УДК 681.519

Метод сжимающихся интервалов на регулярной сетке для поиска глобального минимума

A method of compressible intervals on a regular grid to find the global minimum

Астапкович / Astapkovich A.
Александр Михайлович
(tatalex2@gmail.com)
кандидат технических наук.
ГЕОСКАН (ООО "ПЛАЗ"),
ведущий специалист.
г. Санкт-Петербург

Бутырский / Butyrsky E.
Евгений Юрьевич
(evgenira88@mail.ru)
доктор физико-математических наук, профессор,
заслуженный работник высшей школы РФ.
ФГКВОУ ВО ВУНЦ ВМФ «Военно-морская академия имени Адмирала Флота Советского Союза Н. Г. Кузнецова» МО РФ (ВМА им. Н. Г. Кузнецова).
Военно-морской политехнический институт (ВМПИ),
профессор кафедры гидроакустики.
г. Санкт-Петербург

Шкатов / Shkatov A.
Антон Вячеславович
(a.shkatov@bk.ru)
кандидат технических наук.
ГЕОСКАН (ООО "ПЛАЗ"),
ведущий специалист, заместитель руководителя отдела.
г. Санкт-Петербург

Васильев / Vasiliev V.
Валерий Васильевич
(valeronvazilevs@yandex.ru)
кандидат физико-математических наук.
ВМПИ ВМА им. Н. Г. Кузнецова,
заместитель начальника кафедры гидроакустики.
г. Санкт-Петербург

Ключевые слова: парадигма – paradigm; оптимум – optimum; минимум – minimum; алгоритм – algorithm; интервал неопределенности – uncertainty interval.

В статье рассматривается класс методов поиска глобального минимума для скалярной целевой функции многих переменных при наличии параллелепипедных ограничений. Предлагаемый подход существенным способом базируется на парадигме Канторовича. Задача параметрической идентификации формулируется как задача определения параметров аналитического описания с одновременной оценкой верхней и нижней границ для интервалов значений оцениваемых параметров. Описанный класс методов ориентирован на задачи системного анализа и параметрической идентификации в интервальной постановке. Ключевыми особенностями являются сходимость метода за конечное и заранее рассчитываемое количество шагов и возможности реализации на вычислителях с параллельной архитектурой. В работе рассмотрены ключевые особенности и варианты формулировки оптимизационных задач в интервальной постановке. Приводятся результаты решения тестовых задач.

The paper describes a class of methods for finding the global minimum for a scalar objective function of many variables in the presence of parallellipiped constraints. The proposed approach is essentially based on Kantorovich's paradigm. The problem of parametric identification is formulated as the problem of determining the parameters of the analytical description with the simultaneous assessment of the upper and lower boundaries for the intervals of the values of the evaluated parameters. The described class of methods is focused on the tasks of system analysis and parametric identification in interval setting. The key features are the convergence of the method for a finite and pre-calculated number of steps and the possibility of implementation on computers with a parallel architecture. The paper discusses the key features and variants of formulation of optimization problems in interval formulation. The results of solving test problems are presented.

Введение

В работе описывается класс методов поиска глобального минимума для скалярной целевой функции многих переменных в заданном интервале значений переменных. Метод разработан для решения оптимизационных задач системного анализа и параметрической идентификации.

Предлагаемый подход существенным способом базируется на парадигме Канторовича [1]. В этой работе задача параметрической идентификации формулируется как задача определения параметров аналитического описания с одновременной оценкой верхней и нижней границ для интервалов значений оцениваемых параметров. Далее для идентификации такого способа описания оптимизационной задачи используется определение «интервальный».

Такая постановка существенно опередила свое время, в первую очередь в части возможностей вычислительной техники. Современные тенденции в области вычислительной техники выражаются во взрывном росте производительности по числу операций как для монокристальных многоядерных решений, так для сетевых кластерных систем. Это открывает ряд новых возможностей для задач системного анализа, параметрической идентификации, распознавания образов и т. д. в постановке Канторовича. Обзор современного состояния в этой области выполнен в работе [2].

Оптимизационная задача в интервальной постановке:

$$\mathrm{globmin}\, \mathrm{F}(\mathrm{X}) \left\{ \mathrm{xL0}_i \le \mathrm{x}_i \le \mathrm{xR0}_i \right\} \ \mathrm{X}$$

где $\mathrm{F(X)}$ – целевая функция, (1)

$$\mathrm{D}_i(\mathrm{X}_i) < \mathrm{Dmin}_i, \quad i = 1 \ldots N$$

N – число переменных; (2)

$\mathrm{D}_i(\mathrm{X}_i) = [\mathrm{xR}_i - \mathrm{xL}_i]$ – представляет собой интервал неопределенности для i-й переменной

$\mathrm{xL0}_i, \mathrm{xR0}_i$ – левая и правая границы исходного интервала неопределенности для i-ой переменной

Обозначение globmin F(X) в (1) обозначает абсолютный минимум, что допускает, что на исходной области неопределенности могут быть локальные минимумы. Таким образом, не предполагается, что целевая функция является унимодальной.

Для системы ограничений вида (2) в литературе используются разные определения: «параллелепипедная» [3], «ограничения в виде бруса» [4] и т. п. В интервальной постановке оптимизационная задача подразумевает двоякое использование границ интервалов xR_i и xL_i. В терминах теории методов нелинейного программирования это ограничения области, на которой требуется определить минимум функции. В интервальной постановке в формулировке (2) требуется определить границы области.

Соответственно, их следует рассматривать как переменные, которые влияют на значение целевой функции косвенным образом. С практической точки зрения значения интервалов неопределенности $\mathrm{D}_i(\mathrm{X}_i)$ можно трактовать как точность определения оптимальных значений переменных. Без ограничения общности можно принять, что значения переменных находятся в интервале неопределенности с границами [0, 1]. Это обеспечивается соответствующим масштабированием переменных исходной прикладной задачи. Описываемый класс методов базируется на использовании интервальной формулировке оптимизационной задачи (1)–(2). Для его идентификации используется определение «методы сжимающихся интервалов».

Оптимизационные задачи для невыпуклых и не унимодальных целевых функций требуют использование того или иного варианта перебора. В силу этого размерность пространства переменных $N < 5 \div 10$ сравнительно небольшая. Предлагаемый подход базируется на разных вариантах реализации алгоритмов перебора, обеспечивающих эффективную реализацию на многоядерных или кластерных вычислительных структурах.

В работе рассматриваются разные варианты реализации единого подхода. При этом важно различать два разных типа прикладных задач: с известным минимальным значением целевой функции и с произвольным значением.

Концепция метода сжимающихся интервалов

Ключевую идею предлагаемого подхода рассмотрим применительно к задаче поиска глобального минимума для скалярной функции одной переменной. При рассмотрении многомерного аналога будут описаны варианты его реализации. Ближайшим аналогом алгоритма является метод «сжимающего перебора», описанный в работе [3]. Это эвристический алгоритм, который представляет собой вариант метода случайного перебора для поиска глобального минимума функции одной переменной произвольного вида. Существенно, что этот алгоритм фактически использует интервальную формулировку (1)–(2) для задачи поиска глобального минимума на заданном интервале значений.

