

Ukázky optimalizačních algoritmů na funkci dvou proměnných s jedním minimem

Tomáš Kroupa

20. května 2014



Abstrakt

V následujícím textu bude na jednoduché úloze minimalizace funkce s jedním globálním minimem ukázáno jak fungují jednotlivé typy algoritmů pro hledání zmíněného minima.

Obsah

1	Formulace úlohy	3
2	Informace k následujícím kapitolám	4
3	Popis co se děje v animacích a co a jak je nastaveno	5
3.1	Gradientní	5
3.1.1	LBFGS – Počáteční bod $[x_0, y_0] = [20, 20]$	5
3.1.2	LBFGS – Počáteční bod $[x_0, y_0] = [20, 20]$, výpočet gradientu 10%	7
3.1.3	LBFGS – Počáteční bod $[x_0, y_0] = [20, 20]$, výpočet gradientu 10%, jednostranný výpočet gradientu	9
3.1.4	NLPQLP – Počáteční bod $[x_0, y_0] = [20, 20]$	11
3.1.5	NLPQLP – Počáteční bod $[x_0, y_0] = [0, 0]$	13
3.2	Optimalizační algoritmy inspirované přírodou	15
3.2.1	Evolution algorithm	15
3.2.2	Particle swarm	17
3.2.3	Particle swarm - ponechání běhu optimalizace až do ukončení 25. generace	19
3.2.4	Particle swarm - ponechání běhu optimalizace až do ukončení 25. generace, počáteční generace zadána ručně	21
3.2.5	Simple design improvement – start design $[x_0, y_0] = [20, 20]$	23
3.2.6	Simple design improvement – start design $[x_0, y_0] = [20, 20]$, větší rozhled při hledání, více generací	25
3.2.7	Genetický algoritmus	27

1 Formulace úlohy

Je dána funkce dvou proměnných

$$r = r(x, y) = 0.04(x + 1)^2 + 0.04(y - 4)^2 + 70. \quad (1)$$

Tato funkce je definovaná na čtvercové oblasti, kde

$$x \in \langle -20, 20 \rangle \text{ a} \quad (2)$$

$$y \in \langle -20, 20 \rangle. \quad (3)$$

Úkolem v dalším textu ukázaných optimalizačních algoritmů je nalézt minimum funkce r , přičemž v případě funkce uvedené výše víme, že

$$\min_{x,y}(r) = 70, \quad (4)$$

které je globálním minimem a to v bodě

$$x = -1 \text{ a} \quad (5)$$

$$y = 4. \quad (6)$$

V definované oblasti existuje právě jedno minimum.

Poznámky V praxi a také v užívaném softwaru OptiSLang se funkce r nazývá objektivní funkcí, nebo minimalizovanou funkcí. V analýze, která je v tomto ukázkovém případě pouhým výpočtem hodnoty funkce r , může v obecném (reálnějším) případě být vypočteno více různých hodnot tzv. výstupních parametrů. Z nich lze následně vyčíslit objektivní funkci. Hodnoty x a y se nazývají vstupní parametry, těch může být opět větší množství. V reálných problémech nemusí navíc jít o spojitě se měnící parametry, ale i o diskrétní hodnoty.

Jednotlivé výpočty objektivní funkce budeme nazývat designy. Protože výpočet, zejména při využití metody konečných prvků, jednotlivých designů může trvat i několik hodin, je důležité vždy vybrat vhodný algoritmus, který dosáhne minima při co nejmenším počtu designů.

2 Informace k následujícím kapitolám

V následujících kapitolách je ukázáno fungování množství algoritmů. K textu je vhodné použít i animace, které ukazují, jak jednotlivé algoritmy postupují během optimalizace.

3 Popis co se děje v animacích a co a jak je nastaveno

3.1 Gradientní

3.1.1 LBFGS – Počáteční bod $[x_0, y_0] = [20, 20]$

Nastavení výpočtu

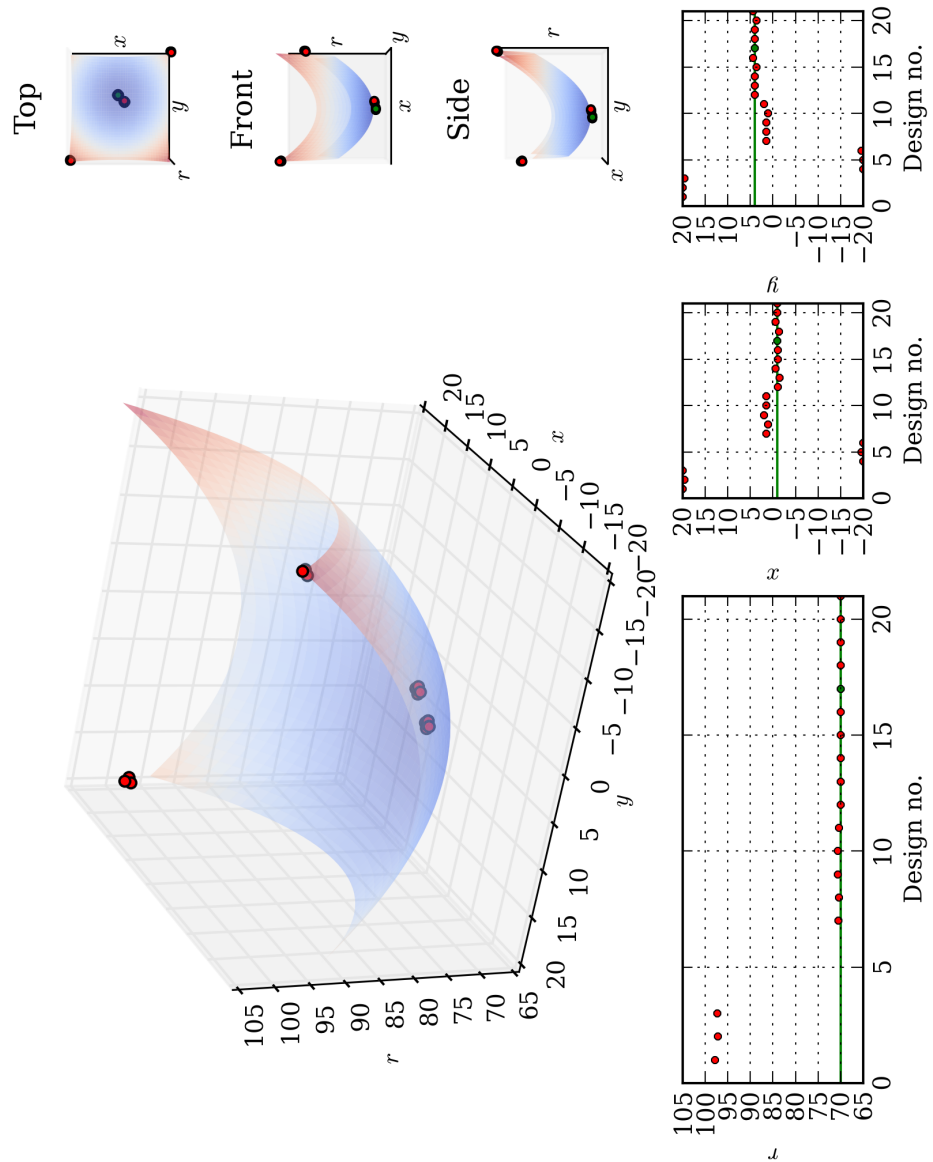
- Maximální počet iterací (maximum number of iterations) = 50
- Maximální počet volání funkce (maximum number of function calls) = 50
- Velikost intervalu pro výpočet gradientu (size of differentiation interval) = 1%
- Výpočet gradientu (differentiation method) = central differences, Pro výpočet gradientu je potřeba 5 výpočtů residua (designů). Vždy hodnotu uprostřed gradientu a po obou stranách.

