

08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

ESTUDO DE MÉTODOS DE MINIMIZAÇÃO PARA UM PROBLEMA BLACK BOX

Bruno Henrique Marques Margotto¹ – brunohmmargotto@gmail.com

Bruno Muniz de Freitas Miotto¹ – brunomiotto77@gmail.com

Carlos Eduardo Polatschek Kopperschmidt¹ – cadupolkop@gmail.com

José Joaquim Conceição Soares Santos² – jjcssantos@yahoo.com.br

Júlio Dutra³ – juliosdutra@yahoo.com.br

Wellington Betencurte da Silva³ – wellingtonufes@gmail.com

¹ Universidade Federal do Espírito Santo – Vitória, ES, Brasil

² Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFES – Vitória, ES, Brasil

³ Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, UFES – Alegre, ES, Brasil

Resumo. Este artigo realiza o estudo dos métodos de otimização determinístico, Steepest Descent, e heurístico, Differential Evolution e Particle Swarm, para um problema black box genérico com duas variáveis em sua função objetivo. O método determinístico apresentou forte dependência dos valores iniciais adotados, apresentando diversos mínimos locais, sendo necessário a adoção de múltiplos pontos iniciais. Os métodos Particle Swarm e Differential Evolution apresentam resultados razoáveis, porém o funcionamento dos algoritmos heurísticos impossibilita que o ponto encontrado seja certamente definido como mínimo global.

Palavras-chave: Otimização, Black box, Determinístico, Heurístico.

1. INTRODUÇÃO

O objetivo de um problema de otimização é melhorar a performance ou custo - output - ajustando as variáveis de entrada - input - (Munõz et al., 2015). Segundo Xiao et al. (2015), muitos dos problemas reais de otimização esta relação entre input-output é vaga, resultando no chamado problema de otimização de função caixa-preta, ou BBFOP (black box function optimization problem).

Quando input e output possuem números reais como variáveis o problema é referido como problema de otimização contínua, sendo este tipo de problema comum na ciência, engenharia, finanças entre outros (Munõz et al., 2015).

Quando o problema de otimização consiste em minimizar o output trata-se de um problema de minimização, e quando este problema possui comportamento não convexo muitos

algoritmos apresentam um mínimo local ao invés de um global, como explicitado por Vavasis (1993), sendo que os mínimos locais são fundamentais para futuras tomadas de decisão quando o mínimo global não pode ser encontrado (Xiao et al., 2015).

É extremamente difícil de os pesquisadores estarem familiarizados com todos os métodos de otimização dado o aumento no número de algoritmos desenvolvidos pela comunidade nas últimas décadas, e a escolha do melhor algoritmo é não trivial, sendo que mesmo com todo o conhecimento dos algoritmos é possível que se fracasse no processo (Munõz et al., 2015).

Selecionar o algoritmo mais apropriado para a otimização de um black box é desafiador, o problema pode conter ruído e incertezas, sendo em muitos casos o input e output analisados sem conhecimento do interior do problema (Munõz et al., 2015).

Neste artigo é minimizado um problema black box genérico com dois parâmetros de entrada sem prévio conhecimento do problema, indicando as estratégias aplicadas para tal otimização.

2. REFERENCIAL TEÓRICO

De acordo com Rodrigues (2005), os métodos determinísticos, também chamados de métodos clássicos, compõem uma metodologia de otimização que envolve cálculo de derivadas de primeira ordem ou segunda ordem. Já os métodos heurísticos, também chamados de probabilísticos, possuem a propriedade de não necessitarem do cálculo de derivadas em seu procedimento de cálculo, mas sim por encontrarem as soluções mais prováveis que otimizam a função objetivo iterativamente. Para tanto, os processos de otimização heurísticos são normalmente computacionalmente caros devido à elevada necessidade de se analisar os resultados obtidos com as possíveis soluções para a função objetivo.

2.1 Differential Evolution

O método Differential Evolution (em português Evolução Diferenciada) é um método heurístico e possui a influência da seleção natural de Darwin, onde os mais fortes de uma população sobrevivem, sendo proposto por Storn e Price (1997).

Os membros da população mais fortes são aqueles que apresentam os menores ou maiores valores finais da função objetivo estudada, para minimização e maximização, respectivamente. Sua formulação é relativamente simples e de fácil implementação computacional quando comparado aos outros métodos heurísticos.

