



СТЕЦЬОК

Петро Іванович – доктор фізико-математичних наук, завідувач відділу методів негладкої оптимізації Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України

МЕТОДИ НЕГЛАДКОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ: ТЕОРІЯ ТА ПРАКТИЧНЕ ЗАСТОСУВАННЯ

Стенограма доповіді на засіданні Президії НАН України 1 листопада 2023 року

У доповіді розглянуто окремі найважливіші результати проведених в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України досліджень у галузі чисельних методів негладкої оптимізації та наведено приклади їх застосування для розв'язання широкого кола актуальних практичних задач. Сучасним напрямом, який активно розвивається в Інституті, є розроблення методів штучного інтелекту з використанням спеціалізованих моделей та алгоритмів негладкої оптимізації для нейронних мереж та машинного навчання, а також для аналізу і проектування логістичних, транспортних та енергетичних мереж.

Шановний Анатолію Глібовичу!

Шановні члени Президії! Шановні присутні!

Сьогодні я хотів би привернути вашу увагу до розвитку теорії та чисельних методів негладкої оптимізації — напряму, який в останні десятиліття викликає особливий інтерес завдяки широкому колу його практичних застосувань.

Методи негладкої оптимізації — це методи, що працюють з неперервними функціями, які не всюди є диференційовними, тобто існують такі точки, в яких у функції немає похідної. Ці точки називають точками негладкості, і для них визначено поняття узагальненого градієнта. Якщо функція є опуклою, узагальнений градієнт називають субградієнтом.

У доповіді я часто буду вживати термін «субградієнтний метод». Його слід розуміти як градієнтний метод, який розширено на клас негладких опуклих функцій.

Методи негладкої оптимізації з кожним роком стають дедалі більш актуальними. Останнім часом у світі спостерігається значний розвиток теорії і методів негладкої оптимізації, що насамперед зумовлено такими чотирма факторами:

1) у сучасному математичному моделюванні технологічних, екологічних та економічних процесів усе частіше доводиться мати справу з негладкими функціями;

2) наявність добре розвинених теорій і чисельних алгоритмів — на сьогодні у світі є багато відомих наукових шкіл негладкої оптимізації;

3) поява нових прикладних галузей, таких як нейронні мережі, машинне навчання, великі дані тощо, актуалізує розроблення ефективних алгоритмів для них;

4) прогрес сучасної обчислювальної техніки (кластерні архітектури, grid- та cloud-обчислення) відкриває нові можливості для розвитку цього напрямку.

Починаючи з 1962 р. в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України під керівництвом академіка НАН України Наума Зуселевича Шора розроблялися оригінальні методи негладкої оптимізації. Досягнення заснованої ним наукової школи здобули широке світове визнання.

Так, у 1962 р. Н.З. Шор розробив перший субградієнтний метод; у 1969 р. — вперше використав оператор розтягу простору для прискорення субградієнтних методів; у 1985 р. — розпочав роботи з розроблення техніки двоїстих оцінок для квадратичних екстремальних задач, яка дає змогу обґрунтовувати оптимальні розв'язки в багатоекстремальних задачах. Отримані результати Наум Зуселевич детально представив у двох англійських монографіях: «Minimization Methods for Non-Differentiable Functions»¹ і «Nondifferentiable Optimization and Polynomial Problems»².

Загалом субградієнтні алгоритми з перетворенням простору мають велике теоретичне та прикладне значення і є «ключем» для розв'язання задач математичного програмування великих розмірностей. Вони вирізняються простотою реалізації, зручністю для розпаралелювання, розвинутою методикою налаштування параметрів з урахуванням спе-

цифіки задачі. Алгоритми забезпечують високу швидкість збіжності для мінімізації яружних функцій, тобто функцій з витягнутими поверхнями рівня.

Добре відомими окремими випадками субградієнтних алгоритмів з розтягом простору є r -алгоритми, розроблені в 1970 р., та метод еліпсоїдів, запропонований у 1977 р. За часом обчислення і точністю результатів програмні реалізації r -алгоритмів виявилися конкурентоспроможними порівняно з найбільш ефективними методами розв'язання гладких погано обумовлених задач (задач із сингулярними особливостями), але при цьому r -алгоритми мають вагому перевагу — їх можна використовувати для задач негладкої оптимізації.