Průběh výpočtů

- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 24
- Minimum nalezeno v 20. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 70$ (přesně)
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [-1, 4]$ (přesně)

Komentáře

- –



Obrázek 1: Animace: function_1_LBFGS_20_20_OPTGRAD.avi

3.1.2 LBFGS – Počáteční bod $[x_0, y_0] = [20, 20]$, výpočet gradientu 10%

Nastavení výpočtu

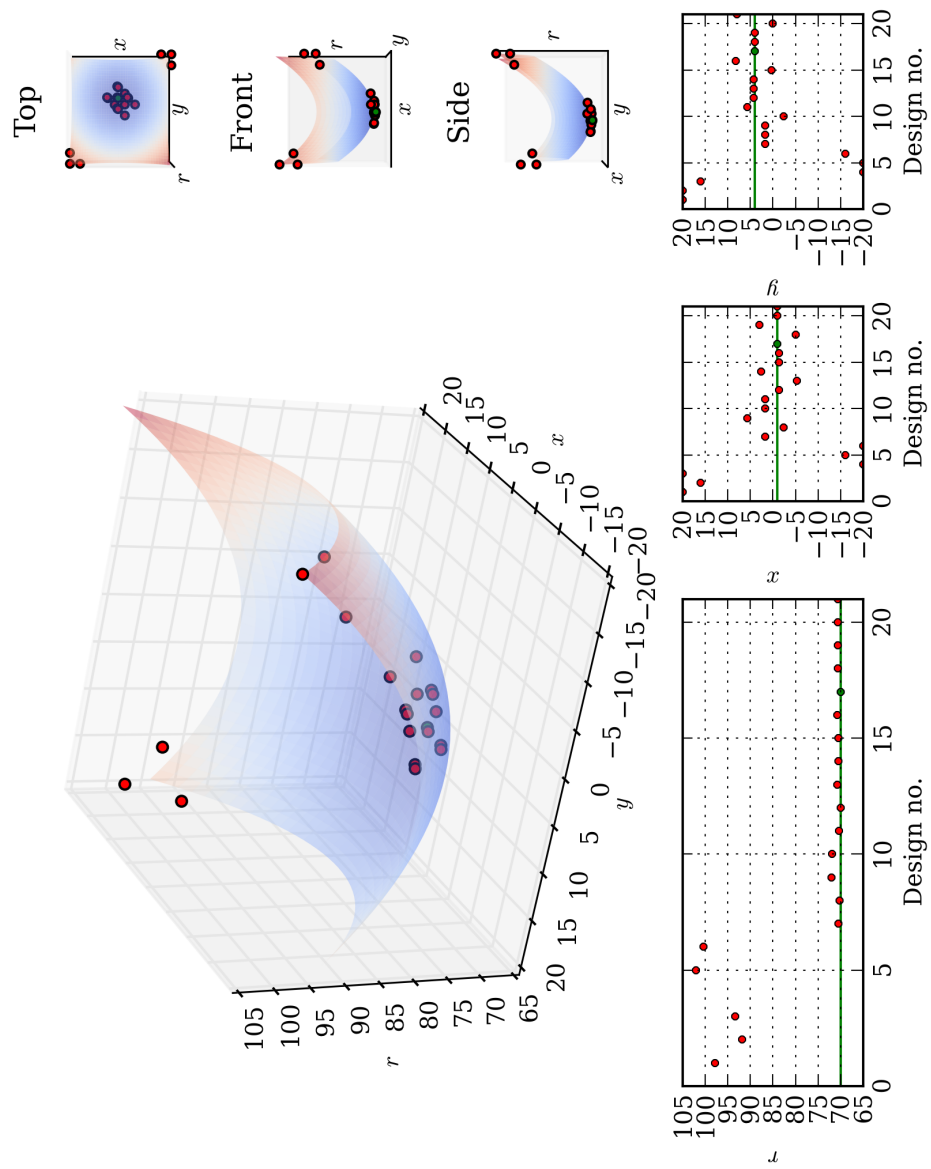
- Maximální počet iterací (maximum number of iterations) = 50
- Maximální počet volání funkce (maximum number of function calls) = 50
- Velikost intervalu pro výpočet gradientu (size of differentiation interval) = 10%
- Výpočet gradientu (differentiation method) = central differences, Pro výpočet gradientu je potřeba 5 výpočtů residua (designů). Vždy hodnotu uprostřed gradientu a po obou stranách pro každý za dvou parametrů.

Průběh výpočtů

- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 24
- Minimum nalezeno v 20. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 70$ (přesně)
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [-1, 4]$ (přesně)

Komentáře

- –



Obrázek 2: Animace: function_1.LBFGS_20_20_big_grad_OPTGRAD.avi

3.1.3 LBFGS – Počáteční bod $[x_0, y_0] = [20, 20]$, výpočet gradientu 10%, jednostranný výpočet gradientu

Nastavení výpočtu

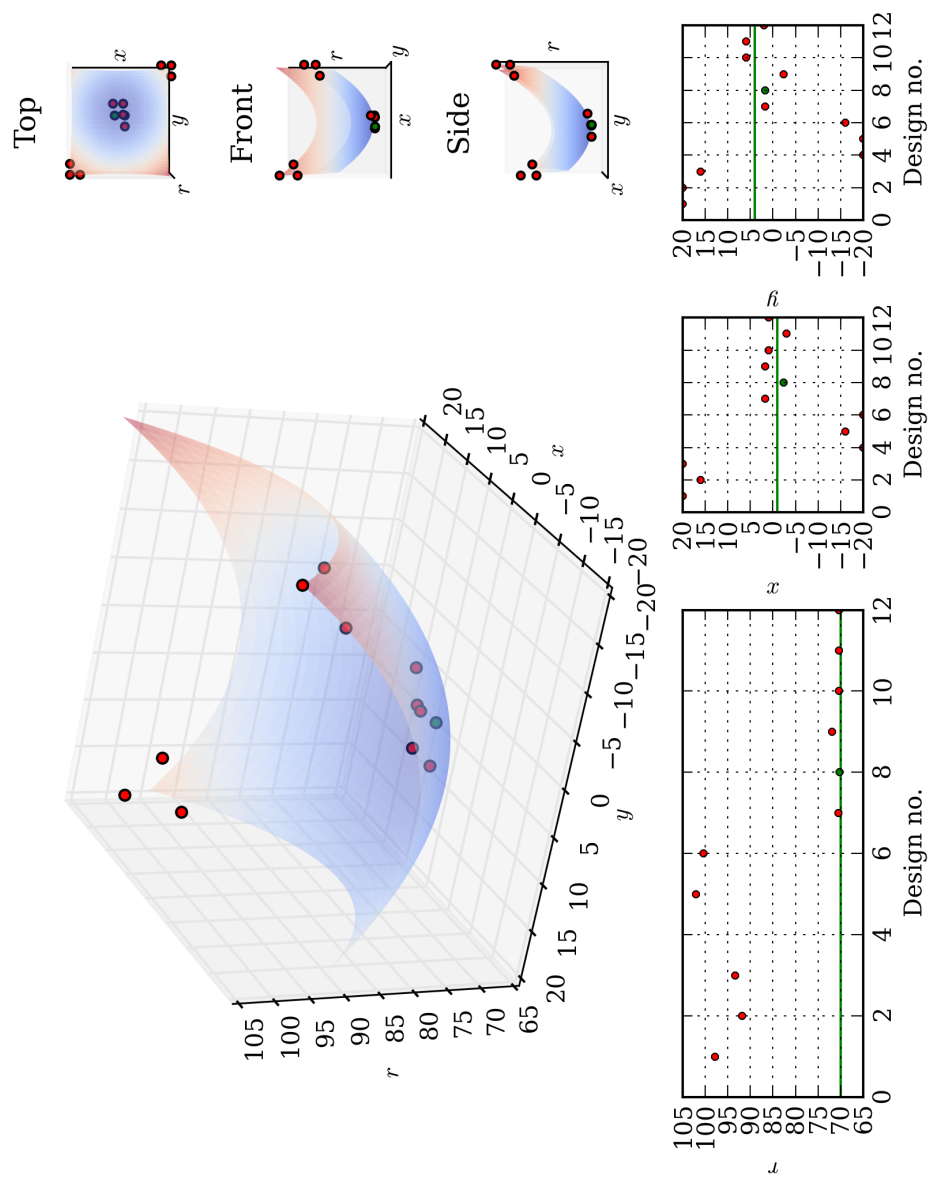
- Maximální počet iterací (maximum number of iterations) = 50
- Maximální počet volání funkce (maximum number of function calls) = 50
- Velikost intervalu pro výpočet gradientu (size of differentiation interval) = 10%
- Výpočet gradientu (differentiation method) = single sided differences, Pro výpočet gradientu je potřeba 3 výpočty residua (designů). Vždy hodnotu uprostřed gradientu a po jedné straně pro každý za dvou parametrů.

