении с численными результатами, полученными существующими методами. Эта методика может быть использована для решения сложных прикладных задач.

Ключевые слова: *глобальная оптимизация, преобразование координат, метод точной квадратичной регуляризации, метод дихотомии, прямо-двойственный метод внутренней точки.*

Актуальність. Розглядається задача глобальної оптимізації в евклідовому скінченномірному просторі. Такі задачі виникають при математичному моделюванні складних систем в техніці, управлінні, економіці, технологічних процесах, проектуванні, штучному інтелекті, інформатиці та інших областях знань. Вони відносяться до класу NP-складних. Для таких задач ще не розроблені ефективні чисельні методи. ***Мета.*** Використовувати перетворення простору і точну квадратичную регуляризацію для чисельного розв'язування задач глобальної оптимізації. ***Методи дослідження.*** Ми використовуємо метод точної квадратичної регуляризації для розвязування багатоекстремальних задач. Цей метод зводить ррозвязування задачі до максимуму норми вектора на опуклому множині. Для чисельної ефективності методу точної квадратичної регуляризації в задачах глобальної оптимізації пропонується перетворення координат, яке полягає в зміщенні допустимої області в напрямку бісектриси позитивного ортанта. ***Результати.*** Зсув координат часто призводить вихідну багатоекстремальну задачу до одноекстремальної. Для розв'язування отриманої задачі використовується ефективний прямо-двоїстий метод внутрішньої точки. У загальному випадку, необхідно використовувати також метод дихотомії. ***Висновки.*** Розроблено нову методику для розв'язування багатоекстремальних задач. Порівняльні чисельні експерименти підтверджують ефективність даного перетворення при розвязуванні безлічі тестових задач глобальної оптимізації. Практично для всіх відомих тестових задач глобальної оптимізації дана методика показала кращі чисельні результати в порівнянні з чисельними результатами, отриманими існуючими методами. Ця методика може бути використана для розв'язування складних прикладних задач.

Ключові слова: *глобальна оптимізація, перетворення координат, метод точної квадратичної регуляризації, метод дихотомії, прямо-двоїстий метод внутрішньої точки.*

Actuality. We consider a problem of global optimization in Euclidian finite-dimensional space. Such problems arise at mathematical modelling of difficult systems in the technician, management, economy, technological processes, designing, an artificial intellect, computer science and other fields of knowledge. These problems belong to the class NP-difficult. Effective numerical methods are not developed for such problems yet. ***Purpose.*** We use transformation of space and exact quadratic regularization for the numerical solution of problems of global optimization. ***Research methods***. We use a method exact quadratic regularization for the solution of multiextreme problems. It is a method reduces the problem solution to a maximum of norm of a vector on convex set. We offer transformation of co-ordinates which consists in displacement of admissible area in a direction of a bisector positive orthant. It raises numerical efficiency of a method exact quadratic regularization in problems of global optimization. ***Results.*** Displacement of co-ordinates often leads an initial multiextreme problem of the one-extreme. We use an effective is primer-dual interior point method for the solution of the received problem. Generally, it is necessary to use also a dichotomy method. ***Conclusions.*** The new technique is developed for the solution of multiextreme problems. Comparative numerical experiments confirm efficiency of the given transformation at the solution of set of test problems of global optimization. The given technique has shown the best numerical results in comparison with the numerical results received by the best existing methods. We have received the best results practically for all known test problems of global optimization. This technique can be used for the solution of difficult applied problems.

.
Key words: *global optimization, coordinate transformation, exact quadratic regularization method, dichotomy method, primer-dual interior point.method.*

