

Т. А. Агасиев, аспирант, e-mail: agtaleh@mail.ru,
МГТУ им. Н. Э. Баумана, Москва

Метод секторизации полной карты вариативности целевой функции для оценки характерных признаков задачи оптимизации

Методы ландшафтного анализа разработаны для оценки различных характерных признаков целевой функции в задаче оптимизации. Точность оценок во многом зависит от выбранного плана эксперимента, т. е. от числа и расположения в пространстве поиска точек, которые формируют дискретное представление ландшафта целевой функции. В статье рассмотрены методы анализа карты вариативности целевой функции, которые позволяют получить оценки, наиболее устойчивые к вариациям плана эксперимента. Недостатком этих методов является высокая чувствительность значений компонент вектора характерных признаков задачи оптимизации к масштабу значений приращений ее целевой функции. Это может отрицательно сказаться на обобщающей способности алгоритма классификации задач по наиболее значимым для оптимизации признакам целевой функции. В связи с этим в работе предложен метод секторизации карты вариативности целевой функции, позволяющий получить оценки характерных признаков, устойчивые к изменению масштаба значений целевой функции. Предложена методика проведения вычислительного эксперимента для сравнительного исследования эффективности методов анализа карты вариативности. Сформулированы критерии эффективности алгоритмов оценки характерных признаков целевой функции. Получены результаты, указывающие на целесообразность применения предложенных методов ландшафтного анализа для классификации задач оптимизации по различным признакам. Качество классификации оптимизационных задач во многом определяет эффективность интеллектуализации подсистем параметрической оптимизации в САПР.

Ключевые слова: глобальная оптимизация, целевая функция, характерные признаки задачи оптимизации, ландшафтный анализ, ландшафтная выборка, метод информационного содержания, метод секторизации, карта вариативности

Введение

Современные системы автоматизированного проектирования и инженерного анализа включают в себя программы, реализующие в том числе алгоритмы непрерывной глобальной оптимизации. Рассмотрим задачу q глобальной оптимизации:

$$\min_{X \in D_X} f(X) = f(X^*) = f^*, \quad (1)$$

где $X \in \mathbb{R}^n$ — n -мерный вектор варьируемых параметров (n — размерность задачи); $D_X \subset \mathbb{R}^n$ — область поиска; $f(X) \in \mathbb{R}^1$ — целевая функция; X^* , f^* — искомые оптимальный вектор X и значение функции $f(X)$.

При решении практически значимых задач оптимизации в САПР широко применяют методы предварительного анализа задачи q для эффективного распределения вычислительных

ресурсов (Shan S., Wang G. G. Survey of modeling and optimization strategies to solve high-dimensional design problems with computationally-expensive black-box functions) [1]. Результатом анализа свойств задачи является вектор $C = (c_1, \dots, c_d)$ характерных признаков (ХП) этой задачи (Kerschke P. Comprehensive Feature-Based Landscape Analysis of Continuous and Constrained Optimization Problems Using the R-Package flacco) [2]. К числу ХП задачи q относят и ХП ее целевой функции. Будем рассматривать только ХП целевой функции $f(X)$ задачи q .

Различают априорные и апостериорные ХП [3] (Агасиев Т. А., Карпенко А. П. Современные техники глобальной оптимизации. Обзор). Априорные ХП прямо вытекают из постановки задачи оптимизации, например, ее размерность n . Апостериорные ХП, в отличие от априорных, требуют предварительного вычисления значений целевой функции в некоторых

точках области поиска D_X в целях последующей экспертной и/или автоматической оценки полученных результатов. Точки для вычислений выбирают в соответствии с некоторым методом планирования эксперимента (например, на основе полного факторного эксперимента (Cavazuti M. Design of experiments)) [4]. В условиях высокой вычислительной сложности целевой функции целесообразно применять адаптивные методы планирования эксперимента (Li G., Aute V., Azarm S. An accumulative error based adaptive design of experiments for offline metamodeling) [5]. После определения значений ХП целевой функции результаты вычислительного эксперимента используют на этапе инициализации алгоритма оптимизации, например, для построения начальной аппроксимирующей модели целевой функции (Forrester A. I. J., Keane A. J. Recent advances in surrogate-based optimization) [6].

Методы автоматической оценки значений апостериорных ХП целевой функции включают методы *ландшафтного анализа* (Mersmann O. et al. Exploratory landscape analysis) [7]. Эти методы применяют, например, для различения и классификации задач оптимизации при исследовании эффективности алгоритмов их решения. Собранную информацию используют для прогнозирования эффективности оптимизационного алгоритма при решении задач оптимизации на основании предварительно вычисленного вектора ХП ее целевой функции. Это позволяет выбирать и настраивать оптимизационный алгоритм перед решением практически значимых задач (Hoos H. N., Neumann F., Trautmann H. Automated Algorithm Selection and Configuration) [8].

В большинстве случаев для получения оценок ХП целевой функции методами ландшафтного анализа необходима *ландшафтная выборка* — набор точек $X_i \in D_X$, $i \in [1:m]$, выбранных в соответствии с некоторым методом планирования эксперимента. Искомые оценки ХП зависят от числа и расположения точек ландшафтной выборки, определяющей дискретное представление ландшафта целевой функции. Известно большое число методов ландшафтного анализа, оценивающих различные ХП целевой функции [9—11]. Общим недостатком этих методов является высокая чувствительность значений искомых ХП к изменению ландшафтной выборки. Для более полного анализа особенностей целевой функции на основе ландшафтной выборки в нашей работе [12] сформулировано понятие *карты вариативности* целевой функции, а также предложен ме-

тод составления так называемой *полной карты вариативности* (ПКВ) ландшафтной выборки целевой функции.

Оценки ХП целевой функции $f(X)$ зависят как от ландшафтной выборки, так и от используемых методов составления и анализа карты вариативности этой выборки. В работе [12] предложено два метода анализа карты вариативности: *модифицированный метод информационного содержания* и *метод обобщенного информационного содержания*. Оценки ХП на основе этих методов в значительной степени зависят от константы Липшица исследуемой целевой функции $f(X)$. Высокая чувствительность методов анализа карты вариативности к константе Липшица может понизить точность оценки величин, характеризующих ключевые для алгоритма оптимизации особенности функции $f(X)$, например, степень ее мультимодальности. В данной работе предложен *метод секторизации карты вариативности*, позволяющий получить более устойчивые оценки значимых для алгоритма оптимизации ХП целевой функции.

