



Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie
 Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Bartosz Rogowski, II rok, 303793
 21 maja 2020

Metody numeryczne

Sprawozdanie nr 10 z zajęć laboratoryjnych

Poszukiwanie minimum wartości funkcji

1. Wstęp teoretyczny

Optymalizacja polega na szukaniu ekstremów funkcji – a więc największych i **najmniejszych** wartości funkcji. W przypadku **minimum globalnego** chodzi o najmniejszą wartość w całej dziedzinie funkcji. Zdarza się, że wśród kandydatów jest wiele punktów – minimów lokalnych – wtedy wybierane jest to najmniejsze (w przypadku maksimum analogicznie - największe). Dla funkcji o jednej zmiennej zadanie to skupia się na badaniu znaku odpowiednich pochodnych (o ile znany jest wzór ogólny), jednak dla funkcji wielu zmiennych to zadanie nie jest już tak trywialne.

Jedną z metod poszukiwania minimum funkcji jest **metoda symulowanego wyżarzania** (jedna z metod typu Monte Carlo [*]). Jest to technika probabilistyczna przybliżająca minima lokalne funkcji (za pomocą prostej modyfikacji można wyznaczyć **minimum globalne**). Nazwa wzięła się od terminu stosowanego w metalurgii [1], ważnym czynnikiem jest temperatura (fizyczny odpowiednik parametru T). Metoda ta wykorzystuje tzw. wędrowców, którzy pokonują drogę do minimum w inny (niezależny) sposób od pozostałych, i ma niezbyt skomplikowaną implementację algorytmiczną, którą można zapisać w sposób opisany poniżej.

- 1) Ustalenie początkowych wartości T , liczby kroków k oraz liczby wędrowców N
- 2) Wybór punktu początkowego x_0 i nadanie tej wartości wszystkim wędrowcom oraz obliczenie wartości funkcji w tym punkcie $f(x_0)$
- 3) Wylosowanie pseudolosowej wartości przemieszczenia Δx_i
- 4) Niech:

$$h_i = f(x_i + \Delta x_i) - f(x_i), \quad (1)$$

jeżeli spełniony jest warunek:

$$h_i \leq 0, \quad (2)$$

to nowe położenie jest akceptowane (z prawdopodobieństwem $P = 1$), tzn.:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x_i. \quad (3)$$

* Metoda probabilistyczna stosowana w modelowaniu matematycznym trudnych procesów i zjawisk. Opiera się na losowym wyborze liczb. W praktyce w tym celu używa się generatorów liczb pseudolosowych, a ponieważ liczby te nie są idealnie losowe oraz w danym cyklu jest ich skończona liczba, to metodę tę stosuje się tam, gdzie oczekiwane są szybkie rezultaty (kosztem dokładności). Wyniki zależą także od liczby sprawdzeń.

W przeciwnym wypadku nowe położenie jest akceptowane zgodnie z prawdopodobieństwem:

$$P = e^{-\frac{h_i}{T}} [*], \quad (4)$$

gdy spełniona jest nierówność:

$$Rand(0, 1) < P. \quad (5)$$

Oznaczenia:

$Rand(0, 1)$ – pseudolosowa liczba z przedziału $[0, 1]$

5) Co k kroków wyznacza się nową temperaturę jako:

$$T_n = T \cdot c, \quad c \in [0, 1] \\ T = T_n \quad (6)$$

Tabela 1. Schemat **metody wyżarzania**.

Uwaga: punkt, podobnie jak przyrost, może być wielowymiarowy (schemat jest uniwersalny):

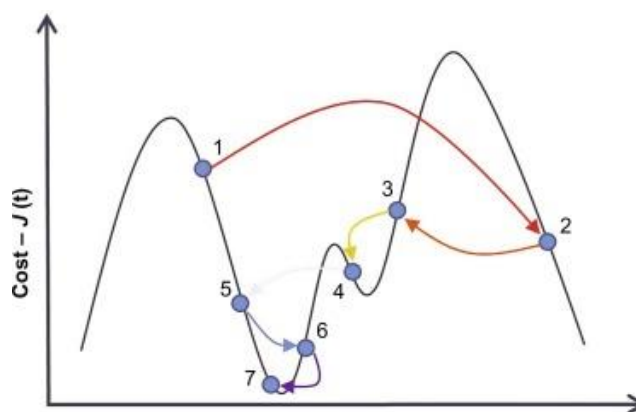
$$x_i = (x_1, x_2, \dots, x_D). \quad (7)$$

Oznaczenia:

D – wymiar – liczba zmiennych, od której zależy funkcja

Kroki 2 – 5 są przeprowadzane k razy dla każdego wędrowca, więc mogą zostać zrównoleżone (wynika to z ich niezależności od siebie). W praktyce stosuje się iteracje - 3 pętle (zaczynając od najbardziej zewnętrznej) na temperaturę, liczbę kroków i wreszcie N wędrowców.

