На правах рукописи

Елсаков Сергей Михайлович

Однородные алгоритмы многоэкстремальной оптимизации и модели липшицевых целевых функций

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Челябинск – 2011

Работа выполнена в Южно-Уральском государственном университете.

Научный руководитель — доктор технических наук, профессор Ширяев Владимир Иванович.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор Панюков Анатолий Васильевич;

доктор физико-математических наук, профессор Жадан Виталий Григорьевич.

Ведущая организация — Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского.

Защита состоится 29 ноября 2011 г., в 15 часов, на заседании диссертационного совета Д 212.298.14 при Южно-Уральском государственном университете по адресу: 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76, ауд. 1001.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Южно-Уральского государственного университета.

Автореферат разослан «____» _____ 2011 г.

0906811

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к. ф.-м. н., доц. **А. В. Келлер**

Общая характеристика работы

Актуальность темы диссертационной работы. Диссертация посвящена разработке эффективных численных методов решения задач многоэкстремальной оптимизации. Актуальность темы диссертации обусловлена тем, что многие задачи принятия решений могут быть сформулированы как задачи многоэкстремальной оптимизации. Такие задачи возникают в самых разных областях науки и техники: проектирование различных систем и материалов, идентификация нелинейных моделей и т.д. Особенностью этих задач является то, что целевая функция может быть невыпуклой, негладкой, иметь несколько существенных экстремумов, допустимое множество также может быть невыпуклым и, возможно, несвязным. Целевые функции могут задаваться алгоритмически. Кроме того, однократное вычисление целевой функции может требовать значительных вычислительных ресурсов.

Для численного решения подобных задач применяются методы многоэкстремальной (глобальной) оптимизации. Исследованию численных методов многоэкстремальной оптимизации посвящены работы К. А. Баркалова, Д. И. Батищева, В. П. Булатова, В. П. Гергеля, А. И. Голикова, С. Ю. Городецкого, В. А. Гришагина, Х. М. Гутмана (H.-M. Gutmann), Д. Р. Джонса (D. R. Jones), Ю. Г. Евтушенко, В. Г. Жадана, А. А. Жиглявского, А. Г. Жилинскаса, Д. Е. Квасова, А. Г. Коротченко, А. В. Орлова, П. М. Пардалоса (P. M. Pardalos), Я. Пинтера (J. D. Pintér), С. А. Пиявского, М. А. Посыпкина, Л. А. Растригина, А. И. Рубана, Я. Д. Сергеева, А. С. Стрекаловского, Р. Г. Стронгина, А. Г. Сухарева, Х. Туя (H. Tuy), К. Флудаса (C. Floudas), Р. Хорста (R. Horst) и многих других.

Актуальной является разработка методов снижения вычислительной трудоемкости решения таких задач, например, за счет использования моделей целевых функций, которые содержат дополнительные предположения, позволяющие построить эффективный алгоритм решения задачи многоэкстремальной оптимизации.

В диссертации рассматривается постановка задачи в предположении о липшицевости целевой функции, которое имеет широкое распространение в рамках многоэкстремальной оптимизации и, как правило, выполняется для решении практических задач, поскольку означает, что все изменения в системе требуют некоторой конечной энергии.

Актуальность диссертации также обусловлена тем, что, в соответствии с современными тенденциями развития вычислительных систем, наряду с последовательными алгоритмами для решения задач многоэкстремальной оптимизации рассматривается параллельный алгоритм, способный работать на сотнях процессорах.

Цель и задачи работы. Целью работы является разработка, исследование и реализация численных методов решения задач многоэкстремальной оптимизации с использованием моделей целевых функций. Целевые функции предполагаются липшицевыми, определенными на единичном гиперкубе, многоэкстремальными, недифференцируемыми, время вычисления значения в заданной точке является существенным.

В соответствии с поставленной целью решались следующие задачи:

1. Построить класс однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации.

2. Построить и сравнить различные модели липшицевых целевых функций для однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации.

3. Разработать численный метод для решения задач многоэкстремальной оптимизации и сравнить его с существующими алгоритмами многоэкстремальной оптимизации при решении тестовых задач и задач оптимизации размещения радиомаяков и идентификации нелинейной модели.

4. Спроектировать и реализовать программный комплекс для решения задач многоэкстремальной оптимизации и проведения вычислительных экспериментов с алгоритмами многоэкстремальной оптимизации и моделями целевых функций.

Методы исследования. При выполнении исследования применялись теория алгоритмов, теория локальной оптимизации, теория многоэкстремальной оптимизации, методы интерполяции, объектно-ориентированное программирование.

Научная новизна.

1. Построены модели липшицевых целевых функций для класса однородных алгоритмов, которые используются для построения новых однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации.

2. Предложен новый класс алгоритмов многоэкстремальной оптимизации — однородные алгоритмы многоэкстремальной оптимизации. В рамках этого класса возможно создание новых численных методов и алгоритмов для решения задач многоэкстремальной оптимизации с помощью выбора соответствующих моделей целевых функций.

3. Доказаны теоремы, устанавливающие: вид функции-характеристики в подклассе однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации, достаточные условия сходимости численного метода, условие останова алгоритма.

4. Разработаны методы, снижающие трудоемкость решения вспомогательных задач в однородных алгоритмах многоэкстремальной оптимизации. Доказаны теоремы об условиях сходимости алгоритмов при использовании методов снижения трудоемкости.

