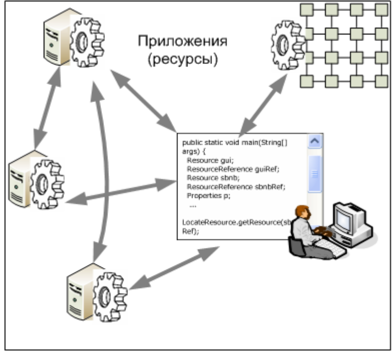
# Конечномерная и динамическая оптимизация в распределённой среде

А.П. Афанасьев

Центр грид-технологий и распределённых вычислений ИСА РАН
Московский физико-технический институт

DICR 2010

# Инструментарий IARnet




Программный инструментарий для интеграции информационно-алгоритмических ресурсов в глобальной сети при решении прикладных задач

Ориентирован на решение задач, декомпозируемых на несколько типовых подзадач с хорошей программно-алгоритмической проработкой

Реализует высокоуровневую модель программирования, доступную широкому кругу прикладных программистов

# Декомпозиция вычислительных задач

Математика, Физика, Химия, Биология ...

Оптимизация

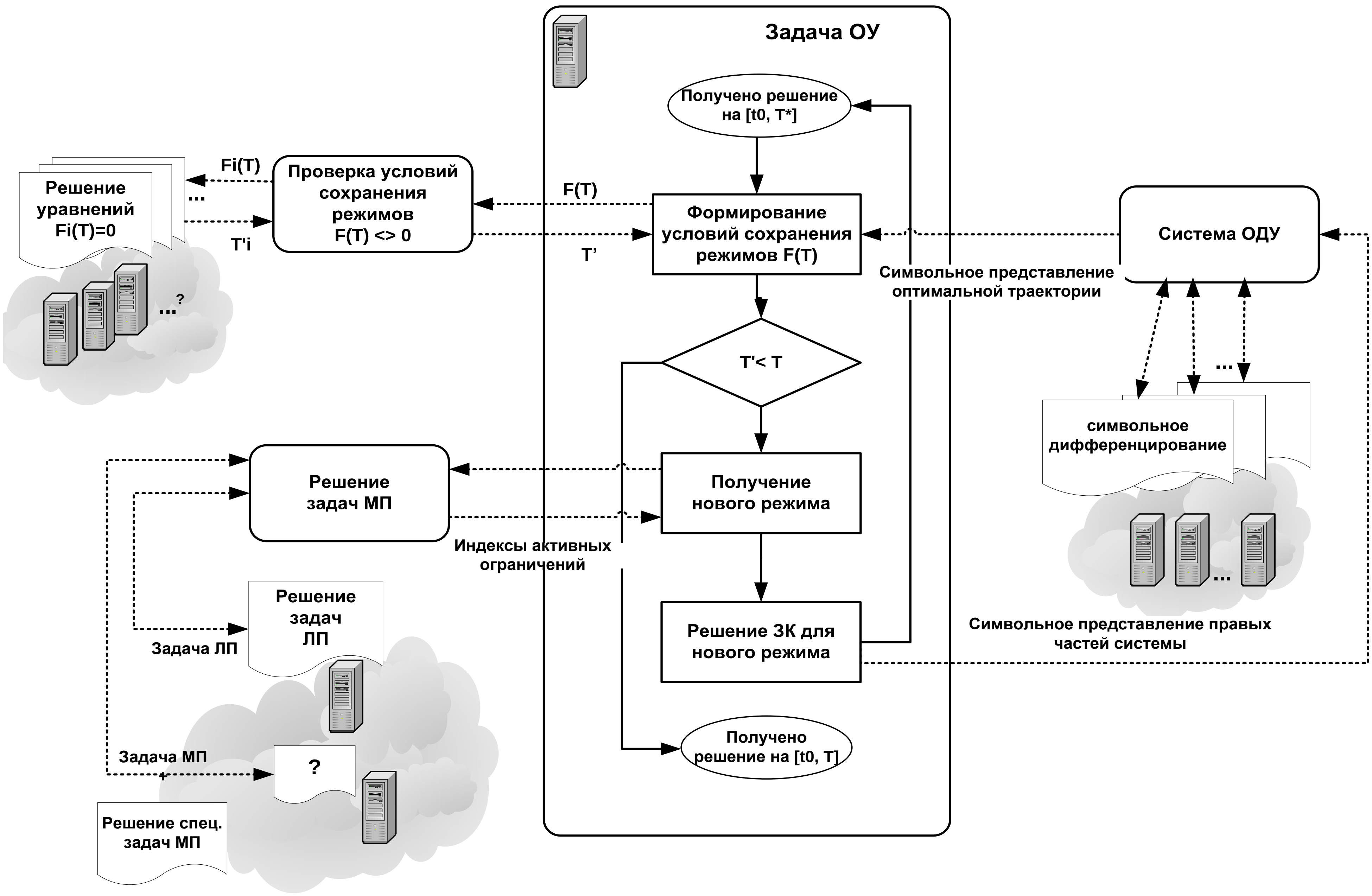
Дифференциальные уравнения

Мат. статистика

Анализ данных

другое

# Задача оптимального управления: Схема распределенного решения



# MathCloud

Сетевая вычислительная математическая среда

Состоит из независимо существующих в Интернете математических и вычислительных сервисов

