Algoritmi numerici pentru optimizare

I - Introducere

Prof.dr.ing. Gabriela Ciuprina

Universitatea "Politehnica" Bucureşti, Facultatea de Inginerie Electrică,
Departamentul de Electrotehnică

Suport didactic pentru disciplina *Algoritmi Numerici*, 2017-2018

Cuprins

1. Formularea problemei optimizării scalare
   - Formularea problemei
   - Minime globale/locale
   - Restricţii
   - Clasificarea problemelor
2. Formularea problemei optimizării vectoriale
   - Formularea problemei
   - Soluţii în sens Pareto
   - Reformularea ca problemă de optimizare scalară
3. Exemple
   - Exemple în inginerie
   - Exemple pentru testarea algoritmilor
4. Clasificarea metodelor
   - Metode deterministe
   - Metode stocastice

Formularea problemei

Să se găsească n parametri independenţi, notaţi $x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*$, pentru care expresia E este minimă, unde

$$E = f(x_1, x_2, \ldots, x_n), \tag{1}$$

şi $f : \Omega \to \mathbb{R}$, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, este dată.

Pe scurt:

$$(x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*) = \arg\min f(x_1, x_2, \ldots, x_n). \tag{2}$$

Notaţii

$$\mathbf{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^T \in \Omega. \tag{3}$$

$$\mathbf{x}_{\min} = [x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*]^T \in \Omega \tag{4}$$

$$\mathbf{x}_{\min} = \arg\min f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega$$

$$E_{\min} = f(\mathbf{x}_{\min}).$$

Formularea problemei

$$\mathbf{x}_{\min} = \arg\min f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \tag{5}$$

$$E_{\min} = f(\mathbf{x}_{\min}). \tag{6}$$

Observaţii:

1. Min / Max - limitare ?

$$\max\{f(\mathbf{x}) | \mathbf{x} \in \Omega\} = -\min\{-f(\mathbf{x}) | \mathbf{x} \in \Omega\}$$

2. Optimizarea "scalară" - un singur număr înglobează criterii
   - de proiectare ($\|$ performanţa cerută $-$ cea obţinută $\|$);
   - de economie (preţul).

$\Rightarrow$ *f* este numită *funcţie obiectiv*, *funcţie de cost*, *funcţie de merit*, *criteriu de performanţă*.

Minime globale/locale

$$\mathbf{x}_{\min} = \arg\min f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \tag{7}$$

$$E_{\min} = \min\{ f(\mathbf{x}) | \, \mathbf{x} \in \Omega \} \tag{8}$$

$\mathbf{x}_{\min}$ este *minim global* dacă

$$E_{\min} \leq f(\mathbf{x}), \quad \forall \, \mathbf{x} \in \Omega \tag{9}$$

- dacă $E_{\min} \leq f(\mathbf{x})$ doar într-o vecinătate a lui $\mathbf{x}_{\min}$ atunci minimul este *local*.
- în practică este dificil de stabilit dacă un minim găsit este local sau global;
- minimul global s-ar putea să nu fie unic.

Restricţii

$$\mathbf{x}_{\min} = \arg\min f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \tag{10}$$

$$E_{\min} = \min\{ f(\mathbf{x}) | \mathbf{x} \in \Omega\} \tag{11}$$

Ω = *domeniu de căutare*

- Dacă $\Omega = \mathbb{R}^n$ atunci optimizarea este fără restricţii de domeniu
- problemele reale sunt în foarte rare cazuri fără restricţii;
- analiza metodelor de optimizare fără restricţii este importantă pentru
  1. a înţelege principiile de bază ale optimizării cu restricţii;
  2. a reformula (dacă este posibil) problemele cu restricţii ca probleme fără restricţii.

Restricţii

Tipuri de restricţii

- *de domeniu*

$$x_{L,i} \leq x_i \leq x_{U,i} \tag{12}$$

unde $x_{L,i}$ şi $x_{U,i}$ sunt limite fixate, $i = 1, \ldots, n$;

- *de tip inegalitate*

$$g_i(x_1, x_2, \ldots, x_n) \leq 0 \tag{13}$$

unde $g_i : \Omega \to \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$ sunt m funcţii date.