Алгоритм в пошаговом режиме производит последовательное сжатие интервала. Для этого используется набор точек внутри текущего интервала, генерируемых случайным образом. Границы нового интервала назначаются исходя из найденной точки Xmin (точки минимума функции). В качестве новых границ интервала берутся точки, соседние с точкой Xmin. Когда размер интервала становится меньше заданного порогового значения, поиск завершается. Главный недостаток этого метода заключается в том, что метод при наличии нескольких локальных минимумов может сходится к точке локального минимума. При этом использование случайного набора точек внутри текущего интервала неопределенности означает, что исход применения этого метода в смысле решения оптимизационной задачи является вероятностной величиной.

Применительно к задачам параметрической идентификации в режиме реального времени метод сжима-

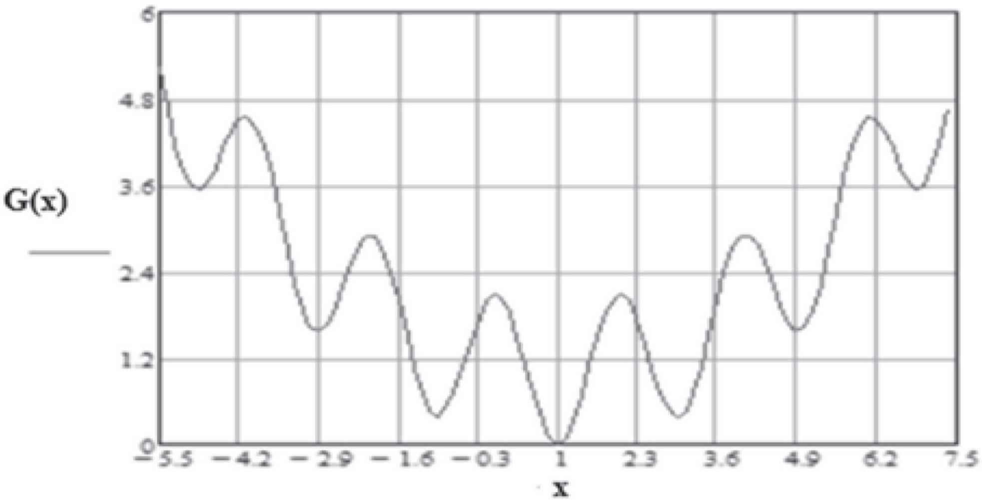
1 2024 2.indd 92 21.03.2024 15:29:56

ющего перебора имеет другой важный недостаток. Для таких систем критически важно обеспечить оценку параметров за время, не превышающее заданное пороговое значение. Это время при исходном варианте метода «сжимающего перебора» становится случайной величиной. Это делает использование исходного варианта метода проблематичным, особенно если учесть необходимость использования его как основу для многомерных задач.

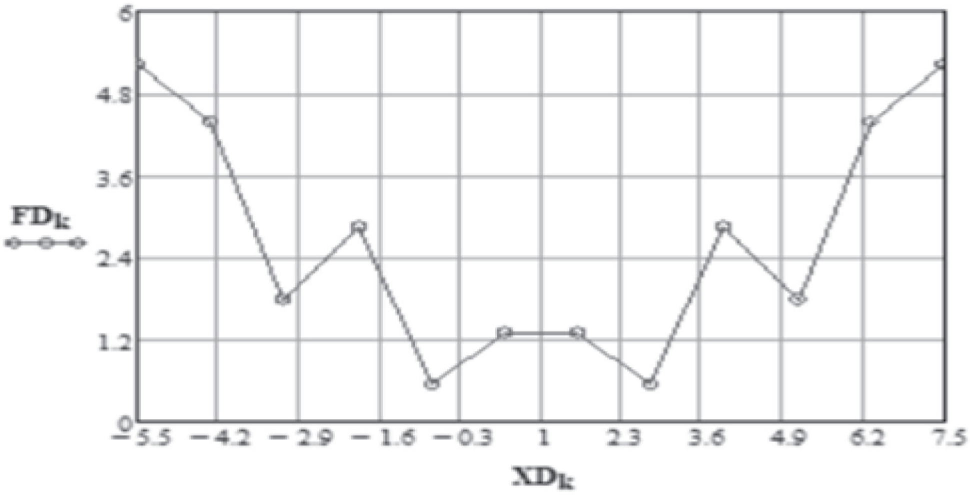
Для иллюстрации будет использована модифицированная тестовая функция из [2], представленная на рис. 1а). Модификация заключается в добавлении константы +1 к значению функции с тем, чтобы в точке минимума функция принимала значение 0. Кроме этого, в иллюстративных целях изменены границы интервалов.

Как следует из рис. 1а), исходная тестовая функция на интервале [-5.5, 7.5] имеет 7 локальных минимумов. Попутно следует отметить, что альтернативы интервальной постановке задачи поиска глобального минимума нет. Действительно, использование другого интервала, например, [2, 7.5] для этой же функции дает как другое количество локальных минимумов, так и другое значение аргумента, соответствующего минимуму функции.

Использование случайного набора точек, как в методе «сжимающего» перебора, имеет достаточно большую вероятность после первого шага получить границы интервала в окрестности одного из 7 локальных минимумов. Фактически это означает, что глобальный минимум при использовании метода сжимающего перебора



а) тестовая функция



b) дискретные значения функции $FD_k=G(XD_k)$ для NPOINT=11

Рис 1. Тестовая функция $G(x) = 0.1(x-1)^2 - \cos(\pi(x-1)) + 1 \times x = [-5.5, 7.5]$

обнаружен не будет. Метод сжимающихся интервалов использует конечный набор точек, равномерно распределенных внутри текущего интервала неопределенности. В этой части метод родственен методу, описанному в [3]. Отличие заключается в алгоритме корректировки границ интервалов. Как следует из рис. 1b), даже для равномерной сетки с числом узлов 11 количество фиксируемых минимумов на интервале [-5.5, 7.5] уменьшается до 4. При этом в данном случае не фиксируется наличие глобального минимума.

Одномерный метод сжимающихся интервалов реализуется как конечная последовательность шагов. На каждом шаге сначала на дискретной сетке значений внутри текущего интервала неопределенности фиксируется значение переменной   для (1). Далее с использованием этой информации осуществляется уменьшение интервала неопределенности, что обеспечивает в конечном счете выполнение условия (2). Эта особенность предопределила название «метод сжимающегося интервала на регулярной сетке». Метод сжимающихся интервалов на регулярной сетке заключается в пошаговой корректировке границ интервала неопределенности на величину текущего шага регулярной сетки. Алгоритм корректировки границ иллюстрирует рис. 2.

Для корректировки границ используется значение функции в середине текущего интервала неопределенности $\mathrm{Gmid} = \mathrm{G(Xmid)}$. Эти значения сравниваются с минимальным значением функции в узлах регулярной сетки. На каждом шаге это значение сравнивается со значением функции в середине интервала G(Xmid) и его положение относительно текущего значения центра интервала неопределенности Xmean. По результатам анализа производится уменьшение интервала неопределенности путем изменения границ интервала на величину шага регулярной сетки, умноженного на коэффициент ускорения *Kd*.

Алгоритм корректировки границ интервала неопределенности:

Шаг 0. Задается начальное описание интервала неопределенности и параметры метода.

$[\mathrm{XL0}, \mathrm{XR0}]$ − начальные границы интервала неопределенности, и $\mathrm{XR0} > \mathrm{XL0}$;

$D_0 = \mathrm{XR0} - \mathrm{XL0}$ − размер начального интервала неопределенности;

$N\mathrm{p}$ − число точек регулярной сетки внутри интервала неопределенности;

Kd − параметр скорости сжатия;

Dmin = EPS − пороговое значение интервала неопределенности.

