



ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ, ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΑΡΑΓΩΓΗΣ ΚΑΙ ΔΙΟΙΚΗΣΗΣ,
ΜΠΣ ΣΧΕΔΙΑΣΗ ΠΡΟΪΟΝΤΟΣ ΚΑΙ ΠΑΡΑΓΩΓΗΣ

Πίσσας Βασίλειος

Μεταπτυχιακή Διατριβή

*Συμβολή στην επιτάχυνση ασύγχρονου παράλληλου
Διαφορικού Εξελικτικού αλγόριθμου με χρήση
Νευρωνικών Δικτύων*

Τριμελής επιτροπή:

Ι.Κ. Νικολός (επιβλέπων)

Α. Δελής

Γ. Αραμπατζής



Χανιά, Σεπτέμβριος, 2021

Στην Οικογένεια μου

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα Καθηγητή μου, κύριο Ιωάννη Κ. Νικολό, για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε αναθέτοντας μου το συγκεκριμένο θέμα, τη συνεχή υποστήριξη, τις υποδείξεις και το αμείωτο ενδιαφέρον που έδειξε εξ'αρχής. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον υποψήφιο διδάκτορα Σταύρο Λελούδα για την πολύτιμη βοήθειά του στο προγραμματιστικό κομμάτι.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου, για όλη τη στήριξη και τη συμπαράσταση που μου προσέφεραν, καθ'όλη τη διάρκεια των σπουδών μου.

AKNOWLEDGMENTS

I would like to warmly thank my supervisor Prof. Dr. Ioannis K. Nikolos, for the trust he has shown to me, his continuous support, his suggestions and the undiminished interest he has shown from the beginning. I would also like to thank Ph.D. candidate Stavros Leloudas for his valuable help in the programming part of this Thesis.

Finally, I would like to thank my family for all the support and encouragement they have generously provided to me throughout my studies.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

«Συμβολή στην επιτάχυνση ασύγχρονου παράλληλου Διαφορικού Εξελικτικού αλγορίθμου με χρήση Νευρωνικών Δικτύων»

Στην παρούσα μεταπτυχιακή διατριβή θα χρησιμοποιηθεί ως βάση ένας υπάρχων παράλληλος ασύγχρονος Διαφορικός Εξελικτικός αλγόριθμος, ο οποίος έχει αναπτυχθεί από μέλη του Εργαστηρίου Στροβιλομηχανών & Ρευστοδυναμικής (TurboLab – TUC), σε γλώσσα προγραμματισμού FORTRAN. Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος υποστηρίζεται από δύο Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ) (Artificial Neural Networks – ANNs), τα οποία λειτουργούν ως υποκατάστατα μοντέλα (surrogate models) για την επιτάχυνση της διαδικασίας αξιολόγησης κάθε υποψήφιας λύσης που εξετάζει ο Διαφορικός Εξελικτικός αλγόριθμος.

Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, αρχικά θα γίνει μία βιβλιογραφική επισκόπηση των μεθόδων που χρησιμοποιούνται διεθνώς για τον συνδυασμό Εξελικτικών Αλγορίθμων με Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα ως surrogate models (meta-models). Ειδικότερα, θα εξετασθεί ο τρόπος που επιλέγονται τα άτομα των προηγούμενων πληθυσμών του Διαφορικού Εξελικτικού αλγορίθμου, ώστε να χρησιμοποιηθούν για την επανεκπαίδευση σε κάθε γενιά των ΤΝΔ. Επειδή η σωστή επιλογή των συγκεκριμένων ατόμων επιτρέπει την καλύτερη εκπαίδευση και αύξηση της ακρίβειας πρόβλεψης των ΤΝΔ, θα γίνει προσπάθεια να βρεθούν πολιτικές πιο αποτελεσματικής επιλογής αυτών των ατόμων σε κάθε γενιά. Η αποτελεσματικότητα των παραπάνω εναλλακτικών πολιτικών θα συγκριθεί με την υπάρχουσα πολιτική σε επιλεγμένα προβλήματα αναφοράς. Παράλληλα, θα γίνει προσπάθεια εισαγωγής και επιπλέον βελτιώσεων στον υπάρχοντα κώδικα, ώστε να καταστεί πιο εύχρηστος και πιο αποτελεσματικός.

Λέξεις Κλειδιά:

Εξελικτικός Αλγόριθμος (ΕΑ), Διαφορικός Εξελικτικός αλγόριθμος (ΔΕ), Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ), εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων, αυτοπροσαρμόσιμη στρατηγική αναζήτησης.

ABSTRACT

«Accelerating a parallel asynchronous Differential Evolution algorithm using Neural Networks»

In the present M.Sc. thesis an existing parallel asynchronous Differential Evolution (DE) algorithm, will be used as a basis, previously developed by members of the Turbomachines & Fluid Dynamics Laboratory (TurboLab - TUC), in FORTRAN programming language. This algorithm is supported by two Artificial Neural Networks (ANNs), which act as surrogate models to speed up the evaluation process of each candidate solution, considered by the Differential Evolutionary algorithm.

In the context of the present work, a comprehensive review of the methods that are used in the open literature for the combination of Evolutionary Algorithms with Artificial Neural Networks as surrogate models (meta-models) will be firstly carried out. Specifically, the way in which individuals of the previous populations of the Differential Evolutionary algorithm are selected will be examined, so that they can be used for retraining the ANNs in each generation of the DE algorithm. As the right choice of those individuals enables better training and increased accuracy of ANNs prediction, efforts will be made to find more effective policies for selecting these individuals in each generation. The effectiveness of the above alternative policies will be compared with the existing policy on selected test cases. Alongside, an effort will be made to introduce further improvements to the existing code, in order to make it easier to use and more efficient.

Index terms:

Evolutionary Algorithms (EAs), Differential Evolution (DE), Artificial Neural Networks (ANNs), Neural Networks training, self-adaptive search strategies (SASS).

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Ευχαριστίες.....	3
Aknowledgments.....	3
Περίληψη.....	5
Abstract.....	7
Συνοπτομογραφίες.....	13
Εισαγωγή	15
Κεφάλαιο 1: Εξελικτικοί Αλγόριθμοι	17
1.1 Εισαγωγή.....	17
1.2 Ιστορική Αναδρομή [Νικολός, 2019]	20
1.3 Διαφορικός Εξελικτικός Αλγόριθμος	20
1.4 Υποκατάστατα Μοντέλα.....	22
1.5 Παραλληλοποίηση	23
1.5.1 Πανμικτικοί Εξελικτικοί Αλγόριθμοι (Panmictic EAs).....	23
1.5.2 Δομημένοι Εξελικτικοί Αλγόριθμοι (Structured EAs).....	24
1.5.3 Σύγχρονη και Ασύγχρονη Εφαρμογή	26
Κεφάλαιο 2: Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα.....	27
2.1 Εισαγωγή.....	27
2.2 Ιστορική Αναδρομή	29
2.3 Multi-Layer Perceptron (MLP).....	30
2.4 Radial Basis Function Network (RBFN)	31
Κεφάλαιο 3: Επισκοπήση τεχνικών για την επιτάχυνση ενός SAEA	35
3.1 Δεδομένα Εκπαίδευσης	35
3.2 Τεχνικές Διαχείρισης Υποκατάστατων Μοντέλων.....	37
3.2.1 Surrogate Model-Aware Evolutionary Search (SMAS).....	37
3.2.2 Global Surrogate-Assisted Prescreen Method (GSAPM)	38
3.2.3 Local Surrogate-Assisted Search Method (LSASM).....	39
3.3 Ενιαία Αναζήτηση.....	40
3.3.1 GPOME Algorithm	40
3.4 Φάσεις Αναζήτησης.....	42
3.4.1 Αλγόριθμος Zhou.....	43
3.4.2 Αλγόριθμος SMEAFO	45
3.4.3 Αλγόριθμος SA-QUATRE.....	49
3.4.4 Αλγόριθμος SAEA-UGC	51
3.4.5 Αλγόριθμος GLSADE.....	54

3.4.6	Αλγόριθμος EHSDE	56
3.5	Στρατηγικές Μετάλλαξης για Αναζήτηση	60
3.5.1	Roulette Wheel Selection.....	60
3.5.2	Αλγόριθμος TASEA	61
3.6	Ταξινόμηση Γειτονιάς.....	64
Κεφάλαιο 4: Ο Αλγοριθμός Εφαρμογής		65
4.1	Διαφορική Εξέλιξη	65
4.2	Υποκατάστατη Μοντελοποίηση	65
4.3	Ασύγχρονη Παραλληλοποίηση.....	67
Κεφάλαιο 5: Εφαρμογή τεχνικών επιτάχυνσης στον αλγοριθμο εφαρμογής (APSADE)		71
5.1	Βάση δεδομένων	71
5.2	Στρατηγικές Μετάλλαξης	72
	DE/apsade	73
	DE/best/1.....	74
	DE/current-to-best/1	74
	DE/current-to-randbest/1	75
	DE/current-to-rand/1	76
	DE/rand/1	77
	DE/rand/1/dir	77
	DE/hybrid/trigonometric.....	78
5.3	Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων	80
	All DB	80
	Newest.....	81
	Best	81
	Top %	81
	Nearest Neighbors.....	82
	PAS	83
	ISS.....	84
5.4	Μέθοδοι Επιτάχυνσης του Αλγόριθμου Εφαρμογής	84
5.4.1	Μέθοδος TASEA	84
5.4.2	Μέθοδος αυτοπροσαρμόσιμης στρατηγικής και φάσης αναζήτησης (SASS)	87
5.4.3	Μέθοδος Neighborhood Classification	90
5.5	Επιλογή Μεθοδολογιών Εκπαίδευσης των Νευρωνικών Δικτύων.....	92
5.5.1	Σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο	92
5.5.2	Τοπικό υποκατάστατο μοντέλο.....	96
5.5.3	Επίλυση του APSADE-SASS για την επιλογή των κατάλληλων μεθόδων	99

Κεφάλαιο 6: Συμπεράσματα & Βελτιώσεις.....	103
6.1 Βελτιώσεις.....	107
Βιβλιογραφία	109
Παράρτημα Α: Μέθοδοι Προεπισκόπησης (GP-model).....	115
Most likely improvement (MI):	115
Expected improvement (EI):	115
Probability of improvement (PoI):	115
Lower confidence bound (LCB):	115
Παράρτημα Β: Test Problems.....	116
Ackley Function.....	116
Griewank Function.....	117
Rastrigin Function.....	118
Rosenbrock Function	119
De Jong Function	120

ΣΥΝΤΟΜΟΓΡΑΦΙΕΣ

EA – Evolutionary Algorithm - Εξελικτικός Αλγόριθμος.

DE – Differential Evolution (algorithm) - Διαφορικός Εξελικτικός (αλγόριθμος).

APSADE – Asynchronous Parallel Surrogate-Assisted Differential Evolution (algorithm) - Ασύγχρονα Παράλληλος Υποβοηθούμενος από Υποκατάστατα μοντέλα, Διαφορικός Εξελικτικός αλγόριθμος.

ANN – Artificial Neural Network - Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο.

MLP – Multi-Layer Perceptron - Πολυεπίπεδο Perceptron.

RBFN – Radial Basis Functions Network - Δίκτυο Συνάρτησης Ακτινικής Βάσης.

DB – Data Base - Βάση Δεδομένων.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Οι Εξελικτικοί Αλγόριθμοι (Evolutionary Algorithms – EAs) είναι κοινώς χρησιμοποιούμενοι μέθοδοι για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης, όπως προβλημάτων μηχανικής σχεδίασης, επιχειρησιακού σχεδιασμού, προγραμματισμού κ.α.. Κατα την επίλυση όμως πραγματικών προβλημάτων («real-world problems»), όπου ο χώρος σχεδίασης μπορεί να αποτελείται από πολλές διαστάσεις και μπορεί να υπάρχει τεράστιος αριθμός πιθανών λύσεων, ο υπολογιστικός χρόνος για την αξιολόγηση μίας λύσης μπορεί να διαρκέσει από λίγα λεπτά έως πολλές ημέρες. Για τον λόγο αυτό έχουν αναπτυχθεί πολλές τεχνικές επιτάχυνσης των EA, ώστε να καταστούν λειτουργικοί σε τέτοιου είδους προβλήματα. Τέτοιες τεχνικές μπορεί να είναι η παραλληλοποίηση της εξελικτικής διαδικασίας σε όλους τους κόμβους (πυρήνες) του συστήματος και η χρήση υποκατάστατων μοντέλων για την προ-αξιολόγηση των υποψήφιων λύσεων.

Σκοπός της παρούσας εργασίας, είναι η εύρεση (μέσω βιβλιογραφικής έρευνας) ή εναλλακτικά η ανάπτυξη νέων τεχνικών για την επιτάχυνση ενός Ασύγχρονου Παράλληλου, υποβοηθούμενου από Υποκατάστατα Μοντέλα, Διαφορικού Εξελικτικού αλγόριθμου (Asynchronous Parallel Surrogate-Assisted Differential Evolutionary algorithm - **APSADE**). Ο APSADE χρησιμοποιεί μια ασύγχρονα παράλληλη εφαρμογή, όπου ο κάθε κόμβος του συστήματος εξελίσει ένα άτομο με τον δικό του ρυθμό (δεν υπάρχει η έννοια μιας ενιαίας γενιάς), με αποτέλεσμα την ταυτόχρονη αξιολόγηση πολλών υποψήφιων λύσεων (χωρίς χρονικές καθυστερήσεις και νεκρούς χρόνους στους επεξεργαστές) και συνεπώς μια σημαντική επιτάχυνση της εξελικτικής διαδικασίας. Επίσης ο APSADE χρησιμοποιεί δύο Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (Artificial Neural Networks – ANNs) ως υποκατάστατα μοντέλα, για την προ-αξιολόγηση των υποψήφιων λύσεων. Ο συνδυασμός αυτών των δύο μοντέλων μπορεί να αποτρέψει την ακριβή και συνάμα χρονοβόρα αξιολόγηση μη υποσχόμενων λύσεων.

Αρχικά θα γίνει μια εισαγωγή στους Εξελεκτικούς Αλγορίθμους και μια αναλυτική περιγραφή στον τρόπο λειτουργίας του Διαφορικού Εξελικτικού αλγόριθμου (DE), ο οποίος χρησιμοποιείται στον εν λόγω APSADE. Στη συνέχεια θα γίνει μια εισαγωγή στα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα, καθώς και μια αναφορά στον τρόπο λειτουργίας των δικτύων MLP και RBF, τα οποία χρησιμοποιούνται ως υποκατάστατα μοντέλα στον εξελικτικό μας αλγόριθμο. Στο τρίτο κεφάλαιο θα διεξαχθεί μια έρευνα για την εύρεση τεχνικών επιτάχυνσης, που μπορούν να εφαρμοστούν στον αλγόριθμό μας, μέσα από τεχνικές που εφαρμόζονται σε ήδη υπάρχοντες αλγορίθμους. Το διάγραμμα ροής και ο τρόπος λειτουργίας του APSADE, παρουσιάζονται στο τέταρτο κεφάλαιο.

Η εφαρμογή των τεχνικών που βρήκαμε μέσω της βιβλιογραφικής έρευνας ή που αναπτύξαμε στα πλαίσια της παρούσας εργασίας για την επιτάχυνση του APSADE, παρουσιάζονται στο πέμπτο κεφάλαιο. Συγκεκριμένα, έγινε μια σύγκριση των μεθοδολογιών επιλογής δεδομένων εκπαίδευσης για την επιλογή της καταλληλότερης σε ένα τοπικό και σε ένα σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο αντίστοιχα. Επίσης, έγινε μια ανάλυση στο είδος που προσφέρει η αναζήτηση (σφαιρική ή τοπική) διαφορών στρατηγικών μετάλλαξης, μέσω επίλυσης προβλημάτων αναφοράς. Τρεις νέες μεθοδολογίες, επηρεασμένες από ήδη υπάρχουσες τεχνικές, προστέθηκαν στον APSADE. Η μεθοδολογία **TASEA** όπου ακολουθεί τον αλγόριθμο TASEA [Yang et al., 2019] (βλέπε παράγραφο 3.5.2) και έχει τροποποιηθεί ώστε να προσαρμοστεί στον APSADE, η μεθοδολογία **NBClass** επηρεασμένη από την ταξινόμηση γειτονιάς, που παρουσιάζεται στην παράγραφο 3.6, καθώς και η μεθοδολογία **SASS**, η οποία είναι επηρεασμένη από την μεθοδολογία Roulette Wheel Selection (βλέπε παράγραφο 3.5.1), με παρόμοιο τρόπο χρήσης όπως του αλγόριθμου PAGHO [Bo Liu et al., 2018]. Μια σύγκριση αυτών των μεθοδολογιών για την εύρεση της καλύτερης, πραγματοποιείται στο κεφάλαιο 6. Τέλος, παρουσιάζονται επιπλέον τεχνικές για την περαιτέρω επιτάχυνση του αλγορίθμου σε μεθεπόμενο στάδιο.

Στο παράρτημα Β μπορούν να βρεθούν τα προβλήματα αναφοράς, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν για την διενέργεια των συγκρίσεων των μεθοδολογιών που προστέθηκαν στον APSADE.

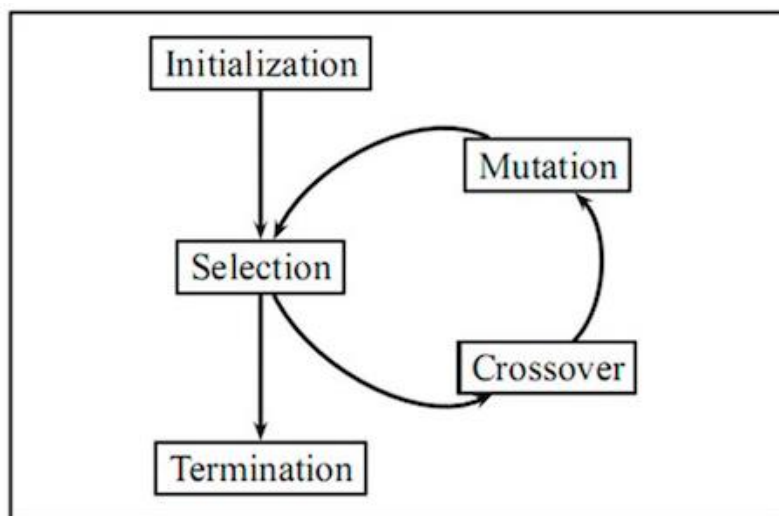
ΕΞΕΛΙΚΤΙΚΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ

1.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Οι Εξελικτικοί Αλγόριθμοι (Evolutionary Algorithms - EAs) είναι στοχαστικές μέθοδοι αναζήτησης, που μιμούνται τη φυσική βιολογική εξέλιξη. Όλοι οι EA βασίζονται στην έννοια ενός πληθυσμού ατόμων (που αντιπροσωπεύουν σημεία αναζήτησης στο χώρο των πιθανών λύσεων σε ένα δεδομένο πρόβλημα), τα οποία υφίστανται πιθανολογικούς τελεστές, όπως μετάλλαξη, επιλογή και επιχiasμός, για να εξελιχθούν τα άτομα του πληθυσμού προς όλο και καλύτερες τιμές προσαρμογής (φυσικής κατάστασης). Η φυσική κατάσταση ενός ατόμου αντανακλά την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησής του σε σχέση με μια συγκεκριμένη συνάρτηση που πρέπει να βελτιστοποιηθεί. Ο τελεστής μετάλλαξης εισάγει την καινοτομία στον πληθυσμό δημιουργώντας παραλλαγές ατόμων και ο τελεστής επιχiasμού πραγματοποιεί ανταλλαγή πληροφοριών μεταξύ διαφορετικών ατόμων από έναν πληθυσμό. Ο τελεστής επιλογής επιβάλλει κινητήρια δύναμη στη διαδικασία της εξέλιξης, προτιμώντας καλύτερα άτομα να επιβιώσουν και να αναπαραχθούν όταν επιλέγονται τα μέλη της επόμενης γενιάς [Cano et al., 2003].

Οι EA αποτελούν ιδιαίτερα ισχυρές τεχνικές για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων βελτιστοποίησης [Deb, 2004]. Ενώ οι παραδοσιακές μέθοδοι αναλυτικής βελτιστοποίησης δεν μπόρεσαν να αντιμετωπίσουν τις προκλήσεις που επιβάλλονται από πολλά πραγματικά προβλήματα («real-world problems»), όπως η πολυτροπικότητα, η μη διαχωριστικότητα και η υψηλή διάσταση, οι EA έχουν αποδειχθεί ιδιαίτερα χρήσιμοι στην αναζήτηση καλών λύσεων σε αυτά τα προβλήματα. Κατά τη διάρκεια των ετών, οι EA έχουν αποδειχθεί ότι παράγουν πολύ καλά αποτελέσματα για μια μεγάλη ποικιλία προβλημάτων, όπως η μηχανολογική σχεδίαση, ο επιχειρησιακός σχεδιασμός και ο προγραμματισμός [Syberfeldt et al., 2008].

Η λειτουργία ενός EA αποτελείται από τρία στάδια: την αρχικοποίηση, τους εξελικτικούς τελεστές (επιλογή, επιχiasμός και μετάλλαξη) και τον τερματισμό. Ο αλγόριθμος ξεκινάει κάνοντας αρχικοποίηση του πληθυσμού με τυχαία επιλεγμένα σημεία (υποψήφιες λύσεις). Στη συνέχεια ο πληθυσμός υφίσταται τους εξελικτικούς τελεστές σε μια επαναληπτική διαδικασία, μέχρις ότου ικανοποιηθεί το κριτήριο διακοπής (στάδιο τερματισμού), όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.1.



Σχήμα 1.1: Σχηματική λειτουργία ενός EA [towardsdatascience.com/introduction-to-evolutionary-algorithms-a8594b484ac, 2021].

Αρχικοποίηση (Initialization)

Το πρώτο βήμα για την έναρξη ενός ΕΑ είναι η δημιουργία ενός αρχικού πληθυσμού λύσεων. Ο πληθυσμός θα περιέχει έναν (προσδιορισμένο από τον χρήστη) αριθμό υποψήφιων λύσεων στο πρόβλημα, τα λεγόμενα άτομα ή χρωμοσώματα. Συνήθως η αρχικοποίηση του πληθυσμού γίνεται τυχαία (εντός των ρητών περιορισμών του προβλήματος), ή στην περίπτωση που είναι γνωστή κάποια προηγούμενη καλή περιοχή λύσεων του προβλήματος, θα επικεντρωθεί περίπου σε αυτή την περιοχή που αναμένεται να βρεθεί και η ολικά βέλτιστη λύση. Είναι σημαντικό ο πληθυσμός να περιλαμβάνει ένα ευρύ φάσμα λύσεων, επειδή ουσιαστικά αντιπροσωπεύει μια γονιδιακή ομάδα. Επομένως, εάν επιθυμούμε να διερευνήσουμε πολλές διαφορετικές δυνατότητες κατά τη διάρκεια του αλγορίθμου, θα πρέπει να στοχεύσουμε να έχουμε πολλά διαφορετικά γονίδια [towardsdatascience.com/introduction-to-evolutionary-algorithms-a8594b484ac, 2021].

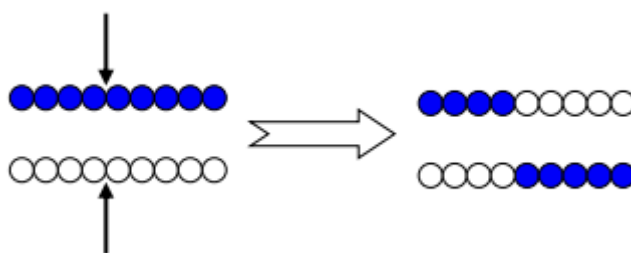
Επιλογή (Selection)

Εφόσον έχει αρχικοποιηθεί ο πληθυσμός, τα άτομα του πληθυσμού πρέπει να αξιολογηθούν σύμφωνα με μια συνάρτηση προσαρμογής. Μια συνάρτηση προσαρμογής είναι μια συνάρτηση που λαμβάνει τα χαρακτηριστικά ενός ατόμου και εξάγει μια αριθμητική αναπαράσταση του πόσο βιώσιμη είναι μία λύση [towardsdatascience]. Η δημιουργία της συνάρτησης προσαρμογής μπορεί συχνά να είναι πολύ δύσκολη και είναι σημαντικό να βρεθεί μια καλή συνάρτηση που να αντιπροσωπεύει με ακρίβεια τα δεδομένα. Ο τελεστής επιλογής καθορίζει ποιά άτομα από τον τρέχοντα πληθυσμό θα περάσουν στην επόμενη γενιά. Τα άτομα με καλύτερη τιμή προσαρμογής, έχουν περισσότερες πιθανότητες επιβίωσης.

Επιχiasμός (Crossover)

Ο επιχiasμός πραγματοποιείται ανάμεσα σε δύο χρωμοσώματα-γονείς με τρόπο ώστε μέσα από την αμοιβαία ανταλλαγή γονιδίων, να παράγονται δύο γόνοι, οι οποίοι θα εμπεριέχουν γενετικό υλικό και από τους δύο γονείς [Νικολός, 2019].

Πραγματοποιείται σάρωση των ατόμων του πληθυσμού και για κάθε άτομο (χρωμόσωμα) του πληθυσμού, παράγεται ένας τυχαίος πραγματικός αριθμός r , ακολουθώντας ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα $[0, 1]$. Αν για το συγκεκριμένο άτομο του πληθυσμού προκύψει ότι $r \leq p_c$ (πιθανότητα επιχiasμού) τότε το συγκεκριμένο άτομο επιλέγεται για επιχiasμό, διαφορετικά η διαδικασία επαναλαμβάνεται για το επόμενο χρωμόσωμα. Η διαδικασία τερματίζεται όταν για κάθε χρωμόσωμα του πληθυσμού έχει παραχθεί ένας τυχαίος αριθμός και έχει αποφασιστεί αν το αντίστοιχο χρωμόσωμα θα υποστεί ή όχι επιχiasμό.



Σχήμα 1.2: Επιχiasμός μονού σημείου [Νικολός, 2019].

Είναι προφανές ότι ο επιχiasμός απαιτεί δύο γονείς (χρωμοσώματα) για την ανταλλαγή γενετικού υλικού. Στην περίπτωση που η παραπάνω διαδικασία δώσει μόνο αριθμό γονέων, είτε απορρίπτεται τυχαία κάποιος από αυτούς, είτε επιλέγεται ακόμα ένας (με τυχαίο τρόπο) από τον πληθυσμό, προκειμένου να διαθέτουμε ζυγό αριθμό χρωμοσωμάτων, που θα λάβουν μέρος στη διαδικασία του επιχiasμού. Για κάθε ζεύγος επιλεγμένων χρωμοσωμάτων, επιλέγεται τυχαία το σημείο που θα «κοπούν» και θα ανταλλάξουν το «γενετικό υλικό» τους (Σχήμα 1.2). Η διαδικασία του επιχiasμού, που περιγράφηκε παραπάνω, αποτελεί μόνο μία από τις πολλές παραλλαγές που έχουν προταθεί.

Μετάλλαξη (Mutation)

Ο επόμενος τελεστής που εφαρμόζεται πάνω στον πληθυσμό λύσεων είναι η μετάλλαξη (Σχήμα 1.3). Κατά την μετάλλαξη, επιλέγονται τυχαία ένα ή περισσότερα γονίδια ενός χρωμοσώματος και αλλάζουν οι τιμές τους (στοχαστικά) μέσα στο επιτρεπτό φάσμα τιμών τους [Νικολός, 2019].



Σχήμα 1.3: Μετάλλαξη ενός γονιδίου [Νικολός, 2019].

Αν το χρωμόσωμα είναι κωδικοποιημένο με βάση το δυαδικό σύστημα, τότε εάν η αρχική τιμή του υπό μετάλλαξη γονιδίου είναι 0, κατά τη μετάλλαξη θα γίνει 1, ενώ εάν ήταν 1 θα μετατραπεί σε 0. Στην περίπτωση που έχουμε κωδικοποίηση πραγματικών αριθμών, η νέα τιμή του υπό μετάλλαξη γονιδίου επιλέγεται με τυχαίο τρόπο (και με ομοιόμορφη συνάρτηση πιθανότητας) εντός του εύρους ορισμού των τιμών του συγκεκριμένου γονιδίου (ρητοί περιορισμοί).

Πραγματοποιείται σάρωση των ατόμων του πληθυσμού και για κάθε άτομο του πληθυσμού, παράγεται ένας τυχαίος αριθμός r , ακολουθώντας ομοιόμορφη συνάρτηση πιθανότητας στο διάστημα $[0, 1]$. Αν για το συγκεκριμένο άτομο του πληθυσμού προκύψει ότι $r \leq p_m$ (πιθανότητα μετάλλαξης), τότε το συγκεκριμένο άτομο επιλέγεται για μετάλλαξη, διαφορετικά η διαδικασία επαναλαμβάνεται για το επόμενο χρωμόσωμα. Στη συνέχεια, για το επιλεγμένο άτομο, πάλι με ομοιόμορφη πιθανότητα, επιλέγεται το γονίδιο που θα υποστεί τη μετάλλαξη.

Τερματισμός (Termination)

Το τελευταίο στάδιο της λειτουργίας ενός ΕΑ είναι ο τερματισμός ή η διακοπή του αλγορίθμου. Αυτό επιτυγχάνεται με ένα κριτήριο διακοπής, που έχει οριστεί από τον χρήστη, που συνήθως ορίζεται ως ένα όριο γενιών ή ένα όριο ακριβών αξιολογήσεων. Μόλις αυτό το κριτήριο ικανοποιηθεί, επιλέγεται η καλύτερη μέχρι στιγμής λύση και επιστρέφεται ως η βέλτιστη λύση που δίνει ο αλγόριθμος.

Τις τελευταίες δεκαετίες, έχει προταθεί μια ποικιλία Εξελικτικών Αλγορίθμων, όπως ο Γενετικός Αλγόριθμος (GA), οι Εξελικτικές Στρατηγικές (ES) και ο Εξελικτικός Προγραμματισμός. Μια σημαντική διαφορά μεταξύ αυτών των αλγορίθμων είναι στην επιλογή των τελεστών διαφοροποίησης, δηλαδή του τρόπου δημιουργίας νέων δοκιμαστικών λύσεων, διαφορετικών από αυτές της προηγούμενης γενιάς. Στη παρούσα εργασία χρησιμοποιείται ο Διαφορικός Εξελικτικός αλγόριθμος (DE), ο οποίος είναι ένα είδος Εξελικτικής Στρατηγικής και χρησιμοποιεί τον τελεστή μετάλλαξης ως τον κύριο τελεστή διαφοροποίησης των απογόνων. Η λειτουργία του αναφέρεται σε επόμενη ενότητα.

Αν και οι ΕΑs έχουν μεγάλη επιτυχία σε πολλές εφαρμογές, αυτοί οι αλγόριθμοι έχουν επίσης αντιμετωπίσει ορισμένα τεχνικά εμπόδια. Μεταξύ αυτών, η αποδοτικότητα είναι μια σημαντική πρόκληση. Τα προβλήματα βελτιστοποίησης πραγματικού κόσμου («real-world problems») συχνά περιλαμβάνουν έναν τεράστιο αριθμό πιθανών λύσεων και ένας ΕΑ χρειάζεται μεγάλο αριθμό αξιολογήσεων προσομοίωσης πριν βρεθεί μια αποδεκτή λύση [Ong et al., 2004; Ulmer et al., 2003]. Ακόμη και με βελτιώσεις στην ταχύτητα επεξεργασίας του υπολογιστή, μία μόνο αξιολόγηση προσομοίωσης μπορεί να διαρκέσει από λίγα λεπτά έως ώρες ή ημέρες [Boesel et al., 2001; Chafeka et al., 2003]. Αυτό θέτει σοβαρό εμπόδιο στην πρακτική εφαρμογή των ΕΑ σε σενάρια πραγματικού κόσμου και για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος έχουν προταθεί διάφορες προσεγγίσεις.

Μια κοινώς χρησιμοποιούμενη τεχνική για την αντιμετώπιση του προβλήματος των υπολογιστικά δαπανηρών προσομοιώσεων είναι ο παραλληλισμός. Με παράλληλους κόμβους επεξεργασίας, πολλές λύσεις μπορούν να προσομοιωθούν αποτελεσματικά και ταυτόχρονα. Μια άλλη τεχνική για αυξημένη

αποδοτικότητα είναι η ενσωμάτωση υποκατάστατων μοντέλων (surrogate models) (ονομαζόμενα επίσης και ως μεταμοντέλα - metamodels), τα οποία κάνουν μια προσέγγιση της προσομοίωσης και έτσι γλυτώνουν υπολογιστικό χρόνο από την απόρριψη των ακριβών αξιολογήσεων (προσομοιώσεων) σε μη υποσχόμενα άτομα (άτομα που επρόκειτο να έχουν χαμηλή τιμή της συνάρτησης προσαρμογής). Μια αναφορά και των δύο αυτών τεχνικών γίνεται σε επόμενη ενότητα.

1.2 ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΑΝΑΔΡΟΜΗ [ΝΙΚΟΛΟΣ, 2019]

Οι Εξελικτικοί Αλγόριθμοι ανάγουν τη γέννησή τους στα τέλη της δεκαετίας του 1950, με την παρουσίαση εργασιών από διαφορετικούς ερευνητές [Bremermann, 1962; Friedberg, 1958; Friedberg et al., 1959; Box 1957]. Όμως, για περίπου τρεις δεκαετίες παρέμεναν στην αφάνεια και η διεθνής επιστημονική κοινότητα αγνοούσε την ύπαρξή τους. Ο λόγος ήταν η απουσία ικανών Η/Υ, οι οποίοι θα μπορούσαν να εκμεταλλευτούν τις δυνατότητες των ΕΑ, αλλά και τα προβλήματα και οι ατέλειες των πρώτων προσεγγίσεων στο θέμα. Το τοπίο άρχισε να αλλάζει μέσα στη δεκαετία του 1960, όταν παρουσιάστηκαν εργασίες όπως αυτές των [Holland, 1962; Rechenberg, 1965; Schwefel, 1968; Fogel, 1962]. Οι παραπάνω εργασίες ακολουθούσαν διαφορετικές προσεγγίσεις στο θέμα, είχαν όμως ως κοινό παρονομαστή τη χρησιμοποίηση ενός πληθυσμού πιθανών λύσεων, οι οποίες εξελισσόμενες με τη χρήση τεχνικών δανεισμένων από τη γενετική, κατέληγαν σε (σχεδόν) βέλτιστες λύσεις. Οι ΕΑ δε χρησιμοποιήθηκαν από όλους τους ερευνητές μόνο ως εργαλεία βελτιστοποίησης, αλλά και ως μέθοδοι προσομοίωσης της φυσικής διαδικασίας της εξέλιξης, αλλά και γενικότερα της συμπεριφοράς ζώντων οργανισμών [Back et al., 1997].

Οι ΕΑ εμφανίζονται σε τρεις διαφορετικές μορφές, οι οποίες ακολουθούν διακριτή πορεία, αλλά με ισχυρές αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους: τους Γενετικούς Αλγόριθμους (Genetic Algorithms – GAs), τον Εξελικτικό Προγραμματισμό (Evolutionary Programming – EP) και τις Εξελικτικές Στρατηγικές (Evolutionary Strategies – ES).

Οι Γενετικοί Αλγόριθμοι (GAs) αναπτύχθηκαν από τον John Holland και τους φοιτητές του στο πανεπιστήμιο του Michigan την δεκαετία 1960-1970 [Holland, 1962]. Ο Holland είχε ως στόχο, όχι τον σχεδιασμό αλγορίθμων που να επιλύουν συγκεκριμένα προβλήματα, αλλά την εξέταση του φαινομένου της προσαρμογής όπως αυτό παρατηρείται στη φύση και την ανάπτυξη τρόπων ώστε οι μηχανισμοί της φυσικής προσαρμογής να προσαρμοσθούν σε υπολογιστικά συστήματα.

Ο Εξελικτικός Προγραμματισμός (EP) αναπτύχθηκε από τους [Back et al., 1997] με σκοπό να διερευνήσουν τη δυνατότητα εξέλιξης της τεχνητής νοημοσύνης με την έννοια “ή μηχανή να μπορεί να προβλέπει αλλαγές στο περιβάλλον της και να αντιδρά κατάλληλα”. Οι εξελισσόμενοι πληθυσμοί είναι Μηχανές Πεπερασμένης Κατάστασης (Finite State Machines - FSM).

Το 1965 ο Rechenberg, εισήγαγε τις Εξελικτικές Στρατηγικές (ES) ως μεθόδους βελτιστοποίησης των παραμέτρων αεροδυναμικών σωμάτων κατά τη διάρκεια πειραμάτων σε αεροδυναμική σήραγγα [Rechenberg, 1965]. Η ιδέα του Rechenberg εξελίχθηκε περαιτέρω από τον [Schwefel, 1968; 1975; 1977]. Οι αρχικές ES χρησιμοποιούν κωδικοποίηση πραγματικών αριθμών και μόνο τη μετάλλαξη ως τεχνική διαφοροποίησης των χρωμοσωμάτων, ενώ προσομοιάζουν με τεχνικές ανάβασης.

1.3 ΔΙΑΦΟΡΙΚΟΣ ΕΞΕΛΙΚΤΙΚΟΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ

Ο Διαφορικός Εξελικτικός (Differential Evolutionary – DE) αλγόριθμος είναι ένας εξαιρετικά απλός στην εφαρμογή, εύχρηστος, αξιόπιστος, ευέλικτος και γρήγορος ΕΑ, ο οποίος έχει δείξει καλύτερη απόδοση σύγκλισης σε σχέση με άλλους ΕΑs [Storn and Price, 1995; Price et al., 2005]. Ο DE αλγόριθμος είναι βασικά ένας τύπος Εξελικτικής Στρατηγικής (ES) με ειδικά χαρακτηριστικά, έτσι ώστε να μπορεί να αντιμετωπίσει αποτελεσματικά προβλήματα συνεχούς βελτιστοποίησης, τα οποία είναι κοινά στην μηχανική σχεδίαση. Ο τυπικός DE αλγόριθμος χρησιμοποιεί ένα σταθερό μέγεθος πληθυσμού N_p χρωμοσωμάτων, ο οποίος αρχικοποιείται τυχαία. Στη συνέχεια καθιερώνεται μια

επαναληπτική διαδικασία και σε κάθε γενιά G παράγεται ένας νέος πληθυσμός. Σε κάθε γενιά, κάθε στοιχείο του πληθυσμού μπορεί να αντικατασταθεί με ένα νέο. Το νέο στοιχείο (δοκιμαστικό διάνυσμα) είναι στην ουσία ένας γραμμικός συνδυασμός μεταξύ ενός τυχαία επιλεγμένου στοιχείου και μιας κλιμακωτής διαφοράς μεταξύ δύο άλλων τυχαία επιλεγμένων στοιχείων. Στο στάδιο της επιλογής, το δοκιμαστικό διάνυσμα ανταγωνίζεται το διάνυσμα πληθυσμού του ίδιου δείκτη σε έναν διαγωνισμό έναν προς έναν, και οι επιζώντες των Np διαγωνισμών γίνονται οι γονείς για την επόμενη γενιά στον εξελικτικό κύκλο [Price et al., 2005].

Παρακάτω παρουσιάζεται μια πιο αναλυτική περιγραφή της δομής του βασικού αλγορίθμου, όπως αναφέρεται και στην εργασία [Nikolos, 2011]. Με συνάρτηση κόστους

$$f(X): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad 1.1$$

ο στόχος της διαδικασίας βελτιστοποίησης είναι να ελαχιστοποιηθεί η τιμή αυτής της συνάρτησης κόστους, βελτιστοποιώντας τις τιμές των μεταβλητών σχεδίασης της

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n), \quad x_i \in \mathbb{R} \quad 1.2$$

Τα προκαθορισμένα άνω και κάτω όρια των μεταβλητών σχεδίασης (ρητοί περιορισμοί) είναι

$$x_i^{(L)} \leq x_i \leq x_i^{(U)}, \quad i = 1, \dots, n \quad 1.3$$

Συνήθως ο DE αλγόριθμος εφαρμόζει πραγματική κωδικοποίηση για τις τιμές των παραμέτρων της αντικειμενικής συνάρτησης (ή της συνάρτησης κόστους, για προβλήματα ελαχιστοποίησης). Ωστόσο, είναι σχετικά εύκολο για τους DE αλγορίθμους να χειρίζονται ένα διάνυσμα μεταβλητών σχεδίασης με ένα μείγμα πραγματικών, ακέραιων ή διακριτών μεταβλητών σχεδίασης. Τα Np μέλη του αρχικού πληθυσμού δημιουργούνται τυχαία στον χώρο που ορίζεται από τα κάτω και άνω όρια των μεταβλητών σχεδίασης (δηλαδή τους ρητούς περιορισμούς του προβλήματος)

$$x_{k,i}^{(0)} = r \cdot (x_i^{(U)} - x_i^{(L)}) + x_i^{(L)}, \quad k = 1, \dots, Np, \quad i = 1, \dots, n \quad 1.4$$

όπου r είναι μια ομοιόμορφα κατανομημένη τυχαία τιμή εντός του διαστήματος $[0, 1]$. Ο τελεστής μετάλλαξης του DE (διαφορική μετάλλαξη) βασίζεται σε μία τριάδα τυχαία επιλεγμένων διαφορετικών μελών του τρέχοντος πληθυσμού. Ένα νέο διάνυσμα μεταβλητών σχεδίασης δημιουργείται με την προσθήκη του διανύσματος σταθμισμένης διαφοράς μεταξύ των δύο μελών της τριάδας στο τρίτο (ο επονομαζόμενος "δότης"). Αυτό το διαταραγμένο άτομο και το αρχικό μέλος του πληθυσμού υποβάλλονται στη συνέχεια σε μια συνάρτηση επιχιασμού, η οποία παράγει την τελική υποψήφια λύση. Ο τελεστής επιχιασμού είναι στην πραγματικότητα ένας ομοιόμορφος επιχιασμός

$$x'_{k,i}^{(G+1)} = \begin{cases} x_{C_{k,i}}^{(G)} + F(x_{A_{k,i}}^{(G)} - x_{B_{k,i}}^{(G)}) & \text{if } (r \leq Cr \vee i = i^*) \forall i = 1, \dots, n \\ x_{k,i}^{(G)} & \text{otherwise} \end{cases} \quad 1.5$$

Όπου $x_{C_{k,i}}^{(G)}$ είναι ο «δότης», G είναι η τρέχουσα γενιά,

$$\begin{aligned} k &= 1, \dots, Np, \quad i = 1, \dots, n \\ A_k &\in [1, \dots, Np], \quad B_k \in [1, \dots, Np], \quad C_k \in [1, \dots, Np] \\ A_k &\neq B_k \neq C_k \neq k \\ Cr &\in [0,1], \quad F \in [0,1+], \quad r \in [0,1] \end{aligned} \quad 1.6$$

και i^* είναι ένας τυχαίος ακέραιος αριθμός στο $[1, n]$, που επιλέγεται μία φορά για όλα τα μέλη του πληθυσμού. Ο τυχαίος αριθμός r σπέρνεται για κάθε γονίδιο κάθε χρωμοσώματος. Τα F και Cr είναι παράμετροι ελέγχου του DE για τις συναρτήσεις μετάλλαξης και επιχιασμού, οι οποίες (για έναν τυπικό DE αλγόριθμο) παραμένουν σταθερές κατά τη διαδικασία αναζήτησης και επηρεάζουν τη συμπεριφορά σύγκλισης και την ευρωστία του αλγορίθμου. Οι τιμές τους εξαρτώνται επίσης από την αντικειμενική συνάρτηση, τα χαρακτηριστικά του προβλήματος και το μέγεθος του πληθυσμού. Το Cr ελέγχει το

κλάσμα των μεταβλητών σχεδίασης (γονιδίων) που αντιγράφονται από το μεταλλαγμένο χρωμόσωμα. Επιπλέον, η δοκιμαστική μεταβλητή σχεδίασης με τυχαία επιλεγμένο δείκτη i^* , λαμβάνεται από το μεταλλαγμένο χρωμόσωμα, ώστε να διασφαλιστεί ότι το δοκιμαστικό διάνυσμα δεν αντιγράφει το αρχικό [Nikolos, 2011].

Ο πληθυσμός για την επόμενη γενιά επιλέγεται μεταξύ του τρέχοντος πληθυσμού και των τελικών υποψήφιων λύσεων, χρησιμοποιώντας μια σύγκριση έναν προς έναν μεταξύ όλων των μελών του τρέχοντος πληθυσμού και των αντίστοιχων υποψήφιων αντικαταστάσεών τους. Εάν κάθε υποψήφιο διάνυσμα είναι καλύτερα προσαρμοσμένο από το αντίστοιχο τρέχον, το νέο διάνυσμα αντικαθιστά το διάνυσμα με το οποίο συγκρίθηκε. Το σχήμα επιλογής του DE περιγράφεται ως εξής (για ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης):

$$X_k^{(G+1)} = \begin{cases} X_k'^{(G+1)} & \text{if } f(X_k'^{(G+1)}) \leq f(X_k^{(G)}) \\ X_k^{(G)} & \text{otherwise} \end{cases} \quad 1.7$$

Τα κλιμακωτά διανύσματα διαφοράς, διασφαλίζουν ότι τα δοκιμαστικά διανύσματα δεν αντιγράφουν υπάρχοντα σημεία. Επιπλέον, η κλιμάκωση μπορεί να αλλάξει την εστίαση της αναζήτησης μεταξύ τοπικής και σφαιρικής [Nikolos, 2011]. Ένα από τα μεγαλύτερα πλεονεκτήματα που παρέχουν τα διανύσματα διαφοράς είναι ότι τόσο το μέγεθος ενός βήματος όσο και ο προσανατολισμός του προσαρμόζονται αυτόματα στο τοπίο της αντικειμενικής συνάρτησης [Price et al., 2005].

Μια σημαντική διαφορά του DE τελεστή επιλογής σε σύγκριση με άλλους EAs είναι ότι το υποψήφιο χρωμόσωμα δεν συγκρίνεται με όλα τα άτομα στον τρέχοντα πληθυσμό, αλλά μόνο με το αντίστοιχο του τρέχοντος πληθυσμού, το οποίο αντικαθιστά εάν είναι πιο κατάλληλο. Αυτό είναι ένα πολύ σημαντικό χαρακτηριστικό σχετικά με τον παραλληλισμό του DE αλγορίθμου, καθώς επιτρέπει την εύκολη εφαρμογή μιας ασύγχρονης διαδικασίας [Nikolos, 2011]. Εάν κάθε μέλος του πληθυσμού αντιστοιχεί σε έναν διαφορετικό επεξεργαστή, ο εκάστοτε επεξεργαστής μπορεί να προχωρήσει στην αξιολόγηση ενός νέου ατόμου, αφού ολοκληρώσει την αξιολόγηση του γονέα του. Η επικοινωνία μεταξύ των διαφορετικών επεξεργαστών απαιτείται μόνο για την εκτέλεση της συνάρτησης μετάλλαξης, η οποία δεν απαιτεί την ύπαρξη μιας γενιάς με αυστηρό νόημα [Nikolos, 2011]. Ένας πληθυσμός που περιλαμβάνει άτομα διαφορετικών γενεών μπορεί να χρησιμοποιηθεί αντ' αυτού. Μια λεπτομερής ανασκόπηση των πρόσφατων εξελίξεων στους αλγόριθμους διαφορικής εξέλιξης και μια σύγκριση των παραλλαγών του DE μπορεί να βρεθεί στο [Neri and Tirronen, 2010].

1.4 ΥΠΟΚΑΤΑΣΤΑΤΑ ΜΟΝΤΕΛΑ

Τα υποκατάστατα μοντέλα (surrogate models) είναι βοηθητικές προσομοιώσεις που είναι λιγότερο πειστικά φυσικές, αλλά και λιγότερο υπολογιστικά ακριβές από τις ακριβείς προσομοιώσεις που περιγράφονται ως «exact» και «accurate» [Nikolos, 2011]. Είναι είτε φυσικά μοντέλα που επιλύουν το ίδιο πρόβλημα με πιο απλοποιημένες προσεγγίσεις, είτε μαθηματικά μοντέλα που προσεγγίζουν το τοπίο λύσης στον χώρο αναζήτησης, που αποκτήθηκε από προηγούμενες δοκιμές της ακριβούς και ακριβής προσομοίωσης [Torczon and Trosset, 1998; Giannakoglou, 2002]. Τέτοιες προσεγγίσεις είναι τα πολυώνυμα χαμηλής τάξης, που χρησιμοποιούνται στην μεθοδολογία επιφανειακής απόκρισης [Myers and Montgomery, 1995; Shyy et al., 2001] τα μοντέλα kriging ή Gaussian Process (GP models), που χρησιμοποιούνται στο σχεδιασμό και την ανάλυση πειραμάτων υπολογιστών [Rattle, 1999], και τα διαφόρων τύπων Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (Artificial Neural Networks – ANNs) [Giannakoglou, 2002]. Ένα υποκατάστατο μοντέλο πρέπει να παρέχει μια ακριβή πρόβλεψη της συνάρτησης τοπίου που προσπαθούμε να μιμηθούμε και αυτή η πρόβλεψη θα πρέπει να είναι πιο ακριβής στην περιοχή του βέλτιστου [Forrester and Keane, 2009].

Τα υποκατάστατα μοντέλα μπορούν να χρησιμοποιηθούν αποτελεσματικά ως συμπληρωματικό εργαλείο για τη μείωση του χρόνου υπολογισμού των εξελικτικών αλγορίθμων βελτιστοποίησης. Τα τελευταία χρόνια, ιδιαίτερη ερευνητική προσπάθεια έχει κατευθυνθεί προς το σχεδιασμό

αποτελεσματικών και ευέλικτων υποκατάστατα-υποβοηθούμενων εξελικτικών αλγορίθμων (SAEAs – Surrogate-Assisted EAs) διαφόρων τύπων [Nikolos, 2011]. Δεδομένου ότι ο χρόνος υπολογισμού σε μια διαδικασία βελτιστοποίησης που βασίζεται σε EAs είναι ανάλογος με τον αριθμό των κλήσεων στις ακριβές (και ακριβείς) προσομοιώσεις, η χρήση αποτελεσματικών και υπολογιστικά φθηνών υποκατάστατων μπορεί να μειώσει τον αριθμό των κλήσεων αυτών και επίσης να οδηγήσει σε σημαντική μείωση στον υπολογιστικό φόρτο της διαδικασίας βελτιστοποίησης [Nikolos, 2011]. Πρέπει να σημειωθεί εδώ ότι το υπολογιστικό κόστος κατασκευής ενός υποκατάστατου μοντέλου είναι γενικά πολύ χαμηλότερο από ότι το κέρδος που προσφέρει η μείωση του αριθμού των ακριβών προσομοιώσεων [Lim et al., 2010].

Καθώς το υποκατάστατο μοντέλο είναι μόνο μια προσέγγιση της αντικειμενικής συνάρτησης, τα αποτελέσματά του θα πρέπει να επιβεβαιώνονται διαδοχικά κατά τη διάρκεια της διαδικασίας βελτιστοποίησης, με κλήσεις προς την αντικειμενική συνάρτηση. Αυτή η αντικειμενική συνάρτηση πρέπει πάντα να παρέχει τον βέλτιστο σχεδιασμό και όχι το υποκατάστατο μοντέλο, το οποίο βασίζεται σε υποθέσεις [Nikolos, 2011]. Τέτοιες πρόσθετες κλήσεις προς την αντικειμενική συνάρτηση σε συγκεκριμένα σημεία του χώρου αναζήτησης, που ονομάζονται σημεία πλήρωσης, χρησιμοποιούνται όχι μόνο για σκοπούς επικύρωσης [Nikolos, 2011]. Ο δεύτερος λόγος είναι η αύξηση της ακρίβειας του υποκατάστατου μοντέλου με την προσαρμοστική δειγματοληψία της αντικειμενικής συνάρτησης σε υποσχόμενες περιοχές, προκειμένου να ενημερώνεται διαδοχικά το μοντέλο και οι δυνατότητες προσέγγισής του, ειδικά στην περιοχή κοντά στη βέλτιστη λύση [Forrester and Keane, 2009]. Η εκμετάλλευση του υποκατάστατου μοντέλου πριν από την επαρκή εξερεύνηση του χώρου αναζήτησης μπορεί να οδηγήσει σε τοπικό βέλτιστο αντί για το ολικό. Η σωστή ισορροπία μεταξύ εξερεύνησης και εκμετάλλευσης πρέπει πάντα να είναι ο στόχος σε σφαιρικές μεθοδολογίες βελτιστοποίησης (είτε περιλαμβάνοντας υποκατάστατα μοντέλα είτε όχι) [Nikolos, 2011]. Οποιαδήποτε μεθοδολογία βελτιστοποίησης βασισμένη σε υποκατάστατα θα πρέπει να περιλαμβάνει μια μορφή επαναλαμβανόμενης διαδικασίας αναζήτησης και συμπλήρωσης προκειμένου να διασφαλιστεί ότι το υποκατάστατο είναι ακριβές στις περιοχές ενδιαφέροντος. Για τον λόγο αυτόν, το υποκατάστατο μοντέλο πρέπει να έχει την ικανότητα να προσαρμόζει το σχήμα του, ώστε να προσαρμόζεται σε οποιοδήποτε περίπλοκο τοπικό χαρακτηριστικό του τοπίου [Forrester and Keane, 2009].