O método realiza a análise da mutação gerada dos filhos resultantes do cruzamento entre mãe e pai, processo chamado de crossover. Caso este filho gerado apresente características mais fortes de sobrevivência da população, ele substituirá o pai, continuando o processo de mutação até que se obtenha um valor ótimo. O processo iterativo deste método pode ser melhor compreendido na figura 1.

Usualmente a população adotada é 10 vezes maior o número de variáveis e os fatores CR e F são usualmente de valor 0,9 e 0,8, respectivamente.

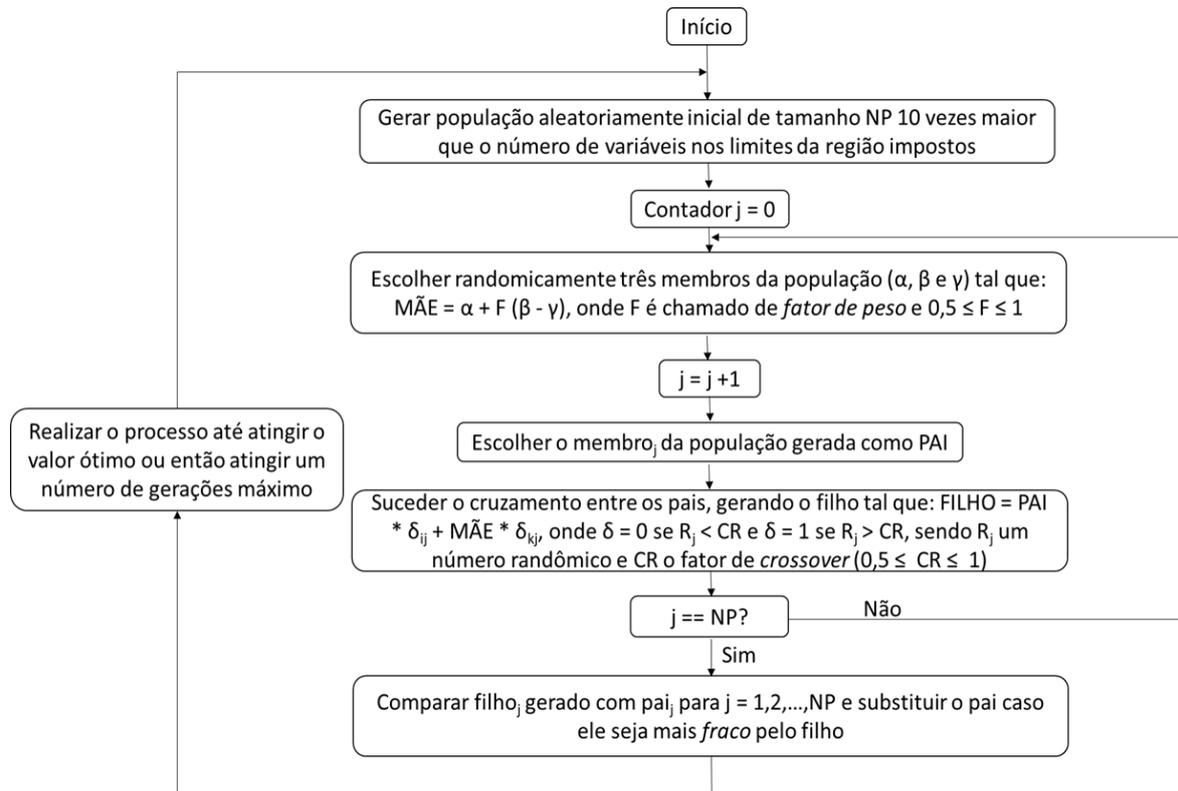


Figura 1 - Diagrama do processo iterativo para o método Differential Evolution

2.2 Particle Swarm

O Particle Swarm é um método heurístico desenvolvido por Kennedy e Eberhart (1995) que se baseia no comportamento social das espécies em relação às regras sociais estabelecidos na sociedade e na individualidade de cada indivíduo. Quanto maior a individualidade, maior a quantidade de locais alternativos, sendo que com uma individualidade elevada o melhor local é impossível de ser obtido, enquanto uma alta sociabilidade promove aprendizado com a vizinhança, mas causa uma convergência sem que seja obtido o local ótimo, precisando que estas características sejam equilibradas.