Шаг 1. Генерируется массив значений аргументов с шагом

$$\mathrm{H} = \frac{\mathrm{XR} - \mathrm{XL}}{N\mathrm{p}}, \quad \mathrm{X_i} = \mathrm{XL} + i \times \mathrm{H} \ \text{ для } \ i = 0 \ldots N\mathrm{p} - 1$$

Рис. 2. Алгоритм корректировки границ

Производится расчет массива значений целевой функции $F(X)$.

Шаг 2. Массивы X и G используются для нахождения пары $Xmin$ и $Gmin = G(Xmin)$, где Gmin имеет минимальное значение.

Шаг 3. Корректировка границ интервала неопределенности путем сравнения значений Xmin и Gmin(Xmin) со значениями в середине интервала

$$Xmean = \frac{XL + XR}{2} \text{ и } Gmean = G(Xmean)$$

по следующим правилам:

если $(Gmin \geq Gmid)$, то $XL = XL + \frac{Kd \cdot H}{2}$, $XR = XR - \frac{Kd * H}{2}$;

если $(Gmin < Gmid) \& (Xmin < Xmid)$, то $XR = XR - Kd \times H$;

если $(Gmin < Gmid) \& (Xmin > Xmid)$, то $XL = XL + Kd \times H$;

Шаг 4. Производится проверка критерия остановки для нового размера интервала неопределённости на m-м шаге $Dm = (XR - XL)$:

– если $(Dm < Dmin$ или $Dm = Dmin)$, то процедура поиска минимума завершается переходом к шагу 5;

– если $(Dm > Dmin)$, то осуществляется переход к шагу 1.

Шаг 5. Оценка точности полученного решения с использованием значений Gmin и Dm.

Если имеется априорная информация о пороговом значении целевой функции Gres, то алгоритм изменяется следующим образом:

Шаг 4. Производится проверка критерия остановки на m-м шаге $(Gmin < Gres)$:

– если $(Gmin < Gres)$, то процедура поиска минимума завершается переходом шагу 5;

– если $(Gmin > Gres)$, то осуществляется переход к шагу 1.

Шаг 5. Производится проверка критерия остановки для нового размера интервала неопределенности на m-м шаге $Dm = (XR - XL)$:

– если $(Dm < Dmin$ или $Dm = Dmin)$, то процедура поиска минимума завершается переходом к шагу 6;

– если $(Dm > Dmin)$, то осуществляется переход к шагу 1.

Шаг 6. Оценка точности полученного решения с использованием значений Gmin и Dm.

Ключевое отличие метода заключается в корректировке границ интервала неопределенности с последовательным уменьшением шага сетки. При этом имеется четкий критерий завершения итераций в виде условия (2).

Параметрами алгоритма являются: Np – количество точек регулярной сетки и Kd – коэффициент ускорения. Эти параметры выбираются из специфики конкретной прикладной задачи.

Сходимость метода сжимающихся интервалов на регулярной сетке

Ключевое достоинство алгоритма сжимающихся интервалов на регулярной сетке применительно к задаче (1)–(2) заключается в том, что он реализуется за конечное число шагов.

Как следует из описания алгоритма в качестве исходных данных на m-м шаге используется текущее значение для границ интервала неопределенности XL_m и XR_m. Соответственно, интервал неопределенности равен:

$$D_m = XR_m - XL_m. \tag{3}$$

Для определения минимума используется набор из Np значений целевой функции на равномерной сетке внутри интервала неопределенности, включая границы. Таким образом, исходный интервал неопределенности разбивается на $(N\text{p} - 1)$ одинаковых подынтервалов размером

$$H_m = \frac{D_m}{(N\text{p} - 1)}. \tag{4}$$

Массив значений целевой функции в узлах сетки используется для определения значение аргумента $Xmin$, при котором целевая функция принимает минимальное значение $Gmin = G(Xmin)$. Логика алгоритма такая, что для всех возможных результатов обработки происходит уменьшение интервала неопределенности на величину H_m

$$D_{m+1} = (XR_{m+1} - XL_{m+1}) = D_m - H_m \tag{5}$$

Таким образом, шаг сетки уменьшается в геометрической прогрессии с показателем

$$q = \frac{D_{m+1}}{D_m} - \frac{D_m Kd * H_m}{D_m} = 1 - \frac{Kd}{N_P - 1}. \tag{6}$$

Соответственно, абсолютное значение для интервала неопределенности на m-м шаге равно

$$D_m = D_0 q^{(m)} = D_0 \times \left(1 - \frac{Kd}{N_p - 1}\right)^m, \tag{7}$$

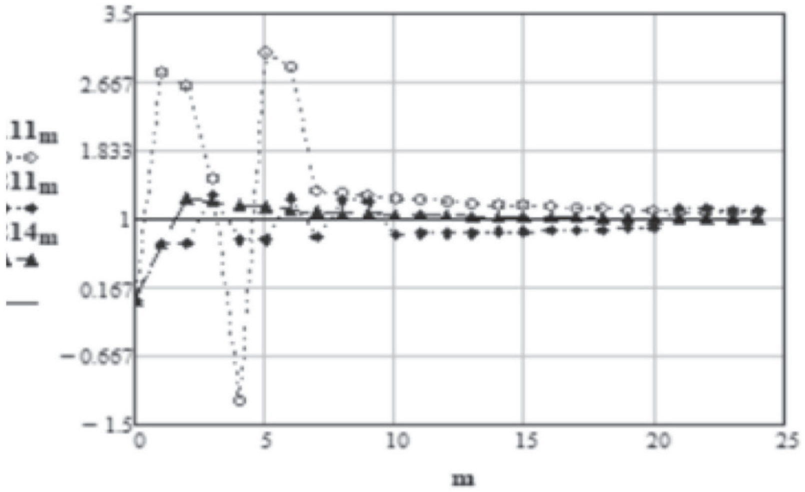
где D_0 – начальное значение интервала неопределенности.

Из соотношения (7) получаем выражение для числа шагов, необходимых для уменьшения исходного интервала неопределенности D_0 до требуемого D_m

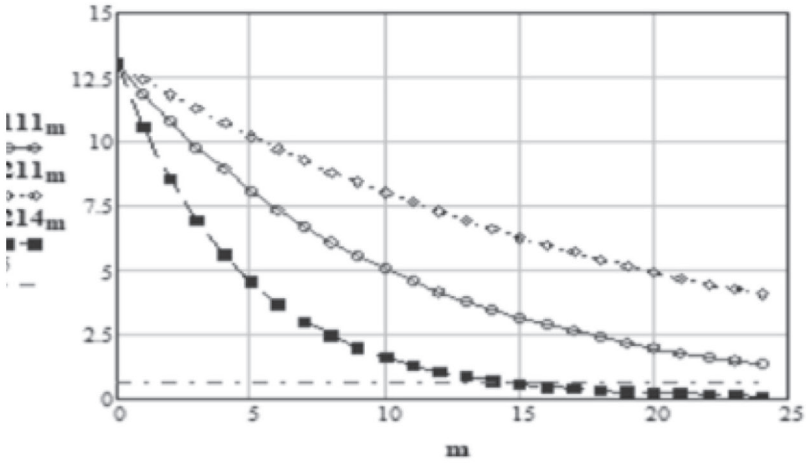
$$m(Dm = Dmin) = \frac{\log(D_m / D_0)}{\log(1 - Kd / (N\text{p} - 1))}. \tag{8}$$

Где $Dm = EPS$ – пороговое значение для интервала неопределенности.

