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:

```
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:

- Schwefel
- Griewank

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

Funkcja Schwefela

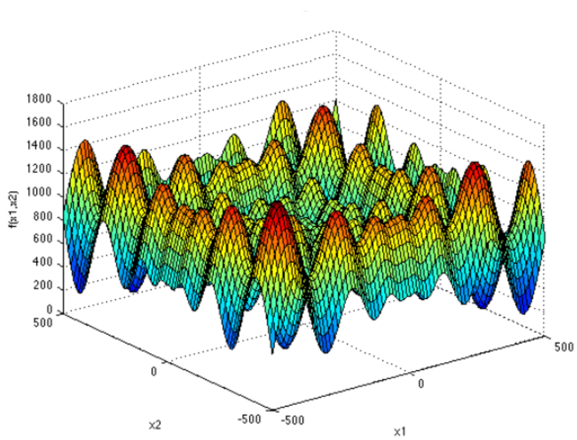
Funckaj Schwefela jest złożoną funkcją, posiadającą wiele minimów lokalnych.

$$f(\mathbf{x}) = 418.9829d - \sum_{i=1}^{d} x_i \sin(\sqrt{|x_i|})$$

Wzór funkcji Schwefela

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 $f(\mathbf{x}^*) = 0, \quad$ dla $\mathbf{x}^* = (420.9687, \ldots, 420.9687)$



Reprezentacja funckji w przestrzeni dwuwymiarowej

Funkcja Griewanka

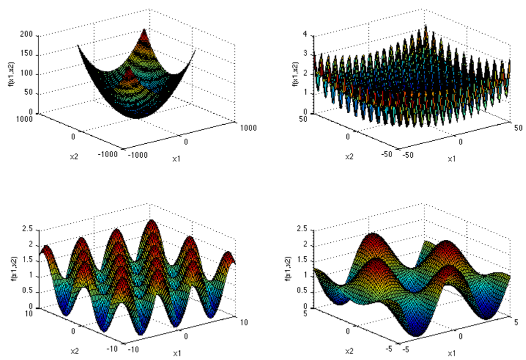
Funkcja Griewanka ma wiele szeroko rozpowszechnionych minimów lokalnych, które są regularnie dystrybuowane.

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

Wzór funkcji Griewanka