Průběh výpočtů

- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 15
- Minimum nalezeno v 11. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 70.2889$
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [-2.333, 4.6667]$

Komentáře

- –



Obrázek 3: Animace: function_1_LBFGS_20_20_single_differences_big_grad_OPTGRAD.avi

3.1.4 NLPQLP – Počáteční bod $[x_0, y_0] = [20, 20]$

Nastavení výpočtu

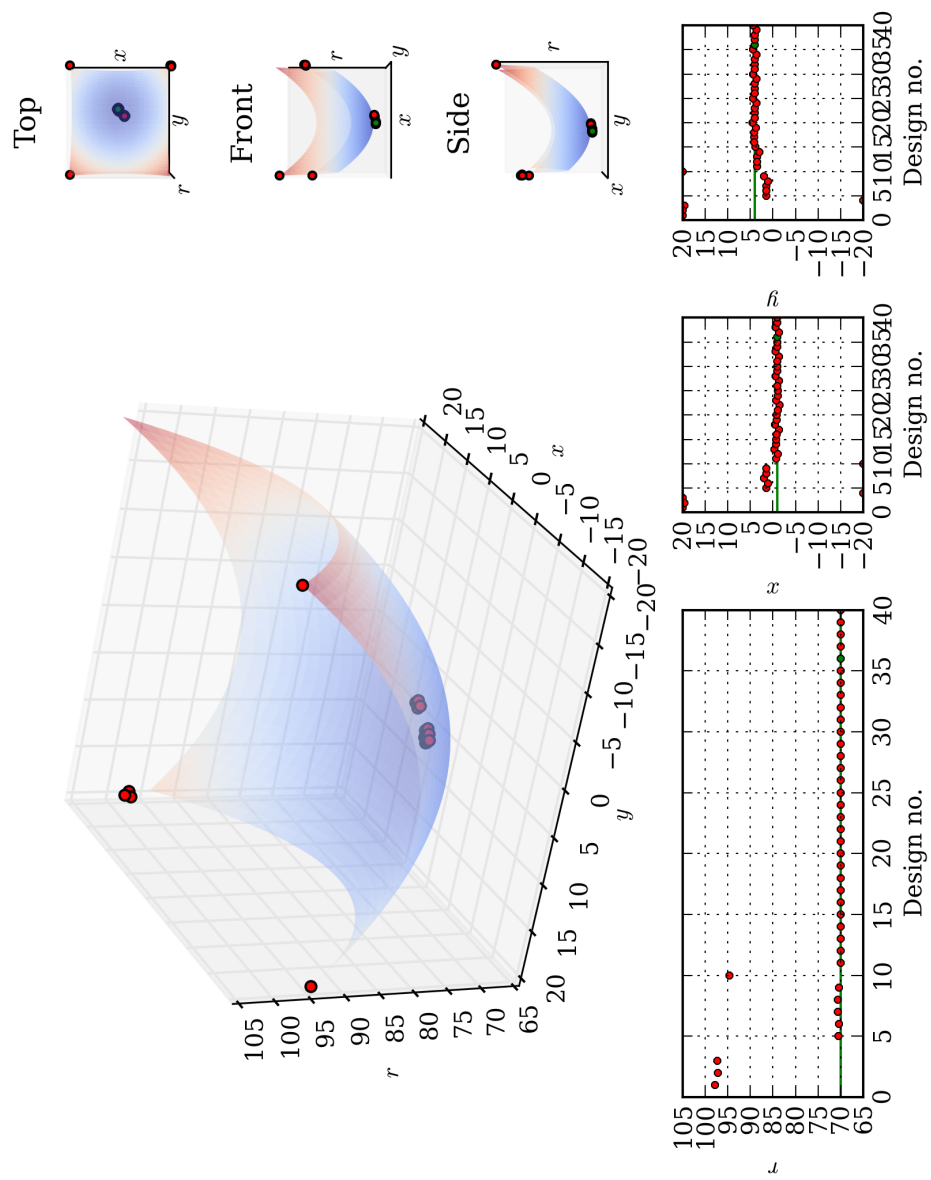
- Maximální počet iterací (maximum number of iterations) = 50
- Maximální počet volání funkce (maximum number of function calls) = 50
- Velikost intervalu pro výpočet gradientu (size of differentiation interval) = 1%
- Výpočet gradientu (differentiation method) = central differences, Pro výpočet gradientu je potřeba 5 výpočtů residua (designů). Vždy hodnotu uprostřed gradientu a po obou stranách pro každý za dvou parametrů.

