УДК 519.6

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЕКТНЫХ РЕШЕНИЙ В САПР

А.П. Карпенко
МГТУ им. Н.Э. Баумана
Россия, 115005, Москва, 2-я Бауманская ул., 5
E-mail: apkarpenko@mail.ru

Ключевые слова: САПР, глобальная оптимизация, параметрическая оптимизация, мета-оптимизация, суррогатное моделирование, ландшафтный анализ.

Аннотация: Представляем постановку задачи глобальной условной оптимизации, основной особенностью которой в САПР является высокая вычислительная сложность целевой функции. Даем определения таких сущностей, как характерные признаки задачи, базовая задача, базовый алгоритм оптимизации, мета-задача и мета-алгоритм оптимизации, стратегия базовой задачи, индикатор эффективности стратегии. Определяем и приводим постановки мульти-индикаторной, мульти-классовой и мульти-бюджетной задач мета-оптимизации. Даем обзор современных методов ландшафтного анализа целевых функций, а также методов мета-оптимизации базовых алгоритмов.

1. Введение

Современные системы автоматизированного проектирования (CAD) и инженерного анализа (CAE) включают в себя программы, реализующие алгоритмы непрерывной глобальной параметрической оптимизации. Высокая вычислительная сложность моделей оптимизируемых объектов не позволяет производить большое число обращений к этим моделям. Поэтому в современном «промышленном» программном обеспечении задач глобальной оптимизации широко используют предварительные анализ и обработку этих задач, включая анализ исходных данных, понижение размерности пространства поиска, ландшафтный анализ целевой функции и т.д. [1]. По той же причине широко применяют предварительный выбор (с помощью методов мета-оптимизации) наиболее эффективного алгоритма оптимизации, учитывающего особенности рассматриваемой оптимизационной задачи.

Рассматриваем задачу q глобальной условной оптимизации вида

$$\min_{X \in D_X} f(X) = f(X^*) = f^*,$$

где X - $|X|$-мерный вектор варьируемых параметров (размерность задачи); $D_X \subset R^{|X|}$ – область поиска; $f(X)$ – целевая функция; X^*, f^* - искомые оптимальный вектор X и значение целевой функции.

Результатом предварительной оценки свойств задачи $q = q(C)$ является $|C|$-мерный вектор C *характерных признаков* (ХП) этой задачи. Различаем априорные и апостериорные ХП.

Априорные ХП прямо вытекают из постановки задачи оптимизации и включают в себя: размерность $|X|$ пространства варьируемых параметров; признак наличия или отсутствия ограничивающих функций в определении области D_X; тип целевой и ограничивающих функций; прогнозируемое число локальных экстремумов и т.д. Универсальная система обозначений задач оптимизации, основанная на использовании их априорных ХП, представлена в [2].

Апостериорные ХП, в отличие от априорных, требуют вычислительных затрат на предварительные испытания целевой функции в области поиска D_X с целью последующей экспертной и/или автоматической оценки результатов испытаний. К числу апостериорных ХП задачи оптимизации относят, прежде всего, ХП целевой функции. Методы оценки значений апостериорных ХП целевой функции без использования экспертных оценок называют методами *ландшафтного анализа* (ЛА) [3].

2. Методы ландшафтного анализа целевой функции

Для определения значений апостериорных ХП целевой функции методами ЛА необходима *обучающая выборка* – набор точек $X \in D_X$ и соответствующих значений целевой функции $f(X)$. Найденные значения ХП определяются не только ландшафтом функции $f(X)$, но и методом планирования эксперимента, использованном при формировании выборки. Потому предпочтение отдают адаптивным методам планирования эксперимента [4], которые по сравнению с неадаптивными методами позволяют получить более точные значения ХП целевой функции за меньшее число испытаний.