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

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



Wizualizacjafunkcji Griewanka

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

MS

- średnia: 0.6055442
- Wartość najmniejsza: 0.007396
- Wartość największa: 4.4481658
- Mediana: 0.3253765
- Dolny kwartyl: 0.1257573
- Górny kwartyl: 0.8310025

PRS

- średnia: 0.6434122
- Wartość najmniejsza: 0.0373963
- Wartość największa: 1.7034647
- Mediana: 0.6161477
- Dolny kwartyl: 0.4292943
- Górny kwartyl: 0.8541051

Funkcja Griewanka 10D

MS

- średnia: $5.3433198 \times 10^{-11}$
- Wartość najmniejsza: $1.3820056 \times 10^{-12}$
- Wartość największa: $2.1964297 \times 10^{-10}$
- Mediana: $4.1341264 \times 10^{-11}$
- Dolny kwartyl: $2.7560176 \times 10^{-11}$
- Górny kwartyl: $7.4529827 \times 10^{-11}$

PRS

- średnia: 51.7091663
- Wartość najmniejsza: 12.0229676

- Wartość największa: 83.9943267
- Mediana: 51.6668436
- Dolny kwartyl: 43.7718444
- Górny kwartyl: 61.4505366

Funkcja Griewanka 20D

MS

- średnia: $8.1357054 \times 10^{-11}$
- Wartość najmniejsza: $1.3866686 \times 10^{-13}$
- Wartość największa: $1.7841773 \times 10^{-10}$
- Mediana: $7.5553341 \times 10^{-11}$
- Dolny kwartyl: $5.6181226 \times 10^{-11}$
- Górny kwartyl: $1.0998349 \times 10^{-10}$

PRS

- średnia: 222.7744787
- Wartość najmniejsza: 138.0348086
- Wartość największa: 271.2005696
- Mediana: 223.940142
- Dolny kwartyl: 207.9649149
- Górny kwartyl: 239.8048899

Funkcja Schwefela 2D

MS

- średnia: -836.7813912
- Wartość najmniejsza: -837.9657745
- Wartość największa: -719.5274399
- Mediana: -837.9657745
- Dolny kwartyl: -837.9657745
- Górny kwartyl: -837.9657745

PRS

