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

Notes

Cuprins

Notes

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

Pe scurt:

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

Notaţii

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

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

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

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

Notes

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*.

Notes

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.

Notes

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.

Notes

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

- *de tip egalitate*

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

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

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

Notes

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.

Notes

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

Notes

Formularea problemei optimizării vectoriale

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

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

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

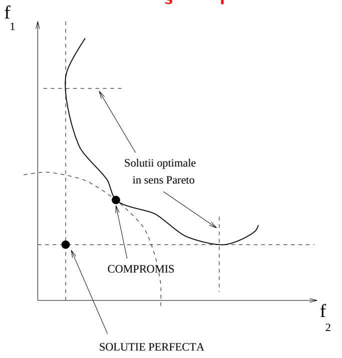
$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \ldots, f_q(\mathbf{x})), \qquad (17)$$

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.

Notes

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

Notes

Reformularea ca problemă de optimizare scalară

De multe ori se reduc la o problemă de optimizare scalară

- *Ponderarea obiectivelor*

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

w_k sunt ponderi care se stabilesc printr-un proces iterativ

- *Ponderarea distanţelor*

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

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

- *Folosirea unui criteriu de tip "minimax"*

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

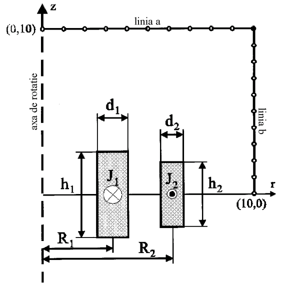
- *Reformularea problemei* - numai unul din obiective se minimizează, celelalte devin restricţii suplimentare.

Notes

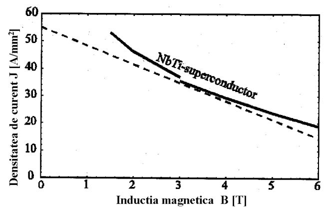
Exemplul 1

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 $E_{\text{ref}} = 180$ 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.

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

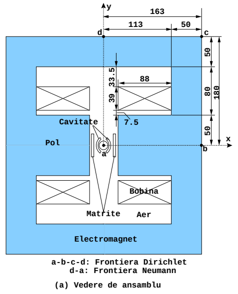
$E_{\text{ref}} = 180$ MJ, $B_{\text{norm}} = 2.0 \cdot 10^{-4}$T şi $B_{\text{stray}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{22} |B_{\text{stray}_i}|^2}{22}$.
(B_{stray}^2 - foloseşte câmpul în puncte pe liniile a şi b).

Notes

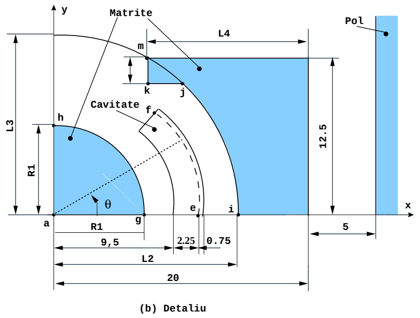
Notes

Exemplul 2

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



Matriţă cu electromagnet.



Detaliu în zona de interes.

Notes

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).

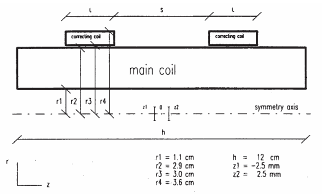
B [T]	0.0	0.11	0.18	0.28	0.35	0.74	0.82	0.91
H [A/m]	0.0	140	178	215	253	391	452	529
B [T]	0.98	1.02	1.08	1.15	1.27	1.32	1.36	1.39
H [A/m]	596	677	774	902	1164	1299	1462	1640
B [T]	1.42	1.47	1.51	1.54	1.56	1.60	1.64	1.72
H [A/m]	1851	2262	2685	3038	3395	4094	4756	7079

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

Notes

Exemplul 3

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



Secţiune transversală.

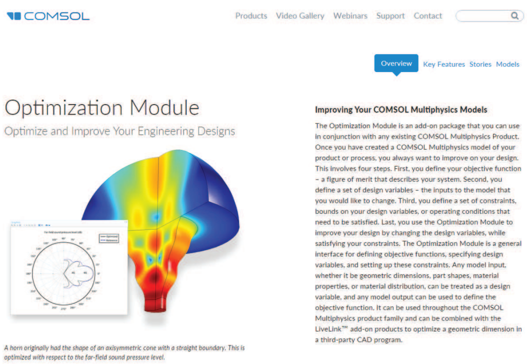
Să se găsescă parametrii geometrici (S,L) astfel încât câmpul magnetic în mijlocul solenoidului să fie uniform.

