Компьютерная математика

Оптимизация вычислений

Предлагается универсальный подход к построению целевых функций с заданным набором свойств для тестирования и сравнительного анализа алгоритмов оптимизации в задачах с непрерывными, дискретными и смешанным типом переменных.

УДК 519.6, 519.8

В.А. ПЕПЕЛЯЕВ, Ю.М. ЧЕРНЫЙ

ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ ЦЕЛЕВЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ ТЕСТИРОВАНИЯ АЛГОРИТМОВ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Введение. Задачи глобальной оптимизации функций возникают в процессе принятия решений при анализе сложных систем и процессов в самых разных прикладных областях. Одним из методов исследования сложных стохастических систем является имитационное моделирование, в процессе которого перед исследователем стоит задача поиска таких параметров конфигурации сложной системы, которые оптимизируют ее работу в соответствии с заданными критериями. Многие программные средства разработки имитационных моделей предоставляют возможности автоматизированного поиска оптимальных решений на множестве допустимых альтернатив, т. е. решают задачу глобальной оптимизации. Наличие модуля оптимизации в современных системах имитационного моделирования является практически стандартом [1].

В задачах глобальной оптимизации поведение целевой (оптимизируемой) функции при изменении набора значений ее аргументов в большинстве случаев бывает сложно предсказать, что делает практически невозможным построение точных алгоритмов (кроме полного перебора всех допустимых альтернатив) нахождения глобального оптимального решения. На практике целевая функция для любого алгоритма глобальной оптимизации является некоторым «черным ящиком», который своими «откликами» реагирует на изменение значений входных переменных, поэтому при решении подобных задач применяются различные метаэвристические алгоритмы [2].

Следует отметить, что задачи оптимизации, возникающие при исследовании сложных систем средствами имитационного моделирования, имеют ряд специфических особенностей, которые следует учитывать при разработке новых или адаптации существующих оптимизационных алгоритмов:

- стохастический характер критерия оценки работы сложной системы – целевой функции (или функций, если их несколько), которую необходимо оптимизировать;
- большое количество независимых переменных различных типов (числовые непрерывные и дискретные, которые также могут описывать логические и категориальные параметры модели) и, соответственно, различные способы задания множества допустимых значений для каждой переменной [3];
- присутствие среди множества переменных мало- или неинформативных, значения которых слабо или вообще не влияют на значение целевой функции;
- наличие нескольких глобальных экстремумов с близкими значениями (средними) целевой функции и множества локальных экстремумов с несколько худшими значениями целевой функции.

Постановка задачи. Для тщательного анализа поведения и сравнения эффективности различных алгоритмов глобальной оптимизации исследователю необходимо иметь удобный и простой в использовании инструментарий для построения тестовых целевых функций (как правило, от многих переменных), которые могут обладать вышеперечисленными свойствами.

В работе предлагаются основные принципы и подходы, которые помогут специалистам, создающим и адаптирующим методы оптимизации для решения различных прикладных задач, легко генерировать множество тестовых целевых функций, обладающих специальными особенностями, характерными для той или иной предметной областях.

Методы исследования – математический анализ, системный анализ, методы оптимизации, теория вероятностей.

Существующие подходы построения тестовых функций цели. Задача оптимизации (далее, без потери общности, минимизации), которую предстоит решать исследуемым алгоритмам, формулируется следующим образом:

найти оптимальные $\boldsymbol{x}^* = (x_1, \ldots, x_n)$ и $F^* = F(\boldsymbol{x}^*)$ такие, что $F(\boldsymbol{x}) \geq F^* - \varepsilon$ для любого $\boldsymbol{x}$, $x_i \in D_i$, $\varepsilon > 0$.

Параметр ε определяет допустимое отклонение значения целевой функции от значения глобального оптимума, так как в задачах оптимизации сложных систем в качестве решений принимаются такие вектора $\boldsymbol{x}$ значений переменных, для которых выполняется условие $F^* \leq F(\boldsymbol{x}) \leq F^* + \varepsilon$.