1. Общая постановка задачи и её актуальность

Математическое моделирование сложных систем часто приводит к необходимости решения задач оптимизации. Такие задачи возникают в экономике, финансах, управлении, технологических процессах, информатике и других областях. Математические модели этих сложных систем являются многоэкстремальными задачами. Численное их решение представляет сложную проблему. В тоже время, выбор не оптимальных решений приводит к чрезмерному расходованию ограниченных ресурсов при построении сложных систем. Поэтому запросы практики стимулируют разработку новых методов решения сложных оптимизационных задач. Для задач глобальной оптимизации в настоящее время разработаны методы ветвей и границ [1]. Эти методы могут использоваться для решения задач малой размерности, так как с увеличением размерности задачи количество итераций в этих методах растет экспоненциально. Новым направлением в глобальной оптимизации является полуопределенное программирование [2]. Оно используется для решения общих квадратичных и полиномиальных задач. Однако в общем случае, полуопределенная оптимизация позволяет находить только оценки решений в многоэкстремальных задачах. К таким же результатам приводят и двойственные методы. Разработаны многочисленные методы, использующие случайный поиск. Это, прежде всего, генетические и эволюционные методы [3]. Эти методы иногда позволяют находить глобальный экстремум при решении тестовых задач, однако, очень часто решения, полученные этими методами далеки от оптимальных. В настоящее время разработан метод точной квадратичной регуляризации, который при решении множества тестовых задач показал лучшие результаты по сравнению с существующими методами [4]. Исследования показывают, что эффективность метода точной квадратичной регуляризации значительно возрастает при преобразовании пространства, при котором допустимая область задачи смещается в направлении биссектрисы положительного ортанта. Использование этого преобразование является предметом настоящей работы.

2. Постановка задачи и метод ее решения

Рассмотрим задачу оптимизации

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

где предполагается, что все функции $f_i(x)$ – выпуклые и непрерывные, x – n-мерный вектор, а E^n – евклидово пространство. Для эффективного решения задачи (1) предполагается, что все функции $f_i(x)$ дважды дифференцируемые. Это достаточно большой класс задач, так как он включает все квадратичные и полиномиальные задачи. При данных предположениях задача имеет решение, если ее допустимое множество компактно.

Если все функции $f_i(x)$ - выпуклые, то задача (1) будет иметь единственное решение и для ее решения эффективным является прямо-двойственный метод внутренней точки [5]. Этот метод позволяет решать задачи (1) с числом переменных до 10 миллионов. К сожалению, выпуклость функций в задачах оптимизации является исключением, а большинство сложных систем приводят к невыпуклым функциям. В таком случае, задача (1) может иметь множество локальных экстремумов. Некоторые практические задачи в информатике и других областях имеют 2^n или $n!$ локальных экстремумов. Для таких задач разбиение допустимой области на части (сеточные методы) является неэффективным.

В методе точной квадратичной регуляризации задача (1) преобразуется к виду

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

где $\|x\|^2 = x_1^2 + \dots + x_n^2 + x_{n+1}^2$, а параметр s выбирается таким, чтобы выполнялось условие

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

где точка x^* – решение задачи (1). Так как точка x^* неизвестна, то для оценки параметра s используем верхние границы изменения переменных, которые легко найти. При заданном значении s и фиксированном значении переменной d первое ограничение задачи (2) будет активным. Тогда при фиксированном значении d решение задачи (2) будет приводить к убыванию значения целевой функции $f_0(x)$. Действительно, из равенств

$$f_0(x^0)+s+(r-1)\|x^0\|^2=d,$$

$$f_0(x^1)+s+(r-1)\|x^1\|^2=d$$

и условия $\|x^1\|^2>\|x^0\|^2$ следует неравенство $f_0(x^1)<f_0(x^0)$.

При увеличении значения $d_1 > d$ и выполнении условий $r\|x^0\|^2 = d$ и $r\|x^1\|^2 = d_1$ получаем равенства

$$f_0(x^0)+s+(r-1)\|x^0\|^2=d,$$

$$f_0(x^1)+s+(r-1)\|x^1\|^2=d_1,$$

откуда следует неравенство $f_0(x^0)<f_0(x^1)$. Таким образом, решение задачи (2) достигается при минимальном значении d.

Параметр $r > 0$ в задаче (2) выбираем таким, чтобы ее ограничения были выпуклыми. Для общих квадратичных функций достаточно, чтобы их матрицы были с преобладающими диагоналями. Это условие легко выполнить. Таким образом, задачу (2) можно записать в виде

$$\max\{\|x\|^2 \mid x\in S(x,d)\}, \tag{3}$$

где $S(x, d)$ – выпуклое множество. Необходимо определить минимальное значение d для которого решение задачи (3) удовлетворяет условию $r\|x\|^2=d$. Минимальное значение d находим, решая задачу выпуклой оптимизации

$$\min\{d \mid x\in S(x,d), r\|x\|^2\le d\}. \tag{4}$$

Если второе ограничение будет активным, то решение задачи (4) совпадает с решением задачи (1). Это означает, что многоэкстремальная задача (1) точной квадратичной регуляризацией преобразуется к одноэкстремальной.