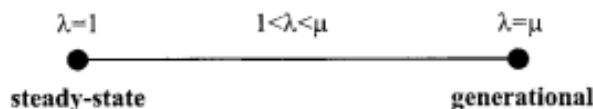
1.5 ΠΑΡΑΛΛΗΛΟΠΟΙΗΣΗ

Ο βασισμένος στον πληθυσμό μηχανισμός αναζήτησης των EA τους καθιστά εξαιρετικά κατάλληλους για παραλληλισμό. Οι διαφορετικοί τύποι παράλληλων EA μπορούν να χωριστούν κυρίως σε δύο κατηγορίες, **πανμικτικοί “panmictic” EA** και **δομημένοι “structured” EA** [Alba and Tomassini, 2002; Cantú-Paz, 1999]. Στους πανμικτικούς EA ακολουθείται συνήθως ένα σφαιρικό μοντέλο παραλληλισμού, το οποίο χρησιμοποιεί έναν μοναδικό πληθυσμό υποψήφιων λύσεων, ενώ η συνάρτηση επιλογής εφαρμόζεται σε όλα τα μέλη του πληθυσμού. Η όλη διαδικασία προσαρμόζεται από έναν κεντρικό επεξεργαστή, ο οποίος κατανέμει τα μέλη του πληθυσμού σε διαφορετικούς επεξεργαστές προκειμένου να αξιολογηθούν παράλληλα, ενώ το βήμα επιλογής πραγματοποιείται μόνο από τον κεντρικό επεξεργαστή διαδοχικά. Αυτό το μοντέλο συνδυάζεται συνήθως με μία αρχιτεκτονική Master-Slave [Νικολός, 2019].

1.5.1 Πανμικτικοί Εξελικτικοί Αλγόριθμοι (Panmictic EAs)

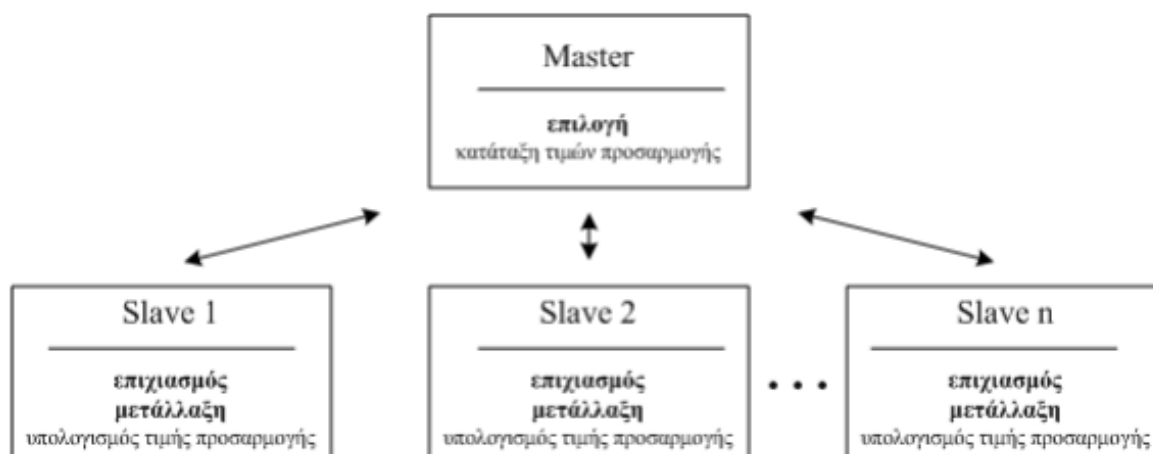
Οι πανμικτικοί EA αποτελούν την κλασσική περίπτωση EA όπου ο πληθυσμός είναι ενιαίος και η διαδικασία της επιλογής πραγματοποιείται σε ολόκληρο τον πληθυσμό. Υπάρχουν δύο δημοφιλής κατηγορίες πανμικτικών EA, οι οποίοι διαφοροποιούνται κατά την αναπαραγωγική διαδικασία [Syswerda, 1991]. Το πρώτο καλείται γενεαλογικό μοντέλο (generational model), στο οποίο ένας καινούριος πληθυσμός από λ άτομα αντικαθιστά τον παλιό. Ο δεύτερος τύπος καλείται σταθερής κατάστασης (steady state), όπου συνήθως ένα ή δύο νέα άτομα δημιουργούνται σε κάθε βήμα του αλγορίθμου και εισέρχονται στον πληθυσμό, και συνεπώς μπορούν να συνυπάρξουν με τους γονείς τους. Στην ενδιάμεση περιοχή υπάρχει πληθώρα μοντέλων επιλογής τα οποία γενικώς ονομάζονται

αλγόριθμοι χάσματος γενεών (generation gap algorithms), στους οποίους ένα δεδομένο ποσοστό των ατόμων αντικαθίσταται με ένα νέο (Σχήμα 1.4). Προφανώς, τα σταθερής κατάστασης και γενεαλογικά μοντέλα επιλογής αποτελούν δύο ειδικές υποκατηγορίες των αλγορίθμων χάσματος γενεών [Alba and Tomassini, 2002].



Σχήμα 1.4: Μοντέλα Πανμικτικών Εξελικτικών Αλγορίθμων [Alba and Tomassini, 2002].

Σε αυτό τον τύπο EA μπορεί να εφαρμοστεί παραλληλισμός με τη χρήση του μοντέλου του σφαιρικού παραλληλισμού (global parallelism). Σύμφωνα με αυτό το μοντέλο, τα άτομα του πληθυσμού αξιολογούνται παράλληλα σε διαφορετικούς επεξεργαστές, ενώ η διαδικασία της επιλογής πραγματοποιείται σειριακά στον κεντρικό επεξεργαστή, που ελέγχει τη συνολική διαδικασία του EA [Levine, 1995]. Το μοντέλο αυτό συνδυάζεται συνήθως με την αρχιτεκτονική δικτύου «Master-Slave» από όπου παίρνει και το όνομα του (Σχήμα 1.5). Ο αλγόριθμος είναι ακριβώς ο ίδιος όπως και στη σειριακή εφαρμογή, μόνο που είναι ταχύτερος, ειδικά σε περιπτώσεις που η αξιολόγηση της κάθε λύσης είναι ιδιαίτερα χρονοβόρα. Μπορεί να υπάρξει ένας επεξεργαστής για κάθε άτομο του πληθυσμού ή σε κάθε επεξεργαστή να αντιστοιχούν περισσότερα άτομα του πληθυσμού, μοιρασμένα με τρόπο ώστε να επιτυγχάνεται ομοιόμορφος φόρτος.

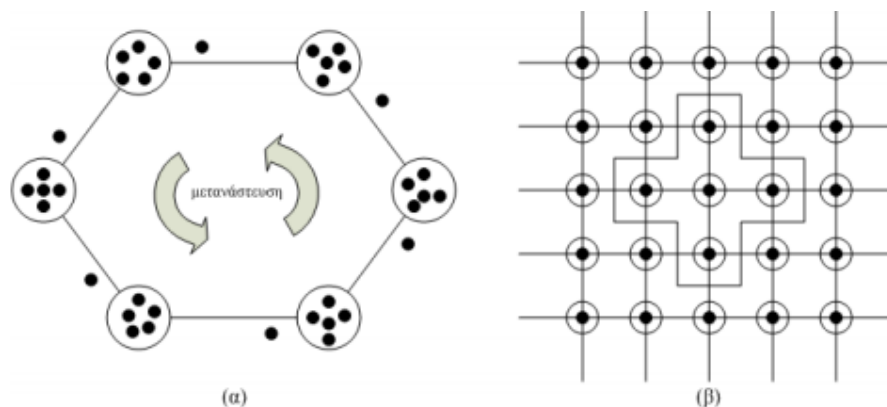


Σχήμα 1.5: Αρχιτεκτονική δικτύου τύπου «Master-Slave» [Dipteni, 2006].

Με βάση λοιπόν τη μέθοδο του σφαιρικού παραλληλισμού διατηρείται ένας απλός πληθυσμός, στον οποίο οι αξιολογήσεις των ατόμων και οι εφαρμογές των γενετικών τελεστών εφαρμόζονται παράλληλα. Ένας κύριος «Master» επεξεργαστής επιβλέπει τον συνολικό πληθυσμό και κάνει την επιλογή. Οι δευτερεύοντες «Slave» επεξεργαστές χρησιμοποιούν τους τελεστές μετάλλαξης και επιχiasμού για τη δημιουργία του ενδιάμεσου πληθυσμού. Ο ενδιάμεσος πληθυσμός πρέπει να αξιολογηθεί πριν επιστρέψει στον «Master» επεξεργαστή [Cantú-Paz, 1999].

1.5.2 Δομημένοι Εξελικτικοί Αλγόριθμοι (Structured EAs)

Υπάρχει μια μεγάλη παράδοση στη χρησιμοποίηση δομημένων πληθυσμών σε εξελικτικές εφαρμογές και πιο ειδικά σε παράλληλες μεθόδους [Νικολός, 2019]. Οι πιο διαδεδομένοι τύποι δομημένων EA είναι οι κατανεμημένοι EA (Distributed EAs) και οι κυτταρικοί EA (Cellular EAs) και χρησιμοποιούνται ευρέως σε διαδικασίες βελτιστοποίησης [Alba and Troya, 1999]. Η διαδικασία δόμησης ενός απλού πληθυσμού μπορεί να επιτευχθεί καταμερίζοντάς τον σε διάφορους υποπληθυσμούς, όπου μπορούν να τοποθετηθούν είτε σε νησιά για την εκτέλεση σποραδικών ανταλλαγών ατόμων (Σχήμα 1.6(α)), είτε να έχουν τη μορφή γειτονιών (Σχήμα 1.6(β)).



Σχήμα 1.6: Μοντέλα δομημένων EA: (α) Κατανεμημένος EA, (β) Κυτταρικός EA [Alba and Tomassini, 2002].

Οι κατανεμημένοι EA (DEAs) που πολλές φορές ονομάζεται και ως μοντέλο νήσου, είναι εν γένει σύνθετοι αλγόριθμοι. Στηρίζονται σε διάφορους υποπληθυσμούς που ανταλλάσσουν άτομα περιοδικά. Αυτή η ανταλλαγή ατόμων καλείται μετανάστευση και ελέγχεται από διάφορες παραμέτρους. Αυτού του τύπου οι PEAs (Parallel EAs) είναι πολύ δημοφιλείς αλλά είναι και πιο δύσκολο να ελεγχθούν, λόγω της διαδικασίας της μετανάστευσης. Συγκεκριμένα, πρέπει να καθοριστούν ο αριθμός και το μέγεθος των υποπληθυσμών, η συχνότητα μετανάστευσης, ο αριθμός και ο προορισμός των μεταναστών και η μέθοδος που χρησιμοποιείται για την επιλογή των ατόμων που θα μεταναστεύσουν [Alba and Tomassini, 2002].

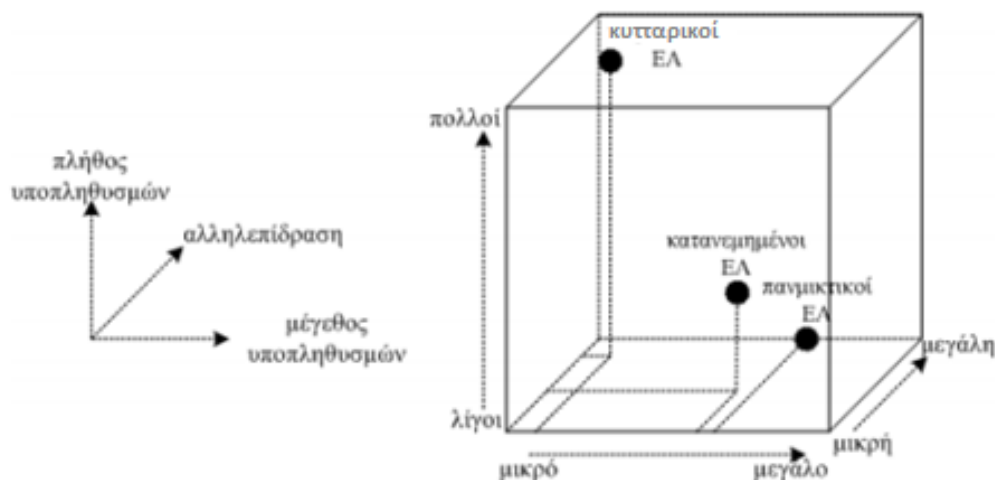
Οι κυτταρικοί EA (CEAs – Cellular EAs), αναφέρονται έτσι επειδή είναι μια κλάση αυτόματων κυττάρων με στοχαστικούς κανόνες γενετικής μεταλλαγής και είναι επίσης γνωστοί ως πυκνής διάταξης αλγόριθμοι. Αυτή η κλάση των PEAs καλείται και μοντέλο διάχυσης, επειδή η διάδοση των καλών ιδιοτήτων στον πληθυσμό είναι ανάλογη της τυχαίας διάχυσης των μορίων στα ρευστά. Η δομή του πληθυσμού είναι συνήθως ορθογώνιο πλέγμα δύο διαστάσεων και υπάρχει ένα άτομο για κάθε κόμβο του πλέγματος. Η επιλογή και ο επιχιασμός περιορίζονται σε μια μικρή περιοχή γύρω από το άτομο. Οι περιοχές αυτές επικαλύπτονται, έτσι ώστε τελικά οι καλές ιδιότητες των ατόμων που υπερέχουν να μπορούν να διαδοθούν σε ολόκληρο τον πληθυσμό.

Στο Σχήμα 1.7 παρατηρείται μια τριδιάστατη απεικόνιση των διαφόρων τύπων των EA βασισμένη στον αριθμό των υποπληθυσμών, το πλήθος των ατόμων σε κάθε έναν και το βαθμό αλληλεπίδρασης ανάμεσά τους.

Παρόλο που οι DEAs και οι CEAs αποτελούν μοντέλα δομημένων EA, παρουσιάζουν αρκετές διαφορές μεταξύ τους [Νικολός, 2019]. Ένας CEA αποτελείται από πολλούς υποπληθυσμούς που όμως συνήθως περιέχουν ένα μόνο άτομο, σε αντίθεση με τους DEAs που ο πληθυσμός κατανέμεται σε λιγότερους υποπληθυσμούς αποτελούμενους όμως από περισσότερα άτομα. Σε έναν DEA οι υποπληθυσμοί συνδέονται χαλαρά, η αλληλεπίδραση δηλαδή μεταξύ τους είναι μικρή, ενώ σε έναν CEA συνδέονται πιο σφικτά. Ο κύβος του Σχήματος 1.7 παρουσιάζει ένα γενικότερο τρόπο κατάταξης των δομημένων EA συμπεριλαμβάνοντας και τους πανμικτικούς EA για την καλύτερη κατανόηση της συμπεριφοράς τους [Alba and Tomassini, 2002].

Σε γενικές γραμμές, οι παράλληλοι EA χρησιμοποιούν κυρίως δομημένους πληθυσμούς, ακολουθώντας είτε το μοντέλο της νήσου (DEA) είτε το κυτταρικό μοντέλο (CEAs). Για την παράλληλη εφαρμογή ο πληθυσμός χωρίζεται σε υποπληθυσμούς που ονομάζονται «demes», και ο καθένας εξελίσσεται ξεχωριστά στον εκχωρημένο επεξεργαστή του. Στους DEAs κάθε υποπληθυσμός αποτελείται από πολλά άτομα, ενώ στους CEAs ο υποπληθυσμός αντιστοιχεί σε ένα μόνο άτομο. Οι υποπληθυσμοί demes ανταλλάσσουν άτομα με κάποια συχνότητα μετανάστευσης για να διασφαλίσουν τη διάδοση καλών λύσεων. Σε έναν DEA οι υποπληθυσμοί συνδέονται χαλαρά μεταξύ τους, ενώ στους CEA κάθε άτομο μπορεί να αλληλεπιδρά μόνο με τους γείτονές του. Κατά την εφαρμογή του μοντέλου

νήσος μόνο ένας μικρός αριθμός υποπληθυσμών χρησιμοποιείται, σε αντίθεση με τον CEA, όπου ο αριθμός των υποπληθυσμών ισούται με το μέγεθος του πληθυσμού [Alba and Tomassini, 2002; Cantú-Paz, 1999].



Σχήμα 1.7: Κύβος τρισδιάστατης απεικόνισης ΕΑ [Alba and Tomassini, 2002].

Είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι οι πανμικτικοί ΕΑ δεν επηρεάζουν γενικά τη συμπεριφορά του αλγορίθμου σε σχέση με τους διάφορους τύπους των δομημένων ΕΑ που αναφέρθηκαν, όπου αλλάζουν τον τρόπο με τον οποίο λειτουργούν οι ΕΑ [Dipteni, 2006].

1.5.3 Σύγχρονη και Ασύγχρονη Εφαρμογή

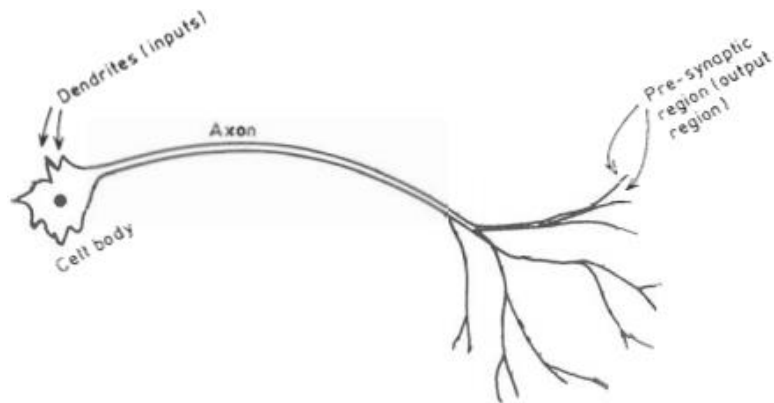
Στους πανμικτικούς ΕΑ η εφαρμογή της διαδικασίας συνήθως είναι σύγχρονη (synchronous application), όμως μπορεί να υπάρξει και ασύγχρονη εφαρμογή (asynchronous application) που σε αρκετές περιπτώσεις επιφέρει καλύτερα αποτελέσματα. Ο αλγόριθμος είναι σύγχρονος, όταν ο κύριος «Master» επεξεργαστής περιμένει να λάβει τις τιμές της συνάρτησης προσαρμογής για όλα τα άτομα του πληθυσμού πριν επεξεργαστεί την επόμενη γενιά. Για να εκτελεστεί επομένως το σειριακό τμήμα του αλγορίθμου, όπου εφαρμόζεται ο τελεστής της επιλογής, θα πρέπει να ολοκληρωθούν όλες οι αξιολογήσεις. Δεδομένου ότι οι σύγχρονοι παράλληλοι ΕΑ σπαταλούν πολύ χρόνο αδράνειας, περιμένοντας την ολοκλήρωση της πιο χρονοβόρας αξιολόγησης της φυσικής κατάστασης, οι ασύγχρονες εξελικτικές προσεγγίσεις φαίνονται σαν ένα υποχρεωτικό βήμα προς την εξοικονόμηση υπολογιστικού χρόνου [Strofylos et al., 2018]. Σε γενικές γραμμές, οι ασύγχρονες παράλληλες εφαρμογές των ΕΑ δημιουργούν μια νέα λύση χωρίς να περιμένουν τις αξιολογήσεις άλλων λύσεων, σε αντίθεση με τις συμβατικές σύγχρονες προσεγγίσεις, που θα πρέπει να περιμένουν να ολοκληρωθούν όλες οι αξιολογήσεις ώστε να συνεχίσουν στην επόμενη γενιά [Scott and De Jong, 2005; 2015].

Στη παρούσα εργασία χρησιμοποιείται ένας παράλληλος DE αλγόριθμος βασισμένος στην πανμικτική προσέγγιση σε ασύγχρονη εφαρμογή, χρησιμοποιώντας έναν μοναδικό πληθυσμό, ο οποίος έχει κατανεμηθεί μεταξύ των επεξεργαστών με την Master-Slave αρχιτεκτονική. Ξεχωριστά εκτελέσιμα προγράμματα εκτελούν την αξιολόγηση κάθε ατόμου στον πληθυσμό, ενώ η απαιτούμενη ανταλλαγή δεδομένων και επικοινωνία μεταξύ των επεξεργαστών επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας τις συναρτήσεις της βιβλιοθήκης MPI (Message Passing Interface). Επιπλέον, η χρήση δύο τεχνητών νευρωνικών δικτύων (ANNs), ως υποκατάστατα μοντέλα στον αλγόριθμο DE, βελτιώνει την απόδοσή του, αντικαθιστώντας τις υπολογιστικά χρονοβόρες και απαιτητικές αξιολογήσεις της συνάρτησης προσαρμογής με προσεγγίσεις χαμηλού κόστους [Strofylos et al., 2018].

ΤΕΧΝΗΤΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ

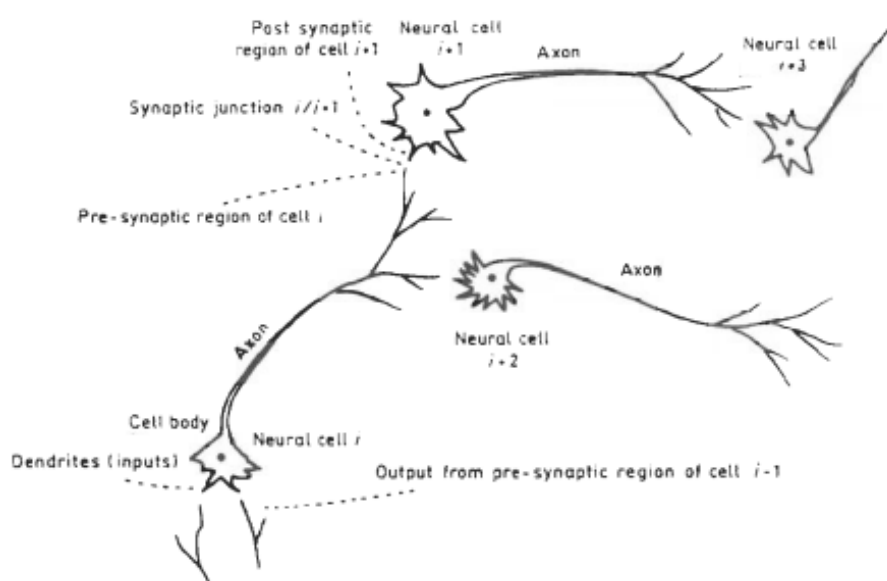
2.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ) (Artificial Neural Networks –ANNs) ή Νευρωνικά Δίκτυα (NNs) όπως συνήθως ονομάζονται, είναι υπολογιστικά συστήματα τα οποία είναι εμπνευσμένα από την λειτουργία του εγκεφάλου. Ένα νευρωνικό δίκτυο σε έναν βιολογικό εγκέφαλο, αποτελείται από ένα πλήθος νευρώνων συνδεδεμένων μεταξύ τους, το οποίο επεξεργάζεται τις πληροφορίες που εισάγονται στο δίκτυο, ώστε να εξάγουν το κατάλληλο αποτέλεσμα. Ο νευρώνας αποτελείται από το κυτταρικό σώμα, στο οποίο γίνεται επί το πλείστον η επεξεργασία της πληροφορίας, τους δενδρίτες που αποτελούν την είσοδο του νευρώνα και τον άξονα που αποτελεί την έξοδο του νευρώνα και παράλληλα τη σύνδεση του με άλλους νευρώνες [Graupe, 2013].



Σχήμα 2.1: Ένα βιολογικό νευρωνικό κύτταρο (νευρώνας) [Graupe, 2013].

Η μεταφορά της πληροφορίας από έναν νευρώνα σε έναν άλλον πραγματοποιείται μέσω μιας ηλεκτροχημικής διαδικασίας ανταλλαγής ιόντων από τις συναπτικές ενώσεις που βρίσκονται στο κάτω μέρος του άξονα (έξοδος του νευρώνα), προς τους δενδρίτες του επόμενου νευρώνα. Μια τέτοια σύνδεση μεταξύ νευρώνων παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.2.



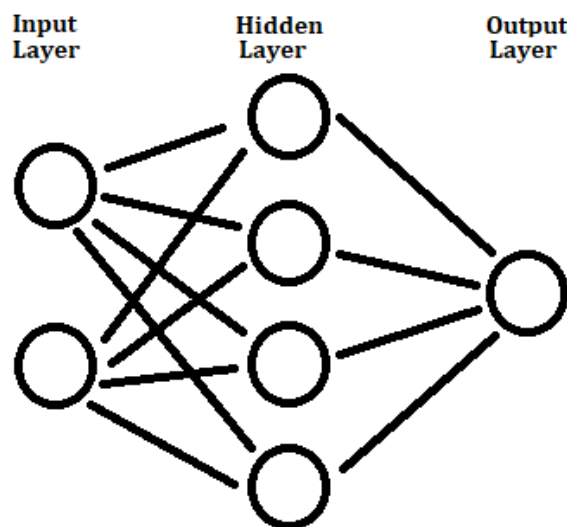
Σχήμα 2.2: Διασύνδεση βιολογικών νευρωνικών δικτύων [Graupe, 2013].

Τα Σχήματα 2.1 και 2.2 υποδεικνύουν ότι, δεδομένου ότι ένας νευρώνας μπορεί να έχει πολλές (εκατοντάδες) συνάψεις, μπορεί να συνδέσει (να περάσει το μήνυμα/σήμα του) σε πολλούς (εκατοντάδες) άλλους νευρώνες. Ομοίως, δεδομένου ότι υπάρχουν πολλοί δενδρίτες ανά νευρώνα, ένας νευρώνας μπορεί να λάβει μηνύματα (νευρικά σήματα) από πολλούς άλλους νευρώνες. Με αυτόν τον τρόπο, το βιολογικό νευρωνικό δίκτυο διασυνδέεται [Ganong, 1973].

Είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι δεν είναι όλες οι διασυνδέσεις εξίσου σταθμισμένες. Ορισμένες έχουν μεγαλύτερη προτεραιότητα (μεγαλύτερο βάρος) από άλλες. Επίσης μερικές είναι διεγερτικές και κάποιες άλλες ανασταλτικές (χρησιμοποιούν για να εμποδίσουν τη μετάδοση ενός μηνύματος). Αυτές οι διαφορές επηρεάζονται από διαφορές στη χημεία και από την ύπαρξη χημικών πομπών και ρυθμιστικών ουσιών μέσα και κοντά στους νευρώνες, στους νευράξονες και στις συναπτικές ενώσεις. Αυτή η φύση της διασύνδεσης μεταξύ των νευρώνων και της στάθμισης των μηνυμάτων είναι επίσης θεμελιώδης και για τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (ANNs) [Graupe, 2013].

Τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ANNs) σχηματίστηκαν αρχικά ως υπερ-απλοποιημένα μοντέλλα παράλληλα με τα «βιολογικά» μοντέλα: και στις δύο περιπτώσεις υπάρχουν κόμβοι επεξεργασίας (νευρώνες), οι οποίοι επικοινωνούν, στέλνοντας σήματα μεταξύ τους μέσω ενός μεγάλου αριθμού σταθμισμένων συνδέσεων [Nikolos, 2011]. Στα ANNs κάθε κόμβος εκτελεί τη σχετικά απλή δουλειά της λήψης εισόδου από γείτονες ή εξωτερικές πηγές και τη χρησιμοποιεί για να υπολογίσει ένα σήμα εξόδου που διαδίδεται σε άλλους κόμβους [Haykin, 1999]. Μπορούν να χαρακτηριστούν καταλληλότερα ως "υπολογιστικά μοντέλα" με συγκεκριμένες ιδιότητες, όπως η ικανότητα προσαρμογής ή εκμάθησης, γενίκευσης ή ομαδοποίησης ή οργάνωσης δεδομένων, η οποία λειτουργία βασίζεται σε παράλληλη επεξεργασία [Kroese and Van der Samgt, 1996].

Τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα αποτελούνται από ένα επίπεδο εισόδου, ένα εξόδου και από ένα ή περισσότερα κρυφά επίπεδα, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.3. Κάθε επίπεδο αποτελείται από έναν ή περισσότερους κόμβους, τους ονομαζόμενους τεχνητούς νευρώνες, οι οποίοι είναι πλήρως συνδεδεμένοι με τους κόμβους των διπλανών επιπέδων. Οι συνδέσεις αυτές ονομάζονται ακμές και περιέχουν ένα βάρος που δηλώνει την ισχύ του σήματος που έχει η εκάστοτε σύνδεση στο δίκτυο. Τα βάρη είναι παράμετροι που μπορούν να αλλάξουν στο δίκτυο και μέσω αυτών πραγματοποιείται η εκμάθηση του δικτύου (επιπρόσθετοι παράμετροι είναι τα biases).



Σχήμα 2.3: Απεικόνιση ενός Τεχνητού Νευρωνικού Δικτύου.

Η εκμάθηση του δικτύου πραγματοποιείται κάνοντας χρήση δεδομένων με γνωστή είσοδο και γνωστό αποτέλεσμα (έξοδο). Η έξοδος που θα μας δώσει το δίκτυο στα δεδομένα αυτά, θα συγκριθεί με το ήδη γνωστό αποτέλεσμα και η διαφορά τους θα ορίσει το σφάλμα του δικτύου. Το δίκτυο στη συνέχεια

προσαρμόζει τα βάρη του σύμφωνα με έναν κανόνα εκμάθησης, χρησιμοποιώντας αυτήν την τιμή σφάλματος. Οι διαδοχικές προσαρμογές θα κάνουν το νευρωνικό δίκτυο να παράγει έξοδο η οποία μοιάζει όλο και περισσότερο με την έξοδο στόχο (γνωστό αποτέλεσμα). Μετά από επαρκή αριθμό αυτών των προσαρμογών, η εκπαίδευση μπορεί να τερματιστεί με βάση ορισμένα κριτήρια. Αυτή η διαδικασία είναι γνωστή ως εποπτευόμενη μάθηση [en.wikipedia.org/wiki/Artificial_neural_network, 2021].

Στην περίπτωση της χρήσης των ANNs ως υποκατάστατα μοντέλα σε έναν Εξελικτικό Αλγόριθμο, η είσοδος του δικτύου είναι τα γονίδια ενός χρωμοσώματος και η έξοδος θα είναι η εκτίμηση της τιμής προσαρμογής του χρωμοσώματος αυτού. Τα δεδομένα εκπαίδευσης που χρησιμοποιούνται για την εκμάθηση του δικτύου, είναι ήδη αξιολογημένα χρωμοσώματα με γνωστή τιμή συνάρτησης προσαρμογής. Ο αλγόριθμος εφαρμογής μας χρησιμοποιεί δύο νευρωνικά δίκτυα τα MLP και RBFN, για τον λόγο αυτόν θα γίνει αναφορά της λειτουργίας μόνο αυτών των δύο νευρωνικών δικτύων (βλέπε ενότητες 2.3 – 2.4).

2.2 ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΑΝΑΔΡΟΜΗ

Η πηγαία ανάγκη του ανθρώπου για συνεχή εξέλιξη, σε συνδυασμό με την εφευρετικότητα, οδήγησαν στην σταδιακή δημιουργία μίας νέας επιστημονικής περιοχής, τα λεγόμενα Νευρωνικά Δίκτυα. Η ανάπτυξη αυτού του κλάδου ξεκίνησε σε παγκόσμιο επίπεδο μόλις τις τελευταίες δεκαετίες του 20ου αιώνα, γνωρίζοντας μεγαλύτερη αναγνώριση στο κοινό μετά το 1980. Στήριζόμενοι στην φρενήρη ανάπτυξη του υλικού των Η/Υ, όσο και στην ανάπτυξη νέων αλγόριθμων εκπαίδευσης, οι επιστήμονες κατόρθωσαν να βάλουν τα θεμέλια στον τομέα των Νευρωνικών Δικτύων [Πήτας, 2018].

Η ιστορία των νευρωνικών δικτύων είναι μεγαλύτερη από όσο πιστεύουν οι περισσότεροι. Η ιδέα της «μηχανής που σκέφτεται» μπορεί να εντοπιστεί μέχρι και στους Αρχαίους Έλληνες. Θα επικεντρωθούμε όμως σε μερικά βασικά γεγονότα, που οδήγησαν στην εξέλιξη της σκέψης γύρω από τα νευρωνικά δίκτυα, η οποία έχει γίνει δημοφιλής με τα χρόνια [ibm.com/cloud/learn/neural-networks, 2021]:

1943: Οι Warren S. McCulloch και Walter Pitts δημοσίευσαν την εργασία [McCulloch and Pitts, 1943]. Μέσω αυτής της έρευνας προσπάθησαν να καταλάβουν πώς ο ανθρώπινος εγκέφαλος θα μπορούσε να παράγει σύνθετα μοτίβα, μέσω συνδεδεμένων εγκεφαλικών κυττάρων ή νευρώνων. Μία από τις κύριες ιδέες που προέκυψαν από αυτήν την εργασία ήταν η σύγκριση νευρώνων με ένα δυαδικό κατώφλι στη λογική του Μπούλ (δηλαδή, 0/1 ή αληθινές/ψευδείς δηλώσεις).

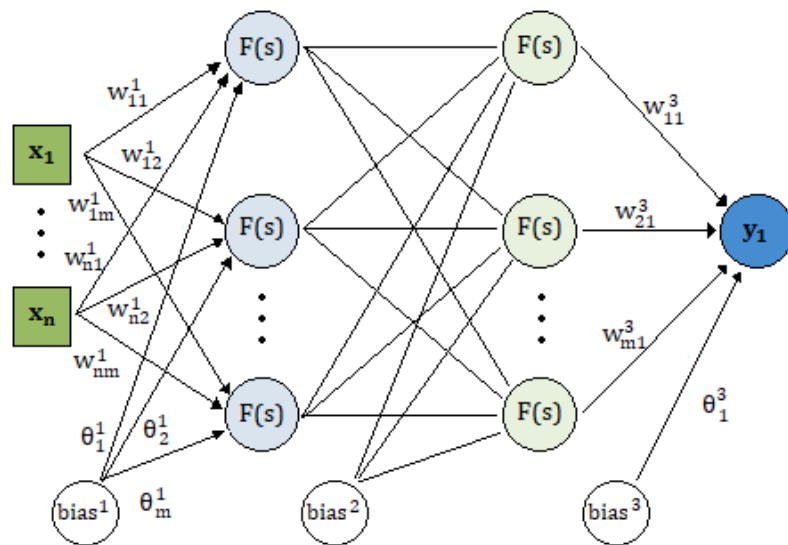
1958: Ο Frank Rosenblatt πιστώνεται για την ανάπτυξη του perceptron, που τεκμηριώνεται στην έρευνά του [Rosenblatt, 1958]. Πηγαίνει το έργο των McCulloch και Pitts ένα βήμα παραπέρα, εισάγοντας βάρη στην εξίσωση. Αξιοποιώντας έναν IBM 704 (ο πρώτος υπολογιστής μαζικής παραγωγής με αριθμητικό υλικό κινητής υποδιαστολής), ο Rosenblatt μπόρεσε να κάνει έναν υπολογιστή να μάθει πώς να διακρίνει κάρτες σημειωμένες στα αριστερά από κάρτες σημειωμένες στα δεξιά.

1974: Ενώ πολλοί ερευνητές συνέβαλαν στην ιδέα της οπίσθιας διάδοσης (backpropagation), ο Paul Werbos ήταν το πρώτο άτομο στις ΗΠΑ που σημείωσε την εφαρμογή της εντός των νευρωνικών δικτύων στο πλαίσιο της διδακτορικής του διατριβής [Werbos, 1974].

1989: Ο Yann LeCun δημοσίευσε ένα άρθρο [LeCun et al., 1989], απεικονίζοντας πώς η χρήση των περιορισμών στην οπίσθια διάδοση (backpropagation) και η ενσωμάτωσή του στην αρχιτεκτονική των νευρωνικών δικτύων μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εκπαίδευση αλγορίθμων. Αυτή η έρευνα αξιοποίησε με επιτυχία ένα νευρωνικό δίκτυο για την αναγνώριση χειρόγραφων ψηφίων ταχυδρομικού κώδικα που παρέχονται από την Ταχυδρομική Υπηρεσία των ΗΠΑ.

2.3 MULTI-LAYER PERCEPTRON (MLP)

Η αρχιτεκτονική διάταξη ενός MLP παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.4, το οποίο αντιστοιχεί σε ένα πλήρως συνδεδεμένο δίκτυο με δύο κρυφά επίπεδα. Κάθε κόμβος περιλαμβάνει μία μη γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης, η οποία στην περίπτωσή μας είναι η κοινώς χρησιμοποιούμενη λογιστική συνάρτηση. Ο αλγόριθμος οπίσθιας διάδοσης (back-propagation) ή άλλες πιο αποτελεσματικές μεθοδολογίες μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον προσδιορισμό των συνοπτικών βαρών του δικτύου, μέσω μιας επαναληπτικής εποπτευόμενης διαδικασίας μάθησης [Kroese and Van der Smagt, 1996; Haykin, 1999]. Ένα δεύτερο κρυφό επίπεδο εισάγεται προκειμένου τα τοπικά χαρακτηριστικά της συνάρτησης προσαρμογής να εξαχθούν στο πρώτο κρυφό επίπεδο και τα σφαιρικά στο δεύτερο κρυφό επίπεδο, παρέχοντας με αυτόν τον τρόπο καλύτερα αποτελέσματα προσαρμογής [Funahashi, 1989; Chester, 1990; Haykin, 1999].



Σχήμα 2.4: Ένα πολύ-επίπεδο perceptron (MLP) τεχνητό νευρωνικό δίκτυο με δύο κρυφά επίπεδα και μία έξοδο.

Το δίκτυο είναι πλήρως συνδεδεμένο, πράγμα που σημαίνει ότι ένας κόμβος σε οποιοδήποτε επίπεδο του δικτύου είναι συνδεδεμένος με όλους τους κόμβους στο προηγούμενο επίπεδο. Κάθε κόμβος στο δίκτυο περιλαμβάνει μια μη γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης $F(s_k^P)$ της συνολικής εισόδου s_k^P , η οποία στην περίπτωσή μας είναι η συνήθως χρησιμοποιούμενη λογιστική συνάρτηση:

$$y_k^P = F(s_k^P) = \frac{1}{1 + \exp(-s_k^P)} \quad (2.1)$$

Η συνολική είσοδος στον κόμβο k είναι απλώς το σταθμισμένο άθροισμα των ξεχωριστών εξόδων από κάθε έναν από τους συνδεδεμένους κόμβους, συν το bias:

$$s_k^P = \sum_j w_{jk}^P y_j^P + \theta_k^P \quad (2.2)$$

Το αποτέλεσμα του bias (θ_k) αντιπροσωπεύεται από μια σύναψη βάρους $w_{0k} = \theta_k$ συνδεδεμένη σε μια σταθερή είσοδο ίση με τιμή 1.

Τα συνοπτικά βάρη καθορίζονται κατά την εποπτευόμενη διαδικασία εκπαίδευσης, μέσω διαδοχικών προσαρμογών βαρών, χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο οπίσθιας διάδοσης (backpropagation) ή άλλους πιο αποτελεσματικούς αλγορίθμους [Nikolos, 2011]. Για την εκπαίδευση του δικτύου, απαιτείται ένα σύνολο διανυσμάτων εισόδου και των σχετικών διανυσμάτων εξόδου (δεδομένα εκπαίδευσης – δείγματα μάθησης). Αυτά «παρουσιάζονται» στο δίκτυο σε διαδοχικές εποχές και σε τυχαιοποιημένη σειρά από εποχή σε εποχή. Στην περίπτωσή μας τα δεδομένα εκπαίδευσης αποτελούνται από διανύσματα χρωμοσώματος για το επίπεδο εισόδου και την αντίστοιχη τιμή της

αντικειμενικής συνάρτησης για τον μοναδικό κόμβο του επιπέδου εξόδου. Τα δείγματα δοκιμής (εκτός από αυτά της μάθησης) χρησιμοποιούνται για να ελέγξουν την εγκυρότητα της προσέγγισης και τη δυνατότητα γενίκευσης του δικτύου [Nikolos, 2011].

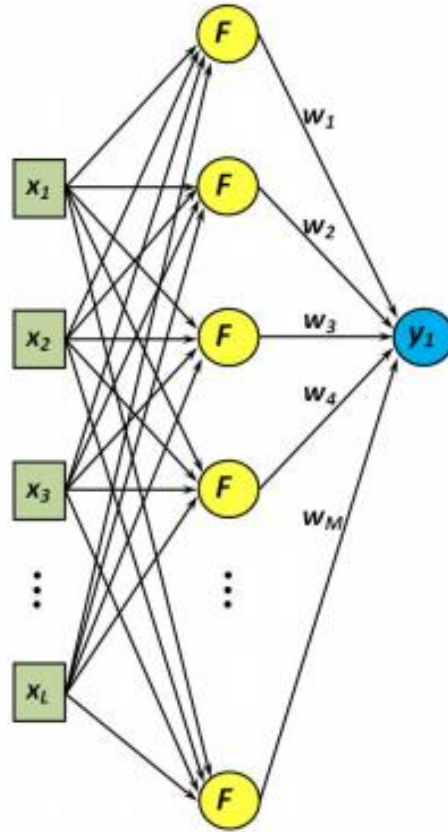
Ο αριθμός των κρυφών επιπέδων και ο αριθμός των κόμβων σε κάθε κρυφό επίπεδο μπορούν να προσδιοριστούν από τον χρήστη, ανάλογα με τον αριθμό των κόμβων στο επίπεδο εισόδου και τον τύπο της συνάρτησης που θα προσεγγιστεί. Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιούνται δύο κρυφά επίπεδα. Ένας μεγάλος αριθμός κρυφών κόμβων οδηγεί σε ένα μικρό σφάλμα στο σύνολο εκπαίδευσης αλλά όχι απαραίτητα σε ένα μικρό σφάλμα στο σύνολο δοκιμής. Ένας μεγάλος αριθμός κρυφών κόμβων έχει ως αποτέλεσμα την υπερβολική προσαρμογή του "θορύβου" της συνάρτησης αντί της παραγωγής μιας ομαλής προσέγγισης της συνάρτησης. Το σφάλμα μάθησης αυξάνεται όσο αυξάνεται το μέγεθος του συνόλου μάθησης, ενώ το σφάλμα δοκιμής μειώνεται όσο αυξάνεται το μέγεθος του συνόλου μάθησης. Τα δύο σφάλματα συγκλίνουν στην ίδια τιμή για μεγάλο αριθμό δειγμάτων μάθησης. Αυτή η τιμή εξαρτάται από τον αριθμό των κρυφών μονάδων και τον τύπο της συνάρτησης ενεργοποίησης που χρησιμοποιείται [Nikolos, 2011].

2.4 RADIAL BASIS FUNCTION NETWORK (RBFN)

Οι συναρτήσεις ακτινικής βάσης (RBFs) έχουν αναπτυχθεί για την παρεμβολή διάσπαρτων πολυπαραγοντικών δεδομένων [Acar et al., 2009]. Χρησιμοποιούν ένα σταθμισμένο άθροισμα απλών ακτινικά συμμετρικών συναρτήσεων βάσης, με βάση την Ευκλείδεια απόσταση ή άλλες μετρήσεις, προκειμένου να μιμηθούν περίπλοκες συναρτήσεις. Ένα δίκτυο RBF μπορεί να θεωρηθεί ως ένα τριών επιπέδων, πλήρως συνδεδεμένο τεχνητό νευρωνικό δίκτυο (ANN), εκτελώντας μία μη γραμμική χαρτογράφηση από τον χώρο εισόδου στον κρυφό χώρο, ακολουθούμενη από μια γραμμική χαρτογράφηση από τον κρυφό χώρο στον χώρο εξόδου. Σε ένα τέτοιο δίκτυο υπάρχει ένα απροσδιόριστο βάρος w_i ανά συνάρτηση βάσης, εάν χρησιμοποιούνται συναρτήσεις σταθερής βάσης (όπως γραμμική ή κυβική). Αυτά τα βάρη παρέχουν την ευελιξία στο μοντέλο για προσαρμογή σε διαφορετικές συναρτήσεις απόκρισης. Η χρήση μη σταθερών, παραμετρικών συναρτήσεων βάσης (όπως Gaussian, multi-quadric ή αντίστροφων multi-quadric) βελτιώνουν τις ιδιότητες γενίκευσης του RBFN, αν και η πρόσθετη επεξεργασία εκτίμησης των παραμέτρων αυξάνει την πολυπλοκότητα και το υπολογιστικό κόστος της διαδικασίας. Για μια Gaussian συνάρτηση βάσης, εκτός από τον προσδιορισμό των βαρών, η τυπική απόκλιση (σ) πρέπει επίσης να προσδιορίζεται (συνήθως λαμβάνεται ως ίδια για όλες τις συναρτήσεις βάσης). Η Gaussian RBF μειώνεται μονοτονικά με την απόσταση από το κέντρο της, με αποτέλεσμα μια σημαντική απόκριση στη γειτονιά του κέντρου της [Queiro et al., 2005]. Τα σταθερής βάσης RBFs είναι κατάλληλα για υψηλών διαστάσεων αλλά σχετικά απλών τοπίων, αλλά τα παραμετρικά RBFs μπορούν να χρησιμοποιηθούν για προβλήματα χαμηλής διάστασης, λόγω του υψηλού κόστους εκπαίδευσης [Forrester et al., 2007].

Το RBFN είναι ένα από τα πιο συχνά χρησιμοποιούμενα μοντέλα προσέγγισης, το οποίο έχει χρησιμοποιηθεί επιτυχώς για προσεγγίσεις συναρτήσεων, προβλέψεις και ελέγχους χρονοσειρών [Kattan and Galvan, 2012]. Μπορεί να θεωρηθεί ως μια παραλλαγή ενός ANN, όπου χρησιμοποιείται η συνάρτηση ακτινικής βάσης ως συνάρτηση ενεργοποίησης. Το RBFN είναι εννοιολογικά απλό και μπορεί να εκτελέσει παρεμβολή και προεκβολή από τα γνωστά σημεία δεδομένων [Kattan and Galvan, 2012].

Γενικά, ένα δίκτυο RBF (Σχήμα 2.5) είναι ένα τριών επιπέδων, πλήρως συνδεδεμένο εμπρόσθιας διάδοσης (feed-forward) τεχνητό νευρωνικό δίκτυο (ΤΝΔ), το οποίο εκτελεί μία μη γραμμική χαρτογράφηση από τον χώρο εισόδου στον κρυφό χώρο ($\mathbb{R}^L \rightarrow \mathbb{R}^M$), ακολουθούμενη από μια γραμμική χαρτογράφηση ($\mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^L$) από τον κρυφό χώρο στον χώρο εξόδου (όπου L είναι ο αριθμός των κόμβων εισόδου, M είναι ο αριθμός των κρυφών κόμβων, ενώ το επίπεδο εξόδου έχει έναν μόνο κόμβο) [Nikolos, 2011].



Σχήμα 2.5: Ένα RBF τεχνητό νευρωνικό δίκτυο [Nikolos, 2011].

Δίνεται η αντίστοιχη έξοδος $yy(xx)$, για ένα διάνυσμα εισόδου $xx = [xx_1, xx_2, \dots, xx_L]$

$$yy(xx) = \sum_{i=1}^M w_i \cdot \varphi_i(xx) \quad (2.3)$$

όπου $\varphi_i(xx)$ είναι η έξοδος του i -οστού κρυφού κόμβου

$$\varphi_i(xx) = F(\|xx - cc_i\|), i = 1, \dots, M \quad (2.4)$$

Οι συνδέσεις (βάρη) με τον κόμβο εξόδου ($w_i, i = 1, \dots, M$) είναι οι μόνες ρυθμιζόμενες παράμετροι. Τα κέντρα RBF στους κρυφούς κόμβους $cc_i, i = 1, \dots, M$ επιλέγονται με τρόπο που μεγιστοποιεί τις ιδιότητες γενίκευσης του δικτύου. Η συνάρτηση μη γραμμικής ενεργοποίησης F στην περίπτωση μας επιλέγεται να είναι η Gaussian συνάρτηση ακτινικής βάσης

$$F(u, \sigma) = \exp(-u^2/\sigma^2) \quad (2.5)$$

όπου σ είναι η τυπική απόκλιση της συνάρτησης βάσης.

Η επιλογή των RBFN κέντρων παίζει σημαντικό ρόλο για τις δυνατότητες πρόβλεψης και τη γενίκευση του δικτύου. Υπάρχουν πολλές στρατηγικές που μπορούν να υιοθετηθούν σχετικά με την επιλογή των κέντρων συναρτήσεων ακτινικής βάσης στο κρυφό επίπεδο. Ο Haykin [1999] αναφέρεται στις εξής:

α) Τυχαία επιλογή σταθερών κέντρων, η οποία είναι η απλούστερη προσέγγιση και η επιλογή κέντρων από το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης είναι μια λογική επιλογή, δεδομένου ότι το τελευταίο είναι επαρκώς αντιπροσωπευτικό για το πρόβλημα που αντιμετωπίζεται.

β) Αυτο-οργανωμένη επιλογή κέντρων, όπου εκτιμάται η κατάλληλη τοποθεσία για τα κέντρα με τη χρήση ενός αλγορίθμου ομαδοποίησης, του οποίου η ανάθεση είναι να χωρίσει το σύνολο εκπαίδευσης σε ομοιογενή υποσύνολα.

γ) Εποπτευόμενη επιλογή κέντρων, η οποία είναι η πιο γενικευμένη μορφή RBF, καθώς η τοποθεσία των κέντρων υποβάλλεται σε εποπτευόμενη διαδικασία εκπαίδευσης, μαζί με τις υπόλοιπες ελεύθερες παραμέτρους του δικτύου.

Η τυπική διαδικασία είναι η επιλογή των διανυσμάτων εισόδου στο σύνολο εκπαίδευσης ως κέντρα RBF [Nikolos, 2011]. Σε αυτήν την περίπτωση το αποτέλεσμα είναι $M = NR$, όπου NR είναι ο αριθμός των δεδομένων εκπαίδευσης. Για μεγάλα σύνολα εκπαίδευσης (με αποτέλεσμα μεγάλες τιμές M), αυτή η επιλογή αναμένεται να αυξήσει τις απαιτήσεις αποθήκευσης και το κόστος της CPU. Επιπλέον, η επιλογή $M = NR$ μπορεί να οδηγήσει σε υπερβολική προσαρμογή ή/και κακή γενίκευση του δικτύου, ειδικά όταν υπάρχει θόρυβος στα δεδομένα εκπαίδευσης. Η προτεινόμενη λύση είναι η επιλογή του $M < NR$ και κατά συνέπεια η αναζήτηση για υπο-βέλτιστες λύσεις, οι οποίες θα παρέχουν μια καλύτερη δυνατότητα γενίκευσης στο δίκτυο [Nikolos, 2011].

Όσον αφορά στην εκπαίδευση, υπάρχουν δύο διαφορετικές προσεγγίσεις, η άμεση και επαναληπτική εκπαίδευση. Η διαδικασία της άμεσης εκπαίδευσης που χρησιμοποιείται σε αυτήν την εργασία, βασίζεται σε μια μήτρα διαμόρφωσης των κυβερνητικών εξισώσεων του δικτύου RBF [Nikolos, 2011]. Η παρουσίαση του δικτύου με τα NR μοτίβα εισόδου επιτρέπει τη διαμόρφωση ενός $(NR \times M)$ πίνακα H , που παίρνει τη μορφή τετραγώνου στην ειδική περίπτωση όταν $NR = M$. Κάθε γραμμή στον πίνακα παρεμβολής H αντιστοιχεί σε ένα παράδειγμα εκπαίδευσης και κάθε στήλη σε ένα κέντρο RBF. Οι τιμές της μονάδας εξόδου έχουν τη μορφή του προϊόντος πίνακα:

$$H(NR \times M)w(M \times 1) = yy(NR \times 1) \quad (2.6)$$

όπου yy είναι το επιθυμητό διάνυσμα εξόδου όπως παρέχεται από το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης, και w είναι το συνοπτικό διάνυσμα βαρών, το οποίο αποτελείται από M άγνωστα που πρέπει να υπολογιστούν. Ένας πιθανός τρόπος για την αντιστροφή του H είναι μέσω της τεχνικής Gram-Schmidt. Το H αποσυντίθεται πρώτα ως

$$H = QR \quad (2.7)$$

με Q και R να είναι $(NR \times M)$ και $(M \times M)$ πίνακες αντίστοιχα, όπου το R είναι άνω τριγωνικό και

$$Q^T Q = \text{diag}(1, 1, \dots, 1) \quad (2.8)$$

Μετά τον υπολογισμό των πινάκων Q και R , το διάνυσμα βαρών μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας πίσω-υποκατάσταση «back-substitution» στο

$$R(M \times M)w(M \times 1) = Q^T(M \times NR)yy(NR \times 1) \quad (2.9)$$

Υπάρχουν πολλοί λόγοι για τους οποίους κάποιος πρέπει να επιλέξει ένα δίκτυο RBF ως το προσεγγιστικό μοντέλο [Nikolos, 2011]. Ο Haykin [1999] προσφέρει συγκριτικά σχόλια για τα RBF και MLP δίκτυα. Ωστόσο, ο κύριος λόγος για την επιλογή των RBFNs είναι η συμβατότητά τους με την τοπική στρατηγική προσέγγισης. Η χρήση σχετικά μικρού αριθμού μοτίβων εκπαίδευσης, δηλαδή μικρών δικτύων, βοηθά στη δημιουργία τοπικών RBF δικτύων. Αυτό με τη σειρά του επιτρέπει την αντιστροφή του πίνακα H χρησιμοποιώντας σχεδόν αμελητέο υπολογιστικό χρόνο και τη διατήρηση πολύ μικρού σφάλματος προσέγγισης. Πρέπει να έχουμε κατά νου ότι το υπολογιστικό κόστος που σχετίζεται με τη χρήση νευρωνικών δικτύων είναι το κόστος εκπαίδευσης των δικτύων, ενώ η χρήση ενός εκπαιδευμένου δικτύου για την αξιολόγηση ενός νέου ατόμου προσθέτει αμελητέο υπολογιστικό κόστος [Nikolos, 2011].

ΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗ ΤΕΧΝΙΚΩΝ ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΠΙΤΑΧΥΝΣΗ ΕΝΟΣ SAEA

Σε αυτό το κεφάλαιο θα αναφερθούμε σε τεχνικές για την επιτάχυνση ενός με Υποκατάστατα μοντέλα-Υποβοηθούμενου Εξελικτικού Αλγορίθμου (Surrogate-Assisted Evolutionary Algorithm – SAEA) που βρέθηκαν μέσω βιβλιογραφικής έρευνας. Για να πετύχουμε τον στόχο μας, δηλαδή την επιτάχυνση ενός SAEA, απαραίτητη είναι η δημιουργία ενός καλού υποκατάστατου μοντέλου, καθώς επίσης και η σωστή αναζήτηση στον χώρο των λύσεων για την εύρεση της βέλτιστης λύσης. Να σημειωθεί εδώ ότι η επιτάχυνση ενός SAEA, δεν σημαίνει μόνο την ταχύτερη ταχύτητα σύγκλισης αλλά και την καλύτερη προσέγγιση της βέλτιστης λύσης. Δηλαδή εάν ένας αλγόριθμος συγκλίνει γρήγορα αλλά δεν προσεγγίζει τη βέλτιστη λύση σε σχέση με έναν άλλον αλγόριθμο, ο οποίος συγκλίνει πιο αργά αλλά προσεγγίζει καλύτερα τη βέλτιστη λύση, τότε δεν μπορούμε να πούμε ότι στον πρώτο έχει επιτευχθεί επιτάχυνση. Για τον λόγο αυτό στοχεύουμε ταυτόχρονα στην αποδοτικότητα (αύξηση της ταχύτητας σύγκλισης) και στην αποτελεσματικότητα (εύρεση της βέλτιστης λύσης) του αλγορίθμου.

Για την δημιουργία ενός καλού υποκατάστατου μοντέλου, σημαντικό ρόλο παίζουν τα δεδομένα εκπαίδευσης που χρησιμοποιούνται για την εκπαίδευση/κατασκευή του, καθώς επίσης και η προεπισκόπηση των δεδομένων εισαγωγής στη βάση δεδομένων (database – DB). Πολλοί αλγόριθμοι κάνουν αναζήτηση στον χώρο με ένα υποκατάστατο μοντέλο (τοπικό ή σφαιρικό) και άλλοι διαχωρίζουν την αναζήτηση στον χώρο σχεδίασης σε σφαιρική αναζήτηση κάνοντας χρήση συνήθως ενός σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου και στη συνέχεια σε τοπική αναζήτηση, στην οποία χρησιμοποιείται ένα τοπικό υποκατάστατο μοντέλο. Παρατηρήθηκε επίσης ότι κάποιοι αλγόριθμοι χρησιμοποιούν διάφορες στρατηγικές μετάλλαξης για την εναλλαγή της φάσης αναζήτησης ή για την καλύτερη αναζήτηση στον χώρο των λύσεων, ανάλογα τη φάση αναζήτησης. Μία προεπισκόπηση για την χρήση της κατάλληλης αξιολόγησης μπορεί να επιταχύνει σημαντικά έναν SAEA, όπως θα φανεί στη συνέχεια.

Αρχικά θα γίνει μια αναφορά στις μεθοδολογίες για τον τρόπο επιλογής δεδομένων εκπαίδευσης και σε διάφορες τεχνικές διαχείρισης υποκατάστατων μοντέλων, οι οποίες αποτελούν τη βάση-πλαίσιο για πολλούς SAEA. Θα γίνει επίσης αναφορά της λειτουργίας διαφόρων αλγορίθμων, οι οποίοι θα παρουσιαστούν στην κατάλληλη παράγραφο, ανάλογα με την αναζήτηση που πραγματοποιούν στον χώρο των λύσεων.

3.1 ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗΣ

Το πιο σημαντικό κριτήριο για την επιτυχία ενός υποκατάστατου μοντέλου είναι η σωστή επιλογή των δεδομένων εκπαίδευσης του. Τα υποκατάστατα μοντέλα εκπαιδεύονται με τα δεδομένα εκπαίδευσης που εισάγονται σε αυτά, ενώ με βάση τις τιμές προσαρμογής αυτών των δεδομένων γίνεται και η εκτίμηση της προσαρμογής των απογόνων από το υποκατάστατο μοντέλο. Για την σωστή εκτίμηση της τιμής προσαρμογής ενός απογόνου, συνίσταται η εκπαίδευση του υποκατάστατου μοντέλου με σημεία κοντινά στον απόγονο. Για τον λόγο αυτόν όταν γνωρίζουμε ότι ο αλγόριθμος βρίσκεται σε μια υποσχόμενη περιοχή και θέλουμε να κάνουμε εκμετάλλευση αυτής της περιοχής (εύρεση τοπικού ή πιθανώς ολικού βέλτιστου), τότε τα δεδομένα εκπαίδευσης για την εκπαίδευση του υποκατάστατου μοντέλου συνηθίζονται να ορίζονται με μεθοδολογίες όπως οι Newest, Best και Nearest Neighbors (βλέπε παρακάτω), όπου αναμένονται αυτά τα δεδομένα εκπαίδευσης να βρίσκονται στην ίδια υποσχόμενη υπό-περιοχή. Στην άλλη περίπτωση όπου ο απόγονος δεν αναμένεται να βρίσκεται στην ίδια υπο-περιοχή με τον αλγόριθμο ή θέλουμε να κάνουμε εξερεύνηση του χώρου αναζήτησης, τότε το υποκατάστατο μοντέλο θα πρέπει να είναι ικανό να εκτιμήσει ένα ευρύ φάσμα του χώρου σχεδίασης, οπότε τα σημεία των δεδομένων εκπαίδευσης θα πρέπει να καλύπτουν έναν τέτοιο χώρο. Αυτό που συνηθίζεται σε τέτοιες περιπτώσεις, όπου δηλαδή γίνεται μια σφαιρική αναζήτηση στον χώρο, είναι η

χρήση όλων των σημείων της βάσης δεδομένων (DataBase – DB) ως δεδομένα εκπαίδευσης για την κατασκευή/εκπαίδευση του υποκατάστατου μοντέλου. Παρακάτω συνοψίζονται όλες οι μεθοδολογίες που βρήκαμε από την βιβλιογραφική έρευνα που πραγματοποιήθηκε για τον τρόπο επιλογής των δεδομένων εκπαίδευσης ενός υποκατάστατου μοντέλου.

- All DB** Αυτή η μεθοδολογία χρησιμοποιεί όλα τα σημεία της βάσης δεδομένων ως δεδομένα εκπαίδευσης και χρησιμοποιείται συνήθως για την κατασκευή/εκπαίδευση ενός σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου. Γίνεται καλή απεικόνιση του χώρου σχεδίασης, με αποτέλεσμα την καλή εξερεύνηση του.
- Newest** Τα νεότερα αξιολογημένα σημεία, που έχουν εισαχθεί στη βάση δεδομένων, χρησιμοποιούνται ως δεδομένα εκπαίδευσης. Η βασική ιδέα είναι ότι το υποκατάστατο μοντέλο ακολουθεί την εξελικτική αναζήτηση. Χρήση της συγκεκριμένης ιδέας έχει γίνει και στους δύο τύπους υποκατάστατων μοντέλων [GPEME, TASEA].
- Best** Τα καλύτερα σημεία με βάση την τιμή της φυσικής κατάστασής τους, επιλέγονται από τη βάση δεδομένων για την εκπαίδευση του υποκατάστατου μοντέλου. Είναι ένας ελιτιστικός τρόπος επιλογής δεδομένων εκπαίδευσης και χρησιμοποιείται τόσο για σφαιρικά μοντέλα [Z.ZHOU], όσο και για τοπικά μοντέλα [SA-QUATRE, GLSADE, EHSDE].
- Top %** Ακολουθεί την ίδια λογική με την Best μεθοδολογία, με την μόνη διαφορά ότι το μέγεθος των δεδομένων εκπαίδευσης δεν παραμένει σταθερό αλλά αυξάνεται όσο αυξάνεται και το μέγεθος της βάσης δεδομένων.
- Nearest Neighbors** Είναι η πιο σύνηθες μεθοδολογία για την εκπαίδευση ενός τοπικού υποκατάστατου μοντέλου. Χρησιμοποιεί τα κοντινότερα σημεία της βάσης δεδομένων ως προς το εξεταζόμενο άτομο ως δεδομένα εκπαίδευσης, με αποτέλεσμα την καλύτερη εκτίμηση των ατόμων που γνωρίζουμε ότι ανήκουν σε μια υπο-περιοχή.

Δύο νέες μέθοδοι που ακολουθούν την **Nearest Neighbors** μεθοδολογία παρουσιάζονται παρακάτω: η **Μέθοδος Υποσχόμενης Περιοχής (PAS)** και η **Μέθοδος Ατομικής Λύσης (ISS)** [Liu et al., February 2014]. Η PAS κάνει εύρεση του ενδιάμεσου ατόμου του πληθυσμού και στη συνέχεια επιλέγει τα κοντινότερα σημεία ως προς αυτό το άτομο για την εκπαίδευση του υποκατάστατου μοντέλου. Η ISS δημιουργεί ένα ενιαίο υποκατάστατο μοντέλο για την αξιολόγηση όλων των απογόνων, σε αντίθεση με την Nearest Neighbors, η οποία δημιουργεί ένα υποκατάστατο μοντέλο για κάθε απόγονο.

PAS Σύμφωνα με τους [Liu et al., February 2014], τόσο οι απόγονοι όσο και τα σημεία δεδομένων εκπαίδευσης βρίσκονται γύρω από την τρέχουσα υποσχόμενη περιοχή. Έτσι, επιλέγεται ένα σύνολο σημείων εκπαίδευσης σε αναλογία με τον αριθμό των μεταβλητών σχεδίασης (d) για να μοντελοποιηθεί η γενική τάση της υποσχόμενης περιοχής.

1. Υπολογισμός του ενδιάμεσου των απογόνων για την απόκτηση του διάνυσματος mx .
2. Εύρεση των κοντινότερων $c1 \times d$ λύσεων στο mx διάνυσμα από τη βάση δεδομένων (με βάση την Ευκλείδεια απόσταση).

Ο συντελεστής $c1$ επιλέγεται συχνά από το διάστημα [4, 6] [Liu et al., February 2014]. Επειδή τα πλησιέστερα γειτονικά σημεία είναι πιο χρήσιμα από τα σημεία μακριά από την υποσχόμενη περιοχή [Zhou et al., 2007] [Emmerich et al., 2006], τα σημεία δεδομένων εκπαίδευσης ταξινομούνται με βάση την απόσταση τους από το διάνυσμα mx .

ISS Αυτή η μέθοδος δίνει έμφαση στη μοντελοποίηση της περιοχής που περιβάλλει κάθε απόγονο και επίσης δημιουργεί ένα ενιαίο υποκατάστατο μοντέλο για ολόκληρο τον πληθυσμό, ώστε να βελτιωθεί η ποιότητα του υποκατάστατου μοντέλου, αντί να δημιουργήσει ένα ξεχωριστό μοντέλο για κάθε απόγονο.

1. Για κάθε υποψήφια λύση στους πληθυσμούς απογόνων, εύρεση των κοντινότερων $c2 \times d$ λύσεων της βάσης δεδομένων (με βάση την Ευκλείδεια απόσταση) ως δεδομένα εκπαίδευσης.
2. Συνδυασμός όλων των δεδομένων εκπαίδευσης και απόρριψη των διπλότυπων.

Για την ισοστάθμιση της ποιότητας του μοντέλου και του κόστους εκπαίδευσης, τα εμπειρικά αποτελέσματα προτείνουν το $c2 \in [0,5, 1]$ [Liu et al., February 2014].

3.2 ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ ΥΠΟΚΑΤΑΣΤΑΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

Η διαχείριση μοντέλων διερευνά βέλτιστους τρόπους για να συνεργαστεί η υποκατάστατη μοντελοποίηση και η εξελικτική αναζήτηση, ώστε να λειτουργούν αρμονικά. Για έναν επιτυχημένο SAEA, πρέπει να επιτευχθεί μια καλή ισορροπία μεταξύ της αποτελεσματικότητας και της αποδοτικότητας της βελτιστοποίησης, οι οποίες συχνά είναι αντιφατικές. Για να αποκτηθεί καλή ικανότητα βελτιστοποίησης απαιτείται ένα υψηλής ποιότητας υποκατάστατο μοντέλο, αλλά αυτό συνεπάγεται συχνά περισσότερα σημεία δεδομένων εκπαίδευσης, τα οποία μπορούν να ληφθούν μόνο με τη χρήση ακριβών αξιολογήσεων. Προς το παρόν, αρκετές επιτυχημένες μέθοδοι διαχείρισης μοντέλων λαμβάνουν μεγάλη προσοχή και πολλοί SAEAs κατασκευάζονται βάσει αυτών, όπως τις SMAS, GSAPM και LSASM.

3.2.1 Surrogate Model-Aware Evolutionary Search (SMAS)

Μία μέθοδος τεχνικής διαχείρισης υποκατάστατων μοντέλων είναι το πλαίσιο SMAS, που παρουσιάζεται από τους [Liu et al., July 2014]. Το SMAS εστιάζει πάντα την αναζήτηση στην τρέχουσα υποσχόμενη υποπεριοχή και μετακινεί σταδιακά αυτήν την υποπεριοχή για εξερεύνηση. Επειδή τα σημεία εκπαίδευσης και οι υποψήφιοι που πρόκειται να εκτιμηθούν συχνά διανέμονται στην ίδια μικρή υπό-περιοχή παρά σε ολόκληρο τον χώρο σχεδίασης όπως ένας τυπικός EA, ένα υψηλής ποιότητας υποκατάστατο μοντέλο μπορεί συχνά να κατασκευαστεί με πολύ λιγότερα σημεία δεδομένων εκπαίδευσης (ακριβείς αξιολογήσεις). Το πλαίσιο SMAS μπορεί να περιγραφεί ως εξής:

- Βήμα 1.* Αρχικοποίηση του δειγματικού χώρου με δειγματικά σημεία και ακριβή αξιολόγηση αυτών. Αποθήκευση των σημείων αυτών καθώς και της τιμής προσαρμογής (φυσικής κατάστασης) τους στη βάση δεδομένων.
- Βήμα 2.* Εάν ικανοποιείται το κριτήριο διακοπής, έξοδος της καλύτερης λύσης από τη βάση δεδομένων. Ειδάλλως μετάβαση στο βήμα 3.
- Βήμα 3.* Επιλογή των λ καλύτερων λύσεων από τη βάση δεδομένων για τον ορισμό του πληθυσμού P .
- Βήμα 4.* Εφαρμογή των εξελικτικών τελεστών στον P για την αναπαραγωγή λ απογόνων.
- Βήμα 5.* Επιλογή τ δεδομένων εκπαίδευσης για τη δημιουργία του υποκατάστατου μοντέλου. Χρήση του υποκατάστατου μοντέλου για την προαξιολόγηση των λ απογόνων του Βήματος 4.
- Βήμα 6.* Εύρεση του καλύτερου απογόνου από το Βήμα 5 και εφαρμογή ακριβής αξιολόγησης σε αυτό. Αποθήκευση αυτού του σημείου και της τιμής προσαρμογής του στη βάση δεδομένων. Μετάβαση στο Βήμα 2.

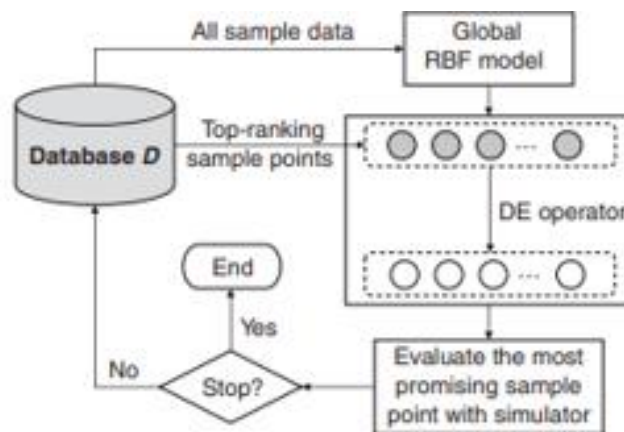
Σε κάθε επανάληψη οι λ τρέχουσες καλύτερες υποψήφιες λύσεις αποτελούν τον γονικό πληθυσμό (είναι λογικό να υποθέσουμε ότι η αναζήτηση επικεντρώνεται στην υποσχόμενη υπό-περιοχή) και ότι ο καλύτερος υποψήφιος που βασίζεται στην τιμή προ-αξιολόγησης στον πληθυσμό απογόνων επιλέγεται για να αντικαταστήσει το χειρότερο άτομο στον γονικό πληθυσμό. Με αυτόν τον τρόπο μόνο ένας υποψήφιος αλλάζει στον γονικό πληθυσμό σε κάθε επανάληψη. Έτσι ο καλύτερος υποψήφιος στους απογόνους σε πολλές διαδοχικές επαναλήψεις μπορεί να είναι πολύ κοντά ο ένας με τον άλλον (στη συνέχεια θα αξιολογηθούν και θα χρησιμοποιηθούν ως σημεία εκπαίδευσης). Επομένως, τα σημεία εκπαίδευσης που περιγράφουν την τρέχουσα υποσχόμενη περιοχή μπορεί να είναι πολύ

πυκνότερα σε σύγκριση με εκείνα που δημιουργούνται από έναν τυπικό μηχανισμό ΕΑ ενημέρωσης πληθυσμού, ο οποίος μπορεί να εξαπλωθεί σε διαφορετικές υπό-περιοχές του χώρου σχεδίασης, ενώ ενδέχεται να μην υπάρχουν επαρκή σημεία δεδομένων εκπαίδευσης γύρω από τις υποψήφιες λύσεις για να ελεγχθεί.

Οι **PAGHO** [Liu et al., 2018], **PSAED** [Akinsolu et al., 2019] και **ASDEMO** [Akinsolu et al., 2020] είναι τρεις αλγόριθμοι που ακολουθούν το πλαίσιο SMAS, όμως χρησιμοποιούν και μία μέθοδο επιλογής στρατηγικής μετάλλαξης για καλύτερη αναζήτηση στον χώρο σχεδίασης, η οποία θα αναλυθεί σε επόμενη ενότητα.

3.2.2 Global Surrogate-Assisted Prescreen Method (GSAPM)

Το GSAPM [Chen et al., 2020] είναι ένα βασικό πλαίσιο διαχείρισης υποκατάστατων μοντέλων. Στο Σχήμα 3.1 παρουσιάζεται το διάγραμμα ροής του GSAPM. Οι συμπαγείς κύκλοι αντιπροσωπεύουν τα δειγματικά σημεία που έχουν αξιολογηθεί επ'ακριβώς, ενώ οι κενοί κύκλοι αντιπροσωπεύουν τα δειγματικά σημεία που αξιολογούνται από το υποκατάστατο μοντέλο. Πολλοί SAEAs έχουν βασιστεί σε αυτό το πλαίσιο, όπως ο **GLSADE** [Chen et al., 2020] και ο **EHSDE** [Chen et al., 2021].



Σχήμα 3.1 – Διάγραμμα ροής του GSAPM [Chen et al., 2020].

Αλγόριθμος 3.1 – Ψευδοκώδικας του GSAPM

Initialization: Παραγωγή τ δειγματικών σημείων χρησιμοποιώντας την LHS (Latin Hypercube Sampling) μέθοδο από τον χώρο σχεδίασης, ακριβή αξιολόγηση αυτών των σημείων και αρχειοθέτηση αυτών στη βάση δεδομένων.

While το κριτήριο διακοπής δεν ικανοποιείται:

Επιλογή των NP καλύτερων δειγματικών σημείων x_1, x_2, \dots, x_{NP} από τη DB .

Χρήση των εξελικτικών τελεστών για την αναπαραγωγή NP νέων απογόνων u_1, u_2, \dots, u_{NP} .

Κατασκευή σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου \hat{f}_g με τη μέθοδο all-DB.

Προεπισκόπηση του καλύτερου ατόμου u_{best} από τους λ νέους απογόνους u_1, u_2, \dots, u_{NP} με το \hat{f}_g .

Ακριβή αξιολόγηση του u_{best} .

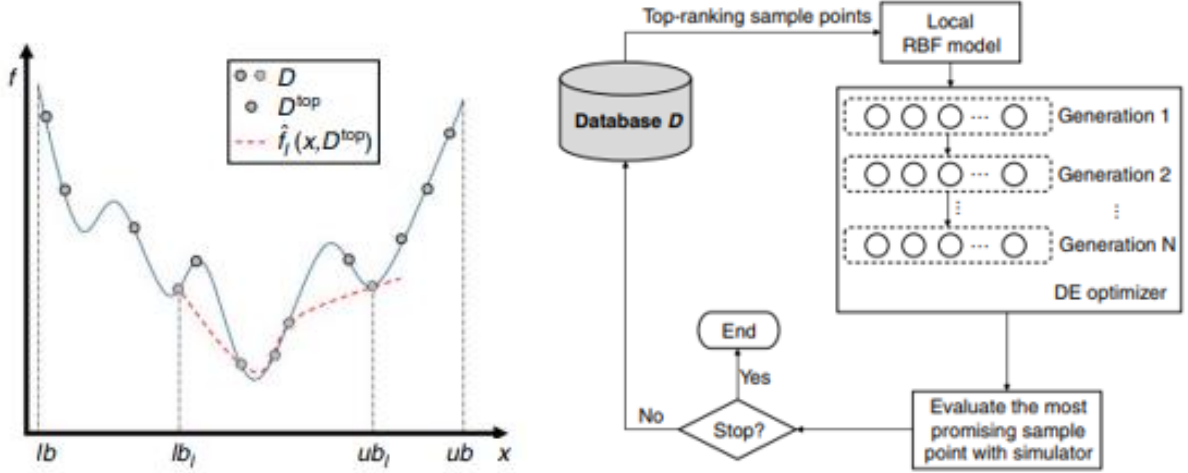
End While

Output

Εφόσον έχει αρχικοποιηθεί ο δειγματικός χώρος με (τ) δειγματικά σημεία, ο αλγόριθμος διαλέγει τα NP καλύτερα σημεία για τον καθορισμό του πληθυσμού. Στη συνέχεια στα άτομα του πληθυσμού χρησιμοποιούνται οι τελεστές μετάλλαξης και επιχιασμού για την αναπαραγωγή NP απογόνων. Το υποκατάστατο μοντέλο δημιουργείται κάνοντας χρήση όλων των σημείων της βάσης δεδομένων και έπειτα αξιολογεί τους απογόνους που δημιουργήθηκαν. Ο καλύτερος απόγονος με βάση την αξιολόγηση του υποκατάστατου επιλέγεται για ακριβή αξιολόγηση και στη συνέχεια αποθηκεύεται στη βάση δεδομένων. Ο αλγόριθμος ακολουθεί ξανά την προαναφερόμενη διαδικασία μέχρις ότου ικανοποιηθεί το κριτήριο διακοπής.

3.2.3 Local Surrogate-Assisted Search Method (LSASM)

Το LSASM πλαίσιο στοχεύει στην επιτάχυνση της ταχύτητας σύγκλισης, εντοπίζοντας το βέλτιστο μιας μικρής υποσχόμενης περιοχής με ένα τοπικό υποκατάστατο μοντέλο [Chen et al., 2020]. Το τοπικό υποκατάστατο μοντέλο αντιπροσωπεύει την τοπική προσεγγιστική συνάρτηση για το πραγματικό τοπίο φυσικής κατάστασης του στόχου στη μικρή υποσχόμενη περιοχή. Μια εικόνα του τοπικού υποκατάστατου μοντέλου παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.2(α). Σε αυτή τη μέθοδο, το τοπικό υποκατάστατο μοντέλο είναι κατασκευασμένο με προκαθορισμένα υποσχόμενα δειγματικά σημεία για να βελτιώσει περαιτέρω την υποσχόμενη περιοχή. Τα κύρια βήματα του LSASM εμφανίζονται στον Αλγόριθμο 3.2.



Σχήμα 3.2 – Αριστερά: (α) Απεικόνιση του LSASM, Δεξιά: (β) Διάγραμμα ροής του LSASM [Chen et al., 2020].

Αλγόριθμος 3.2 – Ψευδοκώδικας του LSASM

Initialization: Παραγωγή τ δειγματικών σημείων, χρησιμοποιώντας την LHS μέθοδο από τον χώρο λύσεων, ακριβή αξιολόγηση αυτών των σημείων και αρχειοθέτηση αυτών στη βάση δεδομένων DB.

While το κριτήριο διακοπής δεν ικανοποιείται:

Επιλογή των τ καλύτερων δειγματικών σημείων x_1, x_2, \dots, x_τ από τη DB.

Κατασκευή του τοπικού υποκατάστατου μοντέλου \hat{f}_l με τα τ επιλεγμένα σημεία (μέθοδος τ -Best) και εύρεση του τοπικού καλά-ελεγχόμενου εύρους $[lb_l, ub_l]$.

Εύρεση του βέλτιστου του \hat{f}_l με την διαφορική εξέλιξη στην τοπική υποσχόμενη καλά-ελεγχόμενη περιοχή.

Ακριβής αξιολόγηση του βέλτιστου.

End While

Output

Εφόσον έχει αρχικοποιηθεί ο δειγματικός χώρος με τ δειγματικά σημεία, ο αλγόριθμος διαλέγει τα τ^* καλύτερα σημεία $D^{top} = \{x_1, x_2, \dots, x_\tau\}$ από τη βάση δεδομένων για τον καθορισμό ενός τοπικού πληθυσμού σε ένα τοπικό εύρος ελέγχου. Δημιουργείται ένα τοπικό υποκατάστατο μοντέλο \hat{f}_l με τα σημεία αυτά και γίνεται εύρεση του τοπικού εύρους ελέγχου $[lb_l, ub_l]$, δηλαδή τα μέγιστα άνω και κάτω όρια τιμής που μπορεί να πάρει ο πληθυσμός. Μια τοπική διαφορική εξέλιξη λαμβάνει μέρος, στην οποία σε κάθε γενιά πραγματοποιούνται οι τελεστές διαφορικής εξέλιξης για την δημιουργία απογόνων και η αξιολόγηση τους γίνεται με βάση το τοπικό υποκατάστατο μοντέλο. Εφόσον ο καλύτερος απόγονος δεν έχει αλλάξει για 10 συνεχόμενες γενιές, η διαφορική εξέλιξη φτάνει εις πέρας και ο συγκεκριμένος απόγονος έπεται σε ακριβή αξιολόγηση και αποθηκεύεται στη βάση δεδομένων. Ο αλγόριθμος ακολουθεί ξανά την προαναφερόμενη διαδικασία, μέχρις ότου ικανοποιηθεί το κριτήριο διακοπής. Τα όρια της υποσχόμενης περιοχής υπολογίζονται ως εξής:

$$\begin{cases} lb_l^i = \min(x_1^i, x_2^i, \dots, x_\tau^i) \\ ub_l^i = \max(x_1^i, x_2^i, \dots, x_\tau^i) \end{cases} \quad 3.1$$

όπου τα lb_i^i και ub_i^i είναι τα κάτω και άνω όρια της i -οστής μεταβλητής για τη μικρή υποσχόμενη περιοχή, και το x_t^i δηλώνει την i -οστή μεταβλητή του t σημείου εκπαίδευσης.

Αξίζει να σημειωθεί ότι, κατά την επαναληπτική δειγματική διαδικασία, η βάση δεδομένων συμπληρώνεται με νέα δειγματικά σημεία και η D^{top} ενημερώνεται με καλύτερα δειγματικά σημεία. Η υποσχόμενη περιοχή μειώνεται συνεχώς έως ότου σταματήσει η διαδικασία βελτιστοποίησης. Το διάγραμμα ροής του LSASM φαίνεται στο Σχήμα 3.2(β). Όλοι οι κενοί κύκλοι αξιολογούνται από το τοπικό υποκατάστατο μοντέλο. Το LSASM πλαίσιο χρησιμοποιείται ως βασικό πλαίσιο για πολλούς αλγόριθμους, όπως τους **GLASDE** και **EHSDE**.

3.3 ΕΝΙΑΙΑ ΑΝΑΖΗΤΗΣΗ

Η ενιαία αναζήτηση αναφέρεται στην χρήση ενός SAEA που κάνει χρήση ενός μόνου υποκατάστατου μοντέλου για την αναζήτηση της βέλτιστης λύσης στον χώρο σχεδίασης. Το υποκατάστατο μοντέλο μπορεί να είναι είτε σφαιρικό, είτε τοπικό υποκατάστατο μοντέλο. Πολλοί είναι οι αλγόριθμοι που χρησιμοποιούν ένα υποκατάστατο μοντέλο και συνήθως ακολουθούν ένα πλαίσιο-βάση από αυτά που έχουμε αναφέρει ως τεχνικές διαχείρισης υποκατάστατων μοντέλων.

Οι **SADEA** [Liu et al., January 2014], **GASPAD** [Liu et al., February 2014] και **GPEME** [Liu et al., April 2014] είναι SAEAs βασισμένοι στο πλαίσιο SMAS και κάνουν χρήση ενός μόνο υποκατάστατου μοντέλου. Χρησιμοποιούν το μοντέλο kriging ή αλλιώς το GP μοντέλο (Gaussian Process) ως υποκατάστατο μοντέλο και τους τελεστές Διαφορικής Εξέλιξης (DE) ως την εξελικτική αναζήτηση. Η GP μοντελοποίηση είναι ευρέως χρησιμοποιούμενη μέθοδος στους SAEAs. Περισσότερες λεπτομέρειες για αυτή τη μοντελοποίηση μπορούν να βρεθούν στις εργασίες [Emmerich et al., 2006; Liu et al., 2012]. Οι τρεις προαναφερόμενοι αλγόριθμοι χρησιμοποιούν παρόμοιο πλαίσιο, το οποίο είναι βασισμένο στο SMAS, με τη διαφορά ότι ο SADEA και ο GPEME παίρνουν ως δεδομένα εκπαίδευσης για το υποκατάστατο μοντέλο τις νεότερες λύσεις (μέθοδος Newest), σε αντίθεση με τον GASPAD που χρησιμοποιεί την μέθοδο PAS. Επιπλέον ο GPEME χρησιμοποιεί μια τεχνική μείωσης διαστάσεων, την Sammon mapping [Sammon, 1969]. Για τον λόγο αυτό, θα αναφερθούμε μόνο στον GPEME από τους τρεις αλγόριθμους.

3.3.1 GPEME Algorithm

Όπως οι περισσότεροι SAEAs, ο GPEME [Liu et al., 2014] καταγράφει όλες τις αξιολογημένες λύσεις και τις τιμές προσαρμογής τους σε μια βάση δεδομένων. Μόλις πραγματοποιηθεί μια ακριβής αξιολόγηση για μια νέα λύση x , αυτή η λύση και η πραγματική τιμή συνάρτησης (τιμή προσαρμογής) y θα προστεθούν στη βάση δεδομένων. Για την προετοιμασία της βάσης δεδομένων, χρησιμοποιείται μια μέθοδος Σχεδιασμού Πειραμάτων (Design of Experiments – DoE), η Latin Hypercube Sampling (LHS) [Stein, 1987] για τη δειγματοληψία ενός συνόλου αρχικών σημείων από τον χώρο αναζήτησης. Η LHS μέθοδος δειγματοληψίας δειγματίζει τον χώρο σχεδίασης πιο ομοιόμορφα και ως εκ τούτου, μπορεί να χρησιμοποιήσει λιγότερα δείγματα για να επιτύχει μια αποτελεσματικότερη δειγματοληψία. Ο GPEME αλγόριθμος λειτουργεί ως εξής.

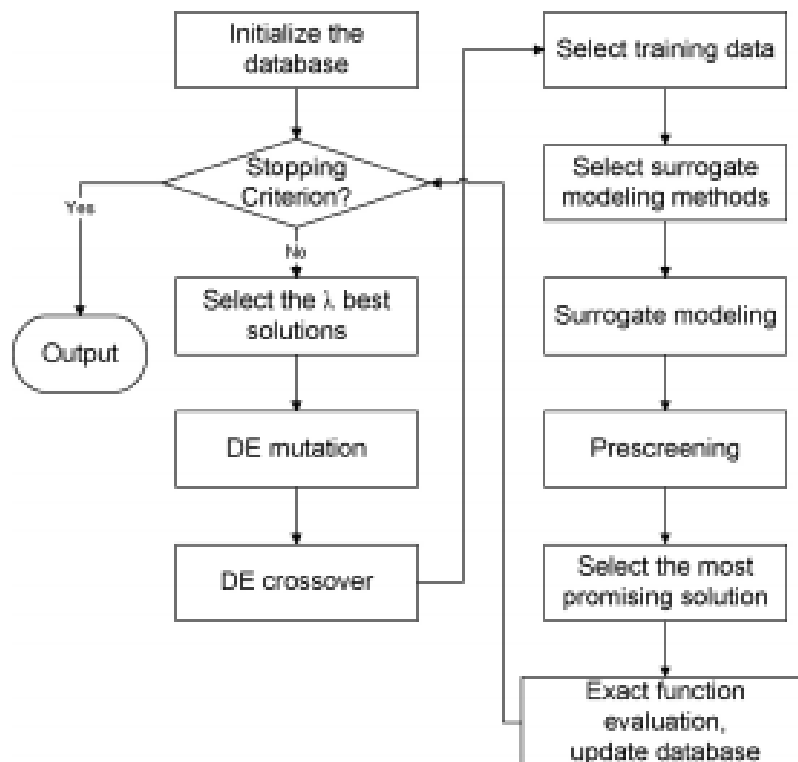
- Βήμα 1.* Χρήση της LHS για τη δειγματοληψία a λύσεων από τον χώρο σχεδίασης, αξιολόγηση των πραγματικών τιμών συνάρτησης αυτών των λύσεων και εισαγωγή αυτών και των λύσεων τους στη βάση δεδομένων.
- Βήμα 2.* Εάν ικανοποιείται το κριτήριο διακοπής, έξοδος της καλύτερης λύσης από τη βάση δεδομένων. Ειδάλλως μετάβαση στο βήμα 3.
- Βήμα 3.* Επιλογή των λ καλύτερων λύσεων από τη βάση δεδομένων για τον ορισμό του πληθυσμού P .
- Βήμα 4.* Εφαρμογή των εξελικτικών τελεστών στον P για την αναπαραγωγή λ απογόνων.
- Βήμα 5.* Χρήση των τ νεότερων λύσεων (μέθοδος Newest) από τη βάση δεδομένων ως δεδομένα εκπαίδευσης για την προεπισκόπηση των λ απογόνων του βήματος 4, κάνοντας χρήση

του GP υποκατάστατου μοντέλου στον πραγματικό χώρο ή των GP+DR (dimension reduction) με την LCB προεπισκόπηση (βλέπε παράρτημα Α).

Βήμα 6. Ακριβής αξιολόγηση του εκτιμώμενου καλύτερου απογόνου από το Βήμα 5. Προσθήκη αυτής της λύσης και της τιμής προσαρμογής της στη βάση δεδομένων. Μετάβαση στο Βήμα 2.

Το διάγραμμα ροής του GPEME πλαισίου δίνεται στο Σχήμα 3.3. Μπορούμε να κάνουμε τις ακόλουθες παρατηρήσεις σχετικά με το πλαίσιο GPEME [Liu et al., 2014]:

- Ο πληθυσμός P που δημιουργείται στο Βήμα 3 αποτελείται από τις λ καλύτερες λύσεις της βάσης δεδομένων. Οι περισσότερες από αυτές τις λύσεις μπορεί να μην βρίσκονται μακριά μεταξύ τους, ιδίως μετά από αρκετές επαναλήψεις. Επομένως, οι περισσότεροι απόγονοι που δημιουργούνται στο Βήμα 4 βρίσκονται σε μια σχετικά μικρή υποσχόμενη υπό-περιοχή.
- Σε κάθε επανάληψη το πολύ μια νέα λύση εισέρχεται στον P πληθυσμό στο Βήμα 3. Ως εκ τούτου, σε αρκετές διαδοχικές επαναλήψεις οι λύσεις που πρόκειται να προ-ελεγχθούν στο Βήμα 5, δεν θα πρέπει να απέχουν πολύ μεταξύ τους, ιδιαίτερα όταν οι περισσότερες λύσεις στον P πληθυσμό διανέμονται σε μια μικρή περιοχή. Για αυτόν τον λόγο, τα σημεία δεδομένων εκπαίδευσης (που λαμβάνονται από το Βήμα 6) δεν μπορούν να απέχουν πολύ από μια λύση που επρόκειτο να προ-ελεγχθεί, κάτι που είναι επιθυμητό για τον GPEME.
- Οι λύσεις τ στο Βήμα 5 είναι οι πιο πρόσφατα παραγόμενες καλύτερες υποψήφιες λύσεις και είναι λογικό να υποθέσουμε ότι αυτές οι λύσεις δεν βρίσκονται επίσης μακριά από την τρέχουσα υποσχόμενη υποπεριοχή. Έτσι, το μοντέλο που δημιουργείται με τη χρήση αυτών των λύσεων θα πρέπει να είναι αρκετά ακριβές για την κατάταξη των λ απογόνων που δημιουργούνται στο Βήμα 4.
- Δεν είναι απαραίτητο να δημιουργηθεί ένα πολύ ακριβές GP μοντέλο στο Βήμα 5 για προεπισκόπηση. Απαιτείται μόνο το GP μοντέλο να μπορεί να επιλέγει μια λογικά καλή λύση.



Σχήμα 3.3 - Διάγραμμα ροής του GPEME [Liu et al., 2014].

Sammon Mapping

Στον GREME αλγόριθμο επιλέγεται μόνο το σημείο με την καλύτερη τιμή **LCB** (βλέπε Παράρτημα Α) για την ακριβή αξιολόγηση της συνάρτησης προσαρμογής, βάσει της ληφθείσας κατάταξης. Είναι επιθυμητό το επιλεγμένο σημείο να είναι υψηλής κατάταξης μεταξύ όλων των μη δοκιμασμένων σημείων. Πιλοτικά πειράματα έχουν δείξει ότι για τα δοκιμαστικά προβλήματα με πολλές μεταβλητές είναι συχνά πολύ δύσκολο να επιτευχθεί ο παραπάνω στόχος με 100 ή 150 δεδομένα εκπαίδευσης [Liu et al., April 2014].

Για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος, προτείνεται ένας αποτελεσματικός τρόπος για την προεπισκόπηση, κάνοντας μείωση διαστάσεων. Η βασική ιδέα είναι να χαρτογραφηθούν τα δεδομένα εκπαίδευσης σε έναν χώρο χαμηλότερης διάστασης και στη συνέχεια να γίνει η GP μοντελοποίηση. Η μέθοδος λειτουργεί ως εξής:

- Είσοδος:** 1) Δεδομένα εκπαίδευσης: x^1, \dots, x^K και y^1, \dots, y^K .
 2) Σημεία για προεπισκόπηση: x^{K+1}, \dots, x^{K+M} .
- Έξοδος:** Η εκτιμώμενη καλύτερη λύση μεταξύ όλων των μη δοκιμασμένων σημείων x^{K+1}, \dots, x^{K+M} .
- Βήμα 1:** Χαρτογράφηση $x^1, \dots, x^{K+M} \in R^d$ σε R^l , όπου $l < d$, και απόκτηση των αντίστοιχων εικόνων στον R^l : $\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^{K+M}$.
- Βήμα 2:** Κατασκευή του GP υποκατάστατου μοντέλου κάνοντας χρήση των \bar{x}^i και y^i δεδομένων ($i = 1, \dots, K$) και χρήση του μοντέλου για τον υπολογισμό των **LCB** τιμών κάθε \bar{x}^{K+j} ($j = 1, \dots, M$).
- Βήμα 3:** Εύρεση του σημείου με την μικρότερη **LCB** τιμή μεταξύ των $\bar{x}^{K+1}, \dots, \bar{x}^{K+M}$. Έξοδος του αντίστοιχου σημείου στον πραγματικό χώρο σχεδίασης R^d ως η εκτιμώμενη καλύτερη λύση.

Υπάρχουν πολλές μέθοδοι μηχανικής εκμάθησης που μπορούν να μετατρέψουν τον αρχικό χώρο R^d σε λανθάνον χώρο R^l για τη μείωση διαστάσεων [Maaten et al., 2008]. Η Sammon mapping [Sammon, Jr, 1969] είναι μία από αυτές, η οποία ελαχιστοποιεί τις διαφορές μεταξύ των αντίστοιχων αποστάσεων μεταξύ σημείων στους δύο χώρους. Επιπλέον, δεν είναι ακριβή μεθοδολογία όταν τα $K + M$ και l δεν είναι μεγάλα. Η Sammon mapping ελαχιστοποιεί την ακόλουθη συνάρτηση σφάλματος:

$$E = \sum_{1 \leq i < j \leq K+M} \frac{1}{dis(x^i, x^j)} \times \sum_{1 \leq i < j \leq K+M} \frac{[dis(x^i, x^j) - dis(\bar{x}^i, \bar{x}^j)]^2}{dis(x^i, x^j)} \quad 3.1$$

Όπου $dis(*, *)$ είναι η Ευκλείδεια απόσταση.

Η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης σφάλματος είναι ένα πρόβλημα μεγάλης κλίμακας τετραγωνικής βελτιστοποίησης. Στα πειράματά των [Liu et al., April 2014], χρησιμοποιείται η μέθοδος gradient descent [Avriel, 2003] για την επίλυση της συνάρτησης σφάλματος και ορίζεται το $l = 4$. Επίσης χρησιμοποιείται η τεχνική Principle Component Analysis (PCA), για την δημιουργία ενός αρχικού σημείου για τη διαδικασία βελτιστοποίησης. Όταν $K = 100$, $M = 50$ και $d = 50$, όπως χρησιμοποιούνται στα πειράματά των [Liu et al., April 2014], ο χρόνος CPU που καταναλώνεται από τη χαρτογράφηση Sammon είναι μερικά δευτερόλεπτα σε έναν επεξεργαστή με συχνότητα λειτουργίας 2.66 GHz.

3.4 ΦΑΣΕΙΣ ΑΝΑΖΗΤΗΣΗΣ

Εκτός από τη χρήση μιας ενιαίας αναζήτησης στον χώρο για την εύρεση του ολικού βελτίστου, στη βιβλιογραφική έρευνα που πραγματοποιήθηκε, παρατηρήθηκε σε πολλά άρθρα η χρήση δύο ειδών αναζήτησης, της σφαιρικής αναζήτησης και της τοπικής αναζήτησης. Η σφαιρική αναζήτηση στοχεύει στην εξερεύνηση (“exploration”) του χώρου λύσεων για υποσχόμενες περιοχές (περιοχές που αναμένεται να βρίσκεται το ολικό βέλτιστο). Η τοπική αναζήτηση στοχεύει στην εκμετάλλευση

(“exploitation”) της υποσχόμενης περιοχής και συνήθως σε αυτήν την αναζήτηση το υποκατάστατο μοντέλο που δημιουργείται είναι ένα τοπικό μοντέλο, ώστε να είναι ικανό να εκτιμήσει σωστά τις τιμές προσαρμογής των απογόνων, οι οποίοι βρίσκονται κοντά στους γονείς τους αφού η αναζήτηση κινείται πλέον σε μια υποπεριοχή του χώρου των λύσεων. Για να επιτευχθεί η εναλλαγή των δύο αυτών φάσεων αναζήτησης έχουν αναπτυχθεί πολλές μεθοδολογίες, όπως θα φανεί στη συνέχεια.

3.4.1 Αλγόριθμος Zhou

Από τη βιβλιογραφική έρευνα που πραγματοποιήθηκε προέκυψε ότι οι [Zhou et al., 2007] είναι οι πρώτοι που εφάρμοσαν τη διαίρεση της αναζήτησης στο χώρο σε δύο φάσεις αναζήτησης. Ο αλγόριθμος που αναπτύχθηκε αποτελείται από 4 φάσεις, οι οποίες παρουσιάζονται στη συνέχεια:

1^η Φάση

Αρχικά ένας πληθυσμός από σχεδιαστικά σημεία αρχικοποιείται είτε τυχαία, είτε χρησιμοποιώντας μία τεχνική όπως η LHS. Αυτά τα σημεία αξιολογούνται επ’ ακριβώς και μαζί με τη συνάρτηση προσαρμογής τους, εισάγονται στην κεντρική βάση δεδομένων (DB). Μετά από κάποιο χρονικό διάστημα (π.χ. 3 γενιές) γίνεται κατασκευή του υποκατάστατου μοντέλου (Data-Parallel Gaussian Process - DPGP), το οποίο αντιπροσωπεύει τις σφαιρικές τάσεις ολόκληρου του χώρου προσαρμογής, χρησιμοποιώντας τα q καλύτερα σημεία στη DB ως δεδομένα εκπαίδευσης (μέθοδος Best).

2^η Φάση (Σφαιρική Στρατηγική Αναζήτησης)

Το πρώτο βήμα σ’ αυτή τη φάση είναι ο έλεγχος εάν το σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο χρειάζεται ανανέωση. Αν έχουν υποστεί αλλαγές στα q καλύτερα σημεία της DB, τότε το υποκατάστατο μοντέλο θα ανανεωθεί με τη χρήση των νέων q καλύτερων σημείων. Έτσι το υπολογιστικό κόστος μπορεί να μειωθεί, αφού το σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο δεν χρειάζεται να ανακατασκευάζεται σε κάθε γενιά. Το DPGP μοντέλο χρησιμοποιείται για την προ-αξιολόγηση όλων των ατόμων του πληθυσμού. Οι εκτιμήσεις που θα προκύψουν, χρησιμοποιούνται για να αντικατοπτρίσουν μεταγενέστερους πληθυσμούς έτσι ώστε μόνο τα καλύτερα $n\%$ άτομα να υφίστανται τους εξελικτικούς τελεστές. Αυτό εξαλείφει κάθε περιττή τοπική αναζήτηση από το να διεξαχθεί σε άτομα που η πραγματική προσαρμογή τους αναμένεται να είναι φτωχή.

3^η Φάση (Τοπική Στρατηγική Αναζήτησης)

Για κάθε μοναδικά (μη διπλότυπα) άτομα κορυφαίας $n\%$ κατάταξης στη DB, δημιουργείται ένα τοπικό RBF υποκατάστατο μοντέλο, χρησιμοποιώντας μόνο τα m κοντινότερα γειτονικά σημεία από τη DB (μέθοδος Nearest Neighbors). Κάθε τέτοιο μοντέλο παριστάνει το τοπικό τοπίο φυσικής κατάστασης στη γειτνίαση ενός ατόμου. Το αποτέλεσμα από κάθε νέα ακριβή αξιολόγηση προστίθεται στη DB, διευκολύνοντας πιθανώς την ανανέωση των υποκατάστατων μοντέλων μέσω της online μάθησης.

4^η Φάση (Βασικές ΕΑ συναρτήσεις)

Ο πληθυσμός στη συνέχεια υφίσταται τους τελεστές διαφορικής εξέλιξης για τη δημιουργία ενός πληθυσμού απογόνων. Η παραπάνω διαδικασία θα εξακολουθεί να πραγματοποιείται έως ότου ικανοποιηθεί ένα προκαθορισμένο κριτήριο διακοπής.

Σφαιρική Αναζήτηση

Η σφαιρική στρατηγική αναζήτησης έχει σχεδιαστεί για τον εντοπισμό περιοχών αναζήτησης που περιέχουν λύσεις καλύτερης ποιότητας, οι οποίες εκπροσωπούνται εδώ από τα ανώτερα άτομα σε έναν ΕΑ πληθυσμό. Στην συγκεκριμένη εργασία, η Probability of Improvement (PoI) [Jones et al., 1998], που προβλέφθηκε από το GP σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο, χρησιμοποιείται ως κριτήριο προεπιλογής για την προεπισκόπηση του πληθυσμού των υποσχόμενων ατόμων κατά την σφαιρική στρατηγική αναζήτησης. Αυτό μπορεί να βοηθήσει στην αποτροπή της πρόωρης σύγκλισης σε ένα ψευδές ολικό βέλτιστο, ειδικά σε πολυτροπικά και πολυδιάστατα προβλήματα. Παρ’ όλα αυτά, ένα μεγάλο μειονέκτημα της GP προσεγγιστικής μεθόδου είναι ότι η κατασκευή μοντέλου και ειδικότερα

ο συντονισμός των υπερπαραμέτρων μπορεί να είναι χρονοβόρα διαδικασία σε σύγκριση με άλλες κοινώς χρησιμοποιούμενες μεθόδους προσέγγισης.

Αλγόριθμος 3.3 - Ψευδοκώδικας

Αρχικοποίηση: Παραγωγή της DB από δειγματικά σημεία.

Κατασκευή του DPGP σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου με τα q καλύτερα σημεία στη DB.

While (το κριτήριο διακοπής δεν ικανοποιείται)

If (τα q καλύτερα σημεία άλλαξαν)

Ανανέωση του DPGP σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου με τα q καλύτερα σημεία της βάσης δεδομένων.

End If

Αξιολόγηση όλων των ατόμων στον πληθυσμό χρησιμοποιώντας το DPGP σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο.

For (κάθε μη-διπλότυπο άτομο, κορυφαίας $n\%$ κατάταξης στον πληθυσμό)

Εφαρμογή τοπικής αναζήτησης, αξιολόγηση με το υποκατάστατο μοντέλο.

Ανανέωση της DB με τα σχεδιαστικά σημεία που αναπαράχθηκαν εν μέσω των επαναλήψεων της έμπιστης-περιοχής, μαζί με τις αντίστοιχες ακριβείς αξιολογήσεις τους.

Αντικατάσταση των ατόμων του πληθυσμού με τις τοπικά βελτιωμένες λύσεις.

End For

Εφαρμογή εξελικτικών τελεστών για την αναπαραγωγή νέου πληθυσμού.

End While

END

Τοπική Αναζήτηση

Η τοπική στρατηγική αναζήτησης έχει σχεδιαστεί για να λειτουργεί με ένα τοπικά εκπαιδευμένο σύστημα, που προσαρμόζεται στις τοπικές ιδιότητες των δεδομένων εκπαίδευσης σε κάθε περιοχή του χώρου εισόδου. Το υποκατάστατο μοντέλο κατασκευάζεται χρησιμοποιώντας μόνο τα γειτονικά σημεία δεδομένων στη βάση δεδομένων που είναι πλησιέστερα στο ενδιαφερόμενο σημείο σχεδίασης, επειδή τα γειτονικά σημεία είναι πιθανό να έχουν μεγαλύτερο αντίκτυπο από τα απομακρυσμένα [Giannakoglou, 2002].

Το υποκατάστατο μοντέλο που χρησιμοποιείται από την τοπική στρατηγική αναζήτησης δημιουργείται δυναμικά για κάθε φίλτραρισμένο και μη διπλότυπο άτομο. Πιο συγκεκριμένα, για κάθε μη διπλότυπο άτομο μεταξύ της κορυφαίας $n\%$ κατάταξης του πληθυσμού, η τοπική στρατηγική αναζήτησης προχωρά με μια ακολουθία υποπροβλημάτων περιοχής εμπιστοσύνης της φόρμας:

$$\begin{aligned} \text{Minimize : } & \hat{f}^k(x + x_c^k) \\ \text{Subject to : } & \|x\| \leq \Omega^k \end{aligned} \quad 3.2$$

όπου $k = 0, 1, 2, \dots, k_{max}$ και $\hat{f}(x)$ είναι η συνάρτηση προσέγγισης που αντιστοιχεί στην αντικειμενική συνάρτηση $f(x)$. Το x_c^k είναι το σημείο εκκίνησης και το Ω^k είναι η ακτίνα της περιοχής εμπιστοσύνης, που χρησιμοποιείται για την τοπική αναζήτηση κατά την k επανάληψη.

Για κάθε υποπρόβλημα (ή κατά τη διάρκεια κάθε επανάληψης της περιοχής εμπιστοσύνης), υποκατάστατα μοντέλα της ακριβούς συνάρτησης προσαρμογής, δηλαδή $\hat{f}^k(x)$, δημιουργούνται δυναμικά. Οι m πλησιέστεροι γείτονες του αρχικού σημείου x_c^k , εξάγονται από την αρχειοθετημένη βάση δεδομένων των σημείων σχεδίασης, που έχουν αξιολογηθεί επ'ακριβώς μέχρι στιγμής. Το κριτήριο που χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της ομοιότητας μεταξύ των σημείων σχεδίασης είναι η απλή μέτρηση της Ευκλείδειας απόστασης. Αυτά τα σημεία χρησιμοποιούνται στη συνέχεια για την κατασκευή τοπικών υποκατάστατων μοντέλων της ακριβούς αντικειμενικής συνάρτησης.

Τα υποκατάστατα μοντέλα που δημιουργούνται με αυτόν τον τρόπο χρησιμοποιούνται για να διευκολύνουν τις απαραίτητες εκτιμήσεις της συνάρτησης προσαρμογής στις τοπικές αναζητήσεις. Κατά την τοπική αναζήτηση, αρχικοποιείται η περιοχή εμπιστοσύνης Ω , χρησιμοποιώντας τα άνω και

κάτω όρια των σημείων σχεδίασης, που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή των υποκατάστατων μοντέλων. Μετά από κάθε επανάληψη, η ακτίνα Ω^k της περιοχής εμπιστοσύνης ενημερώνεται με βάση ένα μέτρο που δείχνει την ακρίβεια του υποκατάστατου μοντέλου του k -οστού τοπικού βέλτιστου x_{lo}^k . Αφού υπολογιστούν οι ακριβείς τιμές της συνάρτησης προσαρμογής σε αυτό το σημείο, η τιμή της αξίας ρ^k υπολογίζεται ως εξής:

$$\rho^k = \frac{f(x_c^k) - f(x_{lo}^k)}{\hat{f}(x_c^k) - \hat{f}(x_{lo}^k)} \quad 3.3$$

Οι παραπάνω σχέσεις παρέχουν ένα μέτρο της πραγματικής έναντι της προβλεπόμενης αλλαγής στις ακριβείς τιμές της συνάρτησης προσαρμογής στο k -οστό τοπικό βέλτιστο. Στη συνέχεια, η τιμή του ρ^k χρησιμοποιείται για την ενημέρωση της ακτίνας εμπιστοσύνης ως εξής [Alexandrov et al., 1998]:

$$\Omega^{k+1} = \begin{cases} 0.25\Omega^k, & \text{if } \rho^k \leq 0.25 \\ \Omega^k, & \text{if } 0.25 < \rho^k \leq 0.75 \\ \xi\Omega^k, & \text{if } \rho^k \geq 0.75 \end{cases} \quad 3.4$$

όπου $\xi = 2$, εάν $\|x_{lo}^k - x_c^k\|_\infty = \Omega^k$ ή $\xi = 1$, εάν $\|x_{lo}^k - x_c^k\|_\infty < \Omega^k$.