Швидкість збіжності методу еліпсоїдів не залежить від властивостей функції, вона залежить тільки від розмірності простору. Це дало можливість отримати перший поліноміальний алгоритм для задачі лінійного програмування та низку поліноміальних алгоритмів для спеціальних задач комбінаторної оптимізації.

Нині в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України продовжуються роботи з розвитку субградієнтних алгоритмів та їх застосування в багатьох прикладних галузях. Розроблено нові модифікації r -алгоритмів: $r(\sigma)$ -алгоритми з автоматичним вибором коефіцієнтів розтягу простору та $r(n)$ -алгоритми з використанням операторів розтягу простору по різниці нормованих субградієнтів, а також узагальнене сімейство методів еліпсоїдів, нові субградієнтні методи з перетворенням простору, які використовують апріорну інформацію про мінімальне значення функції, що мінімізується.

За допомогою цих методів отримано нові результати в теорії двоїстості для неопуклих квадратичних оптимізаційних задач. Розроблені алгоритми мають прискорену збіжність для яружних функцій, і їх програмні реалізації із застосуванням процедури регулювання матриць перетворення простору можна використовувати як оптимізаційні ядра для побудови ефективних методів розв'язання прикладних задач.

¹ Shor N.Z. *Minimization Methods for Non-Differentiable Functions*. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, 1985. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-82118-9>

² Shor N.Z. *Nondifferentiable Optimization and Polynomial Problems*. Springer Science+Business Media Dordrecht, 1998. <https://doi.org/10.1007/978-1-4757-6015-6>

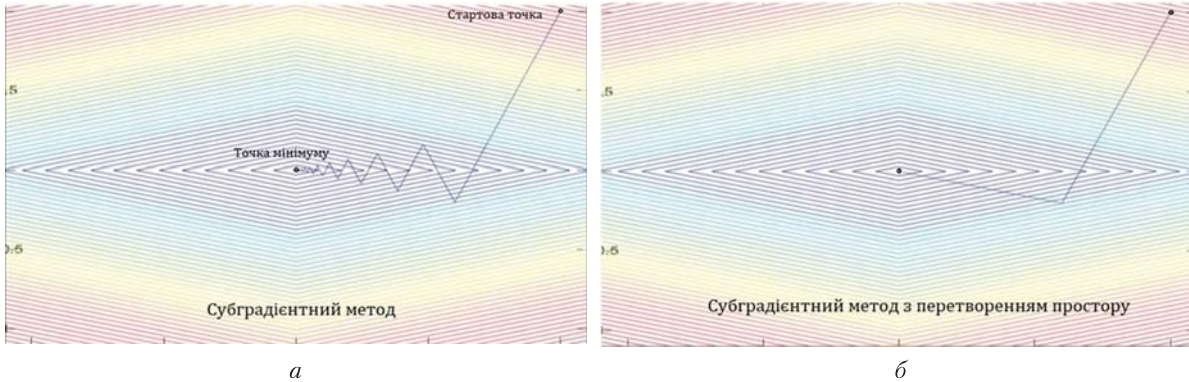


Рис. 1. Порівняння збіжності алгоритмів субградієнтного методу (а) і субградієнтного методу з перетворенням простору (б)

На прикладі кусково-лінійної функції від двох змінних

$$f(x_1, x_2) = |x_1| + 10|x_2|$$

продемонструємо, що саме означає така «прискорена збіжність алгоритмів». На рис. 1а наведено траєкторію субградієнтного методу, яка починається в стартовій точці і закінчується в точці мінімуму. Ця траєкторія є зигзагоподібною, і ще більш зигзагоподібною вона буде, якщо для функції коефіцієнт 10 замінити на більший. На рис. 1б можна бачити траєкторію одного з розроблених нами методів з перетворенням простору, який з тієї самої стартової точки збігається до точки мінімуму всього за дві ітерації. І це буде так незалежно від того, наскільки великим ми візьмемо коефіцієнт при модулі x_2 . Тому розроблені алгоритми з використанням операторів перетворення простору змінних дають можливість будувати ефективні алгоритми для розв'язання оптимізаційних задач із сингулярними особливостями.

