RSCD 2025
Суперкомпьютерные дни в России 2025

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
Институт информационных технологий, математики и механики

Parallel Algorithm for Solving Multicriterial Optimization Problems Using Elements of Machine Learning

Сергей Коннов, Евгений Козинов,
Константин Баркалов, Александр Сысоев, Владимир Гришагин

{evgeny.kozinov,konstantin.barkalov}@itmm.unn.ru,vagris@unn.ru

Содержание

- Многокритериальная оптимизация
- Сведение задач многокритериальной оптимизации к одномерным скалярным задачам глобального поиска
- Подход к поиску эффективных решений в задачах многокритериальной оптимизации
  - Пошаговое решение набора задач скалярной оптимизации
  - Повторное использование поисковой информации
- Параллельная модификация алгоритма
- Ускорение поиска с помощью методов машинного обучения
  - Оценка множества Парето с использованием разделяющей гиперплоскости
  - Оценка множества Парето с использованием нелинейных моделей машинного обучения
- Результаты вычислительных экспериментов

Задача многокритериальной оптимизации

- Задача многокритериальной оптимизации (МКО) может быть сформулирована следующим образом:

$$f(y) = \left(f_1(y), f_2(y), \dots, f_s(y)\right) \to \min, \qquad y \in D$$

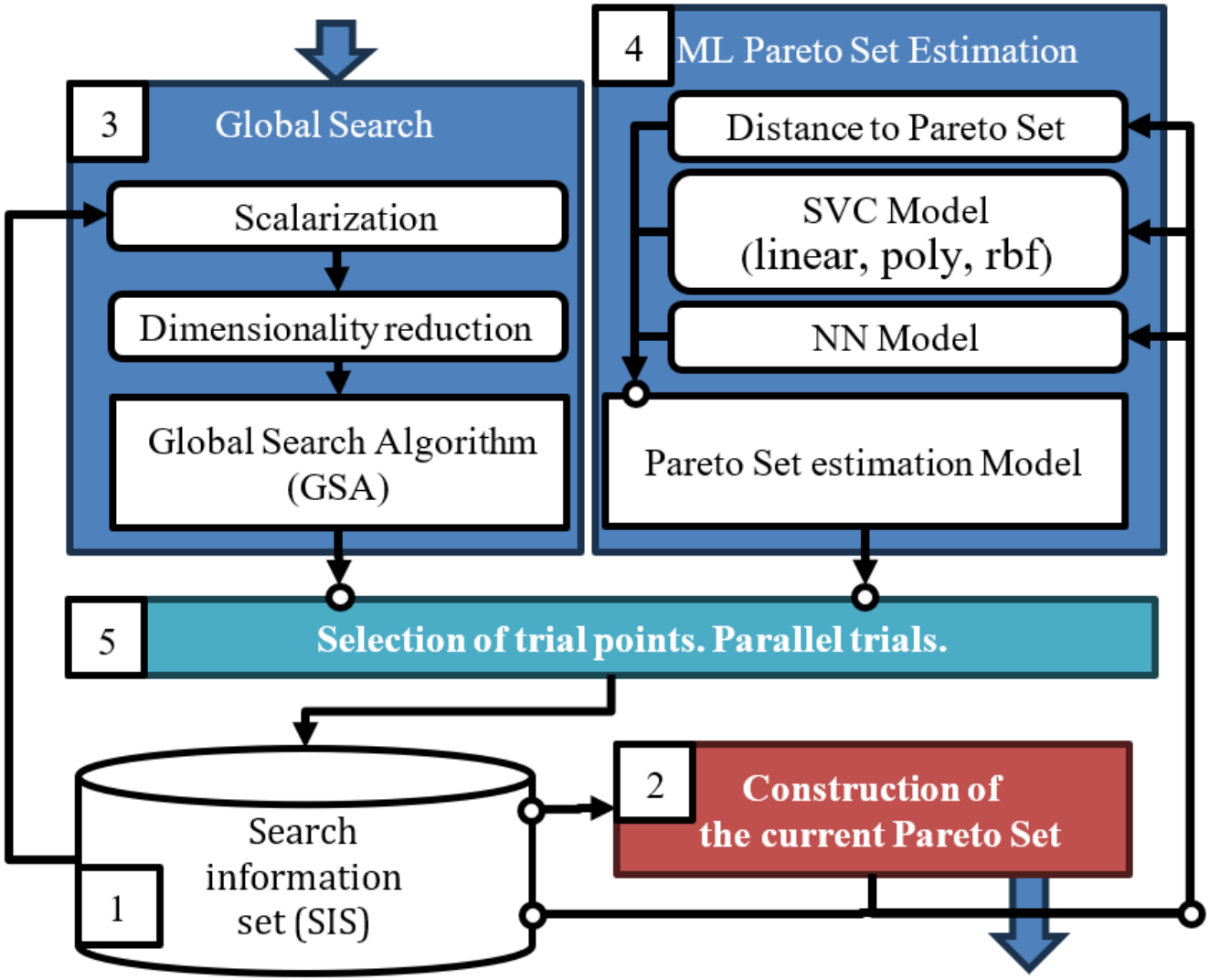
  - $f(y) = (f_1(y), f_2(y), \dots, f_s(y))$ – критерии поиска,
  - $y = (y_1, y_2, \dots, y_N)$ – вектор варьируемых параметров,
  - N – размерность решаемой задачи МКО,
  - D – N-мерный гиперинтервал с областью поиска

$$D = \{y \in R^N : a_i \le y_i \le b_i, 1 \le i \le N\}.$$

- Критерии $f_i(y)$, $1 \le i \le s$, могут быть **многоэкстремальными**, **трудно оцениваемыми** и задаваться в виде **«черного ящика»**.
- Критерии $f_i(y)$, $1 \le i \le s$, удовлетворяют условию Липшица

$$|f_i(y') - f_i(y'')| \le L_i \|y' - y''\|, y', y'' \in D, 1 \le i \le s.$$

Общая схема предлагаемого подхода



Скаляризация критериев

- Для решения задач МКО можно применять скаляризацию критериев

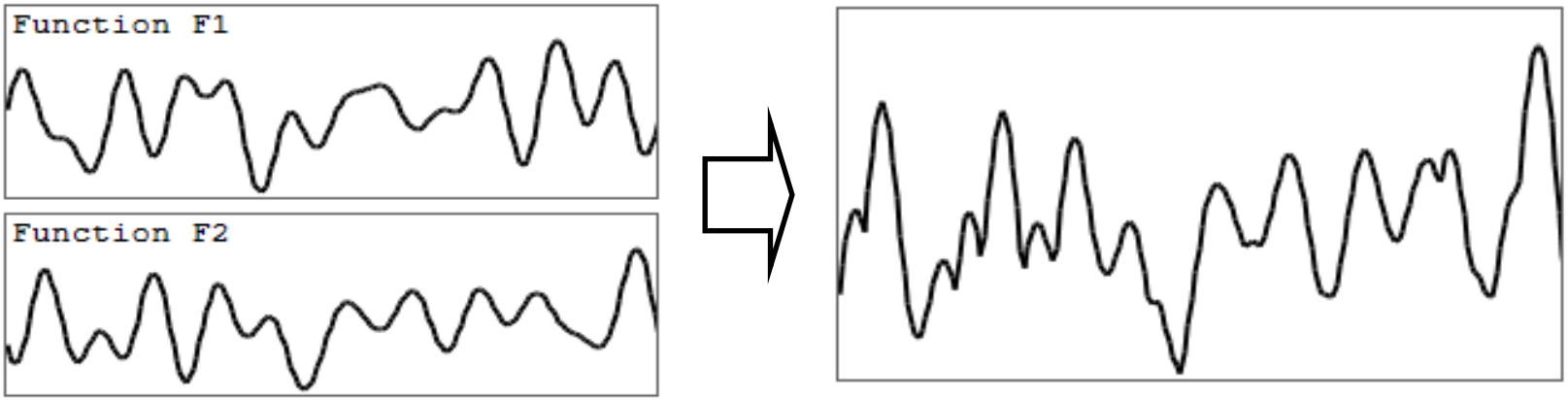
$$\min_{y \in D} \varphi(y) = \min_{y \in D} F(\lambda, y),$$

  - F – скалярный критерий,
  - λ – вектор параметров метода скаляризации (соответствует важности критериев).

