

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОИСКА ГЛОБАЛЬНОГО ЭКСТРЕМУМА МЕТОДОМ ИМИТАЦИИ ОТЖИГА, РАСПАРАЛЛЕЛЕННОГО РАЗЛИЧНЫМИ СПОСОБАМИ

А. В. Высоцкий А. С. Тараканов К. И. Шоломов
Н. Е. Тимофеева А. А. Ерофтиев

Введение

Современные задачи науки и техники, такие как моделирование климата, генная инженерия, проектирование интегральных схем, анализ загрязнения окружающей среды, создание лекарственных препаратов, наноматериалов и др. требуют для своего решения ЭВМ с огромной вычислительной производительностью. Единичные рабочие станции уже не способны в короткие сроки решать вышеперечисленные задачи. Здесь и возникает необходимость использования параллельных вычислений, когда над общей задачей работают десятки, сотни и даже тысячи рабочих станций.

Цель данной работы: реализация и проведение сравнительного анализа методов распараллеливания алгоритма нахождения глобального минимума многоэкстремальной целевой функции многих переменных с явными ограничениями (ограничениями типа равенств), основанного на стохастическом методе имитации отжига.

При этом решались следующие задачи:

- поиск эффективных способов распараллеливания алгоритма, с точки зрения минимизации времени и повышения надежности вычислений;
- программная реализация поиска глобального экстремума методом имитации отжига, распараллеленного различными способами;
- проведение численного эксперимента для оценки эффективности способов распараллеливания;
- анализ результатов численного эксперимента.

Поиск глобального минимума методом имитации отжига при наличии явных ограничений

Метод отжига – это техника оптимизации, использующая упорядоченный случайный поиск на основе аналогии с процессом образования в веществе кристаллической структуры с минимальной энергией при охлаждении.

Большим преимуществом метода отжига является возможность избежать т.н. «ловушек» в локальных минимумах оптимизируемой функции за счет принятия изменений, временно ухудшающих результат, что отражает нагрев расплава для предотвращения его быстрого остывания при протекании соответствующего физического процесса. Еще одним преимуществом является то, что даже в условиях нехватки вычислительных ресурсов для нахождения глобального минимума метод отжига, как правило, выдает неплохое решение – один из локальных минимумов [2].

Конкретная схема отжига задается следующими параметрами [3]:

1. законом изменения температуры $T(k)$, где k – номер шага;
2. порождающим семейством вероятностных распределений $\zeta(x, T)$;
3. функцией вероятности принятия нового состояния $h(\Delta E, T)$.

Таким образом, алгоритм имитации отжига можно записать в следующем виде:

1. Случайным образом выбирается начальная точка $x = x_0$, $x_0 \in \Omega$. Текущее значение энергии E устанавливается в значение $f(x_0)$.
2. k -я итерация алгоритма:
 - (a) Сравнить энергию системы E в состоянии x с найденным на настоящий момент глобальным минимумом. Если $E < min$, $E = f(x)$, то изменить значение глобального минимума.
 - (b) Сгенерировать новую точку $x' = G(x, T(k))$.
 - (c) Вычислить значение функции в ней: $E' = f(x')$
 - (d) Сгенерировать случайное число α из интервала $[0; 1]$.
 - (e) Если $\alpha < h(E' - E, T(k))$, то установить $x = x'$, $E = E'$ и перейти к следующей итерации. Иначе повторить шаг b , пока не будет найдена подходящая точка x' .

Исторически первой схемой метода имитации отжига является схема Больцмановского отжига. В ней изменение температуры задаётся в виде

$$T(k) = \frac{T_0}{\ln(1+k)}, k > 0.$$

Порождающее семейство вероятностных распределений $\zeta(x, T)$ выбирается как семейство нормальных распределений с математическим ожиданием x и дисперсией T и, соответственно, задаётся плотностью

$$g(x'; x, T) = (2\pi T)^{-n/2} \cdot \exp(-|x' - x|^2/(2T)),$$

где n — размерность метрического пространства состояний.

Для данной схемы доказано, что при достаточно больших T_0 и количестве шагов k гарантируется нахождение глобального минимума.

Недостатком схемы Больцмановского отжига является очень медленное уменьшение температуры T . Решение этой проблемы возможно путём замены закона изменения температуры, например, на следующий:

$$T(k) = r \cdot T(k - 1),$$

где температурный коэффициент r выбирается, как правило, в пределах $0.7 \div 0.99$.

