

群体智能优化算法
及其在 GPU 上的并行化研究

汪 靖 著



江西高校出版社

群体智能优化算法
及其在 GPU 上的并行化研究

汪 靖 著

江西高校出版社

图书在版编目(CIP)数据

群体智能优化算法及其在 GPU 上的并行化研究 / 汪靖
著. —南昌: 江西高校出版社, 2014.5

ISBN 978-7-5493-2544-3

I. ①群... II. ①汪... III. ①计算机算法-最优化
算法 IV. ①TP301.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014) 第 105595 号

| | |
|-------|------------------------|
| 出版发行 | 江西高校出版社 |
| 社址 | 江西省南昌市洪都北大道 96 号 |
| 邮政编码 | 330046 |
| 总编室电话 | (0791) 88504319 |
| 销售电话 | (0791) 88513417 |
| 网址 | www.juacp.com |
| 印刷 | 天津市天办行通数码印刷有限公司 |
| 照排 | 江西太元科技有限公司照排部 |
| 经销 | 各地新华书店 |
| 开本 | 890mm×1240mm 1/32 |
| 印张 | 3.75 |
| 字数 | 110 千字 |
| 版次 | 2014 年 5 月第 1 版第 1 次印刷 |
| 书号 | ISBN 978-7-5493-2544-3 |
| 定价 | 28.00 元 |

赣版权登字-07-2014-235

版权所有 侵权必究

前 言

美国著名计算机科学家高德纳(Donald Ervin Knuth) 曾说 “不成熟的优化是一切弊端的根源。”管理学之父彼得·杜拉克(Peter Drucker) 说 “提高无须做的事情的效率是无用的。”可以说优化问题在现实生活中的每个角落都可以找到, 包括工程管理、现代制造、经济金融、计算机工程、医学、音乐、化学和许多其他领域。长期以来, 各种以迭代为原理的数值优化方法如牛顿法、陡坡度法、共轭梯度法得到了广泛应用, 然而这类方法都是确定性优化算法, 在处理一些局部优化问题时, 显示出了良好的性能, 但在面临一些复杂、大规模和多峰的全局性优化问题时, 往往表现得捉襟见肘。

群体智能优化算法是受自然或社会启发发展而来的一类随机搜索方法, 代表了一种群体搜索机制, 实践证明, 它应用于大规模、多峰等全局性优化问题时, 能够取得很好的效果。在优化技术

日益发展的同时,优化问题也越来越复杂,现实生活中复杂的工程问题转化成优化问题时,大都是大规模的高维优化问题,大部分群体智能优化算法也都面临着同一个问题,即随着问题群体规模和维数的增大,算法的搜索性能迅速下降。在有限的硬件条件下,如何在保证优化算法精度的同时又缩短算法的搜索时间,提高优化算法的搜索效率,已成为群体智能优化算法迫切需要解决的问题,这也是本书主要的研究动机和目标。

围绕以上目标,本书做了以下工作:

第一,通过对群体智能优化算法搜索机制的分析,对群体智能优化算法的主要环节给出了数学上的形式描述,提出了一般化的群体智能优化算法的统一框架,并阐述了统一框架与一些典型算法间的关系,说明该框架可系统性地描述多种群体智能优化算法和混合算法,有助于从系统的观点来理解群体智能优化算法,也为设计其他高效群体智能优化算法提供了指导,从理论上分析了基于统一框架的群体智能优化算法的渐近收敛性。

第二,群体智能优化算法搜索性能的好坏,很大程度上取决于算法的全局搜索与局部搜索之间的平衡能力。针对此问题设计了两种策略——一般反向学习策略和导向性邻域挖掘策略,分别用来加强群体智能优化算法的全局搜索能力和局部搜索能力,并对两种策略在结构上进行合并,形成一种适用于群体智能优化算法的通用性混合策略,然后将其应用到一般化的群体智能优化算法的框架上,构成基于一般反向学习(Generalized Opposition-based Learning, GOBL)策略和导向性邻域挖掘(Orientation Neighborhood Mining, ONM)策略的群体智能优化统一算法,最后从理论上对基于统一框架的混合策略群体智能算法进行了相关性能分析。

