

*Ананченко И.В., кандидат технических наук, доцент,
Национальный исследовательский университет ИТМО,
Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)*

*Певнева А.Г., кандидат технических наук, доцент,
Военно-Космическая академия им. А.Ф. Можайского*

О ПРОЕКТИРОВАНИИ СИСТЕМЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ИНЖЕНЕРНЫХ ИНТЕРПРЕТАЦИЙ ЗАДАЧИ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Аннотация: представлена классификация методов глобальной оптимизации, рассматриваются вопросы проектирования архитектуры программно-алгоритмической системы вычислительного эксперимента для различных инженерных интерпретаций задачи глобальной оптимизации

Ключевые слова: задачи глобальной оптимизации, вычислительный эксперимент, классификация методов глобальной оптимизации, архитектура программного комплекса

Введение

Теория глобального поиска возникла как расширение локальной оптимизации, задачи, которые исследуются в рамках этой теории, гораздо менее проработаны по сравнению с теорией и методологией локального поиска экстремума [1]. Дискретные методы теории глобальной оптимизации и модификации случайного поиска («генетические алгоритмы»), входят в совокупность технологий, называемых Data Mining [2]. Научный интерес к методам глобальной оптимизации (МГО) обусловлен актуальностью практических задач архитектуры хранилищ данных. В программной реализации МГО два класса: программная реализация популярных алгоритмов (генетических, алгоритмов ветвей и границ и др.) в сегменте free software; профессиональные информационные системы с реализацией МГО, как

программного модуля. Такой подход затрудняет системный сравнительный анализ алгоритмов разных классов при решении модельных задач, поэтому предпринята попытка разработки приложения сравнения эффективности МГО для вычислительных схем типичных подходов в математическом моделировании.

Постановка задачи глобальной оптимизации. Задана функция $F(x)$, $x \in X \subset \mathbf{R}^n$, $F: X \rightarrow \mathbf{R}$. Среди элементов x , содержащихся в множестве X , найти такой элемент x^* , доставляющий **минимальное** значение функции $F(x)$. Если множество оптимизации $X = \mathbf{R}^n$, то решается задача безусловной оптимизации, иначе – задача условной оптимизации. Решить задачу оптимизации – выполнить одно из 4-х действий: 1) Найти $\bar{x}^* \in X$, такое, что $F(x^*) = \min_{x \in X} F(x)$; 2) Если точки минимума не существует, найти $\inf_{x \in X} F(x)$; 3) Показать, что X – пустое множество; 4) Показать, что целевая функция не ограничена снизу. В случае п. 3 и 4 считаем, задачу оптимизации вырожденной. Требование минимизации не ограничивает общности постановки задачи. Для конструкции алгоритма имеют значение структурные единицы задачи: 1) **Множество оптимизации** — $X \subset \mathbf{R}^n$ 2) **Целевая функция** — отображение $F: X \rightarrow \mathbf{R}$; 3) В основу классификации МГО положены два различных подхода к этим понятиям.

Классификация методов глобальной оптимизации. Методы поиска глобального минимума являются итерационными. В их конструкции ключевую роль играют правило перехода к очередному приближению и формулировка правила остановки алгоритма. На первой ступени классификации выделим две группы. **Рациональные методы:** алгоритмы группы используют в конструкции правила перехода к очередной итерации – опираются на математические свойства целевой функции и множества оптимизации, считая их известными *априори*. Подход гарантирует сходимость итерационного метода, но из-за строгих ограничений на множество и целевую функцию реже применяется, чем методы второй группы. **Эвристические методы:** в конструкции алгоритмов формулируется гибкое правило – эвристика, которое может применяться

независимо от фундаментальных свойств, таких как, например, непрерывность и дифференцируемость целевой функции, выпуклость и односвязность множества оптимизации.

Обобщенная классификация [3, с. 70-74] рациональных и эвристических *МГО* [4, с. 14-23]. Рациональные методы: а) детерминированные, б) стохастические на основе среднеоптимальной концепции. Эвристические методы: а) обобщенный глобальный спуск, б) случайный поиск, в) методы модификации множества оптимизации.

