ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНСТИ ПАКЕТА IOSO ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ФУНКЦИЙ БОЛЬШИХ РАЗМЕРНОСТЕЙ

А.Н. Коварцев, А.А. Мишин

Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет) (СГАУ), Самара, Россия

В настоящее время в сети Интернет распространяется большое количество коммерческих пакетов программ декларирующих возможность организовать поиск глобального оптимума для функций с большим количеством переменных. Рекламируемые возможности таких пакетов входят в противоречие с известной проблемой экспоненциального роста сложности задач глобальной оптимизации. В работе с помощью пакета генерации тестовых заданий исследуется эффективность известного алгоритма многоэкстремальной оптимизации IOSO.

Ключевые слова: многоэкстремальная оптимизация, гладкие функции многих переменных, программный комплекс IOSO, вычислительные эксперименты, генератор тестовых функций.

Введение

К настоящему времени разработано значительное количество алгоритмов и методов решения задачи многоэкстремальной оптимизации. Отчасти развитие численных методов глобальной оптимизации стимулируется стремительным совершенствованием вычислительных средств и во многом связано с относительной доступностью суперкомпьютерных систем. Появилось большое количество разнообразных подходов к распараллеливанию алгоритмов глобальной оптимизации (ГО), которые существенно расширили практические возможности соответствующих методов с точки зрения размерностей решаемых оптимизационных задач [1, 2, 3, 4].

В общем случае, методы оптимизации относятся к классу трудноразрешаемых задач, имеющих экспоненциальную сложность (NP-полнота задачи). В этом смысле, невозможно надеяться на создание универсального алгоритма оптимизации в равной степени эффективно решающего любую задачу. В тоже время, в настоящее время, известно большое количество коммерческих пакетов программ декларирующих возможность организовать поиск глобального оптимума для функций с большим количеством переменных. Так, авторы программного комплекса IOSO NS GT [7] утверждают, что они способен находить глобальный экстремум для функций с сотнями независимых переменных. Для решателя LGO [8] объявляется возможность работать со сложными крупномасштабными моделями до 1000 переменных и 1000 ограничений. Исследованию реальных возможностей программного комплекса IOSO посвящена данная работа.

1. Сложность задачи многоэкстремальной оптимизации

Специфика задачи глобальной оптимизации заключается в многоэкстремальности целевой функции и принципиальной неразрешимости задачи глобальной оптимизации в общем случае.

Еще в 70 годы прошлого века для многоэкстремальной задачи условной оптимизации k раз непрерывно дифференцируемой функции n переменных была получена нижняя оценка стохастической сложности [9]:

$$\tilde{N}(\varepsilon) \geq c(n,k)\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^{n/k}, \qquad (1)$$

где ε - заданная погрешность решения оптимизационной задачи по координате, c(n,k) – некоторый коэффициент, зависящий от свойств функции.

Полученная нижняя информационная оценка (1) показывает, что при заданной точности увеличение размерности задачи оптимизации приводит к катастрофическому росту ее сложности. Реальная вычислительная сложность задачи глобальной оптимизации обычно значительно выше. Конечно, на практике используют методы, не слишком задумываясь о том, какие гарантии они способны доставить, и удовлетворяются полученными результатами, которые кажутся приемлемыми, во всяком случае, значительно лучше, чем приближенные решения. Отсюда Интернет предоставляет большое количество сайтов декларирующих «легкое» решение задач глобальной оптимизации для функций многих переменных. Подобная, ничем не обоснованная, подмена теоретически обоснованных методов эмпирическими подходами таит определенную опасность, поскольку, если не рассматривать специфические классы оптимизационных задач, то эмпирические методы, либо не находят глобальный экстремум, либо делают это очень грубо.

В работе [5] для задачи безусловной глобальной оптимизации гладкой липшицевой функции была получена более оптимистическая оценка сложности:

$$N(n) = 2 \cdot \left(\frac{1}{4\varepsilon}\right)^{n} - 1. \qquad (2)$$

Тем не менее, для решения задачи глобальной оптимизации функции 100 и более переменных для гладких липшицевых функций потребуется приблизительно $N(100) \approx 7 \cdot 10^{150}$ обращений к оптимизируемой функции. Из выражения (1 и 2) ясно, что при заданной точности увеличение размерности задачи оптимизации приводит к катастрофическому росту ее сложности. В связи с чем, непонятно - за счет каких скрытых ресурсов авторы рассчитывают преодолеть экспоненциальный рост сложности задачи глобальной оптимизации.

2. Программный комплекс IOSO

Как утверждают авторы, алгоритмы программного комплекса IOSO базируются на новой эволюционной технологии построения поверхности отклика. Поэтому данная стратегия решения задач оптимизации существенно отличается от известных подходов нелинейного программирования, поскольку она обладает более высокой эффективностью и обеспечивает гораздо более широкие возможности.