Для поиска минимального значения d в задаче (3), для которого выполняется условие $r\|x\|^2=d$, используем метод дихотомии. Этот метод заключается в последовательном увеличении d и решении для каждого значения d задачи (3) до достижения требуемого равенства. Если минимальное значение d найдено и для этого значения решение задачи (3) удовлетворяет условию $r\|x\|^2=d$ с заданной точностью, то задача (1) решена.

3. Преобразование пространства в задачах глобальной оптимизации. Решение задачи (3) будет достигаться на границе допустимой области. Поэтому важное значение, для нахождения решения задачи (3), имеет кривизна выпуклой поверхности $\partial S(x, d)$.

Кривизной поверхности $\partial S(x, d)$ в точке x^0 будем называть минимальную кривизну дуг $(x^0, x^i) \subseteq \partial S(x, d)$, где x^i – точки ε-окрестности точки x^0, при условии, что $\varepsilon\to 0$.

Лемма 1. *Пусть* x^1 *и* x^2 *два локальных максимума в задаче* (3), *где выпуклое множество* $S(d) \subseteq E^n_+$, *тогда функция* $\|x\|^2$ *достигает минимума на любой выпуклой дуге* $G(x^1, x^2)$ *выпуклой поверхности* $\partial S(x, d)$, *соединяющей точки* x^1 *и* x^2.

Доказательство. Из определения локального максимума следует, что функция $\|x\|^2$ убывает в любом направлении от точек x^1 и x^2 в их окрестности. Если, начиная с точки x^0 дуги $G(x^1, x^2)$ в направлении от x^1 к x^2 функция $\|x\|^2$ начнет возрастать, то x^0 – точка минимума функции $\|x\|^2$. Если же вдоль дуги $G(x^1, x^2)$ в направлении от x^1 к x^2 функция $\|x\|^2$ монотонно убывает, то в окрестности точки x^2 вдоль дуги $G(x^1, x^2)$ (от точки x^2 к x^1) функция $\|x\|^2$ будет возрастать. Но это противоречит тому, что x^2 – точка локального максимума. Противоречие доказывает лемму.

Минимум на дуге, соединяющих два локальных максимума в задаче (3) будем называть *внутренним минимумом*, если множители соответствующей функции Лагранжа отрицательны. Очевидно, что если поверхность $\partial S(x, d)$ не содержит внутренних минимумов, то задача (3) будет одноэкстремальной.

Лемма 2. *Пусть в каждой точке* x^i *выпуклой поверхности* $S(x, d)$ *ее минимальная кривизна больше кривизны шара* $\{x \mid \|x\|^2 \le \|x^i\|^2\}$, *тогда задача* (2) *является одноэкстремальной*.

Доказательство. Допустим противное, что задача (2) имеет два локальных максимума в точках x^1 и x^2. Соединим эти дуги кривой минимальной длины на поверхности $S(x, d)$. Тогда из леммы 1 следует, что на этой кривой должна быть точка минимума функции $||x||^2$. Но в точке минимума кривизна кривой будет меньше кривизны шара. Это противоречие доказывает лемму.

Задача (2) будет одноэкстремальной и в том случае, когда условия леммы 2 будут выполняться только в экстремальных точках.

Будем обозначать через $S(x - h, d)$ сдвиг выпуклого множества S вдоль биссектрисы положительного ортанта на величину $h > 0$, а через

$$S_0 = \{x \mid -\| x - h \|^2 + s + 2\| x \|^2 = d\}.$$

Теорема 1. *Существует такое* $h > 0$, *что задача*

$$\max\{||x||^2 | x \in S(x - h, d), x \geq h\} \tag{5}$$

будет одноэкстремальной.

Доказательство. При увеличении значения h минимальная кривизна поверхности S не меняется, а поверхности шара будет убывать при увеличении его радиуса. Следовательно, существует такое $h > 0$, для которого кривизна шара будет меньше кривизны S в ее экстремальных точках. Тогда в соответствии с леммой 2 задача (5) будет одноэкстремальной.

Из данной теоремы следует, что при смещении допустимого множества задачи (3) в направлении биссектрисы положительного ортанта число его экстремальных точек убывает.

Теорема 2. *Пусть задача* (3) *одноэкстремальная, тогда множество* $S(x - h, d)$ *связное на выпуклой поверхности* S_0.

