УДК 681.5.015.63-192

© 2009 г. **Г.Б. Диго,**
Н.Б. Диго
(Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

СОКРАЩЕНИЕ ПРОСТРАНСТВА ПОИСКА В ЗАДАЧАХ ОПТИМИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ БЕЗЫЗБЫТОЧНОЙ СТРАТЕГИИ РАЗБИЕНИЯ[1]

Анализируется один из путей сокращения пространства поиска экстремума алгоритмически заданной целевой функции на основе безызбыточной стратегии его разбиения. Показано, что применение безызбыточного одноточечного алгоритма уменьшает временные затраты и объем компьютерной памяти за счет сокращения пробных точек при сохранении тех же требований к точности решения.

Ключевые слова: пространство поиска, алгоритмически заданная целевая функция, безызбыточная стратегия разбиения, диагональные алгоритмы, одноточечный алгоритм.

Введение

Проблемы поиска глобального экстремума возникают в различных областях науки и техники. Это могут быть задачи проектирования, управления, моделирования реальных процессов или явлений, анализа данных. Подходы к глобальной оптимизации существенно отличаются от техники стандартных методов поиска локальных оптимальных значений функции. И если для решения задач одномерной оптимизации они исследованы достаточно глубоко, то вопросы построения эффективных алгоритмов многомерной оптимизации, имеющих важное практическое значение, продолжают привлекать внимание исследователей. Именно поэтому постоянно растет интерес к решению таких проблем.

Специфика задачи многомерной глобальной оптимизации состоит в неразрешимости ее в общем случае и многоэкстремальности целевой функции. Трудности численного решения подобных задач связаны как с их размерностью, так и с отсутствием достаточной априорной информации о целевой функции. Так, может быть недоступна дополнительная информация о функции (например, ее градиент), функция может не иметь аналитического выражения. При разработке методов глобальной оптимизации в первую очередь приходится учитывать свойства конкретного класса задач, для которых они разрабатываются.

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке гранта ДВО РАН 09-I-П2-03 (Программа фундаментальных исследований Президиума РАН № 2).

Проблема численного решения задач оптимизации обычно сопряжена со значительными трудностями, во многом связанными с размерностью и видом оптимизируемой целевой функции, которая может быть многоэкстремальной, недифференцируемой, заданной в виде черного ящика.

Ввиду высокой сложности многомерных многоэкстремальных задач глобальной оптимизации они не всегда могут эффективно решаться простыми переборными методами.

Развитие методов глобальной оптимизации стимулируется не только актуальностью и сложностью этих задач, но и развитием вычислительных средств. Исследования в данной сфере учитывают архитектурные особенности современных компьютеров, на которых эти алгоритмы предполагается реализовывать, в связи с тем придается большое значение проблемам параллельных вычислений, различным подходам к распараллеливанию алгоритмов глобальной оптимизации, выбору способа сокращения пространства поиска путем уменьшения числа пробных точек.

В статье анализируется подход, основанный на применении безызбыточного одноточечного алгоритма при нахождении глобального экстремума алгоритмически заданной целевой функции, как средства сокращения пространства поиска.

Постановка задачи

Пусть на n-мерном гиперпараллелепипеде $P \subset R^n$ алгоритмически задана многоэкстремальная функция $\varphi(\mathbf{x})$, удовлетворяющая в области поиска условию Липшица с неизвестной константой L. Задача максимизации

$$\varphi_* = \max_{\mathbf{x} \in P} \varphi(\mathbf{x}), \quad P = \{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n : \mathbf{x}_{\min} \le \mathbf{x} \le \mathbf{x}_{\max}\}, \tag{1}$$

где векторное неравенство $\mathbf{x} \le \mathbf{z}$ означает, что $x_i \le z_i, 1 \le i \le n$ не имеет аналитического решения.

В дальнейшем под алгоритмически заданной функцией понимается функция, для которой существует алгоритм нахождения ее значения при любом допустимом значении аргумента. Дополнительная информация о ней может состоять лишь из ее значений, вычисление которых в точках области поиска требует значительных вычислительных затрат.

В общем случае задача (1) неразрешима, поскольку не гарантируется получение результата за конечное число шагов.

Решение подобных задач обычно осуществляется итеративными алгоритмами, порождающими последовательность точек в соответствии с некоторым набором правил, включающих и критерий окончания счета. Глобальный максимум ищется среди всех найденных локальных решений, при этом сокращение вычислительных затрат может быть достигнуто использованием перебора только части из них, если удается доказать, что остальные локальные решения не влияют на окончательный результат.

