

MATEMATIKOS IR INFORMATIKOS INSTITUTAS

Julius ŽILINSKAS

**GLOBALAUS OPTIMIZAVIMO ALGORITMŲ SUDARYMAS,
TYRIMAS IR TAIKYMAS**

Habilitacijos procedūrai teikiamų mokslo darbų
APŽVALGA

Fiziniai mokslai, informatika (09 P)

VILNIUS
2007

Julius Žilinskas. Globalaus optimizavimo algoritmų sudarymas, tyrimas ir taikymas. Habilitacijos procedūrai teikiamų mokslo darbų apžvalga. Fiziniai mokslai, informatika (09 P), 24 psl.

Turinys

1	Įvadas	3
2	Šakų ir rėžių globalaus optimizavimo algoritmų su simpleksiniais posričiais sudarymas, tyrimas ir lygiagretinimas	5
3	Intervalų aritmetika pagrįstų globalaus optimizavimo algoritmų sudarymas ir tyrimas	7
4	Daugiamačių skalių panaudojimas daugiamačių duomenų analizei	12
5	Globalaus optimizavimo algoritmų taikymas praktiniams uždaviniams spręsti	19
6	Išvados	19
7	Habilitacijos procedūrai teikiami mokslo darbai	21
8	Redaguotos knygos	24
9	Kita cituojama literatūra	24

Lentelių sąrašas

1	Pasiūlytų režių vidutinis siaurinimas lyginant su standartine intervalų aritmetika	11
2	Hibridinio algoritmo daugiamatėms skalėms nuosekliosios ir lygiagrečiosios versijų palyginimas	18

Paveikslų sąrašas

1	Sujungtų reaktorių sistema su riboto tikslumo matuojamų medžiagų srautais	12
2	16-mačio simplekso ir 5-mačio kubo viršūnių atvaizdžiai dvimatėse skalėse su Euklido ir miesto kvartalų normomis	17

Santrumpų sąrašas

MPI – pranešimų persiuntimo sąsaja (angl. Message Passing Interface)

DS – daugiamatės skalės

STRESS – mažiausių kvadratų įtempimo funkcija

1 Įvadas

1.1 Tyrimų objektas

Tyrimo objektas yra globalaus optimizavimo algoritmai. Šiame darbe apžvelgti sukurti ir ištirti nauji globalaus optimizavimo algoritmai, tame skaičiuje ir lygiagretieji.

1.2 Tyrimų tikslai

Tyrimais buvo siekiama šių tikslų:

- Sudaryti priemonės globalaus optimizavimo algoritmų ir jų lygiagrečiųjų versijų realizavimui.
- Pasiūlyti ir realizuoti globalaus optimizavimo algoritmus su simpleksiniais posričiais.
- Sukurti randomizuotą intervalų aritmetikos apibendrinimą ir pritaikyti jį globalaus optimizavimo algoritmams.
- Sukurti daugiamačių skalių su miesto kvartalų norma algoritmus.

1.3 Tyrimų aktualumas

Globalaus optimizavimo metodai yra naudojami skaičiuojamosios chemijos ir biologijos, biomedicinos, operacijų tyrimo, ekonomikos, inžinerinio projektavimo ir valdymo bei daugelio kitų inžinerijos ir taikomųjų mokslų uždaviniams spręsti. Pavyzdžiui, chemijos inžinerijoje naudojant globalų optimizavimą buvo sudaryti energiją ir medžiagas taupantys technologiniai procesai. Ekonomikoje globaliu optimizavimu maksimizuojamas pelnas, įvertinami ekonominių modelių parametrai.

Matematiškai globalaus optimizavimo uždavinys formuluojamas taip: reikia rasti netiesinės n tolydžių kintamųjų funkcijos (vadinamos tikslo funkcija) $f(\mathbf{x}) : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ minimumą f^* n -matėje leistinoje srityje $\mathbf{D} \subseteq \mathbf{R}^n$:

$$f^* = \min_{\mathbf{x} \in \mathbf{D}} f(\mathbf{x}),$$

ir vieną arba visus globalaus minimumo taškus \mathbf{x}^* , kuriuose funkcijos reikšmė lygi funkcijos minimumui:

$$\mathbf{x}^* : f(\mathbf{x}^*) = f^*.$$

Globalaus optimizavimo uždaviniai yra sudėtingi algoritmų sudėtingumo teorijos prasme. Praktinių uždavinių sprendimui reikia atlikti daug skaičiavimų. Kai įprastų kompiuterių skaičiavimo pajėgumo neužtenka, gali padėti galingi lygiagretieji

kompiuteriai ir kompiuterių klasteriai: lygiagrečiosiomis algoritmų versijomis galima išspręsti didesnius praktinius uždavinius. Efektyvių globalaus optimizavimo algoritmų ir jų lygiagrečiųjų versijų kūrimas yra aktualus informatikos uždavinys tiek teorijos, tiek ir taikymų prasme.

1.4 Rezultatai

Svarbiausi apžvelgiamuose darbuose paskelbti rezultatai yra šie:

- Sukurtos globalaus optimizavimo algoritmų ir jų lygiagrečiųjų versijų realizavimo priemonės [11, 24].
- Pasiūlytos naujos vidinė intervalų aritmetika [6], balansuojama atsitiktinė intervalų aritmetika [8, 9, 15, 16, 17] bei deterministinės intervalų aritmetikos modifikacijos [4].
- Sukurti ir ištirti globalaus optimizavimo algoritmai:
 - Lygiagretieji Lipšico algoritmai su rėžių skaičiavimu simpleksiniams posričiams [25].
 - Algoritmas, pagrįstas statistiniais modeliais, apibrėžtais simpleksiniuose posričiuose [10].
 - Balansuojamą atsitiktinę intervalų aritmetiką posričių įvertinimui naudojantis algoritmas [14, 23].
- Sukurti ir ištirti daugiamačių skalių nuoseklūs ir lygiagretieji algoritmai [1, 3, 12].
- Algoritmai pritaikyti šiems uždaviniams spręsti:
 - Daugiamačių farmakologinių duomenų vizualizavimo [13].
 - Žmogaus žandikaulio augimo modelio nustatymo [26].
 - Stabilios molekulinės struktūros nustatymo [26].
 - Sujungtų reaktorių sistemos rimties būsenos koncentracijų nustatymo naudojant masių balansą, kai matuojami medžiagų srautai yra riboto tikslumo [15].
 - Cheminių procesų tinklo sintezės [23] ir valdymo [21].
 - Rinkos modelio įvertinimo [2].

Tyrimas ir jo rezultatai pristatyti 11 užsienyje ir 5 Lietuvoje vykusiose tarptautinėse konferencijose.

Šioje apžvalgoje apžvelgiama 10 mokslinių straipsnių [1-10], paskelbtų Mokslinės informacijos instituto pagrindinio sąrašo žurnaluose; 7 moksliniai straipsniai [11-17], paskelbti Mokslinės informacijos instituto konferencijų darbų sąrašo leidiniuose; 9 moksliniai straipsniai [18-26], paskelbti leidiniuose, įtrauktuose į tarptautines mokslo duomenų bazes arba išleistuose pasaulinių mokslo draugijų.

Publikacija [6] yra buvusi dažniausiai peržiūrimas žurnalo “BIT Numerical Mathematics” straipsnis, publikacija [10] yra buvusi dažniausiai peržiūrimu žurnalo “Computers & Mathematics with Applications” straipsnių dešimtoje vietoje. Publikacija [9] yra vienas dažniausiai Mokslinės informacijos instituto pagrindinio sąrašo leidiniuose cituojamas žurnalo “Informatica” straipsnis.

Mokslinė veikla įvertinta 2006 metų Valstybės stipendija mokslininkams.

Mokslinę-organizacinę veiklą atspindi 2 tarptautiniu mastu pripažintų leidyklų išleistų knygų [27, 28] mokslinis redagavimas.

2 Šakų ir rėžių globalaus optimizavimo algoritmų su simpleksiniais posričiais sudarymas, tyrimas ir lygiagretinimas

Globalaus optimizavimo algoritmai gali būti realizuojami pagal šakų ir rėžių metodiką. Šakų ir rėžių algoritmus sudaro inicializavimo, išrinkimo bei dalijimo taisyklės. Inicializavimo etape leistinoji sritis \mathbf{D} padengiama nurodytos formos posričiais. Toliau vykdomas ciklas: iš kandidatų aibės \mathbf{L} išrenkamas ir padalijamas posritis; apskaičiuojami funkcijos minimumo apatinis LB ir viršutinis UB rėžiai naujai gautuose posričiuose; posričiai, kuriuose minimumo taškas negali būti, pašalinami, o nepašalinti posričiai įtraukiami į kandidatų aibę. Algoritmu siekiama, kad kandidatų aibė \mathbf{L} greitai mažėtų ir konverguotų į sprendinių aibę \mathbf{S} . Apibendrintas šakų ir rėžių algoritmas:

Padengiama \mathbf{D} : $\mathbf{L} = \{\mathbf{L}_j | \mathbf{D} \subseteq \bigcup \mathbf{L}_j, j = 1, \dots, m\}$.

