На правах рукописи

КВАСОВ Дмитрий Евгеньевич

ДИАГОНАЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ЛИПШИЦЕВОЙ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Специальность 05.13.18
Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Нижний Новгород
2006

Работа выполнена на кафедре математического обеспечения ЭВМ факультета вычислительной математики и кибернетики Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского.

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, профессор Сергеев Ярослав Дмитриевич
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, профессор Малоземов Василий Николаевич (г. Санкт-Петербург)
	кандидат физико-математических наук, доцент Коротченко Анатолий Григорьевич (г. Нижний Новгород)
Ведущая организация:	Вычислительный центр РАН (г. Москва)

Защита диссертации состоится 21 декабря 2006 г. в 14 ч. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.166.13 при Нижегородском государственном университете им. Н. И. Лобачевского по адресу: 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23, корпус 2, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского.

Автореферат разослан «____» октября 2006 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.166.13
к.ф.-м.н., доцент Савельев В. П.

Общая характеристика работы

Актуальность темы диссертационной работы. Многие задачи принятия оптимальных решений, возникающие в различных сферах человеческой деятельности, могут быть сформулированы как задачи математического программирования. Натуральным следствием возрастающей сложности проектируемых систем является сложность их математических моделей, значительно затрудняющая процедуру поиска наилучшей комбинации параметров этих систем. Трудности численного решения подобных задач во многом связаны с их размерностью и видом оптимизируемой целевой функции, которая в общем случае может быть многоэкстремальной, недифференцируемой и, более того, задана в форме некоторой процедуры, или симулятора, на вход которого подается аргумент, а на выходе наблюдается соответствующее значение функции. При этом может быть недоступна дополнительная информация о функции, такая как, например, ее градиент, и лишь значения целевой функции могут быть использованы в ходе решения задачи. Кроме того, каждое испытание функции (то есть ее вычисление в некоторой точке допустимой области) может потребовать значительных вычислительных ресурсов.

Увеличение числа прикладных задач, описываемых функциями подобного типа, а также бурное развитие вычислительной техники привели к росту интереса к указанным задачам оптимизации и к развитию *глобальной оптимизации* как области математического программирования, посвященной теории и методам решения многоэкстремальных оптимизационных задач. Подходы глобальной оптимизации существенно отличаются от техники стандартных методов поиска локальных оптимумов функции (часто неспособных найти глобальное решение рассматриваемых многоэкстремальных задач) и характеризуются высокой вычислительной трудоемкостью. Вопросы численного решения таких задач широко обсуждаются в литературе (см. работы Д.И. Батищева, В.П. Булатова, Ф.П. Васильева, В.П. Гергеля, А.И. Голикова, С.Ю. Городецкого, В.А. Гришагина, В.Ф. Демьянова, Ю.Г. Евтушенко, Ю.М. Ермольева, В.Г. Жадана, А.А. Жиглявского, А.Г. Жилинскаса, В.Г. Карманова, А.Г. Коротченко, В.Н. Малоземова, Н.Н. Моисеева, Й.Б. Моцкуса, Ю.И. Неймарка, В.И. Норкина, С.А. Пиявского, Э. Полака, Б.Н. Пшеничного, Л.А. Растригина, Я.Д. Сергеева, А.С. Стрекаловского, Р.Г. Стронгина, А.Г. Сухарева, П. Пардалоса, Я. Пинтера, Х. Туя, К. Флудаса, Д. Химмельблау, Р. Хорста, Н.З. Шора, Д.Б. Юдина и др.). При этом техники решения задач одномерной глобальной оптимизации исследованы достаточно глубоко, в то время как построение эффективных алгоритмов многомерной оптимизации, имеющих важное практическое значение, продолжает привлекать большое внимание исследователей.

Возможность построения адаптивных схем поиска наилучшего, то есть глобального, решения многоэкстремальных многомерных задач, отличных от переборных схем, связана с наличием неких априорных предположений о свойствах задач. Такие предположения служат математическим инструментом для получения оценок глобального решения задачи на основе проведенных испытаний целевой функции и играют существенную роль при построении эффективных алгоритмов глобального поиска. Для многих практических задач (таких как, например, решение нелинейных уравнений и неравенств; регулирование сложных нелинейных систем; оптимизация иерархических моделей, связанных с задачами размещения, системами обслуживания и т. п.) типичным является предположение о липшицевости функций, характеризующих моделируемую систему, поскольку отношения их приращений к соответствующим приращениям аргументов обычно не могут превышать некоторый порог, определяемый ограниченной энергией изменений в системе. Разработкой теории и методов численного решения задач подобного типа занимается *липшицева глобальная оптимизация*. Важность данной подобласти глобальной оптимизации объясняется как наличием большого числа прикладных задач, моделируемых при помощи липшицевых функций, так и обширностью класса таких функций.