第三,使用粒子群优化算法对基于 GOBL 和 ONM 混合策略群体

智能优化算法统一框架进行实例化设计。一方面检验群体智能优化算法统一框架的通用性,另一方面验证 GOBL 和 ONM 混合策略的有效性。实验结果表明,GOBL 策略和 ONM 策略能够分别很好地增强粒子群优化算法的全局搜索能力和局部搜索能力,对于大部分函数优化问题,能够帮助粒子群优化算法成功克服局部搜索能力较差、搜索精度不够高、算法不能够绝对保证搜索到全局最优解和容易陷入局部最优等缺陷。

第四,使用差分演化算法对基于 GOBL 和 ONM 混合策略群体智能优化算法统一框架进行实例化设计,进一步检验群体智能优化算法统一框架的通用性及 GOBL 和 ONM 混合策略的有效性。实验结果表明,GOBL 策略和 ONM 策略能够分别很好地增强差分演化算法的全局搜索能力和局部搜索能力,能够帮助差分演化成功解决由于在算法的后期个体之间的值已经趋向相同,容易在复杂多峰函数时易陷入局部最优的缺点,有效地提高了算法精度和效率。

第五,群体智能优化算法都面临着在求解大规模高维函数优化问题时,算法的计算时间随着问题规模的增大而显著增长,并行化是解决这个问题的的解决方案之一。我们通过对图形处理器(Graphic Processing Unit, GPU)硬件特点的分析,充分挖掘 GPU 的高效并行能力,在 GPU 上设计了一种基于 GOBL 和 ONM 混合策略的并行粒子群优化算法。实验结果表明,基于 GPU 的改进粒子群算法在保证算法的精度度的同时,算法的运行时间大大少于 CPU 上相对应算法的运行时间,在最大化使用 GPU 硬件资源的情况下,大部分函数的优化结果都达到了百倍以上加速比,为群体智能优化算法处理复杂的大规模高维优化问题提供了新的研究思路。

本书的主要内容来自本人的博士毕业论文。在此我要特别感谢我的博士生导师吴志健教授,吴老师渊博深厚的学识和敏锐的学术

洞察力为我迅速指明了研究方向,在吴老师的精心指导下,我才能在学术研究的道路上取得一点成绩,本书也才能得以定稿。此外,还要感谢武汉大学软件工程国家重点实验室李元香教授、丁立新教授、何克清教授、应时教授、彭智勇教授等所有的老师们,这些老师的授课和学术讲座开拓了我的学术视野,扩充了我的学术知识,同时他们求真务实、刻苦钻研的科研精神深刻地感染了我。感谢课题研究组的姜大志博士、郭京蕾博士、张建伟博士、董晓健博士、王晖博士、唐晓博士、岳雪芝博士、郭肇禄博士、薛凡博士、刘卫东博士、吴喆珺硕士、俞嵩硕士、陈诚硕士、陈丽丽硕士、李丽硕士、夏晨风硕士、朱峰硕士、何检利硕士、张浩宇硕士,与他们的讨论和交流使我受益匪浅。

汪 靖

2014年4月

目 录

| | |
|-------------------------|------|
| 第一章 绪论 | / 1 |
| 1.1 研究背景 | / 1 |
| 1.2 研究现状 | / 2 |
| 1.2.1 群体计算智能 | / 2 |
| 1.2.2 蚁群算法 | / 3 |
| 1.2.3 鱼群算法 | / 4 |
| 1.2.4 遗传算法 | / 5 |
| 1.2.5 演化策略和演化规划 | / 7 |
| 1.3 本书的主要内容和结构安排 | / 7 |
| 第二章 一般反向学习和导向性邻域挖掘的混合策略 | / 10 |
| 2.1 一般反向学习 | / 10 |
| 2.1.1 反向学习 | / 10 |
| 2.1.2 反向学习的一般化 | / 12 |
| 2.2 导向性邻域挖掘 | / 14 |
| 2.2.1 导向性邻域挖掘策略设计 | / 14 |
| 2.2.2 导向性邻域挖掘策略分析 | / 16 |

