

Оптимизация моделей сложных систем на основе метаэвристических алгоритмов и нейронных сетей

11, ноябрь 2016

Афонин П. В.^{1,*}

УДК 519.711.2

¹Россия, МГТУ им. Н.Э. Баумана

^{*}pavlafon@yandex.ru

Введение

В различных областях науки и техники построение моделей сложных систем во многих случаях не может быть осуществлено с помощью аналитического моделирования. Для таких систем метод имитационного моделирования является единственным подходом к построению моделей необходимого уровня детализации и адекватности [1]. Как правило, конечной целью разработки имитационной модели (ИМ) сложной системы является решение задачи оптимизации параметров ИМ. Для таких задач метаэвристические алгоритмы находят широкое применение, поскольку обеспечивают глобальную оптимизацию и работают для целевых функций, заданных не только в аналитическом виде, но и на основе концепции «черный ящик». В ряде случаев для сходимости эволюционного алгоритма требуется большое число расчетов целевой функции (ЦФ), которые невозможно выполнить за время, отведенное на решение задачи. Основным подходом к решению данной проблемы является использование метамоделей. Метамодель – это приближенная математическая модель, полученная в результате экспериментов с моделью системы. Для расчета значений ЦФ в процессе оптимизации можно использовать метамодель вместо имитационной модели, значительно сокращая время работы оптимизационного алгоритма.

В статье дана постановка задачи оптимизации имитационной модели сложной системы и представлен краткий обзор методов решения. Рассмотрены метаэвристики, способы построения метамоделей и подходы к интеграции метамоделей с эволюционными метаэвристикami. Представлена система для решения задач оптимизации на основе имитационных моделей и эволюционная стратегия на основе метамоделей.

1. Задача оптимизации имитационной модели сложной системы

Для моделируемой системы S необходимо определить комбинацию значений входных параметров (факторов) $x_1, x_2, \dots, x_k$ имитационной модели, при которых достигается мак-

симум (минимум) заданного критерия (отклика) Y (случайной величины), рассчитываемого на всем временном интервале моделирования:

$$E[Y(x_1, x_2, \dots, x_k)] \rightarrow opt,$$

где $E(Y)$ – функция случайной величины отклика.

Функция отклика не может быть вычислена аналитически, но может быть рассчитана с помощью проведения имитационного эксперимента (прогона) с моделью системы.

Основные сложности, возникающие при решении задачи:

- многомерное пространство поиска;
- многоэкстремальность функций отклика;
- проблема длительности прогонов модели;
- необходимость реализации серии прогонов в одной точке k -мерного пространства, т.к. Y – случайная величина.

2. Метаэвристические оптимизационные алгоритмы

Оптимизация на основе имитационного моделирования заключается в совместном использовании ИМ сложной системы и алгоритма оптимизации. Для алгоритма оптимизации модель служит лишь механизмом преобразования входа в выход – концепция «черный ящик». С помощью ИМ рассчитываются значения отклика для различных комбинаций значений факторов, которые предлагает алгоритм оптимизации. Поисковый алгоритм оптимизации, в свою очередь, используя значения отклика, пытается улучшить решение.

Многоэкстремальность функций отклика моделей и многомерность пространства поиска многих систем, наряду с невозможностью применения многих классических математических методов оптимизации (основанных на необходимости представления целевой функции (ЦФ) в аналитическом виде) обусловили активное и эффективное применение метаэвристических методов [2] в качестве оптимизаторов для задач данного типа. Здесь наиболее часто используются эволюционные метаэвристики (ЭМ), а именно: генетические алгоритмы и эволюционные стратегии.

Генетический алгоритм – это эвристический алгоритм поиска, используемый для решения задач оптимизации и моделирования путем последовательного подбора, комбинирования и вариации искомых параметров с использованием механизмов, напоминающих биологическую эволюцию.

В отличие от генетических алгоритмов эволюционные стратегии (ЭС) [3] рассматривают ход эволюции на уровне фенотипа. В ЭС каждая особь характеризуется:

- функцией пригодности (ФП), которая зависит от целевой функции (ЦФ) оптимизационной задачи;
- строкой-хромосомой, включающей:
 - вектор $x(x_1, x_2, \dots, x_n)$, который представляет собой некоторое решение оптимизационной задачи;
 - среднеквадратическое отклонение (шаг мутации) $\sigma(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m)$, $1 \leq m \leq n$, от которого зависит величина мутации;

- угол ротации $\alpha(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k), \alpha_j \in [-\pi, \pi], k = n * (n - 1) / 2$.