Zobrazowanie tej metody znajduje się na rysunku 1, gdzie przedstawione są kolejne przemieszczenia wędrowca.

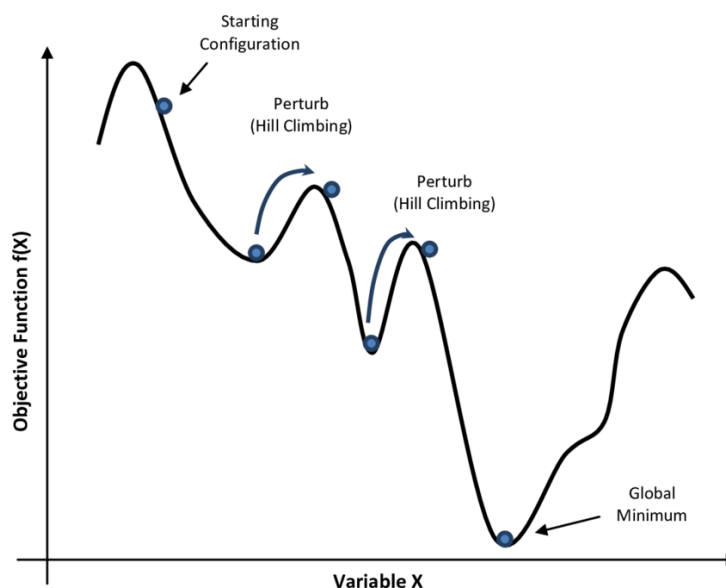


Rysunek 1. Schemat **metody wyżarzania** [2].

Gdy temperatura jest duża, wędrowcy mają tendencję do większych przemieszczeń (im większe T , tym P bliższe wartości 1). Z czasem, gdy staje się niższa, to wędrowcy skupiają się wokół minimum (niekoniecznie globalnych – ono jest wybierane na samym końcu działania algorytmu). Nie zawsze funkcja jest gładka – gdy jest mocniej „poszarpana” (większe oscylacje wartości na niewielkim przedziale), może się wydawać, że punkty będą się osadzać wyłącznie wokół najbliższego minimum lokalnego, jednak punkt 4) algorytmu zabezpiecza przed taką sytuacją. Wybierany jest punkt stosunkowo gorszy (z pewnym prawdopodobieństwem opisanym przez rozkład Boltzmanna), jednak może on prowadzić do następnego minimum – a

* Taki zapis przedstawia rozkład Boltzmanna. Co prawda w mianowniku powinna znajdować się jeszcze stała Boltzmanna k_B , jednak, ze względu na jej rząd (10^{-23}), została pominięta.

to jest cel ów metody. Taka sytuacja jest zilustrowana na rysunku 2. Gdyby temperatura nie stawała się niższa, wędrowcy błędziliby nie mogąc znaleźć minimum. Wynika to z fizyki, bowiem niższa temperatura odpowiada za niższe stany energii, przez co łatwiej jest wędrowcom zlokalizować minima lokalne [2].



Rysunek 2. Przykład **metody wyżarzania** dla bardziej „górzystej funkcji” – kolejne położenia dla wędrowca. Wysoka temperatura pozwala na „wspinanie się po wzgórkach” funkcji [3].

Ustalenie liczby wędrowców w pierwszym punkcie metody jest ważnym krokiem, ponieważ to od niej zależy znalezione rozwiązanie (wynika to z natury metod probabilistycznych), im większa, tym większe prawdopodobieństwo znalezienia ekstremum.

Ciekawostką jest fakt, iż algorytm ten jest wykorzystywany przy problemie komiwojażera (w uproszczeniu: poszukiwanie najkrótszej ścieżki przechodzącej przez zbiór punktów tylko raz).

2. Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Naszym zadaniem było znalezienie minimum globalnego funkcji:

$$f(x) = \sin(x) \cdot \sin(y) - e^{-\left(x+\frac{\pi}{2}\right)^2 - \left(y-\frac{\pi}{2}\right)^2}, \quad (8)$$

metodą **symulowanego wyżarzania** ze zmienną temperaturą.