Os valores de NP (número de indivíduos da população) e β são usualmente 10 vezes maior que o número de variáveis e 2, respectivamente, e α varia de 0 a 1. Os termos R1 e R2 representam números randômicos entre 0 e 1, que influenciam na individualidade e sociabilidade, respectivamente, enquanto N é o número de variáveis do problema. O procedimento de cálculo pode ser observado a partir da figura 2.

De acordo com Lacerda (2007), este método é relativamente rápido para encontrar a região onde se convergem as boas soluções, entretanto lento para se obter um resultado mais fino.

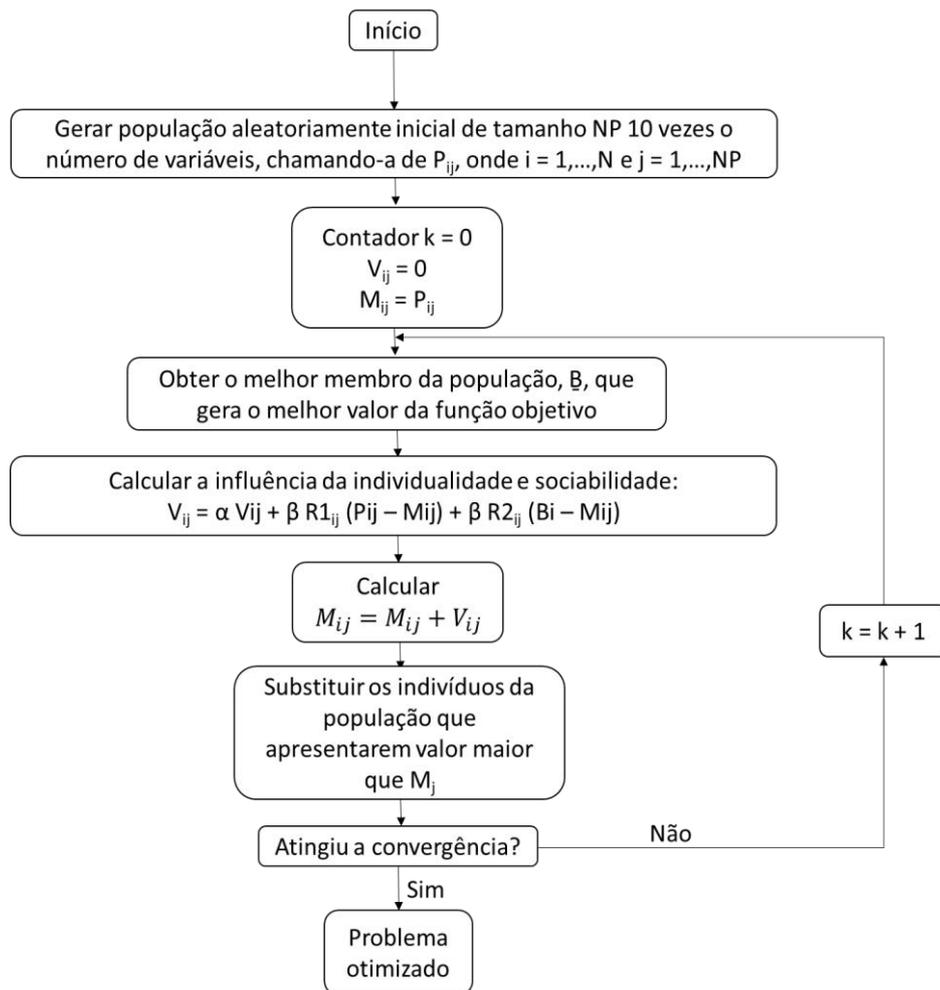


Figura 2 - Diagrama do processo iterativo para o método Particle Swarm

2.3 Método Steepest Descent

O Steepest Descent é, segundo Schneider (2015) o método mais clássico em Otimização Contínua. Foi proposto por Cauchy (1847) sendo um método de primeira ordem, utilizando apenas dados da função e do gradiente da função nos pontos obtidos a cada iteração. Se trata de um método de descida, onde a cada novo ponto obtido uma direção de descida é escolhida de modo a proporcionar um decréscimo na função objetivo, variando o tamanho do passo de busca.

É escolhido um passo inicial e determinado um valor inicial arbitrário para a função, enquanto o gradiente da função for diferente de zero - ou um valor próximo a zero dado pela tolerância indicada no algoritmo - uma nova iteração $k + 1$ é realizada alterando o valor do passo de forma que a direção escolhida a cada iteração seja a direção oposta ao gradiente da função na iteração k . O algoritmo utilizado neste método pode ser observado na figura 3.