Учитывая практическую важность задач многомерной липшицевой глобальной оптимизации и существующие сложности на пути их решения, представляются актуальными исследования по разработке эффективных алгоритмов решения подобных задач, чему и посвящена данная диссертационная работа.

Цель работы. В диссертации рассматривается вопрос построения численных методов поиска глобального минимума в задачах многомерной оптимизации, где целевая функция определена на гиперинтервале и удовлетворяет на нем условию Липшица. При этом функция предполагается многоэкстремальной и недифференцируемой, а ее вычисление даже в одной точке допустимой области может потребовать значительных затрат (времени, машинной памяти и т. п.). Учитывая высокую вычислительную сложность рассматриваемых задач, целью работы является разработка быстрых методов их решения. Основное внимание уделяется использованию новой безызбыточной диагональной стратегии адаптивного разбиения гиперинтервалов, предложенной Я. Д. Сергеевым, которая успешно объединяет в себе идеи кривых, заполняющих пространство, и диагональных алгоритмов.

Научная новизна.

1. Предложена схема построения диагональных алгоритмов глобальной оптимизации, основанная на новой диагональной стратегии разбиения гиперинтервалов, которая позволяет избежать генерирования избыточных точек испытаний целевой функции, характерного для традиционных диагональных стратегий разбиения.

2. В рамках введенной схемы предложены новые многомерные диагональные алгоритмы глобальной оптимизации: информационно-статистический метод с адаптивной оценкой глобальной константы Липшица и геометрический метод, работающий со множеством оценок константы Липшица.

3. Предложена новая схема балансирования локальной и глобальной информации в ходе поиска глобального минимума. Показано, что техника локальной настройки на поведение целевой функции может быть успешно применена для построения многомерных геометрических диагональ-

ных алгоритмов глобальной оптимизации (в частности, предложены два новых геометрических диагональных метода с локальной настройкой).

4. Для всех построенных алгоритмов установлены достаточные условия сходимости к глобальному минимуму.

5. Для проверки работоспособности алгоритмов глобального поиска предложены генератор классов многомерных многоэкстремальных случайных тестовых функций, предоставляющий информацию о расположении всех точек минимумов и размерах их областей притяжения, и ряд критериев численного сравнения методов поиска глобального минимума на классах тестовых функций.

Личный вклад автора. Постановка задачи и методология исследования принадлежат руководителю. Им же предложена новая безызбыточная диагональная стратегия разбиения гиперинтервалов. Соискателем показано, как данная стратегия разбиения может быть применена к построению быстрых диагональных алгоритмов глобальной оптимизации. Ему принадлежат разработка в рамках новой диагональной схемы четырех алгоритмов с различными способами получения оценок константы Липшица, доказательство теорем о достаточных условиях сходимости, систематизация и выполнение исследований, обработка и интерпретация результатов. Соискателем разработана специализированная база данных для хранения поисковой информации и организации работы предложенной диагональной схемы, а также реализована программная система на ее основе. Кроме того, соискателю принадлежат разработка (совместно с руководителем) и программная реализация генератора классов многомерных многоэкстремальных тестовых функций с известным расположением локальных и глобальных минимумов, а также введение в практику ряда критериев численного сравнения алгоритмов глобального поиска на классах тестовых функций.

Практическая ценность работы. Исследования по теме диссертационной работы выполнялись при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 01-01-00587 и 04-01-00455-а), Итальянского фонда фундаментальных исследований (проекты FIRB RBNE01WBBB и RBAU01JYPN), а также гранта Калабрийского университета (г. Козенца, Италия) для молодых ученых (проект “Giovani Ricercatori”, 2006 г.). Результаты работы используются также в следующих курсах факультета вычислительной математики и кибернетики Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, посвященных вопросам оптимизации: “Модели и методы принятия решений” (общий курс по специальности “Прикладная информатика”), “Методы принятия решений” (спецкурс магистратуры по специальности “Прикладная математика и информатика”), “Системы поддержки принятия решений” (спецкурс кафедры математического обеспечения ЭВМ по специальности “Прикладная математика и информатика”), “Параллельные вычисления и методы глобальной оптимизации” (спецкурс кафедры математического обеспечения ЭВМ по специальности “Прикладная математика и информатика”).

Апробация работы. Результаты работы были представлены на международных научно-практических семинарах “Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах” (Нижний Новгород, 2001, 2002, 2003), VI международном конгрессе “Математическое моделирование” (Нижний Новгород, 2004), итальянских национальных конгрессах “Современная вычислительная математика” (Козенца, Италия, 2002, 2005), международном конгрессе “Нелинейная оптимизация большой размерности” (Эриче, Италия, 2004), IV международной конференции “Достижения глобальной оптимизации” (Санторини, Греция, 2003), I международной конференции “Непрерывная оптимизация” (Трой, Нью-Йорк, США, 2004), международном семинаре “Глобальная оптимизация” (Альмерия, Испания, 2005), VIII конгрессе Итальянского общества прикладной математики (Рагуза, Италия, 2006), III международной конференции “Прикладная математика” (Пловдив, Болгария, 2006).