В работе ключевым понятием является *характеризующая функция* карты вариативности. Характеризующей называем функцию, значения и аргументы которой используют в качестве компонент вектора ХП целевой функции. В данной работе предлагаем использовать только значения характеризующей функции при определенных значениях ее аргументов. Алгоритм оценки ХП целевой функции на основании значений характеризующей функции метода анализа карты вариативности называем алгоритмом *характеризации* целевой функции. В работе [12] рассмотрены одноименные характеризующие функции методов информационного и обобщенного информационного содержания. В данной работе для оценки ХП целевой функции методом секторизации предложена характеризующая *функция плотности сектора* карты вариативности. Целью работы является выбор и обоснование эффективности метода анализа карты вариативности для составления вектора ХП целевой функции. В связи с этим в работе также предложена методика оценки эффективности алгоритмов характеризации, которые являются фундаментом для синтеза интеллектуальных подсистем параметрической оптимизации путем сбора и обобщения опыта решения оптимизационных задач.

В п. 1 рассмотрены метод построения ПКВ ландшафтной выборки и общая схема методов анализа карты вариативности, кратко изложе-

ны модифицированный и обобщенный метод информационного содержания. В п. 2 представлен предлагаемый метод секторизации для анализа карты вариативности ландшафтной выборки. В п. 3 изложена методология проведения вычислительного эксперимента и сформулированы критерии эффективности алгоритма характеристики. В п. 4 на основе указанных методов анализа карты вариативности предложены векторы ХП целевой функции различной размерности. Выполнено сравнительное исследование эффективности классификации задач оптимизации по различным признакам на основе составленных векторов ХП.

1. Полная карта вариативности. Методы ее построения и анализа

Общая схема метода оценки ХП целевой функции на основе результатов анализа ПКВ ландшафтной выборки имеет следующий вид:

- 1) составляем ландшафтную выборку $X_i \in D_X$, $i \in [1:m]$, целевой функции $f(X)$;
- 2) строим ПКВ ландшафтной выборки;
- 3) в соответствии с выбранным методом анализа ПКВ рассчитываем значения характеризующей функции;
- 4) составляем искомый вектор ХП целевой функции $f(X)$ на основе этих значений.

Тип характеризующей функции и значения ее аргументов, используемые для расчета значений компонент вектора ХП целевой функции, определяются алгоритмом анализа карты вариативности. На основе значений характеризующей функции соответствующего метода можно предложить большое число алгоритмов оценки ХП целевой функции.

Ниже приведено краткое описание предложенного в работе [12] метода составления ПКВ целевой функции. Затем рассмотрен модифицированный метод информационного содержания *ICoFiS* [13], адаптированный для анализа карты вариативности [12]. Также представлен метод обобщенного информационного содержания [12], который позволяет более точно управлять разбиением карты вариативности на подобласти с учетом ее симметричности.

Полная карта вариативности [12]. Картой вариативности называем сформированный по некоторым правилам набор пар значений приращений целевой функции между соседними точками ландшафтной выборки.

Строим полную карту вариативности следующим образом.

1. Составляем для каждой точки X_i , $i \in [1:m]$, ландшафтной выборки наиболее пригодные для рассмотрения блоки точек по следующей схеме:

а) обозначим $d_{a,b}$ расстояние между двумя точками X_a и X_b . Находим ближайшие к X_i точки X_{p_k} , $k \in [1:K]$, где K — число точек, для которых выполнено неравенство

$$d_{i,p_k} < \max_{i_1} \min_{i_2} d_{i_1,i_2}, \quad i_1, i_2 \in [1:m], \quad i_1 \neq i_2; \quad (2)$$

б) если $K > 1$, то составляем блоки t_k , $k \in [1:K - 1]$, из точек $X_{p_k}, X_i, X_{p_{k+1}}$ и точек $X_{p_{k+1}}, X_i, X_{p_k}$. Включаем в рассмотрение блок t_k в случае, если прямые $X_{p_k}X_i$ и $X_iX_{p_{k+1}}$ образуют угол $\alpha_k > \pi/2$. Если $K \leq 1$, либо если угол $\alpha_k > \pi/2$ для всех найденных точек, то отсутствуют подходящие точки для составления блока.

2. Для всех составленных блоков t_j , $j = 1, 2, \dots$, вычисляем разности δ_1^j, δ_2^j соответствующих значений целевой функции $f(X)$ между точками X_1^j, X_2^j и точками X_2^j, X_3^j с учетом евклидова расстояния между ними:

$$\delta_1^j = \frac{f_2^j - f_1^j}{\|X_2^j - X_1^j\|}, \quad \delta_2^j = \frac{f_3^j - f_2^j}{\|X_3^j - X_2^j\|}. \quad (3)$$

Обозначим l число блоков t_j , составленных в результате описанных выше действий. Полученные значения δ_1^j, δ_2^j , $j \in [1:l]$, образуют ПКВ ландшафтной выборки.

ПКВ удобно представить в виде множества точек в двухмерной системе координат $0\delta_1\delta_2$. Пример графического представления ПКВ ландшафтной выборки приведен на рис. 1 для

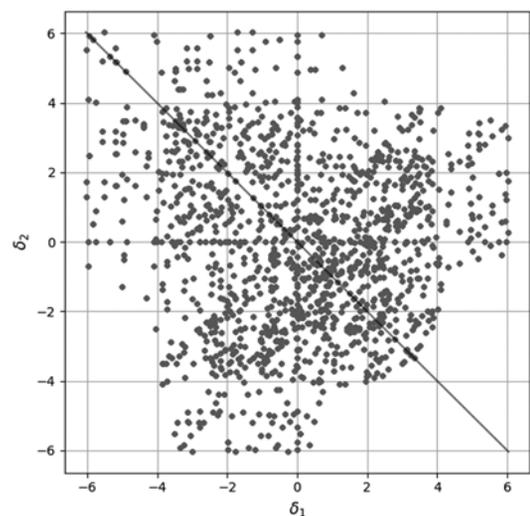


Рис. 1. Полная карта вариативности ландшафтной выборки, полученной методом полного факторного эксперимента для тестовой функции Экли

тестовой функции Экли [14]. Далее в работе, говоря о ПКВ, подразумеваем в том числе и ее графическое представление. Границы ПКВ определяются минимальными и максимальными значениями величин $\delta_1^j, \delta_2^j, j \in [1:L]$, и зависят от константы Липшица целевой функции $f(X)$.

По ПКВ ландшафтной выборки целевой функции $f(X)$ можно судить о степени ее мульти-модальности. Если точки $\delta_1^j, \delta_2^j, j \in [1:L]$, равномерно рассредоточены по ПКВ, то ландшафт функции $f(X)$ имеет большое число локальных экстремумов. Если большая часть этих точек сосредоточена в центральной области ПКВ, то, вероятнее всего, функция $f(X)$ является гладкой и имеет малое число локальных экстремумов [12].

