УДК 519.854

И.В. Сергиенко, В.П. Шило

СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К РЕШЕНИЮ СЛОЖНЫХ ЗАДАЧ ДИСКРЕТНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Введение

Известно, что многие задачи принятия оптимальных решений, возникающие в различных сферах человеческой деятельности, могут быть сформулированы в терминах дискретного программирования. Класс задач дискретной оптимизации весьма многообразен и включает целочисленное программирование, экстремальные комбинаторные задачи, оптимизационные задачи на графах, булево программирование.

Численные методы решения задач этого класса, как правило, имеют трудоемкость, экспоненциально зависящую от их размерности. Поэтому их точное решение при больших размерностях становится невозможным. Альтернативой является приближенное решение таких задач. При постоянно возрастающей сложности оптимизируемых объектов естественно усложнение их математических моделей, что значительно затрудняет поиск решений таких задач. В связи с этим актуальны разработка, исследование новых и усовершенствование существующих приближенных методов решения и соответствующих программных средств для дискретных оптимизационных задач. Следует отметить, что необходимый элемент исследования различных классов задач дискретной оптимизации и методов решения — их экспериментальное исследование.

Известно, что алгоритмы с различной эффективностью решают отдельные классы задач. Поэтому, чем шире их набор у пользователя, тем больше вероятность получения приемлемых решений с минимумом затрат.

Настоящая статья посвящена результатам, полученным в последнее время в Институте кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины под руководством и непосредственном участии авторов, в области решения дискретных оптимизационных задач сложной природы в последовательном и параллельном режимах.

Теоретические исследования моделей, методов и свойств различных классов задач дискретной оптимизации ведутся в Институте кибернетики с 60-х годов XX ст. Накоплен большой опыт их практического использования. В 1961 г. в работе [1] был предложен метод последовательного анализа вариантов для решения вариационных задач управления, планирования и проектирования, основанный на теоретико-множественном подходе к поиску решения. Этот метод получил дальнейшее развитие в многочисленных публикациях [2, 3 и др.].

В [4] предложен подход к решению задач дискретной оптимизации общего вида: найти

$$\min\{f(x) \mid x \in G\},$$

где G — конечное или счетное множество допустимых решений задачи, $f(x)$ — определенная на нем функция. Эта алгоритмическая схема названа методом вектора спада. На основе данной схемы разработаны алгоритмы локального поиска для различных классов задач дискретного программирования (например, [5–9]), которые нашли применение при решении практических задач.

Разработанные алгоритмы использовались в созданных в Институте кибернетики пакетах прикладных программ (ППП) серии ДИСПРО, ориентированных на решение широкого спектра общих и специальных задач дискретного программирования; ППП ДИСНЕЛ — задач дискретной и нелинейной оптимизации; ППП ПЛАНЕР — специальных классов задач производственно-транспортного планирования большой размерности и др. С помощью этих пакетов были решены прикладные задачи.

Следует отметить также интересные результаты [10 и др.], полученные при решении специальных классов задач дискретной оптимизации.

Некоторые применения метода глобального равновесного поиска

Расширение сфер применения и постоянно возрастающая сложность объектов, процессов, структур, которые оптимизируются, усложняет математические модели, существенно увеличивает размерность задач (до сотен тысяч переменных и ограничений) и затрудняет поиск решений. Это обстоятельство стимулировало дальнейшее развитие научных исследований, касающихся создания новых подходов к решению дискретных оптимизационных задач сложной природы.

Один из таких подходов предложен в работе [11] — это вероятностный метод глобального равновесного поиска (ГРП) для решения сложных дискретных оптимизационных задач вида: найти

$$\min\{f(x) \mid x \in G \cap B^n\},$$

где $G \subset R^n$, R^n — множество n-мерных действительных векторов; B^n — множество n-мерных векторов, компоненты которых принимают значения 0 или 1. В этом методе получили дальнейшее развитие идеи методов вектора спада и отжига. Метод ГРП (GES) широко применяется при решении различных классов задач дискретной оптимизации сложной природы, в том числе задач на графах. В последние годы он все больше привлекает внимание исследователей.

