Тестирование математических моделей вычислительных алгоритмов на основе метода глобальной оптимизации

А.Н. Коварцев, Д.А. Попова-Коварцева, Е.Е. Серповская

Самарский государственный аэрокосмический университет им. академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет)

В статье предлагается новый метод поиска ошибок в математических моделях (ММ) вычислительных модулей, основанный на использовании алгоритмов глобальной оптимизации. Как показала практика, реализация математических моделей вычислительных алгоритмов на ЭВМ часто сопровождается возникновением большого количества вынужденных ошибок, связанных с неполным описанием условий применения ММ. В тоже время, большинство подобного рода ошибок могут быть обнаружены с помощью алгоритмов глобального поиска точек неустранимого разрыва функций многих переменных

Введение

Современные математические модели (ММ) позволяют получить расчётным путём обширную и весьма точную информацию о процессах, происходящих в природе и в технике. Проведение вычислительных экспериментов с математической моделью, реализованной в виде компьютерной программы, обеспечивает сокращение сроков исследования и уменьшение её стоимости. Используемые в расчетах ММ, в конечном итоге, реализуются в виде программных продуктов (ПП). Ошибки (в том числе и вычислительного характера), допущенные на этапе разработки математической модели, естественным образом наследуются и в соответствующих ПП [1, 2]. В связи с чем, целесообразно объединить процедуру поиска ошибок в математических моделях с процессом тестирования соответствующих ПП.

Если рассматривать класс программ, построенных на основе численного анализа и вычислительной математики, т.е. программ, реализующих некоторые математические модели, то к наиболее сложно идентифицируемым ошибкам относятся фатальные вычислительные ошибки типа «деления на ноль», приводящие к переполнению порядка и остановки выполнения программы [3]. Тестирование подобного рода программ является сложной задачей, поскольку область ошибочных сочетаний исходных данных в этом случае невелика, а вероятность случайного попадания в эту область одной из точек тестового набора данных, реализуемого, например, с помощью стохастических методов тестирования, ничтожно мала.

В то же время, ошибки потери или переполнения порядка можно эффективно отыскивать, если их рассматривать с позиции решения задачи поиска точек разрыва второго порядка и использования для этого алгоритмов глобальной оптимизации (ГО) функций многих переменных.

Постановка задачи и основные определения

Формально вычислительный модуль можно интерпретировать как векторную функцию $Y = F(X) = (f_1(X), f_2(X),..., f_m(X))^T$, действующую из множества входных параметров $X = (x_1, x_2,..., x_n)^T$ модуля на множество вычисляемых значений $Y = (y_1, y_2,..., y_m)^T$. Область определения модуля опишем как декартово произведение доменов каждого из параметров $\Omega_X = \Omega_{x_1} \times ... \times \Omega_{x_n}$, где Ω_{x_k} - область определения *k*-го параметра модуля. По аналогии, множество допустимых значений функции $F(X)$ представим $\Omega_F = \Omega_{y_1} \times ... \times \Omega_{y_m}$, где Ω_{y_i} - область изменения *i*-й компоненты векторной функции.

Область ошибочных ситуаций определим как множество $\Omega_E \subset \Omega_X$, в котором при $X \in \Omega_E$, в программном модуле $F(X)$ возникает фатальная вычислительная ошибка. При этом, если $f_i(X) = \pm\infty$, то функция терпит разрыв второго рода.

Для точек разрыва второго рода мера множества ошибочных ситуаций равна нулю ($\mu(\Omega_E)=0$), что создает серьезные трудности при поиске ошибок подобного типа. В работе [3] такие ошибки классифицируются как "редкие". Исчерпывающий тест, ориентированный на обнаружения «редких» ошибок, может потребовать огромного количества испытаний функции, практически полного перебора всех значений исходных данных модуля, что невозможно реализовать в течение разумного времени.

