УДК 519.684.6

ОЦІНКА ПАРАМЕТРІВ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ З ВИКОРИСТАННЯМ ПАРАЛЕЛЬНИХ ГІБРИДНИХ АЛГОРИТМІВ ОПТИМІЗАЦІЇ

Гоголенко С.Ю.
Донецький національний технічний університет, кафедра ЕОМ

Задача параметричної ідентифікації виникає в багатьох галузях прикладної науки та інженерії. Водночас вона характеризується надвисокою обчислювальною складністю, що призводить до необхідності використання при її ров'язанні високопродуктивних паралельних обчислювальних систем. В даній роботі розглядаються сучасні методи оцінки параметрів і підходи до їх розпаралелювання.

Постановка задачі оцінки параметрів методом Гауса-Маркова

Формально задача оцінки параметрів математичної моделі за даними експерименту визначається наступним чином [1]. Задано систему ДР, що описує модель

$$F(t;\dot{x}(t),x(t),p)=0,\quad x(T_0)=x_0,\quad t\in[t_0,t_0+t_{пер}], \tag{1}$$

і набір рівнянь спостереження $g(x(t;x_0,p),x_0,p)$. Частина параметрів p' і початкових значень змінних стану x_0' системи, що описує модель, не відомі й утворюють вектор шуканих параметрів $\theta=(x_0';p')$. Визначена фіксована матриця замірів Y, елементи якої є набором вибіркових реалізацій у дискретні моменти часу $t\in T\equiv\{t_j\}_{j=1}^{N}\subset[t_0,t_0+t_{пер}]$ рівнянь спостереження й описуються формулами:

$$y_{ij}=g^{(j)}(x(t_i,\theta),\theta)+\eta_{ij},\quad i=\overline{1,N},\quad j=\overline{1,obs}, \tag{2}$$

де η_{ij} — деякий випадковий білий шум.

Необхідно оцінити вектор шуканих параметрів.

Використовуючи принцип максимальної правдоподібності для випадку, коли густина ймовірності шуму η_{ij} в (2) розподілена за нормальним законом, отримуємо метод оцінки параметрів Гауса-Маркова, згідно з яким вихідна задача приймає повністю формалізований вигляд [1]:

$$\begin{cases} \min\limits_{\theta} \sum\limits_{i=1}^{n} \sum\limits_{j=1}^{obs} \dfrac{\left(y_{ij} - g^{(j)}(x(t_i;\theta),\theta)\right)^2}{2\sigma_{ij}^2} \\ h(x(t), p, t) = 0 \\ g(x(t), p, t) \le 0 \\ p^L \le p \le p^U \end{cases}, \qquad (3)$$

де вектори p^L і p^U, а також векторні функції h і g визначають сукупність обмежень, що накладаються на параметри моделі і вектор станів.

Задача (3) відноситься до групи задач неперервної нелінійної глобальної оптимізації з обмеженнями, які ефективно розв'язуються гібридними оптимізаційними методами.

Огляд методів оптимізації

Класичний підхід до розв'язання задачі неперервної глобальної оптимізації включає два етапи – отримання оцінки наближення до глобального оптимуму за допомогою метода глобальної оптимізації (МГО) і подальше уточнення наближення за допомогою метода локальної оптимізації (МЛО) [2]. Існують і інші підходи до комбінування МГО та МЛО для отримання значення глобального оптимуму з високою наперед заданою точністю. Усі вони об'єднуються під назвою гібридні оптимізаційні методи (ГОМ).

Незважаючи на велику кількість МЛО нелінійного програмування, існує не так багато підходів до їх класифікації. Діаграма, наведена на рис.1, відображує інтегральну класифікацію МЛО. Серед розглянутих на діаграмі класів МЛО для розв'язання задачі (3) найбільш доцільно використовувати стохастичні методи та детерміністичні методи нульового і першого порядків. Причому серед методів першого порядку використання методів найшвидшого спуску є вкрай небажаним.

Інтегральна класифікація МГО, яка об'єднує позитивні риси широко розповсюджених класифікацій Т. Ванга, А. А. Жиглявського, А. Г. Жилінскаса, Т. Рудольфа, А. Торна, М. Швема, а також частково класифікацій А.Ноймайєра, Й. Д. Пінтера і Ч. Бліка та ін., запропонована в [2]. Основу для даної класифікації складає наступний упорядкований за зменшенням пріоритету набір критеріїв: спосіб оперування моделлю в методі; тип пробних точок метода; кількість робочих точок метода; роль випадкових процедур при виборі пробних точок. З класифікації випливає, що якщо обрати в якості МГО для розв'язання задачі оцінки параметрів (3) ансамблеві методи, то від паралельної реалізації МГО слід очікувати високий ступінь розпаралелювання і значну швидкість сходження.

