Metody numeryczne

Laboratorium 10

Poszukiwanie minimum wartości funkcji metodą symulowanego wyżarzania.

21.05.2020r.

Adrian Furman

1. Wstęp teoretyczny

Optymalizacja zadanej funkcji celu (badanej funkcji) - $f(x)$ polega na znalezieniu jej ekstremum globalnego. W zależności od przypadku jest to albo minimum globalne albo maksimum globalne. W dalszej części omawiane będzie poszukiwanie minimum, szukanie maksimum globalnego jest analogiczne przy czym należy jedynie zmienić kierunek nierówności w kilku miejscach.

Minimum funkcji (wielu zmiennych) to taki punkt $x_M = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^T$, dla którego zachodzi:

$$f:\ R^n \Rightarrow R,$$

$$min f(x) = f(x_M) \Leftrightarrow \forall x \in R^n\ f(x_M) < f(x),$$

z ewentualnymi warunkami:

$$g_j(x) \leq 0, \quad j = 1,2,3,\ldots,m,$$

$$h_j(x) = 0, \quad j = 1,2,3,\ldots,r.$$

Metody Monte Carlo – rodzina metod służąca do modelowania matematycznego procesów charakteryzujących się znaczną złożonością, często uniemożliwiającą obliczenie wyników w sposób analityczny. Fundamentem tych metod jest losowość wyboru danych wielkości (przesunięć, położeń itp.). Do losowania wykorzystuje się znany rozkład prawdopodobieństwa.

Metoda symulowanego wyżarzania – stochastyczna metoda (losowa) z rodziny metod Monte Carlo, polegająca na przeszukiwaniu przestrzeni rozwiązań przez tzw. wędrowców w celu znalezienia rozwiązania najlepszego - wartości globalnie najmniejszej (w określonym obszarze). Dla każdego z wędrowców dokonujemy losowych przesunięć, sprawdzając po tym czy wartości funkcji celu po przesunięciu jest lepsza (mniejsza) od wartości funkcji w obecnej pozycji:

$$f(x_i + \Delta x) \leq f(x_i), \quad (1)$$

jeśli tak jest, przesuwamy punkt (wędrowca) do miejsca o lepszej wartości funkcji celu:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x. \quad (2)$$

W przeciwnym wypadku, gdy:

$$f(x_i + \Delta x) > f(x_i), \quad (3)$$

wyznaczamy prawdopodobieństwo akceptacji gorszego rozwiązania:

$$P = \exp\left(-\frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{T}\right), \quad (4)$$

a następnie zgodnie z obliczonym prawdopodobieństwem dokonujemy wyboru przy pomocy wygenerowanej liczby pseudolosowej:

$$X \in U(0,1), \quad (5)$$

$$X < P. \quad (6)$$

Przyjęcie lokalnie gorszego rozwiązania z prawdopodobieństwem P zależnym od T zmniejsza prawdopodobieństwo zamknięcia wędrowca w obrębie lokalnego minimum w obrębie którego wędrowiec został pierwotnie zainicjowany. Ma to znaczenie w szczególności w początkowych iteracjach tj. gdy T jest duże więc P jest bliższe 1. Pozwala to na przemieszczenie wędrowca w pozornie złym kierunku, który z perspektywy dalszych kroków może jednak okazać się prawidłowy ze względu na znajdujące się tam minimum globalne.

2. Zadanie do wykonania

2.1. Opis problemu

Celem zajęć było znalezienie minimum funkcji zadanej następującym wzorem:

$$f(x,y) = \sin(x)\sin(y) - \exp\left(-\left(x + \frac{\pi}{2}\right)^2 - \left(y - \frac{\pi}{2}\right)^2\right),$$

wykorzystując do tego metodę symulowanego wyżarzania ze zmienną temperaturą T, w wersji iteracyjnej.

Symulacja została przeprowadzona dla $N = 200$ wędrowców, w obszarze płaszczyzny $[x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}] = [-10,10] \times [-10,10]$.

Położenie początkowe wędrowców ustawione zostało na $\left(x^{(0)}, y^{(0)}\right) = (5,5)$.

W każdej iteracji dla każdego wędrowca dokonano 100 kroków błądzenia.