Множества D_i допустимых значений для каждой переменной задаются с помощью предложенных в [3] шаблонов данных. Использование шаблонов входных данных задачи оптимизации необходимо при построении тестовых функций для того, чтобы обеспечить принадлежность значения каждой переменной в оптимальном решении $\boldsymbol{x}^*$ множеству допустимых значений задачи.

Для генерации целевых функций для тестирования алгоритмов оптимизации многими авторами предлагались различные методологии. Например, в работе [4] целевая функция строится на основе *n*-мерного параболоида (квадратичной функции от *n* переменных), который дополняется полиномами третьей и пятой степеней для организации локальных минимумов. Недостатками такого подхода является наличие одного глобального минимума, сложность описания и контроля большого количества параметров функции.

В работе [5] для построения целевой функции в задаче максимизации в качестве базовой единицы предложено использовать функцию Гаусса от *n* переменных, которая имеет один максимум, координаты и значение которого зависят от параметров функции. Задавая различные значения параметров с контролируемым расположением и значениями максимумов (как глобальных, так и локальных), можно получить набор функций, на основе которого строится целевая функция вида $F(x) = \max_i g_i(x)$, где $g_i(x)$ – одна из функций Гаусса с *i*-м набором параметров.

В работе [6] представлен обзор и анализ существующих подходов построения целевых функций для задач оптимизации, а также предлагается метод использования периодической функции косинуса для генерации по каждой переменой нескольких глобальных и локальных оптимумов, которые затем образуют с помощью суммирования по всем переменным оптимумы целевой функции от *n* переменных. Применение периодических функций (косинуса или синуса) не всегда подходит для формирования множества глобальных оптимумов: в задачах оптимизации функций от непрерывных переменных значения каждой из переменных в точках некоторых локальных оптимумов совпадают со значениями этих переменных и в точках глобальных оптимумов, что ускоряет работу оптимизационных алгоритмов; в задачах оптимизации функций от дискретных переменных допустимые значения последних не всегда являются периодическими, что не позволит обеспечить в точках оптимумов принадлежность значений переменных множествам их областей определения.

Функции цели от одной переменной. Учитывая существующие методологии построения тестовых целевых функций в задачах оптимизации [4–6], в представляемой работе предлагается в качестве базовых единиц использовать степенную или экспоненциальную функции, которые имеют один минимум с известным значением и координатами. Для упрощения изложения опишем основные принципы построения целевых функций на примере функции, значение которой зависит от одной непрерывной переменной, принимающей значения на ограниченном отрезке $[X_{\min};\ X_{\max}],\ X_{\min} < X_{\max}$.

Рассмотрим множество из *m* степенных функций от одной переменной:

$$g_i(x) = C_i + k_i * |x - a_i|^{p_i},\quad k_i > 0,\ p_i > 0,$$

$$x \in [X_{\min};\ X_{\max}],\ a_i \in [X_{\min}; X_{\max}],\ i=1,m. \qquad (1)$$

Очевидно, что каждая из задаваемых формулой (1) функций имеет на отрезке один минимум, расположение и значение функции в нем определяется параметрами a_i и C_i, а параметры k_i и p_i задают скорость изменения значений функции, т. е. геометрический «ландшафт» значений.

Вместо степенной функции (1) можно в качестве базовой использовать экспоненциальную функцию в виде

$$g_i(x) = H_i - (H_i - C_i) * \exp(-k_i * | x - a_i |^{p_i}),\ k_i > 0,\ p_i > 0,\ \ C_i < H_i,$$
$$x \in [X_{\min}; X_{\max}],\ \ a_i \in [X_{\min}; X_{\max}],\ \ i = 1, m. \qquad (2)$$

В этом случае поведение функции зависит от тех же параметров, что используются при определении степенной, и добавляется параметр H_i, так что каждая i-я функция (2) может принимать значения из интервала (C_i; H_i). Следует заметить, что значения H_i могут быть сколь угодно большими.

