УДК 519.85
DOI:10.25729/ESI.2023.31.3.002

Применение методов случайного поиска и методов машинного обучения к задаче оптимизации в многомерном пространстве

Хашпер Белла Леонидовна, Кантор Ольга Геннадиевна
Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Россия, Уфа, *bellakhashper@gmail.com*

Аннотация. В работе предложен алгоритм решения задачи условной оптимизации в многомерном пространстве с применением методов случайного поиска и методов машинного обучения. Алгоритм апробирован для задачи количественного анализа многокомпонентных смесей на основе данных ультрафиолетовой (УФ) спектрометрии. Методом случайного поиска в комбинации с методами машинного обучения получена информация, способствующая планированию физико-химических экспериментов, направленных на решение задачи параметрической идентификации системы уравнений Фирордта.

Ключевые слова: многомерная оптимизация, метод случайного поиска, статистические методы, методы машинного обучения, задача классификации, задача регрессии, дерево решений, метод Trust-region, число обусловленности

Цитирование: Хашпер Б.Л. Применение методов случайного поиска и методов машинного обучения к задаче оптимизации в многомерном пространстве / Б.Л. Хашпер, О.Г. Кантор // Информационные и математические технологии в науке и управлении. – 2023. – № 3(31). – С. 15-26. – DOI:10.25729/ESI.2023.31.3.002.

Введение. Задачи многомерной оптимизации возникают в различных сферах. В частности, один из подходов к количественному анализу многокомпонентных смесей связан с использованием метода Фирордта, формальное представление которого сводится к системе линейных алгебраических уравнений [1]:

$$AX = B, \tag{1}$$

где A – квадратная матрица размерности $n \times n$, X и B – вектор-столбцы размерности $n \times 1$, n – количество компонентов смеси. Назначение системы (1) состоит в том, чтобы определять неизвестные концентрации элементов смеси X, зная физико-химические параметры, зафиксированные в элементах A и B, которые определяются на основе применения специальных методов обработки экспериментальных данных, что приводит к неустранимым погрешностям. При этом погрешности элементов матрицы A существенно выше, и они значимо влияют на результаты определения концентраций X. Таким образом, возникает необходимость корректировки элементов матрицы A. В работах [1, 2] предложен подход, основанный на сведении данной проблемы к решению оптимизационных задач.

Так, используя идеи чебышевского приближения, математическую модель для определения элементов матрицы A при заданных векторах X и B можно записать в виде:

$$\begin{gathered} \xi \to min, \\ |AX - B| \le \xi, \\ X \in \Omega, \end{gathered} \tag{2}$$

где ξ – предельно допустимая погрешность аппроксимации, Ω – множество решений, обусловленных физическим смыслом задачи. Таким образом, проблема идентификации матрицы A сводится к необходимости решения задачи условной оптимизации в многомерной области.

Искомая матрица A должна не только обеспечивать лучшее приближение имеющихся экспериментальных данных, но и учитывать специфику модели (1), где она в дальнейшем будет использоваться. Известно, что для линейных систем важным критерием является устойчивость получаемого решения. В данном контексте при определении матрицы A актуальным является использование числа обусловленности в качестве критерия ее оптимальности.

Для определения элементов матрицы A в настоящей работе разработаны алгоритмы, основанные на применении методов случайного поиска и машинного обучения.

1. Обзор методов поиска экстремального значения функции. Одним из самых простых способов поиска точки экстремума является задание равномерной сетки на области поиска и расчёт значений целевой функции в каждом узле сетки [3]. Для многомерного пространства задание равномерной сетки на области поиска и расчет значения целевой функции во всех узлах сетки может привести к очень большим затратам вычислительных ресурсов. По некоторым оценкам, время выполнения полного перебора растёт экспоненциально относительно размера входных данных. При высокой вычислительной сложности применения полного перебора для поиска оптимального значения целевой функции, зависящей от множества параметров, применяются различные алгоритмы поиска экстремума в многомерной области. Выбор метода зависит от постановки решаемой задачи, опыта исследователя, характеристик оптимизируемой функции, характеристик области. Не для всех классов задач есть готовые методы. Для некоторых задач оптимизации нужно применять специфические алгоритмы. С развитием информационных технологий стало возможным реализовывать и применять методы, использующие элемент случайности. Также для уточнения решения задачи оптимизации могут применяться алгоритмы машинного обучения.

1.1. Статистические методы или методы случайного поиска. Методы оптимизации можно разделить на детерминированные и статистические (методы случайного поиска) [4]. Детерминированные методы основаны на точных математических алгоритмах. Они обеспечивают гарантированную сходимость к оптимальному решению. С ростом размерности задач эффективность детерминированных методов поиска уменьшается [5]. На практике часто информация об оптимизируемом объекте слишком мала для того, чтобы можно было применить детерминированные методы. Поэтому в таких случаях часто применяют статистические методы. Статистические методы или методы случайного поиска – это методы, использующие элемент случайности. Случайным образом может выбираться направление спуска, длина шага, величина штрафа при нарушении ограничения [5].

Метод случайного поиска эффективен при решении задач большой размерности или при поиске глобального экстремума. Преимущества метода случайного поиска проявляются с ростом размерности задач, так как вычислительные затраты в детерминированных методах поиска с ростом размерности растут быстрее, чем в статистических алгоритмах [5].

В ходе метода случайного поиска произвольно выбираются точки из рассматриваемой области, и в каждой точке рассчитывается значение целевой функции. В качестве решения принимается точка, в которой значение функции минимально (максимально). Точки выбираются, пока не выполнится определённый критерий (будет выбрано определённое количество точек, пройдёт определённое время, будет найдено решение, удовлетворяющее требуемой точности и пр.).

