

© 2020 г. А.В. ПАНТЕЛЕЕВ, д-р физ.-мат. наук (avpanteleev@inbox.ru),
А.В. ЛОБАНОВ (lobbsasha@mail.ru)
(Московский авиационный институт)

МИНИПАКЕТНЫЙ МЕТОД АДАПТИВНОГО СЛУЧАЙНОГО ПОИСКА ДЛЯ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Рассматривается один из возможных способов решения задачи оценки неизвестных параметров динамических моделей, описываемых дифференциально-алгебраическими уравнениями. Оценка параметров производится по результатам наблюдений за поведением математической модели. Значения параметров находятся в результате минимизации критерия, описывающего суммарное квадратическое отклонение значений координат вектора состояния от полученных при измерениях точных значений в различные моменты времени. На значения параметров наложены ограничения параллелепипедного типа. Для решения задачи оптимизации предлагается пакетный метод адаптивного случайного поиска, развивающий идеи методов оптимизации, применяемых в машинном обучении. Предложенный метод применен при решении трех модельных задач, их результаты сравнивались с полученными при помощи градиентных методов оптимизации, используемых в процедурах машинного обучения, и метаэвристических алгоритмов.

Ключевые слова: параметрическая идентификация, динамическая система, градиентные методы оптимизации, минипакетный метод, адаптивный случайный поиск.

DOI: 10.31857/S0005231020110070

1. Введение

В статье рассматривается математическая модель динамической системы с неизвестными параметрами, описываемая системой дифференциально-алгебраических уравнений. На каждый параметр могут быть наложены ограничения в виде отрезка возможных значений с фиксированными концами. Известны результаты наблюдения за состоянием системы в определенные моменты времени функционирования системы. Целевая функция представляется в виде суммы квадратов отклонений значений всех компонент решения системы дифференциальных уравнений в заданные моменты времени от полученных в результате точных измерений значений координат вектора состояния модели. Ставится задача минимизации целевой функции на множестве возможных значений параметров, удовлетворяющих заданным ограничениям.

Большинство публикаций в области идентификации параметров основано на вероятностном подходе (метод максимального правдоподобия, построение доверительных интервалов и т.д.) [1, 2]. Другим направлением исследований

является применение методов оптимизации [3, 4]. Применяются метод коллокаций совместно с линеаризацией и последовательным квадратичным программированием, методы Гаусса–Ньютона, генетические алгоритмы с уточнением на основе алгоритма Левенберга–Марквардта, метод ветвей и границ, метод Лууса и др. [5–14]. Могут быть использованы классические методы нулевого, первого и второго порядков, однако их реализация при больших объемах измерений может быть затруднительной. Альтернативой является применение метаэвристических алгоритмов [15–17], которые при отсутствии теоретического доказательства сходимости позволяют получить решение достаточно хорошего качества за приемлемое время. Однако с ростом числа переменных их эффективное применение требует значительных вычислительных ресурсов.

Поскольку в решаемой задаче целевая функция представляется суммой некоторых функций, то задача параметрической идентификации может быть решена с помощью алгоритмов оптимизации, применяемых в машинном обучении, в частности градиентных методов оптимизации, таких как: метод стохастического градиентного спуска (Stochastic Gradient Descent, SGD), минипакетный метод градиентного спуска (Mini-batch Gradient Descent), классический метод моментов (Classical Momentum), ускоренный градиентный метод Нестерова (Nesterov Accelerated Gradient, NAG), метод адаптивного градиента (Adaptive Gradient, AdaGrad), метод скользящего среднего (Root Mean Square Propagation, RMSProp), метод адаптивной оценки моментов (Adaptive Moment Estimation, Adam), модификация метода Adam (Adamax), ускоренный по Нестерову метод адаптивной оценки моментов (Nesterov-accelerated Adaptive Moment Estimation, Nadam) [18–21]. В градиентных методах, применяемых в машинном обучении, упрощается процедура поиска за счет вычисления градиента по одной (SGD) или нескольким реализациям (минипакетный метод градиентного спуска), накопления информации о величине составляющей градиента или ее квадрате по соответствующей координате вектора неизвестных параметров, покоординатной организации вычислений за счет применения операций поэлементного деления и умножения векторов (по Адамару).

Предлагается распространить идею методов стохастического и минипакетного градиентного спуска на методы нулевого порядка, использующие при поиске информацию только о величине функции. Среди методов этой группы выбран адаптивный метод случайного поиска [22], хорошо зарекомендовавший себя при решении классических задач оптимизации. При подсчете значения целевой функции предлагается выбирать случайным образом одну, две, три и т.д. реализации, образующие минипакет. За счет этого вычислительные затраты могут существенно сокращаться, однако с уменьшением числа реализаций может убывать точность решения задачи и ухудшаться сходимость. Кроме изменения способа вычисления целевой функции в методе должны учитываться ограничения параллелепипедного типа, накладываемые на множество возможных значений оцениваемых параметров. По сравнению с градиентными процедурами и методами второго порядка (Ньютона, Левенберга–Марквардта, Ньютона–Гаусса) нет необходимости приближенно вычислять градиент и аппроксимацию матрицы Гессе. Статья посвящена исследованию

предложенной минипакетной модификации адаптивного метода случайного поиска в приложении к задачам идентификации параметров динамических систем, описываемых дифференциально-алгебраическими уравнениями.

2. Постановка задачи

Сформулируем задачу параметрической идентификации параметров нелинейных динамических систем по результатам измерений.

Пусть заданы:

целевая функция

$$(1) \quad E(\theta) = \sum_{j=1}^T \sum_{i=1}^n (\hat{x}_i(t_j) - x_i(\theta, t_j))^2 \rightarrow \min_{\theta \in \Theta},$$

и ограничения

$$(2) \quad \begin{cases} \dot{x}(t) = f(t, x(t), \theta), \\ x(t_0) = x_0, \end{cases}$$

$$(3) \quad \theta \in \Theta = \left\{ \theta \in \mathbb{R}^p \mid a_i \leq \theta_i \leq b_i, \ i = 1, \dots, p \right\}.$$

где $x \in \mathbb{R}^n$ – вектор состояния системы, $x_0 \in \mathbb{R}^n$ – вектор начального состояния; θ – вектор неизвестных параметров системы, $\Theta \subseteq \mathbb{R}^p$ – множество возможных значений параметров, определяемое параллелепипедными ограничениями (3); $t \in [t_0, t_T]$ – время функционирования системы, $f(t, x, \theta)$ – известная непрерывно-дифференцируемая вектор-функция. На промежутке времени $[t_0, t_T]$ известны наблюдения $\hat{x}(t)$ за вектором состояния системы в моменты времени $t = t_j \in [t_0, t_T]$, $j = 1, \dots, T$; T – заданное число реализаций. При фиксированном векторе параметров θ можно найти решение $x(\theta, t)$ системы дифференциальных уравнений аналитически или численным методом.

Требуется найти оценку $\hat{\theta}$ вектора неизвестных параметров θ , при которой $x(\theta, t)$ наилучшим образом согласуется с наблюдениями, т.е. обеспечивается минимальное значение целевой функции $E(\theta)$.

3. Минипакетный адаптивный метод случайного поиска

3.1. Стратегия поиска

Задается объем минипакета d ($1 \leq d \leq T$), определяющий способ вычисления целевой функции $E_d(\theta)$ (при $d = T$ справедливо $E_d(\theta) = E(\theta)$). Минипакет образуют попарно несовпадающие моменты времени $t_{q_j} \in [t_0, t_T]$ со случайными номерами. Случайный номер q_j ($j = 1, 2, \dots, T$) выбирается из множества возможных номеров $q_j \in \{1, \dots, T\}$ с равной вероятностью, затем он исключается из множества, и процесс выбора продолжается, т.е. $q_1 \neq q_2 \neq \dots \neq q_d$:

$$(4) \quad E_d(\theta) = \sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^n (\hat{x}_i(t_{q_j}) - x_i(\theta, t_{q_j}))^2 \rightarrow \min_{\theta \in \Theta},$$

где $x_i(\theta, t_{q_j})$ – значение соответствующей координаты решения задачи Коши (2), определяемое одним из известных численных методов в случае системы нелинейных дифференциальных уравнений или аналитически (если возможно) в случае линейных систем. Выражение (4) используется вместо (1) в ходе поиска вектора наилучших оценок $\hat{\theta}_d$.

При решении задачи идентификации параметров возможны следующие варианты задания минипакета:

- фиксировать число d ;
- последовательно увеличивать число d , т.е. $d = 1, 2, \dots, T$ (этот способ применяется в описанной далее методике для проведения сравнения работоспособности метода при различных объемах минипакета);
- изменять объем пакета динамически в зависимости от достижения заданной точности оценивания, определяемой величиной критерия (1).

Если объем минипакета и суммарное число итераций применяемого алгоритма оптимизации фиксированы, то результат применения алгоритма может изменяться при каждом его новом запуске в силу случайного характера выбора моментов t_{q_j} , входящих в минипакет. Поэтому предлагается выполнить заданное число запусков метода $S_{\max}$, найти наилучшую оценку $\hat{\theta}_d$ по всем запускам, а с целью анализа процесса поиска найти оценку среднего значения критерия (4) по всем запускам и оценку среднеквадратического отклонения:

$$(5) \quad \overline{E_d} = \frac{\sum_{s=1}^{S_{\max}} E_d^s}{S_{\max}}, \quad \sigma_{E_d} = \sqrt{\frac{1}{S_{\max} - 1} \sum_{s=1}^{S_{\max}} [E_d^s - \overline{E_d}]^2},$$

где $\hat{\theta}_d^s$ и $E_d^s = E_d(\hat{\theta}_d^s)$ – вектор оценок и значение целевой функции (4), полученные в результате s -го запуска ($s = 1, \dots, S_{\max}$). По завершении $S_{\max}$ запусков алгоритма завершается проход.