- Возможный метод скаляризации:

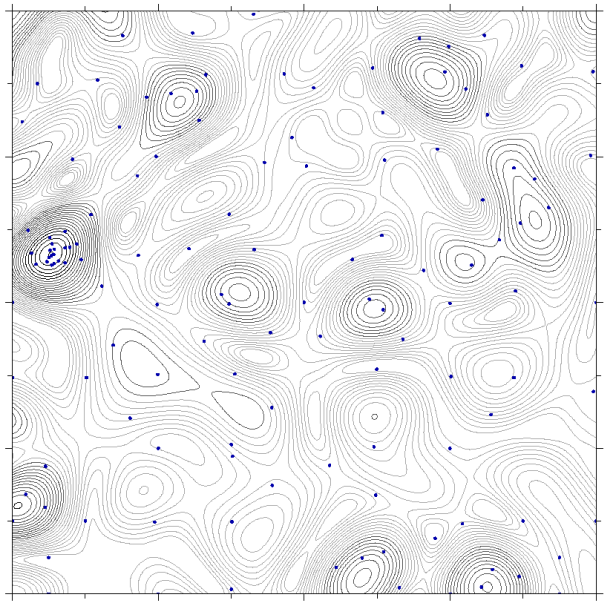
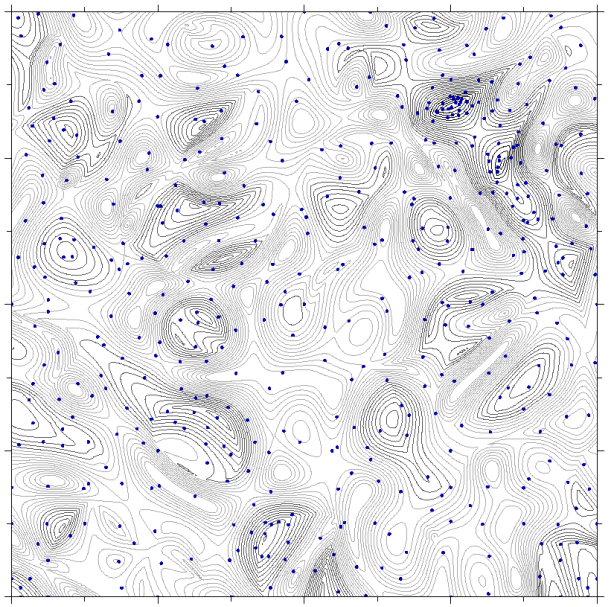
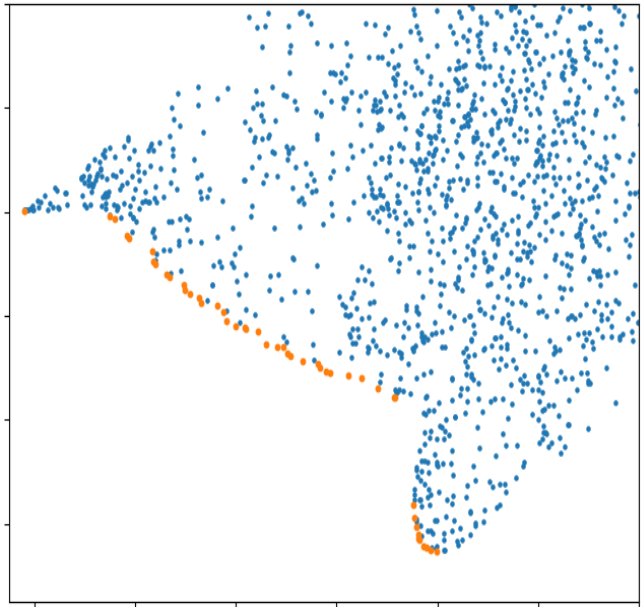
$$\min_{y \in D} F(\lambda, y) = \min_{y \in D} \max_{i} \{\lambda_i (f_i(y) - f_i^*)\}$$

где f^* эталонное решение (может определяться в процессе поиска).



Скаляризация критериев

$\varphi_1(y) = F(\lambda_1, f(y))$ … $\varphi_m(y) = F(\lambda_m, f(y))$ Множество Парето

- Появляется серия скалярных задач глобальной оптимизации

$$\min_{y \in D} \varphi_1(y),\ \min_{y \in D} \varphi_2(y), \ldots,\ \min_{y \in D} \varphi_m(y)$$

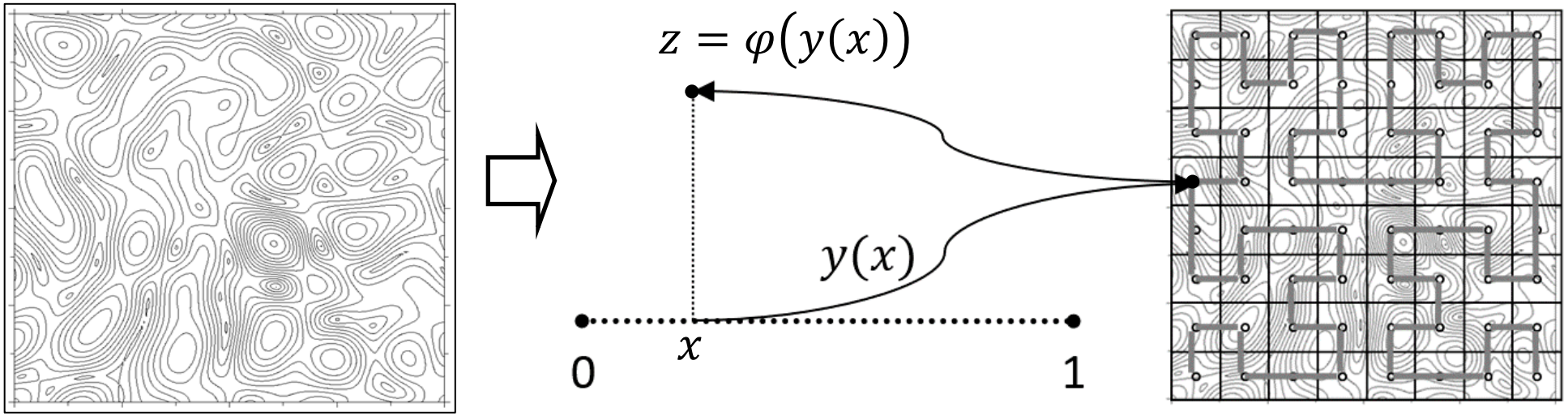
- Критерии $\varphi(y)$ удовлетворяет условию Липшица

$$|\varphi(y') - \varphi(y'')| \le L\|y' - y''\|,\ y', y'' \in D.$$

Уменьшение размерности

- Мы используем *кривые Пеано* $y(x)$, однозначно и непрерывно отображающие интервал [0,1] на N-мерную область поиска D

$$\min_{y \in D} \varphi(y) = \min_{x \in [0,1]} \varphi\left(y(x)\right)$$



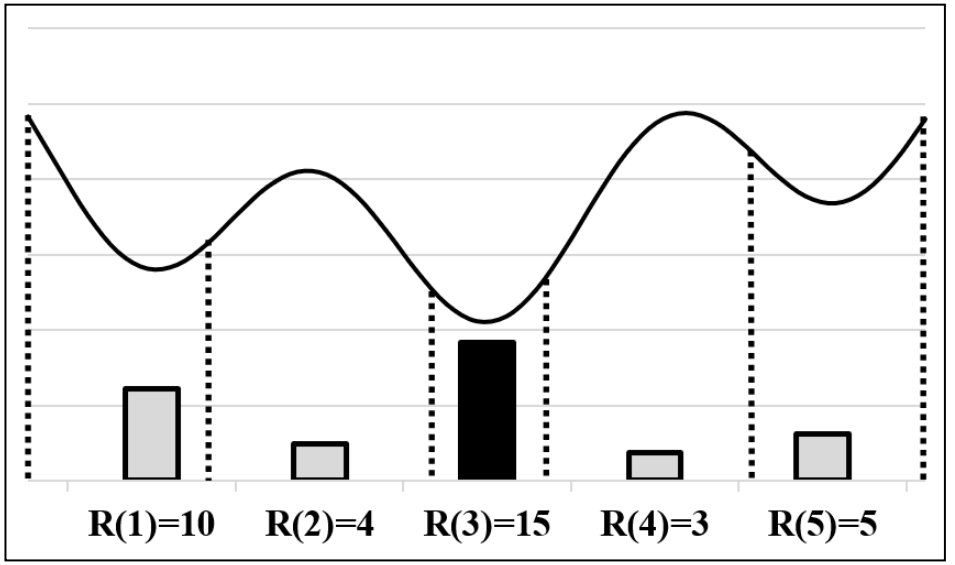
Алгоритм глобального поиска (АГП)

- Испытание – вычисление значений вектор-функции $\varphi(y(x_i))$ в точке x_i.
- Общая схема алгоритма поиска глобального минимума:

Первое испытание проводится в произвольной точке $x^1 \in (0,1)$. Далее:

1. Отсортировать точки испытаний в порядке возрастания их координат $0 = x_0 < x_1 < \ldots < x_i < \ldots < x_k < x_{k+1} = 1$.
2. Для каждого интервала (x_{i+1}, x_i) вычислить значение характеристики $R(i)$.
3. Определить интервал (x_{t-1}, x_t), которому соответствует максимальная характеристика $R(t) = max\ \{R(i): 1 \le i \le k+1\}$.
4. Провести очередное испытание в точке интервала $x^{k+1} \in (x_{t-1}, x_t)$.
5. Условие остановки $\rho_t \le \varepsilon$, где

$$\rho_j = \sqrt[N]{x_i - x_{i-1}}.$$



Параллельный алгоритм глобального поиска (АГП)

- Параллельный алгоритм:

1. Отсортировать точки испытаний в порядке возрастания их координат $0 = x_0 < x_1 < \ldots < x_i < \ldots < x_{k*p} < x_{k*p+1} = 1$.
2. Для каждого интервала (x_{i-1}, x_i) вычислить характеристики интервалов $R(i)$.
3. Отсортировать интервалы по убыванию характеристик, взять p интервалов

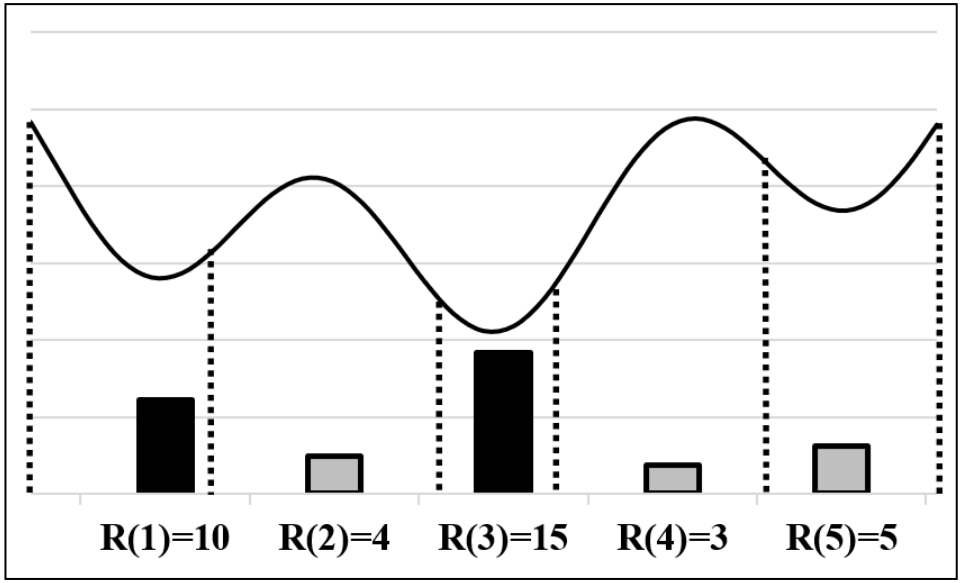
   $R(t_1) \geq R(t_2) \geq \ldots \geq R(t_p)$.