- średnia: -797.1918759
- Wartość najmniejsza: -836.5685042
- Wartość największa: -643.5621982
- Mediana: -804.2280449
- Dolny kwartyl: -823.5638115
- Górny kwartyl: -781.6197479

Funkcja Schwefela 10D

MS

- średnia: -3262.1275223
- Wartość najmniejsza: -3716.0755343
- Wartość największa: -2923.4470726
- Mediana: -3259.0250766
- Dolny kwartyl: -3378.9804707
- Górny kwartyl: -3142.8476519

PRS

- średnia: -1990.2290063
- Wartość najmniejsza: -2648.5365291
- Wartość największa: -1671.7495182
- Mediana: -1977.0998535
- Dolny kwartyl: -2101.5557137
- Górny kwartyl: -1880.3428427

Funkcja Schwefela 20D

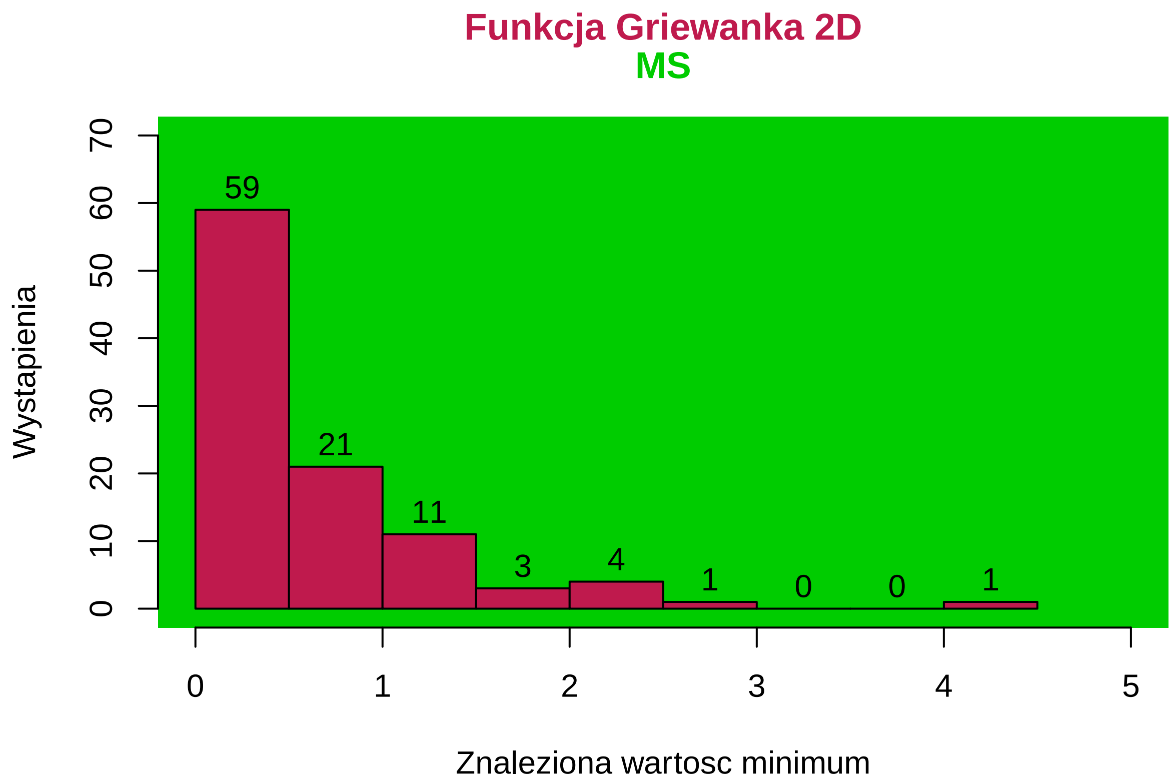
MS

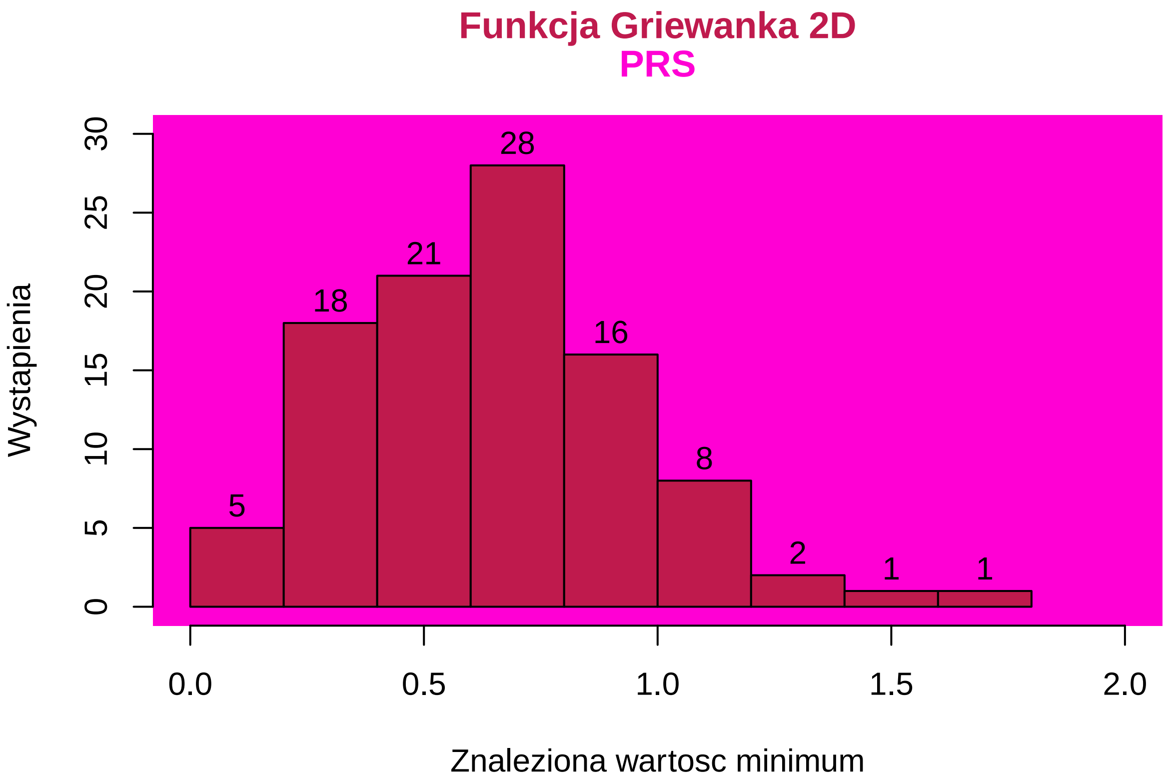
- średnia: -5930.2842622
- Wartość najmniejsza: -6721.5020158
- Wartość największa: -5415.4216596
- Mediana: -5927.3537852
- Dolny kwartyl: -6073.1127276