5. Предложен эффективный однородный алгоритм многоэкстремальной оптимизации для липшицевых функций с большим временем вычисления значения.

Теоретическая значимость работы. В работе предложен класс однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации, который позволяет выполнять анализ многих существующих численных методов решения задач многоэкстремальной оптимизации с единых позиций. Также в рамках этого класса сформулированы требования к модели целевой функции и предложены новые модели целевых функций, позволяющие построить новые алгоритмы многоэкстремальной оптимизации. Разработаны методы снижения трудоемкости решения вспомогательных задач в алгоритмах многоэкстремальной оптимизации.

Практическая значимость работы. Предложенные алгоритмы могут быть использованы для решения задач многоэкстремальной оптимизации при проекти-

ровании систем, идентификации нелинейных моделей и т.д. В рамках работы создан программный комплекс, реализующий разработанные алгоритмы и позволяющий тестировать однородные алгоритмы с различными моделями целевых функций. На программный комплекс получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2010616850 от 14.10.2010. Исследования выполнялись при поддержке грантов губернатора Челябинской области (115.07.06-05.АХ, 065.07.06-08.БХ), гранта г. Челябинска «Лучшая инновационная идея года» 2010 г.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на международных и всероссийских конференциях: XIII-й и XIV-й Всероссийских конференциях «Математическое программирование и приложения»(г. Екатеринбург, 2007, 2011), международной конференции «Алгоритмический анализ неустойчивых задач», посвященной 100-летию со дня рождения В. К. Иванова (г. Екатринбург, 2008), международной конференции «Оптимизация и приложения (OPTIMA-2009)»(Черногория, г. Петровац, 2009), VI Московской международной конференции по исследованию операций (г. Москва, 2010), а также на конференциях: 38 молодежной школе-конференции «Проблемы теоретической и прикладной математики»(г. Екатеринбург, 2007), «Технологии Microsoft в теории и практике программирования»(г. Нижний Новгород, 2007, 2010), XXVI конф. памяти Н.Н. Острякова (г. Санкт-Петербург, 2008), I и II научной конференции аспирантов и докторантов ЮУрГУ (г. Челябинск, 2009, 2010). Результаты работы также докладывались на семинаре под руководством акад. Евтушенко Ю. Г. (ВЦ РАН, г. Москва, 2011) и на семинаре под руководством проф. Гергеля В. П. (ННГУ, г. Нижний Новгород, 2011).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 28 научных работах, в том числе 4 — в изданиях, рекомендованных ВАК [1-4]. В опубликованных статьях В. И. Ширяеву принадлежит общая постановка задачи, а С. М. Елсакову – все полученные результаты. Из остальных работ, выполненных в соавторстве, в диссертацию включены только те результаты, которые были получены лично С. М. Елсаковым, и не затрагивают интересов других соавторов.

Структура и объем работы. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения, библиографии и одного приложения. Объем диссертации 123 страницы, объем библиографии 116 источников.

Содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В **первой главе** приводятся различные постановки задач многоэкстремальной оптимизации, существующие модели целевых функций, численные методы и программные комплексы для решения задач многоэкстремальной оптимизации.

В п. 1.1 рассматриваются постановки задач многоэкстремальной оптимизации, роль дополнительной информации при решении задач многоэкстремальной оптимизации. Отдельное внимание уделено липшицевой оптимизации и условию Лип-

ница. В п. 1.2 описываются различные модели целевых функций и методы безусловной многоэкстремальной оптимизации: методы для решения задач многоэкстремальной оптимизации с использованием и без использования декомпозиции допустимого множества. Рассматриваются типы решающих правил для выбора очередной точки вычисления значения целевой функции и различные способы оценивания константы Липшица. В п. 1.3 приводится обзор современных программных комплексов для решения задач многоэкстремальной оптимизации. В п. 1.4 приводится постановка задачи диссертационного исследования:

$$f(x) \to \min_{x \in X},\ X \subset \mathbb{R}^d,\ X = \left\{x \in \mathbb{R}^d : 0 \le x_j \le 1,\ j = \overline{1,d}\right\}, \qquad (1)$$

где $f(x)$: $\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ – целевая функция, X — допустимое множество, d — размерность задачи. Целевая функция $f(x)$ удовлетворяет условию Липшица $|f(x_1) - f(x_2)| \le L\|x_1 - x_2\|$, $\forall x_1, x_2 \in X$, где L — константа Липшица ($0 < L < \infty$), $\|\cdot\|$ – евклидова норма.

Во **второй главе** вводится класс однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации, доказываются теоремы о структуре однородного алгоритма многоэкстремальной оптимизации, о достаточном условии сходимости последовательности точек испытаний целевой функции к точкам глобального минимума, об условии останова однородного алгоритма. Предлагаются модели целевой функции для однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации, обосновывается их корректность. Предлагаются методы снижения трудоемкости решения вспомогательных задач в однородных алгоритмах.

В п. 2.1 вводится новый класс однородных алгоритмов оптимизации. Пусть $\{x_i\}_{i=1}^k$ — *последовательность точек допустимого множества* X, *в которых осуществляется вычисление значений целевой функции* $f(x)$. Будем говорить, что алгоритм относится к классу однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации, если одновременно выполнены три условия:

1. Алгоритм является *однородным*, т.е. для любых двух целевых функций, различающихся на константу, последовательности точек испытаний $\{x_i\}_{i=1}^k$ совпадают.

