Реализация методов оптимизации в Matlab

1 Метод имитации отжига

1.1 Задача размещения ферзей

Описание задачи: Необходимо расставить n ферзей на доске размера $n \times n$ так, чтобы они не били друг друга.

Реализация функции потерь: Для нашей задачи размещения ферзей в качестве функции потерь является число ферзей, которые бьют друг друга. Так как два ферзя не могут находиться в одной строке или столбце, можем сказать, что изначально рассматриваем только комбинации вида $q = (i_1, \ldots, i_n)$, $i_j \neq i_r \forall j \neq r$, $i_k \in \{1, 2, \ldots, n\}$, где n - размер доски/число ферзей.

Из вышесказанного следует, что ферзи могут бить друг друга только по диагонали, поэтому нам нужно пройтись циклом по всем ферзям и посчитать число пересечений. Два ферзя стоят на одной диагонали, если модуль разности номеров строк равен модулю разности номеров столбцов. Реализуем эту функцию: на вход принимает два параметра q - расстановка, n - длина последовательности. Не реализована внутри функции, так как при реализации алгоритма мы можем сразу посчитать и не пересчитывать каждый раз при подсчете функции потерь.

```
function [h] = calculate(q, n)
h = 0;
for i = 1:n
    for j = i+1:n
        if abs(q(i) - q(j)) == abs(i-j)
            h = h + 2;
        end
    end
end
```

По реализации: при каждом совпадении добавляем 2, так как каждый из двух бьет другого. Второй цикл начинается с i+1, так как до этого элементы уже будут учтены.

Реализация алгоритма: Наш алгоритм будет принимать на вход четыре параметра: q_0 - начальная инициализация (расстановка), n_{iter} - число итераций (можно брать побольше, так как остановится по достижению оптимума), T_0 - начальная температура (100 по умолчанию), α - коэффициент, который отвечает за скорость убывания температуры (решил взять 0.9 по умолчанию). Тогда код алгоритма выглядит следующим образом:

```
function [q] = heatalg(q_0, n_iter, T_0, alpha)
q_old = q_0;
n = length(q_old);
T = T_0;
for i = 1:n_iter
    loss_old = calculate(q_old, n);
    if loss_old == 0
        q = q_old;
        break
    end
    q_new = q_old;
    ind = randi(numel(q_new),1,2);
    q_new(ind) = q_new(ind([2,1]));
    T = T * alpha;
    loss_new = calculate(q_new, n);
    delta_loss = loss_new - loss_old;
    if delta_loss < 0
        q_old = q_new;
    end
    if delta_loss >= 0
        prob = exp(-delta_loss/T);
```

```
22          if prob > unifrnd(0,1)
23              q_old = q_new;
24          end
25      end
26  end
```

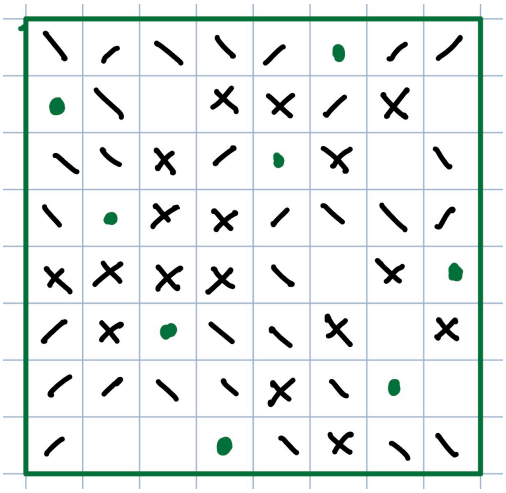
Комментарии к коду:

- Строки 1-4 отвечают за инициализацию
- Строки 5-10 задают цикл по числу итераций, считают лосс и проверяют, достигли ли мы оптимума, если да, то выходим из цикла
- Строки 11 - 16 пересчитывают вектор решений, на одной итерации алгоритма меняем местами два случайных элемента и уменьшаем температуру
- Строки 17 - 26 отвечают за то, что если значение функции стало меньше, то применяем новый вектор решений, иначе задаем вероятность того, что мы примем новый вектор, и потом сравниваем вероятность со случайной точкой на отрезке $[0, 1]$