Тепер від теорії методів негладкої оптимізації перейдемо до прикладів оптимізаційних задач, у яких було використано розроблені нами методи. За браком часу розповім лише про п'ять таких застосувань, хоча їх, звісно, більше. Отже, це:

- 1) відмовостійкі мережі;
- 2) сопло Лавалля з центральним тілом;
- 3) дефекти в регулярних структурах;

- 4) збалансоване пакування 2D- і 3D-об'єктів;
- 5) міжгалузеві моделі планування структурно-технологічних змін.

Роботи над задачами відмовостійких мереж та міжгалузевих моделей планування структурно-технологічних змін розпочалися ще при Наумі Зуселевичі Шорі, тобто над ними ми працюємо вже понад 20 років. Над іншими трьома задачами ми разом з їх замовниками почали працювати в останні роки.

Для розв'язання задач про відмовостійкі мережі в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України розроблено математичні моделі, методи та програмне забезпечення для визначення та модернізації пропускних спроможностей дуг відмовостійких мереж. Такі моделі описуються блочними задачами з сотнями мільйонів змінних та сотнями тисяч обмежень, і для них методи негладкої оптимізації у поєднанні зі схемами декомпозиції є ефективними.

Специфіку цих задач характеризує рис. 2, на якому показано, що мережі повинні функціонувати навіть тоді, коли дуга або шлях виявляться несправними, тобто «відмовлять».

На початку цього року ми почали працювати над задачами відмовостійких мереж для операторів систем розподілу електроенергії. Замовником цих робіт є Навчально-науковий інститут енергетики, автоматики і енергозбереження Національного університету біоресурсів та природокористування. Спільно ми