Предоставляет к ним удаленный доступ к математическим ресурсам

Позволяет объединять различные сервисы для решения математических задач

Использует сервис-ориентированный подход, Web-технологии и модель REST

# Преимущества MathCloud

Использование программ без их установки

Простая возможность объединения различных существующих математических пакетов

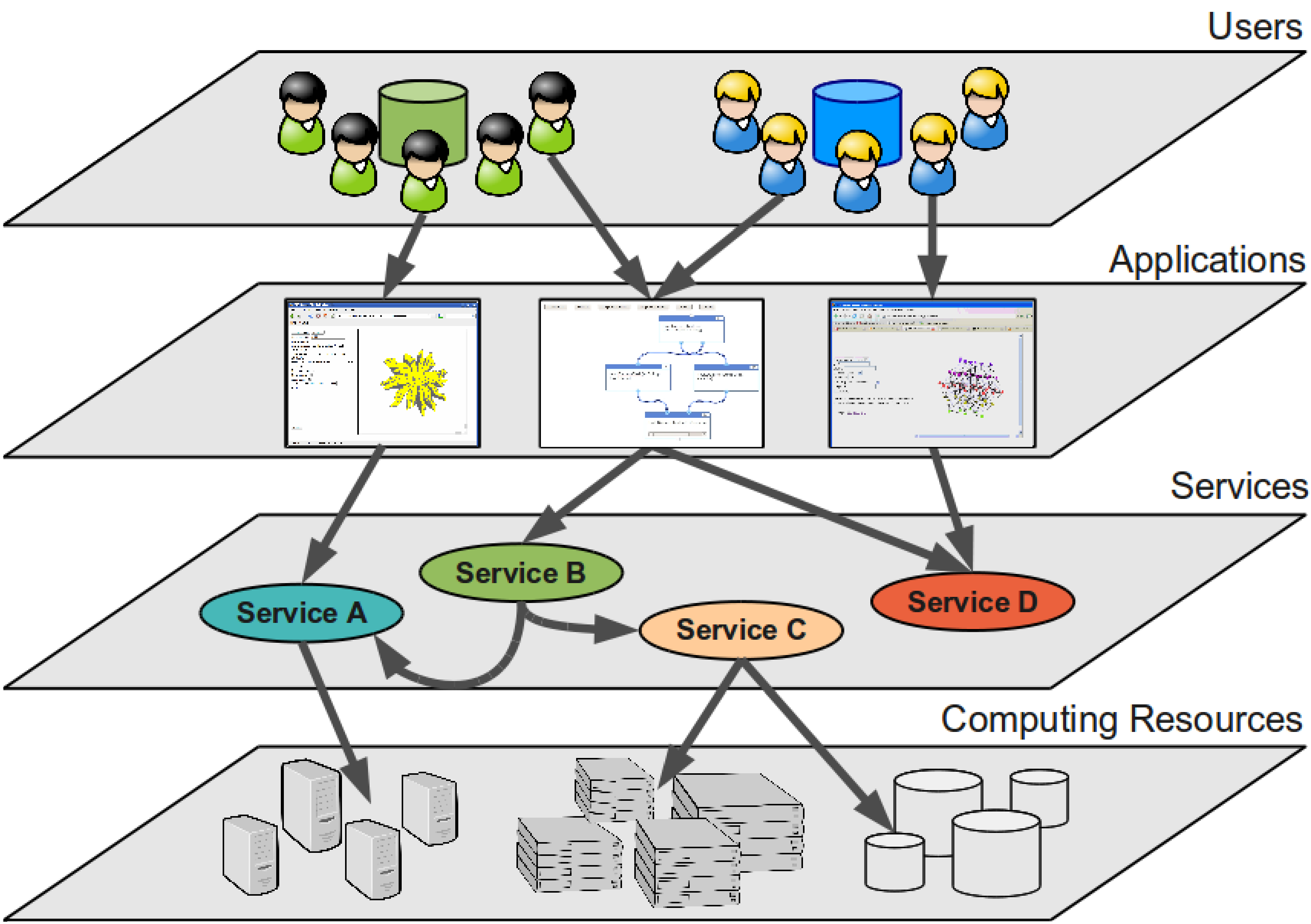
Возможность включения в среду программ, написанных пользователем

Публикация результатов своей работы:
как различных математических конструкций,
так и специализированных программ

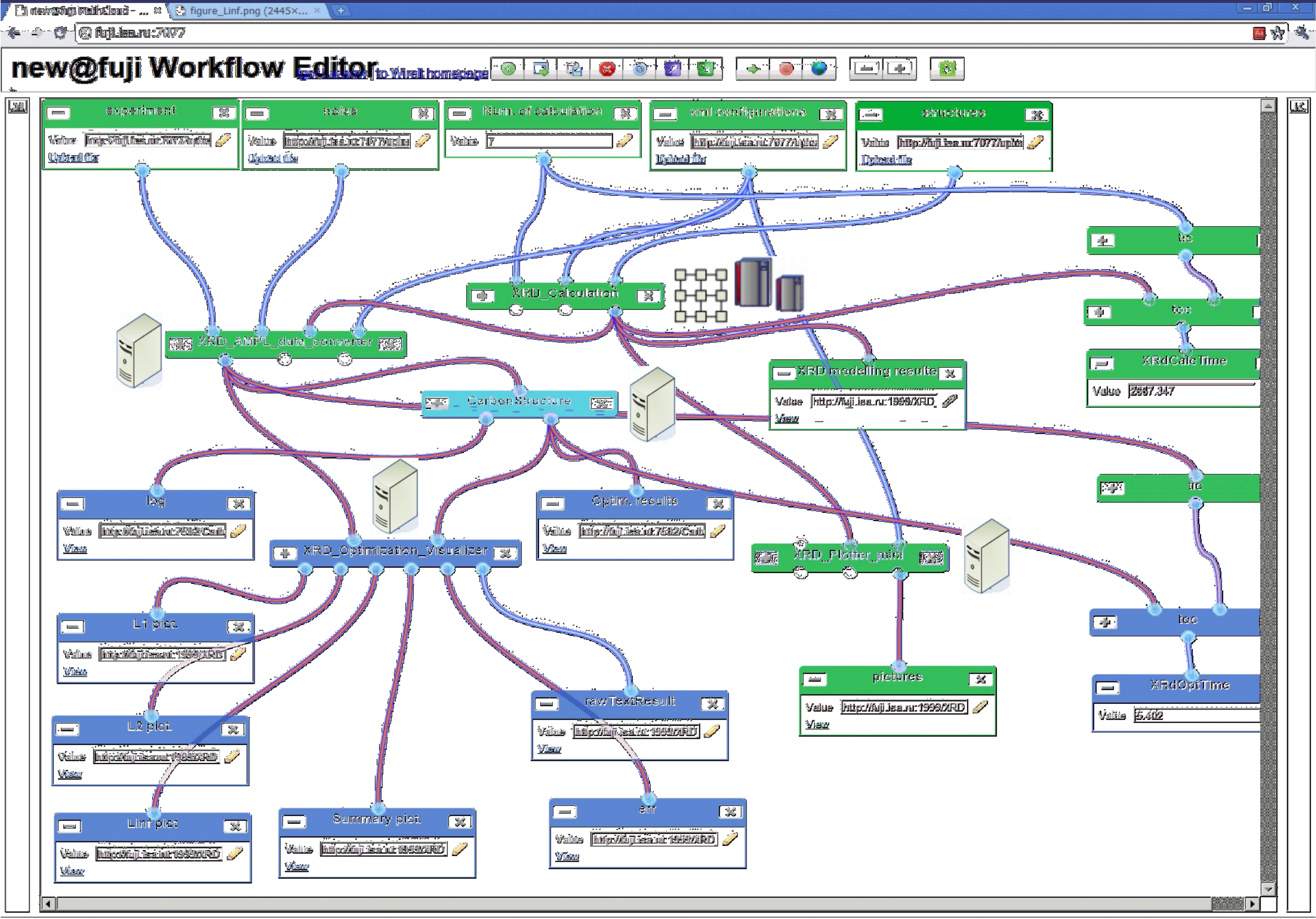
Возможность предоставлять гибкий доступ к своим программам, в частности, в формате аренды приложений

