

# GA+NN+LM hybrid optimization

Student: 許家維

ID: 0851513

Department: Material Science and Engineering

## 最佳化加分題—基本題部分

在過往最佳化問題中，十分常見利用多次試驗(trial)求得模型最佳解的方法例如基因演算法(GA)等。但由於 GA 需要大量的人口(population)才會有較為理想的收斂性，所以常常需要大量時間和計算成本來取得最佳解。而本次作業我利用神經網路(neural network)的方法，適當的進行邊界收縮，使交配池後的子代能在有效率的散佈於可能出現答案的地方，這大幅降低了計算 Fitness 的次數需求。類似方法在建立起數據點之間 convex 特性是已經被實做出來並且是比傳統方法還能有效的去引導其他機器學習算法[1]。

Fig. 1 為本次作業算法的流程圖，先以 GA 進行迭代，並且同時收集計算結果，並使用 NN (fully connected network 並使用 Levenberg–Marquardt algorithm 作為 optimizer) 擬和出目標函數的反函數，在若干步驟後 (本次作業為 15 個 loop)，嘗試以 GA 所找到的 best solution 減去微小值 (epsilon)，帶入 NN 中得出中可能會出現更好解得位置。隨後針對可能出現更好解的位置進行邊緣的收縮，使 GA 搜尋範圍被控制在 NN 認為的熱區中，並重複使用此方法道問題收斂。