4. **Провести p испытаний параллельно**

   $(x_{t_1-1}, x_{t_1}), (x_{t_2-1}, x_{t_2}), \ldots, (x_{t_p-1}, x_{t_p})$.

5. Критерий остановки:

   $\rho_{t_i} \leq \varepsilon, 1 \leq t_i \leq p.$



Ускорение вычислений на основе повторного использования информации

- Численное решение задач глобальной оптимизации предполагает последовательное вычисление значений критериев $f(y)$ в точках y_i.
  - Полученные в результате вычислений данные образуют *множество* Ω *поисковой информации.*

$$\Omega = \{(y_i, f_i = f(y_i)) : 1 \le i \le k\}.$$

- В результате скаляризации и снижения размерности множество Ω можно преобразовать к виду A

$$A = \{(x_i, z_i) : 1 \le i \le k\},$$

где $x_i \in [0,1]$, $z_i = F(\lambda, y(x_i))$.

- Информацию, накопленную во множестве Ω, можно использовать для нахождения минимума следующей задачи оптимизации $F(\lambda, y(x))$, т. е.

$$(y_i, f_i) \xrightarrow{\lambda} (x_i, z_i), 1 \le i \le k, \forall \lambda.$$

Пример решения 2D задачи МКО

- Состояние поиска при решении серии скалярных задач

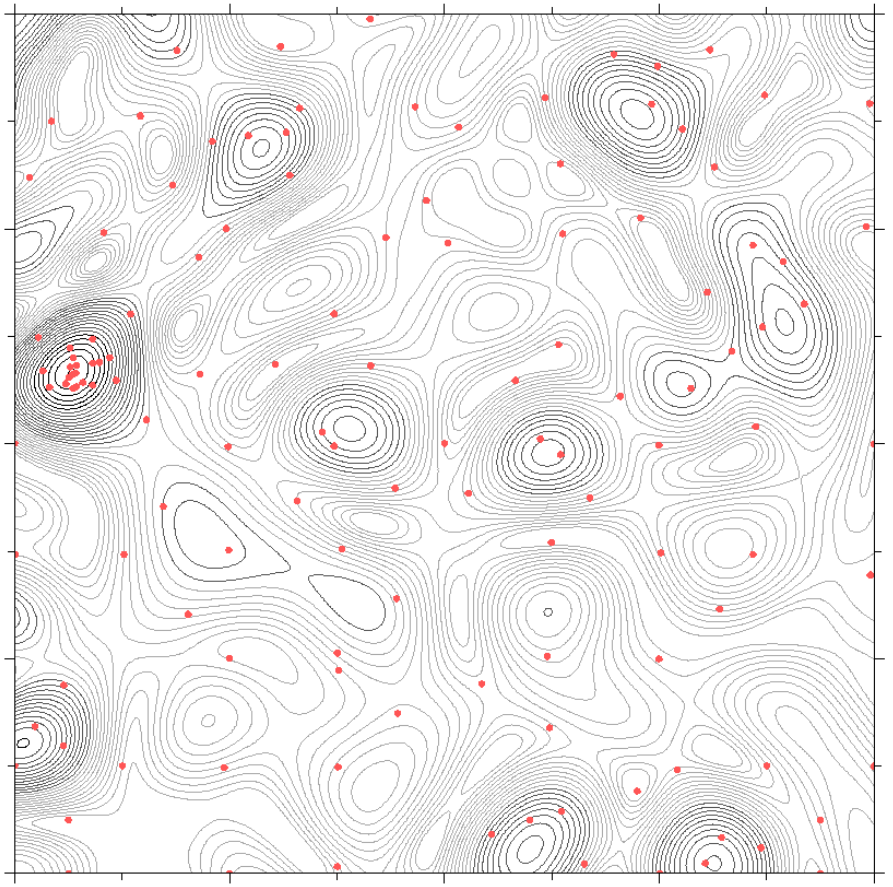
$$f(y) = \left(f_1(y), f_2(y)\right) \rightarrow \min$$

Скалярная задача No. 1, $\lambda = (0,1)$

$$\varphi_1(y) \rightarrow min, y \in D$$

где $\varphi_1(y) = \max\{\lambda_1 f_1(y), \lambda_2 f_2(y)\}$

Число испытаний – 128



Пример решения 2D задачи МКО

- Состояние поиска при решении серии скалярных задач

$$f(y) = \left(f_1(y), f_2(y)\right) \rightarrow \min$$

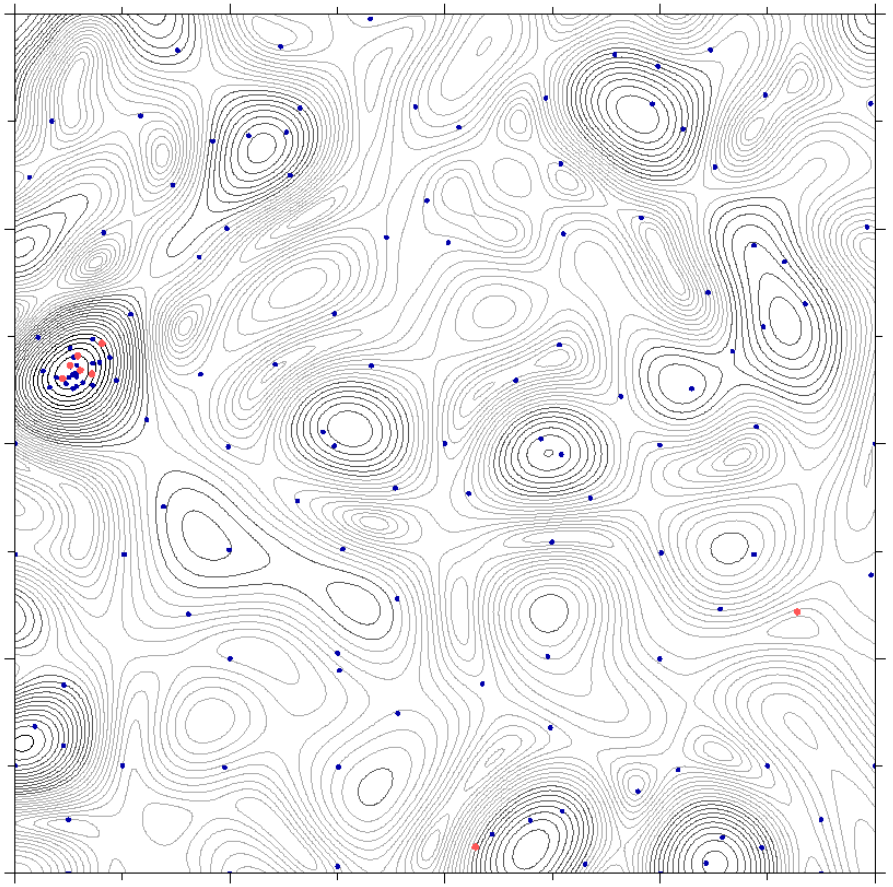
Скалярная задача No. 3, $\lambda = (0.06, 0.94)$

$$\varphi_3(y) \rightarrow min, y \in D$$

где $\varphi_3(y) = \max\{\lambda_1 f_1(y), \lambda_2 f_2(y)\}$

Число испытаний –144

Число новых испытаний – 7
(красные точки)



Пример решения 2D задачи МКО

- Состояние поиска при решении серии скалярных задач

$f(y) = \left(f_1(y), f_2(y)\right) \rightarrow \min$

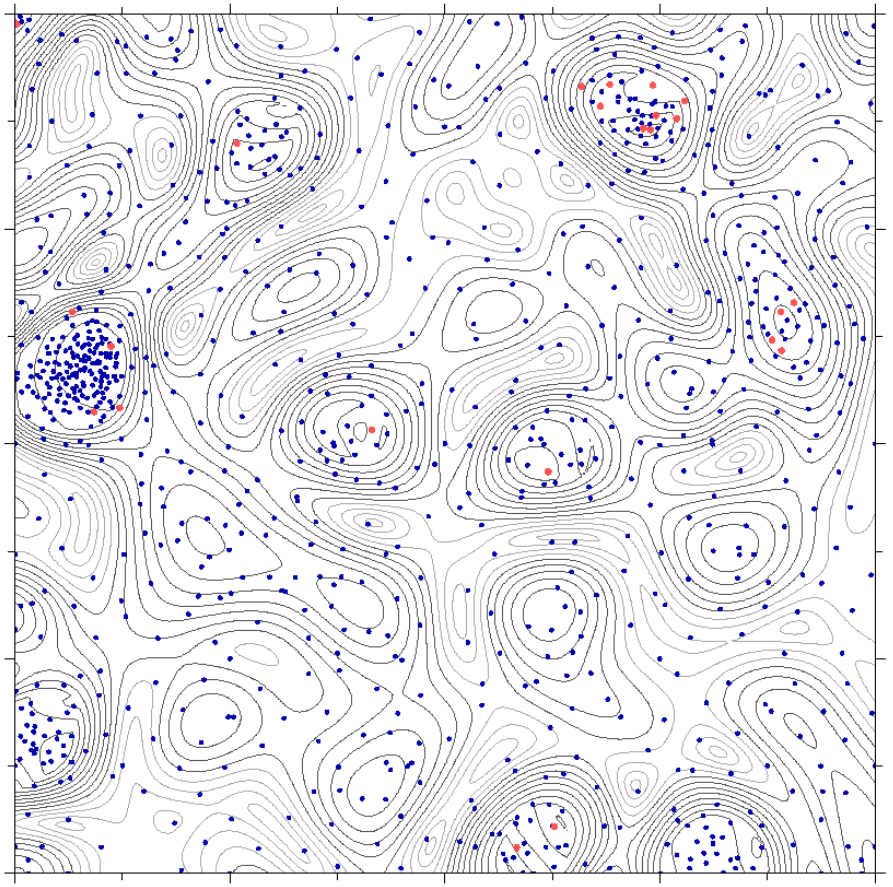
Скалярная задача No. 15, $\lambda = (0.3, 0.7)$