Идея метода поиска точек разрыва второго рода [3] основывается на предположении о том, что точки разрыва второго рода для математических функций можно обнаружить, решая одну из оптимизационных задач:

$$\max_X f_k(X) \quad \left(\min_X f_k(X)\right), \qquad k=\overline{1,m} \tag{1}$$

Действительно, значение функции в точке разрыва второго рода условно принято обозначать $\pm\infty$, что для компьютера можно ассоциировать с максимально большим положительным или отрицательным числом, например, $\pm M_{\sup}$, т.е. с глобальным экстремумом функции в широком смысле этого слова. Применяя методы глобальной оптимизации, мы, несомненно, должны обнаружить и точки разрыва второго рода функции.

Оптимизационный подход к решению задачи поиска точек разрыва второго рода

Среди известных однопараметрических методов многоэкстремальной оптимизации наиболее эффективным является информационно-статистический метод Р.Г. Стронгина [4]. Метод основывается на использовании приближенного апостериорного распределения вероятностей расположения глобального экстремума, формируемого в процессе испытаний функции, что реализует более сбалансированную стратегию поиска глобального минимума функции. Данная стратегия настолько эффективна, что её часто переносят с одномерного случая на случай оптимизации функций многих переменных.

Несколько упрощая ситуацию, далее будем рассматривать скалярную функцию $f(X)=\max|f_i(X)|$.

Относительно оптимизируемой функции предполагается, что она является Липшицевой функцией с константой *K*, т.е. для неё выполняется условие $|f(x')-f(x'')|\le K|x'-x''|$.

В работе [4] показано, что поиск экстремума функции реализуется за счет максимизации достаточно простой характеристической функции:

$$R(i)=m(x_i-x_{i-1})+\frac{(y_i-y_{i-1})^2}{m(x_i-x_{i-1})}-2(y_i+y_{i-1}), \tag{2}$$

где m - оценка константы Липшица, которая вычисляется в процессе поиска экстремума функции:

$$m=\begin{cases}1 & M=0,\\ rM & M>0,\end{cases} \qquad M=\max_i\frac{|y_i-y_{i-1}|}{(x_i-x_{i-1})}, \text{ здесь } r - \text{параметр.}$$

Для решения задачи поиска точек неустранимого разрыва функций многих переменных, подберём характеристическую функцию, подобную (2).

С точки зрения решения задачи поиска точек разрыва второго рода, метод Стронгина оказался не очень эффективным, поскольку этот метод, успешный для Липшицевых функций, непрерывных по определению, теряет свои свойства для класса разрывных функций.

Проанализируем характеристическую функцию (2), полученную при реализации информационно-статистического подхода.

Для простоты положим $r=1$. Формулу (2) представим в виде:

$$R(i) = m\Delta x_i + \frac{\Delta y_i^{\,2}}{m\Delta x_i} - 2(y_i + y_{i-1}),$$

$$\Delta x_i = (x_i - x_{i-1}),\;\; \Delta y_i = (y_i - y_{i-1}).$$

Учитывая, что $m = \max\limits_i \frac{|\Delta y_i|}{\Delta x_i} \approx \max\limits_i |f'(x_i)| = \max\limits_i |f_i'|$, имеем

$$R(i) = \max|f_i'|\Delta x_i + \frac{f_i'^2}{\max|f_i'|}\Delta x_i - 2(y_i + y_{i-1}).$$

Воспользовавшись первыми двумя членами разложения в ряд Тейлора оптимизируемой функции в точке x_{i-1} ($y_i \approx y_{i-1} + f_i'\Delta x_i$), получим

$$R(i) = \frac{(\max|f_i'| - f_i')^2}{\max|f_i'|}\Delta x_i - 4y_{i-1}.$$

Таким образом

$$R(i) \approx \frac{(\max|f_i'| - f_i')^2}{\max|f_i'|}\Delta x_i - 4y_{i-1}. \tag{3}$$

Анализ формулы (3) показывает, что характеристическая функция «склонна» размещать точки испытаний либо в окрестностях локальных минимумов оптимизируемой функции, тяготея при этом к глобальному минимуму, либо в интервалах неопределенности, размеры которых велики по сравнению с другими участками функции.

Модифицируем характеристическую функцию (3), исходя из следующих предположений.

Во-первых, алгоритм поиска точек разрыва второго рода, в принципе, не должен ориентироваться на локальные экстремумы функции, он должен чутко реагировать на быстрое увеличение или уменьшение скорости роста функции.