## Model workflow

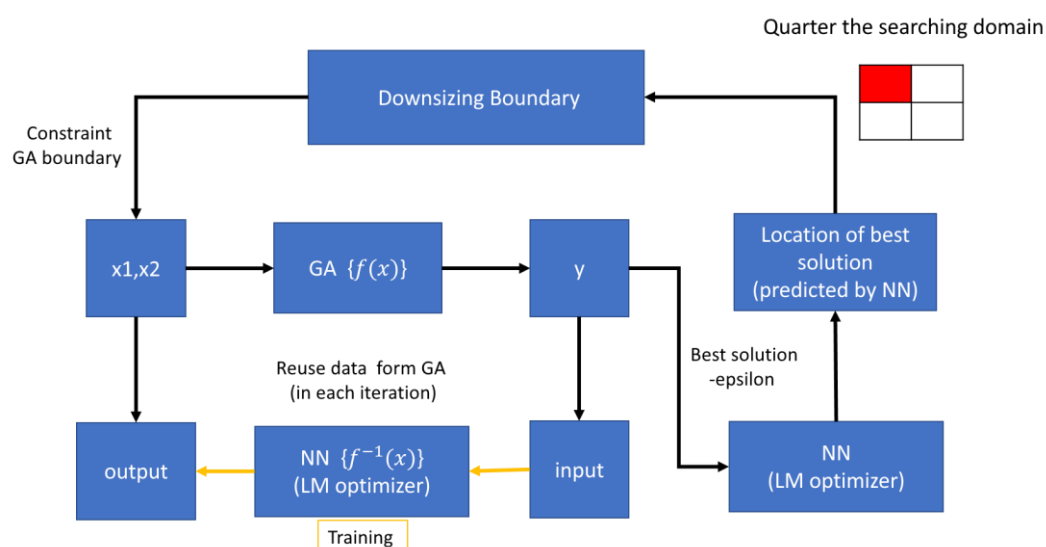


Fig. 1 hybrid optimize (GA+NN+LM)流程示意圖

為了確認模型的收斂效果是否能比一般的模型更好，本研究固定了 GA 的人口等參數，差別只存在範圍是否會受到 NN 而逐漸縮小。

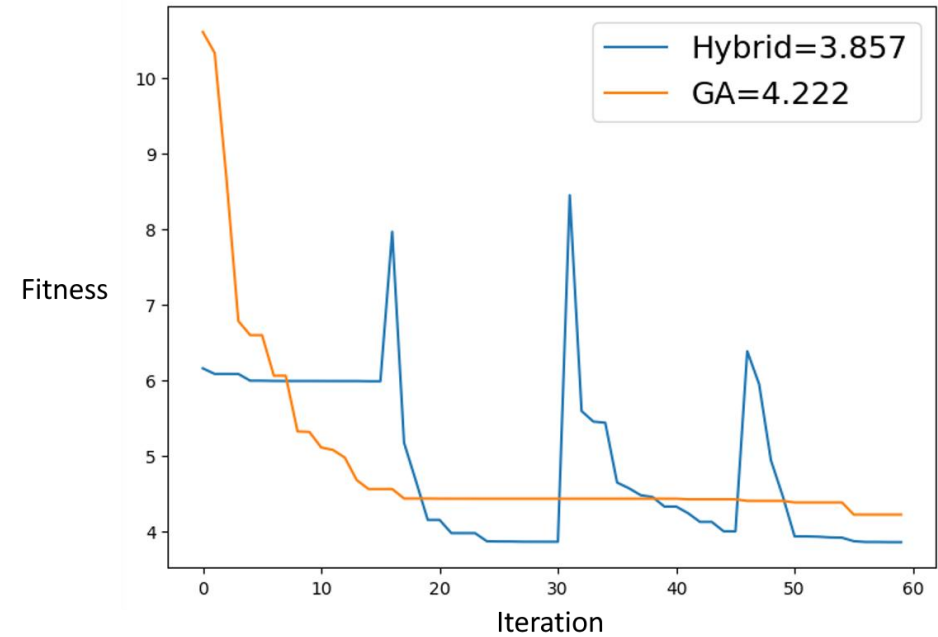


Fig. 2 fitness vs iteration 圖，可以看到 hybrid 方法會得到較好的收斂值，並且由於重新定義出邊界條件而清空交配池的機制，使 GA 若無法在短期內收斂的親代則可以直接被消除掉，在以往中我們只能透過突變機制去逐漸改變此項困境，然而這效率極低，但也不能太有效率會讓正常的基因演算法無法進行，所以這種清洗可以視為有條件性的突變。可以有效克服 GA 在演化困在特定解上的問題，如圖在 20 到 50 iterations 可以看到 GA 演算法並沒有找出更好的解。

Iterations	Fitness	
	GA	Hybrid
1	10.608	6.157
10	5.316	5.990
20	4.435	4.152
40	4.433	4.328
60	4.221	3.857

Fig. 3 將上述圖表整理成表格方便量化效果

而最後為了確保 NN 能正確導引 GA 縮小其搜尋範圍，本作業利用 Bayesian optimization 這種後驗機率的方式，使網路結構能夠相較於人工調超參數(hyper parameter)有著更快的更好的效能，在 60 個 iterations(4 次縮放邊界範圍)內，有錯誤縮放的情況大幅降低。

### 最佳化加分題—複雜題部分

在這複雜問題中，由於 model 的 DOF(degree of freedom)增加到 127 個，若沿用簡單的 case 的演算法搜尋效率極低，常常在多個 iteration 下並無明顯進步。除了透過 NN 去降低搜尋範圍外，仍需要一個更強的搜尋器，此次作業採用 bayesian optimization with tree parzen estimator[2]的方法，可以在極少數數據點下快速擬合出可能的目標函數，進而尋找目標函數的 minimum。

而在 NN guide 的部分，目標模型的複雜度已經超出 MLP (Multilayer perceptron) 的能力範圍，而且面臨到的問題幾乎是 1 to 1 function，所以採用

AE(autoencoder)的網路架構進行 model parameter 與 IV curve 之間的轉換擬合。然而在神經網路的工作上常常因為缺乏物理意義，常被人視為黑盒子(black box)，所以我引入了 physics-informed machine learning [3]的概念，使用各種 function form 來表達原來 IV-curve 的特性，這種做法在有限資料集下是有顯著幫助的。至次相較於簡單問題，源頭(NN guide)和搜尋(Bayesian optimization)都有了一定幅度的進步。