Модифицированный метод информационного содержания [12]. Схема метода соответствует общей схеме методов расчета ХП, представленной выше. В данном случае преобразуем значения (3) $\delta_1^j, \delta_2^j, j \in [1:L]$, ПКВ в символьный набор $s_1^j, s_2^j, j \in [1:L]$, используя формулы

$$s_1^j(\varepsilon) = \begin{cases} \bar{1}, \delta_1^j < -\varepsilon; \\ 0, |\delta_1^j| \leq \varepsilon; \\ 1, \delta_1^j > \varepsilon; \end{cases} \quad s_2^j(\varepsilon) = \begin{cases} \bar{1}, \delta_2^j < -\varepsilon; \\ 0, |\delta_2^j| \leq \varepsilon; \\ 1, \delta_2^j > \varepsilon, \end{cases} \quad (4)$$

где $\varepsilon \in [0: \max(\delta_1^j, \delta_2^j, j \in [1:L])]$ — параметр, определяющий чувствительность метода и разбиение ПКВ на подобласти; символами $\{\bar{1}, 0, 1\}$ обозначаем отрицательные, нейтральные и положительные изменения значений функции $f(X)$ соответственно. Набор символов $s_1^j, s_2^j, j \in [1:L]$, используем для вычисления искомого ХП целевой функции $f(X)$ на основании значений функции информационного содержания ic (рис. 2), которая в данном случае является характеризующей

$$ic(\varepsilon) = - \sum_{a \neq b} p_{ab}(\varepsilon) \log_6 p_{ab}(\varepsilon); \quad (5)$$

$$p_{ab}(\varepsilon) = \frac{n_{ab}(\varepsilon)}{m-1}, \quad (6)$$

где $p_{ab}(\varepsilon)$ — оценка вероятности обнаружения блока типа ab в символьном наборе; $n_{ab}(\varepsilon)$ — число блоков t_j типа ab в этом наборе. Тип блока t_j определяют значения $a, b \in \{\bar{1}, 0, 1\}$ символов s_1^j, s_2^j , соответствующих значениям δ_1^j, δ_2^j этого блока [12].

Координаты наиболее информативных точек характеризующей функции $ic(\varepsilon)$ используем в качестве компонент вектора ХП целевой функции $f(X)$, например, точки перегиба,

точки, в которых достигаются максимальные и минимальные значения этой функции и т. д. Различные способы определения таких информативных точек и их интерпретация предложены в работе [13].

Метод обобщенного информационного содержания [12]. Схема метода также соответствует общей схеме методов расчета ХП, представленной выше. В данном случае разбиваем карту вариативности на подобласти, каждая из которых соответствует некоторому типу блоков t_j , определяемому символами

$$s_1^j(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \begin{cases} \bar{1}, \delta_1^j < -\varepsilon_2; \\ 0, -\varepsilon_2 \leq \delta_1^j \leq \varepsilon_1; \\ 1, \delta_1^j > \varepsilon_1; \end{cases} \quad (7)$$

$$s_2^j(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \begin{cases} \bar{1}, \delta_2^j < -\varepsilon_1; \\ 0, -\varepsilon_1 \leq \delta_2^j \leq \varepsilon_2; \\ 1, \delta_2^j > \varepsilon_2; \end{cases} \quad j \in [1:L].$$

Множество символов $s_1^j, s_2^j, j \in [1:L]$, используем для оценки искомого ХП целевой функции

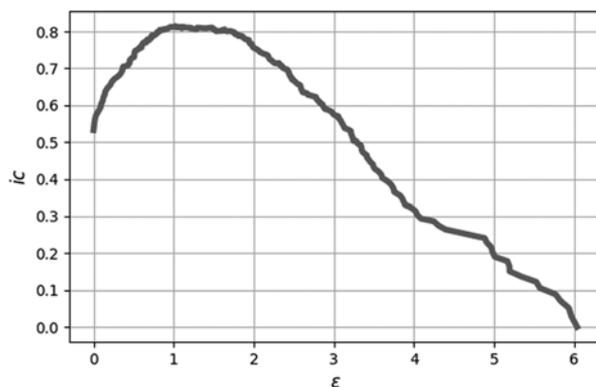


Рис. 2. Функция информационного содержания ландшафтной выборки тестовой функции Экли

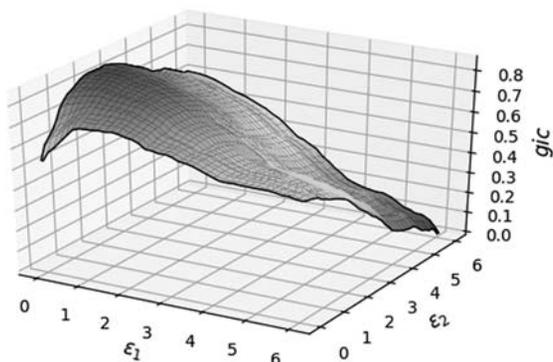


Рис. 3. Функция обобщенного информационного содержания ландшафтной выборки тестовой функции Экли

ции $f(X)$ на основании значений характеризующей функции обобщенного информационного содержания gic (рис. 3)

$$gic(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = - \sum_{a \neq b} p_{ab}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \log_6 p_{ab}(\varepsilon_1, \varepsilon_2),$$

$$a, b \in \{\bar{1}, 0, 1\}. \quad (8)$$

Здесь $p_{ab}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ — оценка вероятности обнаружения блока типа ab , которую рассчитываем по модифицированной формуле (6):

$$p_{ab}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \frac{\sum_{k \in N_{ab}} \alpha_k}{\sum_{j=1}^l \alpha_j}, \quad a, b \in \{\bar{1}, 0, 1\}, \quad (9)$$

где N_{ab} — множество индексов блоков t_j типа ab ; α_j — угол, образуемый прямыми X_1^j, X_2^j и X_2^j, X_3^j , проходящими через точки блока t_j . Если $\alpha_j = \pi$ для всех рассматриваемых блоков $t_j, j \in [1:l]$, то получаем исходную формулу (6) оценки величины p_{ab} .

По аналогии с модифицированным методом информационного содержания используем координаты наиболее информативных точек характеризующей функции $gic(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ в качестве компонент вектора ХП целевой функции $f(X)$. Примеры таких точек приведены в п. 4.

