УДК 519.6

Яковенко О.А., аспірант

O. Iakovenko, graduate student

Про прикладне програмне забезпечення для задач нелінійного програмування

Nonlinear programming software

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: sandra.yakov@gmail.com

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: sandra.yakov@gmail.com

У статті проводиться порівняльний аналіз можливостей сучасних пакетів математичного програмування для задачі нелінійної оптимізації. Окреслено коло базових чисельних методів оптимізації розв'язання нелінійних задач. Подається перелік існуючих оптимізаторів та мов математичного програмування. Наводяться основні напрямки можливого розвитку існуючих інструментаріїв.

Ключові слова: алгоритм, розв'язувач, мова алгебраїчного моделювання, чисельний метод, нелінійна оптимізація.

Nonlinear programming problems are in general more difficult to solve than linear programming problems. Solving nonlinear problems without modern technologies would be complicated and laborious. Effective application of a particular algorithm for solving a nonlinear constrained optimization problem primarily depends on the optimization algorithm practical realization quality.

Most frequently used solvers (for solving constrained optimization problems) and algebraic modelling languages are represented. Point is also made of software packages operational functionality. It is concluded that there is no universal algorithm for solving nonlinear optimization problem.

An article deals with most common nonlinear optimization problem solvers and methods employed by this solvers. Numerical methods which are mostly used in mathematical software are the following: GRG method, interior point method, quasi newton method, branch and bound method, Frank–Wolfe algorithm (also known as conditional gradient method) and trust region method. Programming languages used to develop optimization algorithms were also analyzed.

It is also stated that nonlinear systems properties analysis is carried out only within used optimization method. Therefore, the question of instrumental analysis (especially for systems where the mathematical model changes are required) is not resolved jet.

Keywords: algorithm, solver, numerical method, nonlinear optimization.

Статтю представив д.т.н., проф. Волошин О.Ф.

Розвиток моделей і методів оптимізації стимулювався значним збільшенням розмірності і складності оптимізаційних задач, викликаним істотним технологічним підйомом після другої світової війни [1, с.13].

Найбільш поширені пакети математичного програмування, що надають можливість проведення аналізу властивостей лінійних моделей, були розглянуті у попередній статті [2].

Проте, процеси різної природи формалізуються задачами нелінійного програмування різної складності. Переважна більшість прикладних задач оптимізації є нелінійними. Чисельне розв'язання задачі нелінійної оптимізації без застосування сучасних технологій бачиться складним та обтяжливим. Тому сучасні процедури аналізу та алгоритми нелінійної оптимізації, що використовуються для їх розв'язання у пакетах прикладного математичного програмування, викликають жвавий науковий інтерес як базовий інструментарій розв'язання практичних задач.

Загальна теорія розв'язання задач нелінійного програмування на даний час знаходиться в стані становлення. Для розв'язання таких задач на практиці використовуються алгоритмічно запрограмовані чисельні методи, які розв’язують задачу за допомогою ЕОМ. Теоретична та практична складність проблеми обмежує можливості для створення загальноприйнятого універсального чисельного методу, який дозволяв би отримувати оптимальний розв’язок для будь-якої задачі нелінійної оптимізації. Через це під час розв’язання оптимізаційної задачі, що була сформульована як задача нелінійного програмування, можуть знадобитись декілька методів. Тому вибір та ефективне застосування кожного з них у процесі розв’язання задачі нелінійної оптимізації залежить насамперед від якості практичної реалізації алгоритмів оптимізації, які є в розпорядженні у дослідника.

Формально задача нелінійного програмування може бути сформульована таким чином:

Мінімізувати

$$f(x), x \in E^n, \tag{1}$$

за m лінійних та(або) нелінійних обмежень у вигляді рівностей

$$h_1(x) = 0, j = 1, \dots m, \tag{2}$$

і $(p-m)$ лінійних та(або) нелінійних обмежень у вигляді нерівностей:

$$g_1(x) \geq 0, j = m+1, \dots p. \tag{3}$$

[3, с. 19].

Математичні методи, які були розроблені дослідниками в минулому, дозволяють розв’язати (в багатьох випадках) задачі вигляду (1)-(3) багатьма способами.

Методи їх розв’язання прийнято поділяти на прямі та двоїсті, у залежності від того, чи розв’язують вони вихідну задачу, або ж знаходять відповідь із допомогою двоїстої. Програмна реалізація методів дозволила підняти на якісно новий рівень швидкість вирішення проблем оптимізації [1, 4].

В результаті бурхливого розвитку прикладного програмного забезпечення у сфері математичних комплексів з’явилась велика кількість математичних пакетів, що дозволяють розв’язувати задачі математичної оптимізації. З одного боку, це було "спровоковане" ростом та можливостями обчислювальних потужностей комп’ютерних систем, і з іншого, нагальною виробничою необхідністю (формуються вимоги до інструментарію проведення обчислень). Тому на сьогоднішній день ми маємо досить широкий діапазон для вибору інструментарію, що використовується.