- *de tip egalitate*

$$h_j(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \tag{14}$$

unde $h_j : \Omega \to \mathbb{R}$, $j = 1, \ldots, p$ sunt p funcţii date.

Obs: restricţiile de domeniu pot fi reformulate ca restricţii de tip inegalitate.

Forma generală a problemei minimizării cu restricţii

$$\mathbf{x} =? \quad \min\{f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \Omega, g_i(\mathbf{x}) \leq 0, i \in \mathcal{I}; h_j(\mathbf{x}) = 0, j \in \mathcal{J}\} =?, \tag{15}$$

unde $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $\mathcal{I}$ şi $\mathcal{J}$ sunt mulţimi de indici.

- Domeniul de căutare în care restricţiile sunt satisfăcute = *domeniu admisibil*;
- Optimizarea cu restricţii este mult mai dificilă decât optimizarea fără restricţii.

Clasificarea problemelor de optimizare scalară

$$\min\{f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^n, g_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1, m; h_j(\mathbf{x}) = 0, j = 1, p\}$$

1. Probleme fără restricţii: $\Omega = \mathbb{R}^n$, $m = 0$, $p = 0$;
2. Probleme doar cu restricţii de domeniu: $m = 0$, $p = 0$;
3. Probleme de programare[1] neliniară: f, g_i, h_j neliniare;
4. Probleme de programare liniară: f, g_i, h_j liniare;
5. Probleme de programare pătratică: f pătratică; g_i, h_j liniare;
6. Probleme de optimizare a reţelelor (f, g_i, h_j provin din analiză de grafuri);
7. Programare întreagă ($\mathbf{x} \in \mathbf{Z}^n$);
8. Programare mixtă (unii parametri sunt întregi, iar alţii sunt reali);

[1] "programare" = optimizare

Formularea problemei optimizării vectoriale

Urmăresc satisfacerea simultană a mai multor obiective (e.g.: cost minim, randament maxim, solicitări minime, etc.).

$$\min\{\mathbf{F}(\mathbf{x}) :, g_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1, m; h_j(\mathbf{x}) = 0, j = 1, p\} \tag{16}$$

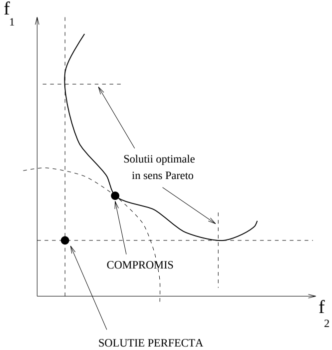
unde $\mathbf{F} : \Omega \to \mathbb{R}^q, \Omega \subset \mathbb{R}^n, g_i : \Omega \to \mathbb{R}, h_j : \Omega \to \mathbb{R}$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \ldots, f_q(\mathbf{x})), \tag{17}$$

unde $f_k : \Omega \to \mathbb{R}, k = 1, q$.
De obicei obiectivele intră în conflict, soluţiile care ar minimiza fiecare obiectiv în parte sunt diferite
$\Rightarrow$ nu există soluţie acolo unde toate obiectivele îşi ating minimul.

Soluţii în sens Pareto

Se caută o soluţie optimală în sens Pareto[2].



Interpretarea geometrică a soluţiilor optimale în sens Pareto.

O problemă de optimizare în care îmbunătăţirea unui obiectiv cauzează degradarea a cel puţin unui alt obiectiv nu are soluţie decât în sens optimal Pareto.