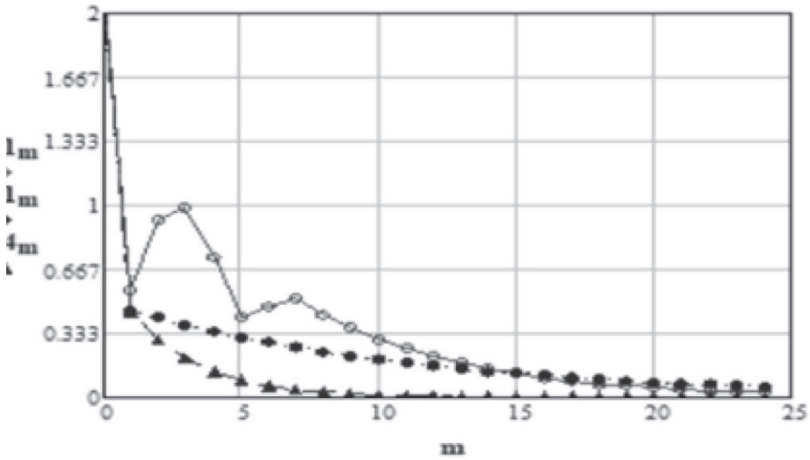
Выражение (7) дает возможность рассчитать количество необходимых вызовов функции для одного параметра



a) значение аргумента для минимального значения на шаге m



a) интервал неопределенности на шаге m



b) минимальное значение функции на сетке на шаге m

Рис. 3. Иллюстрация к алгоритму сжимающихся интервалов на регулярной сетке для тестовой задачи

$$N\text{fun} = m(\text{EPS}) \times N\text{p}\,. \tag{9}$$

Соответственно, в предположении, что используется одинаковое количество точек регулярной сетки для N-мерной задачи, число вычислений функции равно

$$N\text{fun} = m \times (N\text{p})^N \tag{10}$$

Таким образом, цепочка (3)–(10) является доказательством сходимости метода сжимающихся интервалов для решения задачи поиска глобального минимума в интервальной постановке. Следует отметить, что для систем реального времени (10) дает возможность оценить время на решение задачи (1)–(2). А это, в свою очередь, дает возможность выработки спецификации на вычислительные ресурсы встроенной системы управления, включая архитектуру вычислителя.

Одномерная тестовая задача

Для иллюстрации особенностей интервальной постановки задачи для поиска глобального минимума (1)–(2) и интерпретации результатов рассмотрим результаты применения метода сжимающихся интервалов к тестовой функции с рис. 1. Эта функция имеет минимальное значение $G(\text{Xmin}) = 0$ в точке $\text{Xmin} = 1$. В целях наглядности масштабирование функции в целях приведения к единичному интервалу не используется.

Видно, что приближение к минимальному значению функции и аргумента носит немонотонный характер рис. 3b) при том, что величина интервала неопределенности монотонно уменьшается в соответствии с (7). Согласно (8) число шагов m, которое необходимо для уменьшения интервала неопределенности с $D_0 = 12$ до Dmin = 0.6 для Np = 21 и Kd = 4 равно 14. На рис. 3c) для иллюстрации выведено пороговое значение для интервала неопределённости $\text{Dmin} = 0.6$, которое пересекает кривую изменения интервала неопределенности в точке $\text{m} = 14$.

Как следует из рис. 2–3, метод сжимающихся интервалов на регулярной сетке обеспечивает нахождение минимального значения аргумента для функции, имеющей 7 локальных минимумов. Алгоритм сходится к глобальному минимуму в точке $\text{Xmin} = 1$ и обеспечивает сужение интервала неопределенности до назначенного значения. Численные результаты для разных значений параметров алгоритма Np и Kd метода приведены в табл. 1.

Следует подчеркнуть, что пороговое значение для интервала неопределенности Dmin является одним из возможных критериев завершения итераций. При этом значение D_0 характеризует априорную неопределенность о значении переменной. Эта неопределенность может быть уменьшена до любого назначенного значения Dmin. Соответственно, чем меньше значение D_0,тем меньше итераций потребуется.

При анализе результатов решения оптимизационной задачи в интервальной постановке следует

Параметры алгоритма:

$\text{D0} = [-5.5, 7.5] = 12$ исходный интервал неопределенности;

D_{min} – специфицированное значение интервала неопределенности;

x111: NPOINT = 11; Kd= 1; m(Dmin) =29 ; (x - X, D,G)

x211: NPOINT = 21; Kd= 1; m(Dmin) =58 ; (x - X, D,G)

x214: NPOINT = 21; Kd= 4 ;m(Dmin) =14 ; (x - X, D,G)

Таблица 1

Результат решения тестовой задачи

$$\mathbf{G(x) = 0.1(x-1)^2 - \cos(\pi\,(x-1)) + 1 \quad x = [-5.5, 7.5]\, D_0 = 12 \quad Xmin = 1 \quad G(Xmin) = 0}$$

ПАРАМЕТРЫ	XL_m	XR_m	Xmin*	G(Xmin*)	Xmid	G(Xmid)
***N*p=11 Kd=1**	-0.712	2.712	1.171	0.144	1	0
***N*p=21 Kd=1**	-2.283	4.283	0.836	0.133	1	0
***N*p=21 Kd=4**	0.663	1.337	1.02	0.002	1	0

*минимальное значение аргумента на сетке значений учитывать, что в этом случае результатом является как интервал значений переменной, так и значение целевой функции.

В зависимости от прикладной задачи возможны разные варианты оценки результата в виде значения целевой функции G(Xmin). Для задач системного анализа это значение представляет самостоятельную ценность вне зависимости от его значения.

При этом представляется естественным использовать в качестве значения переменной как фактическое значение, которое определяется по Nр точкам, так и значение, соответствующее середине текущего интервала неопределенности

$$\mathrm{Xmid} = (\mathrm{XR}_m + \mathrm{XL}_m) \times 0.5 \text{ интервала.}$$

Как следует из данных, приведенных в табл. 1, использование среднего значения в качестве минимального значения обеспечивает точное решение рассматриваемой тестовой задачи, хотя при этом величина интервала неопределенности остается относительно большой.

В зависимости от постановки задачи в ряде случаев может оказаться полезной информация о значении целевой функции на границах интервала неопределенности. Это позволяет судить об устойчивости найденного значения.

Для задач параметрической идентификации целевая функция является мерой несоответствия данным измерения и расчетным данным с использованием набора функций с неизвестными параметрами. В идеальном случае минимальное значение функции точно известно, и оно равно нулю. Большое значение для целевой функции в точке минимума играет роль несоответствие модели имеющимся экспериментальным данным. Таким образом, метод может использоваться как полезный инструмент при разработке моделей.

Двумерная унимодальная функция

Обзору современных подходов и методов для решения многомерных оптимизационных задач посвящена монография [5].