Рассмотрим вкратце некоторые конкретные применения метода GES. Известно, что задача о максимальном взвешенном разрезе графа (WMAXCUT) — классическая проблема дискретного программирования с многочисленными практическими приложениями, среди них: проектирование сетей связи, сверхбольших интегральных схем, фазированных антенных решеток, моделирование нейронных сетей, распознавание образов, анализ больших массивов данных, задачи физики твердого тела и др.

Задача о максимальном взвешенном разрезе графа имеет такую теоретико-графовую интерпретацию. Пусть задан неориентированный граф $G = G(V, E)$ с множествами вершин V и ребер E. Каждому ребру $(i, j) \in E$ графа соответствует вес $w_{ij} > 0$. Разрезом графа G называется разбиение (V_1, V_2) множества V на два непересекающихся подмножества: V_1 и V_2, такие, что $i \in V_1$, $j \in V_2$. Очевидно, что любое такое разбиение порождает разрез графа. Задача о максимальном взвешенном разрезе неориентированного графа G состоит в нахождении разреза максимального суммарного веса $w(V_1, V_2) = \sum\limits_{i \in V_1, j \in V_2, (i,j) \in E} w_{ij}$.

Задача WMAXCUT *NP*-трудная даже в случае, когда все ребра имеют единичный вес. Для ее решения предложены алгоритмы [12–14], базирующиеся на использовании метода GES [9, 11]. Ключевыми моментами данного метода являются: генерация решения и поиск локального экстремума в окрестности этого решения. В процедуре поиска локального экстремума использовались различные варианты алгоритмов локального типа и табу.

При проведении вычислительных экспериментов было рассмотрено множество тестовых задач из сайта http://www.stanford.edu/~yyye/yyye/Gset/, которые широко используются для проверки эффективности алгоритмов решения задач WMAXCUT. Эти задачи включают тороидальные, планарные и случайные графы с числом вершин $|V|$ от 800 до 20000 и весами 1, 0 или – 1.

По результатам многочисленных экспериментальных исследований разработанные алгоритмы [12–14] имеют полное преимущество перед лучшими, известными для таких задач, алгоритмами. В частности, с их помощью улучшены рекорды (наилучшие значения целевой функции) для 37 из 74 решавшихся задач большой размерности, для остальных задач найдены известные рекорды, как правило, с меньшими затратами времени.

Рассмотрим задачу булевого квадратичного программирования без ограничений (UBQP) вида: найти

$$\max\left\{ f(x)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} q_{ij}x_i x_j \,\middle|\, x\in B^n \right\}, \tag{1}$$

где q_{ij} — элементы симметричной действительной матрицы Q порядка n, B^n — множество n-мерных векторов с компонентами 0 или 1.

К модели (1) сводятся фундаментальные задачи медицины, экономики, инженерии, физики, химии и др., в частности области, связанной с освоением космоса. Многие задачи теории графов можно представить в виде булевого квадратичного программирования, в частности хорошо изученные задачи нахождения максимальной клики и максимального взвешенного разреза графа. Например, задачу о максимальном взвешенном разрезе графа можно сформулировать таким образом: найти

$$\max\left\{ f(x)=\sum_{(i,j)\in E} w_{ij}(x_i-x_j)^2 \,\middle|\, x\in B^n \right\},$$

где w_{ij} — вес, отвечающий каждому ребру $(i, j)\in E$ графа. Кроме того, задача UBQP — общая модель для широкого круга дискретных оптимизационных задач. Известны примеры ее использования при рассмотрении задач раскраски вершин графа, упаковки, разбиения, линейного упорядочения и др.

Для решения задач вида (1) разработаны и исследованы алгоритмы глобального равновесного поиска [15, 16]. На основании экспериментальных расчетов проведено сравнение результатов, полученных с помощью алгоритмов GES, с результатами лучших известных алгоритмов. Оно показало превосходство алгоритмов GES как по качеству найденных решений, так и по времени счета.

На основе метода GES разработаны алгоритмы решения многомерной задачи о ранце, задач нахождения максимального независимого множества вершин графа, о максимальной выполнимости, о покрытии множества, об упаковке множества максимального веса, раскраски графа, о p-медиане, составления расписания и др. С применением алгоритма GES создано также программно-алгоритмическое обеспечение для решения задачи коммивояжера.