Zmianę temperatury opisywała następująca zależność:

$$T_{it} = \frac{10}{2^{it}},$$

gdzie it to numer iteracji, $it=0,1,\ldots,20$.

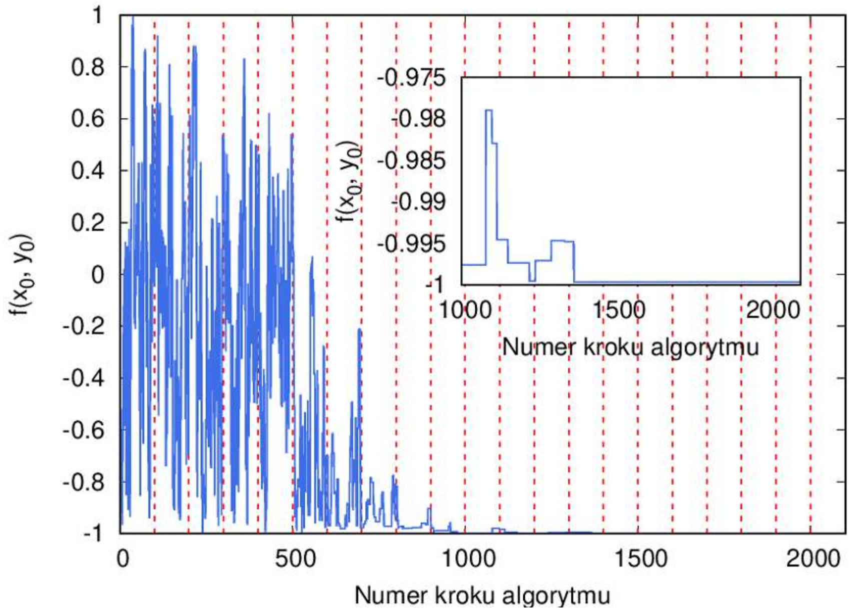
Prawdopodobieństwo akceptacji rozwiązania „gorszego" dane było rozkładem Boltzmanna (4).

Dla $it \in \{0,7,20\}$ zapisano położenia wszystkich wędrowców do pliku w celu późniejszego ich zobrazowania. Ponad to dla jednego wędrowca o indeksie 0 zanotowano wartości funkcji celu dla wszystkich jego pozycji.

Do napisania symulacji wykorzystano czysty język C.

2.2. Wyniki

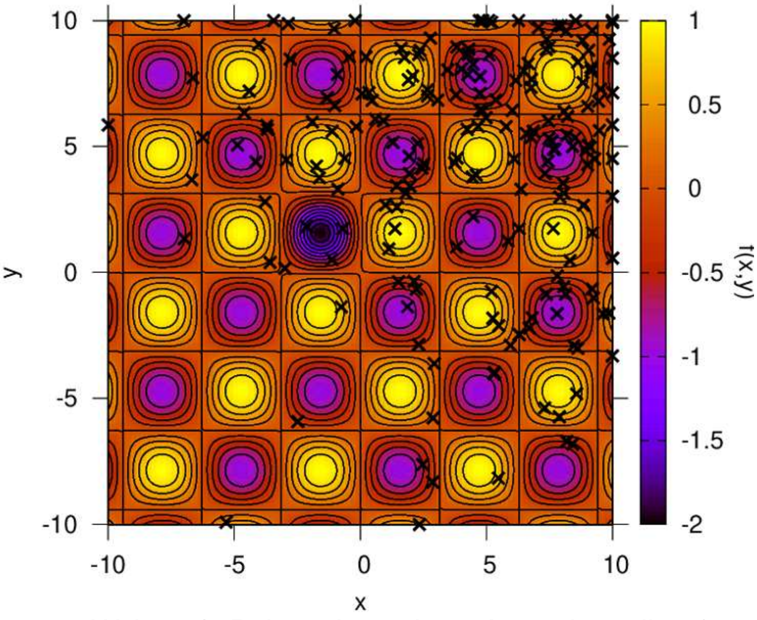
Na podstawie informacji zapisanych do plików oraz przy wykorzystaniu programu *gnuplot* stworzone zostały wykresy obrazujące położenia wszystkich wędrowców po iteracjach 0, 7, 20 – odpowiednio wykresy nr 2, 3, 4 oraz wykres nr 1, przedstawiający wartości funkcji celu dla jednego, wybranego wędrowca we wszystkich jego położeniach podczas przebiegu algorytmu.