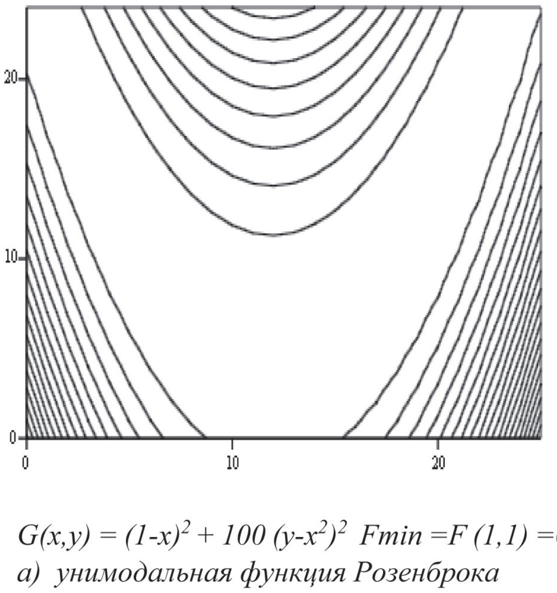
Рассмотрим особенности реализации предлагаемого подхода и алгоритмов на его основе применительно к многомерным задачам. Для это рассмотрим варианты реализации метода сжимающихся интервалов применительно к двумерным целевым функциям.

Для задачи параметрической идентификации в оптимизационной формулировке значение целевой функции является мерой точности описания имеющихся экспериментальных данных используемой моделью. Соответственно, в идеале целевая функция для Xmin имеет минимальное значение:

$$\mathrm{F(Xmin)} = 0\,.$$

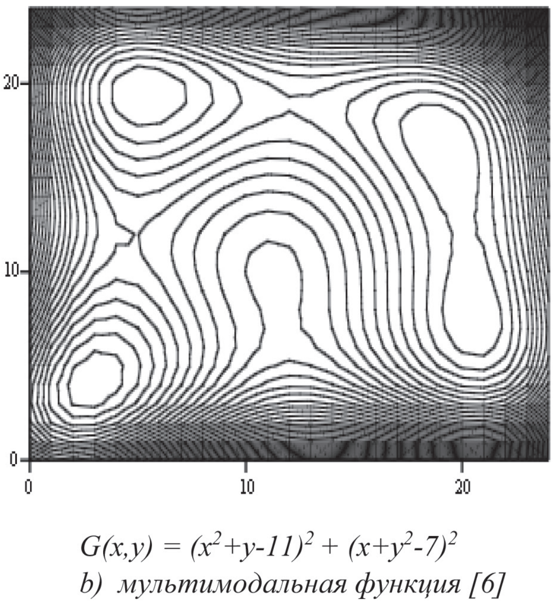
Этот случай соответствует точному соответствию идентифицируемой модели экспериментальным данным. Таким образом, параметрическая идентификация является как инструментом для разработки моделей на качественном уровне, так и методом оценки значений параметров модели.

Для задач системного анализа оптимальное значение целевой функции важно само по себе, но заранее неизвестно. В этом случае выполнение условия (2) является ключевым критерием остановки.



$G(x,y) = (1-x)^2 + 100\,(y-x^2)^2$ $F_{min} = F\,(1,1) = 0$

а) унимодальная функция Розенброка



$G(x,y) = (x^2+y-11)^2 + (x+y^2-7)^2$

b) мультимодальная функция [6]

Рис. 4. Тестовые 2D функции

1 2024 2.indd 98 21.03.2024 15:30:04

В этом разделе в качестве тестовой используется унимодальная функция Розенброка [4]. Для наглядности значения параметров не масштабировались к интервалам [0.1]. Линии уровней этой функций представлены на рис. 4а).

Функция Розенброка – это унимодальная невыпуклая функция, используемая для оценки производительности алгоритмов оптимизации. Считается, что поиск глобального минимума для данной функции является нетривиальной задачей. Эта задача является стандартом де-факто для тестирования алгоритмов поиска экстремума.

В терминах теории методов нелинейного программирования метод сжимающихся интервалов относится к классу прямых методов. При этом на переменные накладываются ограничения в виде неравенств. На рис. 5 приведены два варианта реализации: с фиксированными и плавающими границами области неопределенности для разного количества шагов *m*. Значению 0 соответствуют границы исходного интервала неопределенности.

В варианте с фиксированными границами значения переменных должны всегда находится в первоначальной области неопределенности $m=0$, которая описывается набором неравенств вида

$$\mathrm{XL0}_i \le \mathrm{X}_i \le \mathrm{XR0}_i, \quad i = 1 \ldots N, \tag{11}$$

где N – размерность пространства поиска.

Область неопределенности в этом случае на каждом шаге имеет центр, определяемый вектором, компоненты которого равны значениям центров интервалов неопределенности переменных x_i. И этот центр всегда находится внутри исходной области неопределенности.

При этом при постановке оптимизационной задачи следует учитывать следующие особенности. На *m*-м шаге интервал неопределенности для каждой из переменных уменьшается на величину

$$\mathrm{H}_m = \frac{\mathrm{D}_m}{N\mathrm{p}-1}.$$

Максимальное значение этого шага соответствует исходному интервалу неопределенности $\mathrm{H}_0 = \frac{\mathrm{D}_0}{N\mathrm{p}-1}$. Таким образом, если целевая функция имеет «узкий» глобальный минимум с шириной меньшей, чем H_0, и который находится на границе области неопределенности, он не будет обнаружен, так как это область будет отброшена на следующем шаге. Соответственно, для целевых функций такого типа универсальным рецептом является увеличение $N\mathrm{p}$. В варианте с плавающими границами центр области неопределенности на каждом шаге соответствует значениям переменных, при которых целевая функция имеет минимальное значение. При этом новые границы области могут выходить за границы исходной области неопределенности, но на каждом шаге область неопределенности уменьшается в соответствии с базовым алгоритмом метода.

Следует отметить, что для варианта с плавающими границами алгоритм корректировки границ несколько отличается от описанного ранее.

Для варианта алгоритма с плавающими границами для *m*-го шага в качестве центра интервала для *i*-переменной берется значение Xmin_i. Левая и правая границы интервалов рассчитываются с использованием половины интервала неопределенности для $(m-1)$, уменьшенного на величину шага сетки на *m* шаге, умноженного на коэффициент ускорения Kd.

Таким образом обеспечивается монотонное уменьшение интервалов неопределенности по каждой переменной по закону геометрической прогрессии. Соответственно, значения интервалов неопределенности для каждой из переменных не отличаются от интервалов неопределенности для варианта метода с фиксированными границами. Это утверждение иллюстрируется графиком 5b).

Этот вариант реализации является предпочтительным при наличии априорной информации, что функция унимодальная и не имеет ограничений на область определения. В этом случае сходимость метода по критерию значения целевой функции будет суще-

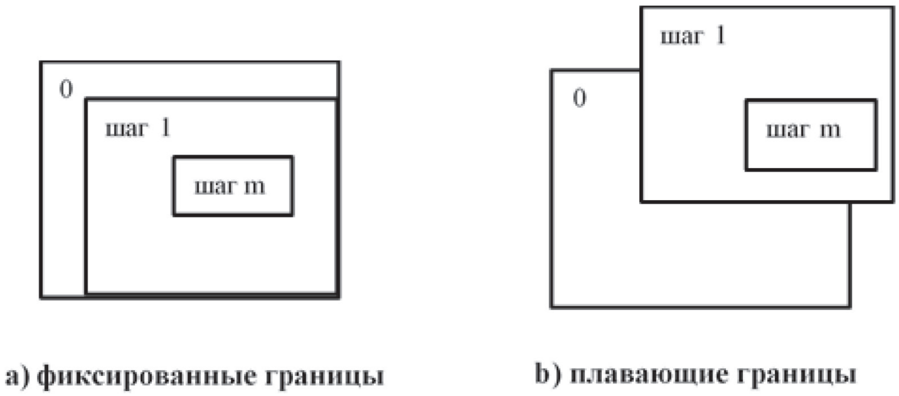


Рис. 5. Варианты реализации метода сжимающихся интервалов

ственно выше, чем для варианта метода с фиксированными границами. Для мультимодальных целевых функций такой вариант реализации малопригоден. Как следует из рис. 5b), размер отбрасываемой области неопределенности большой.