$\varphi_{15}(y) \rightarrow min, y \in D$

where $\varphi_{15}(y) = \max\{\lambda_1 f_1(y), \lambda_2 f_2(y)\}$

Число испытаний – 967

Число новых испытаний – 35
(красные точки)



Пример решения 2D задачи МКО

- Состояние поиска при решении серии скалярных задач

$f(y) = \left(f_1(y), f_2(y)\right) \rightarrow \min$

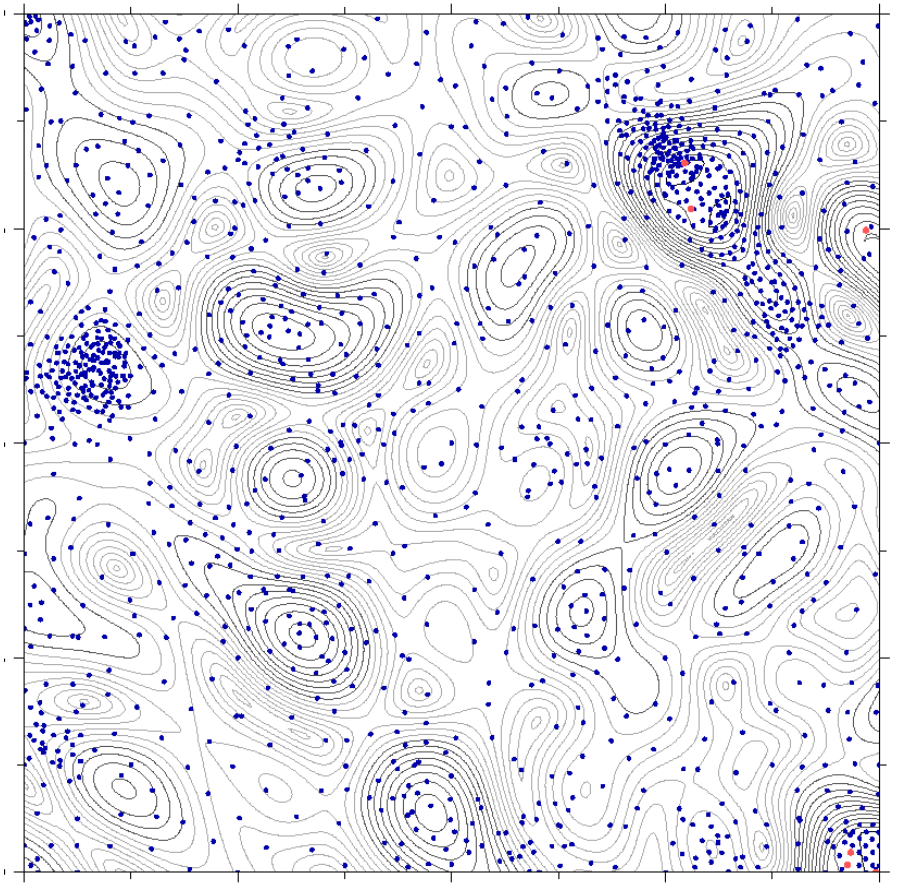
Скалярная задача No. 35, $\lambda = (0.7, 0.3)$

$\varphi_{35}(y) \rightarrow min, y \in D$

where $\varphi_{35}(y) = \max\{\lambda_1 f_1(y), \lambda_2 f_2(y)\}$

Число новых испытаний –1378

Число новых испытаний – 8
(красные точки)



Пример решения 2D задачи МКО

- Состояние поиска при решении серии скалярных задач

$f(y) = \left(f_1(y), f_2(y)\right) \rightarrow \min$

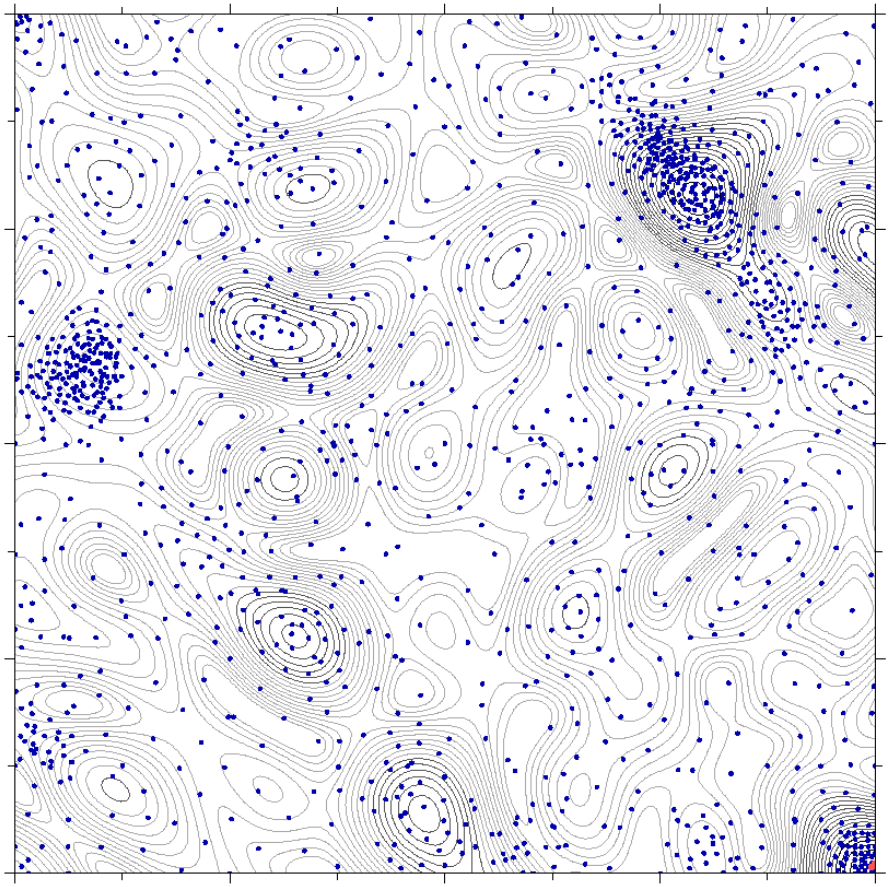
Скалярная задача No. 50, $\lambda = (1, 0)$

$\varphi_{50}(y) \rightarrow min, y \in D$

где $\varphi_{50}(y) = \max\{\lambda_1 f_1(y), \lambda_2 f_2(y)\}$

Число испытаний – 1445

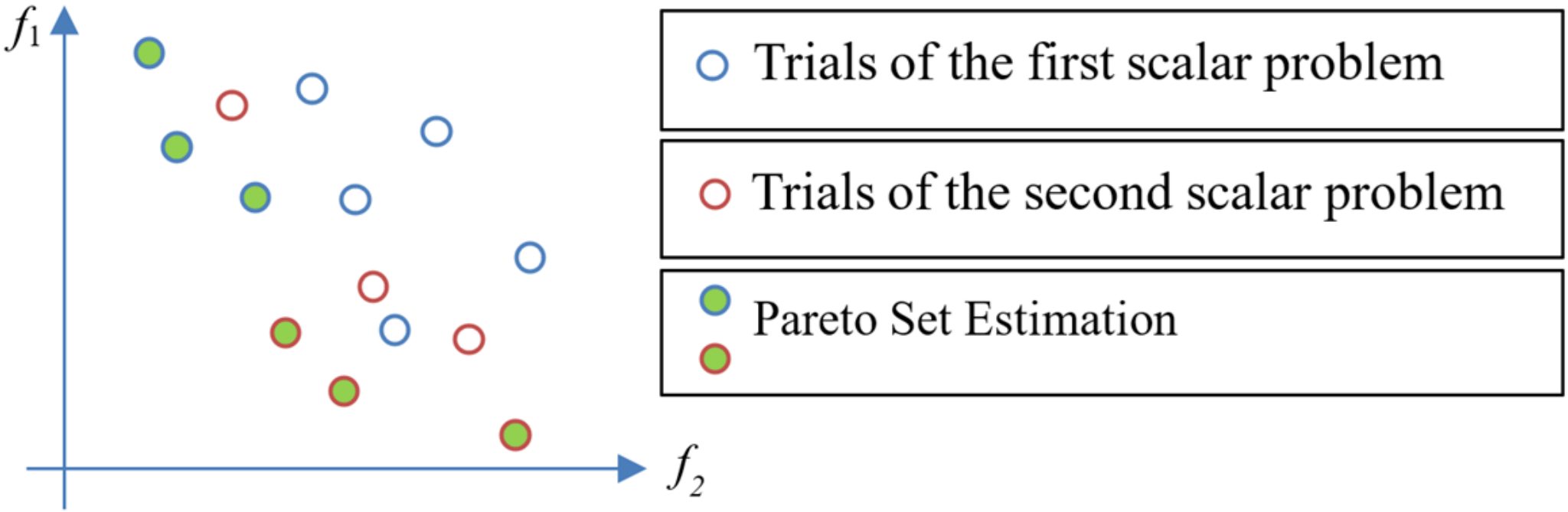
Число новых испытаний – 3
(красные точки)