Поскольку численные значения показателей $\overline{E_d}$ и σ_{E_d} меняются при реализации независимых проходов, для проведения более детального анализа влияния объема минипакета предлагается провести повторное осреднение по заданному числу проходов $B_{\max}$ и найти оценку математического ожидания и оценку среднеквадратического отклонения оценок средних значений критерия (4):

$$(6) \quad \overline{\overline{E_d}} = \frac{\sum_{b=1}^{B_{\max}} \overline{E_d}^b}{B_{\max}}, \quad \sigma_{\overline{E_d}} = \sqrt{\frac{1}{B_{\max} - 1} \sum_{b=1}^{B_{\max}} [\overline{E_d}^b - \overline{\overline{E_d}}]^2},$$

где $\overline{E_d}^b$ – значение $\overline{E_d}$ после b -го прохода ($b = 1, \dots, B_{\max}$). В итоге можно найти наилучшую оценку $\hat{\theta}_d^*$ после $B_{\max}$ проходов, в каждом из которых реализуется $S_{\max}$ запусков алгоритма минимизации, и ее рассматривать в качестве финального результата поиска. Для анализа результирующей точности оценивания находится значение $E(\hat{\theta}_d^*)$ целевой функции (1).

Для решения задачи (4) применяется известный метод адаптивного случайного поиска [22], относящийся к методам минимизации нулевого порядка (без использования информации о производных), модифицированный проверкой, процедурами обеспечения выполнения ограничений и минипакетным способом вычисления значений целевой функции. При выполнении одного s -го запуска алгоритма выполняются следующие операции.

Задается начальная точка $\theta_d^{s,0}$. Каждая последующая точка находится по формуле

$$\theta_d^{s,k+1} = \theta_d^{s,k} + t_k \xi^k,$$

где $t_k > 0$ – величина шага; ξ^k – случайный вектор единичной длины, определяющий направление поиска; k – номер итерации. На текущей итерации при помощи генерирования случайных векторов ξ^k получают точки, лежащие на гиперсфере радиуса t_k с центром в точке $\theta_d^{s,k}$. Полученная точка проверяется на принадлежность множеству допустимых решений, определяемому параллелепипедными ограничениями (3). Если по какой-либо i -й координате ограничения не выполняются, то возможны несколько последовательных вариантов: генерировать решение заново, взять в качестве координаты положение ближайшей границы отрезка $[a_i, b_i]$, генерировать случайную точку согласно равномерному распределению на отрезке $[a_i, b_i]$. Значение функции находится по формуле (4).

Если значение функции в полученной точке $\theta_d^{s,k+1}$ не меньше, чем в центре, шаг считается неудачным. Если число неудачных шагов из текущей точки достигает некоторого числа M , дальнейший поиск продолжается из той же точки, но с меньшим шагом до тех пор, пока он не станет меньше заранее заданной величины R . Если же значение функции в полученной точке меньше, чем в центре, шаг считается удачным и в найденном направлении делается увеличенный шаг, играющий роль ускоряющего шага (как при поиске по образцу в известном методе конфигураций [22]). Если при этом значение функции снова меньше, чем в центре, направление считается удачным, и дальнейший поиск продолжается из этой точки. Если же значение функции стало не меньше, чем в центре, направление считается неудачным, и поиск продолжается из старого центра.

Процедура завершается либо при достижении заданного максимального числа итераций N , либо в случае, если радиус окрестности текущего решения станет меньше величины R . В результате запуска находятся наилучшее решение $\hat{\theta}_d^s$ и соответствующее значение $E_d^s = E_d^s(\hat{\theta}_d^s)$ целевой функции (4).

3.2. Методика решения задачи

Обозначим: E_d^s – минимальное значение функции после s -го запуска; $\hat{\theta}_d^s$ – наилучший вектор параметров после запуска.

Шаг 0. Задать:

$d = 1$ – начальное число реализаций (в общем случае можно начать с любого значения $1 \leq d \leq T$);

$S_{\max}$ – максимальное число запусков;

$B_{\max}$ – максимальное число проходов;

$\alpha \geq 1$ – коэффициент расширения;

$0 < \beta < 1$ – коэффициент сжатия;

M – максимальное число неудачно выполненных испытаний на текущей итерации;

$t_0 = 1$ – начальную величину шага (можно задать любую величину $t_0 > R$);

R – минимальную величину шага;

N – максимальное число итераций в процедуре запуска.

Шаг 1. Положить:

$b = 1$ (счетчик числа проходов);

$P_d = 0$ (начальная величина суммы средних значений целевой функции).

Шаг 2. Положить:

$s = 1$ (счетчик числа запусков);

$E_d^1 = 10^8 \div 10^{10}$ (начальное значение критерия);

$S_d = 0$ (начальная величина суммы значений целевой функции).

Шаг 3. Задать начальную точку $\theta_d^{s,0}$, удовлетворяющую параллелепипедным ограничениям (3). Положить $k = 0$, $j = 1$.

Шаг 4. Получить случайный вектор $\xi^j = (\xi_1^j, \dots, \xi_n^j)^T$, где ξ_i^j – случайная величина, равномерно распределенная на промежутке $[-1, 1]$.

Шаг 5. Вычислить $y^j = \theta_d^{s,k} + t_k \frac{\xi^j}{\|\xi^j\|}$.

Проверить принадлежность решения y^j множеству допустимых решений Θ . При негативном результате возможны следующие варианты действий:

а) выбрать в качестве нового положения ближайшую граничную точку множества допустимых решений;

б) генерировать новое положение заново, так как в расчетных формулах используются случайные величины и есть вероятность, что при других их реализациях новое решение будет принадлежать множеству допустимых решений;

в) если вне множества Θ оказывается i -я компонента вектора y^j , т.е. y_i^j , в качестве нового положения выбрать точку на отрезке, соединяющем y_i^j и a_i , если $y_i^j > b_i$ (y_i^j и b_i , если $y_i^j < a_i$):

$$y_i^{j,New} = a_i + \gamma (y_i^j - a_i), \text{ если } y_i^j > b_i;$$

$$y_i^{j,New} = b_i - \gamma (b_i - y_i^j), \text{ если } y_i^j < a_i;$$

параметр γ можно задать, например, случайным образом на основе закона равномерного распределения, $\gamma \sim R[0, 1]$;

г) комбинировать описанные выше способы, например несколько раз пробовать сгенерировать положение заново и если после определенного количества попыток новое решение все равно оказывается вне множества Θ , положить $y_i^j = a_i$, если $y_i^j < a_i$ ($y_i^j = b_i$, если $y_i^j > b_i$).

Шаг 6. Генерировать минипакет $(t_{q_1}, \dots, t_{q_d})$ объема d , где $t_{q_1}, \dots, t_{q_d}$ — попарно несовпадающие моменты времени из множества $(t_1, \dots, t_T)$. Подсчитать величину $E_d(y^j)$ по формуле (4).

Проверить выполнение условий:

а) если $E_d(y^j) < E_d(\theta_d^{s,k})$, шаг удачный. Положить $z^j = \theta_d^{s,k} + \alpha (y^j - \theta_d^{s,k})$.

Определить, является ли текущее направление $y^j - \theta_d^{s,k}$ удачным:

• если $E_d(z^j) < E_d(\theta_d^{s,k})$, направление поиска удачное.

Положить $\theta_d^{s,k+1} = z^j$, $t_{k+1} = \alpha t_k$, $k = k + 1$ и проверить условие окончания. Если $k < N$, положить $j = 1$ и перейти к шагу 4. Если $k = N$, поиск завершить: $\hat{\theta}_d^s = \theta_d^{s,k}$, перейти к шагу 8;

• если $E_d(z^j) \geq E_d(\theta_d^{s,k})$, направление поиска неудачное, перейти к шагу 7;

б) если $E_d(y^j) \geq E_d(\theta_d^{s,k})$, шаг неудачный и перейти к шагу 7.

Шаг 7. Оценить число неудачных шагов из текущей точки:

а) если $j < M$, следует положить $j = j + 1$ и перейти к шагу 4;

б) если $j = M$, проверить условие окончания:

• если $t_k \leq R$, процесс закончить: $\hat{\theta}_d^s = \theta_d^{s,k}$, $E_d^s = E_d(\theta_d^{s,k})$, перейти к шагу 8;

• если $t_k > R$, положить $t_k = \beta t_k$, $j = 1$ и перейти к шагу 4.

Шаг 8. Проверить улучшение значения целевой функции в результате s -го запуска:

• если $E_d(\theta_d^{s,k}) < E_d^s$, следует положить $E_d^s = E_d(\theta_d^{s,k})$, $\hat{\theta}_d^s = \theta_d^{s,k}$ и перейти к шагу 9;

• если $E_d(\theta_d^{s,k}) \geq E_d^s$, перейти к шагу 9;

Шаг 9. Вычислить $S_d = S_d + E_d^s$ и проверить выполнение условий окончания числа запусков:

а) если $s < S_{\max}$, следует положить $s = s + 1$ и перейти к шагу 3;

б) если $s = S_{\max}$, то положить $\hat{\theta}_d = \hat{\theta}_d^s$ — наилучшее решение в течение b -го прохода при заданном d ; вычислить

$$\overline{E_d} = \frac{S_d^s}{S_{\max}}, \quad \sigma_{E_d} = \sqrt{\frac{1}{S_{\max} - 1} \sum_{s=1}^{S_{\max}} [E_d^s - \overline{E_d}]^2}$$

и перейти к шагу 10.

Шаг 10. Положить $P_d = P_d + \overline{E_d}$, $\overline{E_d^b} = \overline{E_d}$ и проверить условие завершения заданного числа проходов:

а) если $b < B_{\max}$, следует положить $b = b + 1$ и перейти к шагу 2;

б) если $b = B_{\max}$, вычислить:

$$\overline{\overline{E_d}} = \frac{P_d}{B_{\max}}, \quad \sigma_{\overline{E_d}} = \sqrt{\frac{1}{B_{\max} - 1} \sum_{b=1}^{B_{\max}} [\overline{E_d^b} - \overline{\overline{E_d}}]^2}.$$

Шаг 11. Проверить условие завершения исследований влияния объема минипакета:

- если $d < T$, положить $d = d + 1$, $s = 1$ и перейти к шагу 1;
- если $d = T$, перейти к шагу 12.

Шаг 12. В результате найти наилучшую оценку $\hat{\theta}_d^*$ после $B_{\max}$ проходов и показатели $\overline{E_d}$, $\sigma_{\overline{E_d}}$ при каждом значении объема минипакета d . Для анализа результирующей точности оценивания найти значение $E(\hat{\theta}_d^*)$ критерия точности оценивания (1):

$$E(\hat{\theta}_d^*) = \sum_{j=1}^T \sum_{i=1}^n \left(\hat{x}_i(t_j) - x_i(\hat{\theta}_d^*, t_j) \right)^2.$$

Шаги 10 и 11 выполняются при необходимости.