Η ακτίνα της περιοχής εμπιστοσύνης Ω^k μειώνεται εάν η ακρίβεια του υποκατάστατου μοντέλου μετρούμενη από το ρ^k είναι χαμηλή. Η Ω^k διπλασιάζεται εάν το υποκατάστατο βρεθεί να είναι ακριβές και το k -οστό τοπικό βέλτιστο x_{lo}^k βρίσκεται στα όρια της περιοχής εμπιστοσύνης. Ειδάλλως, η ακτίνα της περιοχής εμπιστοσύνης παραμένει αμετάβλητη.

Οι ακριβείς λύσεις των αντικειμενικών συναρτήσεων στο k -οστό τοπικό βέλτιστο συνδυάζονται με τα υπάρχοντα γειτονικά σημεία δεδομένων για τη δημιουργία νέων υποκατάστατων μοντέλων στις επακόλουθες επαναλήψεις περιοχής εμπιστοσύνης. Το αρχικό σημείο για την $k + 1$ επανάληψη ορίζεται ως:

$$x_c^{k+1} = \begin{cases} x_{lo}^k, & \text{if } \rho^k > 0 \\ x_c^k, & \text{if } \rho^k \leq 0 \end{cases} \quad 3.5$$

Η διαδικασία της περιοχής εμπιστοσύνης για ένα άτομο τερματίζεται όταν επιτευχθεί ο μέγιστος επιτρεπόμενος αριθμός επαναλήψεων περιοχής εμπιστοσύνης k_{max} , που ορίζεται από τον χρήστη. Οι εξελικτικοί τελεστές στη συνέχεια εφαρμόζονται εάν η τοπική βέλτιστη λύση k_{max} που αποκτήθηκε είναι μια βελτίωση του αρχικού ατόμου.

3.4.2 Αλγόριθμος SMEAFO

Έχει προταθεί η ακόλουθη μέθοδος που ονομάζεται υποκατάστατα-βοηθούμενος εξελικτικός αλγόριθμος για τη βελτιστοποίηση φίλτρων (SMEAFO), η οποία διαχωρίζει την αναζήτηση σε δύο φάσεις, τη φάση εξερεύνησης και τη φάση εκμετάλλευσης [Liu et al., 2017]. Αντί της χρήσης ενός προτύπου SAEA με συγκεκριμένη ικανότητα εξερεύνησης, γίνεται διαίρεση στη φάση εξερεύνησης με στόχο την εύρεση μίας σχεδόν βέλτιστης περιοχής και στη φάση εκμετάλλευσης με στόχο την απόκτηση του τελικού βέλτιστου σχεδίου από τα σχεδόν-βέλτιστα σχέδια. Η τελευταία φάση απαιτεί λιγότερη ικανότητα εξερεύνησης (υποδεικνύοντας περισσότερο χώρο για απόδοση) χωρίς να θυσιάζεται η ποιότητα της λύσης.

Για την εξισορρόπηση της ικανότητας εξερεύνησης και της αποτελεσματικότητας, οι διαθέσιμοι SAEA μπορούν να ταξινομηθούν κυρίως σε «συντηρητικούς» και «ενεργούς». Οι συντηρητικοί εμβαθύνουν την ικανότητα εξερεύνησης. Αυτές οι μέθοδοι ξεκινούν με έναν τυπικό EA για ορισμένες επαναλήψεις, στοχεύοντας στη συλλογή σημείων εκπαίδευσης που είναι σε θέση να δημιουργήσουν ένα αρκετά καλό σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο και στη συνέχεια να βελτιώσουν επαναληπτικά την ποιότητα της λύσης και την ποιότητα του υποκατάστατου μοντέλου κατά την διαδοχική αναζήτηση. Έτσι, η

εξερευνητική ικανότητα μπορεί να ωφεληθεί πολύ με το κόστος μιας σημαντικής υπολογιστικής επιβάρυνσης για τυπικές ΕΑ επαναλήψεις.

Οι ενεργοί SAEAs, αντίθετα εμβαθύνουν στην απόδοση [Emmerich et al., 2006]. Αυτές οι μέθοδοι πραγματοποιούν ακριβείς (και ακριβές) αξιολογήσεις στις «βέλτιστες» λύσεις, που εκτιμώνται από το υπάρχον υποκατάστατο μοντέλο, παρά το ότι η ποιότητα του μπορεί να μην είναι αρκετά καλή. Ο αριθμός των ακριβών αξιολογήσεων είναι επομένως πολύ μειωμένος αλλά η ικανότητα εξερεύνησης γίνεται αδυναμία. Οι μέθοδοι προεπισκόπησης [Dennis et al., 1997], [Jones et al., 1998] χρησιμοποιούνται για να βοηθήσουν στην έξοδο από τα τοπικά βέλτιστα αλλά δεν μπορούν να λύσουν πλήρως το πρόβλημα. Δοκιμές για το πρόβλημα αναφοράς του Ackley (με μια στενή κοιλάδα και πολλά τοπικά βέλτιστα) [Jamil et al., 2013] δείχνουν ότι τέτοιοι SAEAs δεν είναι σε θέση να ξεφύγουν από τα τοπικά βέλτιστα [Emmerich et al., 2006].

Η φάση εξερεύνησης του SMEAFO ακολουθεί την ιδέα των ενεργών SAEA για την αποφυγή κατανάλωσης σημαντικών προσομοιώσεων σε μη βέλτιστες περιοχές. Για να βελτιωθεί σε μεγάλο βαθμό η ικανότητα εξερεύνησης σε σύγκριση με τους υπάρχοντες ενεργούς SAEAs, γίνεται χρήση μιας νέας μεθόδου υποκατάστατα-βοηθούμενης αναζήτησης, της *Gaussian Local Search*, καθώς και συγκεκριμένων στρατηγικών DE μετάλλαξης και επιλογής δεδομένων εκπαίδευσης.

Φάση Εξερεύνησης

Το γενικό πλαίσιο της φάσης εξερεύνησης φαίνεται στο Σχήμα 3.4, το οποίο αποτελείται από τα ακόλουθα βήματα.

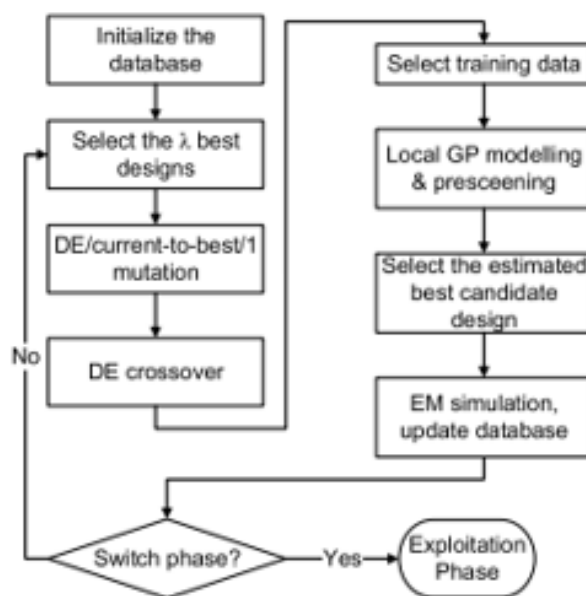
- Βήμα 1.* Δείγμα λ (συνήα μικρό) υποψήφιων σχεδίων, εκτέλεση ακριβούς αξιολόγησης σε αυτά και χρήση τους για τον σχηματισμό της αρχικής βάσης δεδομένων.
- Βήμα 2.* Επιλογή των λ καλύτερων σχεδίων από τη βάση δεδομένων με βάση τις τιμές αντικειμενικής συνάρτησης για τον σχηματισμό ενός πληθυσμού P .
- Βήμα 3.* Εφαρμογή της DE/current-to-best/1 μετάλλαξης και του τελεστή επιχιασμού στον P για την δημιουργία λ απογόνων.
- Βήμα 4.* Για κάθε απόγονο, επιλογή σημείων εκπαίδευσης και δημιουργία ενός τοπικού υποκατάστατου GP μοντέλου.
- Βήμα 5.* Προεπιλογή των λ απογόνων που δημιουργήθηκαν στο Βήμα 3 με χρήση της μεθόδου χαμηλότερης εμπιστοσύνης (LCB). Εκτίμηση των καλύτερων απογόνων με βάση τις τιμές της προαναφερόμενης μεθόδου.
- Βήμα 6.* Εκτέλεση ακριβούς αξιολόγησης στον εκτιμώμενο καλύτερο απόγονο από το Βήμα 5. Προσθήκη αυτού του σχεδίου και της απόδοσής του (τιμή προσαρμογής) στη βάση δεδομένων.

Επιστροφή στο Βήμα 2 μέχρι την εναλλαγή στη φάση εκμετάλλευσης.

Μια βασική διαφορά σε σύγκριση με τους διαθέσιμους ενεργούς SAEAs είναι ότι δεν υιοθετείται μια τυπική ΕΑ διαδικασία. Αντίθετα, μόνο το εκτιμώμενο καλύτερο υποψήφιο σχέδιο προσομοιώνεται και τα τρέχοντα λ καλύτερα υποψήφια σχέδια χρησιμοποιούνται ως ο νέος πληθυσμός σε κάθε επανάληψη. Αυτό το νέο πλαίσιο SAEA βελτιώνει τις θέσεις των δεδομένων εκπαίδευσης. Είναι γνωστό ότι ο αριθμός των δεδομένων εκπαίδευσης επηρεάζει την ποιότητα του υποκατάστατου μοντέλου ενώ οι θέσεις τους συχνά παραβλέπονται. Με τον ίδιο αριθμό δεδομένων εκπαίδευσης, είναι διαισθητικό ότι η χρήση δεδομένων εκπαίδευσης που βρίσκονται κοντά στα σημεία που αναμένονται να εκτιμηθούν (πληθυσμός απογόνων στο Βήμα 3) μπορεί να παράξει καλύτερης ποιότητας υποκατάστατα μοντέλα [Liu et al., 2017]. Αυτό εφαρμόζεται στα Βήματα 2-6 του παραπάνω αλγορίθμου.

Από το Βήμα 2 έως το Βήμα 6 σε κάθε επανάληψη, οι λ τρέχουσες καλύτερες υποψήφιες λύσεις δημιουργούν τον γονικό πληθυσμό (είναι λογικό να υποθέσουμε ότι η αναζήτηση εστιάζει στην υποσχόμενη περιοχή) και επιλέγεται το καλύτερο υποψήφιο σχέδιο βάσει της προεπισκόπησης στον

πληθυσμό απογόνων για να αντικαταστήσει το χειρότερο στον γονικό πληθυσμό. Ως εκ τούτου, μόνο ένας υποψήφιος αλλάζει στον γονικό πληθυσμό σε κάθε επανάληψη, οπότε ο καλύτερος υποψήφιος από τους απογόνους σε αρκετές διαδοχικές επαναλήψεις μπορεί να μην απέχει πολύ ο ένας από τον άλλο (στη συνέχεια θα προσομοιωθούν και θα χρησιμοποιηθούν ως δεδομένα εκπαίδευσης). Επομένως, τα δεδομένα εκπαίδευσης που περιγράφουν την τρέχουσα υποσχόμενη περιοχή μπορεί να είναι πολύ πιο πυκνά σε σύγκριση με αυτά που δημιουργούνται από έναν τυπικό EA μηχανισμό ενημέρωσης πληθυσμού, ο οποίος μπορεί να εξαπλωθεί σε διαφορετικές περιοχές του χώρου σχεδίασης ενώ ενδέχεται να μην υπάρχουν επαρκή δεδομένα εκπαίδευσης γύρω από τις υποψήφιες λύσεις προς προεπισκόπηση [Liu et al., 2017].



Σχήμα 3.4 – Διάγραμμα ροής της φάσης εξερεύνησης [Liu et al., 2017].

Χρησιμοποιώντας τη βάση δεδομένων με βελτιωμένες θέσεις δειγμάτων για υποκατάστατη μοντελοποίηση, ένα διαδοχικό κρίσιμο πρόβλημα είναι η επιλογή δειγμάτων από αυτήν, τα οποία θα χρησιμοποιηθούν ως δεδομένα εκπαίδευσης. Οι περισσότεροι SAEAs δημιουργούν ένα ενιαίο υποκατάστατο μοντέλο για την εκτίμηση του πληθυσμού απογόνων. Για παράδειγμα, ένας ορισμένος αριθμός αξιολογημένων υποσχόμενων λύσεων (κατάταξη βάσει της συνάρτησης προσαρμογής) [Emmerich et al., 2006] ή οι πιο πρόσφατες λύσεις χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία ενός μοντέλου για τον απογονικό πληθυσμό. Ωστόσο, τέτοιες μέθοδοι δεν είναι κατάλληλες για το συγκεκριμένο πρόβλημα, λόγω των χαρακτηριστικών του τοπίου σχεδίασης των φίλτρων μικροκυμάτων [Liu et al., 2017]. Επομένως, στον SMEAFO κατασκευάζεται ένα τοπικό GP υποκατάστατο μοντέλο για κάθε απόγονο, χρησιμοποιώντας τα t πλησιέστερα δείγματα (με βάση την Ευκλείδεια απόσταση). Αυτό σημαίνει ότι λ ξεχωριστά τοπικά GP μοντέλα κατασκευάζονται σε κάθε επανάληψη.

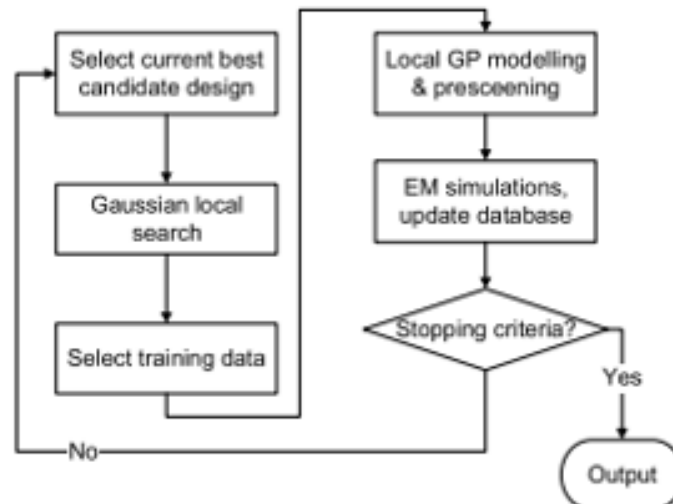
Φάση Εκμετάλλευσης

Ο στόχος της φάσης εκμετάλλευσης είναι η απόκτηση του τελικού βέλτιστου σχεδίου από ένα σχεδόν βέλτιστο σχέδιο που βασίζεται σε μια τοπική μέθοδο αναζήτησης βασισμένη σε υποκατάστατα με μεγάλο βαθμό μειωμένης ικανότητας εξερεύνησης. Αν και οι ευρετικές μέθοδοι τοπικής αναζήτησης δεν είναι περίπλοκες, μια κοινή πρόκληση είναι η προσαρμογή των κρίσιμων παραμέτρων, συμπεριλαμβανομένης της αρχικής κατάστασης και της κλίμακας εκμετάλλευσης [Coello et al., 2007].

Το γενικό πλαίσιο της φάσης εκμετάλλευσης φαίνεται στο Σχήμα 3.5, το οποίο αποτελείται από τα ακόλουθα βήματα.

Βήμα 1. Εκτέλεση τοπικής Gaussian αναζήτησης στο τρέχον καλύτερο σχέδιο της βάσης δεδομένων για τη δημιουργία d (αριθμός μεταβλητών σχεδίασης) λύσεων.

- Βήμα 2.** Για κάθε λύση από το Βήμα 1, επιλογή των δεδομένων εκπαίδευσης, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο στην φάση εξερεύνησης και δημιουργία ενός τοπικού GP υποκατάστατου μοντέλου.
- Βήμα 3.** Προεπισκόπηση των d λύσεων που δημιουργούνται στο Βήμα 1, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο χαμηλότερης εμπιστοσύνης (LCB). Για κάθε μία από αυτές εάν η τιμή χαμηλότερης εμπιστοσύνης είναι καλύτερη από το τρέχον καλύτερο σχέδιο, πραγματοποιείται ακριβή αξιολόγηση σε αυτήν. Προσθήκη αυτού του σχεδίου και της απόδοσης του (τιμή προσαρμογής) στη βάση δεδομένων.
- Βήμα 4.** Εάν πληρείται ένα προκαθορισμένο κριτήριο διακοπής, εξαγωγή της καλύτερης λύσης από τη βάση δεδομένων, διαφορετικά επιστροφή στο Βήμα 1.



Σχήμα 3.5 – Διάγραμμα ροής της φάσης εκμετάλλευσης [Liu et al., 2017].

Να σημειωθεί ότι δεν υπάρχει σαφές όριο για τον διαχωρισμό της εξερεύνησης και της εκμετάλλευσης σε μια διαδικασία αναζήτησης επειδή το "σχεδόν βέλτιστο" είναι ένας εμπειρικός ορισμός [Coello et al., 2007]. Ωστόσο ένας κατάλληλος ορισμός της αρχικής κατάστασης της φάσης εκμετάλλευσης είναι σημαντικός για τον SMEAFO. Η πρώτη έναρξη αυτής της φάσης μπορεί να παγιδεύσει τον αλγόριθμο σε τοπικό βέλτιστο, ενώ η καθυστερημένη εκκίνηση μειώνει την απόδοση. Στον SMEAFO χρησιμοποιείται η μέση τυπική απόκλιση του τρέχοντος πληθυσμού (σ_p) για την αντικατόπριση της ποικιλομορφίας του πληθυσμού ή της προόδου του SMEAFO. Συχνά, η τιμή σ_p αυξάνεται αρχικά (εξερεύνηση του χώρου σχεδίασης) και στη συνέχεια μειώνεται (συγκλίνει στη βέλτιστη περιοχή) σε μια εκτέλεση του SMEAFO. Έχει οριστεί το 10% του μέγιστου σ_p στη φάση εξερεύνησης ως το κατώφλι για την έναρξη της φάσης εκμετάλλευσης [Liu et al., 2017].

Λαμβάνοντας υπόψη την ποιότητα του υποκατάστατου μοντέλου, επειδή αυτή η φάση εκτελεί τοπική αναζήτηση, η βάση δεδομένων που παρέχεται από τη φάση εξερεύνησης είναι μια καλή αφετηρία των δεδομένων εκπαίδευσης. Το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης ενημερώνεται επίσης προσαρμοστικά από το Βήμα 3, υποστηρίζοντας τη συνεχόμενη τοπική αναζήτηση. Η τιμή της χαμηλότερης εμπιστοσύνης χρησιμοποιείται στο Βήμα 3, ώστε να αποφευχθεί η απώλεια πιθανών βέλτιστων λύσεων, η οποία παρέχει επίσης περισσότερα δείγματα γύρω από τη βέλτιστη περιοχή [Liu et al., 2017].

Gaussian Local Search

Για λόγους γενικότητας χρησιμοποιείται σε αυτή τη φάση μια αποτελεσματική μέθοδος για πολύπλοκη αναζήτηση, η Gaussian Local Search [Yao et al., 1999]. Χρησιμοποιείται συχνά για την ενίσχυση της ικανότητας της τοπικής αναζήτησης των ΕΑ. Στον SMEAFO χρησιμοποιείται η ακόλουθη εφαρμογή:

$$xg_j^i = \begin{cases} x_j^i + N(0, \sigma_j^{gls}), & \text{if } rand \leq \frac{1}{d} \\ x_j^i, & \text{otherwise;} \end{cases} \quad j = 1, 2, \dots, d \quad 3.6$$

όπου το $N(0, \sigma_j^{gls})$ είναι ένας κατά Gauss κατανομημένος τυχαίος αριθμός με τυπική απόκλιση σ_j^{gls} και το rand είναι ένας ομοιόμορφα κατανομημένος τυχαίος αριθμός από (0, 1).

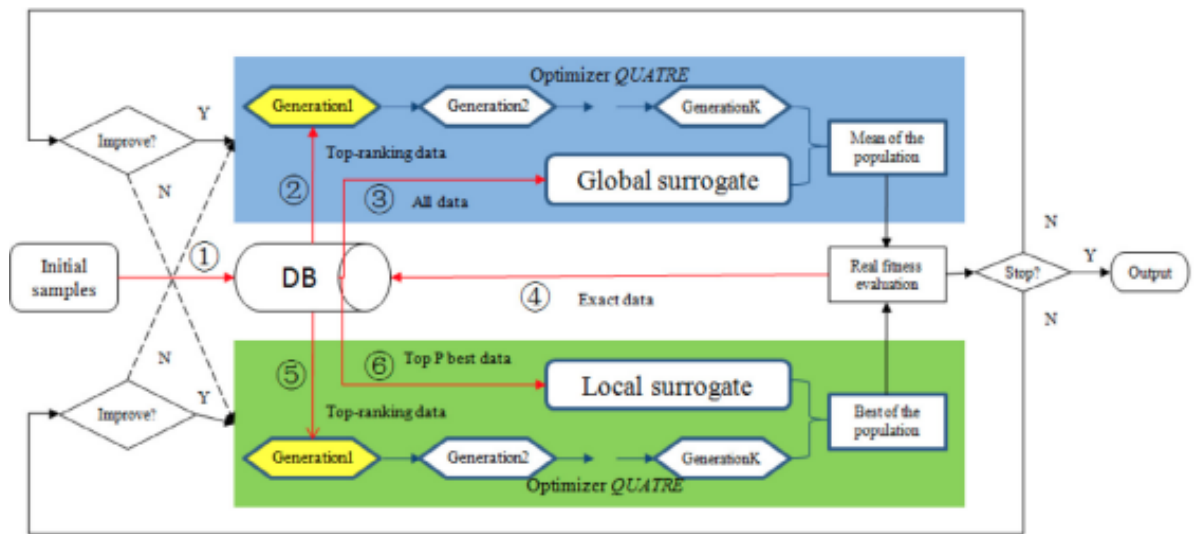
Το σ_j^{gls} είναι μία κρίσιμη παράμετρος της τοπικής κατά Gauss αναζήτησης, όπου εξαρτάται από το πρόβλημα. Ωστόσο, με τη βοήθεια της φάσης εξερεύνησης, ορίζεται αυτοπροσαρμόσιμη ως:

$$\sigma_j^{gls} = 0.5 \times std(PB_j), \quad j = 1, 2, \dots, d \quad 3.7$$

όπου τα PB είναι τα d καλύτερα υποψήφια σχέδια στη βάση δεδομένων και std είναι η τυπική απόκλιση. Αυτό δείχνει ότι το 95,4% (τιμή 2σ) των υποψήφιων σχεδίων που δημιουργούνται από την τοπική κατά Gauss αναζήτηση βρίσκονται στην τυπική απόκλιση των καλύτερων διαθέσιμων υποψήφιων σχεδίων, τα οποία βρίσκονται ήδη σε μια μικρή περιοχή. Αυτό συμβαδίζει με τη βασική ιδέα αυτής της φάσης (εκτέλεση τοπικής εκμετάλλευσης γύρω από το τρέχον καλύτερο σχέδιο). Με την ενημέρωση του PB , το σ_j^{gls} είναι αυτο-προσαρμόσιμο [Liu et al., 2017].

3.4.3 Αλγόριθμος SA-QUATRE

Ο αλγόριθμος SA-QUATRE (Surrogate-Assisted Quasi-Affine Transformation Evolutionary Algorithm) [Liu et al., 2020] είναι επίσης ένας αλγόριθμος ο οποίος διαχωρίζει την αναζήτηση σε μία σφαιρική και μία τοπική φάση αναζήτησης. Ο SA-QUATRE χρησιμοποιεί τον QUATRE ως τον εξελικτικό αλγόριθμο και δύο υποκατάστατα μοντέλα, ένα σφαιρικό και ένα τοπικό υποκατάστατο μοντέλο, τα οποία χρησιμοποιούνται ανάλογα με τη φάση αναζήτησης που βρίσκεται ο αλγόριθμος. Το σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο κατασκευάζεται με βάση όλα τα δεδομένα στη βάση δεδομένων (μέθοδος All DB) και χρησιμοποιείται για την υποστήριξη του βελτιστοποιητή QUATRE στην αναζήτηση σε όλο τον χώρο σχεδίασης της συνάρτησης στόχου. Το τοπικό υποκατάστατο μοντέλο κατασκευάζεται με έναν προκαθορισμένο αριθμό καλύτερων σημείων (μέθοδος Best) και χρησιμοποιείται για την υποστήριξη του βελτιστοποιητή QUATRE στην εύρεση του βελτίστου τριγύρω από τις υποσχόμενες υπό-περιοχές [Liu et al., 2020].



Σχήμα 3.6 - Πλαίσιο του SA-QUATRE [Liu et al., 2020].

Η εναλλαγή αυτών των δύο φάσεων πραγματοποιείται ανάλογα με τις επιδόσεις της κάθε φάσης. Δηλαδή, εάν η σφαιρική φάση παράγει καλύτερους απογόνους από τους γονείς τους (δηλαδή γίνεται

εύρεση καλύτερης λύσης), τότε η αναζήτηση παραμένει στη σφαιρική φάση, ειδικά γίνεται εναλλαγή της φάσης αναζήτησης από σφαιρική σε τοπική. Με τον ίδιο τρόπο γίνεται και η εναλλαγή της φάσης αναζήτησης από τοπική σε σφαιρική αναζήτηση.

Το γενικό πλαίσιο του SA-QUATRE παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.6. Το πάνω μέρος του Σχήματος 3.6 χρησιμοποιεί το σφαιρικό υποκατάστατο για να βοηθήσει το βελτιστοποιητή QUATRE να εξερευνήσει ολόκληρες περιοχές. Αφού ο πληθυσμός εξελιχθεί K γενιές με τον βελτιστοποιητή QUATRE, ο μέσος του πληθυσμού αξιολογείται χρησιμοποιώντας την ακριβή πραγματική συνάρτηση προσαρμογής και αποθηκεύεται στη βάση δεδομένων. Από την άλλη πλευρά, το κάτω μέρος του Σχήματος 3.6 χρησιμοποιεί το τοπικό υποκατάστατο για να βοηθήσει το βελτιστοποιητή QUATRE να εκμεταλλευτεί τις υποσχόμενες υποπεριοχές. Αφού ο πληθυσμός εξελιχθεί K γενιές με τον βελτιστοποιητή QUATRE, το άτομο που έχει την καλύτερη εκτιμώμενη τιμή φυσικής κατάστασης αξιολογείται χρησιμοποιώντας την ακριβή πραγματική συνάρτηση προσαρμογής και αποθηκεύεται στη βάση δεδομένων. Στο Σχήμα 3.6, το DB υποδηλώνει μια βάση δεδομένων για την αποθήκευση των σημείων δεδομένων και των αντίστοιχων τιμών προσαρμογής που αξιολογούνται από την ακριβή πραγματική συνάρτηση προσαρμογής. Οι γραμμές με μαύρο βέλος αντιπροσωπεύουν τις ροές του αλγορίθμου, ενώ οι γραμμές με κόκκινο βέλος αντιπροσωπεύουν τις ροές δεδομένων. Στη συνέχεια, εξηγούμε αυτές τις ροές δεδομένων [Liu et al., 2020]:

- ① Τα δειγματικά σημεία που αρχικοποιήθηκαν με τη δειγματοληψία Latin hypercube Sampling (LHS) [Stein, 1987] και ο μέσος όρος αυτών που αξιολογήθηκαν χρησιμοποιώντας την ακριβή πραγματική συνάρτηση φυσικής κατάστασης αποθηκεύονται στη DB.
- ②,⑤ Αφού ο πληθυσμός εξελιχθεί K γενιές, τα κορυφαία ps καλύτερα δεδομένα που επιλέγονται από την τρέχουσα DB χρησιμοποιούνται για την αρχικοποίηση ή την εκ νέου προετοιμασία του πληθυσμού εξέλιξης του SA-QUATRE. Αυτή η προσέγγιση ονομάζεται βέλτιστη (κορυφαία καλύτερη) στρατηγική επανεκκίνησης [Yu et al., 2019]. Αυτή η στρατηγική εκμεταλλεύεται τις πληροφορίες των επ'ακριβώς αξιολογημένων σημείων για να αποφύγει την παραπλάνηση του βελτιστοποιητή QUATRE από τα σφάλματα που προκαλούνται από το κατά προσέγγιση τοπικό προσαρμογής και για να βοηθήσει γρήγορα την αναζήτηση βελτιστοποίησης προς τις υποσχόμενες περιοχές.
- ③ Όλα τα σημεία που είναι αποθηκευμένα στη DB χρησιμοποιούνται για να εκπαιδεύσουν το σφαιρικό RBF υποκατάστατο για την προσέγγιση της προσαρμογής των απογόνων. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι το σφαιρικό RBF μοντέλο κατασκευάζεται ή ενημερώνεται κάθε K γενιές, το οποίο επιτρέπει στον QUATRE να εξερευνήσει πλήρως το τοπικό προσαρμογής.
- ④ Αφού ο πληθυσμός εξελιχθεί K γενιές, ο μέσος του πληθυσμού που δημιουργείται από το σφαιρικό RBF υποκατάστατο και το άτομο με την καλύτερη εκτιμώμενη τιμή προσαρμογής στην τοπική αναζήτηση αξιολογούνται χρησιμοποιώντας την ακριβή πραγματική συνάρτηση προσαρμογής και αποθηκεύονται στη DB. Ο μέσος του πληθυσμού επωφελεί τη σφαιρική αναζήτηση και το καλύτερο άτομο του πληθυσμού βοηθά στην τοπική αναζήτηση.
- ⑥ Επιλέγεται ένας προκαθορισμένος αριθμός τρεχόντων P καλύτερων σημείων για την κατασκευή του τοπικού RBF υποκατάστατου μοντέλου. Ο ψευδοκώδικας του αλγόριθμου SA-QUATRE παρουσιάζεται στον Αλγόριθμο 3.4.

Μετά τη φάση αρχικοποίησης, ο SA-QUATRE εκτελεί το σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο και στρέφεται στο τοπικό υποκατάστατο μοντέλο όταν δεν μπορεί να βρεθεί καμία καλύτερη λύση. Αντίθετα, ο αλγόριθμος επιστρέφει στο σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο όταν δεν μπορεί να επιτευχθεί περαιτέρω βελτίωση μέσω του τοπικού υποκατάστατου μοντέλου. Αυτή η διαδικασία τερματίζεται όταν εξαντληθεί ο μέγιστος αριθμός ακριβών αξιολογήσεων (NFEmax) (κριτήριο διακοπής). Συνδυάζοντας κατάλληλα το σφαιρικό υποκατάστατο με τα τοπικά υποκατάστατα μοντέλα, ο SA-

QUATRE αναμένεται να επιτύχει μια καλή ανταλλαγή μεταξύ της εξερεύνησης και της εκμετάλλευσης και να μπορεί να βρει το βέλτιστο με ακρίβεια [Liu et al., 2020].

Αλγόριθμος 3.4 - Ψευδοκώδικας του SA-QUATRE

Αρχικοποίηση: Παραγωγή αρχικών δειγμάτων με χρήση της LHS μεθόδου, αξιολόγηση της προσαρμογής των αρχικών δειγμάτων και του μέσου των δειγμάτων, κάνοντας χρήση της ακριβής πραγματικής συνάρτησης προσαρμογής και αρχειοθέτηση αυτών στη DB.

$Flag = 1$, $NFE = ps$, $NFEmax = 11D$ or 1000 , $K = 30$;

While ($NFE < NFEmax$) **do**

If ($Flag = 1$) // χρήση του σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου όταν $Flag = 1$

Κατασκευή του σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου, εκπαιδεύοντας το RBF με όλα τα δεδομένα στη DB;

Αρχικοποίηση του εξελικτικού πληθυσμού με τα ps καλύτερης κατάταξης καλύτερα σημεία στη DB, $gen = 0$;

while $gen < K$ **do**

Ανα παραγωγή του δοκιμαστικού πληθυσμού από τον QUATRE αλγόριθμο;

Εκτίμηση της φυσικής κατάστασης (προσαρμογής) κάθε ατόμου στον δοκιμαστικό πληθυσμό από το RBF σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο;

Επιλογή ενός ατόμου με καλύτερη φυσική κατάσταση από τα άτομα του δοκιμαστικού πληθυσμού και του πληθυσμού γονέων, για επιβίωση στην επόμενη γενιά;

$gen = gen + 1$;

End while

Αξιολόγηση της φυσικής κατάστασης του μέσου του πληθυσμού με την ακριβή πραγματική συνάρτηση προσαρμογής και αρχειοθέτηση αυτών στη DB;

$NFE = NFE + 1$;

Εάν η φυσ. κατάσταση του μέσου είναι καλύτερη από τη τρέχουσα καλύτερη φυσ. κατάσταση, ορισμός $Flag = 1$, ειδάλλως ορισμός $Flag = 0$;

Else // χρήση του τοπικού υποκατάστατου μοντέλου όταν $Flag = 0$

Κατασκευή του τοπικού υποκατάστατου μοντέλου, εκπαιδεύοντας το RBF με τα P καλύτερης κατάταξης καλύτερα δείγματα στη DB;

Αρχικοποίηση του εξελικτικού πληθυσμού με τα ps καλύτερης κατάταξης καλύτερα σημεία στη DB, $gen = 0$;

while $gen < K$ **do**

Αναπαραγωγή του δοκιμαστικού πληθυσμού από τον QUATRE αλγόριθμο;

Εκτίμηση της φυσικής κατάστασης κάθε ατόμου στον δοκιμαστικό πληθυσμό από το RBF τοπικό υποκατάστατο μοντέλο;

Επιλογή ενός ατόμου με καλύτερη φυσική κατάσταση από τα άτομα του δοκιμαστικού πληθυσμού και του πληθυσμού γονέων για επιβίωση στην επόμενη γενιά;

$gen = gen + 1$;

End while

Αξιολόγηση της φυσικής κατάστασης του ατόμου με την καλύτερη εκτιμώμενη φυσική κατάσταση στον πληθυσμό, χρησιμοποιώντας την ακριβή πραγματική συνάρτηση προσαρμογής και αρχειοθέτηση αυτών στη DB;

$NFE = NFE + 1$;

Εάν η φυσ. κατάσταση του ατόμου με την καλύτερη εκτιμώμενη φυσ. κατάσταση είναι καλύτερη από τη τρέχουσα καλύτερη φυσ. κατάσταση, ορισμός $Flag = 0$, ειδάλλως ορισμός $Flag = 1$;

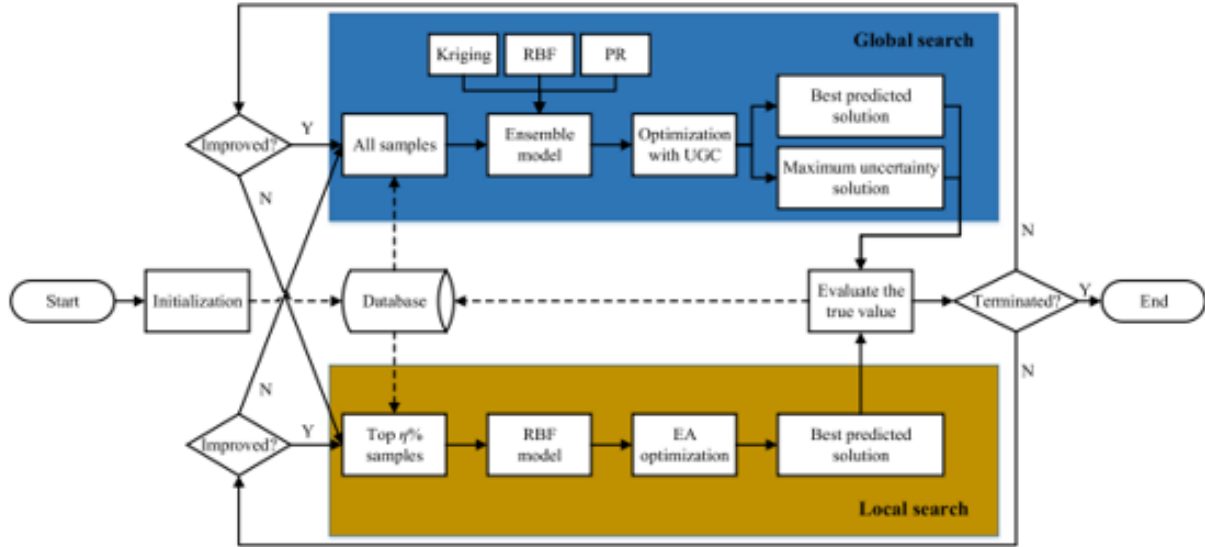
End If

End While

3.4.4 Αλγόριθμος SAEA-UGC

Ο αλγόριθμος SAEA-UGC [Liu et al., 2021] είναι ένας SAEA που στηρίζεται σε ένα νέο κριτήριο συμπλήρωσης, στο οποίο γίνεται ομαδοποίηση βάσει αβεβαιότητας. Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος χωρίζεται επίσης σε δύο φάσεις αναζήτησης στον χώρο σχεδίασης, στην σφαιρική και στην τοπική αναζήτηση. Η σφαιρική αναζήτηση χρησιμοποιεί ένα σύνολο υποκατάστατων μοντέλων για την εκτίμηση των απογόνων και βάσει της διαφοράς των εκτιμήσεων αυτών των μοντέλων ορίζεται και η αβεβαιότητα κάθε λύσης. Η τοπική αναζήτηση χρησιμοποιεί ένα RBF υποκατάστατο μοντέλο για την

εκτίμηση των απογόνων, λόγω της γρήγορης κατασκευής του. Η εναλλαγή μεταξύ αυτών των δύο φάσεων πραγματοποιείται βάσει της απόδοσης κάθε αναζήτησης, π.χ. η σφαιρική ή η τοπική αναζήτηση θα συνεχίζει να εκτελείται εάν μία βελτιωμένη τιμή για το εκάστοτε EOP (Expensive Optimization Problem) μπορεί να βρεθεί σε κάθε επανάληψη, ειδικά θα προκληθεί εναλλαγή μεταξύ της σφαιρικής και τοπικής αναζήτησης [Liu et al., 2021].



Σχήμα 3.7 – Διάγραμμα ροής του SAEA-UGC [Liu et al., 2021].

Αλγόριθμος 3.5 - Ψευδοκώδικας του SAEA-UGC [Liu et al., 2021]

Input: FE_{max} , T_{max} , N_t , N_g , η

Output: x_b

Ορισμός του μετρητή των αξιολογήσεων συνάρτησης $FE = 0$

Initialization

Παραγωγή N_t ατόμων για τον αρχικό πληθυσμό μέσω της LHS μεθόδου

Όλα τα άτομα αξιολογούνται επ'ακριβώς, $FE = FE + N_t$

Τα άτομα και οι τιμές αξιολόγησής τους, χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία της DB

$N_t \leftarrow$ η καλύτερη λύση στη DB

While $FE \leq FE_{max}$ **do**

Global search

$[x_g, x_u] \leftarrow$ Global search (DB, N_g , T_{max})

Απόκτηση των $f(x_g)$ και $f(x_u)$ μέσω της συνάρτησης αξιολόγησης και προσθήκη αυτών στη DB,

$FE = FE + 2$

if $f(x_g) < f(x_b)$ **then**

Αντικατάσταση του x_b με το x_g

end if

while $x_g < x_b$ **do**

Local search

$x_l \leftarrow$ Local search (DB, T_{max} , η)

Απόκτηση του $f(x_l)$ μέσω της συνάρτησης αξιολόγησης και προσθήκη αυτού στη DB, $FE = FE + 1$

if $f(x_l) < f(x_b)$ **then**

Αντικατάσταση του x_b με το x_l

end if

End While

$x_b \leftarrow$ η καλύτερη λύση στη DB

Όπως παρατηρούμε από τον αλγόριθμο 3.5, ο SAEA-UGC αποτελείται από τρία κύρια μέρη, την αρχικοποίηση, την σφαιρική αναζήτηση και την τοπική αναζήτηση. Στην αρχικοποίηση, ο αριθμός

αξιολογήσεων FE ορίζεται ως 0 και έπειτα χρησιμοποιείται η μέθοδος LHS για την τυχαία αναπαραγωγή N_t τυχαίων διαφοροποιημένων λύσεων, οι οποίες διαμορφώνουν τον αρχικό πληθυσμό. Όλες οι λύσεις στον αρχικό πληθυσμό αξιολογούνται χρησιμοποιώντας την πραγματική αντικειμενική συνάρτηση και αποθηκεύονται στη βάση δεδομένων εκπαίδευσης (DB), η οποία χρησιμοποιείται για την εκπαίδευση των μοντέλων σφαιρικής και τοπικής αναζήτησης. Αυτό οδηγεί στην αύξηση του μετρητή FE κατά N_t . Στη συνέχεια, η εξελικτική αναζήτηση, συμπεριλαμβανομένων και των σφαιρικών και τοπικών αναζητήσεων, εκτελείται επαναληπτικά έως ότου η τιμή FE ξεπεράσει την προκαθορισμένη τιμή FE_{max} [Liu et al., 2021].

Σφαιρική Αναζήτηση

Η σφαιρική αναζήτηση αρχικά βρίσκει την καλύτερη λύση από τη DB ως x_b . Δύο διανύσματα βρίσκονται (x_g, x_u) με την χρήση της σφαιρικής αναζήτησης (Αλγόριθμος 3.6) για την εξερεύνηση ολόκληρου του χώρου σχεδίασης με την βοήθεια ενός συνόλου υποκατάστατων μοντέλων. Αυτές οι 2 λύσεις αξιολογούνται επ'ακριβώς και εισάγονται στη DB. Εάν η x_g είναι μικρότερη της καλύτερης λύσης (x_b), τότε η x_g αντικαθιστά την x_b . Η προαναφερόμενη διαδικασία εξακολουθεί να εκτελείται μέχρις ότου να μην μπορεί να βρεθεί καλύτερη λύση και επομένως ο αλγόριθμος θα στραφεί στην τοπική αναζήτηση.

Η αβεβαιότητα κάθε λύσης ορίζεται ως η μέγιστη διαφορά μεταξύ των εκτιμώμενων τιμών από τα τρία υποκατάστατα μοντέλα, η οποία μπορεί να διατυπωθεί ως εξής:

$$U_{unc}(x) = \max (\hat{f}_i(x) - \hat{f}_j(x)) \quad 3.8$$

όπου $1 \leq i, j \leq 3$, αμφότερα η εκτιμώμενη τιμή φυσικής κατάστασης και η εκτιμώμενη αβεβαιότητα που αποκτούνται από το σφαιρικό μοντέλο, θα εφαρμοσθούν στην τοπική αναζήτηση.

Αλγόριθμος 3.6 - Σφαιρική Αναζήτηση

Input: DB, T_{max} , N_g

Output: x_g , x_u

Κατασκευή ενός συνόλου υποκατάστατων μοντέλων βάσει της DB

Παραγωγή N_g λύσεων για τον αρχικό πληθυσμό P_g μέσω της LHS μεθόδου

Ορισμός του μετρητή γενεών $t = 0$

while $t \leq T_{max}$ **do**

 Παραγωγή του C_g πληθυσμού απογόνων από τον P_g με χρήση των εξελικτικών τελεστών

 Απόκτηση των εκτιμώμενων τιμών και των τιμών αβεβαιότητας για τα $C_g \cup P_g$

 Κατανομή όλων των λύσεων στους $C_g \cup P_g$ με βάση την αβεβαιότητα

 Όμοιος διαχωρισμός των κατανεμημένων λύσεων σε Q ομάδες

 Επιλογή της καλύτερης εκτιμώμενης λύσης από κάθε ομάδα

 Ανανέωση του P_g με αυτές τις επιλεγμένες λύσεις

$t = t + 1$

end while

$x_g \leftarrow$ η καλύτερη εκτιμώμενη λύση στον P_g

$x_u \leftarrow$ η πιο αβέβαιη λύση στον P_g

Τοπική Αναζήτηση

Η τοπική αναζήτηση εστιάζει στην περαιτέρω βελτίωση της απόδοσης του SAEA-UGC [Liu et al., 2021]. Αρχικά, μία λύση x_l αποκτάται από την τοπική αναζήτηση (Αλγόριθμος 3.7), στην οποία χρησιμοποιείται το RBF μοντέλο για την προ-αξιολόγηση των λύσεων. Γίνεται επ'ακριβώς αξιολόγηση της λύσης x_l και αποθηκεύεται στη DB. Εάν η x_l είναι μικρότερη της καλύτερης λύσης (x_b), τότε η x_l αντικαθιστά την x_b . Η διαδικασία της τοπικής αναζήτησης συνεχίζει να εκτελείται μέχρις ότου να μην μπορεί να βρεθεί καλύτερη λύση και επομένως ο αλγόριθμος θα στραφεί στην σφαιρική αναζήτηση εάν ο αριθμός FE είναι μικρότερος από τον FE_{max} .

Αλγόριθμος 3.7 - Τοπική Αναζήτηση

Input: DB, T_{max}, η

Output: x_l

Κατανομή όλων των δειγμάτων στη DB με βάση των πραγματικών τιμών συνάρτησης τους

Δημιουργία της DB_{top} χρησιμοποιώντας τα $\eta\%$ κορυφαίας κατάταξης δείγματα της DB

$N_l \leftarrow$ το μέγεθος της DB_{top}

Κατασκευή ενός RBF υποκατάστατου μοντέλου βάσει της DB_{top}

Δημιουργία του αρχικού πληθυσμού P_L από την DB_{top}

while $t \leq T_{max}$ **do**

 Παραγωγή του C_L πληθυσμού απογόνων από τον P_L με χρήση των εξελικτικών τελεστών

 Απόκτηση των εκτιμώμενων τιμών για τα $C_L \cup P_L$

 Κατανομή όλων των λύσεων στους $C_L \cup P_L$ βάσει των εκτιμώμενων τιμών τους

 Επιλογή των N_L κορυφαίων λύσεων από τις κατανεμημένες λύσεις

 Ανανέωση του P_L με αυτές τις επιλεγμένες λύσεις

$t = t + 1$

end while

$x_l \leftarrow$ η καλύτερη εκτιμώμενη λύση στον P_L

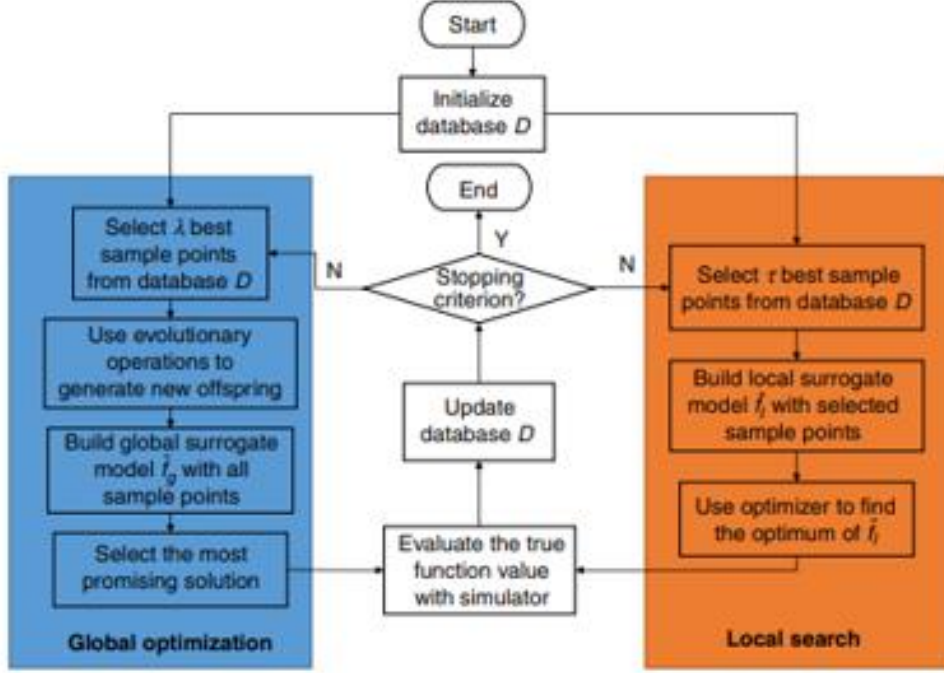
Σε γενικές γραμμές, ο αλγόριθμος ξεκινάει με την αρχικοποίηση του χώρου και της βάσης δεδομένων και στην συνέχεια προβαίνει στην σφαιρική αναζήτηση [Liu et al., 2021]. Η σφαιρική αναζήτηση εκτελείται μέχρις ότου να μην μπορεί να πραγματοποιήσει περαιτέρω βελτίωση και ο αλγόριθμος αλλάζει την αναζήτηση σε τοπική. Αντίστοιχα, εκτελείται η τοπική αναζήτηση μέχρι να μην μπορεί να αποκτηθεί καλύτερη λύση και ο SAEA-UGC θα γυρίσει στην σφαιρική αναζήτηση. Ο αλγόριθμος τρέχει με αυτό το απλό μοτίβο μέχρι ο αριθμός των ακριβών αξιολογήσεων να εξαντληθεί. Το διάγραμμα τής του SAEA-UGC απεικονίζεται στο Σχήμα 3.7.

3.4.5 Αλγόριθμος GLSADE

Ο αλγόριθμος GLSADE (Global and Local Surrogate-model-Assisted Differential Evolution) [Chen et al., 2020] συνδυάζει ένα σφαιρικό και ένα τοπικό υποκατάστατο μοντέλο για την εξισορρόπηση μεταξύ της αποδοτικότητας και της αποτελεσματικότητας του αλγορίθμου. Αποτελείται από δύο φάσεις: μία με σφαιρικά υποκατάστατα υποβοηθούμενη φάση, στην οποία ο DE χρησιμοποιείται για τη δημιουργία πολλαπλών απογόνων και το σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο χρησιμοποιείται για την προεπισκόπηση του πιο υποσχόμενου ατόμου και μία με τοπικά υποκατάστατα υποβοηθούμενη φάση, στην οποία ο DE χρησιμοποιείται για την αναζήτηση του βέλτιστου του υποκατάστατου. Η συνεργασία μεταξύ σφαιρικής βελτιστοποίησης και τοπικής αναζήτησης βοηθά τη διαδικασία βελτιστοποίησης στη γρήγορη σύγκλιση σε ένα ολικό βέλτιστο.

Το διάγραμμα ροής του GLSADE παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.8. Στην αρχή της διαδικασίας βελτιστοποίησης τα δειγματικά σημεία δημιουργούνται μέσω της LHS μεθόδου. Η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης των δειγματικών σημείων υπολογίζεται από τον αριθμητικό προσομοιωτή και δημιουργείται η βάση δεδομένων $DB = \{x^i, y^i\}_{i=1}^N$. Στη συνέχεια, οι **GSAPM** και **LSASM** συνεργάζονται για την αναζήτηση του ολικού βέλτιστου της αντικειμενικής συνάρτησης, η οποία μπορεί να εξισορροπήσει την εξερεύνηση και την εκμετάλλευση της διαδικασίας βελτιστοποίησης. Στη με σφαιρικά υποκατάστατα υποβοηθούμενη φάση, το σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο \hat{f}_g είναι κατασκευασμένο με όλα τα δειγματικά σημεία της βάσης δεδομένων DB . Δημιουργούνται πολλαπλοί απόγονοι χρησιμοποιώντας τους DE τελεστές και ο καλύτερος απόγονος προεπιλέγεται από το υποκατάστατο μοντέλο \hat{f}_g ως το επόμενο δειγματικό σημείο προς αξιολόγηση. Στη με τοπικά υποκατάστατα υποβοηθούμενη φάση αναζήτησης, επιλέγονται τα κορυφαίας κατάταξης δειγματικά σημεία για τη δημιουργία του τοπικού υποκατάστατου μοντέλου \hat{f}_l και το βέλτιστο του τοπικού υποκατάστατου μοντέλου, το οποίο είναι το επόμενο δειγματικό σημείο προς αξιολόγηση, παρέχεται από τον DE βελτιστοποιητή. Τόσο στη σφαιρική φάση όσο και στην τοπική φάση αναζήτησης,

επιλέγεται μόνο ένα δειγματικό σημείο σε κάθε κύκλο και η πραγματική τιμή συνάρτησης αξιολογείται με τον αριθμητικό προσομοιωτή. Μετά την ενσωμάτωση των GSAPM και LSASM πλαισίων για την επίλυση της βελτιστοποίησης, όλες οι λύσεις που έχουν αξιολογηθεί στις δύο φάσεις αποθηκεύονται στην ίδια βάση δεδομένων DB , που σημαίνει ότι μπορούν να μοιραστούν τα υποσχόμενα δειγματικά σημεία. Ο ψευδοκώδικας του GLSADE παρουσιάζεται στον Αλγόριθμο 3.8. Αξίζει να σημειωθεί ότι μπορεί να γίνει εκμετάλλευση παράλληλης υπολογιστικής ισχύος κατά τη διάρκεια της διαδικασίας, επειδή η διαδικασία βελτιστοποίησης δεν είναι σειριακή.