Конечное состояние поиска
после решения 50 скалярных задач

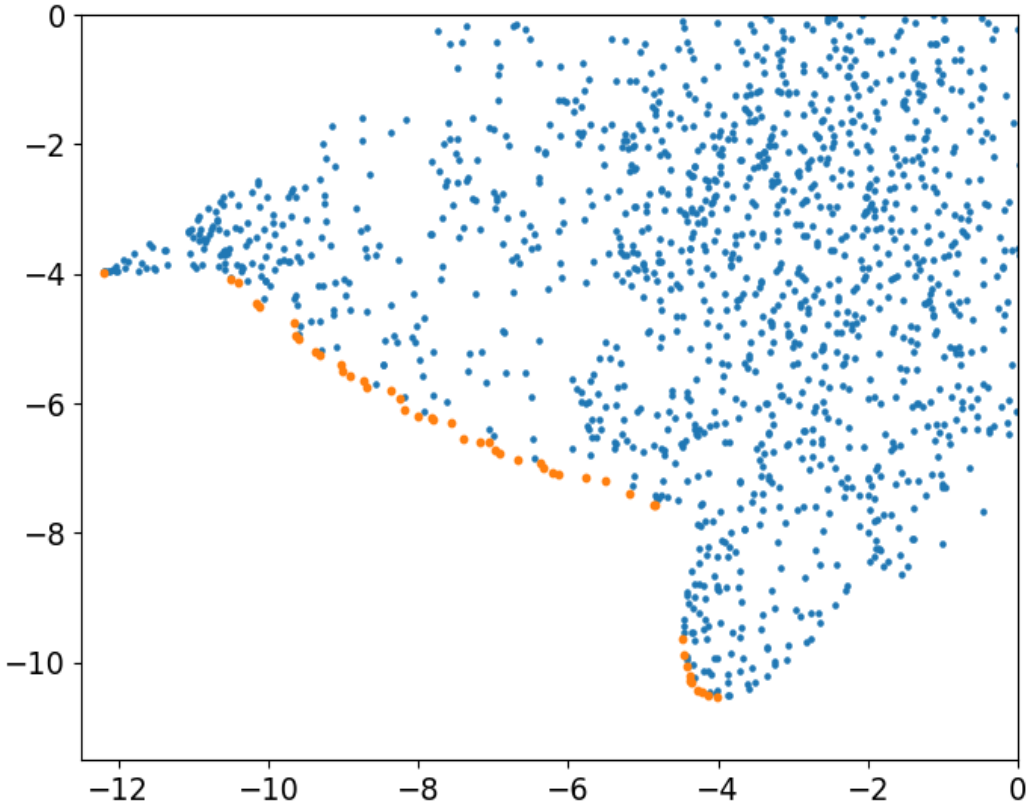
Оценка множества Парето

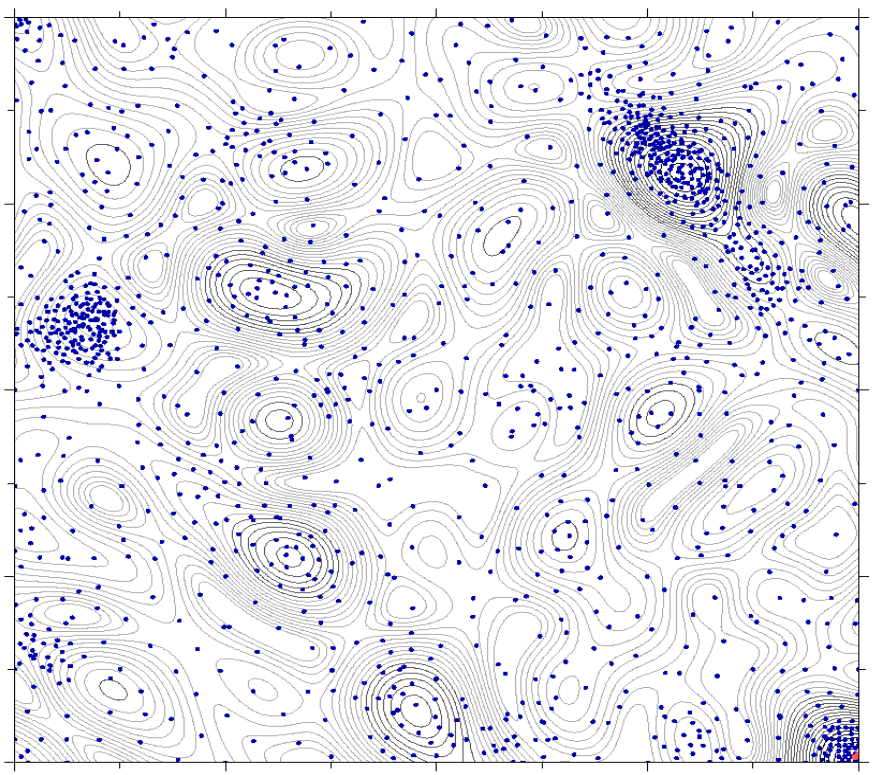
- Множество Парето с решением каждой новой скалярной задачи уточняется
  - На рисунке представлены значения в пространстве критериев



Ускорение поиска

- Существует множество подходов к ускорению решения скалярных задач.
- Нам нужен подход к ускорению решения многокритериальных задач.





Ускорение поиска

- Дальнейшее ускорение поиска может быть основано на применении методов машинного обучения.
- Предлагается следующий подход:
  1. Решить несколько скалярных задач с различными векторами λ, например, $\lambda_1 = (1,0)$, $\lambda_2 = (0.5, 0.5), \lambda_3 = (0,1)$
  2. Построить оценку множества Парето.
  3. Добавить штраф за отклонение от построенной оценки множества Парето в правило выбора новой точки испытаний
  4. Решить i-ю скалярную задачу со следующим вектором λ_i
  5. Добавить точки, полученные при решении i-й задачи, в поисковую информацию и перейти к шагу 2.

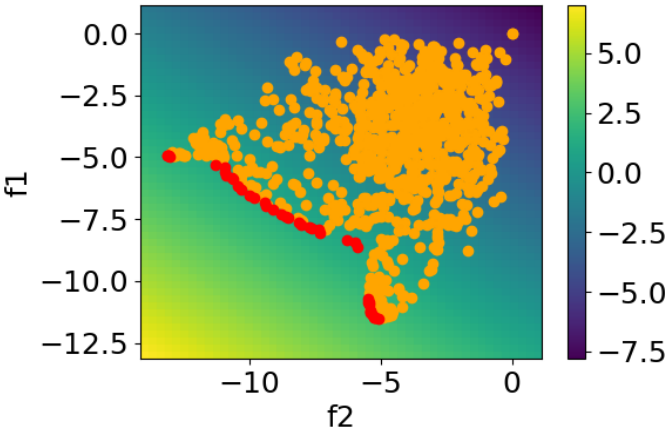
Ускорение поиска с помощью методов машинного обучения

- Пусть $R(i)$ — характеристика i-го интервала.
  Предполагается, что эта характеристика состоит из двух частей:

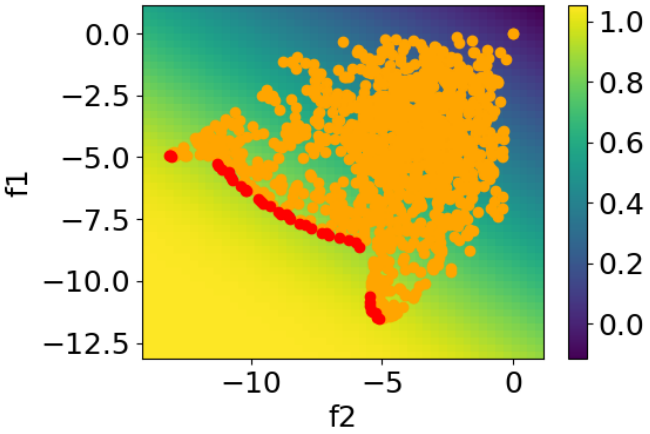
$$R(i) = R_{GS}(i) + \alpha R_{PS}\,(i)$$

  - Часть $R_{GS}(i)$ ориентирована на поиск глобального минимума текущей скалярной задачи оптимизации.
  - Часть $R_{PS}\,(i)$ влияет на выбор интервала для улучшения оценки множества Парето.
- Возможны следующие подходы к вычислению члена $R_{PS}(i)$:
  - на основе расстояния до гиперплоскости, разделяющей доминируемые и недоминируемые решения;
  - на основе вероятностей принадлежности к доминируемым или недоминируемым решениям, полученных с использованием различных методов машинного обучения.