$\mathbf{S} = \emptyset$, $UB(\mathbf{D}) = \infty$.

Kol $\mathbf{L} \neq \emptyset$

Išrenkamas $\mathbf{I} \in \mathbf{L}$.

Jei $LB(\mathbf{I}) < UB(\mathbf{D}) + \epsilon$,

Padalijamas \mathbf{I} į p posričius \mathbf{I}_j .

Kiekvienam $\mathbf{I}_j, j = 1, \dots, p$

Randami $UB(\mathbf{I}_j \cap \mathbf{D})$ ir $LB(\mathbf{I}_j)$.

$UB(\mathbf{D}) = \min(UB(\mathbf{D}), UB(\mathbf{I}_j \cap \mathbf{D}))$.

Jei $LB(\mathbf{I}_j) < UB(\mathbf{D}) + \epsilon$,

Jei \mathbf{I}_j gali būti sprendinys, $\mathbf{S} = \mathbf{I}_j$.

kitu atveju $\mathbf{L} = \{\mathbf{L}, \mathbf{I}_j\}$.

Padengimo ir padalijimo taisyklės priklauso nuo naudojamų posričių formos: gali būti naudojami hiperstačiakampiai, simpleksai, hiperkūgiai ar hipersferos. Galimos išrinkimo taisyklės: geriausiojo išrinkimo – išrenkamas \mathbf{L} elementas su geriausiu įverčiu (su mažiausiu apatiniu tikslo funkcijos režiu); gilyn – išrenkamas jauniausias \mathbf{L} elementas; platyn – išrenkamas vyriausias \mathbf{L} elementas. Rėžių skaičiavimo taisyklės nusako, kaip funkcijos minimumo režiai yra įvertinami: gali būti naudojami išgaubti funkcijos apvalkalai, Lipšico sąlyga, intervalų aritmetika, euristinis įvertinimas, statistinis įvertinimas.

Nors padengimo, išrinkimo, padalijimo ir rėžių skaičiavimo taisyklės priklauso nuo konkretaus algoritmo, šakų ir rėžių algoritmo struktūra išlieka. Konkrečių globalaus optimizavimo algoritmų sudarymui buvo sukurta paprogramių biblioteka [24]. Vėliau buvo realizuotas bendrojo šakų ir rėžių algoritmo šablonas [11], kurio vartotojams tereikia realizuoti specifines taisykles. Šablone buvo realizuotos ir lygiagrečiosios algoritmo versijos, dėl to realizavus specifines algoritmo taisykles, automatiškai gaunamos lygiagrečiosios algoritmo realizacijos.

Simpleksas yra iškili n -matė geometrinė figūra, turinti $n+1$ viršūnę. Vienmatėje erdvėje simpleksas yra atkarpa, dvimatėje – trikampis, trimatėje – tetraedras. Simpleksas yra figūra, n -matėje erdvėje turinti mažiausiai viršūnių. Jeigu vertinant funkcijos režius naudojamos funkcijos reikšmės viršūnėse, tai simpleksas yra tinkamiausia posričių forma.

Optimizavimo uždaviniai, kai tikslo funkcija $f : \mathbf{D} \rightarrow \mathbf{R}, \mathbf{D} \subset \mathbf{R}^n$ patenkina sąlyga:

$$|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})| \leq L\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|, \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{D},$$

vadinami Lipšico optimizavimo uždaviniais, čia $L > 0$ yra Lipšico konstanta, $\|\cdot\|$ žymi norma. Funkcijos režiai įvertinami pasinaudojus šia sąlyga.

Normų įtaka šakų ir rėžių globalaus optimizavimo algoritmų su simpleksiniais posričiais efektyvumui buvo eksperimentiškai ištirta [19]. Eksperimento rezultatai parodė, kad geriausi rezultatai yra gaunami, kai Lipšico režiu įvertinti naudojamas kraštinių (begalinės ir pirmosios) normų junginys dvimačiam atvejui ir jų junginys su Euklido norma trimačiam atvejui.

Lygiagretieji Lipšico globalaus optimizavimo šakų ir rėžių algoritmai su simpleksiniais posričiais buvo ištirti [25]. Algoritmai buvo realizuoti pagal šeimininko-vergų ir paskirstytų skaičiavimų paradigmas. Šeimininko-vergų paradigmos atveju šeimininkas saugo ir valdo posričių sąrašą, valdo užduočių paskirstymą ir skaičiavimų užbaigimą. Vergai atlieka žadančių posričių įvertinimą ir padalijimą. Tokios paradigmos trūkumas – šeimininkas gali nespėti valdyti užduočių paskirstymo. Paskirstytų skaičiavimų atveju vyksta bendraujančių ir bendradarbiaujančių procesorių darbas. Reikia išspręsti apkrovimo balansavimo ir užbaigimo nustatymo problemas. Lygiagretieji algoritmai buvo realizuoti naudojant C++ ir MPI. Algoritmų lygiagretinimo koeficientai buvo įvertinti ir aptarti. Rezultatai parodė, kad paskirstyti algoritmai yra efektyvesni.

Globalaus optimizavimo algoritmai su statistiniais modeliais ir simpleksiniais posirčiais buvo pasiūlyti [10]. Pradinės hiperstačiakampės srities padengimo simpleksais ir simpleksų dalijimo taisyklių įtaka globalaus optimizavimo algoritmų greičiui buvo eksperimentiškai ištirta. Buvo nustatyta, kad geriau sritį padalinti į simpleksus naudojant viršūnių trianguliaciją ir dalinti simpleksus per ilgiausios kraštinės vidurį negu sritį įterpti į didesnę simpleksą ir dalinti simpleksus išlaikant jų formą.

3 Intervalų aritmetika pagrįstų globalaus optimizavimo algoritmų sudarymas ir tyrimas

Intervaliniai globalaus optimizavimo metodai yra pagrįsti intervalų aritmetika, kurios pagrindai pasiūlyti [29] knygoje. Intervalų aritmetika operuoja intervalais, apibrėžtais realiais skaičiais \underline{x} ir \overline{x} : $\overline{x} = [\underline{x}, \overline{x}] = \{x \in \mathbf{R} | \underline{x} \leq x \leq \overline{x}\}$. Intervalų aritmetikos operacijos $\overline{x} \circ \overline{y}$ rezultatas yra intervalas, kuriam priklauso visos galimos realių skaičių aritmetikos operacijos $x \circ y$ rezultato reikšmės, kai $x \in \overline{x}$ ir $y \in \overline{y}$.

Jei funkcija $f(\mathbf{x})$ yra apibrėžta srityje, tai garantuoti jos reikšmių apatinis ir viršutinis rėžiai šioje srityje gali būti įvertinti funkcijos išraiškoje pakeičiant realių skaičių aritmetikos operacijas intervalų aritmetikos operacijomis:

$$\{f(\mathbf{x}) | \mathbf{x} \in \overline{\mathbf{x}}, \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n, \overline{\mathbf{x}} \in \mathbf{R}^n\} \subseteq \overline{f}(\overline{\mathbf{x}}),$$

čia $f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$, $\overline{f}: [\mathbf{R}, \mathbf{R}]^n \rightarrow [\mathbf{R}, \mathbf{R}]$. Įvertinti rėžiai gali būti naudojami nustatyti, ar srityje nėra globalaus minimumo taško – jei apatinis funkcijos reikšmių srityje rėžis yra didesnis negu kokia nors žinoma funkcijos reikšmė, tai geresnės funkcijos reikšmės šioje srityje nebus. Tokios sritys gali būti pašalinamos iš tolesnės paieškos.

Tam, kad intervalų aritmetikos rezultatas būtų garantuoti rėžiai, intervalų aritmetikos realizacijos turi apatinio rėžio skaičiavimuose apvalinti žemyn, o viršutinio – aukštyn. Dėl to intervalų aritmetikos realizavimas nėra paprastas. Intervalų aritmetikų bibliotekų palyginimo metodika buvo pasiūlyta [7]. Viešai prieinamos C ir C++ intervalų aritmetikos bibliotekos buvo ištirtos ir eksperimentiškai palygintos įvertinant intervalų aritmetikos operacijų tikslumą ir greitį. Buvo nustatyta, kad komercinė SUN Forte C++ kompiliatoriaus biblioteka yra tiksliausia ir greičiausia iš tirtų bibliotekų. Deja, ji yra skirta tik SUN kompiuteriams. Iš kitų bibliotekų tiksliausia ir greičiausia yra Wuppertal universitete sukurta ir internete laisvai prieinama filib++ biblioteka.

