В жизни всегда есть место оптимуму

Текст В. П. Гергель (д.т.н., проф.), К. А. Баркалов (к.ф.-м.н.), Н .Н. Оленев (к.ф.-м.н., доц.), А. В. Сысоев (к.т.н.), Нижегородский госуниверситет имени Н. И. Лобачевского, Вычислительный центр имени А. А. Дородницына РАН

К

Несмотря на поражающий воображение быстрый рост производительности компьютеров, в любой текущий момент времени существуют актуальные задачи фундаментальной и прикладной науки, для анализа и исследования которых производительности существующих средств вычислительной техники оказывается недостаточно.

К числу таких задач относятся, например, так называемые проблемы «большого вызова» – моделирование климата, генная инженерия, проектирование интегральных схем, анализ загрязнения окружающей среды, создание лекарственных препаратов и др. К данной категории с полным правом можно отнести также задачи моделирования и анализа интеллектуальных процессов принятия решений (так называемые *задачи глобальной оптимизации*). Задачи данного класса имеют широкий спектр прикладного применения и обладают высокой трудоемкостью вследствие зависимости моделей от большого числа параметров и сложного характера функционалов, входящих в модель.

В статье мы рассмотрим две разноплановые задачи оптимального выбора, находящиеся на разных полюсах областей приложений – идентификацию параметров модели экономики Нижегородской области и оптимизацию профиля колеса для рельсового транспорта. Объединяет их и то, что обе задачи были решены при выполнении больших междисциплинарных проектов.

1. Идентификация параметров модели региональной экономики[1]

1.1. Постановка задачи

Давайте попробуем помочь администрации региона РФ в оценке последствий принятия управленческих решений. Для этого построим модель экономики региона, которая позволяла бы давать прогноз экономического развития, тем самым помогая выбрать наилучшую стратегию действий. Традиционно здесь используют модели межотраслевого баланса. Так, модель межотраслевого баланса В. В. Леонтьева оказала колоссальное влияние на статистические ведомства всех стран мира, которые собирают данные, необходимые для формирования математических моделей в экономике. Однако в случае отдельного региона (в исследовании рассматривалась Нижегородская область, но и для остальных регионов ситуация будет схожая) трудно воспользоваться такой моделью по следующим основным причинам. Во-первых, экономика Нижегородской области чрезвычайно открыта и поэтому данных, необходимых для построения регионального межотраслевого баланса, нет, есть только данные для построения межотраслевого баланса всей страны. Во-вторых, в переходных условиях изменений в экономике технологические коэффициенты (нормы прямых затрат продукции смежных отраслей на выпуск продукции отрасли) быстро меняются от года к году. Адекватным инструментом исследования и прогнозирования могли бы стать многосекторные балансовые нормативные динамические модели (разрабатываемые в ВЦ РАН), если научиться их идентифицировать по исторической статистике, т. е. определять параметры модели, при которых ее поведение в прошлом соответствует историческим данным. Идентифицированная имитационная модель региональной экономики дает возможность получить количественную оценку динамики макропоказателей экономики региона, включая оценку экономического потенциала, показатели структуры человеческого капитала и его динамики.

1.2. Описание модели

Полное описание модели обширно, поэтому здесь укажем только основную идею. При построении модели экономики региона выделено восемь экономических агентов. Во-первых, три Производителя, которые в модели представлены тремя секторами экономики Нижегородской области (1) добывающие и инфраструктурные отрасли; 2) обрабатывающие отрасли региональной экономики, 3) отрасли услуг, включая финансовые услуги. Во-вторых, три основных Потребителя конечной продукции: 4) домашние хозяйства, 5) правительство региона, 6) внешние для региона потребители. Замыкает модель описание поведения еще двух экономических агентов: 7) банковской системы региона, 8) торгового посредника. Модель учитывает налогообложение производителей и домашних хозяйств, теневой оборот в сфере производства и потребления, формирование консолидированного регионального бюджета за счет сбора налогов, поставки произведенной продукции на внутренний и внешний рынки и множество других факторов взаимодействия выделенных экономических агентов. Итоговая модель содержит более ста соотношений, выражающихся в виде дифференциальных уравнений. Задача идентификации модели региональной экономики заключается в поиске значений неизвестных параметров, при которых рассчитанные по модели временные

