Підходи до класифікації методів неперервної нелінійної глобальної оптимізації

Святний В. А., Гоголенко С. Ю.
Кафедра ЕОМ, ДонНТУ
sergiy.gogolenko@gmail.com

Abstract

Svjatnyj V. A., Gogolenko S. Yu., Approaches to the classification of continuous nonlinear global optimization methods. *The great variety of continuous nonlinear global optimization (CNLGO) methods were developed for different optimization problems. It leads to difficulties of their classification. This article contains an attempt to derive overwhelming integral taxonomy of CNLGO methods from existing classifications and formal definition of CNLGO method and problem model. Proposed formal definition of CNLGO method differs from existing in strict distinction between features of optimization algorithm and features of problem model. Considered classifications are divided on two groups according to its basic criterion – morphological and functional. Proposed integral taxonomy doesn't contradict with present morphological and the most of functional classifications and reflects state-of-the-art in global optimization theory. Potential developers of optimization software may be more confident in projecting of interfaces for classes after reading this paper.*

Вступ

"Оптимізація" являє собою пошук серед множини розв'язань визначеної задачі такого розв'язання, яке кваліфікується як найкраще. Основою для проведення оптимізації є множина всіх можливих альтернатив і критерій (або набір критеріїв) якості, який визначає принцип вибору кращої з кількох альтернатив. Задачі оптимізації у випадку, коли множина альтернатив описується підмножиною множини точок n-мірного евклідового простору, а критерієм якості є неперервна дійсна функція з більш ніж одним екстремумом (або з їх невідомою кількістю), утворюють клас задач неперервної нелінійної глобальної оптимізації (ННГО).

Існує декілька підходів до прийнятного розв'язання задачі ННГО. Класичний підхід полягає у відшукуванні точного значення глобального оптимуму за допомогою застосування апарату математичного аналізу до функції з відомим аналітичним виразом. Альтернативний класичному підхід полягає у використанні ітеративних процедур пошуку наближеного значення оптимуму. Подібні процедури називаються алгоритмами або чисельними методами ННГО (надалі просто методи ННГО). У випадку, коли методи ННГО використовують засоби інтерактивної взаємодії з користувачем в процесі пошуку розв'язання задачі ННГО (наприклад, методи динамічної візуалізації [15]), вони називаються неформальними. Предметом даної статті є чисельні методи ННГО за виключенням саме неформальних алгоритмів.

Починаючи з 1949 р., коли Н. К. Метрополісом і С. М. Уламом вперше було запропоновано метод ННГО Монте-Карло, теорія чисельного розв'язання задачі ННГО почала бурхливо розвиватися. Дослідниками було запропоновано велику кількість методів ННГО з різноманітними базовими ідеями, що на даний момент значно ускладнило їх адекватну класифікацію. Це, в свою чергу, призвело до появи великої кількості відмінних між собою підходів до класифікації методів ННГО [2-25], в яких автори згідно зі своїм баченням виділили спільні ідейні і теоретичні засани методів ННГО, означили схожі властивості в їх поведінці. Метою даної роботи є розробка інтегральної багатоступеневої класифікації методів ННГО, яка б поєднувала у собі найкращі властивості вже існуючих класифікацій, не вступаючи з ними у протиріччя, і базувалася на чіткій та обґрунтованій критеріальній основі. Задля досягнення поставленої мети в статті запропоновано формалізоване визначення методу оптимізації, яке визначає необхідну критеріальну основу, а також наводиться огляд і короткий аналіз найвідоміших і найактуальніших класифікацій.

Визначення моделі задачі і алгоритму ННГО

Розглядається задача ННГО в наступній постановці: задана непуста компактна множина $X \subseteq R^n$ та визначена обмежена знизу і неперервна на X функція $f : X \to Y \subset R$; необхідно знайти наближення до

$$\hat{f} := f(\hat{x}) = \inf_{x \in X} f(x) \tag{1}$$

і точку $\hat{x} \in X$, в якій дане наближення реалізується. При цьому вважається, що множина X має достатньо просту структуру і не вимагає при побудові метода розв'язання задачі (1) використання додаткових процедур умовної оптимізації для урахування специфіки цієї множини або спрощення її структури шляхом модифікації самої задачі оптимізації (1). Функція $f(x)$ називається цільовою функцією (ЦФ) та являє собою критерій, який визначає вибір з множини можливих розв'язань. Множина X описує усі можливі способи досягнення визначеної мети чи усі можливі способи функціонування деякої системи і називається множиною оптимізації або допустимою множиною. Будь-який елемент $x \in X$ називається допустимою точкою задачі. Значення функції $\hat{f} := f(\hat{x})$ в точці $\hat{x} \in X$ називається глобальним мінімумом (ГМ), а власне точка $\hat{x} \in X$ – точкою глобального мінімуму функції (ТГМ). Під наближенням до ТГМ в задачі (1) зазвичай розуміють будь-яку точку, що належить до однієї з наступних множин [5, С.10]:

$$A(\delta) = \{ x \in X \mid f(x) \le f(\hat{x}) + \delta \}, \tag{2}$$

де $\delta > 0$ – похибка за значенням функції

або

$$B(\varepsilon) = B_{\varepsilon}(\hat{x}, \rho) = \{ x \in X \mid \rho(x, \hat{x}) \le \varepsilon \}, \tag{3}$$

де $\varepsilon > 0$ – похибка за аргументом функції, ρ – деяка метрика на X. Оскільки часто для покращення наближення до ТГМ після завершення роботи методів ННГО використовують методи неперервної локальної оптимізації (ННЛО), які для заданої початкової точки знаходять локальний мінімум задачі з будь-якою наперед заданою точністю, то під наближенням до ТГМ задачі (1) можна також розуміти точки з зони тяжіння глобального мінімуму, тобто точки, для яких метод ННЛО сходиться до глобального мінімуму:

$$C(a^{LO}) = \{ x \in X \mid \rho(a^{LO}(x), \hat{x}) \le \varepsilon^{LO} \}, \tag{4}$$

де a^{LO} – обраний метод ННЛО, $\varepsilon^{LO} > 0$ – припустима похибка метода ННЛО, ρ – деяка метрика на X.

У найзагальнішому вигляді пошук оптимуму методами ННГО можна представити, як ітераційний процес генерування пробних точок з X і прийняття рішень про наближене розташування (чи значення) оптимуму на основі апріорних відомостей про задачу й інформації про локальні характеристики ЦФ у згенерованих точках.

