

ДВА ПОДХОДА К ПОИСКУ ГЛОБАЛЬНОГО МИНИМУМА МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Ю.Г. Евтушенко, В.У. Малкова, А.А. Станевичюс

На основе метода неравномерных покрытий, предложенном Ю.Г. Евтушенко в [1], был разработан и реализован метод параллельного поиска глобального экстремума липшицевых функций [2, 3]. Этот метод был применен для определения структуры атомного кластера с минимальной потенциальной энергией.

Случай липшицевых функций является наиболее проработанным. Если известна константа Липшица, то метод неравномерных покрытий дает гарантированное решение, но на практике им удается решить лишь задачи невысокой размерности. Численные эксперименты показывают, что эффективность метода существенно зависит от константы Липшица, которая обычно априори неизвестна и приходится пользоваться ее завышенными верхними оценками, что существенно усложняет расчеты. Вместе с тем, во многих задачах существуют подобласти, где константа Липшица невелика и ориентация на максимальную константу неоправдана.

Ниже рассмотрен новый вариант алгоритма, в котором снято условие знания и постоянства константы Липшица на всей области поиска и введено условие дифференцируемости функции.

Особенность нового алгоритма заключается в способе вычисления нижней границы значения функции. Миноранта минимизируемой функции строится на подмножествах исходного множества с учетом их особенностей, таких как выпуклость, дифференцируемость. Особое внимание уделено дифференцируемой функции, градиент которой удовлетворяет условию Липшица.

Рассмотрим задачу отыскания глобального минимума функции f , определенной на множестве $X \subset R^n$:

$$f_* = \underset{x \in X}{glob \min} f(x)$$

Через f_* обозначим минимальное значение целевой функции $f(x)$. Будем считать, что допустимое множество X – это n -мерный параллелепипед с гранями, параллельными координатным плоскостям:

$$X = \{x \in R^n, a \leq x \leq b\}$$

В процессе расчетов используются вспомогательные векторы $a_i, b_i \in R^n$ и порождаемые ими прямоугольные параллелепипеды с гранями, параллельными координатным плоскостям: $P_i = \{x \in R^n : a_i \leq x \leq b_i\}$.

Будем считать, что все векторы $a_i \geq a$ и $b_i \geq b$. Таким образом все параллелепипеды $P_i \subseteq X$. В качестве точек c_i берутся центры параллелепипедов P_i : $c_i^j = (a_i^j + b_i^j) / 2, 1 \leq j \leq n$.

Вектор главной диагонали d_i параллелепипеда P_i имеет компоненты $d_i^j = (b_i^j - a_i^j), 1 \leq j \leq n$. Чебышевская норма вектора d_i определяет длину максимального ребра w_i параллелепипеда P_i : $w_i = \|d_i\|_\infty = \max_{1 \leq j \leq n} d_i^j$.

Через q_i обозначим значение минимума миноранты функции $f(x)$ на P_i . Если $f(x)$ удовлетворяет условию Липшица всюду на X с константой l , т.е. для любых x и y из P_i выполнено неравенство $|f(x) - f(y)| \leq \|x - y\|$, то

$$q_i = \min_{x \in P_i} g(c_i, x) = f(c_i) - \frac{l}{2} \max_{1 \leq j \leq n} \|d_i^j\| = f(c_i) - \frac{l}{2} w_i \quad \text{при } y = c_i.$$

Если градиент функции $f(x)$ удовлетворяет условию $\|f_x(x) - f_y(y)\| \leq L \|x - y\|$ с константой L , то q_i определяется выражением $q_i = f(c_i) - \langle |f_x(c_i)|, b_i - c_i \rangle - \frac{L_i}{2} \|b_i - c_i\|^2$.

Программная реализация метода неравномерных покрытий выполняется однотипным образом для разных липшицевых функций. По-разному вычисляются только оценки минимума q_i и минимальные радиусы покрывающих шаров ξ . Алгоритм покрытия множества X параллелепипедами P_i остается один и тот же.

