Porównanie działania wybranych algorytmów minimalizacji stochastycznej

Kacper Feliks, Maciej Wiśniewski

28-01-2025

Cel projektu

Projekt polega na prostym opracowaniu statystycznym wyników porównania działania wybranych algorytmów minimalizacji stochastycznej. Zdecydowaliśmy się do porównania użyć następujących algorytmów:

- Poszukiwanie przypadkowe (Pure Random Search, PRS)

- Metoda wielokrotnego startu (multi-start, MS)

Opis algorytmów

Poszukiwanie przypadkowe (Pure Random Search, PRS)

Algorytm PRS polega na losowym przeszukiwaniu przestrzeni rozwiązań, w której minimalizowana funkcja jest zdefiniowana. Działa w następujący sposób:

1. **Losowanie punktów**: Losujemy kolejne punkty w przestrzeni poszukiwań z rozkładu jednostajnego. Jeżeli dziedzina poszukiwań jest kostką wielowymiarową, to każdą współrzędną punktu losujemy z odpowiedniego jednowymiarowego rozkładu jednostajnego.
   Na przykład, jeśli dziedzina poszukiwań to kostka trójwymiarowa $[0, 1] \times [-2, 2] \times [100, 1000]$, losowanie współrzędnych wygląda następująco:
   - pierwsza współrzędna: $U(0, 1)$,
   - druga współrzędna: $U(-2, 2)$,
   - trzecia współrzędna: $U(100, 1000)$.
2. **Porównanie wartości funkcji**: Wartość funkcji w każdym wylosowanym punkcie porównujemy z aktualnie zapamiętanym minimum. Jeśli wartość funkcji w nowym punkcie jest mniejsza, zapamiętujemy ten punkt jako nowe minimum.
3. **Wynik**: Wartość funkcji w ostatnim zapamiętanym punkcie stanowi wynik algorytmu.

Metoda wielokrotnego startu (Multi-Start, MS)

Algorytm MS łączy losowe przeszukiwanie przestrzeni z metodami optymalizacji lokalnej. Jego kroki są następujące:

1. **Losowanie punktów**: Podobnie jak w PRS, losujemy zadany zbiór punktów startowych z rozkładu jednostajnego w przestrzeni poszukiwań.
2. **Uruchomienie optymalizacji lokalnej**: Dla każdego wylosowanego punktu startowego uruchamiana jest metoda optymalizacji lokalnej .
3. **Porównanie wyników**: Dla każdego startu zapisujemy wartość funkcji w zwróconym punkcie lokalnego minimum. Wynikiem algorytmu jest minimalna wartość funkcji spośród wszystkich punktów końcowych.

Do porównania należało wybrać dwie z funkcji dostępnych w pakiecie `smoof`, które są skalarne (single-objective) i mają wersje dla różnej liczby wymiarów (akceptują parametr `dimensions`).

W celu sprawdzenia dostępnych algorytmów wykonaliśmy następujący algorytm, który znajdywał dostępne funckje o wymaganych parametrach:

```r
library(smoof)

scalar_dimensional_functions <- Filter(function(fn_name) {
  fn <- get(fn_name, envir = asNamespace('smoof'))
  is.function(fn) &&
  'dimensions' %in% names(formals(fn)) &&
  inherits(try(fn(2), silent = TRUE), 'smoof_function') &&
  getNumberOfObjectives(fn(2)) == 1
}, ls('package:smoof'))

print(scalar_dimensional_functions)
```

Do porównania wybraliśmy dwie funckje:

- Griewank
- Schwefel

Nasz wybór padł dokładnie na te funkcję ze względu na nich odmienność, trudność w optymalizacji oraz niebanalną impelmentację.

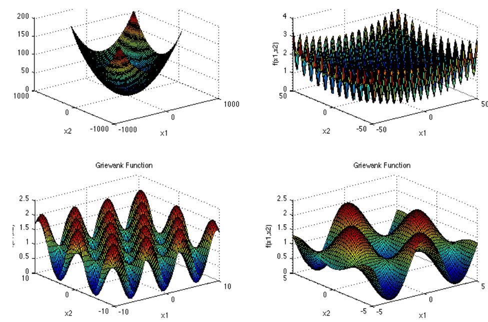
Funkcja Griewanka

Funkcja Griewanka ma wiele szeroko rozpowszechnionych minimów lokalnych, które są regularnie dystrybuowane. Wzór funkcji:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{d} \frac{x_i^2}{4000} - \prod_{i=1}^{d} \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right) + 1$$

gdzie przez d rozumiemy ilość wymiarów. Funkcja jest zazwyczaj definiowa na hiperszcześcianach $x_i \in [-600, 600]$, dla każdego $i = 1, \ldots, d$.

Minimum globalne $f(\mathbf{x}^*) = 0, \quad$ dla $\mathbf{x}^* = (0, \ldots, 0)$



Wizualizacja funkcji Griewanka w 3D

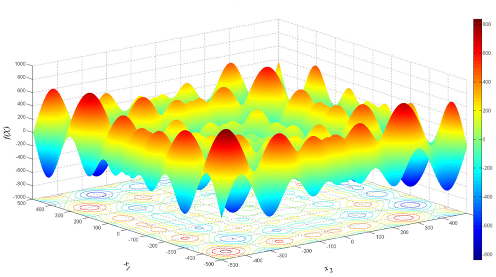
Funkcja Schwefela

Funckaj Schwefela jest złożoną funkcją, posiadającą wiele minimów lokalnych. Wzór funkcji:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} -x_i \sin\left(\sqrt{|x_i|}\right)$$

gdzie przez d rozumiemy ilość wymiarów. Funkcja jest zazwyczaj definiowa na hiperszcześcianach $x_i \in [-500, 500]$, dla każdego $i = 1, \ldots, d$.

Minimum globalne $f(\mathbf{x}^*) = 418.9829 * d, \quad$ dla $\mathbf{x}^* = (420.9687, \ldots, 420.9687)$



Reprezentacja funkcji Schwefela w przestrzeni 3D

Specyfikacja sprzętu

Obliczenia i testy zostały wykonane na komputerze o następujące specyfikacji:

- system Windows 10
- procesor Intel Core i7-6700HQ 2.60 GHz.
- pamięć Ram 16Gb

WYNIKI

Funkcja Griewanka 2D

Miara	**MS**	**PRS**
Średnia	0.6055442	0.6434122
Wartość najmniejsza	0.007396	0.0373963
Wartość największa	4.4481658	1.7034647
Mediana	0.3253765	0.6161477
Dolny kwartyl (25%)	0.1257573	0.4292943
Górny kwartyl (75%)	0.8310025	0.8541051

Funkcja Griewanka 10D

Miara	**MS**	**PRS**
Średnia	$5.3433198 \times 10^{-11}$	51.7091663
Wartość najmniejsza	$1.3820056 \times 10^{-12}$	12.0229676
Wartość największa	$2.1964297 \times 10^{-10}$	83.9943267
Mediana	$4.1341264 \times 10^{-11}$	51.6668436
Dolny kwartyl (25%)	$2.7560176 \times 10^{-11}$	43.7718444
Górny kwartyl (75%)	$7.4529827 \times 10^{-11}$	61.4505366

Funkcja Griewanka 20D

Miara	**MS**	**PRS**
Średnia	$8.1357054 \times 10^{-11}$	222.7744787
Wartość najmniejsza	$1.3866686 \times 10^{-13}$	138.0348086
Wartość największa	$1.7841773 \times 10^{-10}$	271.2005696
Mediana	$7.5553341 \times 10^{-11}$	223.940142
Dolny kwartyl (25%)	$5.6181226 \times 10^{-11}$	207.9649149
Górny kwartyl (75%)	$1.0998349 \times 10^{-10}$	239.8048899