Во-вторых, сама по себе функция не несет в себе информации о своем будущем поведении. Первая производная показывает скорость роста функции, а вторая производная - ускорение этого роста. Очевидно, что вторая производная в этом смысле более информативна, поэтому, в качестве первой составляющей характеристической функции выберем $(f_i'')^2$. Возведение в квадрат второй производной связано с тем обстоятельством, что нам не важен знак кривизны функции в точке разрыва.

В качестве меры неопределенности частичного интервала, по аналогии с методом Стронгина, выберем длину интервала, поправленного неким регулировочным параметром *r*. Учитывая сказанное, в качестве характеристической функции метода поиска точек неустранимого разрыва можно взять функцию $R(i) = (f''(x_i))^2(\Delta x_i)^r$. В многомерном случае, например для функции 2-х переменных, вместо второй производной можно использовать дифференциал второго порядка, а характеристическую функцию представить в виде:

$$R(i) = (d^2 f(X_i))^2(\Delta x_1 \Delta x_2)^r. \tag{4}$$

Алгоритм поиска точек разрыва второго рода

Пусть областью поиска ошибок в вычислительном модуле является единичный квадрат $\Pi = [0,\,1] \times [0,\,1]$, который в процессе деления пропорционально разбивается на четыре квадрата меньших размеров.

Для вычисления второго дифференциала функции по её значениям, вычисленным в узловых точках сетки, несложно построить полный полином второго порядка $P_{2,2}(X)$, тогда $d^2 f(X) \approx d^2 P_{2,2}(X)$. Обобщая полученные результаты, можно построить *алгоритм метода конечных разностей (МКР) поиска точек разрыва второго рода*:

Шаг 1. Для текущего квадрата Q_k формируется регулярная полная интерполяционная сетка $\{X_{ij}\}$ $i, j = 0,1,2$. Причем значения функции в вершинах квадрата и в центре известны по построению на предшествующем шаге работы алгоритма. Остаётся вычислить значения функции в серединах рёбер квадрата. В итоге имеем $Z^{(k)} = \left\| z_{i,j}^{(k)} \right\|$, $i, j = 0,1,2$. А исходный квадрат Q_k, ограниченный узловыми точками регулярной интерполяционной сетки $\{x_{ij}\}$ $i, j = 1,2,3$, делится на четыре новых квадрата $Q_k = Q_{k+1} \cup Q_{k+2} \cup Q_{k+3} \cup Q_{k+4}$.

Шаг 2. Используя матицу $Z^{(k)}$, для Q_k строится интерполяционный полином $P_{2,2}^{(k)}(X)$. В центрах X_{k+l}^c квадратов Q_{k+l}, $l = 1,2,3,4$ вычисляется характеристическая функция $R(k+l) = (d^2 P_{2,2}^{(k)}(X_{k+l}^c))^2 (h_k)^{2r}$. Здесь h_k - длина стороны квадратов Q_{k+l}.

Шаг 3. Вычисленные значения характеристической функции заносятся в список R в порядке убывания значений функции, т.е. ($\forall i\ R(i) \geq R(i+1)$)

Шаг 4. В качестве «решающего» элемента из списка R выбирается элемент с максимальной характеристикой, т.е. *R(1)*. При этом он удаляется из списка *R*.

Шаг 5. Если не выполняется условие остановки алгоритма ($(\max_i |z_i| > M_{\sup}) \vee (\min_i h_i < \varepsilon)$), то перейти к шагу 1.

Условие остановки алгоритма, описанное в шаге 5, обеспечивает завершение его работы, если значение тестируемой функции выходит за пределы области определения функции, что фактически равносильно возникновению ошибочной ситуации.

Вычислительные эксперименты

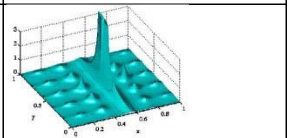
Для оценки эффективности алгоритма МКР рассматривались тестовые функции, представленные в таблице 1. Первые две тестовые функции были построены из известных функций путем их модификации. Так, например, известная модификация тестовой функции Растригина [5], имеющая в единичном квадрате 625 локальных минимумов и один глобальный, была преобразована в функцию, имеющую большое количество остроконечных локальных экстремумов и один "щелевидный" разрыв второго рода.