Yra svarbu turėti kuo tikslesnius (siauresnius) rėžius. Intervalų metodų trūkumas yra priklausomybės problema: kiekvienas to paties kintamojo panaudojimas intervalinėje išraiškoje nepagrįstai traktuojamas kaip naujas kintamasis. Todėl gaunami pernelyg platūs funkcijos reikšmių rėžiai, o kuo funkcijos reikšmių rėžiai platesni, tuo mažiau neperspektyvių sričių galima atmesti, kas

salygoja lėtesnį optimizavimą. Pavyzdžiui, jeigu cikle skaičiavimuose naudojama visų išskyrus vieno elementų suma, realiuose skaičiavimuose paprastai bendra suma suskaiciuojama iš anksto, o nereikalingas elementas atimamas cikle, nes

$$\sum_{i \neq j} x_i = \sum_i x_i - x_j.$$

Tačiau intervalų skaičiavimuose

$$\sum_{i \neq j} \bar{x}_i \neq \sum_i \bar{x}_i - \bar{x}_j = \sum_{i \neq j} \bar{x}_i + \bar{x}_j - \bar{x}_j,$$

nes $\bar{x}_j - \bar{x}_j = [-(\bar{x}_j - \underline{x}_j), \bar{x}_j - \underline{x}_j] \neq [0, 0]$. Dėl to gaunami platesni rėžiai. Šiuo atveju tikslų funkcijos reikšmių rėžį gautume, jeigu atimčiai naudotume Kaučerio vidinę intervalų aritmetiką [30]. Kaučerio vidinės intervalų aritmetikos rezultatas – garantuotas vidinis intervalas:

$$\bar{f}_u(\bar{\mathbf{x}}) \subseteq \{f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \bar{\mathbf{x}}\} \subseteq \bar{f}(\bar{\mathbf{x}}).$$

Tikrasis funkcijos reikšmių rėžis yra tarp standartinio ir vidinio intervalo. Kaučerio intervalų aritmetika įvertina nepalankiausią atvejį, o jos rezultatas gali būti išsigimęs intervalas $[0, 0]$. Buvo pasiūlyta reguliarioji Kaučerio aritmetikos versija [6], paremta prielaida apie operandų priklausomybės reguliarumą. Pagrindinis šios intervalų aritmetikos skirtumas nuo Kaučerio aritmetikos yra daugybos operacija. Pasiūlytos aritmetikos operacijos (\circ_{ur}) yra:

$$\begin{aligned} \bar{x} +_{ur} \bar{y} &= [\underline{x} + \bar{y} \vee \bar{x} + \underline{y}], \\ \bar{x} -_{ur} \bar{y} &= [\underline{x} - \underline{y} \vee \bar{x} - \bar{y}], \\ \bar{x} \times_{ur} \bar{y} &= \begin{cases} [\min(\underline{x}\bar{y}, \bar{x}\underline{y}), \mu(\underline{x}, \bar{x}, \underline{y}, \bar{y})], & \bar{x} > 0, \bar{y} > 0 \text{ or } \bar{x} < 0, \bar{y} < 0, \\ [\mu(\underline{x}, \bar{x}, \underline{y}, \bar{y}), \max(\underline{x}\bar{y}, \bar{x}\underline{y})], & \bar{x} > 0, \bar{y} < 0 \text{ or } \bar{x} < 0, \bar{y} > 0, \\ [\mu(\underline{x}, \bar{x}, \underline{y}, \bar{y}), \mu(\underline{x}, \bar{x}, \underline{y}, \bar{y})], & \text{kitu atveju,} \end{cases} \\ \bar{x} /_{ur} \bar{y} &= \begin{cases} [\underline{x}/\underline{y} \vee \bar{x}/\bar{y}], & \bar{x} > 0, \bar{y} > 0 \text{ or } \bar{x} < 0, \bar{y} < 0, \\ [\bar{x}/\bar{y} \vee \underline{x}/\underline{y}], & \bar{x} > 0, \bar{y} < 0 \text{ or } \bar{x} < 0, \bar{y} > 0, \\ [\underline{x}/\bar{y}, \bar{x}/\underline{y}], & 0 \in \bar{x}, \bar{y} > 0, \\ [\bar{x}/\underline{y}, \underline{x}/\underline{y}], & 0 \in \bar{x}, \bar{y} < 0, \end{cases} \end{aligned}$$

čia $[a \vee b] = [\min(a, b), \max(a, b)]$,

$$\mu(x_1, x_2, y_1, y_2) = \begin{cases} x_2 y_1, & \frac{(x_2 - x_1)y_2 - x_1(y_2 - y_1)}{2(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} > 1, \\ x_1 y_2, & \frac{(x_2 - x_1)y_2 - x_1(y_2 - y_1)}{2(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} < 0, \\ \frac{(x_2 y_2 - x_1 y_1)^2}{4(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}, & \text{kitu atveju.} \end{cases}$$

Bendru atveju nėra žinoma, kada vidinė intervalų aritmetika gali būti naudojama vietoje standartinės. Pasiūlytoje balansuojamoje atsitiktinėje intervalų aritmetikoje [8, 16], skaičiavimuose atsitiktinai naudojamos standartinės arba vidinės intervalų aritmetikos operacijos. Aritmetikos rezultatai valdomi prieš skaičiavimus nustatoma standartinės intervalų aritmetikos operacijos tikimybe. Atsitiktinis skaičius nuo 0 iki 1 yra sugeneruojamas prieš vykdant kiekvieną intervalų aritmetikos operaciją. Jeigu jis yra mažesnis už prieš skaičiavimus nustatytą standartinės intervalų aritmetikos operacijos tikimybę, vykdoma standartinė intervalų aritmetikos operacija, priešingu atveju vykdoma vidinė intervalų aritmetikos operacija.

Įvairių globalaus optimizavimo tikslo funkcijų atsitiktiniai intervalai atsitiktiniuose posričiuose buvo įvertinti naudojant balansuojamą atsitiktinę intervalų aritmetiką su skirtingomis prieš skaičiavimus nustatomos standartinių intervalų operacijų tikimybės reikšmėmis [9, 17]. Buvo nustatyta, kad daugiamatčių matematinių globalaus optimizavimo testo funkcijų ir praktinių globalaus optimizavimo uždavinių tikslo funkcijų atsitiktinių intervalų centrai ir spinduliai yra pasiskirstę normaliuoju dėsnio. Be to, vidutinė apskaičiuotų atsitiktinių intervalų centrų reikšmė artėja link standartinio intervalo centro, o vidutinė spindulių reikšmė didėja link standartinio intervalo spindulio (apskaičiuoti intervalai plėtėja), didėjant standartinės intervalų aritmetikos operacijos tikimybei. Funkcijos reikšmių režiai posričiuose gali būti įvertinami naudojant atsitiktinių intervalų centrų bei spindulių vidurkius bei nuokrypius:

$$[\mu_{centres} \pm (3.0\sigma_{centres} + \mu_{radii} + 3.0\sigma_{radii})].$$

Paprastų matematinių globalaus optimizavimo testo funkcijų, kuriose yra per mažai operacijų, atsitiktinių intervalų centrai ir spinduliai nėra pasiskirstę normaliuoju dėsnio, tačiau tokių funkcijų standartiniai intervalai būna artimi funkcijos režiams.

Svarbu ne tik žinoti, kad konkrečios funkcijos režius galima įvertinti naudojant balansuojamą atsitiktinę intervalų aritmetiką, bet ir kokie režių įverčiai yra gaunami ir kaip jie priklauso nuo naudojamos prieš skaičiavimus nustatomos standartinių intervalų operacijų tikimybės reikšmės. Kuo režių įverčiai yra siauresni, tuo globalaus optimizavimo algoritmas greičiau išnagrinės sprendžiamą uždavinį. Tačiau, jeigu režių įverčiai yra per siauri ir neapima tikrų funkcijos režių, algoritmas gali atmesti ir sritį, kurioje yra globalaus minimumo taškas, taigi nerastų kai kurių, o gal ir nė vieno, globalaus minimumo taško. Balansuojamos atsitiktinės intervalų aritmetikos nustatomos standartinių intervalų operacijų tikimybės parinkimas apsprendžia balansą tarp globalaus optimizavimo algoritmo greičio ir patikimumo. Įvairių funkcijų režiai atsitiktiniuose posričiuose buvo įvertinti naudojant balansuojamą atsitiktinę intervalų aritmetiką su skirtingomis prieš skaičiavimus nustatomos standartinių intervalų operacijų tikimybės reikšmėmis [14]. Režių įverčiai buvo lyginami su režiais gaunamais naudojant standartinę intervalų

aritmetiką. Jeigu rėžių įverčių sėkmė iki 1 užauga greičiau negu jų vidutinis plotis susilygina su standartinės intervalų aritmetikos rėžių pločiu, yra galimybė pagreitinti optimizavimą naudojant balansuojama atsitiktine intervalų aritmetika įvertinamus rėžius. Ištirta ir nustatyta, kad taip yra praktinių globalaus optimizavimo uždavinių tikslo funkcijoms. Pavyzdžiui, daugiamačių duomenų vizualizacijos uždavinio tikslo funkcijos rėžių įverčiai yra vidutiniškai net iki 30% siauresni už standartinius rėžius, kai jų sėkmės tikimybė yra apie 1.