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

[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.

Notes

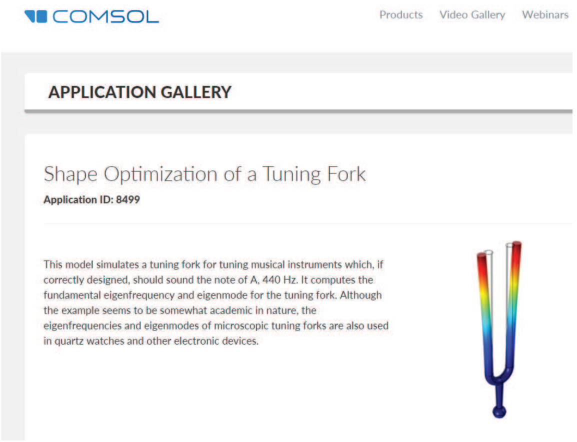
Alte exemple - optimizări în inginerie



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

Notes

Alte exemple - optimizări în inginerie

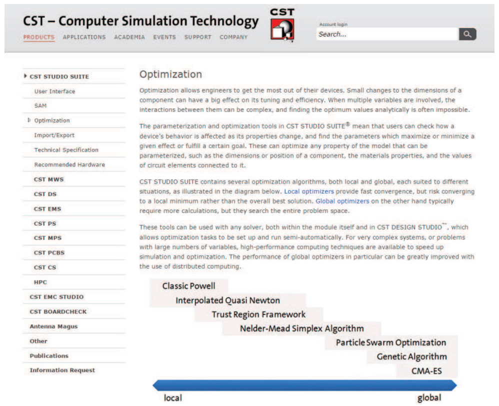


https://www.comsol.com/model/shape-optimization-of-a-tuning-fork-8499

Notes

Formularea problemei optimizării scalare
Formularea problemei optimizării vectoriale
Exemple
Clasificarea metodelor
Exemple în inginerie
Exemple pentru testarea algoritmilor

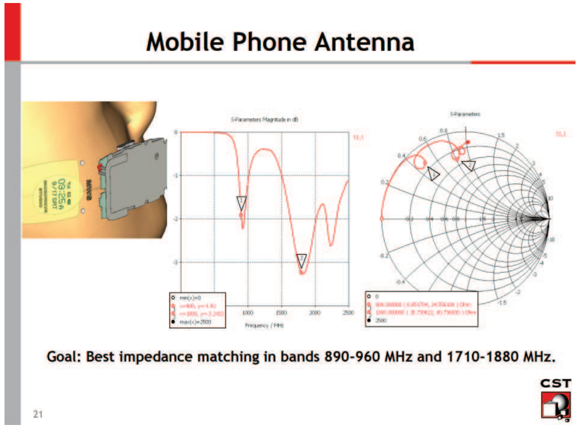
Alte exemple - optimizări în inginerie



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

Notes

Alte exemple - optimizări în inginerie



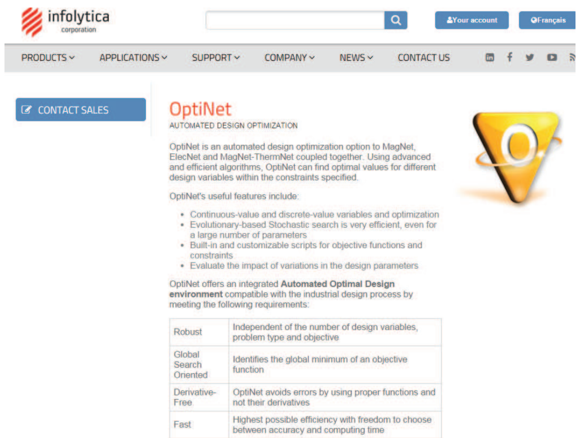
https://www.cst.com/content/events/downloads/eugm2011/talk_6-1-4_cst_ugm_2011.pdf

Notes

Formularea problemei optimizării scalare
Formularea problemei optimizării vectoriale
Exemple
Clasificarea metodelor