Результаты экспериментальных расчетов

В последнее время на основе метода глобального равновесного поиска нами разработаны серия алгоритмов GESPR нового поколения и соответствующее про-

 ISSN 0572-2691

граммное обеспечение, с помощью которых решались задачи WMAXCUT и UBQP очень большой размерности. Отличительная особенность этих алгоритмов — проведение осцилляции на основе методологии Path Relinking [17] вокруг наилучшего найденного решения x_{best}.

Таблица

Задача	$\|V\|$	BLS	GES
G55	5000	10294	**10299**
G56	5000	4012	**4017**
G57	5000	3492	**3494**
G58	5000	19263	**19293**
G59	5000	6078	**6086**
G60	7000	14176	**14188**
G61	7000	5789	**5796**
G62	7000	4868	**4870**
G63	7000	26997	**27045**
G64	7000	8735	**8751**
G65	8000	5558	**5562**
G66	9000	6360	**6364**
G67	10000	6940	**6950**
G70	10000	9541	**9591**
G72	10000	6998	**7006**
G77	14000	9926	**9938**
G81	20000	14030	**14056**

Все вычислительные эксперименты проводились с использованием PC с Intel® Core QUAD CPU Q9550 2.83GHz и 8.0GB оперативной памяти в режиме реального времени. Было рассмотрено множество тестовых задач из сайта http://www.stanford.edu/~yyye/yyye/Gset/, которые ранее не рассматривались авторами.

В таблице отражены некоторые результаты сравнительного исследования рекордов, найденных одним из алгоритмов GESPR и алгоритмом BLS [18]. В первуй колонке таблицы указан номер задачи, во второй $|V|$ — мощность множества V (число вершин графа G). Следует отметить, что на период публикации работы [18] алгоритм BLS был лучшим для задачи WMAXCUT, а в дальнейшем таким стал алгоритм GESPR [19]. Для всех задач из таблицы алгоритмом GESPR найдены новые рекорды.

Подходы к распараллеливанию процесса оптимизации

При решении дискретных оптимизационных задач большой размерности, в частности задач WMAXCUT и UBQP, возникает необходимость обработки больших объемов данных за приемлемое время. Эффективное решение таких задач возможно на параллельных компьютерах. Распараллеливание вычислений не только эффективно, но часто и единственно возможный способ решения сложных задач дискретного программирования большой размерности во многих отраслях. Кроме того, в ближайшие годы ожидается появление высокопроизводительных настольных ПК (high-end desktop — HEDT) и задачи, решаемые сейчас на многопроцессорных комплексах типа СКИТ, смогут эффективно решаться на этих ПК.

В связи с этим возрастает потребность в создании эффективных алгоритмов дискретной оптимизации и соответствующих программных средств для параллельных вычислений на многопроцессорных вычислительных комплексах. С этим перспективным направлением и связаны наши дальнейшие исследования.

Распараллеливание процесса оптимизации имеет свою специфику. Так, если некоторый вычислительный алгоритм распараллеливается на P процессоров, обычно лучшее, на что можно надеяться, это ускорение в P раз, т.е. линейное. Например, P землекопов, если не будут мешать друг другу, выроют P ям в P раз быстрее, чем один. Но обычно очень трудно так построить работу, чтобы землекопы не мешали друг другу. Процесс оптимизации не связан с обработкой какого-то заданного объема вычислений, как в случае вычислительных алгоритмов. Объем вычислений зависит от хода процесса оптимизации. Возвращаясь к аналогии с землекопами, предположим, что цель землекопа — найти клад. Для этого он должен проверить (выкопав ямы) P мест. Если клад лежит на поверхности, то землекопы вообще не будут копать, так как один из них сразу же обнаружит его. В этом случае на поиск клада уйдет времени меньше, чем в P раз.

Можно выделить следующие основные типы распараллеливания: операций, декомпозиционное, копий алгоритма.

Под распараллеливанием операций, выполняемых оптимизационным алгоритмом, понимается представление алгоритма в виде последовательности групп операций. Все операции одной группы должны быть независимыми и обладать возможностью выполняться одновременно на имеющихся в системе процессорах. Группы операций должны быть упорядочены так, что каждая операция любой группы зависит либо от исходных данных, либо от результатов выполнения операций из предыдущих групп. Заметим, что с ростом числа процессоров могут возникать проблемы с выбором групп операций и организацией обмена информацией между ними. Обмен информацией и ее обработка могут забирать очень много времени и понижать эффективность распараллеливания.