Intervalų aritmetika pagrįsto globalaus optimizavimo algoritmai, kuriuose gali būti naudojami balansuojama intervalų aritmetika įvertinami funkcijos rėžiai, aptarti [9]. Kadangi teoriškai sunku įvertinti, kaip funkcijos rėžių siaurinimas įtakoja globalaus optimizavimo algoritmų greitį, buvo pasiūlytas modeliavimo metodas [5]. Klasikiniame šakų ir rėžių algoritme analizuojamuose posričiuose standartiniai funkcijos rėžiai buvo nustatomi naudojant intervalų aritmetiką, o tikrieji funkcijos rėžiai – naudojant pagalbinį minimizavimo ir maksimizavimo globalaus optimizavimo algoritmą. Rėžių siaurinimo įtaka globalaus optimizavimo algoritmo greičiui buvo tirama įvertinant algoritmo greitį esant įvairiems tarpiniams tarp standartinių ir tikrųjų rėžiams. Šiam tyrimui atlikti reikėjo ieškoti tikrųjų funkcijos rėžių panaudojant pagalbinį globalaus optimizavimo algoritmą milijonus kartų. Toks tyrimas užtruktu per ilgai, jei nebūtų naudojami lygiagretieji kompiuteriai. Dėl to šiam tyrimui buvo sudarytas mobilus lygiagretusis globalaus optimizavimo algoritmas, kuris gali būti naudojamas ir personaliniuose kompiuteriuose su Linux operacine sistema, ir lygiagrečiajame SUN ar kito tipo superkompiuteryje. Tyrimai, atlikti vykdant algoritmą personaliniame kompiuteryje ir Sun HPC 6500 UltraSPARC-III lygiagrečiajame kompiuteryje, parodė, kad rėžių siaurumas labai įtakoja globalaus optimizavimo algoritmų greitį, ypač augant tikslo funkcijos priklausomybės faktoriui, tai yra, kai rėžiai nustatomi naudojant standartinę intervalų aritmetiką yra per platūs.

Balansuojama atsitiktinė intervalų aritmetika buvo panaudota šakų ir rėžių algoritmo sudarymui [23]. Algoritmas buvo pritaikytas cheminių procesų tinklo sintezės uždaviniams spręsti. Buvo ištirtas algoritmo greitis ir patikimumas. Algoritmas su balansuojama atsitiktine intervalų aritmetika yra 5 kartus greitesnis už algoritmą su standartinę intervalų aritmetika. Algoritmas su standartinę intervalų aritmetika turi būti naudojamas, kai garantuotas uždavinio sprendinys turi būti rastas. Tačiau, jeigu reikia globalaus optimizavimo algoritmo, kuris spęstų uždavinį greitai, bet nebūtinai garantuotai, algoritmas su balansuojama atsitiktine intervalų aritmetika turi būti naudojamas. Panašūs tyrimo rezultatai gauti pritaikius sudarytą globalaus optimizavimo algoritmą su balansuojama atsitiktine intervalų aritmetika rinkos modelio parametru įvertinimui [2].

Nauji deterministiniai funkcijų reikšmių rėžių įvertinimo iš standartinės ir vidinės intervalų aritmetikos būdai buvo pasiūlyti [4]. Buvo įvertinti ir palyginti pasiūlyti matematinių globalaus optimizavimo testavimo funkcijų ir

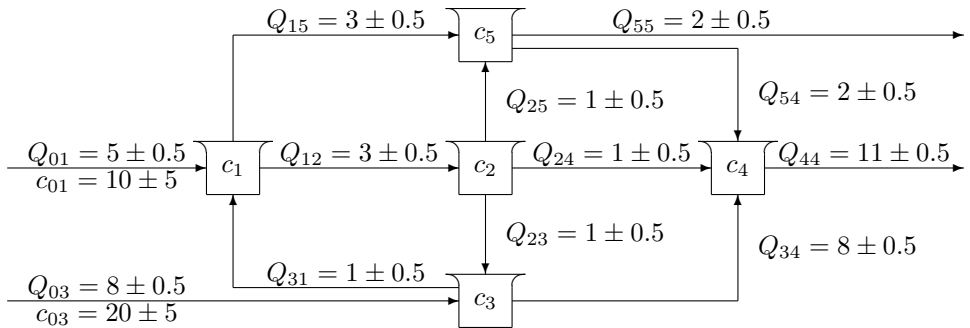
1 Lentelė: Pasiūlytų rėžių vidutinis siaurinimas lyginant su standartine intervalų aritmetika

Testavimo funkcija	Balansuojama atsitiktinė intervalų aritmetika	Balansuojama intervalų aritmetika
Daugiamatės skalės	30%	30%
Cheminio proseso sintezė	60%	60%
Paviani	30%	40%
Goldstein and Price	40%	0%
Six Hump Camel Back	15%	15%
Shekel 5, 7, 10	10%	10%
Levy 4, 5, 6, 7	5-15%	5-15%

praktinių globalaus optimizavimo uždavinių tikslo funkcijų reikšmių rėžių įverčiai. Eksperimento rezultatai parodė, kad tikslinga naudoti pasiūlytą balansuojamą intervalų aritmetiką intervaliniame globaliame optimizavime.

Funkcijų reikšmių rėžių įvertinimo naudojant intervalų aritmetiką būdai buvo apžvelgti ir palyginti [18]. Įvairių testo funkcijų rėžiai buvo įvertinti atsitiktiniuose posričiuose ir įvertinta, kiek vidutiniškai siauresni rėžiai už standartinius intervalinius rėžius gaunami, kai jų sėkmės tikimybė yra apie 1. Balansuojama atsitiktine ir balansuojama (deterministine) intervalų aritmetika gaunamų rėžių palyginimas yra pateiktas 1 lentelėje: kuo pateikti skaičiai yra didesni, tuo gaunami rėžiai yra siauresni. Balansuojama intervalų aritmetika gaunami rėžiai nedaug nusileidžia balansuojama atsitiktine intervalų aritmetika gaunamiems rėžiams, tačiau jų privalumas – jiems reikia atlikti mažiau skaičiavimų, be to rėžių įvertinimas neparemtas prielaida apie normaliuosius pasiskirstymus.

Pasiūlytų aritmetikų taikymo sritis neapsiriboja globaliu optimizavimu. Jos gali būti naudojamos ir kituose intervaliniuose skaičiavimo metodų taikymuose, pavyzdžiui, tiesinių intervalinių lygčių sistemų sprendimuose [15]. Balansuojama atsitiktine intervalų aritmetika gauti sprendinių rėžių įverčiai yra beveik dvigubai siauresni už rėžius, rastus naudojant standartinę intervalų aritmetiką. Tai įvertinant buvo pasiūlyta taikyti balansuojamą atsitiktinę intervalų aritmetiką praktiniame cheminių procesų inžinerijos uždavinyje – sujungtų reaktorių sistemos, pavaizduotos 1 paveiksle, rimities būsenos koncentracijų nustatyme naudojant masių balansą, kai matuojami medžiagų srautai yra riboto tikslumo, kas visada būna praktikoje.



1 Pav.: Sujungtų reaktorių sistema su riboto tikslumo matuojamų medžiagų srautais

4 Daugiamačių skalių panaudojimas daugiamačių duomenų analizei

Eksperimentiniai mokslai surenka daug duomenų, kurie vėliau yra analizuojami įvairiais būdais. Dažnai norimoms žinioms išskirti iš duomenų matematiniai metodai turi būti derinami su tyrėjo patirtimi ir intuicija. Žmonių euristiniai sugebėjimai gerai išvystyti objektų analizei mažo matavimo – vienmatėje, dvimatėje ir trimatėje, erdvėje. Daugiamačių duomenų atvaizdavimas mažo matavimo erdvėje labai pagelbėja euristinei analizei. Daugiamatės skalės (DS) naudojamos daugiamačių duomenų struktūros analizei atvaizduojant juos dvimatėje arba trimatėje erdvėje. DS yra naudojamos daugelyje taikymų.