Такая схема имитации отжига называется тушением. Она очень быстро сходится, что позволяет экономить вычислительные ресурсы. При этом не гарантируется нахождение глобального минимума, но, как правило, быстро находится близкое решение, а на практике и сам минимум.

Параллельные варианты метода имитации отжига

Появление и развитие параллельных вычислительных систем привело к развитию нескольких подходов к распараллеливанию метода имитации отжига.

Существуют различные подходы к реализации алгоритма имитации отжига на параллельных вычислительных системах, рассмотрим 3 из них:

1. параллельный запуск алгоритма имитации отжига (мультистарт);
2. параллельный запуск алгоритма имитации отжига с обменом результатами (кластерный алгоритм);
3. разбиение пространства решений на области [1].

Рассмотрим их подробнее.

Параллельный запуск алгоритма имитации отжига

Данная адаптация метода имитации отжига предполагает вычисление глобального минимума ЦФ одновременно на нескольких машинах (вычислительных узлах) с последующим выбором лучшего решения на выделенной машине (управляющий узел).

В выполняемой на нескольких вычислительных узлах при одинаковых начальных условиях осуществляется поиск минимума ЦФ методом имитации отжига по схеме Больцмановского тушения.

Затем результаты, полученные в вычислительных узлах, передаются в управляющий узел, в котором осуществляется выбор решения с наименьшим значением ЦФ, что должно обеспечивать глобальность найденного минимума

Реализованный таким образом на параллельной вычислительной системе алгоритм оптимизации методом имитации отжига должен обеспечивать надёжный поиск глобального минимума целевой функции за счёт многократного повторения поиска в заданной явными ограничениями области.

При этом, так как многократный процесс поиска минимума осуществляется одновременно на соответствующем числе машин, то затраченное на выполнения всего параллельного алгоритма, блок-схема которого изображена на рис. 1, время приблизительно равно времени выполнения одного процесса и практически не зависит от числа процессов. Соответственно, при использовании клиентских машин можно уменьшить временные затраты при поиске глобального минимума примерно в p раз[3].

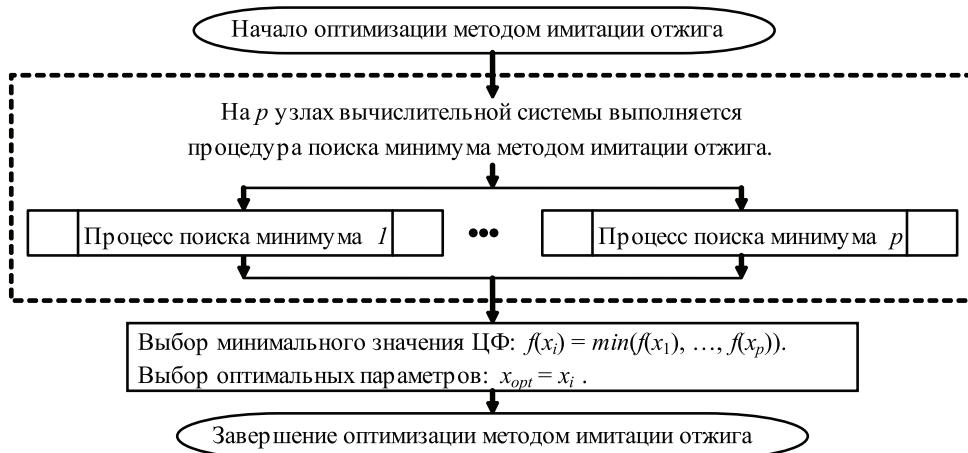


Рис. 1. Блок-схема алгоритма оптимизации методом имитации отжига, выполняемого на параллельной вычислительной системе. Пунктиром выделена часть алгоритма, выполняемая на клиентских машинах.

Кластерный алгоритм

Кластерный алгоритм является дальнейшим развитием алгоритма, который представлен выше. Основным отличием его является введение в выполняемую на каждом вычислительном узле параллельной системы последовательную часть алгоритма этапа обмена результатами между рабочими узлами.

Изначально на каждом из p узлов параллельной вычислительной системы запускается алгоритм имитации отжига с разными начальными точками x_l , $1 \leq l \leq p$. По выполнении заданного количества итераций рабочие узлы обмениваются текущими результатами, после чего продолжают работу, исходя из лучшего значения результата. После t обменов рабочие узлы продолжают работу по получению индивидуального результата. По достижении условия завершения поиска главный узел

вычислительной системы выбирает лучшее решение[3].