Операція обчислення локальних характеристик ЦФ у пробній точці x_i називається випробуванням. Причому пробні точки, а отже і локальні характеристики ЦФ, у загальному випадку можуть описуватися не лише точними координатами в X (чи відповідно R), але і множинами інтервалів, множинами нечітких точок чи множинами імовірнісних точок над X (чи над R), які надалі позначаються F^X (чи F^R). У випадку простих випробувань з точними координатами маємо $F^X = X$ і $F^R = R$. Використання подібних „множинних” пробних точок характерне для робіт з теорії і методів ННГО останніх п’ятнадцяти років [9, 16, 18]. Для реалізації випробувань методами ННГО використовується аналітично чи алгоритмічно задана функція проведення випробувань (ФПВ) $\varphi(x_i, l_i)$, яка визначає необхідні локальні характеристики ЦФ (у загальному випадку з детермінованими і/або випадковими похибками) на основі пробних точок. Однією з характеристик ФВП φ є максимальна кількість локальних характеристик ЦФ m, які ФВП спроможна обчислити. Оскільки часто алгоритм ННГО може вимагати неповних випробувань, в якості одного зі своїх параметрів, окрім безпосередньо пробної точки для проведення обчислень, функція φ має m-мірний вектор булевих змінних, елементи якого визначають необхідність обчислення тієї чи іншої локальної характеристики. Набір локальних характеристик ЦФ, які обчислюються за допомогою функції φ, може варіюватися в залежності від методу ННГО. У найпростішому випадку такою величиною є лише значення ЦФ у точці, тобто $y_i = \varphi(x_i,1) = f(x_i) + \xi_i$, де ξ_i – сумарна похибка при обчисленні значення ЦФ в точці $x_i \in F^X$. У складніших випадках до обчислюваних за допомогою φ локальних характеристик ЦФ можуть відноситися градієнт, гесіан, значення складових декомпозиційної ЦФ і її якобіану, тощо. Результат випробувань на перших i кроках складає впорядкована множина трійок $\Sigma_i = \{(x_j, l_j, y_j), j = \overline{1,i}\}$, де x_j – пробна точка, l_j – булевий вектор ознак достовірності обчислення локальних характеристик, а $y_j = \varphi(x_j, l_j)$.

До апріорних відомостей про задачу відносяться апріорна модель M_Φ класу функцій Φ, до якого належить ЦФ, і апріорна модель M_X допустимої множини X. Модель M_Φ може містити як локальну, так і глобальну інформацію про ЦФ, а також клас функцій Φ, відому до початку виконання алгоритму ННГО. Локальна інформація зазвичай включає значення локальних характеристик ЦФ у кількох точках допустимої множини. До глобальної інформації належать загальні відомості про клас функцій Φ і величини інтегральних характеристик функцій даного класу. До загальних відомостей про клас функцій Φ відносяться ознаки неперервності та гладкості функцій класу Φ, ствердження про те, що функцій класу Φ мають обмежену швидкість зростання (є ліпшицевими і т.п.), тощо. Прикладами інтегральних характеристик, що часто використовуються методами ННГО, є кількість локальних оптимумів f на X, константа Ліпшиця для f, тощо. У випадку часткової апріорної невизначеності, або складності формалізації апріорних знань про ЦФ за допомогою детермінованої моделі M_Φ, апріорна модель M_Φ може задаватися статистично (наприклад, за допомогою стохастичної функції чи випадкового процесу). Широкий набір можливих детермінованих апріорних моделей M_Φ наведено в роботі А. А. Жиглявського [4]. Приклади статистичних моделей можна знайти в [5, 6].

Основою апріорної моделі M_X є множина параметрів, що визначають знання про допустиму множину. Кількість цих параметрів залежить від способу завдання допустимої множини. Так, наприклад, у випадку задачі безумовної ННГО X не має параметрів, а у випадку, коли допустима множина є n-мірним паралелепіпедом $X = [a,b]^n$, параметрами виступає множина пар $M_X = \{(a_i, b_i) \mid i = \overline{1,n}\}$, що задають нижню і верхню границі паралелепіпеда. Модель M_X за своєю природою завжди є детермінованою.

Функція проведення випробувань та апріорні відомості про задачу ННГО складають модель задачі ННГО. Отже, формально модель задачі ННГО можна визначити наступним чином.

Визначення 1 (*Модель задачі ННГО*).

Моделлю задачі ННГО є кортеж

$$p = <\varphi, M_\Phi, M_X> \in \mathrm{P},$$

де $\varphi : F^X \times \{0,1\}^m \to F^{R^m}$ – функція (алгоритм) проведення випробувань;

M_Φ – апріорна модель класу функцій, до якого належить ЦФ;

M_X – апріорна модель допустимої множини X.

Основу ітерацій методу ННГО складають процедура вибору пробних точок, процедура поточної оцінки глобального оптимуму і процедура перевірки необхідності завершення обчислювального процесу, а також набір параметрів методу $\theta \in \Theta$, що уточнюють їх принцип роботи. Кожна з даних процедур може бути описана вектором функцій, параметрами яких виступають група параметрів методу θ, модель задачі ННГО $p \in P$ і множина результатів випробувань на попередніх i кроках $\Sigma_i \in (F^X \times \{0,1\}^m \times F^{R^m})^i$.

До найбільш розповсюджених параметрів методу θ належать необхідна точність (або дисперсія) знаходження оптимуму за координатою і за значенням, максимальна допустима кількість випробувань і ітерацій методу, обмеження на використання ресурсів обчислювальної системи, тощо. Повний набір параметрів є специфічним для кожного окремого методу. У переважній більшості формальних і напівформальних алгоритмів ННГО параметри θ лишаються постійними протягом усього процесу пошуку оптимуму, детермінуючи поведінку алгоритму на ітераціях.