Funkcja Schwefela 2D

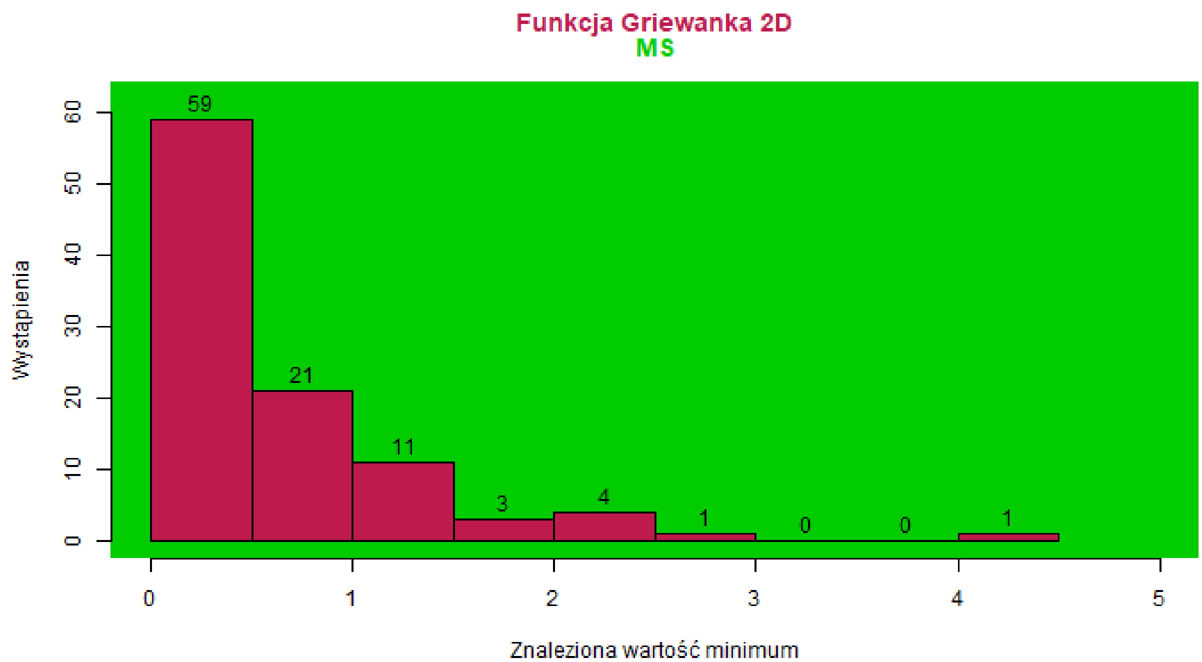
Miara	MS	PRS
Średnia	-836.7813912	-797.1918759
Wartość najmniejsza	-837.9657745	-836.5685042
Wartość największa	-719.5274399	-643.5621982
Mediana	-837.9657745	-804.2280449
Dolny kwartyl (25%)	-837.9657745	-823.5638115
Górny kwartyl (75%)	-837.9657745	-781.6197479

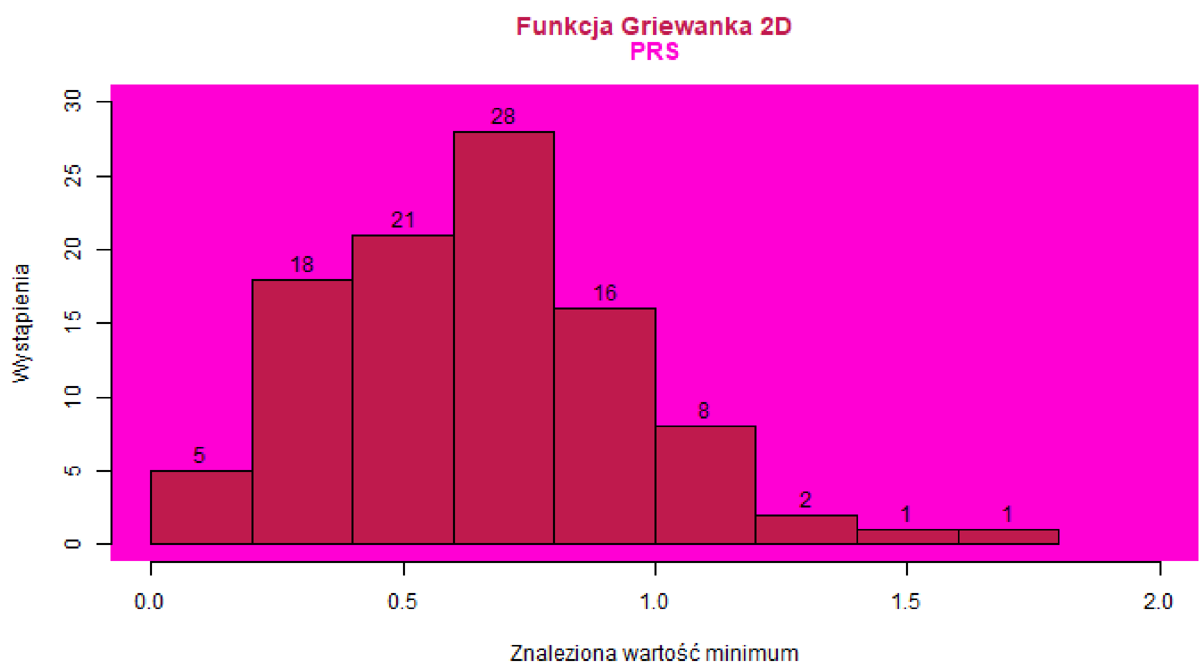
Funkcja Schwefela 10D

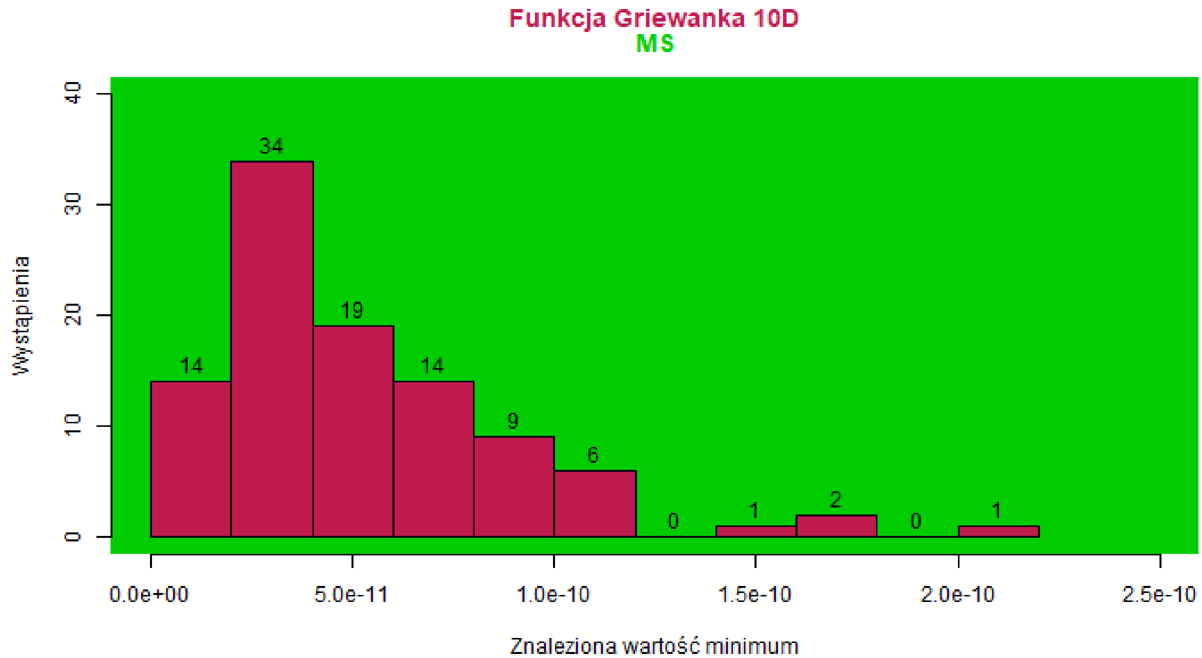
Miara	MS	PRS
Średnia	-3262.1275223	-1990.2290063
Wartość najmniejsza	-3716.0755343	-2648.5365291
Wartość największa	-2923.4470726	-1671.7495182
Mediana	-3259.0250766	-1977.0998535
Dolny kwartyl (25%)	-3378.9804707	-2101.5557137
Górny kwartyl (75%)	-3142.8476519	-1880.3428427