Он зависит от взаимного положения локального (зафиксированного на шаге) минимума и глобального минимума. В предельном случае, когда локальный минимум находится на границе, а глобальный минимум уже шага регулярной сетки, его величина может быть приблизительно равной исходному интервалу неопределенности. При этом величина усеченного интервала неопределенности уменьшится лишь на шаг сетки за счет смещения границ области неопределенности.

Использование того или иного варианта зависит от прикладной задачи. Вариант с фиксированными границами представляется предпочтительным при наличии априорной информации о предельных значениях переменных или об области определения функции. Например по физическим, геометрическим и т. п. ограничениям, свойственным конкретной прикладной области. Вариант с плавающими границами обеспечивает возможность решения задач, для которых положение глобального в пространстве переменных априори неизвестно. На рис. 6 приведены результаты использования метода сжимающихся интервалов для функции Розенброка.

На рис. 6 (c–d) приведены траектории изменения центра интервала неопределенности как функции числа шагов. Оба варианта метод сжимающихся интервалов обеспечивают нахождением точки минимума для функции Розенброка.

Мультимодальная целевая функция

Рассмотрим особенности решения оптимизационной задачи в интервальной постановке для целевой полимодальной функции многих переменных. В рамках исходной постановки задачи в виде (1)–(2) требуется определить значение одного набора параметров, соответствующего глобальному минимуму целевой функции.

Рассмотрим возможность применения интервальных методов сжимающихся интервалов к решению оптимизационной задачи для мультимодальных целевых функций. В качестве тестового примера используем функцию, представленную на рис. 4b).

Эта функция имеет 4 разнесенных минимума, в которых целевая функция принимает значения, $G(x, y)$ близкие к 0. В верхней части таблицы 2 в колонке приведены оценки значений x и y для соответствующих локальных минимумов. Эти значения получены методом сжимающихся интервалов путем выбора начальных границ области неопределенности таким образом, чтобы целевая функция была выпуклой и унимодальной.

Приведенные результаты по значению переменных и целевой функции следует воспринимать как приближенные. Но это находится в полном соответствии с логикой интервального подхода.

В нижней части табл. 2 приведены результаты применения двух вариантов метода: с фиксированными и плавающими границами. Они сходятся к разным точкам локальных минимумов. Для ряда прикладных задач системного анализа и параметрической идентификации факт наличия нескольких экстремумов в ряде случаев сам по себе является важным результатом. Таким образом, оптимизационная задача для мультимодальных функций в общей постановке включает в себя необходимость определения их количества.

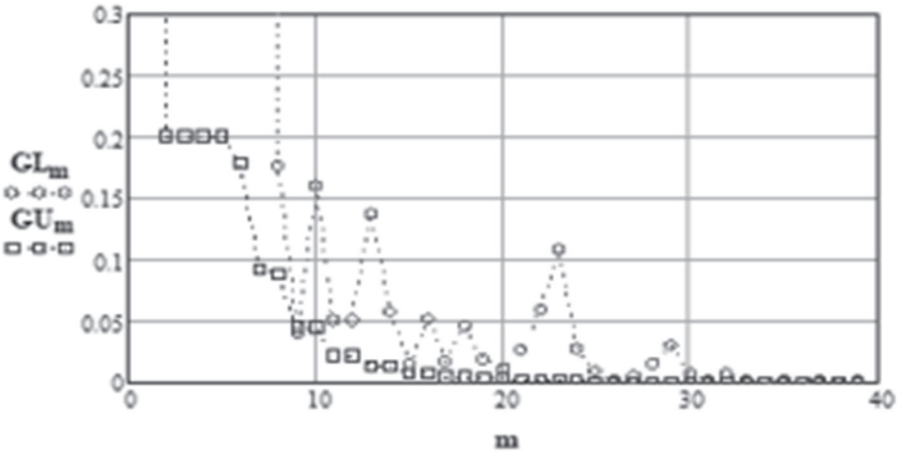
Такая постановка имеет смысл, если целевая функция имеет разнесенные в пространстве переменных минимумы. С учетом этого представляется актуальной постановка задачи поиска глобального минимума на случай поиска M кандидатов. Такую постановку представляется целесообразным идентифицировать как $\mathrm{Mglob}(X)$. При такой постановке требуется найти M интервальных описаний для точек, потенциально являющихся решениями оптимизационной задачи. Соответственно, появляется еще один параметр метода M, который задает количество таких точек.

Направления дальнейших исследований

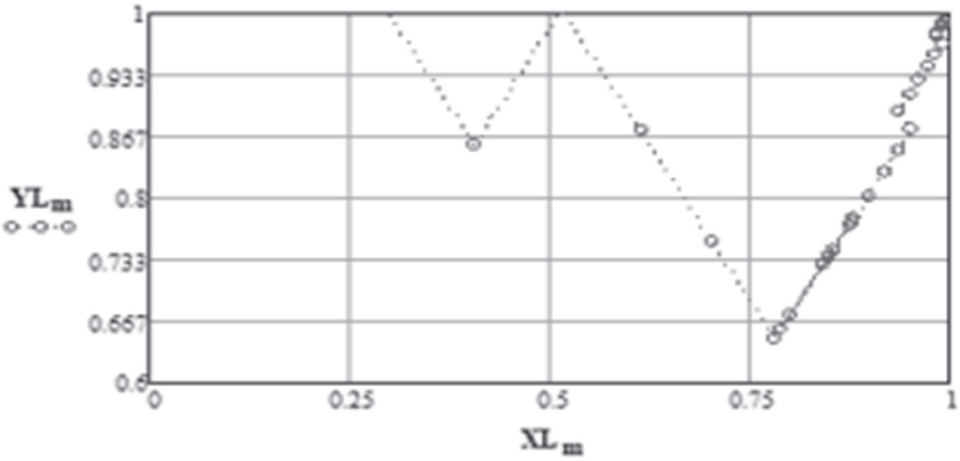
Необходимость применения интервальной постановки оптимизационных задач на теоретическом уровне осознана достаточно давно [1], [7]. На прикладном уровне в настоящее время этот аппарат интенсивно применяется и развиваются специализированные методы решения задач параметрической идентификации моделей.

Кратко рассмотрим перспективные направления развития предлагаемого подхода, которые являются актуальными с практической точки зрения. Для широкого круга практических приложений интервальная формулировка оптимизационной задачи является естественны подходом. Следует подчеркнуть, что для решения задачи поиска глобального минимума требуется использовать тот или иной вариант перебора. Для задач большой размерности это означает существенное увеличение объема вычислений. Соответственно, одним из важных требований к методам решения является возможность эффективного распараллеливания используемых алгоритмов.