Рекомендации по выбору параметров метода. Величина ξ_i^j , равномерно распределенная на отрезке $[-1, 1]$, генерируется обычно с помощью датчиков псевдослучайных чисел. Вырабатывается случайная величина η_i^j , равномерно распределенная на $[0, 1]$, а затем используется линейное преобразование: $\xi_i^j = 2\eta_i^j - 1$. Параметры алгоритма: коэффициент расширения $\alpha \geq 1$: $\alpha = 1,618$; коэффициент сжатия $0 < \beta < 1$: $\beta = 0,618$; максимальное число неудачно выполненных испытаний на текущей итерации $M = 3n$; начальный шаг $t_0 > R$ можно задавать произвольно.

4. Модельные примеры

Пример 1. Математическая модель описывает необратимую реакцию первого порядка, в которой измеряются концентрации x_1, x_2 компонент веществ, а θ_1, θ_2 – коэффициенты скоростей реакций соответственно [7, 8]:

$$(7) \quad \begin{cases} \dot{x}_1(t) = -\theta_1 x_1(t), & x_1(0) = 1, \\ \dot{x}_2(t) = \theta_1 x_1(t) - \theta_2 x_2(t), & x_2(0) = 0. \end{cases}$$

Целевая функция имеет вид:

$$(8) \quad E(\theta) = \sum_{j=1}^{10} \sum_{i=1}^2 [\hat{x}_i(t_j) - x_i(\theta, t_j)]^2 \rightarrow \min_{\theta \in \Theta},$$

где $T = 10$, $n = 2$. Ограничения на параметры: $0 \leq \theta_1 \leq 10$, $0 \leq \theta_2 \leq 10$.

В табл. 1 представлены результаты наблюдений за реакцией.

Таблица 1. Наблюдения

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
t_j	0,100	0,200	0,300	0,400	0,500	0,600	0,700	0,800	0,900	1
$\hat{x}_1$	0,606	0,368	0,223	0,135	0,082	0,050	0,030	0,018	0,011	0,007
$\hat{x}_2$	0,373	0,564	0,647	0,669	0,656	0,624	0,583	0,539	0,494	0,451

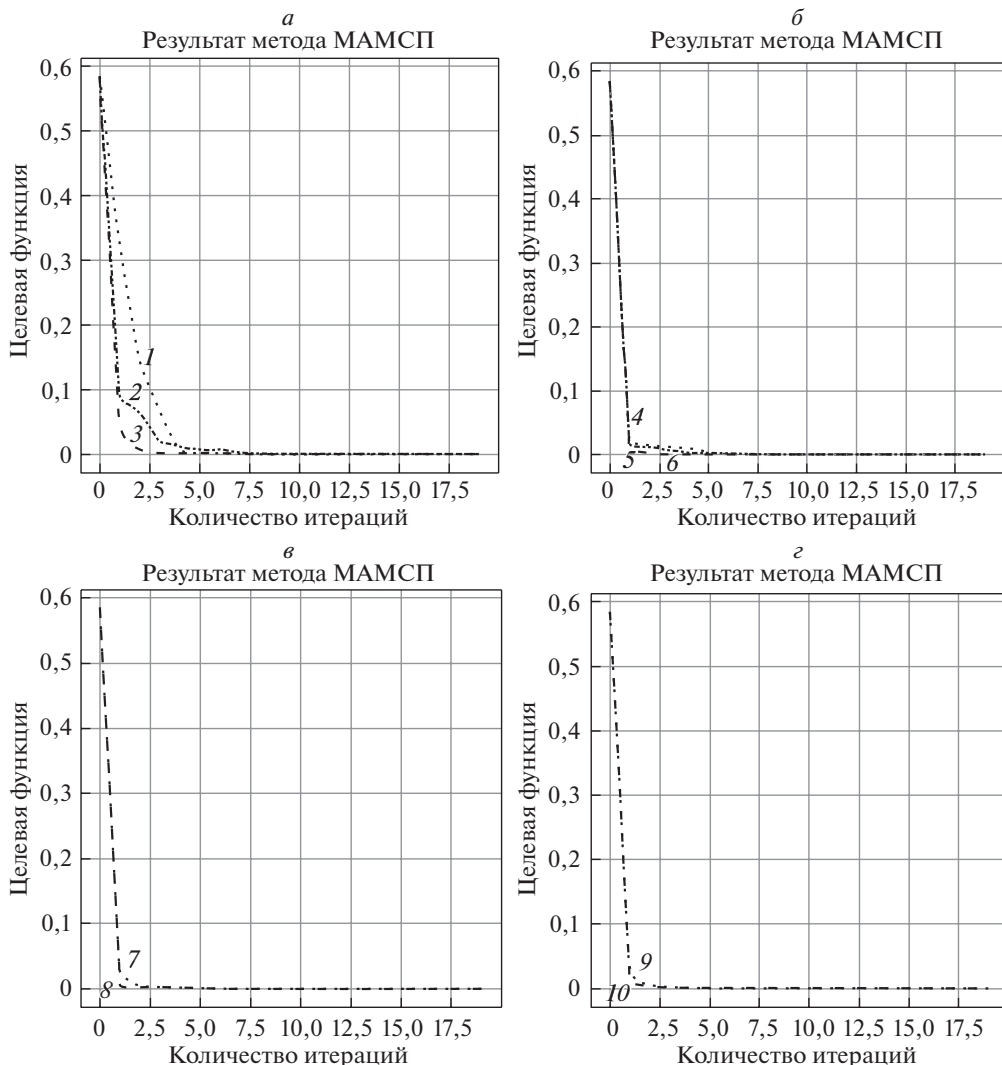


Рис. 1. Результат работы минипакетного адаптивного метода случайного поиска в зависимости от объема минипакета: 1 – $[d = 1]$, 2 – $[d = 2]$, 3 – $[d = 3]$, 4 – $[d = 4]$, 5 – $[d = 5]$, 6 – $[d = 6]$, 7 – $[d = 7]$, 8 – $[d = 8]$, 9 – $[d = 9]$, 10 – $[d = 10]$.

Наилучшее известное решение [7, 8]: значение целевой функции (1) $1,18584 \cdot 10^{-6}$; вектор параметров: $\theta = (5,0035; 1,0000)^T$. Сравнимые результаты, полученные с помощью метаэвристических алгоритмов без использования минипакетов: методом фейерверков, методом большого взрыва – большого сжатия и методом гранат, приведены в [17].

Результаты решения минипакетным адаптивным методом случайного поиска представлены на рис. 1 и в табл. 2. На рис. 1 приведены решения в зависимости от объема минипакета. В табл. 2 показаны лучшие результаты в зависимости от объема минипакета. Во всех тестах $N = 150$ – максимальное число итераций, $M = 10$ – максимальное число неудачно выполненных ис-

Таблица 2. Результат решения минипакетным адаптивным методом случайного поиска (МАСП)

d	θ_d^{*1}	θ_d^{*2}	$E(\hat{\theta}_d^*)$	$\overline{\overline{E_d}}$	$\sigma_{\overline{E_d}}$
1	5,00486	1,00006	$1,24600 \cdot 10^{-6}$	0,02034	0,25643
2	5,00269	0,99998	$1,20612 \cdot 10^{-6}$	0,00513	0,15234
3	5,00343	0,99999	$1,18608 \cdot 10^{-6}$	0,00149	0,09354
4	5,00323	0,99997	$1,18844 \cdot 10^{-6}$	0,00034	0,04729
5	5,00365	1,00001	$1,18673 \cdot 10^{-6}$	0,00025	0,03888
6	5,00342	1,00003	$1,18663 \cdot 10^{-6}$	$1,30989 \cdot 10^{-6}$	0,00115
7	5,00350	1,00000	$1,18595 \cdot 10^{-6}$	$1,25257 \cdot 10^{-6}$	0,00112
8	5,00346	1,00002	$1,18623 \cdot 10^{-6}$	$1,22674 \cdot 10^{-6}$	0,00111
9	5,00341	1,00001	$1,18624 \cdot 10^{-6}$	$1,20433 \cdot 10^{-6}$	0,00110
10	5,00349	1,00000	$1,18595 \cdot 10^{-6}$	$1,18595 \cdot 10^{-6}$	0,00109

Таблица 3. Результаты сравнения МАСП ($E(\hat{\theta}_{10}^*) = 1,18595 \cdot 10^{-6}$) с градиентными методами по наилучшей достигнутой величине критерия (1) (наилучшее известное решение $E(\hat{\theta}) = 1,18584 \cdot 10^{-6}$)

SGD	ClassMom	NAG	AdaGrad
$1,37131 \cdot 10^{-6}$	$1,05923 \cdot 10^{-6}$	$9,32474 \cdot 10^{-7}$	$1,82699 \cdot 10^{-6}$
RMSProp	ADAM	AdaMax	Nadam
$7,13530 \cdot 10^{-5}$	$9,83579 \cdot 10^{-7}$	$1,18653 \cdot 10^{-6}$	$1,33935 \cdot 10^{-6}$

пытаний на текущей итерации, $R = 8 \cdot 10^{-10}$ – минимальная величина шага, $S_{\max} = 100$ – максимальное число запусков, $B_{\max} = 100$ – максимальное число проходов, $\alpha = 1,618$ – коэффициент расширения, $\beta = 0,618$ – коэффициент сжатия, $\overline{\overline{E_d}}$ и $\sigma_{\overline{E_d}}$ – оценка математического ожидания и оценка среднеквадратического отклонения оценок средних значений критерия (4), $\theta_d^{s,0} = (2,3)^T$ – начальная точка.

В табл. 2 представлены результаты решения примера 1 минипакетным адаптивным методом случайного поиска при различных объемах минипакета $1 \leq d \leq 10$ (суммарное время работы алгоритма составило 57 с (процессор intel CORE i5 2.10 GHz)).

Анализ табл. 2 позволяет сделать вывод о том, что сходимость к известному результату достигается при всех объемах минипакета, точность оценок возрастает с увеличением d , при $d = 10$ ответ практически совпадает с известным. Следует отметить, что зависимость величины показателя $\overline{\overline{E_d}}$ от объема минипакета, как правило, является монотонной, а показателя $\overline{E_d}$ может быть не монотонной в силу случайности генерации минипакета.

Так как система дифференциальных уравнений (7) линейная, то удастся найти ее аналитическое решение, что позволяет находить производные целевой функции по параметру θ и пользоваться градиентными методами оптимизации процедур машинного обучения. В табл. 3 представлены результаты сравнения решений, полученных предложенным методом и известными градиентными методами машинного обучения.