Если $q_i \geq R_m - \varepsilon$, то параллелепипед P_i может быть исключен, так как глобальный минимум на нем не дает улучшения текущего рекорда R_m более чем на ε и поиск продолжается на множестве $X \setminus P_i$. В противном случае, если $q_i < R_m - \varepsilon$, то параллелепипед P_i делится пополам по максимальному ребру и поиск ведется на этих двух

частях. Если главные диагонали одной или обеих частей меньше, чем ξ , то на них $f(x) \geq q_i = f(c_i) - \varepsilon$ и эти части исключаются из области поиска. В центрах оставшихся частей вычисляются значения $f(x)$. При этом если возможно, улучшается рекорд и проверяется условие покрытия обеих частей. Те части, которые оказались покрытыми, исключаются из области поиска. Если обе части исключены, то P_i также исключается, если нет, то продолжается дальнейшее деление до тех пор, пока параллелепипед P_i не будет покрыт.

Для покрытия параллелепипеда X используется метод ветвей и границ. Из всех непокрытых параллелепипедов образуется список. Из этого списка выбирается тот параллелепипед, с которого начинается покрытие. Это так называемый рабочий параллелепипед. В настоящее время предлагается использовать следующие три правила выбора рабочего параллелепипеда:

MINQ – параллелепипед с минимальной нижней оценкой функции $f(x)$;

FIFO – первый из списка;

LIFO – последний из списка.

На каждом шаге описанного выше метода один параллелепипед из текущего списка разбивается пополам на два новых по наибольшему ребру плоскостью, параллельной координатной. Сечение P_i по ребру максимальной длины представляется наиболее простым и естественным. Однако в случае наличия большого разброса значений компонент вектора градиента можно ввести некоторый аналог масштабирования. Если функция $f(x)$ дифференцируема, то в качестве масштабирующего коэффициента можно взять соответствующую компоненту вектора градиента функции, вычисленного в центре параллелепипеда P_i .

Первое, что понадобилось в реализации метода в виде параллельной программы, так это введение понятия контрольной точки расчетов, которая включает рекордную точку и текущие наборы (списки) параллелепипедов для каждого процессора. Промежуточные результаты расчетов могут сохраняться в виде контрольной точки. При последующих расчетах можно взять такую сохраненную точку в качестве начальной, в том числе и при других значениях параметров, например, при другом числе процессоров. Для реализации такой "контрольной точки" запоминается лучшая найденная точка и текущая область поиска в виде некоторого двоичного дерева для каждого процессора.

Для тестирования метода был реализован параллельный вариант программы определения структуры атомного кластера с минимальной потенциальной энергией. В качестве математического метода применен изложенный выше метод. Практическая отладка и вычислительные эксперименты были проведены на вычислительном комплексе МВС100К Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (<http://www.jssc.ru>) и на Grid-сегменте, построенном на базе вычислительных ресурсов ВЦ РАН, ИСП РАН и МФТИ. Grid-сегмент работает под управлением инфраструктуры Globus 4.0, а доступ пользователей к нему осуществляется через специально выделенный сервер ВЦ РАН.

Для численных экспериментов использовалась функция Морса, определяющая энергию атомных кластеров, состоящих из n атомов:

$$F(\rho) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n ((e^{\rho(1-\|X_i-X_j\|)} - 1)^2 - 1)$$

где ρ – скалярный параметр, X_i и X_j ($-1 \leq X_i, X_j \leq +1$) – трехмерные векторы координат центров частиц i и j , соответственно. Задача состоит в определении координат n частиц таким образом, чтобы при фиксированном значении параметра ρ функция $F(\rho)$ достигала глобального минимума.

Сложность этой задачи быстро растет с увеличением параметра ρ . На данный момент на сайте <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/~jon/structures/Morse.html> приведены текущие результаты поиска оптимума для n от 5 до 80 и при $\rho = 3, 6, 10, 14$.

В проведенных расчетах значения ρ , брались равными 3, 6, 10 и 14 а число атомов кластера достигало 85, при этом число искомых скалярных переменных – 255.

Предполагалось, что функция F удовлетворяет условию Липшица с некоторой константой l или ее градиент удовлетворяет условию Липшица с некоторой константой L . Так как их значения априори не известны, то делалось несколько просчетов: вначале с небольшим значением констант, а после нахождения некоторого рекорда их значения постепенно увеличивались таким образом, чтобы время счета было приемлемым.