Průběh výpočtů

- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 40
- Minimum nalezeno v 36. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 70$ (přesně)
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [-1, 4]$ (přesně)

Komentáře

- –



Obrázek 4: Animace: function_1_NLPQLP_20_20_OPTGRAD.avi

3.1.5 NLPQLP – Počáteční bod $[x_0, y_0] = [0, 0]$

Nastavení výpočtu

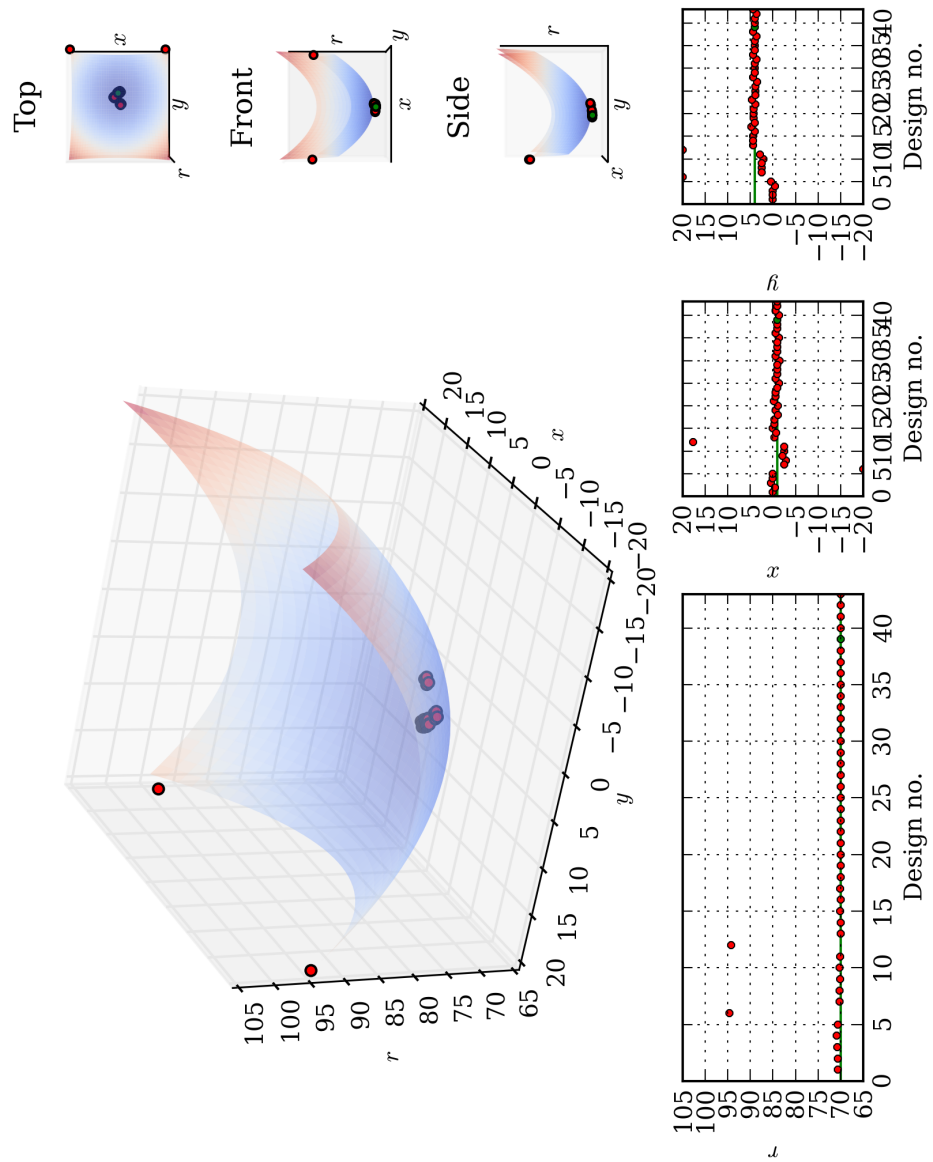
- Maximální počet iterací (maximum number of iterations) = 50
- Maximální počet volání funkce (maximum number of function calls) = 50
- Velikost intervalu pro výpočet gradientu (size of differentiation interval) = 1%
- Výpočet gradientu (differentiation method) = central differences, Pro výpočet gradientu je potřeba 5 výpočtů residua (designů). Vždy hodnotu uprostřed gradientu a po obou stranách pro každý za dvou parametrů.

Průběh výpočtů

- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 43
- Minimum nalezeno v 39. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 70$ (přesně)
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [-1, 4]$ (přesně)

Komentáře

- –



Obrázek 5: Animace: function_1_NLPQLP_0_0_OPTGRAD.avi

3.2 Optimalizační algoritmy inspirované přírodou

3.2.1 Evolution algorithm

Nastavení výpočtu

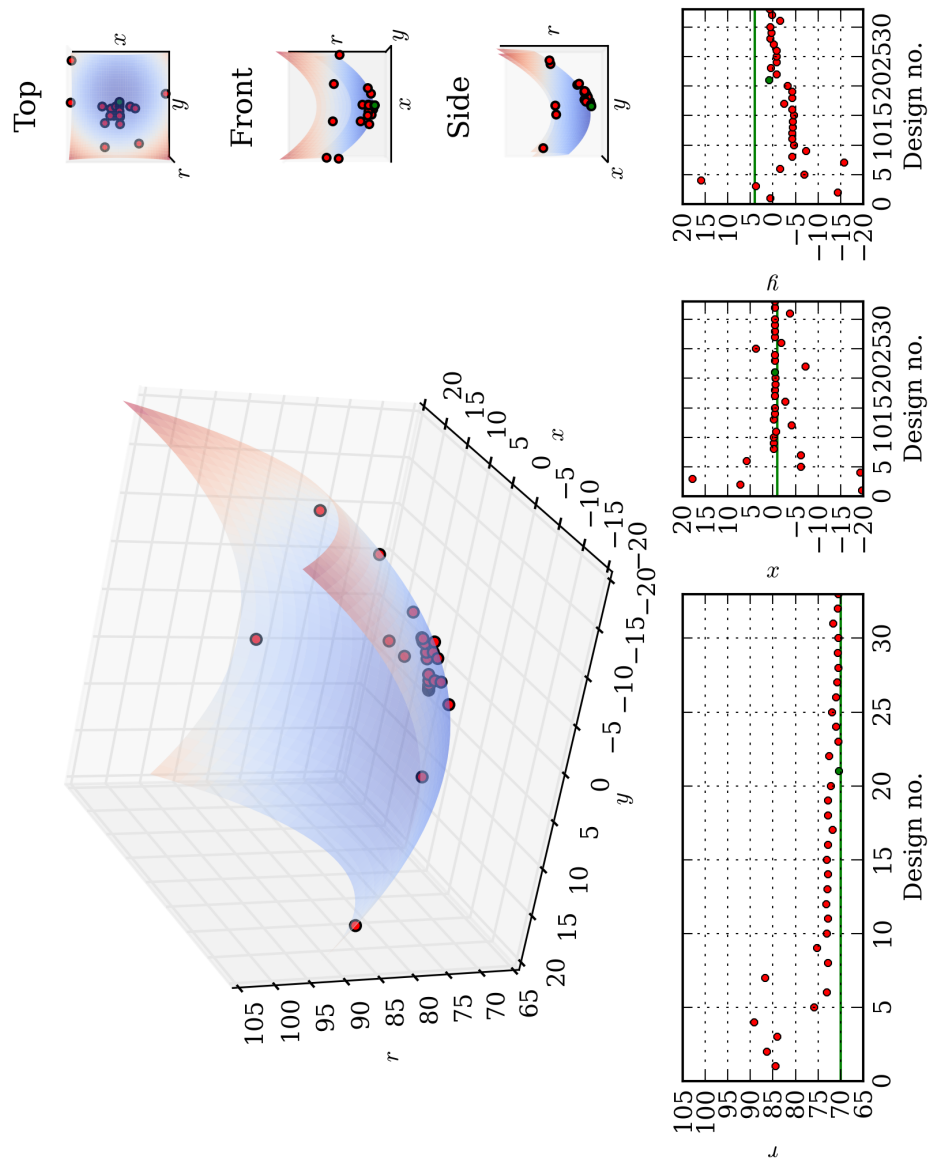
- Počáteční generace (initial generation) = 4
- Minimální počet generací (Minimum number of generations) = 10
- Maximální počet generací (Maximum number of generations) = 25
- Po kolik ageneracích kdy algoritmus nenajde lepší řešení zastavit (Stop after generation of stagnation) = 5
- Velikost archivu (Archiv size) = 2
- Jak známkovat nejlepší řešení (Ranking method) = linear
- Počet rodičů = 4
- Výběr potomků (Selection method) = Stochastic universal sampling
- Křížení (Crossover) = Aritmetic
- Frekvence křížení (Crossover rate) = 0.5
- Hybridní křížení (Hybrid crossover) = vypnuto
- Typ mutace (Mutation type) = Normal distribution
- Frevence křížení (Mutation rate) = 0.2
- Rozptyl mutace na začátku optimalizace (Std. deviation start) = 0.1
- Rozptyl mutace na konci optimalizace (Std. deviation end) = 0.01