2. На каждой итерации алгоритма определены функции $m_k(x) \equiv m(x, x_1, f(x_1), ..., x_k, f(x_k))$ и $s_k(x) \equiv s(x, x_1, f(x_1), ..., x_k, f(x_k))$, которые удовлетворяют следующим условиям:

A1) $m_k(x_i) = f(x_i)$, $i = \overline{1,k}$;

A2) $s_k(x_i) = 0$, $i = \overline{1,k}$;

A3) $s_k(x) > 0$, $x \ne x_i$, $i = \overline{1,k}$;

A4) $m_k(x)$, $s_k(x)$ — липшицевы.

3. Алгоритм представлен в следующем виде:

Шаг 1. Выбрать начальные точки $x_i \in X$, $i = \overline{1,M}$. **Вычислить** $f(x_i)$, $i = \overline{1,M}$. Положить $k = M$.

Шаг 2. Построить функции $m_k(x)$ и $s_k(x)$.

Шаг 3. Вычислить

$$x_{k+1} = \arg\min_{x \in X} P\left(m_k(x), s_k(x)\right), \qquad (2)$$

где $P(m_k(x),s_k(x)) : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ — некоторая функция, $m_k(x)$, $s_k(x)$ — функции, удовлетворяющие условиям A1)-A4).

Шаг 4. Вычислить значение $f(x_{k+1})$, положить $k=k+1$.

Шаг 5. Если выполнено некоторое условие φ останова алгоритма, то завершить алгоритм, иначе вернуться на Шаг 2. ■

Предлагаемый класс однородных алгоритмов имеет следующие особенности по сравнению с другими классами алгоритмов:

1. Рассматриваются многомерные алгоритмы оптимизации целевых функций.

2. Алгоритмы рассматриваются вне зависимости от метода разбиения допустимого множества.

3. Предъявляются требования не только к структуре алгоритма, но и к свойствам последовательности испытаний по аналогии с аксиоматически построенными алгоритмами.

4. В классе однородных алгоритмов рассматривается только один тип сходимости, а именно сходимость только к точкам глобального минимума.

5. В подклассе однородных алгоритмов задача построения алгоритма многоэкстремальной оптимизации сводится к выбору двух функций, удовлетворяющих определенным условиям.

Несмотря на вышеприведенные отличия, класс однородных алгоритмов пересекается со многими другими классами алгоритмов: характеристическими, типичнопредставимыми, «divide-the-best», методы ветвей и границ, методы неравномерных покрытий, методы на основе поверхностей отклика.

Введем дополнительные условия на модель целевой функции:

A5) $m(x, x_1, f(x_1)+c, ..., x_k, f(x_k)+c) = m(x, x_1, f(x_1), \ldots, x_k, f(x_k)) + c$, $k \in \mathbb{N}$, $c \in \mathbb{R}$;

A6) $s(x, x_1, f(x_1)+c, ..., x_k, f(x_k)+c) = s(x, x_1, f(x_1), ..., x_k, f(x_k))$, $k \in N$, $c \in \mathbb{R}$.

И наряду с задачей (2), рассмотрим задачу

$$(m^*, s^*) = \arg \min_{(m,s)\in SM} P(m, s), \tag{3}$$

где $m^* = m_k(x_{k+1})$, $s^* = s_k(x_{k+1})$, $SM = \{(m,s) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}\backslash\mathbb{R}_- : m = m_k(x), s = s_k(x), x \in X\}$. Доказываются следующие теоремы.

Теорема 1. *Если существует дважды непрерывно дифференцируемая функция $P(m,s)$, такая что*

1) для любых функций $m_k(x)$ и $s_k(x)$, удовлетворяющих условиям A1)-A6), выполняется условие $\arg\min_{x\in X} P(m_k(x), s_k(x)) = \arg\min_{x\in X} P(m_k(x)+c, s_k(x))$,

2) для любой точки (m^*, s^*) существуют функции $m_k^*(x)$ и $s_k^*(x)$, удовлетворяющие условиям A1)-A6), такие, что решение задачи (3) достигается в точке (m^*, s^*),

то тогда выполняется $\arg\min_{x\in X} P(m_k(x), s_k(x)) = \arg\min_{x\in X} \left[\overline{C} m_k(x) + p(s_k(x))\right]$,

где $\overline{C} = const$, $p(s)$ — дважды непрерывно дифференцируемая функция.

Теорема 2. *Для того чтобы множество предельных точек последовательности испытаний $\{x_i\}_{i=1}^{\infty}$, порождаемых однородным алгоритмом с критерием*

$P(m_k(x), s_k(x)) = Cm_k(x) + p(s_k(x))$, *совпадало с множеством глобальных минимумов липшицевой функции* $f(x)$ *с константой Липшица* L *на компакте* X *достаточно, чтобы функция* $p(x)$ *была липшицева и* $\min\limits_{x\in X}(P(m_k(x), s_k(x))) \leq$ $\leq \min\limits_{x\in X}\max\limits_{i=\overline{1,k}}(f(x_i) - K\|x - x_i\|)$, *где* $K = const$ *и* $K > L$.