В качестве еще одного теста для указанных алгоритмов была взята функция, определяющая структуру кластера из 25 атомов, у которых все координаты, кроме двух, были фиксированы (см. рис. 1). Задача состояла в нахождении значений лишь двух координат. Зависимость минимизируемой функции от искомых двух координат приведена на рис. 1.

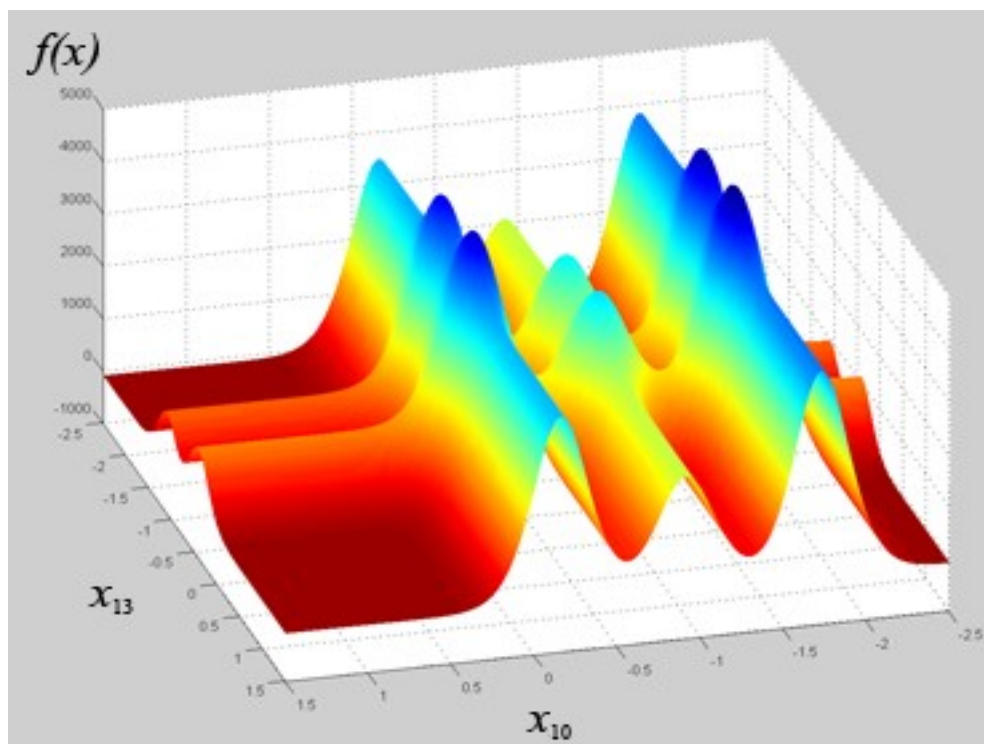


Рисунок 1: График функции при меняющихся переменных x_{10} и x_{13} .

Результаты сравнения эффективности двух алгоритмов, в первом из которых предполагалось, что функция удовлетворяет условию Липшица, а во втором учитывалось, что функция дифференцируема и ее градиент удовлетворяет условию Липшица, приведены ниже в таблице. Они демонстрируют, что второй алгоритм в несколько раз сокращает число разрезов, необходимое для нахождения оптимума. Кроме того, у этого алгоритма на порядок выше достоверность оценок, благодаря чему он не отсеивает те параллелепипеды, которые могут содержать оптимум, что повышает вероятность его нахождения.

Алгоритм	Способ выбора ребра	Число параллелепипедов	Процент недостоверных оценок
<i>$f(x_{10}, x_{13})$</i>			
Первый	По макс. ребру	16 947	14,22%
Второй	По макс. ребру	7 895	0,00%
Второй	По «весу»	2 097	0,05%
<i>$f(x_4, x_{12})$</i>			
Первый	По макс. ребру	17 327	1,63%
Второй	По макс. ребру	7 419	0,05%
Второй	По «весу»	3 781	0,08%
<i>$f(x_6, x_3)$</i>			
Первый	По макс. ребру	33 761	10,06%
Второй	По макс. ребру	5 965	1,15%
Второй	По «весу»	4 823	2,26%

Таблица. Сравнение двух алгоритмов

На рис. 2 показан сравнительный график поиска оптимума для функции Морса при числе атомов 25 (75 переменных) для этих двух алгоритмов. Из графика видно, что второй алгоритм значительно быстрее находит оптимум.