Интеграция с существующими в Интернете математическими ресурсами

# MathCloud: Architecture



# Система структурного анализа в MathCloud



# AMLs' features enabling unification

**Algebraic model**

$$f_o(p,x) \to \min_x ,$$
$$f_i(p,x) \leqslant 0 \quad (i \in I),$$
$$g_j(p,x) = 0 \quad (j \in J)$$
$$x \in M$$

***.mod file**

**Given data**

**param N : 1;**
**set I : 1..N;**
**set J : N..N^2;**

***.dat file**

**Command file**

**model *.mod;**
**data *.dat;**
**option solver ipopt;**
**solve;**
**display _var, _dvar;**
**printf ...**

**Problem data in binary format**

**AMPL "stub", *.nl**

**GAMS data exch., *.gdx**

**MPS**

**AML-parsers**

**ampl.exe**
**gams.exe**
**...**

**AML API**

**A**MPL/
**S**olver
interface
**L**ibrary

GAMS

....

**Solvers**

**CPLEX**
**Minos**
**Knitro**
**Gurobi**
**Mosek**
**...**

***COIN-OP***
**Ipopt**
**CLP**

**...**

**GLPK**

**AMPL and GAMS are almost equivalent in features and Use Cases standards de-facto**

# Algebraic Modeling Languages in Optimization

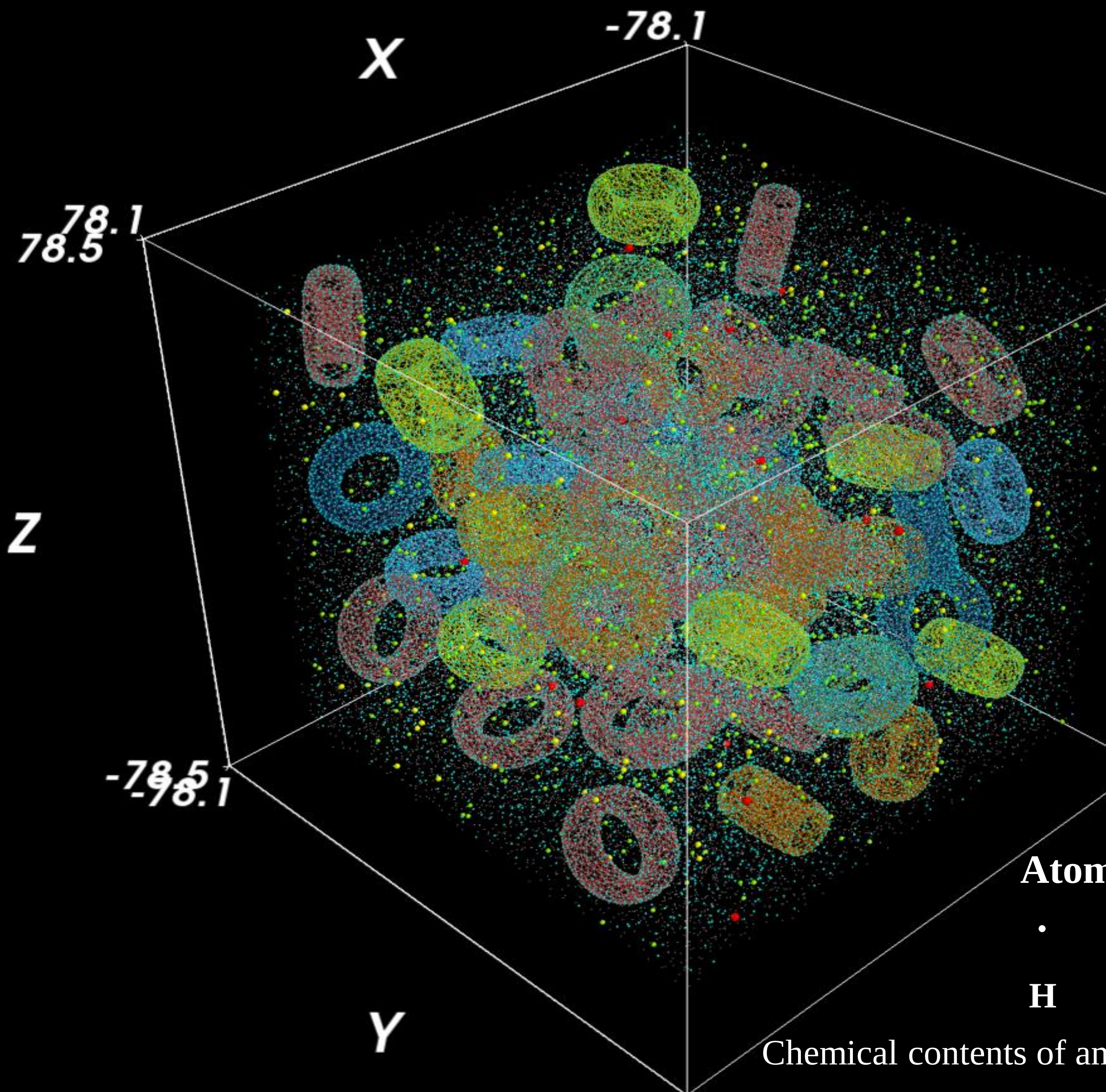
Below is an incomplete list well-known languages

- **AMPL** - A Modeling Language for Mathematical Programming,
  AT&T Bell Laboratories, since beginning of 1980th,
  http://www.ampl.com
- **GAMS** - General Algebraic Modeling System,
  International Bank for Reconstruction and Development,
  since middle of 1980th, http://www.gams.com
- **OPL** - Optimization Programing Lang., **IBM**,
  solvers: ILOG CPLEX (LP, QP, ...), CP Optimizer
- **GNU MathProg** – “subset” of AMPL for GLPK, GNU LP Kit,
  **Moscow Aviation Institute**, since 2000,
  http://www.gnu.org/software/glpk/
- **Zimpl** - **Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin** (ZIB)
  Thorsten Koch, 2004, http://zimpl.zib.de/

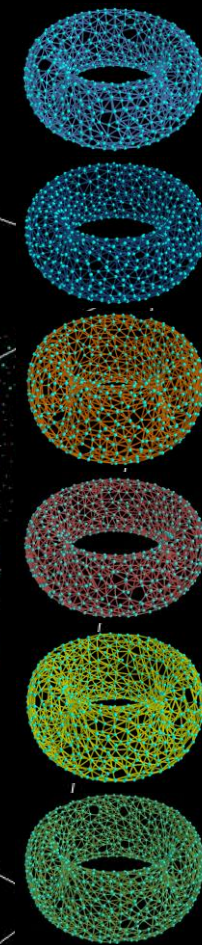
# Примеры задач

- **Моделирование рентгеновской дифракции на углеродных наноструктурах и определение их состава в осаждённых плёнках из ТОКАМАКА Т-10** (совместно с НТК "Курчатовским центром синхротронного излучения и нанотехнологий" РНЦ "Курчатовский институт")
- **Безошибочные вычисления в среде сервисов компьютерной алгебры** (на примере обращения плохо-обусловленных матриц)
- **Оптимизация транспортных перевозок** (частично-целочисленная задача глобальной оптимизации)
- **Задачи вычислительной и комбинаторной геометрии**
- **Проблема 13-ти сфер**