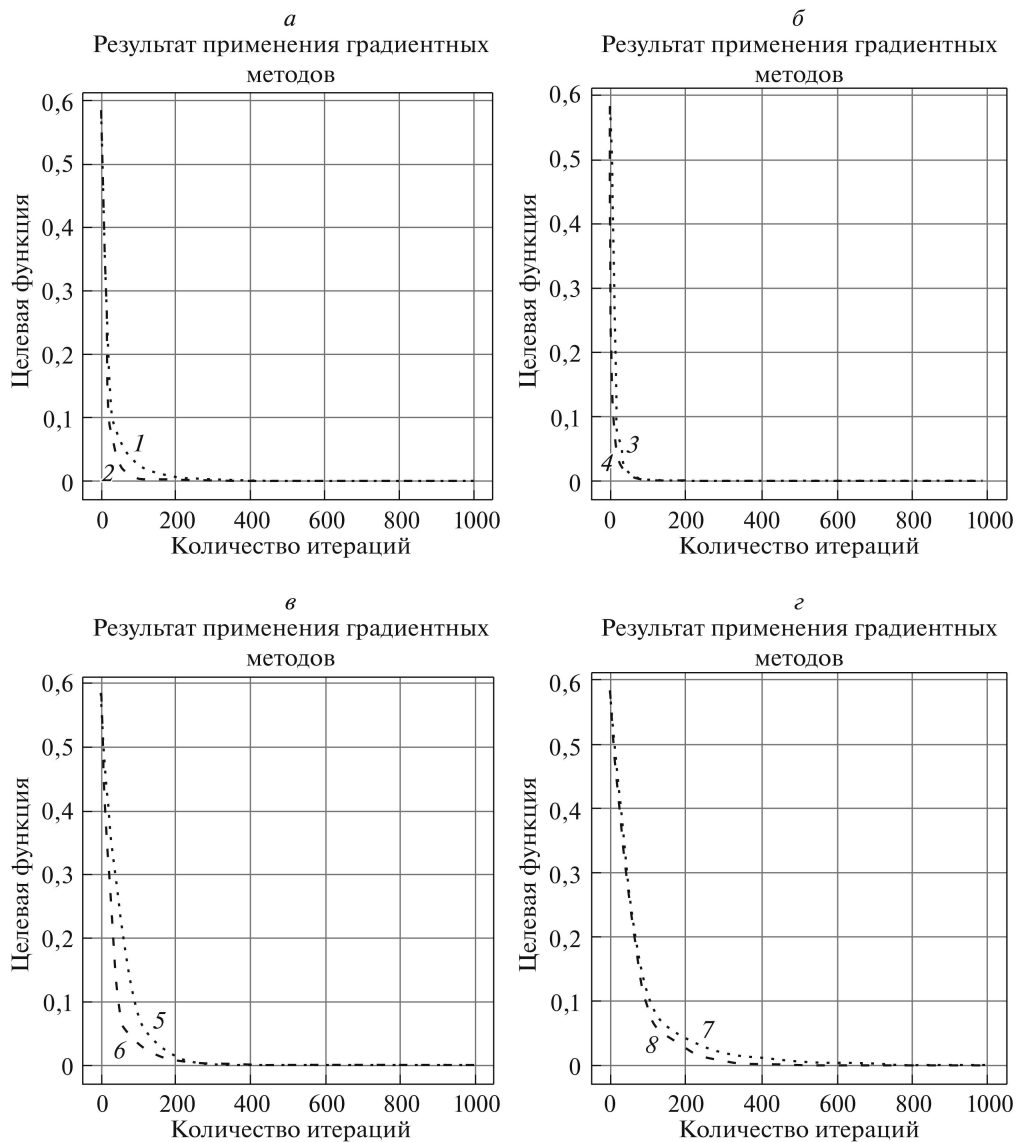


Рис. 2. Результаты применения градиентных методов оптимизации: 1 – SGD, 2 – ClasMom, 3 – NAG, 4 – AdaGrad, 5 – RMSProp, 6 – ADAM, 7 – AdaMax, 8 – Nadam.

На рис. 2 приведены результаты решения примера 1 (изменение целевой функции с ростом числа итераций) при выбранных для обеспечения сходимости значениях шага градиентных методов машинного обучения. Рисунок 2 соответствует начальной точке $\theta_d^{s,0} = (2, 3)^T$, значениям шага SGD – 0,2; ClassMom – 0,2; NAG – 0,2; AdaGrad – 0,3; RMSProp – 0,02; ADAM – 0,02; AdaMax – 0,02; Nadam – 0,02 (краткое описание методов приведено в Приложении).

Пример 2. Модель описывает каталитический крекинг для превращения газойля в бензин. x_1, x_2 – концентрации компонент, $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ – коэффициенты

Таблица 4. Наблюдения

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
t_j	0,0250	0,0500	0,0750	0,1000	0,1250	0,1500	0,1750	0,2000	0,2250	0,2500
$\hat{x}_1$	0,7307	0,5982	0,4678	0,4276	0,3436	0,3126	0,2808	0,2692	0,2210	0,2122
$\hat{x}_2$	0,1954	0,2808	0,3175	0,3047	0,2991	0,2619	0,2391	0,2210	0,1898	0,1801

j	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
t_j	0,3000	0,3500	0,4000	0,4500	0,5000	0,5500	0,6500	0,7500	0,8500	0,9500
$\hat{x}_1$	0,1903	0,1735	0,1615	0,1240	0,1190	0,1109	0,0890	0,0820	0,0745	0,0639
$\hat{x}_2$	0,1503	0,1030	0,0964	0,0581	0,0417	0,0413	0,0367	0,0219	0,0124	0,0089

Таблица 5. Результат решения минипакетным адаптивным методом случайного поиска

d	θ_d^{*1}	θ_d^{*2}	θ_d^{*3}	$E(\hat{\theta}_d^*)$	$\overline{E_d}$	σ_{E_d}	L
1	12,71954	8,62194	1,94031	$3,87373 \cdot 10^{-3}$	0,09323	0,24901	4
2	12,19646	8,30268	2,10194	$3,15674 \cdot 10^{-3}$	0,02092	0,07256	19
3	12,31779	8,13561	2,04472	$2,77824 \cdot 10^{-3}$	0,01287	0,04473	21
4	12,41866	8,13885	2,03050	$2,78531 \cdot 10^{-3}$	0,00421	0,00457	52
5	12,13970	7,97463	2,15734	$2,81254 \cdot 10^{-3}$	0,00391	0,00408	56
6	12,26164	8,07087	2,17864	$2,76099 \cdot 10^{-3}$	0,00352	0,00361	72
7	12,21603	8,01094	2,10274	$2,79811 \cdot 10^{-3}$	0,00327	0,00330	84
8	12,26468	8,03486	2,25584	$2,78409 \cdot 10^{-3}$	0,00312	0,00314	93
9	12,27566	8,05249	2,12116	$2,75432 \cdot 10^{-3}$	0,00309	0,00312	93
10	12,20370	8,03736	2,15236	$2,76500 \cdot 10^{-3}$	0,00305	0,00311	96
11	12,23648	8,01906	2,19338	$2,74747 \cdot 10^{-3}$	0,00300	0,00310	98
12	12,17853	7,97887	2,21586	$2,75452 \cdot 10^{-3}$	0,00294	0,00300	98
13	12,21782	8,01541	2,20164	$2,74887 \cdot 10^{-3}$	0,00291	0,00295	100
14	12,22653	8,01777	2,19107	$2,74819 \cdot 10^{-3}$	0,00287	0,00292	100
15	12,18114	7,97683	2,21814	$2,75350 \cdot 10^{-3}$	0,00283	0,00287	100
16	12,23149	7,99277	2,21086	$2,74755 \cdot 10^{-3}$	0,00282	0,00282	100
17	12,22948	7,98994	2,21324	$2,74755 \cdot 10^{-3}$	0,00279	0,00279	100
18	12,22944	8,00584	2,19629	$2,74727 \cdot 10^{-3}$	0,00277	0,00277	100
19	12,23437	8,00666	2,19891	$2,74701 \cdot 10^{-3}$	0,00276	0,00276	100
20	12,23645	8,00809	2,19849	$2,74699 \cdot 10^{-3}$	0,00274	0,00274	100

скоростей реакций [7, 8]:

$$(9) \quad \begin{cases} \dot{x}_1(t) = -(\theta_1 + \theta_3)x_1^2(t), & x_1(0) = 1, \\ \dot{x}_2(t) = \theta_1 x_1^2(t) - \theta_2 x_2(t), & x_2(0) = 0. \end{cases}$$

Целевая функция имеет вид:

$$(10) \quad E(\theta) = \sum_{j=1}^{20} \sum_{i=1}^2 [\hat{x}_i(t_j) - x_i(\theta, t_j)]^2 \rightarrow \min_{\theta \in \Theta},$$

где $T = 20$, $n = 2$. Ограничения на параметры: $0 \leq \theta_1 \leq 20$, $0 \leq \theta_2 \leq 20$, $0 \leq \theta_3 \leq 20$.

В табл. 4 представлены результаты наблюдений за реакцией.