В процессе оптимизации в IOSO на каждой итерации осуществляется построение поверхностей отклика критериев оптимизации и ограничиваемых параметров. При этом используется информация об исследуемой системе в окрестностях оптимального решения, что повышает адекватность поверхностей отклика в области экстремума. Для построения поверхности отклика применяются различные высокоэффективные алгоритмы: адаптивные алгоритмы регрессионного анализа; эволюционные алгоритмы самоорганизации со структурно параметрической аппроксимацией; нейросетевые алгоритмы [11].

В качестве функции отклика фактически используется полином Колмогорова-Габора [10], что позволяет строить достаточно сложные функции отклика с меньшим количеством коэффициентов. Тонкости механизма установления корреляционных связей между независимыми переменными, за счет которых можно было бы определить вид функции отклика, в пакете IOSO не раскрывается. Однако утверждается, что особенностью предлагаемого подхода является крайне малое количество пробных точек (30-50 точек) позволяющих построить функцию отклика с почти 100 переменными [7].

При этом предполагается, что в отличие от известных технологий построения поверхности отклика, алгоритмы IOSO-технологии относятся к классу эволюционных процедур, которые адаптированы к проведению оптимизационных исследований и позволяют с высокой точностью предсказывать расположение экстремума в пространстве.

В литературе приводится большое количество содержательных примеров использования IOSO для оптимизации узлов газотурбинных двигателей и элементов летательных аппаратов в 3D исполнении. При этом рассматривались задачи оптимизации с большим количеством независимых переменных. Полученные результаты невозможно проверить точными методами глобальной оптимизации из-за размерности задачи ГО. Однако можно протестировать сам программный комплекс IOSO на тестовых функциях с большим количеством переменных, для которых известны расположения всех локальных и глобальных экстремумов.

3. Генератор тестовых заданий GKLS

В 1998 году появился свободно распространяемый пакет генерации тестовых функций GKLS [12] с заданными свойствами, облегчающий разработчикам алгоритмов глобальной оптимизации проводить свои исследования. В силу возрастающей популярности в настоящее время GKLS играет роль своеобразного стандарта, по которому настраивают алгоритмы глобальной оптимизации.

Тестовые функции, генерируемые генератором GKLS, являются переопределением квадратичного параболоида, который в произвольных местах переопределен таким образом, что появляется возможность точно указать расстояние от глобального минимума до вершины параболоида r, радиус области притяжения глобального минимума ρ и количество локальных минимумов.

Пакет GKLS позволяет генерировать функции с фактически неограниченным числом переменных трёх классов: класс непрерывно дифференцируемых функций (функции D-типа); дважды непрерывно дифференцируемые функции (функции D2-типа) и класс не дифференцируемых функций (функции ND-типа).

В генераторе, пользователь задает только несколько параметров, определяющих для выбранного типа функции размерность задачи, количество локальных минимумов, значение глобального минимума, радиус области притяжения глобального минимума, расстояние от глобального минимума локальных минимумов, в то время как остальные параметры выбираются автоматически случайным образом.

Для каждого класса функций генератор формирует 100 основных функций произвольного размерности с произвольным числом локальных минимумов. На рисунке 1 представлен общий вид тестовых функций.

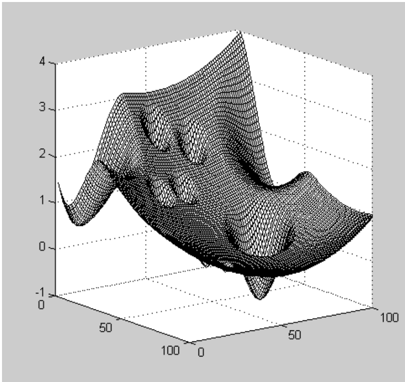

Рис.1. Общий вид тестовой функции пакета GKLS

4. Вычислительные эксперименты

Тестирование программного комплекса IOSO производилось на тестовых функциях, генерируемых генератором GKLS с параметрами: $r = 0{,}9$; $\rho = 0{,}2$ и десяти локальных минимумов. Рассматривались задачи ГО для функций с $n = 2, 3, 8, 50$ оптимизируемых переменных. Параметры алгоритма IOSO выбирались по умолчанию. Менялась только размерность пространства переменных в соответствии с выбранной тестовой задачей.

Таблица. Эффективность алгоритма IOSO

Тестовый класс	Кол. решенных задач		Ср. количество испытаний	
	IOSO	ДАМПД	IOSO	**ДАМПД**
GKLS 2D	15	100	31,7	**775,6**
GKLS 3D	3	100	326,5	**1540,3**
GKLS 8D	0	100		$3{,}7 \cdot 10^6$
GKLS 50D	**0**	**-**		**-**

В таблице представлены результаты решения тестовых задач алгоритмом IOSO. Для сравнения в ней приводятся аналогичные характеристики точного метода поиска ГО двухэтапным алгоритмом модифицированного метода половинных делений (ДАМПД) [4]. Для рассматриваемых классов тестовых задач алгоритм ДАМПД обеспечивает нахождение ГО по аргументам функции с точность до $1{,}0 \cdot 10^{-8}$.