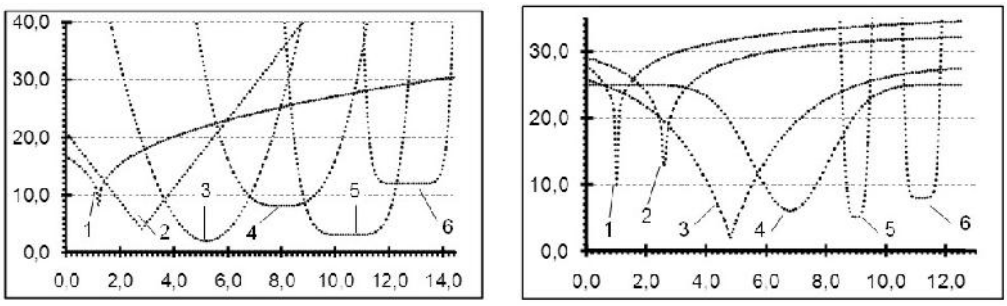
Задавая различные значения параметров (прежде всего, для a и C) функций (1) или (2), можно определить целевую функцию

$$F(x) = \min_i g_i(x) \qquad (3)$$

с несколькими экстремумами (в нашем случае – минимумами), расположение и значение которых известно пользователю. Если необходимо построить целевую функцию для задачи с переменной, которая может принимать только дискретные значения, параметр a в формулах (1) и (2) должен принимать значения только из допустимого множества определения переменной [3].

Примеры функций (1) и (2) от одной переменной показаны на рис. 1 а, б, в табл. 1 приведены значения параметров этих функций.

На рис. 2 показаны целевые функции, построенные по формуле (3) с использованием функций, показанных на рис. 1.



а б

РИС. 1. Примеры функций: а – $g(x) = C + k*|x-a|^p$, б – $g(x) = H – (H – C)*\exp(-k*|x-a|^p)$ при различных значениях параметров

Функции цели от многих переменных. Принцип построения функции, зависящей от n переменных, аналогичен случаю одной переменной, только вместо скалярного значения параметра a_i необходимо задавать вектора значений (a_{i1}, …, a_{ij},…, a_{in}), $i = 1, m$. Формулы (1) и (2) при этом примут вид

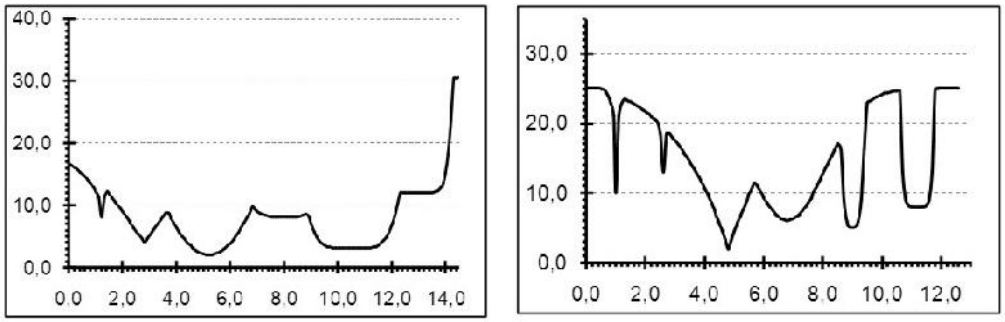
$$g_i(x) = C_i + u_i * Q_i, \tag{4}$$

$$g_i(x) = H - (H - C_i) * \exp(-u_i * Q_i) \ , \ C_i < H, \tag{5}$$

где $Q_i(x) = \sum_{j=1}^{n} k_j * | x_j - a_{ij} |^{p_j}$, $k_j > 0, p_j > 0, \ x_j \in D_j, \ a_{ij} \in D_j$, $i = 1, m, \ \ j = 1, n.$