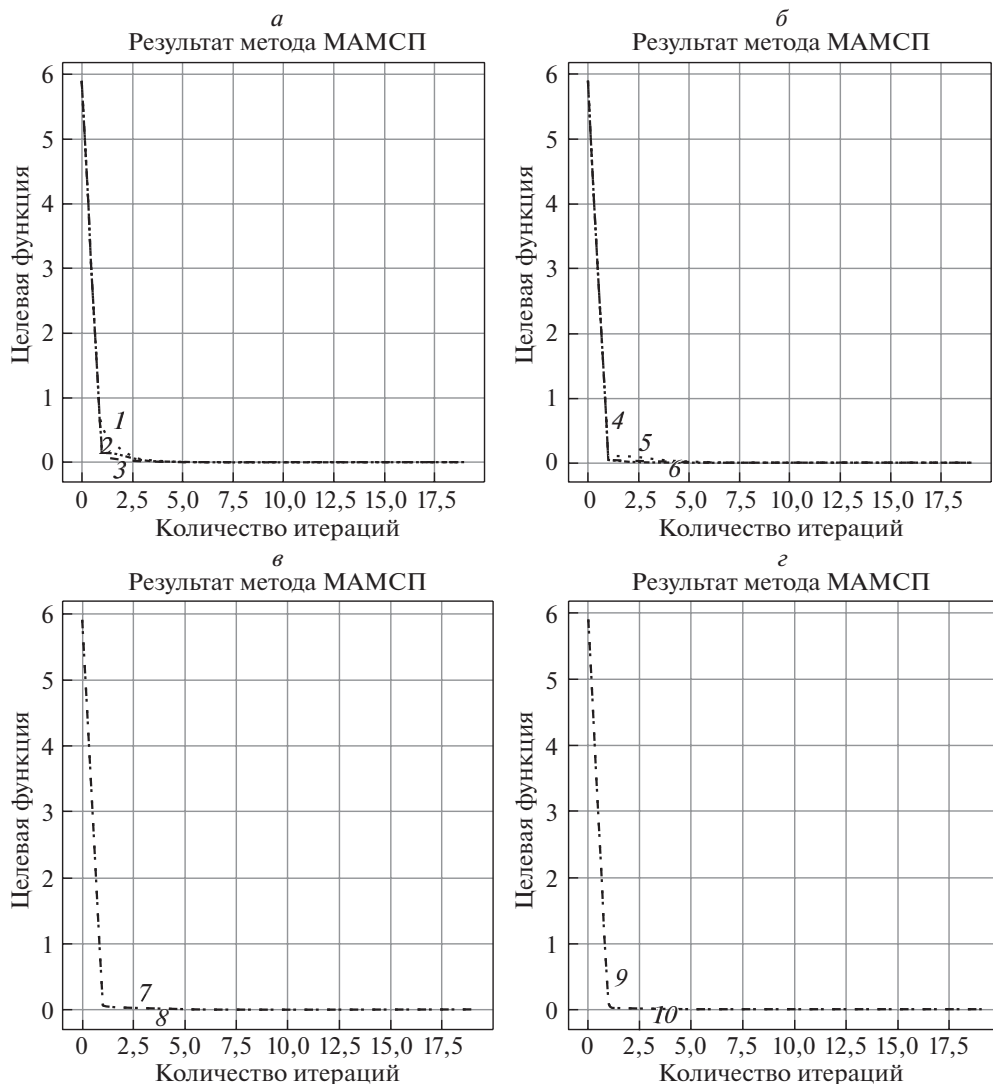


Рис. 3. Результат работы минипакетного адаптивного метода случайного поиска в зависимости от объема минипакета: 1 – $[d = 1]$, 2 – $[d = 2]$, 3 – $[d = 3]$, 4 – $[d = 4]$, 5 – $[d = 5]$, 6 – $[d = 6]$, 7 – $[d = 7]$, 8 – $[d = 8]$, 9 – $[d = 9]$, 10 – $[d = 10]$.

Наилучшее известное решение [7, 8]: значение целевой функции: $2,65567 \times 10^{-3}$, вектор параметров: $\theta = (12,214; 7,9798; 2,2216)^T$.

Сравнимые результаты, полученные с помощью метаэвристических алгоритмов без использования минипакетов: методом фейерверков, методом большого взрыва – большого сжатия и методом гранат, приведены в [17].

Результат решения минипакетным адаптивным методом случайного поиска представлены в табл. 5 и на рис. 3. На рис. 3 приведены решения в зависимости от объема минипакета. В табл. 5 показаны лучшие результаты в зависимости от объема минипакета. Во всех тестах $N = 150$ – максимальное

Таблица 6. Результаты сравнения МАМСР ($E(\hat{\theta}_{20}^*) = 2,74699 \cdot 10^{-3}$) с градиентными методами по наилучшей достигнутой величине критерия (1) (наилучшее известное решение $E(\hat{\theta}) = 2,65567 \cdot 10^{-3}$)

SGD	ClassMom	NAG	AdaGrad
$8,60908 \cdot 10^{-3}$	$3,06110 \cdot 10^{-3}$	$3,51929 \cdot 10^{-3}$	$7,01255 \cdot 10^{-3}$
RMSProp	ADAM	AdaMax	Nadam
$4,11410 \cdot 10^{-3}$	$2,95625 \cdot 10^{-3}$	$5,81047 \cdot 10^{-3}$	$3,01257 \cdot 10^{-3}$

число итераций, $M = 20$ – максимальное число неудачно выполненных испытаний на текущей итерации, $R = 8 \cdot 10^{-10}$ – минимальная величина шага, $S_{\max} = 100$ – максимальное число запусков, $\alpha = 1,618$ – коэффициент расширения, $\beta = 0,618$ – коэффициент сжатия, $\overline{E}_d$ – оценка математического ожидания, σ_{E_d} – оценка среднеквадратического отклонения, L – количество попаданий (значение $E(\theta)$ попало в ε -окрестность известного значения целевой функции, где $\varepsilon = 0,001$), $\theta_d^{s,0} = (1, 20, 0)^T$ – начальная точка.

В табл. 5 представлены результаты решения примера 2 минипакетным адаптивным методом случайного поиска при различных объемах минипакета $1 \leq d \leq 20$ (суммарное время работы алгоритма составило 18 мин (процессор intel CORE i5 2.10 GHz)).

На рис. 3 представлены результаты решения задачи с применением минипакетного адаптивного метода случайного поиска при объеме минипакета $1 \leq d \leq 10$. При $10 \leq d \leq 20$ характер изменения такой же, как на рис. 3,г. При этом с увеличением объема минипакета характеристика отклонения от наилучшего известного решения уменьшается.

Так как система дифференциальных уравнений (9) нелинейная, то для нахождения градиента функции будем использовать конечно-разностные аппроксимации, а решение системы дифференциальных уравнений находим численным методом Рунге–Кутты 4-го порядка (с шагом 0,005). В данном случае градиент целевой функции имеет вид:

$$\nabla_{\theta} E(\theta) = \begin{pmatrix} \frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta_1} \\ \frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta_2} \\ \frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta_3} \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta_1} &\cong \frac{E(\theta_1 + \Delta; \theta_2; \theta_3) - E(\theta_1; \theta_2; \theta_3)}{\Delta}, \\ \frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta_2} &\cong \frac{E(\theta_1; \theta_2 + \Delta; \theta_3) - E(\theta_1; \theta_2; \theta_3)}{\Delta}, \\ \frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta_3} &\cong \frac{E(\theta_1; \theta_2; \theta_3 + \Delta) - E(\theta_1; \theta_2; \theta_3)}{\Delta}, \end{aligned}$$

где $\Delta = 0,01$.

В табл. 6 представлены результаты сравнения решений, полученных предложенным методом и известными градиентными методами машинного обучения.

На рис. 4 приведены результаты решения примера (изменение целевой функции с ростом числа итераций) при разных значениях шага. Рисунок 3 соответствует начальной точке $\theta_d^{s,0} = (1, 20, 0)^T$ и значениям шага SGD – 1;

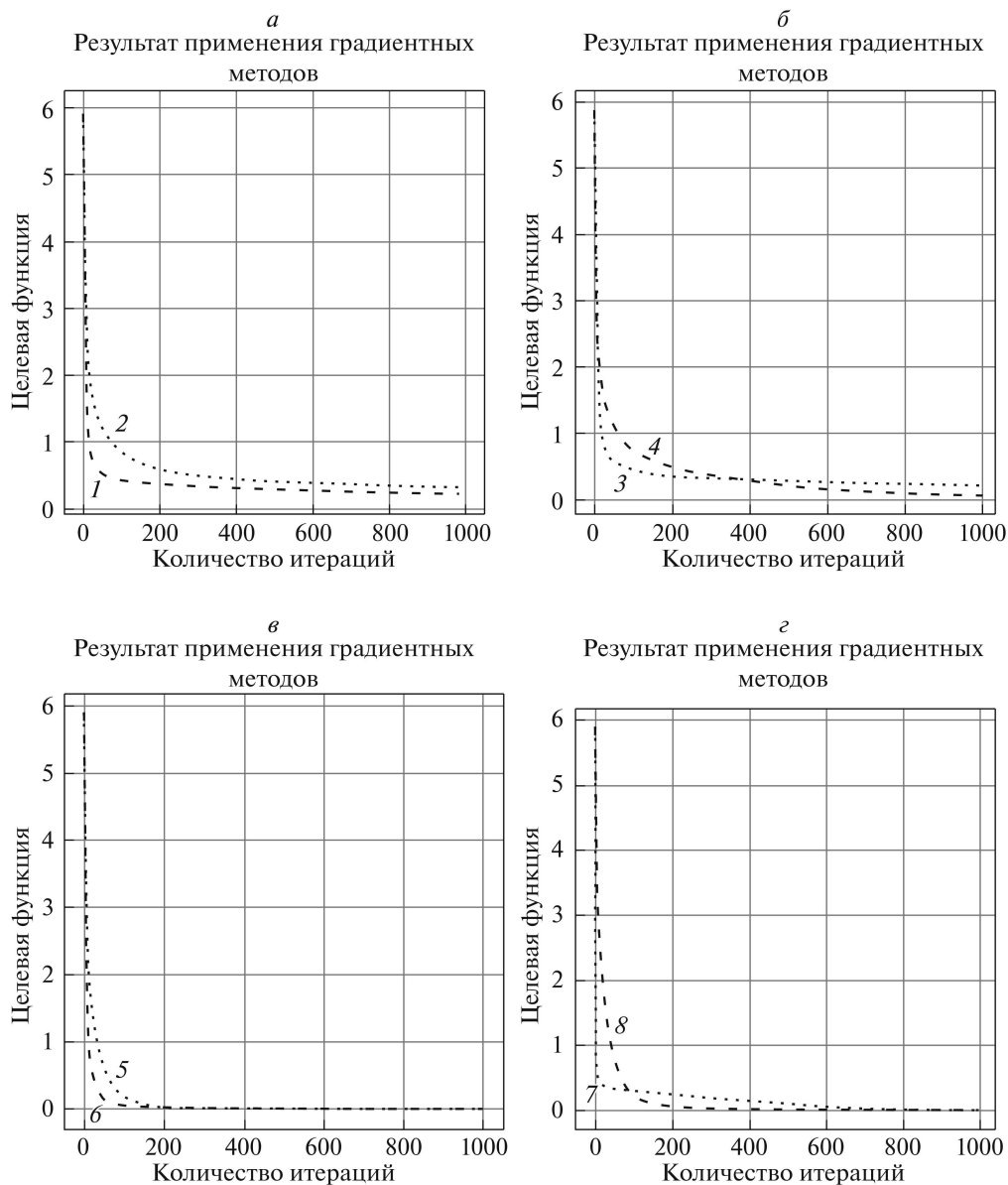


Рис. 4. Результаты применения градиентных методов оптимизации: 1 – SGD, 2 – ClasMom, 3 – NAG, 4 – AdaGrad, 5 – RMSProp, 6 – ADAM, 7 – AdaMax, 8 – Nadam.