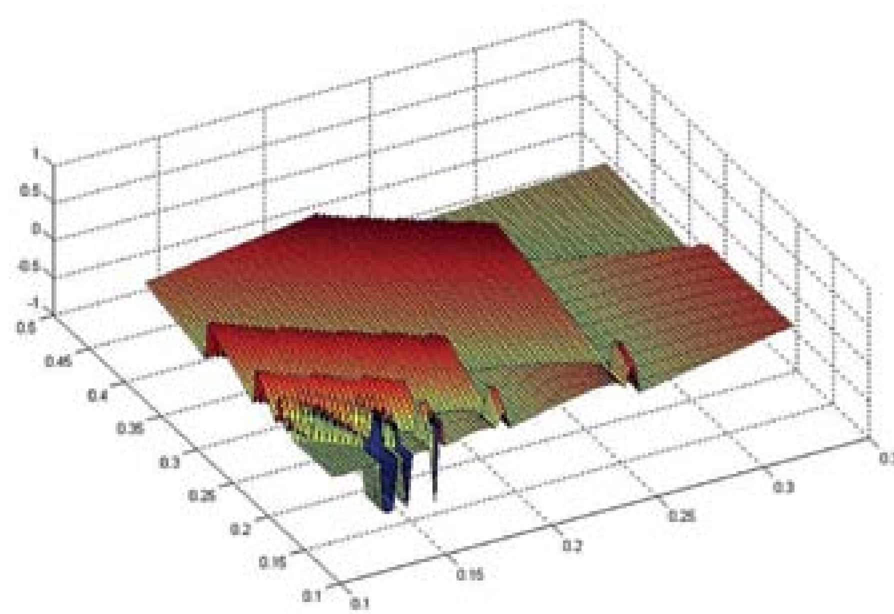

Рис. 1. Двумерное сечение целевой функции

---

[1] Работа выполнена в ННГУ имени Н. И. Лобачевского и ВЦ имени А. А. Дородницына РАН при поддержке РФФИ, проект № 11-07-97017-р_поволжье_а.

ряды макропоказателей экономики близки к историческим статистическим данным для этих временных рядов. Критерием близости расчетных и исторических статистических временных рядов может служить свертка критериев Тейла для каждого макропоказателя. И вот здесь исследование сталкивается с «проклятием размерности» – число параметров, которые нельзя определить напрямую из статистики, оказывается для таких моделей настолько велико, что даже суперкомпьютер оказывается бессилен, если искать решение перебором сложной задачей. К примеру, если бы использовался метод перебора по равномерной сетке с некоторым количеством точек n по каждой переменной, то общее число узлов сетки составило бы n^{60}, что неприемлемо ни при каком $n > 1$.

Указанная задача была решена на кластере ННГУ имени Н. И. Лобачевского с помощью параллельного метода глобального поиска. Оценка оптимума была получена после 300 тыс. итераций, время получения оценки составило 26 мин.; общее время счета составило 3 часа.

2. Оптимизация профиля железнодорожного колеса[2]

Что может быть проще колеса, изобретенного столь давно, что никто сейчас не знает достоверно, когда именно? Что здесь оптимизировать, тем более с использованием суперкомпьютеров? Попробуем разобраться.

Факт № 1: современные скоростные поезда развивают скорость свыше пятисот километров в час в максимуме и от двухсот в среднем.