Таким образом, последовательная часть алгоритма имитации отжига по схеме Больцмановского тушения приобретает вид (см. рис. 2).

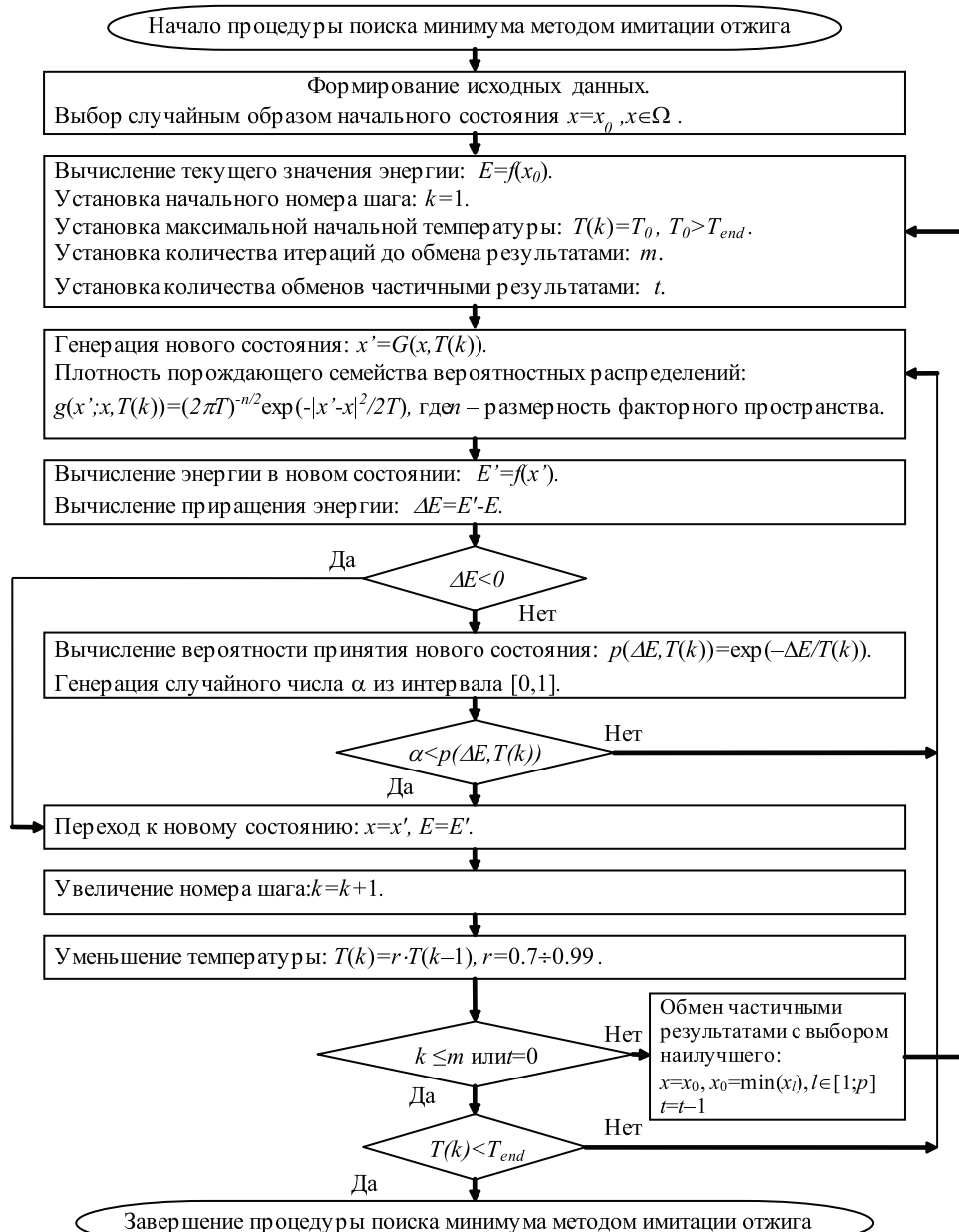


Рис. 2. Блок-схема последовательной части кластерного алгоритма имитации отжига по схеме Больцмановского тушения с обменом результатами.