На следующем уровне рациональные методы разделяются на две группы по способу построения целевой функции. Детерминированные методы применяются для функций, при вычислении значений которых не используются распределения случайных величин. Стохастические методы применяются для функций, являющихся реализациями случайных процессов (алгоритмы на основе концепции Байеса, информационные алгоритмы Стронгина). Классификация эвристических алгоритмов, объединенных общим названием «случайный поиск». Методы третьей группы: эволюционные алгоритмы, метод моделирования отжига, генетические алгоритмы моделирования процесса естественного отбора, а метод оптимизации с помощью роя частиц (*Particle Swarm Optimization*, далее PSO [5,6]). Методы привлекают простотой программной реализации, в процессе поиска не вычисляется градиент.

Классификация методов случайного поиска. Случайный поиск: а) равномерный случайный поиск и его модификации; б) случайный мултистарт и его модификации; в) методы моделирования природных процессов: в.1) разновидности эволюционных алгоритмов: GA, PSO, в.2) метод моделирования отжига. Необходимо выделить несколько особенностей: в конструкции переходных правил этих методов также используются распределения случайных точек в множестве оптимизации, что и роднит их с алгоритмами предыдущего класса; различие между группами алгоритмов в этом классе состоит в конструкции правил разбиения множества допустимых решений на подмножества, в которых осуществляется поиск на каждой итерации; вопросы

сходимости методов к глобальному минимуму должны решаться отдельно для каждого случая, общая методология доказательства сходимости отсутствует.

Классификация методов МГО с преобразованием допустимого множества. Методы модификации множества оптимизации: а) метод ветвей и границ; б) методы кластеризации Торна; в) методы линий уровня ψ – преобразования Чичинадзе; г) туннельные методы. Сущность алгоритмов ветвей и границ заключена в последовательном разбиении множества допустимых решений на подмножества с последующим отсеком подмножеств, не содержащих решения. Для получения оценки проверяется условие. В процессе решения формируется список условий, в начальный момент содержащий только один элемент, соответствующий всему множеству допустимых решений, определяемому исходной задачей. На каждом шаге в методе ветвей и границ производится разбиение (ветвление) одного из элементов списка условий на несколько новых задач, для каждой из которых решается оценочная задача [7,8].

Примеры задач, решаемых МГО. Как видно из представленных классификаций, метод существенно зависит от характера вычислений при определении значений целевой функции и от структуры множества оптимизации. Поэтому нельзя при решении задачи рекомендовать какой-либо метод однозначно. **Были подробно рассмотрены** типичные экстремальные задачи в инженерной практике с целью выявления их структуры (по соображениям компактности рассмотрение задач не приводится) для дальнейшего поиска глобального решения: **1.** Обратная задача математического моделирования (на примере обратной задачи геологоразведки). **2.** Задача оптимального синтеза системы (на примере проектирования химико-технологической схемы (ХТС) [9]). **3.** Прямые задачи оптимального управления, основанные на принципе максимума Лагранжа. **4.** Максимизация дальности полета аппарата в атмосфере. **5.** Задача ракетодинамики в однородном поле (задача об оптимальном в смысле расхода топлива движении ракеты в пустоте).

Архитектура программного комплекса. Парадигмой проектирования программного комплекса является рассмотренная выше методологическая

классификация МГО. Для исследования вычислительной эффективности конкретных реализаций алгоритмов из разных классов в решении обобщенных моделей инженерных задач необходима такая архитектура программного обеспечения, которая облегчит системный сравнительный анализ. При разработке программного комплекса преследовалась основная цель: возможность легкого расширения на максимальное количество задач, добавление других методов глобальной оптимизации. Для реализации цели необходима программная структура, соответствующая предъявляемым требованиям к масштабируемости. В то же время структура должна быть доступна для понимания квалифицированных пользователей, желающих расширить программный комплекс другими задачами или реализацией других методов.