[2] concept introdus în 1896 pentru probleme din economie

Reformularea ca problemă de optimizare scalară

De multe ori se reduc la o problemă de optimizare scalară

- *Ponderarea obiectivelor*

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{q} w_k f_k(\mathbf{x}) \tag{18}$$

w_k sunt ponderi care se stabilesc printr-un proces iterativ

- *Ponderarea distanţelor*

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{q} w_k (f_k^* - f_k(\mathbf{x}))^2 \tag{19}$$

f_k^* sunt cerinţele de atins (minimele funcţiilor obiectiv);

- *Folosirea unui criteriu de tip "minimax"*

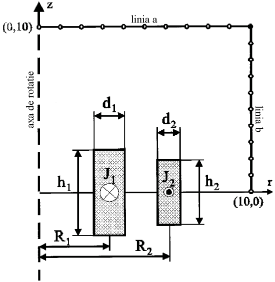
$$\min \max |w_k f_k(\mathbf{x})| \tag{20}$$

- *Reformularea problemei* - numai unul din obiective se minimizează, celelalte devin restricţii suplimentare.

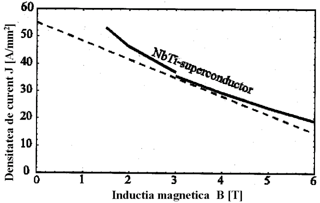
Exemplul 1

proiectare = optimizare

Ex.1. Optimizarea unui sistem de stocare a energiei (problema TEAM[3]



Dispozitiv SMES cu doi solenoizi.



Restricţia impusă pentru supraconductor.

[3] TEAM (Testing Electromagnetic Analysis Methods) = grup de lucru internaţional care îşi propune să compare programele pentru calculul câmpului electromagnetic, detalii şi formulări detaliate se găsesc la http://www.compumag.org/jsite/team.html nr.22)

Exemplul 1

Să se găsescă $(R_1, R_2, h_1/2, h_2/2, d_1, d_2, J_1, J_2)$ având restricţiile:

	R_1 [m]	R_2 [m]	$h_1/2$ [m]	$h_2/2$ [m]	d_1 [m]	d_2 [m]	J_1 [MA/m^2]	J_2 [MA/m^2]
min	1.0	1.8	0.1	0.1	0.1	0.1	10.0	-30.0
max	4.0	5.0	1.8	1.8	0.8	0.8	30.0	-10.0

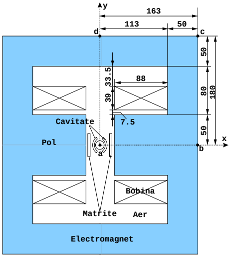
- Energia magnetică stocată să fie $E_{\mathrm{ref}} = 180$ MJ;
- Să fie garantată supraconductibilitatea;
  $|\mathbf{J}| \leq (-6.4|\mathbf{B}| + 54.0) \quad \mathrm{A/mm}^2$.
- Câmpul de dispersie (măsurat la 10 m de dispozitiv) să fie cât mai mic posibil.

$$f(R_1, R_2, h_1/2, h_2/2, d_1, d_2, J_1, J_2) = \frac{B^2_{\mathrm{stray}}}{B^2_{\mathrm{norm}}} + \frac{|E - E_{\mathrm{ref}}|}{E_{\mathrm{ref}}} \qquad (21)$$

$E_{\mathrm{ref}} = 180$ MJ, $B_{\mathrm{norm}} = 2.0 \cdot 10^{-4}$T şi $B^2_{\mathrm{stray}} = \frac{\sum_{i=1}^{22} |B_{\mathrm{stray}_i}|^2}{22}$.
(B^2_{stray} - foloseşte câmpul în puncte pe liniile a şi b).

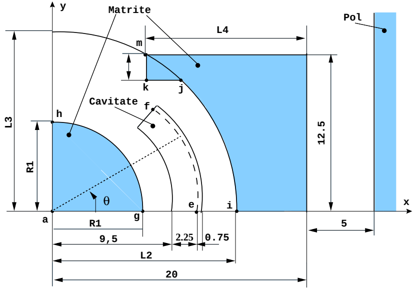
Exemplul 2

Ex.2. Optimizarea unei matriţe cu electromagnet folosită pentru orientarea pulberilor magnetice (problema TEAM nr.25)



a-b-c-d: Frontiera Dirichlet
d-a: Frontiera Neumann
(a) Vedere de ansamblu

Matriţă cu electromagnet.