В процессе работы алгоритма ЭС происходит адаптация значений шага мутации и угла ротации. Основным оператором в ЭС является оператор мутации, который реализуется с помощью нормального закона распределения. Существует два типа селекции: (μ, λ) –селекция и $(\mu + \lambda)$ –селекция. В случае (μ, λ) –селекции в следующую популяцию выбирают лучшие μ родителей только из множества λ потомков. При $(\mu + \lambda)$ –селекции новая популяция образуется из объединенного множества родителей и потомков. Предпочтительнее (μ, λ) –селекция, поскольку реализует механизм выхода из локальных оптимумов.

3. Метамодел

Существуют три основных подхода к построению метамоделей: полиномы, кригинг и нейронные сети.

3.1. Полиномы

Наиболее часто используются полиномы второй степени. Число коэффициентов такой модели рассчитывается как $(n + 1) * (n + 2) / 2$, где n – число переменных. Для расчета неизвестных коэффициентов полинома можно использовать метод наименьших квадратов или градиентный метод. Основным недостатком являются значительные временные затраты на расчет коэффициентов модели в случае решения задачи большой размерности.

3.2. Кригинг

Это комбинация глобальной модели и локальных «отклонений»:

$$y(x) = g(x) + Z(x).$$

Здесь $g(x)$ является глобальной составляющей модели целевой функции; $Z(x)$ представляет собой функцию Гаусса с нулевым математическим ожиданием и ковариацией, моделирующей локальные отклонения от глобальной модели. Обычно функция $g(x)$ задается полиномом. Расчет параметров модели осуществляется с помощью метода максимального правдоподобия.

Основным достоинством кригинга является возможность расчета доверительного интервала без дополнительных вычислений. Однако необходимо выполнять матричные преобразования для расчета выхода модели, что значительно увеличивает время вычислений с ростом размерности задачи.

3.3. Нейронные сети

Нейронные сети являются «мощным» аппаратом для аппроксимации сложных зависимостей [4]. Здесь применяются три типа сетей: многослойный персептрон, сеть на основе радиальных базисных функций и машина опорных векторов.

Многослойный персептрон прямого распространения состоит из входного слоя (состоящего из множества сенсорных элементов), одного или нескольких скрытых слоев вычислительных нейронов (как правило, с сигмоидальной функцией активации) и выходного

слоя нейронов. Обучение такой сети выполняется с помощью алгоритма обратного распространения ошибки (ВР–алгоритм). Для повышения эффективности решения задачи с помощью многослойного персептрона применяют модификации ВР–алгоритма и методы оптимизации структуры сети для конкретной задачи.

Сеть на основе радиальных базисных функций (RBF–сеть) состоит из трех слоев. Входной слой включает нейроны, которые связывают сеть с внешней средой. Промежуточный слой является единственным скрытым слоем сети. В нем каждый нейрон воспроизводит гауссову поверхность отклика и выполняет нелинейное преобразование входного пространства. Для большинства задач размерность скрытого слоя значительно превышает размерность входного слоя. Выходной слой сети включает нейроны с линейными функциями активации и выполняет линейное преобразование пространства скрытого слоя.

Машина опорных векторов представляет собой линейную систему, которая решает задачу разделения объектов в пространстве признаков с помощью гиперплоскости. Теория таких систем исходит из теории статистического обучения. Основными достоинствами машины опорных векторов являются: отсутствие локального минимума ошибки в процессе обучения, а также то, что ошибка обобщения не зависит от размерности задачи.

4. Интеграция метамоделей с эволюционными метаэвристиками

В большинстве случаев применяют два подхода интеграции метамоделей с эволюционными метаэвристиками. В первом сначала определяется оптимум по метамоделю, а затем реализуется расчет оптимизируемой функции в точке оптимума. Новые данные используются для построения новой (более точной) метамоделю и процесс определения оптимума и обновления метамоделю повторяется. Второй подход основан на концепции *контроля эволюции* [5], в рамках которого применяются два метода: контроль эволюции на уровне особей и контроль эволюции на уровне поколений. В случае контроля на уровне особей расчет ФП реализуется на основе целевой функции только для части особей текущей популяции. Для остальных особей текущей популяции расчет ФП осуществляется с использованием метамоделю. В случае контроля на уровне поколений все особи популяции очередного поколения рассчитываются или с помощью целевой функции, или с помощью метамоделю. Особи, для которых ФП рассчитывается с использованием ЦФ принято называть *контролируемыми*.

4.1. Контроль эволюции на уровне особей

Для эволюционных стратегий наиболее популярными являются следующие методы.