Классический метод ландшафтного анализа [3] предлагает в общей сложности 50 числовых признаков ландшафта функции $f(X)$, сгруппированных в шесть так называемых свойств: выпуклость, степень кривизны, *y*-распределение, ярусность, мульти-модальность, мета-модельные свойства. Здесь под *y*-распределением понимают статистические оценки плотности вероятности распределения значений $f(X)$ в точках обучающей выборки, число экстремумов функции плотности вероятности, степень близости этой функции к нормальному закону распределения. Ярусность функции $f(X)$ оценивают как вероятность того, что ее значения превышают заданное значение. Мета-модельные признаки $f(X)$ вычисляют на основании результатов оценки точности ее линейных или квадратичных регрессионных мета-моделей, построенных на используемой обучающей выборки.

Широко известны следующие методы ЛА: *метод клеточного отображения* (*Cell Mapping*); *метод обобщенного клеточного отображения* (*Generalized Cell Mapping*); *метод барьерных деревьев* [1]. Наиболее содержательным, на наш взгляд, является *метод информационного содержания* (*Information Content*) [5], который позволяет оценить численные характеристики зашумленности и мультимодальности ландшафта целевой функции $f(X)$. В соответствии с этим методом сначала точки $X_i, i \in [1:l]$ обучающей выборки упорядочивают тем или иным образом и вычисляют перепад значений $f(X)$ между соседними точками выборки. Затем последовательность значений $f(X_i) = f_i$ преобразуют в символьный набор $S(\varepsilon) = \{s_1, s_2, ..., s_{l-1}\}$ по правилу

$$s_i = \begin{cases} \bar{1}, & \delta_i < \varepsilon, \\ 0, & abs(\delta_i) \le \varepsilon, \\ 1, & \delta_i > \varepsilon; \end{cases} \quad \delta_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{\|X_{i+1} - X_i\|}, \quad i \in [1 : l-1].$$

Здесь ε – параметр, определяющий чувствительность метода; $\|\cdot\|$ – евклидова норма. Полученную последовательность символов используют для вычисления искомых ХП на основании значений *функции информационного содержания*

$$ic(\varepsilon) = -\sum_{a \ne b} p_{ab}(\varepsilon)\, Log_6 p_{ab}(\varepsilon), \quad a, b \in \{\bar{1}, 0, 1\},$$

где ab – блок последовательных символов из набора $S(\varepsilon)$, например, $\bar{1}1, 01, 11$; p_{ab} – вероятность обнаружения блока ab в наборе $S(\varepsilon)$.

Известно некоторое число других методов ЛА. Например, метод *Nearest-Better Clustering* [1] позволяет идентифицировать единичные большие скачки мульти-модальной целевой функции $f(X)$. Метод *главных компонент* [1] определяет ландшафт числом главных компонент рассматриваемой выборки, при котором величина остаточной (объяснительной) дисперсии не превышает заданного значения. Предложены также ХП на основе оценки дисперсии попарных расстояний между всеми точками выборки и лучшими из этих точек [1].

3. Методы мета-оптимизации

Современные алгоритмы оптимизации имеют, как правило, значительное число свободных параметров $(b_1, b_2, ..., b_{|B|}) = B$, от значений которых может существенно зависеть эффективность этих алгоритмов. Отсюда возникает задача *настройки алгоритма* – задача определения в каком-то смысле наилучших («оптимальных») значений этих параметров. Вектор B свободных параметров базового алгоритма оптимизации $a = a(B)$ называют *стратегией алгоритма* a (*Б-стратегий*). Множество D_B допустимых Б-стратегий определяет набор алгоритмов $A(B) = \{a(B), B \in D_B\}$, то есть *метод оптимизации* $A(B)$.