Разбиение пространства решений на области

В данном методе пространство решений алгоритма имитации отжига разбивается на несколько областей, в каждой из которых запускается последовательный алгоритм имитации отжига. В этом случае работа главного вычислительного узла, так

же как и в упомянутых ранее адаптациях, сводится к выбору наилучшего решения среди полученных на рабочих узлах параллельной вычислительной системы.

Данный подход позволяет строить параллельные алгоритмы с низким трафиком обмена между параллельными процессами [3].

Построение алгоритма имитации отжига, основанного на этом подходе, требует решения следующих проблем [1]:

1. разбиение исходного пространства корректных решений на несколько непересекающихся областей, дающих в объединении все пространство;
2. выбор начального корректного решения в каждой из областей;
3. введение операций преобразования решения таким образом, чтобы они были замкнуты в каждой из областей;
4. выбор способа распределения областей по узлам вычислительной системы и схемы отсечения «неперспективных» областей в ходе работы алгоритма.

Данный способ может эффективно применяться на широком классе задач. В то же время особенностью метода имитации отжига с разбиением на области является необходимость разработки способа разбиения для каждой решаемой задачи.

Описание численного эксперимента и анализ полученных результатов

Оценка надёжности и эффективности распараллеленного алгоритма имитации отжига по схеме Больцмановского тушения осуществлялась на многоэкстремальных ЦФ, с количеством параметров оптимизации n , равным 2:

- гладкая многоэкстремальная функция:

$$f(x_1, x_2) = -\frac{1}{\frac{x_1^2 + x_2^2}{100} - \cos(x_1) \cos\left(\frac{x_2}{\sqrt{2}}\right) + 2}, \quad (1)$$

где $-0.5 < x_j < 1$, $j = 1, 2$, $f_{min} = -1$;

- многоэкстремальная функция Растригина:

$$f(x_1, x_2) = 20 + x_1^2 - 10 \cos(2\pi x_1) + x_2^2 - 10 \cos(2\pi x_2), \quad (2)$$

где $-0.5 < x_j < 1$, $j = 1, 2$, $f_{min} = 0$;

- негладкая 4-х экстремальная функция:

$$\begin{aligned}
 f_1 &= -5 * e^{-3*(|x_1+1|^{0.6}+|x_2+1|^{0.6})}, \\
 f_2 &= -10 * e^{-2*(|x_1|+|x_2|)}, \\
 f_3 &= -7 * e^{-2.5*(|x_1-1|^{0.8}+|x_2-1|^{0.8})}, \\
 f_4 &= -3 * e^{-(|x_1-2|^{0.9}+|x_2-2|^{0.9})}, \\
 f(x_1, x_2) &= f_1 + f_2 + f_3 + f_4,
 \end{aligned} \tag{3}$$

где $-0.5 < x_j < 1$, $j = 1, 2$, $f_{min} = -10.1$;

- негладкая 4-х экстремальная функция, имеющая три равных по значению глобальных минимума:

$$\begin{aligned}
 g_1 &= -7 * e^{-3*(|x_1+1|^{0.6}+|x_2+1|^{0.6})}, \\
 g_2 &= -7 * e^{-2*(|x_1|+|x_2|)}, \\
 g_3 &= -7 * e^{-2.5*(|x_1-1|^{0.8}+|x_2-1|^{0.8})}, \\
 g_4 &= -7 * e^{-(|x_1-2|^{0.9}+|x_2-2|^{0.9})}, \\
 f(x_1, x_2) &= g_1 + g_2 + g_3 + g_4,
 \end{aligned} \tag{4}$$

где $-0.5 < x_j < 1$, $j = 1, 2$, $f_{min} = -7.5$.

Тестирование проводилось при следующих условиях: начальная температура $T_0 = 10^9$, конечная $T_{end} = 0.1$, коэффициент изменения температуры $r = 0.97$. При таких значениях параметров обеспечивалось оптимальное соотношение точности результата и времени вычисления алгоритма.

Результаты поиска минимума ЦФ (1), (2), (3) и (4) тремя распараллеленными методами имитации отжига в зависимости от числа одновременно работающих процессов p , усредненные по итогам 100 запусков вычислительной системы, приведены на рисунках 3, 4, 5 и 6 для каждой из функций.