2. Метод секторизации полной карты вариативности

Введем понятие *сектора* карты вариативности. Сектором называем область карты вариативности, ограниченную двумя полупрямыми, расположенными под углами $-\pi/4 - \gamma$ и $-\pi/4 + \gamma$ относительно положительной полуоси δ_1 . Параметр $\gamma \in [0; \pi]$ определяет площадь рассма-

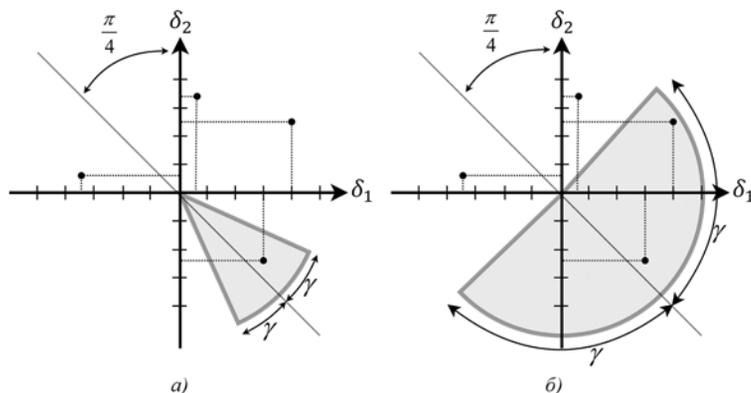


Рис. 4. Секторы карты вариативности ландшафтной выборки целевой функции, соответствующие значениям $\gamma = \pi/6$ (а) и $\gamma = \pi/2$ (б)

триваемой области, ограниченной величиной, равной расстоянию $\max_{j \in [1:l]} \sqrt{(\delta_1^j)^2 + (\delta_2^j)^2}$ до наиболее отдаленной от центра карты вариативности точки. На рис. 4 изображены примеры секторов карты вариативности, соответствующих различным значениям угла γ .

Определим характеризующую функцию *плотности сектора* карты вариативности

$$p(\gamma) = \frac{\sum_{k \in N_\gamma} \alpha_k}{\sum_{j=1}^l \alpha_j}. \quad (10)$$

Здесь N_γ — множество индексов блоков t_j , расположенных в секторе карты вариативности, определяемом углом γ . Функция $p(\gamma)$ является монотонно возрастающей в пределах $\gamma \in [0; \pi]$ и позволяет оценить вероятность обнаружения какого-либо блока t_j в указанном секторе. Значения этой функции пропорциональны числу точек, обнаруженных в секторе, и лежат в диапазоне $[0; 1]$.

Схема метода секторизации ПКВ ландшафтной выборки также соответствует общей схеме методов расчета ХП целевой функции (см. п. 1):

- 1) составляем ландшафтную выборку $X_i \in D_X, i \in [1:m]$, целевой функции $f(X)$;
- 2) строим ПКВ ландшафтной выборки;
- 3) рассчитываем соответствующие значения характеризующей функции $p(\gamma)$;
- 4) составляем искомый вектор ХП целевой функции $f(X)$ на основе этих значений.

Примеры значений параметра γ , используемых для расчета компонент вектора ХП на основе значений функции $p(\gamma)$, рассмотрены в п. 4.

На рис. 5 (см. вторую сторону обложки) приведены примеры графиков функций $p(\gamma)$ и $\Delta p(\gamma) = p(\gamma) - p(\gamma - \Delta\gamma)$, где $\Delta\gamma$ — шаг дискретизации. Эти графики позволяют визуально оценить отличия в распределении точек по секторам ПКВ ландшафтной выборки мультимодальной функции Экли и унимодальной функции Розенброка. Наибольший прирост значений функции $p(\gamma)$, соответствующих ландшафтной выборке мультимодальной функции Экли, наблюдается в окрестностях значений $\pi/4$ и $3\pi/4$ параметра γ . Повышенная концентрация точек в данных областях ПКВ свидетельствует о наличии большого числа блоков типа $\bar{1}\bar{1}$ или $\bar{1}1$ (в терминах метода *ICoFiS*), типичных

для областей целевой функции $f(X)$ с большим числом локальных экстремумов. Аналогичные графики для унимодальной функции Розенброка показывают, что максимальный прирост значений величины $p(\gamma)$ приходится на окрестность значения параметра $\gamma = \pi/2$. Это обусловлено тем, что в ландшафтной выборке целевой функции, имеющей малое число локальных экстремумов, превалируют "гладкие" блоки, соответствующие типам I и II [12].

Таким образом, распределение точек по секторам ПКВ в значительной степени зависит от существенных для метода оптимизации особенностей ландшафта целевой функции $f(X)$, например, от степени ее мультимодальности. Напротив, расстояния от этих точек до центральной области ПКВ очевидным образом не влияют на значения функции $p(\gamma)$ и в меньшей степени отражают ключевые признаки ландшафта целевой функции $f(X)$. Эти расстояния зависят, главным образом, от приращений целевой функции в соответствующей области пространства поиска D_X . Инвариантность оценок ХП целевой функции, полученных на основе значений функции $p(\gamma)$, к масштабу значений $\delta_1^j, \delta_2^j, j \in [1:J]$, потенциально улучшает обобщающую способность метода классификации задач оптимизации.

3. Методика оценки эффективности методов анализа ПКВ

Вектор ХП $C = (c_1, \dots, c_{|C|}) \in D_C$ может иметь различную длину в зависимости от числа рассматриваемых значений характеризующей функции и принадлежит области допустимых значений D_C этой функции. Тип характеризующей функции определяется методом анализа карты вариативности, тогда как состав и размерность вектора ХП зависят от способа реализации этого метода в алгоритме характеристики целевой функции. Таким образом, метод анализа карты вариативности порождает

класс алгоритмов характеристики, каждый из которых определяет свое пространство ХП.

Об эффективности метода анализа карты вариативности судим по эффективности соответствующих алгоритмов характеристики. Эффективность алгоритма характеристики определяем эффективностью классификации оптимизационных задач на основе тех векторов ХП, состав и размерность которых установлены этим алгоритмом. Заметим, что эффективность классификации во многом зависит от устойчивости выбранных значений характеризующей функции как к изменению ландшафтной выборки, так и к незначительным изменениям ландшафта целевой функции.

Для исследования эффективности представленных методов анализа карты вариативности предлагаем алгоритмы характеристики, построенные по следующим правилам.

- Вектор ХП в случае использования одномерной характеризующей функции представляет собой набор ее значений в точках, равномерно распределенных в диапазоне варьирования аргумента этой функции.
- В случае если характеризующая функция имеет несколько аргументов, в качестве компонент вектора ХП выбираем максимальные значения этой функции по одному из аргументов при фиксированных значениях остальных.