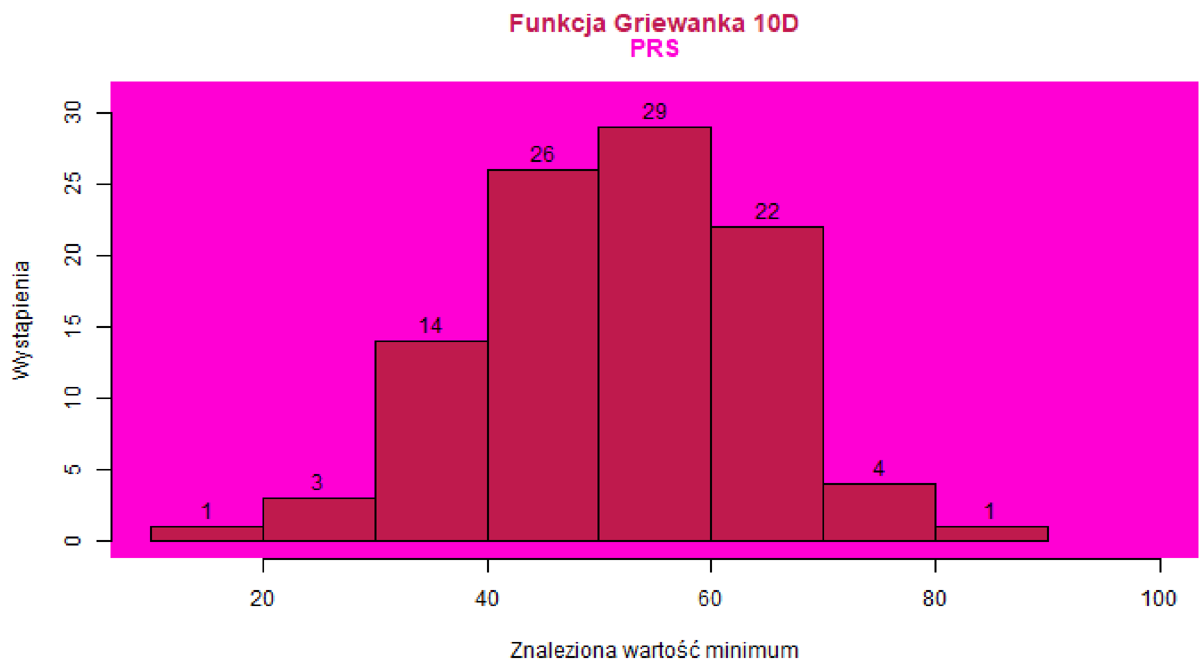
Funkcja Schwefela 20D

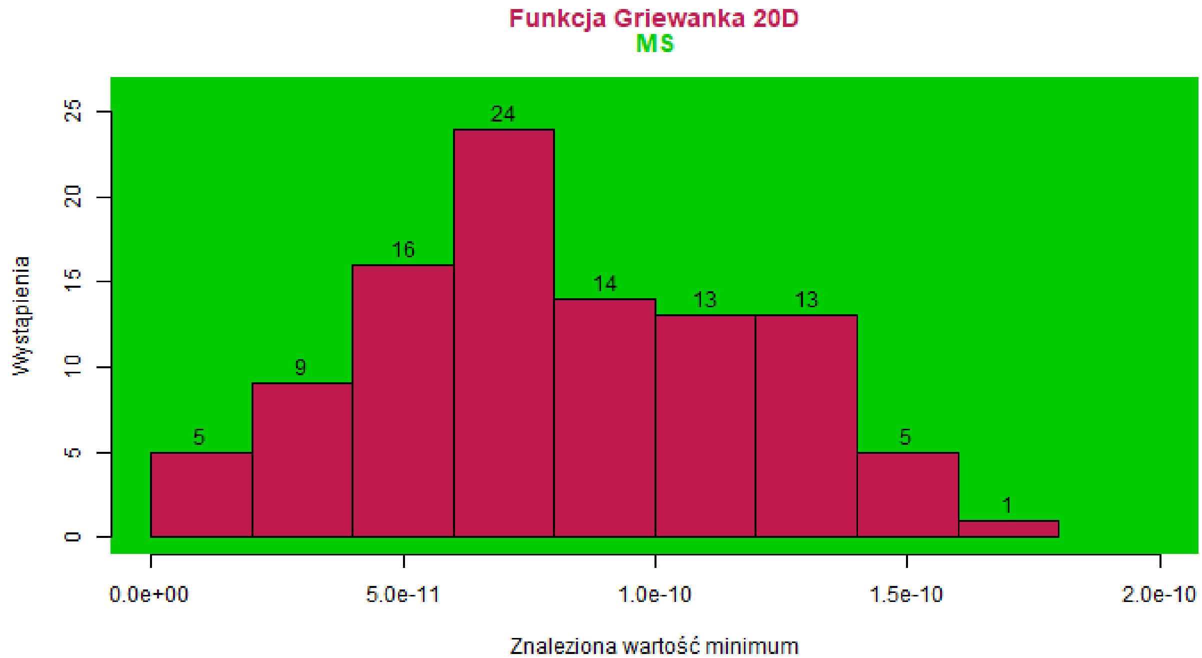
Miara	MS	PRS
Średnia	-5930.2842622	-2871.2092706
Wartość najmniejsza	-6721.5020158	-3883.630182
Wartość największa	-5415.4216596	-2404.6476755
Mediana	-5927.3537852	-2845.6522752
Dolny kwartyl (25%)	-6073.1127276	-3018.7275952
Górny kwartyl (75%)	-5732.1016643	-2683.1582378