Σχήμα 3.8 – Διάγραμμα ροής του GLSADE [Chen et al., 2020].

Αλγόριθμος 3.8 – Ψευδοκώδικας του GLSADE [Chen et al., 2020].

Initialization: Παραγωγή τ δειγματικών σημείων, χρησιμοποιώντας την LHS μέθοδο από τον χώρο σχεδίασης, ακριβή αξιολόγηση αυτών των σημείων και αρχειοθέτηση αυτών στη βάση δεδομένων DB .

While το κριτήριο διακοπής δεν ικανοποιείται:

Σφαιρικά υποκατάστατα-βοηθούμενη φάση

Επιλογή των NP καλύτερων δειγματικών σημείων x_1, x_2, \dots, x_{NP} από τη DB .

Χρήση των εξελικτικών τελεστών για την αναπαραγωγή NP νέων απογόνων u_1, u_2, \dots, u_{NP} .

Κατασκευή σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου \hat{f}_g με τη μέθοδο all-DB.

Προεπισκόπηση του καλύτερου ατόμου u_{best} από τους λ νέους απογόνους u_1, u_2, \dots, u_{NP} με το \hat{f}_g .

Ακριβή αξιολόγηση του u_{best} .

Ανανέωση της βάσης δεδομένων DB .

Τοπικά υποκατάστατα-βοηθούμενη φάση

Επιλογή των τ καλύτερων δειγματικών σημείων x_1, x_2, \dots, x_τ από τη DB .

Κατασκευή του τοπικού υποκατάστατου μοντέλου \hat{f}_l με τα τ επιλεγμένα σημεία (μέθοδος τ -Best) και εύρεση του τοπικού καλά-ελεγχόμενου εύρους $[lb_l, ub_l]$.

Εύρεση του βέλτιστου του \hat{f}_l με την διαφορική εξέλιξη στην τοπική υποσχόμενη καλά-ελεγχόμενη περιοχή.

Ακριβή αξιολόγηση του βέλτιστου.

Ανανέωση της βάσης δεδομένων DB .

End While

Output

3.4.6 Αλγόριθμος EHSDE

Ο αλγόριθμος EHSDE (Efficient Hierarchical Surrogate-assisted Differential Evolutionary) [Chen et al., 2021] αποτελείται από δύο φάσεις αναζήτησης. Την με σφαιρικά υποκατάστατα υποβοηθούμενη αντικατοπτρική φάση, στην οποία ο καλύτερος και ο πιο αβέβαιος απόγονος αναγνωρίζονται αντίστοιχα. Ο καλύτερος απόγονος αντικατοπτρίζεται από ένα σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο που δημιουργήθηκε χρησιμοποιώντας ένα RBFN με όλα τα δειγματικά σημεία, ενώ ο πιο αβέβαιος απόγονος αντικατοπτρίζεται με την χρήση της Ευκλείδειας απόστασης μεταξύ του απογόνου και των ήδη υπάρχων δειγματικών σημείων. Η 2^η φάση είναι η με υποκατάστατα υποβοηθούμενη τοπική αναζήτηση, η οποία κάνει χρήση δύο τοπικών υποκατάστατων μοντέλων. Αυτά τα μοντέλα δημιουργούνται με τα πιο υποσχόμενα δειγματικά σημεία και τα δειγματικά σημεία που περιβάλλουν την καλύτερη λύση αντίστοιχα ώστε να επιταχύνουν την ταχύτητα σύγκλισης. Με τον συνδυασμό αυτών των δύο στρατηγικών, ο εξελικτικός αλγόριθμος επιταχύνει τη σύγκλιση.

Με σφαιρικά υποκατάστατα υποβοηθούμενη αντικατοπτρική φάση

Η με σφαιρικά υποκατάστατα υποβοηθούμενη αντικατοπτρική στρατηγική στοχεύει στο να εξερευνήσει την άγνωστη περιοχή σε ολόκληρο τον χώρο σχεδίασης. Ο ψευδοκώδικας παρουσιάζεται στον Αλγόριθμο 3.9. Τα NP καλύτερα χρωμοσώματα επιλέγονται από την βάση δεδομένων DB ως ο τωρινός πληθυσμός (P). Στη συνέχεια NP δοκιμαστικά διανύσματα (απόγονοι) αναπαράγονται χρησιμοποιώντας τον $DE/best/1$ τελεστή διαφορικής μετάλλαξης. Ακολούθως, το σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο (RBF) δημιουργείται με βάση όλα τα δειγματικά σημεία της βάσης δεδομένων (DB). Γίνεται εύρεση του καλύτερου και του πιο αβέβαιου απογόνου. Ο καλύτερος απόγονος επιλέγεται σύμφωνα με την εκτίμηση του υποκατάστατου μοντέλου:

$$u_{best} = \underset{u \in P}{\operatorname{argmin}} \hat{f}_g(u) \quad 3.9$$

όπου, u_{best} είναι το καλύτερο δειγματικό σημείο. Οι σκοποί του κριτηρίου συμπλήρωσης με βάση την αβεβαιότητα, είναι η μείωση του κινδύνου στην εξαγωγή τοπικού βελτίστου και η βελτίωση της ποιότητας του υποκατάστατου μοντέλου. Η αβεβαιότητα των απογόνων $g(u)$, εκτιμάται σύμφωνα με την ελάχιστη Ευκλείδεια απόσταση μεταξύ των απογόνων και των ήδη υπαρχόντων δειγματικών σημείων, όπως ακολούθως:

$$g(u) = \min_{x \in D} (\operatorname{dis}(u, x)) \quad 3.10$$

όπου, $\operatorname{dis}(u, x)$ ορίζεται ως η Ευκλείδεια απόσταση μεταξύ των απογόνων u και των ήδη αξιολογημένων δειγματικών σημείων x . Ο πιο αβέβαιος απόγονος επιλέγεται με την ακόλουθη εξίσωση:

$$u_{unc} = \underset{u \in P}{\operatorname{argmax}} g(u) \quad 3.11$$

όπου, u_{unc} είναι το πιο αβέβαιο δειγματικό σημείο που επιλέχθηκε. Μετά την εύρεση του καλύτερου και του πιο αβέβαιου απογόνου, εφαρμόζονται ακριβείς αξιολογήσεις στα προαναφερόμενα σημεία και χρησιμοποιούνται για την ανανέωση της βάσης δεδομένων DB .

Αλγόριθμος 3.9 – Ψευδοκώδικας του σφαιρικού αντικατοπτρικού αλγορίθμου

Η βάση δεδομένων DB αποτελείται από τα αξιολογημένα δειγματικά σημεία και τις αντίστοιχες τιμές της φυσικής κατάστασής τους;

Επιλογή των NP καλύτερων δειγματικών σημείων από τη DB ως ο τωρινός πληθυσμός $P = \{u_1, u_2, \dots, u_{NP}\}$;

Παραγωγή NP δοκιμαστικών διανυσμάτων u_1, u_2, \dots, u_{NP} με χρήση της $DE/best/1$ στρατηγικής μετάλλαξης;

Κατασκευή του σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου \hat{f}_g με όλα τα δειγματικά σημεία στη DB ;

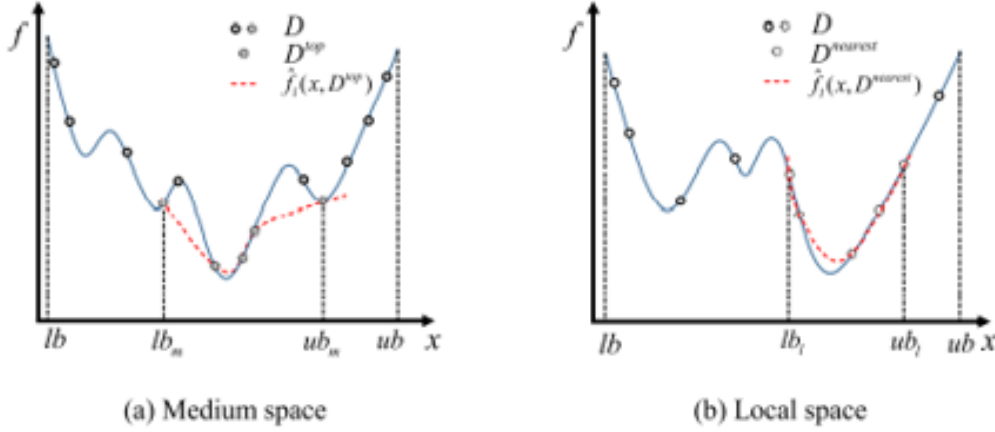
Προεπισκόπηση του καλύτερου ατόμου u_{best} από τα NP δοκιμαστικά διανύσματα με το \hat{f}_g ;

Προεπισκόπηση του πιο αβέβαιου ατόμου u_{unc} ;

Output: u_{best}, u_{unc}

Με υποκατάστατα υποβοηθούμενη τοπική αναζήτηση

Η με υποκατάστατα υποβοηθούμενη στρατηγική τοπικής αναζήτησης στοχεύει στην επιτάχυνση της σύγκλισης της διαδικασίας βελτιστοποίησης. Ο ψευδοκώδικας της τοπικής αναζήτησης παρουσιάζεται στον Αλγόριθμο 3.10. Σε αυτήν την φάση, δημιουργούνται δύο τοπικά υποκατάστατα μοντέλα σε δύο υποχώρους, με τα πιο υποσχόμενα δειγματικά σημεία και με τα δειγματικά σημεία που περιτριγυρίζουν την τρέχουσα καλύτερη λύση, αντίστοιχα. Οι δύο υποχώροι μπορούν να διαιρεθούν σε έναν μεσαίο και έναν τοπικό χώρο, αντίστοιχα με το μέγεθος του υποχώρου. Το Σχήμα 3.9 δείχνει το σχηματικό διάγραμμα των δύο τοπικών υποκατάστατων μοντέλων.



Σχήμα 3.9 – Το σχηματικό διάγραμμα της δομής των δύο τοπικών υποκατάστατων μοντέλων [Chen et al., 2021].

Για τον μεσαίο χώρο, επιλέγονται τα τ καλύτερα σε συνάρτηση προσαρμογής δειγματικά σημεία δεδομένων εκπαίδευσης από την βάση δεδομένων DB. Τα άνω και κάτω όρια του μεσαίου χώρου προσδιορίζονται ως εξής:

$$\begin{cases} lb_m^i = \min(x_1^i, x_2^i, \dots, x_\tau^i) \\ ub_m^i = \max(x_1^i, x_2^i, \dots, x_\tau^i) \end{cases} \quad 3.12$$

όπου, lb_m^i και ub_m^i ορίζουν το κάτω όριο και το άνω όριο της i -οστής μεταβλητής σχεδίασης (γονιδίου) από τον μεσαίο χώρο αντίστοιχα. Το κριτήριο συμπλήρωσης της τοπικής αναζήτησης χρησιμοποιείται για τον εντοπισμό του βέλτιστου του υποκατάστατου μοντέλου στον μεσαίο χώρο:

$$x_{best1} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \hat{f}_m(x) \quad 3.13$$

όπου x_{best1} είναι το δειγματικό σημείο προς αξιολόγηση και \hat{f}_m είναι το υποκατάστατο μοντέλο στον μεσαίο χώρο.

Για τον τοπικό χώρο αναζήτησης, τα δειγματικά σημεία εκπαίδευσης, τα οποία βρίσκονται πιο κοντά στο τρέχον βέλτιστο δειγματικό σημείο, επιλέγονται από τη βάση δεδομένων DB. Τα κάτω και άνω όρια του τοπικού χώρου προσδιορίζονται όπως ακολούθως:

$$\begin{cases} lb_l^i = \min(x_1^i, x_2^i, \dots, x_\tau^i) \\ ub_l^i = \max(x_1^i, x_2^i, \dots, x_\tau^i) \end{cases} \quad 3.14$$

όπου, lb_l^i και ub_l^i ορίζουν το κάτω όριο και το άνω όριο της i -οστής μεταβλητής σχεδίασης (γονιδίου) από τον τοπικό χώρο, αντίστοιχα. Το κριτήριο συμπλήρωσης της τοπικής αναζήτησης χρησιμοποιείται για τον εντοπισμό του βέλτιστου του υποκατάστατου μοντέλου στον τοπικό χώρο:

$$x_{best2} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \hat{f}_l(x) \quad 3.15$$

όπου x_{best2} είναι το δειγματικό σημείο προς αξιολόγηση και \hat{f}_l το υποκατάστατο μοντέλο στον τοπικό χώρο. Εφόσον έχουν προσδιοριστεί οι δύο υποψήφιες λύσεις x_{best1} και x_{best2} ελαχιστοποιώντας τα δύο υποκατάστατα χρησιμοποιώντας διαφορική εξέλιξη (DE), οι τιμές προσαρμογής αξιολογούνται και έπειτα η βάση δεδομένων DB ανανεώνεται.

Αλγόριθμος 3.10 – Ψευδοκώδικας της τοπικής αναζήτησης

Η βάση δεδομένων DB αποτελείται από τα αξιολογημένα δειγματικά σημεία και τις αντίστοιχες τιμές της φυσικής κατάστασης τους;

Μεσαίος χώρος

Επιλογή των τ καλύτερων δειγματικών σημείων x_1, x_2, \dots, x_τ από τη βάση δεδομένων DB;

Κατασκευή του υποκατάστατου μοντέλου \hat{f}_m με τα επιλεγμένα σημεία;

Υπολογισμός του μεσαίου εύρους $[lb_m, ub_m]$;

Απόκτηση του υποψήφιου σχεδίου x_{best1} ελαχιστοποιώντας το \hat{f}_m χρησιμοποιώντας διαφορική εξέλιξη στην υποσχόμενη περιοχή;

Τοπικός χώρος

Επιλογή των τ κοντινότερων δειγματικών σημείων εκπαίδευσης ως προς τη τωρινή καλύτερη λύση από τη βάση δεδομένων DB;

Κατασκευή του υποκατάστατου μοντέλου \hat{f}_l με τα επιλεγμένα σημεία;

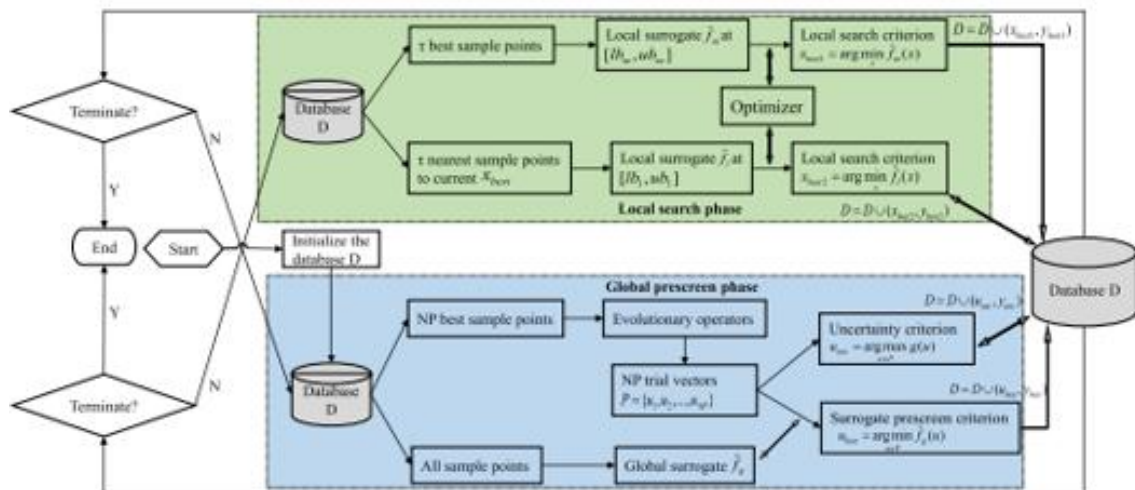
Υπολογισμός του τοπικού εύρους $[lb_l, ub_l]$;

Απόκτηση του υποψήφιου σχεδίου x_{best2} ελαχιστοποιώντας το \hat{f}_l χρησιμοποιώντας διαφορική εξέλιξη στην υποσχόμενη περιοχή;

Output: x_{best1}, x_{best2}

Framework of EHSDE

Ο προτεινόμενος αλγόριθμος EHSDE συνδυάζει το σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο με το τοπικό υποκατάστατο μοντέλο με έναν ιεραρχικό τρόπο, ώστε να επιταχυνθεί η σύγκλιση. Το πλαίσιο της ιεραρχικής βελτιστοποίησης παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.10. Αρχικά, τ δειγματικά σημεία αναπαράγονται χρησιμοποιώντας την LHS μέθοδο από τον χώρο σχεδίασης. Στη συνέχεια, η συνάρτηση προσαρμογής αξιολογείται και η βάση δεδομένων $DB = \{x_i, y_i\}_{i=1}^N$ ανανεώνεται. Έπειτα, μια με σφαιρικά υποκατάστατα υποβοηθούμενη αντικατόπριση και μια τοπική αναζήτηση, διαδοχικά οδηγούν τον εξελικτικό αλγόριθμο υπό συνεργασία στην επιτάχυνση της σύγκλισης.



Σχήμα 3.10 – Διάγραμμα ροής του EHSDE [Chen et al., 2021].

Ο αλγόριθμος 3.11 δείχνει την σχολαστική διαδικασία της EHSDE. Είναι αξιοσημείωτο να αναφέρουμε ότι είναι μη χρηστική η κατασκευή ενός υψηλής-ποιότητας υποκατάστατου μοντέλου σε έναν υψηλής-διάστασης χώρο λύσεων με πολύ περιορισμένο αριθμό δειγματικών σημείων. Άλλωστε, όσο ο αριθμός των δειγματικών σημείων εκπαίδευσης αυξάνεται, η διαδικασία εκπαίδευσης του υποκατάστατου

μοντέλου γίνεται χρονοβόρα. Επιπρόσθετα, αποκτώντας τις υποψήφιες λύσεις ελαχιστοποιώντας το υποκατάστατο μοντέλο με χρήση της διαφορικής εξέλιξης (DE), είναι επίσης χρονοβόρα διαδικασία. Επομένως, για την μείωση του υπολογιστικού κόστους της διαδικασίας βελτιστοποίησης και για την βελτίωση της σύγκλισης, το σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο μαζί με όλα τα δειγματικά σημεία απασχολεί την αντικατοπτρική στρατηγική και το τοπικό υποκατάστατο μοντέλο μαζί με έναν προκαθορισμένο αριθμό δειγματικών σημείων απασχολεί την στρατηγική τοπικής αναζήτησης σε έναν μειωμένο χώρο.

Αλγόριθμος 3.11 – Ψευδοκώδικας του EHSDE [Chen et al., 2021]

Initialization: Παραγωγή τ δειγματικών σημείων μέσω της LHS μεθόδου από τον χώρο σχεδίασης, αξιολόγηση των τιμών φυσικής κατάστασης και προσθήκη αυτών στη βάση δεδομένων DB;

$FES = \tau$;

While $FES < FES_{max}$

Σφαιρικά υποκατάστατα-βοηθούμενη αντικατοπτρική φάση

Επιλογή των NP καλύτερων δειγματικών σημείων από τη DB ως ο τωρινός πληθυσμός $P = \{u_1, u_2, \dots, u_{NP}\}$;

Παραγωγή NP δοκιμαστικών διανυσμάτων u_1, u_2, \dots, u_{NP} με χρήση της DE/best/1 στρατηγικής μετάλλαξης;

Κατασκευή του σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου \hat{f}_g με όλα τα δειγματικά σημεία στη DB;

Προεπισκόπηση του καλύτερου ατόμου u_{best} από τα NP δοκιμαστικά διανύσματα με το \hat{f}_g ;

Προεπισκόπηση του πιο αβέβαιου ατόμου u_{unc} ;

Αξιολόγηση της τιμής φυσικής κατάστασης των u_{best} και u_{unc} ;

$FES = FES + 2$;

if $f(u_{best}) < f(x_{best})$

$x_{best} = u_{best}$;

end if

if $f(u_{unc}) < f(x_{best})$

$x_{best} = u_{unc}$;

end if

Προσθήκη των αξιολογημένων σημείων στη βάση δεδομένων DB;

Φάση τοπικής αναζήτησης

Επιλογή των τ καλύτερων δειγματικών σημείων x_1, x_2, \dots, x_τ από τη βάση δεδομένων DB;

Κατασκευή του υποκατάστατου μοντέλου \hat{f}_m με τα επιλεγμένα σημεία;

Υπολογισμός του μεσαίου εύρους $[lb_m, ub_m]$;

Απόκτηση του υποψήφιου σχεδίου x_{best1} ελαχιστοποιώντας το \hat{f}_m χρησιμοποιώντας διαφορική εξέλιξη στην υποσχόμενη περιοχή;

Τοπικός χώρος

Επιλογή των τ κοντινότερων δειγματικών σημείων εκπαίδευσης ως προς το τη τωρινή καλύτερη λύση από τη βάση δεδομένων DB;

Κατασκευή του υποκατάστατου μοντέλου \hat{f}_l με τα επιλεγμένα σημεία;

Υπολογισμός του τοπικού εύρους $[lb_l, ub_l]$;

Απόκτηση του υποψήφιου σχεδίου x_{best2} ελαχιστοποιώντας το \hat{f}_l χρησιμοποιώντας διαφορική εξέλιξη στην υποσχόμενη περιοχή;

Αξιολόγηση της τιμής της φυσικής κατάστασης των x_{best1} και x_{best2} ;

if $f(x_{best1}) < f(x_{best})$

$x_{best} = x_{best1}$;

end if

if $f(x_{best2}) < f(x_{best})$

$x_{best} = x_{best2}$;

end if

Προσθήκη των αξιολογημένων σημείων στη βάση δεδομένων DB;

End While

Output

3.5 ΣΤΡΑΤΗΓΙΚΕΣ ΜΕΤΑΛΛΑΞΗΣ ΓΙΑ ΑΝΑΖΗΤΗΣΗ

Μια περαιτέρω ειδίκευση στην αναζήτηση ενός SAEA πραγματοποιείται με την εναλλαγή στρατηγικών μετάλλαξης, ώστε να καθοδηγηθεί η αναζήτηση σε διαφορετικές φάσεις. Έχουν αναπτυχθεί διάφοροι αλγόριθμοι για τον προγραμματισμό της εναλλαγής των στρατηγικών μετάλλαξης, με σκοπό την καθοδήγηση της αναζήτησης, όπως ο PAGHO [Liu et al., 2018], ο SGDE [Rakhsani et al., 2019], ο GLoSADE [Wang et al., 2019], ο TASEA [Yang et al., 2019] ο PSAED [Akinsolu et al., 2019] και ο ASDEMO [Akinsolu et al., 2020].

3.5.1 Roulette Wheel Selection

Η Roulette Wheel Selection ή αλλιώς Fitness proportionate selection [Goldberg et al., 1991], είναι ένας τελεστής που χρησιμοποιείται στους Γενετικούς Αλγορίθμους για την επιλογή των λύσεων που θα επιβιώσουν στην επόμενη γενιά. Κάποιος μπορεί να τον φανταστεί όπως τη ρουλέτα σε ένα καζίνο. Στους ΕΑ χρησιμοποιείται για την επιλογή της κατάλληλης στρατηγικής μετάλλαξης για την αναζήτηση που θέλει να επιτύχει ο αλγόριθμος. Παρακάτω παρουσιάζεται η μεθοδολογία της, όπως χρησιμοποιείται στον **PAGHO** αλγόριθμο [Liu et al., 2018].

Για κάθε πληθυσμό απογόνων $i = 1, 2, \dots, h$.

- Βήμα 1.* Εάν ο αλγόριθμος βρίσκεται εντός της περιόδου μάθησης, δηλαδή ο τρέχων αριθμός επαναλήψεων είναι μικρότερος από ένα κατώτατο όριο L (20-40 συνήθως), τότε το ποσοστό χρήσης των $DE/rand/1$ (1), $DE/current-to-best/1$ (2) και $DE/rand/2$ (3) στρατηγικών μετάλλαξης είναι 1/3. Διαφορετικά γίνεται χρήση των τιμών στο Βήμα 5.
- Βήμα 2.* Εκτέλεση της Roulette Wheel Selection [Goldberg et al., 1991], με βάση τους ρυθμούς για τον προσδιορισμό μιας DE μεθόδου μετάλλαξης και δημιουργία ενός πληθυσμού απογόνων C_i που περιλαμβάνει λ απογονικές λύσεις.
- Βήμα 3.* Υπολογισμός της ενδιάμεσου των λ απογονικών λύσεων. Επιλογή των τ πλησιέστερων λύσεων στην ενδιάμεσο (μέθοδος PAS) από τη βάση δεδομένων (με βάση την Ευκλείδεια απόσταση) και των τιμών προσαρμογής τους (επιδόσεις) ως προς τα δεδομένα εκπαίδευσης για τη δημιουργία ενός GP υποκατάστατου μοντέλου.
- Βήμα 4.* Σύγκριση της εκτιμώμενης τιμής κάθε λύσης του C_i και της τρέχουσας καλύτερης λύσης. Προσθήκη του αριθμού των λύσεων που είναι καλύτερες από την τρέχουσα καλύτερη λύση στο N_s [ο αριθμός των επιτυχιών των (1), (2) και (3)] και προσθήκη του λ στο N_u [ο αριθμός των χρήσεων των (1), (2) και (3)], μέχρι να δημιουργηθούν όλες οι ομάδες απογόνων.

Τέλος επανάληψης

- Βήμα 5.* Ενημέρωση των ποσοστών χρήσης των $DE/rand/1$ (1), $DE/current-to-best/1$ (2) και $DE/rand/2$ (3) από τα N_s και N_u με βάση τις προηγούμενες L επαναλήψεις. Ενημέρωση του αριθμού των επαναλήψεων.

Παρατηρείται ότι αρχικά κάθε στρατηγική μετάλλαξης έχει την ίδια πιθανότητα επιλογής και στη συνέχεια τα ποσοστά τους αλλάζουν ανάλογα με την επίδοση που έχουν. Κάθε φορά που ένας απόγονος εκτιμάται ως καλύτερος από τον γονέα του, τότε ο μετρητής N_s αυξάνεται κατά ένα. Το νέο ποσοστό της εκάστοτε στρατηγικής μετάλλαξης ισούται με N_s/N_u , όπου N_u είναι ο αριθμός των χρήσεων της εκάστοτε στρατηγικής. Δηλαδή με το πέρασμα των γενεών, οι στρατηγικές με τις καλύτερες επιδόσεις εμφανίζονται συχνότερα [Liu et al., 2018].

Η επιλογή της σωστής στρατηγικής μετάλλαξης DE αντισταθμίζει την ποικιλομορφία του πληθυσμού, διατηρώντας ταυτόχρονα την ταχύτητα σύγκλισης. Κάθε τελεστής μετάλλαξης DE ανταλλάσσει την ικανότητα εξερεύνησης (ποικιλομορφία του πληθυσμού) και την ταχύτητα σύγκλισης σε κάποιο βαθμό. Μεταξύ των στρατηγικών που χρησιμοποιούνται παραπάνω, η $DE/current-to-best/1$ έχει τη λιγότερη εκτίμηση διαφορετικότητας αλλά η ταχύτητα σύγκλισης της είναι η ταχύτερη, η $DE/rand/2$ δίνει

έμφαση στην προώθηση της ποικιλομορφίας του πληθυσμού αλλά με την πιο αργή ταχύτητα σύγκλισης. Η DE/rand/1 βρίσκεται στη μέση και από τις δύο απόψεις [Liu et al., 2018].

Στους αλγόριθμους PSAED [Akinsolu et al., 2019] και ASDEMO [Akinsolu et al., 2020] γίνεται χρήση της Roulette Wheel Selection, με τη διαφορά όμως της χρήσης διαφορετικών στρατηγικών μετάλλαξης. Ο PSAED χρησιμοποιεί τις DE/best/1, DE/current-to-best/1 και DE/rand/2 στρατηγικές και ο ASDEMO χρησιμοποιεί τις DE/rand-to-best/2 [Feoktistov et al., 2004], DE/rand/1/dir [Qin et al., 2009] και DE/hybrid trigonometric [Fan et al., 2003] στρατηγικές μετάλλαξης.

3.5.2 Αλγόριθμος TASEA

Οι [Yang et al., 2019] προτείνουν έναν δύο-επιπέδων προσαρμοστικό με υποκατάστατα υποβοηθούμενο εξελεκτικό αλγόριθμο, τον TASEA, στον οποίο τρεις διαφορετικές στρατηγικές αναζήτησης εκτελούνται προσαρμοστικά κατά την επανάληψη, σύμφωνα με τις πληροφορίες ανάδρασης. Στη προτεινόμενη μέθοδο χρησιμοποιείται ένα σφαιρικό GP υποκατάστατο μοντέλο για την προεπισκόπηση των απογόνων που παρήχθησαν από την στρατηγική μετάλλαξης DE/current-to-best/1 για γρήγορη ταχύτητα σύγκλισης και από την DE/current-to-randbest/1 που προτείνεται για τη καθοδήγηση του σφαιρικού GP μοντέλου για τον εντοπισμό υποσχόμενων περιοχών, όταν οι πληροφορίες ανάδρασης φθάσουν ένα προκαθορισμένο επίπεδο. Επιπλέον, χρησιμοποιείται μια στρατηγική μετάλλαξης για τοπική αναζήτηση (DE/best/1), για την καθοδήγηση του τοπικού GP μοντέλου, το οποίο δημιουργήθηκε κάνοντας χρήση των κοντινότερων ατόμων στο τωρινό καλύτερο άτομο, για την εκμετάλλευση της υποσχόμενης περιοχής. Χρησιμοποιείται επίσης μια τεχνική μείωσης διαστάσεων, η **Sammon Mapping**, για τη δημιουργία ενός αρκετά ακριβούς υποκατάστατου μοντέλου για ακριβή προβλήματα υψηλών διαστάσεων.

Περιγραφή του TASEA

Το πλαίσιο του TASEA περιγράφεται στον Αλγόριθμο 3.12. Ο αρχικός πληθυσμός παράγεται με χρήση της LHS μεθόδου. Όλα τα άτομα αξιολογούνται χρησιμοποιώντας την αντικειμενική συνάρτηση και εισάγονται στη βάση δεδομένων. Στη συνέχεια η προσαρμοστική αναζήτηση πραγματοποιείται μέσω του μηχανισμού ανάδρασης, ο οποίος καθοδηγείται από τη μεταβλητή δείκτη **good** και τη τιμή κατάστασης N_f . Η μεταβλητή δείκτης (good) και η τιμή κατάστασης (N_f) ανανεώνονται όταν το καλύτερο άτομο ανανεωθεί. Το άτομο αυτό αξιολογείται με την αντικειμενική συνάρτηση και αρχειοθετείται μαζί με την τιμή προσαρμογής του στη βάση δεδομένων.

Αλγόριθμος 3.12 – Ψευδοκώδικας του TASEA [Yang et al., 2019]

Inputs: $f(x)$, x_l , x_u , D , β , α , λ , L , F , CR , N_c , κ , μ , Max_{FES}/Max_{FES} είναι ο μέγιστος αριθμός των αξιολογήσεων φυσικής κατάστασης.

Αρχικοποίηση του πληθυσμού με β άτομα x_1, x_2, \dots, x_β μέσω της LHS μεθόδου.

Επακριβής αξιολόγηση κάθε ατόμου και αρχειοθέτηση αυτών στη βάση δεδομένων.

Αρχικοποίηση των τιμών ανάδρασης: $N_f = 1$, $good = 0$.

while το κριτήριο διακοπής δεν ικανοποιείται **do**

Επιλογή των α καλύτερων ατόμων από τη βάση δεδομένων για τον ορισμό του πληθυσμού Pop .

Αναπαραγωγή λ απογόνων και προεπισκόπηση αυτών για την απόκτηση του εκτιμώμενου καλύτερου απογόνου.

Επακριβής αξιολόγηση του εκτιμώμενου καλύτερου απογόνου.

if η τιμή προσαρμογής του καλύτερου απογόνου είναι καλύτερη από του τρέχοντος καλύτερου ατόμου **do**

$N_f = 1$, $good = 1$

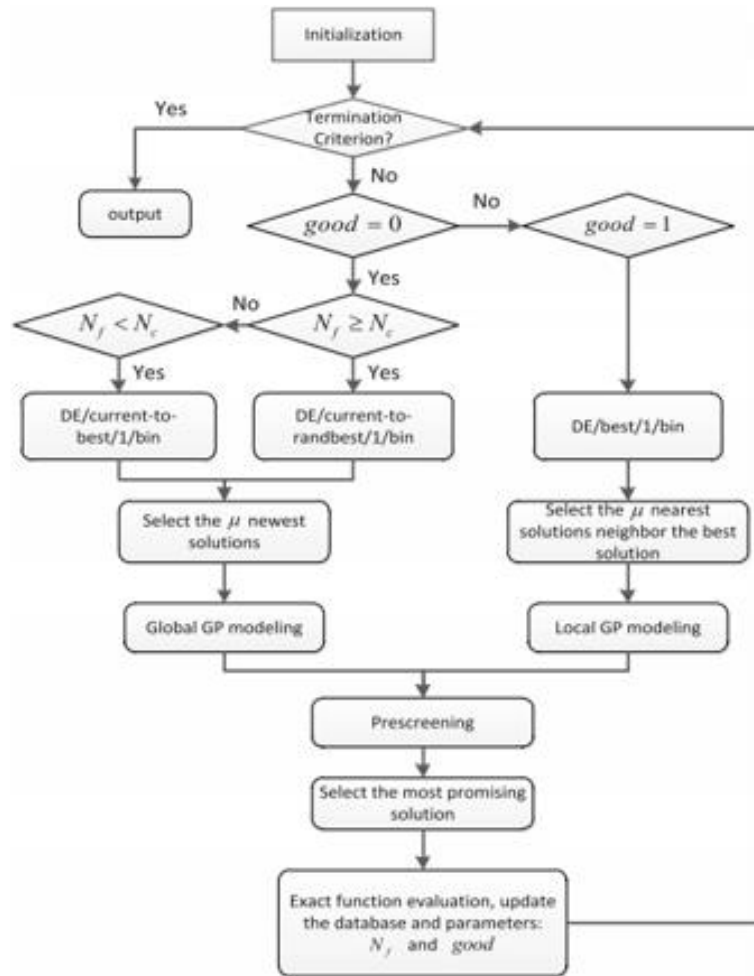
Ανανέωση του καλύτερου ατόμου και της τιμής προσαρμογής του από το νέο αξιολογημένο άτομο και προσθήκη στη βάση δεδομένων.

Else

$N_f = N_f + 1$, $good = 0$

end while

Στον αλγόριθμο TASEA χρησιμοποιούνται τρεις στρατηγικές αναζήτησης, με αντίστοιχες ρυθμίσεις παραμέτρων ελέγχου για την προσαρμοστική αναζήτηση κατά τη διάρκεια της διαδικασίας της εξελεκτικής βελτιστοποίησης. Η DE/current-to-best/1 στρατηγική χρησιμοποιείται ως η κύρια στρατηγική αναζήτησης για την επίτευξη γρήγορης ταχύτητας σύγκλισης. Η DE/current-to-randbest/1 προτείνεται για την αύξηση της ποικιλομορφίας του πληθυσμού και την αποφυγή πτώσης σε πρόωρη σύγκλιση. Αυτή η στρατηγική διεξάγεται προσαρμοστικά, σύμφωνα με τις πληροφορίες ανάδρασης από την εξελεκτική διαδικασία αναζήτησης. Ως εντατική τοπική στρατηγική αναζήτησης, η DE/best/1 στρατηγική μετάλλαξης εφαρμόζεται σε συνδυασμό με το τοπικό GP υποκατάστατο μοντέλο για τη βελτίωση της ταχύτητας σύγκλισης στις υποσχόμενες περιοχές.



Σχήμα 3.11 – Διάγραμμα ροής του TASEA [Yang et al., 2019].

Μηχανισμός ανάδρασης

Στους εξελεκτικούς αλγορίθμους, που υποστηρίζονται από προσαρμοστικές στρατηγικές παραμέτρων ελέγχου, το ζητούμενο είναι η δυναμική αλλαγή των παραμέτρων ελέγχου σύμφωνα με την ανάδραση από την εξελεκτική διαδικασία αναζήτησης. Ο TASEA, με βάση τις πληροφορίες ανάδρασης κατά την εξελεκτική αναζήτηση, μπορεί να καθοδηγήσει προσαρμοστικά τη κατεύθυνση της βελτιστοποίησης με διαφορετικά υποκατάστατα μοντέλα και στρατηγικές αναζήτησης και να βελτιώσει την αποτελεσματικότητά της, με περιορισμένο υπολογιστικό κόστος. Η προαναφερόμενη μέθοδος παρουσιάζεται στον Αλγόριθμο 3.13. Η έννοια της τιμής κατάστασης N_f εισάγεται για να αντιπροσωπεύσει τις πληροφορίες ανάδρασης κατά την εξελεκτική αναζήτηση. Ορίζεται ως ο αριθμός διατήρησης του καλύτερου ατόμου στη φάση δεδομένων κατά τη διάρκεια των διαδοχικών επαναλήψεων και η τιμή της επαναφέρεται όταν γίνεται ενημέρωση αυτού του ατόμου. Με άλλα λόγια, η παράμετρος N_f καταγράφει τον αριθμό των επαναλήψεων όπου το καλύτερο άτομο δεν ανανεώνεται.

Η παράμετρος **good** είναι μια μεταβλητή δείκτης, η οποία δείχνει εάν ο αλγόριθμος πρέπει να προσαρμοστεί για την επίτευξη συγκεκριμένων στόχων αναζήτησης. Η αρχική της τιμή είναι **0** και ορίζεται σε **1** όταν το καλύτερο άτομο ανανεωθεί στη βάση δεδομένων, το οποίο υποδεικνύει ότι ο αλγόριθμος θα πρέπει να προσαρμοστεί για να πετύχει ισχυρότερη τοπική αναζήτηση στην υποσχόμενη περιοχή τριγύρω από το ανανεωμένο καλύτερο άτομο. Επαναφέρεται στο **0** όταν το καλύτερο άτομο δεν ανανεώνεται στη βάση δεδομένων. Η τιμή της παραμέτρου γ αυξάνεται σταδιακά με την επανάληψη, προκειμένου να βελτιωθεί η ακρίβεια του τοπικού μοντέλου. Η παράμετρος N_c είναι μια σταθερά που καθορίζει πότε θα προσαρμοστεί η στρατηγική αναζήτησης κατά την επανάληψη. Εάν η τιμή της παραμέτρου N_c έχει οριστεί σχετικά μικρή, η DE/current-to-randbest/1 θα χρησιμοποιείται πιο συχνά, πράγμα που μπορεί να έχει ως αποτέλεσμα χαμηλότερη ταχύτητα σύγκλισης. Ωστόσο, αν η τιμή της έχει οριστεί σχετικά μεγάλη, η DE/current-to-best/1 θα χρησιμοποιείται πιο συχνά, γεγονός που μπορεί να προκαλέσει την παγίδευση του αλγορίθμου σε τοπικό βέλτιστο.

Αλγόριθμος 3.13 – Μηχανισμός Ανάδρασης [Yang et al., 2019]

Inputs: N_c , N_f , λ , F , CR , κ , μ , γ , *good*

Outputs: λ απόγονοι και πληροφορίες μοντελοποίησης (*Local GP* ή *Global GP*).

Εφαρμογή της DE/current-to-best/1/bin για αναπαραγωγή απογόνων στην πρώτη γενιά.

if $N_f < N_c$ και *good* = 0 **do**

Εφαρμογή της DE/current-to-best/1 για την αναπαραγωγή απογόνων

Επιλογή των μ νεότερων ατόμων στη βάση δεδομένων ως δεδομένα εκπαίδευσης για την κατασκευή του σφαιρικού GP μοντέλου στον μειωμένο χώρο.

else if $N_f \geq N_c$ και *good* = 0 **do**

Εφαρμογή της DE/current-to-randbest/1 για την αναπαραγωγή απογόνων

Επιλογή των μ νεότερων ατόμων στη βάση δεδομένων ως δεδομένα εκπαίδευσης για την κατασκευή του σφαιρικού GP μοντέλου στον μειωμένο χώρο.

else

Εφαρμογή της DE/best/1/bin για την αναπαραγωγή απογόνων

Επιλογή των $\mu + \gamma$ κοντινότερων ατόμων στο τρέχον καλύτερο άτομο της τωρινής γενιάς ως δεδομένα εκπαίδευσης για την κατασκευή του προσαρμοσμένου τοπικού GP μοντέλου στον μειωμένο χώρο.

end if

Τα μ νεότερα άτομα στη βάση δεδομένων είναι τα πιο πρόσφατα παραγόμενα καλύτερα υποψήφια άτομα και μπορεί σε κάποιο βαθμό να αντιπροσωπεύουν τη κατεύθυνση της αναζήτησης των υποσχόμενων περιοχών, ιδιαίτερα μετά από αρκετές επαναλήψεις. Επομένως, θα πρέπει να είναι ακριβής ο εντοπισμός της υποσχόμενης περιοχής από το σφαιρικό μοντέλο, το οποίο δημιουργείται από αυτά τα άτομα [Yang et al., 2019]. Κατά τη διάρκεια της επαναληπτικής διαδικασίας, η θέση του καλύτερου ατόμου μπορεί σε κάποιο βαθμό να δείχνει τη κατεύθυνση της αναζήτησης στη προσέγγιση του ολικού ή τοπικού βελτίστου. Έτσι ο αλγόριθμος θα εισέλθει σε μια περισσότερο υποσχόμενη περιοχή όταν το καλύτερο άτομο ανανεωθεί, ειδικά όταν η βελτιστοποίηση συνεχίζεται για ορισμένες επαναλήψεις. Η πλειοψηφία των ατόμων που βρίσκονται πιο κοντά στο καλύτερο άτομο είναι σύνηθες να βρίσκονται σ' αυτήν την υποσχόμενη περιοχή. Για αυτό το λόγο το τοπικό μοντέλο δημιουργείται κάνοντας χρήση αυτών των ατόμων που είναι πιο κοντά στο καλύτερο άτομο ως δεδομένα εκπαίδευσης, τα οποία μπορούν να διασφαλίσουν ότι το τοπικό μοντέλο θα έχει υψηλότερη ακρίβεια στην υποσχόμενη περιοχή. Επιπλέον, η πλειοψηφία των απογόνων που παράγονται από τη στρατηγική DE/best/1 με αντίστοιχη ρύθμιση παραμέτρων είναι επίσης πιο πιθανό να βρίσκονται στην υποσχόμενη περιοχή. Ως εκ τούτου, η εντατική τοπική αναζήτηση μπορεί να επιτευχθεί με τη χρήση ενός υψηλής ακρίβειας τοπικού μοντέλου, για τον προεπισκόπηση των απογόνων που παράγονται από τη στρατηγική DE/best/1 στην υποσχόμενη περιοχή [Yang et al., 2019].

3.6 ΤΑΞΙΝΟΜΗΣΗ ΓΕΙΤΟΝΙΑΣ

Ενδιαφέρον έχει μια μέθοδος στην οποία πραγματοποιείται μία ταξινόμηση της γειτονιάς κάθε απογόνου, με σκοπό την καθοδήγηση στην επιλογή της κατάλληλης αξιολόγησης του απογόνου σε έναν SAEA. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την εξοικονόμηση υπολογιστικού χρόνου από περίσσειες αξιολογήσεις. Οι [Lu et al., 2011] ανέπτυξαν έναν Classification-Assisted Διαφορικό Εξελικτικό Αλγόριθμο, ο οποίος χρησιμοποιεί ένα Support Vector Machine (SVM) ως υποκατάστατο μοντέλο, το οποίο εκπαιδεύεται με τα γειτονικά σημεία κάθε απογόνου.

Ο αλγόριθμος ξεκινά με την αρχικοποίηση του πληθυσμού και την εισαγωγή των χρωμοσωμάτων και των τιμών προσαρμογής τους στη Βάση Δεδομένων (Database - DB). Στη συνέχεια, για έναν προκαθορισμένο αριθμό γενιών (π.χ. 3), χρησιμοποιούνται οι τελεστές διαφορικής εξέλιξης για την δημιουργία νέων πληθυσμών και την αύξηση των σημείων δεδομένων εκπαίδευσης της DB. Μέχρις ότου το προκαθορισμένο κριτήριο διακοπής ικανοποιηθεί (στο συγκεκριμένο άρθρο ένας αριθμός ακριβών αξιολογήσεων), οι τελεστές μετάλλαξης και επιχιασμού της διαφορικής εξέλιξης χρησιμοποιούνται για την αναπαραγωγή απογόνων. Τα κ κοντινότερα γειτονικά σημεία από τη βάση δεδομένων ως προς τον απόγονο προς αξιολόγηση βρίσκονται και ορίζουν την γειτονιά του. Η γειτονιά του απογόνου ταξινομείται και ανάλογα το είδος της χρησιμοποιείται και η κατάλληλη αξιολόγηση.

Η γειτονιά ταξινομείται σε 3 κλάσεις (είδη γειτονιάς).

- **Καλή γειτονιά:** αποτελείται μόνο από γειτονικά σημεία τα οποία έχουν καλύτερη τιμή προσαρμογής από τον γονέα (το χρωμόσωμα στο οποίο εφαρμόστηκαν οι τελεστές εξέλιξης).
- **Κακή γειτονιά:** αποτελείται μόνο από γειτονικά σημεία με χειρότερη τιμή προσαρμογής από αυτή του γονέα τους.
- **Ανάμεικτη γειτονιά:** αποτελείται και από τα δύο προαναφερόμενα είδη γειτονικών σημείων.

Εάν η γειτονιά είναι καλή τότε ο απόγονος αξιολογείται επ'ακριβώς, εάν είναι ανάμεικτη τότε χρησιμοποιείται το υποκατάστατο μοντέλο για την αξιολόγηση του απογόνου. Εάν η γειτονιά είναι κακή και ο γονέας είναι το καλύτερο χρωμόσωμα στην εκάστοτε γενιά, τότε γίνεται ακριβής αξιολόγηση στον απόγονο, ειδάλλως ο απόγονος απορρίπτεται και δεν χρειάζεται να εφαρμοστεί καμμία αξιολόγηση. Η συγκεκριμένη μεθοδολογία είναι απλή στην εφαρμογή της και εξοικονομεί υπολογιστικό χρόνο, λόγω της αποφυγής περιττών αξιολογήσεων.

Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ

Ο αλγόριθμος στον οποίο θα εφαρμόσουμε τεχνικές επιτάχυνσης, που βρήκαμε μέσω της βιβλιογραφικής έρευνας (Κεφάλαιο 3) ή που αναπτύξαμε στην παρούσα εργασία, είναι ένας Ασύγχρονα Παράλληλος Υποκατάστατα Βοηθούμενος Διαφορικός Εξελικτικός Αλγόριθμος (Asynchronous Parallel Surrogate Assisted Differential Evolutionary Algorithm – APSADE), ο οποίος έχει αναπτυχθεί από τους [Strofylos et al., 2018]. Προγενέστερες εκδόσεις του συγκεκριμένου αλγορίθμου, πριν την εισαγωγή της παραλληλοποίησης, μπορούν να βρεθούν στις εργασίες [Nikolos, 2011] και [Nikolos, 2013].

4.1 ΔΙΑΦΟΡΙΚΗ ΕΞΕΛΙΞΗ

Ο χρησιμοποιούμενος APSADE χρησιμοποιεί τις ίδιες στρατηγικές των τελεστών της Διαφορικής Εξέλιξης που έχουμε αναφέρει στο Κεφάλαιο 1, εκτός από την στρατηγική του τελεστή μετάλλαξης. Η στρατηγική μετάλλαξης που ακολουθεί ο APSADE είναι παρόμοια με την DE/rand/1, με τη διαφορά ότι ο δότης είναι ένα τυχαίο ποσοστιαίο άθροισμα των γονιδίων των τριών τυχαίων χρωμοσωμάτων.

$$v_{k,i}^{G+1} = donor(i)^G + F(x_{r_2,i}^G - x_{r_3,i}^G) \quad 4.1$$

$$donor(i)^G = rand_1 * gene(i, x_{r_1,i}^G) + rand_2 * gene(i, x_{r_2,i}^G) + rand_3 * gene(i, x_{r_3,i}^G) \quad 4.2$$

$$rand_1, rand_2, rand_3 \in [0,1]$$

$$r_1 \neq r_2 \neq r_3 \in \{1,2, \dots, Np\}$$

$$i = 1, \dots, n$$

$$k = 1, \dots, Np$$

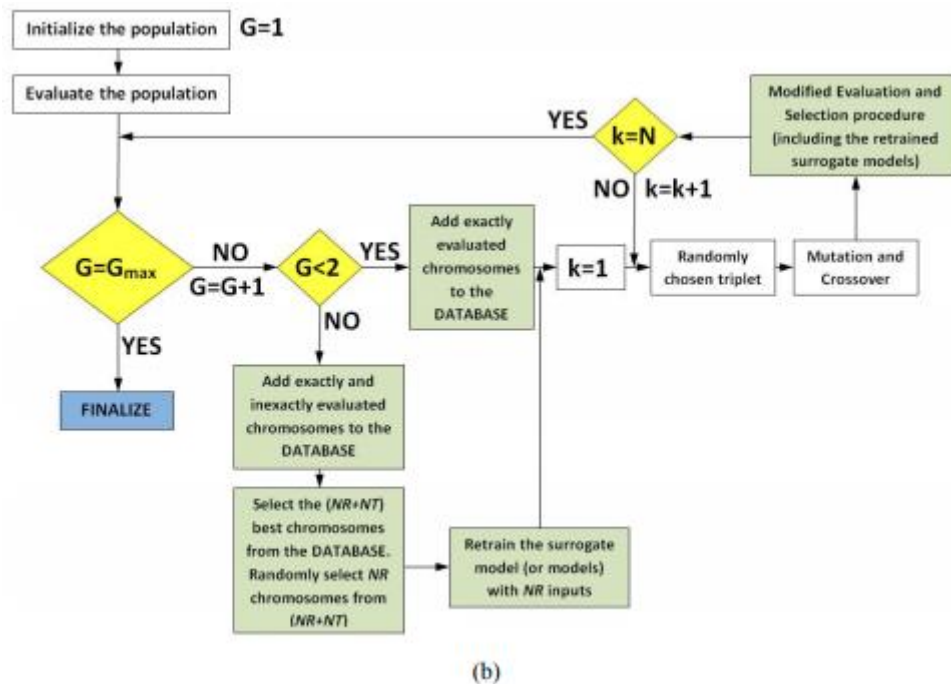
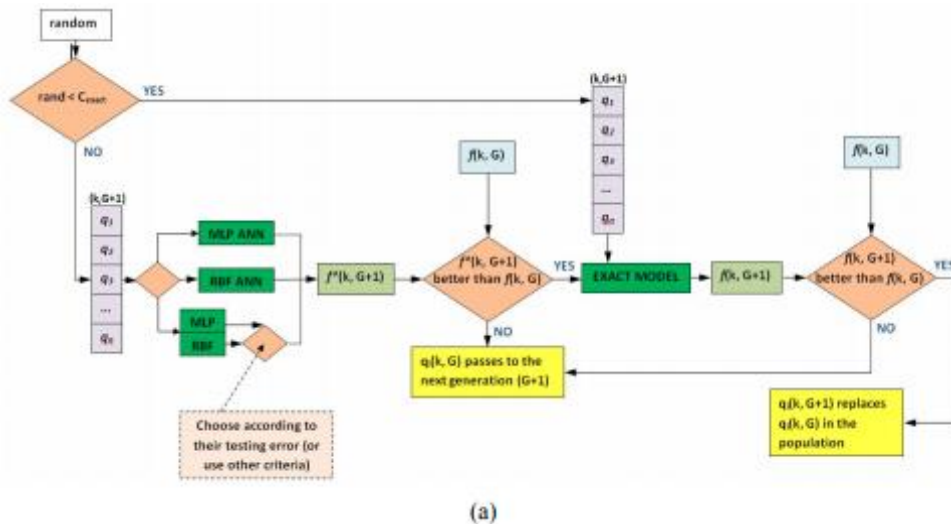
όπου n είναι ο αριθμός των μεταβλητών σχεδίασης και Np είναι το μέγεθος του πληθυσμού.

4.2 ΥΠΟΚΑΤΑΣΤΑΤΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ

Ο χρησιμοποιούμενος APSADE κάνει χρήση δύο τεχνητών νευρωνικών δικτύων (ΤΝΔ), ενός πολυεπίπεδου Perceptron (MLP) και ενός δικτύου συνάρτησης ακτινικής βάσης (RBFN). Τα δύο αυτά υποκατάστατα μοντέλα μπορούν να χρησιμοποιηθούν είτε ξεχωριστά, είτε σε συνδυασμό, ανάλογα με την επιθυμία του χρήστη. Στην πρώτη περίπτωση χρησιμοποιείται ένα μόνο υποκατάστατο καθ' όλη τη διαδικασία βελτιστοποίησης, το οποίο επανεκπαιδεύεται σε κάθε γενιά. Στη δεύτερη περίπτωση σε κάθε γενιά και τα δύο υποκατάστατα μοντέλα επανεκπαιδεύονται και δοκιμάζονται (στα ίδια σύνολα δεδομένων εκπαίδευσης και δοκιμής) και στη συνέχεια επιλέγεται ένα μόνο μοντέλο για την προ-αξιολόγηση των μελών του πληθυσμού. Αυτή η επιλογή βασίζεται στην χαμηλότερη τιμή του σφάλματος δοκιμής (test error). Σε σύγκριση με το κόστος των ακριβών αξιολογήσεων, η κατάρτιση περισσότερων από ενός υποκατάστατων μοντέλων σε κάθε γενιά προσθέτει αμελητέο κόστος στην υπολογιστική διαδικασία. Κατά τη διάρκεια της εξέλιξης του πληθυσμού επιλέγεται αυτόματα το καλύτερο υποκατάστατο μοντέλο για τη συγκεκριμένη περιοχή του χώρου των λύσεων, βάσει των προγνωστικών δυνατοτήτων τους και του κριτηρίου επιλογής που έχει υιοθετηθεί [Nikolos, 2013]. Τα διαγράμματα ροής της διαδικασίας βελτιστοποίησης με βάση το υποκατάστατο μοντέλο και της εξελικτικής διαδικασίας παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.1.