Функції $d_i(\theta, p, \Sigma_i)$, що визначають алгоритм вибору пробних точок, називають вирішуючими функціями. Результатом роботи i-ої вирішуючої функції d_i є координата x_{i+1} для проведення $(i+1)$-ого випробування. Функції оцінки глобального екстремуму $e_i(\theta, p, \Sigma_i)$ задають алгоритм розрахунку наближення до ТГМ і ГМ в результаті проведення i випробувань. Оскільки в ряді випадків адекватно оцінити значення ТГМ значно складніше, ніж отримати оцінку ГМ, кожна функція e_i в якості результату повертає оцінку ТГМ і ГМ, а також ознаку достовірності оцінки ТГМ. Інколи алгоритм ННГО окрім наближених значень ТГМ і ГМ дозволяє отримати оцінку інтервалу, в якому достовірно знаходиться глобальний оптимум, або оцінки ТГМ і ГМ у імовірнісному вигляді (наприклад, у вигляді нормально розподілених величин з заданими математичними очікуваннями і дисперсіями), тому оцінки ТГМ x_i^e і ГМ y_i^e коректніше описувати не точками з множин X і Y, а точками деяких імовірнісних чи детермінованих множин E^X і E^Y, визначених над X і Y відповідно. Умова зупинки алгоритму ННГО описується функціями

$\tau_i(\theta, p, \Sigma_i)$, які повертають булеву змінну – ознаку можливості завершення обчислювального процесу. Функції, що визначають метод ННГО, повинні задовольняти ряду очевидних вимог, найважливішими з яких є дві наступні:

a) умова однозначності завершення процесу пошуку оптимуму [6]:

$$\tau_i(\theta, p, \Sigma_i) = 1 \Rightarrow \tau_{i+1}(\theta, p, \Sigma_{i+1}) = 1, \quad i \in N, \tag{5}$$

b) умова непогіршення оцінок оптимуму:

$$e_i(\theta, p, \Sigma_i) \geq_e e_{i+1}(\theta, p, \Sigma_{i+1}), \quad i = \overline{1, T-1}, \tag{6}$$

де $T = \min\{i \mid \tau_i(p, \Sigma_i) = 1\}$, $\geq_e$ – відношення непогіршення оцінки (тобто зменшення за значенням ГМ або уточнення оцінки (звуження її інтервалу, зменшення дисперсії і т.п.)).

Слід зауважити, що у неформальних методах ННГО параметри процедур пошуку θ і модель задачі p не є постійними і можуть непередбачуваним чином інтерактивно змінюватися користувачем, тому при переході на нову ітерацію в таких методах умови (5) і (6) не завжди виконуються.

Усе вищесказане можна узагальнити і формалізувати у наступному визначенні методу ННГО, яке є необхідним усучаснюючим розширенням і уточненням відомого в літературі визначення чисельного методу ННГО Р. Г. Стронгіна [1, 6].

Визначення 2 (*Метод ННГО*).

Чисельний метод (алгоритм) ННГО визначає кортеж з множини параметрів і трьох векторів функцій

$$a = <\theta, \vec{d}, \vec{e}, \vec{\tau}> \in A,$$

де $\theta \in \Theta$ – параметри методу;

$\vec{d}$ –вектор вимірюваних функцій $d_i : \Theta \times \mathrm{P} \times (F^X \times \{0,1\}^m \times F^{R^m})^i \to X$, що задають вирішуючі правила;

$\vec{e}$ – вектор функцій $e_i : \Theta \times \mathrm{P} \times (F^X \times \{0,1\}^m \times F^{R^m})^i \to \{0,1\} \times E^X \times E^Y$, що оцінюють ГМ і ТГМ (при інтерпретації наближення до оптимуму за формулою (2), (3) або(4)) і задовольняють вимозі (6);

$\vec{\tau}$ – вектор функцій $\tau_i : \Theta \times \mathrm{P} \times (F^X \times \{0,1\}^m \times F^{R^m})^i \to \{0,1\}$, що визначають умови зупинки обчислювального процесу і задовольняють вимозі (5).

Морфологічні і функціональні класифікації методів ННГО

Усі підходи до класифікації методів ННГО можна віднести до групи функціональних чи до групи морфологічних підходів. Основою для проведення класифікації в функціональних підходах виступають функціональність та зовнішні прояви роботи алгоритмів. У морфологічних підходах класифікація проводиться за особливостями побудови та реалізації алгоритмів. У цілому, морфологічні класифікації корисніші для розробників оптимізаційних алгоритмів і програмного забезпечення (ПЗ) за функціональні, бо в них факт належності метода до певного класу віддзеркалює логіку його побудови. Морфологічні класифікації корисніші і з методологічної точки зору. Оскільки в таких класифікаціях алгоритми в межах одного класу мають спільні методологічні засади, то для їх теоретичного аналізу (визначення типу, швидкості, точності і надійності збігання, витрат ресурсів на реалізацію, тощо) часто використовуються подібні підходи. У свою чергу функціональні класифікації корисніші для користувачів алгоритмів, оскільки в них робиться акцент на зовнішніх проявах роботи методів ННГО.

В якості критеріїв для морфологічних класифікацій різними авторами найчастіше використовуються:

а) структурна та ідейна спільність з іншими алгоритмами [17];
б) наявність, місце і роль випадкових (і статистичних) процедур [4, 8, 11, 13, 24];
в) наявність (відсутність) глобальної моделі цільової функції, для якої розробляється алгоритм [5, 7, 12, 14, 22, 23];
г) наявність, місце і роль процедур пошуку локального екстремуму [6, 23, 25];
д) ступінь формалізації процедури пошуку [15];
е) пасивність пошуку [11, 21] і придатність до реалізації на паралельних ЕОМ [21].