ТАБЛИЦА 1. Значения параметров функций, показанных на рис. 1

Номер	Функция $C + k*\|x - a\|^p$				Функция $H - (H - C)*\exp(- k*\|x - a\|^p$				
	C	a	k	p	C	H	a	k	p
1	8	1,2	8,0	0,4	10	38	1,0	1,0	0,3
2	4	2,8	6,0	1,0	13	33	2,6	1,0	0,5
3	2	5,2	3,0	2,0	2	28	4,8	0,5	1,0
4	8	8,0	1,0	3,0	6	25	6,8	0,3	2,0
5	3	10,5	0,5	5,0	5	55	9,0	10,0	4,0
6	12	12,7	0,3	9,0	8	43	11,2	40,0	8,0



а б

РИС. 2. Примеры функций цели $F(x)$ при использовании: а – степенной, б – экспоненциальной базовых функций

Чтобы сделать процесс контроля значений параметров при конструировании целевых функций более удобным, предлагается задавать значения параметров k_j и p_j отдельно для каждой переменной. Это можно сделать двумя массивами размерности n каждый. Кроме того, для каждой задаваемой экстремальной точки помимо параметров C_i и $a_i = (a_{i1}, a_{i2}, \ldots, a_{in})$ предлагается добавить параметр u_i, чтобы иметь возможность для каждой экстремальной точки задавать разные размеры области притяжения [4]. Это потребует дополнительно m значений.

Таким образом, вместо двух матриц размерностью $m \times n$ для задания значений параметров k и p в каждой экстремальной точке, достаточно двух векторов размерности n и одного вектора размерности m. При таком подходе не только уменьшается размер выделяемой памяти для хранения значений переменных в программе, но и упрощается контроль при задании характера поведения целевой функции вблизи экстремальных точек.

Параметр H в (5) полагается одинаковым для всех $g_i(\boldsymbol{x})$, и, следовательно, функция $F(\boldsymbol{x})$ может принимать значения в интервале $[\min_i C_i; H)$. Вид формулы (3) не изменится, только в качестве аргумента функции подразумевается не число, а вектор $\boldsymbol{x}$.

Использование экспоненциальной функции (5) для построения целевых функций предпочтительнее по сравнению со степенной. Экспоненциальная функция позволяет создавать экстремумы как с очень малой, так и с достаточно большой областью притяжения. Наличие ограничения сверху позволяет в режиме трассировки процесса поиска оптимальных решений отслеживать и оценивать поведение алгоритмов по промежуточным значениям функции цели.

Чтобы автоматизировать процесс генерации тестовых целевых функций и иметь возможность отслеживать процесс поиска алгоритмами оптимальных решений, предлагается разделить области для глобальных и локальных экстремальных значений. Для этого предлагается ввести три параметра – M, L и ε. Значения C_i для глобальных экстремумов должны задаваться в интервале $[M, M + \varepsilon]$ $(\varepsilon > 0)$, а для локальных – в интервале $[L, H - \varepsilon)$. При этом должны выполняться условия

$$M + 3^* \varepsilon < L < H - \varepsilon, \qquad (6)$$

смысл которых станет понятен далее в разделе Стохастичность функции цели.

Задание признака значимости переменных. В задачах моделирования, оценивания, прогнозирования, т. е. в задачах, где необходимо определить влияние отдельной входной переменной на результат вычисления целевой (или аппроксимирующей) функции, а также оценить степень такого влияния, почти всегда оказывается, что из всего множества входных параметров-факторов некоторые переменные оказывают очень слабое влияние на результат вычислений или моделирования. Такие факторы обычно называются малоинформативными. Поэтому при генерации тестовых целевых функций необходимо иметь возможность обозначить любую переменную как неинформативную. Это достигается введением массива параметров w_j – признаков информативности для каждой переменной. Функция $Q_i(\boldsymbol{x})$ в формулах (4) и (5) примет вид

$$Q_i(x) = \sum_{j=1}^{n} w_j * k_j * | x_j - a_{ij} |^{p_j}, \quad w_j \in \{0,1\}.$$