# Структурный анализ углеродных плёнок. Смесь структур




**L2 optimization**



R=1 nm,
Rx=0.3 nm, Ry=0.5 nm

R=1.05 nm,
Rx=0.3 nm, Ry=0.5 nm

R=0.95 nm,
Rx=0.3 nm, Ry=0.6 nm

R=1.1 nm,
Rx=0.3 nm, Ry=0.5 nm

R=1 nm,
Rx=0.3 nm, Ry=0.6 nm

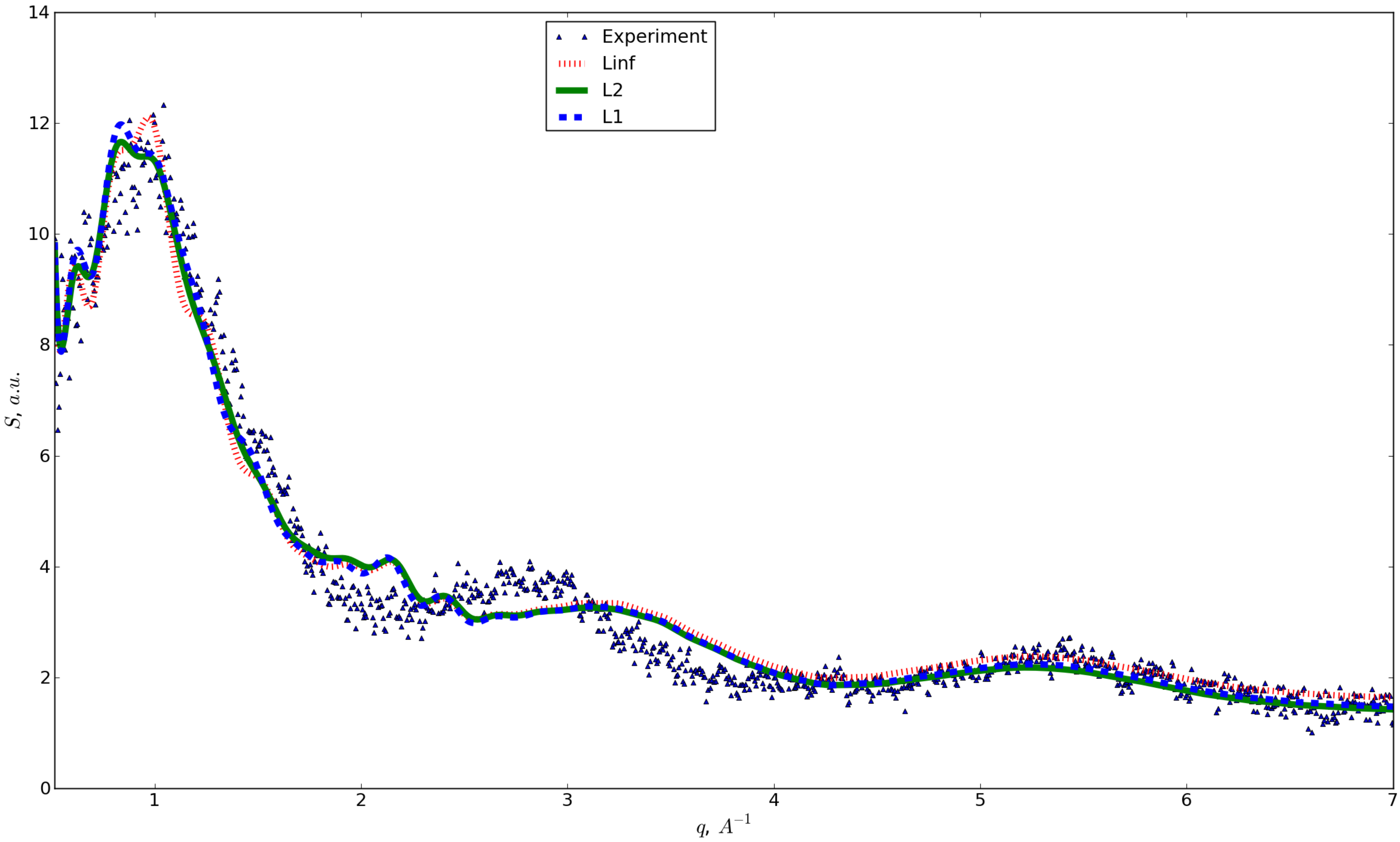
R=1.2 nm,
Rx=0.3 nm, Ry=0.65 nm

**Atoms:**

H C Cr, Fe, Ni Nb, Mo Tl

Chemical contents of amorphous medium taken from experiment

# Визуализация результатов





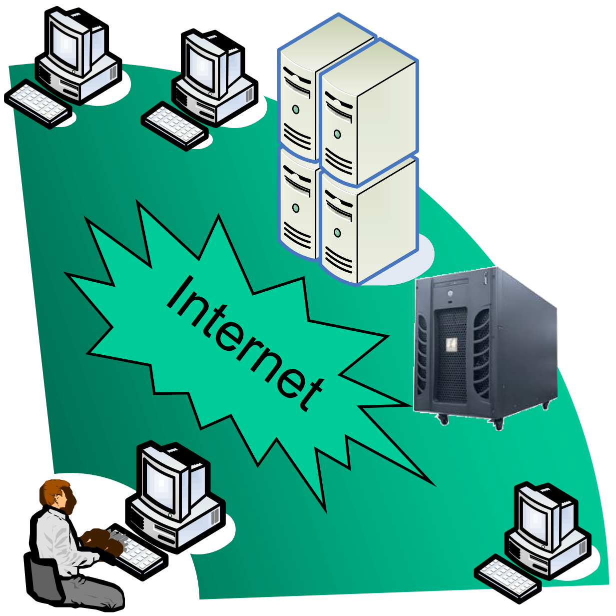

Суммарный график

# Предварительные выводы

- Существующие версии компонентов MathCloud (контейнеры сервисов, СУС, спец. сервисы) продемонстрировали достаточную надёжность работы в режиме "24x7«
- MathCloud вполне пригоден для "быстрой разработки" по крайней мере, прототипа РВС в исследовательских проектах
- Компоненты системы нетребовательны к ресурсам и вполне могут  устанавливаться на настольных машинах.