| | | |
|-------|-------------------------------|------|
| 2.3 | 基于 GOBL 和 ONM 混合策略的群体智能算法统一描述 | / 18 |
| 2.4 | 基于 GOBL 和 ONM 混合策略的群体智能算法性能分析 | / 20 |
| 2.5 | 本章小结 | / 21 |
| 第三章 | 基于 GOBL 和 ONM 混合策略的粒子群算法 | / 22 |
| 3.1 | 算法设计 | / 22 |
| 3.1.1 | 粒子群优化算法 | / 22 |
| 3.1.2 | 基于 GOBL 和 ONM 的粒子群的算法设计 | / 24 |
| 3.2 | 数值优化中的应用 | / 25 |
| 3.2.1 | 单峰函数优化问题 | / 26 |
| 3.2.2 | 多峰函数优化问题 | / 31 |
| 3.2.3 | 高维优化问题 | / 35 |
| 3.3 | 本章小结 | / 39 |
| 第四章 | 基于 GOBL 和 ONM 混合策略差分演化算法 | / 40 |
| 4.1 | 算法设计 | / 40 |
| 4.1.1 | 差分演化算法 | / 40 |
| 4.1.2 | 基于 GOBL 和 ONM 的差分演化的算法设计 | / 42 |
| 4.2 | 数值优化中的应用 | / 44 |
| 4.2.1 | 单峰函数优化问题 | / 44 |
| 4.2.2 | 多峰函数优化问题 | / 51 |
| 4.2.3 | 高维优化问题 | / 57 |
| 4.3 | 本章小结 | / 61 |
| 第五章 | 混合策略的粒子群算法在 GPU 上的并行研究 | / 62 |
| 5.1 | 研究动机 | / 62 |
| 5.2 | 可编程图形处理器 | / 63 |
| 5.2.1 | GPU 上的通用计算 | / 63 |
| 5.2.2 | CUDA 编程模型 | / 64 |

| | | |
|-------|-----------------------------|------|
| 5.2.3 | CUDA 存储模型 | / 66 |
| 5.3 | GPU 上细粒度并行的 GOBL-ONM-PSO 算法 | / 67 |
| 5.3.1 | 随机数 | / 67 |
| 5.3.2 | 数据的存储 | / 70 |
| 5.3.3 | 算法的框架 | / 72 |
| 5.4 | 数值实验分析 | / 75 |
| 5.4.1 | 精度分析 | / 75 |
| 5.4.2 | 加速度比较分析 | / 78 |
| 5.5 | 在微分方程反问题中的应用 | / 84 |
| 5.5.1 | 问题描述 | / 84 |
| 5.5.2 | 数值实验 | / 85 |
| 5.6 | 本章小结 | / 89 |
| 第六章 | 总结与展望 | / 91 |
| 6.1 | 本书的研究工作及创新 | / 91 |
| 6.2 | 进一步研究工作的展望 | / 92 |
| 附录 | 本书所用的函数优化问题 | / 94 |
| 参考文献 | | / 98 |

第一章 绪论

1.1 研究背景

优化问题研究的是在众多方案中寻找最优方案,即在满足一定的约束条件下,寻找一组参数值,使得系统某些性能指标达到最大或最小。现实世界中,各种工程问题实际上都可以转化为优化问题。美国工程院院士哈佛大学何毓琦教授指出:“任何控制与决策问题本质上均可以归结为优化问题”,“优化是一个光彩夺目的研究领域”。目前,优化方法已经在生产管理、工程管理、现代制造、系统控制、经济规划等领域得到了广泛的应用。传统的优化方法,例如最陡坡度法、共轭梯度法、牛顿算法在不停迭代减小目标函数值的寻优过程中,以其良好的鲁棒性为大家所知。然而,它们大多数仅仅适合于解决单峰、连续的单目标函数问题。随着实际工程复杂性的增加,多峰、强约束、不连续、多极小等问题会普遍地降低传统优化方法的效率,寻求一种适合于复杂问题且具有智能特征的优化算法已经成为有关学科的主要研究目标和引人注目的研究方向。