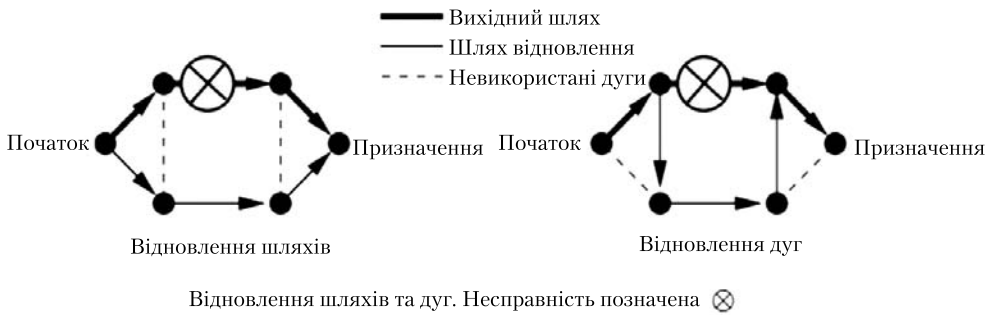


Рис. 2. Схема задачі про відмовостійкості мережі

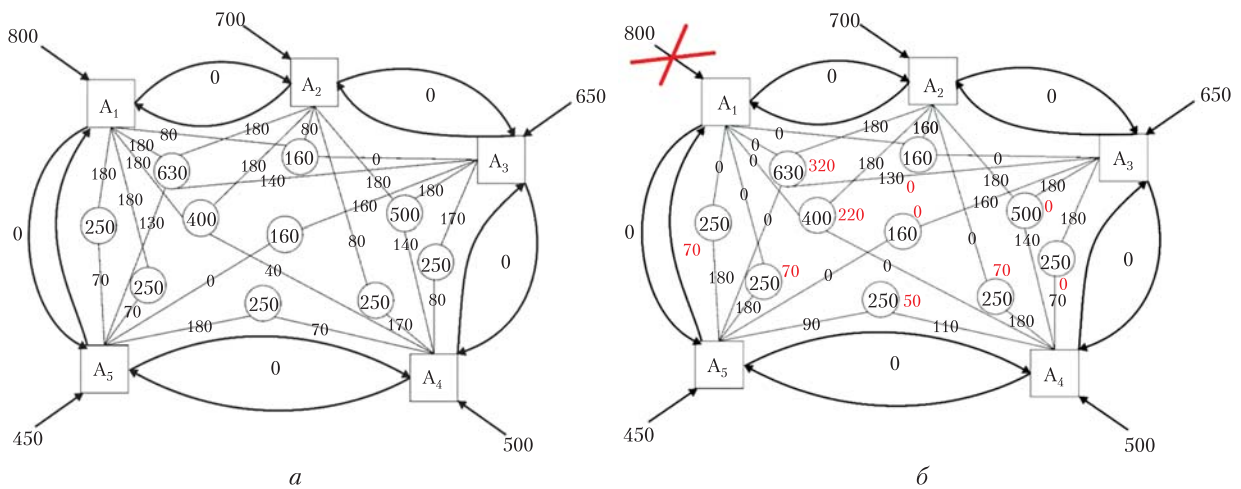


Рис. 3. Схема задачі адресності потоків у багатовузлових регіональних енергосистемах для забезпечення оптимальних сценаріїв диспетчеризації регіональних енергосистем в умовах дефіциту потужності (квадратики — постачальники, кружечки — споживачі): а — розподіл потоків у мережі в разі, якщо всі постачальники поставляють електроенергію; б — перерозподіл потоків у разі, якщо постачальник A_1 не зможе поставляти електроенергію в систему

розробили алгоритм і програмне забезпечення для розв’язання задачі адресності потоків у багатовузлових регіональних енергосистемах для забезпечення оптимальних сценаріїв диспетчеризації регіональних енергосистем в умовах дефіциту потужності.

Схему цих задач наведено на рис. 3. Ключове питання полягає в тому, як у разі неможливості постачання електроенергії одним або кількома постачальниками перерозподілити потоки в мережі так, щоб споживачі постраждали якнайменше. Може так статися, що ці задачі виявляться дуже актуальними цієї зими.

У другому прикладі застосувань ми використали модифікації r -алгоритмів для побу-

дови профілів зовнішнього та внутрішнього контурів поверхонь сопла Лавалю з центральним тілом та аеродинамічних профілів і поверхонь пера лопатки для авіадвигунів. Ці роботи ми виконували в 2018–2020 рр. спільно з ДП «Запорізьке машинобудівне конструкторське бюро «Прогрес» імені академіка О.Г. Івченка».

Зміст задачі про сопло Лавалю з центральним тілом показано на рис. 4. Потрібно так побудувати контури поверхонь сопла та центрального тіла, щоб вони задовольняли задані закони зміни площ для крайнього лівого, крайнього правого та кількох проміжних положень центрального тіла.

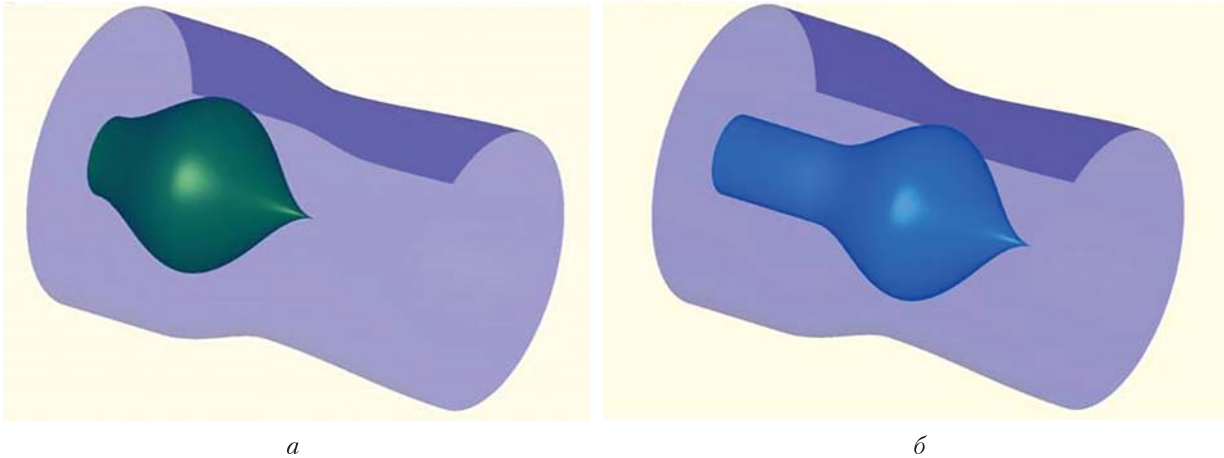


Рис. 4. Задача про сопло Лаваля з центральним тілом: *a* — крайнє ліве положення центрального тіла; *б* — крайнє праве положення центрального тіла