Если значение равно 0, то соответствующая переменная не вносит свой вклад в вычисление значения целевой функции. Введение дополнительного массива параметров $\{w_j\}$ вместо того, чтобы использовать массив $\{k_j\}$, задавая в нем отдельные нулевые значения, предлагается для того, чтобы разделить функциональные зоны ответственности каждого параметра, описывающего поведение конструируемой целевой функции. Наличие отдельного массива для обозначения информативности переменных позволяет исследователю на одной и той же функции проводить тестирование алгоритма оптимизации, делая неинформативными разные переменные, меняя значения 0 и 1 в массиве $\{w_j\}$. Для массива параметров $\{k_j\}$ потребовалось бы после значения 0 восстанавливать предыдущее значение конкретного параметра k_j.

Множество локальных экстремумов. Функции $g_i(\boldsymbol{x})$ в формулах (4) и (5) позволяют задавать точное расположение как глобальных экстремумом, так и локальных. Однако, если исследователя не интересует расположение и количество локальных экстремумов, или он дополнительно хочет добавить множество неконтролируемых локальных экстремальных точек, чтобы «запутать» алгоритм, то можно использовать в качестве дополнительной функции $g_0(\boldsymbol{x})$ в (3) периодическую и ограниченную функцию с использованием косинуса (или синуса):

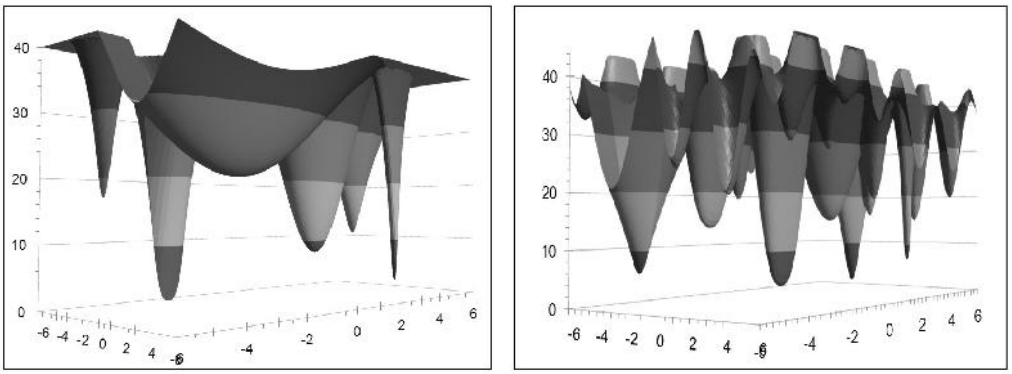
$$g_0(\boldsymbol{x}) = K - L^*\cos(\varphi(\boldsymbol{x})), \tag{7}$$

$$L < K < H - \varepsilon, \qquad 0 < L' < K - L, \tag{8}$$

где $\varphi(\boldsymbol{x})$ – некоторая заданная пользователем функция, зависящая от всех или нескольких входных переменных.

Как следует из условий (8), нижняя граница функции (7) не может быть меньше, чем значение L, поэтому ее наличие не повлияет в силу ограничений (6) на присутствие у функции (3) заданных пользователем глобальных экстремумов (минимумов). При этом некоторые локальные экстремумы могут быть поглощены функцией (7) в силу определения функции (3).

На рис. 3 показаны примеры целевых функций от двух переменных с несколькими экстремумами при отсутствии (рис. 3, а) и при наличии (рис. 3, б) периодической функции.



а б

РИС. 3. Пример функций цели от двух переменных: а – без наличия, б – при наличии функции $\cos(\varphi(\boldsymbol{x}))$

Стохастичность функции цели. Как отмечалось выше, одной из особенностей целевых функций в моделировании является наличие случайных факторов при получении результатов наблюдений.