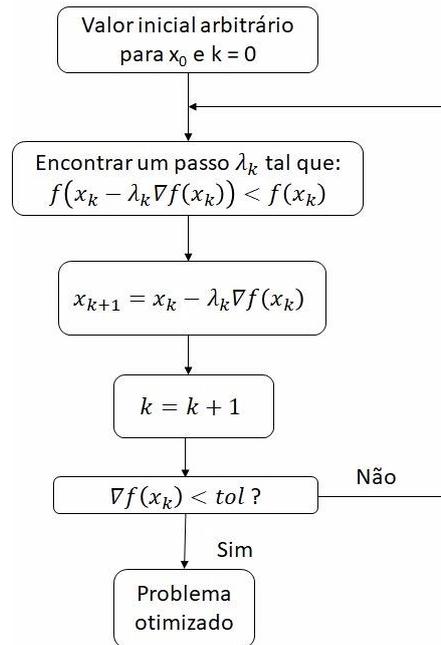


Figura 3 - Diagrama do processo iterativo para o método Steepest Descent

3. METODOLOGIA

Por se tratar de um problema com apenas dois parâmetros de entrada o recurso gráfico se mostra vantajoso no que se refere a avaliar os resultados obtidos durante a otimização, portanto, plota-se o gráfico da função objetivo, indicado na Figura 4, onde (a) indica o comportamento da função objetivo para um espaço de busca de -600 a 600 para cada variável, (b) indica um espaço de -100 a 100 e (c) de -10 a 10.

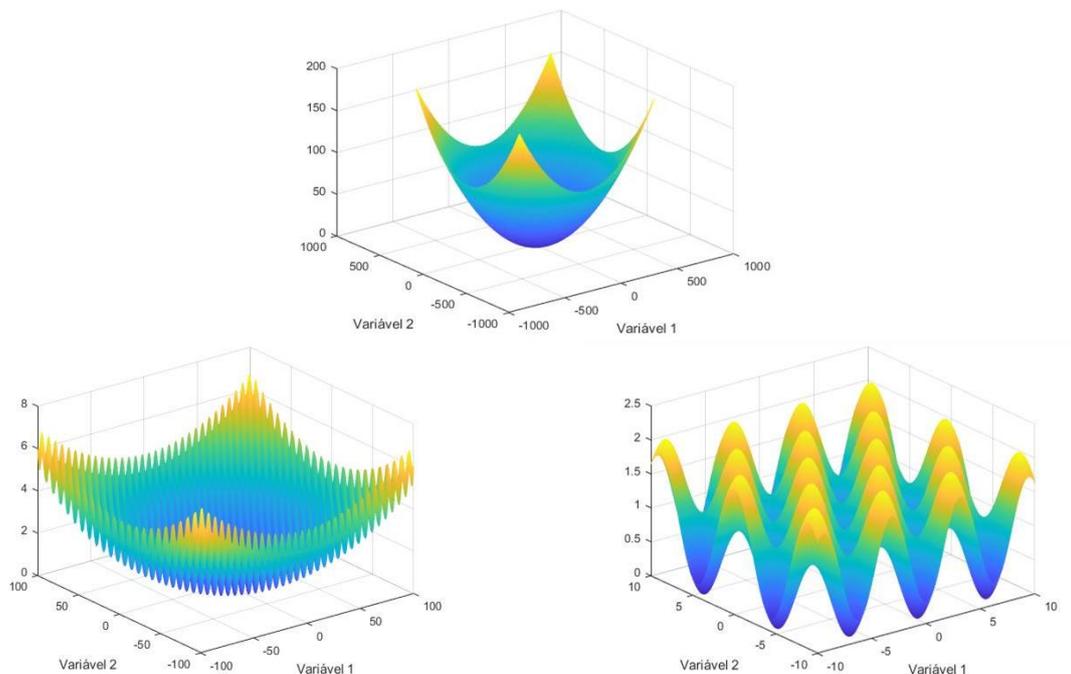


Figura 4 – Gráfico da função objetivo utilizada neste trabalho

Dado o comportamento da função implementa-se a redução do domínio de estudo de modo a avaliar os resultados ótimos do problema para três casos distintos:

- Caso 1 - Avalia-se o comportamento da otimização em todo o domínio definido para a função, ou seja, para cada variável um espaço definido de -600 a 600.
- Caso 2 - De forma arbitrária, reduz-se o espaço em estudo para cada variável para -100 a 100.
- Caso 3 - Reduz-se o caso 2 em dez vezes, sendo estudado o valor ótimo no espaço de -10 a 10.