Κατά τη φάση αξιολόγησης, κάθε νέο δοκιμαστικό διάνυσμα προ-αξιολογείται χρησιμοποιώντας το υποκατάστατο μοντέλο. Εάν το δοκιμαστικό διάνυσμα προ-αξιολογηθεί ως χαμηλότερης φυσικής κατάστασης από το αντίστοιχο διάνυσμα του τρέχοντος πληθυσμού, τότε δεν πραγματοποιείται

περαιτέρω ακριβής (και ακριβή) αξιολόγηση. Το δοκιμαστικό διάνυσμα εγκαταλείπεται και το τρέχων μεταφέρεται στην επόμενη γενιά. Διαφορετικά, πραγματοποιείται ακριβής επαναξιολόγηση, ακολουθούμενη από μια νέα σύγκριση μεταξύ των δύο διανυσμάτων. Εάν το δοκιμαστικό διάνυσμα αξιολογηθεί επίσης ως καλύτερης φυσικής κατάστασης κατά την δεύτερη σύγκριση, τότε περνά στην επόμενη γενιά, ειδάλλως το δοκιμαστικό διάνυσμα εγκαταλείπεται και το τρέχων διάνυσμα θα περάσει στην επόμενη γενιά [Nikolos, 2013].



Σχήμα 4.1: (a) Διάγραμμα ροής της Εξελικτικής Βελτιστοποίησης με βάση το υποκατάστατο μοντέλο, (b) Διάγραμμα ροής της Εξελικτικής Διαδικασίας [Nikolos, 2013].

Στις δύο πρώτες γενιές όλα τα διανύσματα αξιολογούνται επακριβώς για την αρχικοποίηση της κεντρικής βάσης δεδομένων που απαιτείται για την εκπαίδευση των υποκατάστατων μοντέλων. Ένα επιπρόσθετο μικρό ποσοστό των υποψήφιων λύσεων επιλέγεται σε κάθε γενιά με ομοιόμορφη πιθανότητα για να αξιολογηθεί επακριβώς, προκειμένου να ενισχυθεί η ευρωστία της διαδικασίας [Nikolos, 2013]. Η καθορισμένη διαδικασία οδηγεί στο γεγονός ότι μόνο τα δοκιμαστικά διανύσματα που έχουν αξιολογηθεί επακριβώς έχουν την ευκαιρία να περάσουν στην επόμενη γενιά. Κατά συνέπεια, σε κάθε γενιά ο τρέχων πληθυσμός αποτελείται μόνο από άτομα που έχουν αξιολογηθεί

επακριβώς. Ως αποτέλεσμα, ένα μέρος κάθε σύγκρισης μεταξύ του τρέχοντος και του δοκιμαστικού διάνυσματος είναι πάντοτε ένα ακριβές αξιολογημένο διάνυσμα (το τρέχων διάνυσμα), το οποίο ενισχύει την ευρωστία της διαδικασίας. Μια κεντρική βάση δεδομένων χρησιμοποιείται για την αποθήκευση του αποτελέσματος κάθε αξιολόγησης, μαζί με το αντίστοιχο χρωμόσωμα [Nikolos, 2013].

Η επιλογή των δεδομένων εκπαίδευσης των υποκατάστατων μοντέλων πραγματοποιείται με την μέθοδο **Best**. Το 80% αυτών των δεδομένων χρησιμοποιείται ως σύνολο εκπαίδευσης και το υπόλοιπο 20% χρησιμοποιείται ως σύνολο δοκιμής. Η επιλογή εισαγωγής κάθε δεδομένου στο αντίστοιχο σύνολο, γίνεται τυχαία και με ομοιόμορφη πιθανότητα. Θα πρέπει να τονιστεί ότι οι εκτιμήσεις των υποκατάστατων μοντέλων αντικαθιστούν τις ακριβείς και δαπανηρές αξιολογήσεις μόνο για τα μη υποσχόμενα άτομα. Η φάση προ-αξιολόγησης χρησιμοποιείται για να τα απορρίψει γρήγορα, χωρίς να δαπανήσει πολύτιμους υπολογιστικούς πόρους για την ακριβή αξιολόγησή τους [Nikolos, 2013].

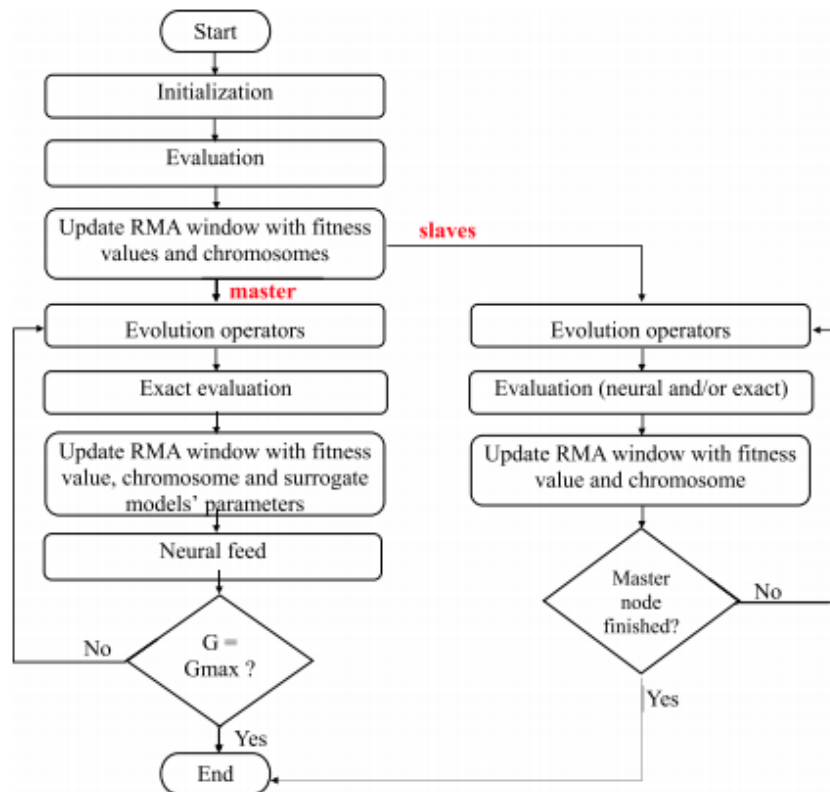
4.3 ΑΣΥΓΓΡΟΝΗ ΠΑΡΑΛΛΗΛΟΠΟΙΗΣΗ

Παρά τη σημαντική συμβολή των εξελικτικών αλγορίθμων (EAs) στην επίλυση περίπλοκων προβλημάτων, τείνουν να είναι υπερβολικά χρονοβόροι, καθώς απαιτούν σημαντικό αριθμό αξιολογήσεων. Έτσι, φαίνεται ότι είναι απαραίτητη η κατάλληλη επιτάχυνση μέσω παράλληλης επεξεργασίας. Αυτό υποστηρίζεται και από το γεγονός ότι οι EA είναι εγγενώς παράλληλοι αλγόριθμοι, καθώς ασχολούνται με έναν πληθυσμό διαφορετικών υποψήφιων λύσεων σε κάθε γενιά. Η ιδέα πίσω από την αναπτυγμένη στρατηγική παραλληλισμού είναι να καταστήσει δυνατή τη συνεργασία της DE με διαφορετικό λογισμικό προσομοίωσης με τη μορφή εκτελέσιμων. Η απαιτούμενη μεταφορά δεδομένων μεταξύ του DE και του λογισμικού προσομοίωσης επιτυγχάνεται με κατάλληλα αρχεία κειμένου. Η επικοινωνία μεταξύ των επεξεργαστών και της παράλληλης εφαρμογής επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας τις συναρτήσεις βιβλιοθήκης του Message Passing Interface (MPI). Η προτεινόμενη στρατηγική φαίνεται να είναι αρκετά αποτελεσματική, ανεξάρτητα από τη χρήση αρχείων κειμένου, δεδομένου ότι ο υπολογιστικός χρόνος μεταφοράς δεδομένων είναι αμελητέος σε σύγκριση με εκείνον του βήματος αξιολόγησης [Strofylos et al., 2018].

Αρχικά τα μέλη του πληθυσμού κατανέμονται μεταξύ των διαθέσιμων επεξεργαστών, δηλαδή κάθε επεξεργαστής είναι υπεύθυνος για την αξιολόγηση ενός ατόμου. Στη συνέχεια, εκχωρείται μια μοναδική κατάταξη σε κάθε επεξεργαστή, ενώ ένας από αυτούς αναγνωρίζεται ως ο κύριος κόμβος, που παρακολουθεί ολόκληρη τη διαδικασία. Αυτός ο κύριος κόμβος εκτελεί όλη την προ-επεξεργασία που απαιτείται πριν από την έναρξη της διαδικασίας βελτιστοποίησης [Strofylos et al., 2018]. Αυτό περιλαμβάνει τη δημιουργία ενός φακέλου εργασίας για κάθε επεξεργαστή όπου αναπαράγονται τα εκτελέσιμα που περιλαμβάνουν το βήμα αξιολόγησης και τα αντίστοιχα αρχεία κειμένου. Επιπλέον, ο κύριος κόμβος διανέμει όλες τις απαραίτητες πληροφορίες σχετικά με τον DE αλγόριθμο σε όλους τους άλλους επεξεργαστές, δηλαδή τον αριθμό των μεταβλητών σχεδίασης, τα ανώ και κάτω όρια τους και τις παραμέτρους ελέγχου. Με την ολοκλήρωση του σταδίου προετοιμασίας (αρχικοποίησης), ξεκινά η κύρια διαδικασία. Κάθε επεξεργαστής αναπαράγει ένα τυχαίο άτομο εντός των καθορισμένων ορίων για κάθε γονίδιο του χρωμοσώματος και το αξιολογεί. Στη συνέχεια, οι τιμές της φυσικής κατάστασης των υποψήφιων λύσεων και των αντίστοιχων χρωμοσωμάτων τους μεταδίδονται σε όλους τους επεξεργαστές, για να ενημερώσουν τις βάσεις δεδομένων τους με τα νέα μέλη του πληθυσμού. Κάθε επεξεργαστής εξελίσσει ένα χρωμόσωμα ξεχωριστά και το νέο προκύπτον (απόγονος) αποθηκεύεται στον αντίστοιχο φάκελο εργασίας του [Strofylos et al., 2018].

Σε μια ασύγχρονη εφαρμογή, η γενιά δεν είναι αυστηρά ορισμένη και ο τρέχων πληθυσμός (σε κάθε χρονική στιγμή) μπορεί να περιλαμβάνει άτομα που ανήκουν σε διαφορετικές γενιές. Πιο συγκεκριμένα, κάθε νέο δοκιμαστικό διάνυσμα (απόγονος) μπορεί να αντικαταστήσει τον γονέα του (εάν έχει καλύτερη φυσική κατάσταση) και να γίνει μέλος του τρέχοντος πληθυσμού αμέσως μετά την ολοκλήρωση της διαδικασίας αξιολόγησής του, χωρίς να περιμένει την ολοκλήρωση των φάσεων

αξιολόγησης των υπόλοιπων μελών του βοηθητικού πληθυσμού (Σχήμα 4.2). Έτσι, τα άτομα εξελίσσονται ανεξάρτητα, χωρίς αυστηρό κεντρικό έλεγχο ή πλήρη συντονισμό μεταξύ γενεών [Strofylos et al., 2018].



Σχήμα 4.2: Διάγραμμα ροής της ασύγχρονης εφαρμογής [Strofylos et al., 2018].

Ο χρησιμοποιούμενος APSADE χρησιμοποιεί λειτουργίες επικοινωνίας MPI χωρίς αποκλεισμό. Έχει ακολουθηθεί μια ασύγχρονη αρχιτεκτονική master-slave, δηλαδή η κύρια διαδικασία καθοδηγεί τη διαδικασία εξέλιξης, εκπαιδεύει και δοκιμάζει τα υποκατάστατα μοντέλα και συλλέγει/κατανέμει δεδομένα από όλες τις άλλες διαδικασίες [Strofylos et al., 2018]. Αυτό επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας παράθυρα πρόσβασης απομακρυσμένης μνήμης (RMA). Για να επιτραπεί η απομακρυσμένη πρόσβαση στη μνήμη, ο κύριος κόμβος εκθέτει συνεχόμενες περιοχές μνήμης στις υπόλοιπες διαδικασίες, οι οποίες ονομάζονται παράθυρα. Το MPI το επιτυγχάνει με μια συλλογική συνάρτηση που ονομάζεται "MPI_Win_create". Μια διαδικασία μπορεί να πάρει και να ορίσει δεδομένα στην απομακρυσμένη μνήμη μέσω των εντολών "MPI_Get" και "MPI_Put". Καθώς το MPI απαγορεύει την ταυτόχρονη πρόσβαση στην ίδια θέση μνήμης στο παράθυρο, είναι απαραίτητο να υπάρχει ένας μηχανισμός που να διασφαλίζει ότι οι λειτουργίες πρόσβασης ολοκληρώνονται πριν από τη χρήση των δεδομένων. Έτσι, οι ενημερώσεις στα παράθυρα RMA από άλλες διαδικασίες προστατεύονται από τον κύριο κόμβο, χρησιμοποιώντας αποκλειστικά κλειδώματα σε περίπτωση διένεξης (σύγκρουσης). Οι μη συγκρουόμενες προσβάσεις (όπως οι προσβάσεις μόνο για ανάγνωση ή οι συσσωρευμένες προσβάσεις) προστατεύονται από κοινόχρηστα κλειδώματα, τόσο για τοπικές όσο και για προσβάσεις RMA [Strofylos et al., 2018].

Κάθε δευτερεύον «slave» κόμβος λειτουργεί ανεξάρτητα, ενημερώνοντας περιοδικά μόνο την τιμή της συνάρτησης προσαρμογής και το αντίστοιχο χρωμόσωμά του στα παράθυρα RMA. Κάθε ένας από τους δευτερεύοντες κόμβους εκτελεί την ίδια διαδικασία σε έναν άπειρο βρόχο, ελέγχοντας αρχικά τον ρυθμιστή λήψης για να δει εάν έχει φτάσει το μήνυμα τερματισμού από τον κύριο «master» κόμβο. Στη συνέχεια, αποκτά όλα τα ενημερωμένα δεδομένα που είναι απαραίτητα για τους υπολογισμούς που πραγματοποιήθηκαν κατά τη διάρκεια μιας επανάληψης DE. Αυτές περιλαμβάνουν τις τιμές προσαρμογής των υποψήφιων λύσεων και τα αντίστοιχα χρωμοσώματά τους, καθώς και τις

παραμέτρους των υποκατάστατων μοντέλων μέσω των παραθύρων RMA, προκειμένου να εκτελέσουν τους τελεστές εξέλιξης [Strofylos et al., 2018].

Λόγω της μη-φραγμένης επικοινωνίας, οι διαδικασίες δεν περιμένουν ποτέ η μία την άλλη. Δηλαδή τρέχουν εντελώς ασύγχρονα και η πιο αργή διαδικασία δεν επιβραδύνει τις άλλες [Strofylos et al., 2018]. Αυτό το χαρακτηριστικό είναι απαραίτητο, ειδικά όταν χρησιμοποιούνται υποκατάστατα μοντέλα, καθώς η προεκτίμηση του δοκιμαστικού διανύσματος πραγματοποιείται πολύ γρήγορα. Αυτό σημαίνει ότι, εάν το δοκιμαστικό διάνυσμα (απόγονος) έχει χειρότερη φυσική κατάσταση από το αντίστοιχο διάνυσμα του τρέχοντος πληθυσμού (γονέας), ο επεξεργαστής δεν θα χρειαστεί να περιμένει όλους τους άλλους επεξεργαστές να ολοκληρώσουν τους υπολογισμούς. Αντ' αυτού, μπορεί να προβεί στην παραγωγή του επόμενου δοκιμαστικού διανύσματος και στην αξιολόγησή του [Strofylos et al., 2018].

Όπως προαναφέρθηκε, στον χρησιμοποιούμενο APSADE η έννοια της γενιάς δεν υπάρχει πλέον. Ωστόσο, απαιτείται ένας ορισμός για έναν αριθμό «γενιάς» για τον ορισμό μιας συχνότητας για την επανεκπαίδευση των υποκατάστατων μοντέλων, για την ερμηνεία του ιστορικού σύγκλισης της βελτιστοποίησης και για σκοπούς σύγκρισης [Strofylos et al., 2018]. Έτσι, ο αριθμός γενιάς για τον APSADE ορίζεται ως εξής: ο κύριος κόμβος, ο οποίος ελέγχει τη διαδικασία DE, επιβάλλεται να αξιολογεί πάντα επ' ακριβώς το αντίστοιχο χρωμόσωμά του. Επομένως, η αλλαγή μεταξύ επιτυχημένων ατόμων για τον κύριο κόμβο ορίζει μια γενιά για αυτόν τον κόμβο, η οποία χρησιμοποιείται επίσης και για τον ορισμό μιας «γενιάς» για ολόκληρο τον πληθυσμό. Αυτός ο ορισμός συνδέεται μάλλον με τα χρονικά διαστήματα υπολογισμού, παρά με μια ιδέα της πραγματικής γενιάς. Ο χρόνος της ακριβούς αξιολόγησης για κάθε άτομο είναι περίπου ο ίδιος για όλες τις διαδικασίες σε ένα σύστημα που περιλαμβάνει πανομοιότυπους επεξεργαστές ή πυρήνες [Strofylos et al., 2018].

ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΕΧΝΙΚΩΝ ΕΠΙΤΑΧΥΝΣΗΣ ΣΤΟΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ (APSADE)

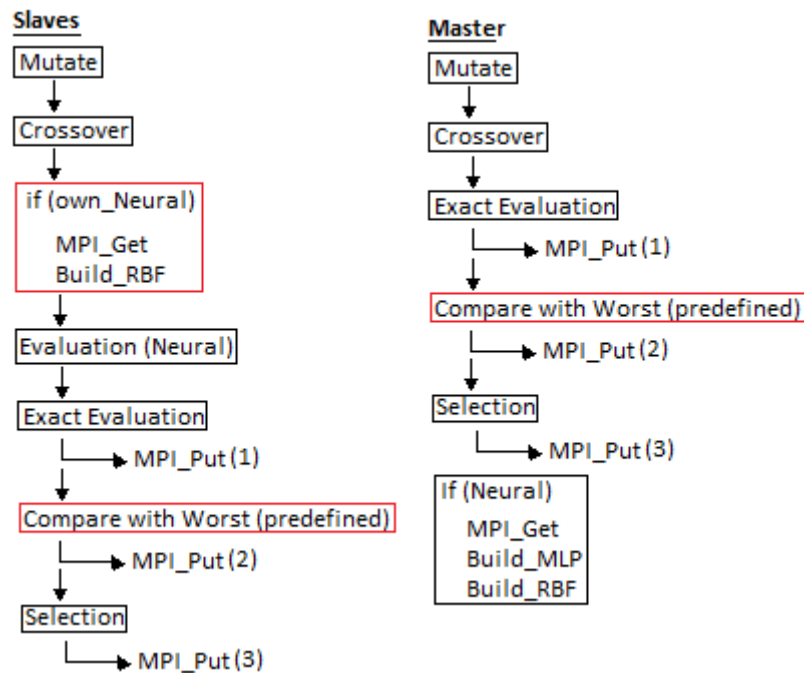
5.1 ΒΑΣΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ

Ο αλγόριθμος εφαρμογής μας (APSADE), δημιουργεί και εκπαιδεύει τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα μόνο στον κύριο κόμβο (master) και για τον λόγο αυτόν, η βάση δεδομένων συλλέγει τα δεδομένα της μόνο σε αυτόν τον κόμβο. Διάφορες μεθοδολογίες όμως, όπως η εκπαίδευση των υποκατάστατων μοντέλων με την [NearestNeighbors](#) (βλέπε ενότητα 3.1), καθώς και άλλες τεχνικές επιτάχυνσης που έχουμε αναφέρει σε προηγούμενο κεφάλαιο, κατά την τοπική αναζήτηση δημιουργούν ένα υποκατάστατο μοντέλο για κάθε νέα υποψήφια λύση. Για τη χρήση/προσθήκη μιας τέτοιας τεχνικής στον αλγόριθμο μας θα χρειαστεί κάθε επεξεργαστής να κατασκευάζει/εκπαιδεύει το δικό του υποκατάστατο μοντέλο και αυτό απαιτεί μια ενιαία βάση δεδομένων, την οποία θα μοιράζονται όλοι οι κόμβοι του συστήματός μας. Το επιθυμητό αποτέλεσμα μπορεί να επιτευχθεί με την χρήση των MPI εντολών, όπως δηλαδή χρησιμοποιήθηκαν και για την παραλληλοποίηση του APSADE (βλέπε ενότητα 4.3). Χρησιμοποιώντας την εντολή `MPI_Win_Create`, δημιουργείται ένα παράθυρο απομακρυσμένης μνήμης (RMA) για την βάση δεδομένων, στο οποίο κάθε κόμβος (πυρήνας) μπορεί να έχει πρόσβαση. Με την χρήση των εντολών `MPI_Put` και `MPI_Get` θα πραγματοποιείται εισχώρηση και λήψη δεδομένων στη βάση δεδομένων.

Δημιουργήθηκε μια υπορουτίνα, η `MPI_PUT_DB`, στην οποία γίνεται εισχώρηση της τιμής προσαρμογής και των γονιδίων κάθε νέας υποψήφιας λύσης που εισχωρείται στη βάση δεδομένων, καθώς και ενός μετρητή του μεγέθους της βάσης δεδομένων. Αυτή η υπορουτίνα μπορεί να κληθεί οπουδήποτε στον κώδικα, για την εισχώρηση των νέων υποψήφιων λύσεων στη βάση δεδομένων, πράγμα που μας διευκολύνει στην εναλλαγή του κριτηρίου επιλογής δεδομένων προς εισαγωγή στη βάση δεδομένων. Δηλαδή, εάν θέλουμε τα δεδομένα εισαγωγής να είναι μόνο οι απόγονοι που συγκρίνονται ως καλύτεροι από τον γονέα τους, τότε θα καλέσουμε την υπορουτίνα `MPI_PUT_DB`, αμέσως μετά τον τελεστή επιλογής. Εάν θέλουμε να εισάγονται όλοι οι απόγονοι που έχουν αξιολογηθεί επακριβώς, τότε θα καλέσουμε την υπορουτίνα `MPI_PUT_DB` αμέσως μετά την συνάρτηση ακριβής αξιολόγησης. Ένα τρίτο κριτήριο επιλογής μπορεί να συμπεριληφθεί, το οποίο προϋποθέτει μια σύγκριση του απογόνου με το χειρότερο σε φυσική κατάσταση άτομο στον τωρινό πληθυσμό. Η εισαγωγή του απογόνου στη βάση δεδομένων, θα πραγματοποιηθεί εφόσον έχει κριθεί ως καταλληλότερος από το συγκεκριμένο άτομο (το λιγότερο προσαρμοσμένο άτομο στον πληθυσμό). Το τελευταίο κριτήριο επιλογής μπορεί να μας δώσει μια σχετική σφαιρική εικόνα του τοπίου του χώρου σχεδίασης με μειωμένη υπολογιστική απαίτηση, σε αντίθεση με το κριτήριο επιλογής όλων των ακριβώς αξιολογημένων σημείων, όπου η υπολογιστική απαίτηση αυξάνεται σημαντικά με το πέρασμα των γενεών. Το κριτήριο επιλογής μόνο των ακριβώς αξιολογημένων ατόμων (γόνων), που έχουν κριθεί ως καταλληλότερα από τον γονέα τους, είναι το λιγότερο υπολογιστικά απαιτητικό, αλλά μπορεί να παρουσιάσει δυσκολία στην σφαιρική απεικόνιση του χώρου σχεδίασης κατά τις αρχικές γενιές της εξέλιξης, ιδιαίτερα σε περιπτώσεις όπου ο πληθυσμός αποτελείται από λίγα άτομα. Να τονισθεί εδώ ότι η υπολογιστική απαίτηση δεν υπόκειται στην εισχώρηση ή στη λήψη των δεδομένων από τη βάση δεδομένων, αλλά στην επεξεργασία αυτών για την εκπαίδευση των υποκατάστατων μοντέλων.

Η εντολή `MPI_Get` χρησιμοποιείται για την λήψη των δεδομένων της βάσης δεδομένων και καλείται από όλους τους κόμβους κάθε φορά που χρειάζεται να κατασκευάσουν/εκπαιδεύσουν τα υποκατάστατα μοντέλα. Από τους δευτερεύοντες κόμβους καλείται, εφόσον έχει κριθεί από τον αλγόριθμο (π.χ. [NBClass](#)), ή εφόσον έχει προκαθοριστεί από τον χρήστη, η εκπαίδευση του τοπικού υποκατάστατου

μοντέλου από όλους τους κόμβους. Στο Σχήμα 5.1 παρουσιάζεται το διάγραμμα ροής του APSADE με την προσθήκη των MPI εντολών για τη βάση δεδομένων.



Σχήμα 5.1: Διάγραμμα Ροής του APSADE με προσθήκη εντολών MPI για τη βάση δεδομένων.

Τα MPI_Put (1), (2) και (3) δηλώνουν το κριτήριο επιλογής δεδομένων για εισαγωγή στη βάση δεδομένων (ένα από αυτά χρησιμοποιείται μόνο). Τα κόκκινα πλαίσια δηλώνουν τη χρήση των εντολών μέσα σε αυτά υπό προκαθορισμένες συνθήκες. Η σύγκριση με το χειρότερο άτομο θα πραγματοποιηθεί εφόσον έχει επιλεγεί το κατάλληλο κριτήριο επιλογής, ενώ η κατασκευή/εκπαίδευση του υποκατάστατου μοντέλου στους δευτερεύοντες κόμβους θα πραγματοποιηθεί, όπως ήδη έχουμε αναφέρει, εφόσον έχει προκαθορισθεί από τον χρήστη.

5.2 ΣΤΡΑΤΗΓΙΚΕΣ ΜΕΤΑΛΛΑΞΗΣ

Η μετάλλαξη είναι ο κύριος τρόπος με τον οποίο η Διαφορική Εξέλιξη κάνει αναζήτηση στον χώρο, αφού βάσει αυτής δημιουργούνται τα νέα σημεία (απόγονοι), τα οποία θα αξιολογηθούν με σκοπό να εισέλθουν στον εκάστοτε πληθυσμό. Όπως είδαμε και από την βιβλιογραφική έρευνα που πραγματοποιήθηκε στο κεφάλαιο 3, έχουν αναπτυχθεί πολλές στρατηγικές μετάλλαξης και κάθε αλγόριθμος (που αναφέραμε στην βιβλιογραφική έρευνα) χρησιμοποιεί μία ή και πολλές από αυτές (με κάποια τεχνική όπως η *Roulette Wheel*) για την αναζήτηση στο χώρο των λύσεων.

Στον αλγόριθμο μας (APSADE) εισαγάγαμε κάποιες από τις στρατηγικές αυτές. Παρακάτω παρουσιάζονται οι στρατηγικές μετάλλαξης που εισαγάγαμε, μαζί με μια αναφορά στην αναζήτηση που προκαλούν, μετά από εξέταση που κάναμε σε 2 προβλήματα αναφοράς (*Ackley* και *Rosenbrock*). Ο χώρος σχεδίασης της συνάρτησης Ackley είναι γεμάτος με τοπικά βέλτιστα (βλέπε παράρτημα 6), με αποτέλεσμα μια στρατηγική μετάλλαξης που επιφέρει τοπική αναζήτηση να παγιδεύεται εύκολα σε ένα από αυτά. Μια στρατηγική μετάλλαξης όμως που επιφέρει σφαιρική αναζήτηση θα αναζητεί διαρκώς σημεία που βρίσκονται εκτός από την υπό-περιοχή που βρίσκεται ο αλγόριθμος (πιθανώς περιοχή τοπικού βέλτιστου), με αποτέλεσμα την συνεχή μετατόπισή του προς την περιοχή του ολικού βέλτιστου. Σε αντίθεση με το πρόβλημα Ackley, το πρόβλημα Rosenbrock δεν περιέχει τοπικά ελάχιστα, η συνάρτηση Rosenbrock είναι μονοτροπική και το ολικό ελάχιστο βρίσκεται σε μια στενή, παραβολική κοιλάδα. Ωστόσο, παρόλο που αυτή η κοιλάδα είναι εύκολο να βρεθεί, η σύγκλιση στο ελάχιστο είναι δύσκολη [Picheny et al., 2012]. Για τον λόγο αυτόν μια στρατηγική μετάλλαξης με

ικανότητα τοπικής αναζήτησης θα είναι ικανή να βρει το ολικό βέλτιστο, σε αντίθεση με μια που έχει ικανότητα σφαιρικής αναζήτησης.

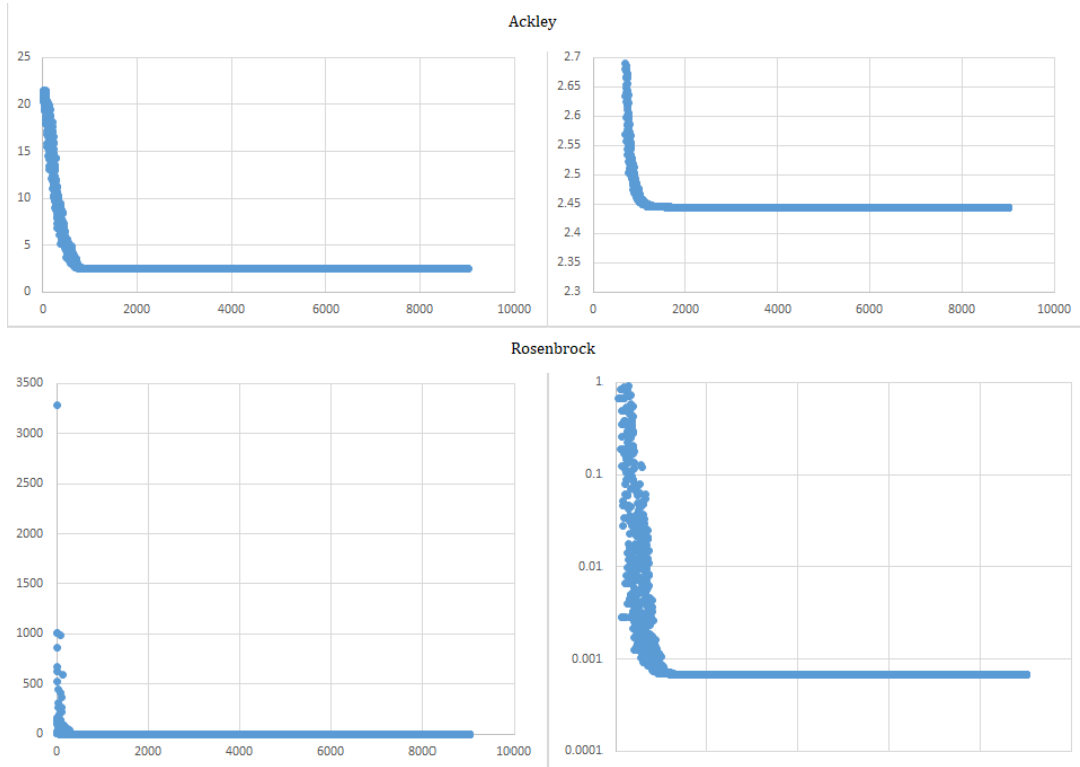
Όλες οι εκτελέσεις για κάθε στρατηγική μετάλλαξης πραγματοποιήθηκαν χωρίς την προσθήκη της υποκατάστατης μοντελοποίησης (δηλαδή όλες οι αξιολογήσεις είναι ακριβείς), με τιμή των παραμέτρων $F = 0.6$ και $CR = 0.45$ και με κριτήριο διακοπής τις 1000 γενιές. Όλες οι στρατηγικές θα κριθούν ως προς την ικανότητα της αναζήτησης (σφαιρικής ή τοπικής) που επιφέρουν, μέσω ανάλυσης των τιμών προσαρμογής, του μεγέθους των ακριβών αξιολογήσεων και επίσης της παρέκκλισης των τιμών προσαρμογής, όταν έχει συγκλίνει ο αλγόριθμος.

DE/apsade

Η συγκεκριμένη στρατηγική χρησιμοποιείται στον αλγόριθμο εφαρμογής APSADE.

$$\begin{aligned} donor(i)^G &= rand_1 * gene(i, x_{r_1,i}^G) + rand_2 * gene(i, x_{r_2,i}^G) + rand_3 * gene(i, x_{r_3,i}^G) \\ v_{k,i}^{G+1} &= donor(i)^G + F(x_{r_2,i}^G - x_{r_3,i}^G) \end{aligned} \quad 5.1$$

Όπου $rand_1, rand_2, rand_3 \in [0,1]$ και $r_1 \neq r_2 \neq r_3 \in \{1,2, \dots, Np\}$.



Σχήμα 5.2: Επίλυση του Αλγόριθμου με την DE/apsade στρατηγική μετάλλαξης

Στο Σχήμα 5.2 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα από την επίλυση του αλγορίθμου με την στρατηγική μετάλλαξης DE/apsade. Επάνω αριστερά φαίνονται τα αξιολογημένα σημεία σε όλο το εύρος του χώρου σχεδίασης της συνάρτησης Ackley και επάνω δεξιά σε ένα μικρό εύρος, όπου έχει συγκλίνει ο αλγόριθμος. Παρόμοια παρουσιάζονται τα αξιολογημένα σημεία και στο κάτω σκέλος του Σχήματος 5.2 κατά την επίλυση της συνάρτησης Rosenbrock.

Παρατηρούμε ότι με τη στρατηγική μετάλλαξης DE/apsade στην συνάρτηση Ackley, ο αλγόριθμος παγιδεύεται νωρίς (1000 αξιολογήσεις περίπου) σε ένα τοπικό βέλτιστο με καλύτερη τιμή προσαρμογής περίπου στο 2.45. Στην συνάρτηση Rosenbrock, ο αλγόριθμος συγκλίνει σε μια ικανοποιητική τιμή (κοντά στο 0), αλλά αδυνατεί να βρεί τη βέλτιστη λύση. Και στις δύο περιπτώσεις παρατηρούμε ότι οι μεταλλάξεις μετά την σύγκλιση του αλγορίθμου δεν επιφέρουν μεγάλη ποικιλομορφία στον πληθυσμό.

Αυτό μπορεί να παρατηρηθεί από την σχεδόν ευθεία γραμμή που σχηματίζεται μετά την σύγκλιση του αλγορίθμου.

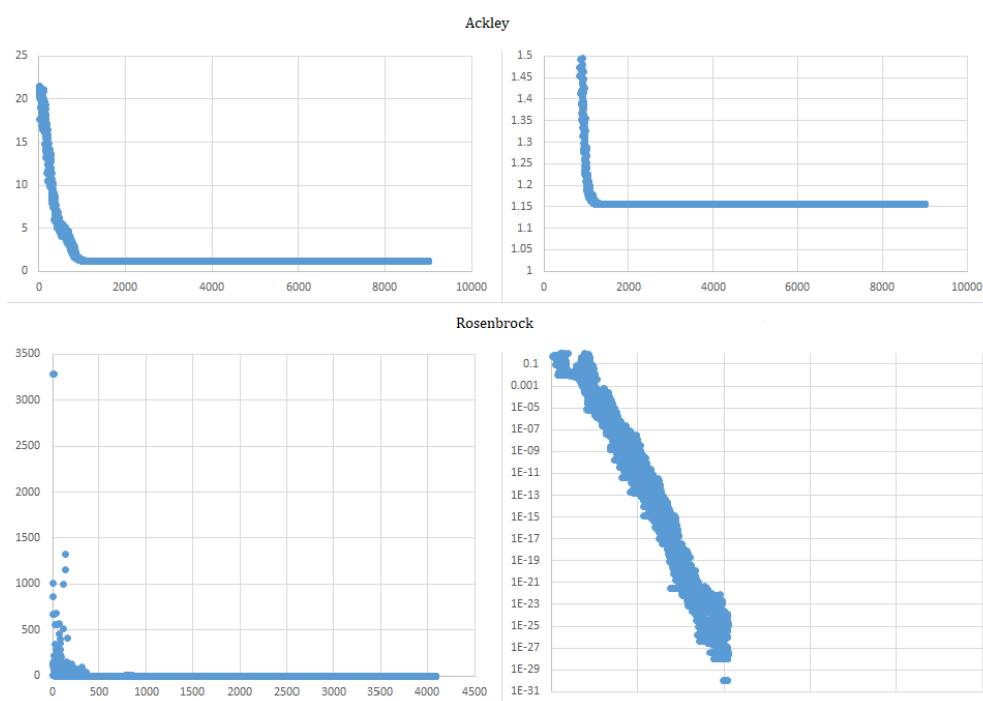
Με τις παρατηρήσεις που κάναμε, μπορούμε να αποφανθούμε στο συμπέρασμα ότι η στρατηγική μετάλλαξης DE/apsade επιφέρει μια ενδιάμεση κατάσταση μεταξύ τοπικής και σφαιρικής αναζήτησης στον χώρο σχεδίασης.

DE/best/1

Σύμφωνα με τους [Liu et al., 2014] η DE/best/1 έχει συνήθως τη καλύτερη ταχύτητα σύγκλισης αλλά συγχρόνως και την λιγότερη ποικιλομορφία στα άτομα, σε σχέση με τις DE/rand/1 και DE/current-to-best/1. Στην εργασία των [Yang et al., 2019] η DE/best/1 χρησιμοποιείται για την βελτίωση της ταχύτητας σύγκλισης στις υποσχόμενες περιοχές.

$$v_{k,i}^{G+1} = x_{best,i}^G + F(x_{r_1,i}^G - x_{r_2,i}^G) \quad 5.2$$

Όπου $r_1 \neq r_2 \neq best \in \{1, 2, \dots, Np\}$ και το best δηλώνει το καλύτερο χρωμόσωμα του τωρινού πληθυσμού.



Σχήμα 5.3: Επίλυση του Αλγόριθμου με την DE/best/1 στρατηγική μετάλλαξης.

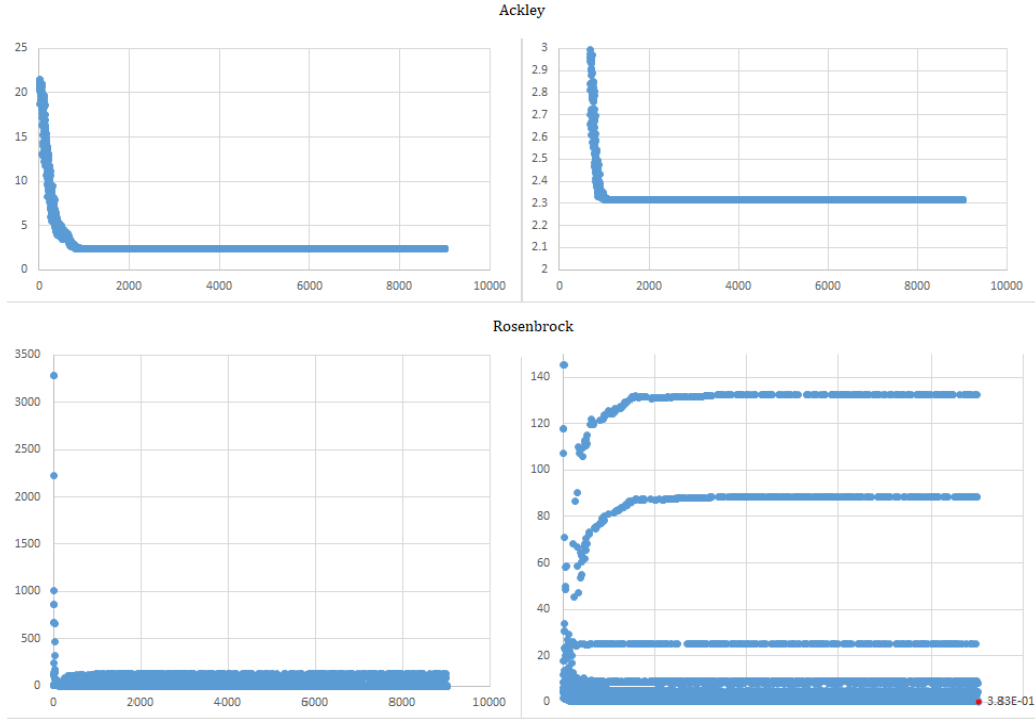
Κατά την επίλυση της συνάρτησης Ackley, παρατηρούμε παρόμοια αποτελέσματα με την DE/apsade, ο αλγόριθμος παγιδεύεται νωρίς σε ένα τοπικό ελάχιστο, με τιμή προσαρμογής περίπου στο 1.15 και δεν παρατηρείται μεγάλη διακύμανση της τιμής αυτής κατά τις επόμενες μεταλλάξεις. Στη συνάρτηση Rosenbrock, ο αλγόριθμος είναι ικανός να βρει το ολικό βέλτιστο στις 4000 ακριβείς αξιολογήσεις. Αυτό μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η στρατηγική μετάλλαξης DE/best/1, έχει πολύ καλή ικανότητα τοπικής αναζήτησης.

DE/current-to-best/1

Η στρατηγική μετάλλαξης DE/best/1 μπορεί να μην έχει επαρκή πληθυσμιακή ποικιλομορφία, επειδή η προστιθέμενη ποικιλομορφία στο τρέχοντα καλύτερο σχέδιο δεν είναι μεγάλη. Αντίθετα, η DE/rand/1 μπορεί να εισαγάγει υπερβολική πληθυσμιακή ποικιλομορφία. Η DE/current-to-best/1 βρίσκεται στη μέση [Liu et al., 2017]. Οι [Yang et al., 2019] χρησιμοποιούν την DE/current-to-best/1 ως την κύρια στρατηγική μετάλλαξης για την απόκτηση γρήγορης ταχύτητας σύγκλισης.

$$v_{k,i}^{G+1} = x_i^G + F(x_{best,i}^G - x_i^G) + F(x_{r_1,i}^G - x_{r_2,i}^G)$$

5.3



Σχήμα 5.4: Επίλυση του Αλγόριθμου με την DE/current-to-best/1 στρατηγική μετάλλαξης.

Από τα αποτελέσματα παρατηρούμε ότι στην συνάρτηση Ackley η DE/current-to-best/1 συμπεριφέρεται όπως και οι υπόλοιπες στρατηγικές μετάλλαξης, που επιφέρουν τοπική αναζήτηση στον χώρο σχεδίασης. Στη συνάρτηση Rosenbrock όμως παρατηρούμε μια πολύ γρήγορη ταχύτητα σύγκλισης (~1000 αξιολογήσεις), καθώς και την μη ανταπόκριση των ατόμων του πληθυσμού στην εξέλιξη του πληθυσμού. Αυτό παρατηρείται από τις διαφορετικές καμπύλες που έχουν δημιουργηθεί στο Σχήμα 5.4, οι οποίες αντιπροσωπεύουν την εξέλιξη του κάθε ατόμου ξεχωριστά. Επίσης παρατηρούμε από τις σχεδόν ευθείες καμπύλες που σχηματίζονται, ότι η διατάραξη των ατόμων που προκαλεί η συγκεκριμένη στρατηγική μετάλλαξης δεν είναι επαρκής για την δημιουργία διαφορετικών λύσεων, δηλαδή την ικανότητα ποικιλομορφίας που προσφέρει μία σφαιρική αναζήτηση. Από τα παραπάνω οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι η DE/current-to-best/1, ναι μεν συμπεριφέρεται σαν μια τοπική στρατηγική αναζήτησης, αλλά δεν παρουσιάζει ισχυρή ικανότητα τοπικής αναζήτησης για να συγκλίνει στην βέλτιστη λύση του προβλήματος αναφοράς Rosenbrock. Παρ' όλα αυτά, προτείνεται για μια τοπική αναζήτηση στον χώρο σχεδίασης με ταχεία ταχύτητα σύγκλισης.

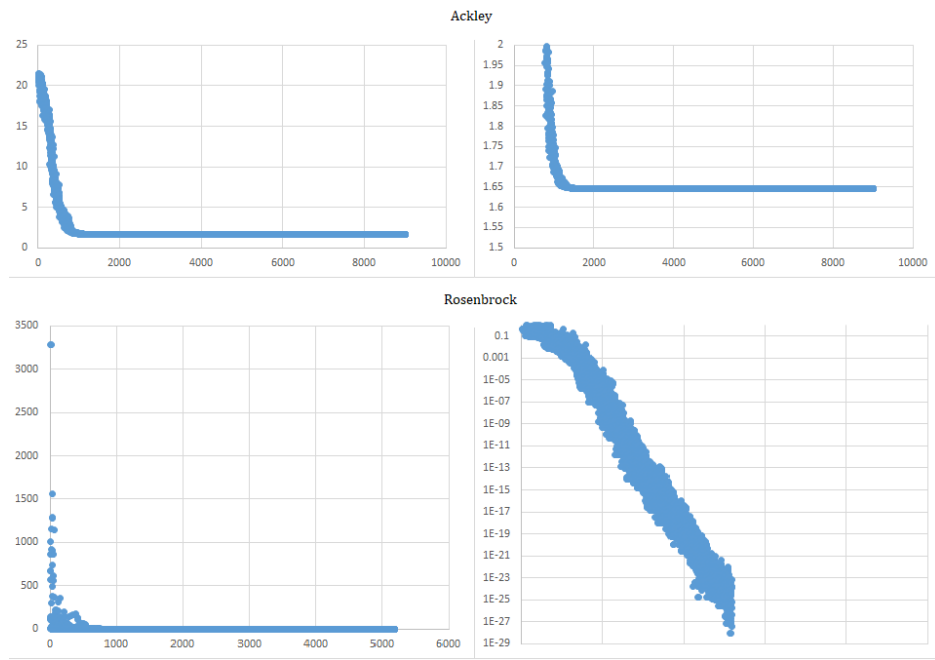
DE/current-to-randbest/1

Η στρατηγική DE/current-to-randbest/1 δίνει μεγαλύτερη προσοχή στις πληροφορίες που λαμβάνονται από τα τυχαία άτομα σε σχέση με αυτές που προσφέρονται από τα καλύτερα άτομα. Έτσι μπορεί να επιτευχθεί ισχυρότερη σφαιρική αναζήτηση [Yang et al., 2019]:

$$v_{k,i}^{G+1} = x_i^G + rand(x_{best,i}^G - x_i^G) + F(x_{r_1,i}^G - x_{r_2,i}^G)$$

5.4

Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται παρακάτω αντικρούονται με τους ισχυρισμούς των [Yang et al., 2019]. Παρατηρούμε παρόμοια συμπεριφορά με την στρατηγική μετάλλαξης DE/best/1, με την διαφορά μιας πιο πυκνής καμπύλης στον λογαριθμικό άξονα κατά την επίλυση της συνάρτησης Rosenbrock, δηλαδή παρατηρείται περισσότερη διακύμανση των αξιολογημένων σημείων από την DE/best/1. Ίσως αυτό να οδήγησε τους [Yang et al., 2019] στο συμπέρασμα ότι η DE/current-to-randbest/1 προσφέρει ισχυρότερη σφαιρική αναζήτηση, μπορεί όμως σε άλλα προβλήματα αναφοράς η DE/current-to-randbest/1 να παρουσιάζει διαφορετική συμπεριφορά.



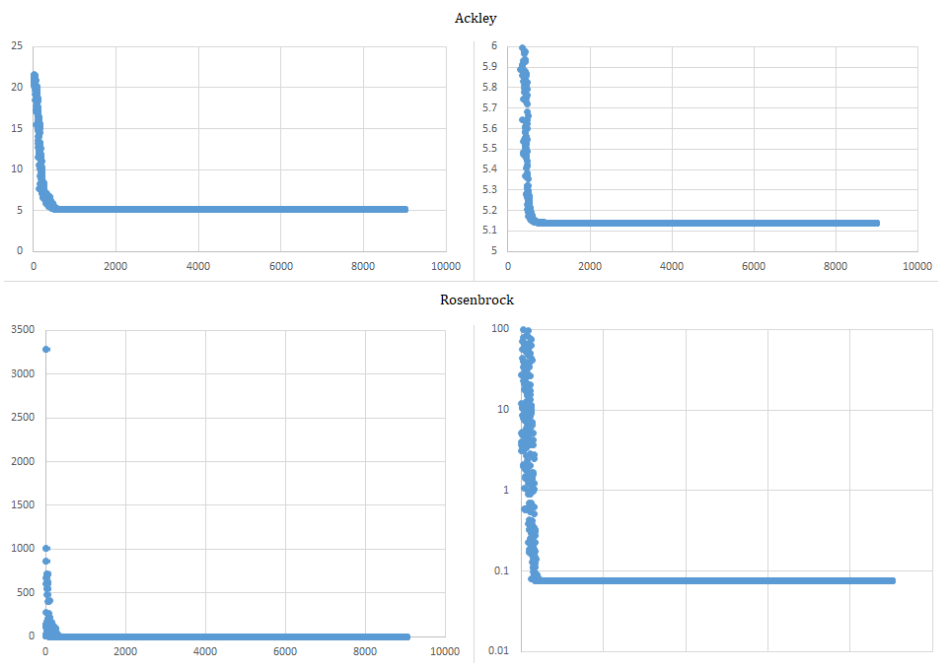
Σχήμα 5.5: Επίλυση του Αλγόριθμου με την DE/current-to-randbest/1 στρατηγική μετάλλαξης

Από τα αποτελέσματα μας παρατηρούμε ότι η DE/current-to-randbest/1 στη συνάρτηση Ackley παγιδεύεται νωρίς σε ένα τοπικό βέλτιστο, ενώ στη συνάρτηση Rosenbrock είναι ικανή να βρει το ολικό βέλτιστο, αλλά με περισσότερες ακριβείς αξιολογήσεις από την DE/best/1. Ως εκ τούτου, μπορούμε να αποφανθούμε στο συμπέρασμα ότι η DE/current-to-randbest/1 προσφέρει τοπική αναζήτηση στον χώρο σχεδίασης, αλλά λιγότερη ισχυρή από την DE/best/1.

DE/current-to-rand/1

Η συγκεκριμένη στρατηγική μετάλλαξης εισήχθη από τους [Chen et al., 2019], αλλά δεν παρέχονται πληροφορίες ως προς την αναζήτηση που πραγματοποιεί.

$$v_{k,i}^{G+1} = x_i^G + F(x_{r_1,i}^G - x_i^G) + F(x_{r_2,i}^G - x_i^G) \quad 5.5$$



Σχήμα 5.6: Επίλυση του Αλγόριθμου με την DE/current-to-rand/1 στρατηγική μετάλλαξης.

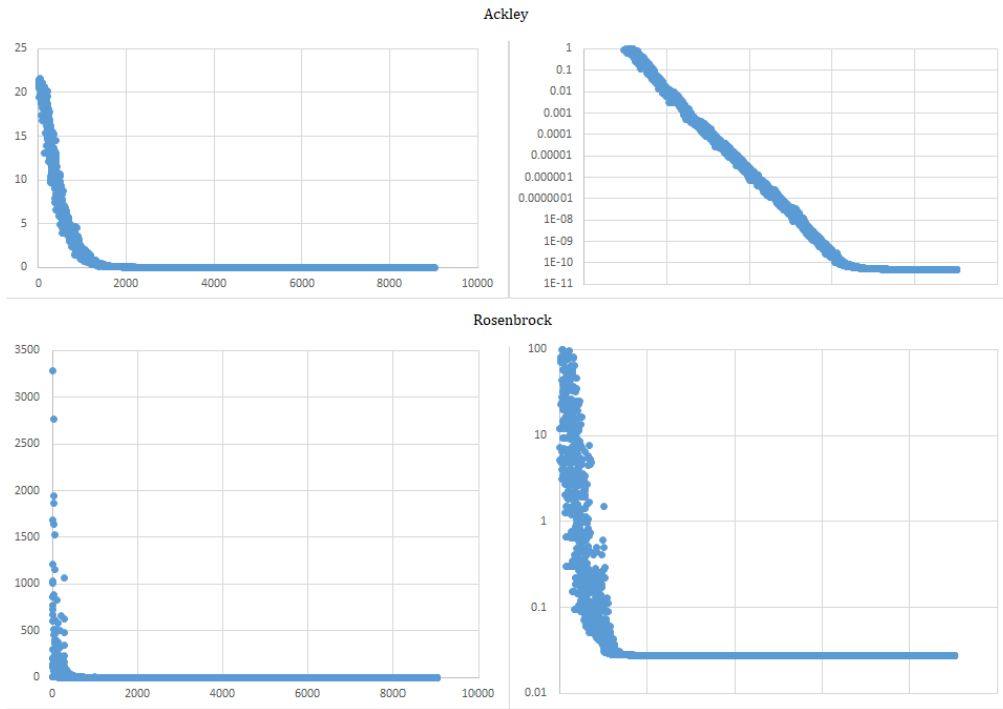
Από τα αποτελέσματα του Σχήματος 5.6 παρατηρούμε ότι η DE/current-to-rand/1 δεν έχει ισχυρή ικανότητα ούτε σφαιρικής, ούτε τοπικής αναζήτησης. Και στα δύο προβλήματα αναφοράς, ο αλγόριθμος αδυνατεί να βρεί την βέλτιστη λύση και συγκλίνει πολύ γρήγορα. Σε καμία από τις δύο συναρτήσεις δεν παρατηρείται ποικιλομορφία στις λύσεις του πληθυσμού. Άρα μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η συγκεκριμένη στρατηγική αναζήτησης ανήκει σε μια ενδιάμεση κατάσταση, μεταξύ σφαιρικής και τοπικής αναζήτησης.