DS metodas sprendžia, kaip n artumo duomenimis apibrėžtų objektų gali būti patikimai atvaizduoti taškais mažo matavimo erdvėje. Objektų artumas yra apibrėžiamas jų porų skirtingumu. i -ojo ir j -ojo objektų skirtingumas yra apibrėžtas realiu skaičiumi δ_{ij} , $i, j = 1, \dots, n$. Ieškoma taškų m -matėje erdvėje $\mathbf{x}_i \in \mathbf{R}^m$, $i = 1, \dots, n$, tarp kurių atstumai atitiktų duotus skirtingumus. Atvaizdavimo kokybė yra matuojama įtempimo funkcija, kuri lygina objektų skirtingumą ir atstumą tarp juos atvaizduojančių taškų. Objektų atvaizdžiai gali būti randami minimizuojant šią funkciją: turi būti rastos tokios n taškų koordinatės m -matėje erdvėje, kad įtempimo funkcija būtų minimali. Dažniausiai naudojama mažiausių kvadratų *STRESS* įtempimo funkcija

$$S(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij} (d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \delta_{ij})^2,$$

čia $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$; $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ žymi atstumą tarp taškų $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im})$ ir $\mathbf{x}_j = (x_{j1}, x_{j2}, \dots, x_{jm})$; $w_{ij} > 0$ yra teigiami svoriai, $i, j = 1, \dots, n$. Paprastai

$d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i) = 0$, $\delta_{ij} = \delta_{ji}$, $\delta_{ii} = 0$, $w_{ij} = w_{ji}$.

Konkrečiau kriterijaus nustatymui, norma \mathbf{R}^m erdvėje turi būti pasirinkta apibrėžiant atstumų $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ skaičiavimo formulę. Dažniausiai naudojami Minkovskio atstumai:

$$d_r(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \left(\sum_{k=1}^m |x_{ik} - x_{jk}|^r \right)^{1/r}.$$

Ši formulė apibrėžia Euklido atstumus, kai $r = 2$, ir miesto kvartalų atstumus, kai $r = 1$. Dažniausiai DS naudojama Euklido norma. Tačiau DS su kitokiomis Minkovskio normomis sprendimo erdvėje gali būti informatyvesnės. Kai uždavinio duomenys yra daugiamaciai taškai, skirtingumai gali būti įvertinti apskaičiuojant atstumus tarp taškų daugiamatėje duomenų erdvėje.

Įtempimo funkciją minimizuoti yra sudėtinga, kadangi:

- yra daug lokalių minimumų taškų, o svarbu rasti globalų minimumą ir jį atitinkantį atvaizdį;
- praktiniai uždaviniai paprastai yra daugiamaciai, optimizavimo kintamųjų skaičius yra lygus $n \times m$;
- įtempimo funkcija yra ne visur diferencijuojama;
- įtempimo funkcija yra invariantinė perkėlimui, sukimui ir atspindžiams.

STRESS funkcija su miesto kvartalų norma gali būti nediferencijuojama netgi minimumo taške [1]. Dėl to tokios funkcijos minimizavimas yra ypač sudėtingas. Standartinių lokalių paieškų panaudojimas globalaus optimizavimo pagreitinimui yra netinkamas. Dviejų lygių algoritmas DS $m = 2$ su miesto kvartalų norma buvo pasiūlytas [1]. Vėliau šis algoritmas buvo apibendrintas atvejui su bet koku m . Algoritmas naudoja kombinatorinę globalią paiešką ir lokalią paiešką, sukurtą specialiai *STRESS* funkcijai su miesto kvartalų norma išnaudojant dalimis kvadratinę tokios funkcijos struktūrą.

Kai naudojama miesto kvartalų norma, *STRESS* gali būti performuluota šitaip:

$$S(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij} \left(\sum_{k=1}^m |x_{ik} - x_{jk}| - \delta_{ij} \right)^2.$$

Pažymėkime $A(\mathbf{P})$ aibę $(n \times m)$ -matėje vektorinėje erdvėje:

$$A(\mathbf{P}) = \{\mathbf{X} | x_{ik} \leq x_{jk}, \text{ jei } p_{ki} < p_{kj}, i, j = 1, \dots, n, k = 1, \dots, m\},$$

čia $\mathbf{P} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_m)$, $\mathbf{p}_k = (p_{k1}, p_{k2}, \dots, p_{kn})$ yra m natūrinių skaičių $1, \dots, n$ kėlinių.

Atvejui $\mathbf{X} \in A(\mathbf{P})$, *STRESS* gali būti perrašyta:

$$S(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij} \left(\sum_{k=1}^m (x_{ik} - x_{jk}) z_{kij} - \delta_{ij} \right)^2,$$

čia

$$z_{kij} = \begin{cases} 1, & p_{ki} > p_{kj}, \\ -1, & p_{ki} < p_{kj}. \end{cases}$$

Kadangi funkcija $S(\mathbf{X})$ yra kvadratinė briaunainyje $\mathbf{X} \in A(\mathbf{P})$, minimizavimo uždavinys

$$\min_{\mathbf{X} \in A(\mathbf{P})} S(\mathbf{X})$$

yra kvadratinio programavimo uždavinys:

$$\begin{aligned} \min & \left[- \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n x_{ik} \sum_{j=1}^n w_{ij} \delta_{ij} z_{kij} + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} \left(\sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m \sum_{i=1}^n x_{ik} x_{il} \sum_{t=1, t \neq i}^n w_{it} z_{kit} z_{lit} - \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n x_{ik} x_{jl} w_{ij} z_{kij} z_{lij} \right) \right] \\ \text{s.t. } & \sum_{i=1}^n x_{ik} = 0, \quad k = 1, \dots, m, \\ & x_{\{j|p_{kj}=i+1\},k} - x_{\{j|p_{kj}=i\},k} \geq 0, \quad k = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n-1. \end{aligned}$$

Briaunainis $\mathbf{X} \in A(\mathbf{P})$ yra apibrėžtas tiesinėmis nelygybėmis. Lygybiniai ribojimai užtikrina sprendinio centravimą pagal kiekvieną koordinatę, tam kad būtų išvengta perkėlimo invariantiškumo.

Atsižvelgiant į minimizavimo uždavinio struktūrą, sudarytas dviejų lygių minimizavimo algoritmas: kombinatorinis uždavinys sprendžiamas viršutiniame lygyje ir kvadratinio programavimo uždavinys sprendžiamas apatiniame lygyje:

$$\min_{\mathbf{P}} \mathbf{S}(\mathbf{P}),$$

$$\text{s.t. } \mathbf{S}(\mathbf{P}) = \min_{\mathbf{X} \in A(\mathbf{P})} S(\mathbf{X}).$$

Viršutinio lygio uždavinio tikslo funkcija yra apibrėžta m natūrinių skaičių $1, \dots, n$ kėlinių aibėje. Kombinatorinis uždavinys gali būti sprendžiamas įvairiais algoritmais, šiame darbe buvo tiriama atsitiktinė paieška, lokalsios paieškos iš atsitiktinių sprendinių ir evoliucinė paieška, kuri pasirodė esanti tinkamiausia.

Evoliucinės paieškos idėja – laikyti geriausius *STRESS* reikšmės prasme sprendinius, kurių kryžminimas gali sukurti geresnius sprendinius. Kėliniai \mathbf{P} interpretuojami kaip individų chromosomos. Pradinės chromosomos yra sugeneruojamos atsitiktinai ir pagerinamos naudojant lokalią paiešką. Populiacija vystosi generuojant dviejų atsitiktinių esamos populiacijos individų su chromosomomis $\hat{\mathbf{P}}$ ir $\tilde{\mathbf{P}}$ palikuonį. Palikuonio chromosoma yra nustatoma formule

$$\mathbf{P}_k = (\hat{p}_{k1}, \dots, \hat{p}_{k\xi_1}, \tilde{p}_{k1}, \dots, \tilde{p}_{k(\xi_2-\xi_1)}, \hat{p}_{k\xi_2}, \dots, \hat{p}_{kn}), k = 1, \dots, m,$$

kur ξ_1, ξ_2 yra du tolygiai pasiskirstę atsitiktiniai skaičiai $1, \dots, n$; \tilde{p}_{ki} yra skaičiai $1, \dots, n$ nepriklausantys aibei $(\hat{p}_{k1}, \dots, \hat{p}_{k\xi_1}, \hat{p}_{k\xi_2}, \dots, \hat{p}_{kn})$, bet surikiuoti taip, kaip jie surikiuoti $\tilde{p}_{k1}, \dots, \tilde{p}_{kn}$. Palikuonis pagerinamas naudojant lokalią paiešką. Palikuonio prisitaikomumas yra apibrėžiamas atitinkančio apatinio lygio kvadratinio programavimo uždavinio minimumo reikšme. Jei palikuonis yra geresnis už blogiausią populiacijos individą, jis pastarąjį pakeičia. Minimizavimas tęsiamas generuojant naujus palikuonis ir stabdomas po iš anksto nustatyto laiko t_c .