(b) Detaliu

Detaliu în zona de interes.

Exemplul 2

Să se găsescă (R_1, L_2, L_3, L_4) având restricţiile

	R_1 [mm]	L_2 [mm]	L_3 [mm]	L_4 [mm]
min	5	12.6	14	4
max	9.4	18	45	19

- a.î. pentru o solenaţie de 4253 A-spiră, câmpul magnetic în cavitate să fie orientat radial:
  $B_x = 0.35 \cos\theta$ [T] $\quad B_y = 0.35 \sin\theta$ [T]

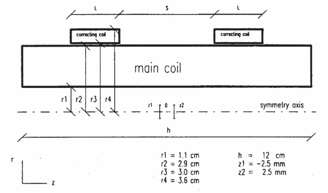
Matriţa şi electromagnetul au curba de magnetizare dată (oţel).

B [T]	0.0	0.11	0.18	0.28	0.35	0.74	0.82	0.91
H [A/m]	0.0	140	178	215	253	391	452	529
B [T]	0.98	1.02	1.08	1.15	1.27	1.32	1.36	1.39
H [A/m]	596	677	774	902	1164	1299	1462	1640
B [T]	1.42	1.47	1.51	1.54	1.56	1.60	1.64	1.72
H [A/m]	1851	2262	2685	3038	3395	4094	4756	7079

$$f(R_1, L_2, L_3, L_4) = \sum_{i=1}^{n} [(B_{xp_i} - B_{xo_i})^2 + (B_{yp_i} - B_{yo_i})^2] \qquad (22)$$

Exemplul 3

Ex.3. Optimizarea unei configuraţii de solenoizi (problema Loney[4])



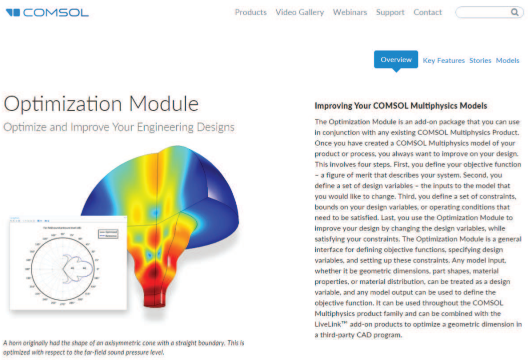
Secţiune transversală.

Să se găsescă parametrii geometrici (S, L) astfel încât câmpul magnetic în mijlocul solenoidului să fie uniform.

$$f(S, L) = \frac{B_{\max} - B_{\min}}{B_0} \qquad (23)$$

[4] P. di Barba, A. Gottvald, A. Savini, *Global optimization of Loneyş solenoid: a benchmark problem.* International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics. Vol 4 (1995), pages 273-276. ISSN 0925-2096.

Alte exemple - optimizări în inginerie



COMSOL

Products Video Gallery Webinars Support Contact

Overview Key Features Stories Models

Optimization Module

Optimize and Improve Your Engineering Designs

A horn originally had the shape of an axisymmetric cone with a straight boundary. This is optimized with respect to the far-field sound pressure level.

Improving Your COMSOL Multiphysics Models

The Optimization Module is an add-on package that you can use in conjunction with any existing COMSOL Multiphysics Product. Once you have created a COMSOL Multiphysics model of your product or process, you always want to improve on your design. This involves four steps. First, you define your objective function – a figure of merit that describes your system. Second, you define a set of design variables – the inputs to the model that you would like to change. Third, you define a set of constraints, bounds on your design variables, or operating conditions that need to be satisfied. Last, you use the Optimization Module to improve your design by changing the design variables, while satisfying your constraints. The Optimization Module is a general interface for defining objective functions, specifying design variables, and setting up these constraints. Any model input, whether it be geometric dimensions, part shapes, material properties, or material distribution, can be treated as a design variable, and any model output can be used to define the objective function. It can be used throughout the COMSOL Multiphysics product family and can be combined with the LiveLink™ add-on products to optimize a geometric dimension in a third-party CAD program.