Fig. 4 為本次作業算法的流程圖，先處理 first part，以 GA+LM 演算法把 IV curve 主要特徵以 Function 保存起來，如 Fig. 5，並做為 physics-informed 的依據。

再處理 second part，使用上述經過萃取後的 data 和 model parameter 之間建立起相互映射的 NN，並且這 2 個 NN 都是經過 Bayesian optimization 尋找過最好的超參數。隨後進入到 third part，透過 NN 對於 goal IV curve 的 inference，可得知大約的 model parameter 會坐落的區域，而這些區域將會被視為熱區。

Bayesian optimization 將會直接透過 fitness calculator 來尋找靠近 goal IV curve 的模型參數，值得注意的是相較於 GA 接近於 Random searching 的作法，Bayesian 會被 tree parzen estimator 控制，進行有意義且快速的空間搜索。

### Model(autoencoder) workflow

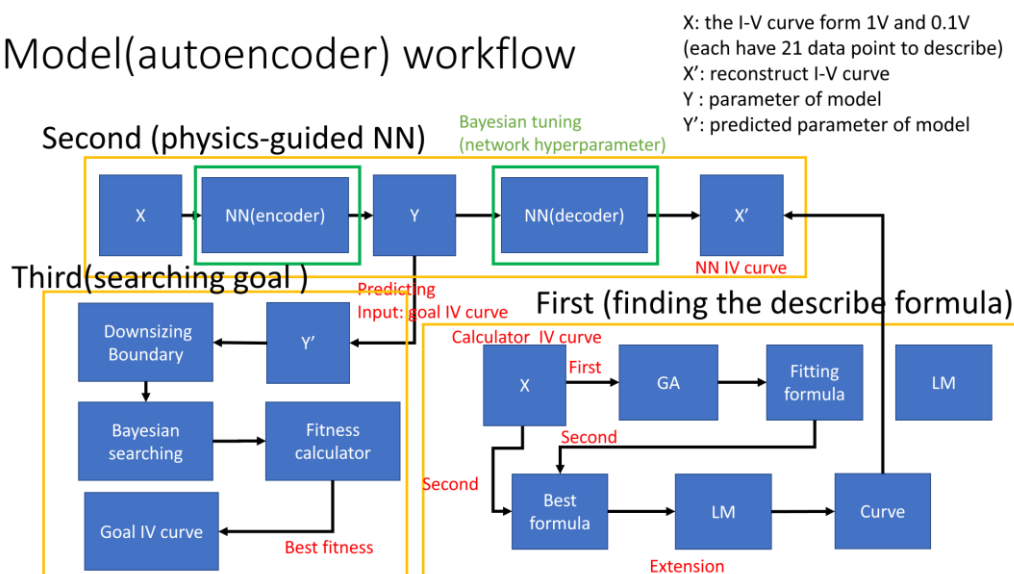


Fig. 4 enhance hybrid optimize (GA+NN+LM+ Bayesian optimization)流程示意圖