Публикации. Основное содержание диссертации изложено в работах [1]–[21].

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения, двух приложений и списка литературы из 250 наименований. Основной печатный текст занимает 150 страниц, объем приложений равен 32 страницам. В работе содержатся 32 рисунка и 20 таблиц.

Краткое содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации, определяются цели исследования, освещаются научная новизна и практическая ценность полученных результатов, дается краткая характеристика диссертационной работы.

Первая глава – "Безусловная липшицева глобальная оптимизация". В этой главе производится постановка задачи безусловной липшицевой глобальной оптимизации как частного случая общей задачи глобальной оптимизации и обсуждаются некоторые известные алгоритмы ее решения. В работе рассматривается задача вида

$$f^* = f(x^*) = \min f(x), \quad x \in D, \tag{1}$$

где многоэкстремальная целевая функция $f(x)$ определена в N-мерном гиперинтервале D

$$D = [a, b] = \{x \in \mathbb{R}^N : a(j) \leq x(j) \leq b(j),\, 1 \leq j \leq N\}, \tag{2}$$

и удовлетворяет в области поиска D условию Липшица с неизвестной константой Липшица L

$$|f(x') - f(x'')| \leq L\|x' - x''\|, \quad \forall\, x', x'' \in D, \quad 0 < L < \infty, \tag{3}$$

$a, b \in \mathbb{R}^N$ есть заданные векторы, $\|\cdot\|$ обозначает евклидову норму, а $x(j)$ является j-й ($j = 1, 2, \ldots, N$) компонентой вектора $x \in \mathbb{R}^N$. Функция $f(x)$ может быть недифференцируемой, поэтому лишь значения $f(x)$ в точках $x \in D$ могут быть доступны в ходе решения задачи (1)–(3). Предполагается также, что проведение испытания целевой функции (то есть ее вычисление в некоторой точке допустимой области) требует больших вычислительных затрат.

В частности, в §1.1 дается постановка задачи, рассматриваются ее основные свойства и практическая ценность. В §1.2 обсуждается влияние информации о константе Липшица на скорость сходимости методов липшицевой глобальной оптимизации. Способы получения такой информации иллюстрируются кратким описанием некоторых одномерных алгоритмов липшицевой оптимизации, отдельные идеи которых используются в диссертационной работе при построении новых многомерных методов решения задачи глобальной оптимизации. В частности, кратко описываются метод ломаных (с априорно заданной константой Липшица), информационно-статистический алгоритм (с адаптивной оценкой глобальной константы Липшица), схема локальной настройки (с адаптивным оцениванием локальных констант Липшица) и алгоритм DIRECT (с оцениванием константы Липшица из множества возможных значений). Подчеркивается важность оценивания локальных констант Липшица и балансирования локальной и глобальной информации в ходе поиска глобального минимума для ускорения работы алгоритмов. В §1.3 демонстрируются возможные пути обобщения одномерных методов на многомерный случай (рассматриваются некоторые схемы редукции размерности, кратко обсуждаются различные аспекты обобщения одномерного метода ломаных, а также подходы адаптивного разбиения многомерной области поиска на подобласти).

Вторая глава – “Диагональный подход к решению задач глобальной оптимизации”. Эта глава посвящена рассмотрению диагонального подхода, предложенного Я. Пинтером, к решению многомерных задач глобальной оптимизации, при котором область поиска последовательно разбивается на гиперинтервалы и целевая функция вычисляется в двух вершинах главной диагонали каждого из получаемых гиперинтервалов. Диагональные алгоритмы, построенные в рамках такого подхода, с одной стороны, точнее оценивают наименьшие значения функции на гиперинтервалах по сравнению с алгоритмами, использующими популярные схемы разбиения с вычислением функции в центральных точках гиперинтервалов. С другой стороны, такие алгоритмы могут быть построены путем обобщения многих эффективных одномерных методов на многомерный случай, что открывает интересные перспективы в создании новых быстрых алгоритмов глобальной оптимизации и, следовательно, имеет большое практическое значение.