Таке розмаїття породжує резонне запитання – то який саме математичний пакет краще враховує потреби "замовника" та придатний для розв’язання конкретної задачі?

У сучасних наукових дослідженнях ретельно розглянуті питання використання прикладних програмних комплексів та наявних алгоритмів для розв’язання конкретної прикладної задачі нелінійної оптимізації. У таких дослідженнях робляться висновки про продуктивність та доцільність використання конкретного алгоритму для розв’язання типової задачі. Нам здається необхідним зробити акцент і на огляді та порівнянні існуючого інструментарію не лише на базі конкретної задачі, а за допомогою аналізу і висвітлення спектру функціональних можливостей у програмних продуктах, що використовуються найчастіше.

В цілому арсенал для розв’язання задачі оптимізації можна поділити на мови алгебраїчного моделювання та на розв’язувачі.

Серед мов алгебраїчного моделювання можна виділити шість найбільш вживаних [5]. Такі системи використовують для опису та розв’язання проблем високої складності великомасштабних математичних розрахунків.

Цей список містить такі мови:

1. AIMMS (Advanced Interactive Multidimentional Modeling System);
2. AMPL (A Mathematical Programming Language);
3. GAMS (General Algebraic Modelling System);
4. LINDO/LINGO;
5. MPL (Mathematical Programming Language);
6. MathLab.

Будучи системами моделювання високого рівня, вони підтримують велику кількість і комерційних розв’язувачів, і таких що мають відкритий код. Перевага використання мови алгебраїчного моделювання як середовища програмування полягає у тому, що у разі її використання оптимізаційна модель записується лише один раз, а для того, щоб змінити алгоритм (тобто розв’язувач, який реалізовує такий алгоритм), достатньо змінити декілька рядків коду і параметри моделі будуть передаватися у зазначеному напрямку. Це не тільки звільняє від необхідності переписувати модель декілька разів, але й надає можливість порівняти розв’язання тієї ж самої моделі різними методами.

Також існують дослідження, що порівнюють конкретні розв’язувачі, які використовує дослідник під час розв'язання своєї задачі у рамках використання конкретної мови математичного програмування [6], наприклад, AMPL [7] або GUMS [8].

Серед розв'язувачів найбільш вживаними для розв'язання задач нелінійної умовної оптимізації визначають такі: CONOPT, SNOPT, Gurobi, MOSEK, KNITRO, MINOS, LOQO, IPOPT,BARON, XPRESS.

Варто також зазначити, що серед вище перелічених мов, LINDO та MathLab (Optimizational Toolbox) являють собою і мову алгебраїчного моделювання і оптимізатор одночасно. Саме тому вважаємо за необхідне включити їх у список розв'язувачів, які будемо досліджувати.

Таблиця 1

Розв'язувач	Алгоритмізований метод
LINDO	GRG method (Метод умовного градієнта)
CONOPT	GRG method (Метод умовного градієнта)
LOQO	Метод внутрішньої точки
SNOPT	Квазіньютонівський метод
KNITRO	Метод довірчих інтервалів
MOSEK	Метод внутрішньої точки
MINOS	Метод умовного градієнта
BARON	Метод гілок і меж
XPRESS	Метод гілок і меж
IPOPT	Метод внутрішньої точки
Mathlab Optimizational Toolbox	Метод довірчих інтервалів

У таблиці 1 наведені найбільш поширені пакети прикладного програмування, що оснащені розв'язувачами нелінійних задач математичного програмування та методи, які вони використовують для розв'язання.

Керуючись інформацією, отриманою під час проведення дослідження, можемо констатувати, що найбільш згадуваними у літературі і поширеними вважаються оптимізатори: KNITRO, SNOPT та MINOS.

Порівняльна таблиця 1 наочно демонструє, що розв'язувачі використовують різноманітні методи. Це підтверджує зроблене на початку статті зауваження, що нелінійне програмування, на відміну від лінійного, не має універсального методу розв'язання оптимізаційних задач. З іншого боку, це надає можливість для отримання кращого результату за рахунок того, що можна вирішити проблему оптимізації декількома методами і порівняти результати, або навіть заздалегідь подивитись на спеціалізованих сайтах, який саме метод використовується для розв'язання конкретної задачі, що дозволяє користувачу самостійно визначити, який саме розв'язувач використовувати. Адже кожна задача унікальна, а найефективніший алгоритм може варіюватись.

Мови, на яких написані алгоритми оптимізації, належать до ешелону перших мов програмування: C/C++ та FORTRAN (його різні модифікації(версії), як то Fortran77, Fortran 90, Fortran95 тощо). Це пов'язано з тим, що теоретична база цих алгоритмів була розроблена раніше, аніж почали бурхливо розвиватися комп'ютерні технології загалом і мови програмування зокрема. Як тільки з'явилась фундаментальна практична база і можливість запрограмувати існуючі алгоритми оптимізації, починаючи з 70-х років з'являлися і перші версії оптимізаторів, які були згодом покращені.

