К.А. Баркалов, В.В. Рябов, С.В. Сидоров

Нижегородский государственный университет им.Н.И. Лобачевского

ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ИНДЕКСНОГО МЕТОДА ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ[1]

Данная работа продолжает развитие известного подхода к минимизации многоэкстремальных функций при невыпуклых ограничениях, описанного в работах [1–5] и получившего название *индексного метода* глобальной оптимизации. Подход основан на раздельном учете каждого ограничения задачи и не связан с использованием штрафных функций. При этом решение многомерных задач сводится к решению эквивалентных им одномерных. Соответствующая редукция основана на использовании кривых Пеано (называемых также развертками Пеано), однозначно отображающих единичный отрезок вещественной оси на гиперкуб, а также их обобщений («вращаемые развертки»), которые можно применять при решении задачи на кластерных системах с десятками и сотнями процессоров. Приведены результаты экспериментов, позволяющие оценить эффективность параллельного индексного метода. Эксперименты выполнены на вычислительном кластере ННГУ им. Н.И. Лобачевского, установленном в ходе выполнения нацпроекта «Образование».

Постановка задачи. Рассмотрим задачу глобальной оптимизации вида

$$\varphi^{*}=\varphi(y^{*})=\min\{\varphi(y):\ y\in D,\ g_j(y)\le 0,\ 1\le j\le m\}, \qquad (1)$$

$$D=\left\{y\in R^N : a_i\le y_i\le b_i, 1\le i\le N\right\},$$

где целевая функция $\varphi(y)$ (в дальнейшем обозначаемая также $g_{m+1}(y)$) и левые части ограничений $g_j(y), 1\le j\le m$, удовлетворяют условию Липшица с соответствующими константами $L_j, 1\le j\le m+1$, а именно

---

[1] Работа выполнена при поддержке совета по грантам Президента Российской Федерации (грант № МК-1536.2009.9).

$$\left| g_j(y_1)-g_j(y_2) \right| \le L_j|y_1-y_2|,\ 1\le j\le m+1,\ y_1,y_2\in D.$$

Используя кривые типа развертки Пеано $y(x)$, однозначно отображающие отрезок $[0,1]$ на N-мерный гиперкуб D:

$$D=\{y\in R^N:\ -2^{-1}\le y_i\le 2^{-1},\ 1\le i\le N\}=\{y(x):\ 0\le x\le 1\},$$

исходную задачу можно редуцировать к следующей одномерной задаче:

$$\varphi(y(x))=\min\{\varphi(y(x)):\ x\in[0,1],\ g_j(y(x))\le 0,\ 1\le j\le m\}.$$

Рассматриваемая схема редукции размерности сопоставляет многомерной задаче с липшицевой минимизируемой функцией и липшицевыми ограничениями одномерную задачу, в которой соответствующие функции удовлетворяют равномерному условию Гельдера [1], т.е.

$$|g_j(y(x'))-g_j(y(x''))|\le K_j|x'-x''|^{1/N},\ x',x''\in[0,1],\ 1\le j\le m+1,$$

где N – размерность исходной многомерной задачи, а коэффициенты K_j связаны с константами Липшица L_j исходной задачи соотношениями $K_j\le 4L_j\sqrt{N}$.

Различные варианты индексного алгоритма для решения одномерных задач и соответствующая теория сходимости представлены в работах [3], [5].

Использование множественных отображений. Редукция многомерных задач к одномерным с помощью разверток имеет такие важные свойства, как непрерывность и сохранение равномерной ограниченности разностей функций при ограниченности вариации аргумента. Однако при этом происходит потеря части информации о близости точек в многомерном пространстве, так как точка $x\in[0,1]$ имеет лишь левых и правых соседей, а соответствующая ей точка $y(x)\in R^N$ имеет соседей по 2^N направлениям. А при использовании отображений типа кривой Пеано близких в N-мерном пространстве образам y', y'' могут соответствовать достаточно далекие прообразы x', x'' на отрезке [0,1]. Как результат, единственной точке глобального минимума в многомерной задаче соответствует несколько (не более 2^N) локальных экстремумов в одномерной задаче, что, естественно, ухудшает свойства одномерной задачи.

