О НЕКОТОРЫХ СПОСОБАХ БАЛАНСИРОВКИ ЛОКАЛЬНОГО И ГЛОБАЛЬНОГО ПОИСКА В ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМАХ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

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

Данная работа продолжает развитие информационно-статистического подхода к минимизации многоэкстремальных функций при невыпуклых ограничениях, получившего название индексного метода глобальной оптимизации. При этом решение многомерных задач сводится к решению эквивалентных им одномерных. Редукция основана на использовании кривых Пеано, однозначно отображающих единичный отрезок вещественной оси на гиперкуб. Также используется схема построения множества кривых Пеано («вращаемые развертки»), которую можно эффективно применять при решении задачи на кластере с десятками и сотнями процессоров. Основное внимание уделяется применению смешанной локально-глобальной схемы вычислений для ускорения сходимости параллельного алгоритма, а также применению локального спуска при каждом улучшении оценки глобального оптимума (локальное уточнение рекорда) с последующим продолжением глобального поиска.

1. Введение

Данная работа продолжает развитие известного подхода к минимизации многоэкстремальных функций при невыпуклых ограничениях, описанного в работах [1–6] 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. Используется схема построения множества кривых Пеано («вращаемые развертки»), которую можно применять при решении задачи на кластерных системах с десятками и сотнями процессоров. Данная схема распараллеливания дополняется применением смешанной локально-глобальной стратегии поиска, заключающейся в чередовании итераций индексного метода и его локально-адаптивной модификации, что приводит к ускорению сходимости. Кроме того, в работе исследуется применение методов многомерного локального спуска из каждой точки, в которой достигается улучшение оценки глобального оптимума. Причём локальный спуск может быть скомбинирован как с исходным глобальным методом, так и с его смешанной версией. Приведены результаты экспериментов по сравнению смешанного алгоритма с исходным индексным методом (с локальным уточнением рекордов и без него), а также с известным алгоритмом DIRECT [9], убедительно подтверждающие достоинство параллельной схемы построения множественных отображений в совокупности со смешанной стратегией поиска и локальными уточнениями рекордов. Эксперименты выполнены на вычислительном кластере ННГУ им.Н.И.Лобачевского, установленном в ходе выполнения нацпроекта «Образование».

2. Постановка задачи

Рассмотрим задачу глобальной оптимизации вида

$$\varphi^*=\varphi(y^*)=\min\{\varphi(y):\ y\in D,\ g_j(y)\le 0,\ 1\le j\le m\},$$
$$D=\{y\in R^N:\ a_i\le y_i\le b_i,\ 1\le i\le N\}, \tag{1}$$

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 $L_j, 1\le j\le m$, а именно

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

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 (см. [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 есть 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].

3. 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 близким 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

$$Y_L(x)=\{y^1(x),\ldots,\ y^L(x)\} \tag{2}$$

вместо применения единственной кривой Пеано $y(x)$ (см. [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 $y^i(x)$.

3.1 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 e поиска решения задачи. С позиции экономии вычислительных ресурсов было невыгодно использовать число разверток большее, чем $\log_2(e^{-1})$. 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 схема построения множественных отображений, предложенная в [7]. Отличительной чертой этой схемы является посторенние 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, которое равно $C_N^2 = \dfrac{N(N-1)}{2}$, 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 [2], отсутствует. В случае необходимости данный способ построения множества отображений может быть легко «отмасштабирован» для получения большего (вплоть до 2^N) числа разверток.

3.2 Параллельный индексный метод

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

$$\min\{\ \varphi(y^l(x)):x\in[0,1],\ g_j(y^l(x))\le 0,\ 1\le j\le m\},\ 1\le l\le L. \tag{3}$$

Каждая задача из данного набора может решаться независимо, при этом любое вычисленное значение $z=g_v(y')$, $y'=y^i(x')$ функции $g_v(y)$ в i-й задаче может интерпретироваться как вычисление значения $z\in g_v(y')$, $y'=y^s(x'')$ для любой другой s-й задачи без повторных трудоемких вычислений функции $g_v(y)$. 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 [8].