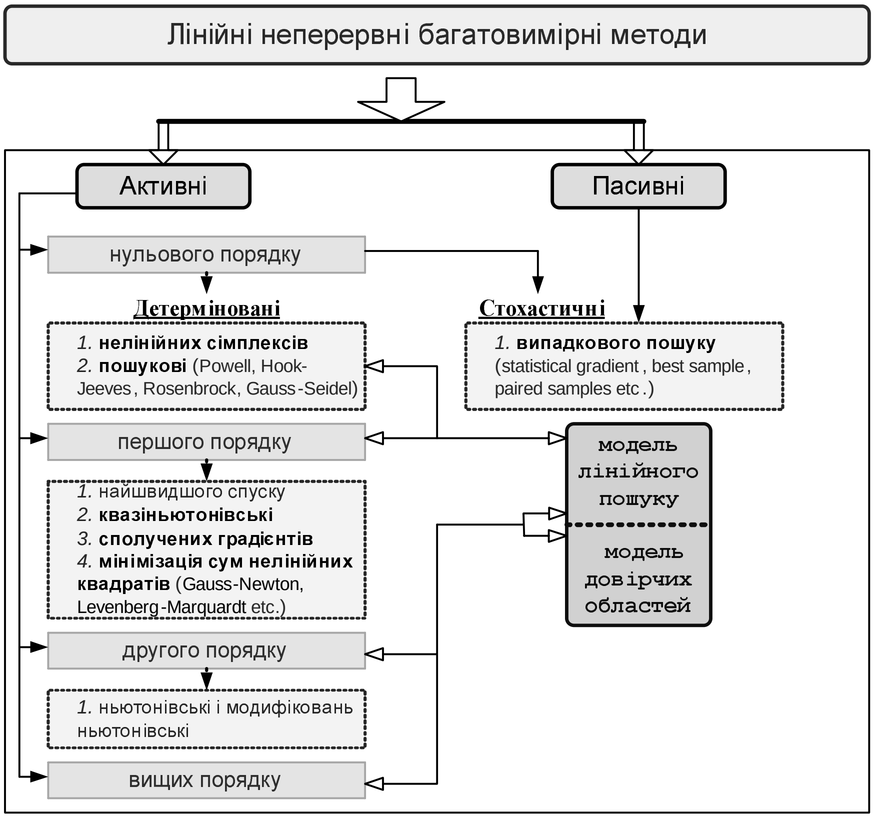

Рисунок 1 — Узагальнена класифікація МЛО нелінійної оптимізації

Паралелізм в методах оптимізації

Сучасний огляд паралельних методів оптимізації міститься в роботі [5]. Аналіз даної роботи дозволяє говорити про три рівні розпаралелювання оптимізаційних алгоритмів: рівень задачі, рівень ітерації методу, рівень методів.

Типовими представниками паралельних методів на рівні задачі є два класси паралельних алгоритмів, розроблених Феррісом і Мангасаріаном (Ferris & Mangasarian) [5] для задач оптимізації з обмеженнями. На відміну від інших методів розпаралелювання на рівні задачі методи Ферріса-Мангасаріана не залежать від специфіки задачі, проте потребують для своєї реалізації додаткових обчислень.

Спеціалізований метод розпаралелювання на рівні задачі для проблеми оцінки параметрів був запропонований Домселааром і Хемкером у 1975 р. і отримав назву методом множинних стрільб (ММС) [7]. Даний підхід полягає в наступному Спочатку часовий проміжок оцінки параметрів розбивається за певною стратегією на часові підінтервали точками $T^* \equiv \{t_j^*\}_{j=1}^{m} \subset [t_0, t_0 + t_{пер}]$. Кожному з підінтервалів ставиться у відповідність свій проміжок траєкторії для інтегрування з власними невідомими початковими значеннями змінних стану x_0'. Шукані параметри моделі p' при цьому для всіх інтервалів залишаються спільними. У кожний інтервал повинна потрапляти щонайменше одна експериментальна точка. Оскільки результуюча траєкторія не повинна мати розривів, то до сукупності обмежень, визначених в (1.4), додається ряд обмежень, що забезпечують неперервність результуючої траекторії в моменти переходів між інтервалами. Остаточно задача оцінки параметрів за ММС приймає наступний вигляд:

$$\begin{cases} \min\limits_{\theta} \sum\limits_{j=1}^{obs} \sum\limits_{k=1}^{m-1} \sum\limits_{t_i \in [t_k^*, t_{k+1}^*]} \frac{\left(y_{ij} - g^{(j)}(x(t_i; x_{0(k)}', p'), p')\right)^2}{2\sigma_{ij}^2} \\ x(t_k^+; x_{0(k)}, p) - x(t_{k+1}^-; x_{0(k+1)}, p) = 0, \quad k = \overline{1, m-1} \\ h(x(t), p, t) = 0 \\ g(x(t), p, t) \le 0 \\ p^L \le p \le p^U \end{cases}, \tag{4}$$

де вектор шуканих параметрів $\theta = (x_{0(1)}', x_{0(2)}', ..., x_{0(m-1)}'; p')$.

Незважаючи на значний зріст числа невідомих і обмежень-рівностей у ММС, дана схема окрім високого ступеня масштабованості має чимало інших переваг [7].

На рівні ітерації методу розпаралелюватися можуть як допоміжні обчислення, так і обчислення значень цільової функції. Розпаралелювання допоміжних обчислень широко розповсюджене серед ЛДМ. Це стосується в першу чергу різноманітних допоміжних процедур лінійної алгебри, таких як факторизація повних і розріджених матриць, обернення матриць, розв’язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь, тощо. Паралельне обчислення значень цільової функції в різних пробних точках застосовується зокрема в методі Берда для ЛДМ, а також різноманітних розподілених методах в пасивних і ансамблевих МГО [5]. В цілому, можливості щодо розпаралелювання на рівні ітерації методу значною мірою залежать від самого методу.

На рівні методів розрізняють два підходи до розпаралелювання – побудова асинхронних методів та побудова гібридних методів. Ідея асинхронних методів полягає в паралельному виконанні оптимізаційних алгоритмів без їх взаємної кореляції. Алгоритми при цьому можуть бути різними або однаковими, проте стартуючими за різних початкових умов. У гібридних методах реалізується модель паралельного виконання кількох методів з обміном результатами між ними в процесі роботи.

Паралельні меметичні алгоритми

Одними з найефективніших гібридних ансамблевих методів на даний момент є меметичні алгоритми (МА). Ідея даних алгоритмів була запозичена з відомої в біології моделі культурної еволюції Р. Докінза (Dawkins), в якій процес адаптації відповідно до законів природньої еволюції Дарвіна супроводжується процесом локальної культурної адаптації [6]. В термінах теорії еволюційних обчислень це значить, що МА комбінують у собі деякий еволюційний алгоритм (найчастіше генетичний) з ЛДМ.

Оскільки МА розширюють ГА, то в них можна використовувати практично усі методи розпаралелювання на рівні ітерацій, запропоновані для ГА в [4]. Зокрема можливе використання однопопуляційних ГА типу «master-slave», багатопопуляційних ГА, дрібнозернистих ГА, ієрархічних ГА (модель островів), тощо.

Загальна схема можливостей щодо розпаралелювання МА при розв’язанні задачі оцінки параметрів наведена на рис. 2.