Сохранить часть информации о близости точек позволяет использование множества отображений

$$Y_L(x)=\{y^1(x),\ldots,\ y^L(x)\}$$

вместо применения единственной кривой Пеано $y(x)$ [2], [4]. Каждая кривая Пеано $y^i(x)$ из $Y_L(x)$ может быть получена в результате некоторого сдвига вдоль главной диагонали гиперинтервала D. Таким образом сконструированное множество кривых Пеано позволяет получить для любых близких образов y', y'', отличающихся только по одной координате, близкие прообразы x', x'' для некоторого отображения $y^i(x)$.

Вращаемые развертки. К числу недостатков ставшей уже классической схемы построения множественных разверток (далее будем называть их сдвиговыми развертками или С-развертками) можно отнести, во-первых, наличие дополнительного ограничения, порождающего сложную допустимую область на одномерных отрезках. А во-вторых, при построении С-разверток число разверток L (а следовательно, и число параллельно решаемых задач) зависело от требуемой точности ε поиска решения задачи. С позиции экономии вычислительных ресурсов было невыгодно использовать число разверток большее, чем $\lceil \log_2(\varepsilon^{-1}) \rceil$. Например, при решении задачи с точностью 10^{-3} по координате целесообразно было выбирать число разверток не больше 10.

Преодолеть эти недостатки, сохранив информацию о близости точек в N-мерном пространстве, позволяет новая схема построения множественных отображений. Отличительной чертой предложенной схемы является построение множества кривых Пеано не с помощью сдвига вдоль главной диагонали гиперкуба, а поворотом развертки вокруг начала координат. При этом найдется отображение $y^i(x)$, которое точкам многомерного пространства y', y'', которым при исходном отображении соответствовали достаточно далекие прообразы на отрезке [0,1], будет сопоставлять более близкие прообразы x', x''. Развертки, порождаемые в соответствии с новой схемой, будем называть вращаемыми развертками или В-развертками.

Максимальное число различных поворотов развертки, отображающей N-мерный гиперкуб на одномерный отрезок, составляет 2^N. Использование всех из них является избыточным, требуется выбрать лишь часть из всех возможных вариантов. В предложенной схеме преобразование развертки осуществляется в виде поворота на угол $\pm\pi/2$ в каждой из координатных плоскостей. Число подобных пар поворотов определяется числом координатных плоскостей пространства $C_N^2 = N(N-1)/2$, а общее число преобразований будет равно $N(N–1)$. Учитывая исходное отображение, приходим к заключению, что данный способ позволяет строить до $N(N–1)+1$ развертки для отображения N-мерной области на соответствующие одномерные отрезки. При этом дополнительное ограничение, которое возникало при построении С-разверток [4], отсутствует. В случае необходимости данный способ построения множества отображений может быть легко «отмасштабирован» для получения большего (вплоть до 2^N) числа разверток.

Параллельный индексный метод. Использование множества отображений $Y_L(x)=\{y^1(x),\ldots,\ y^L(x)\}$ приводит к формированию соответствующего множества одномерных многоэкстремальных задач

$$\min\{\varphi(y^l(x)){:}x\in[0,1],\ g_j(y^l(x))\le 0,\ 1\le j\le m\},\ 1\le l\le L.$$

Каждая задача из данного набора может решаться независимо, при этом любое вычисленное значение $z=g_\nu(y')$, $y'=y^i(x')$ функции $g_\nu(y)$ в i-й задаче может интерпретироваться как вычисление значения $z=g_\nu(y')$, $y'=y^s(x'')$ для любой другой s-й задачи без повторных трудоемких вычислений функции $g_\nu(y)$. Подобное информационное единство позволяет решать исходную задачу (1) путем параллельного решения индексным методом L задач вида (3) на наборе отрезков [0,1]. Каждая одномерная задача решается на отдельном процессоре. Для организации взаимодействия на каждом процессоре создается L очередей, в которые процессоры помещают информацию о выполненных итерациях. Используемая схема не содержит какого-либо единого управляющего процессора, что увеличивает надежность выполняемых вычислений.

Подробное описание решающих правил параллельного индексного алгоритма глобальной оптимизации приведено в работе [7].

Результаты экспериментов. Один из известных подходов к оценке эффективности методов безусловной глобальной оптимизации основан на численном решении этими методами всех задач из некоторой случайно генерируемой выборки большого объема. Генераторы таких выборок можно рассматривать как некоторые классы функций $f(y)$, $y \in D$, с определенной на них вероятностной мерой.