DE/rand/1

Η DE/rand/1 χρησιμοποιείται στις εργασίες των [Liu et al., 2014; 2017] και ειδικά αναφέρεται ότι προκαλεί μεγάλη ποικιλομορφία στον πληθυσμό. Αυτό παρατηρείται και από τα αποτελέσματα παρακάτω, όπου στην συνάρτηση Ackley είναι ικανή να ξεφύγει από τα τοπικά βέλτιστα και να συγκλίνει σε μια τιμή της τάξεως της 10^{-11} (πολύ κοντά στο ολικό βέλτιστο). Στην συνάρτηση Rosenbrock αδυνατεί να πλησιάσει το ολικό βέλτιστο, όπως ήταν αναμενόμενο για μια σφαιρική στρατηγική αναζήτησης, σε ένα τέτοιο τοπίο σχεδίασης. Άρα καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η στρατηγική μετάλλαξης DE/rand/1, λειτουργεί ως μία στρατηγική σφαιρικής αναζήτησης.

$$v_{k,i}^{G+1} = x_{r_1,i}^G + F(x_{r_2,i}^G - x_{r_3,i}^G) \quad 5.6$$

Όπου $r_1 \neq r_2 \neq r_3 \in \{1, 2, \dots, Np\}$.



Σχήμα 5.7: Επίλυση του Αλγόριθμου με την DE/rand/1 στρατηγική μετάλλαξης.

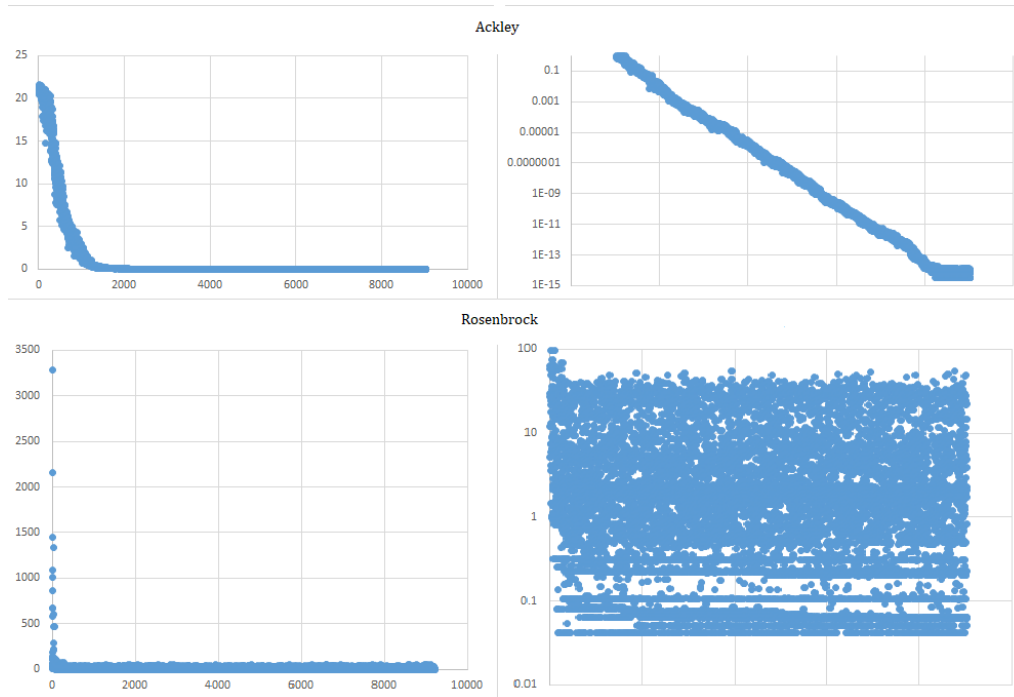
DE/rand/1/dir

Η στρατηγική μετάλλαξης DE/rand/1/dir προτάθηκε από τους [Feoktistov et al., 2004]:

$$v_{k,i}^{G+1} = x_{r_1,i}^G + F/2(x_{r_2,i}^G - x_{r_3,i}^G) \quad 5.7$$

Όπως παρατηρούμε από το Σχήμα 5.8, ο αλγόριθμος με την χρήση της DE/rand/1/dir στρατηγικής μετάλλαξης κατά την επίλυση της συνάρτησης Ackley, συγκλίνει σε μια πολύ κοντινή τιμή στο ολικό βέλτιστο (10^{-15}). Μετά την σύγκλιση του αλγορίθμου παρατηρείται μεγάλη ποικιλομορφία στις λύσεις του πληθυσμού και αυτό φαίνεται από την πυκνή γραμμή στο Σχήμα 5.8 (λογαριθμικός άξονας), σε σχέση με προηγούμενες εκτελέσεις (διαφορετικές στρατηγικές μετάλλαξης). Η χρήση της για την

επίλυση της συνάρτησης Rosenbrock, έχει ως αποτέλεσμα τη ταχεία σύγκλιση σε ένα ψευδές βέλτιστο, αλλά με την παρουσία μεγάλης ποικιλομορφίας.



Σχήμα 5.8: Επίλυση του Αλγόριθμου με την DE/rand/1/dir στρατηγική μετάλλαξης.

Όπως έχουμε αναφέρει, λόγω του τοπίου της συνάρτησης Rosenbrock, μια στρατηγική μετάλλαξης με ικανότητα σφαιρικής αναζήτησης παρουσιάζει μεγάλη δυσκολία στο να αναζητήσει τη βέλτιστη λύση. Αυτό το φαινόμενο παρατηρείται και στην συγκεκριμένη στρατηγική, συνεπώς μπορούμε να συμπεράνουμε ότι, η στρατηγική μετάλλαξης DE/rand/1/dir συμπεριφέρεται ως μία σφαιρική στρατηγική αναζήτησης.

DE/hybrid/trigonometric

Μια μετάλλαξη του DE πραγματοποιείται συνήθως βάσει τριών ατόμων στον τρέχοντα πληθυσμό. Ένα άτομο, που λαμβάνεται ως δότης, διαταράσσεται με ένα κλιμακούμενο διάνυσμα διαφοράς από τα άλλα δύο άτομα έτσι ώστε να παραχθεί ένα μεταλλαγμένο άτομο. Αυτό επιτρέπει τον σχηματισμό ενός υπέρ-γεωμετρικού τριγώνου στον χώρο αναζήτησης, όπου τα τρία επιλεγμένα άτομα (σημεία) υπάρχουν ως κορυφές, και τη χρήση των τιμών της αντικειμενικής συνάρτησης των επιλεγμένων ατόμων μαζί με αυτό το τρίγωνο σε μια λειτουργία μετάλλαξης. Εφαρμόζοντας επίσης τις πληροφορίες των τιμών της αντικειμενικής συνάρτησης στη μετάλλαξη, οι διαταραχές μπορούν να προκαλούνται προς τα σημεία (τις κορυφές του υπέρ-γεωμετρικού τριγώνου) παρέχοντας τις χαμηλότερες τιμές αντικειμενικής συνάρτησης [Fan et al., 2003].

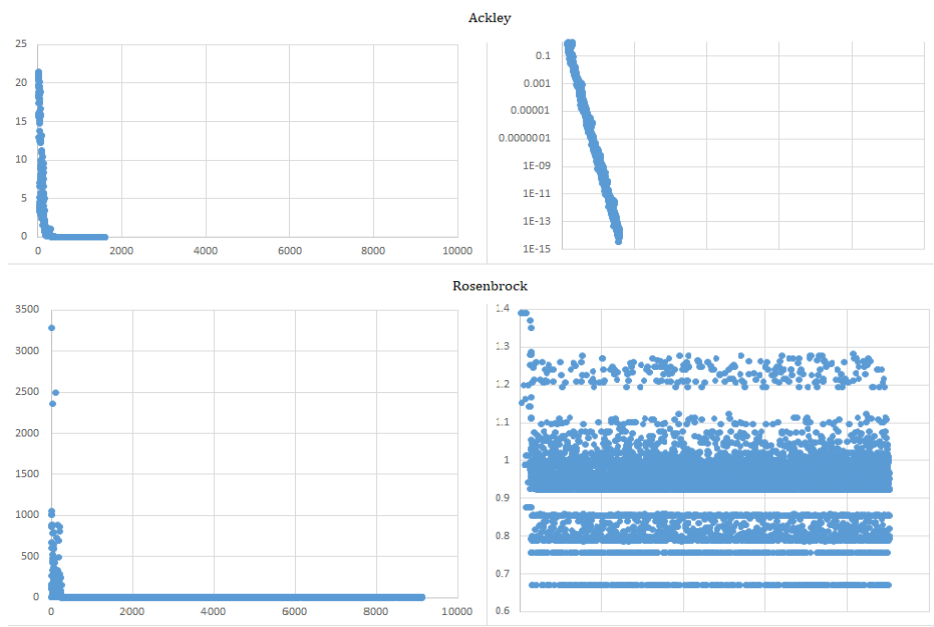
Από τα παραπάνω, προτείνεται από τους [Fan et al., 2003] μια νέα προσέγγιση μετάλλαξης, δηλαδή μια συνάρτηση τριγωνομετρικής μετάλλαξης που περιγράφεται ως ακολούθως. Όταν εκτελείται μια συνάρτηση τριγωνομετρικής μετάλλαξης, αντί ενός ατόμου που λαμβάνεται τυχαία από τα τρία επιλεγμένα όπως στην βασική μετάλλαξη του DE (DE/rand/1), ο δότης που πρέπει να διαταραχθεί θεωρείται ότι είναι το κεντρικό σημείο του υπέρ-γεωμετρικού τριγώνου. Η διαταραχή που επιβάλλεται στον δότη αντισταθμίζεται στη συνέχεια με ένα άθροισμα τριών σταθμισμένων διαφορικών φορέων.

$$p_s = |f(x_{r_1}^G)| + |f(x_{r_2}^G)| + |f(x_{r_3}^G)| \quad 5.8$$

$$p_1 = \frac{|f(x_{r_1}^G)|}{p_s}, \quad p_2 = \frac{|f(x_{r_2}^G)|}{p_s}, \quad p_3 = \frac{|f(x_{r_3}^G)|}{p_s} \quad 5.9$$

$$v_{k,i}^{G+1} = \frac{x_{r_1,i}^G + x_{r_2,i}^G + x_{r_3,i}^G}{3} + (p_2 - p_1)(x_{r_1,i}^G - x_{r_2,i}^G) + (p_3 - p_2)(x_{r_2,i}^G - x_{r_3,i}^G) + (p_1 - p_3)(x_{r_3,i}^G - x_{r_1,i}^G) \quad 5.10$$

Όπου $r_1 \neq r_2 \neq r_3 \in \{1, 2, \dots, Np\}$ και $f(x)$ η τιμή της συνάρτησης προσαρμογής του εκάστοτε χρωμοσώματος.



Σχήμα 5.9: Επίλυση του Αλγόριθμου με την DE/hybrid/trigonometric στρατηγική μετάλλαξης.

Η DE/hybrid/trigonometric είναι ικανή να βρεί το ολικό βέλτιστο στη συνάρτηση Ackley με λιγότερες ακριβές αξιολογήσεις από 2000. Στην Rosenbrock συνάρτηση συγκλίνει γρήγορα σε μία μη βέλτιστη λύση, όμως παρουσιάζει μεγάλη ποικιλομορφία στις μεταλλάξεις της, όπως φαίνεται στο παραπάνω σχήμα. Από τα παραπάνω αποτελέσματα βλέπουμε ότι η DE/hybrid/trigonometric στρατηγική μετάλλαξη, συμπεριφέρεται ως μια στρατηγική σφαιρικής αναζήτησης με πολύ γρήγορη ταχύτητα σύγκλισης.

Στον Πίνακα 5.1 συνοψίζονται η ικανότητα αναζήτησης στον χώρο σχεδίασης και η ταχύτητα σύγκλισης για κάθε στρατηγική μετάλλαξης από τις παραπάνω που εξετάστηκαν στην παρούσα εργασία.

Πίνακας 5.1: Συνοπτικός πίνακας των στρατηγικών μεταλλάξεων που εξετάστηκαν.

Στρατηγικές Μετάλλαξης	Ικανότητα Αναζήτησης	Ταχύτητα Σύγκλισης
<i>DE/apsade</i>	ενδιάμεση	πολύ γρήγορη
<i>DE/best/1</i>	τοπική	γρήγορη
<i>DE/current-to-best/1</i>	ενδιάμεση	πολύ γρήγορη
<i>DE/current-to-randbest/1</i>	τοπική	γρήγορη
<i>DE/rand/1</i>	σφαιρική	ικανοποιητική
<i>DE/current-to-rand/1</i>	ενδιάμεση	πολύ γρήγορη
<i>DE/rand/1/dir</i>	σφαιρική	ικανοποιητική
<i>DE/hybrid/trigonometric</i>	σφαιρική	Γρήγορη

Σε επόμενη ενότητα θα αναφερθούμε σε μεθόδους που εφαρμόσαμε στον αλγόριθμο μας, στις οποίες γίνεται χρήση πολλαπλών στρατηγικών μεταλλάξεων, καθώς και πώς πραγματοποιείται η εναλλαγή των στρατηγικών αυτών.

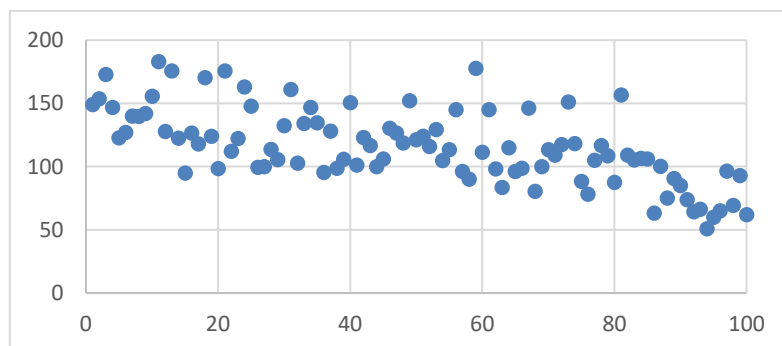
5.3 ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

Όπως αναφέραμε και στην ενότητα 3.1, το πιο σημαντικό κριτήριο για τη δημιουργία ενός επιτυχημένου υποκατάστατου μοντέλου είναι η μέθοδος επιλογής των δεδομένων εκπαίδευσής του. Ένα επιτυχημένο υποκατάστατο μοντέλο θα κάνει σωστές εκτιμήσεις και θα επιταχύνει τον αλγόριθμό μας, γλιτώνοντάς μας από ακριβές υπολογιστικά ακριβείς αξιολογήσεις των εκτιμώμενων σημείων που έχουν χειρότερη φυσική κατάσταση από αυτήν των γονέων τους. Ένα μη επιτυχημένο υποκατάστατο μοντέλο θα πραγματοποιεί λάθος εκτιμήσεις, με αποτέλεσμα την πρόωρη σύγκλιση και παγίδευση του αλγορίθμου σε τοπικό βέλτιστο ή την επιβράδυνση του αλγορίθμου. Αν το υποκατάστατο μοντέλο αξιολογεί λάθος τους απογόνους ως χειρότερης φυσικής κατάστασης, τότε ο αλγόριθμος θα συγκλίνει γρήγορα σε ένα ψευδές βέλτιστο (λόγω του ότι δεν μπορεί να βρεθεί καλύτερο άτομο) και συγκεκριμένα στον αλγόριθμο μας (APSADE) η εξελίξη θα προχωράει μόνο από τα άτομα που υπόκεινται σε ακριβή αξιολόγηση δίχως την εκτίμηση των υποκατάστατων (ένα μικρό ποσοστό περίπου 10% του πληθυσμού που χρησιμοποιείται για την ευρωστία του αλγορίθμου). Στην άλλη περίπτωση, όπου το υποκατάστατο μοντέλο επί το πλείστον αξιολογεί λανθασμένα τους απογόνους ως καλύτερης φυσικής κατάστασης από τον γονέα τους, τότε ο αλγόριθμος θα αξιολογεί επ'ακριβώς όλους τους απογόνους, όπως ακριβώς γίνεται χωρίς την χρήση των υποκατάστατων μοντέλων. Αυτό θα έχει ως αποτέλεσμα την επιβράδυνση του αλγορίθμου λόγω της χρήσης περισσειων εντολών για την μη ωφέλιμη εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων.

Για τους παραπάνω λόγους εισαγάγαμε στον αλγόριθμο μας όλες τις μεθοδολογίες επιλογής δεδομένων εκπαίδευσης που αναφέραμε στο κεφάλαιο 3, με σκοπό την εύρεση της καλύτερης μεθοδολογίας για την κατασκευή ενός επιτυχημένου υποκατάστατου μοντέλου, ανάλογα με την φάση αναζήτησης που πραγματοποιείται. Ο αλγόριθμός μας, όπως αναφέραμε και στο κεφάλαιο 4, χρησιμοποιεί την μέθοδο **Best** για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων. Παρακάτω θα αναφέρουμε όλες τις μεθόδους επιλογής δεδομένων εκπαίδευσης για την εκπαίδευση των υποκατάστατων μοντέλων που εισαγάγαμε στον αλγόριθμο μας, καθώς και μία περιγραφή της λειτουργίας τους.

API DB

Στη συγκεκριμένη μεθοδολογία, όλα τα δεδομένα της βάσης δεδομένων χρησιμοποιούνται για την εκπαίδευση των υποκατάστατων μοντέλων. Συνήθως χρησιμοποιείται για την δημιουργία ενός σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου και για την προ-αξιολόγηση των απογόνων κατά την σφαιρική φάση αναζήτησης, όπως είδαμε και στο κεφάλαιο 3. Τα δεδομένα της βάσης δεδομένων εξαρτώνται από τον τρόπο εισαγωγής τους σε αυτήν. Άναλογα με το τρόπο εισαγωγής των δεδομένων στη βάση δεδομένων αυξομειώνεται και το μέγεθός της, που στη συγκεκριμένη στρατηγική παίζει σημαντικό ρόλο. Όσο μεγαλύτερο το μέγεθος της βάσης δεδομένων τόσο περισσότεροι και ο υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται στη συγκεκριμένη μεθοδολογία.



Σχήμα 5.10: Απεικόνιση των δεδομένων της βάσης δεδομένων με τη σειρά που έχουν εισαχθεί (γενιά).

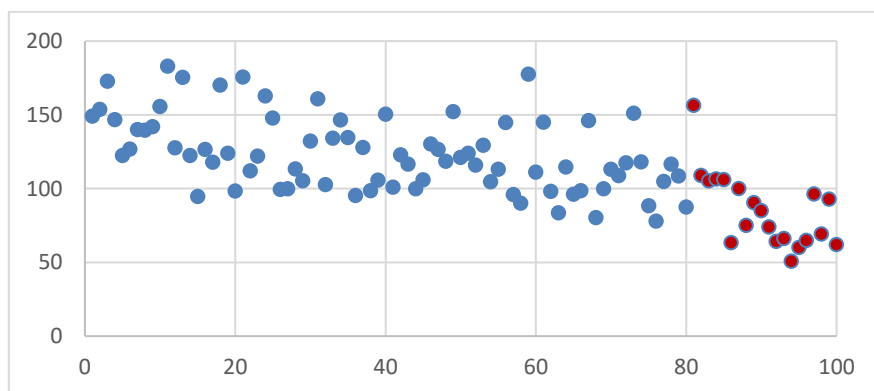
Στο Σχήμα 5.10 παρουσιάζονται όλα τα δεδομένα που έχουν εισαχθεί στη βάση δεδομένων από ένα χρωμόσωμα με το πέρασ 100 γενεών. Υποθέτουμε ότι η βάση δεδομένων περιέχει μόνο αυτά τα σημεία για τη διευκόλυνση της απεικόνισής της. Όλα τα σημεία που απεικονίζονται στο συγκεκριμένο

γράφημα χρησιμοποιούνται ως δεδομένα εκπαίδευσης για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων στον αλγόριθμο μας.

Newest

Τα τ (προκαθορισμένος αριθμός) νεότερα αξιολογημένα σημεία (δεδομένα) της βάσης δεδομένων, χρησιμοποιούνται ως δεδομένα εκπαίδευσης για την εκπαίδευση των υποκατάστατων μοντέλων. Η συγκεκριμένη μεθοδολογία επιφέρει μια μικροσκελή σφαιρική απεικόνιση του χώρου αν έχει προηγηθεί σφαιρική αναζήτηση στον χώρο και μία τοπική απεικόνιση του χώρου εάν έχει προηγηθεί τοπική αναζήτηση στον χώρο σχεδίασης.

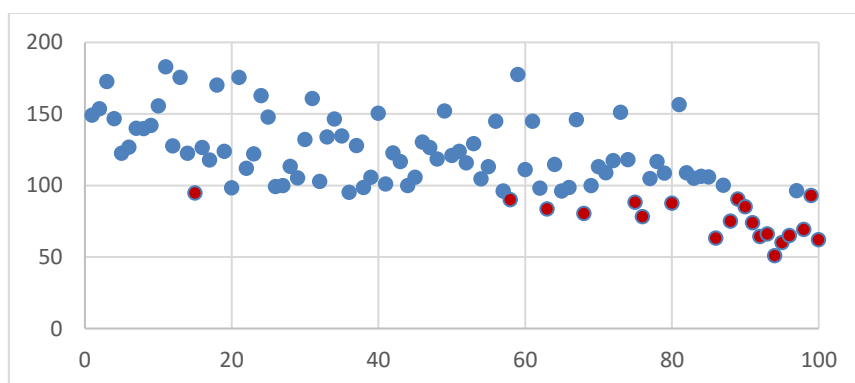
Παρακάτω, στο Σχήμα 5.11, παρουσιάζεται η απεικόνιση της βάσης δεδομένων, όπως και προηγουμένως. Οι κόκκινες κουκκίδες δηλώνουν τα δεδομένα που επιλέχθηκαν για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων. Υποθέτουμε ότι το τ ισούται με 20.



Σχήμα 5.11: Απεικόνιση των δεδομένων εκπαίδευσης που έχουν επιλεγεί από την βάση δεδομένων.

Best

Τα δεδομένα της βάσης δεδομένων κατανέμονται κατά αύξουσα σειρά σε σχέση με τις τιμές της φυσικής κατάστασης τους και τα τ (προκαθορισμένος αριθμός) καλύτερα σημεία (αρχικά σημεία μετά την κατανομή κατά αύξουσα σειρά σε προβλήματα ελαχιστοποίησης) επιλέγονται από τη βάση δεδομένων για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων. Στο Σχήμα 5.12 παρουσιάζονται τα επιλεγμένα σημεία από τη βάση δεδομένων για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων με κόκκινες κουκκίδες. Υποθέτουμε ότι το τ ισούται με 20.

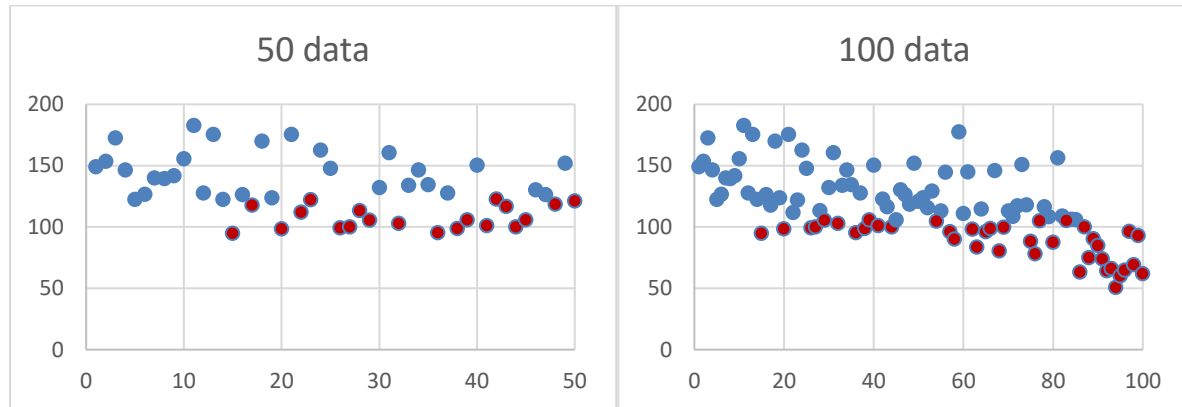


Σχήμα 5.12: Απεικόνιση των δεδομένων εκπαίδευσης που έχουν επιλεγεί από την βάση δεδομένων.

Top %

Ακολουθεί την μεθοδολογία της Best μεθόδου, αλλά αντί για έναν προκαθορισμένο αριθμό τ , χρησιμοποιείται ένα προκαθορισμένο ποσοστό $\tau\%$ της βάσης δεδομένων. Δηλαδή επιλέγονται ως δεδομένα εκπαίδευσης των νευρωνικών δικτύων τα σημεία που ανήκουν στο $\tau\%$ της βάσης δεδομένων,

εφόσον έχει προηγηθεί κατανομή της βάσης δεδομένων σε αύξουσα σειρά, με βάση τις τιμές προσαρμογής. Παρακάτω παρουσιάζονται τα δεδομένα που επιλέχθηκαν από τη βάση δεδομένων σε 50 γενιές (αριστερά) και σε 100 γενιές (δεξιά), με ένα ποσοστό $\tau = 40\%$.



Σχήμα 5.13: Απεικόνιση των δεδομένων εκπαίδευσης που έχουν επιλεγεί από την βάση δεδομένων.

Αρχικά μπορεί να κάνει τοπική απεικόνιση στον χώρο για την εκτίμηση των μεταμοντέλων, αλλά στη συνέχεια, λόγω της συνεχόμενης αύξησης των δεδομένων εκπαίδευσης, συμπεριφέρεται σαν την μέθοδο all DB αλλά σε μικρότερη κλίμακα, δηλαδή κάνει μια σφαιρική απεικόνιση του χώρου σχεδίασης.

Nearest Neighbors

Όπως είδαμε και στο κεφάλαιο 3, η Nearest Neighbors είναι η πιο συνηθισμένη μέθοδος για την εκπαίδευση των υποκατάστατων μοντέλων κατά την τοπική φάση αναζήτησης. Για κάθε νέο απόγονο δημιουργείται/εκπαιδεύεται ένα τοπικό υποκατάστατο μοντέλο, με τα κοντινότερα γειτονικά σημεία σε αυτό.

Στον δικό μας αλγόριθμο, ο οποίος είναι παράλληλος, η διαδικασία που ακολουθείται για την εφαρμογή της Nearest Neighbors είναι η εξής:

- *Ανανέωση της βάσης δεδομένων του εκάστοτε κόμβου, μέσω των εντολών `MPI_GET`.*
- *Κανονικοποίηση των γονιδίων, για την ίση επίδραση όλων των γονιδίων στην υπολογιζόμενη απόσταση (λόγω μεταβλητών σχεδίασης με διαφορετικές κλίμακες μέτρησης ή μίγματος αριθμητικών και κατηγορικών μεταβλητών).*

$$\text{Standardized value } X_s = \frac{X - \min}{\text{Max} - \min} \quad 5.11$$

Όπου, X_s η νέα κανονικοποιημένη τιμή, X η πραγματική τιμή και Max και \min τα άνω και κάτω όρια των τιμών του εκάστοτε γονιδίου αντίστοιχα.

- *Μέτρηση των αποστάσεων (με μια συνάρτηση απόστασης) μεταξύ των γονιδίων του απογόνου προς αξιολόγηση και των γονιδίων κάθε δεδομένου στη βάση δεδομένων.*
- *Εύρεση των τ κοντινότερων γειτονικών σημείων (μικρότερη τιμή απόστασης) και χρήση αυτών ως δεδομένα εκπαίδευσης για την δημιουργία ενός τοπικού υποκατάστατου μοντέλου.*

Συναρτήσεις απόστασης

Οι συναρτήσεις απόστασης μπορεί να είναι οι παρακάτω, αλλά συνήθως χρησιμοποιείται η Ευκλείδεια απόσταση, όπως θα χρησιμοποιήσουμε και εμείς στον δικό μας αλγόριθμο.

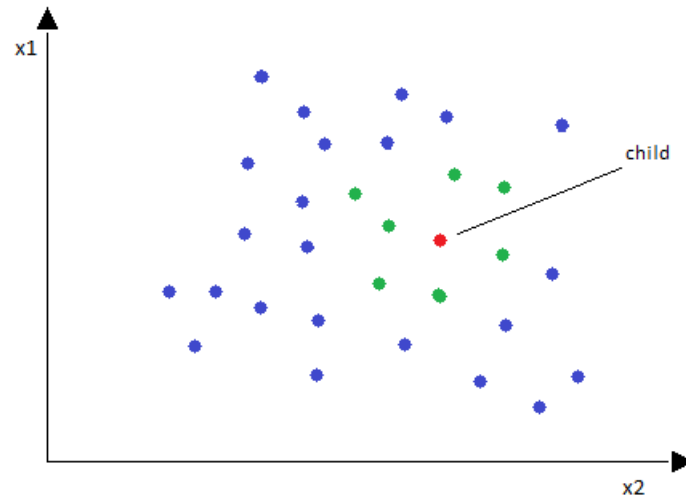
$$\text{Euclidean} \quad \sqrt{\sum_{i=1}^K (x_i - y_i)^2} \quad 5.12$$

$$\text{Manhattan} \quad \sum_{i=1}^K |x_i - y_i| \quad 5.13$$

$$\text{Minkowski} \quad (\sum_{i=1}^K (|x_i - y_i|)^q)^{1/q}$$

5.14

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζεται η επιλογή των δεδομένων εκπαίδευσης από τη βάση δεδομένων κατά τη χρήση της μεθοδολογίας Nearest Neighbors, σε έναν διδιάστατο χώρο σχεδίασης (2 γονίδια). Όλες οι κουκκίδες εκτός από την κόκκινη αποτελούν όλα τα δεδομένα της βάσης δεδομένων, η κόκκινη κουκκίδα δηλώνει τον προς αξιολόγηση απόγονο και οι πράσινες τους κοντινότερους 7 ($\tau = 7$) σε απόσταση γειτόνους από τη βάση δεδομένων προς τον απόγονο, οι οποίοι θα χρησιμοποιηθούν για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων.

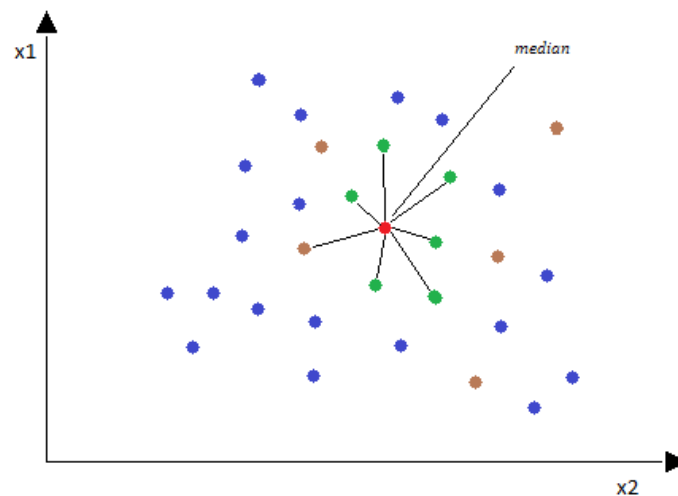


Σχήμα 5.14: Απεικόνιση της επιλογής των δεδομένων εκπαίδευσης με την μέθοδο NearestNeighbors σε έναν διδιάστατο χώρο.

PAS

Δημιουργείται ένα ενιαίο υποκατάστατο μοντέλο για την εκτίμηση όλων των απογόνων στην επόμενη γενιά. Εφόσον έχει ολοκληρωθεί μια γενιά, όλα τα άτομα του πληθυσμού κατανέμονται σε αύξουσα σειρά σε σχέση με τις τιμές προσαρμογής τους. Γίνεται εύρεση του ενδιαμέσου ατόμου και στη συνέχεια ακολουθείται παρόμοια διαδικασία με της Nearest Neighbors, αλλά ως προς τον ενδιαμέσο άτομο αντί του προς αξιολόγηση απογόνου.

Στον APSADE, η διαδικασία αυτή καλείται όταν έχει κληθεί η κατασκευή/επανεκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων από τον κύριο κόμβο (καλείται όταν ένας μετρητής των ακριβών αξιολογήσεων ισούται με το μέγεθος του πληθυσμού). Μετά από την δημιουργία/επανεκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων, ο προαναφερόμενος μετρητής μηδενίζεται.



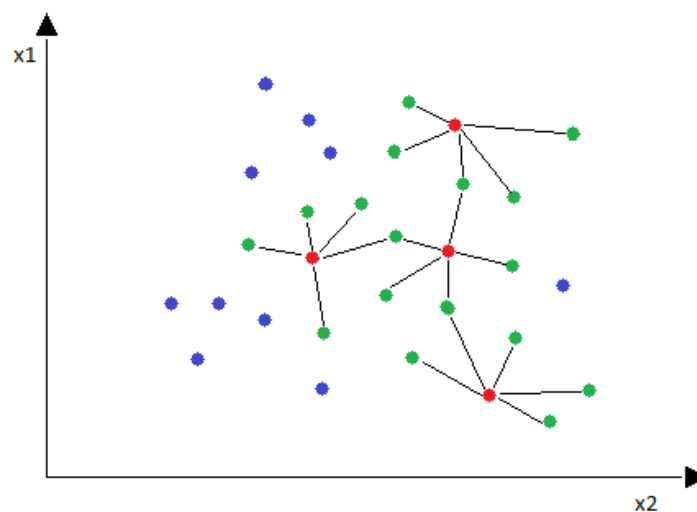
Σχήμα 5.15: Απεικόνιση της επιλογής των δεδομένων εκπαίδευσης με την μέθοδο PAS σε έναν διδιάστατο χώρο.

Στο Σχήμα 5.15 απεικονίζεται η επιλογή των δεδομένων εκπαίδευσης από τη βάση δεδομένων κατά τη χρήση της μεθοδολογίας PAS, σε έναν διδιάστατο χώρο σχεδίασης (2 γονίδια). Όλες οι κουκκίδες αποτελούν όλα τα δεδομένα της βάσης δεδομένων, οι καφέ κουκκίδες δηλώνουν τα άτομα του τωρινού πληθυσμού και η κόκκινη το ενδιάμεσο άτομο από αυτά. Οι πράσινες κουκκίδες δηλώνουν τους κοντινότερους 7 ($\tau = 7$) σε απόσταση γειτόνους από τη βάση δεδομένων προς το ενδιάμεσο άτομο, οι οποίοι θα χρησιμοποιηθούν για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων.

ISS

Η μέθοδος ατομικής λύσης (ISS), ακολουθεί την ίδια λογική με την μέθοδο PAS, αλλά αντί της εύρεσης των κοντινότερων σημείων στο ενδιάμεσο άτομο του εκάστοτε πληθυσμού, γίνεται εύρεση των τ (προκαθορισμένος αριθμός) κοντινότερων σημείων από τη βάση δεδομένων για κάθε άτομο του πληθυσμού. Ακολουθείται μια απαλοιφή των διπλότυπων σημείων και τα υπολοιπόμενα χρησιμοποιούνται ως δεδομένα εκπαίδευσης για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων.

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζεται η επιλογή των δεδομένων εκπαίδευσης από τη βάση δεδομένων κατά τη χρήση της μεθοδολογίας ISS, σε έναν διδιάστατο χώρο σχεδίασης (2 γονίδια). Όλες οι κουκκίδες αποτελούν τα δεδομένα της βάσης δεδομένων, οι κόκκινες κουκκίδες δηλώνουν τα άτομα του τωρινού πληθυσμού καθώς και τα σημεία στα οποία θα πραγματοποιηθεί η εύρεση των κοντινότερων γειτονικών σημείων. Οι πράσινες κουκκίδες δηλώνουν τα κοντινότερα 5 ($\tau = 5$) σημεία από τη βάση δεδομένων για κάθε άτομο του τωρινού πληθυσμού (έστω ότι ο πληθυσμός αποτελείται από 4 άτομα), τα οποία μετά την απαλοιφή των διπλότυπων θα χρησιμοποιηθούν για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων.



Σχήμα 5.16: Απεικόνιση της επιλογής των δεδομένων εκπαίδευσης με την μέθοδο ISS σε έναν διδιάστατο χώρο.

Μια σύγκριση των παραπάνω μεθοδολογιών για την επιλογή της καλύτερης ανάλογα της φάσης αναζήτησης, θα πραγματοποιηθεί σε επόμενη ενότητα.

5.4 ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΠΙΤΑΧΥΝΣΗΣ ΤΟΥ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ

5.4.1 Μέθοδος TASEA

Αυτή η μέθοδος ακολουθεί την διαδικασία του αλγορίθμου TASEA [Yang et al., 2019], δηλαδή τον μηχανισμό ανάδρασης που χρησιμοποιείται στην ενότητα 3.5.2, για την εναλλαγή της φάσης και της στρατηγικής αναζήτησης του αλγορίθμου στον χώρο σχεδίασης.

Αρχικά ορίζονται οι παράμετροι $N_f = 1$, $N_c = 20$ και $good = 0$ (βλέπε Μηχανισμός Ανάδρασης). Λόγω του ασύγχρονου παραλληλισμού του αλγορίθμου (APSADE), ο κάθε κόμβος έχει τις δικές του παραμέτρους και εναλλάζει ανεξάρτητα από τους άλλους κόμβους την φάση και στρατηγική

αναζήτησης. Ο πληθυσμός αρχικοποιείται από τυχαία δειγματικά σημεία στον χώρο σχεδίασης και η βάση δεδομένων αρχικοποιείται κατά τις 2 πρώτες γενιές για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων. Πριν την εφαρμογή του τελεστή μετάλλαξης έχει προστεθεί στον αλγόριθμο μας ένας έλεγχος για την επιλογή της στρατηγικής και της φάσης αναζήτησης (Μηχανισμός Ανάδρασης), ο οποίος παρουσιάζεται στον Αλγόριθμο 5.1.

Αλγόριθμος 5.1 – Μηχανισμός Ανάδρασης

*Εάν $N_f < N_c$ και $good = 0$ **κάνε***

Εφαρμογή της DE/hybrid/trigonometric/1 για την αναπαραγωγή απογόνων

Χρήση του σφαιρικού MLP νευρωνικού δικτύου για την προ-αξιολόγηση του απογόνου.

*Αλλιώς εάν $N_f \geq N_c$ και $good = 0$ **κάνε***

Εφαρμογή της DE/current-to-randbest/1 για την αναπαραγωγή απογόνων

Χρήση του τοπικού RBF νευρωνικού δικτύου για την προ-αξιολόγηση του απογόνου.

*Αλλιώς εάν $good = 1$ **κάνε***

Εφαρμογή της DE/best/1 για την αναπαραγωγή απογόνων

Χρήση του τοπικού RBF νευρωνικού δικτύου για την προ-αξιολόγηση του απογόνου.

Τέλος εάν

Η εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων πραγματοποιείται στον κύριο κόμβο κάθε φορά που πραγματοποιείται ένα κριτήριο ικανοποίησης που έχουμε ορίσει, π.χ. εάν έχουν πραγματοποιηθεί τόσες ακριβές αξιολογήσεις όσες και το μέγεθος του πληθυσμού ή με το πέρας μίας γενιάς. Η επιλογή της μεθοδολογίας για την επιλογή των σημείων εκπαίδευσης για τα νευρωνικά δίκτυα, ορίζεται πριν από την έναρξη του αλγορίθμου από ένα αρχείο κειμένου. Αν για το RBF δίκτυο έχει επιλεγεί η μεθοδολογία Nearest Neighbors, τότε μόνο γίνεται η κατασκευή του συγκεκριμένου δικτύου από τους δευτερεύοντες κόμβους, όταν κληθεί η προαξιολόγηση του απογόνου από το συγκεκριμένο δίκτυο (κατά την φάση εκμετάλλευσης).

Στον αλγόριθμο TASEA στην πρώτη φάση της αναζήτησης ($N_f < N_c$), χρησιμοποιείται η στρατηγική μετάλλαξης DE/current-to-best/1, λόγω της γρήγορης ταχύτητας σύγκλισης που επιφέρει. Στην επόμενη φάση της αναζήτησης, χρησιμοποιείται η στρατηγική μετάλλαξης DE/current-to-randbest/1 με σκοπό την αύξηση της ποικιλομορφίας του πληθυσμού. Σαν στρατηγική τοπικής αναζήτησης χρησιμοποιείται η DE/best/1, για τη βελτίωση της ταχύτητας σύγκλισης στις υποσχόμενες περιοχές [Yang et al., 2019].

Από τις συγκρίσεις που πραγματοποιήθηκαν στην [ενότητα 5.2](#) για τις στρατηγικές μετάλλαξης, είδαμε ότι η στρατηγική DE/current-to-randbest/1 δεν επιφέρει μεγάλη ποικιλομορφία και για τον λόγο αυτό θα την αντικαταστήσουμε με την DE/hybrid/trigonometric, η οποία είδαμε ότι προσφέρει πολύ καλή σφαιρική αναζήτηση στον χώρο σχεδίασης και κατά συνέπεια ποικιλομορφία στον πληθυσμό. Τις υπόλοιπες 2 φάσεις του μηχανισμού ανάδρασης θα τις αφήσουμε ως έχουν, δηλαδή με τις ίδιες στρατηγικές μετάλλαξης.

Εφόσον ο απόγονος έχει αξιολογηθεί επακριβώς, ένας έλεγχος αυτής της αξιολόγησης πραγματοποιείται για την ανανέωση των τιμών των παραμέτρων του μηχανισμού ανάδρασης, όπως φαίνεται στον παρακάτω αλγόριθμο.

Αλγόριθμος 5.2 – Ανανέωση παραμέτρων μηχανισμού ανάδρασης

*Εάν (ο απόγονος έχει αξιολογηθεί επ'ακριβώς) **Κάνε***

*εάν (η τιμή προσαρμογής του απογόνου είναι καλύτερη από του γονέα) **κάνε***

$N_f = 1$, $good = 1$

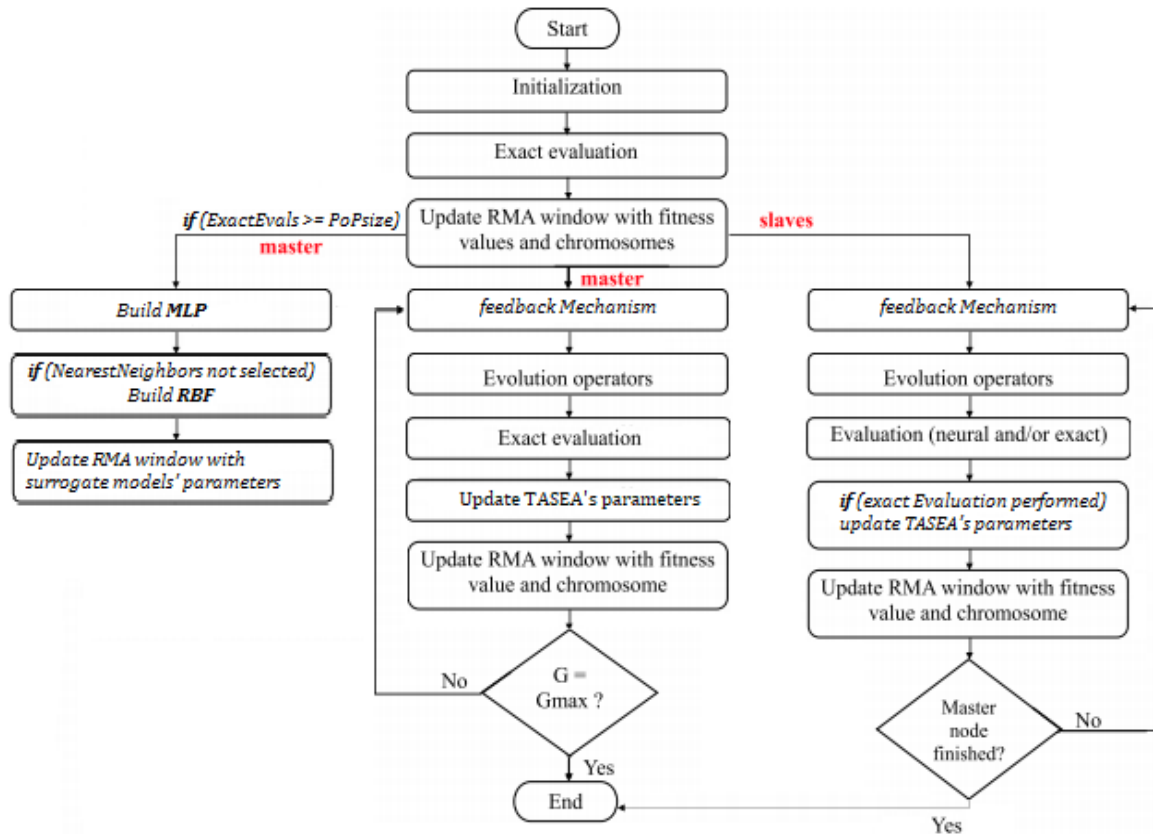
αλλιώς

$N_f = N_f + 1$, $good = 0$

τέλος εάν

Τέλος Εάν

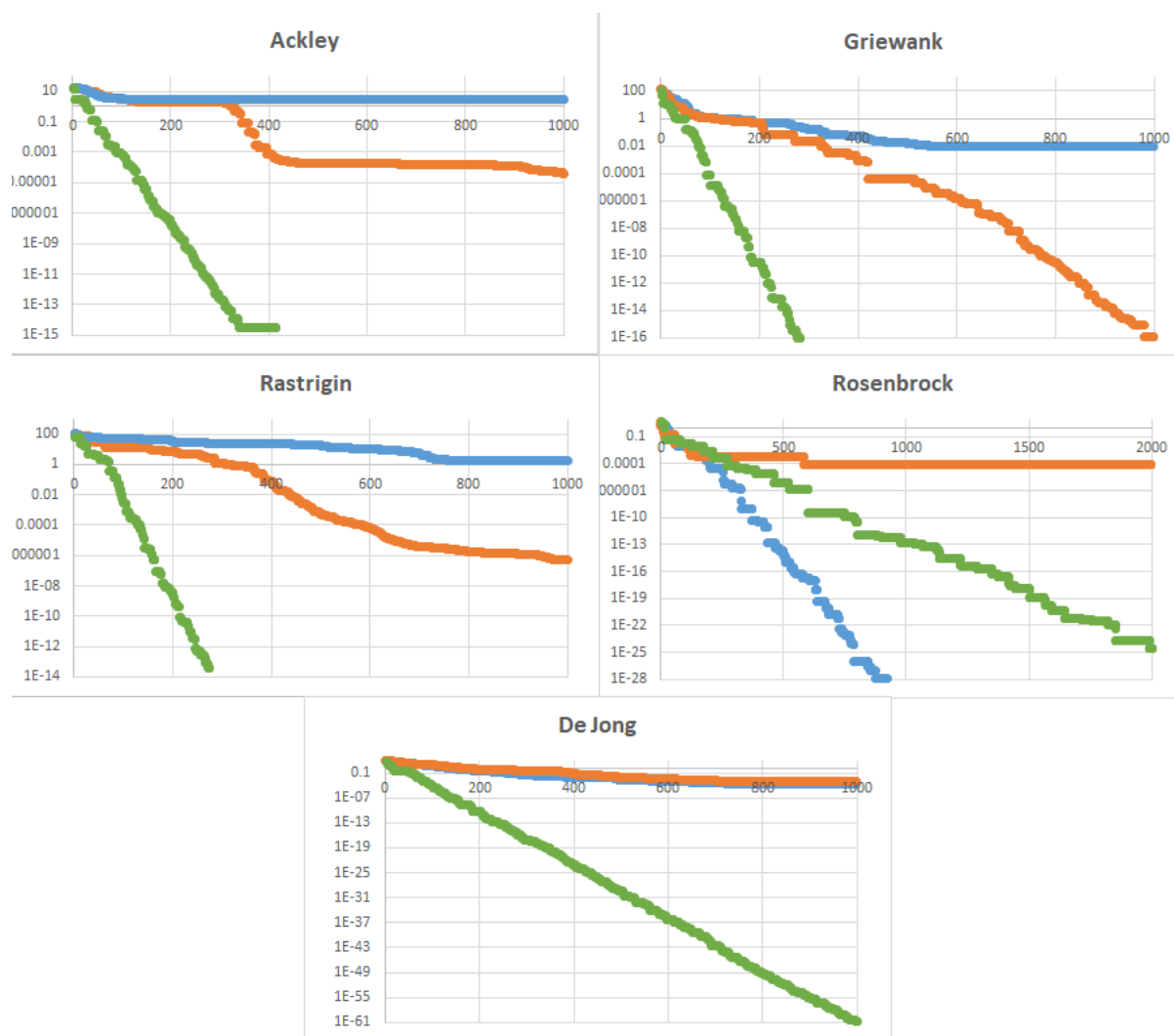
Παρακάτω παρουσιάζεται το διάγραμμα ροής του αλγορίθμου μας (APSADE), μετά την προσθήκη της μεθοδολογίας TASEA.



Σχήμα 5.17: Διάγραμμα ροής του APSADE με την προσθήκη του μηχανισμού ανάδρασης TASEA.

Στο Σχήμα 5.18 κάνουμε μια σύγκριση των προαναφερόμενων 2 μηχανισμών ανάδρασης (διαφορετικές στρατηγικές μετάλλαξης), σε 5 προβλήματα αναφοράς (βλέπε [παράρτημα Β](#)). Με μπλε γραμμή απεικονίζεται ο μηχανισμός ανάδρασης που χρησιμοποιείται στον αλγόριθμο TASEA και με πορτοκαλί ο μηχανισμός ανάδρασης που προτείνουμε εμείς. Παρατηρούμε ότι στα προβλήματα Ackley, Griewank και Rastrigin, τα οποία αποτελούνται από πολλά τοπικά ελάχιστα, ο μηχανισμός ανάδρασης του TASEA παγιδεύεται νωρίς σε ένα από αυτά, ενώ ο μηχανισμός που προτείνουμε είναι ικανός να συνεχίσει την εύρεση της βέλτιστης λύσης αλλά με πολύ αργούς ρυθμούς (περισσότερες από 1000 γενιές). Στο πρόβλημα Rosenbrock, το οποίο είναι μονοτροπικό και μια στρατηγική τοπικής αναζήτησης είναι ικανή να βρεί το ολικό βέλτιστο σε σύγκριση με μια σφαιρικής αναζήτησης, ο μηχανισμός ανάδρασης του αλγορίθμου TASEA είναι ικανός να βρεί το ολικό βέλτιστο σε σύντομο χρονικό διάστημα σε αντίθεση με τον μηχανισμό που προτείνουμε εμείς. Στο πρόβλημα De Jong, παρατηρείται ίδια συμπεριφορά και από τους δύο μηχανισμούς ανάδρασης.

Για τους παραπάνω λόγους προτείνουμε έναν τρίτο μηχανισμό, ο οποίος ευελπιστούμε να είναι ικανός να βρίσκει το ολικό βέλτιστο ανεξαρτήτως το τοπίο του χώρου σχεδίασης. Σαν 1^η στρατηγική μετάλλαξης (δηλαδή όταν $N_f < N_c$), χρησιμοποιούμε μια στρατηγική μετάλλαξης με ισχυρή ικανότητα σφαιρικής αναζήτησης, την DE/hybrid/trigonometric, για την εύρεση υποσχόμενων περιοχών. Ακολουθούν δύο στρατηγικές τοπικής αναζήτησης, για την αποφυγή παγίδευσης του αλγορίθμου σε ψευδές βέλτιστο, σε τοπία όπως του προβλήματος Rosenbrock. Η πρώτη στρατηγική τοπικής αναζήτησης είναι η DE/current-to-randbest/1, η οποία είναι λιγότερη ισχυρή από την DE/best/1 και χρησιμοποιείται όπως αναφέρεται στον αλγόριθμο 5.1. Μόλις βρεθεί μια καλύτερη λύση χρησιμοποιείται μια στρατηγική μετάλλαξης με πολύ ισχυρή ικανότητα τοπικής αναζήτησης, όπως η DE/best/1. Η επίλυση του αλγορίθμου στα προβλήματα αναφοράς με τον προαναφερόμενο μηχανισμό ανάδρασης παρουσιάζεται στο Σχήμα 5.18 με πράσινη γραμμή.



Σχήμα 5.18: Σύγκριση στρατηγικών μετάλλαξης για τον μηχανισμό ανάδρασης.

Πράγματι ο μηχανισμός ανάδρασης που προτείνουμε παρουσιάζει πολύ καλύτερα αποτελέσματα από τους προηγούμενους δύο, σε όλα τα προβλήματα αναφοράς εκτός από το πρόβλημα Rosenbrock. Στα προβλήματα Ackley, Griewank και Rastrigin, παρατηρούμε την εύρεση της βέλτιστης λύσης με πολύ μεγάλη ταχύτητα. Στο πρόβλημα De Jong, παρατηρούμε μια πολύ καλή λύση που μας έχει δώσει ο αλγόριθμος στις 1000 γενιές που έχει τρέξει. Στο πρόβλημα Rosenbrock, παρόλο που ο μηχανισμός ανάδρασης του αλγόριθμου TASEA εμφανίζει καλύτερα αποτελέσματα, μας ικανοποιεί διότι ο προτεινόμενος μηχανισμός έχει την ικανότητα της εύρεσης της βέλτιστης λύσης.