Примеры реализации:

```
1  >> q_0 = [1 2 3 4 5 6 7 8]
2  >> heatalg(q_0, 1000, 100, 0.9)
3  ans =
4       2     4     6     8     3     1     7     5
5
6  >> q_0 = [1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13]
7  >> heatalg(q_0, 1000, 100, 0.9)
8  ans =
9       7    10    12     3     6    13    11     8     1     4
              2     5     9
```

Изобразим картинку для первого примера, чтобы убедиться, что все верно:



1.2 Минимизация недифференцируемой функции

Описание задачи: В данном упражнении перед нами стоит задача найти минимум следующей функции:

$$f(x) = x^2 \cdot \big(2 + |\sin(a \cdot x)|\big),\ a > 0 \quad f(x) \underset{x}{\to} \min$$

Несложно увидеть, что минимум функции достигается в нуле, однако градиентные методы тут бесполезны, так как функция является недифференцируемой. Поэтому мы воспользуемся методом отжига.

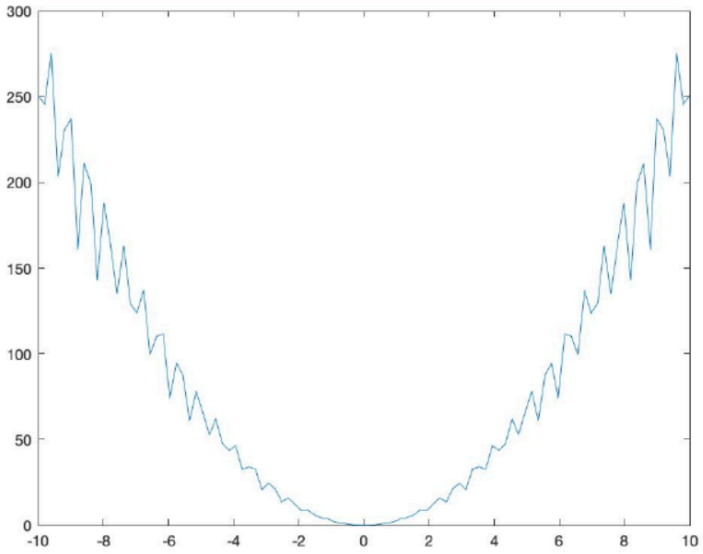
Реализация функции потерь: Сначала напишем простой код, который будет вычислять значение функции в заданной точке при фиксированном a - параметр, который мы задаем сами (по умолчанию зададим $a = 10$).

```
function [f] = loss_heat(x, a)
f = x^2 * (2 + abs(sin(a*x)));
end
```

Также визуализируем данную функцию простой генерацией семплов из матлаба:

```
>> x = linspace(-10, 10)
```

```
>> y = arrayfun(@loss_heat, x)
>> plot(x, y)
```



Реализация алгоритма: Наш алгоритм будет принимать на вход четыре параметра: a - параметр функции, n_{iter} - число итераций (1000 по умолчанию), T_0 - начальная температура (100 по умолчанию), α - коэффициент, который отвечает за скорость убывания температуры (0.95 по умолчанию). Тогда код алгоритма выглядит следующим образом:

```
function [x] = new_heatalg(a, n_iter, T_0, alpha)
x_old = unifrnd(-10, 10);
T = T_0;
for i = 1:n_iter
    loss_old = loss_heat(x_old, a);
    x_new = x_old + unifrnd(-1, 1);
    T = T * alpha;
    loss_new = loss_heat(x_new, a);
    delta_loss = loss_new - loss_old;
    if delta_loss < 0
```

```
11          x_old = x_new;
12      end
13      if delta_loss >= 0
14          prob = exp(-delta_loss/T);
15          if prob > unifrnd(0,1)
16              x_old = x_new;
17          end
18      end
19  x = x_old;
20  end
```