Wzór (6) z algorytmu (patrz: tabela 1) został zastąpiony przez (istnieje wiele metod chłodzenia, np. liniowe jak we wzorze z algorytmu, kwadratowe):

$$T_i = \frac{10}{2^{i_T}}. \quad (9)$$

Oznaczenia:
 $i_T = 0, \dots, 20$ – zmienna sterująca pętlą po temperaturze

W treści zostały podane następujące parametry:

$x_{min} = y_{min} = -10$	początek przedziału
$x_{max} = y_{max} = 10$	koniec przedziału
$k = 100$	maksymalna liczba kroków
$N = 200$	liczba użytych wędrówców

Tabela 2. Parametry podane w treści zadania.

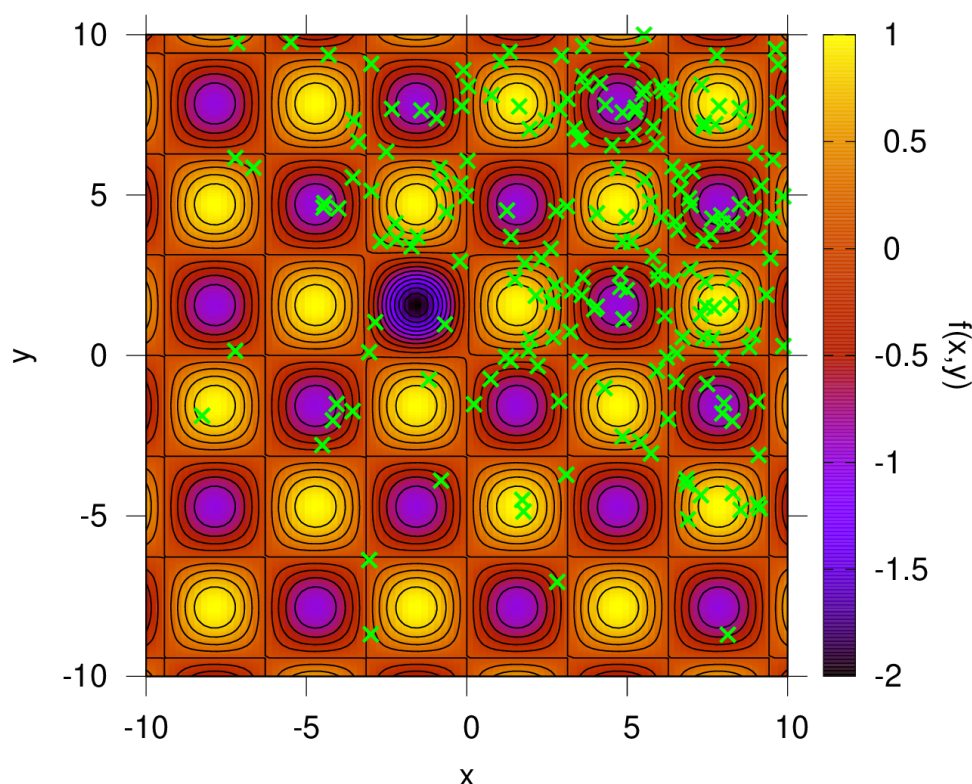
Do wygenerowania pseudolosowych liczb potrzebna była specjalna funkcja skalująca od razu liczby na odpowiedni zakres. Liczby te, z zakresu $[-1, 1]$, stanowiły przyrost, a więc przemieszczenie wędrówców. Dodatkowo, ponieważ poszukiwania zostały zawężone do konkretnego przedziału, każdy przyrost był sprawdzany tak, aby nie wyjść poza zakres, tzn.:

$$\begin{aligned} x_{min} &\leq x_i + \Delta x_i \leq x_{max} , \\ y_{min} &\leq y_i + \Delta y_i \leq y_{max} . \end{aligned} \quad (10)$$

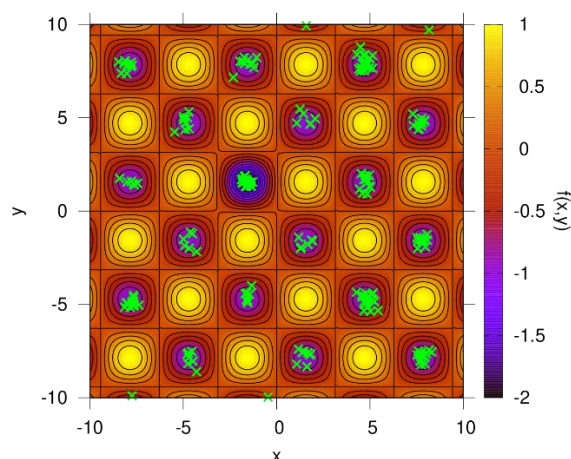
Łącznie wykonanych zostało $21 \cdot 100 \cdot 200$ iteracji (kolejno: temperatura, kroki, liczba użytych wędrówców).