Метод случайного поиска может быть применён в следующих случаях [6]:

– многомерная область содержит большой процент удовлетворительных решений;
– многомерная область не является однородной.

Метод случайного поиска может применяться к функциям, не имеющим аналитического выражения, и к функциям, у которых сложно вычислить градиент.

Алгоритм метода случайного поиска в общем случае включает следующие шаги:

1) определение области поиска;
2) определение критерия остановки генерации точек (количество точек, время, требуемая точность);
3) генерация случайной точки;
4) вычисление значения целевой функции в сгенерированной точке;
5) выбор точки с оптимальным значением целевой функции;
6) повторение шагов 3)-5) алгоритма, пока не выполнится критерий остановки.

Основные преимущества метода случайного поиска:

– простота программной реализации и отладки;
– надёжность и устойчивость к выбросам;
– универсальность;
– возможность введения операций обучения;
– возможность введения операций прогнозирования точки экстремума.

Основным недостатком метода случайного поиска является необходимость большого количества итераций для достижения точного результата. Этот недостаток может быть устранён применением метода случайного поиска вместе с методами машинного обучения [7].

1.2. Методы машинного обучения. Теория машинного обучения возникла в конце 1950-х гг. и развивается на стыке прикладной статистики, численных методов оптимизации, комбинаторики, дискретного анализа, вычислительной математики [8]. Машинное обучение – это раздел теории искусственного интеллекта, предметом которого является поиск методов решения задач путем обучения в процессе решения сходных задач. Для построения таких методов используются средства алгебры, математической статистики, дискретной математики, теории оптимизации, численных методов, и других разделов математики [9]. Распространёнными задачами, решаемыми методами машинного обучения, являются задача классификации и задача регрессии.

Задача классификации заключается в прогнозировании, к какому классу относится объект, основываясь на его характеристиках. Задача классификации часто решается с помощью алгоритмов машинного обучения. Эти алгоритмы обучаются на основе набора данных с известными метками классов, чтобы определить зависимости между характеристиками объектов и их принадлежности к определенному классу. Результатом работы алгоритма является модель, которая может применяться для классификации новых объектов.

Задача регрессии – это предсказание числового значения целевой переменной на основе характеристик объекта. Для ее решения используются алгоритмы машинного обучения, которые обучаются на данных с известными значениями целевой переменной. Результатом работы алгоритма является модель, которая может использоваться для предсказания значений целевой переменной для новых объектов.

Для решения задач классификации и регрессии часто используются деревья решений. Деревья решений моделируют неизвестные заранее правила и представляют их в иерархическом и последовательном виде, где каждому атрибуту соответствует свой узел, на основе которого дается решение [10]. В «листьях» дерева решений стоят значения целевой функции (регрессионное дерево решений) или номер класса (классификационное дерево решений), а в остальных узлах – условия перехода, определяющие, по какому из ребер осуществляется переход [11].

Таким образом, для решения задачи (2) методом случайного поиска в комбинации с методами машинного обучения:

- в пространстве поиска выбираются случайные точки;
- для каждой точки рассчитывается значение целевой функции;
- на основе полученных данных проводится статистический анализ;
- методами машинного обучения классифицируются полученные значения целевой функции;
- определяются ограничения на значения параметров, позволяющие получить минимальные значения целевой функции.

3. Апробация алгоритма. Разработать алгоритм случайного поиска в комбинации с методами машинного обучения в общем виде достаточно сложно, так как он будет зависеть от характеристик целевой функции, ограничений, области и других параметров. Для решения каждой задачи необходимо применять специфический подход с учётом всех условий.

Рассмотрим применение метода случайного поиска с методами машинного обучения на примере задачи количественного анализа многокомпонентных смесей на основе данных УФ спектрометрии. Эта задача сводится к задаче параметрической идентификации вида (3) [12]:

$$\gamma_{ij} \to min\,(\gamma_{ij} \to max), i,j = \overline{1{,}5},$$
$$|A'X - B| \le 0{,}01,$$
$$|\gamma_{ij} - 1| \le \xi^*, i,j = \overline{1{,}5}, \quad (3)$$
$$\gamma_{ij} \ge 0, i,j = \overline{1{,}5},$$

где A – матрица молярных коэффициентов поглощения размерностью 5×5, B – вектор оптических плотностей размерностью 5, γ_{ij} – поправочные коэффициенты, $\gamma_{ij} \ge 0$, A' – матрица молярных коэффициентов поглощения с учётом поправочных коэффициентов: $A' = (a'_{ij})$, $a_{ij}{}' = \gamma_{ij} \cdot a_{ij}$, X– вектор концентраций компонентов смеси, ξ^* – оптимальное решение задачи (2).

Решение задачи (3) позволяет получить интервалы значений параметров для каждого параметра γ_{ij} (минимальные и максимальные значения), $i,j = \overline{1{,}5}$. Нужно из этих интервалов найти значения параметров γ_{ij} , минимизирующие число обусловленности матрицы A' $cond(A')$:

$$cond(A') = \|A'\| \cdot \|A'^{-1}\|, \quad (4)$$

где ‖°‖ – обозначение нормы соответствующей матрицы. В качестве нормы выбрана евклидова норма. Таким образом, в 25мерном пространстве нужно найти точку (значения параметров γ_{ij}, $i,j = \overline{1{,}5}$), минимизирующую значение $cond(A')$. Известны интервалы для каждого параметра.

Рассмотрим схему решения поставленной задачи методом случайного поиска с применением методов машинного обучения (рисунок 1).