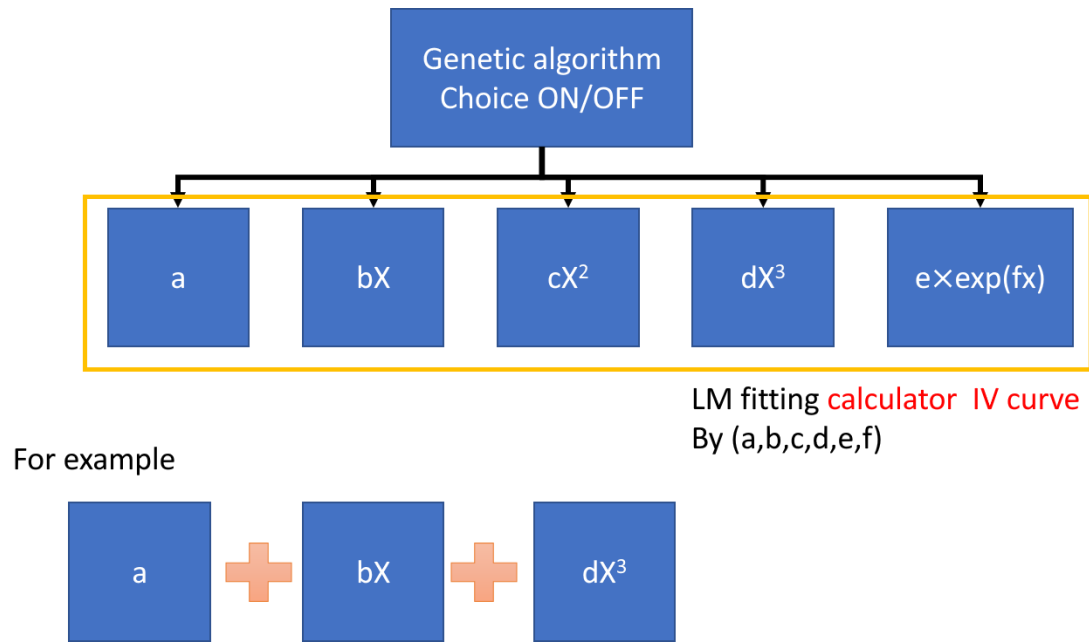


Fig. 5 GA+LM 演算法篩選出逼近函數的示意圖

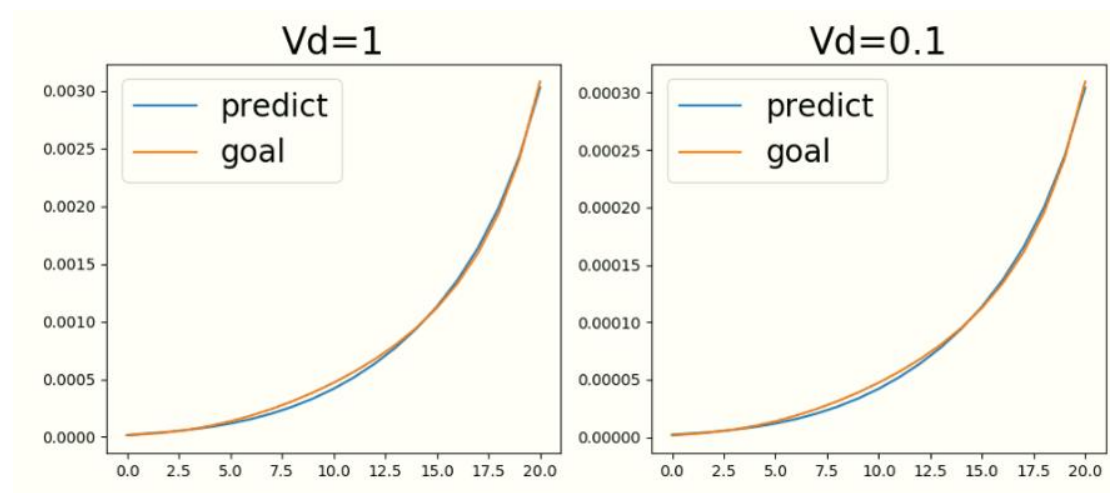


Fig. 6 此圖顯示出在不同  $V_D$  下，算法找出的 IV curve(predict)和 goal curve (goal)十分接近。

- [1] Y.Chen, Y.Shi, and B.Zhang, "Optimal Control Via Neural Networks : A Convex Approach," pp. 1–25.
- [2] J.Snoek, H.Larochelle, and R. P.Adams, "Practical Bayesian Optimization of Machine Learning Algorithms," pp. 1–9.
- [3] J.Wang, J.Wu, and H.Xiao, "Physics-informed machine learning approach for reconstructing Reynolds stress modeling discrepancies based on DNS data," vol. 034603, pp. 1–22, 2017.