Доказательство. Если задача (3) одноэкстремальная, то и задача

$$\max\{||x + h||^2 | x \in S\} \tag{6}$$

одноэкстремальная. Это следует из того, что после замены $x = x + h$ задача (6) принимает вид

$$\max\{||x||^2 | x \in S(x - h, d)\},$$

которая является одноэкстремальной для $h > 0$. Одноэкстремальность в задаче (6) означает, что линии уровня ее целевой функции делят допустимую область на две части. Так как поверхность S_0 совпадает с линиями уровня функции $||x + h||^2$ при любом фиксированном значении x_{n+1}, то эта поверхность также будет делить допустимую область на две части (допустимая область не зависит от переменной x_{n+1}). Таким образом, множество $S(x - h, d)$ связно на поверхности выпуклого множества S_0.

Задача (3) преобразуется точной квадратичной регуляризацией к эквивалентной задаче

$$\max\{||x||^2 | x \in S_0 \cap S(x - h, d)\} \tag{7}$$

при смещении допустимой области.

Теорема 3. *Пусть* x^* *– решение задачи* (2), *задача* (5) *одноэкстремальна и* $x^* + h$ *ее решение, тогда и задача* (7) *также одноэкстремальна.*

Доказательство. Достаточно показать, что точка $x^* + h$ удовлетворяет ограничениям задачи (7). Учитывая, что

$$s \geq 2||x^*||^2 + 2||h||^2$$

и

$$d = 3(||x^* + h||^2 + x^2_{n+1})$$

получаем для второго ограничения задачи (7)

$$||x^* + h||^2 + x^2_{n+1} - 2||h||^2 + 2||x^*||^2 + 2||h||^2 + x^2_{n+1} \leq 3(||x^* + h||^2 + x^2_{n+1}).$$

Откуда

$$-||x^* + h||^2 + 2||x^*||^2 \leq 0.$$

Таким образом, точка $x^* + h$ удовлетворяет ограничениям задачи (7). Теорема доказана.

Если условия теоремы 3 не выполняются, то задача (7) будет многоэкстремальной. Линии уровня целевой функции задачи (7) на S_0 будут совпадать с линиями уровня функции $e^T x$ на S_0. Поэтому задача (7) эквивалентна задаче

$$\min\{e^T x | x \in S_0 \cap S(x - h, d)\}, \tag{8}$$

где $e = (1,\ldots, 1)$. Если решение задачи (8) достигается в точке x^1 и $r||x^1||^2 > d$, то методом дихотомии значение d будет уменьшено.

Полученные результаты позволяют построить следующий алгоритм для решения задачи (7).

Шаг 1. Решаем задачу (2) методом дихотомии и прямо-двойственным методом внутренней точки, начиная с начальной точки x^0. Пусть x^1 – ее решение, для которого выполняется условие $r\|x^1\|^2 = d$.

Шаг 2. Выберем h – величину смещения пространства и решим задачу (8). Если x^2 – ее решение, для которого выполняется условие $r\|x^2\|^2 > d$, то полагаем $x^0 = x^2$ и переходим к шагу 1.

Шаг 3. Если увеличение h не приводит к уменьшению значения целевой функции задачи (1), то текущее решение является оптимальным. В противном случае, увеличиваем значение h и переходим к шагу 1.

4. Численные эксперименты

Для проверки численной эффективности метода точной квадратичной регуляризации со смещение пространства были решены известные тестовые задачи для глобальной оптимизации. Многие из таких задач можно найти на веб-сайте GLOBAL Library: http://www.gamsworld.org/global/globallib.htm. Так, была решена сложная задача минимизации функции Egg Holder

$$\min\{\sum_{i=1}^{n-1}[-x_i\sin(\sqrt{|x_i - x_{i+1} - 47|} - (x_{i+1}+47)\sin(\sqrt{|x_{i+1} + x_i/2 + 47|})], -512 \le x \le 512\}.$$

В работе [6] приведено лучшее на сегодняшний день решение этой задачи $f_0(x^*) = -74103{,}26$ для $n = 100$. Метод точной квадратичной регуляризации со сдвигом пространства показал лучший результат $f_0(x^*) = -89948{,}521$. В этой же работе приведено лучшее решение для другой сложной функции Rana

$$\min\{\sum_{i=1}^{n-1}[(x_{i+1}+1)\cos(\sqrt{|x_{i+1} - x_i + 1|})\sin(\sqrt{|x_{i+1} + x_i + 1|}) +$$
$$+ x_i\cos(\sqrt{|x_{i+1} + x_i + 1|})\sin(\sqrt{|x_{i+1} - x_i + 1|})]| -500 \le x \le 500\}$$