Среди подобных генераторов следует отметить используемый в данной работе GKLS-генератор, описанный в [7] и доступный для свободного скачивания. Отличительной особенностью GKLS-генератора является прозрачный способ задания сложности генерируемых задач: параметрами генератора являются количество локальных минимумов задачи, размеры их областей притяжения, удаленность глобального минимума от локальных и многое другое. Всё это определяет востребованность GKLS-генератора, который используется более чем в 40 странах для тестирования методов глобальной оптимизации. Для сравнения методов использовались описанные в [8] несколько классов тестовых задач по 100 функций каждый. Область поиска D во всех задачах составляет гиперкуб $[-1.0, 1.0]^N$.

Примененная процедура оценки основана на операционных характеристиках [4] и состоит в следующем. Пусть некоторая задача из рассматриваемой выборки решается с помощью алгоритма S. При этом задаче сопоставляется порождаемая алгоритмом последовательность точек испытаний $\{y^k\}$. Указанная последовательность усекается (т.е. процесс решения прекращается) либо в связи с первым попаданием точки очередного испытания в заданную δ-окрестность решения y^*, либо в связи с тем, что в ходе выполнения заданного числа $K_{\max}$ испытаний такое попадание не имело места. В проведенных численных экспериментах использовалось значение $K_{\max}=10\ 000$.

Результат решения всех задач выборки с помощью алгоритма S представляется функцией $P_S(k)$, характеризующей долю задач, для которых в ходе k шагов поиска имели место попадания точек испытаний в заданную δ-окрестность решения. Такую функцию будем называть операционной характеристикой алгоритма S. Отметим, что при использовании GKLS-генератора δ-окрестность решения задачи заранее известна.

Эксперименты проводились для двух реализаций алгоритма с вращаемыми развертками: *последовательной* и *параллельной* при плотности $m = 10$, числе разверток $L = 6$. При этом использовались параметры надежности $r = 3{,}8$ (данные параметры являются минимальными для соответствующих методов, при которых достигается решение 100 % задач из выборки); точность попадания в окрестность решения составляла $\delta = 0{,}01$.

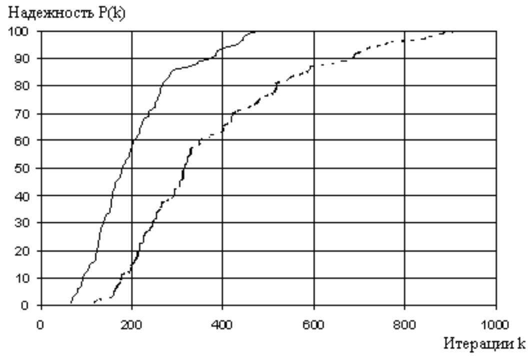

Рис. 1. Операционные характеристики
для параллельного метода

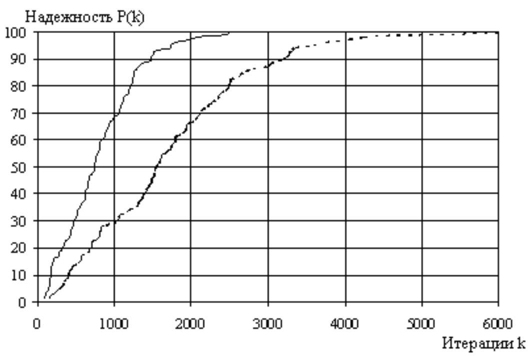

Рис. 2. Операционные характеристики
для последовательного метода

Операционные характеристики для обоих методов, полученные на некоторых классах, порожденных GKLS-генератором, представлены соответственно на рис. 1 и 2. При этом нижняя разрывная кривая характеризует *последовательный* метод, а верхняя непрерывная – *параллельный* метод с вращаемой разверткой. Указанное расположение кривых показывает, что параллельный алгоритм с вращаемыми развертками обеспечивает в среднем значительно более быстрое получение оценок, лежащих в заданной окрестности решения, чем его последовательный прототип.

В проведенных экспериментах доля правильно решенных задач определяет *надежность поиска решения*, а число выполненных испытаний целевой функции – *затратность при поиске решения*. Для последовательного метода число итераций k совпадает с количеством испытаний K, а при применении параллельной версии $K \approx k \cdot L$.