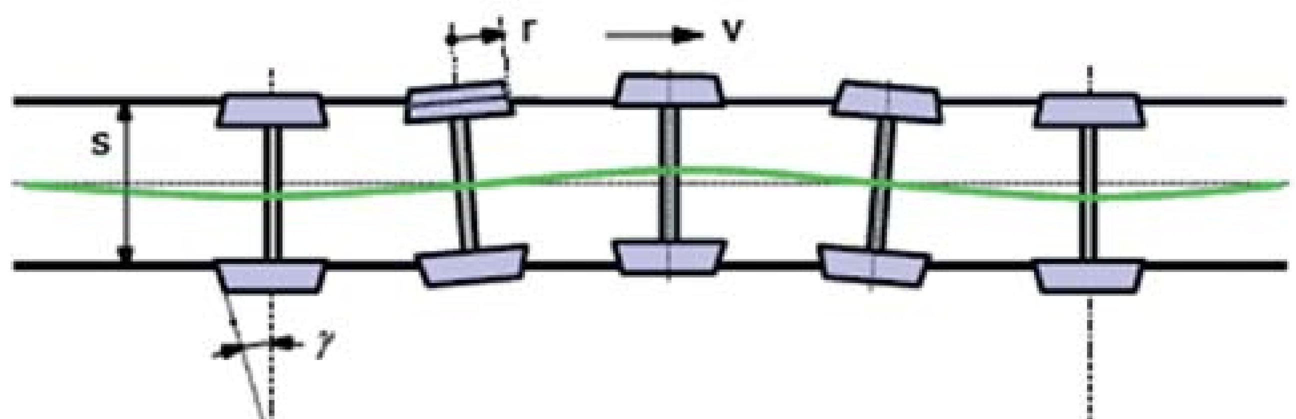

Рис. 2. Траектория движения колесной пары

всех возможных вариантов. Помочь в данной ситуации могут параллельные алгоритмы глобального поиска, разработанные в ННГУ имени Н. И. Лобачевского, которые осуществляют «умный» перебор, отсеивая заведомо неперспективные варианты.

1.3. Задача оптимизации

Возникающая таким образом задача глобальной оптимизации имеет 60 независимых параметров, 86 нелинейных ограничений и многоэкстремальную целевую функцию. В качестве иллюстрации на рис. 1 приведено двумерное сечение целевой функции. Как видно из рисунка, функция имеет узкие и глубокие минимумы, отыскать которые является

Найден допустимый вариант значений параметров, при которых результаты расчетов на историческом интервале 2000–2009 гг. соответствуют статистическим данным Нижегородской области, а прогноз экономического развития дает экономически осмысленные результаты.

С помощью идентифицированной математической модели Нижегородской области в ВЦ РАН были проведены сценарные расчеты, отражающие динамику экономических показателей региона при различной экономической политике (пессимистичный, базовый и оптимистичный сценарии).

Факт № 2: протяженность железных дорог в России – чуть менее 100 тыс. километров, в Европе – более 200 тыс. километров. Факт № 3: компании ОАО «РЖД» принадлежит порядка 20 тыс. локомотивов и более 600 тыс. грузовых и пассажирских вагонов.

Нетрудно видеть, что уменьшение износа колес и рельсового полотна на проценты может дать огромный экономический эффект, а повышение, например, устойчивости вагона в процессе движения позволит повысить безопасность и/или

[2] Работа выполнена в ННГУ имени Н. И. Лобачевского и Технологическом университете г. Делфт (Нидерланды), грант Netherlands Organization for Scientific Research (NWO) № 047.016.014.

увеличить среднюю скорость движения. Итак, смысл оптимизации очевиден, но нужны ли здесь высокопроизводительные вычисления?

2.1. Постановка задачи

В процессе движения центр колесной пары вследствие конической формы колеса совершает синусоидальные колебания относительно линии, проходящей в середине рельсового полотна (рис. 2).

Кинематические свойства контакта колеса с рельсом: радиус вращения, угол контакта, угол наклона колесной пары и др. – меняются при поперечном смещении колесной пары относительно рельса и определяются поперечной позицией колесной пары и профилями колеса и рельса.

Радиус вращения колеса в контактной точке может различаться для правого и левого колес, поскольку колесная пара смещается по рельсу (радиусы r_1 и r_2 соответственно на рис. 3).

