AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA
W KRAKOWIE

Metody Numeryczne Laboratoria

Sprawozdanie nr 10

Poszukiwanie minimum wartości funkcji metodą symulowanego wyżarzania

Łukasz Wajda, 13.05.2021 r.

1. Wstęp teoretyczny

Celem dziesiątego laboratorium było zapoznanie się ze sposobem na poszukiwanie minimum wartości funkcji przy użyciu metody symulowanego wyżarzania, zaprogramowanie tej metody i znalezienie minimum funkcji $f(x, y)$.

Zadaniem optymalizacji jest poszukiwanie minimum lub maksimum funkcji (wielu zmiennych). W praktyce problem sprowadza się do poszukiwania minimum globalnego, czyli takiego punktu dla którego zachodzi:

$$f: R^n \rightarrow R \,, \tag{1}$$

$$min f(\vec{x}) = f(\vec{x}^*) \Leftrightarrow \bigwedge_{x \in R^n} f(\vec{x}^*) < f(\vec{x}) \,, \tag{2}$$

$$\vec{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T \,. \tag{3}$$

Metoda Monte Carlo to metoda stosowana do rozwiązywania w numeryczny sposób procesów zbyt złożonych, aby można było przewidzieć ich wyniki za pomocą podejścia analitycznego. Polega na wielokrotnym wykonywaniu obliczeń (opartych o losowe symulacje ze znanym rozkładem prawdopodobieństwa), i na ich podstawie, szacowaniu wyniku.

Symulowane wyżarzanie to stochastyczna metoda, algorytm typu Monte Carlo. Opiera się na przeszukaniu zadanej przestrzeni przy wykorzystaniu tzw. wędrowców, w celu odnalezienia jej minimum globalnego. Ważnym aspektem poprawnego działania algorytmy są warunki początkowe: ustalamy temperaturę $T = T_{max}$, obieramy punkt startowy x_0, wartość funkcji celu w punkcie startowym $f(x_{min})$ dla naszego wędrowca oraz ilość kroków M, jaką ma wykonać.

Następnie algorytm w sposób iteracyjny powtarza kolejne czynności:

1. losowanie Δx (przemieszczenie wędrowca) generatorem liczb pseudolosowych,
2. przesuwamy punkt w którym znajduje się wędrowiec (nowe położenie z prawdopodobieństwem P=1) jeśli po przemieszczeniu wartość funkcji w nowym punkcie jest mniejsza od poprzedniej:

$$f(x_i + \Delta x) \leq f(x_i) \,. \tag{4}$$

W przeciwnym przypadku wyznaczamy prawdopodobieństwo akceptacji gorszego położenia (zadanym przez rozkład Boltzmanna) zgodnie ze wzorem:

$$P = \exp\left(-\frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{T}\right), \tag{5}$$

i losujemy liczbę $X \in U(0,1)$. Nowe położenie jest akceptowane (z prawdopodobieństwem P) jeżeli jest spełniona relacja:

$$X < P \tag{6}$$

3. aby efektywnie zmniejsza prawdopodobieństwo akceptacji położenia o wyższej funkcji kosztu, co określoną początkowo M liczbę iteracji zmniejszmy temperaturę T.

2. Zadanie do wykonania

Problemem, z którym przyszło nam się zmierzyć na dziesiątym laboratorium był problem minimalizacji funkcji dwóch zmiennych:

$$f(x,y) = \sin(x)\sin(y) - \exp\left(-\left(x + \frac{\pi}{2}\right)^2 - \left(y - \frac{\pi}{2}\right)^2\right). \tag{7}$$

W celu odnalezienia minimum globalnego wykorzystano uprzednio zaimplementowany algorytm wyżarzania ze zmienną temperaturą T.

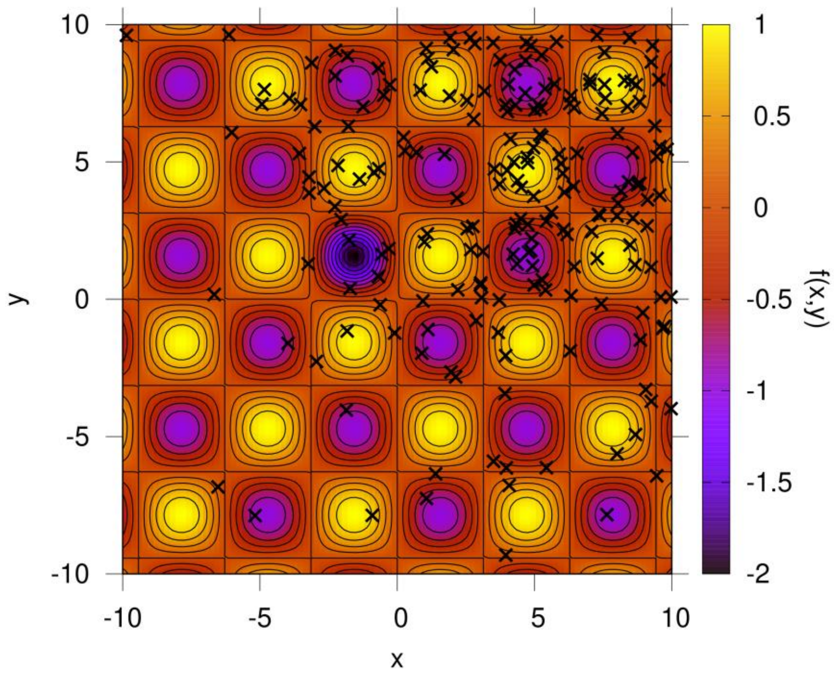
Dla $N = 200$ wędrowców przy ich początkowym położeniu $(x^{(0)}, y^{(0)}) = (5,5)$ przeprowadzono symulację na płaszczyźnie $[-10,10] \times [-10,10]$. Natomiast temperaturę wyznaczano w kolejnych iteracjach co $k = 100$ kroków błądzenia, zgodnie z wzorem:

$$T = \frac{10}{2^{i_T}}, \tag{8}$$

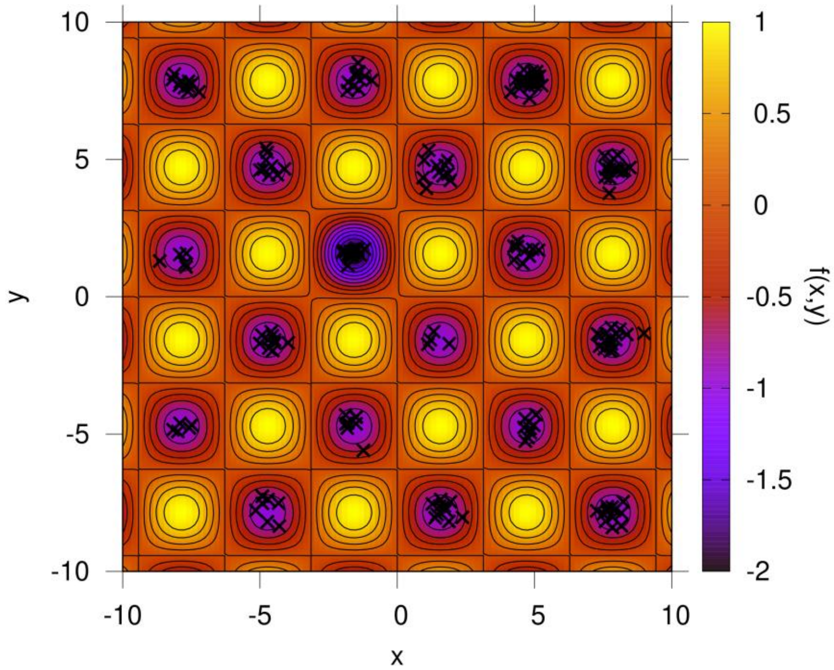
gdzie i_T to numer iteracji.

3. Wyniki

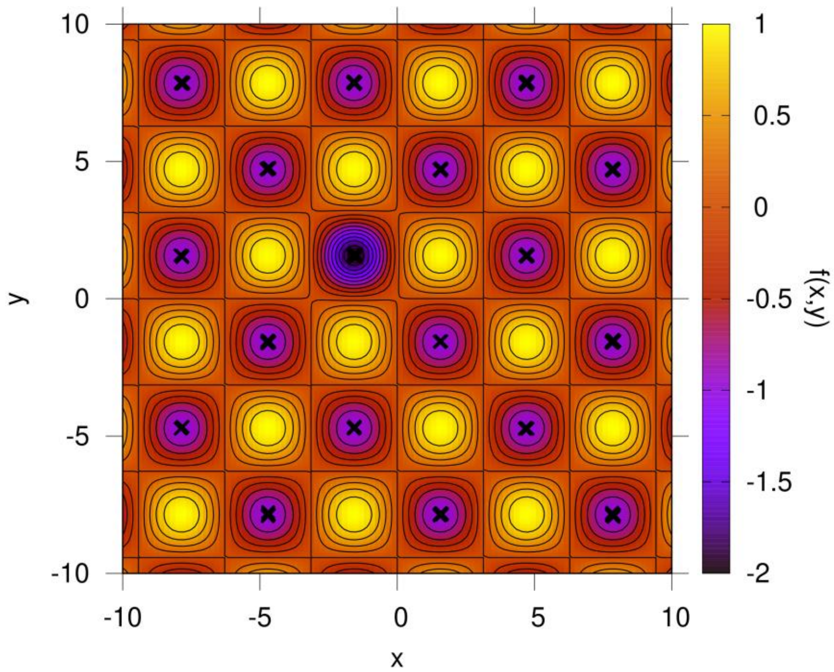
Dzięki programowi w języku C, oraz wskazówkom prowadzącego stworzono odpowiednie funkcje, które wykorzystując skrypt Gnuplota pozwoliły na wygenerowanie wykresów:



Rysunek 1.: *Położenie wędrowców po zakończeniu błądzenia dla zadanego numeru* $i_T = 0$