ClassMom – 0,3; NAG – 0,3; AdaGrad – 0,3; RMSProp – 0,3; ADAM – 0,3; AdaMax – 1; Nadam – 0,1.

Пример 3. Математическая модель имеет вид:

$$(11) \quad \begin{cases} \dot{x}_1(t) = \theta_1 x_1(t)(1 - x_2(t)), & x_1(0) = 1, \\ \dot{x}_2(t) = \theta_2 x_2(t)(x_1(t) - 1), & x_2(0) = 0. \end{cases}$$

Таблица 7. Наблюдения

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
t_j	1,0000	2,0000	3,0000	4,0000	5,0000	6,0000	7,0000	8,0000	9,0000	10,0000
$\hat{x}_1$	0,7990	0,8731	1,2487	1,0362	0,7483	1,0024	1,2816	0,8944	0,7852	1,1527
$\hat{x}_2$	1,0758	0,8711	0,9393	1,1468	1,0027	0,8577	1,0274	1,1369	0,9325	0,9074

Таблица 8. Результат решения минипакетным адаптивным методом случайного поиска

d	θ_d^{*1}	θ_d^{*2}	$E(\hat{\theta}_d^*)$	$E(\hat{\theta})$	$\overline{E_d}$	σ_{E_d}
1	3,15622	0,95191	0,001501	$1,24924 \cdot 10^{-3}$	0,64113	0,78286
2	3,27374	0,91270	0,001268	$1,24924 \cdot 10^{-3}$	0,74766	0,85022
3	3,24234	0,92115	0,001250	$1,24924 \cdot 10^{-3}$	0,67812	0,74912
4	3,22817	0,92447	0,001276	$1,24924 \cdot 10^{-3}$	0,64793	0,71009
5	3,25294	0,91882	0,001255	$1,24924 \cdot 10^{-3}$	0,58970	0,68599
6	3,26656	0,91384	0,001256	$1,24924 \cdot 10^{-3}$	0,66807	0,71758
7	3,26416	0,91397	0,001264	$1,24924 \cdot 10^{-3}$	0,61353	0,67164
8	3,24321	0,92107	0,001249	$1,24924 \cdot 10^{-3}$	0,45911	0,54942
9	3,24711	0,91979	0,001250	$1,24924 \cdot 10^{-3}$	0,36868	0,42101
10	3,24444	0,92080	0,001249	$1,24924 \cdot 10^{-3}$	0,30586	0,34670

Модель описывает взаимодействие двух биологических видов: “хищник”– “жертва”. x_1 – число особей “жертва”, x_2 – число особей “хищник”. θ_1 – коэффициент роста и истребления популяции вида “жертва”, θ_2 – коэффициент роста и смертности популяции вида “хищник”. Различные методы решения задач анализа и фильтрации в вольтерровских системах изложены в [23, 24].

Целевая функция имеет вид:

$$(12) \quad E(\theta) = \sum_{j=1}^{10} \sum_{i=1}^2 [\hat{x}_i(t_j) - x_i(\theta, t_j)]^2 \rightarrow \min_{\theta \in \Theta},$$

где $T = 10$, $n = 2$. Ограничения на параметры: $0 \leq \theta_1 \leq 10$, $0 \leq \theta_2 \leq 10$.

В табл. 7 представлены результаты наблюдений за реакцией.

Наилучшее известное решение [7, 8]: значение целевой функции: $1,24924 \times 10^{-3}$, вектор параметров: $\theta = (3,2434; 0,9209)^T$.

Сравнимые результаты, полученные с помощью метаэвристических алгоритмов без использования минипакетов: методом фейерверков, методом большого взрыва – большого сжатия и методом гранат, приведены в [17].

Результат решения минипакетным адаптивным методом случайного поиска представлены в табл. 8 и на рис. 5. В табл. 8 показаны лучшие результаты в зависимости от объема минипакета. На рис. 5 приведены решения в зависимости от объема минипакета. Во всех тестах $N = 150$ – максимальное число итераций, $M = 15$ – максимальное число неудачно выполненных испытаний на текущей итерации, $R = 8 \cdot 10^{-10}$ – минимальная величина шага, $S_{\max} = 100$ – максимальное число запусков, $\alpha = 1,618$ – коэффициент расширения, $\beta = 0,618$ – коэффициент сжатия, $\overline{E_d}$ – оценка математического

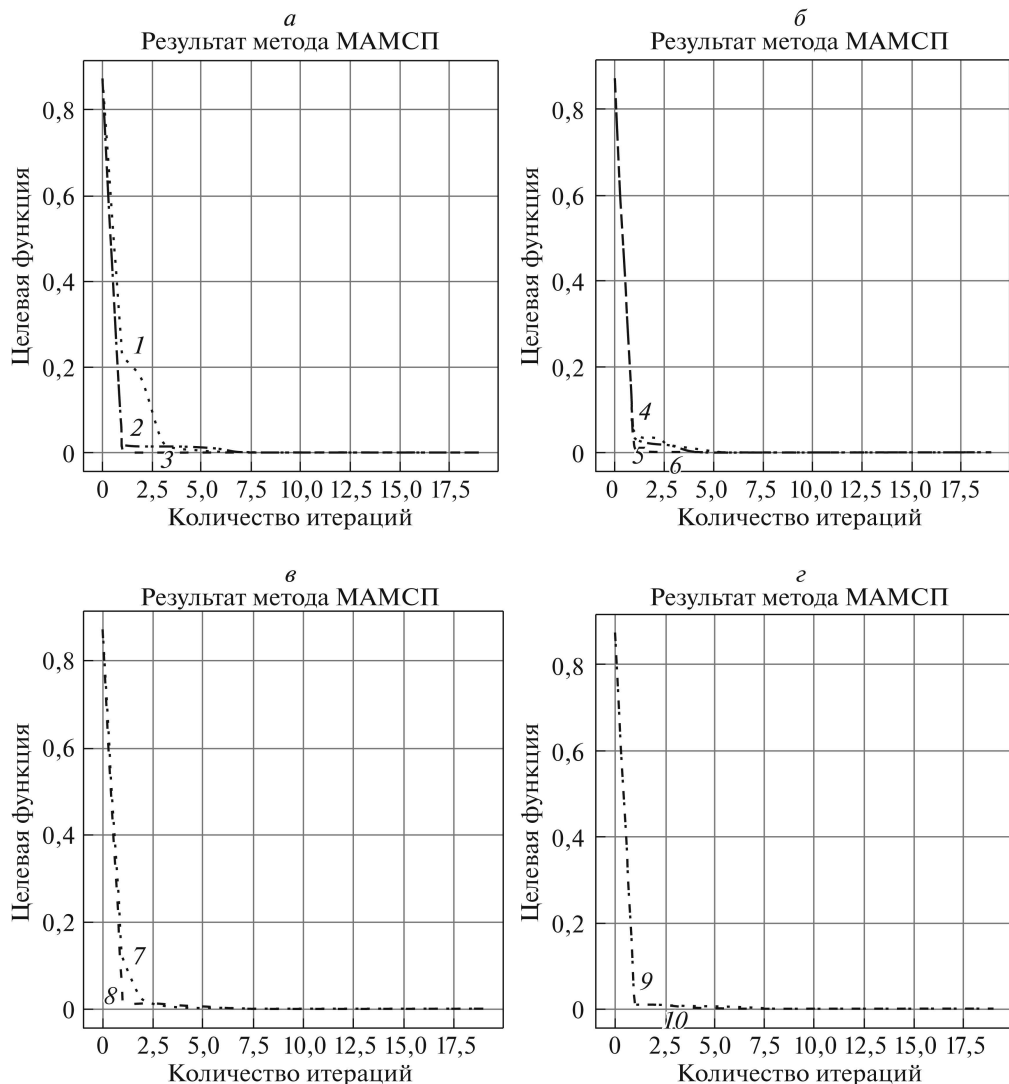


Рис. 5. Результат работы мини пакетного адаптивного метода случайного поиска в зависимости от объема мини пакета: 1 – $[d = 1]$, 2 – $[d = 2]$, 3 – $[d = 3]$, 4 – $[d = 4]$, 5 – $[d = 5]$, 6 – $[d = 6]$, 7 – $[d = 7]$, 8 – $[d = 8]$, 9 – $[d = 9]$, 10 – $[d = 10]$.

ожидания, σ_{E_d} – оценка среднеквадратического отклонения, $\theta_d^{s,0} = (4, 1)^T$ – начальная точка.

В табл. 8 представлены результаты решения примера 3 мини пакетным адаптивным методом случайного поиска при различных объемах мини пакета $1 \leq d \leq 10$ (суммарное время работы алгоритма составило 20 минут (процессор intel CORE i5 2.10 GHz)).