**BNB-Solver:** библиотека для решения задач конечномерной оптимизации на МВК

**BNB-Grid:** программный комплекс для решения задач конечномерной оптимизации в среде распределенных вычислений



# BNB-Solver

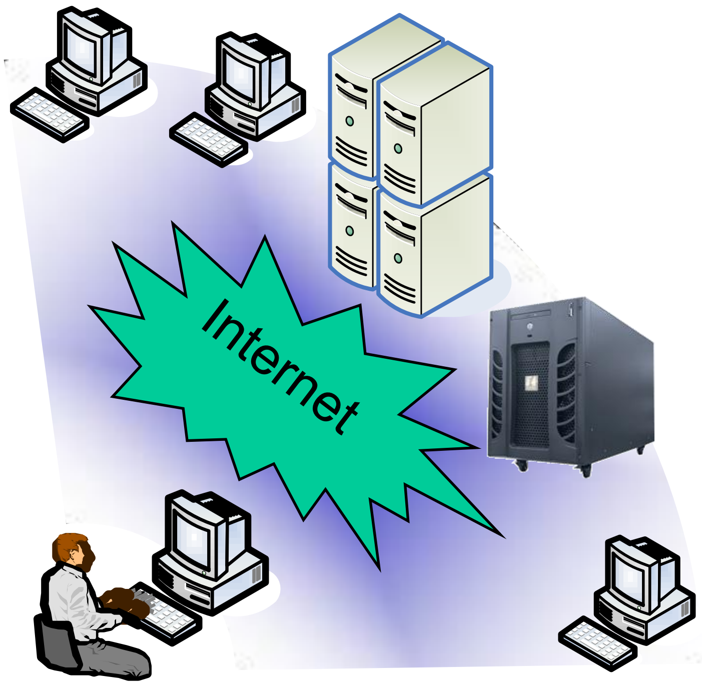
**BNB-Solver** – объектно-ориентированная библиотека для решения задач оптимизации на многопроцессорных вычислительных комплексах.

Библиотека написана на Си++ и MPI, является переносимой, модульной и расширяемой.

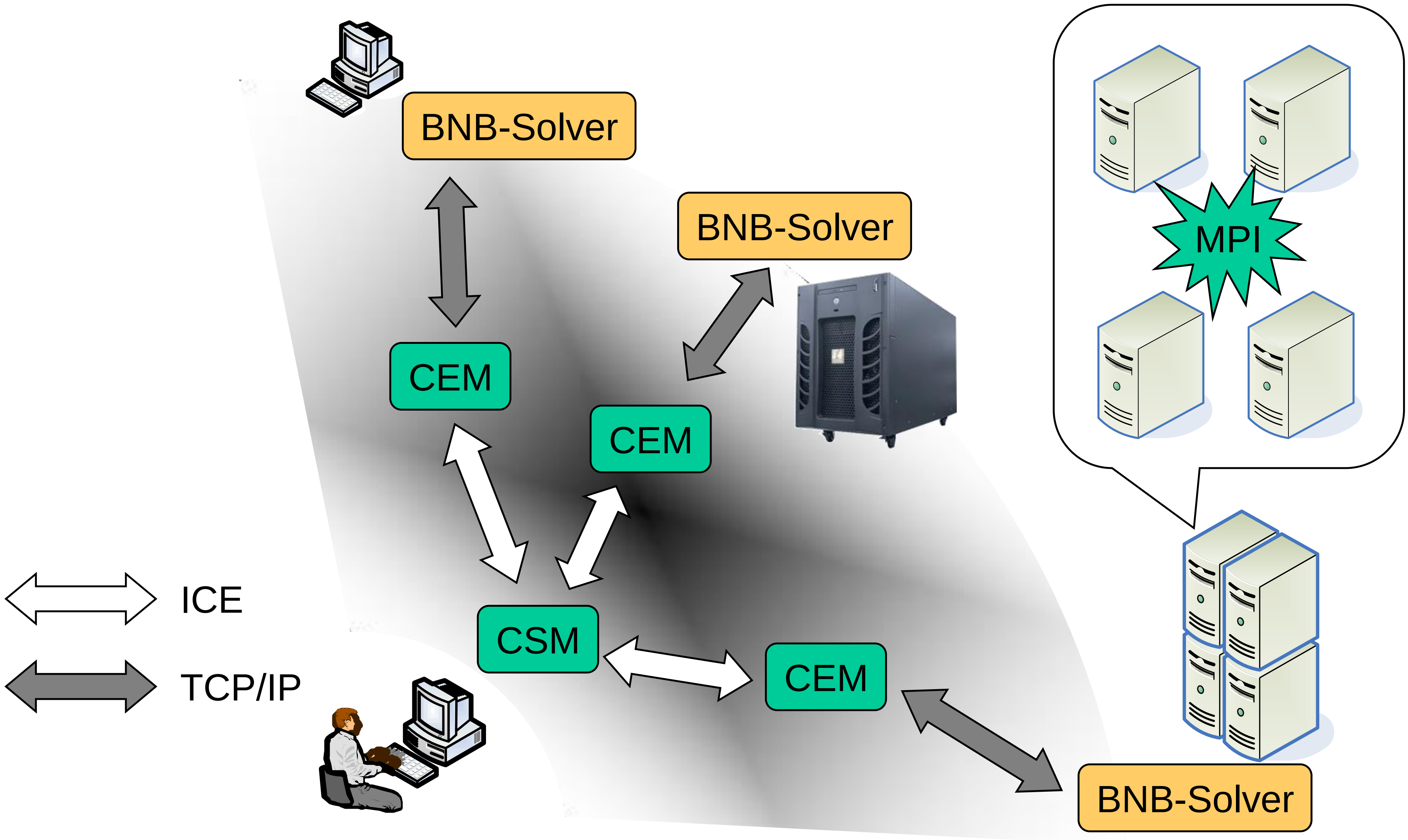
# BNB-Grid

Программный комплекс позволяет:

- проводить расчеты на разнородных, географически удаленных вычислительных ресурсах;
- решать различные задачи оптимизации точными и эвристическим методами;
- проводить расчеты в течение длительного времени с контрольными точками и устойчивостью к сбоям.