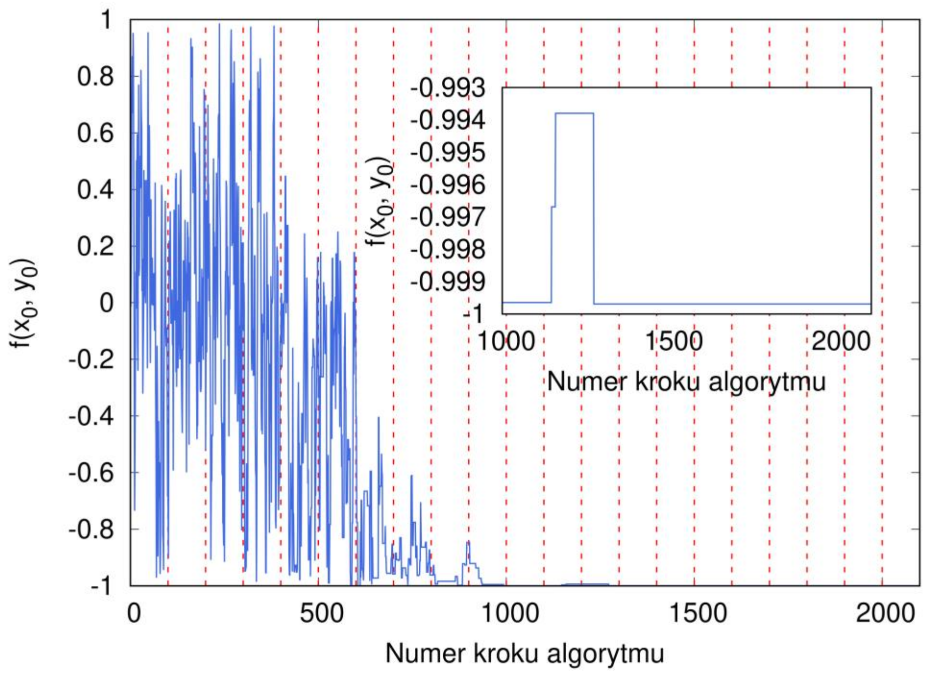


Rysunek 2.: *Położenie wędrowców po zakończeniu błądzenia dla zadanego numeru* $i_T = 7$



Rysunek 3.: *Położenie wędrowców po zakończeniu błądzenia dla zadanego numeru* $i_T = 20$

Na powyższych wykresach widać jak zmieniało się położenie wszystkich dwustu wędrowców w danych iteracjach. Dla małych iteracji położenia wędrowców są chaotyczne, wraz ze wzrostem iteracji następuje skupienie się wędrowców wokół punktów gdzie występują lokalne bądź globalne minimum funkcji na zadanej przestrzeni.



Rysunki 4.: *Wartość funkcji $f(x, y)$ dla wszystkich położeń pierwszego z wędrowców w trakcie działania całego algorytm wraz z wstawionym wykresem zbliżenia dla końcowych kroków.*

Początkowo wahania wartości położenia w punkcie, w którym znajduje się wędrowiec o indeksie 0, są „burzliwe", jednak w miarę obniżania się temperatury T i zwiększania liczby losowań, „wysokość" na której znajduje się wędrowiec ulega gwałtownemu obniżeniu i utrzymaniu się na stałym poziomie w okolicy wartości równej -1.

Podjęto się próby wyznaczenia położenia punktu dla którego wartość funkcji, po zakończeniu działania algorytmu, była najmniejsza. Dla punktu o współrzędnych $[-1.56828, 1.56995]$ wartość funkcji wyniosła $f(x, y) = -1.999989$. Punktu okazał się bliski minimum globalnemu funkcji na zadanym przedziale, co świadczy to o poprawności algorytmu.

4. Wnioski

Metoda znajdowania minimum globalnego przy użyciu symulowanego wyżarzania jest prosta w implementacji i zrozumieniu. Należy jednak brać pod uwagę losowość działania tego typu algorytmów (typu Monte Carlo) i ryzyko znalezienia lokalnego, a nie globalnego minimum funkcji. Na szczęście w naszej funkcji udało się je wyznaczyć z duża dokładnością.

Wędrowiec wraz ze wzrostem temperatury może przyjmować jedynie coraz to niższe wartości położenia. Stopniowe zmniejszanie się temperatury T, powoduje dążenie prawdopodobieństwa P do zera, czyli prawdopodobieństwa przyjęcia gorszego położenia.

Uzyskane wykresy 1-3 obrazują jak ważną rolę pełni zadana liczba wędrowców. Wielu z nic „zbłądziło" w czasie odszukiwania globalnego minimum i w związku z brakiem możliwości przyjęcia gorszego położenia wraz ze wzrostem temperatury, przyjęły one minima lokalne na zadanej przestrzeni.

Zniwelowanie powyższego problemu przyjmowania przez wędrowców minimów lokalnych, poprzez nieobniżanie temperatury, byłaby nieskutecznym rozwiązaniem. Próba synchronizacji temperatury i prawdopodobieństwa przyjmowania gorszego położenia, poskutkowałaby nieskończonym błądzeniem wędrowców, bez przybliżenia poszukiwanego wyniku.