http://www.comsol.com/models/optimization-module

Alte exemple - optimizări în inginerie

COMSOL

Products Video Gallery Webinars

APPLICATION GALLERY

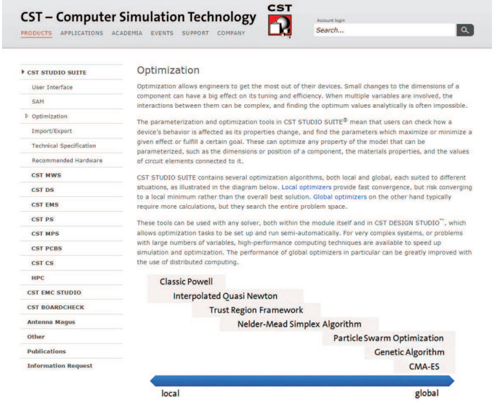
Shape Optimization of a Tuning Fork

Application ID: 8499

This model simulates a tuning fork for tuning musical instruments which, if correctly designed, should sound the note of A, 440 Hz. It computes the fundamental eigenfrequency and eigenmode for the tuning fork. Although the example seems to be somewhat academic in nature, the eigenfrequencies and eigenmodes of microscopic tuning forks are also used in quartz watches and other electronic devices.

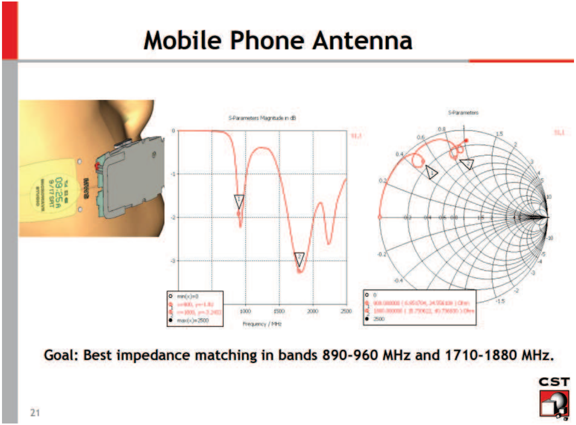
https://www.comsol.com/model/shape-optimization-of-a-tuning-fork-8499

Alte exemple - optimizări în inginerie



https://www.cst.com/Products/CSTS2/Optimization

Alte exemple - optimizări în inginerie



https://www.cst.com/content/events/downloads/eugm2011/talk_6-1-4_cst_ugm_2011.pdf

Alte exemple - optimizări în inginerie

infolytica corporation

Your account | Français

PRODUCTS | APPLICATIONS | SUPPORT | COMPANY | NEWS | CONTACT US

CONTACT SALES

OptiNet

AUTOMATED DESIGN OPTIMIZATION

OptiNet is an automated design optimization option to MagNet, ElecNet and MagNet-ThermNet coupled together. Using advanced and efficient algorithms, OptiNet can find optimal values for different design variables within the constraints specified.

OptiNet's useful features include:

- Continuous-value and discrete-value variables and optimization
- Evolutionary-based Stochastic search is very efficient, even for a large number of parameters
- Built-in and customizable scripts for objective functions and constraints
- Evaluate the impact of variations in the design parameters

OptiNet offers an integrated **Automated Optimal Design environment** compatible with the industrial design process by meeting the following requirements:

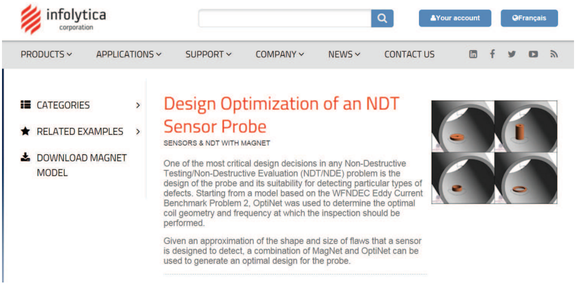
Robust	Independent of the number of design variables, problem type and objective
Global Search Oriented	Identifies the global minimum of an objective function
Derivative-Free	OptiNet avoids errors by using proper functions and not their derivatives
Fast	Highest possible efficiency with freedom to choose between accuracy and computing time

http://www.infolytica.com/en/products/optinet/

Alte exemple - optimizări în inginerie

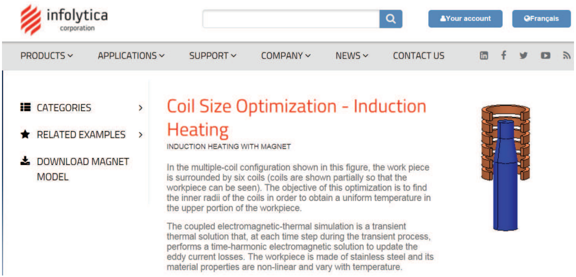
http://www.infolytica.com/en/applications/ex0123/

Alte exemple - optimizări în inginerie

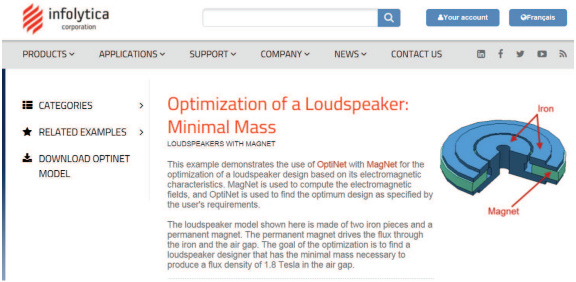


http://www.infolytica.com/en/applications/ex0116/

Alte exemple - optimizări în inginerie



Alte exemple - optimizări în inginerie



http://www.infolytica.com/en/applications/ex0086/

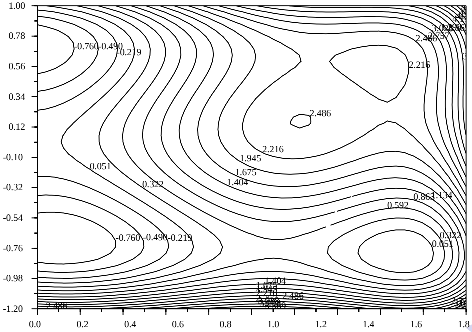
Alte exemple - optimizări în inginerie

http://www.infolytica.com/en/applications/ex0132/

Exemple simple pentru testarea algoritmilor

Funcţia "six-hump camel back" (cămila cu şase cocoaşe)

$$C(x, y) = \left(4 - 2.1x^2 + \frac{x^4}{3}\right) x^2 + xy + \left(-4 + 4y^2\right) y^2 \quad (24)$$

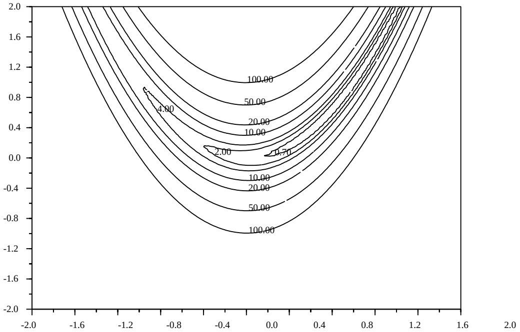


$-3 \leq x \leq 3$ şi
$-2 \leq y \leq 2$
Un minim global = -1.03163 în două puncte diferite: $(x, y) = (-0.0898, -0.7126)$ şi $(0.0898, -0.7126)$.