Ao final dos resultados com métodos heurísticos são realizados testes com o método Steepest Descent para comparação dos resultados em relação ao custo computacional e resultado ótimo.

Os procedimentos experimentais são executados no Matlab® 2017a em um computador com processador Intel Core i5 8250U, 1.60GHz, 8GB RAM e SO Windows 10.

4. RESULTADOS

Differential Evolution (DE) - Utilizou-se como critérios para a implementação da população de 200 e número de iterações de 250, com parâmetros de CR = 0,9 e F = 0,8. Os resultados obtidos para o Caso 1 são apresentados na Figura 5.

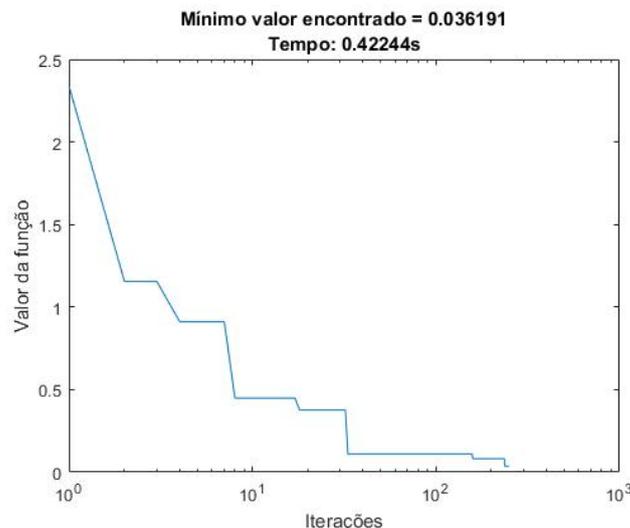


Figura 5 - Resultados para o método Differential Evolution para o Caso 1

Nota-se que devido seu comportamento populacional na medida que o número de iterações é acrescido a tendência é que a população encontre um valor cada vez mais próximo do ótimo, fazendo com que as novas gerações se aproximem cada vez mais uma das outras.

Particle Swarm (PS) - Utilizou-se como critérios para a implementação da população semelhante à utilizada no método DE, e o número de iterações também se manteve. Para os

parâmetros do método foi utilizado o coeficiente α de 0,3 e β de 2. Os resultados obtidos para o Caso 1 são apresentados na Figura 6.

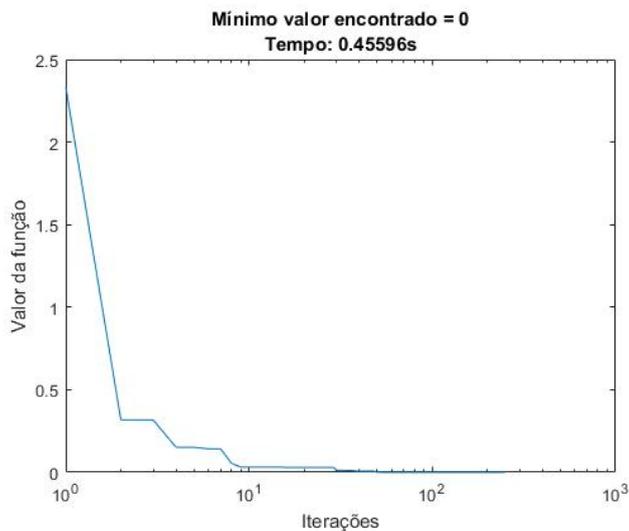


Figura 6 – Resultados para o método Particle Swarm para o Caso 1

Conforme a população foi melhorada, foi cada vez mais lento o processo de otimização ao longo das iterações, consoante com Lacerda (2007), comportamento também verificado no método Differential Evolution.

Steepest Descent - Pelo caráter determinístico do método, é esperado que os resultados variem muito em função de um valor arbitrário inicial, portanto, arbitrando o valor de 100 para a primeira variável e 100 para a segunda plota-se o gráfico indicado na Figura 7.