Диаграмма классов. Основные классы, реализующие вариант использования *«Решить задачу ГО с ручным вводом параметров»* и *«Решить задачу ГО по плану вычислительного эксперимента»* приведены на Рис. 1. Управляющий класс UControl отвечает за загрузку классов – сущностей программного комплекса: RESEARCHER, TASK, METHOD, EXPR_PLAN, REPORT, и осуществляет контроль над текущими процессами. Абстрактный класс RESEARCHER реализует идентификацию пользователя, уровень его доступа в зависимости от задачи, выбор метода и задачи, а также ведение журнала и сохранение отчетов о работе каждого пользователя. Процесс решения задачи глобальной оптимизации описывается абстрактными классами TASK и METHOD, от которых в свою очередь наследуются классы, реализующие конкретные задачи, и методы, описанные выше. Класс METHOD имеет наследников – классы EMPIRIC и RATIONAL, не отраженные на диаграмме. Включение этих классов необходимо из-за качественных методологических различий алгоритмов. В классе EMPIRIC отсутствуют атрибуты, регламентирующие свойства множества оптимизации, а также метод, регламентирующий режим выбора задачи, то есть ограничивающий свойства целевых функций. Это особенно актуально для методов, реализующих так

называемый «информационный алгоритм» [10]. В класс RATIONAL включен метод на основе байесовского подхода в оптимизации, требующий жесткой структуризации. Отраженные на диаграмме классы, реализующие конкретные методы, фактически являются наследниками класса EMPIRIC. Кроме того, абстрактный класс Consider реализует представление индивидуальной для каждой задачи оценки целевой функции и описывает метод сравнения между собой объектов, отражающих элементы траектории поиска. Заметим, что на первом этапе тестирования программного комплекса подробный анализ проводился на представителях класса RANDOM SEARCH. Это связано, прежде всего, с относительной алгоритмической простотой этих методов и их популярностью в настоящее время среди исследователей. Метод ψ – преобразования рассматривался из соображений его универсальности по отношению к рельефу целевой функции и оригинальной конструкции.

Заключение. Рассмотренный подход к проектированию программного комплекса отражает целостность теории глобального поиска. Алгоритмы классифицированы по методологическому критерию, в основу проекта положена не только структура основных единиц задачи, но и способ построения алгоритма. Поэтому вычислительная система, построенная по такому проекту, может эффективно выполнять сравнительный анализ алгоритмов, опираясь на общие черты и различия их внутренней структуры. Использованный подход дает основания для проектирования не только вычислительного комплекса, реализующего некоторые алгоритмы глобального поиска, но и экспертной системы по выбору алгоритма решения конкретной задачи. Анализ решаемых задач из различных инженерных областей позволил обобщить и сформулировать системные проблемы эмпирических алгоритмов глобального поиска: выбор исходного положения для траекторий поиска; вариативность траекторий, то есть возможность изменять направление и числовые параметры на каждом шаге, а также объединять траектории; устойчивость расчетного алгоритма относительно его параметров, то есть при любых вариациях параметра должна существовать траектория, приводящая в точку глобального оптимума; проблема остановки

процесса поиска, то есть формулировка однозначного критерия завершения траектории. Эти проблемы можно назвать *«информационными»*, так как их решение уменьшает как исходную неопределенность, так и неопределенность на каждом шаге глобального поиска. Именно решение этих проблем и составляет предмет системного сравнительного анализа алгоритмов глобального поиска. Представленная архитектура программного комплекса может быть обобщена для варианта распределённого решения с использованием архитектуры «клиент-сервер». Структура алгоритмов оптимизации позволяет реализовывать параллельные вычисления. Апробация этих решений, определение их вычислительной и временной эффективности составляет самостоятельное направление исследований, выходящее за рамки данной статьи.