Рассмотрим алгоритм решения поставленной задачи методом случайного поиска с применением методов машинного обучения. На вход алгоритм принимает 25 интервалов для каждого параметра γ_{ij}, матрицу молярных коэффициентов поглощения A и число симуляций.

1. Проверяется, есть ли параметры γ_{ij}, для которых минимальные и максимальные значения совпали. Если есть, то эти параметры исключаются из рассмотрения. Размерность задачи уменьшается.
2. Выбирается точка случайным образом в качестве стартовой точки для алгоритма минимизации. Решается задача минимизации числа обусловленности. Находится точка минимума.
3. Повторяем пункт 2 для каждой симуляции.
4. Получаем набор точек минимума и соответствующих им чисел обусловленности.
5. Строим распределение значений числа обусловленности.
6. Рассчитываем парную корреляцию параметров γ_{ij} и числа обусловленности.
7. Исключаем из рассмотрения параметры, слабо коррелирующие с числом обусловленности.
8. По результатам, полученным в пункте 5, выбираем два значения числа обусловленности m_1 и m_2 ($m_1 < m_2$), которые будут делить выборку на три части. Будем считать, что значения числа обусловленности, которые меньше, чем m_1, относятся к категории «Отлично», значения числа обусловленности, которые больше, чем m_1, и меньше, чем m_2, относятся к категории «Хорошо», значения числа обусловленности, которые больше, чем m_2, относятся к категории «Плохо».

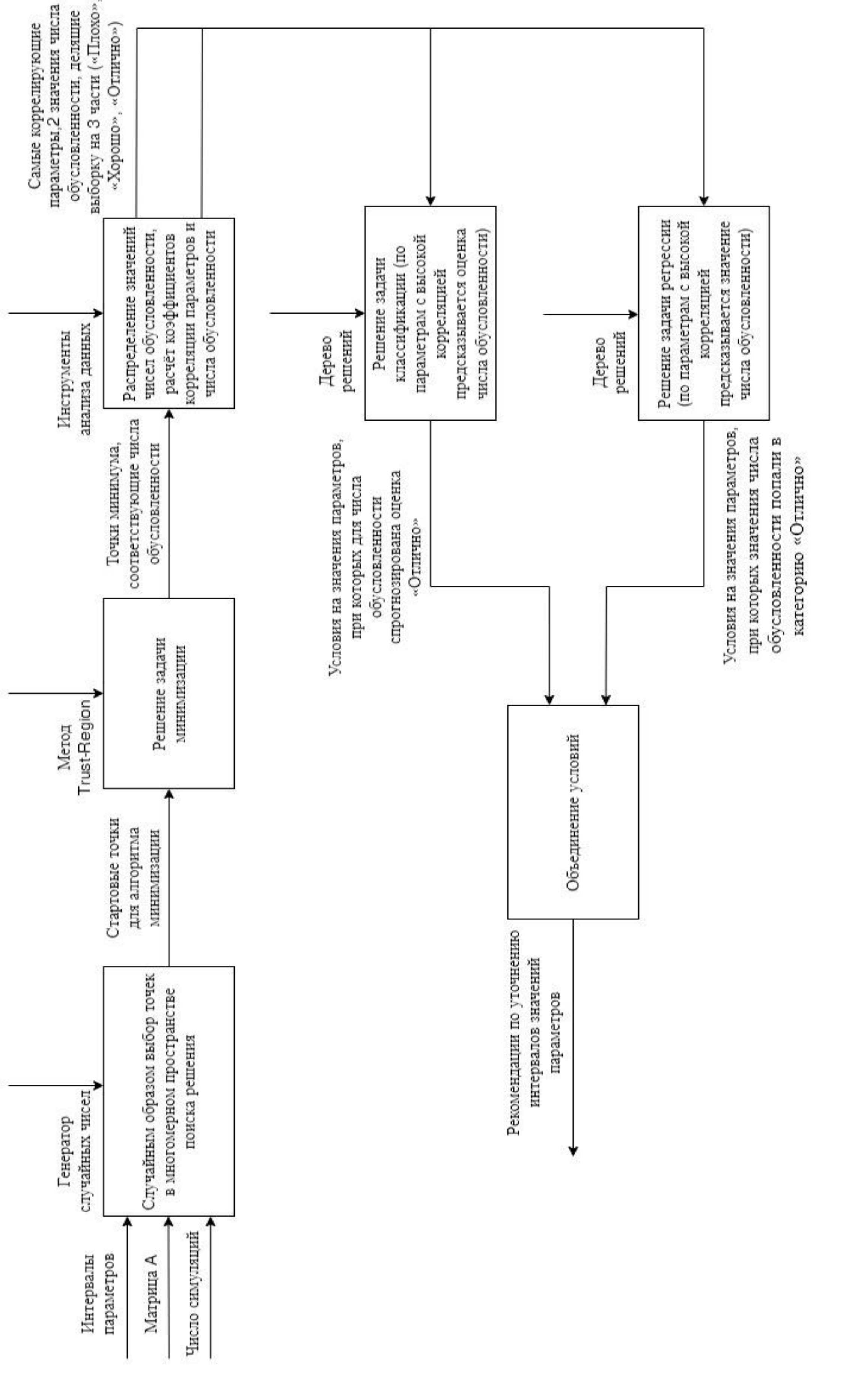


Рис. 1. Схема решения задачи

9. Строятся графики зависимости числа обусловленности от каждого параметра γ_{ij} с высокой корреляцией. Если по графикам можно определить граничные значения параметров, соответствующие значениям числа обусловленности из группы «Отлично», выдаются рекомендации по сужению диапазонов этих параметров для уменьшения значения числа обусловленности.