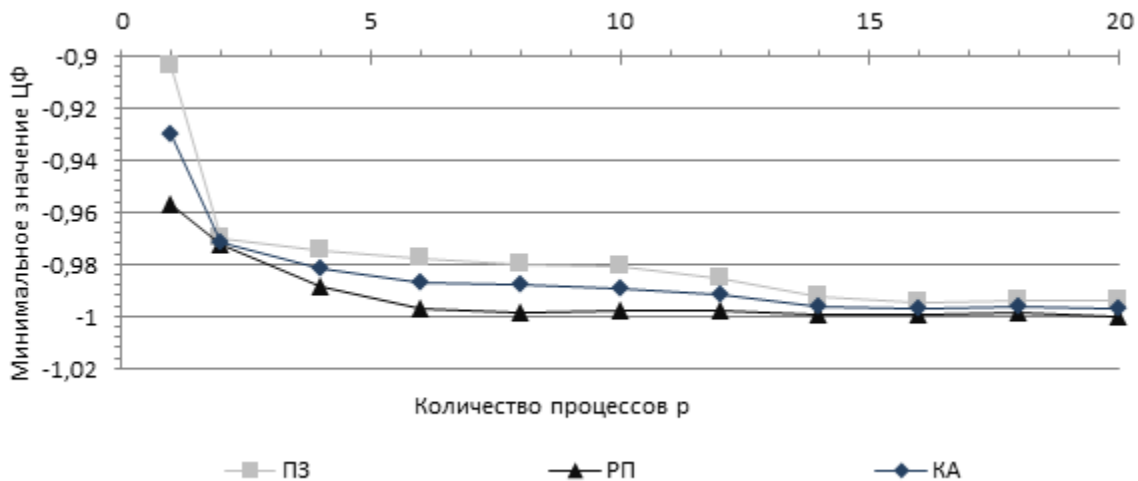


Рис. 3. Зависимость минимального значения целевой функции от количества одновременно работающих процессов при параллельном запуске (ПЗ), кластерном алгоритме (КА) и разбиении пространства решений на области (РП) для гладкой многоэкстремальной функции.

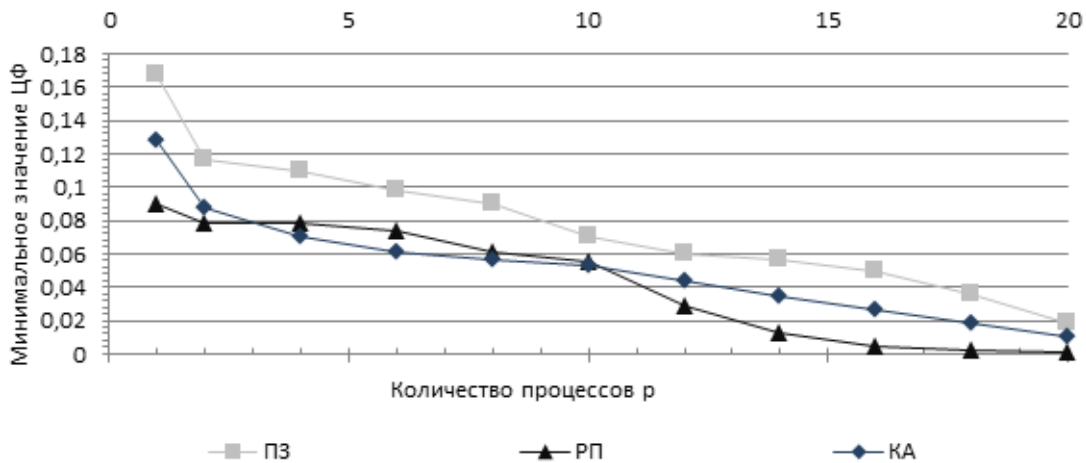


Рис. 4. Зависимость минимального значения целевой функции от количества одновременно работающих процессов при параллельном запуске (ПЗ), кластерном алгоритме (КА) и разбиении пространства решений на области (РП) для многоэкстремальной функции Растригина.