Теорема 3. *Если для функций* $m_k(x)$ *и* $s_k(x)$ *выполняются условия A1)–A6) и дополнительно выполняется условие*

$$A7)\ s_k(x) \geq \min_{i=\overline{1,k}}\|x - x_i\|,$$

то множество предельных точек последовательности испытаний $\{x_i\}_{i=1}^{\infty}$, *порождаемых алгоритмом с функцией* $P(s_k(x), m_k(x)) = m_k(x) - 2Ks_k(x)$, *где* $K > L + L_m$, *а* L_m *— константа Липшица для функции* $m_k(x)$, *будет совпадать с множеством глобальных минимумов липшицевой функции* $f(x)$ *с константой Липшица* L.

Теорема 4. *Если в качестве условия* φ *останова алгоритма выбрать условие* $\min\limits_{i=\overline{1,k}}\|x_i - x_{k+1}\| < \varepsilon$, *где* x_{k+1} *— точка следующего испытания целевой функции, то однородный алгоритм обеспечит решение задачи* (1) *с точностью по значению целевой функции не хуже, чем* $L(L_p + L_m)\varepsilon/(K - L)$, *где* L *— константа Липшица целевой функции, а* L_p *и* L_m *— константы Липшица для функций* $p(s_k(x))$ *и* $m_k(x)$ *соответственно.*

Далее предлагается два способа повышения эффективности однородных алгоритмов за счет снижения трудоемкости построения моделей целевых функций, а также за счет снижения точности решения вспомогательной задачи (2).

Пусть допустимое множество X разбито на подмножества $X = X_1 \cup X_2 \cup \cdots \cup$ $\cup X_M$ и количество точек испытаний внутри каждого подмножества отлично от нуля. Обозначим границу множества X как ∂X, а множеств X_i как ∂X_i. Введем расстояние до внутренней границы подмножества как $\rho_i(x) = \min\limits_{y\in\partial X_i\setminus\partial X}\|x - y\|$.

Теорема 5. *Пусть функции* $m_k^i(x)$, $s_k^i(x)$, $i = \overline{1, M}$, *построенные по результатам испытаний, которые располагаются только внутри подмножества* X_i, *удовлетворяют условиям A1)–A7), и для разбиения допустимого множества существует* $\delta > 0$ *такая, что для любой точки* $x \in X$, *которая принадлежит более чем одному подмножеству* X_i, *выполняется* $\sum\limits_{i:x\in X_i}\rho_i(x) > \delta$. *Тогда функции*

$$\widetilde{m}_k(x) = \left(\sum_{i:x\in X_i}\rho_i(x)m_k^i(x)\right)\Big/\sum_{i:x\in X_i}\rho_i(x),\ \widetilde{s}_k(x) = \left(\sum_{i:x\in X_i}\rho_i(x)s_k^i(x)\right)\Big/\sum_{i:x\in X_i}\rho_i(x)$$

удовлетворяют условиям A1)–A7).

Теорема 6. *Если на k-м шаге не удалось найти точку* x_{k+1} *такую, чтобы выполнялось условие*

$$P_k(x_{k+1}) \leq \min_{i=\overline{1,k}} f(x_i) - \varepsilon, \qquad (4)$$

то задача многоэкстремальной оптимизации (1) *решена с точностью* ε *по значению целевой функции.*

Предлагается алгоритм совместного оценивания константы Липшица и поиска точки следующего испытания x_{k+1}, удовлетворяющей условию (4). В качестве оценки константы Липшица $\hat{L}$ используется выражение $\hat{L} = r \max\limits_{\substack{i,j=\overline{1,k} \\ i \neq j}} |f(x_j) - f(x_i)| / \|x_j - x_i\|$, где r — коэффициент достоверности. Если $k + 1 - 2^{d+1} \leq \arg\min\limits_{i=\overline{1,k}} f(x_i)$, то в качестве текущего коэффициента достоверности используется минимальное значение из ряда $r = 0, 0.1, \ldots 3.0$, при котором локальный поиск из $\arg\min\limits_{x_i, i=\overline{1,k}} f(x_i)$ позволяет найти точку, в которой выполняется условие (4); в противном случае используется текущее значение коэффициента достоверности, который изначально равен 1.0. Локальный поиск запускается из точек, в которых модель целевой функции не соответствует целевой функции, что выражается значением величины $|f(x_i) - m_{i-1}(x_i)| / \left(s_{i-1}(x_i)\hat{L}\right)$, а также из точек минимума липшицевой миноранты, построенной на отрезках, соединяющих каждую точку испытания с ближайшей к ней точкой испытания. Кроме того, локальный поиск запускается из точек, сохраненных в процессе глобального поиска. Если с помощью метода локальной оптимизации определена точка, удовлетворяющая неравенству (4), то поиск прекращается. В противном случае применяется алгоритм глобального поиска на основе адаптивных диагональных кривых с заданной оценкой константы Липшица. При этом любая точка, удовлетворяющая неравенству (4), принимается не сразу, а спустя 1000 итераций алгоритма многоэкстремальной оптимизации для того, чтобы была возможность сформировать непустое множество точек для следующего шага алгоритма. Если с помощью алгоритма глобального поиска не удалось найти точку, удовлетворяющую неравенству (4), то текущее значение коэффициента достоверности увеличивается на 0.1, и алгоритм совместного оценивания константы Липшица и поиска точки следующего испытания запускается сначала.