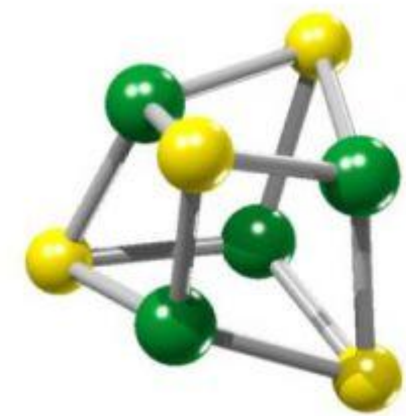


# АРХИТЕКТУРА



# BNB-GRID: ПОИСК КОНФИГУРАЦИИ АТОМОВ С МИНИМАЛЬНОЙ ЭНЕРГИЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

$$F(x)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=i+1}^{n} v\left(\left\|x^{(i)}-x^{(j)}\right\|\right)\to \mathbf{min}$$



$\left\|x^{(i)}-x^{(j)}\right\|$ - distance between atom $i$ and $j$;

$v(r)$ - pair potential;

$v_{LJ}(r)=\frac{1}{r^{12}}-\frac{2}{r^{6}}$ - Lennard-Jones potential;

$v_M(r;\rho)=e^{\rho(1-r)}\left(e^{\rho(1-r)}-2\right)$ - Morse potential.

| Потенциал | Число атомов | Число начальных приближений | $N_{max}$ | Общее время расчетов (мин) | Количество «попаданий» | Найденный минимум | Наилучший известный минимум |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Леннард-Джонс | 98 | 512 | 8192 | 43 | 8 | -543.665361 | -543.665361 |
| Морзе | 85 | 512 | 8192 | 63 | 3 | -405.246158 | -405.246158 |
| Морзе $\rho = 6$ | 90 | 512 | 8192 | 91 | 74 | -433.355380 | -433.355380 |
| Морзе $\rho = 6$ | 100 | 512 | 8192 | 96 | 98 | -488.675685 | -488.675685 |
| Морзе $\rho = 6$ | 70 | 1024 | 8192 | 174 | 9 | -292.462856 | -292.462856 |
| Морзе $\rho = 14$ | 75 | 1024 | 8192 | 205 | 2 | -318.407330 | -318.407330 |
| Морзе $\rho = 14$ | 80 | 1024 | 8192 | 244 | 3 | -340.811371 | -340.811371 |
| Морзе $\rho = 14$ | 85 | 1024 | 8192 | 188 | 5 | -363.891261 | -363.893075 |
| Морзе $\rho = 14$ | 90 | 1024 | 8192 | 266 | 2 | -388.401652 | -388.401652 |
| Морзе $\rho = 14$ | 100 | 1024 | 8192 | 232 | 8 | -439.070547 | -439.070547 |
| Дзюгутов $\rho = 14$ | 50 | 1024 | 8192 | 175 | 2 | -104.366189 | -104.366189 |
| Дзюгутов | 100 | 1024 | 8192 | 175 | 1 | -218.678229 | -219.523265 |
| Дзюгутов | 100 | 1024 | 32758 | 371 | 1 | -218.744395 | -219.523265 |

# BNB-GRID: КРИПТОАНАЛИЗ ГЕНЕРАТОРА A5/1

Решалась методом сведения к логическому уравнению. Далее решалась задача выполнимости (SAT).

Распределенная среда:

1. MVS-100k (МСЦ РАН)
2. СКИФ-МГУ (МГУ им. Ломоносова)
3. Blue-Gene (МГУ им. Ломоносова)
4. Кластер РНЦ (РНЦ «Курчатовский Институт»)

Проводились длительные расчеты (неделя и более) на **1000-6000** вычислительных ядер одновременно. В результате были взломаны три тестовые задачи криптоанализа для генератора A5/1. На решение одной задачи затрачивалось 2-4 суток.

# Что значит решить задачу Коши для системы дифференциальных уравнений?

$$\dot{x}(t) = f(x(t), t), \ t \in [0, T], \ x(0) = x_0 \quad \Rightarrow \quad x(t) = \varphi(x_0, t)$$

$$\dot{x}(t) = x(t)$$

$$t_0 = 0; \ \ x(0) = x_0$$

$$\Downarrow$$

$$x(t) = x_0 \cdot e^t$$

$$x_0 = 10; \ t = 5; \ x(t) = ?$$

# Решение задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений на основе формулы Тейлора

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t)) \qquad x(t_0) = x_0$$

$$x(t) = x_0 + x^{(1)}(t_0)(t - t_0) + \ldots + x^{(s)}(t_0)\frac{(t - t_0)^s}{s!} \ldots$$

# Можно вычислять производные x(t) в символьном виде

Производные x(t) любого порядка в символьном виде в силу диф. ур.

$$\dot{x}(t) = f(x(t))$$

$$\dot{x}(t_0) = f(x_0)$$

$$x^{(2)}(t) = \frac{d}{dt}(f(x)) = \left.\frac{\partial f(x)}{\partial x}\right|_{x_0} \cdot f(x_0) = f_2(x)$$

$$\ldots$$

$$x^{(s)}(t) = \frac{d}{dt}(f_{s-1}(x)) = \left.\frac{\partial f_{s-1}(x)}{\partial x}\right|_{x_0} \cdot f(x_0) = f_s(x)$$

# Задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений с полиномиальными правыми частями

$$\frac{dx_1(t)}{dt} = P_{1,1}(x(t))$$

$$\frac{dx_2(t)}{dt} = P_{1,2}(x(t))$$

$$\dots$$

$$\frac{dx_n(t)}{dt} = P_{1,n}(x(t))$$

$$x(t_0) = x_0$$

Где $P_{1,i}(\,)$ - n-мерный многочлен m-го порядка с постоянными коэффициентами .

# Квазианалитическое представление приближенного решения задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений с полиномиальными правыми частями в виде отрезка ряда Тейлора

$$x(x_0, t) = x_0 + T_1(x_0)t + T_2(x_0)\frac{t^2}{2} + \dots$$

$$\dots + T_i(x_0)\frac{t^i}{i!} + \dots + R(x_0, T, k)$$

$n$ – порядок системы ДУ

$m$ – степень многомерного многочлена правой части ДУ

$i$ – порядковый номер многочлена $T$ от $x_0$ в разложении в ряд Тейлора ($Ti(x_0)$)

$im-i+1$ – степень многочлена $Ti(x_0)$

$n^{im-i+2}$ – число коэффициентов в $i$-ом члене разложения в ряд Тейлора

$i$ - число членов разложения

# Точность квазианалитического решения

Точность квазианалитического решения зависит от радиуса сходимости ряда Тейлора по следующей формуле

$$H < C\left(\frac{t - t_0}{R}\right)^n$$

где $R(x_0, f)$ – радиус сходимости,

функция зависящая от начальных условий и правой части.

| | | | |
|---|---|---|---|
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | |
| | | | | | |
| | | | | | |

| | | |
|---|---|---|
| | | |
| | | |

| | | |
|---|---|---|
| | | |
| | | |

| | | |
|---|---|---|
| | | |
| | | |

# Примеры вычислительных задач

Вычисление значения многомерного многочлена при помощи обобщённой схемы Горнера.