Průběh výpočtů

- Počet vypočítaných generací = 13
- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 52
- Minimum nalezeno v 32. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 70.4255$
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [-0.44375, 0.78622]$

Komentáře

- –



Obrázek 6: Animace: function_1_EA_NOA.avi

3.2.2 Particle swarm

Nastavení výpočtu

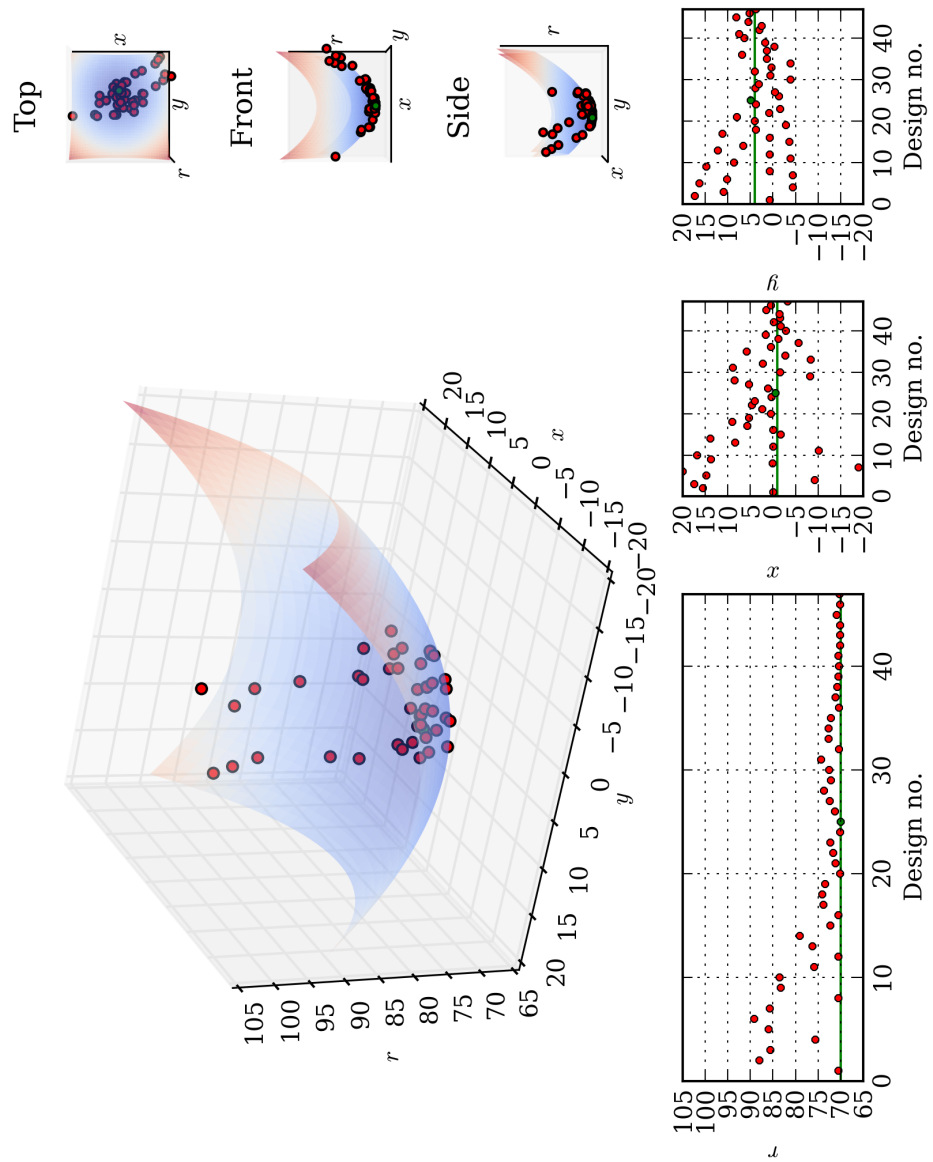
- Počet jedinců v generaci (Population size) = 4
- Minimální počet generací (Minimum number of generations) = 10
- Maximální počet generací (Maximum number of generations) = 25
- Po kolik ageneracích kdy algoritmus nenajde lepší řešení zastavit (Stop after generation of stagnation) = 5
- Prohledavací strategie (Search strategy) = Global search
- – (Inertia weight) = 0.9 (begin), 0.2 (end)
- – (Personal acceleration) = 0.9 (begin), 0.1 (end)
- – (Global acceleration) = 0.1 (begin), 0.9 (end)
- Typ mutace (Mutation type) = Normal distribution
- Frekvence křížení (Mutation rate) = 0.2
- Rozptyl mutace na začátku optimalizace (Std. deviation start) = 0.1
- Rozptyl mutace na konci optimalizace (Std. deviation end) = 0.01

Průběh výpočtů

- Počet vypočítaných generací = 12
- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 48
- Minimum nalezeno v 26. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 70.0379$
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [-0.6196, 4.8966]$