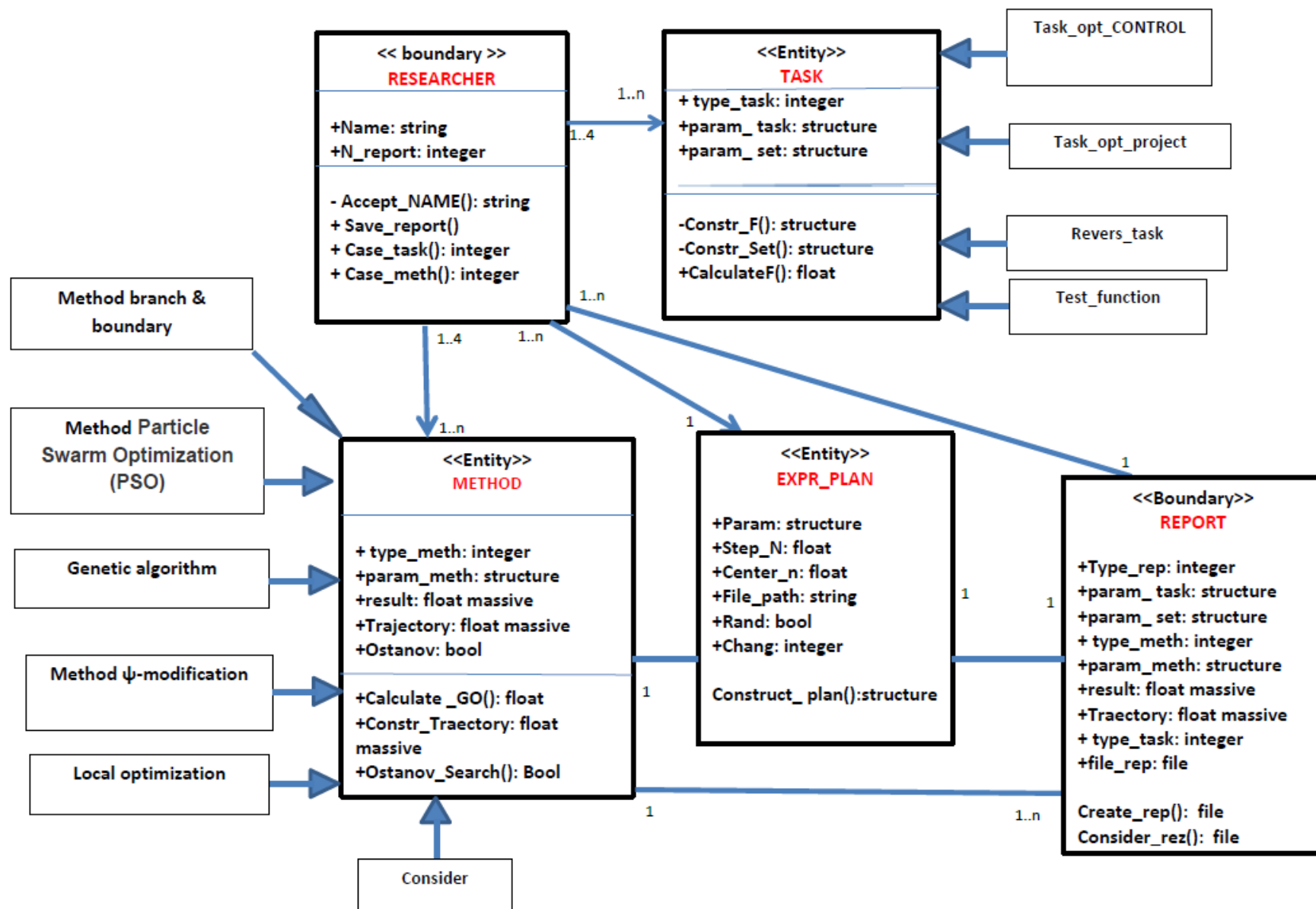


Рис. 1. Диаграмма классов

Литература

1. Жиглявский А.А., Жилинскас А.Г. Методы поиска глобального экстремума. М.: Наука, 1991.
2. Барсегян, А.А., Анализ данных и процессов: учеб. пособие / А.А. Барсегян, М.С. Куприянов, И.И. Холод, М.Д. Тесс, С.И. Елизаров. - 3-е изд. – СПб.: БХВ–Петербург, 2009. – 512 с.:ил.
3. Певнева, А.Г. Классификация эвристических методов глобальной оптимизации / А.Г. Певнева // Московское научное обозрение, 2012. – № 11(27). – С. 70-74.
4. Певнева, А.Г. Построение классификации методов глобальной оптимизации / А.Г. Певнева // Международный научно-исследовательский журнал, 2012. – № 3. – С. 14-23.)
5. Particle Swarm Central [Электронный ресурс] <http://www.particleswarm.info/> (Дата обращения 30.09.2016)
6. Y. Shi, R. C. Eberhart. A modified Particle Swarm Optimizer. IEEE International Conference of Evolutionary Computation, Anchorage, Alaska, 1998
7. A.H. Land, A.G. Doig. An Automatic Method of Solving Discrete Programming Problems // Econometrica. Vol. 28, No. 3 (Jul., 1960), pp. 497-520 Published by: The Econometric Society DOI: 10.2307/1910129
8. Архитектура и программная организация библиотеки для решения задач оптимизации методом ветвей и границ на многопроцессорных вычислительных комплексах М. А. Посыпкин Труды ИСА РАН 2006. Т. 25
9. Певнева А.Г. О некоторых особенностях применения глобального случайного поиска в моделировании химико-технологических схем // Отраслевые аспекты технических наук. 2012. № 2 (14). С. 21-23.
10. Strongin R.G. Algorithms for multi-extremal mathematical programming problems employing the set of joint space-filling curves // Journal of Global Optimization. 1992. V. 2. № 4. P. 357-378. DOI: 10.1007/BF00122428

References

1. Zhigljavskij A.A., Zhilinskas A.G. Metody poiska global'nogo jekstremuma. M.: Nauka, 1991.
2. Barsegjan, A.A., Analiz dannyh i processov: ucheb. posobie / A.A. Barsegjan, M.S. Kuprijanov, I.I. Holod, M.D. Tess, S.I. Elizarov. - 3-e izd. – SPb.: BHV–Peterburg, 2009. – 512 s.:il.
3. Pevneva, A.G. Klassifikacija jevrsticheskikh metodov global'noj optimizacii / A.G. Pevneva // Moskovskoe nauchnoe obozrenie, 2012. – № 11(27). – S. 70-74.