Одна из основных трудностей при решении задач вида (1) состоит в большой размерности пространства поиска и приводит к большим вычислительным затратам. Так, для достижения гарантированного экстремума с заданной точностью простым перебором на равномерной сетке в области поиска необходимое число испытаний оптимизируемой функции возрастает экспоненциально относительно роста размерности. Это вызывает необходимость искать алгоритмы решения поставленной задачи, требующие меньшего числа испытаний (проблема уменьшения числа пробных точек) при тех же требованиях к точности решения. Такая возможность появляется при переходе к адаптивным последовательным методам оптимизации, – таким как различные методы неравномерных покрытий пространства поиска, редукция многомерной задачи к одномерным задачам с последующим применением эффективных одномерных алгоритмов глобальной оптимизации, многомерный метод ломаных и т.д.

К алгоритмам, позволяющим сократить пространство поиска, относится и одноточечный безызбыточный алгоритм, использующий эффективное расположение выбираемых точек для каждого шага адаптации. Он базируется на стратегии разбиения области поиска [1], разработанной первоначально для диагональных алгоритмов и применяемой к одноточечным алгоритмам [2].

Ставится задача применения безызбыточного одноточечного алгоритма для сокращения пространства поиска глобального экстремума алгоритмически заданной многоэкстремальной целевой функции.

Анализ задачи

В сформулированной выше задаче (1) пространство поиска максимума алгоритмически заданной функции $\varphi(\mathbf{x})$ представляет собой n-мерный гиперпараллелепипед P вида

$$P = \{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n : \mathbf{x}_{\min} \le \mathbf{x} \le \mathbf{x}_{\max}\}, \tag{2}$$

где $\mathbf{x}_{\min} = (x_{1\min},\ldots,x_{n\min})$, $\mathbf{x}_{\max} = (x_{1\max},\ldots,x_{n\max})$.

Применение стратегии адаптивного диагонального разбиения для решения этой задачи позволяет уменьшить число пробных точек и пространство памяти для хранения характеризующей их информации [1, 2]. Однако традиционные диагональные алгоритмы (деление пополам или деление на 2^n), разработанные на основе этой стратегии, несмотря на вычисление значений целевой функции только в двух точках каждого гиперпараллелепипеда текущего разбиения исходного гиперпараллелепипеда P, являются избыточными. Избыточность возрастает по мере дробления, поскольку в одних и тех же вершинах, полученных на разных итерациях, проводятся повторные вычисления, существенно уменьшающие скорость работы алгоритма и увеличивающие машинную память, необходимую для хранения поисковой информации.

Предложенная в [1] безызбыточная стратегия диагонального разбиения обеспечивает вычисление значений целевой функции только в двух вершинах каждого гиперпараллелепипеда разбиения на текущей итерации. Введенная в ней специальная индексация гиперпараллелепипедов разбиения позволяет с малыми вычислительными затратами устанавливать связи между гиперпараллелепипедами, полученными на разных итерациях алгоритма. Кроме того, она разграничивает информацию, характеризующую каждый полученный гиперпараллелепипед и координаты его вершин, исключая повторные вычисления значений целевой функции в одних и тех же пробных точках.

Аналогичные свойства присущи одноточечной безызбыточной стратегии разбиения [2]. Поэтому представляет интерес анализ возможности ее использования для сокращения пространства поиска при максимизации функции $\varphi(\mathbf{x})$. В отличие от безызбыточной стратегии диагонального разбиения, в этой ситуации вместо значений целевой функции $\varphi(\mathbf{x})$ в двух вершинах текущего гиперпараллелепипеда используется лишь одно.

Одноточечная безызбыточная стратегия разбиения

По сравнению с традиционно используемыми одноточечными алгоритмами одноточечная безызбыточная стратегия разбиения имеет особенности, связанные со способом разбиения области поиска и выбором местоположения пробной точки на каждом шаге разбиения. Применяется подход, основанный на эффективной безызбыточной стратегии диагонального разбиения, разработанной для адаптивного разбиения n-мерных гиперпараллелепипедов в структуре диагональных алгоритмов [3]. Пробная точка на каждом шаге разбиения выбирается не внутри гиперпараллелепипеда, а в одной из его вершин.

При формальном описании выбранной стратегии разбиения без потери общности будем считать, что исходное пространство поиска (допустимая область) является n-мерным гиперкубом, поскольку этого всегда можно добиться с помощью линейных преобразований. Обозначим исходный n-мерный гиперкуб B_0, полагая

$$B_0 = \{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n : \mathbf{a} \le \mathbf{x} \le \mathbf{b}\}, \tag{3}$$

где $\mathbf{a} = (a_1,...,a_n)$, $\mathbf{b} = (b_1,...,b_n)$.