Под декомпозиционным распараллеливанием понимается разбиение задачи на множество подзадач, каждую из которых можно независимо решать на выделенных для этого процессорах. Интересные, на наш взгляд, подходы связаны с вероятностной декомпозицией [9].

Весьма перспективным, с нашей точки зрения, является подход, когда вместо операций, выполняемых алгоритмом, распараллеливаются его копии [9]. Это имеет смысл, когда речь идет о рандомизированных алгоритмах, где каждый экземпляр (копия) одного и того же алгоритма использует некоторое начальное значение для инициализации его генератора псевдослучайных чисел. В этом случае разные начальные значения будут давать различающиеся между собой траектории поиска решений.

В работах [19–21] предложен и развит новый подход к построению объединения (портфелей и команд) алгоритмов глобального равновесного поиска для распараллеливания процесса решения задач WMAXCUT и UBQP, который обобщает и развивает исследования по распараллеливанию копий алгоритмов.

Пусть имеется множество алгоритмов $A = \{A_1, ..., A_n\}$, которые работают параллельно на P разных процессорах. Каждый алгоритм должен решать одну и ту же задачу. Любой процессор может использоваться одним алгоритмом множества A, а один и тот же алгоритм использоваться на разных процессорах.

Объединением алгоритмов $union\{n_1 A_1, ..., n_m A_m\}$ для P процессоров, где $P = \sum_{i=1}^{m} n_i$, будем называть список независимых алгоритмов $A_i \in A$ с указанием количества n_i, $i = 1, ..., m$, используемых ими процессоров.

Объединение алгоритмов, которые не обмениваются между собой информацией, будем называть портфелем алгоритмов $portfolio\{n_1 A_1, ..., n_m A_m\}$, а объединение алгоритмов, которые обмениваются между собой информацией, — командой алгоритмов $team\{n_1 A_1, ..., n_m A_m\}$. Заметим, что время решения задачи с помощью объединения алгоритмов (портфеля или команды) определяется временем самого быстрого ее решения на одном из процессоров, т.е. $t_{union} = \min_{j=1,...,P} t_j$, где t_j — время решения задачи на j-м процессоре.

В команду может входить и управляющий алгоритм, который осуществляет выбор подмножества алгоритмов для проведения оптимизации, составление схемы и формата обмена информацией между ними, возможную корректировку выбранной схемы или формата в зависимости от хода решения и, наконец, проведение необходимой замены алгоритмов в процессе оптимизации. Алгоритм команды должен уметь, прежде всего, воспринимать информацию, использовать ее. Например, если задача решается с помощью команды алгоритмов локального поиска, то какой-либо обмен информацией между ними не имеет смысла, поскольку эти алгоритмы не приспособлены к использованию внешней информации.

Отметим, что кроме вычислительной эффективности главное преимущество метода глобального равновесного поиска — его командные свойства, под которыми понимаем способность эффективно использовать решения, полученные другими алгоритмами. Обмен информацией дает возможность усилить лучшие качества алгоритма, который приводит как к уменьшению времени счета, так и к улучшению качества решения.

Экспериментальные исследования с использованием суперкомпьютера СКИТ-4

В дальнейшем экспериментальные исследования по распараллеливанию процесса решения задач WMAXCUT и UBQP проводились на многопроцессорном вычислительном комплексе СКИТ-4 ИК НАН Украины. Для их проведения использовались тестовые задачи G77 и G81 из вышеупомянутого множества тестовых задач о максимальном взвешенном разрезе графа с числом вершин соответственно 14000 и 20000, которые, как отмечалось выше, формулируются в терминах булевого квадратичного программирования.

Ускорение процесса решения задачи G77 с помощью портфелей алгоритмов GESPR по сравнению с одним алгоритмом показано на рис. 1. На оси абсцисс указаны достигнутые значения целевой функции, а на оси ординат — коэффициенты ускорения этого процесса.