Обычно при решении задачи $q(C)$ используют "умолчательные" стратегии алгоритма $a(B)$, полученные в результате выполненной ранее настройки этого алгоритма его авторами. Современным подходом к настройке алгоритмов оптимизации является подход на основе автоматизированного или автоматического решения задачи настройки, как *задачи мета-оптимизации (М-задачи*). Эта задача заключается в отыскании «оптимальной» стратегии B^* алгоритма $a(B)$ при решении данной *базовой задачи оптимизации* $q(C)$ (*Б-задачи*) или *класса Б-задач оптимизации* $Q(D_C) = \{q(C) \mid C \in D_C\}$, где D_C - множество допустимых значений компонентов вектора ХП. Настраиваемый алгоритм оптимизации $a(B)$ называем *базовым алгоритмом* (*Б-алгоритмом*), а настраивающий – *мета-алгоритмом* (*М-алгоритмом*).

Критерий эффективности Б-стратегий называем *индикатором эффективности* и обозначаем $e = e(q(C), a(B)) = e(C, B)$. М-задачу редко ставят и решают для одной Б-задачи, напротив, обычно М-задачу решают на некотором классе задач, который мы выше определили как $Q(D_C)$. Таким образом, *одно-индикаторную М-задачу* для класса Б-задач $Q(D_C)$ (*multi-instance problem tuning*) записываем в виде

(2) $$\underset{B \in D_B}{opt}\ e(Q(D_C), B) = e(D_C, B^*)\ .$$

В качестве индикатора эффективности Б-стратегий на классе задач D_C обычно используют усредненные значения $\bar{e}(D_C, B)$ индикатора $e(q(C), B)$ на этом классе задач, то есть полагают, что $e(D_C, B) = \bar{e}(q(C), B)$, $C \in D_C$. Иногда рассматривают двумерный вектор индикаторов, первая компонента которого есть $\bar{e}(D_C, B)$, а вторая компонента – оценка стандартного отклонения $\sigma(D_C, B)$ индикатора $e(q(C), B)$ на том же классе задач. Другими словами, рассматривают М-задачу как мульти-задачу М-оптимизации. Выделяем три следующих класса таких задач.

Мульти-индикаторные М-задачи. В этих задачах эффективность Б-стратегий оценивают с помощью вектора индикаторов $E = (e_1, e_2, ..., e_{|E|}) = E(D_C, B)$. Аналогично задаче (2), мульти-индикаторную М-задачу рассматриваем в постановке

(3) $$\underset{B \in D_B}{opt}{}^{\uparrow}\ E(D_C, B) = E(D_C, \mathbf{B}^*)\ ,$$

где индекс $\uparrow$ указывает на многокритериальность постановки задачи; $\mathbf{B}^*$ - набор «оптимальных» стратегий, принадлежащих множеству Парето задачи (3). В качестве компонентов вектора $E(D_C, B)$ аналогично задаче (2) могут использоваться их средние значения $\bar{e}_i(D_C, B)$ и стандартные отклонения $\sigma_i(D_C, B)$; $i \in [1:|E|]$.

Мульти-классовые М-задачи (*multu-problem tuning*). М-задачу (2) часто решают не на одном классе задач $Q(D_C)$, но на некотором наборе таких классов задач $Q(D_{C_1}), Q(D_{C_2}), ..., Q(D_{C_{|D|}})$, то есть решают $|D|$ штук М-задач вида (2):

(4) $$\underset{B \in D_B}{opt}\ e(D_{C_i}, B) = e(D_{C_i}, B_i^*),\ D_{C_i} \in D_C,\ i \in [1:|D|].$$

Относительно решений М-задачи (4) возникает вопрос: насколько чувствительна каждая из полученных «оптимальных» Б-стратегий $B_i^* = B^*(D_{C_i})$ к изменению (сужению или расширению) класса задач $Q(D_{C_i})$? Ответ на этот вопрос отыскивают путем решения многокритериальной мульти-классовой М-задачи

(5) $$\underset{B \in D_B}{opt}{}^{\uparrow}\ E(\mathbf{D}_C, B) = E(\mathbf{D}_C, \mathbf{B}^*)\ .$$

Здесь приняты следующие обозначения: $\mathbf{D}_C = \{D_{C_i} \in D_C, i \in [1:|D|]\}$ – набор, определяющий рассматриваемые классы задач; $E(\mathbf{D}_C, B) = (e(D_{C_i}, B) = e_i(B), i \in [1:|D|])$ – векторный индикатор эффективности.