Оценка близости двух решений, исходящих из разных начальных точек.

Вычисление траектории. Точки не обязательно брать часто или редко, поведение траектории не зависит от предыдущих вычислений (в отличии от разностных схем).

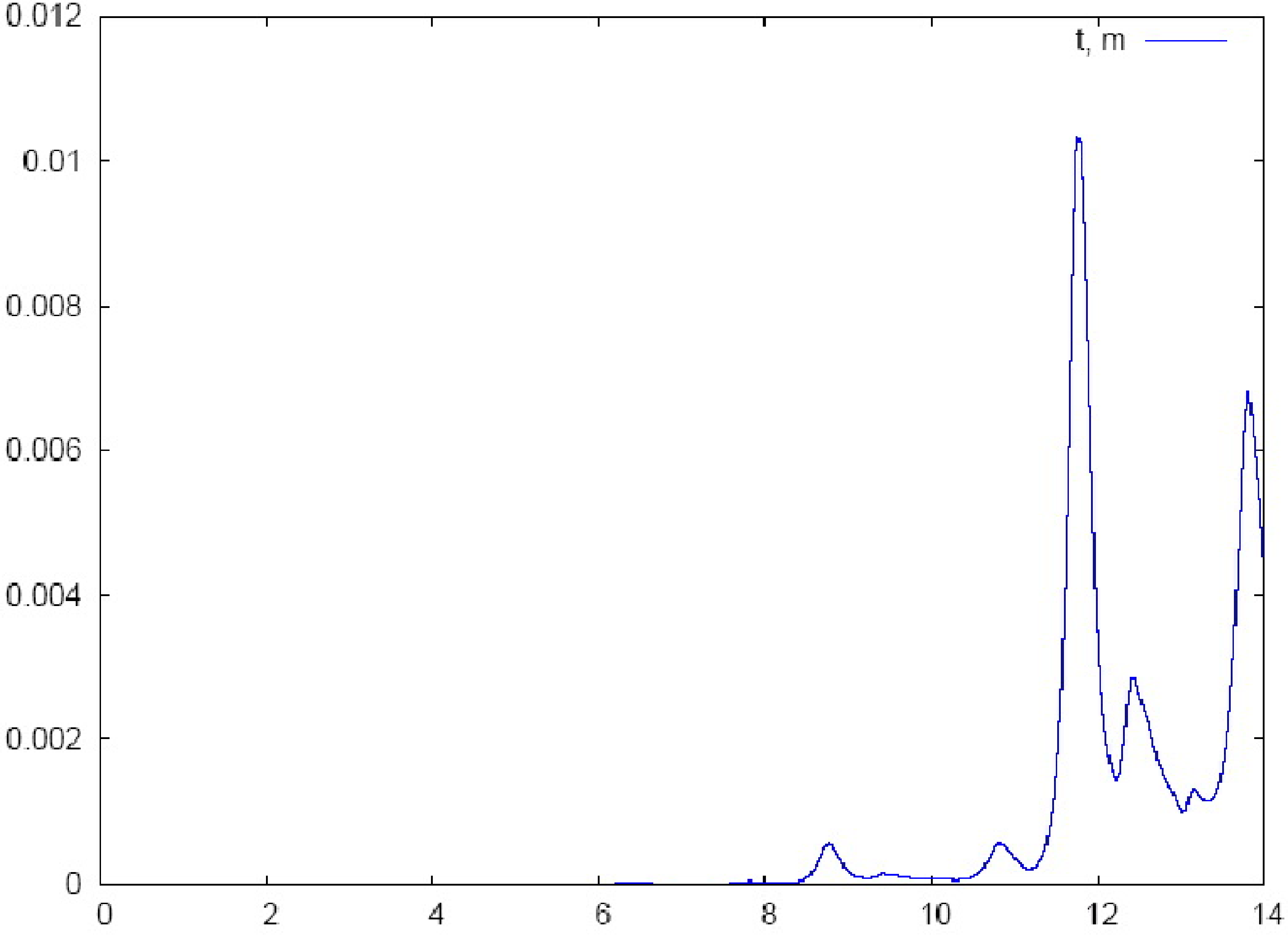
Синтез решения. Построение решения как функции от $t$ и $x_0$.

# Система Лоренца

$$\dot{x}_1 = \sigma(x_2 - x_1),$$
$$\dot{x}_2 = r x_1 - x_2 - x_1 x_3,$$
$$\dot{x}_3 = x_1 x_2 - b x_3$$