В п. 2.2 рассматриваются различные модели целевых функций для однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации. Для функции $m_k(x)$ предложены: кусочно-линейная функция на основе триангуляции Делоне (Д), кубический RBF-сплайн (К), логарифмический RBF-сплайн (Л), функция на основе обычного кригинга (О). Для функций $s_k(x)$ предложены: кусочно-квадратичная функция на основе триангуляции Делоне (Д), функция расстояния до ближайшей точки испытания (Р), гладкая аппроксимация функции расстояния до точки ближайшего испытания (Г(1,3,5) — число указывает значение используемого параметра), функция на основе простого кригинга (П). Для всех моделей доказано, что они удовлетворяют условиям A1)-A7).

В п. 2.3 предлагается модель для определения области применения алгоритма многоэкстремальной оптимизации с существенными вспомогательными вычислениями. Показано, что если $\mathcal{B}$ — алгоритм с существенными вспомогательными вы-

числениями, $\mathcal{A}$ — алгоритм с несущественными вспомогательными вычислениями, $N_{\mathcal{A}}$ — количество обращений к целевой функции алгоритмом $\mathcal{A}$, $N_{\mathcal{B}}$ — количество обращений к целевой функции алгоритмом $\mathcal{B}$, T_t — время, необходимое для однократного вычисления целевой функции, T_s — время, затрачиваемое на вспомогательные вычисления алгоритмом $\mathcal{B}$, а время, затрачиваемое на вспомогательные вычисления алгоритмом $\mathcal{A}$, будем полагать нулевым, и $T_t \geq T_s/(N_{\mathcal{A}} - N_{\mathcal{B}})$, тогда суммарное время, затраченное алгоритмом $\mathcal{B}$, меньше, чем суммарное время, затраченное алгоритмом $\mathcal{A}$.

В **третьей главе** приведены результаты вычислительных экспериментов по сравнению предлагаемых однородных алгоритмов с существующими алгоритмами на стандартных наборах тестовых функций. Показаны возможность применения предложенного алгоритма многоэкстремальной оптимизации для решения задач высокой размерности и возможность распараллеливания алгоритма для работы на многоядерных вычислительных системах.

В п. 3.1 описываются условия проведения вычислительных экспериментов. Для тестирования были выбраны распространенные тестовые функции: из набора Dixon-Szego (9 тестовых функций), предложенные В. А. Гришагиным (100 тестовых функций), генерируемые генератором GKLS (10 наборов по 100 тестовых функций в каждом), задача оптимизации конфигурации атомного кластера с потенциальной энергией Морса, задачи размещения радиомаяков в разностно-дальномерной системе посадки, задачи идентификации нелинейной динамической модели. Эксперименты выполнялись на кластере «СКИФ-УРАЛ»: процессоры Intel Xeon E5472 (4 ядра по 12 Гфлопс каждое), каждому процессу выделялось отдельное ядро (кроме результатов в п. 3.8).

В п. 3.2 приведены результаты тестирования моделей липшицевых целевых функций. Были построены 24 однородных алгоритма многоэкстремальной оптимизации с различными моделями целевых функций. Сравнение проводилось на тестовых функциях В. А. Гришагина, наборе Dixon-Szego, двухмерном наборе тестовых функций GKLS. Количество испытаний для всех алгоритмов не превышало 1000.

В табл. 1 представлена сумма (по трем наборам тестовых функций) количества алгоритмов на основе моделей целевых функций, которые в среднем смогли решить тестовую задачу за меньшее количество испытаний, чем алгоритм на основе рассматриваемой модели целевой функции, которая определялась соответствующим выбором функций $m_k(x)$ и $s_k(x)$. Использование этого показателя позволяет сравнивать модели целевых функций на различных наборах тестовых функций с учетом того, что на одном наборе в среднем может требоваться значительно больше испытаний, чем на другом. Наилучший результат показал Однородный Алгоритм с использованием Кубического

Таблица 1

Ранжирование моделей целевых функций

		$m_k(x)$			
		Д	К	Л	О
$s_k(x)$	Д	46	13	23	32
	Р	42	**6**	14	27
	Г1	61	26	38	62
	П	48	20	17	36
	Г3	64	27	32	52
	Г5	53	13	22	54

RBF–сплайна и Расстояния до ближайшей точки испытания (OAKP). По количеству решенных задач и по среднему времени решения задачи оптимизации алгоритм OAKP также оказался лучшим по сравнению с алгоритмами на основе других моделей.

В п. 3.3 приводятся результаты сравнения OAKP с алгоритмами, использующими множественные оценки константы Липшица (DIRECT, DIRECTl, алгоритм на основе адаптивных диагональных кривых). Использование алгоритма OAKP для решения шести тестовых задач из девяти в наборе Dixon–Szego потребовало наименьшего числа испытаний по сравнению с другими алгоритмам. На тестовых функциях GKLS (рис. 1) использование алгоритма OAKP позволило сократить среднее число испытаний на 31-72% (в зависимости от набора тестовых функций) относительно наилучшего из остальных алгоритмов. Согласно модели, предложенной в п. 2.4, и по результатам экспериментов в п. 3.3 алгоритм OAKP целесообразно применять для целевых функций, время вычисления которых более 278 мс ($\approx 3,3 \cdot 10^9$ операций с плавающей запятой).