Atvaizdžio tikslumas negali būti numatytas teoriškai dėl sudėtingo globalaus optimizavimo uždavinio. Dėl to naudojamas eksperimentinis tyrimas. Gerai suprantamų objektų atvaizdžiai gali būti lyginami vertinant, kaip juose išlieka objektų savybės. Kiekybiniam įvertinimui naudojama santykinė klaida

$$f(\mathbf{X}) = \sqrt{S(\mathbf{X}) / \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij} \delta_{ij}^2},$$

o ne *STRESS* funkcijos reikšmė, kad būtų sumažinta objektų skaičiaus ir duomenų erdvės normų įtaka. Globalaus optimizavimo algoritmas vertinamas dviem kriterijais: geriausias globalaus minimumo įvertis f^* 100 paieškų po 10 sekundžių ir paieškų dalis procentais *perc*, kai globalaus minimumo įvertis yra neblogesnis negu $f^* + 10^{-4}$.

Eksperimentiniams tyrimams reikalingos kelios gerai suprantamoms geometrinėms figūroms priklausančių daugiamačių taškų aibės, pavyzdžiui daugiamačių simpleksų ir kubų viršūnės. Skirtingumai tarp viršūnių yra matuojami atstumu daugiamatėje duomenų erdvėje. Skirtingo sudėtingumo globalaus optimizavimo uždaviniai gali būti sudaryti keičiant duomenų erdvės matą \dim ir tuo pačiu geometrinių figūrų viršūnių skaičių n .

Daugiamatžio simplekso viršūnių skaičius yra $n = \dim + 1$, o globalaus optimizavimo kintamųjų skaičius yra $N = m \times (\dim + 1)$. Vienetinio simplekso viršūnių koordinatės:

$$v_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{jei } i = j + 1, \\ 0, & \text{kitu atveju,} \end{cases} \quad \left| \begin{array}{l} i = 1, \dots, \dim + 1, \\ j = 1, \dots, \dim. \end{array} \right.$$

Tokio simplekso viršūnė koordinacių pradžioje yra vienodai nutolusi nuo visų kitų viršūnių, be to visos kitos viršūnės yra vienodai nutolusios nuo viena kitos.

Daugiamačio kubo viršūnių skaičius $n = 2^{\dim}$, o globalaus optimizavimo kintamųjų skaičius $N = m \times 2^{\dim}$. i -osios dim-mačio kubo viršūnės koordinatės yra lygios 0 arba 1, jas nustato dvejetainis viršūnės numerio $i = 0, \dots, n - 1$ kodas. Kubo savybė – visos viršūnės vienodai nutolusios nuo kubo centro, viršūnės sudaro viršūnių grupes, sudarančias briaunas, šonus ir panašiai. Lyginant geometrinių figūrų atvaizdžius, privalumas suteikiamas tiems, kuriuose yra matomos numanomos daugiamačių figūrų savybės.

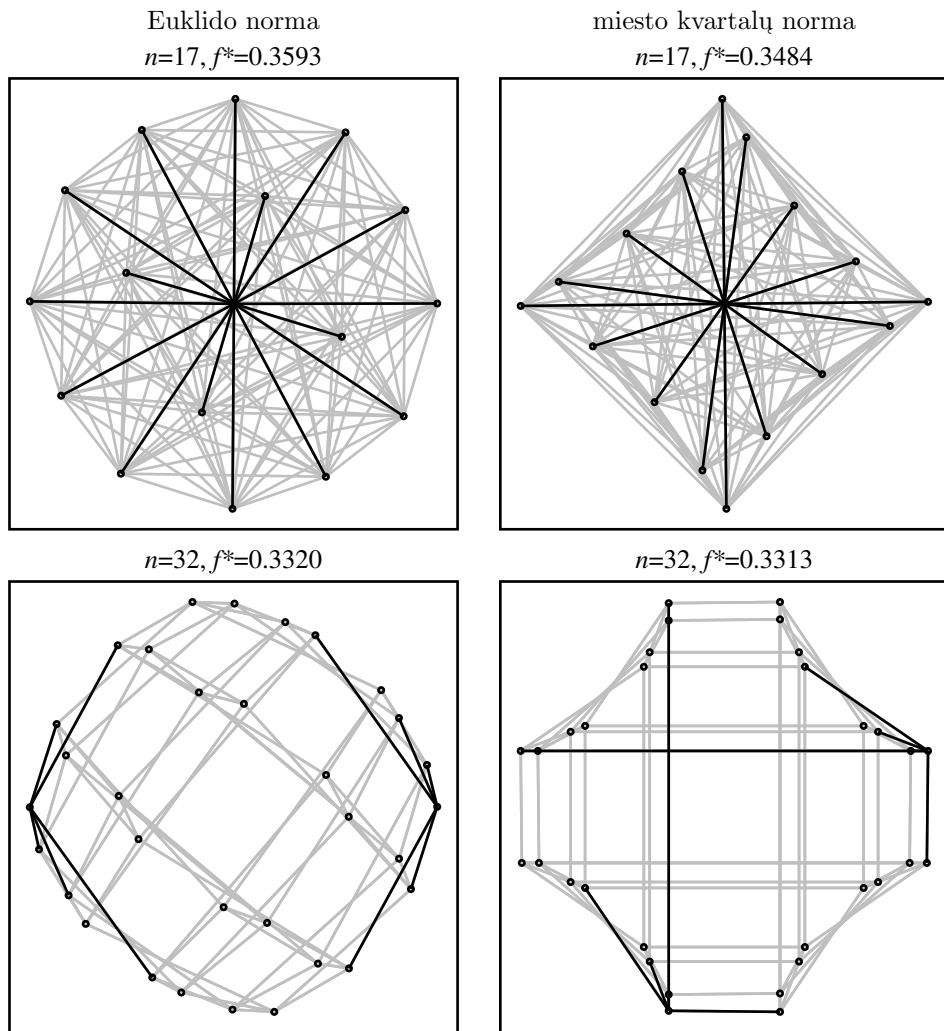
Geometrinių figūrų ir praktinių duomenų aibių atvaizdžiai DS su Euklido ir miesto kvartalų normomis buvo palyginti [22]. Pavyzdžiui, 2 paveiksle pateiktos 16-mačio vienetinio simplekso ir 5-mačio kubo viršūnių atvaizdžiai dvimatėse skalėse su Euklido ir miesto kvartalų normomis. Figūrų viršūnės vaizduojamos taškais. Gretimos viršūnės yra sujungtos linijomis. Kai kurie sujungimai yra tamsesni. Simplekso atveju jie rodo sujungimus su viršūne koordinacių pradžioje, kubo atveju jie rodo sujungimus su dviem priešingomis viršūnėmis.

Simplekso viršūnė koordinacių pradžioje yra atvaizduota centre. Kai miesto kvartalų norma yra naudojama DS, kitų viršūnių atvaizdžiai sudaro į kvadratą su vertikalia įstrižaine panašią figūrą, taigi jos visos yra nutolę nuo viršūnės koordinacių pradžioje panašiu atstumu, nes kvadrato su vertikalia įstrižaine kraštinių taškai yra vienodai nutolę nuo centro, kai miesto kvartalų norma yra naudojama. Atvaizdžiuose DS su Euklido norma kitos viršūnės sudaro apskritimus, tačiau skirtinguose apskritimuose esančios viršūnės yra skirtingai nutolę nuo centro.

Daugiamačio kubo viršūnių atvaizdžiai DS su miesto kvartalų norma irgi sudaro į kvadratą su vertikalia įstrižaine panašią figūrą, taigi visos viršūnės yra nutolę nuo centro panašiu atstumu, nes miesto kvartalų norma yra naudojama. DS su Euklido norma tokia kubų savybė neišlieka. DS su abejomis normomis kubo viršūnių atvaizdžiai suformuoja mažesnio matavimo kubus atitinkančias grupes – briaunas ir šonus.

Santykinės klaidos f reikšmės yra pateiktos virš paveikslėlių. Jos panašios DS su abejomis normomis, tačiau jos truputį mažesnės, kai miesto kvartalų norma yra naudojama.