У той час, як у лінійному програмуванні переважна більшість задач розв'язується за допомогою програмного забезпечення, що розв'язує задачі загальновизнаним ефективним симплекс-методом [2], та робляться активні спроби застосування релаксаційних схем та структурного аналізу властивостей лінійних систем [9], нелінійне програмування все ще залишається областю дослідження на стадії становлення, включає в себе елементи експериментування.

Можна констатувати, що нелінійні задачі оптимізації все ще не мають універсального алгоритму розв'язання. Більшою мірою на сьогоднішній день процес розв'язання задачі нелінійного програмування зводиться до пошуку найкращого алгоритму для розв'язання конкретної задачі шляхом порівняння результатів використання різних методів. Аналіз властивостей нелінійних систем проводиться лише у рамках методу оптимізації, що використовується. І тому питання інструментального аналізу властивостей таких систем (особливо при змінах параметрів математичної моделі) комплексно не вирішено. Це залишає широке поле для подальших наукових досліджень.

Список використаних джерел

1. *Базара М.* Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы / М. Базара, К. Шетти, Х. Шералі. – М.: Мир, 1982. – 583 с.
2. *Яковенко О.А.* Про інструментарії аналізу властивостей лінійних моделей у пакетах математичного програмування / О.А. Яковенко, В.І. Кудін // Вісник Київського національного університету імені Т.Шевченка. Серія физ.-мат. науки. – 2014. – 4. – С. 210-215.
3. *Химмельблау Д.* Прикладное нелинейное программирование: [пер. с англ. И.М. Быховской, Б.Т. Вавилова] / Д. Химмельблау. – М.: Мир, 1975. – 534 с.
4. Numerical methods for constrained optimization / Edited by P. E. Gill and W. Murray. – Academic Press, London, 1974. – 283 p.
5. *Kallrath J.* Modeling Languages in Mathematical Optimization / Josef Kallrath. – Springer, 2004. – 408 p.
6. *Neumaier A. A* comparison of complete global optimization solvers / Arnold Neumaier, Oleg Shcherbina, Waltraud Huyer, Tamás Vinkó // Mathematical Programming. –June 2005. – Volume 103, Issue 2. – pp. 335-356.
7. *Benson H. Y. A* Comparative Study of Large-Scale Nonlinear Optimization Algorithms / Hande Y. Benson, David F. Shanno, Robert J. Vanderbei // High Performance Algorithms and Software for Nonlinear Optimization, Applied Optimization. – 2003. – Volume 82. – pp. 95-127.
8. *Lastusilta T.* Comparison of some high-performance MINLP solvers / T. Lastusilta, M. Bussieck, T. Westerlund // Chemical Engineering Transactions, 2007. – pp. 125-130.
9. *Кудин В.И.* Релаксационная система решения задачи линейного программирования с использованием метода последовательного анализа / В.И. Кудин // Автоматика . – 1989. – №3. – С. 42-47.

References

1. BAZARAA, M. S., SHERALI, C., SHETTY, K. (2006) *Nonlinear programming: theory and algorithms.* New York : Wiley.
2. IAKOVENKO, O.A., KUDIN, V.I. *About existing linear models properties analysis tools in mathematical software packages.* Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series Physics & Mathematics. – 2014. – 4. – pp. 210-215.
3. HIMMELBLAU, D. (1972) *Applied nonlinear programming.* New York : Mcgraw-Hill.
4. GILL, P. E., MURRAY, W., *ed.* (1974) *Numerical methods for constrained optimization.* London : Academic Press.
5. KALLRATH, J. (2004) *Modeling Languages in Mathematical Optimization*. New York : Springer.
6. *NEUMAIER, A.*, SHCHERBINA, O., HUYER, W., VINKÓ, T. *A comparison of complete global optimization solvers*, Mathematical Programming. – June 2005, Volume 103, Issue 2. – pp. 335-356.
7. *BENSON, H. Y.*, SHANNO, D. F., VANDERBEI, R. J. *A Comparative Study of Large-Scale Nonlinear Optimization Algorithms*. High Performance Algorithms and Software for Nonlinear Optimization, Applied Optimization. – 2003. – Volume 82. – pp. 95-127.
8. *LASTUSILTA, T.*, BUSSIECK, M., WESTERLUND, T. *Comparison of some high-performance MINLP solvers*. Chemical Engineering Transactions, 2007. – pp. 125-130.
9. *KYDIN, V.I. Relaxation system for solving the linear programming problem using sequential analysis*. Avtomatika. – 1989. – №3. – pp. 42-47.

Надійшла до редколегії 20.04.15