Общая схема диагональных алгоритмов дается в §2.1. Диагональный алгоритм адаптивно разбивает гиперинтервал поиска D из (2) на множество гиперинтервалов $D_i = [a_i, b_i]$, $1 \leq i \leq M(k)$, с вершинами a_i, b_i и главными диагоналями $[a_i, b_i]$ ($M(k)$ есть число гиперинтервалов на k-й итерации алгоритма). С целью уменьшения вычислительных затрат при оценивании значений $f(x)$, испытания функции в каждом гиперинтервале D_i производятся только в его двух вершинах a_i и b_i. На каждой итерации производится оценка "пригодности" гиперинтервалов текущего разбиения для дальнейшего поиска глобального минимума, где "пригодность" гиперинтервала D_i часто может быть проинтерпретирована как вероятность принадлежности точки x^* глобального минимума $f(x)$ области D_i. "Пригодность" гиперинтервала D_i численно выражается при помощи значения R_i, называемого *характеристикой гиперинтервала*. При этом некоторые одномерные характеристики могут быть использованы как прототипы для вычисления характеристики R_i многомерного гиперинтервала D_i, если рассматривать их (при надлежащей трансформации) на одномерном отрезке, являющемся главной диагональю $[a_i, b_i]$ гиперинтервала D_i. Тем самым диагональный подход допускает естественное обобщение многих одномерных алгоритмов на многомерный случай. Гиперинтервал с "наилучшей" текущей характеристикой (например, с наибольшей) разбивается при помощи некоторой стратегии разбиения, и новые испытания проводятся в вершинах, соответствующих главной диагонали каждого из вновь сгенерированных гиперинтервалов. Задание вида характеристики $R(\cdot)$ и стратегии разбиения определяют конкретный диагональный метод.

В §2.1 описываются также две стратегии разбиения, традиционно используемые в диагональных алгоритмах: *Деление на* 2^N и *Деление пополам*. В первом случае гиперинтервал D_t, выбранный для разбиения, делится на 2^N новых гиперинтервала (где N есть размерность задачи), а во втором случае – на два новых гиперинтервала. Гиперплоскости, разделяющие выбранный гиперинтервал D_t, проходят через некую точку S_t на главной диагонали, расположение которой зависит от конкретной реализации алгоритма, причем в случае применения стратегии *Деление на* 2^N используются N взаимно перпендикулярных гиперплоскостей, параллельных координатным плоскостям, а при стратегии *Деление пополам* – одна гиперплоскость, перпендикулярная стороне D_t с наибольшей длиной. После разбиения D_t функция $f(x)$ вычисляется только в вершинах главных диагоналей полученных гиперинтервалов.

В §2.2 предлагаются два новых диагональных алгоритма, обобщающих одномерный геометрический метод Я. Д. Сергеева с локальной настройкой на поведение целевой функции на многомерный случай при помощи диагональной схемы. Новые методы отличаются друг от друга стратегиями разбиения области поиска D: один метод использует стратегию *Деление на* 2^N, другой – *Деление пополам*. В остальном структура обоих методов идентична, что позволяет провести их описание и исследование в рамках единого алгоритма – Нового Диагонального Алгоритма с Локальной Настройкой (НДАЛН).

Ключевая идея методов НДАЛН заключается в сопряжении локальной и глобальной информации при адаптивном оценивании локальных констант Липшица в различных гиперинтервалах текущего разбиения области поиска D. Если главная диагональ некоторого гиперинтервала мала (по сравнению с текущей максимальной длиной среди всех главных диагоналей в разбиении области D), то основное влияние на работу методов оказывает локальная информация о поведении функции вблизи вершин рассматриваемого гиперинтервала, а результаты испытаний, проведенных в других гиперинтервалах, имеют меньшее значение. При рассмотрении большого гиперинтервала (с длиной его главной диагонали близкой к текущей наибольшей длине) роль глобальной информации повышается, так как в этом случае локальная информация может оказаться ненадежной. Балансирование глобальной и локальной информации в ходе глобального поиска осуществляется таким образом, чтобы обеспечить нахождение глобального решения.

Исследуется характер сходимости методов НДАЛН и устанавливаются достаточные условия глобальной сходимости НДАЛН (теоремы* 2.1 и 2.2). Приводятся результаты численных экспериментов, призванных, с одной стороны, сравнить технику локальной настройки с традиционным подходом к оцениванию глобальной константы Липшица, а с другой стороны, сравнить стратегии разбиения *Деление на* 2^N и *Деление пополам*. Показывается, что комбинация техники локальной настройки и стратегии разбиения *Деление пополам* является самой успешной среди рассмотренных методов на многомерных тестовых функциях из литературы.

В §2.3 традиционные стратегии разбиения исследуются более детально и раскрываются их недостатки. Как стратегия *Деление на* 2^N, так и стратегия *Деление пополам* кажутся достаточно эффективными, если рассматривать их на каждой отдельно взятой итерации. Однако отмечается, что обе стратегии в ходе работы алгоритма генерируют (независимо от вида характеристики $R(\cdot)$, определяющей, какой гиперинтервал должен быть поделен на каждой итерации) большое число избыточных точек испытаний функции $f(x)$. Причины проведения избыточных испытаний одинаковы для обеих стратегий: (1) на каждой итерации $f(x)$ вычисляется более чем в двух точках в каждой подобласти D_i, из которых используются только две точки (например, при вычислении характеристики R_i); (2) нет возможности эффективно установить связь между подобластями, полученными на разных итерациях, что влечет за собой потерю информации о близости точек испытаний в многомерном пространстве поиска $D \subset \mathbb{R}^N$ (в худшем случае поисковая информация дублируется). Такая избыточность ведет как к уменьшению скорости работы алгоритмов, так и к увеличению машинной памяти, требуемой для хранения необходимой поисковой информации.