Величина $|C|$ определяет размерность множества D_C допустимых векторов ХП. Алгоритмы характеристики целевой функции для методов информационного содержания, обобщенного информационного содержания и секторизации карты вариативности представлены в табл. 1. Обозначим $D_C^{ic}, D_C^{gic}, D_C^p$ множества допустимых векторов, определяемые соответствующими алгоритмами.

На рис. 6 (см. вторую сторону обложки) в качестве примера для тестовой функции Экли представлены графики характеризующих функций, точками на которых обозначены значения, используемые в качестве элементов вектора $C = (c_1, \dots, c_{|C|})$.

Таблица 1

Алгоритмы характеристики целевой функции

Алгоритм оценки ХП	Элементы вектора ХП $C = (c_1, \dots, c_{ C })$
Алгоритм информационного содержания	$ic \left(\varepsilon_i = \varepsilon_{\min} + \frac{i}{ C -1} (\varepsilon_{\max} - \varepsilon_{\min}) \right), i \in [0: C -1]$
Алгоритм обобщенного информационного содержания	$\max_{\varepsilon_1} gic(\varepsilon_1, \varepsilon_2 = \varepsilon_i), \max_{\varepsilon_2} gic(\varepsilon_1 = \varepsilon_i, \varepsilon_2), i \in \left[0: \frac{ C }{2} - 1 \right]$
Алгоритм секторизации карты вариативности	$p \left(\gamma_i = \frac{i}{ C +1} \pi \right), i \in [1: C]$

Общая схема исследования эффективности алгоритма характеристики целевой функции с использованием тестовых задач оптимизации имеет следующий вид.

1. Для каждой из тестовых задач генерируем некоторое число ландшафтных выборок $\mathbb{X}_j, j \in [1:M]$, где $\mathbb{X}_j = \{X_{i,j}, i \in [1:m]\}$ — ландшафтная выборка из m точек, случайным образом расположенных в области поиска D_X .

2. Для каждой из указанных ландшафтных выборок составляем ПКВ и рассчитываем значения компонент вектора ХП $C = (c_1, \dots, c_{|C|})$ на основе выбранных исследуемым алгоритмом значений характеризующей функции. В результате получаем множество $C_r, r \in [1:R]$, точек в пространстве ХП.

3. Назначаем метки h_r векторам C_r и тем самым получаем размеченную выборку $\{(C_1, h_1), \dots, (C_R, h_R)\}$.

4. Некоторым образом оцениваем качество кластерной структуры $(C_r, h_r)_{r=1}^R$ (см. п. 4).

Размеченная выборка $(C_r, h_r)_{r=1}^R$ затем может быть использована для построения приближенного отображения $C \mapsto \hat{h}$, где \hat{h} — метка класса задачи оптимизации, спрогнозированная на основе ХП ландшафтной выборки целевой функции. Качество кластерной структуры выборки $(C_r, h_r)_{r=1}^R$ позволяет судить об эффективности метода характеристики без построения модели классификации и использования спрогнозированных меток $\hat{h}_r, r \in [1:R]$. В качестве метки h_r вектора C_r можно использовать, например, номер тестовой задачи оптимизации, для ландшафтной выборки которой этот вектор вычислен. Набор H используемых меток зависит от выбранного критерия эффективности алгоритма характеристики (см. п. 4).

4. Критерии эффективности алгоритма характеристики

Обозначим T тип векторов ХП:

$$T = \langle n, g(Y), \{Y_1, \dots, Y_n\} \rangle. \quad (11)$$

Здесь n — размерность векторов ХП этого типа; $g(Y)$ — используемая характеризующая функция, где Y — вектор ее аргументов; $\{Y_1, \dots, Y_n\} \subset R^n$ — множество значений аргументов, для которых вычисляем значения функции $g(Y)$, используемые в качестве компонент векторов ХП данного типа.

Например, в качестве компонент вектора ХП можно использовать значения функции $ic(\varepsilon)$

в точках $\varepsilon_1 = 0$ и $\varepsilon_2 = \arg \max ic(\varepsilon)$. Тогда вектор $C = (ic(\varepsilon_1), ic(\varepsilon_2))$ имеет тип $T = \langle 2, ic(\varepsilon), \{\varepsilon_1, \varepsilon_2\} \rangle$.

Пусть указанным образом определен тип T вектора ХП. Тогда запись вида $C \in T$, где C — вектор ХП, означает, что этот вектор имеет тип T . Запись вида $C \in D_C$ значит, что значения компонент этого вектора принадлежат допустимому множеству D_C .

Предлагаем для численной оценки эффективности алгоритма характеристики использовать индекс силуэта [15] качества кластерной структуры выборки $(C_r, h_r)_{r=1}^R$, вычисляемый по формуле

$$S(T) = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \frac{d_r^{out}(T) - d_r^{in}(T)}{\max(d_r^{out}(T), d_r^{in}(T))} \in [-1; 1], \quad (12)$$

где d_r^{in} — среднее расстояние от вектора C_r принадлежащего рассматриваемому кластеру, до других векторов этого же кластера; d_r^{out} — среднее расстояние от вектора C_r до векторов ближайшего кластера. Максимальное значение величины $S(T)$, равное 1, соответствует кластерной структуре с четко выделенными непересекающимися кластерами.

Индекс силуэта $S(T)$ оценивает как "компактность" кластеров — среднее расстояние между точками C_r одного кластера, так и отдаленность центров этих кластеров друг от друга — среднее расстояние между точками C_r соседних кластеров.

Обозначим D_T некоторое множество типов векторов $C \in D_C$, составленных на основе значений характеризующей функции $ic(\varepsilon)$, $gic(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ или $p(\gamma)$. Наилучшим является алгоритм характеристики, устанавливающий такой тип $T^* \in D_T$ векторов ХП, который обеспечивает максимальное значение индекса силуэта $S(T)$ выборки $(C_r, h_r)_{r=1}^R$:

$$\max_{T \in D_T} S(T) = S(T^*). \quad (13)$$

Набор H используемых меток h_r зависит от выбранного критерия эффективности алгоритма характеристики, устанавливающего тип вектора $C \in D_C$. Определим следующие критерии эффективности алгоритма характеристики.

Критерий 1. Точки, соответствующие векторам C_r , полученным на основе различных ландшафтных выборок данной целевой функции, находятся "близко" друг к другу в пространстве ХП. Здесь метки $h_r \in H^1 = \{h^{1,1}, h^{1,2}, \dots\}$ соответствуют номеру тестовой задачи оптимизации, для ландшафтной выборки которой

вычислен вектор C_r . В этом случае число кластеров соответствует числу тестовых задач оптимизации.