3.3 Смешанная локальго-глобальная схема построения вычислений

Локально-адаптивный алгоритм является модификацией индексного метода глобального поиска, состоящей в том, что, начиная с некоторого шага, при выборе точек итераций используется дополнительная информация – текущие оценки плотности вероятности для расположения точки искомого оптимума. Оценки плотности определяются по значениям функционалов задачи, вычисленных в точках выполненных итераций. Таким образом, плотность переоценивается после каждой итерации, причем максимумы плотности соответствуют окрестностям точек текущих оптимальных значений. Подробно решающие правила локально-адаптивного метода приведёны, например, в [6]. Существенным параметром этого метода является целое число $0 \leq \alpha \leq 30$, влияющее на характер сходимости. При $\alpha=0$ поиск носит глобальный характер, при $\alpha=30$ – локальный.

Смешанный алгоритм является модификацией индексного метода глобального поиска, состоящей в том, что, начиная с некоторого шага итерации, определяемые правилами индексного метода, чередуются с итерациями, определяемыми правилами локально-адаптивного алгоритма. Частота чередования является параметром метода.

Данная схема естественным образом адаптируется к параллельному индексному методу с вращаемыми развёртками.

3.4 Локальное уточнение рекордов

Для быстрого уточнения текущих оценок глобально-оптимальных решений может быть применено *локальное уточнение рекордов*. Оно заключается в применении одного из методов многомерного локального спуска при каждом улучшении оценки глобального оптимума. Глобальный или смешанный метод продолжает свою работу после окончания локального спуска, причем конечная точка локального спуска добавляется в базу поисковой информации для глобального поиска, тогда как промежуточные точки траектории спуска используются лишь для уточнения адаптивной оценки константы Липшица.

В данной работе экспериментально показано, что даже применение достаточно простого метода наискорейшего координатного спуска с переменным шагом даёт улучшение сходимости без потери глобального оптимума.

4. Результаты экспериментов

На кафедре математического обеспечения ЭВМ ННГУ им. Лобачевского разрабатывается программный комплекс параллельной глобальной оптимизации Global Expert, одной из особенностей которого является быстрая работа с большими объёмами поисковой информации (т.е. совокупностью всех точек, в которых вычислялись функции задачи), включая собственную подсистему подкачки, учитывающую особенности алгоритмов глобального поиска. В рамках данной работы реализована поддержка смешанной локально-глобальной схемы в подсистеме хранения поисковых данных. Смешанная схема поддерживается также и в режиме возобновления вычислений после предшествующей остановки поиска (например, по исчерпанию вычислительных ресурсов).

4.1 Классы тестовых функций

При сравнении методов глобальной оптимизации, ориентированных на определённые классы задач, является актуальным вопрос выбора тестовых задач для сравнения. В литературе встречается немало различных классов липшицевых многоэкстремальных функций для минимизации, многие из которых генерируются автоматически. Среди подобных генераторов одним из наиболее востребованных является GKLS, описанный, например, в [12] и доступный для свободного скачивания. Отличительной особенностью GKLS является прозрачный способ задания сложности генерируемых задач: количество локальных минимумов, размеры областей притяжения и многое другое. Всё это во многом определило использование GKLS в данной работе.

В работе [13] для сравнения методов глобальной оптимизации описывается 6 классов тестовых задач по 100 функций каждый. В таблице 1 приведены параметры GKLS-генератора для каждого класса. Здесь N – размерность, M – количество локальных минимумов, f^* - значение функции в точке глобального оптимума, d – расстояние точки глобального оптимума от вершины базового параболоида, r_g – радиус области притяжения глобального оптимума.

Таблица 1. Параметры GKLS-генератора для классов тестовых функций

Класс	N	M	f^*	d	r_g
1-simple2-hard	2 2	10 10	-1.0 -1.0	0.66 0.90	0.33 0.20
3-simple 4-hard	3 3	10 10	-1.0 -1.0	0.66 0.90	0.33 0.20
5-simple 6-hard	4 4	10 10	-1.0 -1.0	0.66 0.90	0.33 0.20

Область поиска – $[-1.0, 1.0]^N$.