На первом шаге согласно схеме разбиения, приведенной в [1, 4], выбирается пробная точка $\mathbf{a} = (a_1,...,a_n)$ из B_0. В ней вычисляется значение $w_{(1)} = \varphi(\mathbf{a})$ функции $\varphi(\mathbf{x})$ и полагается $w^* = w_{(1)}$. Необходимо отметить, что выбранная выше точка $\mathbf{a} = (a_1,...,a_n)$ является одной из вершин гиперкуба B_0, заданного формулой (3).

На втором шаге B_0 разделяется двумя гиперплоскостями, ортогональными координатной оси x_i и проходящими через точки

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= (a_1, a_2, ..., a_{i-1}, a_i + 2(b_i - a_i)/3, a_{i+1}, ..., a_n), \\ \mathbf{v} &= (b_1, b_2, ..., b_{i-1}, b_i + 2(a_i - b_i)/3, b_{i+1}, ..., b_n), \end{aligned} \tag{4}$$

где индекс i удовлетворяет условию

$$i = \arg\min\max\{|b_j - a_j| : \ 1 \le j \le n\}. \tag{5}$$

В результате B_0 разбивается на три гиперпараллелепипеда $B(1)$, $B(2)$, $B(3)$ равного объема, $B_0 = \bigcup_{i=1}^{3} B(i)$, в дальнейшем изложении именуемыми ячейками, каждый из которых характеризуется только одной вершиной **u**, выбираемой в качестве пробной точки. Вычисляется значение целевой функции $w_{(2)} = \varphi(\mathbf{u})$ и выбирается $w^* = \max\{w^*, w_{(2)}\}$. Точка **v** из (4) используется только для целей разбиения.

На каждой итерации, начиная со второй, из ячеек текущего разбиения выбирается претендент на дальнейшее дробление. Для этого вводится некоторая числовая характеристика $H_i = H(B(i))$, позволяющая количественно оценивать возможность нахождения точки глобального максимума в пределах рассматриваемой ячейки. Ее вид зависит от конкретного алгоритма и может быть, например, оценкой максимального значения целевой функции в ячейке $B(i)$ [1, 3]. Будем считать, что дальнейшему разбиению подвергается ячейка с наибольшим значением этой характеристики.

Вычислению значения целевой функции $\varphi(\mathbf{x})$ в полученной на k-м ($k > 2$) шаге вершине **u** должна предшествовать проверка, использовалась ли она на предыдущих итерациях. При этом возможны два варианта: такое значение уже было получено; значение в выбранной вершине не вычислялось.

В первом случае новое значение $\varphi(\mathbf{x})$ не вычисляется и w^* не меняется. Во втором случае вычисляется новое значение $w_{(k)} = \varphi(\mathbf{u})$ и выбирается максимальное $w^* = \max\{w^*, w_{(k)}\}$.

Описанный процесс адаптивного разбиения прекращается, когда для выбранной на текущем шаге ячейки и заданного $\varepsilon > 0$ выполняется неравенство

$$\max_{1 \le j \le n} \left| b_j - a_j \right| < \varepsilon . \tag{6}$$

Выбранное к этому моменту значение w^* принимается за искомое максимальное значение в точке

$$\mathbf{x}_\varepsilon^* = \arg\{w^*\}.$$

Если неравенство (6) не выполняется, то пересчитываются числовые характеристики H_i, $i = 1,2,\ldots,Q(k)$, где $Q(k)$ – количество число ячеек перед выполнением (k+1)-го шага алгоритма, полагается $k = k + 1$ и для последующего разбиения осуществляется переход к новой ячейке по числовой характеристике

$$H_k = \max_{1 \le i \le Q(k)} H_i . \tag{7}$$

Как и в случае использования безызбыточной стратегии диагонального разбиения, можно ввести индексацию текущих ячеек [1, 3], обеспечивающую нахождение координат тех вершин, в которых вычисляются значения функции $\varphi(\mathbf{x})$.