Критерій спільності ідей побудови алгоритмів в тій чи іншій мірі притаманний практично усім існуючим класифікаціям методів ННГО. Це пов'язано з тим, що більшість класифікацій складається з кількох рівнів деталізації. На нижньому рівні таких класифікації вказуються групи алгоритмів зі спільними ідеями побудови, з яких і формуються верхні щаблі класифікації. Це характерно як для морфологічних, так і для функціональних класифікацій. Існують і однорівневі класифікації, в яких виділяються групи ідейно спільних методів без їх об'єднання за іншими критеріями. Прикладом такої однорівневої класифікації є класифікація Й. Д. Пінтера [17], в якій виділяються дев'ять груп методів. У пізніших класифікаціях Й. Д. Пінтера цей базовий набір груп значно розширився [18, 19]. До найважливіших груп методів ННГО, які згадуються різними авторами, відносяться адаптивний стохастичний пошук, включаючи кластерні методи; методи статистичних моделей, включаючи байєсівський пошук та інформаційно-статистичні методи; методи гілок і границь (B&B – branch and bound), включаючи ліпшицеву оптимізацію і інтервальні методи; методи повного перебору, включаючи неадаптивні методи сіток; методи згладжування, включаючи методи гомотопії (подовження) і тунельні методи (у тому числі методи заповнених функцій); траєкторні методи, включаючи методи на основі диференціальних рівнянь (ДР); методи трасувань і штрафів на локальні мінімуми; стратегії релаксації, включаючи методи зовнішньої апроксимації; апроксимаційні методи, включаючи метод поверхонь відгуку і наближене опукле недооцінювання; м'які обчислення (ЕС – soft computing), включаючи методи з нечіткою логікою (FLM – fuzzy-logic methods), нейромережні методи (ANNM – artificial neural networks methods) і еволюційні обчислення (ЕС – evolutionary computation) з еволюційними алгоритмами (ЕА – evolutionary algorithms); ансамблеві (популяційні) методи, включаючи ЕА і методи моделювання інтелекту груп (PSO – particle swarm optimization); підходи на базі навчання, включаючи ANNM та нарощуване навчання популяцій (PBIL – population-based inctemental learning); методи сусідів, включаючи метод моделювання затвердіння (SA – simulated annealing); пошук з табу (TS – taboo search); жадібні методи ("greedy" methods); методи перестановок; методи Монте-Карло і випадкового крокування; методи прямого пошуку (PS – pattern/direct search), включаючи методи гнучких поліедронів (нелінійні стохастичні симплекси і т.п.) і розсіяного пошуку (SS – scatter search); методи мультистарту; методи згладжування і фільтрації; методи редукції до інших задач, включаючи редукцію розмірності; тощо. В роботі [5] А.А.Жиглявський, уточнюючи власну класифікацію [4], запропонував розрізняти п'ять крупних груп ідейно споріднених методів ННГО: методи, що ґрунтуються на моделі обмеженої швидкості зміни функції; методи, що ґрунтуються на статистичних моделях; методи редукції до інших обчислювальних задач; методи з проміжним локальним пошуком; алгоритми глобального випадкового пошуку.

Історично найпершим підходом до класифікації з кількома рівнями слід вважати підхід, згідно з яким за ознакою наявності випадкових процедур методи ННГО розбиваються на клас детермінованих і клас стохастичних методів. Дана класифікація була запропонована Л. Діксоном і Г. Сзегьо у другому томі першої в світі книги, присвяченої виключно проблематиці ННГО [13]. Надалі цей підхід став базовим для класифікацій А. А. Жиглявського [4], А. Рінноой-Кана і Г. Тіммера, Т. Вайзе [24], І. В. Орлянсьної [8], тощо. Причому трактування випадкових процедур у різних авторів має певні відмінності. Так, у Т. Вайзе клас стохастичних методів об'єднує алгоритми, в яких при розрахунку пробних точок використовуються генератори випадкових чисел, а у А. А. Жиглявського клас стохастичних методів складається з методів, що ґрунтуються на імовірнісних моделях або інших ідеях, запозичених з теорії ймовірностей і математичної статистики. Через це в класифікації А. А. Жиглявського до стохастичних віднесено статистичні (оптимальні у середньому) методи, що не є характерним для класифікації Т. Вайзе, а, наприклад, глобальний випадковий пошук (ГВП) відноситься до стохастичних методів у обох класифікаціях. З усіх класифікацій за ознакою наявності випадкових процедур класифікація А. А. Жиглявського найкраще обґрунтована методологічно. Оскільки шляхом рандомізації практично в будь-який алгоритм ННГО можна включити вибір пробних точок з використанням генераторів випадкових чисел, то границі між класами в класифікаціях, подібних до класифікації Т.Вайзе, фактично є штучними. Розбиття методів ННГО на детерміновані і стохастичні водночас є складовою частиною ряду інших класифікацій [2, 11, 15, 25].

Іншим широко розповсюдженим критерієм є наявність чи відсутність в основі методів пошуку оптимуму глобальної моделі ЦФ. Даний підхід характерний для оглядових робіт А. Г. Жилінскаса [5, 22], А. Г. Сухарєва [7], Й. Дрео та ін. [12], П. Грея та ін. [14], А. Торна [22, 23], тощо. П. Грей і А. Торн на верхніх щаблях своїх класифікацій розрізняють три класи методів. Перший клас складають методи, в основі яких лежать детерміновані моделі ЦФ, що ґрунтуються на апріорних знаннях про швидкість зміни ЦФ чи на аналітичному формулюванні ЦФ, а отже і на можливості її інтервального аналізу. П. Грей називає такі методи стратегіями розбиття, а А. Торн методами з гарантією. У вітчизняних працях [1, 5, 6, 7] для позначення даного класу методів використовується термін мінімаксні стратегії. Другий клас утворюють методи, що використовують апріорну інформацію або припущення про те, як ЦФ може бути промодельована певною статистичною функцією, параметри якої оцінюються й уточнюються в процесі пошуку оптимуму на основі попередніх випробувань. В термінології П. Грея це статистичні методи, а в термінах А. Торна байєсівські. У вітчизняній літературі такі методи називаються оптимальними у середньому (або байєсівськими) [1, 4, 5, 6]. Усі інші методи, в основі яких немає глобальної моделі ЦФ, П. Грей називає неточними, а А. Торн пошуковими. Серед пошукових методів за наявністю адаптивних властивостей А. Торн розрізняв методи глобального пошуку й адаптивні методи. А. Г. Жилінскас і Й. Дрео об’єднують стратегії розбиття і статистичні методи в один клас, отримуючи таким чином два класи: клас раціональних (традиційних) методів і клас евристичних методів (метаевристик). А. Г. Сухарєв, напроти, в один клас об’єднує статистичні і неточні методи, називаючи їх евристичними, а стратегії розбиття називає оптимальними методами.

Ознака застосування процедур пошуку локального екстремуму в процесі роботи метода ННГО є основою для класифікацій Р. Г. Стронгіна [6], Т. Ванга [25], тощо. Р. Г. Стронгін в [6] пропонує розбити всі алгоритми ННГО на оптимальні методи, методи редукції розмірності та методи, що узагальнюють локальний пошук на випадок багатоекстремальних функцій. Основними класами методів ННГО в класифікації Т. Ванга є клас методів глобального пошуку і клас методів глобальної оптимізації. Методи глобального пошуку є надбудовами над локальними методами, які відшукують локальні мінімуми методами ННЛО, використовуючи певні механізми виходу з локальних екстремумів при зупинці методів ННЛО. Механізми виходу з локальних екстремумів відповідно можуть бути детермінованими (узагальнені методи спуску, підходи на базі навчання) і стохастичними (незалежні від якості розв’язку стратегії, PBIL, методи максимізації спільної інформації, тощо). Клас методів глобальної оптимізації за Т. Вангом складають методи, в яких локальна оптимізація не утворює основу для пошуку оптимуму. Такі методи переважно є стохастичними. Згідно з Т. Вангом методи глобальної оптимізації на відміну від методів глобального пошуку при певному налаштуванні здатні гарантовано знаходити ГМ або в результаті виконання заданої кількості ітерацій, або сходитися до нього протягом нескінченного пошуку. За роллю процедур локальної оптимізації А. Торн в [23] серед адаптивних пошукових методів розрізняє методи глобально-локального пошуку, а також методи однієї робочої точки і методи покриття множин.