5.2 Сравнение с алгоритмами DIRECT и LBDIRECT

Известный алгоритм глобальной оптимизации DIRECT и его модификация LBDIRECT (locally-biased DIRECT) подробно описаны в [9–11], а из работы [13] использованы результаты экспериментов для приведённых классов тестовых функций для двух указанных алгоритмов, а также для исходного индексного метода глобального поиска, который также известен как алгоритм Стронгина с индексной схемой учёта ограничений (обозначим его AG, как в [13]). Введём также следующие сокращения: индексный метод с вращаемыми развёртками – AG-R, индексный метод с вращаемыми развёртками и смешанной стратегией – AG-R-mixed, индексный метод с одной развёрткой и смешанной стратегией – AG-mixed.

Как и в работе [13], здесь для каждой задачи использовалось правило остановки $\left\| y - y^* \right\| \leq \rho$, т.е. достижение известного глобального оптимума с заданной точностью. Для задач размерности N=2,3 использовалось $\rho = 0.01 \cdot \sqrt{N}$, а для N=4 – $\rho = 0.02 \cdot \sqrt{N}$.

Параметры индексного метода и его модификаций: плотность развёртки m=10, параметр надёжности для AG-mixed – r=4.3, для AG-R-mixed – r=3.2, 3.8 (в зависимости от числа развёрток). В AG-R-mixed каждая четвёртая итерация – локально-адаптивная с параметром $\alpha = 15$.

В таблицах 2 и 3 приведены максимальные и средние количества испытаний, затраченные методами для достижения глобального оптимума с заданной точностью. В случае, если не все 100 задач были решены, в скобках указано количество нерешённых задач. Прочерк означает неприменимость метода с указанным количеством развёрток для задач слишком маленькой размерности, поскольку максимальное число развёрток в текущей реализации *L=N(N-1)*. Курсивом отмечены результаты поиска с локальным уточнением рекордов.

Таблица 2. Сравнение AG-R-mixed и других алгоритмов в худшем случае.

Класс задач		Максимальное число испытаний									
		irect	BDirect	G	G-mixed =4.3	G-R L=2r=3.8	G-R L=4r=3.8	G-R L=6r=3.2	G-R-mixed L=2 r=3.8	AG-R-mixed L=4r=3.8	AG-R-mixed L=6 r=3.2
1-simple		127	165	239	207	587	-	-	221	-	-
*1-simple**		-	-	77	-	183	-	-	141	-	-
2-hard		1159	2665	938	90000 (2)	90000 (2)	-	-	90000 (1)	-	-
2-hard*		-	-	90000 (1)	-	938	-	-	*90000 (2)*	-	-
3-simple		1179	1717	3945	1287	3505	5330	4276	1301	961	1013
3-simple*		-	-	929	-	537	751	1242	910	804	1066
4-hard		77951	85931	26964	90000 (2)	11672	15057	18535	7513	9025	90000(1)
4-hard*		-	-	8231	-	7890	7105	90000 (1)	8601	6817	90000(1)
5-simple		90000 (1)	90000 (15)	27682	9684	31611	36551	17399	057	5221	9697
5-simple*		-	-	7028	-	10711	14985	8825	7369	6325	7538
6-hard		90000 (43)	90000 (65)	90000 (1)	82923	90000 (2)	90000 (2)	90000 (3)	-2	61613	81081
6-hard*		-	-	90000 (2)	-	61590	90000 (1)	68011	75065	62565	82187

Таблица 3. Сравнение AG-R-mixed и других алгоритмов в среднем.

Класс задач		Среднее число испытаний									
		Direct	LB Direct	AG	AG-mixed$r$ =4.3	AG-R L=2r=3.8	AG-R L=4r=3.8	AG-R L=6r=3.2	AG-R-mixedL=2r=3.8	AG-R-mixed L=4 r=3.8	AG-R-mixed L=6 r=3.2
1-simple		68.1	70.7	90.1	82.3	198.1	-	-	94.4	-	-
*1-simple**		-	-	16	-	24	-	-	23.3	-	-
2-hard		208.6	304.3	333.1	1968.1	2168.7	-	-	1080.0	-	-
2-hard*		-	-	>331.6	-	124.2	-	-	>144.3	-	-
3-simple		238.1	355.3	817.7	380.2	1359.1	1963.9	1239.7	346.7	370.5	336.8
3-simple*		-	-	118.8	-	113.9	106.8	123.7	123.4	117.5	121.8
4-hard		5857.2	9990.6	3541.8	3809.6	4483.3	5652.7	4125.5	1798.9	1689.8	2543.1
4-hard*		-	-	1226.2	-	1266.9	1234	>1245	1362.9	1403.5	>1359.6
5-simple		>12206	>23452	3950.4	1644.1	4179.2	5752.7	3470.0	1387.5	1536.1	1315.6
5-simple*		-	-	1079.2	-	1293.4	1639.8	856.6	993.5	1202.2	931.3
6-hard		>57333	>65326	>22315	19788	>24038	>27548	>28791	>18642	16416.1	16934.9
6-hard*		-	-	>15408	-	14322	>15622	13398	16865	16237.9	14872.7