Критерий 2. Точки, соответствующие векторам C_r , полученным на основе различных ландшафтных выборок "похожих" целевых функций, находятся "близко" друг к другу в пространстве ХП. Здесь метки $h_r \in H^2 = \{h^{2,1}, h^{2,2}\}$ обозначают степень мультимодальности целевой функции тестовой задачи оптимизации, для ландшафтной выборки которой вычислен вектор C_r . Метку $h^{2,1}$ ставим в соответствие вектору C_r в случае, если он характеризует ландшафтную выборку целевой функции с малым числом локальных минимумов. Метку $h^{2,2}$ используем в случае, если вектор C_r характеризует ландшафтную выборку с большим числом локальных минимумов. Таким образом, в данном случае выборка $(C_r, h_r)_{r=1}^R$ содержит два кластера.

5. Вычислительный эксперимент

В данном пункте представлены тестовые задачи, использованные для проведения вычислительного эксперимента. Выполнено сравнительное исследование эффективности предложенных алгоритмов характеристики по схеме, описанной в п. 3. Для визуализации результатов оценки эффективности выполнено исследование алгоритмов, устанавливающих тип двумерных векторов ХП.

Для проведения вычислительного эксперимента используем тестовые задачи оптимизации [14]:

- задачи q_1, q_2 с малым числом локальных минимумов в области поиска D_X , составленные на основе тестовых функций Розенброка и Химмельблау соответственно;
- задачи q_3, q_4 с большим числом локальных минимумов в области поиска D_X , составленные на основе тестовых функций Экли и Растригина соответственно.

Ландшафты целевых функций тестовых задач оптимизации q_1-q_4 в области поиска D_X изображены на рис. 7 (см. вторую сторону обложки).

Вычисляем значения критериев эффективности алгоритма характеристики, который устанавливает тип T векторов ХП, по следующей схеме.

1. Для каждой из тестовых задач q_1-q_4 генерируем $M = 100$ различных ландшафтных выборок, каждая из которых состоит из $m = 100$ точек, случайным образом расположенных в области D_X .

2. Для каждой ландшафтной выборки составляем ПКВ и рассчитываем координаты векторов ХП на основе значений характеризующих функций из табл. 1. Получаем множество $\{C_r, r \in [1:400]\}$ точек в пространстве ХП: по 100 точек для каждой из тестовых задач q_1-q_4 .

3. Ставим метки из наборов H^1 и H^2 в соответствие векторам C_r , получаем две размеченные выборки: $(C_r, h_r^1)_{r=1}^{400}$ и $(C_r, h_r^2)_{r=1}^{400}$.

4. Рассчитываем значения S_1 и S_2 индекса $S(T)$ для выборок $(C_r, h_r^1)_{r=1}^{400}$ и $(C_r, h_r^2)_{r=1}^{400}$ соответственно. Оцениваем эффективность алгоритма, устанавливающего тип вектора $C = (c_1, \dots, c_{|C|})$, по критерию 1 с использованием величины S_1 , по критерию 2 — с использованием величины S_2 .

Для корректного сравнения эффективности методов анализа карты вариативности на основе эффективности порожденных ими алгоритмов характеристики необходимо оценивать качество классификации задач оптимизации в пространствах ХП высокой размерности. На рис. 8 представлены результаты оценки качества кластерных структур $(C_r, h_r^1)_{r=1}^{400}$ и $(C_r, h_r^2)_{r=1}^{400}$ в 64-мерных пространствах ХП для ландшафтных выборок различного размера.

На рис. 8 видно, что индекс силуэта кластерной структуры, а значит, и эффективность алгоритма характеристики ожидаемо растут вместе с ростом числа точек ландшафтной выборки. Из рис. 8, а видно, что наиболее эффективными по критерию 1 являются алгоритмы характеристики на основе методов обобщенного информационного содержания и секторизации карты вариативности. По критерию 2 эффективность алгоритма на основе метода секторизации карты вариативности значительно превосходит эффективность других сравниваемых алгоритмов (рис. 8, б). Это может свидетельствовать о потенциально большей обобщающей способности алгоритма классификации задач оптимизации в случае использования алгоритмов характеристики на основе метода секторизации карты вариативности.

Двумерный вектор ХП. Для визуальной оценки эффективности классификации задач оптимизации составим двумерные векторы $C = (c_1, c_2)$ на основе значений характеризующих функций $ic(\epsilon)$, $gic(\epsilon_1, \epsilon_2)$ и $p(\gamma)$ (табл. 2)

На рис. 9 (см. третью сторону обложки) в качестве примера для ландшафтной выборки тестовой функции Экли представлены графики соответствующих характеризующих функций. Точками обозначены значения, которые используем в качестве элементов c_1, c_2 вектора ХП.

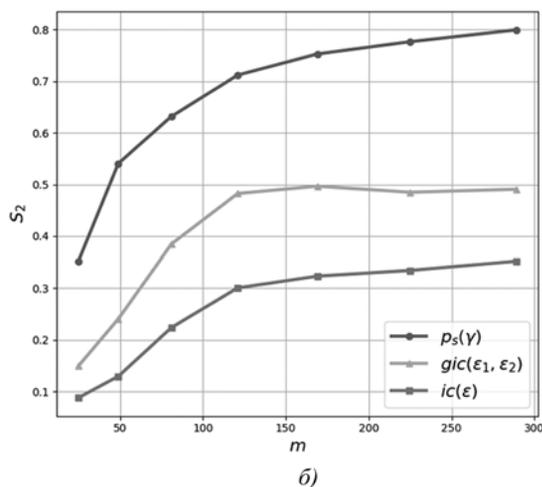
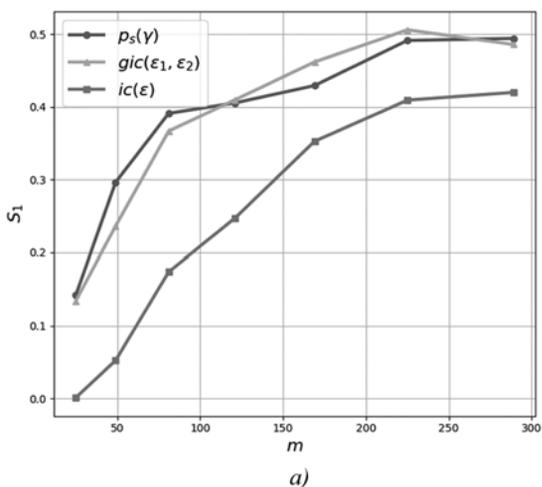


Рис. 8. Зависимости индекса силуэта $S(T)$ кластерных структур $(C_r, h_r^1)_{r=1}^{400}$ (а) и $(C_r, h_r^2)_{r=1}^{400}$ (б) от размера ландшафтной выборки в 64-мерных пространствах ХП

Для каждой сгенерированной ландшафтной выборки рассчитываем значения компонентов c_1, c_2 из табл. 1. Получаем три множества векторов $C_r^{ic}, C_r^{gic}, C_r^p, r \in [1:R]$, соответствующих различным методам анализа карты вариативности. На рис. 10 изображены эти множества вместе с метками $h_r \in H^1$, обозначенными различными цветами.