Со стандартными параметрами σ=10, r=28,b =8/3

# Эволюция расстояния между двумя близкими траекториями

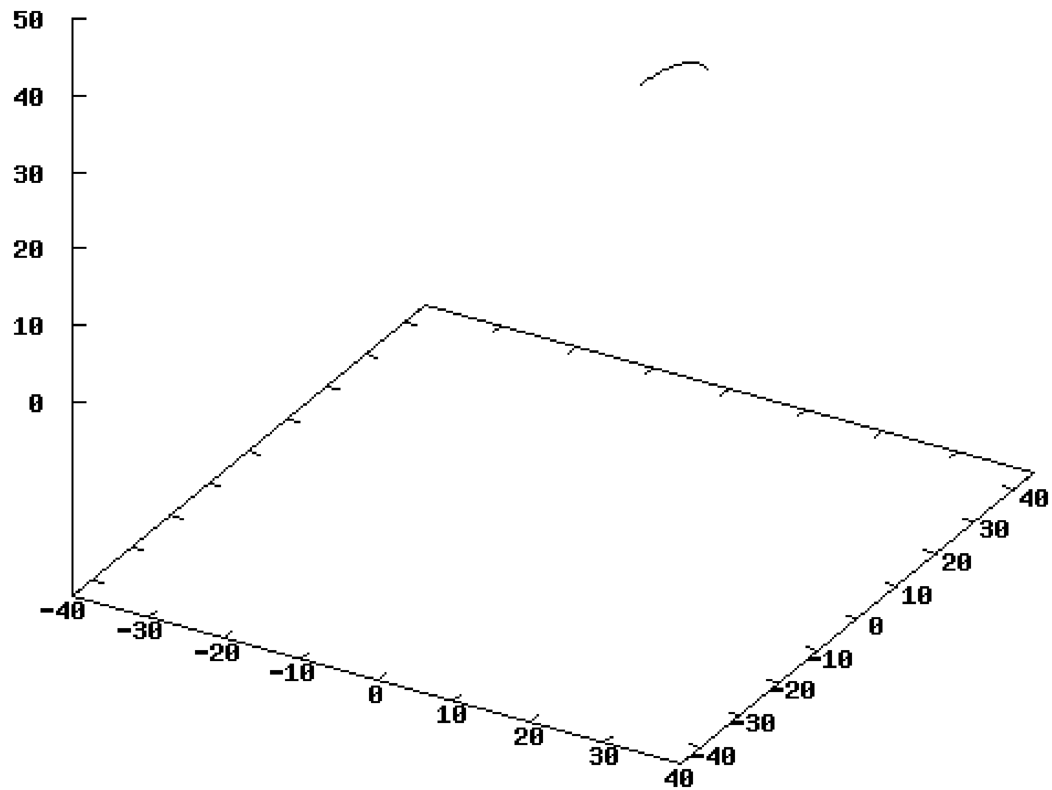


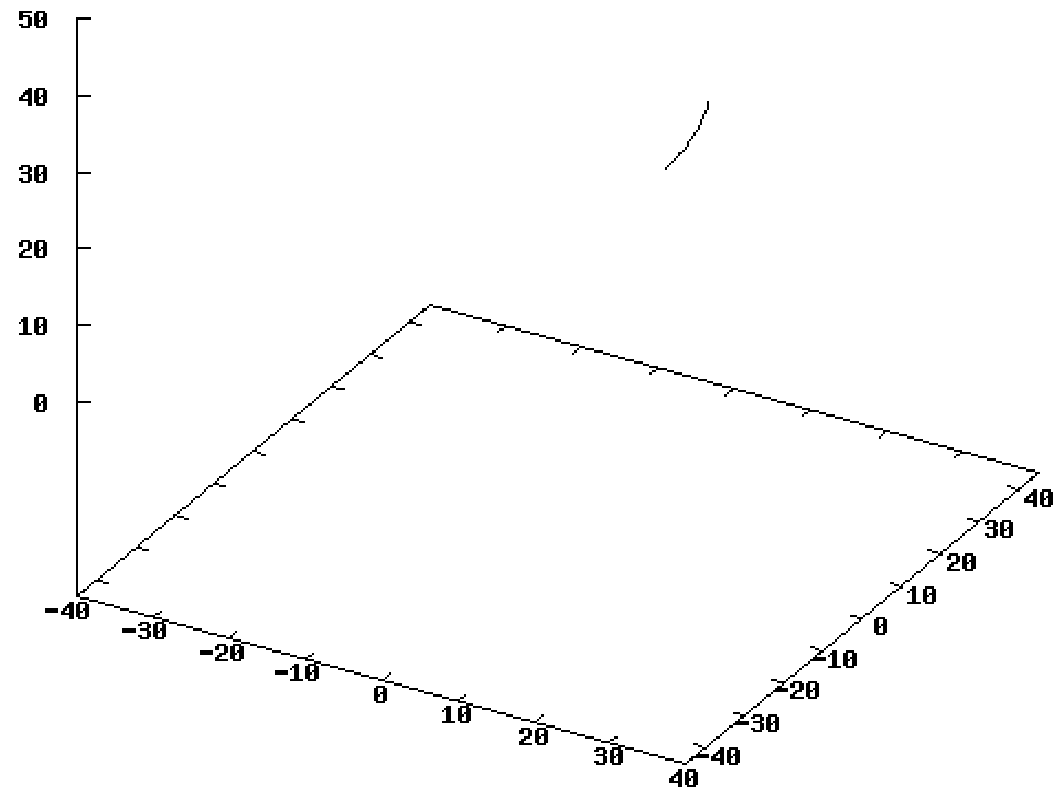
# Составное квазианалитическое решение

Пусть $x(t) = \varphi(x_0, t - t_0)$ квзианалитическое решение .

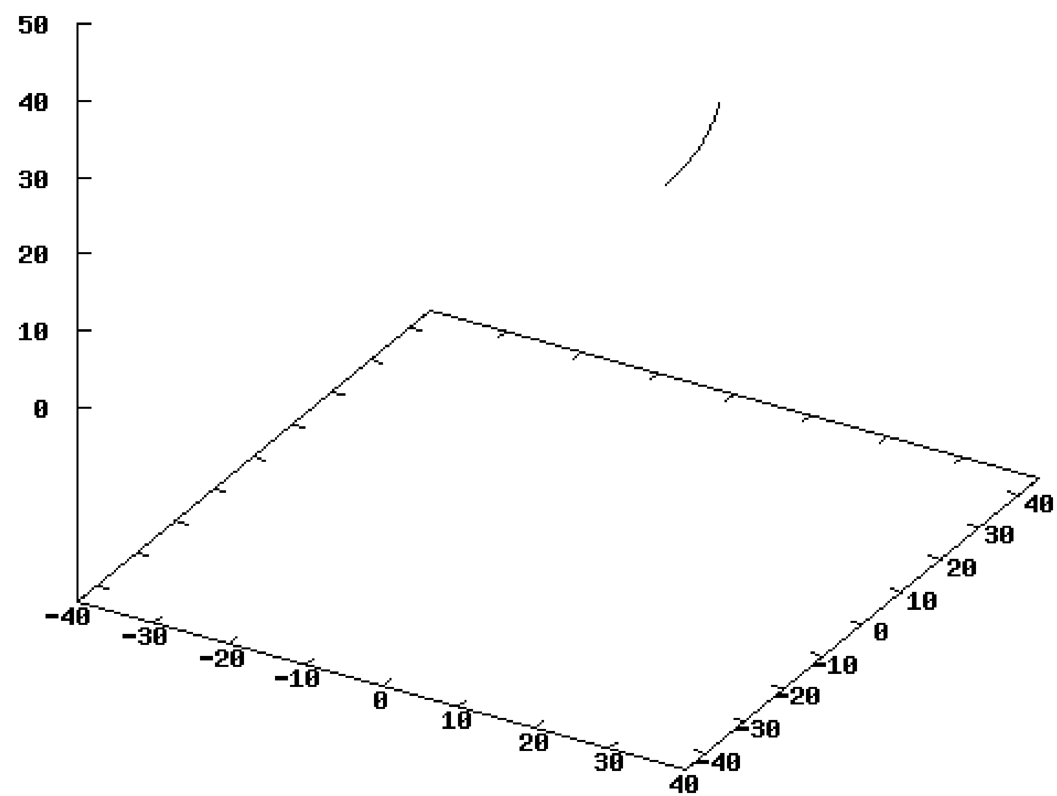
Составное квзианалитическое решение можно представить как комбинацию уже существующих квазианалитических приближений любой требуемой глубины $n$ :

$$x(t) = \varphi(\varphi(...\varphi(x_0, t_1 - t_0), t_2 - t_1)..., t - t_n)$$


50
40
30
20
10
0
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40



50
40
30
20
10
0
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40



50
40
30
20
10
0
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40
-40
-30
-20
-10
0
10
20
30
40

Спасибо за внимание!