Чтобы имитировать стохастичность поведения создаваемых генератором функций и при этом избежать значительного пересечения областей значений локальных и глобальных экстремумов, достигается добавлением к (4) или (5) случайного числа с нормальным распределением $N(0, (\varepsilon/3)^2)$. Таким образом, в соответствии со свойствами нормального распределения более 99,7 % наблюдаемых значений целевой функции в точках глобальных минимумов будут попадать в интервал $[M - \varepsilon; M + 2*\varepsilon]$, а в локальных минимумах – не будут опускаться ниже границы $L - \varepsilon$, из чего следуют соотношения допустимых значений параметров ограничения (6).

Средства автоматизации генерации тестовых функций цели с заданными свойствами. На основе представленной методологии в отделе системного моделирования Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины создан генератор целевых функций для исследования применения алгоритмов оптимизации в имитационном моделировании сложных систем.

Входные параметры, задающиеся пользователем для генератора, такие:

H – верхняя граница значений функции;

M – значение абсолютного глобального минимума;

ε – допустимое отклонение от M для значений глобальных минимумов;

L – нижняя граница для значений локальных минимумов;

s – количество глобальных минимумов, значения функции лежат в интервале $[M; M + \varepsilon]$;

t – количество локальных минимумов, значения функции лежат в интервале $[L; H - \varepsilon)$;

K – значение уровня нулевых значений функции $\cos(\varphi(\boldsymbol{x}))$ в (7);

$v_{\cos}$ – признак наличия периодической функции;

v_{prob} – признак наличия случайной величины.

Схематичное относительное расположение параметров и допустимые зоны значений целевой функции в точках экстремумов показаны на рис. 4.

Генератор, используя файл описания типов переменных задачи [3] и заданные пользователем параметры целевой функции, случайным образом генерирует в области допустимых значений расположение s глобальных и t локальных минимумов и сохраняет значения функции и координаты всех экстремумов вместе с другими параметрами функции (H, M, ε, L, s, t, K, $v_{\cos}$, v_{prob}) в текстовом файле с разделителями-знаками табуляции.

Структура файла такова, что сначала идут единичные параметры, заданные пользователем как входные для генератора, а затем массивы параметров, описывающие характеристики точек экстремумов. В табл. 2 приведен шаблон относительного расположения массивов параметров. Пользователь может редактировать данные в файле, сохраняя заданный шаблон записей, с помощью текстового редактора или электронных таблиц.

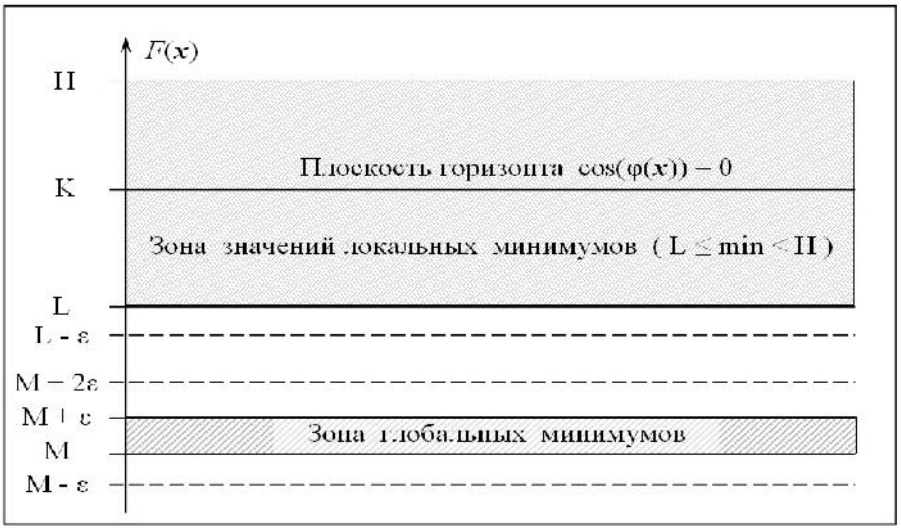


РИС. 4. Зоны для значений локальных и глобальных минимумов
в зависимости от задаваемых для генератора целевых функций параметров