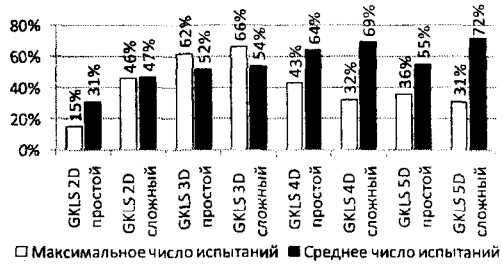


Рис. 1. Снижение количества испытаний при использовании алгоритма OAKP по сравнению с алгоритмом на основе адаптивных диагональных кривых

В п. 3.4 сравнивается алгоритм OAKP с алгоритмами на основе поверхностей отклика (rbfSolve, EGO, ARBF). На тестовых функциях Dixon–Szego применение алгоритма OAKP потребовало меньшего количества обращений к целевой функции на четырех тестовых функциях из девяти. Использование алгоритма OAKP позволило в среднем использовать на 13% меньше испытаний (табл. 2) по сравнению с алгоритмами rbfSolve, EGO и ARBF на тестовых функциях В. А. Гришагина. При этом только применение алгоритма OAKP позволило решить 100% тестовых задач. Согласно модели, предложенной в п. 2.4, и по результатам экспериментов в п. 3.4 алгоритм OAKP целесообразно применять для целевых функций, время вычисления которых более 16 мс ($\approx 1,9 \cdot 10^8$ операций с плавающей запятой).

Таблица 2

Результаты сравнения алгоритма OAKP с алгоритмами из пакета TOMLAB на тестовых функциях В. А. Гришагина

Критерии сравнения	OAKP	RBF1	RBF2	EGO1	EGO2	ARBF
Средн. кол-во испытаний	76,92	286,82	286,67	36,81	38,09	87,99
Макс. кол-во испытаний	349	1000	1000	127	97	225
Средн. время оптим., с	0,17	2563,40	1629,96	81,54	36,20	521,37
Доля решенных задач, %	100	89	90	40	38	98

В п. 3.5 было проведено сравнение алгоритма OAKP с алгоритмами, реализованными в программных комплексах IOSO и LGO. Для сравнения были выбраны

тестовые функции В. А. Гришагина и GKLS. Использование алгоритма OAKP позволило решить 100% предложенных задач, использование алгоритмов из ПК IOSO и LGO позволило решить от 8% до 89% предложенных задач (в зависимости от набора тестовых функций). Применение алгоритма OAKP также позволило снизить среднее число обращений к целевой функции на 66-91% (в зависимости от набора тестовых функций) по сравнению с наилучшим из алгоритмов IOSO и LGO, с помощью которых было решено более 50% функций в наборе тестовых функций (рис. 2, отсутствие столбца в диаграмме означает, что алгоритм решил менее 50% предложенных задач). Согласно модели, предложенной в п. 2.4, и по результатам экспериментов в п. 3.5 алгоритм OAKP целесообразно применять для целевых функций, время вычисления которых более 326.4 мс ($\approx 3,9 \cdot 10^9$ операций с плавающей запятой).

В п. 3.6 представлено сравнение алгоритмов OAKP, IOSO и OPTIMUM по результатам решения трех задач оптимизации размещения радиомаяков (одна задача размерности два и две задачи размерности четыре) и трех задач идентификации нелинейных систем (одна задача размерности три и две задачи второй размерности). Количество испытаний при решении задач о размещении радиомаяков не превышало 1000, при решении задач идентификации — 200. Рандомизированный алгоритм OPTIMUM запускался десять раз. Алгоритмы упорядочивались по минимальному найденному значению целевой функции за все испытания. Алгоритм, с помощью которого было найдено минимальное значение, получал ранг 1, остальные алгоритмы получали последовательные ранги в соответствии с найденными минимальными значениями. На рис. 3 представлен суммарный ранг алгоритмов по всем шести задачам. Во втором сравнении (табл. 3) рассматривались алгоритмы OAKP, IOSO и OPTIMUM (медианное значение найденного минимума целевой функции из десяти запусков).

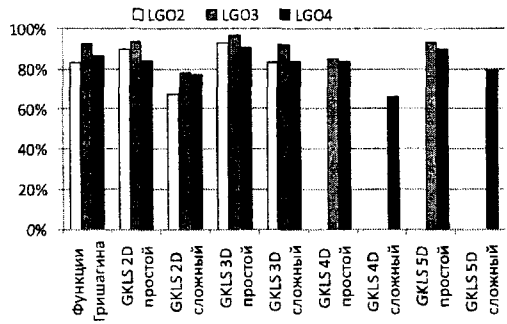


Рис. 2. Снижение среднего количества обращений к целевой функции для различных наборах тестовых функций при использовании алгоритма OAKP по сравнению с алгоритмами LGO

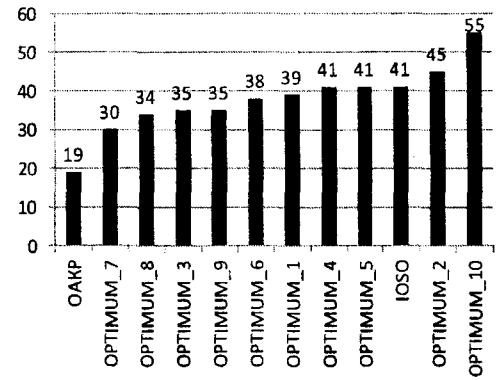


Рис. 3. Суммарный ранг алгоритмов

Таблица 3

Ранги алгоритмов при решении задач оптимизации размещения радиомаяков и идентификации нелинейной модели

Алгоритм	4 РМ	5 РМ	6 РМ	Прямое время	Обратное время $N = 20$	Обратное время $N = 100$	Сумма
OAKP	1	2	1	1	1	1	7
IOSO	3	1	2	2	2	3	13
OPTIMUM	2	3	3	3	3	2	16

Сравнение алгоритмов OAKP, IOSO и OPTIMUM показало, что алгоритм OAKP оказался наиболее эффективным при решении задачи оптимизации расположения радиомаяков в разностно-дальномерной системе посадки ЛА и в задаче идентификации нелинейной динамической системы.