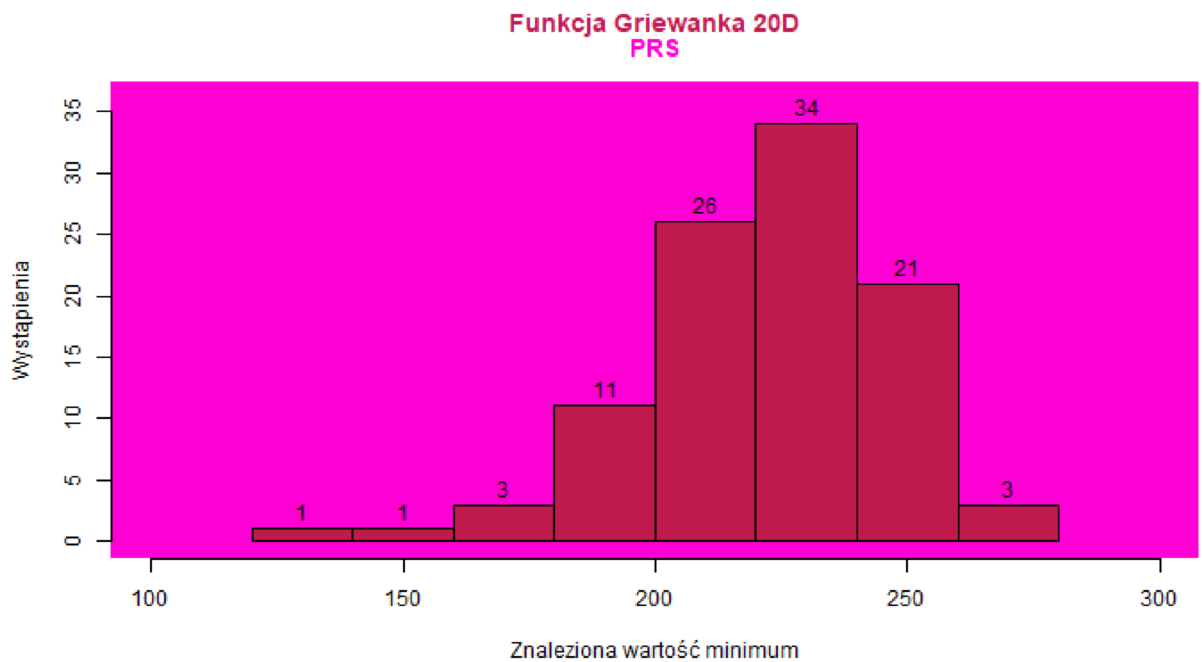

Funkcja Griewanka 2D
MS
Wystąpienia
Znaleziona wartość minimum

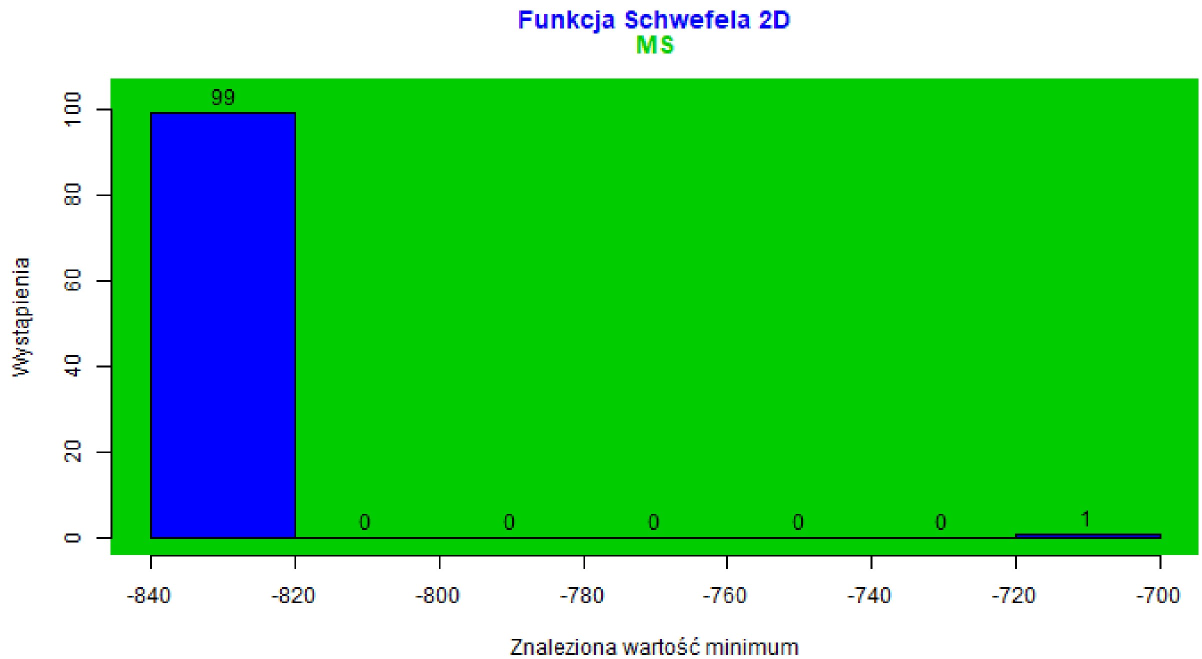

Funkcja Griewanka 2D
PRS
Wystąpienia
Znaleziona wartość minimum

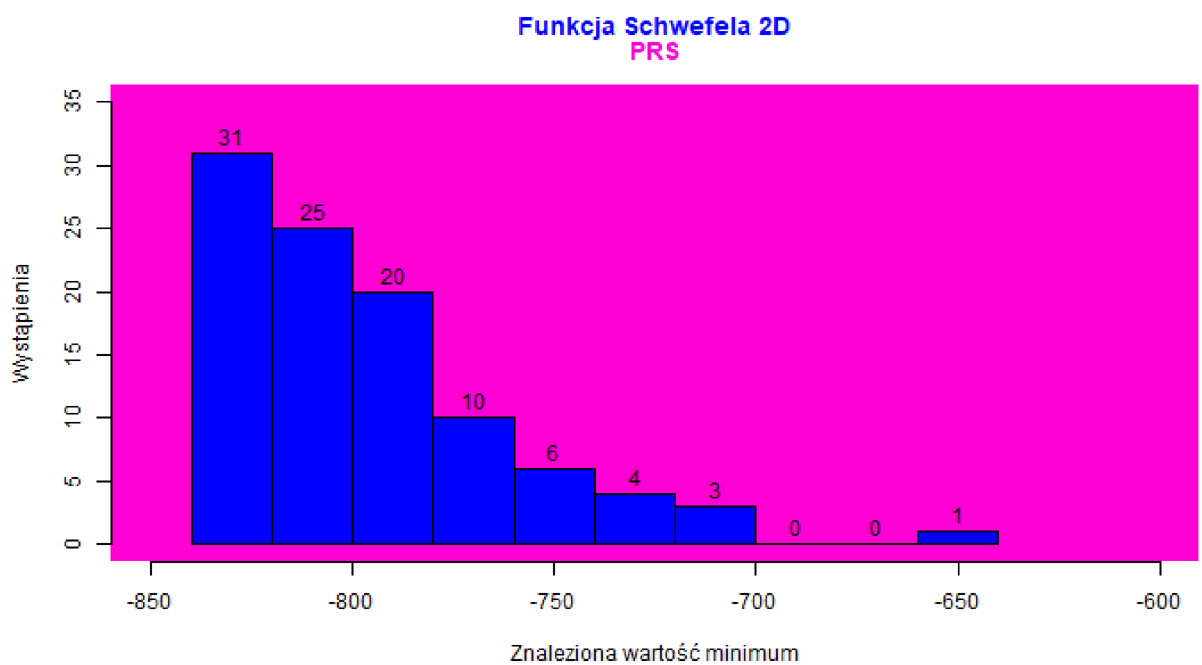

Funkcja Griewanka 10D
MS
Wystąpienia
0
10
20
30
40
14
34
19
14
9
6
0
1
2
0
1
0.0e+00
5.0e-11
1.0e-10
1.5e-10
2.0e-10
2.5e-10
Znaleziona wartość minimum