ТАБЛИЦА 2. Шаблон представления массивов параметров при задании функций цели

Индекс точки экстремума			w_1	w_2	...	w_j	...	w_n
			k_1	k_2	...	k_j	...	k_n
			p_1	p_2	...	p_j	...	p_n
1	u_1	C_1	a_{11}	a_{12}	...	a_{1j}	...	a_{1n}
2	u_2	C_2	a_{21}	a_{22}	...	a_{2j}	...	a_{2n}
...	...	...	...	...	...	...	...	...
i	u_i	C_i	a_{i1}	a_{i2}	...	a_{ij}	...	a_{in}
...	...	...	...	...	...	...	...	...
m	u_m	C_m	a_{m1}	a_{m2}	...	a_{mj}	...	a_{mn}

Выводы. Предложенные и описанные в работе общие принципы построения целевых функций, предназначенных для тестирования алгоритмов оптимизации, позволяют достаточно легко и просто конструировать достаточно широкий спектр функций с заданными свойствами и особенностями. Представленный подход может быть использован для разработки и исследования алгоритмов в задачах оптимизации в разных прикладных областях на множествах непрерывных, дискретных и смешанных типов переменных.

В.А. Пепеляєв, Ю.М. Чорний

ПРИНЦИПИ ПОБУДОВИ ЦІЛЬОВИХ ФУНКЦІЙ ДЛЯ ТЕСТУВАННЯ АЛГОРИТМІВ ГЛОБАЛЬНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ

Запропоновано універсальний підхід до побудови цільових функцій із визначеним переліком ознак для тестування та порівняльного аналізу алгоритмів оптимізації у задачах з неперервними, дискретними та змішаним типом змінних.

V.A. Pepeliaev, Yu.M. Czornyy

THE PRINCIPLES OF FITNESS FUNCTIONS BUILDING FOR GLOBAL OPTIMIZATION ALGORITHMS TESTING

A universal approach to create fitness functions with a predetermined set of features is proposed for testing and comparative analysis of optimization algorithms in problems with continuous, discrete, and mixed-value variables.

1. Пепеляев В.А. К вопросу об интеграции методов оптимизации и имитационного моделирования. *Теория оптимальных решений*. 2003. № 2. С. 51– 60.
2. Пепеляев В.А., Сахнюк М.А., Черный Ю.М., Шваб Н.Д. К вопросу о реализации мета-эвристических стратегий оптимизации моделирования. *Компьютерная математика*. 2005. № 2. С. 26 – 33.
3. *Бигдан В.Б., Криковлюк А.А., Пепеляев В.А.* Унификация структур входных данных для оптимизационных алгоритмов в имитационных экспериментах. *Компьютерная математика*. 2017. № 1. С. 45 – 54.
4. Gaviano M., Kvasov D.E., Lera D., Sergeyev Ya.D. Algorithm 829: Software for generation of classes of test functions with known local and global minima for global optimization. *ACM* Transactions on Mathematical Software. 2003, 29(4). P. 469 – 480.
5. Gallagher M., Yuan B.A. General-purpose tunable landscape generator. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*. 2006. 10(5). P. 590 – 603.
6. Rönkkönen J., Li X., Kyrki V., Lampinen J. A generator for multimodal test functions with multiple global optima. *Proceedings of the 7th International Conference on Simulated Evolution and Learning (SEAL '08), Berlin, Heidelberg*. Springer-Verlag. 2008. P. 239 – 248.

Получено 20.11.2017

Об авторах:

Пепеляев Владимир Анатольевич,
доктор физико-математических. наук, заведующий отделом
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины,

Черный Юрий Михайлович,
научный сотрудник
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины.
E-mail: dept160incyb@gmail.com