В §2.4 описываются новая стратегия разбиения гиперинтервалов

*Нумерация теорем в автореферате совпадает с нумерацией в тексте диссертации.

(предложенная Я. Д. Сергеевым), ее основные свойства и программная реализация. Данная стратегия разбиения успешно решает обе проблемы, обнаруженные при использовании стратегий *Деление на* 2^N и *Деление пополам*, и не производит характерных для них избыточных вычислений функции, что дает основание называть новую диагональную стратегию разбиения гиперинтервалов *безызбыточной*. Действительно, во-первых, при ее использовании выбранный гиперинтервал D_t разбивается на три равных гиперинтервала, в которых функция $f(x)$ вычисляется строго в двух вершинах (теорема 2.3), что соответствует духу диагонального подхода. Во-вторых, использование специальной индексации гиперинтервалов, непосредственно связанной с регулярностью процедуры разбиения, дает возможность (теорема 2.4) вычислять координаты вершин a_i и b_i каждого гиперинтервала D_i по его индексу, позволяя разграничить информацию о гиперинтервале (как, например, значение его характеристики) и информацию о вершинах (как, например, значения функции в них). Поэтому координаты вершин вместе с соответствующей поисковой информацией могут быть сохранены в отдельной области данных (*массив вершин*), на элементы которой устанавливаются ссылки из области машинной памяти, хранящей информацию о гиперинтервалах (*список гиперинтервалов*). Вся необходимая информация о функции в конкретной вершине вычисляется только один раз, записывается в массив вершин, а затем при необходимости считывается из него. Таким образом, удается избежать избыточных вычислений функции и многократного сохранения информации о точках испытаний, являющихся вершинами нескольких гиперинтервалов одновременно. Кроме того, разбиения осуществляются так, что одна и та же точка испытаний $f(x)$ может принадлежать различным (до 2^N) гиперинтервалам. При этом операция повторного вычисления функции (до 2^N раз в одной и той же точке) заменяется гораздо менее трудоемкой операцией считывания информации из памяти ЭВМ, что значительно ускоряет процедуру поиска, особенно при увеличении размерности задачи N.

Новая стратегия разбиения является также процедурой, генерирующей последовательность так называемых *адаптивных диагональных кривых*, схожих с кривыми, заполняющими пространство. Адаптивные диагональные кривые строятся на главных диагоналях гиперинтервалов текущего разбиения области D. Порядок их разбиения отличается в разных подобластях и определяется заданием характеристик $R(\cdot)$ гиперинтервалов и видом целевой функции. Конкретный диагональный алгоритм, использующий безызбыточную стратегию разбиения, строит свою собственную последовательность кривых. Если параметры алгоритма заданы надлежащим образом, то такая последовательность становится более плотной в окрестностях точек глобального минимума целевой функции.

Регулярность множества точек испытаний $f(x)$ при использовании безызбыточной стратегии разбиения позволяет построить *специализированную базу данных* и эффективно реализовать операции с данными в ней. Структура данных для организации работы новой стратегии разбиения и программная система на ее основе предлагаются в §2.4. Данная система может быть использована не только при решении задач липшицевой глобальной оптимизации, но также при анализе общей задачи минимального описания вектор-функции $\mathcal{F}(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_q(x))$ в N-мерном гиперинтервале, если такое описание достигается при помощи диагональных алгоритмов с использованием безызбыточной стратегии разбиения. Термин “минимальное описание” при этом подразумевает получение необходимой информации о поведении функции путем вычисления ее значений в минимально возможном количестве точек $x \in D$.

Третья глава – “Методы глобальной оптимизации на основе безызбыточной диагональной стратегии разбиения”.

В этой главе показывается, как безызбыточная стратегия разбиения может быть использована для построения быстрых диагональных алгоритмов глобальной оптимизации. Предлагаются и всесторонне изучаются два новых диагональных метода с использованием указанной стратегии разбиения и с различными подходами к получению информации о константе Липшица: в первом из методов адаптивно оценивается глобальная константа Липшица, во втором оценки константы Липшица выбираются из множества возможных значений от нуля до бесконечности. Устанавливаются условия сходимости предлагаемых методов. Приводятся результаты их численного тестирования и сравнения с некоторыми известными алгоритмами глобального поиска.

В частности, в §3.1 предлагается Новый многомерный Диагональный Информационно-Статистический Алгоритм (НДИСА) липшицевой глобальной оптимизации, основанный на использовании безызбыточной стратегии разбиения. Алгоритм НДИСА обобщает одномерный информационно-статистический алгоритм Р. Г. Стронгина на многомерный случай. Выбор данного одномерного метода в качестве базового для многомерного обобщения был мотивирован наличием хороших оценок его скорости сходимости.