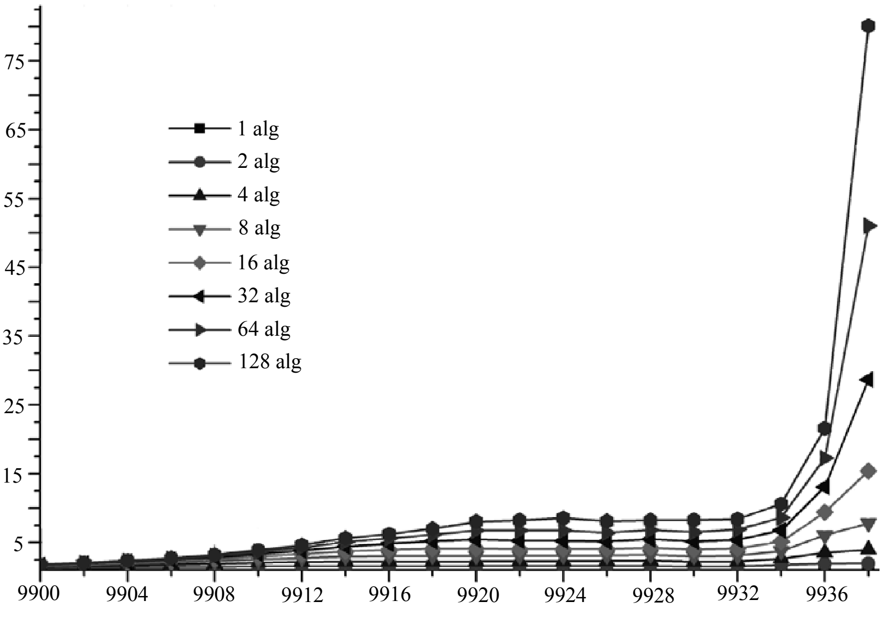

Рис. 1

На рис. 2 показано ускорение процесса решения задачи G81 с помощью портфелей и команд алгоритмов GESPR по сравнению с одним алгоритмом. Обозначения рис. 2 и рис. 3 совпадают с соответствующими обозначениями рис. 1.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что портфель из 128 алгоритмов GESPR в 80 раз быстрее находит решение задачи G77 со значением целевой функции 9938 и в 123 раза быстрее находит решение задачи G81 со значением целевой функции 14054, чем один алгоритм. Команда из 32 алгоритмов в 95 раз быстрее, чем один алгоритм, находит решение с таким же значением целевой функции. Как видим, при использовании команд алгоритмов достигается сверхлинейное ускорение. Такие же результаты имеют место для команд, составленных из восьми и шестнадцати алгоритмов. Очевидно, что при построении портфеля из четырех команд алгоритмов, в которые входит по 32 алгоритма, можно получить ускорение относительно одного алгоритма больше, чем в 289 раз.