Способ хранения поисковой информации

Для описания связей между подъячейками текущего разбиения и полученными на предыдущих шагах ячейками, имеющими с ними общие грани [1, 3], введем вектор соответствия

$$\mathbf{r}(j) = (r_1, r_2, ..., r_n) \qquad (8)$$

В (8) $r_i, 1 \le i \le n$, – строка, состоящая из $n_i + 1$ символа трехсимвольного алфавита $\{0,1,2\}$. Число символов в наборе n_i равно числу разбиений, сделанных ортогонально координатной оси x_i для получения ячейки $B(j) = B(r_1, r_2, ..., r_n)$. Тогда исходная область поиска B_0 обозначается как $B(1) = B(0,0,...,0,0,0,...,0)$, а все компоненты вектора $\mathbf{r}(j)$ из (8) представлены единственной цифрой 0.

Ячейки, составляющие B_0 на втором шаге, записываются в виде

$$B(2) = B(0,0,...,0,00,0,...,0),$$

$$B(1) = B(0,0,...,0,01,0,...,0),$$

$$B(3) = B(0,0,...,0,02,0,...,0),$$

имея номера соответственно 2, 1, 3. Их вершины описываются выражениями

$$B(2):\quad \mathbf{a}(2) = (a_1, a_2, ..., a_{i-1}, a_i, a_{i+1}, ..., a_n),$$

$$B(1):\quad \mathbf{a}(1) = (a_1, a_2, ..., a_{i-1}, 2(b_i - a_i)/3, a_{i+1}, ..., a_n),$$

$$B(3):\quad \mathbf{a}(3) = (a_1, a_2, ..., a_{i-1}, 2(b_i - a_i)/3, a_{i+1}, ..., a_n).$$

Для разбиения на следующем шаге выбирается ячейка с числовой характеристикой, определяемой по (7) для числа $Q(k) = 3$. Введенный вектор соответствия $\mathbf{r}(j)$, описываемый выражением (8), обеспечивает вычисление значения целевой функции в каждой конкретной вершине только один раз и хранение его в специальном массиве.

При необходимости требуемые значения считываются из этого массива, что менее трудоемко, чем повторные вычисления.

Если на k-м шаге максимальной характеристикой является H_p, то ячейка $B(p) = B(r_1, r_2, ..., r_n)$ разбивается двумя гиперплоскостями, ортогональными самой длинной грани параллельно i-й координатной оси. Используются координаты вершины $\mathbf{a}(p)$, в которой уже была вычислена функция $\varphi(\mathbf{x})$, определяемые следующими выражениями:

$$a_i = \begin{cases} 3^{-n_i}(h_{n_i} + 1) + \sum\limits_{j=0}^{n_i - 1} 3^{-j} h_j, & \text{в случае 1}, \quad 1 \le i \le N, \\ \sum\limits_{j=0}^{n_i} 3^{-j} h_j, & \text{в случае 2}, \quad 1 \le i \le N, \end{cases} \qquad (9)$$

где $h_0, h_1, ..., h_{n_i - 1}, h_{n_i}$ – цифры, составляющие r_i; случай 1 – число r_i содержит нечетное количество цифр 1; случай 2 – все остальные сочетания цифр.

Наличие координат вершины $\mathbf{a}(p)$, полученных по формуле (9), позволяет описать k-й шаг разбиения в следующем виде.

Ячейка $B(p)$ разбивается на три равных подъячейки двумя гиперплоскостями, ортогональными координатной оси x_i и проходящими через точки $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$, задаваемые выражениями (4) при значении i, найденном из (5).

Полученные ячейки $B(p(k+1))$, $B(Q(k)+1)$, $B(Q(k+1))$, с учетом $Q(k+1) = Q(k) + 2$, определяются своими вершинами

$$\mathbf{a}(Q(k)+1)=\mathbf{a}(p(k)), \tag{10}$$

$$\mathbf{a}(Q(k)+2)=\mathbf{u}, \tag{11}$$

$$\mathbf{a}(p(k+1))=\mathbf{a}(Q(k)+2)=\mathbf{u}. \tag{12}$$

Новые ячейки, образованные на (k+1)-м шаге, с учетом формул (4), (5) и (10) – (12), описываются в виде

$$B(Q(k)+1)=B(r_1,r_2,...,r_{i-1},h_0h_1..h_{n_i-1}h_{n_i}\,0,r_{i+1,},...,r_n),$$

$$B(p(k+1))=B(r_1,r_2,...,r_{i-1},h_0h_1..h_{n_i-1}h_{n_i}\,1,r_{i+1,},...,r_n),$$

$$B(Q(k)+2)=B(r_1,r_2,...,r_{i-1},h_0h_1..h_{n_i-1}h_{n_i}\,2,r_{i+1,},...,r_n).$$

Таким образом, введенная индексация ячеек разбиения обеспечивает экономное хранение необходимой поисковой информации. Вся информация о значении функции в конкретной вершине ячейки вычисляется только один раз, записывается в массив вершин и считывается из него по мере надобности. Разбиения осуществляются так, что одна и та же пробная точка может принадлежать различным (до 2^n) ячейкам, а операция повторных вычислений заменяется менее трудоемкой операцией считывания информации из памяти ЭВМ.