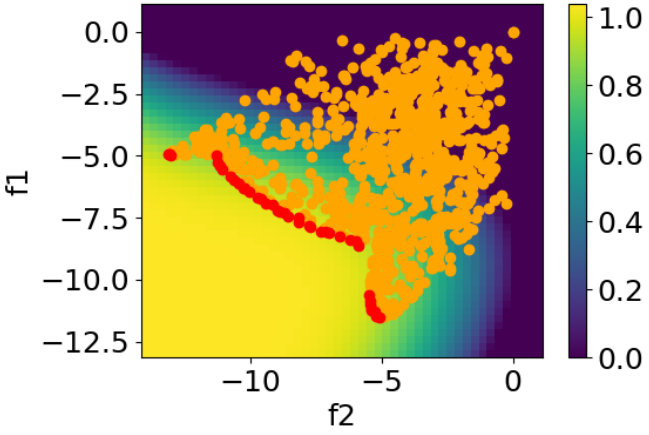
Ускорение поиска с помощью методов машинного обучения



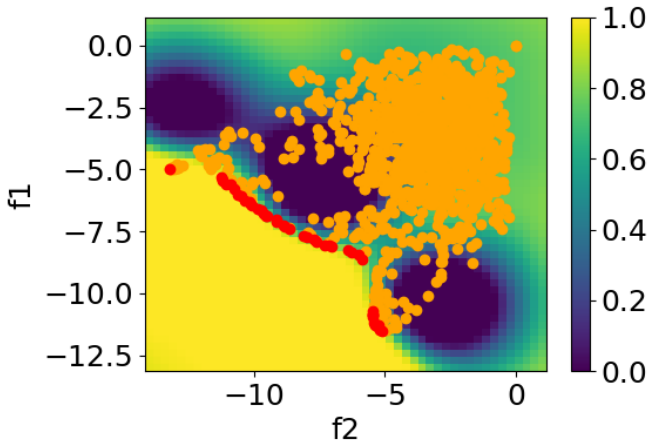
(a) MGSA SVC Dist (940 iter)



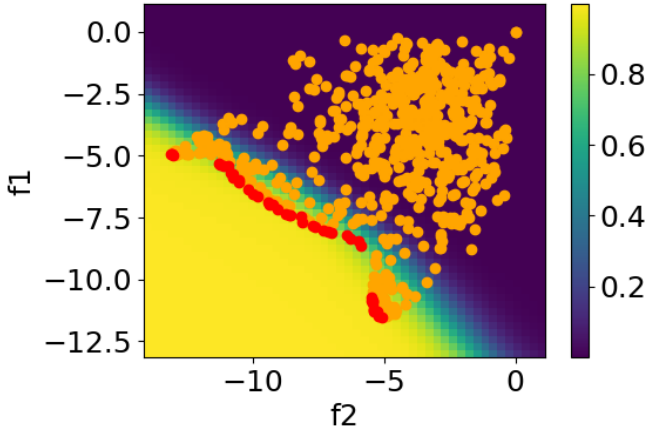
(b) MGSA SVC Linear (1327 iter)



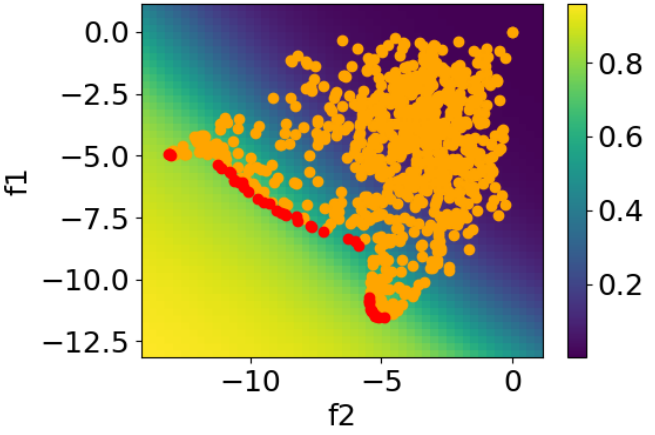
(c) MGSA SVC Poly (981 iter)



(d) MGSA SVC RBF (1283 iter)

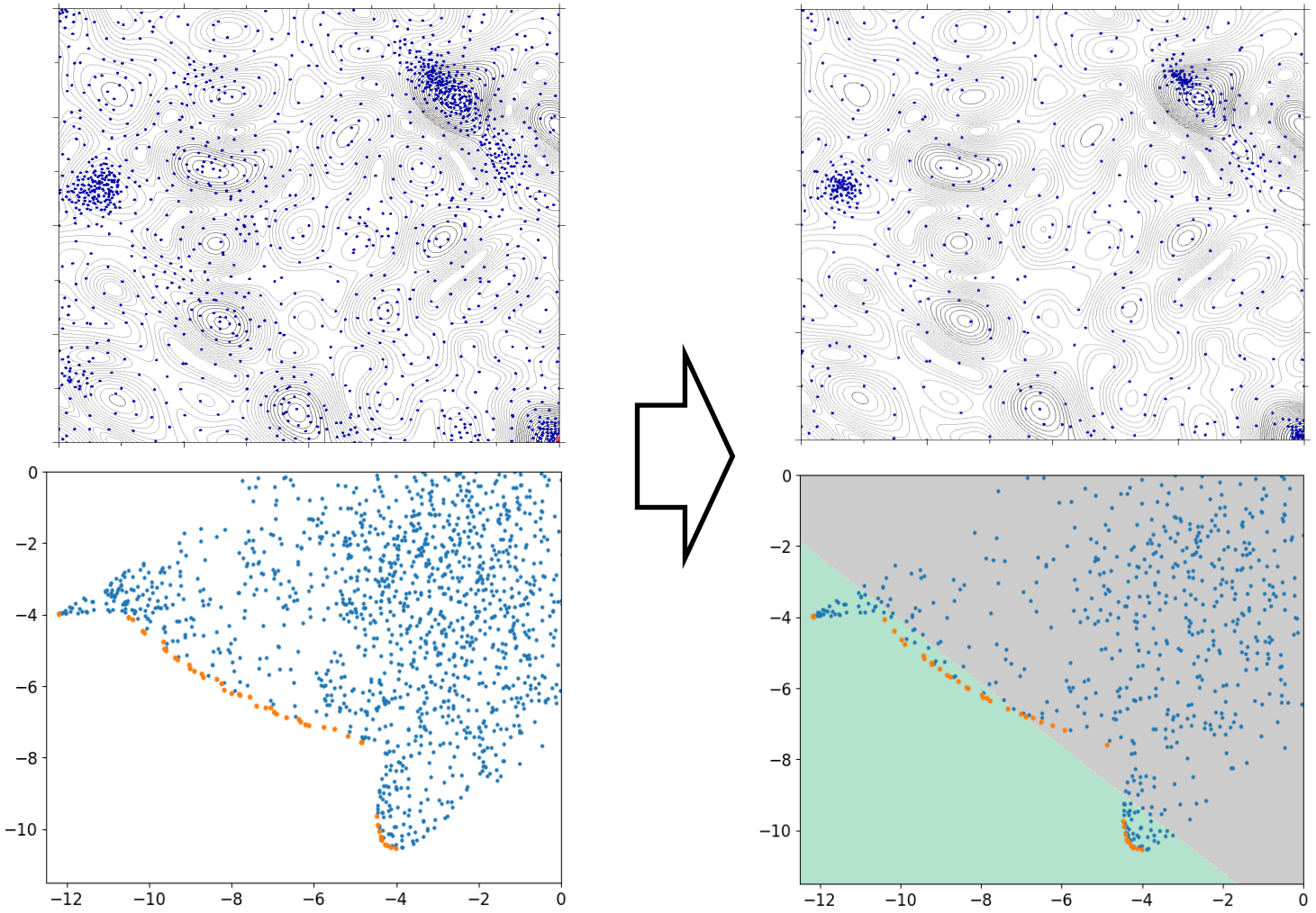


(e) MGSA NN 2 layers (683 iter)



(f) MGSA NN 1 layer (863 iter)

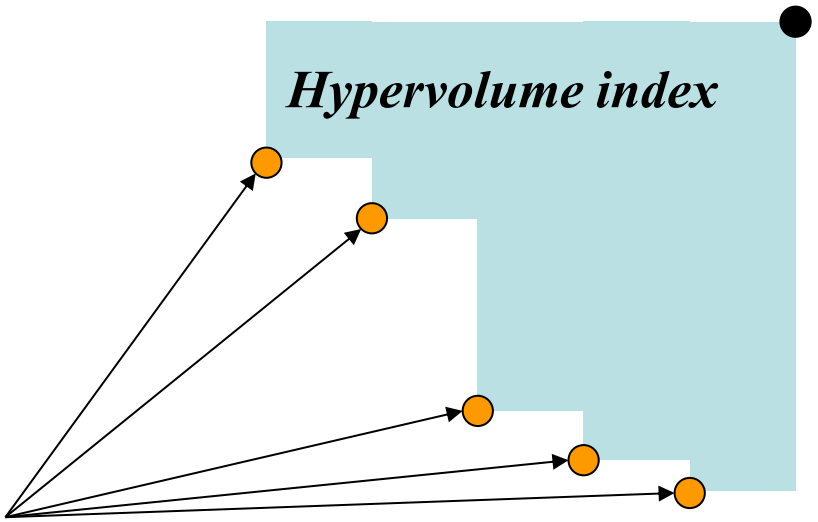
Эффект от использования методов машинного обучения



