

Математические модели принятия оптимальных решений и быстрые алгоритмы с использованием суперкомпьютерных вычислений

Я.Д. Сергеев, В.А. Гришагин, С.Ю. Городецкий, В.Е. Турлапов

Калабрийский университет, Ренде, Италия

Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского

Введение

Летом 2009 года группа исследователей Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского приступила к реализации поискового проекта по Федеральной целевой программе «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России», в рамках темы, наименование которой приведено в качестве заголовка тезисов. Представленный ниже материал информирует о характере выполняемых работ в той их части, которая соответствует тематике конференции: приводится описание классов задач, подходов к их исследованию, а также обзор имеющихся результатов.

Рассматриваемые классы задач

В рамках проекта рассматривается широкий класс задач принятия оптимальных решений, представимых перестраиваемым в ходе анализа семейством задач векторной многоэкстремальной оптимизации при невыпуклых ограничениях сложной структуры:

$$f(y) \rightarrow \inf, y \in Y, f : D \rightarrow R^n, \quad (1)$$

$$Y = \{y \in D \subseteq R^N; g^- \leq g(y) \leq g^+\}, \quad g : D \rightarrow R^m \quad (2)$$

$$D = \{y \in R^N : a \leq y \leq b\}, \quad (3)$$

где некоторые компоненты векторов-ограничителей g^- , g^+ могут принимать значения $-\infty$ или $+\infty$ соответственно. Заметим, что задачи указанного типа принципиально отличаются от рассматриваемых, например, в [10] и некоторых других источниках многоэкстремальных задач специальной структуры, требующих применения совершенно иного математического аппарата и подходов, по сравнению с описываемыми ниже. Семейства задач (1)-(3) интерактивно формируются на основе общей модели оптимизируемого объекта (процесса, явления и т.п.), включающей базовый набор параметров объекта $P \subseteq R^L$, $N \leq L$, а также совокупность критериев качества $w(p)$. При формировании промежуточной задачи (1)-(3) происходит выделение из общего вектора параметров p набора варьируемых компонент, образующих в (1)-(3) вектор y , при закреплении значений остальных параметров. Кроме того, из набора критериев качества $w(p)$ выделяется группа оптимизируемых критериев, образующих целевую вектор-функцию $f(y)$, а также набор ограничиваемых критериев, образующий функции ограничений-неравенств $g(y)$ в (2), вместе со значениями ограничителей g^- , g^+ . Предполагается, что в процессе поиска оптимального решения постановка задачи (1)-(3) может быть многократно трансформирована по результатам оптимизационных расчетов, выполненных для предшествующих постановок задач.

Наиболее характерным ограничением на свойства критериев в многоэкстремальной оптимизации обычно является непрерывность по Липшицу или Гельдеру с неизвестным априори значением соответствующих констант (см. [1,2,4,9,11,19,18] и др.). В рамках выполняемого проекта кроме этой широко используемой гипотезы рассматриваются ее расширения, а именно, классы функций с вычислимым липшицевым градиентом ([9, 13,18] и др.), или же функции с липшицевой производной по направлениям, в предположении, что сами производные не вычисляются [3, 4]. Функции последне-

го из указанных классов характеризуются тем, что для некоторой константы $L > 0$ $\forall y^1, y^2 \in D, y^1 \neq y^2$ и $u = (y^2 - y^1) / \|y^2 - y^1\|$ имеет место оценка

$$|\partial f(y^2) / \partial u - \partial f(y^1) / \partial u| \leq L \|y^2 - y^1\|.$$

Поскольку разным классам функций соответствуют различные наборы $J^k = J^k(f, g)$ измеряемых в некоторой точке y^k (из области поиска) локальных характеристик функций (значений, первых производных), то такие измерения будем называть испытаниями.

Ансамбли накопленных за k шагов результатов испытаний образуют поисковую информацию $\omega_k = \{(y^i, J^i) : i = 1, \dots, k\}$, используемую алгоритмами рассматриваемых ниже семейств при построении моделей (оценок) поведения функций, описывающих постановку задачи. Наличие единой расширяемой информационной базы позволяет выполнять трансформацию постановок задач (1)-(3) с возможностью сохранения и использования ранее накопленной поисковой информации, если только трансформация не приводила к изменению набора варьируемых параметров y и общего ансамбля используемых критериев f, g .