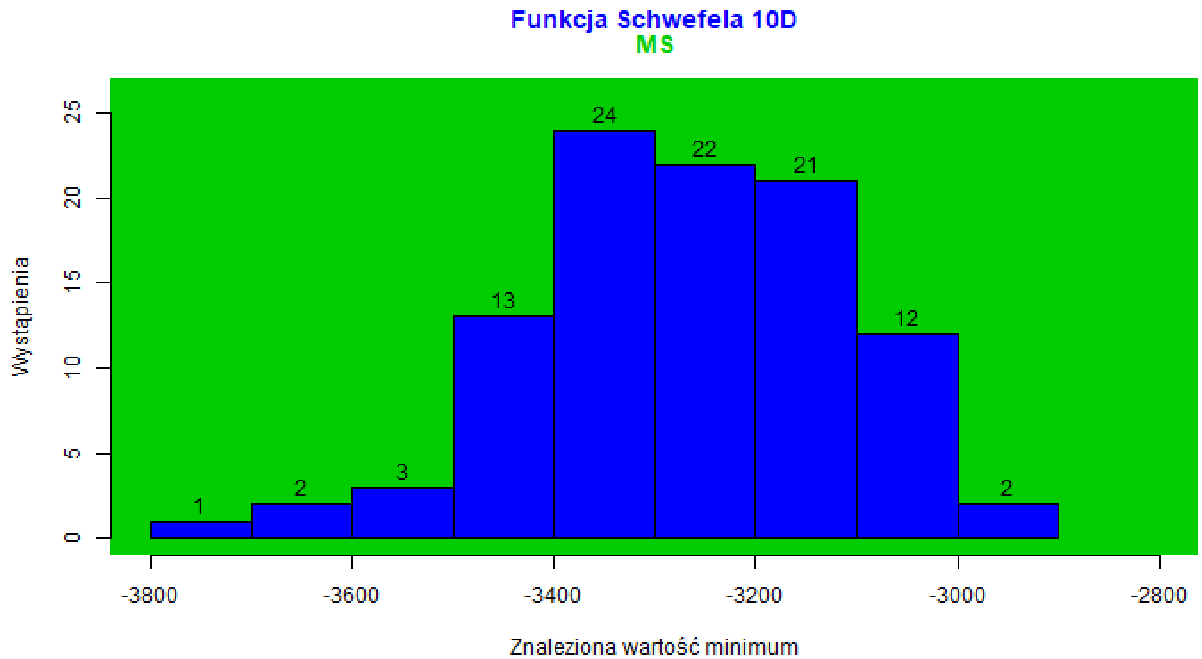

Funkcja Griewanka 10D
PRS
Wystąpienia
0
5
10
15
20
25
30
1
3
14
26
29
22
4
1
20
40
60
80
100
Znaleziona wartość minimum


Funkcja Griewanka 20D
MS
Wystąpienia
0
5
10
15
20
25
5
9
16
24
14
13
13
5
1
0.0e+00
5.0e-11
1.0e-10
1.5e-10
2.0e-10
Znaleziona wartość minimum

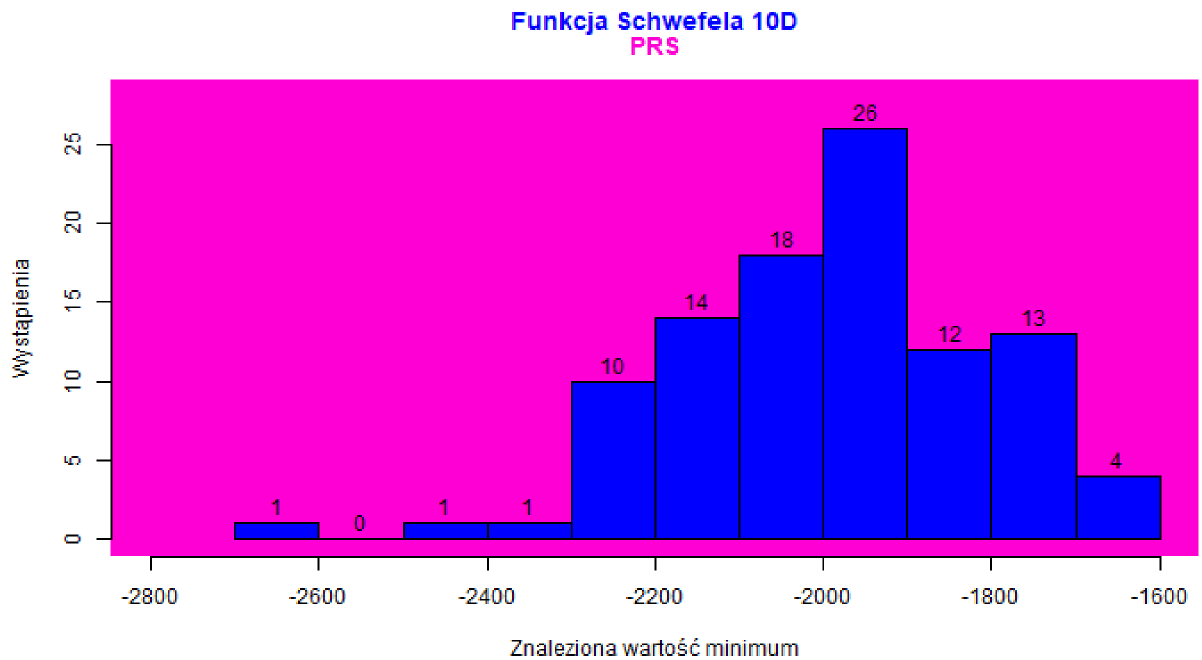

Funkcja Griewanka 20D
PRS
Wystąpienia
0
5
10
15
20
25
30
35
1
1
3
11
26
34
21
3
100
150
200
250
300
Znaleziona wartość minimum


Funkcja Schwefela 2D
MS
Wystąpienia
Znaleziona wartość minimum
99
0
0
0
0
0
1
-840
-820
-800
-780
-760
-740
-720
-700
0
20
40
60
80
100

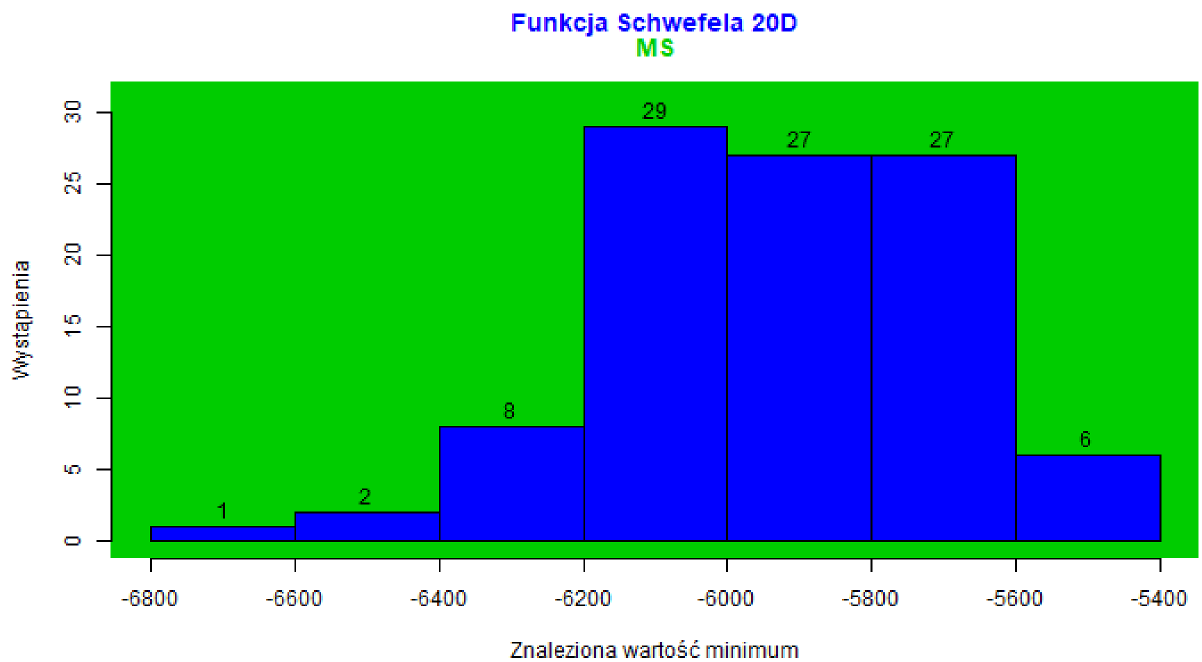

Funkcja Schwefela 2D
PRS
Wystąpienia
Znaleziona wartość minimum
31
25
20
10
6
4
3
0
0
1
-850
-800
-750
-700
-650
-600
0
5
10
15
20
25
30
35