2.2 Wyniki

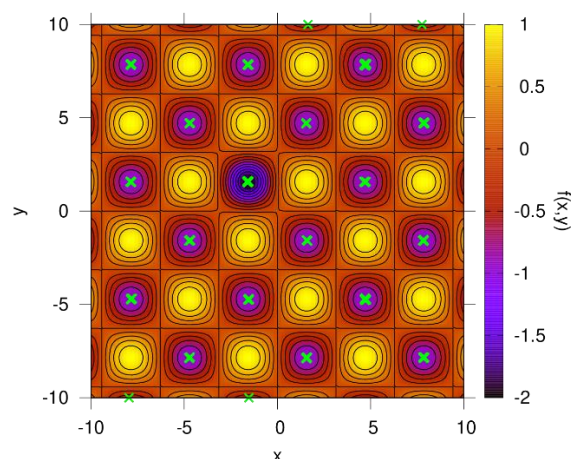
Po zapisaniu położeń wszystkich wędrówców do pliku (po odpowiednim schłodzeniu temperatury w pętach), specjalnie przygotowany skrypt pozwolił wygenerować wykresy za pomocą programu Gnuplot.



Rysunek 3. Położenia wędrówców (zaznaczone zielonymi x) przed pierwszą iteracją temperatury.

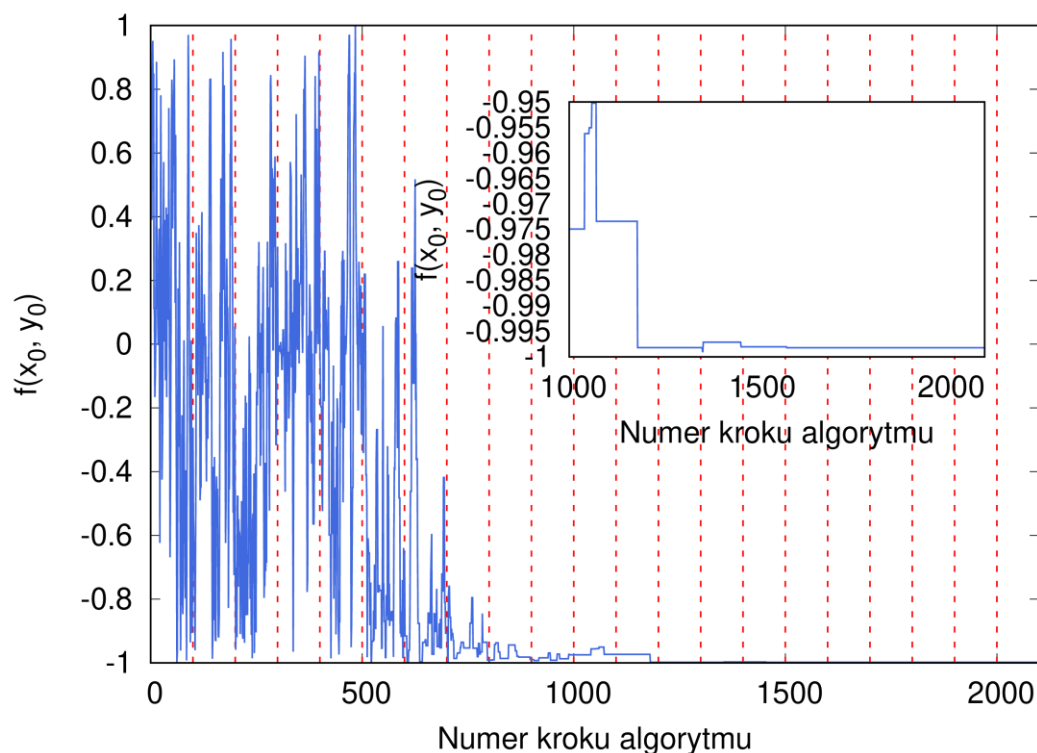


Rysunek 4. Położenia wędrówców (zaznaczone zielonymi iksami) po 7. iteracji temperatury.