Kadangi DS yra sudėtingi globalaus optimizavimo uždaviniai, jų sprendimas reikalauja nemažai laiko. Panaudojant lygiagrečiuosius skaičiavimus, sprendimo laikas gali būti sutrumpintas ir didesni uždaviniai išspręsti. Buvo sukurtas lygiagretusis algoritmas [3, 12], realizuojantis evoliucinį metodą viršutinio lygio kombinatorinio uždavinio sprendimui. Kiekviename procesoriuje naudojama atskira populiacija. Kiekvienas procesorius vykdo tą patį evoliucinį algoritmą, tik su skirtingomis atsitiktinių skaičių sekomis, inicijuojant skirtingas, nuo procesoriaus numerio priklausančias, atsitiktinių skaičių generatorių sekas. Skirtingų procesorių rezultatai surenkami pabaigus skaičiavimus. Procesorių



2 Pav.: 16-mačio simplekso ir 5-mačio kubo viršūnių atvaizdžiai dvimatėse skalėse su Euklido ir miesto kvartalų normomis

bendravimui naudojamas standartizuotas pranešimų persiuntimo protokolas MPI. Šio lygiagretaus algoritmo rezultatai 2 lentelėje akivaizdžiai rodo pagerėjimą naudojant kelis procesorius. Šiuo algoritmu buvo rastas geresnis Morzės kodų atskyrimo uždavinio sprendinys negu skelbti literatūroje.

2 Lentelė: Hibridinio algoritmo daugiamatėms skalėms nuosekliosios ir lygiagrečiosios versijų palyginimas

n	1 procesorius				8 procesoriai			
	f_{min}^*	f_{mean}^*	f_{max}^*	$perc$	f_{min}^*	f_{mean}^*	f_{max}^*	$perc$
daugiamačiai kubai								
8	0.2245	0.2245	0.2245	100	0.2245	0.2245	0.2245	100
16	0.2965	0.2965	0.2969	96	0.2965	0.2965	0.2965	100
32	0.3313	0.3317	0.3354	14	0.3313	0.3314	0.3316	55
64	0.3514	0.3577	0.3784	1	0.3513	0.3516	0.3522	7
daugiamačiai simpleksai								
6	0.1869	0.1869	0.1869	100	0.1869	0.1869	0.1869	100
7	0.2247	0.2247	0.2247	100	0.2247	0.2247	0.2247	100
8	0.2569	0.2569	0.2569	100	0.2569	0.2569	0.2569	100
9	0.2759	0.2759	0.2759	100	0.2759	0.2759	0.2759	100
10	0.2936	0.2936	0.2936	100	0.2936	0.2936	0.2936	100
11	0.3058	0.3058	0.3058	100	0.3058	0.3058	0.3058	100
12	0.3167	0.3167	0.3167	100	0.3167	0.3167	0.3167	100
13	0.3249	0.3249	0.3249	100	0.3249	0.3249	0.3249	100
14	0.3325	0.3325	0.3330	93	0.3325	0.3325	0.3325	100
15	0.3384	0.3386	0.3391	70	0.3384	0.3384	0.3384	100
16	0.3439	0.3443	0.3448	25	0.3439	0.3439	0.3443	94
17	0.3484	0.3490	0.3497	8	0.3484	0.3486	0.3490	56
18	0.3526	0.3532	0.3538	3	0.3526	0.3529	0.3531	17
19	0.3562	0.3568	0.3575	2	0.3562	0.3565	0.3568	5
20	0.3597	0.3602	0.3607	4	0.3595	0.3599	0.3602	2
21	0.3625	0.3630	0.3636	4	0.3623	0.3627	0.3631	2

DS buvo pritaikytos farmakologinio sąryšio duomenų vizualizavimui [13]. Farmakologinio sąryšio duomenys yra pateikti matrica, kurios viena dimensija atitinka mažesniąsias molekules, tirtas eilėje eksperimentų, kita atitinka skirtingus baltymus, prie kurių pastarosios prisiriša. Nepanašumas tarp baltymų yra įvertinamas atstumu tarp baltymus atitinkančių \log_{10} -transformuotų vektorių. Nepanašumas tarp mažesniųjų molekulių yra įvertinamas atstumu tarp jas atitinkančių \log_{10} -transformuotų vektorių. Farmakologinių duomenų analizė suteikia žinias naujų vaistų kūrimui, baltymų struktūrų nustatymui. Farmakologinio sąryšio duomenų atvaizdžiai DS su Euklido ir miesto kvartalų normomis buvo palygintos. Nors atvaizdžiuose DS su abejomis normomis yra matomos panašios duomenų savybės, kai kurios savybės yra labiau išryškėjusios, kai miesto kvartalų norma yra naudojama. Be to santykinės klaidos reikšmės yra mažesnės, kai miesto kvartalų norma yra naudojama. Tačiau DS su miesto kvartalų

norma uždaviniai yra sunkiau sprendžiami, kas buvo pastebėta ne tik šiems, bet ir kitiems uždaviniams.

Naudojant DS su miesto kvartalų norma algoritmą, buvo eksperimentiškai ištirta, kaip santykinės klaidos skiriasi priklausomai nuo sprendimo erdvės mato m . Santykinės klaidos mažėja didinant sprendimo erdvės matą. $m = 3$ mato sprendimo erdvė atrodo tinkamiausia praktinių uždavinių DS. Trimatėse skalėse turėtų išlikti daugiau duomenų savybių negu dvimatėse skalėse. Stereo ekranų ir kitų erdvinio vaizdavimo priemonių populiarėjimas daro trimates skales ypač patrauklias. Tačiau yra sunku pademonstruoti trimačių skalių privalumus popieriuje.

Klasikinis erdviųjų kūnų vaizdavimo ortogonalio ir izometrine projekcijomis būdas yra ne toks vaizdus, kaip panaudojant stereo ekranus, tačiau net ir iš projekcijų galima įvertinti kai kurias erdviųjų objektų savybes. Daugiamatčių geometrinių figūrų trimatės skalės yra pavaizduotos ortogonalio ir izometrine projekcijomis ir aptartos [20].

5 Globalaus optimizavimo algoritmų taikymas praktiniams uždaviniams spręsti

Intervalų metodų inspiruotu euristiniu globalaus optimizavimo algoritmu buvo išspręsti tiesinio žmogaus žandikaulio augimo modelio sudarymo ir stabilios molekulinės struktūros nustatymo uždaviniai [26], kurių nepajėgė išspręsti standartinis intervalinis globalaus optimizavimo algoritmas.

Globalaus optimizavimo algoritmas su balansuojama atsitiktine intervalų aritmetika buvo pritaikytas cheminių procesų tinklo sintezės [23] ir rinkos modelio parametrų įvertinimo [2] uždaviniams. Buvo parodyta, kad biomasės auginimo proceso optimalaus valdymo uždavinys gali būti sėkmingai sprendžiamas kaip minimumo paieškos uždavinys baigtinio matavimų skaičiaus erdvėje [21].

Daugiamatčių skalių su miesto kvartalų norma dviejų lygių hibridinis algoritmas buvo pritaikytas farmakologinio sąryšio duomenų [13] ir Morzės kodų atskyrimo duomenų [3] vizualizavimui. Šiuo algoritmu rastas geresnis Morzės kodų atskyrimo uždavinio sprendinys negu skelbti literatūroje.

6 Išvados

Balansuojama atsitiktinė intervalų aritmetika yra tinkama daugiamatčių matematinių funkcijų ir praktinių globalaus optimizavimo uždavinių tikslo funkcijų režių įvertinimui. Tikslo funkcijos režių siaurumas labai įtakoja globalaus optimizavimo algoritmų greitį, todėl pasiūlytos intervalų aritmetikos panaudojimas yra aktualus, ypač uždaviniams, kurių režiai apskaičiuoti standartinė intervalų aritmetika yra per platus. Globalaus optimizavimo algoritmas su balansuojama

atsitiktine intervalų aritmetika yra 5 kartus greitesnis negu algoritmas su standartine intervalų aritmetika, nors juo sprendiniai randami ne garantuotai, o su artima vienetui tikimybe.

Balansuojama atsitiktinė intervalų aritmetika gali būti naudojama ne tik globaliame optimizavime, bet ir kituose intervaliniuose skaičiavimo metodų taikymuose, pavyzdžiui, tiesinių intervalinių lygčių sistemų sprendimuose.

Daugiamatėse skalėse su miesto kvartalų norma išryškėja daugiau geometrinių figūrų ir praktinių duomenų aibių savybių negu daugiamatėse skalėse su Euklido norma. Be to, santykinės paklaidos yra mažesnės, kai naudojama miesto kvartalų norma.

Pasiūlytu daugiamatčių skalių su miesto kvartalų norma lygiagrečiuoju dviejų lygių algoritmu (derinančiu evoliucinę kombinatorinę paiešką su kvadratinio programavimu pagrįsta lokalia paieška) randami geresni praktinių uždavinių sprendiniai negu skelbti literatūroje.