10. Решается задача классификации (по параметрам с высокой корреляцией предсказывается оценка числа обусловленности). Фиксируются условия на значения параметров γ_{ij}, при которых для числа обусловленности спрогнозирована оценка «Отлично».

11. Решается задача регрессии (по параметрам с высокой корреляцией предсказывается значение числа обусловленности). Фиксируются условия на значения параметров γ_{ij}, при которых значения числа обусловленности попали в категорию «Отлично».

12. Объединяются условия, полученные при решении задач классификации и регрессии. Если полученные значения числа обусловленности удовлетворяют требованиям к точности, в качестве рекомендаций к значениям параметров γ_{ij} выдаются найденные условия на значения параметров.

13. Алгоритм повторяется, пока получаемые значения числа обусловленности не будут удовлетворять требованиям.

4. Результаты вычислительного эксперимента. Экспериментальные данные:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 54000 & 30800 & 35800 & 28500 & 30900 \\ 30900 & 22800 & 28300 & 27900 & 28800 \\ 19600 & 21000 & 21800 & 18500 & 16050 \\ 50500 & 24370 & 17630 & 15070 & 11800 \\ 60780 & 24150 & 15350 & 13000 & 11700 \end{pmatrix}$$

Интервалы значений параметров, полученные при решении задачи (3), приведены в таблице 1.

Таблица 1. Интервалы значений параметров γ_{ij}

γ_{ij}	γ_{i1}	γ_{i2}	γ_{i3}	γ_{i4}	γ_{i5}
γ_{1j}	[0.973; 0.973]	[1.333; 1.4]	[1.312; 1.4]	[1.175; 1.4]	[1.057; 1.197]
γ_{2j}	[1.014; 1.014]	[1.277; 1.4]	[1.25; 1.4]	[1.09; 1.4]	[0.91; 1.114]
γ_{3j}	[1.048; 1.048]	[0.745; 0.892]	[1.185; 1.4]	[1.272; 1.4]	[1.3; 1.4]
γ_{4j}	[1.056; 1.056]	[0.747; 0.904]	[1.07; 1.4]	[1.206; 1.4]	[1.232; 1.4]
γ_{5j}	[0.779; 1.4]	[0.6; 1.4]	[0.6; 1.4]	[0.6; 1.4]	[0.6; 1.4]

В таблице выделены параметры, у которых совпали минимальные и максимальные значения диапазонов. У этих параметров фиксированные значения.

В качестве числа симуляций выбрано значение 2000. Экспериментально установлено, что с увеличением числа симуляций, больше 2000, существенно не изменяются статистические характеристики получаемых значений числа обусловленности и корреляций числа обусловленности с параметрами γ_{ij} (рис. 2).

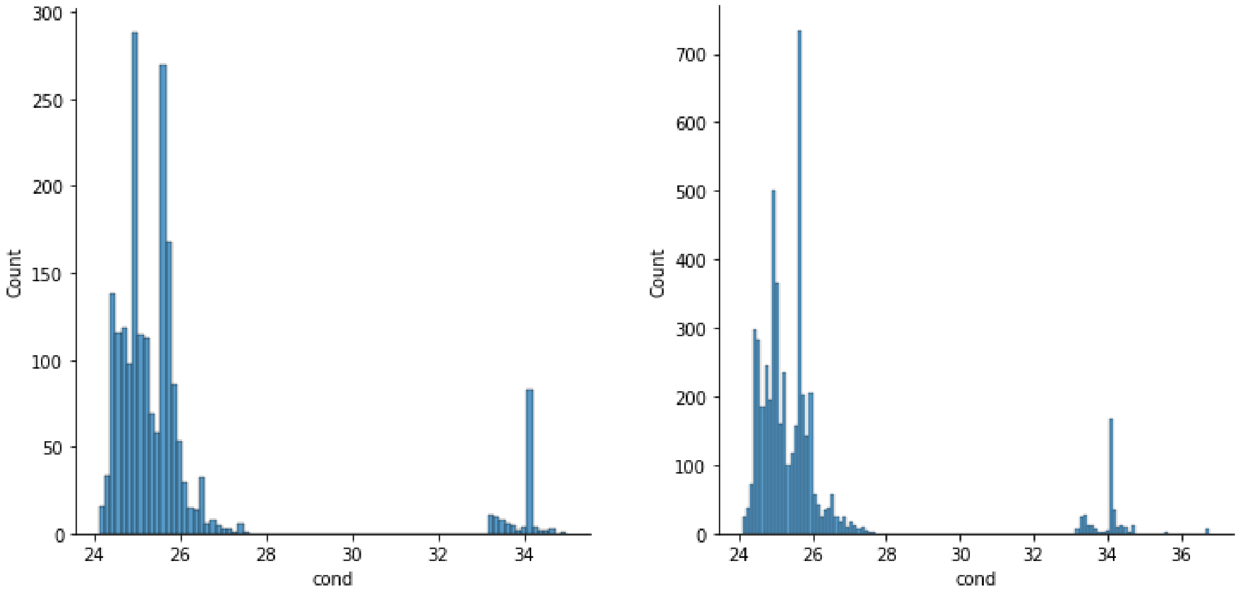
2000 раз для случайно выбранной стартовой точки найдено минимальное значение числа обусловленности и точка минимизации. Решение задачи минимизации находилось функцией minimize из библиотеки scipy.optimize. Для решения нелинейной задачи условной оптимизации в многомерной области в функцию minimize требуется передать минимизируемую функцию, начальную точку, область поиска решения, ограничения, накладываемые на решение, и метод оптимизации. В качестве метода оптимизации выбран метод Trust-region, базирующийся на определении региона вокруг лучшего решения, в котором квадратичная модель аппроксимирует целевую функцию. Trust-region методы надежны и устойчивы, могут быть применены к плохо обусловленным задачам и имеют хорошие свойства сходимости. Хорошая сходимость обусловлена тем, что размер области на каждой итерации зависит от улучшений, сделанных на предыдущих итерациях [13].