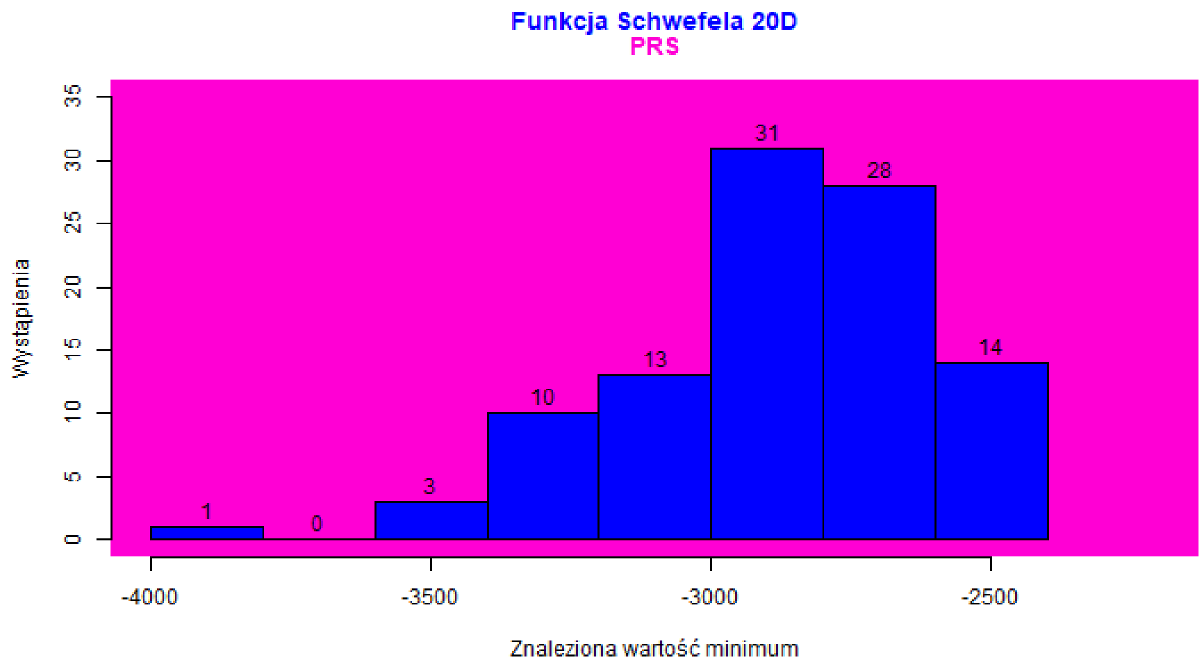


Funkcja Schwefela 10D
MS
Wystąpienia
Znaleziona wartość minimum
-3800
-3600
-3400
-3200
-3000
-2800
0
5
10
15
20
25
1
2
3
13
24
22
21
12
2

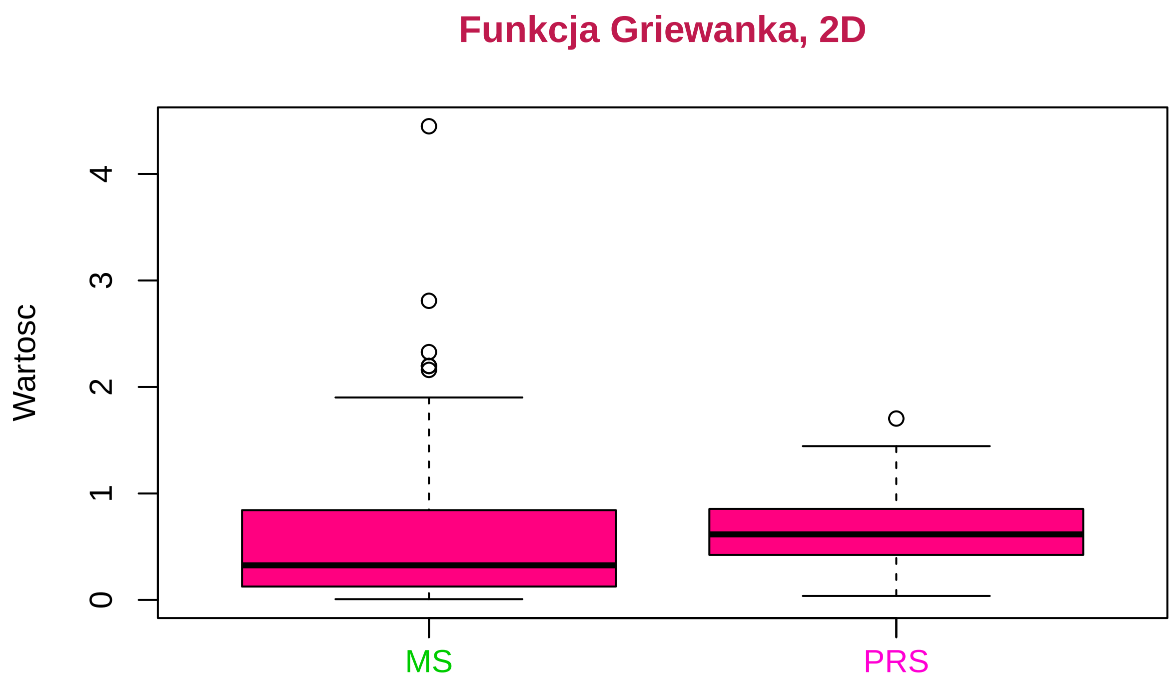


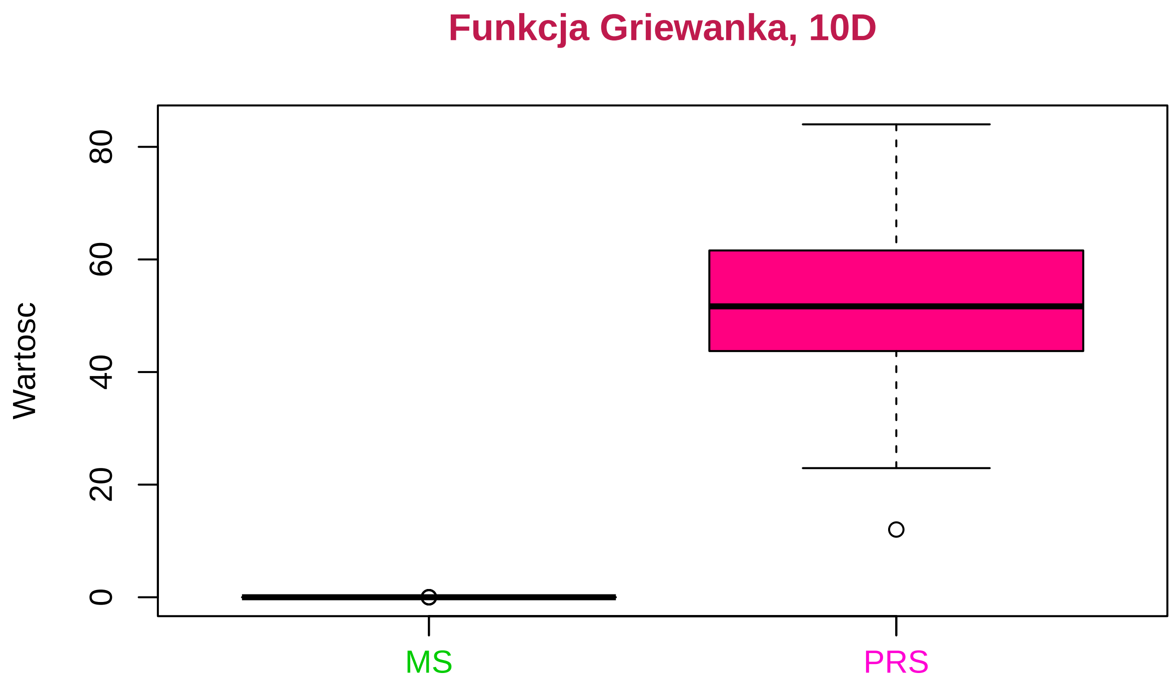
Funkcja Schwefela 10D
PRS
Wystąpienia
Znaleziona wartość minimum
-2800
-2600
-2400
-2200
-2000
-1800
-1600
0
5
10
15
20
25
1
0
1
1
10
14
18
26
12
13
4