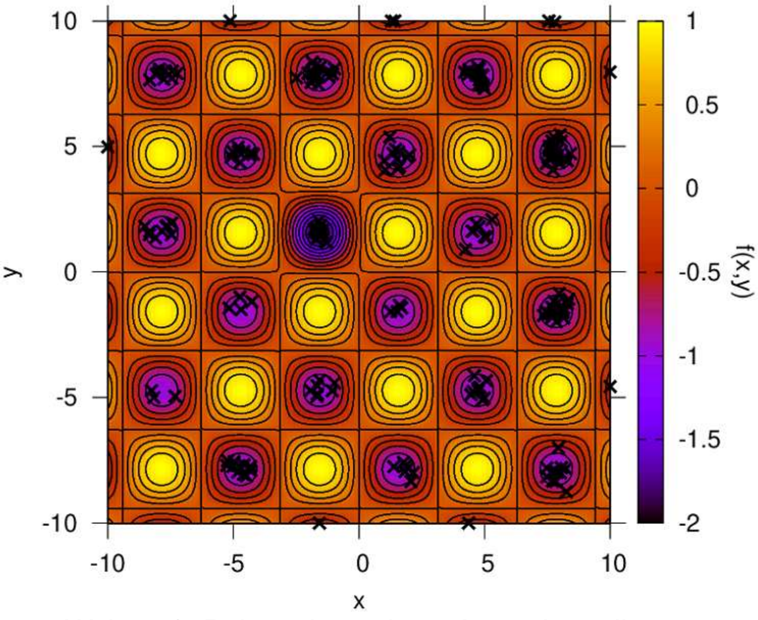
Wykres 1. Wartości funkcji celu dla wszystkich położeń wybranego wędrowca.

W początkowej fazie działania algorytmu wyraźnie widać znaczne skoki pomiędzy wartościami funkcji celu co wynika z początkowo dużego prawdopodobieństwa przyjęcia wyniku gorszego – Dla dużych T, prawdopodobieństwo P jest bliskie 1 – wzór (4). Z biegiem czasu (spadku temperatury) zauważamy stopniowe „uspakajanie” się wykresu i zbieganie do wartości najmniejszej – jest to jak najbardziej naturalne i wynika bezpośrednio z zależności wspomnianego wzoru (4) od temperatury T. Dla bardzo małych wartości T ujemny wykładnik eksponenty osiąga bardzo duże wartości co przekłada się na dążące do zera wartości prawdopodobieństwa przyjęcia wyniku gorszego. W związku z tym przesunięcia dokonywane są praktycznie tylko w kierunku lokalnego minimum.

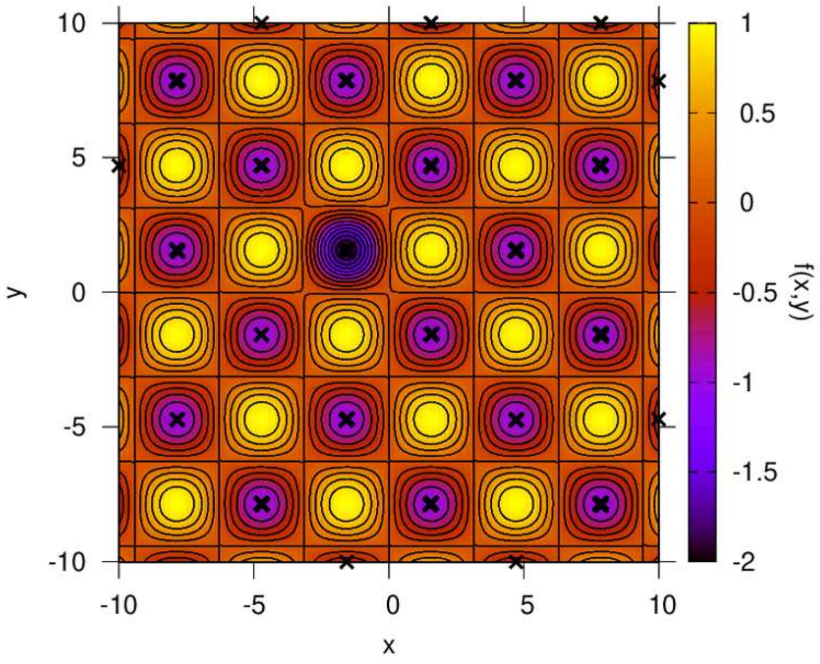
Znalezione minimum okazuje się być jedynie minimum lokalnym, w przybliżeniu równym -1.