Построена корреляция каждого из незафиксированных параметров γ_{ij} и числа обусловленности $cond(A')$. В таблице 2 представлены параметры с высокими значениями корреляций.

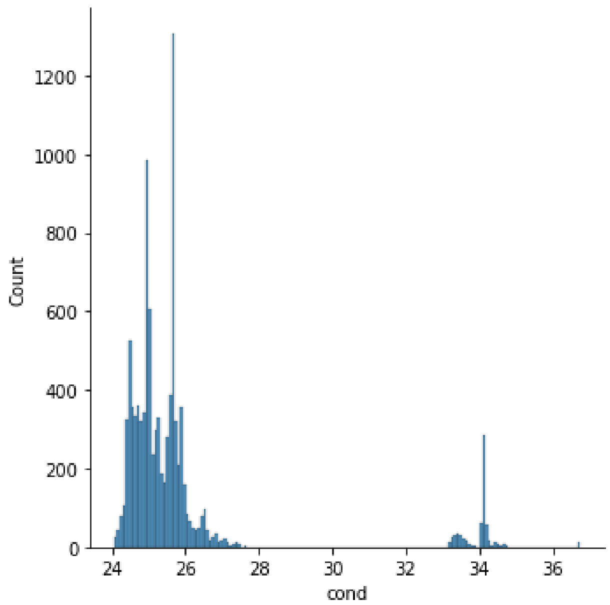
Таблица 2. Коэффициенты корреляций каждого из параметров γ_{ij} с числом обусловленности $cond(A')$

γ_{44}	-0.824142
γ_{24}	-0.659639
γ_{12}	-0.591375
γ_{14}	0.540963
γ_{32}	0.492502
γ_{15}	-0.488911
γ_{25}	0.441271
γ_{13}	0.408883
γ_{35}	-0.406343

На рисунке 2 представлена частотная диаграмма распределения полученных значений числа обусловленности. Все полученные значения принадлежат интервалу [24, 36]. Наиболее распространёнными оказались значения от 24 до 28. В диапазон от 28 до 32 не попало ни одного значения числа обусловленности. В интервале от 32 до 36 частота попадания значений выше, чем в интервале от 28 до 32, но ниже, чем в интервале от 24 до 28. На основании анализа результатов вычислительного эксперимента диапазон значений был разделен на 3 класса: от 24 до 28, от 28 до 32, от 32 до 36. В качестве границ классов выбраны значения 28 и 32. Таким образом, получены следующие категории значений числа обусловленности: $cond(A') \leq 28$ – категория «Отлично»; $28 < cond(A') \leq 32$ – категория «Хорошо»; $cond(A') > 32$ – категория «Плохо». На рисунке 2 видно, что в категории «Хорошо» нет значений.



a) b)



c)

Рис. 2. Частотная диаграмма распределения значений числа обусловленности
a) для 2000 симуляций b) для 5000 симуляций c) для 10000 симуляций

На рисунке 3 представлен график зависимости $cond(A')$ от γ_{44}, параметра с самой высокой корреляцией.

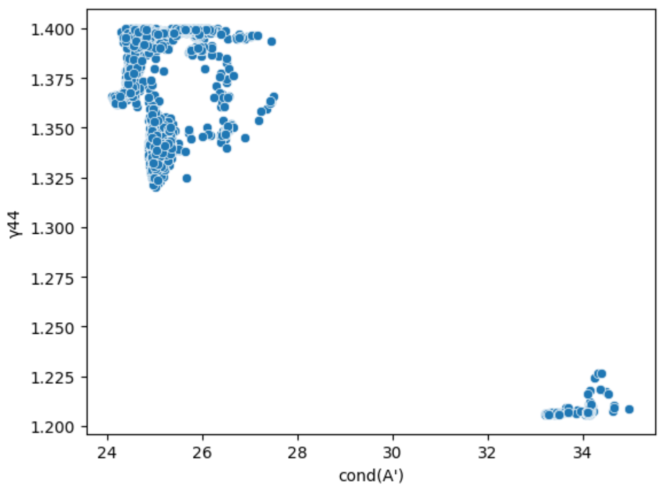
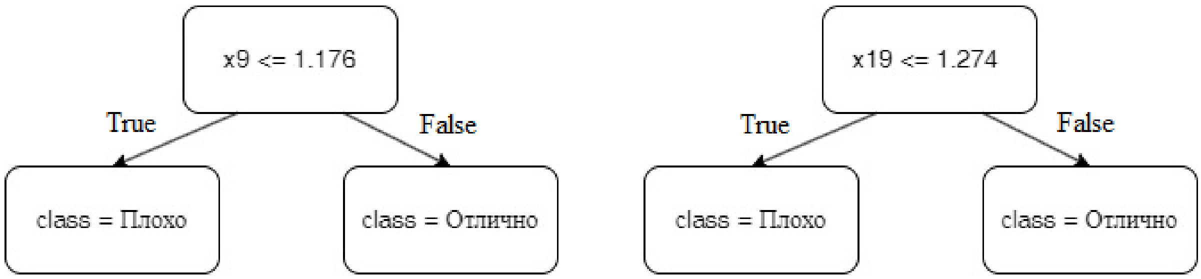


Рис. 3. График зависимости $cond(A')$ от γ_{44}

Видно, что если $\gamma_{44} > 1.3$, $cond(A') > 28$. То есть, если диапазону параметра γ_{44} задать нижнюю границу 1.3, значения $cond(A')$ получатся гарантированно хорошие (категория «Отлично»), обеспечивающие устойчивость решения.