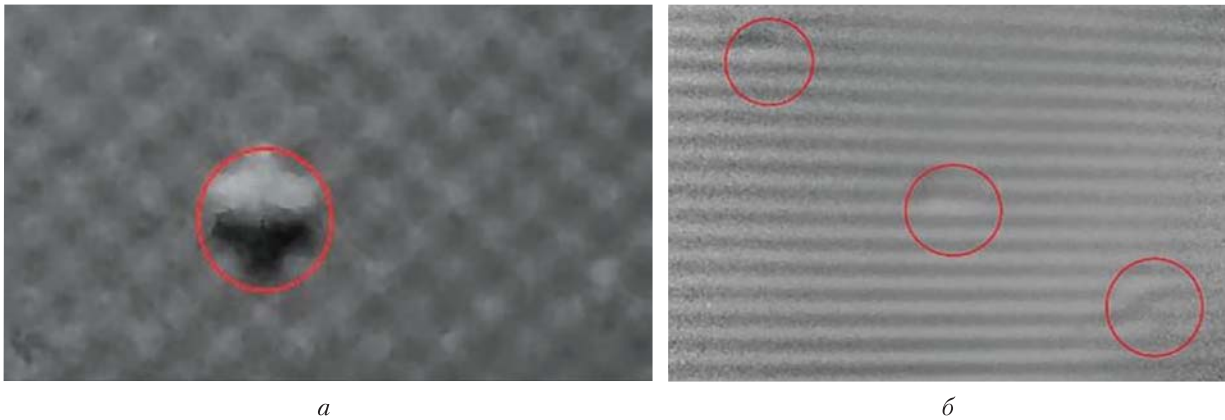


Рис. 5. Результати вимірювання деформацій у зображеннях, отриманих за допомогою методів широгографії для тонкостінних багат шарових композиційних матеріалів: *a* — тришарова панель з дефектом зварювання; *б* — композиційна пластина з трьома внутрішніми дефектами

На основі отриманих результатів було розширено функціональні можливості розроблених у ДП «Івченко-Прогрес» пакетів прикладних програм «Поверхня» і «Сопло». Нові версії пакетів прикладних програм дозволяють скоротити терміни проектування аеродинамічних поверхонь та поверхонь сопла Лаваля з центральним тілом і поліпшити їх газодинамічні характеристики. Це має важливе значення для створення сучасної авіаційної техніки.

Третій приклад — дослідження щодо знаходження місць розміщення та границь дефектних областей у зображеннях, отриманих за

допомогою методів широгографії для тонкостінних багат шарових композиційних матеріалів. Ці роботи ми виконували спільно з Інститутом електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України.

Так, було розроблено алгоритми пошуку дефектів у регулярних структурах з використанням методу найменших модулів, який описується негладкою функцією. Деформації вимірювали за допомогою розробленої в Інституті електрозварювання методики неруйнівного контролю якості металевих і композиційних матеріалів (рис. 5), а створене нами алгорит-

мічне та програмне забезпечення дозволяє автоматизувати процес визначення місцезнаходження дефектів у стільникових панелях, що мають періодичну структуру, та зменшити вплив людського фактора під час неруйнівного контролю якості методом широгографії.

Наступний приклад пов'язаний із розв'язанням задач оптимального пакування геометричних об'єктів у контейнери різних форм за умови балансу (рівновага, інерційність та ін.). Паралельні алгоритми для деяких задач пакування реалізовано на суперкомп'ютерному комплексі СКІТ Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України. Ці роботи ми проводимо ще з 2011 р. спільно з професорами Юрієм Григоровичем Стояном і Тетяною Євгенівною Романовою, які представляють відділ математичного моделювання і оптимального проектування Інституту проблем машинобудування ім. А.М. Підгорного НАН України.