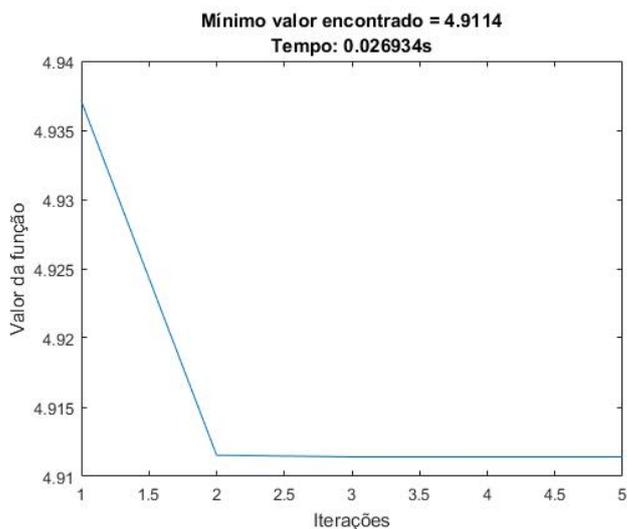


Figura 7 - Resultado para Steepest Descent arbitrado

Dado o valor ótimo para um ponto arbitrado muito distante dos obtidos nos métodos anteriores, realiza-se uma pequena modificação no algoritmo de modo a apresentar valores melhores para o método sem prejudicar consideravelmente o custo computacional.

Como o método determinístico é muito rápido, mas depende diretamente do valor inicial arbitrado o algoritmo foi adaptado de modo a apresentar um valor inicial ótimo dentro de um espaço de busca previamente definido. Foram comparadas 100 posições espaçadas igualmente no domínio para cada uma das variáveis de modo com que as posições que resultassem em um valor minimizado fossem as utilizadas no programa propriamente dito. O resultado obtido para o Caso 1 com o valor inicial otimizado é apresentado na Figura 8.

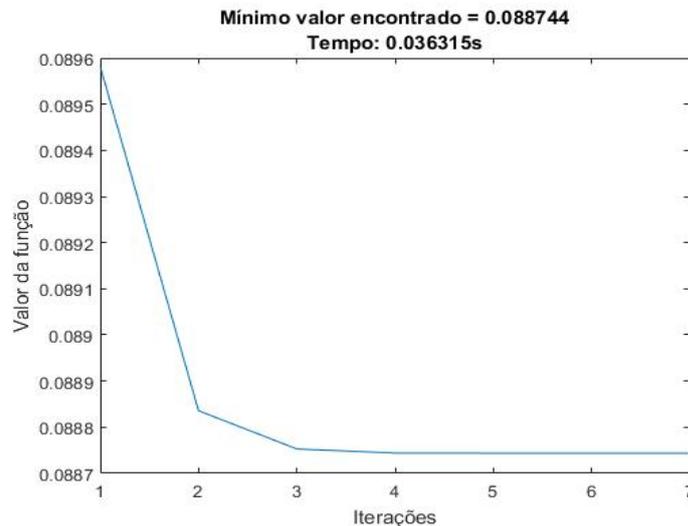


Figura 8 - Steepest Descent com valor inicial otimizado para o Caso 1

É possível verificar que o valor inicial ótimo aprimorou o mecanismo de otimização para a função objetivo em estudo, possibilitando encontrar um resultado razoável em menos de um segundo.

A partir da execução de todos os testes previstos é gerada a tabela 1 onde são apresentados os resultados dos ensaios.

Tabela 1 - Resumo dos resultados obtidos para os métodos

		Caso 1	Caso 2	Caso 3
Differential Evolution	Tempo (s)	0,4224	0,4311	0,4520
	Valor ótimo	3,61e-2	4,30e-2	2,42e-2
Particle Swarm	Tempo (s)	0,4559	0,4596	0,4626
	Valor ótimo	0	0	0
Steepest Descent	Tempo (s)	0,0363	0,0373	0,0454
	Valor ótimo	8,87e-2	4,68e-02	3,18e-7

5. CONCLUSÕES

Não é possível afirmar com certeza que o mínimo global foi encontrado nos procedimentos aplicados dado o caráter de um black box, mas dentre os valores de mínimos apresentados o melhor método foi o Particle Swarm, tendo apresentado o menor resultado para a função objetivo. Com relação ao tempo, o método Steepest Descent foi superior, mas teve piora nos resultados da minimização.