Далее была решена задача классификации методом дерева решений с использованием функции DecisionTreeClassifier библиотеки sklearn.tree. 2000 значений числа обусловленности и соответствующих им наборов параметров поделены на обучающую (1500 значений) и тестовую (500 значений) выборки. Оценка предсказывалась по всем коэффициентам γ_{ij}, кроме зафиксированных. Числа обусловленности не использовались для предсказаний, только оценка. Глубина дерева варьировалась от 2 до 10. Во всех случаях получалось дерево глубины 2 (рисунок 4). Предсказывалось за проверку одного условия. В некоторых случаях предсказывалась оценка «Отлично», если γ_{24} $(x_9) > 1.176$ (рисунок 4a) В других случаях предсказывалась оценка «Отлично», если γ_{44} $(x_{19}) > 1.274$ (рисунок 4b).



a) b)

Рис. 4. Определение класса методом дерева решений

а) условием на γ_{24} b) условием на γ_{44}

Все построенные деревья предсказали без ошибки. 468 значений тестовой выборки были отнесены к классу «Отлично», 32 значения были отнесены к классу «Плохо».

Затем была решена задача регрессии методом дерева решений с использованием функции DecisionTreeRegressor библиотеки sklearn.tree. 2000 значений числа обусловленности и соответствующих им наборов параметров поделены на обучающую (1500 значений) и тестовую (500 значений) выборки. Значение числа обусловленности предсказывалось по всем коэффициентам γ_{ij}, кроме зафиксированных. Глубина дерева варьировалась от 2 до 10. При глубине, равной 6, средняя абсолютная ошибка (насколько фактические числа обусловленности тестовой выборки в среднем отличаются от предсказанных) составила 0.09022.

На рисунке 5 представлен фрагмент дерева глубины 6, по веткам которого можно прийти к минимальному значению числа обусловленности. На первом уровне производилась дифференциация по условию γ_{44}> 1.274, как и при решении задачи классификации. В дереве решений параметры называются сквозными номерами $(x_1, x_2, \dots, x_{25})$.

Согласно дереву решений минимальное значение $cond(A')$ (24.239) получается при одновременном выполнении следующих условий на параметры: γ_{44} (x_{19}) > 1.274, γ_{32} $(x_{12}) \leq$ 0.756, γ_{33} (x_{13}) > 1.399, γ_{45} (x_{20}) > 1.399, γ_{24} $(x_9) \leq$ 1.367, γ_{51} $(x_{21}) \leq$ 0.969.

С учётом ограничений на γ_{24} и γ_{44}, полученных деревом решений для задачи классификации, сгенерированы 200 стартовых точек и решена задача минимизации. Значения числа обусловленности для уточнённых интервалов уменьшились. Минимальное значение числа обусловленности – 24.304, максимальное – 27.333. Исходные интервалы (табл. 1) скорректированы по правилам, полученным деревом решений для задачи регрессии. Сгенерированы 200 стартовых точек. Для каждой стартовой точки решена задача минимизации числа обусловленности. Минимальное значение числа обусловленности составило 24.089, максимальное – 39.923.

По результатам применения деревьев классификации и регрессии определены интервалы значений корректирующих коэффициентов γ_{ij}, которые обеспечивают меньшие значения числа обусловленности матрицы A'.

Заключение. Решение задачи методами линейного программирования, полученное в работах [1], [11], улучшено при помощи применения алгоритма, основанного на комбинации статистических методов и методов машинного обучения. Уточнены интервалы параметров γ_{ij}, минимизирующих число обусловленности коэффициентной матрицы в модели (1). Полученная информация составляет основу для планирования физико-химических экспериментов, направленных на уточнение значений коэффициентов экстинций (элементов матрицы A). Так, наиболее приоритетными направлениями подобных экспериментов являются те, которые призваны уточнить значения коэффициентов экстинций, для которых значения γ_{ij} значимо отклоняются от единицы.