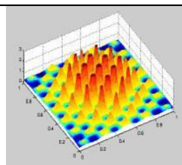
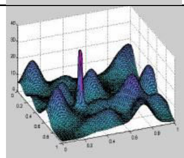
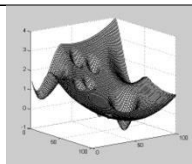
Вторая тестовая функция была построена с использованием операции деления единицы на функцию Griewank, что породило большое количество точек разрыва второго рода. Третья тестовая функция Коварцева была сформирована путем добавления единственной точки разрыва второго рода к линейной комбинации функций ошибок, порождающих гладкую функцию с более 20 локальными экстремумами.

В литературе эффективность алгоритмов поиска обычно оценивают, используя аппарат операционных характеристик [6]. Операционная характеристика представляет собой зависимость вероятности обнаружения ошибочной ситуации $P_{алг}$ от количества итераций алгоритма. В нашем случае от количества обращений к тестируемой функции N_f.

Поскольку точки разрыва второго рода могут быть найдены любым из алгоритмов глобальной оптимизации, поэтому эффективность предлагаемого алгоритма МКР сравнивалась с эффективностью прямого метода ГО, например, модифицированного метода половинных делений (МПД) [7].

Таблица 1. Набор тестовых функций

№	Функция	Общий вид
1	Модифицированная функция Растригина: $f(x_1,x_2) = 1/(10\sin^2(\pi z_1)$ $+ (z_1-1)^2(1+10\sin^2(\pi z_2))$ $+ (z_2-1)^2)$,	

	$z_1 = 1-(11-20(x_1-a+0.55))/4;$ $z_2 = 1-(11-20(x_2-b+0.55))/4;$ $x_1, x_2 \in [0;1]$. Множество локальных экстремумов. «Щелевидный» разрыв второго рода.	
2	Модифицированная функция Griewank: $f(x_1,x_2) = 1/((x_1^2+x_2^2)/400 - \cos(x_1)\cos(x_2/\sqrt{2})+1)$ $x_1, x_2 \in [0;1]$. Множество точек разрыва второго рода	
3	Тестовая функция Коварцева: $f(x_1,x_2) = \sum_{i=0}^{19}(i+1)e^{-\frac{(x_1-a_{1i})^2+(x_2-a_{2i})^2}{0.01}} + 1/(1-e^{-\frac{(x_1-b_1)^2+(x_2-b_2)^2}{0.01}})$ $x_1, x_2 \in [0;1]$. 20 локальных экстремумов. Одна точка разрыва второго рода.	
4	Тестовые функции GKLS. Непрерывная дважды дифференцируемая функция. 10 локальных экстремумов. Один глобальный экстремум. Точек разрыва нет.	

На рис. 2 представлены операционные характеристики методов МКР и МПД, построенные для тестовых функций 1 – 3 (см. табл. 1). На рисунке сплошной линией обозначены операционные характеристики алгоритма МКР, пунктирной – алгоритма МПД.

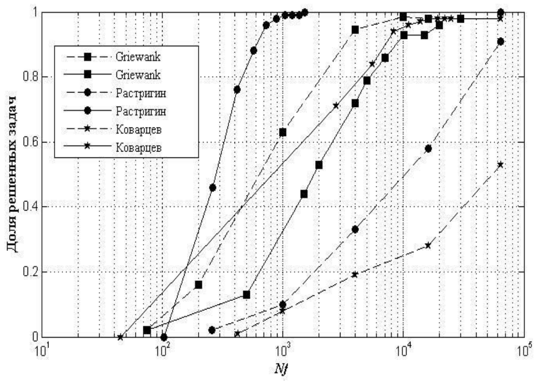


Рисунок 2- Операционные характеристики алгоритмов МКР и МПД

Как видно из графиков, предлагаемый алгоритм МКР по эффективности значительно превосходит метод половинных делений для функций №1 и №3. Происходит это потому, что концептуально метод половинных делений ориентирован на оптимизацию непрерывных функций, что заставляет его более подробно «просматривать» участки функций при увеличении оценки константы Липшица. Данная ситуация возникает всякий раз, когда функция вычисляется вблизи точек её разрыва. Метод МКР, наоборот, ищет участки быстрого роста тестируемой функции.