- Górny kwartyl: -5732.1016643

PRS

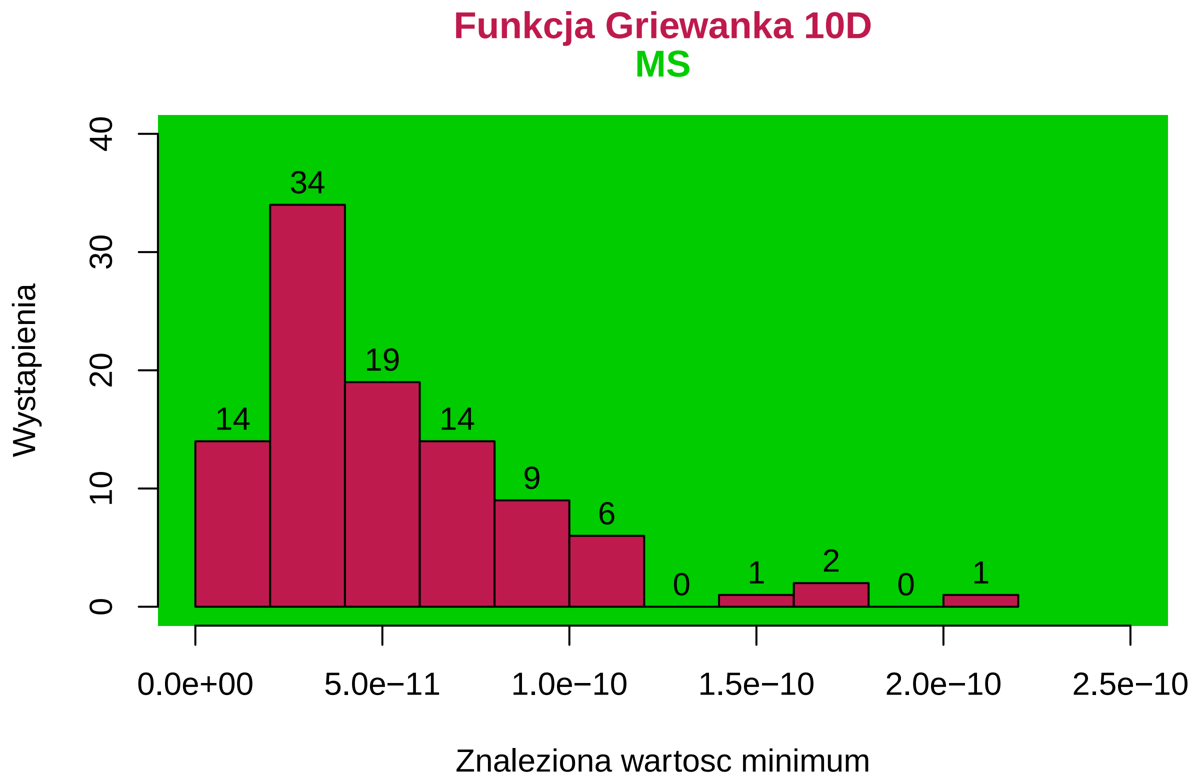
- średnia: -2871.2092706
- Wartość najmniejsza: -3883.630182
- Wartość największa: -2404.6476755
- Mediana: -2845.6522752
- Dolny kwartyl: -3018.7275952
- Górny kwartyl: -2683.1582378

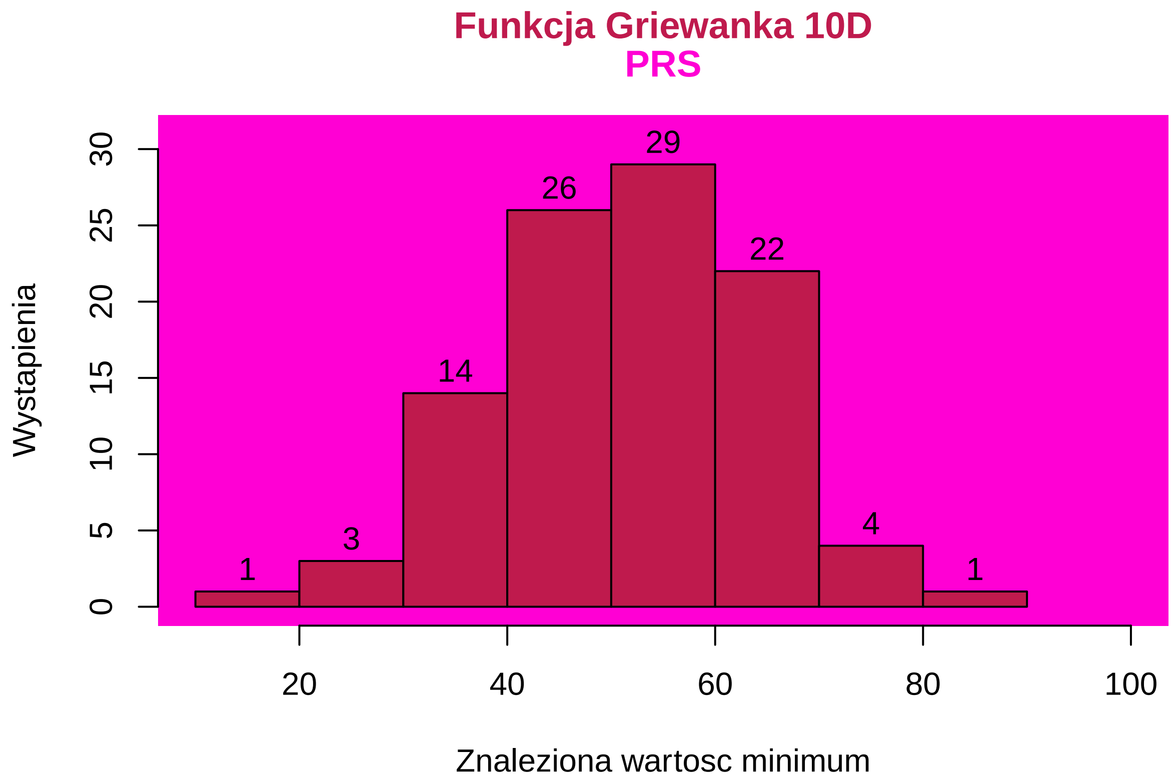
Wyniki na wykresach



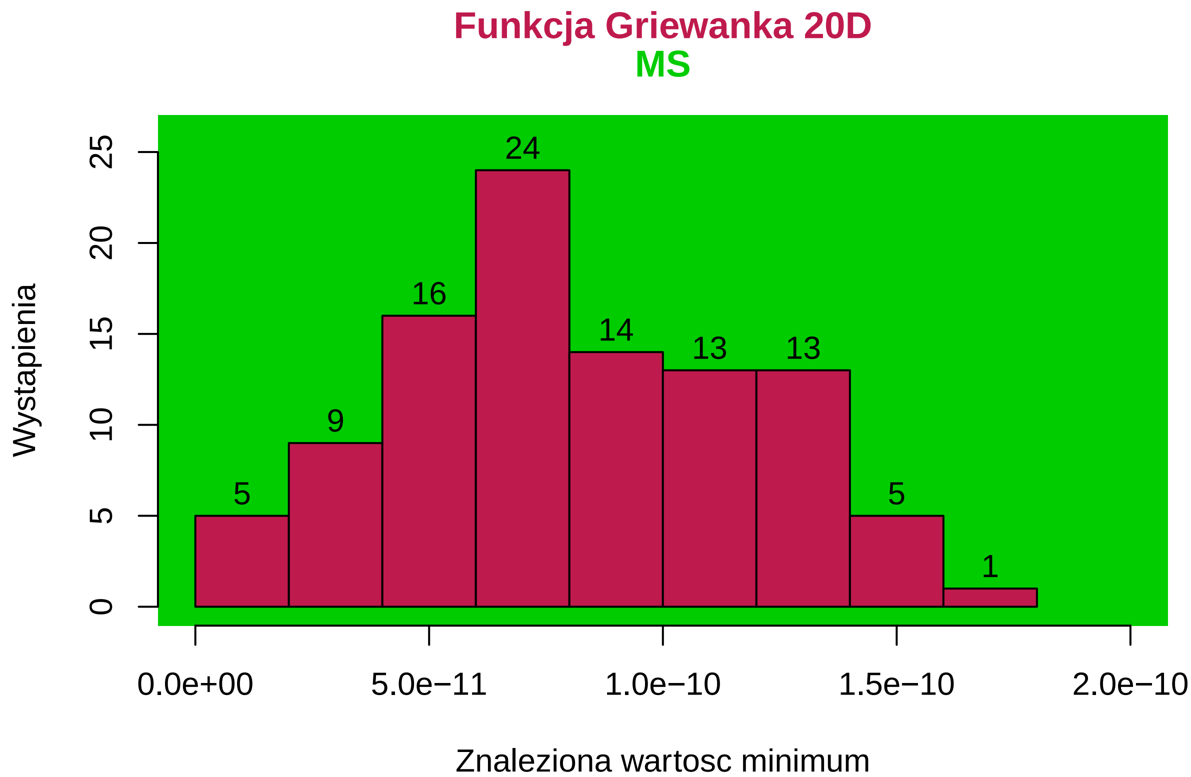


Funkcja Griewanka 2D
PRS
Wystapienia
0
5
10
15
20
25
30
5
18
21
28
16
8
2
1
1
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
Znaleziona wartosc minimum

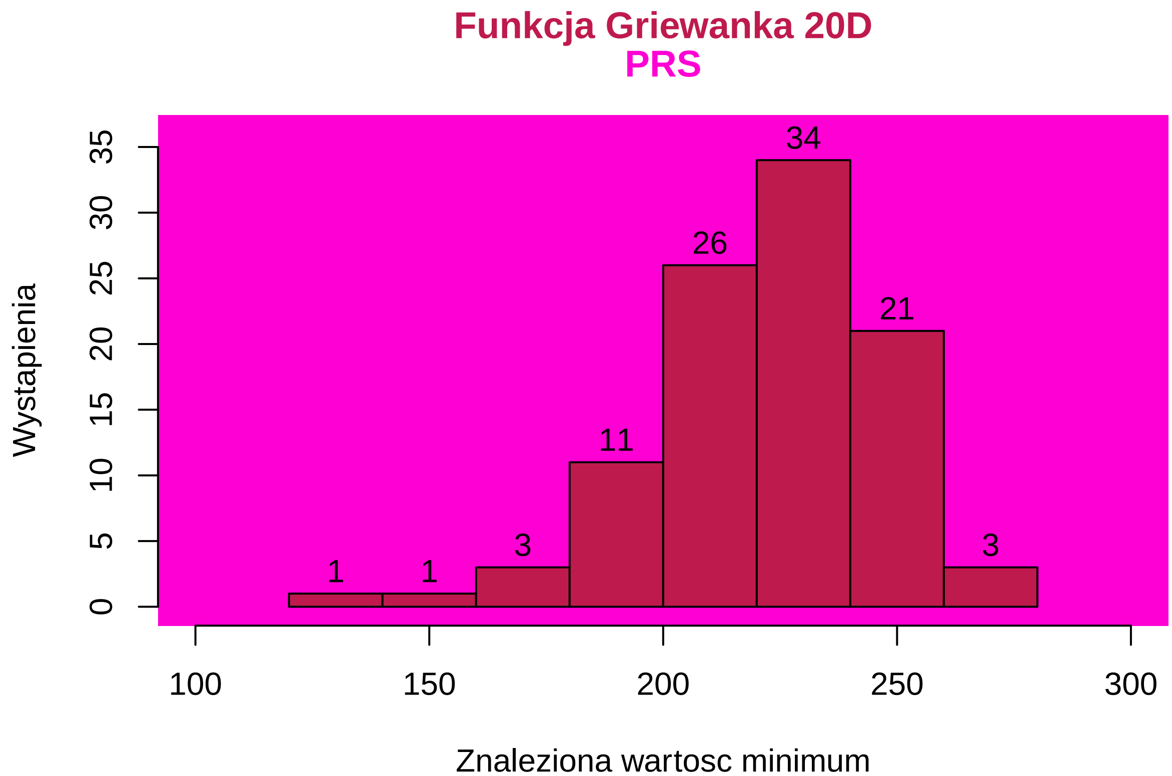

Funkcja Griewanka 10D
MS
Wystapienia
Znaleziona wartosc minimum
0.0e+00
5.0e−11
1.0e−10
1.5e−10
2.0e−10
2.5e−10
0
10
20
30
40
14
34
19
14
9
6
0
1
2
0
1

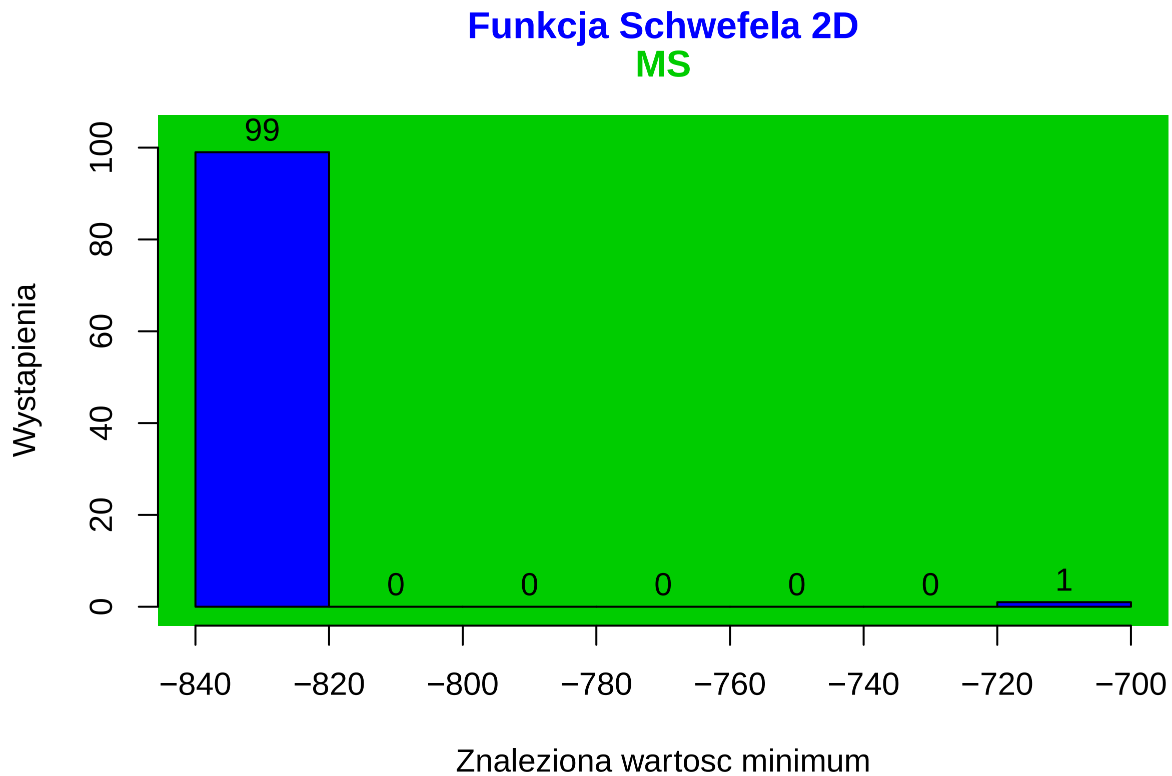


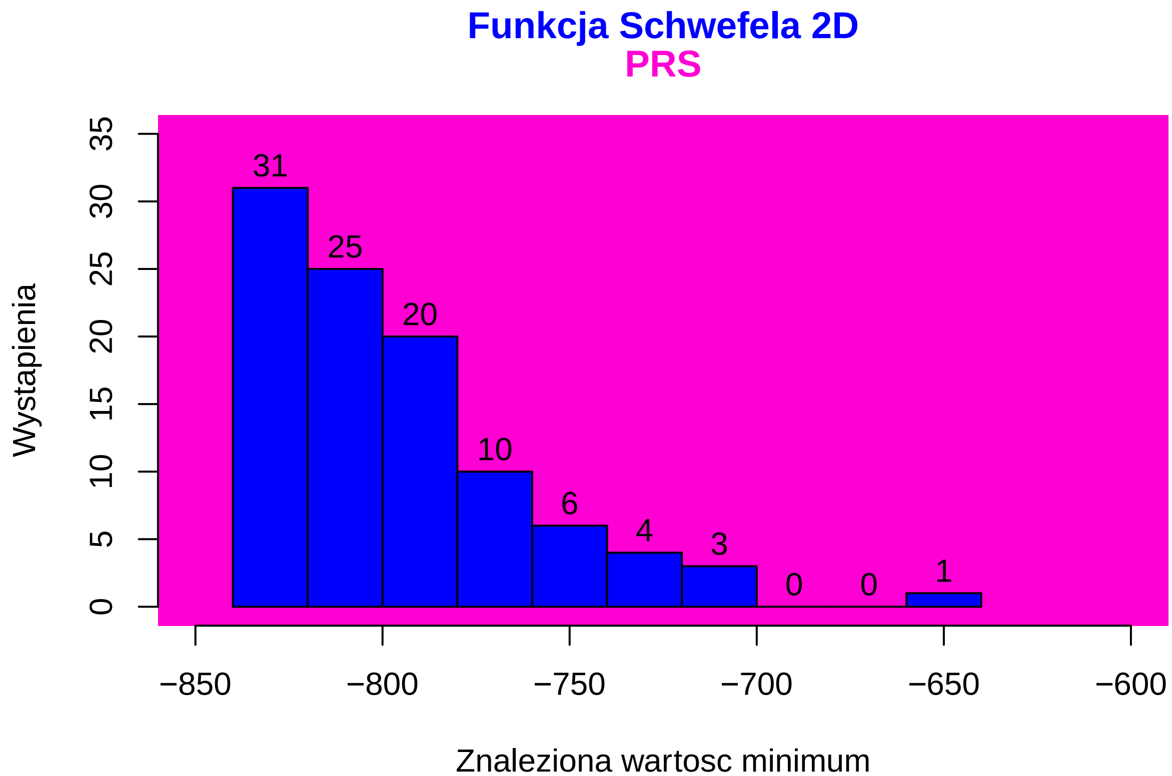
Funkcja Griewanka 10D
PRS
Wystapienia
0
5
10
15
20
25