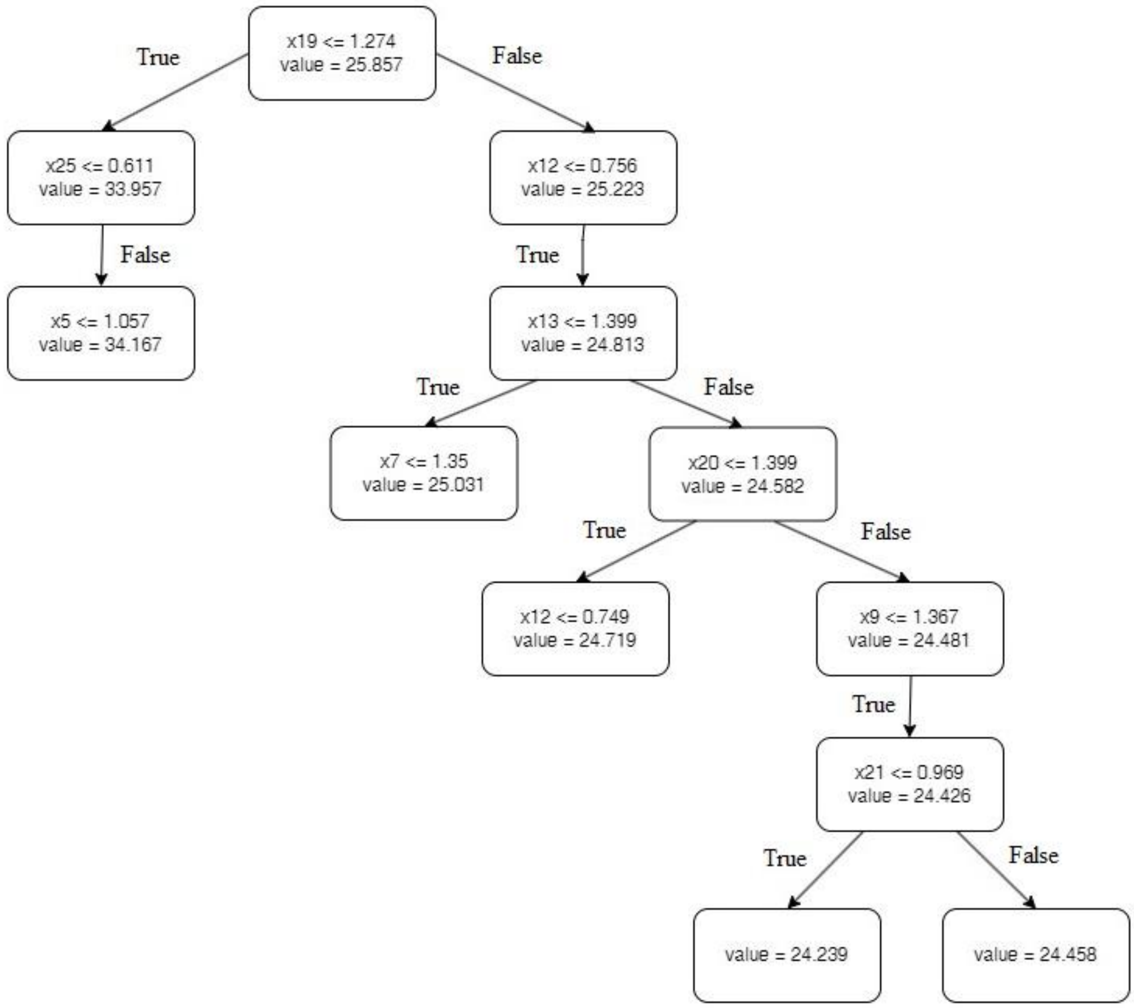


Рис. 5. Фрагмент дерева регрессии, ведущий к минимальному значению $cond(A')$

Список источников

1. Кузнецов С.И. Количественный УФ спектрометрический анализ смесей замещенных фуллеренов C_{60} / С.И. Кузнецов, Д.С. Юнусова, Р.Х. Юмагулова [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии, 2015. – Т. 82 – № 4. – С. 608 - 615.
2. Спивак С.И. Предельно допустимые оценки расчета параметров физико-химических моделей / С.И. Спивак, О.Г. Кантор, Д.С. Юнусова // Башкирский химический журнал, 2015. – Т. 22. – № 3. – С. 12-17.
3. Гончаров В.А. Методы оптимизации: учебное пособие // В.А. Гончаров. – М.: Изд-во Московского государственного института электронной техники, 2008. – 188 с.
4. Ахмадиев Ф.Г. Математическое моделирование и методы оптимизации: учебное пособие / Ф.Г. Ахмадиев, Р.М. Гильфанов. – Казань: Изд-во Казанского государственного архитектурно-строительного университета, 2017. – 178 с.
5. Лемешко Б.Ю. Методы оптимизации: Конспект лекций. / Б.Ю. Лемешко. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2009. – 126 с.
6. Скиена С. Алгоритмы. Руководство по разработке: пер. с англ. / Стивен Скиена. – СПб.: БХВ-Петербург, 2013. – 720 с.
7. Матренин П.В. Методы стохастической оптимизации: учебное пособие / П.В. Матренин, М.Г. Гриф, В.Г. Секаев. – Новосибирск: Издательство НГТУ, 2016. – 67 с.
8. Гладков Л.А. Генетические алгоритмы / Л.А. Гладков, В.В. Курейчик, В.М. Курейчик. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 320 с.
9. Миронов А.М. Машинное обучение. / А.М. Миронов. – М.: ООО «МАКС Пресс», 2018. – Часть 1. – 90 с.
10. Гусева А.И. Исследование алгоритмов многомерной классификации научных данных / А.И. Гусева, В.С. Киреев, И.А. Кузнецов, П.В. Бочкарев // Фундаментальные исследования, 2015. – № 11 (часть 5). – С. 868-874.

11. Минигалиева Г.И. Дифференциация пород терригенной толщи нижнего карбона по петрофизическим параметрам платформенной части республики Башкортостан / Г.И. Минигалиева, О.Р. Привалова, Т.В, Бурикова [и др.] // Материалы международной научно-практической конференции «ГеоСочи – 2019. Нефтегазовая геология и геофизика», 2019. – С. 149-152.
12. Кантор О.Г. Оценка погрешности экспериментальных данных в задачах параметрической идентификации линейных моделей / О.Г. Кантор, С.И. Спивак, Б.Л. Хашпер // Материалы XXII Международной научной конференции «Distributed computer and communication networks: control, computation, communications». – Москва: Российский университет дружбы народов, 2019. – С. 389-397.
13. Byrd R.H., Schnabel R.B., Schultz G.A. A trust region algorithm for nonlinearly constrained optimization. SIAM J. Numer. Anal., 1987, vol. 24, pp. 1152-1170.