Мульти-бюджетные М-задачи возникает в связи с тем, что «оптимальная» Б-стратегия может сильно зависеть от используемой конфигурации вычислительной системы, то есть, вообще говоря, для разных доступных вычислительных ресурсов нужно отыскивать разные «оптимальные» стратегии. Применительно к каждой данной Б-задаче мощность этих ресурсов измеряют максимально допустимым числом испытаний целевой функции $f(X)$ - *бюджетом* задачи. При небольшом бюджете, обусловленном использованием ЭВМ малой мощности, «оптимальная» Б-стратегия обеспечивает преимущественную интенсификацию поиска. Напротив, мощные вычислительные системы позволяют использовать «оптимальные» стратегии, которые реализуют широко диверсифицированный поиск.

4. Заключение

Введем следующие обозначения: 1ММ-задача – одна из рассмотренных мульти-задач М-оптимизации; 2ММ – комбинированная мульти-задача М-оптимизации, объединяющая любые две из этих мульти-задач; 3ММ – аналогичная задача, включающая в себя все три мульти-задачи.

В целях сокращения вычислительных затрат, в программном обеспечении глобальной параметрической оптимизации в САПР возрастает поддержка предварительного анализа постановки задачи на основе использования известных и новых алгоритмов анализа данных, понижения размерности пространства поиска, ландшафтного анализа целевой функции.

Повышается «интеллектуальность» программных комплексов параметрической оптимизации в САПР, в том числе, за счет реализации в них методов мета-оптимизации базовых алгоритмов оптимизации. Если в настоящее время, как правило, используются методы однократной настройки параметров этих алгоритмов, то перспективным является использование методов перманентной настройки, а также адаптивных и самоадаптивных методов управления параметрами [1]. С другой стороны, сейчас, почти без исключений, мульти-задачи мета-оптимизации решают только по отдельности, то есть как 1ММ-задачи. Актуальной является проблема совместного решения таких задач (то есть решения 2ММ- и 3ММ-задач). При этом возникают сложные задачи многокритериального принятия решений, требующие одновременного анализа боле одного многомерного фронта (множества) Парето. В целом современные методы многокритериального принятия решений еще недостаточно широко используются в процессе решения задач метаоптимизации. Например, перспективным, на наш взгляд является использование подходов, основанных на выявлении так называемой функции предпочтений ЛПР [1].

Для решения современных практически важных задач оптимизации все более широко используют параллельные вычислительные системы, имеющие разные архитектуры – вычислительные кластеры, системы с общей памятью, системы на основе графических процессорных устройств, слабосвязанные вычислительные системы типа ГРИД-систем и т.д. В этой связи актуальными являются проблемы разработки методов, алгоритмов и соответствующего программного для решения базовых задач оптимизации и задач мета-оптимизации, ориентированных на указанные классы параллельных систем.

Список литературы

1. Агасиев Т.А, Карпенко А.П. Современные техники глобальной оптимизации. Обзор // Информационные технологии. 2018. № 6. С. 370-386.
2. Bongartz I. et al. CUTE: Constrained and unconstrained testing environment // ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS). 1995. Vol. 21, No. 1. P. 123-160.
3. Mersmann O. et al. Exploratory landscape analysis // Proceedings of the 13th annual conference on Genetic and evolutionary computation. ACM. 2011. P. 829-836.
4. Li G., Aute V., Azarm S. An accumulative error based adaptive design of experiments for offline metamodeling // Structural and Multidisciplinary Optimization. 2010. Vol. 40, No. 1. P. 137-155.

5. Muñoz M.A., Kirley M., Halgamuge S.K. Exploratory landscape analysis of continuous space optimization problems using information content // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. 2015. Vol. 19, No. 1. P. 74-87.