Funkcja Schwefela 20D
MS
Wystąpienia
0
5
10
15
20
25
30
1
2
8
29
27
27
6
-6800
-6600
-6400
-6200
-6000
-5800
-5600
-5400
Znaleziona wartość minimum

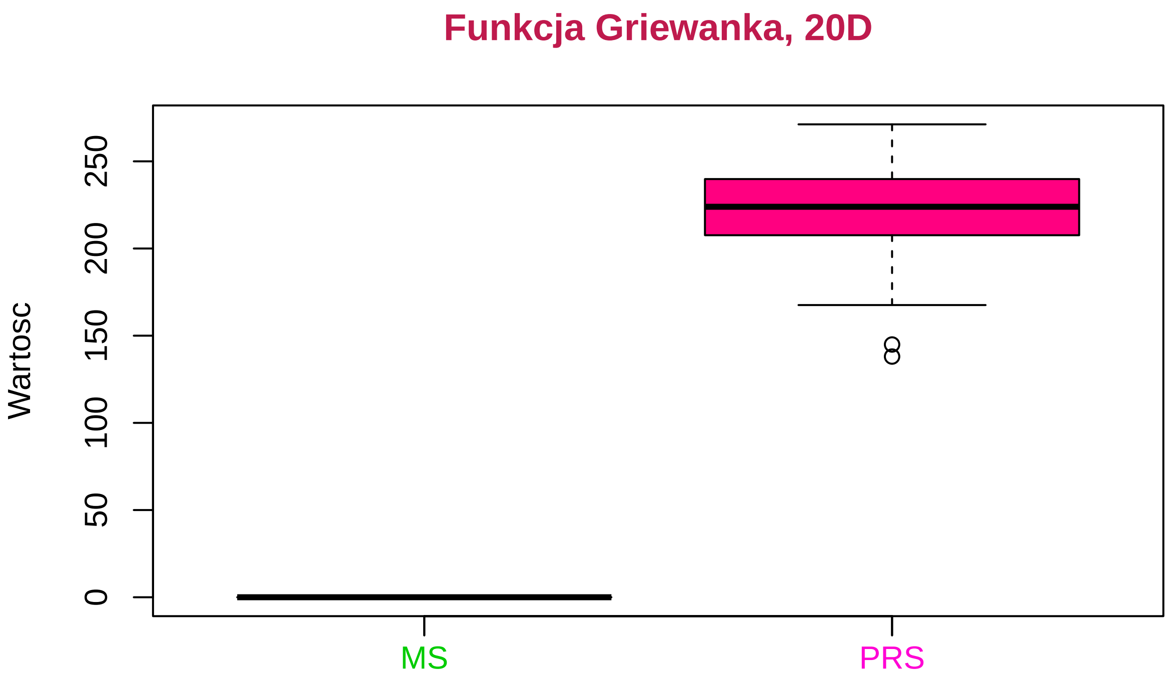

Funkcja Schwefela 20D
PRS
Wystąpienia
0
5
10
15
20
25
30
35
1
0
3
10
13
31
28
14
-4000
-3500
-3000
-2500
Znaleziona wartość minimum