Komentáře

- –



Obrázek 7: Aniamce: function_1_PSO_NOA.avi

3.2.3 Particle swarm - ponechání běhu optimalizace až do ukončení 25. generace

Nastavení výpočtu

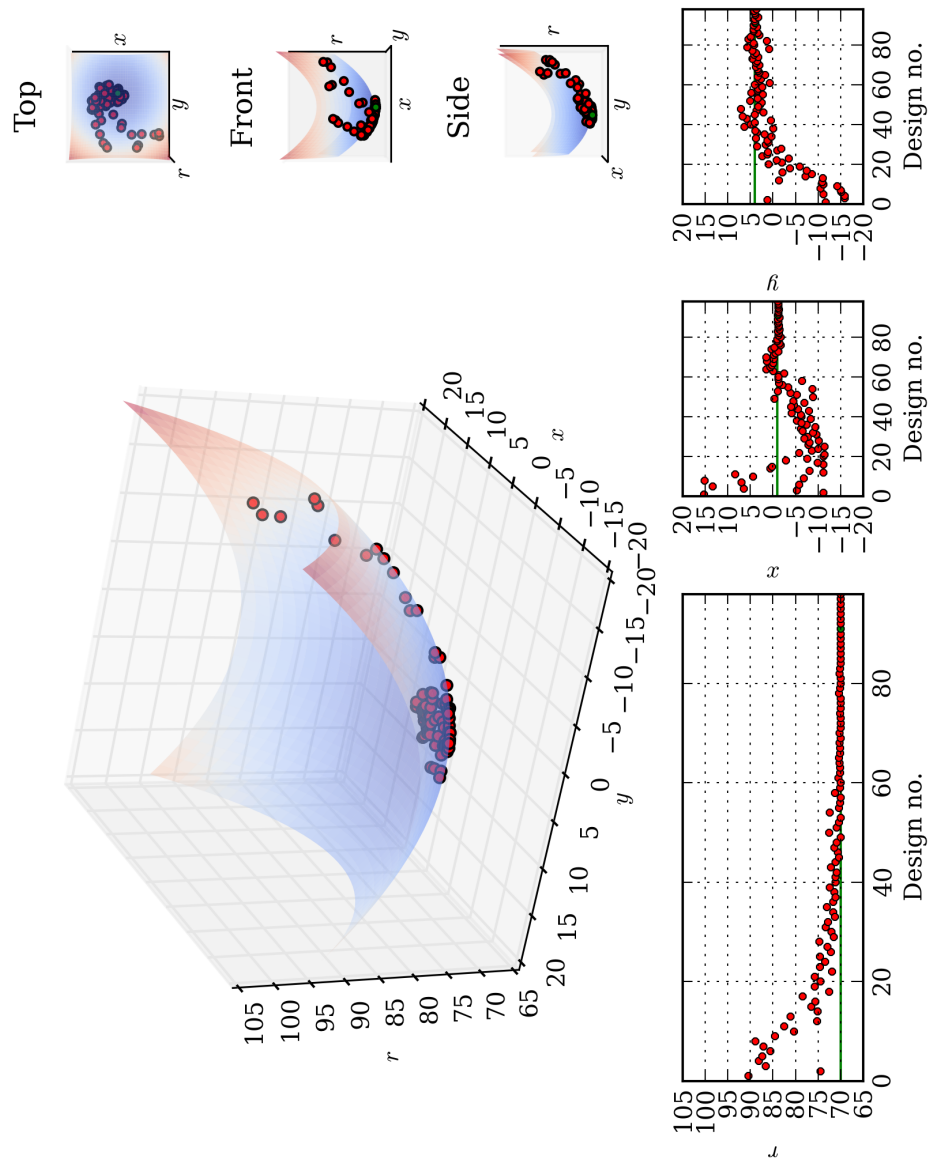
- Počet jedinců v generaci (Population size) = 4
- Minimální počet generací (Minimum number of generations) = 25
- Maximální počet generací (Maximum number of generations) = 25
- Po kolik ageneracích kdy algoritmus nenajde lepší řešení zastavit (Stop after generation of stagnation) = 25
- Prohledavací strategie (Search strategy) = Global search
- – (Inertia weight) = 0.9 (begin), 0.2 (end)
- – (Personal acceleration) = 0.9 (begin), 0.1 (end)
- – (Global acceleration) = 0.1 (begin), 0.9 (end)
- Typ mutace (Mutation type) = Normal distribution
- Frekvence křížení (Mutation rate) = 0.2
- Rozptyl mutace na začátku optimalizace (Std. deviation start) = 0.1
- Rozptyl mutace na konci optimalizace (Std. deviation end) = 0.01

Průběh výpočtů

- Počet vypočítaných generací = 25
- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 100
- Minimum nalezeno v 93. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 70.0007$
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [-1.1186, 3.9393]$

Komentáře

- –



Obrázek 8: Animace: function_1_PSO_until_the_end_NOA.avi

3.2.4 Particle swarm - ponechání běhu optimalizace až do ukončení 25. generace, počáteční generace zadána ručně

počáteční generace

1. $[x_0^1, y_0^1] = [-20, -20]$
2. $[x_0^2, y_0^2] = [-20, 20]$
3. $[x_0^3, y_0^3] = [20, -20]$
4. $[x_0^4, y_0^4] = [20, 20]$

Nastavení výpočtu

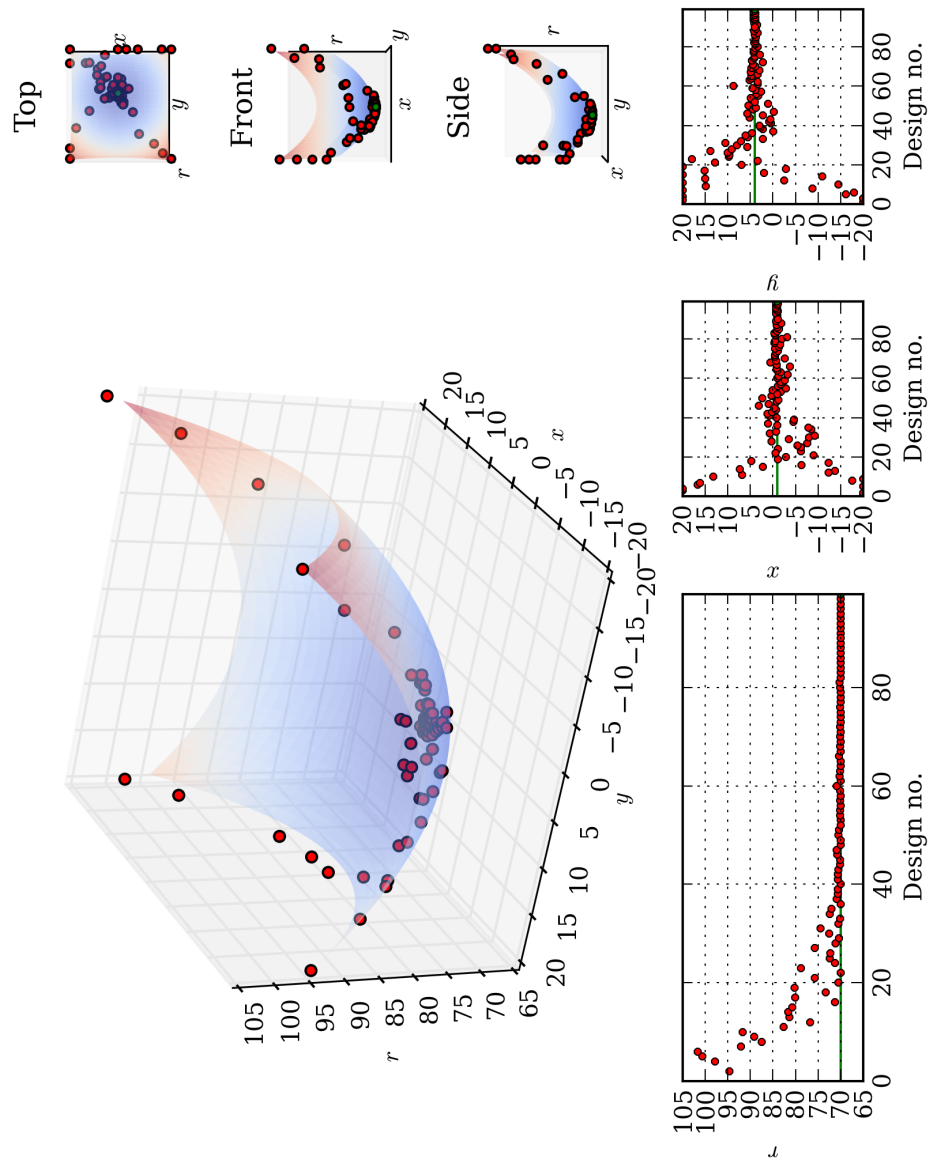
- Počet jedinců v generaci (Population size) = 4
- Minimální počet generací (Minimum number of generations) = 25
- Maximální počet generací (Maximum number of generations) = 25
- Po kolik ageneracích kdy algoritmus nenajde lepší řešení zastavit (Stop after generation of stagnation) = 25
- Prohledovací strategie (Search strategy) = Global search
- – (Inertia weight) = 0.9 (begin), 0.2 (end)
- – (Personal acceleration) = 0.9 (begin), 0.1 (end)
- – (Global acceleration) = 0.1 (begin), 0.9 (end)
- Typ mutace (Mutation type) = Normal distribution
- Frevence křížení (Mutation rate) = 0.2
- Rozptyl mutace na začátku optimalizace (Std. deviation start) = 0.1
- Rozptyl mutace na konci optimalizace (Std. deviation end) = 0.01