Rysunek 5. Położenia wędrówców (zaznaczone zielonymi iksami) po 20. iteracji temperatury.

Ponadto dla pierwszego wędrówcy zapisano kolejne wartości funkcji w celu prześledzenia jego zachowania (rys. 6).



Rysunek 6. Wartość funkcji dla położenia pierwszego wędrówcy. Wstawiony wykres to zbliżenie na dalsze kroki. Na czerwono przerywanymi liniami oznaczono kolejne kroki (co 100).

Program został wyposażony w proste wyszukiwanie najmniejszej wartości funkcji dla finalnych położenia wędrówców, a znalezione minimum globalne to:

$$f(-1.57338, 1.5641) = 1.99992. \quad (11)$$

3. Wnioski

- Optymalizacja polega na znalezieniu ekstremów funkcji – największych lub najmniejszych wartości w całej dziedzinie (lub na zwężonym przedziale).

- Metoda symulowanego wyżarzania jest metodą stochastyczną – opartą na losowym (probabilistycznym) przemieszczaniu się wędrowców, dlatego każde wywołanie takiej metody daje nieco inne wyniki.
- Parametr T – fizyczny odpowiednik to temperatura – odpowiada za zdolność przemieszczania się wędrowców i trafność wyboru minimów. Im wyższa, tym łatwiejsze przemieszczanie się, lecz trudniejsze zlokalizowanie minimów; im niższa, tym lepsze rozpoznawanie i skupianie się wokół nich.
- Oprócz samego T , algorytm ten opiera się także na liczbie kroków (im większa, tym lepszy rezultat, jednak zajmuje to więcej czasu i operacji), a także na liczbie wędrowców (mała liczba nie ma dużego prawdopodobieństwa na zlokalizowanie ekstremum, dlatego wywołanie implementacji tej metody dla $N = 1$ wędrowca byłoby ryzykowne – znikome szanse na otrzymanie satysfakcjonującego rezultatu zgodnego z oczekiwaniami analitycznymi).
- Analiza wykresów (rys. 3 – 5) potwierdza wpływ czynnika, jakim jest temperatura T . Na początku (wysoka temperatura) wędrowcy przemieszczają się z mniejszą lub większą świadomością czy gromadzą się blisko minimów. Po siedmiokrotnym obniżeniu temperatury, wędrowcy ominęli lokalizacje o wyższych wartościach i zaczęli skutecznie wykrywać obszary o małych wartościach. Po ostatniej – dwudziestej – iteracji temperatury, wędrowcy znajdują się już bardzo blisko punktów – minimów lokalnych.
- Dla pierwszego wędrowca zapisano wartości funkcji w zależności od kroku iteracji. Rysunek 6 ilustruje jego zachowanie. Już po 700 krokach trafnie lokalizuje minimum lokalne. W dalszych próbuje już zwiększyć swoją dokładność, co szczegółowo przedstawia wstawiony wykres. Zlokalizowane minimum nie jest jednak globalne. Fakt ten potwierdza istotę parametru T .
- Dodatkowo można zaobserwować fakt, że mechanizm sprawdzania wyjścia poza zakres działa prawidłowo. Na rys. 5 widać, że wędrowcy mogli by wyjść poza „teren poszukiwań”, próbując odnaleźć kolejne ekstrema lokalne, jednak zostają na granicach zadanego obszaru.
- Ostatnim krokiem jest znalezienie wędrowca, którego położenie da najmniejszą wartość funkcji. Wynik (patrz: wzór (11)) zgadza się z analitycznym, bowiem minimum globalne stanowi punkt $\left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$, dla którego wartość funkcji wynosi -2 , zatem otrzymany rezultat jest bardzo bliski wartości teoretycznej (różnica rzędu piątego miejsca po przecinku), a co najważniejsze – jest do zaakceptowania. Świadczy to o poprawnej implementacji przedstawionego algorytmu.

4. Bibliografia

¹ źródło: https://en.wikipedia.org/wiki/Simulated_annealing [data dostępu: 18 maja 2020]

² źródło: <https://www.sciencedirect.com/topics/materials-science/simulated-annealing> [data dostępu: 18 maja 2020]

³ źródło: https://www.researchgate.net/figure/Simulated-Annealing-optimization-of-a-one-dimensional-objective-function_fig1_308786233 [data dostępu 18 maja 2020]