Й. Б. Моцкус визначає за рівнем формалізації чотири класи методів ННГО: повністю формалізовані, ймовірнісно формалізовані, напівформалізовані і неформалізовані [15]. Фактично дана класифікація повторює класифікацію за наявністю моделі ЦФ. Клас повністю формалізованих методів відповідає мінімаксним стратегіям, клас ймовірнісно формалізованих методів – оптимальним у середньому стратегіям, а клас напівформалізованих методів – метаевристикам. Під неформалізованими методами розуміються методи з застосуванням інтерактивних процедур. У роботі [15] Й. Б. Моцкус також вказаує на глибинний зв’язок між рівнем формалізації методу і його гнучкістю: чим менше формалізований метод, тим більше можливостей він надає для налаштування на особливості конкретної задачі ННГО. Це послугувало основою для розробки байєсівських евристичних методів ННГО.

Критерій пасивності пошуку тісно пов’язаний з властивістю адаптивності і з придатністю до реалізації методу на паралельних ЕОМ. Пасивними методами на відміну від активних називають такі методи ННГО, в яких пробні точки обираються незалежно одна від одної. Такі методи не мають адаптивних властивостей і легко піддаються розпаралелюванню, тому М. Швем назвав їх паралельними [21]. Активні методи, в яких на кожній ітерації обирається значна кількість пробних точок, і в них паралельно проводяться випробування, називаються, згідно з термінологією М. Швема, популяційними. Активні методи, в яких пробні точки конструюються на базі усіх знайдених до цього, М. Швем називає послідовними.

Оригінальну морфологічну класифікацію методів ННГО розробили Ю. Г. Євтушенко і В. Г. Жданов [3]. Виходячи з запропонованої ними трактовки задачі ННГО як задачі розв’язання систем нелінійних рівнянь, в яких частина змінних є розв’язком допоміжних задач пошуку ГМ, вони виділили клас прямих, клас непрямих і клас прямих-двоїстих методів. Дана класифікація може виявитися корисною для виявлення спільних теоретичних засад методів ННГО, проте в усьому іншому практична цінність даної класифікації сумнівна.

Серед функціональних класифікацій методів ННГО найбільш розповсюдженими є наступні критерії:

а) надійність, робастність, тип і швидкість збіжності [10, 16, 18, 19];
б) співвідношення часу і надійності пошуку [24];
в) рівень гнучкості [15];
г) просторове розташування пробних точок [9, 20];
д) наявність адаптивних властивостей [2, 21].

Переважна більшість функціональних класифікацій базується на характеристиках збіжності методів. За наявністю властивості гарантованої збіжності Й. Д. Пінтер [18, 19] розрізняє точні методи, для яких доведена властивість глобальної збіжності за відомих аналітичних умов, і евристичні методи, для яких умови глобальної збіжності у загальному випадку невідомі, і які у переважній більшості базуються на аналогії з природними чи науково відомими явищами. За тим самим критерієм в [10, С.66-67] пропонується розрізняти евристичні, апроксимаційні і систематичні методи. Співвідношення між цією класифікацією і класифікацією Й. Д. Пінтера наступне: класи евристичних методів тотожні, клас систематичних методів співпадає з класом точних методів, а клас апроксимаційних методів утворюють методи, що заміняють вихідну задачу простішою задачею глобальної мінімізації, яку можна розв’язати систематичним методом. За надійністю, робастністю і типом збіжності А.Ноймайєр [16] класифікує методи ННГО на неповні, асимптотично повні, повні і рігоричні (точні). Неповні методи не гарантують знаходження ГМ. Асимптотично повні методи точно або принаймні з одиничною ймовірністю досягають ГМ, якщо алгоритм працює нескінченно довго, проте не дозволяють встановити поточну близькість до ГМ. Повні методи за відсутності помилок обчислень гарантовано досягають глобального мінімуму, причому вони дають змогу визначити точність поточного наближення. У рігоричних методах ГМ досягається з заданою точністю, навіть якщо наявні похибки (виключаючи вироджені випадки).

За співвідношенням часу і надійності пошуку Т. Вайзе в роботі [24] розрізняє онлайн- і офлайн-оптимізатори. До першого класу відносяться методи, що швидко розв’язують задачу ННГО, можливо, за рахунок ненадійності пошуку, а до другого – методи, що дозволяють надійно знаходити розв’язок за рахунок невисокої швидкості.

Оригінальний підхід до класифікації методів ННГО за просторовим розташуванням пробних точок був запропонований Г. Рудольфом [9, 20]. Основна розмежувальна лінія в даному підході проводиться між просторово-орієнтованими та траєкторно-орієнтованими методами. Просторово-орієнтованими методами досліджується уся допустима множина. В траєкторно-орієнтованих методах, починаючи з заданої початкової точки, будується послідовність пробних точок на певній траєкторії в допустимій множині. Траєкторно-орієнтовані методи в свою чергу поділяються на методи прогнозування та методи зондування. Методи прогнозування розраховують розташування наступної пробної точки на траєкторії, базуючись на внутнішньо заданій моделі ЦФ. Методи зондування, не маючи подібної моделі ЦФ, визначають пробні точки з евристичних міркувань. Як зауважує Т. Бек [9] на прикладі еволюційних алгоритмів, часто неможливо точно встановити приналежність методу до того чи іншого класу класифікації Г. Рудольфа, адже значна група методів поєднує у собі властивості просторово і траєкторно-спрямованого пошуку.