Из рис. 10, а и б (см. третью сторону обложки) видно, что при использовании векторов C_r^{ic}, C_r^{gic} группы точек, соответствующих ландшафтными выборкам тестовых задач оптимизации q_1-q_4 , расположены в пространстве ХП в порядке роста степени мультимодальности целевых функций этих задач. При использовании вектора C_r^p (рис. 10, в, см. третью сторону обложки) наблюдаем явное разделение вдоль оси c_1 получившихся кластеров точек по степени мультимодальности целевых функций соответствующих им задач q_1-q_4 : слева расположены кластеры, соответствующие задачам q_1, q_2 с малым числом локальных экстремумов; справа — кластеры, соответствующие задачам q_3, q_4 с большим числом локальных экстремумов.

Из табл. 2 следует, что наибольшая эффективность классификации оптимизационных задач по типу их целевой функции (критерий 1) достигается при использовании вектора ХП, составленного на основе значений функции $gic(\epsilon_1, \epsilon_2)$. В случае, если необходимо классифицировать задачи оптимизации по степени мультимодальности их целевой функции, то наиболее эффективным по критерию 2 является вектор ХП, составленный на основе значений функции $p(\gamma)$. Эффективность метода ландшафтного анализа можно значительно по-

высить, используя большее число точек характеризующих функций и большее число точек ландшафтной выборки.

В табл. 3 представлены значения индекса силуэта $S(T)$ качества кластерных структур, полученных в результате применения меток из наборов H^1 и H^2 к множествам векторов $C_r^{ic}, C_r^{gic}, C_r^p, r \in [1:R]$.

Таблица 2

Формулы оценки значений компонентов вектора ХП

Алгоритм оценки ХП	Элементы вектора ХП	
	c_1	c_2
Алгоритм информационного содержания	$ic(\epsilon = 0)$	$\max_{\epsilon} ic(\epsilon)$
Алгоритм обобщенного информационного содержания	$\max_{\epsilon_1} gic(\epsilon_1, \epsilon_2 = 0)$	$\max_{\epsilon_2} gic(\epsilon_1 = 0, \epsilon_2)$
Алгоритм секторизации карты вариативности	$p(\gamma = \pi/6)$	$p(\gamma = \pi/3)$

Таблица 3

Результаты оценки величины $S(T)$

Алгоритм	Индекс силуэта S	
	метки H_r^1	метки H_r^2
Алгоритм информационного содержания	0,53	0,57
Алгоритм обобщенного информационного содержания	0,55	0,60
Алгоритм секторизации карты вариативности	0,34	0,67

Заключение

Методы ландшафтного анализа используют для оценки ХП целевой функции задачи оптимизации. В работе рассмотрены методы ландшафтного анализа целевой функции на основе карты вариативности ландшафтной выборки. Для анализа карты вариативности предложен метод ее секторизации, позволяющий по сравнению с методами информационного и обобщенного информационного содержания получить оценки более значимых для алгоритма оптимизации особенностей целевой функции. Высокая обобщающая способность алгоритмов классификации оптимизационных задач по наиболее значимым признакам является необходимой основой для интеллектуализации подсистем САПР параметрической оптимизации.

Искомые оценки ХП зависят от расположения точек ландшафтной выборки, используемого метода анализа карты вариативности и алгоритма характеристики, определяющего состав и размерность результирующего вектора ХП. Предложена методика сравнительного исследования эффективности указанных методов анализа карты вариативности на основе оценок эффективности порожденных ими алгоритмов характеристики. Результаты проведенного по данной методике вычислительного эксперимента свидетельствуют об универсальности и высокой эффективности метода секторизации карты вариативности по сравнению с другими методами ее анализа.

В целях дополнительного обоснования сделанных выводов составлены двухмерные векторы ХП на основе значений характеризующих функций рассмотренных методов, что позволило визуализировать полученные результаты в пространстве ХП целевой функции.

Исследование показало, что алгоритмы характеристики целевой функции на основе метода секторизации карты вариативности являются наиболее пригодными для классификации задач оптимизации по различным признакам.