30
1
3
14
26
29
22
4
1
20
40
60
80
100
Znaleziona wartosc minimum



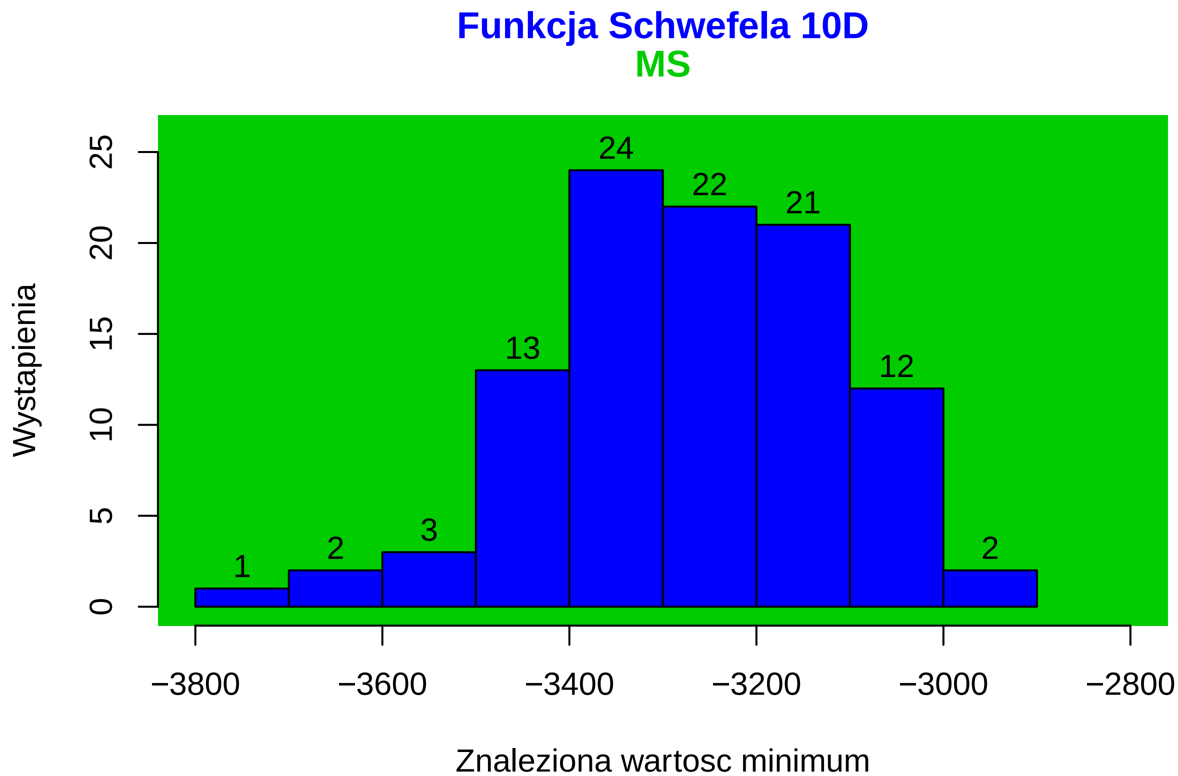
Funkcja Griewanka 20D
MS
Wystapienia
Znaleziona wartosc minimum
0
5
10
15
20
25
0.0e+00
5.0e−11
1.0e−10
1.5e−10
2.0e−10
5
9
16
24
14
13
13
5
1

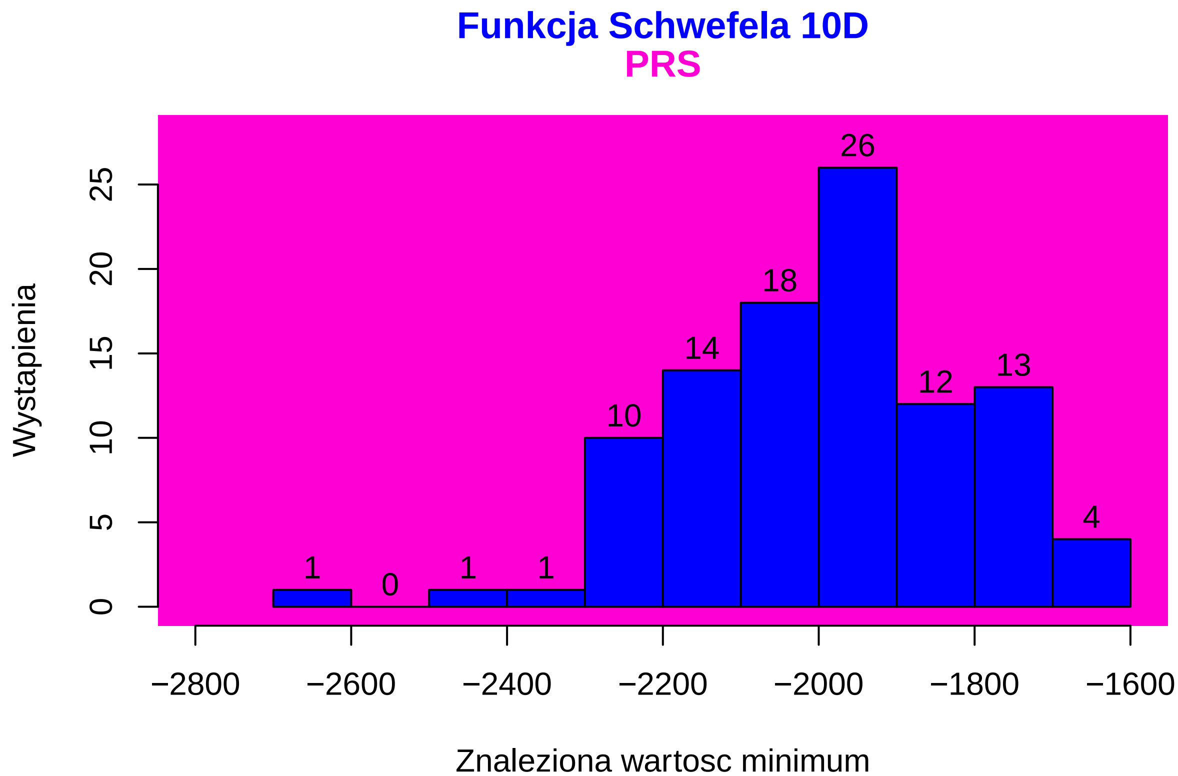

Funkcja Griewanka 20D
PRS
Wystapienia
0
5
10
15
20
25
30
35
1
1
3
11
26
34
21
3
100
150
200
250
300
Znaleziona wartosc minimum

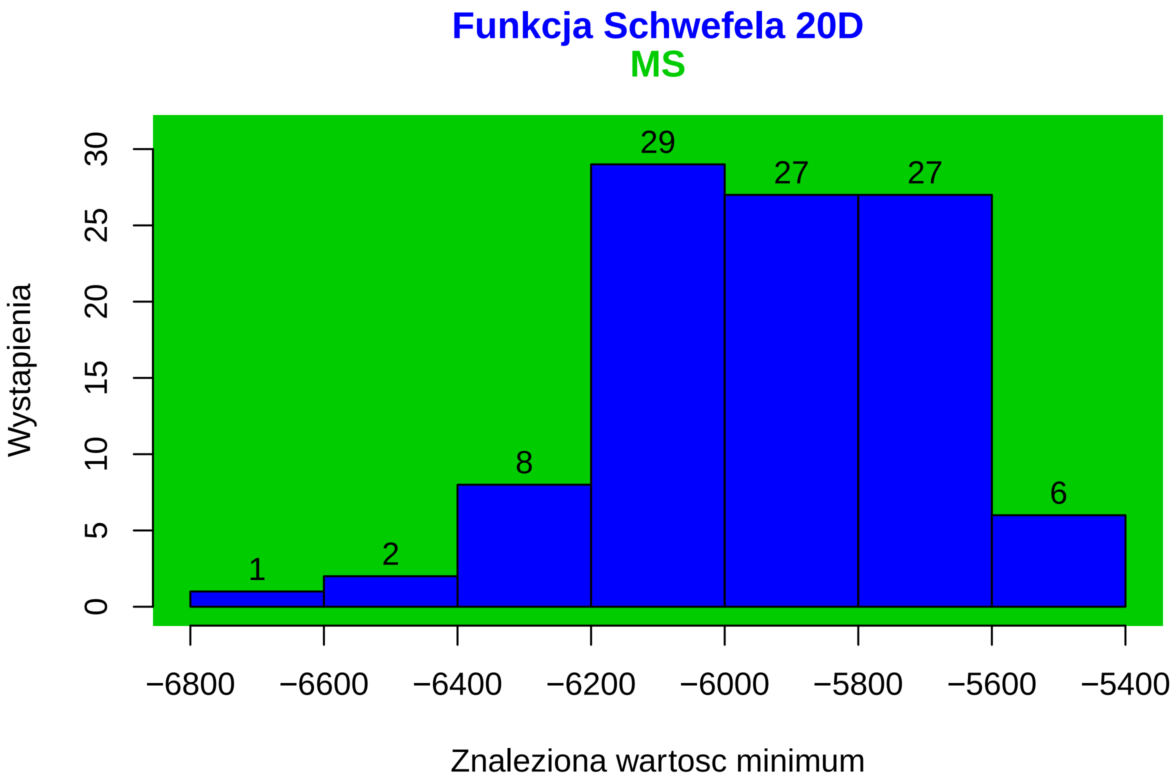

Funkcja Schwefela 2D
MS
99
0
0
0
0
0
1
0
20
40
60
80
100
Wystapienia
−840
−820
−800
−780
−760
−740
−720
−700
Znaleziona wartosc minimum

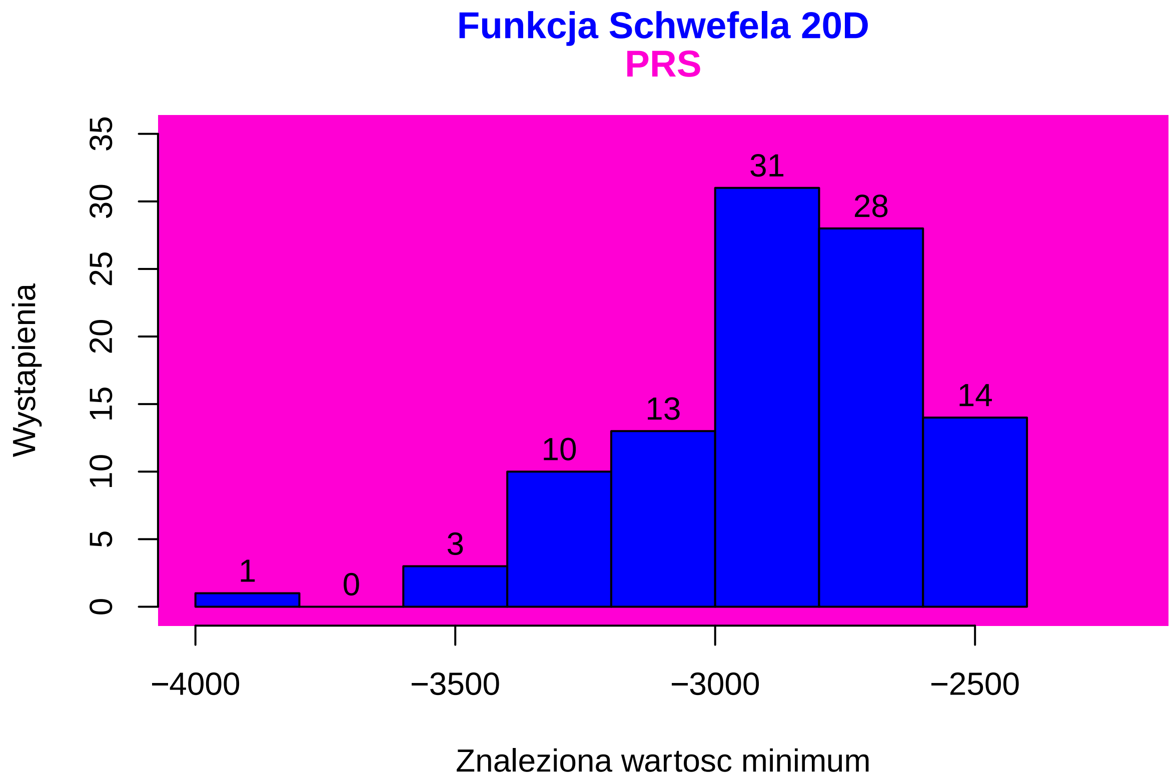


Funkcja Schwefela 2D
PRS
Wystapienia
0
5
10
15
20
25
30
35
31
25
20
10
6
4
3
0
0
1
−850
−800
−750
−700
−650
−600
Znaleziona wartosc minimum


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