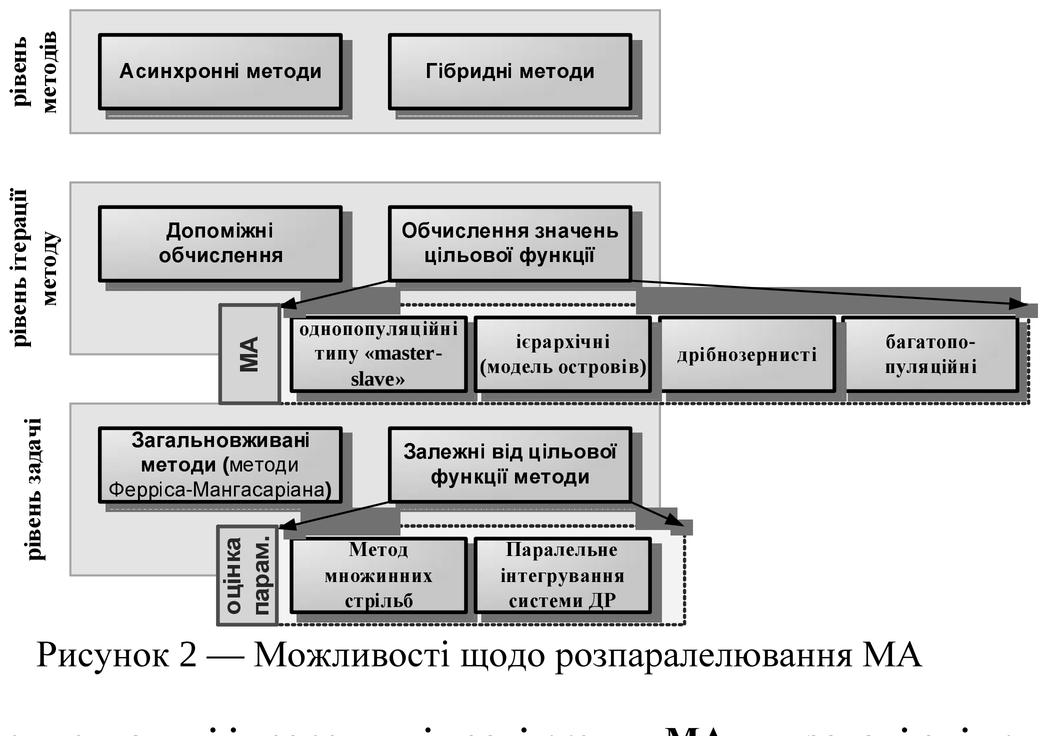

Рисунок 2 — Можливості щодо розпаралелювання МА

Експериментальні і теоретичні дослідження МА для задачі оцінки параметрів

Автором статті разом з Трубаровим В.А. і Теплинським К.С. було побудовано підсистему оцінки параметрів математичних моделей на основі паралельних МА для моделюючого середовища Diana і проведено ряд експериментальних досліджень. Дослідження проводилися на штучних цільових функціях і на моделях Лотки-Вольтерра та реактора Хафке. Результати досліджень наведені в [1]. Робота [3] містить ряд простих апріорних оцінок розпаралелювання реалізованих МА.

Бібліографічні посилання

1. Гоголенко С.Ю., Святний В.А. Адаптація локально-детерміністичних методів оптимізації до розв’язання задачі оцінки параметрів математичної моделі методом Гауса-Маркова // Наукові праці ДонНТУ; Серія «Проблеми моделювання та автоматизації проектування динамічних систем» (МАП 2006). Випуск: 5(116). – Донецьк: ДонНТУ, 2007. – С.179-189.
2. Гоголенко С.Ю., Святний В.А. Підходи до класифікації методів неперервної нелінійної глобальної оптимізації // Наукові праці ДонНТУ; Серія «Проблеми моделювання та автоматизації проектування динамічних систем» (МАП 2007). Випуск: 6(127). – Донецьк: ДонНТУ, 2008. – С.198-216.
3. Трубаров В.А., Теплинський К.С., Бабенко І.В. Застосування паралельного генетичного алгоритму для вирішення задач оптимізації складних динамічних систем // Наукові праці ДонНТУ; Серія «Проблеми моделювання та автоматизації проектування динамічних систем» (МАП 2007). Випуск: 6(127). – Донецьк: ДонНТУ, 2008. – С.89-102.
4. Cantú-Paz E. Efficient and Accurate Parallel Genetic Algorithms / Genetic Algorithms and Evolutionary Computation, 1. – Boston, Dordrecht, London: Kluwer Academic Publishers, 2001. – 162 p.
5. Dennis(Jr.) J.E., Wu Zh. Parallel Continuous Optimization // Dongarra J. et al. Sourcebook of Parallel Computing. – San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers, 2003. – Ch.22. – P.649-670.
6. Krasnogor N., Smith J.E. A Tutorial for Competent Memetic Algorithms: Model, Taxonomy and Design Issues // IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 9(5). – 2005. – P. 474- 488.
7. Peifer M., Timmer J. Parameter Estimation in Ordinary Differential Equations Using the Method of Multiple Shooting – A Review / Freiburg Centre for Data Analysis and Modelling. – Freiburg, 2005. – 21 p.

Дата написання 24.04.2008 р.