Анализ данных табл. 8 показывает, что значения характеристики $\overline{E_d}$ значительно отличаются от наилучших значений критерия $E(\hat{\theta}_d^*)$ при всех рассматриваемых объемах мини пакета. Это свидетельствует о том, что для по-

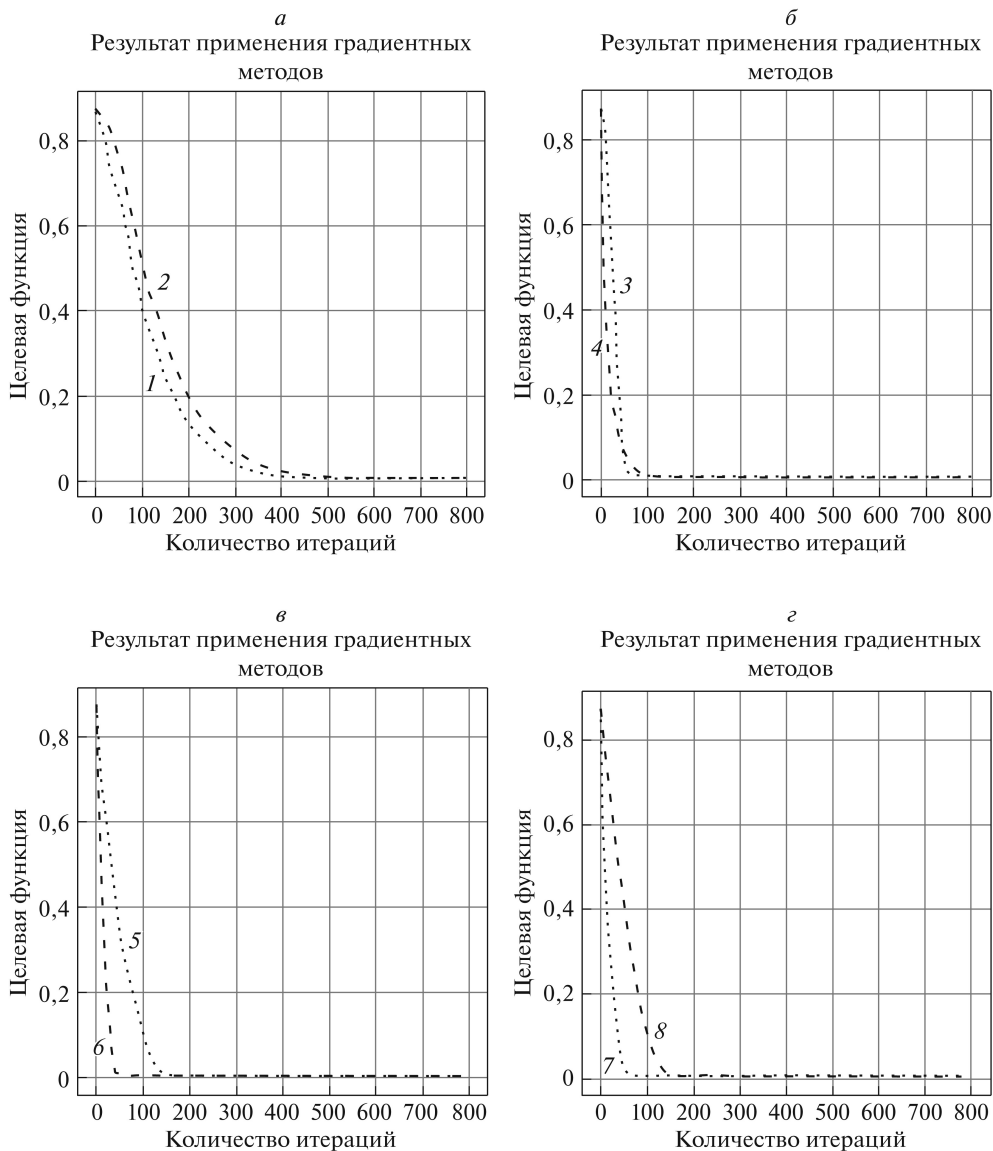


Рис. 6. Результаты применения градиентных методов оптимизации: 1 – SGD, 2 – ClasMom, 3 – NAG, 4 – AdaGrad, 5 – RMSProp, 6 – ADAM, 7 – AdaMax, 8 – Nadam.

лучения приемлемого результата потребуются реализация достаточного количества запусков (здесь $S_{\max} = 100$).

Система дифференциальных уравнений (11) является нелинейной, и для нахождения градиента функции будем использовать конечно-разностные аппроксимации ($\Delta = 0,01$). Решение системы дифференциальных уравнений находим численным методом Рунге–Кутты 4-го порядка (с шагом 0,2). На рис. 6 приведены результаты решения примера (изменение целевой функции

Таблица 9. Результаты сравнения МАМСР ($E(\hat{\theta}_{10}^*) = 1,24924 \cdot 10^{-3}$) с градиентными методами по наилучшей достигнутой величине критерия (1) (наилучшее известное решение $E(\hat{\theta}) = 1,24924 \cdot 10^{-3}$)

SGD	ClassMom	NAG	AdaGrad
$7,05873 \cdot 10^{-3}$	$7,03563 \cdot 10^{-3}$	$6,85268 \cdot 10^{-3}$	$4,39537 \cdot 10^{-3}$
RMSProp	ADAM	AdaMax	Nadam
$4,55656 \cdot 10^{-3}$	$3,28811 \cdot 10^{-3}$	$6,85572 \cdot 10^{-3}$	$4,51559 \cdot 10^{-3}$

с ростом числа итераций) при разных значениях шага. Рисунок 6 соответствует начальной точке $\theta_d^{s,0} = (4, 1)^T$, значениям шага SGD – 0,002; ClassMom – 0,0002; NAG – 0,002; AdaGrad – 0,02; RMSProp – 0,002; ADAM – 0,002; AdaMax – 0,02; Nadam – 0,002.

В табл. 9 представлены результаты сравнения решений, полученных предложенным методом и известными градиентными методами машинного обучения.

Как следует из сравнительного анализа рис. 1, 3, 5 и рис. 2, 4, 6, метод МАМСР не только не уступает известным градиентным методам, но и превосходит большинство методов при достаточном объеме минипакета d . Характер сходимости алгоритма МАМСР к наилучшему известному результату сравним с поведением метода ADAM – наилучшего из приведенных градиентных методов.

5. Заключение

Предложен минипакетный алгоритм адаптивного случайного поиска для решения задачи оценивания параметров динамических систем, использующий идеи популярных методов оптимизации, применяемых в машинном обучении. Приведены результаты сравнения эффективности его применения по сравнению с известными градиентными методами оптимизации: SGD, Classical Momentum, NAG, AdaGrad, RMSProp, Adam, Adamax, Nadam на трех модельных примерах. На данный момент представляется возможным его применение в задачах параметрического синтеза субоптимального управления пучками траекторий детерминированных систем, а также управления стохастическими системами при неполной информации о состоянии, в том числе систем совместного оценивания и управления, в которых критерий качества управления может быть приближенно представлен в виде суммы некоторых функций.

ПРИЛОЖЕНИЕ

А. Метод стохастического градиентного спуска (Stochastic Gradient Descent, SGD):

$$\begin{aligned}\theta^{k+1} &= \theta^k - \alpha_k \nabla_{\theta} L(\theta^k, \hat{x}(t_j), t_j) = \\ &= \theta^k - \alpha_k \nabla_{\theta} \underbrace{\left[\sum_{i=1}^n (\hat{x}_i(t_j) - x_i(\theta, t_j))^2 \right]}_{L(\theta^k, \hat{x}(t_j), t_j)},\end{aligned}$$

где $\alpha_k > 0$, $k = 0, 1, \dots$, – величина шага, t_j – случайный момент времени на множестве T , выбираемый на каждой k -й итерации заново; ∇_θ – градиент по вектору параметров.

Б. Классический метод моментов (Classical Momentum, ClassMom):

$$\begin{aligned}\theta^{k+1} &= \theta^k - \alpha_k v^k, \\ v^{k+1} &= \beta v^k + (1 - \beta) \nabla_\theta L(\theta^k, \hat{x}(t_j), t_j),\end{aligned}$$

где $v^0 = o$ – нулевой вектор-столбец, $\beta = 0,9$.

В. Ускоренный градиентный метод Нестерова (Nesterov Accelerated Gradient, NAG) для решения задачи $f(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$.

Шаг 1. Задать параметры: γ , $\gamma \in (0, 1)$, – коэффициент сохранения ($\gamma = 0,9$); η – коэффициент влияния новой информации; $x^0 \in \mathbb{R}^n$ – начальная точка; $v^0 = o$; $\varepsilon_1 > 0$.

Положить $k = 0$.

Шаг 2. Положить $k = k + 1$ и выполнить:

$$y^k = x^k - \gamma v^{k-1}, \quad g^k = \nabla f^k(y^k), \quad v^k = \gamma v^{k-1} + \eta g^k.$$

Шаг 3. Вычислить $x^k = x^{k-1} - v^k$.

Шаг 4. Проверить выполнение условия $\|x^k - x^{k-1}\| < \varepsilon_1$.

Если условие выполнено, то $x^* = x^k$. Иначе перейти к шагу 2.

Г. Метод адаптивного градиента (Adaptive Gradient, AdaGrad) для решения задачи $f(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$.

Шаг 1. Задать параметры: γ , $\gamma \in (0, 1)$, – коэффициент сохранения ($\gamma = 0,9$); η – скорость обучения (обычно $\eta = 0,01$); $x^0 \in \mathbb{R}^n$ – начальная точка; $\varepsilon = 10^{-6} \div 10^{-8}$ – сглаживающий параметр; $\varepsilon_1 > 0$; $G^{-1} = o$.

Положить $k = 0$.

Шаг 2. Положить

$$g^k = \nabla f^k(x^k); \quad G^k = G^{k-1} + g^k \odot g^k,$$

где $\odot$ – поэлементное произведение матриц по Адамару.

Шаг 3. Вычислить

$$x^{k+1} = x^k - \eta g^k \oslash \sqrt{G^k + \varepsilon},$$

где $\oslash$ – операция поэлементного деления матриц.

Шаг 4. Проверить выполнение условия $\|x^{k+1} - x^k\| < \varepsilon_1$.

Если условие выполнено, то $x^* = x^{k+1}$. Иначе положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 2.

Д. Метод скользящего среднего (Root Mean Square Propagation, RMSProp) для решения задачи $f(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$.

Шаг 1. Задать параметры: $\gamma, \gamma \in (0, 1)$, – коэффициент сохранения ($\gamma = 0,9$); $x^0 \in \mathbb{R}^n$ – начальная точка; $\varepsilon = 10^{-6} \div 10^{-8}$ – сглаживающий параметр; $\varepsilon_1 > 0$; η – величина шага (обычно $\eta = 0,001$); $M^{-1} = o$.

Положить $k = 0$.

Шаг 2. Положить $g^k = \nabla f^k(x^k)$; $G^k = g^k \odot g^k$; $M^k = \gamma M^{k-1} + (1 - \gamma)G^k$.

Шаг 3. Вычислить $x^{k+1} = x^k - \eta g^k \odot \sqrt{M^k + \varepsilon}$.

Шаг 4. Проверить выполнение условия $\|x^{k+1} - x^k\| < \varepsilon_1$.

Если условие выполнено, то $x^* = x^{k+1}$. Иначе положить $k = k+1$ и перейти к шагу 2.

Е. Метод адаптивной оценки моментов (Adaptive Moment Estimation, Adam) для решения задачи $M[f(x)] \rightarrow \min$, в которой имеются случайные реализации $f^1(x), f^2(x), \dots, f^K(x)$.