Исследуются условия глобальной сходимости предложенного алгоритма (теоремы 3.1–3.3). Показывается, что существует бесконечное множество значений параметра метода, гарантирующих его сходимость только к точкам глобального минимума. Описываются численные эксперименты, проведенные для тестирования НДИСА и его сравнения с известными диагональными методами глобальной оптимизации на классах тестовых функций и на двух существенно многоэкстремальных десятимерных функциях. Результаты экспериментов подтверждают теоретические выводы и демонстрируют превосходство нового метода по сравнению с традиционными диагональными алгоритмами глобального поиска как по числу проводимых испытаний целевой функции, так и по качественному исследованию области поиска D, характеризуемому количеством генерируемых гиперинтервалов. За счет того, что каждая (внутренняя для области D) точка испытания $f(x)$ может принадлежать до 2^N гиперинтервалам области $D \subset \mathbb{R}^N$ (и, следовательно, при использовании безызбыточной стратегии разбиения экономятся до 2^N вычислений функции), преимущество метода НДИСА увеличивается с ростом размерности задачи.

В §3.2 рассматривается Новый Диагональный Алгоритм со Множеством Оценок липшицевых констант (НДАМО). В нем используется безызбыточная стратегия разбиения гиперинтервалов, усиленная новой техникой выбора гиперинтервалов для разбиения. Предлагается новая процедура оценивания нижних границ значений целевой функции на гиперинтервалах (теорема 3.4), которая успешно сочетается с идеей (введенной в алгоритме DIRECT Д. Р. Джонса и др.) выбора оценок константы Липшица из множества возможных значений. Вводится понятие недоминируемых гиперинтервалов, и обосновывается процедура нахождения таких гиперинтервалов для их последующего возможного разбиения (теорема 3.5).

Новый метод нацелен (в отличие от популярных в зарубежной литературе алгоритмов DIRECT и его локально-ориентированной модификации DIRECT*l*, которые также используют в своей работе множественные оценки константы Липшица) на решение сложных многомерных задач с большим числом локальных минимумов. Для достижения этой цели предлагается двухфазная схема поиска глобального минимума, в которой выделяются глобальная и локальная фазы. Как известно, алгоритм DIRECT также балансирует глобальную и локальную информацию в ходе работы. Однако в нем явное преимущество отдается локальной фазе. Предлагаемая двухфазная схема алгоритма НДАМО при достижении достаточного уровня разбиений гиперинтервалов около точки текущего минимального значения функции переключает работу метода на исследование больших гиперинтервалов, которые могут содержать лучшее решение. Такое решение обосновано тем, что около текущей лучшей точки проводится большое число разбиений, поэтому ее окрестность содержит лишь малые гиперинтервалы, в то время как большие гиперинтервалы могут находиться только далеко от текущего решения. Таким образом, НДАМО балансирует глобальную и локальную информацию более совершенным образом с целью обеспечения более быстрой сходимости метода к точкам глобального минимума сложных многоэкстремальных функций.

Исследуются условия сходимости предложенного алгоритма, в частности, устанавливается (теорема 3.6) его так называемая “всюду плотная” сходимость (то есть сходимость бесконечной последовательности точек испытаний к любой точке области поиска). Описываются и интерпретируются результаты численных экспериментов, проведенных на более чем 1600 многоэкстремальных функциях из 16 тестовых классов размерностей $N = 2$, 3, 4 и 5 с использованием предлагаемого в работе набора пяти критериев сравнения методов. Результаты проведенных экспериментов демонстрируют, что применение алгоритма НДАМО для решения сложных многомерных задач ведет к значительным улучшениям (в терминах рассматриваемых критериев) по сравнению с использованием алгоритма DIRECT и его модификации DIRECTl. Так как метод НДАМО ориентирован на решение сложных многомерных многоэкстремальных задач, то чем более сложные задачи содержатся в тестовом классе, тем заметнее преимущество нового алгоритма.

В **заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы.

В **Приложении А** – “GKLS-генератор классов тестовых функций” – обсуждается вопрос численного тестирования алгоритмов глобальной оптимизации и детально описывается предлагаемый в работе генератор (GKLS-генератор) трех классов (недифференцируемых, непрерывно дифференцируемых и дважды непрерывно дифференцируемых) многомерных многоэкстремальных тестовых функций. Процедура генерирования состоит в переопределении выпуклой квадратичной функции (параболоида) при помощи полиномов. Каждый тестовый класс содержит 100 функций и задается лишь пятью интуитивными параметрами: (1) размерностью задачи, (2) числом локальных минимумов, (3) значением глобального минимума, (4) радиусом области притяжения точки глобального минимума, (5) расстоянием между точкой глобального минимума и вершиной параболоида. Изменяя указанные параметры, пользователь может создавать тестовые классы с различными свойствами и исследовать различные аспекты интересующего его алгоритма глобального поиска. Большинство других параметров выбирается генератором при помощи датчика случайных чисел, обеспечивая при этом однородность свойств функций одного класса и повторяемость численных экспериментов на тестовых классах GKLS-генератора. Необходимое согласование многочисленных параметров каждой функции (например, уже для одной двумерной функции с десятью локальными минимумами их больше 40) осуществляется автоматически. Для всех тестовых функций генератор предоставляет подробную информацию о расположении точек минимумов и о размерах их областей притяжения. Также генерируются частные производные дифференцируемых функций. Генератор использовался в диссертационной работе при проведении численных экспериментов. С момента создания (2003 г.) он уже был запрошен компаниями и исследовательскими организациями из более чем 20 стран мира.