Редукция сложности структуры задач и семейство базовых алгоритмов с учетом параллелизма реализации

Основу выполняемых по проекту исследований составляет развитие алгоритмической базы и теории решения (сходимость, оценки эффективности) задач описываемых классов. Основным предметом исследования являются как обычные (не параллельные) версии новых алгоритмов, так и синхронные и асинхронные формы их параллельной реализации. Можно указать, например, на работу [19], в которой было показано, что классы базовых алгоритмов, разработанных представителями Нижегородской школы многоэкстремальной оптимизации, являются хорошо параллелизуемыми с возможностью получения теоретических оценок эффективности, включая оценки безызбыточности. Это остается справедливым и для новых разрабатываемых базовых алгоритмов. Под базовыми алгоритмами понимаются, как правило, методы решения одномерных вариантов рассматриваемых задач в скалярной постановке со «снятыми» функциональными ограничениями. Распространение принципов параллелизма на задачи общего класса опирается на возможность редукции сложности исходных постановок всюду, где такая редукция может быть применена.

Таким образом, в основе всех алгоритмов лежит принцип редукции сложности самой структуры задачи вида (1)-(3), а также, для большинства алгоритмов, редукции размерности ([1,4,5,9,19] и др.). Редукция сложности применяется к векторной природе критерия в общей постановке (1)-(3), а также к имеющимся функциональным ограничениям. Эти процедуры можно было бы назвать «скаляризацией и избавлением от функциональных ограничений». Обзор и изложение нескольких методов непараметрической скаляризации можно найти, например, в [4], (укажем также на некоторые из оригинальных работ: [6, 8]). Эти методы позволяют свести задачу отыскания оценки всего множества слабо эффективных точек к решению одной задачи со скалярным критерием (вид которого перестраивается в процессе поиска решения). В [3,4,19] также описано несколько однопроходных методов «избавления от ограничений». Их существенной характерной стороной (для большинства вариантов реализации) является сведение задачи условной многоэкстремальной оптимизации к задаче многоэкстремальной оптимизации на гиперинтервале. Целевая функция этой вспомогательной задачи оказывается «хорошо» устроенной, однако, как и в случае «скаляризации», является перестраиваемой в процессе решения в зависимости от результатов проведенных испытаний. Одним из известных методов редукции такого типа (для непараллельной реализа-

ции) является индексный метод учета ограничений, его описание приведено, например, в [4,19]. Базовая версия другого метода учета ограничений для класса триангуляционных алгоритмов, также приводящая к задаче с перестраиваемым критерием, описана в [3,4]. Исследования по параллельным реализациям алгоритмов рассматриваемых классов основываются на теоретических разработках, частично отраженных в работах [5,13,14,17,19] и др.

Фундаментальные методы редукции размерности и распараллеливание

При разработке алгоритмической базы в рамках проекта используются все современные методы редукции размерности, порождающие линейные структуры данных: рекурсивные многошаговые процедуры (см., например, [4,5]), фрактальные кривые, заполняющие пространство (см. [16]), наиболее характерными представителями которых являются различные аппроксимации кривых Пеано (см. [11], а также [4]), компонентные методы, включая методы на основе гиперинтервалов (см. библиографию и новые методы в [9]) и адаптивной триангуляции ([3,4], см. также альтернативные исследования в [12]), а также методы, удачно сочетающие компонентные разбиения и принципиально новые диагональные развертки [9].

Основная часть указанных методов имеют, кроме обычной формы, различные параллельные схемы реализации. Часть из них прошла этапы алгоритмической проработки и программной реализации (см., например, [1]), другие же находятся на уровне теоретической проработки (см., например, [5]) и подлежат реализации и тестированию на представительных наборах задач.

В программу настоящей конференции включен доклад от участников представляемого проекта, связанный с исследованиями нового типа множественных разверток в сочетании с параллельной реализацией исполняющих алгоритмов.

Некоторые принципиально новые направления исследований

В числе нескольких принципиально новых направлений, развиваемых при проведении исследований в рамках проекта, укажем на ниже следующие.