Когда колесная пара находится в центральной позиции, радиусы вращения совпадают, т. е. $r_1 = r_2 = r$. Отличие между радиусами вращения левого и правого колес Δr может быть определено как функция бокового смещения колесной пары по отношению к ее центральной позиции. Минимизация этой разности радиусов вращения является целью задачи.

Профиль колеса описывается с помощью B-сплайна, построенного на основе множества точек на кромке и поверхности катания колеса.

В качестве компонент вектора y параметров задачи оптимизации выбраны ординаты точек сплайна, при этом абсциссы данных точек фиксированы.

В описываемой задаче число подвижных точек, а следовательно, и число переменных равно 11; минимизируется разность радиусов

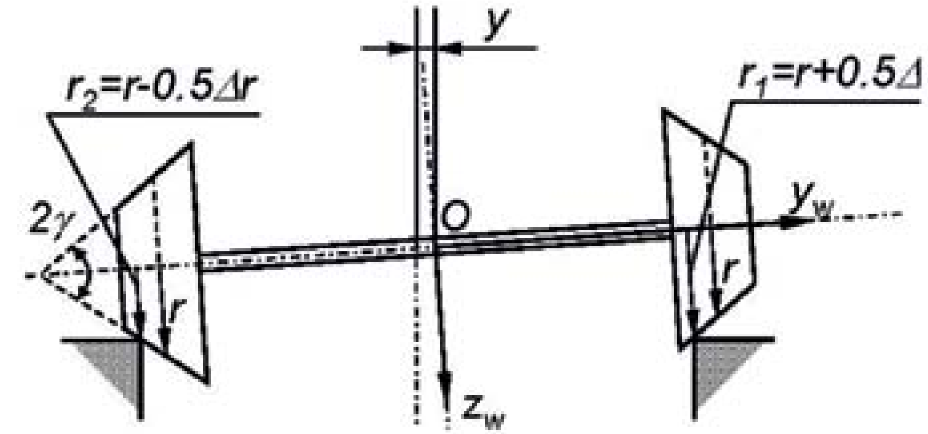

Рис. 3. Смещение колесной пары в перпендикулярном разрезе

вращения $\Delta r(y)$, а ограничения вводятся из соображений устойчивости (например, одно из ограничений наложено на максимальный угол наклона колесной пары).

Таким образом, возникает задача оптимизации с 11 параметрами и 6 ограничениями. Ограничения аналитической формы не имеют и заданы функционально (в виде вычислительных процедур в пакете MATLAB).

Вычисление значений входящих в задачу функций для одного набора значений параметров занимает более десяти секунд на современном процессоре (Intel Xeon 3 ГГц).

2.2. Задача оптимизации

Итак, задача сформулирована. Попробуем оценить, какие временные ресурсы нужны для ее решения в зависимости от выбранного метода.

Если оптимум искать, используя полный перебор на сетке выбранной точности, получим следующее. Взяв десять вариантов значения каждого из параметров (напомним, всего параметров 11), получим 10^{11} вычислений, что дает порядка 10^{12} секунд, то есть 3 года непрерывного счета на суперкомпьютере с 10 тыс. процессоров.

Таким образом, сложность задачи такова, что высокопроизводительные вычисления не только являются необходимыми, но и должны в обязательном порядке дополняться эффективными численными методами решения для получения результата в обозримых временных рамках.

Описанная задача решалась с помощью параллельного алгоритма глобального поиска, разработанного в ННГУ имени Н. И. Лобачевского, на кластере Технологического университета г. Делфта.

Покоординатная точность решения – 2^{-10}, то есть 1024 точки по каждому параметру. Время получения оценки оптимума с данной точностью – 27 часов, при этом значения функционалов задачи были вычислены 17 214 раз.

Расчеты, проведенные специалистами Технического университета г. Делфта для колеса оптимизированного профиля, показали, что его ресурс (т. е. межпроверочный интервал) возрос до 120 тыс. км пробега (более чем в пять раз по сравнению с колесом оригинального профиля), а максимально допустимая скорость – с 40 до 60 м/с.