智能优化算法是一类通过模拟某一自然现象或过程而建立起来的优化方法,这类算法包括演化算法、粒子群算法、禁忌算法、模拟退火、人工免疫系统和蚁群算法等。和传统的优化方法相比,智能优化算法具有以下这些优点:①针对问题的非线性和存在多极小点的特点,具有一定克服搜索过程陷入局部极小的能力;②针对问题的大规模性和 NP-hard 性,具有一定质量意义下的高效搜索能力;③针对问题的多目标性和强约束性,具有对各目标合理平衡的能力;④针对问题的不确定性和算法本身的参数,具有良好的鲁棒性;⑤针对问题的连续和离散共存特点,具有搜索操作的灵活性和有效性。然而这些智能算法也都面临着同一个问题,即随着问题群体规模和维数的增

大,算法的搜索性能迅速下降。造成这种现象的原因主要有两点:第一,问题的复杂性通常随着问题规模的增大而增大,先前成功的智能搜索算法或策略可能没有能力找到大规模问题的最优解;第二,问题的搜索空间随着问题规模的增加而成指数倍的增大,在有限的计算资源(时间和硬件资源)下,先前的搜索策略很难找到最优解^[1]。

因此,面对求解大规模和高维这一具有挑战性的优化问题时,如何提高求解精度,加速求解过程将是急需解决的问题。解决此类问题的有效途径之一是对智能优化算法本身进行改进,对智能优化算法辅以各种优化策略,增加群体的多样性,加快算法的收敛速度,平衡算法的全局和局部探索能力;另外有个效途径就是并行化,传统的并行设计需要建立在大量计算机集群或昂贵的硬件设备上,这也使得很多研究者望而却步,而近年来图形技术飞速发展,传统的图形硬件已经演化为可编程图形处理器,其强大的并行计算性能、灵活的可编程性以及面向个人消费市场的低廉价格,吸引了越来越多的研究者将 GPU 用于解决图形渲染之外的通用计算任务(General Purpose Computing on GPU, GPGPU),并取得了较好的效果^[2-10]。

1.2 研究现状

1.2.1 群体计算智能

20 世纪 80 年代在传统人工智能理论发展出现停顿而以生物进化为思想的演化计算出现新的突破时,计算智能理论迅速成为人工智能研究的主流。1994 年,IEEE 在美国佛罗里达州举行了关于演化计算、模糊系统和神经网络的首届计算智能世界大会,进行了“计算智能:模仿生命”的主题讨论会。计算智能以生物进化的观点认识和模拟智能,以数据为基础,通过训练建立联系而进行问题求解。按照这一观点,智能是在生物的遗传、变异、生长以及外部环境的自然选择中产生。在优胜劣汰的过程中,适应度高的结构被保存下来,智能的水平也随之提高。

特别是近年来,受生物群体行为研究的启发,研究者们发明了各种群体智能计算模型,群体智能算法也逐渐成为近年来的研究热点。

目前,群体智能算法在学术上还没有严格的定义,有些学者认为群体智能(swarm intelligence, SI)是一种智能表现,群体中的每个个体也是有自己导向性,例如粒子群算法、蚁群算法、鱼群算法等等,也有些学者认为群体智能(population-based intelligence, PI)是个以群体为基础的智能搜索算法,通过个体间信息互相学习传递,最终找到最优解,例如遗传算法,差分演化算法等等也是群体智能算法。对这两种观点我们都认同,集体的群体行为会影响每个的个体行动,每个的个体行动会改变个体周边的环境,这样该个体的行为和它邻近个体也就会发生变化,从而反过来影响集体的群体行为,所以个体行为和集体行为是相互的,因而群体智能最重要的因素是相互作用或协作。下面将简要的介绍几个经典群个体智能算法,此外粒子群算法和差分演化算法分别在第四章和第五章另做详细介绍。