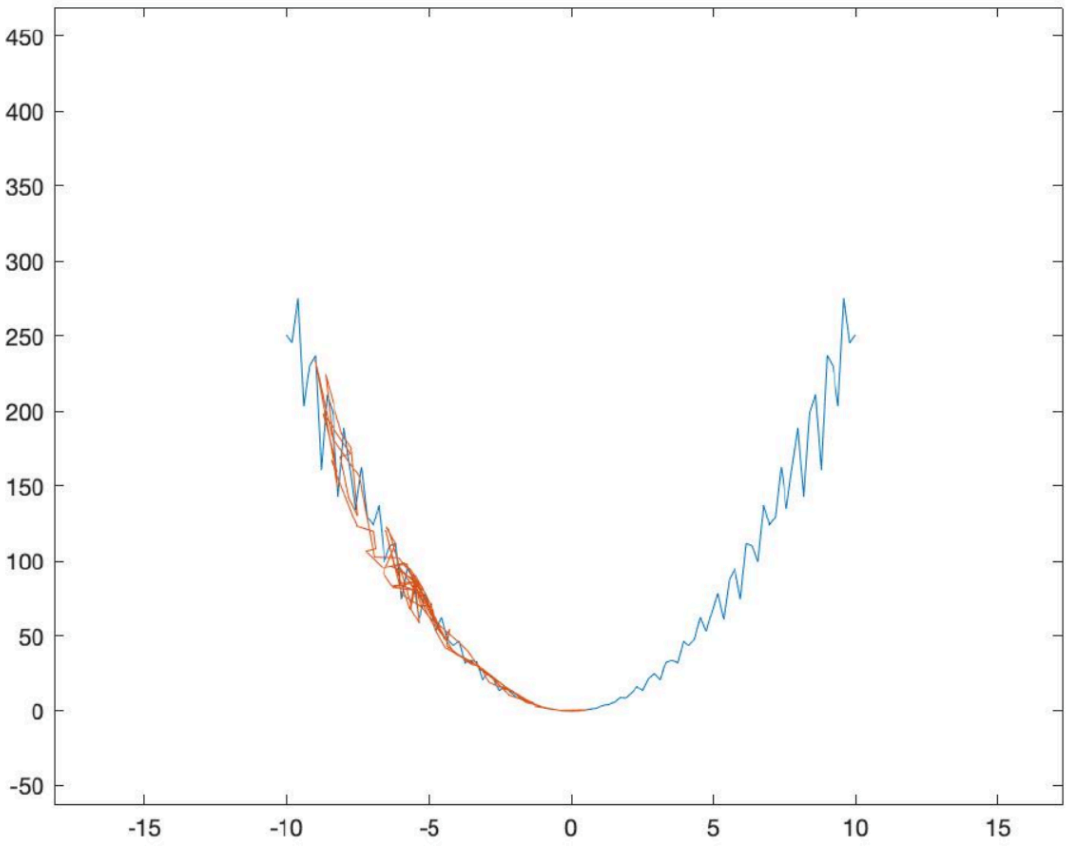
Комментарии к коду:

- Строки 1-3 отвечают за инициализацию
- Строки 4-9 отвечают за подсчет лосса, создание новой точки и уменьшение температуры (в цикле). Новая точка получается как $x_k = x_{k-1} + \xi_k, \quad \xi_k \sim \text{Unif}([-1, 1])$
- Строки 10 - 20 Сравниваем значение лосса со старым и аналогично задаче 1.1 считаем вероятность принять новую точку, если значение функции выросло

Пример реализации:

```
1  >> new_heatalg(10, 1000, 100, 0.95)
2  ans = 1.0587e-04
3  >> loss_heat(ans, 10)
4  ans = 2.2427e-08
```

Как мы видим, алгоритм работает успешно и при 1000 итераций выдает значение очень близкое к $x_{min} = 0$, при этом значение функции также около нуля, что является минимумом данной функции. График иллюстрирует оранжевым цветом путь алгоритма по шагам.