Інтегральна класифікація методів ННГО

Розглянуті вище класифікації мають як спільні моменти, що відбиваються у наявності однакових груп методів у класах різних класифікацій, так і значні відмінності. Ліквідувати існуючі між класифікаціями методів ННГО розбіжності можна, використовуючи інтегральну класифікацію на базі кількох критеріїв. У якості основи для виділення необхідних критеріїв доцільно взяти формалізоване визначення методу ННГО. Розглядаючи дані в пункті 1 визначення, можна помітити, що поведінка і структура методу ННГО визначається як моделлю задачі, так і властивостями, внутрішньо притаманними методу. Як показано нижче, задовільно окреслити набір класів дозволяє наступний упорядкований за зменшенням пріоритету набір критеріїв:

а) спосіб оперування моделлю;
б) тип пробних точок;
в) кількість робочих точок метода;
г) роль випадкових процедур при виборі пробних точок.

Перші два критерії пов’язані з моделлю задачі, два інші – з внутрішніми властивостями методу, а конкретніше з властивостями вирішуючих правил.

За способом оперування і впливом на модель задачі усі методи ННГО розбиваються на три класи – методи редукції, раціональні методи і пошукові методи. У методах редукції вихідна задача оптимізації (1) замінюється іншою обчислювальною задачею, інколи неоптимізаційної природи. У раціональних методах протягом пошуку ГМ модель задачі змінюється шляхом звуження допустимої множини (ДМ) M_X, або уточнення параметрів моделі ЦФ (класу функцій, до якого належить ЦФ) M_Φ. Пошукові методи не змінюють ані вихідної задачі, ані її моделі.

Як уже зазначалося в 1, пробні точки для ФПВ φ найчастіше бувають звичайними координатами у ДМ, детермінованими інтервалами у ДМ, або імовірнісними величинами над ДМ. Відповідно, методи ННГО поділяються за типом пробних точок на методи з координатними, інтервальними та імовірнісними пробними точками.

Робочими точками метода називаються точки, згенеровані на поточній ітерації функціями d_i, що задають вирішуючі правила. Іншими словами, кількість робочих точок характеризує рівень блочної незалежності функцій d_i. За кількістю робочих точок розрізняються методи з усіма, з групою і з однією робочою точкою. Між класифікацією за кількістю робочих точок і класифікацією М. Швема є пряма відповідність.

За роллю випадкових процедур при виборі пробних точок методи поділяються на детерміновані і стохастичні. У стохастичних методах ідея побудови пробних точок передбачає обов'язкове неодноразове використання протягом пошуку ГМ у функціях d_i змодельованих випадкових (або квазівипадкових) чисел. У детермінованих методах застосування випадкових чисел не обов'язкове.

Оскільки в методах редукції фактично відбувається відхід від задачі ННГО, орієнтовані на методи розв'язання задачі (1) критерії б), в) і г) у межах класу методів редукції для подальшої деталізації класифікації є непридатними. У даному випадку методи доцільно класифікувати за типом задачі, до якої зводиться вихідна задача. За даним критерієм розрізняються методи редукції до простіших оптимізаційних задач і методи редукції до інших задач обчислювальної математики. Серед методів редукції до простіших оптимізаційних задач важливі групи складають методи редукції розмірності (покоординатна оптимізація, розгортання простору пошуку за допомогою кривих Пєано, відокремлення істотних змінних, оптимізація за n-мірними перерізами, тощо) і методи переходу до задач дискретної оптимізації (дискретизація ДМ, побудова опуклої оболонки ДМ і огинаючої ЦФ). Частину методів редукції до простіших оптимізаційних задач можна трактувати як пошукові методи. Клас методів редукції до неоптимізаційних задач обчислювальної математики складають методи редукції до диференціальних (ДР) або інтегральних рівнянь, методи редукції до апроксимаційних задач, методи згладжування, тощо.

Практично усі раціональні методи є детермінованими. Єдину значну групу методів, що є виключенням з даного правила, складають методи гілок й імовірнісних границь. Тому для деталізації класифікації раціональних методів використовуються лише критерії б) і в). До методів з координатними пробними точками в першу чергу відносяться методи простих покриттів (сіток) та методи мінімізації функцій з обмеженою швидкістю зростання, такі як методи мажорування ЦФ (метод ламаних

Вуда, алгоритми Євтушенка і Брента). Методи з інтервальними пробними точками переважно є методами гілок і границь (B&B) з детермінованими оцінками знизу. Детальніше класифікувати інтервальні методи B&B можна на основі роботи [16]. Оптимальні у середньому методи та методи гілок й імовірнісних границь припускають їх трактовку у якості методів з імовірнісними пробними точками. За подібної трактовки оптимальних у середньому методів процедуру перерахунку апріорних ймовірностей у апостеріорні на основі випробувань доцільніше відносити до моделі задачі ННГО, відділивши її від процедури аналізу моделі в методі ННГО. Результатом випробування в такому разі стає модель ЦФ у вигляді уточненої випадкової функції. Підсумовуючи, слід зауважити, що дещо покращити розглянуту класифікацію раціональних методів може використання критерію оптимальності методу [1, 5, 6, 7].

Усі пошукові методи використовують координатні пробні точки. Частину методів глобального випадкового пошуку при певних припущеннях можна розглядати як методи з імовірнісними пробами (наприклад, еволюційні стратегії припускають їх трактування в якості алгоритму адаптивного глобального пошуку з імовірнісними пробними точками), проте навіть в них ФПВ φ для подальшого аналізу повинна повертати точні координати. Отже на відміну від критерію в), критерії б) і в) для пошукових методів дозволяють провести адекватну класифікацію.

Інтегральна класифікація, яка узагальнює все вище сказане, наведена нижче на діаграмі (рис.1). Додатково ця діаграма відбиває приналежність основних груп методів до визначених класів.

У таблиці 1 проведено паралель між інтегральною класифікацією та іншими відомими класифікаціями методів ННГО. З даної таблиці випливає, що запропонована класифікація знаходиться майже у повній відповідності з класифікаціями Т. Ванга [25], А. А. Жиглявського [4], А. Г. Жилінскаса [5], Т.Рудольфа [9, 20], А. Торна [23] і М. Швема [21], проте існують певні несумісності з кількома функціональними класифікаціями, такими як класифікації А.Ноймайєра [16], Й. Д. Пінтера [18] і Ч. Бліка та ін. [10]. Зрозуміло, що наведена у таблиці 1 відповідність відбиває лише сучасний стан розробок у галузі методів ННГО, і, можливо, ця чітка відповідність буде розмита у майбутньому деякими новими групами методів ННГО.