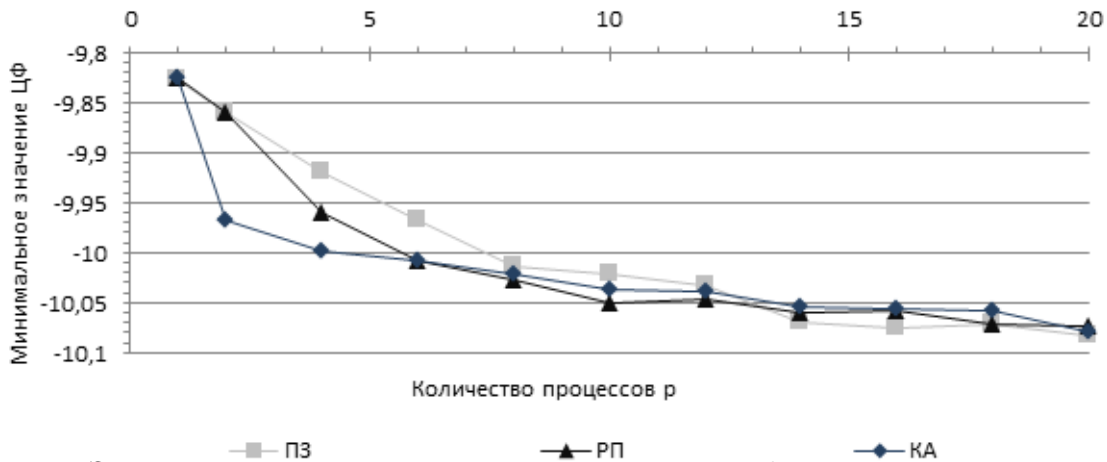


Рис. 5. Зависимость минимального значения целевой функции от количества одновременно работающих процессов при параллельном запуске (ПЗ), кластерном алгоритме (КА) и разбиении пространства решений на области (РП) для негладкой 4-экстремальной функции.

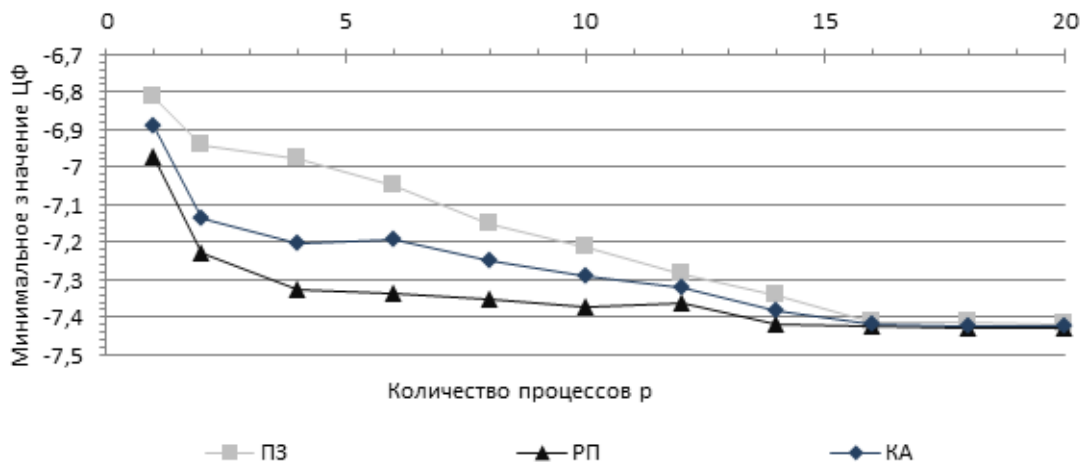


Рис. 6. Зависимость минимального значения целевой функции от количества одновременно работающих процессов при параллельном запуске (ПЗ), кластерном алгоритме (КА) и разбиении пространства решений на области (РП) для негладкой 4-экстремальной функции с тремя равными минимумами.

Как видно из рисунков 3–6, при малом количестве работающих процессов p результат выдается с большим разбросом, но при увеличении p результаты стабилизируются и приближаются к глобальному минимуму, так как поиск в этом случае ведётся в большей части заданной явными ограничениями области факторного пространства.

При этом увеличение числа параллельно работающих процессов p с 1 до 20 приводит к уменьшению размеров области глобального минимума, оцениваемой по среднеквадратическому отклонению минимального значения ЦФ, на 60%, 55% и 50% для разбиения пространства решений на области, кластерного алгоритма и параллельного запуска соответственно (см. рис. 7).