Предполагается широко использовать новые схемы балансировки глобальной и локальной информации в рамках общих решающих правил базовых алгоритмов глобальной информации. Этот подход предложен в [9] и предполагает, что на обычную схему выбора (для размещения новых испытаний) наиболее приоритетного интервала (гиперинтервала или компотенты триангуляционного разбиения) накладываются дополнительные правила временных запретов обработки некоторой части элементов разбиения с тем, чтобы после очередного существенного улучшения текущей оценки решения методу были предоставлены расширенные возможности по уточнению найденной оценки, в остальные же периоды, за счет временных запретов обработки элементов разбиения малого диаметра, расширяются возможности метода по обнаружению новых локальных экстремумов.

Участниками проекта построены (один из методов описан в [9, 18]) и будут детально исследованы алгоритмы многоэкстремальной оптимизации нового типа, вообще не использующие оценок липшицевых констант, а допускающие наличие неограниченного множества их возможных значений. Эта идея была предложена в [15] и реализована в виде метода DIRECT. В [9, 18] получены диагональные алгоритмы, использующие идею данного подхода и обладающие существенно большей эффективностью по сравнению с методом DIRECT. Сергеевым Я.Д. получено также новое нетривиальное обобщение для задач с измеримым липшицевым градиентом (статья принята в настоящее время к публикации).

При разработке новых алгоритмов будут также широко использованы уже опробованные и показавшие высокую эффективность методы учета локальной информации

о различии поведения критериев в разных подобластях области поиска в форме использования локализованных оценок констант классов функций (см. соответствующие описания в [4, 9]).

При реализации ряда компонентных методов (триангуляционных), требующих при вычислении приоритетов компонент, входящих в разбиение области, решения относительно сложных вспомогательных экстремальных задач (типа задач сепарабельного программирования [4]), а также при вычислении целевых функций в ряде приложений (см., например, задачи, рассмотренные в [7]), планируются исследования по использованию технологий проведения общих вычислений на графических процессорах со сверхвысокой степенью параллелизма. Тот же подход будет применен для визуализации процессов решения ряда прикладных задач, например, при оптимизации структуры пространственных механизмов. Предварительные исследования по этому направлению в рамках проекта представлены в виде отдельного доклада на данной конференции.

В рамках проекта будут развиты, алгоритмически проработаны и теоретически обоснованы новые методы многоэкстремальной оптимизации на основе адаптивной триангуляции области поиска для задач (1)-(3) на классе функций с липшицевыми производными по направлениям. В отличие от других работ, связанных с использованием регулярных (правильных) симплексов (см., например, [12]), предлагаемые методы используют системы триангуляций на симплексах произвольного вида, что обеспечивает большую свободу в размещении точек испытаний, поскольку поддерживать регулярный характер разбиения не требуется.

Вопросы теоретического оценивания безызбыточности и степени эффективности параллельных реализаций разрабатываемых алгоритмов будут решаться с использованием подходов, разработанных в [19,14].

Вопросы сопоставления и достоверной оценки эффективности методов

При разработке многомерных алгоритмов многоэкстремальной оптимизации чрезвычайно сложным является вопрос достоверной оценки их эффективности (включая оценки безызбыточности и сбалансированности загрузки процессоров при различных вариантах параллелизма реализаций). Ситуация усугубляется тем, что теоретические оценки обычно являются слишком завышенными и в силу их грубости не могут служить основой сравнения методов. В этих условиях единственным выходом является тестирование. Однако результаты вычислительных экспериментов на отдельных задачах также не являются показательными.

Поэтому важнейшим инструментом объективного сопоставления методов являются представительные выборки случайно генерируемых многомерных многоэкстремальных функций из специально построенных тестовых классов. При этом важно, чтобы выбранный тестовый класс порождал наборы функций с легко настраиваемой сложностью и управляемым (известным после генерации функции) расположением локальных и глобального минимумов. В рамках настоящего проекта принято решение о проведении тестовых испытаний на классах функций, порождаемых GRLS-генератором, описание которого можно найти в [9]. Порождаемые им классы функций обладают указанными выше полезными свойствами, а сам генератор уже используется более чем в 20 странах мира. Предполагается использовать специальные наборы критериев для сопоставления методов, включая построение операционных характеристик. Предлагаемый набор критериев тестирования для непараллельных реализаций рассмотрен в [9]. Для оценки эффективности распараллеливания набор критериев сравнения будет расширен.