Возможные пути сокращения пространства поиска при оптимизации по стохастическому критерию

Один из этапов параметрического синтеза технических систем состоит в поиске оптимальных номинальных значений параметров проектируемых объектов [5]. Это задача глобальной оптимизации многоэкстремальной многомерной целевой функции, заданной алгоритмически. Сложность ее численного решения вызвана как большой размерностью пространства параметров (и внутренних, и выходных), так и высокой вычислительной трудоемкостью на отдельных этапах проектирования за счет большого числа циклов анализа системы. Поэтому попрежнему остается важной проблема сокращения объема вычислений и временных затрат.

Применение безызбыточной стратегии диагонального разбиения к n-мерному параллелепипеду допусков на внутренние параметры при оптимизации по стохастическим критериям позволяет уменьшить число пробных точек (пространство поиска). В [4] разбиение осуществляется таким образом, что одно и то же значение $\varphi(\mathbf{x})$ может принадлежать различным (вплоть до 2^n) ячейкам, но операция повторных вычислений значений этой функции (до 2^n раз в одной и той же точке) заменяется более быстрой операцией считывания информации из памяти ЭВМ. Это значительно ускоряет процесс поиска решения задачи, особенно с ростом размерности n. Стремление дальнейшего сокращения пространства поиска привело к анализу возможности использования изложенного выше одноточечного алгоритма при решении задач параметрического синтеза. При этом сокращение числа пробных точек производится за счет использования на каждом текущем шаге значения целевой функции только в одной вершине. Однако, справедливости ради, нужно отметить, что имеющийся уровень информации об оптимизируемой функции не всегда позволяет заранее сказать [2], какой из этих подходов на самом деле окажется лучшим для конкретной оптимизационной задачи.

Заключение

Исследование возможности сокращения пространства поиска в задачах оптимизации на основе одноточечной безызбыточной стратегии разбиения, предложенной в [1, 2], позволяет сделать следующие выводы.

Уменьшается вычислительная сложность алгоритма за счет проведения испытаний целевой функции только в одной точке каждого гиперпараллелепипеда текущего разбиения начального гиперпараллелепипеда.

Сохраняется информация о близости вершин гиперпараллелепипедов, полученных на различных итерациях, за счет установления с помощью специальной индексации глобальной связи между пробными точками, принадлежащими этим ячейкам.

Исключается проведение повторных испытаний целевой функции, присущее традиционным стратегиям разбиения.

Стратегия разбиения и структура данных для хранения полученной информации оказывают существенное влияние на скорость вычислительного процесса.

При недостаточном уровне имеющейся информации об оптимизируемой функции использование технологии распараллеливания для диагональных и одноточечных алгоритмов позволяет обеспечить сокращение временных и вычислительных затрат на отдельных этапах поиска. Так, если на текущей итерации несколько подобластей имеют максимальную характеристику, параллельные вычисления позволяют проводить их одновременное разбиение и анализировать поведение целевой функции.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Сергеев Я.Д., Квасов Д.Е.* Диагональные методы глобальной оптимизации. – М.: Физматлит, 2008.
2. *Sergeyev Ya.D.* Efficient partition of *N*–dimensional intervals in the framework of one-point-based algorithms // Journal of Optimization Theory and Applications. – 2005. – V. 124, №2. – P.503-510.
3. *Sergeyev Ya.D.* An efficient strategy for adaptive partition of *N*-dimensional intervals in the framework of diagonal algorithms // Journal of Optimization Theory and Applications. – 2000. – V. 107, №1. – P.145-168.
4. *Диго Г.Б., Диго Н.Б.* Применение диагонального разбиения в задачах оптимального параметрического синтеза // Информатика и системы управления. – 2008. – №3(17). – С.83-90.
5. *Абрамов О.В.* Параметрический синтез стохастических систем с учетом требований надежности. – М.: Наука, 1992.

Статья представлена к публикации членом редколлегии О.В. Абрамовым.

E-mail:
Диго Г.Б. – bernatsk@iacp.dvo.ru, digo@iacp.dvo.ru;
Диго Н.Б. – bernatsk@iacp.dvo.ru, digo@iacp.dvo.ru.