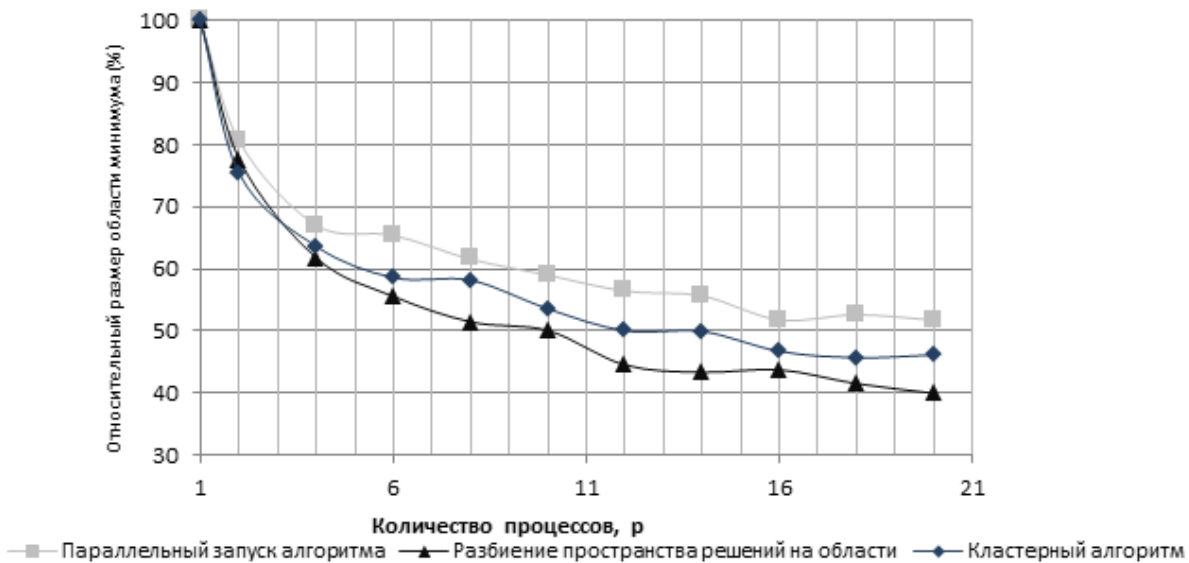


Рис. 7. Зависимость размеров области глобального минимума от количества параметров оптимизации n и числа p одновременно работающих процессов поиска минимума методом имитации отжига по схеме Больцмановского тушения.

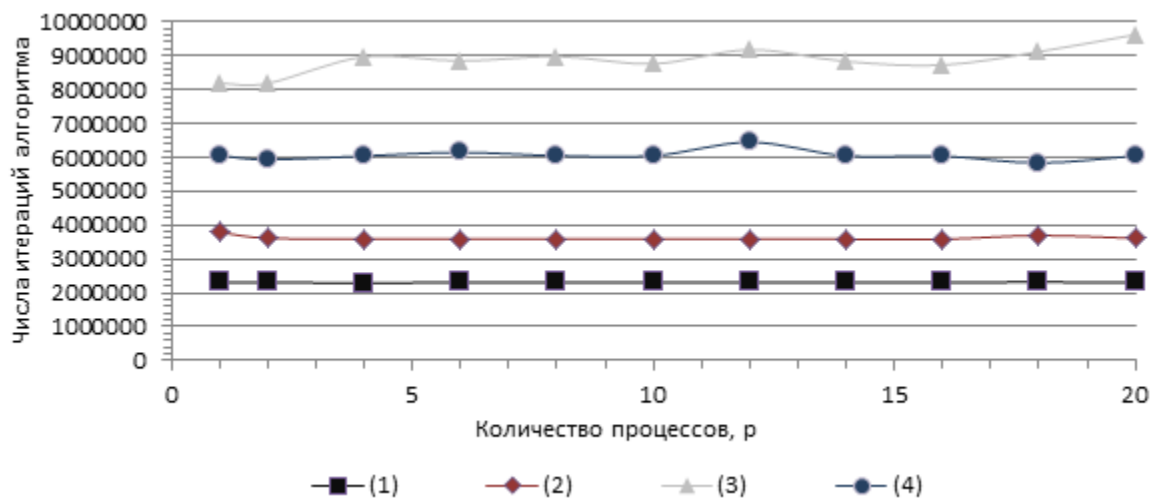


Рис. 8. Число итераций алгоритма поиска минимума ЦФ 1-4 методом параллельного запуска.