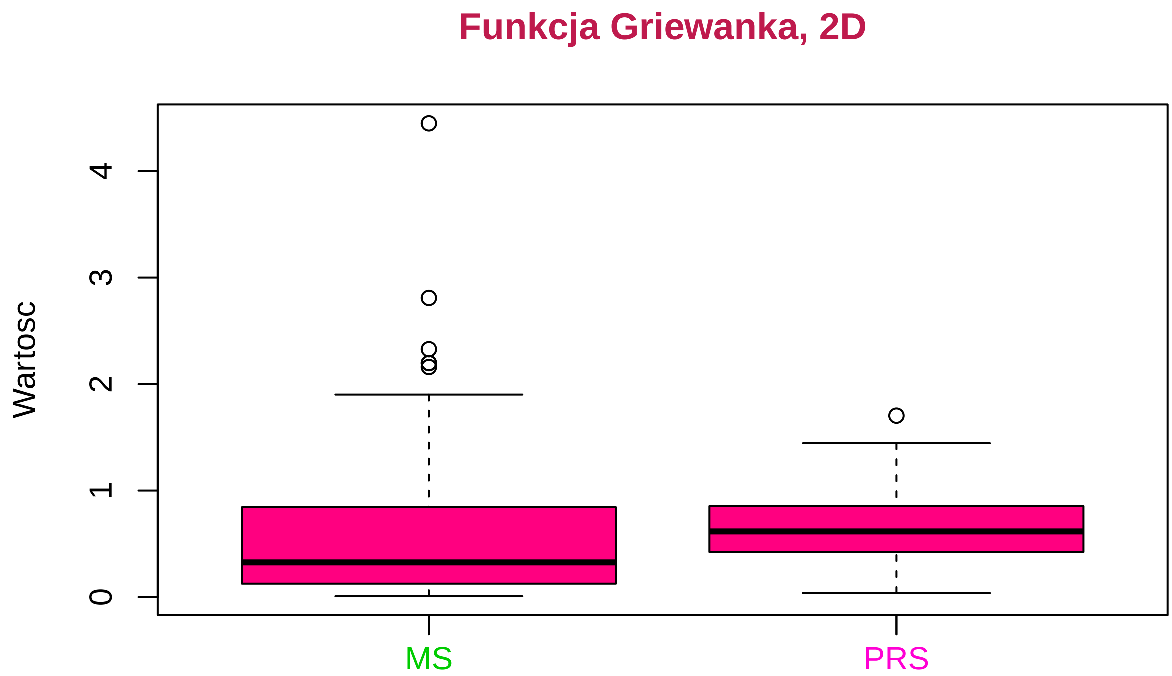

Funkcja Schwefela 10D
PRS
Wystapienia
0
5
10
15
20
25
1
0
1
1
10
14
18
26
12
13
4
−2800
−2600
−2400
−2200
−2000
−1800
−1600
Znaleziona wartosc minimum

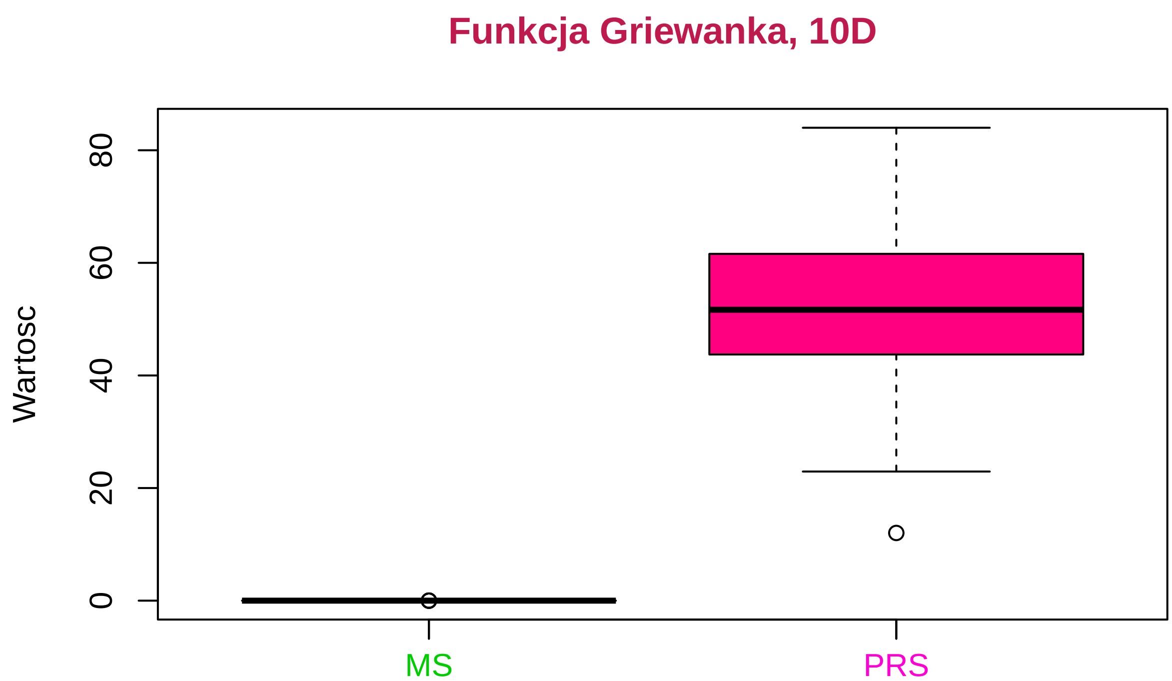

Funkcja Schwefela 20D
MS
Wystapienia
0
5
10
15
20
25
30
1
2
8
29
27
27
6
−6800
−6600
−6400
−6200
−6000
−5800
−5600
−5400
Znaleziona wartosc minimum

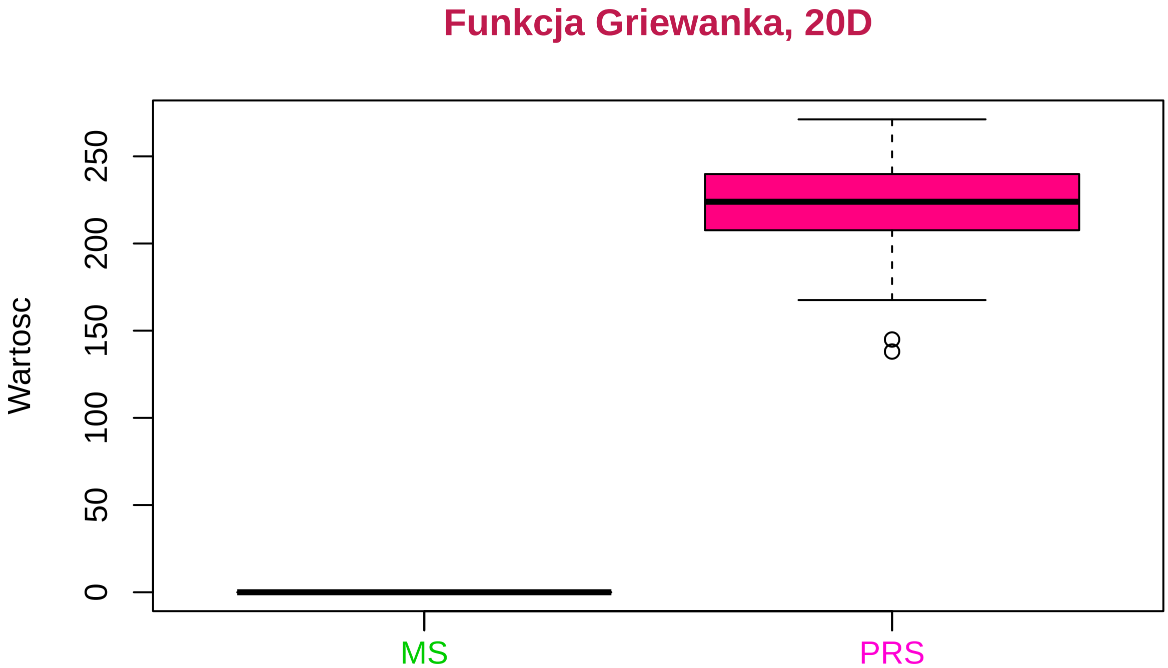


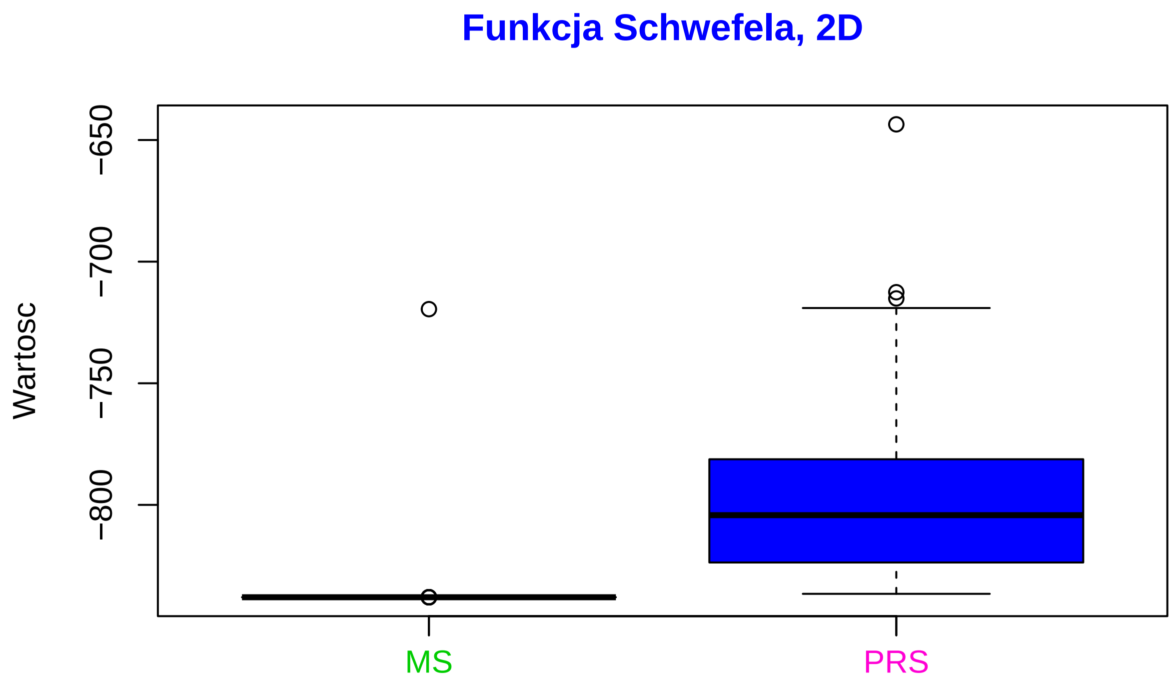
Funkcja Schwefela 20D
PRS
Wystapienia
0
5
10
15
20
25
30
35
1
0
3
10
13
31
28
14
−4000
−3500
−3000
−2500
Znaleziona wartosc minimum

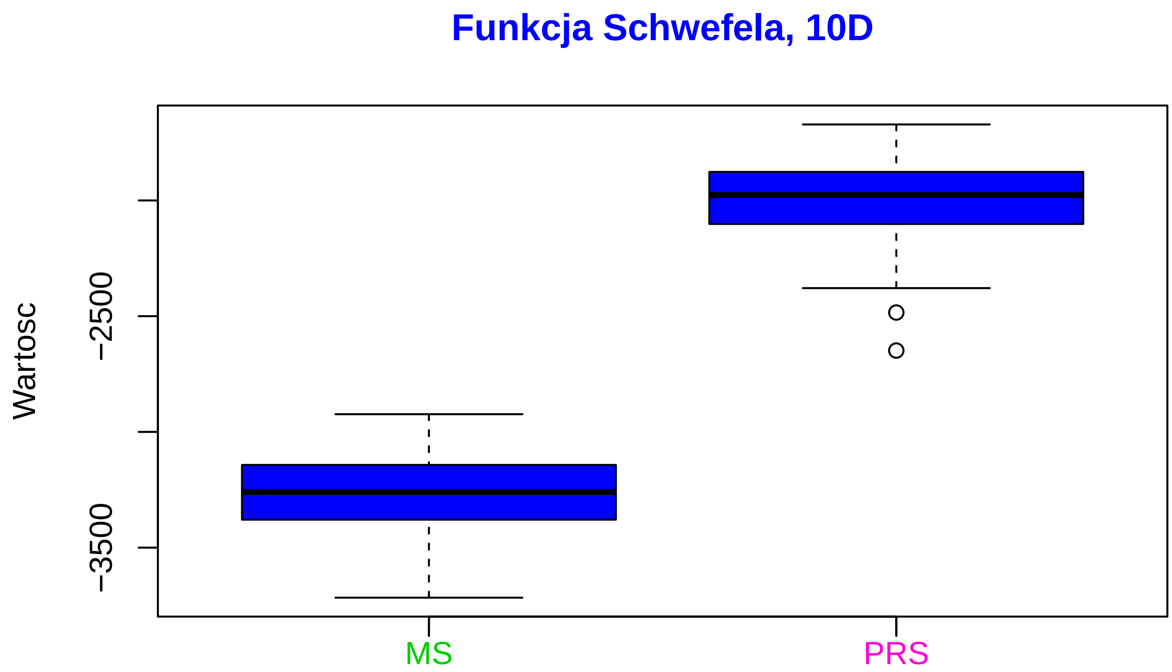
Wykresy pudełkowe

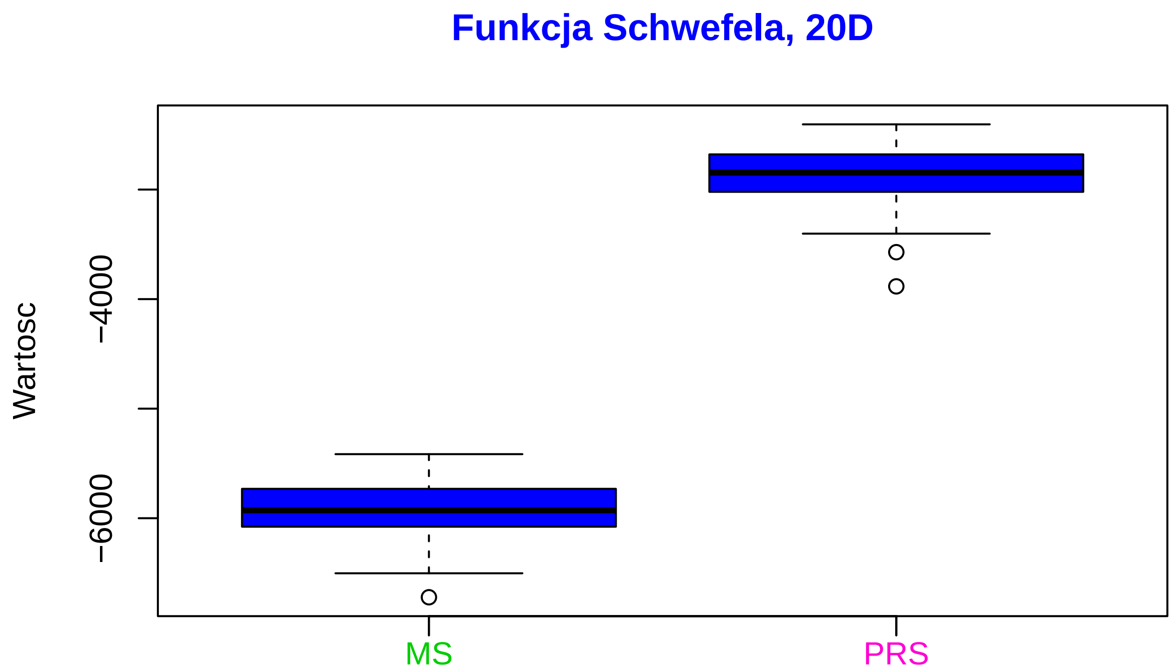





Funkcja Griewanka, 20D
Wartosc
0
50
100
150
200
250
MS
PRS


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 końcowe:

Wpływ wymiarowości:

Wraz ze wzrostem liczby wymiarów, różnica między algorytmami staje się coraz bardziej wyraźna. Przewaga MS nad PRS rośnie wykładniczo wraz z wymiarowością.

Porównanie funkcji:

Funkcja Schwefela wykazuje większe różnice między algorytmami niż funkcja Griewanka. Dla funkcji Griewanka w 2D nie zaobserwowano istotnej różnicy między algorytmami.

Efektywność algorytmów:

MS konsekwentnie osiąga lepsze wyniki niż PRS dla wszystkich przypadków (z wyjątkiem G2D). Różnice są szczególnie widoczne w wyższych wymiarach. MS wydaje się być znacznie bardziej odpowiedni dla problemów wielowymiarowych.

Rekomendacje:

Dla problemów 2D: można stosować oba algorytmy (szczególnie dla funkcji Griewanka). Dla problemów wielowymiarowych: zdecydowanie zalecane jest użycie MS W przypadku funkcji Schwefela: MS powinien być preferowanym wyborem niezależnie od wymiarowości.