Список литературы

1. **Shan S., Wang G. G.** Survey of modeling and optimization strategies to solve high-dimensional design problems with computationally-expensive black-box functions // *Structural and Multidisciplinary Optimization*. 2010. Vol. 41, N. 2. P. 219–241. DOI: 10.1007/s00158-009-0420-2.
2. **Kerschke P.** Comprehensive Feature-Based Landscape Analysis of Continuous and Constrained Optimization Problems Using the R-Package flacco // *arXiv preprint arXiv:1708.05258*. 2017.
3. **Агасиев Т. А., Карпенко А. П.** Современные техники глобальной оптимизации: Обзор // *Информационные технологии*. 2018. Т. 6, № 24. С. 363–370. DOI: 10.17587/it.24.370-386.
4. **Cavazzuti M.** Design of experiments // *Optimization Methods*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2013. P. 13–42.
5. **Li G., Aute V., Azarm S.** An accumulative error based adaptive design of experiments for offline metamodeling // *Structural and Multidisciplinary Optimization*. 2010. Vol. 40, N. 1. pp. 137–155. DOI: 10.1007/s00158-009-0395-z.
6. **Forrester A. I. J., Keane A. J.** Recent advances in surrogate-based optimization // *Progress in Aerospace Sciences*. 2009. Vol. 45, N. 1–3. P. 50–79. DOI: 10.1016/j.paerosci.2008.11.001.
7. **Mersmann O., Bischl B., Trautmann H., Preuss M., Weihs C., Rudolph G.** Exploratory landscape analysis // *Proceedings of the 13th annual conference on Genetic and evolutionary computation*. ACM, 2011. P. 829–836. DOI: 10.1145/2001576.2001690.
8. **Hoos H. H., Neumann F., Trautmann H.** Automated Algorithm Selection and Configuration (Dagstuhl Seminar 16412) // *Dagstuhl Reports*. 2017. Vol. 6. P. 34–74.
9. **Kerschke P., Preuss M., Hernández C., Schütze O., Sun J. Q., Grimme C., Rudolph G., Bischl B., Trautmann H.** Cell mapping techniques for exploratory landscape analysis // *EVOLVE-A Bridge between Probability, Set Oriented Numerics, and Evolutionary Computation V*. Springer, Cham. 2014. P. 115–131. DOI: 10.1007/978-3-319-07494-8_9.
10. **Flamm C., Hofacker I. L., Stadler P. F., Wolfinger M. T.** Barrier trees of degenerate landscapes // *Zeitschrift für physikalische Chemie*. 2002. Vol. 216, N. 2. P. 155. DOI: 10.1524/zpch.2002.216.2.155.
11. **Kerschke P., Preuss M., Wessing S., Trautmann H.** Detecting funnel structures by means of exploratory landscape analysis // *Proceedings of the 2015 Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation*. ACM. 2015. P. 265–272. DOI: 10.1145/2739480.2754642.
12. **Агасиев Т. А.** Карта Вариативности Целевой Функции Для Анализа Характерных Признаков Задачи Глобальной Оптимизации // *Приборостроение*. 2019 (в печати).
13. **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, N. 1. P. 74–87. DOI: 10.1109/TEVC.2014.2302006.
14. **Momin J., Yang X. S.** A literature survey of benchmark functions for global optimization problems // *Journal of Mathematical Modelling and Numerical Optimisation*. 2013. Vol. 4, N. 2. P. 150–194. DOI: 10.1504/IJMMNO.2013.055204.
15. **Guerra L., Robles V., Bielza C., Larrañaga P.** A comparison of clustering quality indices using outliers and noise // *Intelligent Data Analysis*. 2012. Vol. 16, N. 4. P. 703–715. DOI: 10.3233/IDA-2012-0545.

Sectorization Method of Full Variability Map Analysis for Characteristic Features Assessment of Global Optimization Problems

Landscape analysis methods are designed to assess various characteristic features of objective function of optimization problem. The accuracy of estimations mostly depends on the chosen design of experiment, i.e. on the number and location of points in the search space. The paper considers methods of variability map analysis that allow to obtain estimations that are more stable to variations of the experimental design. The drawback of these methods is the high sensitivity of resulting values of characteristic features to the scale of objective function values variations. This may adversely affect the generalizing ability of the algorithm of problems classification by the most significant objective function features. In relation to this, the paper presents sectorization method of variability map analysis which allows to obtain estimations stable to the scale of objective function changes. A technique of conducting the computational experiment is proposed for comparative research of the efficiency of different methods of variability map analysis. Efficiency criteria for algorithms of characteristic features assessment are formulated. The results of experiment demonstrate relevance of using the proposed methods of landscape analysis for classifying optimization problems by different features. The quality of optimization problems classification largely defines the efficiency of intellectualization of the parametric optimization subsystems in CAD.

Keywords: global optimization, characteristic features of problem, exploratory landscape analysis, landscape sample, information content method, sectorization method, variability map

DOI: 10.17587/it.25.707-717

References

1. Shan S., Wang G. G. Survey of modeling and optimization strategies to solve high-dimensional design problems with computationally-expensive black-box functions, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2010, vol. 41, no. 2, pp. 219–241. DOI: 10.1007/s00158-009-0420-2.
2. Kerschke P. Comprehensive Feature-Based Landscape Analysis of Continuous and Constrained Optimization Problems Using the R-Package flacco, *arXiv preprint arXiv:1708.05258*, 2017.
3. Agsiev T. A., Karpenko A. P. Modern Technologies of Global Optimization. Review, *Information Technologies*, 2018, vol. 6, no 24, pp. 363–370 (in Russian). DOI: 10.17587/it.24.370-386.
4. Cavazzuti M. Design of experiments, *Optimization Methods*, Springer, Berlin, Heidelberg, 2013, pp. 13–42.
5. 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, pp. 137–155. DOI: 10.1007/s00158-009-0395-z.
6. Forrester A. I. J., Keane A. J. Recent advances in surrogate-based optimization, *Progress in Aerospace Sciences*, 2009, vol. 45, no. 1–3, pp. 50–79. DOI: 10.1016/j.paerosci.2008.11.001.
7. Mersmann O., Bischl B., Trautmann H., Preuss M., Weihs C., Rudolph G. Exploratory landscape analysis, *Proceedings of the 13th annual conference on Genetic and evolutionary computation*, ACM, 2011, pp. 829–836. DOI: 10.1145/2001576.2001690.
8. Hoos H. H., Neumann F., Trautmann H. Automated Algorithm Selection and Configuration (Dagstuhl Seminar 16412), *Dagstuhl Reports*, 2017, vol. 6, pp. 34–74.
9. Kerschke P., Preuss M., Hernández C., Schütze O., Sun J. Q., Grimme C., Rudolph G., Bischl B., Trautmann H. Cell mapping techniques for exploratory landscape analysis, *EVOLVE-A Bridge between Probability, Set Oriented Numerics, and Evolutionary Computation V*, Springer, Cham, 2014, pp. 115–131. DOI: 10.1007/978-3-319-07494-8_9.
10. Flamm C., Hofacker I. L., Stadler P. F., Wolfinger M. T. Barrier trees of degenerate landscapes, *Zeitschrift für physikalische chemie*. 2002, vol. 216, no. 2, pp. 155. DOI: 10.1524/zpch.2002.216.2.155.
11. Kerschke P., Preuss M., Wessing S., Trautmann H. Detecting funnel structures by means of exploratory landscape analysis, *Proceedings of the 2015 Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation*, ACM, 2015, pp. 265–272. DOI: 10.1145/2739480.2754642.
12. Agasiev T. A. Variability map of objective function for analysis of global optimization problem characteristic features. Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Instrument Engineering, 2019, no. 2, pp. 4–21 (in Russian). DOI: 10.18698/0236-3933-2019-2-4-21.
13. 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, pp. 74–87. DOI: 10.1109/TEVC.2014.2302006.
14. Momin J., Yang X. S. A literature survey of benchmark functions for global optimization problems, *Journal of Mathematical Modelling and Numerical Optimisation*, 2013, vol. 4, no. 2, pp. 150–194. DOI: 10.1504/IJMMNO.2013.055204.
15. Guerra L., Robles V., Bielza C., Larrañaga P. A comparison of clustering quality indices using outliers and noise, *Intelligent Data Analysis*, 2012, vol. 16, no. 4, pp. 703–715. DOI: 10.3233/IDA-2012-0545.