2 Алгоритм роения частиц

2.1 Две функции

Постановка задачи и реализация loss функций: В данном упражнении перед нами стоит задача найти минимум функции Розенброка:

$$f(x_1, x_2) = (1 - x_1)^2 + 100(x_2 - x_1^2)^2 \to \min_{x_1, x_2}$$

Несложно увидеть, что минимум функции достигается в точке $(1, 1)$, однако градиентные методы очень тяжело справляются с задачей минимизации из-за своеобразных линий уровня функции - овражная функция. Реализуем подсчет данной функции в matlab в векторном виде: $x = (x_1, x_2)$.

```
1 function [func] = loss(x, type)
2 if type == 1
```

```
    func = (1 - x(:, 1)).^2 + 100 * (x(:, 2) - x(:, 1).^2).^2;
end
if type == 2
    func = 0.01 .* (x(:, 1) - 0.5) .^ 2 + abs(x(:, 1).^2 - x(:,
        2)) + abs(x(:, 1).^2 - x(:, 3));
end
```

Функция Розенброка занумерована первым типом, параллельно будем писать код для второй функции, которая сложнее, чем первая:

$$f(x_1, x_2, x_3) = 0.01(x_1 - 0.5)^2 + |x_1^2 - x_2| + |x_1^2 - x_3| \to \min_{x_1, x_2, x_3}$$

Минимум этой функции находится в точке $x = (0.5, 0.25, 0.25)$

Реализация алгоритма Алгоритм будет принимать на вход шесть параметров: α, β, γ - параметры функции, отвечающие за веса при пересчете вектора скорости, n_{iter} - число итераций (1000 по умолчанию), m - число частиц (агентов), *type* - тип функции - принимает значения 0 или 1. Тогда код алгоритма выглядит следующим образом:

```
function [answer] = particle_swarm(alpha, beta, gamma, n_iter,
   m, type)
if type == 1
    n_args = 2;
    x = unifrnd(-10, 10, m, n_args);
    v = unifrnd(-3, 3, m, n_args);
end
if type == 2
    n_args = 3;
    x = zeros(m, n_args);
    x(:, 1) = unifrnd(-0.2, 1, m, 1);
    x(:, 2) = unifrnd(-0.3, 1, m, 1);
    x(:, 3) = unifrnd(-0.5, 1, m, 1);
    v = unifrnd(-0.05, 0.05, m, n_args);
```

```
14 end
15 p = x;
16 [~, ind] = min(loss(p, type));
17 J = x(ind, :);
18 for i = 1:n_iter
19     xi_1 = unifrnd(0, 1, m, n_args);
20     xi_2 = unifrnd(0, 1, m, n_args);
21     v = alpha .* v + beta .* (xi_1 .* (p - x)) + gamma .* xi_2
          .* (J - x);
22     x = x + v;
23     for j = 1:m
24         if loss(x(j, :), type) < loss(p(j, :), type)
25             p(j, :) = x(j, :);
26         end
27     end
28     [~, ind] = min(loss(p, type));
29     J = x(ind, :);
30 answer = J;
31 end
```

Комментарии к коду: так как число параметров и инициализируемые значения у двух функций будут отличаться, поэтому в начале приходится расписывать нулевой шаг алгоритма отдельно в зависимости от значения переменной type.

- Строки 1 - 17 инициализируют параметры алгоритма в зависимости от типа функции и определяем изначальный минимум функции
- Строки 18 - 22 вычисляют новые точки путем изменения вектора скорости
- Строки 23 - 27 заменяют историю лучшего положения точки, если новое положение точки оказалось лучше, чем все старые

- Строки 28-29 ищут лучшую точку среди истории и записывают в ответ по этому индексу текущее значение точки
- Выходя из цикла записываем ответ

Выводы: Пример реализации для первой функции:

```
>> ans_first = particle_swarm(0.95, 0.2, 0.2, 10000, 100, 1)
ans_first =
     1     1
```