Метод ϕ -функцій, розроблений у цьому відділі, на сьогодні високо оцінено світовою науковою спільнотою фахівців з дослідження операцій (operational research). Цей метод визнано найбільш потужним засобом математичного моделювання відношень геометричних об'єктів, що відкрило шлях до можливості застосування методів математичного програмування для розв'язання NP-складних задач геометричного проектування. У загальному випадку кожна ϕ -функція є негладкою, тому методи негладкої оптимізації є вкрай важливими для пошуку найкращих локально-оптимальних рішень.

За цей час ми виконали кілька спільних міжнародних проєктів, зокрема грант Українського науково-технологічного центру (2014–2015) і грант Volkswagen Foundation, який розпочався 2021 р. і нині ще продовжується.

Задачі збалансованого пакування мають широкий спектр застосувань — це і космічна інженерія, і адитивне виробництво (3D-друк), і матеріалознавство та багато інших галузей.

І останній приклад — використання міжгалузевих моделей планування структурно-технологічних змін для виявлення диспропорцій в економіці та аналізу шляхів їх усунення. Ці ро-

боти ми проводимо ще з 1998 р., коли Михайло Володимирович Михалевич звернувся до нас з проханням виконати за допомогою методів негладкої оптимізації розрахунки для однієї з його економічних задач. Упродовж десяти років ми активно розвивали методи розв'язання таких задач, після чого ними зацікавилися швейцарські вчені з Університету м. Фрібурґ, спільно з якими ми виконували такі міжнародні проєкти, як грант Швейцарської національної наукової фундації (SNSF) IZ73ZO_127962 «Аналіз інституційних і технологічних змін у ринкових та перехідних економіках на тлі сучасної фінансової кризи» (2010–2012), а також гранти SNSF IZ63ZO_147586 (2013–2014) і SNSF IZ63ZO_160605 (2015–2016). Результати цих робіт узагальнено в монографії «Институциональные и технологические изменения в странах с рыночной и переходной экономикой» (2015).

Отже, актуальність подальшого розвитку методів негладкої оптимізації визначається доведеною ефективністю їх практичного застосування. Ці методи дозволяють побудувати адекватні моделі оптимізації для багатьох прикладних задач.

Методи негладкої оптимізації можна використовувати для різноманітних класів задач (оптимальне планування, проектування, управління), що відкриває широкі перспективи для розширення співпраці в різних сферах науки і техніки. На сьогодні є необхідність посилення інформаційної обізнаності та зв'язків із потенційними замовниками для побудови прийнятних математичних моделей.

Особливого значення набуває розроблення спеціалізованих алгоритмів негладкої оптимізації для нейронних мереж та машинного навчання.

Сьогодні в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України розробляються також методи штучного інтелекту із застосуванням моделей та алгоритмів негладкої оптимізації (спеціалізовані алгоритми негладкої оптимізації для нейронних мереж та машинного навчання), методи негладкої оптимізації для аналізу та проектування логістичних, тран-

спортних та енергетичних мереж. Потенційними їх користувачами є кафедра медичної інформатики Тернопільського національного медичного університету імені І.Я. Горбачевського, якій вони потрібні для вирішення завдань реабілітаційної та телереабілітаційної медицини, асоціація «Український логістичний альянс»,

Інститут проблем моделювання в енергетиці ім. Г.Є. Пухова НАН України, Інститут електродинаміки НАН України та інші організації, зацікавлені в дослідженнях за цим напрямом.

Дякую за увагу!

За матеріалами засідання підготувала О.О. Мележик

Petro I. Stetsyuk

V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4036-2543>

METHODS OF NON-SMOOTH OPTIMIZATION: THEORY AND PRACTICAL APPLICATION

Transcript of scientific report at the meeting of the Presidium of NAS of Ukraine, November 1, 2023

The report presents some of the most important results of research conducted at the V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS of Ukraine in the field of numerical methods of non-smooth optimization and gives examples of their application for solving a wide range of relevant practical problems. A modern direction that is actively evolving at the Institute is the development of artificial intelligence methods using specialized models and non-smooth optimization algorithms for neural networks and machine learning, as well as for the analysis and design of logistics, transport, and energy networks.

Cite this article: Stetsyuk P.I. Methods of non-smooth optimization: theory and practical application. *Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr.* 2024. (1): 49–55. <https://doi.org/10.15407/visn2024.01.049>