7 Habilitacijos procedūrai teikiami mokslo darbai

Straipsniai leidiniuose, įrašytuose į Mokslinės informacijos instituto pagrindinių leidinių sąrašą

- [1] Žilinskas, A.; Žilinskas, J. Two level minimization in multidimensional scaling // Journal of Global Optimization. ISSN 0925-5001. Spaudoje, publikuotas internete (2007).
- [2] Žilinskas, J.; Bogle, I. D. L. Balanced random interval arithmetic in market model estimation // European Journal of Operational Research. ISSN 0377-2217. Vol. 175, Iss. 3 (2006). p. 1367–1378.
- [3] Žilinskas, A.; Žilinskas, J. Parallel hybrid algorithm for global optimization of problems occurring in MDS based visualization // Computers & Mathematics with Applications. ISSN 0898-1221. Vol. 52, Iss. 1-2 (2006). p. 211–224.
- [4] Žilinskas, J. Estimation of functional ranges using standard and inner interval arithmetic // Informatica. ISSN 0868-4952. Vol. 17, Iss. 1 (2006). p. 125–136.
- [5] Žilinskas, A.; Žilinskas, J. On efficiency of tightening bounds in interval global optimization // Lecture Notes in Computer Science. ISSN 0302-9743. Vol. 3732 (2006). p. 197–205.
- [6] Žilinskas, A.; Žilinskas, J. On underestimating in interval computations // BIT Numerical Mathematics. ISSN 0006-3835. Vol. 45, Iss. 2 (2005). p. 415–427.
- [7] Žilinskas, J. Comparison of packages for interval arithmetic // Informatica. ISSN 0868-4952. Vol. 16, Iss. 1 (2005). p. 145–154.
- [8] Žilinskas, J.; Bogle, I. D. L. Balanced random interval arithmetic // Computers & Chemical Engineering. ISSN 0098-1354. Vol. 28, Iss. 5 (2004). p. 839–851.
- [9] Žilinskas, J.; Bogle, I. D. L. Evaluation ranges of functions using balanced random interval arithmetic // Informatica. ISSN 0868-4952. Vol. 14, Iss. 3 (2003). p. 403–416.
- [10] Žilinskas, A.; Žilinskas, J. Global optimization based on a statistical model and simplicial partitioning // Computers & Mathematics with Applications. ISSN 0898-1221. Vol. 44, Iss. 7 (2002). p. 957–967.

Straipsniai leidiniuose, įrašytuose į Mokslinės informacijos instituto konferencijų darbų sąrašą

- [11] Baravykaitė, M.; Žilinskas, J. Implementation of parallel optimization algorithms using generalized branch and bound template // Bogle, I. D. L.; Žilinskas, J. (redaktoriai), *Computer Aided Methods in Optimal Design and Operations*. Series on Computers and Operations Research. Vol. 7. World Scientific, 2006. ISBN 981-256-909-X. p. 21–28.
- [12] Varoneckas, A.; Žilinskas, A.; Žilinskas, J. Multidimensional scaling using parallel genetic algorithm // Bogle, I. D. L.; Žilinskas, J. (redaktoriai), *Computer Aided Methods in Optimal Design and Operations*. Series on Computers and Operations Research. Vol. 7. World Scientific, 2006. ISBN 981-256-909-X. p. 129–138.
- [13] Žilinskas, J. Multidimensional scaling in protein and pharmacological sciences // Bogle, I. D. L.; Žilinskas, J. (redaktoriai), *Computer Aided Methods in Optimal Design and Operations*. Series on Computers and Operations Research. Vol. 7. World Scientific, 2006. ISBN 981-256-909-X. p. 139–148.
- [14] Žilinskas, J.; Bogle, I. D. L. Generalised interval methods in optimal design // Barbosa-Povoa, A.; Matos, H. (redaktoriai), *European Symposium on Computer-Aided Process Engineering - 14*, Lisbon, Portugal. *Computer-Aided Chemical Engineering*. Vol. 18. ISSN 1570-7946. Elsevier, 2004. p. 313–318.
- [15] Žilinskas, J.; Bogle, I. D. L. Balanced random and adaptive interval arithmetic for systems of linear interval equations // Parmee, I. C. (redaktorius), *Adaptive Computing in Design and Manufacture VI*, Bristol, UK. Springer, 2004. ISBN 1-85233-829-6. p. 347–358.
- [16] Žilinskas, J.; Bogle, I. D. L. On the generalization of a random interval method // Kraslawski, A.; Turunen, I. (redaktoriai), *European Symposium on Computer-Aided Process Engineering - 13*, Lappeenranta, Finland. *Computer-Aided Chemical Engineering*. Vol. 14. ISSN 1570-7946. Elsevier, 2003. p. 989–994.
- [17] Žilinskas, J.; Bogle, I. D. L. Experimental investigation of balanced random interval arithmetic // Pranevičius, H.; Zavadskas, E.; Rapp, B. (redaktoriai), *Modelling and Simulation of Business Systems: International Conference*, May 13-14, 2003, Vilnius, Lithuania. Technologija, 2003. ISBN 9955-09-420-6. p. 62–66.

Straipsniai leidiniuose, įtrauktuose į tarptautines mokslo duomenų bazes arba išleistuose pasaulinių mokslo draugijų

- [18] Žilinskas, J.; Bogle, I. D. L. A survey of methods for the estimation ranges of functions using interval arithmetic // Törn, A.; Žilinskas, J. (redaktoriai), *Models and Algorithms for Global Optimization*. Springer Optimization and Its Applications. Vol. 4. ISSN 1931-6828. Springer, 2007. p. 97–108. [SpringerLink].
- [19] Paulavičius, R.; Žilinskas, J. Analysis of different norms and corresponding Lipschitz constants for global optimization // *Technological and Economic Development of Economy*. ISSN 1392-8619. Vol. 12, Iss. 4 (2006). p. 301–306. [Business Source Complete, ICONDA].
- [20] Žilinskas, A.; Žilinskas, J. On visualization of multidimensional data using three-dimensional embedding space // *Technological and Economic Development of Economy*. ISSN 1392-8619. Vol. 12, Iss. 4 (2006). p. 353–359. [Business Source Complete, ICONDA].
- [21] Levišauskas, D.; Galvanauskas, V.; Simutis, R.; Žilinskas, A.; Žilinskas, J. Optimization of biomass production in fed-batch culture by feed and dilution control actions // *Information Technology and Control*. ISSN 1392-124X. Vol. 35, Iss. 4 (2006). p. 383–390. [INSPEC].
- [22] Žilinskas, A.; Žilinskas, J. On multidimensional scaling with Euclidean and city block metrics // *Technological and Economic Development of Economy*. ISSN 1392-8619. Vol. 12, Iss. 1 (2006). p. 69–75. [Business Source Complete, ICONDA].
- [23] Žilinskas, J.; Bogle, I. D. L. Stochastic global optimisation in chemical engineering // *7th World Congress of Chemical Engineering*, July 10-14, 2005, Glasgow, UK. 2005. ISBN 0-85295-494-8. p. 9.
- [24] Žilinskas, J. A package for development of algorithms for global optimization // *10th International Conference Mathematical Modelling and Analysis*, June 1-5, 2005, Trakai, Lithuania. Technika, 2005. ISBN 9986-05-924-0. p. 185–190. [MathSciNet].
- [25] Žilinskas, J. Parallel algorithms for Lipschitz global optimization with simplicial partitioning // *Information Technology and Control*. ISSN 1392-124X. Vol. 4, Iss. 25 (2002). p. 31–36. [INSPEC].

- [26] Žilinskas, J. Application of black box global optimization algorithm inspired by interval methods for practical problems // Information Technology and Control. ISSN 1392-124X. Vol. 3, Iss. 24 (2002). p. 76–82. [INSPEC].

8 Redaguotos knygos

- [27] Törn, A.; Žilinskas, J. (redaktoriai). Models and Algorithms for Global Optimization. Springer, 2007. ISBN 0-387-36720-9.
- [28] Bogle, I. D. L.; Žilinskas, J. (redaktoriai). Computer Aided Methods in Optimal Design and Operations. World Scientific, 2006. ISBN 981-256-909-X.

9 Kita cituojama literatūra

- [29] Moore, R. E. Interval Analysis. Prentice-Hall, 1966.
- [30] Kreinovich, V., Nesterov, V., and Zheludeva, N. Interval methods that are guaranteed to underestimate (and the resulting new justification of Kaucher arithmetic) // Reliable Computing. Vol. 2 (1996). p. 119–124.

Julius Žilinskas

Globalaus optimizavimo algoritmų sudarymas, tyrimas ir taikymas

Habilitacijos procedūrai teikiamų mokslo darbų apžvalga

Fiziniai mokslai, informatika (09 P)

Tiražas 15 egz. Išleido Matematikos ir informatikos institutas