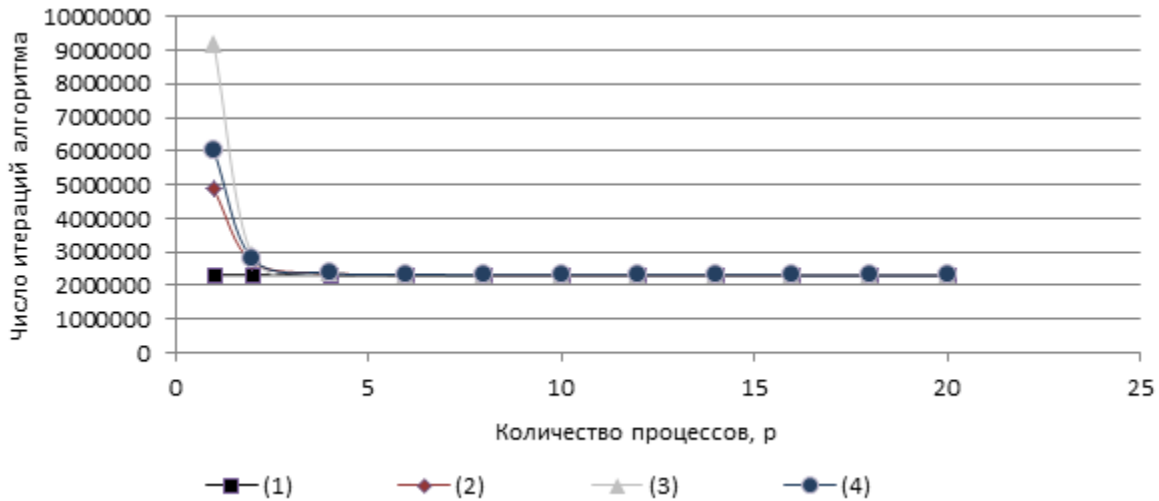


Рис. 9. Число итераций алгоритма поиска минимума ЦФ 1-4 методом разбиения пространства решений.

При решении реальных оптимизационных задач большое время занимает вычисление ЦФ. Соответственно, эффективность метода оптимизации можно оценивать по количеству итераций алгоритма. Как видно из рис. 7, в случае параллельного запуска алгоритма на p вычислительных узлах среднее число итераций алгоритма не будет зависеть от числа одновременно работающих процессов. Данная зависимость характерна и для кластерного алгоритма, так как количество итераций алгоритма задается пользователем и не зависит от числа работающих узлов. Однако, с ростом числа узлов увеличивается время выполнения алгоритма. Это связано с задержкой в передаче и приеме данных, осуществляемых через сеть. Число итераций сокращается с увеличением вычислительных узлов в случае разбиения пространства решений на области и имеет экспоненциальный характер.

Значительное влияние на количество вычислений ЦФ и, соответственно, на эффективность тестируемого метода оптимизации оказывает значение температурного коэффициента r . В ходе проведения численного эксперимента был сделан вывод, что изменение температурного коэффициента r с 0.95 до 0.9999 приводит к увеличению времени вычислений ЦФ практически в 6 раз, однако при этом точность нахождения решения повышается.

Заключение

В ходе проведенной работы были рассмотрены и реализованы 3 варианта распараллеливания алгоритма оптимизации многоэкстремальной целевой функции двух переменных с явными ограничениями, основанного на стохастическом методе имитации отжига, и проведен анализ эффективности работы каждого из способов распараллеливания.

Список литературы

- [1] Kirkpatrick, S.A., *Optimization by simulated annealing* C.D. Gelatt, M.P. Vecchi. — Science, 1983. p. 671–680
- [2] Лопатин А.С., *Метод отжига // Межвуз. сб. «Стохастическая оптимизация в информатике»* 2005. — Выпуск 1. — С. 133–149.
- [3] Савин А.Н, Тимофеева Н.Е., *Применение алгоритма оптимизации методом имитации отжига на системах параллельных и распределённых вычислений // Известия Саратовского университета. Серия Математика. Механика. Информатика.* 2012. — Вып. 1. — С. 110–116.
- [4] Janaki, R.D., *Parallel Simulated Annealing Algorithms / Sreenivas T.H., Ganapathy Subramaniam K // J. of parallel and distributed computing* 1996. — №37. — P. 207–212.
- [5] Калашников, А.В., *Параллельный алгоритм имитации отжига для построения многопроцессорных расписаний / В.А Костенко// Известия РАН. Теория и системы управления* 2008. — №3. — С. 101–110.