1.2.2 蚁群算法

1997年,意大利学者 Marco Dorigo 等人受蚁群觅食、哺乳和建筑等合作行为的启发,提出了一种新的群体智能优化算法,蚂蚁算法模型^[3]。从那以后,蚂蚁算法得到了长足的发展,涌现了一批相关算法和应用^[4-15]。后来,Marco Dorigo 等人继续对蚂蚁算法模型进行跟进分析,将基于蚂蚁觅食行为的算法归类为蚁群优化算法(ant colony optimization, ACO)^[8],并借鉴蚂蚁间通过信息素进行间接沟通和合作的现象成功求解了著名的旅行商问题(Travel Salesman Problem, TSP)。下面我们对 ACO 算法进行简单的描述:

在 ACO 算法的每次迭代中,蚂蚁根据状态转移规则来决定在解得构造图上的移动,进而构造不完整解。信息素浓度和偏好是决定状态转移规则的两个因素。前者用于指导蚂蚁在构造图上向好的方向移动,后者则给蚂蚁在可行的移动中提供了偏好顺序。当整个蚁群构造出完整的解后,由信息素蒸发和信息素增强组成的信息素更新规则将对每条可能路径上的信息素浓度进行更新。标准的 ACO 算法基本框架如下:

```
BEGIN
  Initialize: 随机初始化种群,信息素浓度和参数;
  While ( 终止准则不满足)
    利用状态转移规则生成新的蚁群
    评价蚁群
    根据信息素更新规则更新信息浓度
  End While
  输出最好的蚂蚁记录
END
```

图 1.1 标准的 ACO 算法基本框架

1.2.3 鱼群算法

在一片水域中,鱼往往能自行或尾随其他鱼找到营养物质多的地方,因而鱼生存数目最多的地方一般就是本水域中营养物质最多的地方,根据这一特点,国内学者李晓磊博士于 2002 年提出了一种基于鱼群行为的群体智能优化算法——人工鱼群算法(Artificial Fish-swarm Algorithm, AFSA)^[9]。李晓磊博士认为鱼群行为可以形容为三类:觅食行为、聚群行为和追尾行为。觅食行为是指随机游动的鱼在水中发现食物时会向食物逐渐增多的地方游去;聚群行为是指为了保障自身安全和躲避危害鱼在随机游动的过程中会自动聚集成群;追尾行为是说当鱼群中某条或某些鱼发现食物时,鱼群中其他的鱼会迅速尾随而至。根据这三类行为,AFSA 首先构造了每条人工鱼(Artificial Fish, AF)的底层行为,个体在迭代中选择能使自己向最优方向前进最大的行为不断寻优,并在最后通过群体或某些个体突现出全局最优值。AFSA 算法基本框架如下:

```
BEGIN
```

```
  Initialize: 随机初始化种群,信息素浓度和参数;
```

```
  While ( 终止准则不满足)
```

```
    Switch( 选择行为)
```

```
      Case 1:
```

```
        执行觅食行为;
```

```
      Case 2:
```

```
        执行聚群行为;
```

```
      Case 3:
```

```
        执行追尾行为。
```

```
    End Switch
```

```
    更新自己的位置。
```

```
  End While
```

```
    输出最好记录
```

```
END
```

图 1.2 标准 AFSA 算法基本框架

自从 AFSA 提出以后,迅速得到了研究者的广泛关注。Yang Yu^[10]等在人工鱼群算法的初始阶段扩大每条人工鱼视野,从而扩大寻优范围,取得了较好的结果。Cui-ru Wang 等^[11]将人工鱼群算法的实际步长改为参数定义域内的随机数,保证算法良好的全局搜索能力。王西邓^[12]等通过减小移动步长并对移动步长进行动态调整,对全局最优值进行更加精细的搜索。李晓磊等^[9]对 AFSA 设计了一种取决于 AF 当前所在的状态和视野中视点感知的状态的自适应步长的改进策略。Jianmei Xiao 等^[13]提出了一种对步长和拥挤度因子进行适时的自行调整,以达到提高收敛精度的目的的自适应人工鱼群算法。范玉军^[14]等采用最优个体保留策略和加速个体局部搜索分别用来改进 AF 的觅食行为、聚群行为和追尾行为。实验结果表明改进的人工鱼群算法求解精度和寻优成功率都很高。