Наконец, в **Приложении В** предлагается ряд критериев сравнения методов глобального поиска с использованием классов тестовых функций.

Основные результаты работы

1. Показано, как техника локальной настройки на поведение целевой функции, позволяющая получить значительное ускорение сходимости ряда методов липшицевой глобальной оптимизации, может быть применена при построении диагональных алгоритмов. В частности, предложены два геометрических метода с локальной настройкой, использующие в работе традиционные диагональные стратегии разбиения области поиска.

2. Изучены свойства безызбыточной диагональной стратегии разбиения гиперинтервалов и показано, что она может быть положена в основу новой диагональной схемы построения быстрых алгоритмов глобальной оптимизации. Разработана специализированная база данных для хранения поисковой информации и организации работы предложенной диагональной схемы, а также реализована программная система на ее основе. Эффективность работы системы объясняется тем, что целевая функция вычисляется в каждой точке только один раз, результат вычислений сохраняется в базе данных и считывается при необходимости, заменяя трудоемкую операцию многократного (до 2^N, где N есть размерность задачи) вычисления функции значительно более простой операцией считывания информации из базы данных.

3. Предложен многомерный информационно-статистический метод, расширяющий одномерный информационно-статистический алгоритм Р. Г. Стронгина на многомерный случай при помощи диагональной схемы с безызбыточной стратегией разбиения. Результаты обширных численных экспериментов показали, что новый метод существенно превосходит традиционные диагональные методы.

4. Предложен геометрический диагональный алгоритм решения сложных многомерных задач, использующий как новую схему разбиения, так и новый подход к получению оценок константы Липшица из множества возможных значений. Предложена и реализована новая техника балансирования локальной и глобальной информации в ходе поиска глобального минимума. Результаты многочисленных экспериментов показали значительное преимущество нового метода по сравнению с ранее используемыми схемами.

5. Для всех предложенных алгоритмов установлены достаточные условия сходимости к глобальному минимуму.

6. Предложен генератор* классов многомерных многоэкстремальных случайных тестовых функций с известным расположением локальных и глобальных минимумов. Он позволяет генерировать тестовые классы, состоящие из 100 функций с близкой структурой, путем задания пяти простых параметров и предоставляет полное описание всех сгенерированных функций. Предложен набор критериев для сравнения различных методов глобальной оптимизации на классах случайных тестовых функций.

---

*Генератор хранится в базе данных алгоритмов CALGO, поддерживаемой Международной ассоциацией вычислительной техники (Association for Computing Machinery, ACM), а также находится в свободном доступе по WWW-адресу: http://wwwinfo.deis.unical.it/~yaro/GKLS.html. С момента создания (2003 г.) он уже был запрошен компаниями и исследовательскими организациями из более чем 20 стран мира.

Публикации по теме диссертационной работы

1. *Сергеев Я. Д., Квасов Д. Е.* Адаптивные диагональные кривые и их программная реализация // *Вестник ННГУ: Математическое моделирование и оптимальное управление*. – 2001. – Вып. 2, № 24. – С. 300–317.

2. *Квасов Д. Е.* Структуры данных для реализации адаптивных диагональных кривых // Материалы Международного научно-практического семинара "Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах" / Под ред. Р. Г. Стронгина. – Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2001. – С. 76–80.

3. *Сергеев Я. Д., Квасов Д. Е.* Новый диагональный алгоритм глобальной минимизации // Материалы второго Международного научно-практического семинара "Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах" / Под ред. Р. Г. Стронгина. – Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2002. – С. 265–267.

4. *Квасов Д. Е., Сергеев Я. Д.* Многомерный алгоритм глобальной оптимизации на основе адаптивных диагональных кривых // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. – 2003. – Т. 43, № 1. – С. 42–59.

5. *Гришагин В. А., Квасов Д. Е., Сергеев Я. Д.* Сравнительная оценка эффективности синхронных и асинхронных рекурсивных алгоритмов глобальной оптимизации // Материалы третьего Международного научно-практического семинара "Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах"/ Под ред. Р. Г. Стронгина. – Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2003. – С. 243–246.

6. *Квасов Д. Е., Сергеев Я. Д.* Исследование методов глобальной оптимизации при помощи генератора классов тестовых функций: Методическая разработка. – Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2006. – 48 с.