Работа по проекту выполняется при финансовой поддержке Федерального агентства по науке и инновациям, госконтракт № 02.740.11.5018.

Литература

1. Баркалов К.А., Сидоров С.В., Рябов В.В.. Исследование методов глобальной оптимизации на некоторых классах многоэкстремальных задач. // 8-я Международная Конференция по высокопроизводительным параллельным вычислениям на кластерных системах (НПС-2008). Труды конференции – Казань: Изд. КГТУ, 2008.
2. Городецкий С.Ю. Многоэкстремальная оптимизация на основе триангуляции области. // Математическое моделирование и оптимальное управление. Вестник Нижегородского государственного университета. Вып. 2(21). Н. Новгород: изд-во ННГУ, 1999.– С. 249–269.
3. Городецкий С. Ю. SM – методы в задачах многоэкстремальной оптимизации с ограничениями для класса функций с липшицевыми производными по направлениям./ННГУ–Н.Новгород, 2007. – 22 с. Деп. в ВИНТИ 11.01.07, № 18-B2007.
4. Городецкий С.Ю., Гришагин В.А. Нелинейное программирование и многоэкстремальная оптимизация. – Н.Новгород: Изд-во ННГУ, 2007. – ISBN 978-5-85746-987-3. – 489 с.
5. Гришагин В.А., Сергеев Я.Д. Асинхронные параллельные характеристические алгоритмы в многомерной рекурсивной глобальной оптимизации. // 8-я Международная Конференция по высокопроизводительным параллельным вычислениям на кластерных системах (НПС-2008). Труды конференции – Казань: Изд. КГТУ, 2008.
6. Евтушенко Ю.Г., Потапов М.А. Методы численного решения многокритериальных задач // ДАН, 1986. Т. 28. № 11.
7. Коробейников А.В., Турлапов В.Е. Моделирование и инженерный анализ платформ Стюарта. Сиб. журн. вычисл. математики, РАН. Сиб. отд-ние. – Новосибирск, 2006. –Т.9, №3. – С.279-286.
8. Маркин Д.Л., Стронгин Р.Г. О равномерной оценке множества слабо эффективных точек в многоэкстремальных многокритериальных задачах оптимизации // ЖВМ и МФ. 1993. Т. 33. № 2. – С. 195-205.
9. Сергеев Я.Д., Квасов Д.Е. Диагональные методы глобальной оптимизации. – М.: Физматлит, 2008. – ISBN 978-5-9221-1032-7. – 352 с.
10. Стрекаловский А.С. Элементы невыпуклой оптимизации. – Новосибирск: Наука, 2003.
11. Стронгин Р.Г. Численные методы многоэкстремальной оптимизации (информационно-статистические алгоритмы) – М.: Наука, 1978. – 239 с.
12. Clausen J., Zilinskas A. Subdivision, Sampling, and Initialization Strategies for Simplicial Branch and Bound in Global Optimization. // Computers and Mathematics with Applications. 44, 2002. – P. 957-967.
13. Gergel V.P., Sergeyev Y.D. Sequential and parallel algorithms for global minimizing functions with Lipschitzian derivatives//Comput. Math.Appl.–1999.–V. 37, №4-5.–P.163-179.
14. Grishagin V.A., Sergeyev Y.D., Strongin R.G. Parallel characteristic algorithms for solving problems of global optimization. //J. Global Optim. –1997. –V. 10, № 2. – P.185-206.
15. Jones D.R., Pertunen C.D., Stuckman B.E. Lipschitzian optimization without the Lipschitz constant. // J. Optim. Theory Appl. – 1993. – Vol. 79, № 1. – P. 157-181.
16. Sagan H. Space-Filling Curves. – N.Y.: Springer-Verlag. 1994.
17. Sergeyev Y.D., Grishagin V.A. Parallel asynchronous global search and the nested optimization scheme. // J. Comput. Anal. Appl. –2001.– Vol.3, № 2. – P. 123-145.
18. Sergeyev Ya.D., Kvasov D.E. Global search based on efficient diagonal partitions and a set of Lipschitz constants //SIAM J. Optim., 2006,Vol. 16, №3.–P. 910-937.
19. Strongin R.G., Sergeyev Ya.D. Global Optimization with Non-Convex Constraints. Sequential and Parallel Algorithms. – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers. The Netherlands, 2000.