Отметим, что оценка по итерациям косвенно характеризует выигрыш по времени от применения параллельных реализаций. Таким образом, выигрыш по времени на первом классе функций (при условии правильного решения всех задач) примерно равен 1,9 раза, а на втором – он составил 2,4 раза, т.е. коэффициент ускорения возрастает с ростом сложности задач. Аналогичный эффект наблюдается при увеличении размерности (отчасти – за счет возможности увеличения коэффициента распараллеливания, совпадающего с числом используемых разверток L).

Дадим оценки избыточности. Анализируя результаты, приведенные на рис. 1, можно оценить общее количество вычислений функций, выполненных параллельной версией, исходя из общего числа итераций (оно составило 475), необходимого для решения 100 % задач. Общее число измерений функции (в худшем случае) при этом оценивается как $475L = 28500$ на задачу. При этом для полного решения всех задач в худшем случае последовательной версии потребовалось 900 итераций. Таким образом, коэффициент избыточности по количеству испытаний при $L = 6$ за счет параллелелизма может быть оценен как 28500/900 = 3,17. Аналогичный способ оценивания для второго эксперимента (см. рис. 2) дает оценку избыточности, равную $2500L/6000 = 2{,}5$.

Укажем также абсолютное время, затраченное программной реализацией алгоритма на поддержку собственного функционирования в условиях суперкомпьютерных вычислений (без учета времени вычисления функций). Оно составило в проведенных экспериментах (в среднем на одну задачу) 0,6 с на каждый процессор. Общее время вычислений зависит от затрат на одно вычисление функции, т.е. определяется их вычислительной сложностью. Указанные временные характеристики соответствуют следующим показателям использованного оборудования. При проведении экспериментов использовался высокопроизводительный кластер, приобретенный Нижегородским университетом в 2007 году, с двухпроцессорными двухъядерными серверами Intel Xeon 3.2 GHz, число разверток соответствовало числу вычислительных ядер. Размер оперативной памяти, выделяемой каждому ядру составлял 1 Гб.

В заключение можно отметить, что предложенная схема построения множества кривых Пеано (В-развертки) ориентирована на кластерные системы с большим числом вычислительных узлов. Проведены вычислительные эксперименты, результаты которых позволяют оценить эффективность параллельного индексного метода. Эксперименты проведены с помощью параллельной системы глобальной оптимизации GloblExpert, разработаной в ННГУ им. Н.И. Лобачевского.

Список литературы

1. Стронгин Р.Г. Поиск глобального оптимума. – М.: Знание, 1990.

2. Стронгин Р.Г. Параллельная многоэкстремальная оптимизация с использованием множества разверток// Вычисл. матем. и матем. физ. – 1991. – Т. 31, № 8. – С. 1173–1185.

3. Стронгин Р.Г., Баркалов К.А. О сходимости индексного алгоритма в задачах условной оптимизации с ε-резервированн-

ными решениями // Математические вопросы кибернетики. – М.: Наука, 1999. – С. 273–288.

4. Strongin R.G., Sergeyev Ya.D. Global optimization with non-convex constraints. Sequential and parallel algorithms. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2000.

5. Баркалов К.А. Ускорение сходимости в задачах условной глобальной оптимизации. – Н. Новгород: Изд-во Нижегород. гос. ун-та, 2005.

6. Баркалов К.А., Сидоров С.В., Рябов В.В. Параллельные вычисления в задачах многоэкстремальной оптимизации // Вестн. ННГУ. Математическое моделирование и оптимальное управление. – Н. Новгород: Изд-во Нижегород. гос. ун-та. – 2009. – № 6(1) – С. 171–177.

7. Software for generation of classes of test functions with known local and global minima for global optimizations / M. Gaviano [et al.] – URL: http://si.deis.unical.it/~yaro/GKLS.html // ACM TOMS. – 2003. – Vol. 29, No. 4. – P. 469–480.

8. Lera D., Sergeyev Ya.D. Lipschitz and Hölder global optimization using space-filling curves // Applied Numerical Mathematics. – January 2010. – Vol. 60, No. 1–2, P. 115–129.

А.А. Безгодов, С.В. Иванов, С.С. Косухин

НИИ наукоемких компьютерных технологий Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики

ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЙ ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭКСТРЕМАЛЬНОЙ ДИНАМИКИ МОРСКИХ ПЛАВУЧИХ ОБЪЕКТОВ

Моделирование динамики морских плавучих объектов (судов и объектов океанотехники) в экстремальных условиях эксплуатации является актуальной задачей, тесно связанной с обеспечением безопасности мореплавания. Это обусловлено тем, что в сложных погодных условиях статические характери-