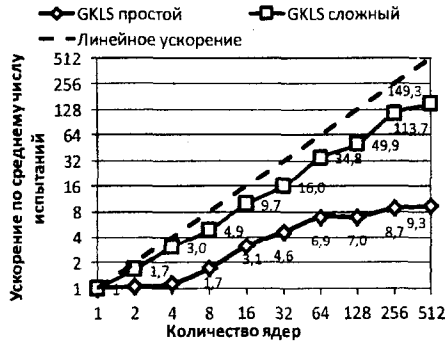
В п. 3.7 для решения задач высокой размерности представлена модификация алгоритма OAKP, которая заключается в том, что для решения вспомогательной задачи используется только алгоритм локальной оптимизации и первоначальные точки выбираются согласно латинского гиперкуба (число точек — $3d$, где d — размерность пространства). Модифицированный алгоритм сравнивался с алгоритмом на основе метода неравномерных покрытий на тестовой функции, описывающей потенциал Морса для кластера атомов в трехмерном пространстве. Рассматривались две серии тестовых задач: минимизировалась непосредственно потенциальная энергия для размерностей 6, 9 и 12 и минимизировалось значение, получаемое алгоритмом локальной оптимизации, который запускался из точки, определяемой алгоритмом многоэкстремальной оптимизации для размерностей 6, 9, 12, 15, 18, 21, 24, 27, 33, 45. Число испытаний в первой серии задач было ограничено 5000, во второй — 200. Все алгоритмы ранжировались по числу затраченных испытаний для поиска глобального минимума с заданной точностью. Алгоритм исключался из ранжирования, если его применение не позволило найти глобальный минимум. Алгоритм OAKP получил средний ранг 2.5, модифицированный алгоритм OAKP — 1.2, наилучший из алгоритмов на основе метода неравномерных покрытий — 2.5.

В п. 3.8 рассматривается параллельная реализация алгоритма OAKP. Задача (1) декомпозируется на P подзадач $f(x) \to \min\limits_{x \in X_p}$, где P — число доступных ядер, $X = X_1 \bigcup X_2 \bigcup \ldots \bigcup X_p$, и $X_i \bigcap X_j = \partial X_i \bigcap \partial X_j$, если $i \neq j$, $i, j = \overline{1, P}$. Каждая подзадача решалась алгоритмом OAKP на отдельном ядре. Реализация этого алгоритма предусматривает завершение всех процессов, если хотя бы один нашел глобальный минимум. Тестирование алгоритма (рис. 4) на различном числе ядер на тестовых функциях GKLS продемонстрировало возможность использование алгоритма OAKP на многоядерных системах. Сверхлинейное ускорение параллельного алгоритма по времени на «сложном»наборе тестовых функций достигается за счет того, что с ростом количества испытаний общее время, затрачиваемое на вспомогательные операции алгоритмом OAKP, растет квадратично.

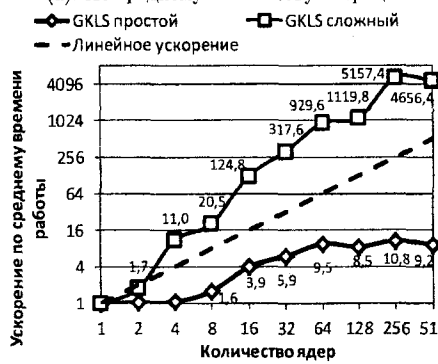
В **четвертой главе** представлено описание программного комплекса для решения задач многоэкстремальной оптимизации и проведения вычислительных экс-

периментов с однородными алгоритмами многоэкстремальной оптимизации и моделями целевых функций.

В п. 4.1 представлено описание архитектуры программного комплекса, дано подробное описание всех входящих в его состав компонент. Общее количество строк исходного кода программного комплекса — более 7000. Программный комплекс позволяет решать оптимизационные задачи, а также выполнять пакетные запуски для решения серии оптимизационных задач и по результатам таких запусков автоматически строить диаграммы операционных характеристик и минимального достигнутого значения.



(а). По среднему количеству итераций



(б). По среднему времени решения

Рис. 4. Ускорение параллельного алгоритма

В п. 4.2 приведен пример использования программного комплекса для проведения вычислительного эксперимента по сравнению алгоритмов многоэкстремальной оптимизации. На тестовых функциях В. А. Гришагина было выполнено сравнение алгоритма на основе адаптивных диагональных кривых, алгоритма на основе метода неравномерных покрытий, однородного алгоритма. По результатам тестирования на основе операционной диаграммы и диаграммы достигнутого минимального значения сделан вывод о преимуществе однородного алгоритма многоэкстремальной оптимизации при решении тестовых задач В. А. Гришагина.

В **заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы, выносимые на защиту.

В **приложении А** представлено описание задач о размещении радиомаяков и идентификации нелинейной динамической системы.