7. *Kvasov D. E., Pizzuti C., Sergeyev Ya. D.* Comparison of two partition strategies in diagonal global optimization algorithms: Tech. Rep. 9. – Institute of Systems and Informatics, Rende (CS), Italy: ISI–CNR, 2001. – 16 p.

8. *Gaviano M., Kvasov D. E., Lera D., Sergeyev Ya. D.* Software per la generazione di classi di funzioni test nell'ottimizzazione globale // Atti del Convegno Nazionale Italiano "Analisi Numerica: Stato dell'Arte" / A cura di F. Costabile. – Pubblicazioni del Laboratorio di Analisi Numerica. – Dipartimento di Matematica, Università della Calabria, Rende (CS), Italy: 2002. – P. 24.

9. *Kvasov D. E., Sergeyev Ya. D.* Information global optimization algorithms // Atti del Convegno Nazionale Italiano "Analisi Numerica: Stato dell'Arte" / A cura di F. Costabile. – Pubblicazioni del Laboratorio di Analisi Numerica. – Dipartimento di Matematica, Università della Calabria, Rende (CS), Italy: 2002. – P. 32–33.

10. *Sergeyev Ya. D., Kvasov D. E.* A new optimization algorithm using adaptive diagonal curves and its numerical testing: Tech. Rep. 1. – Institute of Systems and Informatics, Rende (CS), Italy: ISI–CNR, 2002. – 13 p.

11. *Kvasov D. E., Pizzuti C., Sergeyev Ya. D.* Local tuning and partition strategies for diagonal GO methods // Numerische Mathematik. – 2003. – Vol. 94, no. 1. – P. 93–106.

12. *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. – Vol. 29, no. 4. – P. 469–480.

13. *Kvasov D. E., Gaviano M., Lera D., Sergeyev Ya. D.* Generator of classes of test functions for global optimization algorithms // Proc. of the 4th International Conference on Frontiers in Global Optimization / Ed. by C. A. Floudas, P. M. Pardalos. – Vol. 10 of *Aegean Conferences Series*. – Santorini, Greece: 2003. – P. 55.

14. *Sergeyev Ya. D., Kvasov D. E.* Diagonal Lipschitz global optimization algorithm working with a set of Lipschitz constants: Tech. Rep. RT-ICAR-CS-04-15. – Institute of High Performance Computing and Networking, Rende (CS), Italy: ICAR–CNR, 2004. – 33 p.

15. *Kvasov D. E., Sergeyev Ya. D.* Global optimization methods and classes of test functions // Proc. of the 1st International Conference on Continuous

Optimization *ICCOPT-I* / Ed. by J.-S. Pang. – Troy (NY), USA: 2004. – P. 38–39.

16. *Sergeyev Ya. D., Kvasov D. E.* Lipschitzian global optimization without the Lipschitz constant based on adaptive diagonal curves // Proc. of the 6th International Congress on Mathematical Modeling. – Nizhni Novgorod: NNGU Press, 2004. – P. 121.

17. *Sergeyev Ya. D., Kvasov D. E.* Diagonal global search based on a set of possible Lipschitz constants // Proc. of the International Workshop on Global Optimization *GO05* / Ed. by I. Garcìa, L. G. Casado, E. M. T. Hendrix, B. Tóth. – Almerìa, Spain: University of Almerìa, 2005. – P. 219–224.

18. *Khalaf F. M. H., Kvasov D. E.* One-dimensional constrained Lipschitzian global optimization algorithms // Proc. of the International Conference “Numerical Analysis: The State of the Art” / Ed. by F. Costabile et al. – Pubblicazioni del Laboratorio di Analisi Numerica. – Dipartimento di Matematica, Università della Calabria, Rende (CS), Italy: 2005. – P. 43.

19. *Kvasov D. E., Sergeyev Ya. D.* Global search based on efficient diagonal partitions and several techniques for obtaining the Lipschitz information // Proc. of the 3rd International Conference of Applied Mathematics *TICAM* / Ed. by D. Bainov, S. Nenov. – Vol. 2. – Plovdiv, Bulgaria: 2006. – P. 164–165.

20. *Khalaf F. M. H., Kvasov D. E., Sergeyev Ya. D.* One-dimensional global optimization problems with multiextremal constraints // Proc. of the VIII Congress of the Italian Society for Applied and Industrial Mathematics *SIMAI 2006* / Ed. by L. Puccio, P. Rughetti. – Università degli Studi di Messina, Italy: 2006. – P. 184.

21. *Sergeyev Ya. D., Kvasov D. E.* Global search based on efficient diagonal partitions and a set of Lipschitz constants // *SIAM Journal on Optimization*. – 2006. – Vol. 16, no. 3. – P. 910–937.

Подписано в печать Формат $60 \times 84\,1/16$.

Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1. Заказ Тираж 100 экз.

Типография Нижегородского госуниверситета.

Лиц. ПД № 18-0099 от 04.05.2001.

603000, Н. Новгород, ул. Б. Покровская, 37.