при $n = 100$. Найденный глобальный минимум этой задачи на сегодняшний день равен $f_0(x^*) = -41047.18$, а методом точной квадратичной регуляризации со сдвигом пространства был снова получен лучший результат $f_0(x^*) = -50855.784$. Можно привести также задачу Ex8_4_7 с ограничениями из веб-сайта (см. выше). В этой задаче 62 переменные и 40 ограничений. Лучший известный результат $f_0(x^*) = 29.0473$. Метод точной квадратичной регуляризации со сдвигом пространства показал лучший результат $f_0(x^*) = 26.99430909$. Еще несколько результатов расчетов тестовых задач из указанного сайта приведены в табл. 1.

Таблица 1. Результаты решений тестовых задач

№ п/п	Задача	n	m	Метод EQR	Лучшее известное решение
1	Ex2_1_8	24	10	**15639**	15990
2	Ex7_3_5	13	15	**7.684E-06**	1.2069
3	Ex8_4_3	52	25	**-12,018963**	-3,25611
4	Ex8_5_6	6	7	**-2.264901975**	-0.998832628
5	Ex8_5_6	20	7	**-1020.242976**	-986.513
6	Harker	12	9	**-3.27297594**	900
7	Haverly	24	10	**15639**	15990

4. Выводы и направления дальнейших исследований

Предложен новый метод точной квадратичной регуляризации со сдвигом пространства. Численные эксперименты показали его преимущество над существующими методами глобальной оптимизации при решении множества тестовых задач. В настоящее время этот метод используется для решения прикладных задач теории расписаний, оптимизации надежности сложных систем, раскроя материалов, упаковки шаров и прямоугольников и других задач.

ЛИТЕРАТУРА

1. Horst R., Tuy H. Global Optimization: Deterministic Approaches. 3rd ed./ R. Horst, H. Tuy. – Berlin: Springer–Verlag, 1996. – 727 p.
2. Ye Y. Semidefinite programming /Y. Ye. – Stanford University, 2003. – 161 p.
3. Kenneth V. P., Storn R. M., Lampinen J. A. Differential Evolution. A Practical Approach to Global Optimization / V. P. Kenneth, R. M. Storn, J. A. Lampinen. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2005. – 542 p.
4. Косолап А. И. Глобальная оптимизация. Численные эксперименты / А. И. Косолап. – Днепр, ПГАСА, 2017. – 112 с.
5. Nocedal J., Wright S. J. Numerical optimization / J. Nocedal, S. J.Wright. – Springer, 2006. – 685 p.
6. Wu S. and Chow T. W. S. Self-Organizing and Self-Evolving Neurons: A New Neural Network for Optimization / S. Wu and T. W. S. Chow // IEEE transactions on neural networks, 2007, Vol.18, No.2. – P.385-396.

REFERENCIES

1. . R. Horst and H. Tuy, *Global Optimization: Deterministic Approaches*. 3rd ed. Berlin: Springer–Verlag, 1996.
2. Y. Ye, *Semidefinite programming*. Stanford University, 2003.
3. V. P. Kenneth, R. M. Storn, J. A. Lampinen, *Differential Evolution. A Practical Approach to Global Optimization*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2005.
4. А. И. Косолап, *Глобальная оптимизация. Численные эксперименты*. Днепр: ПГАСА, 2017.
5. J. Nocedal, S. J. Wright, *Numerical optimization*. Springer, 2006.
6. S. Wu and T. W. S. Chow, Self-Organizing and Self-Evolving Neurons: A New Neural Network for Optimization // *IEEE transactions on neural networks*, vol.18, no.2, pp.385-396, 2007.

Косолап Анатолий Иванович *– доктор физико-математических наук, профессор; Украинский государственный химико-технологический університет, г. Днепр, проспект Гагарина, 8, 49005; e-mail: anivkos@ua.fm; ORCID:* 0000-0001-73386707.

Романчук Александр Александрович - *аспирант; Украинский государственный химико-технологический університет, г. Днепр, проспект Гагарина, 8, 49005; e-mail:aaromanchuk1991@gmail.com; ORCID:* 0000-0003-2623-350X .

Надійшла – 02.04.2018.