- *Best-стратегия* [5]. Здесь для всех λ потомков популяции ФП рассчитывается с помощью метамоделю. Затем для λ^* лучших потомков расчет ФП осуществляется с помощью ЦФ. Далее обновляется метамоделю и для оставшихся $(\lambda - \lambda^*)$ потомков расчет ФП реализуется по метамоделю. Лучшие μ особей из λ потомков становятся родителями следующего поколения.

- *Pre-selection*-стратегия [6]. Здесь $\lambda^* > \lambda$ потомков генерируются из μ родителей с помощью операторов рекомбинации и мутации. Для них осуществляется расчет ФП по метамодели. Затем лучшие λ потомков предварительно отбираются из λ^* потомков и для них осуществляется расчет ФП с помощью ЦФ. В заключении лучшие μ особей из λ потомков отбираются в следующее поколение.

В работе [7] сделано заключение о том, что качество работы алгоритма, использующего эволюционный контроль на уровне особей будет выше, если родители выбираются из контролируемых особей. Однако в данных стратегиях не решен вопрос о том, сколько особей и какие особи текущего поколения необходимо контролировать.

4.2. Механизмы адаптации

Базовым механизмом адаптации является следующее правило: если качество метамодели *улучшается* в процессе поиска, то *большее* число особей должно рассчитываться с использованием метамодели.

В работе [6] предложено правило определения числа особей для предварительного отбора λ_{pre} в зависимости от качества селекции, рассчитываемого по метамодели. В работе [7] описаны механизм адаптации на основе расчета среднеквадратического отклонения, механизм адаптации на основе селекции и механизм адаптации на основе корреляции.

Существует точка зрения [6, 7], что при использовании метамodelей в эволюционных алгоритмах важным является только правильная селекция, а не ошибка аппроксимации метамодели.

4.3. Модификации для случайного отклика

Случайный характер ЦФ может вносить негативный эффект в работу ЭМ, приводя к блужданию поискового процесса, потере скорости сходимости алгоритма и попаданию в локальные оптимумы. Основным подходом является проведение серии прогонов ИМ для одной особи-решения и расчет среднего значения ФП. Считается, что главным является работа оператора селекции ЭМ при выборе особей в следующее поколение [8,9].

Так, в работе [8] предложены два подхода к построению оператора селекции для варианта случайной величины отклика:

- 1) адаптация механизма селекции с учетом разброса значений случайной величины;
- 2) изменение числа расчетов отклика в зависимости от наблюдаемой разности значений случайной величины.

Работа [9] посвящена разработке механизмов селекции для выбора единственной лучшей особи в популяции в условиях случайного характера отклика.

5. Система оптимизации на основе имитационного моделирования

Структура системы представлена на рис. 1.

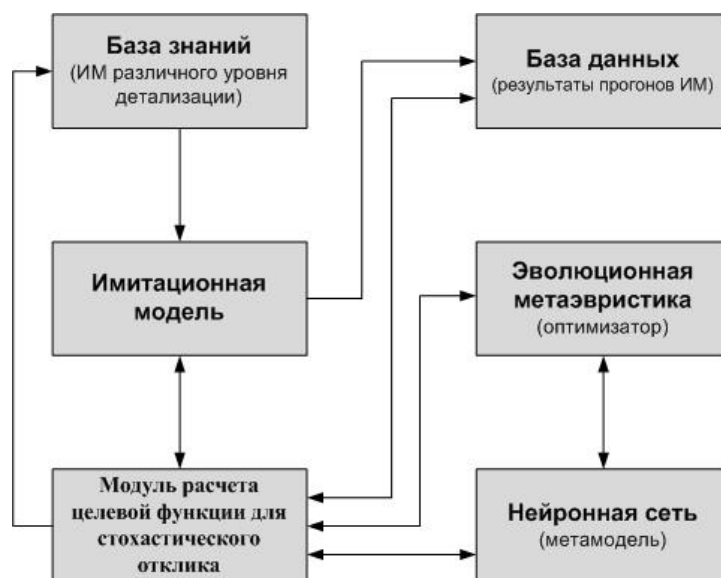


Рис.1. Структура системы оптимизации на основе имитационного моделирования

Имитационная модель. Модуль реализует расчет отклика одной ИМ из базы знаний.

Эволюционная метаэвристика. Оптимизатор реализуется на основе генетического алгоритма или эволюционной стратегии. В функции модуля также входят: запуск системы, принятие решения о выборе способа расчета ЦФ (на базе ИМ или на базе метамодели) и остановка работы системы с выдачей полученного решения. Оценка решений реализуется в модуле расчета ЦФ для стохастического отклика.