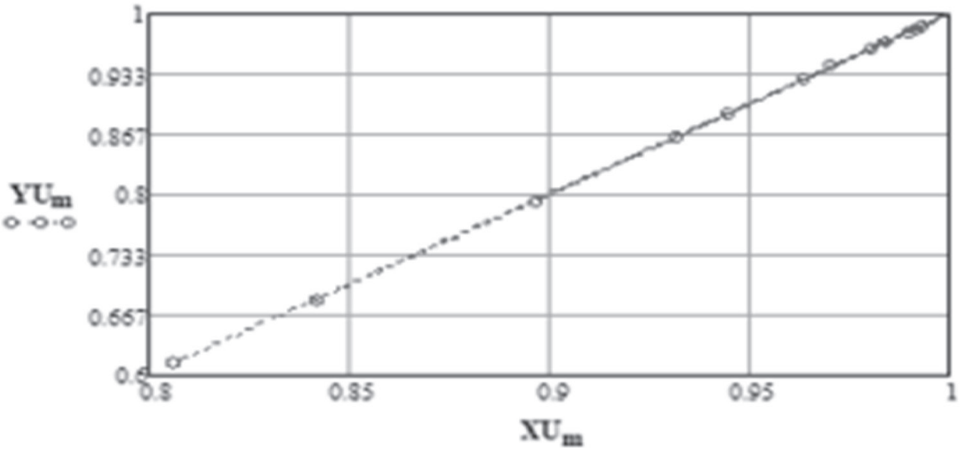
Применительно к конкретным прикладным областям проблема реализации может быть решена за счет учета специфики прикладной области. Таким образом, речь идет о разработке специализированных оптимизационных интервальных методов. В этой связи может предложена классификация прикладных областей, представленная на рис. 7.



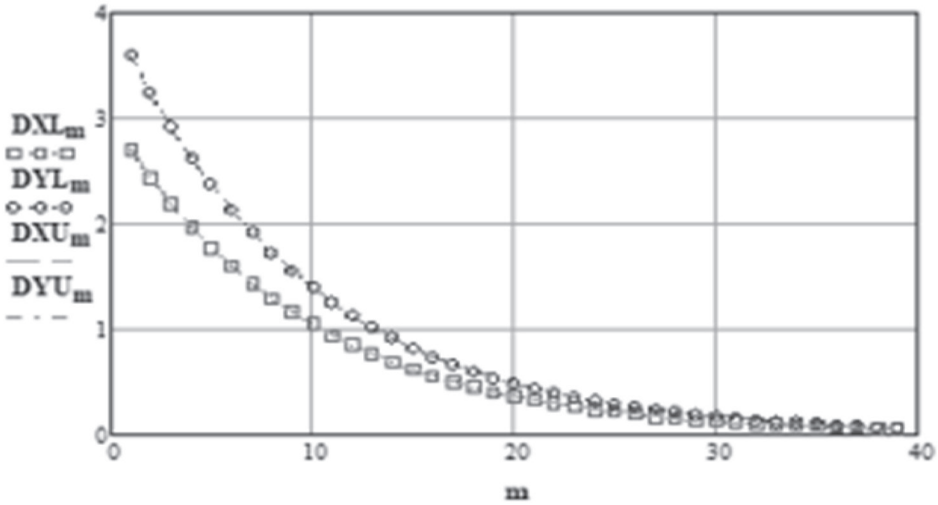
а) значение целевой функции после m-шагов
GL – фиксированные границы
GU – плавающие границы



b) траектория поиска для варианта фиксированных границ, точка минимума (1,1)



c) траектория поиска для варианта плавающих границ, точка минимума (1,1)



d интервалы неопределенности по переменным x и y для двух реализаций

Рис. 6. Тестирование метода сжимающихся интервалов на функции Розенброка исходные интервалы неопределенности $x = [-1.5,\ 1.5]$, $y = [-0.5, 2]$ *параметры алгоритма: Np = 10   Kd = 1   m = 0..40*

Таблица 2

Мультимодальная функция $\mathbf{G(x,y) = (x^2+y-11)^2 + (x+y^2-7)^2}$			
N **минимума**	**x**	**y**	**G(x,y)**
1	-3.779	-3.284	$4.15\cdot10^{-5}$
2	-2.804	3.131	$4.405\cdot10^{-5}$
3	3.584	-1.847	$2.486\cdot10^{-5}$
4	3	2	0
Метод сжимающихся интервалов начальная область неопределенности $\mathbf{x = [-5,5],\ y = [-5,5]}$ параметры метода **NPOINT = 11 KD = 1 NSTEP = 100**			
Фикс. границы	2.998	2 .002	$1.36\cdot10^{-4}$
Плав. границы	-3.777	-3.279	$8.091\cdot10^{-4}$

В качестве иллюстрации приведем два примера применения интервальной постановки оптимизационных задач, учитывающих особенности прикладной области.

В работе [6] предлагается процедура параметрической идентификации моделей химической кинетики, основанная на использовании предельно допустимых оценок для значений параметров при определении их интервальных оценок. Используется интервальная постановка оптимизационной задачи. Описана одна из особенностей этой предметной области, заключающаяся в том, что в общем случае для одной и той же модели могут существовать несколько наборов оптимальных параметров. Соответственно, рассматривается случай мультимодальной целевой функции. В качестве критерия отбора наилучшего набора введен критерий устойчивости решения, который оценивает степень влияния малых изменений параметров на точность описания экспериментальных данных.

В статье [7] имеется описание алгоритма определения глобального минимума для стационарной системы жесткого реального времени. К этому классу относятся системы с фиксированными значениями времени на решение задачи. При этом превышение этого времени приводит к неприемлемым потерям.

В качестве иллюстрации приведем характерные примеры применения интервальной постановки оптимизационных задач, учитывающих особенности прикладной области.

В соответствии с предложенной классификацией параметрическая идентификация моделей химической кинетики относится к классам задач «Разработка нестационарных моделей» и «Параметрической идентификации». В принципе, это взаимосвязанные задачи. Неудовлетворительное решение задачи параметрической идентификации, количественно оцениваемое в виде большого значения целевой функции, свидетельствует о необходимости модификации модели. Существенной особенностью этой прикладной области является необходимость описания динамики процесса. Сложность такой постановки диктует необходимость разработки узкоспециализированных методов.

В работе [8] описывается методика параметрической идентификации моделей химической кинетики, основанная на использовании предельно допустимых оценок для значений параметров при определении их интервальных оценок. В работе описана формализованная процедура параметрической идентификации моделей, основанная на использовании предельно допустимых оценок параметров, позволяющая определять множество их значений, гарантирующих достижение требуемого качественного уровня описания экспериментальных данных, в том числе с позиций анализа влияния изменений требований к точности их воспроизведения. Описана одна из особенностей этой предметной области, заключающаяся в том, что в общем случае для одной и той же модели могут существовать несколько наборов опти-

Рис. 7. Классификация прикладных применений

1 2024 2.indd 103 21.03.2024 15:30:05

мальных параметров. Соответственно, рассматривается случай мультимодальной целевой функции. В качестве критерия отбора наилучшего набора введен критерий устойчивости решения, который оценивает степень влияния малых изменений параметров на точность описания экспериментальных данных.

В работах [9], [10] описана методика параметрической идентификации динамических систем с интервальными параметрами к задаче нахождения констант скоростей химической реакции окисления нафталина. Суть рассматриваемого подхода заключается в составлении целевой функции в пространстве грани интервальных параметров и характеризующей отклонение модельного решения от экспериментальных данных. Для целевой функции имеется возможность построить градиент и использовать для ее оптимизации методы первого порядка. В основе подхода лежит алгоритм адаптивной интерполяции, позволяющий получать для прямых интервальных задач решение в виде явных параметрических множеств. Результатом применения является оценка интервалов для значений констант реакции. Вычислительные аспекты реализация методики на параллельных вычислительных структурах рассмотрены в работе [11].