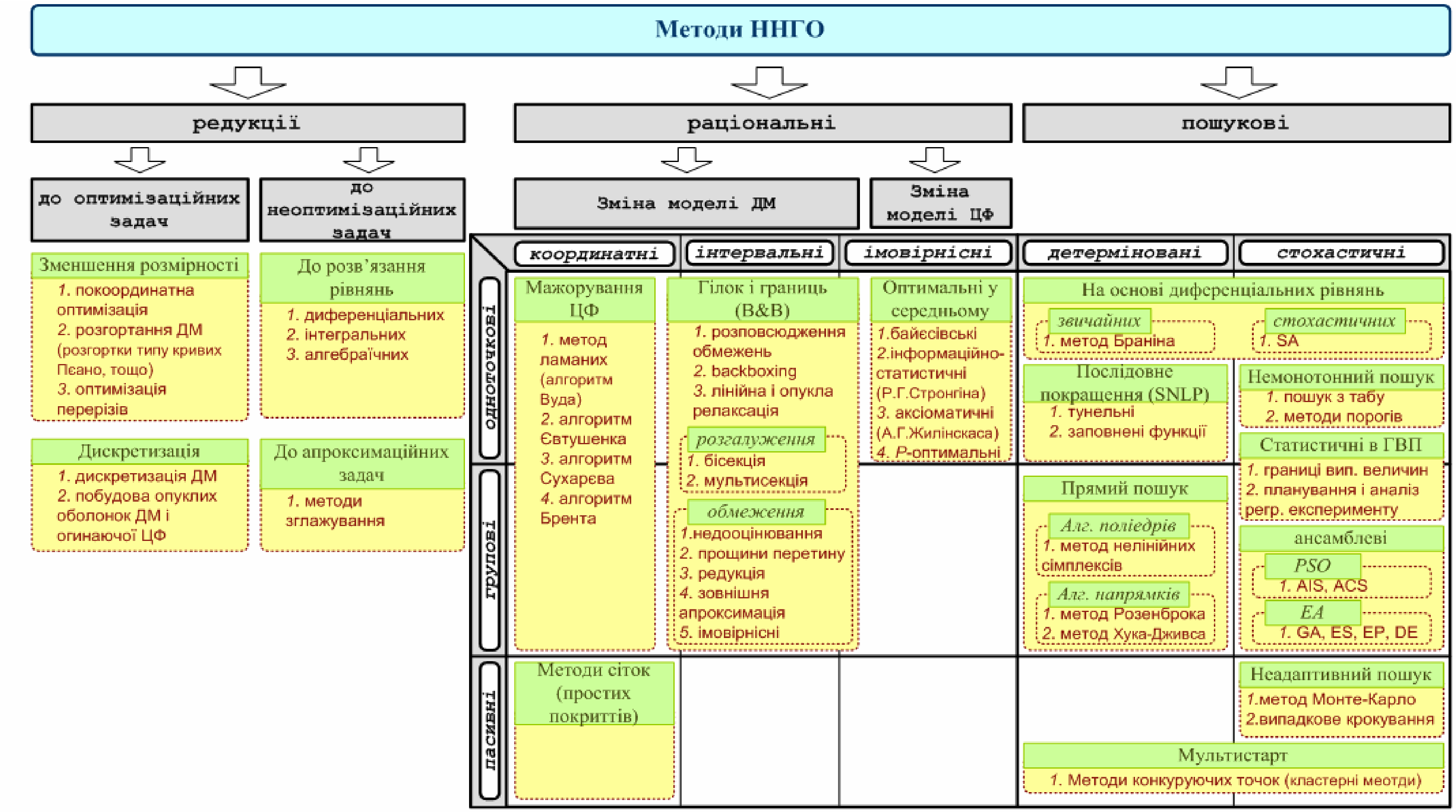

Рисунок 1 — Відношення груп методів ННГО до класів інтегральної класифікації

Таблиця 1. Співвідношення між інтегральною й іншими класифікаціями

Критерії інтегральної класифікації				Інші класифікації							
				морфологічні					функціональні		
Спосіб оперування моделлю задачі	Тип пробних точок	Кількість робочих точок	Генерування пробних точок	Жиглявський, [4]	Жилінскас, [5]	Торн, [23]	Ванг, [25]	Швем, [21]	Ноймайєр, [16]	Блік та ін., [10]	Рудольф, [9, 20]
редукції					еврист.					апрокс.*	досл.*
раціональні, зміна моделі ДМ	координати	одна		детерм.	мінімакс.	пошук	опт.	посл.	повні	сист.	тр.-ор.
		група		детерм.	мінімакс.	пошук	опт.	попул.	повні	сист.	тр.-ор.
		усі		детерм.	мінімакс.	пошук	опт.	парал.	рігор.	сист.	пр.-ор.
	інтервали	одна		детерм.	мінімакс.	гарант.	опт.	посл.	рігор.	сист.	тр.-ор.
		група		детерм.	мінімакс.	гарант.	опт.	попул.	рігор.	сист.	тр.-ор.
	імовірнісні величини	одна		стох.	еврист.	пошук	опт.	посл.	асимп.	еврист.*	тр.-ор.
		група		стох.	еврист.	пошук	опт.	попул.	асимп.	еврист.*	тр.-ор.
раціональні, зміна моделі ЦФ	імовірнісні величини	одна		стох.	опт. у серед.	байєс.	пошук	посл.	асимп.	сист.	прогн.
пошукові	координати	одна	детерм.	детерм.	еврист.	пошук	пошук	посл.	непов.*	еврист.*	прогн.*
			стох.	стох.	еврист.	пошук	пошук	посл.	нерігор.	еврист.*	досл.
		група	детерм.	детерм.	еврист.	пошук	пошук	попул.	непов.*	еврист.*	мішані
			стох.	стох.	еврист.	пошук	опт./ пошук	попул.	нерігор.	еврист.*	мішані
		усі	детерм.	детерм.	еврист.	пошук	пошук	парал.	непов.*	еврист.*	пр.-ор.
			стох.	стох.	еврист.	пошук	опт.*	парал.	асимп.*	сист.*	пр.-ор.

* позначає належність до класу не усіх, а переважної більшості алгоритмів

Висновки

Дано формалізоване визначення методу ННГО з чітким розмежуванням між моделлю задачі і методом, що не властиве для багатьох інших визначень методу ННГО [5, 24]. Запропоновані нами визначення дозволили виділити чотири критерії для проведення класифікації методів ННГО. Розроблена на основі цих критеріїв класифікація на даний момент знаходиться у повній відповідності з більшістю відомих морфологічних і зі значною частиною функціональних класифікацій.