Нейронная сеть. Для построения метамодели данные выбираются из базы данных и проходят обработку в модуле расчета ЦФ для стохастического отклика.

База данных (БД). Содержит данные о прогонах ИМ. Формат: 1) номер ИМ в БЗ; 2) вход ИМ – выход ИМ. Данные используются для построения метамодели.

База знаний (БЗ). Содержит ИМ различного уровня детализации. Возможен выбор менее точных ИМ для прогона на начальном этапе работы блока оптимизации и последующее повышение точности ИМ в процессе поиска. Данный механизм позволяет сократить время поиска решения. Результаты моделирования заносятся в БД.

Модуль расчета целевой функции для стохастического отклика. Функции модуля: 1) выбрать ИМ из БЗ и реализовать минимальное число прогонов ИМ для оценки популяции ЭМ; 2) выбрать данные из БД и рассчитать значения ЦФ для построения метамодели.

6. Эволюционная стратегия на основе метамodelей и выборочного эволюционного контроля

Точность метамодели может изменяться от поколения к поколению вследствие изменения области расположения текущей популяции в пространстве поиска и изменения дан-

ных, которые используются для построения метамоделей. Поэтому прогноз числа контролируемых особей в следующем поколении, на основе качества метамоделей, рассчитанного в текущем поколении, может быть неверным.

Одним из критериев оценки качества метамоделей является ранговая корреляция p^{rank} [11], которая, в свою очередь, зависит от разности рангов (номера в отсортированном по ФП списке) особей, рассчитанных с помощью целевой функции и с помощью метамоделей.

Можно предположить, что если бы мы могли сначала оценить качество метамоделей в текущем поколении и затем использовать эту оценку для определения контролируемых особей в этом же поколении, то такой метод мог бы оказаться эффективным для корректного отбора особей в следующее поколение.

Основная идея предлагаемого метода заключается в том, что выбор контролируемых особей в текущем поколении должен осуществляться в зависимости от качества метамоделей, которое необходимо оценить в рамках того же поколения на основе расчета разности рангов в пределах небольших групп особей.

Для этой цели введем параметр η – число контролируемых особей, которые обязательно должны иметь лучший ранг среди всех λ потомков текущего поколения. При этом число контролируемых особей λ^* для любого поколения может быть в пределах от η до λ .

Введем условие $\eta \geq \mu$, которое означает, что выбор родителей для следующего поколения должен осуществляться из контролируемых особей.

Если точность метамоделей низкая, то существует высокая вероятность того, что первые η особей изменят свой ранг. В этом случае число контролируемых особей возрастет. Если точность метамоделей высокая, то существует низкая вероятность того, что первые η особей изменят свой ранг. Тогда число контролируемых особей уменьшится.

Рассмотрим иллюстрацию выборочного эволюционного контроля (рис.1). Сначала λ потомков генерируются из μ родителей текущего поколения с помощью операторов рекомбинации и мутации. Затем все λ потомков рассчитываются с помощью модели. Далее осуществляется расчет ФП особей с помощью ЦФ. На шаге 1 осуществляется расчет η лучших особей из λ потомков. При этом первая особь меняет ранг 1 на ранг 2, оставаясь в пределах η лучших особей, а вторая выходит за пределы η лучших особей, меняя ранг 2 на ранг 6. На шаге 2 рассчитываются только неконтролируемые особи из η лучших особей, в результате чего первая особь меняет ранг 1 на ранг 4, а вторая ранг 2 на ранг 1. На шаге 3 рассчитывается только вторая особь, в результате чего она меняет ранг 2 на ранг 1, а первая особь меняет ранг 1 на ранг 2. Теперь все η лучших особей являются контролируемыми. Далее осуществляется обновление метамоделей с учетом λ^* контролируемых особей текущего поколения. В заключении, μ лучших отбираются из η контролируемых особей.

Таким образом, число контролируемых особей λ^* для одного поколения может быть от η до λ в зависимости от точности модели, а выбор μ родителей для следующего поколения всегда осуществляется из контролируемых особей.