Как мы видим, для первой функции все работает отлично и при малых значениях числа итераций, однако вторая функция гораздо сложнее, поэтому для успешного применения и стабильного достижения оптимума напишем функцию multistart, которая делает несколько запусков и выбирает наилучший из них.

```
function [answer] = multistart(n_times)
loss_best = 1000;
x = zeros(n_times, 3);
for i = 1:n_times
    x = particle_swarm(0.6, 0.3, 0.3, 10000, 100, 2);
    if loss(x, 2) < loss_best
        loss_best = loss(x, 2);
        answer = x;
    end
end
```

Теперь протестируем работу функции multistart (параметры α, β, γ) подобраны путем перебора нескольких вариантов, однако благодаря тому, что мы делаем много запусков и берем лучший результат, их выбор не имеет большого значения.

```
>> ans_second = multistart(100)
ans_second =
    0.5002    0.2502    0.2502
```

Как мы видим, путем создания дополнительной функции, удается достичь очень стабильных и точных результатов.

3 Генетический алгоритм

3.1 Непрерывная функция

Постановка задачи: Необходимо найти минимум следующей функции:

$$F(x) = \sum_{k=1}^{n} x_k^2 \cdot (1 + |\sin(100 x_k)|)$$

Функция задана на $\mathbb{R}_n$, по умолчанию будем рассматривать $n = 5$. Особенность функции в том, что она имеет множество локальных минимум и один глобальный в $x = 0$, в который мы и хотим попасть. Реализация кода функции:

```
function [y] = func1(x)
    y = (x.^2) .* (1 + abs(sin(100 .* x)));
    y = sum(y, 2);
end
```

Создание функции приспособленности: Для всех задач оптимизации при помощи генетического алгоритма нам понадобится функция приспособленности, с помощью которой мы будем ранжировать пул особей:

$$Fit(x) = \frac{1}{1 + F(x)}$$

где $F(x)$ - минимизируемая функция. В случае неотрицательной функции получаем удобную величину для ранжирования, так как принимает значения от 0 до 1, кроме того, функция важна для скрещивания и получения новых особей, с помощью нее вычисляем вероятности:

$$p = \frac{Fit(x)}{Fit(x) + Fit(y)}, \qquad q = \frac{Fit(y)}{Fit(x) + Fit(y)}$$

В результате, имея двух особей x и y можем получить новую особь z путем сравнения p с ξ_i - равномерно распределенной с. в. Если $\xi_i \leq p$, то i-я компонента новой особи равна

x_i, иначе y_i. Таким образом, чем более приспособлена особь, тем больше генов войдут в ее потомка. Реализуем функцию в коде:

```
1 function [y] = fit_func(x)
2     y = 1 ./ (1 + x);
3 end
```

Реализация алгоритма: Возьмем число особей $M = 1000$, число худших убиваемых особей $M_c = 200$, количество итераций алгоритма $L = 1000$

```
1  function [x] = genetic_algorithm(m, m_c, l, n)
2      x = rand(m, n) .* 20 - 10;
3      for iter_ = 1:l
4          [~, indexes] = sort(fit_func(func1(x)), 'descend');
5          x = x(indexes, :);
6          ind = randi([1, m], [m-m_c-1, 1]);
7          xi = rand(m-m_c-1, n);
8          fit = fit_func(func1(x));
9          probas = fit(2:m-m_c) ./ (fit(2:m-m_c) + fit(ind));
10         mask = 1 * (probas >= xi);
11         x(2:m-m_c, :) = mask .* x(2:m-m_c, :) + (1 - mask) .* x
               (ind, :);
12         x(m-m_c+1:m, :) = rand(m_c, n) .* 20 - 10;
13     end
14     x = x(1, :);
15 end
```

Комментарии к коду:

- Строки 1-2 инициализируем начальных особей из равномерного распределения от -10 до 10
- Строки 3-5 сортируют точки по значению функции (первая точка - наилучшая

особь)

- Строка 6 выбирает индексы случайных особей для скрещивания
- Строки 7-9 рассчитывают значение функции приспособленности и вероятность того, что мы возьмем i-ю компоненту из новой особи
- Строки 10-11 осуществляют скрещивание особей по описанной ранее схеме - применяем ко всем особям кроме наилучшей и 200 наихудших
- Строка 12 заменяет худшие особи на случайные
- Строки 13-15 берут лучшую особь в качестве ответа и возвращают ответ