Можно утверждать, что для систем реального времени альтернативы использованию параллельных вычислительных структур для решения параметрической идентификации динамически систем нет [12].

В статье [13] имеется описание алгоритма определения глобального минимума для стационарной системы жесткого реального времени. К этому классу относятся системы с фиксированными значениями времени на решение задачи. При этом превышение этого времени приводит к неприемлемым потерям. Эта работа представляет интерес с точки зрения оценки ресурсов для решения задач параметрической идентификации в системах управления жесткого реального времени

Работа выполнялась под патронажем министерства обороны США, что определило специфику постановки задачи. Это нашло как отражение в названии метода «A guaranteed global optimization algorithm», так и в использованном вычислителе.

В качестве модельной использовалась задача определения расстояния до точки старта баллистической ракеты с помощью радара. Для оценки расстояния использовались данные с мультиспектрального датчика, находящегося на высоте 11 км. Вычислительная сложность проблемы заключалась в том, что при распространении электромагнитной волны в атмосфере, она взаимодействует с молекулами разных газов и частицами вещества. Как следствие, электромагнитная энергия поглощается и рассеивается.

Рассеяние и поглощение энергии описывается нелинейными зависимостями. Показания датчика существенным образом зависят от набора параметров, определяющих поглощающие свойства атмосферы. А именно: используемая частота радара, газовый состав атмосферы, включая концентрацию аэрозолей, температура. В частности, в работе акцентируется внимание на влиянии профиля распределения озона по высоте и оценке его текущего значения.

Для расчетов использовалась модель MODTRAN [14]-[15]. При этом в режиме жесткого реального времени производилась оценка параметров модели, которая описывает концентрацию газов в атмосфере по результатам косвенных измерений.

Как и в методе сжимающихся интервалов, описываемый в [10] алгоритм использует регулярную сетку. При этом алгоритм гарантированного решения GOP (Global Optimization Problem) на первом этапе определяет границы области, где находится глобальный минимум, а далее находит точное положение минимума в пространстве переменных.

Алгоритм GOP работает при следующих условиях:

1. Глобальный минимум один и имеет значение $E(X) = 0$.

2. Локальные минимумы целевой функции разнесены в пространстве поиска и по значению отличаются на пороговую величину $h > 0$.

3. Размер области глобального минимума (basin of attraction) измеряемый на уровне $E(x) = h$, известен.

Для его реализации был добавлен компонент, обеспечивающий оценку области глобального минимума. Для этого использовалась сетка, число узлов которой последовательно увеличивалось на фактор 2.

Представляется важным привести данные об архитектуре и параметрах вычислителя, который обеспечил выполнение требований к системе. Использовался параллельный суперкомпьютер IBM Power4 центра ORNL Center for Computational Sciences. Суперкомпьютер использует сетку из 27·32 процессоров, работающих на частоте 1.3 ГГц. Для решения прикладной задачи потребовалось использование 441 процессора (55% от мощности суперкомпьютера).

Заключение

1. Предлагаемый в работе класс методов находится в русле современных тенденций в части постановки оптимизационных задач в интервальной постановке [5], [6], [9].

2. Описанные варианты реализации алгоритма обеспечивают решение задач параметрической идентификации для систем с относительно небольшой размерностью области параметров.

3. Размерность области может быть увеличена либо при снятии ограничений на время решения задачи, либо при использовании вычислительных систем большой производительности.

4. Существенно, что методы сжимающихся интервалов реализуется за конечное число шагов, что делает

их перспективными для использования в системах жесткого реального времени как для стационарных, так и систем встраиваемого класса.

5. Метод перспективен для реализации на многоядерных вычислителях, что позволяет в значительной степени обойти проблему вычислительной сложности.

6. Интервальная постановка оптимизационной задачи Mglob(X) представляется актуальной с практической точки зрения и представляет собой перспективную область для дальнейших исследований.

Литература

1. Канторович, Л. В. О некоторых новых подходах к вычислительным методам и обработке наблюдений / Л.В. Канторович // Сибирский математический журнал. – 1962. – Т. 3, № 5. – С. 701–709.

2. Морозов, А. Ю. Моделирование динамических систем с интервальными параметрами. Обзор методов и программных средств / А.Ю. Морозов, Д.Л. Ревизников // Моделирование и анализ данных. – 2019. – № 4. – С. 5–31.

3. Сороковиков, П. С. Разработка и исследование нелокальных алгоритмов параметрической идентификации динамических систем : диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук : 2.3.1 / Сороковиков Павел Сергеевич ; на правах рукописи. – Иркутск, 2022. – 262 с.

4. Баженов, А. Интервальный анализ. Часть 1. Основы теории и примеры применений. Учебное пособие / А. Баженов. – Санкт-Петербург : СПбПУ Петра Великого, 2018. – 62 с.

5. Черноруцкий, И. Г. Методы оптимизации. Компьютерные технологии / И.Г. Черноруцкий. – Санкт-Петербург : БХВ-Петербург, 2011. – 384 с.

6. Химмельблау, Д. М. Прикладное нелинейное программирование / Д.М. Химмельблау. – Москва : Мир, 1975. – 534 с.

7. Прикладной интервальный анализ / Л. Жолен, М. Кифер, О. Дидри, Э. Вальтер. – Москва–Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2007. – 468 с.

8. Кантор, О. Г. Параметрическая идентификация моделей с заданными качественными характеристиками / О.Г. Кантор, С.И. Спивак, Н.Д. Морозкин // Инженерные технологии и системы. – 2019. – Т. 29, № 4. – С. 480–495.

9. Морозов, А. Ю. Идентификация интервальных констант скоростей химической реакции окисления нафталина / А.Ю. Морозов // Моделирование и анализ данных. – 2023. – Т. 13, № 3. – С. 66–78.

10. Морозов, А. Ю. Интерполяционный подход в задачах моделирования динамических систем с эллипсоидными оценками параметров / А.Ю. Морозов // Труды МАИ. – 2022. – № 124. – С. 24.

11. Морозов, А. Ю. Параллельный алгоритм адаптивной интерполяции на основе разреженных сеток для моделирования динамических систем с интервальными параметрами / А.Ю. Морозов // Программная инженерия. – 2021. – Т. 12, № 8. – С. 395–403.

12. Параллельные вычисления в задачах глобальной оптимизации / Р.Г. Стронгин, В.П. Гергель, В.А. Гришагин, К.А. Баркалов. – Москва : Издательство Московского университета, 2013. – 280 с.

13 GMG – A guaranteed global optimization algorithm: Application to remote sensing / C.D. Helon, V. Propopescu, J.C. Wells, J. Barhen // Mathematical and Computer Modeling. – 2007. – Vol. 45, Iss. 3-4. – P. 459–472.

14. MODTRAN4: Multiple scattering and bi-directional reflectance distribution function (BRDF) upgrades to MODTRAN / P.K. Acharya, A. Berk, G.P. Anderson [et al.] // SPIE proceeding, Optical Spectroscopic Techniques and Instrumentation for Atmospheric and Space Research III. – 1999. – Vol. 3756. – P. 354–362.

15. MODTRAN Cloud and multiple scattering upgrades with application to AVIRIS / A. Berk, L.S. Bernstein, G.P. Anderson [et al.] // Remote Sens. Environ. – 1998. – Vol. 65. – P. 367–375.

1 2024 2.indd 105 21.03.2024 15:30:05