Основные результаты диссертационной работы

1. Предложен класс однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации, в рамках которого представимы многие существующие численные методы для решения задач многоэкстремальной оптимизации. Для построение новых численных методов и алгоритмов решения задач многоэкстремальной оптимизации в классе однородных алгоритмов достаточно выбрать модель липшицевой целевой

функции, которая должна удовлетворять сформулированным требованиям. Доказаны достаточные условия сходимости однородных алгоритмов к глобальному минимуму, обосновано условие останова алгоритма. Разработаны методы снижения трудоемкости решения вспомогательных задач: построения моделей целевых функций и решения вспомогательной задачи оптимизации, что позволяет решать задачи с десятками тысяч испытаний целевой функции.

2. Для однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации предложены модели липшицевых целевых функций. Доказано, что их использование позволяет построить алгоритмы, удовлетворяющие условиям сходимости к глобальному минимуму. По результатам вычислительного эксперимента в качестве модели целевой функции рекомендуется использовать для функции $m_k(x)$ — кубический RBF-сплайн, а для функции $s_k(x)$ — расстояние до ближайшего испытания.

3. Разработан однородный алгоритм многоэкстремальной оптимизации. Сравнение его с различными алгоритмами многоэкстремальной оптимизации на различных тестовых функциях, задаче размещения радиомаяков в разностно-дальномерной системе навигации и задаче идентификации нелинейной модели подтвердило высокую эффективность предложенного алгоритма. По результатам вычислительного эксперимента установлено, что область применения предложенного алгоритма — многомерные (размерность до 6) задачи многоэкстремальной оптимизации с целевой функцией, время вычисления которой превышает 327 мс ($\approx 3,9 \cdot 10^9$ операций с плавающей запятой). Предложены две модификации алгоритма: для задач высокой размерности (решена задача 45 размерности) и для многоядерных вычислительных систем (продемонстрирована работа на 512 ядрах).

4. Спроектирован и реализован программный комплекс (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2010616850 от 14.10.2010) для решения задач многоэкстремальной оптимизации и проведения вычислительного эксперимента с однородными алгоритмами многоэкстремальной оптимизации и моделями липшицевых целевых функций.

Основные публикации по теме диссертации

Статьи, опубликованные в ведущих рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК:

1. *Антонов, М.О.* Нахождение оптимального расположения радиомаяков в разностно-дальномерной системе посадки летательного аппарата / М.О. Антонов, С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // Авиакосмическое приборостроение. – 2005. – № 11. – С. 41–45.

2. *Елсаков, С.М.* О многоэкстремальности в задачах оценивания состояния систем детерминированного хаоса / С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // Вестник ЮУрГУ. Сер. Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. – 2009. – № 3. С. 37–41.

3. *Елсаков, С.М.* Однородные алгоритмы многоэкстремальной оптимизации / С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2010. – № 10. С. 1727–1740.

4. *Елсаков, С.М.* Однородные алгори
ции для целевых функций со значительнь
С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // Вычислител
2011. – № 1. – С. 52–73.

Другие научные

5. *Елсаков, С.М.* Об однородных алгоритмах глобальной оптимизации / С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // Информ. бюллетень Ассоциации математического программирования. №11. Конф. «Математическое программирование и приложения». Научн. издание. – Екатеринбург: УрО РАН, 2007. – С. 37–38.

6. *Елсаков, С.М.* Однородные алгоритмы многоэкстремальной оптимизации на основе сплайнов / С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // Современные проблемы вычислительной математики и математической физики: Междунар. конф. Москва, МГУ им. М.В.Ломоносова, 16-18 июня 2009 г.: Тез. докл. – М.: Изд. отд. фак. ВМК МГУ им. М.В. Ломоносова: МАКС Пресс, 2009. – С. 49–50.

7. *Елсаков, С.М.* Алгоритмы многомерной глобальной оптимизации на основе RBF-сплайнов / С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // Забабахинские научные чтения: сб. матер. X Междунар. конф. 15-19 марта 2010. – Снежинск: Изд-во РФЯЦ-ВНИИТФ, 2010. – С. 292–294.

8. *Елсаков, С.М.* Однородный алгоритм глобальной оптимизации с использованием вспомогательной модели для целевой функции / С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // VI Московская Междунар. конф. по исследованию операций (ORM2010). – М.: МАКС Пресс, 2010. – С. 230–232.

9. *Елсаков, С.М.* Повышение эффективности однородных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации для решения задач с большим временем вычисления значения целевой функции / С.М. Елсаков // Информ. бюллетень Ассоциации математического программирования №12. Конф. «Математическое программирование и приложения». Научн. издание. – Екатеринбург: УрО РАН, 2011. – С. 32–33.

10. *Elsakov, S.M.* Homogeneous algorithms of global optimization / S.M. Elsakov, V.I. Shiryaev // Abstracts of International conference «Optimization and applications (OPTIMA-2009)». – Montenegro: Dorodnicyn computing center of RAS, 2009. – P. 23–24.

11. *Elsakov, S.M.* Linear Homogeneous Algorithms of Global Optimization / S.M. Elsakov, V.I. Shiryaev // Global Optimization: Theory, Methods & Applications. Series Lecture notes in decision science. Vol. 12. – Hong Kong, London, Tokyo: Global-Link Publisher, 2009. – P. 241–247.

Типография «Два комсомольца»
Подписано в печать 20.10.2011. Формат 60 × 84 1/16.
Печать цифровая. Усл. печ. л. 0,86. Уч.-изд. л. 1.
Тираж 100 экз. Заказ 143/249.
Отпечатано в типографии «Два Комсомольца».
454008 г. Челябинск, Комсомольский пр., 2, оф. 207