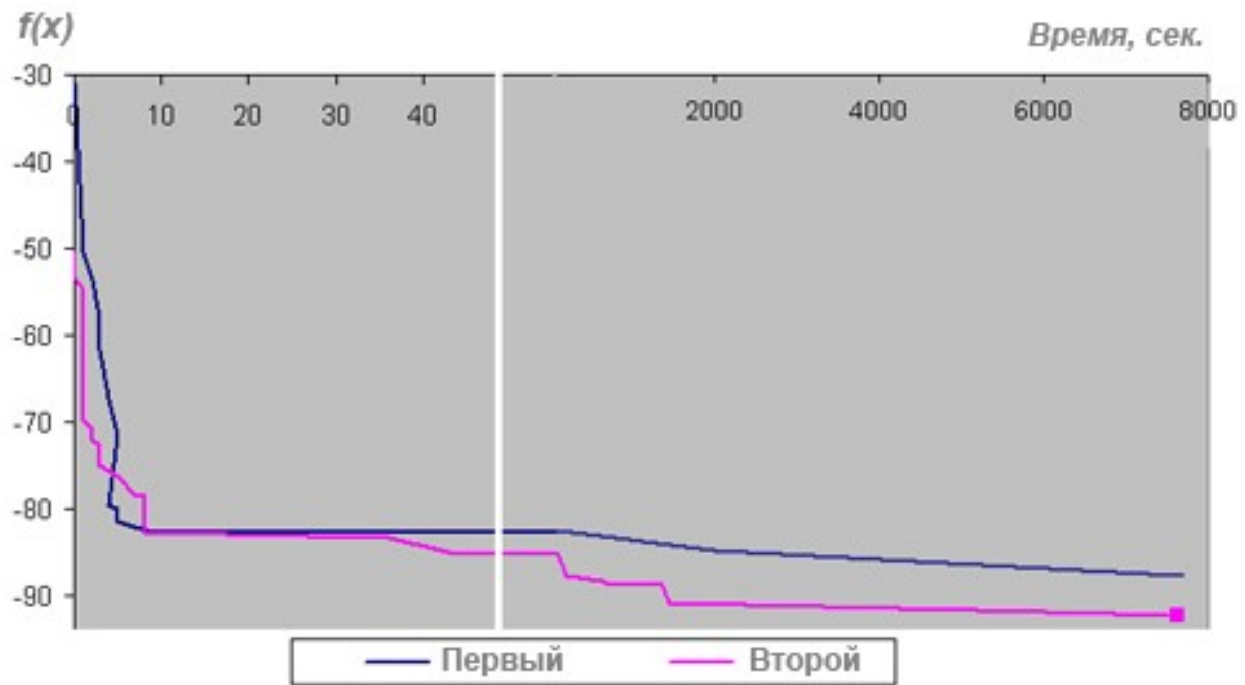


Рисунок 2: Сравнение эффективности двух алгоритмов

Рассмотренные два варианта метода неравномерных покрытий позволяют проводить глобальную оптимизацию липшицевых функций. Было снято условие знания и постоянства константы Липшица на всей области поиска. Введено условие дифференцируемости функции. Благодаря этому, удалось существенно улучшить нижние оценки значений функций в текущих областях поиска и, тем самым, сократить время расчетов, ускорив отсев «неперспективных» параллелепипедов.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Ю.Г. Евтушенко "Численный метод поиска глобального экстремума функций (перебор на неравномерной сетке)" // ЖВМ и МФ. N6, 1971.
2. Ю.Г. Евтушенко, В.У. Малкова, А.А. Станевичюс "Распараллеливание процесса поиска глобального экстремума" // Автоматика и телемеханика. N5, 2007, с.46-58.
3. Ю.Г. Евтушенко, В.У. Малкова, А.А. Станевичюс "Параллельный поиск глобального экстремума функций на многоядерных вычислительных комплексах". Материалы Всероссийской научной конференции "Научный сервис в сети ИНТЕРНЕТ", Новороссийск, 24-29 сентября 2007 г., Изд-во Московского Университета, с.127-129