Exemple simple pentru testarea algoritmilor

Funcţia lui Rosenbrock ("funcţia banană")

$$B(x, y) = 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2 \quad (25)$$

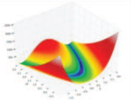


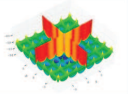
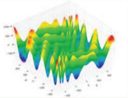
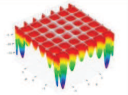
$-2.048 \leq x \leq 2.048$ şi $-2.048 \leq y \leq 2.048$

Un minim global egal cu 0 în punctul $(x, y) = (1, 1)$. Minime locale nu există, dar funcţia are un relief complicat pentru algoritmii de optimizare

Exemple simple pentru testarea algoritmilor

Alte exemple de acest tip https://en.wikipedia.org/wiki/Test_functions_for_optimization

Rosenbrock function	

Cross-in-tray function:		$f(x,y) = -0.0001\left(\left\lvert\sin(x)\sin(y)\exp\left(\left\lvert 100 - \frac{\sqrt{x^2+y^2}}{\pi}\right\rvert\right)\right\rvert + 1\right)^{0.1}$
Eggholder function:		$f(x,y) = -(y+47)\sin\left(\sqrt{\left\lvert y + \frac{x}{2} + 47\right\rvert}\right) - x\sin\left(\sqrt{\lvert x-(y+47)\rvert}\right)$
Hölder table function:		$f(x,y) = -\left\lvert\sin(x)\cos(y)\exp\left(\left\lvert 1 - \frac{\sqrt{x^2+y^2}}{\pi}\right\rvert\right)\right\rvert$

Clasificarea metodelor

În general, metodele de optimizare sunt iterative.

$$E_0, E_1, \ldots, E_k, \ldots$$

E_k este valoarea minimă obţinută la iteraţia k.

- Dacă E_k nu scade un număr de iteraţii, este posibil să se fi atins un minim, dar este imposibil să se precizeze dacă acesta este global sau nu.
- Nicio tehnică de optimizare nu garantează atingerea unui minim global.

Viteza relativă de convergenţă = se estimează de obicei prin numărul de evaluări ale functiei obiectiv necesare pentru a reduce valoarea E_k de un anumit număr de ori.

Metode deterministe

I. Deterministe - conduc la aceeaşi soluţie pentru rulări diferite ale programului, dacă pornesc din aceleaşi condiţii iniţiale şi au aceeaşi parametri.

- Dezavantaj: găsesc întotdeauna un minim local, dependent de iniţializare;
- Avantaj: efort de calcul mic.
  În problemele de optimizare din efortul de calcul se exprimă în număr de evaluări de funcţii obiectiv.

Pot fi

1. de ordin zero - necesită doar evaluări de funcţii obiectiv;

   Ex: metoda căutării simultane; metoda căutării dihotomice; metoda Fibonacci; metoda secţiunii de aur;

   metoda simplexului descendent (Nelder-Mead); metoda Powell, etc.
2. de ordin superior (1,2) - necesită şi evaluări ale derivatelor funcţiei obiectiv.

Metode stocastice

II. Stocastice - au un caracter aleator, nu conduc la aceeaşi soluţie, chiar dacă pornesc din aceleaşi condiţii iniţiale şi au aceeaşi parametri;

- Dezavantaj: necesita un efort de calcul foarte mare.
- Avantaj: au o probabilitate foarte mare de a găsi un minim global.

Ex: metoda căutării aleatoare; algoritmi evoluţionişti; algoritmi genetici, optimizare bazată pe roiuri de particule (*particle swarm*), colonii de furnici (*ant colony*), călirea simulată (*simulated annealing*), căutare tabu (*tabu search*), etc.

Răsfoiţi şi https://en.wikipedia.org/wiki/Mathematical_optimization

- [Ciuprina02] G.Ciuprina, D.Ioan, I.Munteanu, M.Rebican, R.Popa, Optimizarea numerica a dispozitivelor electromagnetice, Editura Printech, 2002.

  disponibilă la http://www.lmn.pub.ro/∼gabriela/books/opt2002.pdf
- [Cheney08] Ward Cheney and David Kincaid, *Numerical Mathematics and Computing*, Brooks/Cole publishing Company,2008. (Capitolul 16 - Minimization of functions)