Функция №2 (Griewank) имеет настолько большое количество точек неустранимого разрыва, что их обнаружение легко реализуется с одинаковой эффективностью как методом МКР, так и МПД. Из рис. 2 видно, что МПД имеет даже небольшое преимущество по сравнению с МКР. Для всех остальных функций было зафиксировано существенное превосходство метода МКР над МПД.

На рис.3 представлены операционные характеристики рассматриваемых методов, построенные для непрерывной тестовой функции GKLS.

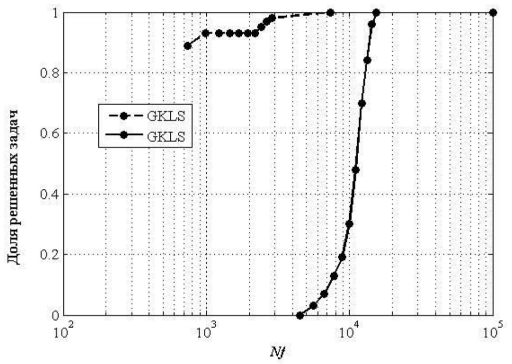


Рисунок 3- Операционные характеристики алгоритмов для непрерывной функции

Как видно из рисунка, для непрерывных функций эффективность алгоритма МКР значительно ниже эффективности алгоритма МПД. В случае непрерывных функций, когда отсутствуют точки разрыва второго рода (тестируемый программный модуль не имеет ошибок), метод конечных разностей вынужден с большей тщательностью исследовать пространство оптимизируемых переменных. В связи с чем, возникает идея при тестировании вычислительных модулей использовать алгоритмы МКР и МПД в комбинированном варианте, останавливая вычисления, когда либо МКР находит ошибку, либо завершает свою работу метод половинных делений.

Заключение

В работе рассмотрен алгоритм глобального поиска точек разрыва второго рода, предназначенный для обнаружения фатальных ошибок в математических моделях вычислительных алгоритмов. Основная идея предложенного алгоритма состоит во введении в классический алгоритм глобальной оптимизации оригинальной эвристической характеристической функции, построенной на основе анализа характеристической функции Стронгина и учитывающей особенности решаемой задачи. Это позволило существенно повысить эффективность алгоритма поиска ошибочных ситуаций. Данный результат позволяет надеяться на организацию поиска ошибочных ситуаций для функций больших размерностей. В дальнейшем планируется развитие алгоритма МКР с использованием современных суперкомпьютерных технологий.

Работа выполнена при государственной поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках реализации мероприятия Программы повышения конкурентоспособности СГАУ среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2013-2020 годы.

Литература

1. Липаев В.В. Тестирование программ. – М.: Радио и связь, 1986. – 296 с.
2. Котляров В.П., Коликова Т.В. Основы тестирования программного обеспечения. – М.: БИНОМ, 206. – 285 с.
3. Коварцев А.Н. Автоматизация разработки и тестирования программных средств. – Самара: Самарский государственный аэрокосмический университет, 1999. – 150 с.
4. Стронгин Р.Г. Поиск глобального оптимума. - М.: Знание, 1990.
5. Абакаров А. Ш., Сушков Ю. А. Адаптация случайного поиска с использованием логистической кривой. - СПб.: СПбГУ. 2005. С. 67–75.
6. Гергель В.П., Стронгин Р.Г. Абсолют. Программная система для исследования и изучения методов глобальной оптимизации.// Учебное пособие. Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского университета, 1998. 141 с.
7. Коварцев, А.Н**.,** Попова-Коварцева Д.А., Аболмасов П.В. Исследование эффективности глобальной параллельной оптимизации функций многих переменных. Вестник ННГУ.-2013. - №3 (1). - С. 252-261