Хашпер Белла Леонидовна. *Аспирант, Уфимский государственный нефтяной технический университет. AuthorID: 848754, SPIN: 2031-2622, bellakhashper@gmail.com, г. Уфа, ул. Космонавтов 8.*

Кантор Ольга Геннадиевна. *Доцент, профессор. д-р физ.-мат. наук, Уфимский государственный нефтяной технический университет. AuthorID: 588782, SPIN: 5677-7494, ORCID: 0000-0002-3186-3285, o_kantor@mail.ru, г. Уфа, ул. Космонавтов 8*

UDC 519.85
DOI:10.25729/ESI.2023.31.3.002

Application of random search methods and machine learning methods to optimization problems in multidimensional space

Bella L. Khashper, Olga G. Kantor

Ufa State Petroleum Technical University,
Russia, Ufa, *bellakhashper@gmail.com*

Abstract. The article discusses the application of random search method for finding the extremal value of a function that depends on multiple parameters. The advantages and disadvantages of the method are described, as well as the possibility of improving it using machine learning methods. Using the example of quantitative analysis of multicomponent mixtures, it is shown how random search method can be combined with machine learning methods to solve the problem of parametric identification.

Keywords: Multidimensional optimization, random search method, statistical methods, machine learning, classification task, regression task, decision tree, Trust-region method, condition number

References

1. Kuznetsov S.I., Yunusova D.S., Yumagulova R.Kh. [et al.] Kolichestvennyy UF spektrometricheskiy analiz smesey zameshchennykh fullerenov S60 [Quantitative UV spectrometric analysis of mixtures of substituted fullerenes C60]. Zhurnal prikladnoy spektroskopii [Journal of applied spectroscopy], 2015, vol. 82, no. 4, pp. 608-615.
2. Spivak S.I., Kantor O.G., Yunusova D.S. Predel'no dopustimyye otsenki parametrov fiziko-khimicheskikh modeley [Maximum permissible assessment parameters of physico-chemical models]. Bashkirskiy khimicheskiy zhurnal [Bashkir chemical journal], 2015, vol. 22, no. 3, pp. 12-17.
3. Goncharov V.A. Metody optimizatsii: uchebnoe posobie [Optimization methods: textbook]. Moscow, Izd-vo Moskovskogo sluzhashchego elektronnogo instituta tekhniki [Moscow state institute of electronic technology publ.], 2008, 188 p.
4. Akhmadiev F.G., Gilfanov R.M. Mathematicheskoe modelirovanie i metody optimizatsii: uchebnoe posobie [Mathematical modeling and optimization methods: textbook]. Kazan, Izd-vo Kazanskogo okhrany avariyno-stroitel'nogo universiteta [Kazan state university of architecture and engineering publ.], 2017, 178 p.
5. Lemeshko B.Yu. Metody optimizatsi: Konspekt lektsii [Optimization methods: Lecture notes]. Novosibirsk Izd-vo NGTU [NSTU publishing house], 2009, 126 p.
6. Skiena S. Algorithmy. Rukovodstvo po razrabotke [The Algorithm. Design Manual]. St. Petersburg, BKHV-Peterburg [BHV-Petersburg Publ.], 2013, 720 p.

7. Matrenin P.V., Grif M.G., Sekaev V.G. Metody stohasticheskoi optimizatsii: uchebnoe posobie [Stochastic optimization methods: textbook]. Novosibirsk, Izd-vo NGTU [NSTU Publ.], 2016, 67 p.
8. Gladkov L.A., Kureichik V.V., Kureichik V.M. Geneticheskie algorithmy [Genetic algorithms]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2006, 320 p.
9. Mironov A.M. Mashinnoe obuchenie [Machine learning]. Moscow, MAX Press Publ., 2018, Part 1, 90 p.
10. Guseva A.I., Kireev V.S., Kuznetsov I.A., Bochkarev P.V. Issledovanie algorithmov mnogomernoi klassifikatsii nauchnyh dannyh [Research of algorithms for multidimensional classification of scientific data]. Fundamental'nyye issledovaniya [Fundamental Research], 2015, no. 11 (part 5), pp. 868-874.
11. Minigalieva G.I., Privalova O.R., Burikova T.V. [et al.] Differentsiatsiya porod terrigennoi tolshchi nizhnego karbona po petrofizicheskim parametram platformennoi chasti respubliki Bashkortostan [Differentiation of rocks of the lower carboniferous terrigenous formation by petrophysical parameters of the platform part of the Republic of Bashkortostan]. In: Proceedings of the international scientific and practical conference “GeoSochi - 2019. Petroleum geology and geophysics”, 2019, pp. 149-152.
12. Kantor O.G., Spivak S.I., Khasper B.L. Otsenka pogreshnosti eksperimentalnyh dannyh v zadachah parametricheskoi identifikatsii lineinyh modelei [Estimation of experimental data error in problems of parametric identification of linear models]. XII International Conference on Distributed computer and communication networks: control, computation, communications (DCCN-2019) [In: Proceedings of the XXII International scientific conference "Distributed computer and communication networks: control, computation, communications". Moscow, Peoples' friendship university of Russia publ.], 2019, pp. 389-397.
13. Byrd R.H., Schnabel R.B., Schultz G.A. A trust region algorithm for nonlinearly constrained optimization. SIAM Journal on numerical analysis, 1987, vol. 24, pp. 1152-1170.

Khashper Bella Leonidovna. *Postgraduate student, Ufa state petroleum technical university. AuthorID: 848754, SPIN: 2031-2622, bellakhashper@gmail.com.*

Kantor Olga Gennadievna. *Associate Professor, Doctor of physical and mathematical sciences, Ufa state petroleum technical university, professor. AuthorID: 588782, SPIN: 5677-7494, ORCID: 0000-0002-3186-3285, o_kantor@mail.ru.*

Статья поступила в редакцию 19.06.2023; одобрена после рецензирования 08.09.2023; принята к публикации 18.09.2023.

The article was submitted 06/19/2023; approved after reviewing 09/08/2023; accepted for publication 09/18/2023.