Полученные данные убедительно показывают в целом превосходство последовательного смешанного индексного метода с вращаемыми развёртками, особенно с ростом размерности и сложности решаемых задач. Заметим, однако, что подбор одинакового для всех классов задач параметра надёжности r затруднён: 2-й, 4-й и 6-й классы задач порой решаются на 98-99%, а для одной-двух оставшихся задач небольшое варьирование r приводит к их решению. Здесь намеренно не приводятся результаты такого варьирования, хотя в результатах, взятых из [13], такое варьирование присутствует.

В докладе также приводятся результаты применения параллельного метода со всеми перечисленными модификациями.

6. Заключение

В рамках данной работы программно реализована модификация последовательного и параллельного индексного метода с вращаемыми развёртками путём внедрения смешанной локально-глобальной схемы выполнения вычислений и локального уточнения рекордов. Проведено исследование эффективности этих стратегий в последовательном и параллельном случае на шести классах автоматически сгенерированных многоэкстремальных задач различной сложности. Результаты наглядно подтверждают ускорение сходимости, а эффективный паралеллизм позволяет ещё дальше отодвинуть порог сложности решаемых задач.

Отметим также, что существуют параллельные реализации метода DIRECT и его модификаций. Сравнение с ними параллельного индексного метода может стать одним из дальнейших направлений исследований.

Работа выполнена при поддержке совета по грантам Президента Российской Федерации (грант № МК-1536.2009.9), а также Федерального агентства по науке и инновациям, госконтракт № 02.740.11.5018.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Стронгин Р.Г. Поиск глобального оптимума. М.: Знание, 1990.
2. Стронгин Р.Г. Параллельная многоэкстремальная оптимизация с использованием множества разверток // Ж. 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-резервированными 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., Стронгин Р.Г. Метод глобальной оптимизации с адаптивным порядком проверки ограничений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2002., Т.42, №9. С. 1338−1350.
6. Баркалов К.А. Ускорение сходимости в задачах условной глобальной оптимизации. Нижний Новгород: изд-во Нижегородского гос. ун-та, 2005.
7. Баркалов К.А., Рябов В.В., Сидоров С.В. Использование кривых Пеано в параллельной глобальной оптимизации // Материалы Девятой международной конференции-семинара "Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах", Владимир, 2009, стр. 44 - 47.
8. Стронгин Р.Г., Гергель В.П., Баркалов К.А. Параллельные методы решения задач глобальной оптимизации // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. – Т. 52. №10, 2009.–С. 25–32.
9. Jones D.R., Perttunen C.D., Stuckman B.E. Lipschitzian optimization without the Lipschitz constant // Journal of Optimization Theory and Applications. – 1993. – N. 79. – P. 157–181.
10. Gablonsky M.J. Modifications of the DIRECT Algorithm // Ph.D. thesis, North Carolina State University, Raleigh, NC, 2001.
11. Gablonsky M.J., Kelley C.T. A locally-biased form of the DIRECT Algorithm // Journal of Global Optimization. – 2001. – Vol. 21. – P. 27–37.
12. Gaviano M., Kvasov D.E., Lera D., Sergeyev Ya.D. Software for generation of classes of test functions with known local and global minima for global optimization: [http://si.deis.unical.it/~yaro/GKLS.html] // ACM TOMS. – 2003. – Vol. 29, N. 4. – P. 469–480.
13. Lera D., Sergeyev Ya.D. Lipschitz and Hölder global optimization using space-filling curves // Applied Numerical Mathematics. – January 2010. – Vol. 60, N. 1–2, P. 115–129.