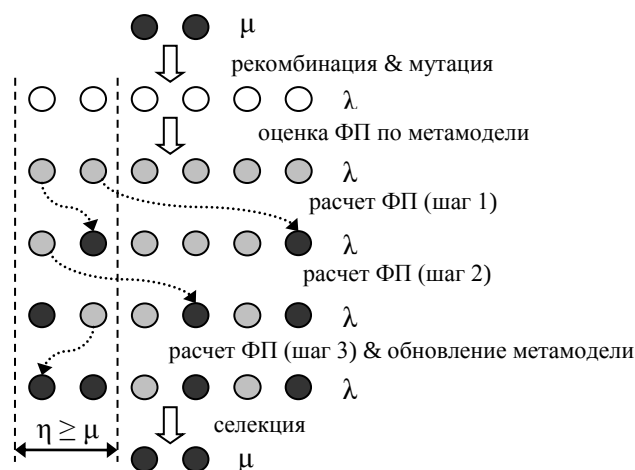


Рис.2. Эволюционная стратегия на основе выборочного эволюционного контроля

Алгоритм эволюционной стратегии на основе выборочного эволюционного контроля показал лучшие результаты по сравнению с другими эволюционными стратегиями (обычной ЭС, pre-selection-стратегией и best-стратегией) при исследовании на стандартных тестовых функциях [12].

Заключение

В работе рассмотрена задача оптимизации параметров имитационной модели сложной системы. Предложена система для решения данной задачи, которая включает модуль оптимизации на базе эволюционной метаэвристики, метамоделю на основе нейронной сети и базу знаний имитационных моделей различного уровня детализации для сокращения времени на поиск решения. Предложен алгоритм эволюционной стратегии на основе метамоделей и выборочного эволюционного контроля особей. В данном алгоритме отбор в следующее поколение всегда осуществляется из особей, для которых функция пригодности рассчитывается с использованием целевой функции, а не метамоделей, обеспечивая хорошие результаты и сходимость алгоритма.

Список литературы

- [1]. Лоу А.М., Кельтон В.Д. Имитационное моделирование. 3-е изд. Пер. с англ. СПб.: Питер, Издат. группа BHV. 2004. 848 с.
- [2]. Glover F.W., Kochenberger G.A. Handbook of Metaheuristics. Kluwer, Boston. 2003. 570 p.
- [3]. Hansen N., Ostermeier A. Completely derandomized self-adaptation in evolution strategies. // Evolutionary Computation. 2001. Vol. 9. № 2. P. 159–196. DOI: 10.1162/106365601750190398
- [4]. Haykin S. Neural Networks: A Comprehensive Foundation. Second Edition. Prentice-Hall. 1999. 874 p.

- [5]. Jin Y., Olhofer M., Sendhoff B. A framework for evolutionary optimization with approximate fitness functions. // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. 2002. Vol. 6. № 5. P. 481-494.
- [6]. Ulmer H., Streichert F., Zell A. Evolution strategies with controlled model assistance. // 2004 IEEE Congress on Evolutionary Computation. Portland, Oregon. 2004. P.1569-1576. Режим доступа: <http://www.ra.cs.uni-tuebingen.de/publikationen/2004/ulmer04evolution> (дата обращения: 6.10.2016)
- [7]. Gräning L., Jin Y., Sendhoff B. Individual-based Management of Meta-models for Evolutionary Optimization with Applications to Three-Dimensional Blade Optimization. // Evolutionary Computation in Dynamic and Uncertain Environments. Springer. 2007. P. 225-250.
- [8]. Branke J., Schmidt C. Sequential sampling in noisy environments. / In Xin Yao et. al., editor. // Proceedings of the 8th International Conference on Parallel Problem Solving from Nature (PPSN VIII). (Birmingham, UK, September 18-22, 2004). Berlin/Heidelberg, Germany: Springer. 2004. P. 202–211. DOI: 10.1007/978-3-540-30217-9_21
- [9]. Jaskowski W., Kotłowski W. On Selecting the Best Individual in Noisy Environments. // The proceedings of GECCO'08. (July 12–16, 2008, Atlanta, Georgia, USA). P. 961-968.
- [10]. Афонин П.В. Построение гибридных систем имитационного моделирования на базе эволюционных метаэвристик и нейронных сетей // Обзорение прикладной и промышленной математики. Сборник трудов Макросимпозиума «Нечеткие системы, мягкие вычисления и интеллектуальные технологии». 2011. Т.4. С.38-39.
- [11]. Jin Y., Huesken M., Sendhoff B. Quality measures for approximate models in evolutionary computation. / In Alwyn M. Barry, editor. // GECCO 2003. Genetic and Evolutionary Computation Conference: Workshop Program. Chicago. 2003. P. 170–173.
- [12]. Афонин П.В. Метод контроля эволюции для эволюционных стратегий на основе нейросетевых метамоделей // Труды V-ой Международной научно-практической конференции «Интегрированные модели и мягкие вычисления в искусственном интеллекте». (28-30 мая 2009 г., Коломна). М.: Физматлит. 2009. Т.2. С.563-574.