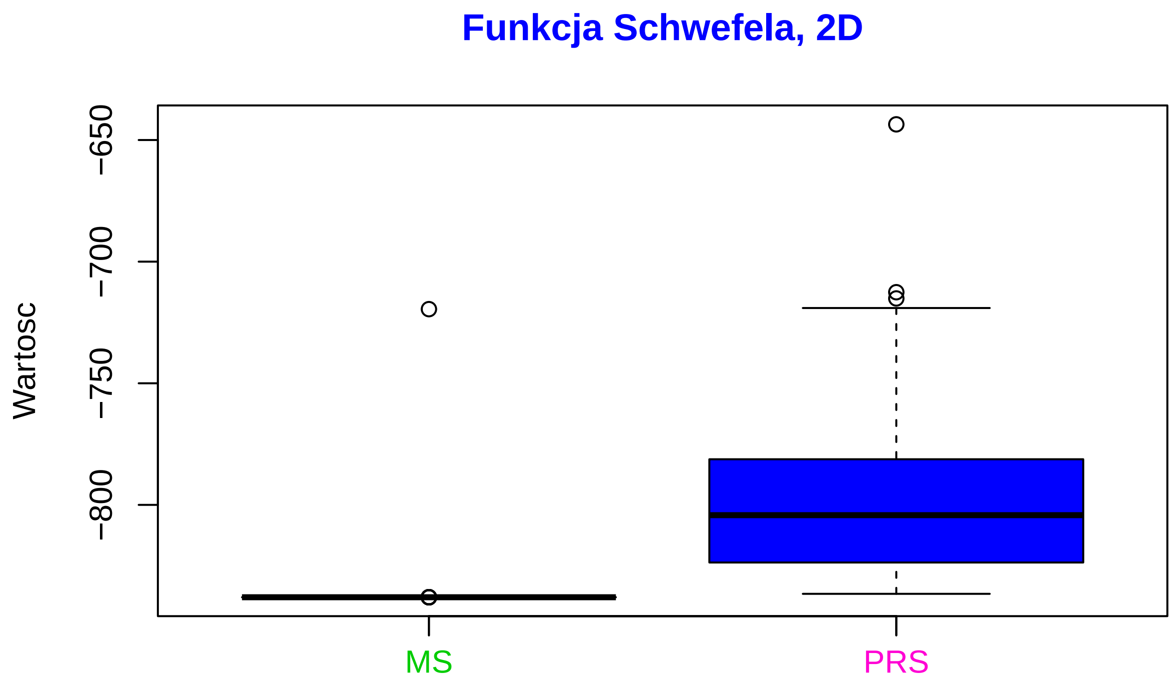
Wykresy pudełkowe

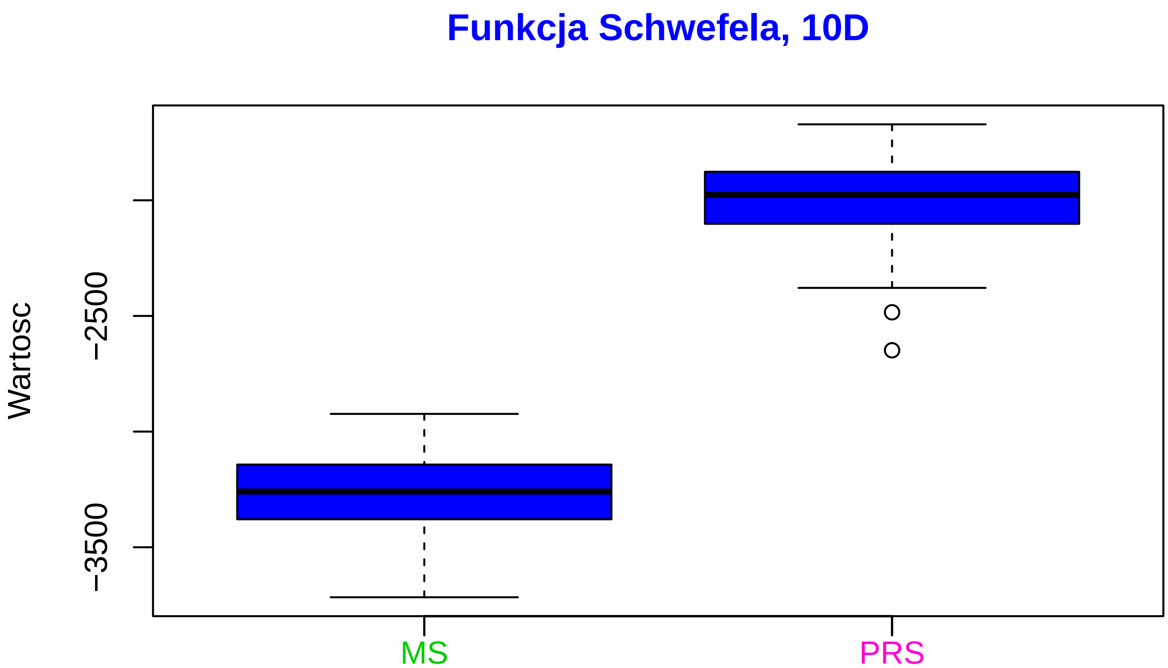




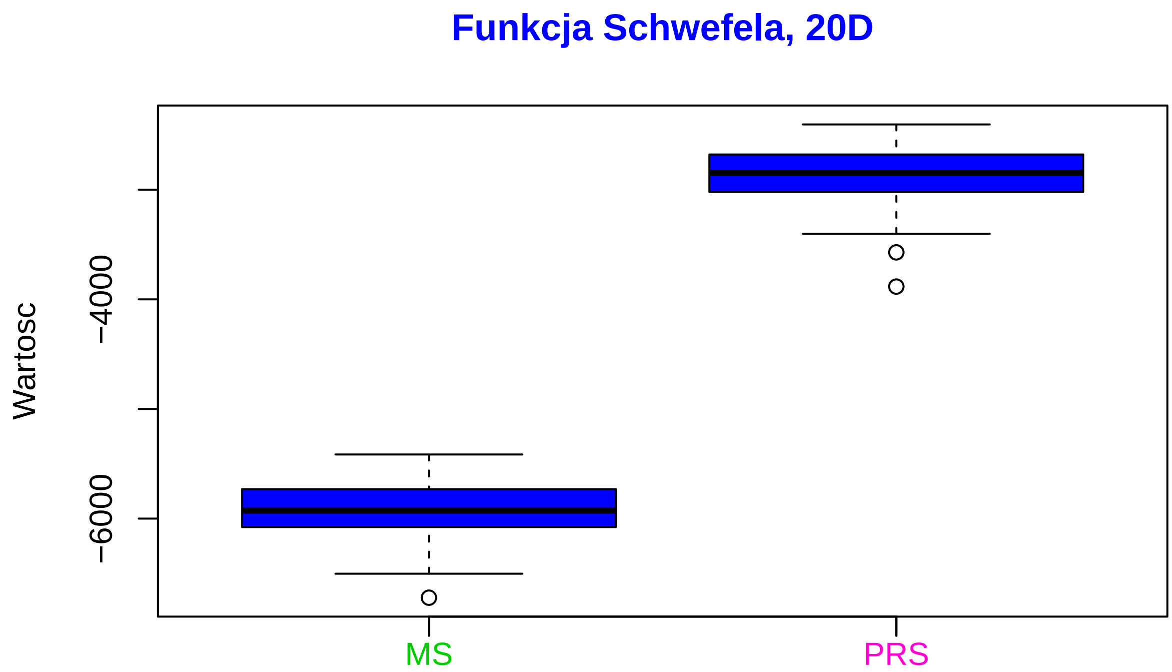
Funkcja Griewanka, 10D
Wartosc
0
20
40
60
80
MS
PRS


Funkcja Griewanka, 20D
Wartosc
0
50
100
150
200
250
MS
PRS


Funkcja Schwefela, 2D
Wartosc
−650
−700
−750
−800
MS
PRS



Funkcja Schwefela, 10D
Wartosc
−2500
−3500
MS
PRS


Funkcja Schwefela, 20D
Wartosc
−4000
−6000
MS
PRS

T testy

Dla hipotezy zerowej twierdzącej, że średnie są sobie równe

Funkcja Griewanka, 2D

```
##
##  Paired t-test
##
## data:  G2PRS and G2MS
## t = 0.51955, df = 99, p-value = 0.6045
## alternative hypothesis: true mean difference is not equal to 0
## 95 percent confidence interval:
##  -0.1067528  0.1824889
## sample estimates:
## mean difference
##      0.03786802
```

Funkcja Griewanka, 10D

```
##
##  Paired t-test
##
## data:  G10PRS and G10MS
## t = 40.75, df = 99, p-value < 2.2e-16
## alternative hypothesis: true mean difference is not equal to 0
## 95 percent confidence interval:
##  49.19135 54.22699
## sample estimates:
## mean difference
##        51.70917
```

Funkcja Griewanka, 20D

```
##
##  Paired t-test
##
## data:  G20PRS and G20MS
## t = 87.939, df = 99, p-value < 2.2e-16
## alternative hypothesis: true mean difference is not equal to 0
## 95 percent confidence interval:
##  217.7479 227.8011
## sample estimates:
## mean difference
##        222.7745
```

Funkcja Schwefela, 2D

```
##
##  Paired t-test
##
## data:  S2PRS and S2MS
## t = 10.624, df = 99, p-value < 2.2e-16
## alternative hypothesis: true mean difference is not equal to 0
## 95 percent confidence interval:
##  32.19550 46.98353
## sample estimates:
## mean difference
##        39.58952
```

Funkcja Schwefela, 10D

```
##
##  Paired t-test
##
## data:  S10PRS and S10MS
## t = 56.898, df = 99, p-value < 2.2e-16
## alternative hypothesis: true mean difference is not equal to 0
## 95 percent confidence interval:
##  1227.543 1316.254
## sample estimates:
## mean difference
##        1271.899
```

Funkcja Schwefela, 20D

```
##
##  Paired t-test
##
## data:  S20PRS and S20MS
## t = 91.343, df = 99, p-value < 2.2e-16
## alternative hypothesis: true mean difference is not equal to 0
## 95 percent confidence interval:
##  2992.623 3125.527
## sample estimates:
## mean difference
##        3059.075
```

Wnioski podsumowujące:

Funkcja Schwefela wykazuje większe różnice między algorytmami niż funkcja Griewanka. Dla funkcji Griewanka w 2D nie zaobserwowano istotnej różnicy między algorytmami, ale dla wyższych wymiarów (10D, 20D) MS osiąga znacząco lepsze wyniki niż PRS. W przypadku funkcji Schwefela, która charakteryzuje się trudnymi krajobrazami z wieloma lokalnymi minimami, metoda MS znacznie lepiej radzi sobie z eksplorowaniem przestrzeni poszukiwań i znajdowaniem głębszych minimów. Z kolei PRS wykazuje pewne trudności w bardziej złożonych przestrzeniach, co prowadzi do większych różnic w wynikach w wymiarach wyższych niż 2D.

W funkcji Schwefela dla 10D i 20D różnice między algorytmami stają się wyraźniejsze, ponieważ w tych wymiarach przestrzeń staje się bardziej złożona. Różnice w wynikach są statystycznie istotne, co wskazuje na większą efektywność MS w radzeniu sobie z trudnymi funkcjami optymalizacyjnymi w wyższych wymiarach. Wraz ze wzrostem liczby wymiarów, różnica między algorytmami staje się coraz bardziej wyraźna. Przewaga MS nad PRS rośnie wykładniczo wraz z wymiarowością. Testy statystyczne (t-test) oraz średnie różnice wskazują, że algorytmy różnią się w sposobie rozwiązywania problemu.