Метрика качества

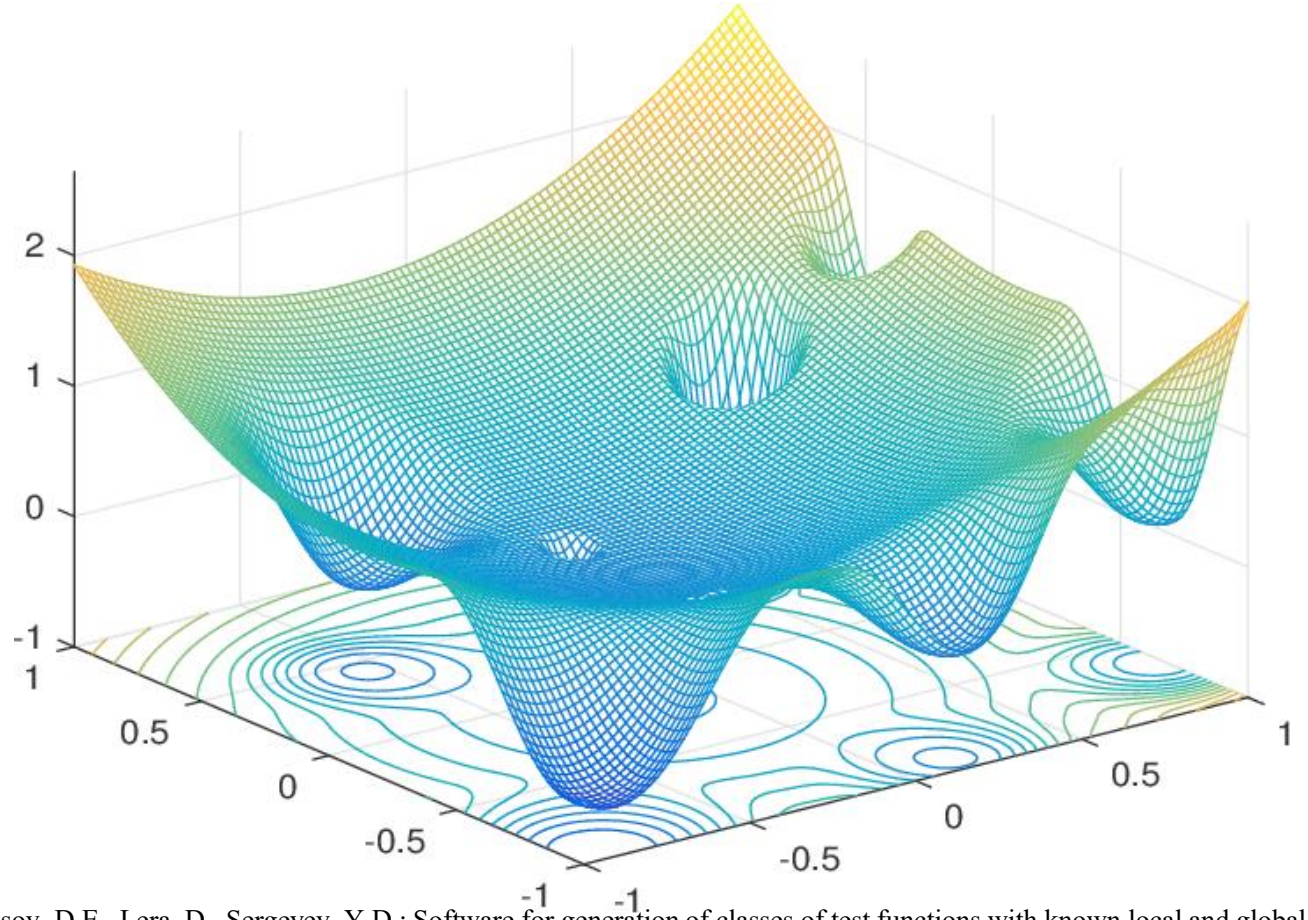
- Качество аппроксимации множества Парето оценивалось с помощью *hypervolume index* (HV; чем выше значение HV, тем лучше)

Оценка множества Парето (PS)



Результаты численных экспериментов

- В первой серии численных экспериментов решались задачи, полученные с помощью генератора GKLS.



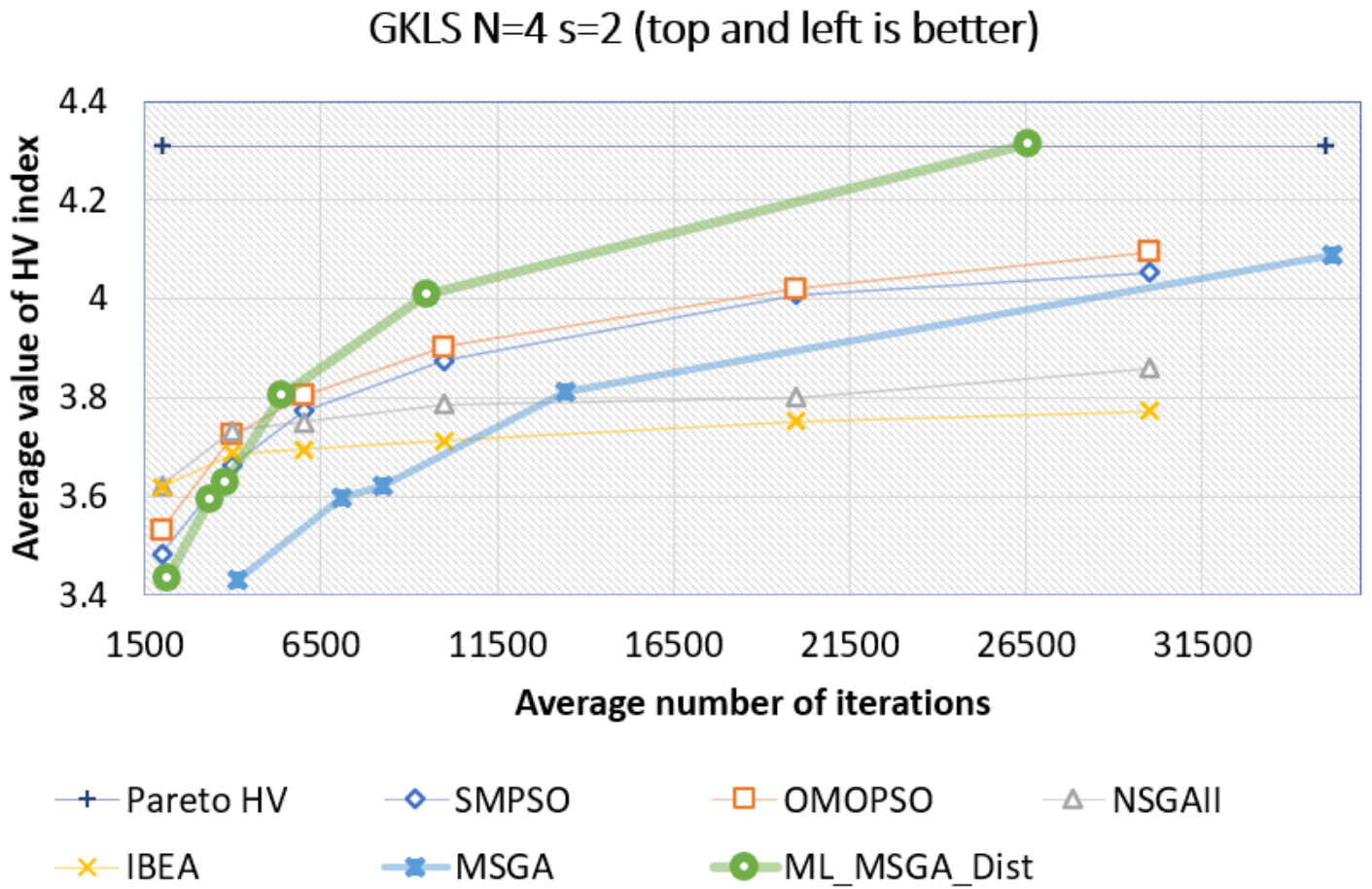
* Gaviano, M., Kvasov, D.E., Lera, D., Sergeyev, Y.D.: Software for generation of classes of test functions with known local and global minima for global optimization. ACM Transactions on Mathematical Software 29(4), 469-480 (2003)

Результаты численных экспериментов

- В первой серии численных экспериментов решались задачи, полученные с помощью генератора GKLS.
- Использовались методы из библиотеки jMetal.
  - A.J. Nebro at el. *SMPSO: A New PSO-based Metaheuristic for Multi-objective Optimization* (**SMPSO**)
  - M. Reyes and C.A. Coello Coello *Improving PSO-Based Multi-objective Optimization Using Crowding, Mutation and ϵ-Dominance* (**OMOPSO**)
  - K. Deb and el. *A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm* (**NSGAII**)
  - E. Zitzler & S. Künzli *Indicator-based selection in multiobjective search* (**IBEA**)
- Сравнение проводилось с методом, основанным на построении разделяющей гиперплоскости.

Результаты численных экспериментов

- Каждая точка представляет собой усреднение индекса HV по решению 100 задач GKLS.