Průběh výpočtů

- Počet vypočítaných generací = 25
- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 100
- Minimum nalezeno v 100. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 70$ (přesně)
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [-1, 4]$ (přesně)

Komentáře

- –



Obrázek 9: Animace: function_1_PSO_until_the_end_initial_generation_NOA.avi

3.2.5 Simple design improvement – start design $[x_0, y_0] = [20, 20]$

Nastavení výpočtu

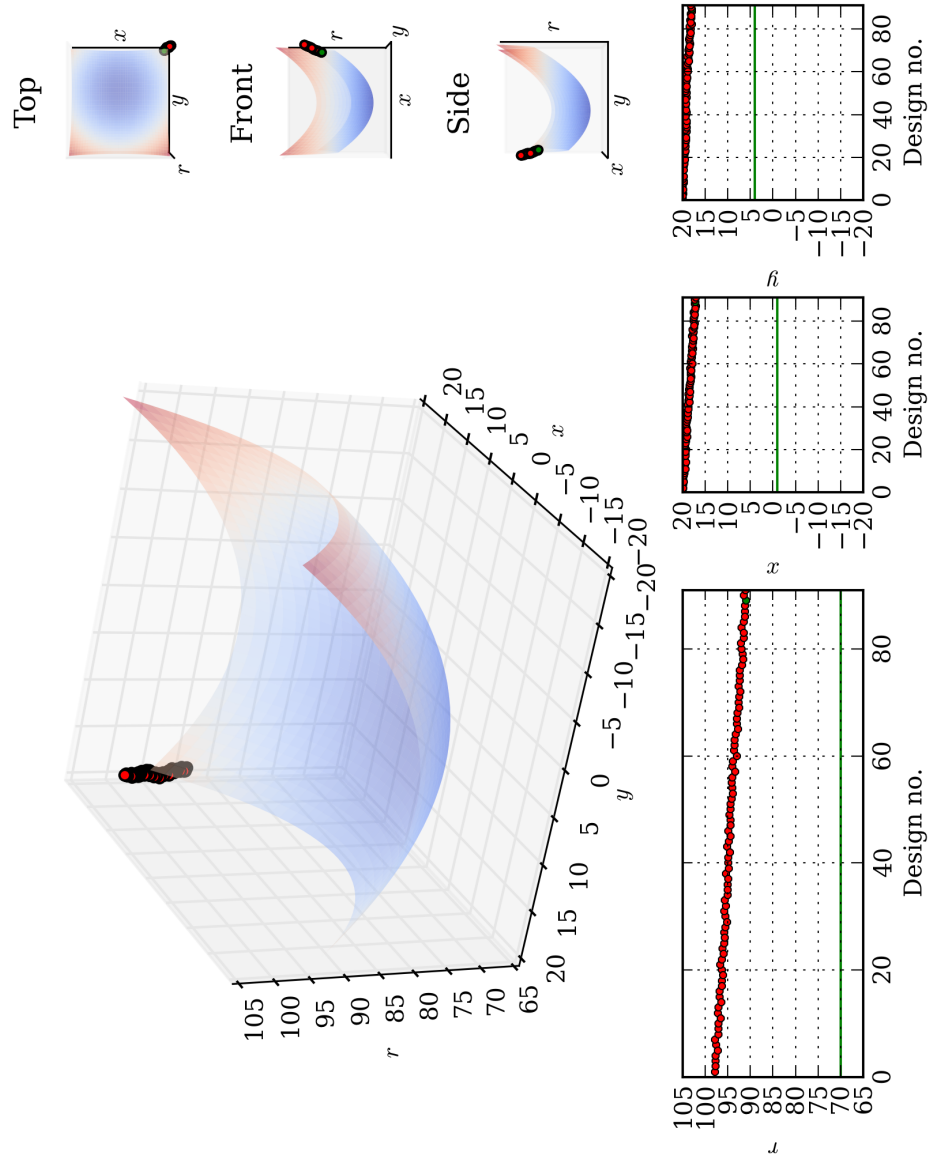
- Počet jedinců v generaci (Number of samples) = 4
- Šířka rozhledu pro hledání dalších lepších výsledků (Sampling bound width) = 1% z (horní mez - dolní mez parametru)
- Minimální počet generací (Minimum number of generations) = 25
- Maximální počet generací (Maximum number of generations) = 25
- Zastavovací podmínka = Type 2 = 0 (Detorioration of performance) – Nula ponechána aby algoritmus běžel pořád

Průběh výpočtů

- Počet vypočítaných generací = 25
- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 100
- Minimum nalezeno v 98. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 90.9295$
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [17.167, 17.9]$

Komentáře

- Ke globálnímu minimumu se algoritmus ani nepřiblížil, nikoliv důvodu nevhodnosti algoritmu, ale díky necitlivému nastavení.