O Differential Evolution apresentou resultados intermediários em relação a tempo e valor ótimo. Para um melhor resultado na otimização, é essencial que se aumente o número de população e o número de iterações, o que prejudica o custo computacional do método, não sendo o ideal para o problema simples em estudo.

Como o custo computacional do Steepest Descent é relativamente baixo, dada a função objetivo depender de apenas duas variáveis, utilizar diversos pontos iniciais para encontrar o ponto ótimo se mostrou uma boa estratégia, porém, em problemas mais complexos com múltiplas variáveis, trabalhar com diversos pontos iniciais para um método determinístico exige um esforço computacional muito maior devido a grande quantidade de derivadas.

O método determinístico se apresentou muito rápido na obtenção dos mínimos locais mesmo com múltiplos testes iniciais, sendo uma ferramenta poderosa quando se pode ter acesso a informações da função objetivo como a região na qual se encontra o mínimo global e o comportamento da função próximo do mesmo.

A estratégia de restringir o domínio não surtiu o efeito em relação aos métodos heurísticos, porém possibilitou melhores resultados para o método Steepest Descent tanto computacionalmente quanto em relação ao ponto ótimo encontrado. Esta melhora indica a possibilidade de que o desenvolvimento de um algoritmo híbrido, no qual um método heurístico aproxima-se da região do mínimo global e em seguida utiliza-se o método determinístico para definir o ponto ótimo possa otimizar ainda mais o presente black box.

5. AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001 e com o apoio do Edital FAPES/CAPES nº 01/2018.

REFERENCIAS

- Cauchy, A. Méthode générale pour la résolution des systèmes d'équations simultanées. C. R. Acad. Sci.: vol. 25, pp. 536-538. Paris, 1847.
- Jin-ke Xiao, Wei-min Li, Wei Li, and Xin-rong Xiao, "Optimization on Black Box Function Optimization Problem," *Mathematical Problems in Engineering*, vol. 2015, Article ID 647234, 10 pages, 2015.
- Kennedy, J., Eberhart, R., "Particle Swarm Optimization", *Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks*, 1995, PP.1942- 1948.
- de Freitas, G.C.S.; Peixoto, F.C.; Vianna Jr, A.S. (2008), Simulation of a thermal battery using Phoenix. *Journal of Power Sources*, 179, 424-429.
- Lacerda E. G. M. A Otimização Nuvem de Partículas (Particle Swarm). Departamento de Engenharia da Computação e Automação da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2007.
- Marques, T. A. C.; Galo, Y.G.; Silva, W. B.; Minimização de caixa preta pelos métodos de Steepest Descent e Simulated Annealing abril 2017 vol. 4 num. 1 - V SEQUFES – V Semana da Engenharia Química da Universidade Federal do Espírito Santo
- Medeiros, G. F.; Kripka, M., "ALGUMAS APLICAÇÕES DE MÉTODOS HEURÍSTICOS NA OTIMIZAÇÃO DE ESTRUTURAS", *Revista CIATEC – UPF*, vol.4 (1), p.p.19-32, 2012
- Muñoz, M. A., Sun, Y., Kirley, M., & Halgamuge, S. K. (2015). Algorithm selection for black-box continuous optimization problems: A survey on methods and challenges. *Information Sciences*, 317, 224–245.
- Schneider, R. M., MÉTODOS DE MÁXIMO DECLIVE PARA MINIMIZAÇÃO QUADRÁTICA. Florianópolis, Universidade Federal de Santa Catarina. Dissertação de Mestrado em Matemática, 2015.
- Storn, R. and Price, K. (1997) "Differential Evolution - A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Space," *Journal of Global Optimization*, vol. 11, pp. 341-359.
- Vavasis, S. A. (1993). Black-Box Complexity of Local Minimization. *SIAM Journal on Optimization*, 3(1), 60–80.

STUDY OF MINIMIZATION METHODS FOR A BLACK BOX PROBLEM

Abstract. *This paper aims to study the deterministic optimization method, Steepest Descent, and heuristics methods, Differential Evolution and Particle Swarm, for a generic black box problem with two variables in its fitting function. The deterministic method presented strong dependence of the initial values adopted, presenting several local minimums, being necessary the adoption of multiple initial points. The Particle Swarm and Differential Evolution methods presented reasonable results, but the operation of the heuristic algorithms makes it impossible for the result found to be precisely defined as a global minimum.*

Keywords: *Optimization, Black box, Deterministic, Heuristic.*