Результаты численных экспериментов

- Во второй серии эксперименте было решено 100 двухкритериальных задач МКО. В качестве частных критериев были взяты критерии $f(y)$:

$$f(y) = -\sqrt{AB + CD},$$

$$AB = \left(\sum_{i=1}^{7} \sum_{j=1}^{7} [A_{ij}\, a_{ij}(y_1, y_2) + B_{ij}\, b_{ij}(y_1, y_2)] \right)^2,$$

$$CD = \left(\sum_{i=1}^{7} \sum_{j=1}^{7} [C_{ij}\, a_{ij}(y_1, y_2) + D_{ij}\, b_{ij}(y_1, y_2)] \right)^2,$$

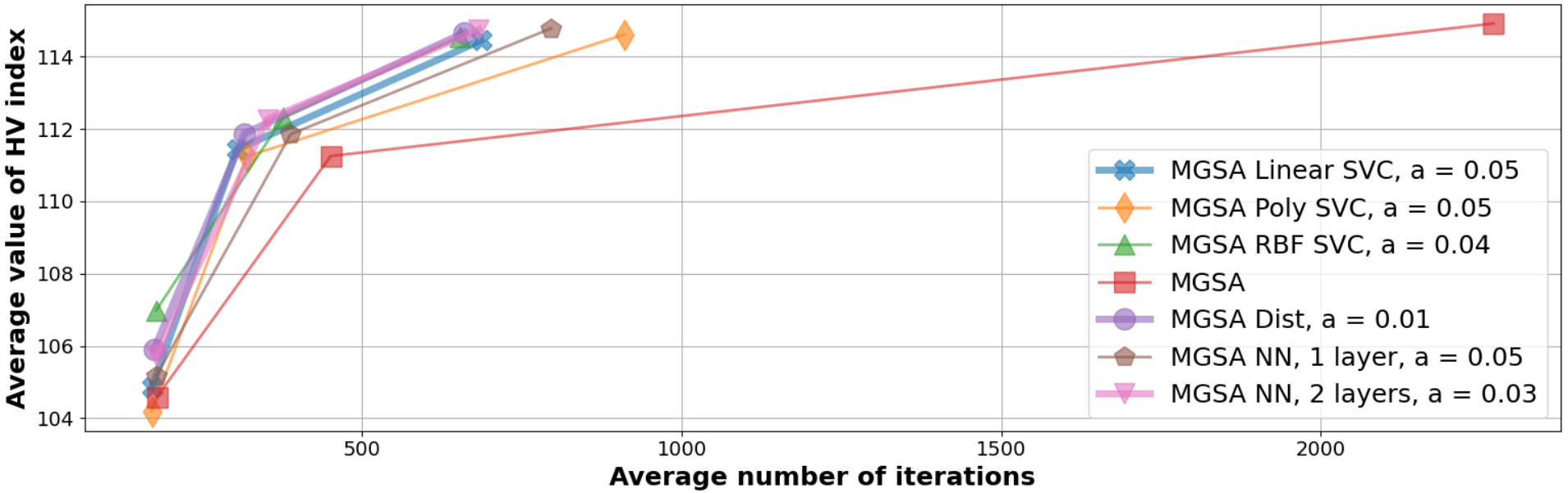
$$a_{ij}(y_1, y_2) = \sin(\pi\, i\, y_1) \sin(\pi\, j\, y_2),$$

$$b_{ij}(y_1, y_2) = \cos(\pi\, i\, y_1) \cos(\pi\, j\, y_2),$$

где $0 \le y_1, y_2 \le 1$,а параметры $-1 \le A_{ij}, B_{ij}, C_{ij}, D_{ij} \le 1$ являются независимыми равномерно распределенными случайными величинами.

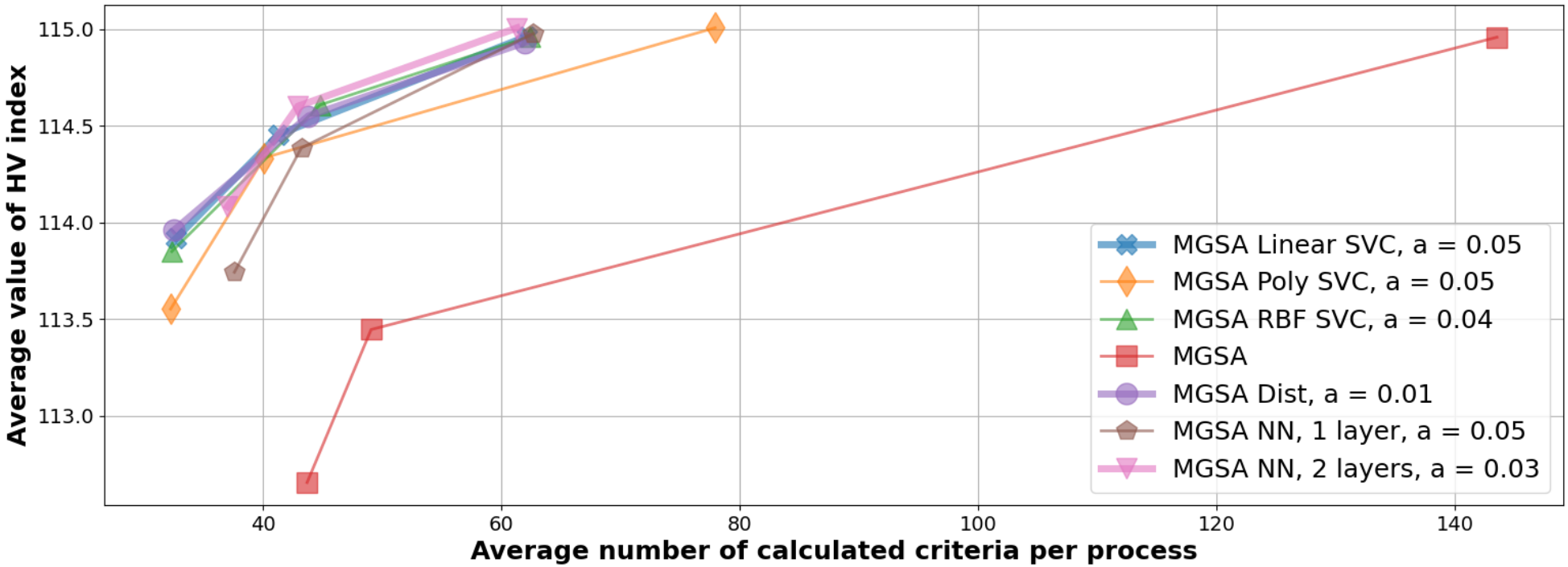
Результаты численных экспериментов

- Сравнение значений индекса HV для последовательной реализации алгоритма.



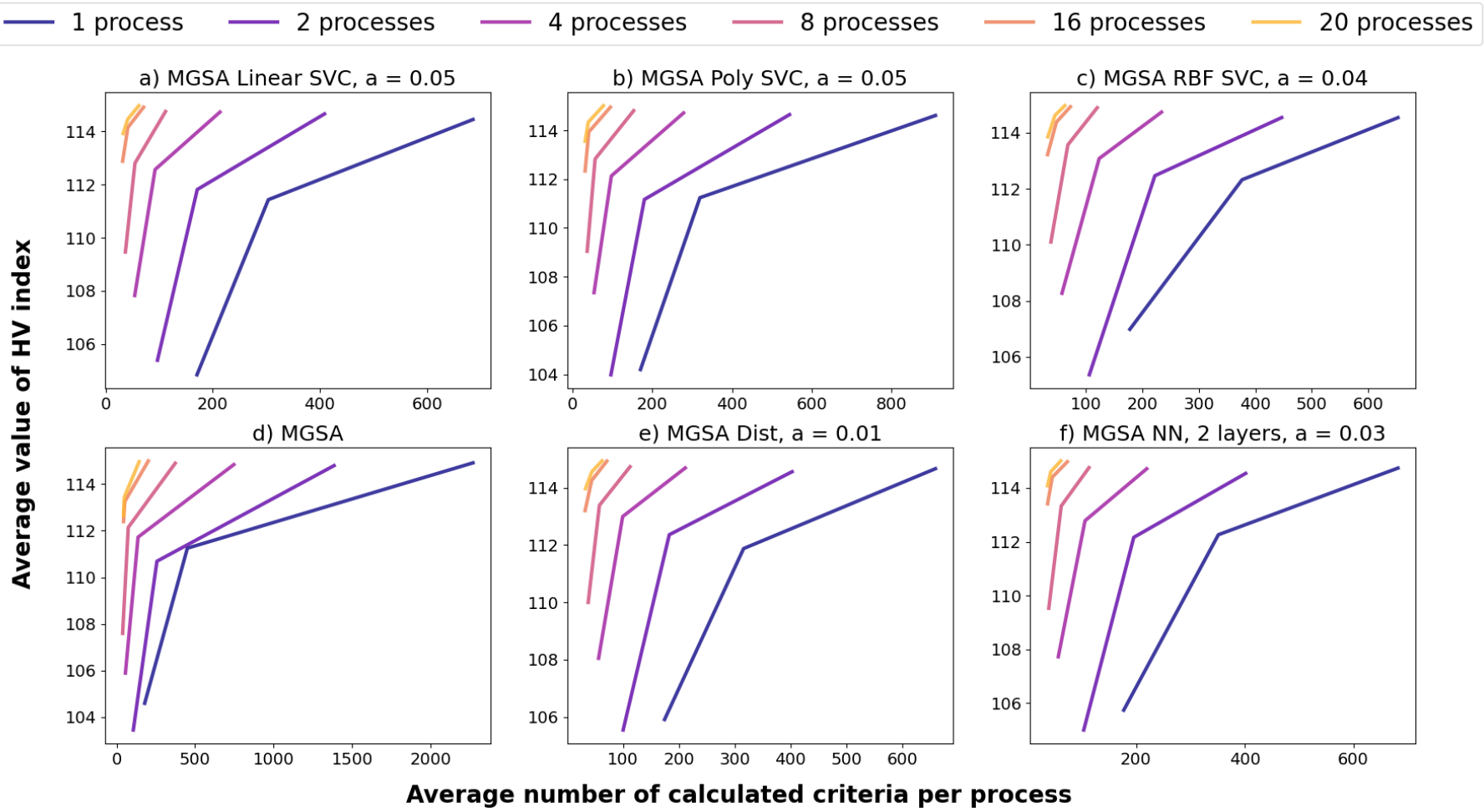
Результаты численных экспериментов

- Зависимость среднего значения индекса HV от количества испытаний на процесс для случая 20 процессов.



Результаты численных экспериментов

- Зависимость индекса HV от количества выполненных испытаний для разного количества процессов.



Thank you for attention

Konstantin Barkalov

konstantin.barkalov@itmm.unn.ru

Vladimir Grishagin

vagris@unn.ru

Evgeniy Kozinov

evgeny.kozinov@itmm.unn.ru

The study is supported by the program for the development of regional scientific and educational mathematical centers, Agreement No 075-02-2025-1727 with additional agreement No 075-02-2025-1727/1.