Пример работы алгоритма:

```
1 >> genetic_algorithm(1000, 200, 1000, 5)
2 ans =
3     0.0266    0.0194   -0.0009    0.0008   -0.0088
```

Как мы видим, мы находимся в окрестности оптимального решения, если увеличить число итераций до 10000, то значений будут порядка 1e-4, то есть очевидно, что алгоритм сходится к минимуму функции.

3.2 Задача разбиения множества

Постановка задачи: Пусть задано конечное множество из натуральных чисел A, необходимо разбить A на два подмножества K_1, K_2 такие, что

$$A = K_1 \cup K_2, K_1 \cap K_2 = \emptyset$$

таким образом, чтобы

$$H(K_1, K_2) = \left| \sum_{a_k \in K_1} a_k - \sum_{a_m \in K_2} a_m \right| \to \min$$

В целом, задача решается только полным перебором, однако с помощью генетического алгоритма можно решить значительно быстрее. Пусть $|A| = n$, в нашем случае возьмем

$n = 5000$, чтобы реализовать функции и работу алгоритма, представим решение $x = (x_1, \ldots, x_n)$, в котором каждая компонента либо 0, либо 1, в зависимости от того, в какое подмножество попадает элемент. Кроме того, в примере множество $A = \{1, \ldots, 5000\}$, поэтому сумму можно посчитать как сумму индексов элементов, которые относятся к конкретному подмножеству. Тогда реализация функции потерь выглядит следующим образом:

```
function [result] = func2(x)
    loss = [];
    for i = 1:size(x, 1)
        a_1 = find(x(i,:) == 1);
        a_0 = find(x(i,:) == 0);
        loss(i) = abs(sum(a_1) - sum(a_0));
    end
    result = loss;
end
```

В данной функции мы проходимся циклом по всем особям и считаем сумму согласно тому, как мы ранее описали. Функция приспособленности не отличается от задачи 3. 1.

Реализация алгоритма: Для данной задачи возьмем $M = 1000, M_c = 200, L = 100, n = 5000$. Посмотрим, сойдется ли алгоритм за 100 итераций.

```
function [result] = genetic_algorithm_2(m, m_c, l, n)
    x = binornd(1, 0.5, m, n);
    for iter_ = 1:l
        [~, indexes] = sort(fit_func(func2(x)), 'descend');
        x = x(indexes, :);
        ind = randi([1, m], [m-m_c-1, 1]);
        xi = rand(m-m_c-1, n);
        fit = fit_func(func2(x));
        probas = (fit(2:m-m_c) ./ (fit(2:m-m_c) + fit(ind))).';
```

```
        mask = 1 * (probas >= xi);
        x(2:m-m_c, :) = mask .* x(2:m-m_c, :) + (1 - mask) .* x
           (ind, :);
        x(m-m_c+1:m,:) = binornd(1, 0.5, m_c, n);
    end
    result = x(1,:);
end
```

Комментарии к коду: реализация алгоритма ничем не отличается от задачи 3. 1., кроме того, что теперь мы сэмплируем новые точки из биномиального распределения: выбор k успехов из n испытаний, где вероятность успеха равна 0.5. Таким образом, получаем векторы такого вида, который и ожидает увидеть на входе наша функция потерь. Пример работы алгоритма:

```
>> x = genetic_algorithm_2(1000, 200, 300, 5000);
>> func2(x)
ans =
     0
```

Бывает, что алгоритм скатывается в локальные минимумы, где значение функции потерь равно 2 или 4, однако это можно решить, несколько раз запустив алгоритм, либо же увеличив число особей / число итераций. В данном случае присутствует trade-off между стабильным достижением глобального минимума и временем работы алгоритма.