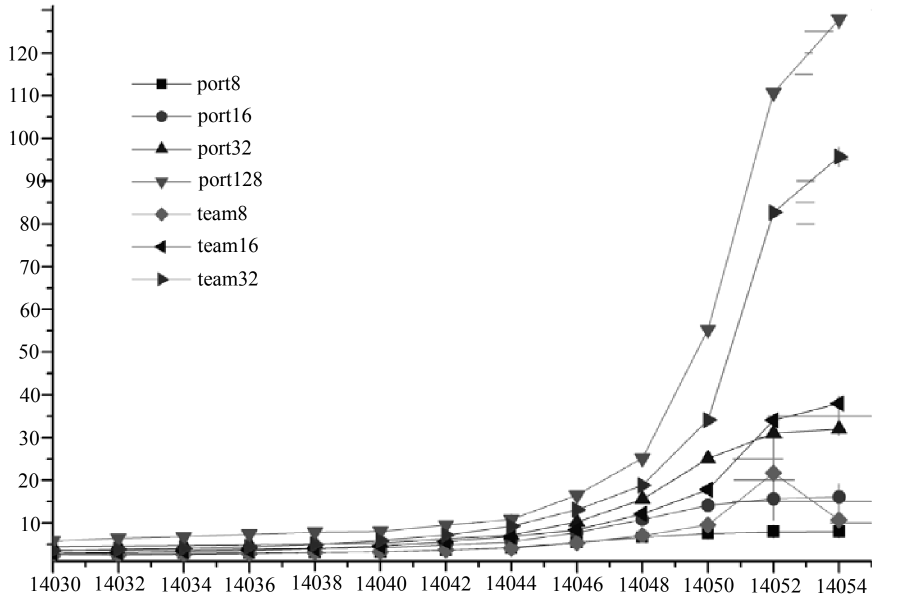

Рис. 2

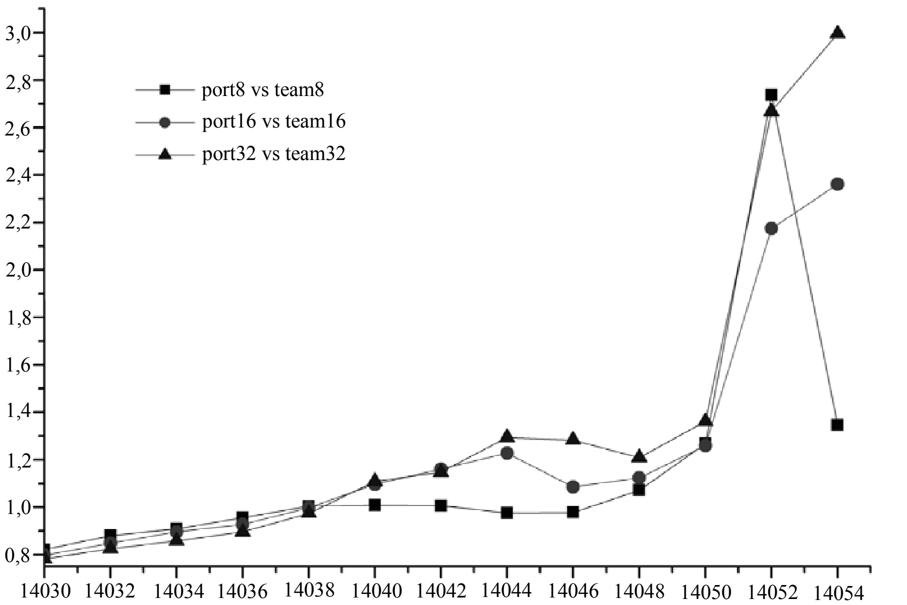

Рис. 3

Ускорение работы команд относительно портфелей алгоритмов GESPR для задачи G81 показано на рис. 3. Из этого рисунка видно, что команда, составленная из 32 алгоритмов, в три раза быстрее, чем портфель из 32 алгоритмов, находит решение со значением целевой функции 14054. Графики рис. 3 показывают, что команды алгоритмов всегда находят решения высокого качества быстрее, чем портфели алгоритмов.

Заключение

Таким образом, проведенные исследования показали, что подходы к решению сложных задач дискретной оптимизации, основанные на использовании метода глобального равновесного поиска, являются в настоящее время практически эффективными средствами дискретного программирования, причем их эффективность особенно проявляется при решении задач большой размерности.

Анализ полученных результатов распараллеливания процесса решения сложных задач WMAXCUT и UBQP с использованием предложенной авторами методологии построения объединения (портфелей и команд) алгоритмов показал существенное ускорение (иногда более, чем в 100 раз) процесса их решения с помощью объединения алгоритмов глобального равновесного поиска по сравнению с одним алгоритмом. Он свидетельствует о перспективности дальнейших исследований по созданию команд алгоритмов, в частности по разработке эффективных протоколов обмена информацией между алгоритмами, которые входят в состав команд.

І.В. Сергієнко, В.П Шило

СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО РОЗВ'ЯЗАННЯ СКЛАДНИХ ЗАДАЧ ДИСКРЕТНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ

Запропоновано підходи до розв'язання складних задач дискретної оптимізації в послідовному і паралельному режимах. Вони базуються на використанні ідей методу глобального рівноважного пошуку та специфіки задач, що розглядаються. Розпаралелювання процесу розв'язання задач здійснюється за допомогою запропонованої методології побудови об'єднання (портфелів і команд) алгоритмів. Результати численних обчислювальних експериментів, проведених на ПК та суперкомп'ютері СКІТ-4 ІК НАНУ, підтверджують ефективність розроблених підходів.

I.V. Sergienko, V.P. Shylo

MODERN APPROACHES TO SOLVING COMPLEX DISCRETE OPTIMIZATION PROBLEMS

The approaches to solving complex discrete optimization problems in sequential and parallel modes are considered. They are based on the use of the ideas of global equilibrium search method and the specific features of problems under consideration. Parallelization problem solving process is carried out using the proposed methodology associations (portfolios and teams) algorithms. The results of extensive computational experiments carried out on the PC and SKIT-4 supercomputer of ICyb NASU, confirm the effectiveness of the developed approaches.