Obrázek 10: Animace: function_1.SDLNOA.avi

3.2.6 Simple design improvement – start design $[x_0, y_0] = [20, 20]$, větší rozhled při hledání, více generací

Nastavení výpočtu

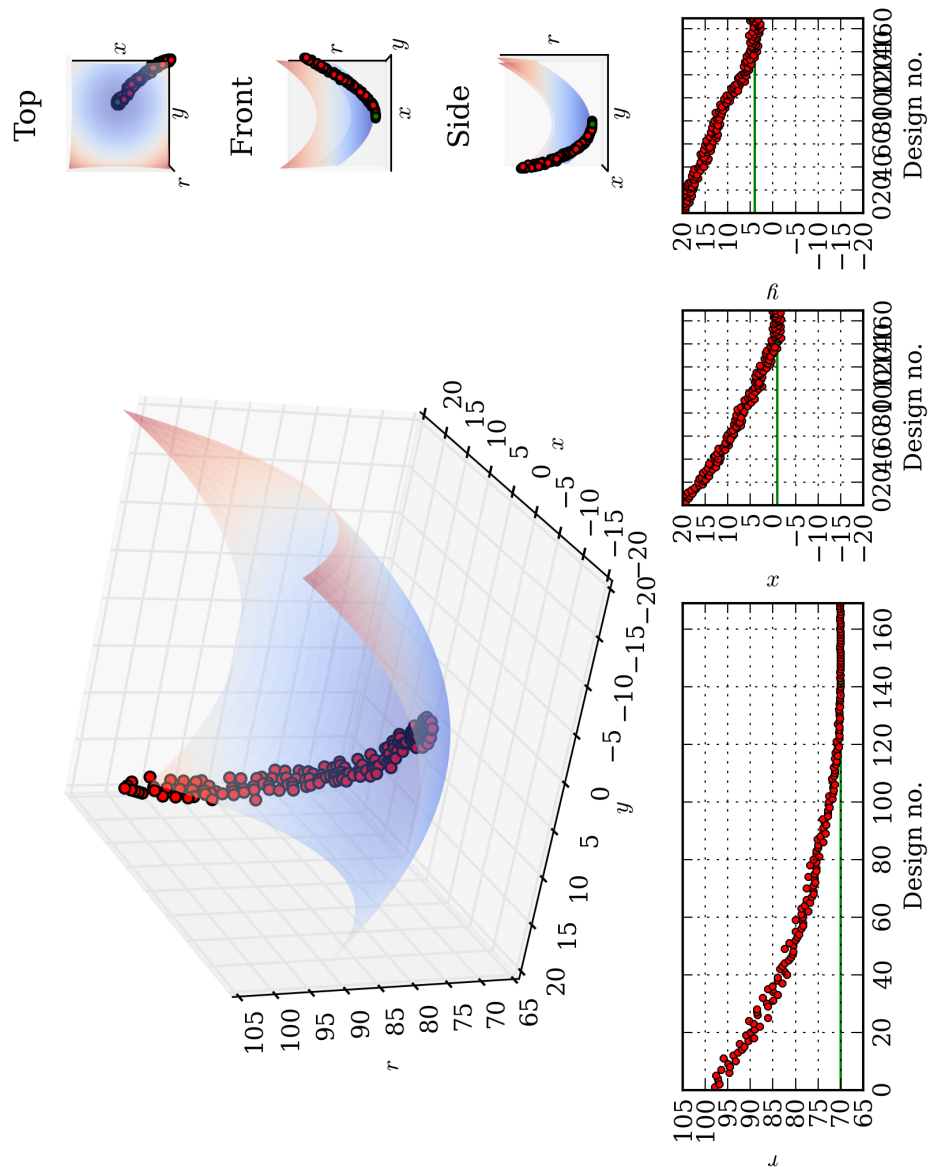
- Počet jedinců v generaci (Number of samples) = 4
- Šířka rozhledu pro hledání dalších lepších výsledků (Sampling bound width) = 5% z (horní mez - dolní mez parametru)
- Minimální počet generací (Minimum number of generations) = 1000
- Maximální počet generací (Maximum number of generations) = 1000
- Zastavovací podmínka = Type 2 = 0 (Detorioration of performance) –
Bude zastaveno ručně, až algoritmus dojde k minimu

Průběh výpočtů

- Počet vypočítaných generací = 50
- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 199
- Minimum nalezeno v 155. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 70.0011$
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [-1.1667, 4]$

Komentáře

- Stačí větší „krok“ a více generací a algoritmus dojde kam má.



Obrázek 11: Animace: function_1_SDL.bigger_step_detioration_NOA.avi

3.2.7 Genetický algoritmus

Nastavení výpočtu

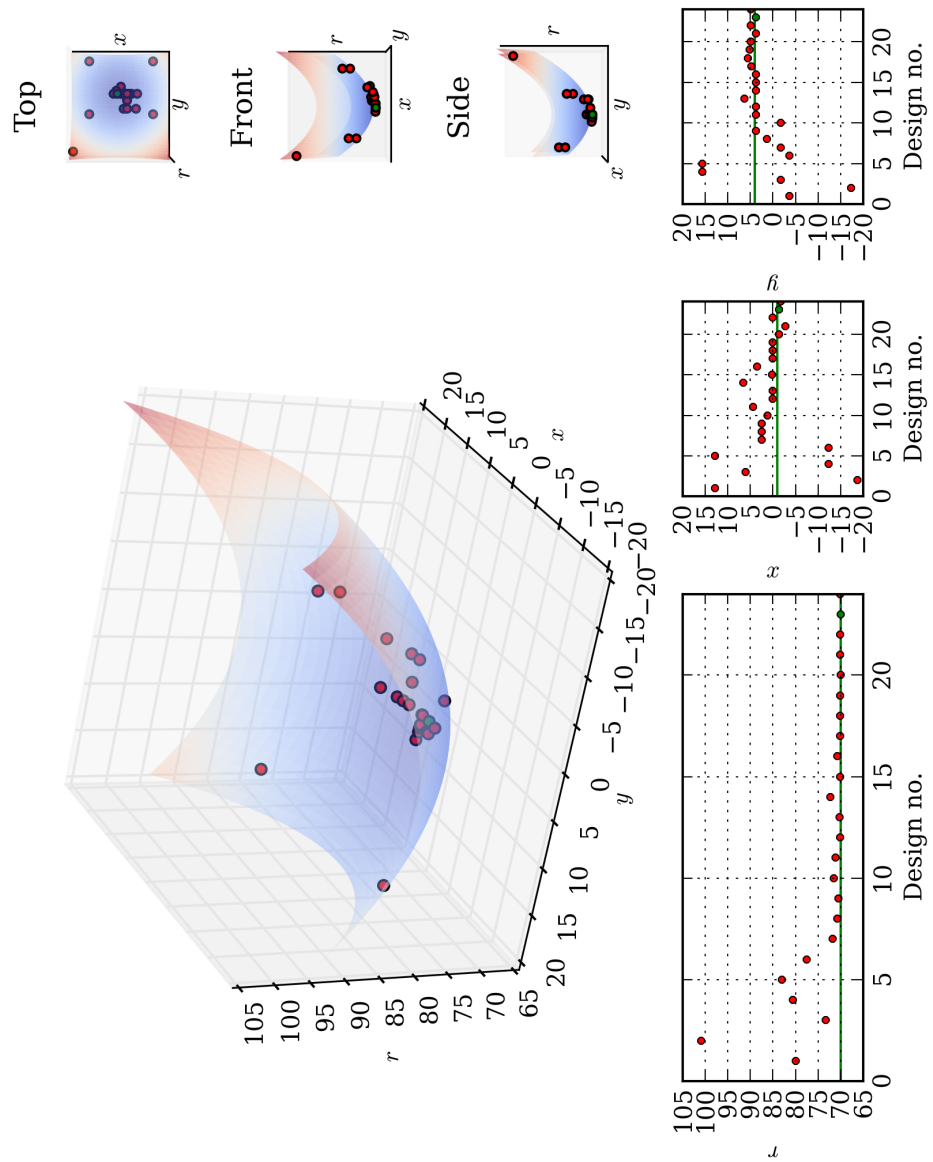
- Počet jedinců v generaci (Population size) = 4
- Maximální počet generací (Maximum number of generations) = 1000
- Počet nejlepších řešení uchovávaných (Number of elites) = 1
- Počet výměn v jedné generaci (Number of replaced) = 1
- Četnost křížení (Crossover rate) = 50%
- – (Selection pressure) = 90%
- – (Cliff) = 50%
- Exponent mutace (mutation exponent) = 1
- Četnost mutace (Mutation rate) = 0.1
- Rozptyl na začátku (Start std. deviation) = 0.1
- Rozptyl na konci (End std. deviation) = 0.01

Průběh výpočtů

- Počet vypočítaných generací = 25
- Počet provedených výpočtů (designů) residua = 100
- Minimum nalezeno v 93. designu.
- Hodnota nalezeného minima $r = 70.0054$
- Minimum nalezeno v bodě $[x, y] = [-1.2839, 3.7652]$

Komentáře

- –



Obrázek 12: Animace: function_1_GA_NOA.avi

Tato prezentace je spolufinancována Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky v rámci projektu č. **CZ.1.07/2.2.00/28.0206**
„Inovace výuky podpořená praxí“.



Tento studijní materiál je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.