Оскільки розробка формалізованих визначень обчислювальних методів і їх класифікацій є необхідним теоретичним етапом при побудові обґрунтованих інтерфейсів пакетів прикладних програм на базі цих методів, результати роботи можуть знайти практичне застосування при побудові підсистем неперервної глобальної оптимізації у моделюючих і обчислювальних середовищах.

Література

1. Гергель В.П. и др. *Современные методы принятия оптимальных решений* [Электронный ресурс]: Учеб. пособие / В.П. Гергель, В.А. Гришагин, С.Ю. Городецкий, М.В. Маркина. – Нижний Новгород, 2001. – 119 с. – Режим доступа: http://www.itlab.unn.ru/uploads/des/SprBook.pdf.
2. Гладков Л.А., Курейчик В.В., Курейчик В.М. *Генетические алгоритмы* / Под ред. В.М. Курейчика. – 2-е изд., испр. и доп. –Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 320 с.
3. Евтушенко Ю.Г., Жданов В.Г. Об одном подходе к систематизации численных методов нелинейного программирования // *Техническая кибернетика*. – 1983. – № 1. – С.47–59.
4. Жиглявский А.А. *Математическая теория глобального случайного поиска*. – Ленинград: Изд-во Ленингр. ун-та, 1985. – 296 с.
5. Жиглявский А.А., Жилинскас А.Г. *Методы поиска глобального экстремума* / Рец. А.Г. Сухарев. – Москва: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1991. – 248 с.
6. Стронгин Р.Г. *Численные методы в многоэкстремальных задачах (информационно-статистические алгоритмы)* / Серия: «Оптимизация и исследование операций»; под ред. Н.Н. Моисеева. – Москва: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1978. – 240 с.
7. Сухарев А.Г. Глобальный экстремум и методы его отыскания // *Математические методы в исследовании операций*: Сб. статей. / Ред. Моисеев Н.Н., Краснощеков П.С. – Москва: Изд-во МГУ, 1981. – С.4–37.

8. Орлянская И.В. Современные подходы к построению методов глобальной оптимизации // *Исследовано в России*. – Москва: Изд-во МФТИ, 2002. – С.2097–2107.
9. Bäck Th. *Evolutionary Algorithms in Theory and Practice: Genetic Algorithms, Evolution Strategies, Evolutionary Programming*. – New York: Oxford University Press Inc., 1996. – 314 с.
10. Bliek Ch., Spelucci P., Vicente L.N., Neumaier A., Granvilliers L., Monfroy E., Benhamou F., Huens E., Van Hentenryck P., Sam-Haroud D., Faltings B. *Algorithms for Solving Nonlinear Constrained and Optimization Problems: the State of the Art*. COCONUT Project Report. – 2001. – 222 с.
11. Coello C.A.C., Lamont G.B., van Veldhuizen D.A. *Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems* / Genetic and Evolutionary Computation Series; Ed. by D.E. Goldberg, J.R. Koza. – 2nd ed. – Springer-Verlag, 2007. – 800 p.
12. Dréo J. et al. *Metaheuristics for Hard Optimization: Methods and Case Studies* / J. Dréo, A. Pétrowski, P. Siarry., E. Taillard; Transl. from fr. by A. Chatterjee. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 2006. – 369 p.: 140 fig.
13. Dixon L.C.W., Szegö G.P. The Global Optimization Problem: An Introduction // *Towards Global Optimization 2* / Ed. by L.C.W. Dixon and G.P. Szegö. – Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1978. – P.1–15.
14. Gray P., Hart W., Painton L., Phillips C., Trahan M., Wagner J. *A Survey of Global Optimization Methods* [WWW-document]. – NM 87185. – Albuquerque: Sandia National Laboratories, 1997. – HTTP-address: http://www.cs.sandia.gov/opt/survey/.
15. Mockus J. et al. *Bayesian Heuristic Approach to Discrete and Global Optimization: Algorithms, Visualization, Software, and Applications* / J. Mockus, W. Eddy, A. Mockus, L. Mockus, G. Reklaitis; Nonconvex Optimization and Its Applications. – Boston, Dordrecht, London: Kluwer Academic Publishers, 1996. – 416 p.
16. Neumaier A. Complete Search in Continuous Global Optimization and Constraint Satisfaction // *Acta Numerica 2004* (A. Iserles, ed.). – Cambridge: Cambridge University Press, 2004. – Vol.13. – С.271–369.
17. Pintér J.D. Continuous global optimization software: a brief review // *Optima*. – Gainesville: University Press of Florida, 1996. – №52. – С.1-8.
18. Pintér J.D. Global Optimization: Software, Test Problems and Applications // *Handbook of Global Optimization* (Ed. P.M. Pardalos and H.F. Romeijn). – Boston, Dordrecht, London: Kluwer Academic Publishers, 2002 – Vol.2. – С.515–569.
19. Pintér J.D. Model Development, Solution, and Analysis in Global Optimization // In: *Global Optimization: Selected Case Studies* / Ed. by

J.D.Pintér. – Dordrecht, Boston, London: Kluwer Academic Publishers, 2002. – 19 p.
20. Rudolph G. *Globale Optimierung mit parallelen Evolutionsstrategien*: Diplomarbeit / Universität Dortmund, Fachbereich Informatik. – Dortmund, 1990.
21. Schwehm M. *Global Optimization by Generational Methods* [E-Article]. – Erlangen, 2002. – 10 p. – HTTP-address: http://citeseer.ist.psu.edu/378138.html.
22. Törn A., Žilinskas A.G. *Global Optimization* / Lecture Notes in Computer Science. – Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo: Springer-Verlag, 1989. – Vol.350 – 253 c. // C.13-21
23. Törn A. Global Optimization // *Probabilistic Algorithms* [WWW-document]. – Åbo, 1998-2000. – HTTP-address: http://web.abo.fi/~atorn/ProbAlg/Page510.html.
24. Weise Th. *Global Optimization Algorithms – Theory and Application* [E-Book] / University of Kassel, Distributed Systems Group. – Kassel, 2006-2007. – 846 p. – HTTP-address: http://www.it-weise.de/projects/book.pdf.
25. Wang T. *Global Optimization for Constraint Nonlinear Programming*: PhD thesis / Graduate College of the University of Illinois at Urbana-Champaign; for the degree in Computer Science. – Urbana, 2001. – 201 c.

Дата надходження до редакції 26.12.2007 р.