1. *Михалевич В.С., Шор Н.З.* Метод последовательного анализа вариантов при решении вариационных задач управления, планирования и проектирования // Докл. на IV Всесоюз. мат. съезде. — М., 1961. — 91 с.
2. *Вычислительные* методы выбора оптимальных проектных решений / Под ред. В.С. Михалевича. — Киев : Наук. думка, 1977. — 178 с.

3. *Михалевич В.С., Волкович В.Л.* Вычислительные методы исследования и проектирования сложных систем. — М. : Наука, 1982. — 286 с.
4. *Сергієнко І.В.* Один метод розв'язування задач на відшукання екстремальних значень // Автоматика. — 1964. — № 5. — С. 15–21.
5. *Сергиенко И.В.* Математические модели и методы решения задач дискретной оптимизации. — Киев : Наук. думка, 1988. — 471 с.
6. *Sergienko Ivan V.* Methods of optimization and systems analysis for problems of transcomputational complexity. — New York; Heidelberg; Dordrecht; London : Springer, 2012. — 226 p.
7. *Сергиенко И.В., Лебедева Т.Т., Рощин В.А.* Приближенные методы решения дискретных задач оптимизации. — Киев : Наук. думка, 1980. — 276 с.
8. *Сергиенко И.В., Каспшицкая М.Ф.* Модели и методы решения на ЭВМ комбинаторных задач оптимизации. — Киев : Наук. думка, 1981. — 288 с.
9. *Сергиенко И.В., Шило В.П.* Задачи дискретной оптимизации: проблемы, методы решения, исследования. — Киев : Наук. думка, 2003. — 262 с.
10. *Михалевич В.С., Трубин В.А., Шор Н.З.* Оптимизационные задачи производственно-транспортного планирования. — М. : Наука, 1986. — 264 с.
11. *Шило В.П.* Метод глобального равновесного поиска // Кибернетика и системный анализ. — 1999. — № 1. — С. 74–81.
12. *Шило В.П., Шило О.В.* Решение задачи о максимальном разрезе графа методом глобального равновесного поиска // Там же. — 2010. — № 5. — С. 68–79.
13. *Shylo V.P., Shylo O.V.* Path relinking scheme for the max-cut problem within global equilibrium // International Journal of Swarm Intelligence Research (IJSIR). — 2011. — **2**, N 2. — P. 42–51.
14. *Шило В.П., Шило О.В., Рощин В.А.* Метод глобального равновесного поиска решения задачи о максимальном взвешенном разрезе графа // Кибернетика и системный анализ. —2012. — № 4. —С. 101–105.
15. *Global* equilibrium search applied to the unconstrained binary quadratic optimization problem / P.M. Pardalos, O.A. Prokopyev, O.V. Shylo, V.P. Shylo // Optimization Methods and Software. — 2008. — **23**. — P. 129–140.
16. *Шило В.П., Шило О.В.* Решение задачи булева квадратичного программирования без ограничений методом глобального равновесного поиска // Кибернетика и системный анализ. — 2011. — № 6. — С. 68–78.
17. *Glover F., Laguna M., Marti R.* Fundamentals of scatter search and path relinking // Control and Cybernetics. — 2000. — **39**. — P. 653–684.
18. *Benlic U., Hao J.K.* Breakout local search for the max-cut problem // J. Engineering Applications of Artificial Intelligence . — 2013. — **26**(3). — P. 1162–1173.
19. *Shylo V.P., Glover F., Sergienko I.V.* Teams of global equilibrium search algorithms for solving weighted MAXIMUM CUT problem in parallel // Кибернетика и системный анализ. — 2015. — № 1. — С. 20–29.
20. *Шило В.П., Рощин В.А., Шило П.В.* Построение портфеля алгоритмов для распараллеливания процесса решения задачи о максимальном взвешенном разрезе графа // Компьютерная математика. — 2014. — № 2. — С. 163–170.
21. *Шило В.П., Рощин В.О., Шило П.В.* Паралельні алгоритми розв'язання задач булевого квадратичного програмування // Там же. — 2015. — № 2. — С. 12–20.

Получено 30.11.2015