Wykres 2. Położenia wędrowców po iteracji nr 0.



Wykres 3. Położenia wędrowców po iteracji nr 7.



Wykres 4. Położenia wędrowców po iteracji nr 20.

Na pierwszym wykresie, po pierwszej iteracji widzimy znaczne rozproszenie wędrowców co jest wynikiem omówionej zależności wzoru (4) od temperatury – T. Na wykresie (3) pokazującym sytuację po 7 iteracji zauważamy skupienie się wędrowców w obszarach minimów lokalnych. Dla tej iteracji temperatura T wynosi około 0.08 więc prawdopodobieństwo przyjęcia pozycji o wartości większej niż obecna – wzór (4) jest stosunkowo małe – wędrowcy zmierzają w kierunku minim lokalnych. Potwierdza to także wykres (1), dla numeru kroku około 700 (7 iteracji x 100 kroków każda) wartości funkcji celu są już w okolicach minimum lokalnego. Ostatni wykres przedstawia końcowe położenie wszystkich wędrowców, którzy zebrali się w minimach lokalnych rozważanego obszaru.

Minimum globalne wyznaczone za pomocą metody wyżarzania wyniosło $f(x_M) = -1.99964$ i znajduje się w punkcie $(x, y) = (-1.56716, 1.55568)$ co zgadza się z wynikami wzorcowymi.

3. Wnioski

Metoda symulowanego wyżarzania stanowi wygodne i stosunkowo proste w implementacji narzędzie znajdowania ekstremów funkcji (optymalizacji funkcji). Należy pamiętać, że ze względu na swój probabilistyczny charakter nie gwarantuje ona znalezienia ekstremum globalnego, jednak przy dobraniu parametrów – liczby wędrowców, kroków, iteracji itp. odpowiednich do charakterystyki badanej funkcji z dużym prawdopodobieństwem możemy liczyć na poprawny wynik.

W naszym przypadku znalezione minimum jest minimum globalnym więc algorytm sprawdził się dla naszej funkcji i obranych parametrów.

Liczba wędrowców ma niezwykle istotny wpływ na działanie algorytmu ponieważ wraz z jej wzrostem zwiększamy szansę na osiągnięcie wszystkich ekstremów przez co najmniej jednego wędrowca dzięki czemu w ostatnim kroku działania algorytmu jakim jest wybranie najmniejszej z wartości dla położeń wszystkich wędrowców możemy liczyć na znalezienie minimum globalnego. Oczywiście trzeba mieć na uwadze złożoność czasową, która zależy od liczby wędrowców i dla zbyt dużej ich liczby może nie dać rozwiązania w satysfakcjonującym nas czasie.

Od temperatury zależy prawdopodobieństwo P – wzór (4) dzięki czemu steruje ona skalą „błądzenia” wędrowców. Dla dużych wartości wędrowcy przemieszczają się w stosunkowo losowych kierunkach. Wraz z obniżaniem się temperatury wędrowcy zaczynają coraz bardziej skupiać się wokół ekstremów lokalnych żeby wreszcie dla temperatur bliskich zeru znaleźć się w przybliżeniu w miejscu ekstremum.

Uruchomienie algorytmu dla jednego wędrowca mogło by okazać się skuteczne jednak z niewielkim prawdopodobieństwem ponieważ wędrowiec może trafić w każde minimum, niekoniecznie to jedyne globalne. Było by to niezwykle nieefektywne i mało racjonalne podejście.

Obniżanie temperatury jest konieczne ze względu na niejednokrotnie wspomnianą zależność prawdopodobieństwa akceptacji wyniku gorszego od temperatury właśnie. Gdyby temperatura nie malała, błądzenie wędrowców było by znaczne do samego końca i w efekcie nie wszyscy zbiegali by się do minimów lokalnych lub robili by to w sposób ogromnie nieefektywny co znacznie zmniejszyło by prawdopodobieństwo znalezienia minimum globalnego.