Exemple în inginerie
Exemple pentru testarea algoritmilor

Alte exemple - optimizări în inginerie



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

Notes

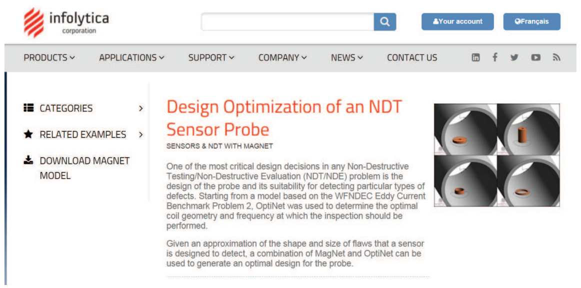
Alte exemple - optimizări în inginerie

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

Notes

Formularea problemei optimizării scalare
Formularea problemei optimizării vectoriale
Exemple
Clasificarea metodelor
Exemple în inginerie
Exemple pentru testarea algoritmilor

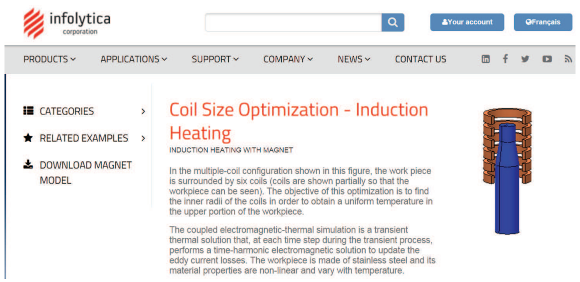
Alte exemple - optimizări în inginerie



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

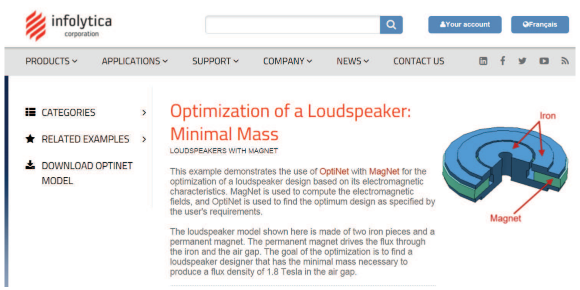
Notes

Alte exemple - optimizări în inginerie



Notes

Alte exemple - optimizări în inginerie



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

Notes

Alte exemple - optimizări în inginerie

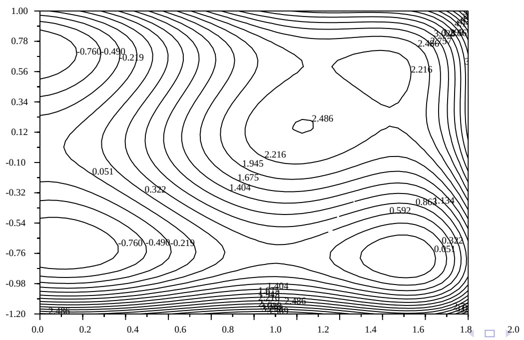
http://www.infolytica.com/en/applications/ex0132/

Notes

Exemple simple pentru testarea algoritmilor

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

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



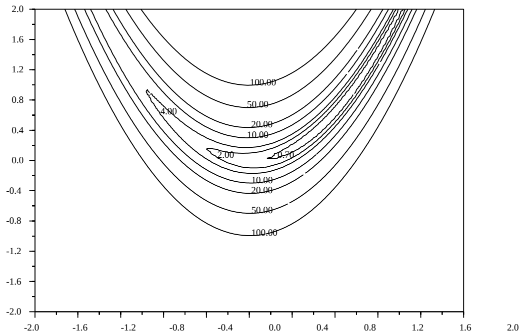
$-3 \leq x \leq 3$ şi
$-2 \leq y \leq 2$
Un minim global $= -1.03163$ în două puncte diferite: $(x, y) = (-0.0898, -0.7126)$ şi $(0.0898, -0.7126)$.

Notes

Exemple simple pentru testarea algoritmilor

Funcţia lui Rosenbrock ("funcţia banană")

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



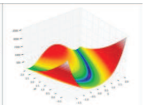
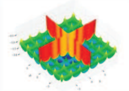
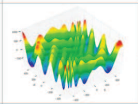
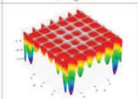
$-2.048 \leq x \leq 2.048$ şi $-2.048 \leq y \leq 2.048$

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

Notes

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

Notes

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.

Notes

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.

gradienţilor conjugaţi; metode cvasi-Newton, etc.

Notes

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

Notes

- [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)

Notes