4. Pevneva, A.G. Postroenie klassifikacii metodov global'noj optimizacii / A.G. Pevneva // Mezhdunarodnyj nauchno-issledovatel'skij zhurnal, 2012. – № 3. – S. 14-23.)
5. Particle Swarm Central [Jelektronnyj resurs] <http://www.particleswarm.info/> (Data obrashhenija 30.09.2016)
6. Y. Shi, R. C. Eberhart. A modified Particle Swarm Optimizer. IEEE International Conference of Evolutionary Computation, Anchorage, Alaska, 1998
7. A.H.Land, A.G.Doig. An Automatic Method of Solving Discrete Programming Problems // Econometrica. Vol. 28, No. 3 (Jul., 1960), pp. 497-520
Published by: The Econometric Society DOI: 10.2307/1910129
8. Arhitektura i programmaja organizacija biblioteki dlja reshenija zadach optimizacii metodom vetvej i granic na mnogoprocessornyh vychislitel'nyh kompleksah M. A. Posypkin Trudy ISA RAN 2006. T. 25
9. Pevneva A.G. O nekotoryh osobennostjah primenenija global'nogo sluchajnogogo poiska v modelirovanii himiko-tehnologicheskikh shem // Otrasleyve aspekty tehniceskikh nauk. 2012. № 2 (14). S. 21-23.
10. Strongin R.G. Algorithms for multi-extremal mathematical programming problems employing the set of joint space-filling curves // Journal of Global Optimization. 1992. V. 2. № 4. P. 357-378. DOI: 10.1007/BF00122428

***Anantchenko I.V., Candidate of Engineering Sciences, Associate Professor,
ITMO University (Saint Petersburg National Research University of
Information Technologies, Mechanics and Optics), St. Petersburg State
Technological Institute (technical university)***

*Pevneva A.G., Candidate of Engineering Sciences, Associate Professor,
VKA A.F Mozhaiskogo (Mozhaisky Military Space Academy)*

SYSTEM DESIGN OF COMPUTATIONAL EXPERIMENTS FOR DIFFERENT ENGINEERING INTERPRETATIONS OF GLOBAL OPTIMIZATION

Abstract: the article presents the classification of global optimization methods, discusses the design architecture of software-algorithmic system of computational experiments for different engineering interpretations of global optimization problems

Keywords: global optimization, computational experiment, classification of global optimization methods, architecture of the software