Алгоритм IOSO нашел 15 ГО из 100, для класса GKLS 2D, при этом в среднем было реализовано 31,7 обращений к функции. Для несложной задачи ГО из класса GKLS 3D IOSO нашел 3 ГО со средним количеством обращений к функции 326,5. Для сравнения точный метод глобальной оптимизации решает все тестовые функции, но с большим числом обращений к функции.

Для класса тестовых функций с большим количеством переменных IOSO не нашел ни одного глобального оптимума, затратив значительные ресурсы для организации поиска оптимума.

Похожие результаты тестирования алгоритма IOSO приводятся в работе [13].

Заключение

Проведенные исследования эффективности алгоритма глобальной оптимизации IOSO показали, что для функций с большим количеством переменных IOSO не предоставляет дополнительных преимуществ при решении задач поиска глобального оптимума функции. Как показали эксперименты, алгоритм IOSO фактически «скатывается» к ближайшему локальному экстремуму. В этом смысле гораздо практичнее использовать эффективные точные методы локальной оптимизации, имеющие полиномиальную сложность решения оптимизационных задач [14].

Для функций небольшой размерности алгоритм IOSO проигрывает точным методам глобальной оптимизации [4, 13].

Работа выполнена при государственной поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках реализации мероприятия Программы повышения конкурентоспособности СГАУ среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2013-2020 годы.

Литература

1. Гришагин, В.А. Параллельный метод решения многомерных многоэкстремальных задач с невыпуклыми ограничениями / В.А Гришагин, Я.Д. Сергеев // V международный научно-практический семинар «Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах». - 2005. Н. Новгород, ННГУ. - С. 74-82.
2. Посыпкин, М.А. Параллельный эвристический алгоритм глобальной оптимизации. // Труды ИСА РАН, 2008, Т. 32.- С. 166-179.
3. Strongin, R.G., Global optimization with non-convex constraints. Sequential and parallel algorithms. / R.G. Strongin, Ya.D. Sergeyev // Dordrecht: KluwerAcademic Publishers - 2000.- 704 p.
4. Коварцев, А.Н. Исследование эффективности глобальной параллельной оптимизации функций многих переменных / А.Н. Коварцев, Д.А. Попова-Коварцева., П.В. Аболмасов // Вестник ННГУ.- 2013. - №3 (1). - С. 252-261.
5. Коварцев, А.Н. К вопросу об эффективности параллельных алгоритмов глобальной оптимизации функций многих переменных. / А.Н. Коварцев, Д.А. Попова-Коварцева. // Компьютерная оптика. – 2011. - Т.35, №2. – С.256-261.
6. Посыпкин, М.А. Методы и распределенная программная инфраструктура для численного решения задачи поиска молекулярных кластеров с минимальной энергией / М.А. Посыпкин // Труды ПаВТ'2009. – 2009. С.528-536.
7. Egorov, I.N. Robust design optimization strategy of IOSO technology / I.N. Egorov, G.V. Kretinin, I.A. Leshchenko // Proc. Fifth World Congress on Computational Mechanics. Vienna. Austria. 2002. - P. 1–8.
8. Pinter, J.D. Nonlinear optimization with GAMS/LGO // J. of Global Optimization. - 2007. N 1.- P. 79–101.

9. Немировский, А.С. Сложность задач и эффективность методов оптимизации / А.С. Немировский, Д.Б. Юдин. – М.: Наука, 1979. 384 с.
10. Ивахненко, А.Г. Принятие решений на основе самоорганизации / А.Г. Ивахненко, Ю.Л. Зайченко, И.Д. Димитрова – М.: Сов. Радио, 1976. - 275 с.
11. Egorov, I.N. IOSO Optimization Toolkit - Novel Software to Create Better Design / I.N. Egorov, G.V. Kretinin, I.A. Leshchenko, S.V. Kuptzov // AIAA paper AIAA-2002-5514, 9th AIAA/ ISSMO Symposium and Exibit on Multidisciplinary Analysis and Optimization, Atlanta, GA, 4-6 September. - 2002.
12. Gaviano, M. Generation of classes of test functions with known local minima / M. Gaviano, D.E. Kvasov, D. Lera, Ya.D. Sergeyev // ACM Trans. Math. Soft. - 2003. N 4. - P. 469–480.
13. Елсаков, С.М. Однородные алгоритмы многоэкстремальной оптимизации для целевых функций со значительным временем вычисления значения / С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // Вычислительные методы и программирования. Т. 12. 2011. - С. 48-69.
14. Nesterov, Yu. Cubic regularization of Newton’s method and its global performance / Yu. Nesterov, B. Polyak Mathematical Programming, 108(1). 2006, - P. 177-205.