Шаг 1. Задать параметры: $\alpha = 0,001$ – величина шага; $\beta_1 = 0,9$; $\beta_2 = 0,999$ – параметры оценки моментов, $x^0 \in \mathbb{R}^n$ – начальная точка; $\varepsilon = 10^{-8}$ – сглаживающий параметр; $\varepsilon_1 > 0$; $m^0 = o$ – начальное значение первого вектора моментов $M[\nabla f(x)]$; $v^0 = o$ – начальное значение второго вектора моментов $M[\nabla f(x) \odot \nabla f(x)]$.

Положить $k = 0$.

Шаг 2. Положить $k = k + 1$,

$$\begin{aligned} g^k &= \nabla f^k(x^{k-1}); \quad m^k = \beta_1 m^{k-1} + (1 - \beta_1)g^k; \\ G^k &= g^k \odot g^k; \quad v^k = \beta_2 v^{k-1} + (1 - \beta_2)G^k; \\ \hat{m}^k &= \frac{m^k}{1 - \beta_1^k}; \quad \hat{v}^k = \frac{v^k}{1 - \beta_2^k}. \end{aligned}$$

Шаг 3. Вычислить $x^k = x^{k-1} - \alpha \hat{m}^k \odot \sqrt{\hat{v}^k + \varepsilon}$.

Шаг 4. Проверить выполнение условия $\|x^{k+1} - x^k\| < \varepsilon_1$.

Если условие выполнено, то $x^* = x^k$. Иначе перейти к шагу 2.

Ж. Модификация метода Adam (Adamax) для решения задачи $M[f(x)] \rightarrow \min$, где $f(x) \in C^1$. Имеются случайные реализации $f^1(x), f^2(x), \dots, f^K(x)$.

Шаг 1. Задать параметры: $\alpha = 0,002$ – величина шага; $\beta_1 = 0,9$; $\beta_2 = 0,999$ – параметры оценки моментов, $\beta_2 \in [0, 1]$; $x^0 \in \mathbb{R}^n$ – начальная точка; $\varepsilon = 10^{-8}$ – сглаживающий параметр; $\varepsilon_1 > 0$, $m^0 = o$ – начальное значение первого вектора моментов $M[\nabla f(x)]$; $u^0 = o$.

Положить $k = 0$.

Шаг 2. Положить $k = k + 1$,

$$\begin{aligned} g^k &= \nabla f^k(x^{k-1}); \quad m^k = \beta_1 m^{k-1} + (1 - \beta_1)g^k, \\ u^k &= \max \left\{ \beta_2 u^{k-1}, |g^k| \right\} \quad (\text{операция } \max \text{ выполняется поэлементно}). \end{aligned}$$

Шаг 3. Вычислить $x^k = x^{k-1} - \frac{\alpha}{1 - \beta_1^k} m^k \odot u^k$.

Шаг 4. Проверить выполнение условия $\|x^{k+1} - x^k\| < \varepsilon_1$.

Если условие выполнено, то $x^* = x^k$. Иначе перейти к шагу 2.

3. Ускоренный по Нестерову метод адаптивной оценки моментов (Nesterov-accelerated Adaptive Moment Estimation, Nadam).

Шаг 1. Задать параметры: $\alpha = 0,002$ – величина шага; $\beta_1 = 0,975$; $\beta_2 = 0,999$ – параметры оценки моментов, $x^0 \in \mathbb{R}^n$ – начальная точка; $\varepsilon = 10^{-8}$ – сглаживающий параметр; $m^0 = o$ – начальное значение первого вектора моментов $M[\nabla f(x)]$; $v^0 = o$ – начальное значение второго вектора моментов $M[\nabla f(x) \odot \nabla f(x)]$. Положить $k = 0$.

Шаг 2. Положить $k = k + 1$,

$$\begin{aligned} g^k &= \nabla f^k(x^{k-1}); \quad m^k = \beta_1 m^{k-1} + (1 - \beta_1)g^k; \\ G^k &= g^k \odot g^k; \quad v^k = \beta_2 v^{k-1} + (1 - \beta_2)G^k; \\ \hat{m}^k &= \frac{\beta_1 m^k}{1 - \beta_1^{k+1}} - \frac{(1 - \beta_1)g^k}{1 - \beta_1^k}; \quad \hat{v}^k = \frac{\beta_2 v^k}{1 - \beta_2^k}. \end{aligned}$$

Шаг 3. Вычислить $x^k = x^{k-1} - \alpha \hat{m}^k \oslash \sqrt{\hat{v}^k + \varepsilon}$.

Шаг 4. Проверить выполнение условия $\|x^{k+1} - x^k\| < \varepsilon_1$.

Если условие выполнено, то $x^* = x^k$. Иначе перейти к шагу 2.

И. Мини пакетный метод градиентного спуска (Mini-batch Gradient Descent):

$$\theta^{k+1} = \theta^k - \alpha_k \nabla_{\theta} \bar{Q}(\theta^k), \quad \alpha_k > 0, \quad k = 0, 1, \dots,$$

где α_k – величина шага (learning rate),

$$\bar{Q}(\theta) = \frac{1}{m} \sum_{i \in J_m} \underbrace{\left[\sum_{j=1}^n \theta_j f_j(x_i) - y_i \right]^2}_{L(\theta, x_i, y_i)} = \frac{1}{m} \sum_{i \in J_m} L(\theta, x_i, y_i),$$

где J_m – набор из m номеров произвольных элементов $(x_i, y_i) \in X^l$ обучающей выборки (можно взять m подряд идущих элементов). Чтобы реализовать одно улучшение параметров, требуется использовать не весь набор данных (dataset), а его небольшую часть (в прикладных задачах обычно от 50 до 256 элементов).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bard Y. Nonlinear parameter estimation. N.Y.: Acad. Press, 1974.
2. Ивченко Г.И., Медведев Ю.И. Введение в математическую статистику. М.: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”, 2014.
3. Stewart W.E., Caracotsios M., Sorensen J.P. Parameter Estimation from Multiresponse Data // AIChE J. 1992. 38 (5). P. 641–650.

4. *Biegler L.T.* Optimization Algorithms for Parameter Estimation and Data Reconciliation. Carnegie Mellon Center.
<http://numero.cheme.cmu.edu/content/06606/Parestnotes.pdf>
5. *Csendes T.* Nonlinear Parameter Estimation by Global Optimization – Efficiency and reliability // *Acta Cybernetica*, 1988. 8 (4). P. 361–372.
6. *Arora N., Biegler L.T.* Trust Region SQP Algorithm for Equality Constrained Parameter Estimation with Simple Parameter Bounds // *Comput. Optim. Appl.* 2004. No. 28. P. 51–86.
7. *Floudas C.A., Pardalos P.M., Adjimann C.S., Esposito W.R., Gumus Z.H., Harding S.T., Schweiger C.A.* Handbook of test problems in local and global optimization, 1999. V. 67. Springer US. <https://titan.princeton.edu/TestProblems>
8. *Tjoa I.B., Biegler L.T.* Simultaneous Solution and Optimization Strategies for Parameter Estimation of Differential–algebraic Equation Systems // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 1991. V. 30. No. 2. P. 376–385.
<https://doi.org/10.1021/ie00050a015>
9. *Bock H.G.* Recent Advances in Parameter Identification Techniques in ODE / *Deuflhard P., Hairer E.* (eds.). Numerical treatment of inverse problems in differential and integral equations. P. 95–121. Birkhauser, 1983.
10. *Panteleev A.V., Letova T.A., Pomazueva E.A.* Parametric Design of Optimal in Average Fractional-Order PID Controller in Flight Control Problem // *Autom. Remote Control*. 2018. V. 79. № 1. P. 153–166.
Пантелеев А.В., Летова Т.А., Помазуева Е.А. Параметрический синтез оптимального в среднем дробного ПИД-регулятора в задаче управления полетом // *Управление большими системами*. 2015. Вып. 56. С. 176–200.
11. *Esposito W.R., Floudas C.A.* Global Optimization for the Parameter Estimation of Differential-Algebraic Systems // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2000. V. 39. P. 1291–1310.
12. *Osborne M.R.* On Estimation Algorithms for Ordinary Differential Equations // *ANZIAM J.* 2008. No. 50. P. 107–120.
13. *Adjiman C.S., Androulakis I.P., Floudas C.A., Neumaier A.A.* Global Optimization Method for General Twice-Differentiable NLPs, II. Implementation and Computational Results // *Comput. Chem. Eng.* 1998. No. 22 (9). P. 1159.
14. *Cizniar M., Podmajersky M., Hirmajer T., Fikar M.* Global Optimization for Parameter Estimation of Differential-algebraic Systems // *CHEM PAP.* 2009. V. 63 (3). P. 274–283.
15. *Floudas C.A., Pardalos P.M.* (eds.) Encyclopedia of optimization. Springer, 2009.
16. *Glover F.W., Kochenberger G.A.* Handbook of metaheuristics. Boston, MA: Kluwer Acad. Publishers, 2003.
17. *Пантелеев А.В., Крючков А.Ю.* Метаэвристические методы оптимизации в задачах оценки параметров динамических систем // *Науч. вестн. Моск. гос. технического ун-та гражданской авиации*. 2017. Т. 20. № 2. С. 37–45.
18. *Ruder S.* An Overview of Gradient Descent Optimization Algorithms.
arXiv:1609.04747v2 [cs.LG] 15 Jun 2017.
19. *Karpathy Andrej* (2017). A Peek at Trends in Machine Learning.
<https://medium.com/@karpathy/a-peek-at-trends-in-machine-learning-ab8a1085a106>
20. *Sra Suvrit, Nowozin Sebastian, Wright Stephen J.* Optimization for machine learning. MIT Press, 2012.

21. *Пантелеев А.В., Лобанов А.В.* Градиентные методы оптимизации в машинном обучении идентификации параметров динамических систем // Моделирование и анализ данных. 2019. № 4. С. 88–99.
22. *Пантелеев А.В.* Методы оптимизации. Уч. пос. / А.В. Пантелеев, Т.А. Летова. М.: Логос, 2011.
23. *Синицын И.Н., Синицын В.И.* Условно-оптимальное линейное оценивание нормальных процессов в вольтерровских стохастических системах // Системы и средства информатики. 2019. Т. 29. № 3. С. 16–28.
24. *Синицын И.Н., Синицын В.И.* Аналитическое моделирование процессов в вольтерровских стохастических системах методом канонических разложений // Системы и средства информатики. 2019. Т. 29. № 1. С. 109–127.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.И. Кибзуном.

Поступила в редакцию 02.03.2020

После доработки 21.05.2020

Принята к публикации 09.07.2020