3.3 Задача линейного программирования

Постановка задачи: Задача производства n товаров: $T_1, \ldots, T_n$, для товаров требуется m ресурсов. $A = \{(a_{ij})\}$ - кол-во i-го ресурса, необходимое для производства j-го товара, $a_{ij} \geq 0$. Вектор $b = (b_1, \ldots, b_m)^T$ - ограничение ресурсов. Необходимо определить план производства товаров $x = (x_1, \ldots, x_n)^T$, $x_j \geq 0$, при этом должны учесть, что некоторые товары могут быть только в целочисленном количестве. Также для каждого товара заданы цены $c = (c_1, \ldots, c_n)$, цены положительные. Необходимо максимизиро-

вать следующую функцию:

$$F(x) = c_1 x_1 + \cdots + c_n x_n \to \max_x$$

При условиях:

$$a_{11} x_1 + \cdots + a_{1n} x_n \leq b_1$$

$$\cdots$$

$$a_{m1} x_1 + \cdots + a_{mn} x_n \leq b_m$$

Реализация условий задачи: Сначала создадим функцию, которая будет определять, выполняются ли для товаров ресурсные ограничения:

```
function result = constraint(x, A, b)
    result = all((x * A.' <= b), 2);
end
```

Данная функция просто проверяет, что все m условий выполняются.

Будем учитывать ограничения в функции потерь следующим образом: так как кол-во всех товаров неотрицательно и цены положительные, установим значение $F = 0$, если ресурсные ограничения для набора товаров не выполняются.

```
function vals = func_3(x, c, A, b)
    vals = x * c.';
    vals(constraint(x, A, b) == 0) = 0;
end
```

Кроме того, чтобы мы могли генерировать и натуральные, и просто неотрицательные числа, будем по особому генерировать наборы товаров - зададим int idx -> list, который хранит все индексы товаров, количество которых может принимать только натуральные значения.

```
function x = create_random_x(int_idx, m, n)
    x = rand(m, n) * 100;
    x(:, int_idx) = randi([0, 100], m, length(int_idx));
```

```
end
```

Сначала заполняем все равномерным распределением от 0 до 100, затем заменяем количества у целочисленных товаров на случайные целые числа от 0 до 100.

Реализация алгоритма: не отличается от предыдущих задач, единственное отличие в том, что так как у нас теперь задача максимизации, вместо fit функции будем использовать исходную функцию и в формулу для подсчета вероятностей добавим eps = 1e-5, так как в случае, если для обоих особей не выполнены ресурсные ограничения возникает в знаменателе p = 0/0, так как значения функции равны нулю.

```
function x = genetic_algorithm_3(m, m_c, l, n, c, A, b, int_idx
    )
    x = create_random_x(int_idx, m, n);
    for iteration = 1:l
        [~, indexes] = sort(func_3(x, c, A, b), 'descend');
        x = x(indexes, :);
        ind = randi([1, m], [m-m_c-1, 1]);
        xi = rand(m - m_c - 1, n);
        fit = func_3(x, c, A, b);
        probas = fit(2:m - m_c) ./ ((fit(2:m - m_c) + fit(ind))
            + 1e-5);
        mask = probas >= xi;
        x(2:m - m_c, :) = mask .* x(2:m - m_c, :) + (1 - mask)
           .* x(ind, :);
        x(m - m_c + 1:m, :) = create_random_x(int_idx, m_c, n);
    end
    x = x(1, :);
end
```

Пример работы алгоритма - зададим следующий пример:

$$A = \begin{pmatrix} 40 & 30 \\ 20 & 30 \end{pmatrix}, \quad b = (4000, 3000)^T, \quad c = (30, 40)^T, \quad int\_idx = [1]$$

Известно что для таких параметров истинный оптимум $x = (50, 200/3)$. Проверим наш алгоритм:

```
>> A = [[40, 30]; [20, 30]];
>> b = [4000, 3000];
>> c = [30, 40];
>> int_idx = [1];
>> genetic_algorithm_3(1000, 200, 500, 2, c, A, b, int_idx)
ans =
   50.0000   66.6619
```

Действительно, получаем значения практически неотличимые от истинного оптимума.