1.2.4 遗传算法

遗传算法的创始人是美国著名学者密西根大学教授 John.H.Hol-

land。Holland 在 20 世纪 50 年代末期开始研究自然界的自适应现象,并希望能够将自然界的进化方法用于实现求解复杂问题的自动程序设计。Holland 认为,可以用一组二进制串来模拟一组计算机程序,并且定义了一个衡量每个“程序”的正确性的量度“适应值”。Holland 模拟自然选择机制对这组“程序”进行“进化”,直到最终得到一个正确的“程序”。1967 年,Bagley 发表了关于遗传算法应用的论文,在其论文中首次使用“遗传算法(Genetic Algorithm)”来命名 Holland 所提出的“进化”方法。1975 年,Holland 总结了自己的研究成果,发表了在遗传算法领域具有里程碑意义的著作——《自然及人工系统中的适应性》(Adaptation in Nature and Artificial Systems)。在这本书中,Holland 为所有的适应系统建立了一种通用理论框架,并展示了如何将自然界的进化过程应用到人工系统中去。Holland 认为,所有的适应问题都可以表示为“遗传”问题,并用“进化”方法来解决。

遗传算法在自然与社会现象模拟、工程计算等方面得到了广泛的应用。在各个不同的应用领域,为了取得更好的结果,人们对遗传算法进行了大量改进。Holland 所提出的遗传算法也被称为是标准遗传算法(Canonical Genetic Algorithm),简称 GA、CGA 或 SGA。其算法流程简要如下:

BEGIN

Initialize: 随机初始化种群并计算个体的适应值

While (终止准则不满足)

 基于选择策略选择参与遗传操作父代个体对
 执行交叉和变异操作,产生新个体

 计算子代个体的适应值

 采用种群竞争策略更新种群

End While

 输出最好个体

END

图 1.3 标准 GA 算法基本框架

1.2.5 演化策略和演化规划

在美国学者 Holland 等提出遗传算法后,德国学者 Schwefel 和 Rechenberg 在 1965 年提出了演化策略(Evolution Strategy),简称 ES。美国学者 Fogel 在 1966 年又提出了演化规划(Evolutionary Programming),简称 EP。这三种方法具有共同的本质,但分别强调了自然进化中的不同方面:遗传算法强调染色体的操作,演化策略强调了个体级的行为变化,而演化规划强调种群级以上的行为变化。现在的学术界把遗传算法 GA、演化策略 ES、演化规划 EP 通称为演化计算(Evolution Computation),简称 EC。

ES 是在 1965 年由 Schwefel 和 Rechenberg 提出的,主要用于求解连续函数优化问题。ES 通过变异、交叉和选择来对种群进行演化。变异主要通过对每个个体实施高斯扰动来达到变异目的。交叉主要分为两类:一类是局部交叉,即用两个父代来参与操作产生子代,另一类是全局交叉,即用多个父代来参与操作产生子代。1964 年,Fogel 首次提出了 EP 的概念,他认为智能行为要同时具备预报环境状态和把预报的环境状转换为对给定的目标适当相应的能力,并以此来演化寻优。在 EP 中,产生后代的机制是变异,经典的 EP 使用自适应的变异方案,通过高斯扰动对每个个体进行位置的变化。Yao^[15][16] 等人经过大量实验分析,发现使用柯西分布取样对个体进行变异,可以大大提升算法的性能。

1.3 本书的主要内容和结构安排

现实中的各类工程问题,实际上最后都可以转换为优化问题。迄今为止,人们开发各种经典有效的优化方法来解决实际工程中的优化问题。本文主要讨论群体智能优化方法,我们首先对群体智能优化算法的特点进行归纳,给出群体智能优化算法的一般化理论框架,并基于此理论框架设计了一般反向策略和导向性邻域挖掘策略,以增强算法的全局搜索能力和局部搜索能力,然后分别通过粒子群优化算法和差分演化算法对基于混合策略的群体智能优化算法框架进行实例化设计,以验证智能优化算法框架的适用性和一般反向策