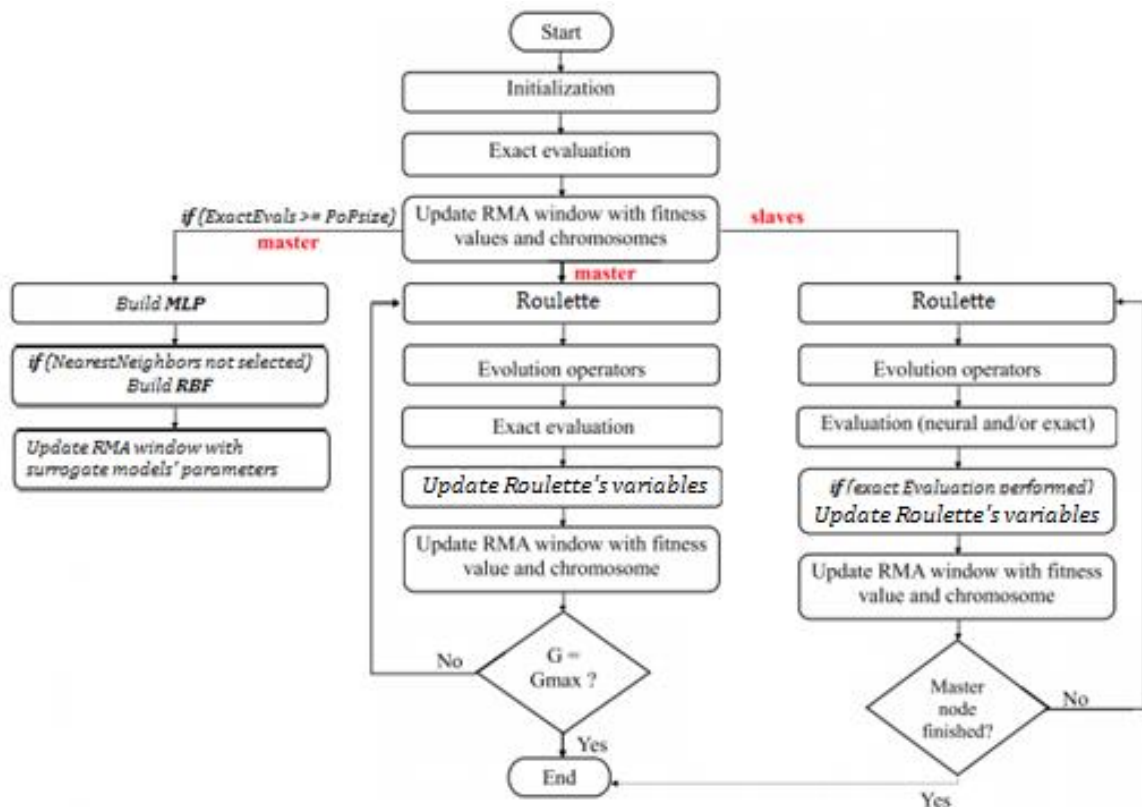
5.4.2 Μέθοδος αυτοπροσαρμόσιμης στρατηγικής και φάσης αναζήτησης (SASS)

Η μέθοδος αυτοπροσαρμόσιμης στρατηγικής και φάσης αναζήτησης (Self Adaptive Search Strategy - SASS) βασίζεται στην μέθοδο της ρουλέτας ([Roulette Wheel Selection](#)), για την επιλογή της στρατηγικής μετάλλαξης. Με την χρήση αυτής της μεθόδου, ο αλγόριθμος αυτοπροσαρμόζεται στο τοπίο σχεδίασης και αυτό οδηγεί στην κατάλληλη επιλογή της στρατηγικής μετάλλαξης (η πιο επιτυχημένη έχει περισσότερες πιθανότητες επιλογής). Δημιουργείται μια ενιαία ρουλέτα, η οποία αποτελείται και από τα δύο είδη στρατηγικών μετάλλαξης (τοπικής και σφαιρικής αναζήτησης). Η εναλλαγή της στρατηγικής αναζήτησης πραγματοποιείται κάνοντας χρήση της μεθοδολογίας Roulette Wheel Selection και η φάση αναζήτησης ορίζεται ανάλογα με την στρατηγική μετάλλαξης που έχει επιλεγεί. Αν έχει επιλεγεί σφαιρική στρατηγική μετάλλαξης, τότε ο κόμβος θα αναπαράξει έναν νέο απόγονο με την εκάστοτε σφαιρική στρατηγική μετάλλαξης και θα τον αξιολογήσει με το σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο (σφαιρική φάση αναζήτησης). Εάν όμως έχει επιλεγεί τοπική στρατηγική

μετάλλαξης, τότε το τοπικό υποκατάστατο μοντέλο θα χρησιμοποιηθεί για την αξιολόγηση του νέου απογόνου (τοπική φάση αναζήτησης).

Η ρουλέτα που δημιουργήσαμε εισάγεται στον αλγόριθμο μας πριν τον τελεστή μετάλλαξης, για την επιλογή της κατάλληλης στρατηγικής μετάλλαξης. Αποτελείται από τις DE/apsade, DE/best/1 και DE/hybrid/trigonometric στρατηγικές μετάλλαξης. Η DE/hybrid/trigonometric στρατηγική, όπως είδαμε στην ενότητα 5.2, προσφέρει ισχυρή σφαιρική αναζήτηση στον χώρο σχεδίασης και τη χρησιμοποιούμε για την αύξηση της ποικιλομορφίας του πληθυσμού. Η DE/best/1 εισήχθη λόγω της πολλής ισχυρής τοπικής αναζήτησης. Η DE/apsade παρόλο που ανήκει σε μια ενδιαμέση κατάσταση (σφαιρική/τοπική αναζήτηση), τη χρησιμοποιούμε λόγω της ταχείας σύγκλισης που προσφέρει.

Αρχικά η πιθανότητα επιλογής κάθε μίας από αυτές τις στρατηγικές ισούται με $1/3$, μέχρις ότου ο αριθμός των επαναλήψεων υπερβεί ένα όριο μάθησης $L = 30$. Μέχρι αυτό το όριο λέμε ότι ο αλγόριθμος (ή καλύτερα ο κόμβος) βρίσκεται σε περίοδο μάθησης. Έπειτα από αυτό το σημείο ο αλγόριθμος αυξομειώνει τις πιθανότητες των στρατηγικών μετάλλαξης της ρουλέτας σύμφωνα με δύο μετρητές, τους N_s και N_u . Ο μετρητής N_s μετράει τον αριθμό των επιτυχιών της εκάστοτε στρατηγικής μετάλλαξης και ανανεώνεται κατά την διάρκεια του ελέγχου για την επιλογή της φάσης αναζήτησης (Αλγόριθμος 5.4). Ο μετρητής N_u μετράει τον αριθμό χρήσης της εκάστοτε στρατηγικής μετάλλαξης και ανανεώνεται κατά την διάρκεια της χρήσης της ρουλέτας. Λόγω της παραλληλοποίησης του αλγορίθμου, κάθε κόμβος χρησιμοποιεί τους δικούς του μετρητές. Κάθε κόμβος δηλαδή εναλλάσσει την φάση αναζήτησης και την στρατηγική μετάλλαξης ανεξάρτητα από τους υπολοίπους. Εφόσον λοιπόν ο κόμβος έχει περάσει το όριο μάθησης (L) και δεν βρίσκεται πλέον σε περίοδο μάθησης, τότε οι πιθανότητες της κάθε στρατηγικής μετάλλαξης ανανεώνονται σύμφωνα με τους προαναφερόμενους μετρητές (N_s/N_u). Ο αλγόριθμος προσαρμόζεται στο περιβάλλον του και συνεπώς αυξάνεται η πιθανότητα επιλογής των στρατηγικών μετάλλαξης που επιφέρουν μεγάλη επιτυχία και μειώνεται στις στρατηγικές που επιφέρουν μικρή επιτυχία. Η λειτουργία της ρουλέτας παρουσιάζεται στον Αλγόριθμο 5.3.



Σχήμα 5.19: Διάγραμμα ροής του APSADE, με την εφαρμογή της μεθόδου SASS-2.

Πολλές φορές μια στρατηγική μετάλλαξης με ικανότητα τοπικής αναζήτησης μπορεί να θεωρηθεί ως η πιο επιτυχημένη στρατηγική από την ρουλέτα (να έχει δηλαδή την μεγαλύτερη πιθανότητα επιλογής) και στη συνέχεια ο αλγόριθμος να συναντήσει ένα τοπικό βέλτιστο, με αποτέλεσμα αυτή η στρατηγική να μην μπορεί να βοηθήσει στην αναζήτηση καλύτερης λύσης. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την επιβράδυνση της εξελικτικής διαδικασίας λόγω της συχνής επιλογής μιας λανθασμένης στρατηγικής. Για την αποφυγή αυτού του φαινομένου, ένας έλεγχος για την ανανέωση της περιόδου μάθησης έχει προστεθεί στο τέλος του Αλγορίθμου 5.3, που έχει ως σκοπό την ανανέωση των πιθανοτήτων των στρατηγικών μετάλλαξης. Κάθε φορά που ο εκάστοτε κόμβος έχει αριθμό επαναλήψεων ίσο με 3 φορές το όριο μάθησης ($N = 90$), ο κόμβος αυτός θα μπαίνει ξανά σε μια περίοδο μάθησης και οι τιμές των πιθανοτήτων των στρατηγικών μετάλλαξης θα ανανεώνονται.

Αλγόριθμος 5.3 – Roulette

Initialize: $Ns(i) = 0, Nu(i) = 0, L = 30, i = \{1,2,3\}$

Input: $Ng, Ns(i), Nu(i), L, p, p_1, p_2, p_3, rnumb$

if ($N < L$) **then**

$p = 1/3$

$p_1 = p$

$p_2 = p_1 + p$

$p_3 = p_2 + p$

else

!Calculate the new ratios based on counters

$p_1 = Ns1/Nu1$

$p_2 = Ns2/Nu2$

$p_3 = Ns3/Nu3$

!Update the new ratios

$p = p_1 + p_2 + p_3$

$p_1 = p_1/p$

$p_2 = p_1 + p_2/p$

$p_3 = p_2 + p_3/p$

end if

!Select the mutation strategy

$rnumb = \text{random} [0,1]$

if ($rnumb \leq p_1$) **then**

Call DE/apsade

$Nu1 = Nu1 + 1$

else if ($rnumb \leq p_2$) **then**

Call DE/best/1

$Nu2 = Nu2 + 1$

else

Call DE/hybrid/trigonometric

$Nu3 = Nu3 + 1$

endif

$N = N + 1$

if ($N == 90$) **then**

$N = 1$

$Ns1 = Ns2 = Ns3 = 0$

$Nu1 = Nu2 = Nu3 = 0$

end if

Η παράμετρος N μετράει τον αριθμό των επαναλήψεων για τον έλεγχο της περιόδου μάθησης. Η παράμετρος $rnumb$ είναι ένας τυχαίος αριθμός από 0 έως 1 και χρησιμοποιείται για την τυχαία επιλογή της στρατηγικής μετάλλαξης. Τα p_1 , p_2 και p_3 είναι οι πιθανότητες των στρατηγικών μετάλλαξης DE/apsade, DE/best/1 και DE/hybrid/trigonometric αντίστοιχα.

Μετά από κάθε ακριβή αξιολόγηση, πραγματοποιείται ένας έλεγχος για την ανανέωση των μετρητών επιτυχίας κάθε στρατηγική μετάλλαξης. Εάν ο απογόνος έχει αξιολογηθεί ως καλύτερος από τον γονέα του, τότε ο μετρητής (Ns) της στρατηγικής μετάλλαξης που χρησιμοποιήθηκε για την απόκτηση του συγκεκριμένου απογόνου αυξάνεται κατά 1. Στον Αλγόριθμο 5.4 παρουσιάζεται η λειτουργία του ελέγχου που μόλις αναφέραμε.

Αλγόριθμος 5.4 – Ανανέωση παραμέτρων της ρουλέτας

```

If (child better than parent) then
  if (DE/apsade is used) then
     $Ns1 = Ns1 + 1$ 
  elseif (DE/best/1 is used) then
     $Ns2 = Ns2 + 1$ 
  elseif (DE/hybrid/trigonometric is used) then
     $Ns3 = Ns3 + 1$ 
  endif
End If

```

Το διάγραμμα ροής του APSADE με την προσθήκη της μεθόδου SASS, παρουσιάζεται στο Σχήμα 5.19.

5.4.3 Μέθοδος Neighborhood Classification

Επηρεασμένοι από τους [Lu et al., 2011], δημιουργήσαμε μια ταξινόμηση της γειτονιάς κάθε απογόνου για την εναλλαγή της φάσης αναζήτησης. Εφαρμόζεται μια υπορουτίνα που αξιολογεί τη γειτονιά και ανάλογα το είδος της και η ανάλογη αξιολόγηση (ακριβής ή μη), αντικαθιστά την υπορουτίνα που χρησιμοποιούμε στον αλγόριθμό μας (APSADE) για την προ-αξιολόγηση των απογόνων, δηλαδή την αξιολόγηση από τα νευρωνικά δίκτυα. Η νέα υπορουτίνα όχι μόνο επιλέγει ποιά άτομα θα προ-αξιολογηθούν και ποιά όχι, αλλά και με ποιο νευρωνικό δίκτυο θα αξιολογηθούν.

Αρχικά ορίζεται το μέγεθος της γειτονιάς κάθε απογόνου, π.χ. στην παρούσα εργασία έχει οριστεί ως 3 φορές τον αριθμό των γονιδίων. Αφού οριστεί το μέγεθος της γειτονιάς, κάθε φορά που δημιουργείται ένας νέος απογόνος, η γειτονιά του ορίζεται ως εξής:

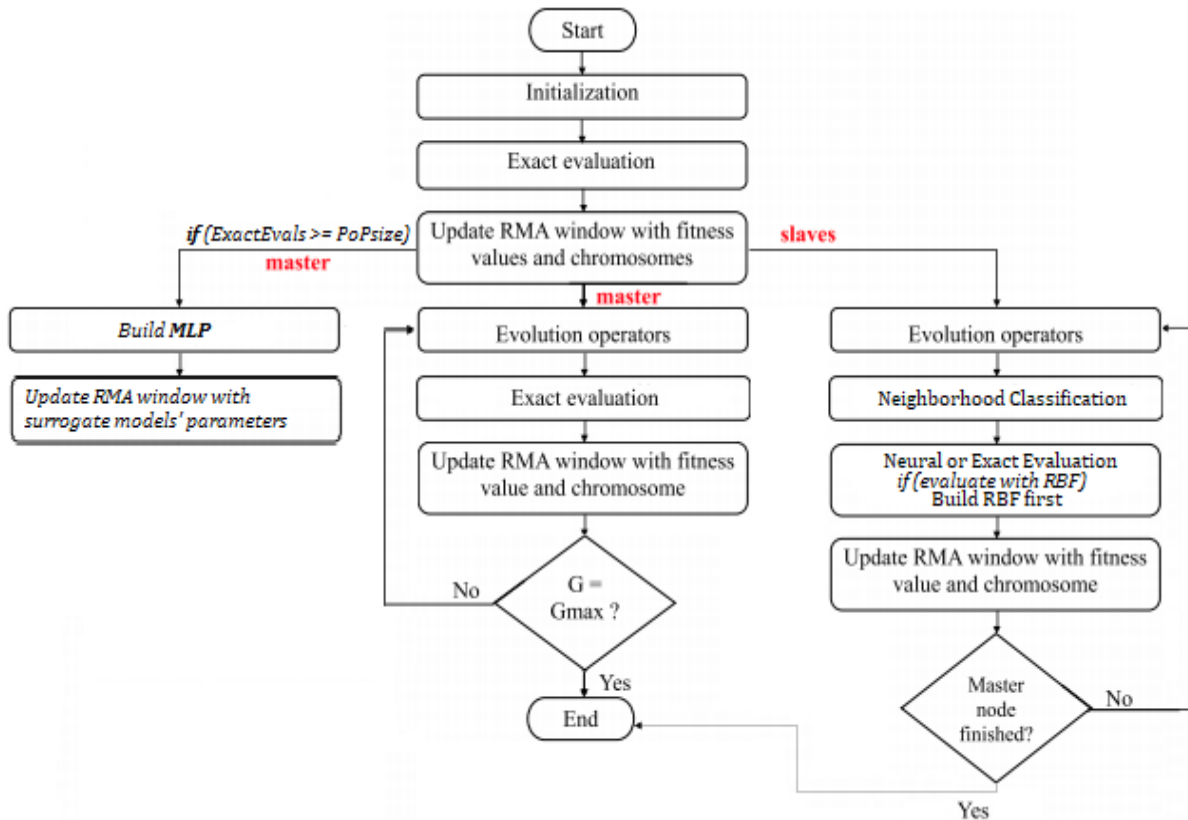
1. Κανονικοποίηση όλων των γονιδίων του απογόνου και κάθε δεδομένου στη βάση δεδομένων.
2. Εύρεση των αποστάσεων (Ευκλείδια απόσταση, βλέπε [Συναρτήσεις Απόστασης](#)) του απογόνου με κάθε σημείο από τη βάση δεδομένων.
3. Εύρεση των 30 (τα προβλήματα αναφοράς που χρησιμοποιούμε αποτελούνται από χρωμοσώματα 10 γονιδίων) κοντινότερων σημείων (μέγεθος γειτονιάς) στον απόγονο, σύμφωνα με τις αποστάσεις τους.

Εφόσον έχει οριστεί η γειτονιά του απογόνου, τότε πραγματοποιείται και η ταξινόμησή της, όπως έχουμε αναφέρει και στην [ενότητα 3.6](#). Το κάθε γειτονικό σημείο αξιολογείται ανάλογα με την τιμή της προσαρμογής του. Εάν η τιμή προσαρμογής του είναι μικρότερη από αυτήν του γονέα του προς αξιολόγηση απογόνου, τότε αξιολογείται ως καλό σημείο. Η ταξινόμηση της γειτονιάς εξαρτάται από το είδος των γειτονικών σημείων που κατέχει και παρουσιάζεται παρακάτω.

- **Καλή γειτονιά:** αποτελείται μόνο από γειτονικά σημεία τα οποία έχουν καλύτερη τιμή προσαρμογής από τον γονέα του απογόνου.
- **Κακή γειτονιά:** αποτελείται μόνο από γειτονικά σημεία με χειρότερη τιμή προσαρμογής από αυτή του γονέα του υπό εξέταση απογόνου.
- **Ανάμεικτη γειτονιά:** αποτελείται και από τα δύο προαναφερόμενα είδη γειτονικών σημείων.

Η αξιολόγηση που επιφέρει η γειτονιά εξαρτάται από το είδος της. Εάν έχει αξιολογηθεί ως καλή γειτονιά, τότε επειδή όλα τα γειτονικά της σημεία έχουν καλύτερη φυσική κατάσταση από τον γονέα του απογόνου, μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι και ο απογόνος θα έχει καλύτερη φυσική κατάσταση

από τον γονέα του. Για τον λόγο αυτόν κάνουμε επ'ακριβή αξιολόγηση σε τέτοιου είδους γειτονιά. Εάν η γειτονιά είναι ανάμεικτη, και τα γειτονικά σημεία που έχουν αξιολογηθεί ως καλά είναι παραπάνω από το $1/3$ του μεγέθους της γειτονιάς, τότε συμπεραίνουμε ότι η γειτονιά είναι ικανοποιητική στο να εκτιμήσει τον απογόνο και δημιουργούμε ένα τοπικό υποκατάστατο μοντέλο (RBF) με δεδομένα εκπαίδευσης τα σημεία της γειτονιάς (μέθοδος Nearest Neighbors). Η αξιολόγηση του απογόνου θα γίνει με αυτό το μοντέλο. Όταν ο αριθμός των καλών σημείων σε μια ανάμεικτη γειτονιά είναι μικρότερος από το $1/3$ του μεγέθους της γειτονιάς, τότε η γειτονιά δεν είναι ικανοποιητική για την αξιολόγηση του απογόνου και για τον λόγο αυτόν το σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο (MLP) κρίνεται κατάλληλο για την αξιολόγηση του απογόνου, το οποίο έχει εκπαιδευτεί στον κύριο κόμβο με την κατάλληλη (προ-επιλεγμένη) μεθοδολογία εκπαίδευσης.



Σχήμα 5.20: Διάγραμμα ροής του APSADE, με την προσθήκη Neighborhood Classification μεθοδολογίας.

Στην περίπτωση που η γειτονιά είναι κακή, έχουμε δύο ενδεχόμενα. Το πρώτο είναι όταν ο γονέας του υπο εξέταση απογόνου είναι το καλύτερο χρωμόσωμα του τωρινού πληθυσμού. Σε αυτήν την περίπτωση επειδή δεν μπορούν να υπάρξουν καλά γειτονικά σημεία και επειδή το καλύτερο σημείο στον πληθυσμό έχει τις περισσότερες πιθανότητες να εξελίξει τον πληθυσμό μας (να βρει καλύτερη λύση), κάνουμε επ'ακριβής αξιολόγηση στον απογόνο. Το δεύτερο ενδεχόμενο είναι όταν ο γονέας δεν είναι το καλύτερο χρωμόσωμα του πληθυσμού, τότε δεν θα πραγματοποιηθεί καμμία αξιολόγηση στον υπό εξέταση απογόνο.

Η στρατηγική μετάλλαξης με την οποία θα αναπαραχθεί ο απογόνο για κάθε κόμβο στον αλγόριθμο μας, εφαρμόζεται πριν τη νέα υπορουτίνα αξιολόγησης. Για την επιλογή της στρατηγικής μπορεί να χρησιμοποιηθεί η μεθοδολογία TASEA ή η μεθοδολογία SASS. Η χρήση της μεθοδολογίας που περιγράψαμε σε αυτήν την ενότητα (Neighborhood Classification) γίνεται με την δήλωση της σε ένα αρχείο κειμένου (txt file) από τον χρήστη, πριν την έναρξη του αλγορίθμου. Το διάγραμμα ροής του αλγορίθμου APSADE, με την εφαρμογή της παραπάνω διαδικασίας, φαίνεται στο Σχήμα 5.20.

5.5 ΕΠΙΛΟΓΗ ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΩΝ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗΣ ΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

Χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο μας (APSADE), θα κάνουμε διάφορες εκτελέσεις για τον προσδιορισμό της καταλληλότερης μεθοδολογίας εκπαίδευσης υποκατάστατων μοντέλων για τα νευρωνικά δίκτυα που χρησιμοποιούνται στον APSADE. Σαν τοπικό υποκατάστατο μοντέλο θα χρησιμοποιηθεί το RBF νευρωνικό δίκτυο, λόγω της γρήγορης κατασκευής του. Η μέθοδος Nearest Neighbors κατασκευάζει ένα νευρωνικό δίκτυο για κάθε απόγονο, οπότε στη προκειμένη περίπτωση η χρήση ενός υποκατάστατου μοντέλου που κατασκευάζεται/εκπαιδεύεται γρήγορα είναι αναγκαία. Σαν σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο θα χρησιμοποιηθεί το MLP νευρωνικό δίκτυο. Η κατασκευή και των δύο μοντέλων γίνεται από τον κύριο κόμβο (όταν ένα κριτήριο που έχουμε δηλώσει ικανοποιείται), εκτός από την περίπτωση χρήσης της μεθόδου Nearest Neighbors, που αναγκάζει την κατασκευή ενός τοπικού μοντέλου σε κάθε δευτερεύοντα κόμβο, κάθε φορά που ένας απόγονος αναπαράγεται.

Οι εκτελέσεις του αλγορίθμου θα γίνουν με τα προβλήματα αναφοράς του παραρτήματος Β. Οι μεθοδολογίες θα εξετασθούν ως προς τη σύγκλιση που επιφέρουν και την διακύμανση της εκτιμώμενης τιμής από την πραγματική (ακριβιά αξιολογημένη τιμή προσαρμογής). Κάθε εκτίμηση από το υποκατάστατο μοντέλο στα παρακάτω γραφήματα θα αξιολογηθεί αν είναι επιτυχής. Αν το υποκατάστατο μοντέλο προέβλεψε επιτυχώς ότι η νέα υποψήφια λύση είναι καλύτερη ή χειρότερη από την τρέχουσα λύση, τότε λέμε ότι η εκτίμηση είναι επιτυχής. Το ποσοστό επιτυχίας όλων των εκτιμήσεων του υποκατάστατου μοντέλου θα συγκριθεί για όλες τις μεθοδολογίες εκπαίδευσης. Όλα τα πειράματα θα διεξαχθούν με πληθυσμό 10 ατόμων (10 πυρήνες) και με κριτήριο διακοπής τις 500 γενιές.

5.5.1 Σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο

Για τον προσδιορισμό της καλύτερης μεθόδου επιλογής δεδομένων εκπαίδευσης για ένα σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο, λύσαμε τις συναρτήσεις Rosenbrock, Ackley και De Jong ([παράρτημα Β](#)) με κάθε μία από τις μεθόδους επιλογής δεδομένων εκπαίδευσης που έχουμε αναφέρει στην [ενότητα 5.3](#). Γενικά ένα σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο θέλουμε να κάνει σωστές εκτιμήσεις της τιμής προσαρμογής σημείων σε όλο τον χώρο σχεδίασης. Για τον λόγο αυτόν η στρατηγική μετάλλαξης που χρησιμοποιήσαμε είναι η DE/rand/1, η οποία προσφέρει μεγάλη πληθυσμιακή ποικιλομορφία και συνεπώς μπορούμε να δούμε εάν η εκάστοτε μεθοδολογία μπορεί να ανταποκριθεί σε αυτήν. Η εκτίμηση των απογόνων γίνεται μόνο από το MLP νευρωνικό δίκτυο, το οποίο όπως έχουμε αναφέρει το χρησιμοποιούμε ως σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο.

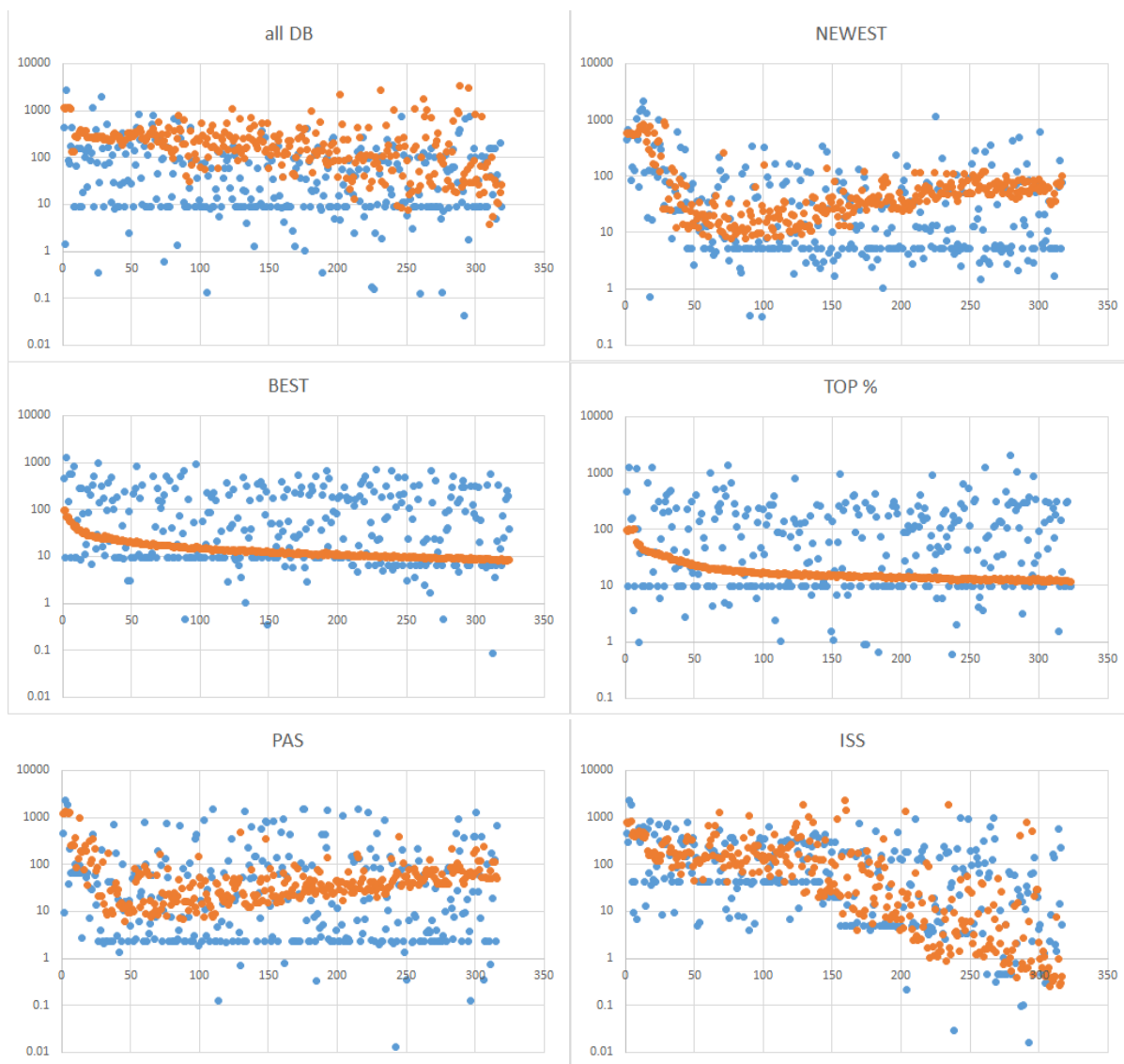
Για την καλύτερη απεικόνιση και ανάλυση της εκτίμησης που προσφέρει το υποκατάστατο μοντέλο θα κάνουμε ακριβή αξιολόγηση σε όλα τα σημεία, ανεξάρτητα από την εκτίμηση του υποκατάστατου μοντέλου. Ο λόγος είναι για να δούμε το ποσοστό επιτυχίας του υποκατάστατου μοντέλου, όχι μόνο στα σημεία που εκτιμάει ως καλύτερα αλλά και στα σημεία που εκτιμάει ως χειρότερα, δηλαδή να δούμε πόσο βοηθάει το υποκατάστατο μοντέλο όχι μόνο στην σωστή εκτίμηση ενός απογόνου ως καλύτερου από του γονέα του, αλλά και στην αποφυγή ακριβών αξιολήσεων μη υποσχόμενων σημείων. Η ανάλυση που θα κάνουμε θα είναι από τα αποτελέσματα των ακριβή αξιολογημένων σημείων και των εκτιμήσεων των σημείων αυτών από το υποκατάστατο μοντέλο μόνο από έναν κόμβο (πυρήνα) για την διευκόλυνση της απεικόνισης των αποτελεσμάτων σε γραφήματα.

Συνάρτηση Rosenbrock

Στα παρακάτω γραφήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της λύσης της συνάρτησης Rosenbrock για κάθε μία από τις μεθόδους εκπαίδευσης των υποκατάστατων μοντέλων. Με μπλε κουκκίδες εμφανίζονται όλες οι ακριβείς αξιολογήσεις κάθε απογόνου και με πορτοκαλί όλες οι εκτιμήσεις που έχει κάνει το υποκατάστατο μοντέλο για αυτούς τους απογόνους. Εύκολα μπορούμε να συμπεράνουμε ότι οι μεθοδολογίες **Best** και **Top %**, δεν ανταποκρίνονται στις απαιτήσεις μας. Αυτό φαίνεται από την σχεδόν ίσια γραμμή που σχηματίζεται από τις εκτιμήσεις του υποκατάστατου μοντέλου, δηλαδή το

υποκατάστατο μοντέλο δεν είναι ικανό να εκτιμήσει την πληθυσμιακή ποικιλομορφία. Για αυτόν τον λόγο απορρίπτουμε αυτές τις δύο μεθοδολογίες.

Οι υπόλοιπες μεθοδολογίες όπως φαίνεται είναι ικανές να εκτιμήσουν μια ευρύτερη περιοχή του χώρου σχεδίασης. Ιδιαίτερη εντύπωση μας κάνουν οι μεθοδολογίες all DB και ISS, οι οποίες παρουσιάζουν μεγαλύτερο εύρος εκτίμησης. Μια περαιτέρω σύγκριση όμως θα μας διευκολύνει στην απόφαση μας. Οι εκτιμήσεις που προσφέρει το υποκατάστατο μοντέλο για τις 4 υπολοιπούμενες μεθοδολογίες, θα συγκριθούν με το ποσοστό επιτυχίας που προσφέρει η κάθε μία (Πίνακας 5.2).



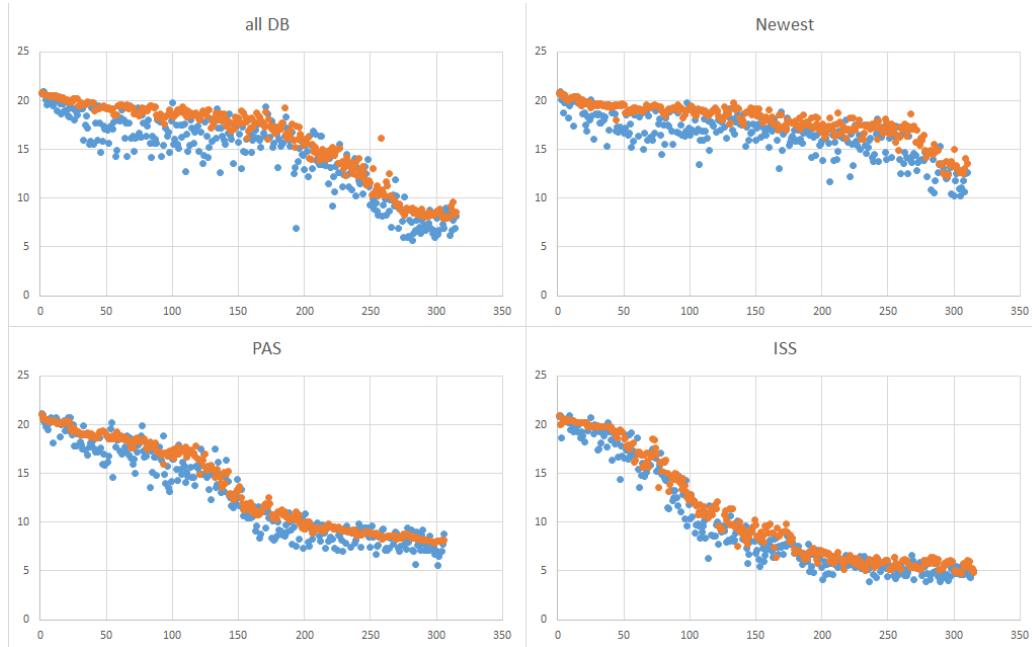
Σχήμα 5.21: Αποτελέσματα επίλυσης του αλγόριθμου APSADE στην συνάρτηση Rosenbrock, για την επιλογή της μεθόδου εκπαίδευσης ενός σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου. Από τα αριστερά προς τα δεξιά, χρήση των μεθόδων all DB, Newest, Best, Top %, PAS, ISS.

Πίνακας 5.2: Ποσοστό επιτυχίας του MLP δικτύου για κάθε μέθοδο εκπαίδευσης.

	all DB	Newest	PAS	ISS
Αξιολογήσεις	319	317	316	317
Επιτυχής	198	177	210	176
Ποσοστό Επιτυχίας	62.06897	55.83596	66.4557	55.5205

Παρατηρούμε ότι παρόλου που η μέθοδος **ISS** δείχνει ότι έχει μεγάλο εύρος εκτίμησης (Σχήμα 5.21), το ποσοστό επιτυχίας της είναι μικρό σε σχέση με τις άλλες μεθόδους. Το ίδιο παρατηρείται και με την χρήση της μεθόδου **Newest**. Οι μεθοδολογίες **all DB** και **PAS** παρουσιάζουν το μεγαλύτερο ποσοστό επιτυχίας, με την **PAS** να φτάνει στο 66,5%.

Συνάρτηση Ackley



Σχήμα 5.22: Αποτελέσματα επίλυσης του αλγόριθμου APSADE στην συνάρτηση Ackley, για την επιλογή της μεθόδου εκπαίδευσης ενός σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου. Από τα αριστερά προς τα δεξιά, χρήση των μεθόδων **all DB**, **Newest**, **PAS**, **ISS**.

Πίνακας 5.3: Ποσοστό επιτυχίας του **MLP** δικτύου για κάθε μέθοδο εκπαίδευσης.

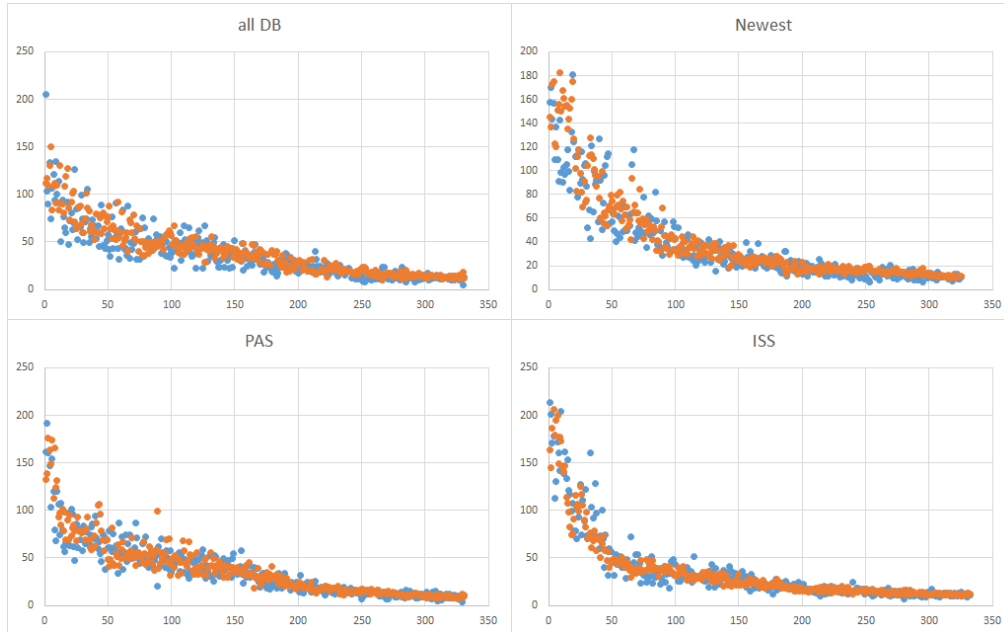
	all DB	Newest	PAS	ISS
Αξιολογήσεις	315	310	306	315
Επιτυχής	103	122	115	98
Ποσοστό Επιτυχίας	32.69841	39.35484	37.5817	31.11111

Κατά την επίλυση της συνάρτησης Ackley, παρατηρούμε από το Σχήμα 5.22, ότι οι εκτιμήσεις του υποκατάστατου μοντέλου ακολουθούν την εξελικτική αναζήτηση σε όλες τις μεθοδολογίες εκπαίδευσης. Παρ' όλα αυτά, παρατηρούμε μικρότερο ποσοστό επιτυχίας σε σχέση με αυτά της συνάρτησης Rosenbrock, όπου το υποκατάστατο μοντέλο δεν ακολουθά τόσο πιστά την εξελικτική αναζήτηση. Αυτό μπορεί να οφείλεται στο τοπίο σχεδίασης του συγκεκριμένου προβλήματος αναφοράς, το οποίο αποτελείται από πολλά τοπικά ελάχιστα (παράρτημα Β) και τα καλύτερα σημεία που βρίσκει η εξελικτική αναζήτηση ενδεχομένως να βρίσκονται πολύ μακριά από τα σημεία (άτομα) του τρέχοντος πληθυσμού, με αποτέλεσμα τα δεδομένα εκπαίδευσης να μην είναι επαρκή για την σωστή εκτίμηση τέτοιων ατόμων.

Σε τέτοιου είδους τοπία σχεδίασης, πιθανώς η βάση δεδομένων να γεμίζει με άτομα από τις υπό-περιοχές τοπικών ελαχίστων στις οποίες παγιδεύεται ο αλγόριθμος. Να ακολουθά δηλαδή τον εξελικτικό πληθυσμό και όπου «παγιδεύεται», να δέχεται πληθώρα σημείων σε αυτόν τον υποχώρο, με αποτέλεσμα οι εκτιμήσεις του υποκατάστατου μοντέλου να κυμαίνονται κοντά στις τιμές προσαρμογής των ατόμων του τρέχοντος πληθυσμού. Αυτό παρατηρείται και από τα γραφήματα του Σχήματος 5.22, όπου οι εκτιμήσεις του υποκατάστατου μοντέλου ακολουθούν πιστά την εξελικτική αναζήτηση, αλλά δεν παρουσιάζουν μεγάλη διακύμανση.

Τα ποσοστά επιτυχίας των μεθοδολογιών εκπαίδευσης ίσως να μπορούν να βελτιωθούν με την χρήση διαφορετικού κριτηρίου επιλογής των εισαγόμενων δεδομένων στη βάση δεδομένων από αυτό που χρησιμοποιείται (εισαγωγή των επακριβώς αξιολογημένων ατόμων που είναι καλύτεροι από τον γονέα τους).

Συνάρτηση De Jong



Σχήμα 5.23: Αποτελέσματα επίλυσης του αλγόριθμου APSADE στην συνάρτηση De Jong, για την επιλογή της μεθόδου εκπαίδευσης ενός σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου. Από τα αριστερά προς τα δεξιά, χρήση των μεθόδων all DB, Newest, PAS, ISS.

Πίνακας 5.4: Ποσοστό επιτυχίας του MLP δικτύου για κάθε μέθοδο εκπαίδευσης.

	all DB	Newest	PAS	ISS
Αξιολογήσεις	331	325	331	332
Επιτυχής	125	123	118	129
Ποσοστό Επιτυχίας	37.76435	37.84615	35.64955	38.85542

Κατά την επίλυση των συναρτήσεων Ackley και De Jong, παρατηρούμε παρόμοια συμπεριφορά από όλες τις μεθοδολογίες, με την **Newest** να παρουσιάζει τα καλύτερα αποτελέσματα στην συνάρτηση Ackley και την **ISS** στην συνάρτηση De Jong. Όλες οι μεθοδολογίες ακολουθούν την εξελικτική αναζήτηση και ανταποκρίνονται στην πληθυσμιακή ποικιλομορφία που επιφέρει η στρατηγική αναζήτησης DE/rand/1, όπως φαίνεται από τα Σχήματα 5.22 και 5.23.

Ο Πίνακας 5.5 μας δείχνει τον μέσο όρο επιτυχίας της κάθε μεθόδου από την επίλυση του αλγορίθμου σε 3 προβλήματα αναφοράς (Rosenbrock, Ackley και De Jong), δηλαδή το ποσοστό επιτυχίας της κάθε μεθόδου σαν μια γενική μέθοδος εκπαίδευσης σε διάφορα τοπία σχεδίασης.

Πίνακας 5.5: Ποσοστό επιτυχίας του MLP δικτύου για κάθε μέθοδο εκπαίδευσης.

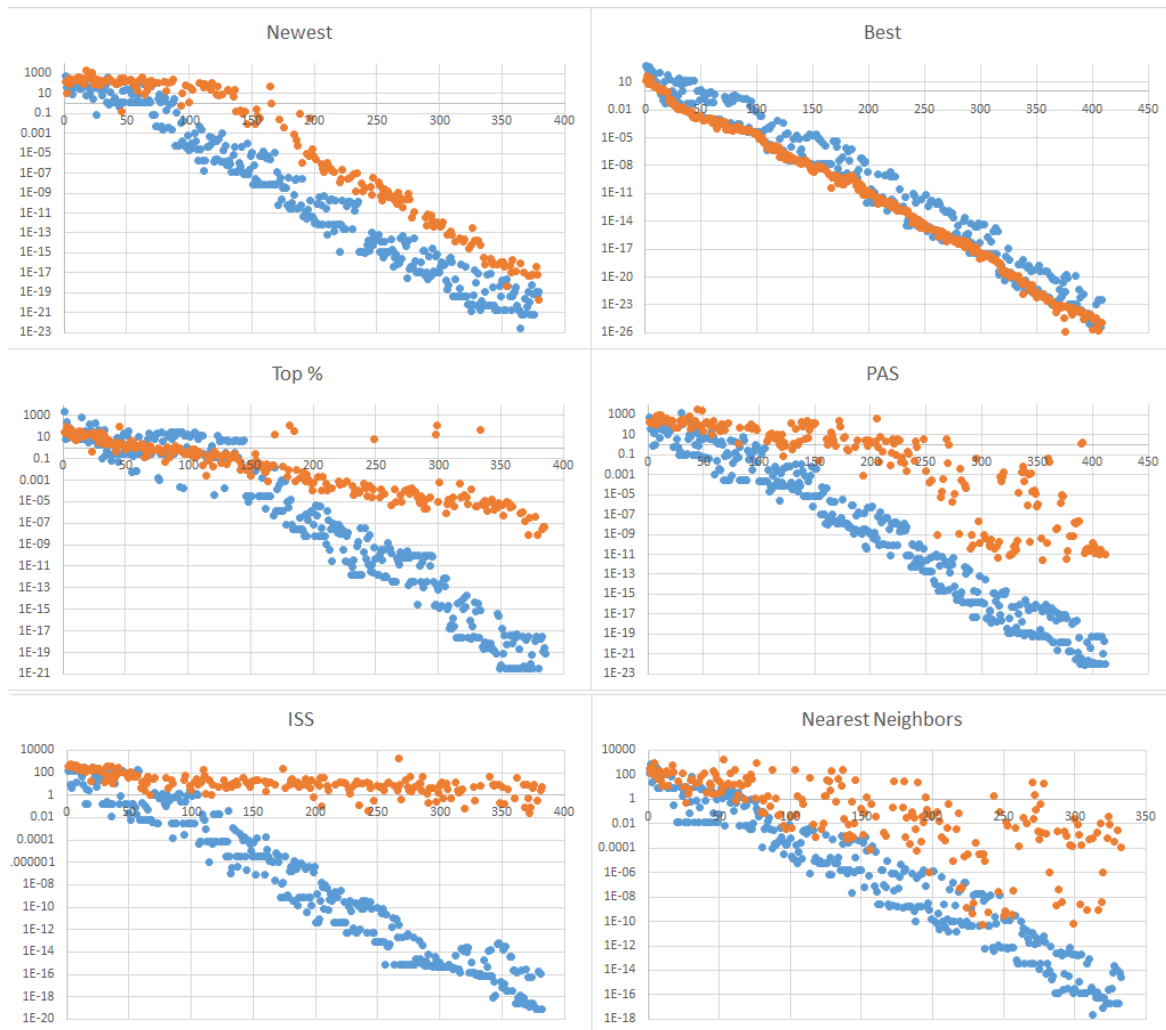
	all DB	Newest	PAS	ISS
Rosenbrock	62.06897	55.83596	66.4557	55.5205
Ackley	32.69841	39.35484	37.5817	31.11111
De Jong	37.76435	37.84615	35.64955	38.85542
Mean	44.17724	44.34565	46.56232	41.82901

Από τον μέσο όρο των ποσοστών επιτυχίας των μεθοδολογιών επιλογής δεδομένων εκπαίδευσης για την κατασκευή/εκπαίδευση ενός σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου, παρατηρούμαι ότι η **PAS** μέθοδος παρουσιάζει την μεγαλύτερη επιτυχία και ακολουθούν η **Newest** και η **all DB** με παρόμοιο ποσοστό. Η μέθοδος **ISS**, παρόλο που στην συνάρτηση De Jong παρουσιάζει το μεγαλύτερο ποσοστό επιτυχίας, σαν γενική μέθοδος εκπαίδευσης ενός σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου διαφόρων τοπίων σχεδίασης δεν είναι ικανοποιητική. Μια περαιτέρω ανάλυση θα διεξαχθεί σε μεθεπόμενο στάδιο για την εξαγωγή της απόφασής μας.

5.5.2 Τοπικό υποκατάστατο μοντέλο

Σαν τοπικό υποκατάστατο μοντέλο στον αλγόριθμο μας, θα χρησιμοποιηθεί το RBF νευρωνικό δίκτυο, λόγω της γρήγορης κατασκευής του. Οι μέθοδοι εκπαίδευσης που θα εξετασθούν είναι οι Newest, Best, Top %, PAS, ISS και Nearest Neighbors. Η μεθοδολογία all DB δεν θα εξετασθεί, λόγω της γνώσης εκ των προτέρων της σφαιρικής απεικόνισης που προσφέρει. Η στρατηγική μετάλλαξης για την αναπαραγωγή των απογόνων που θα χρησιμοποιηθεί είναι η DE/best/1, η οποία προσφέρει πολύ καλή τοπική αναζήτηση, όπως είδαμε από την ενότητα 5.3. Τα προβλήματα αναφοράς στα οποία θα γίνει η εξέταση των αποτελεσμάτων του αλγορίθμου μας είναι τα Rosenbrock, Ackley και De Jong. Ο πληθυσμός αποτελείται από 10 άτομα (10 κόμβους) και το κριτήριο διακοπής είναι στις 500 γενιές.

Συνάρτηση Rosenbrock



Σχήμα 5.24: Αποτελέσματα επίλυσης του αλγορίθμου APSADE στην συνάρτηση Rosenbrock, για την επιλογή της μεθόδου εκπαίδευσης ενός τοπικού υποκατάστατου μοντέλου. Από τα αριστερά προς τα δεξιά, χρήση των μεθόδων Newest, Best, Top %, PAS, ISS και Nearest Neighbors.

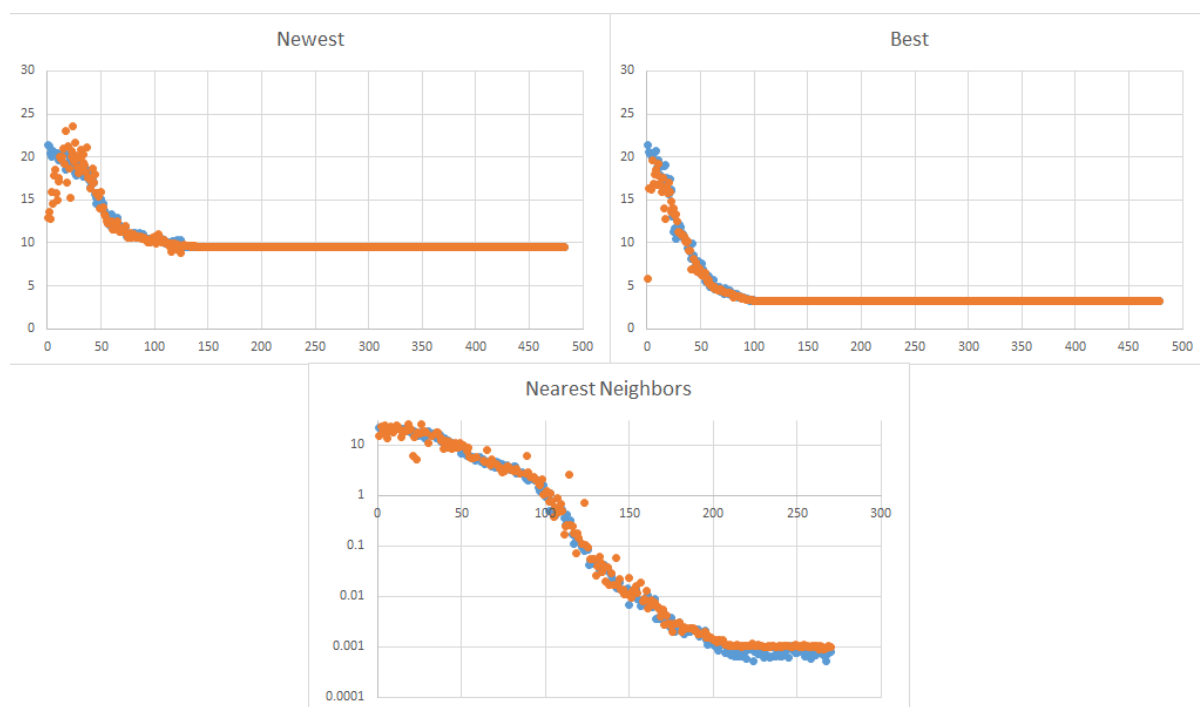
Πίνακας 5.6: Ποσοστό επιτυχίας του RBF δικτύου για κάθε μέθοδο εκπαίδευσης.

	Newest	Best	Nearest
Αξιολογήσεις	379	408	333
Επιτυχής	141	129	139
Ποσοστό Επιτυχίας	37.20317	31.61765	41.74174

Από τα αποτελέσματα του Σχήματος 5.24 βλέπουμε ότι οι μεθοδολογίες επιλογής δεδομένων εκπαίδευσης **Top %**, **PAS** και **ISS** δεν ακολουθούν την εξελικτική αναζήτηση. Παρ'όλα αυτά κατά την χρήση αυτών των μεθοδολογιών εξ'ακολουθεί να βρίσκεται καλύτερη λύση, αλλά η εκτίμηση του υποκατάστατου μοντέλου σε αυτές τις περιπτώσεις είναι αρνητική (δεν φαίνεται στο γράφημα) και πολύ μακριά από την πραγματική τιμή. Για τους παραπάνω λόγους θα απορρίψουμε τις τρεις προαναφερθείσες μεθοδολογίες για την εκπαίδευση ενός τοπικού υποκατάστατου μοντέλου. Στις υπόλοιπες τρεις μεθοδολογίες παρατηρούμε λύσεις ανάμεσα στον εξελικτικό πληθυσμό, με καλύτερη αποτύπωση της εξελικτικής αναζήτησης από την μεθοδολογία **Best**.

Από τον Πίνακα 5.6 παρατηρούμε ότι η μεθοδολογία **Nearest Neighbors** παρουσιάζει το μεγαλύτερο ποσοστό επιτυχίας αλλά με το μικρότερο αριθμό ακριβών αξιολογήσεων. Η μεθοδολογία **Best** έρχεται τελευταία και αυτό οφείλεται στις εκτιμήσεις της τιμής προσαρμογής που έκανε το υποκατάστατο ως εσφαλμένα καλύτερες από τον γόνεα του υπό αξιολόγηση απογόνου. Αυτό παρατηρείται και από το Σχήμα 5.24, όπου οι εκτιμήσεις ακολουθούν τα καλύτερα άτομα (βρίσκονται στο κάτω μέρος της εξελικτικής αναζήτησης). Στις άλλες δύο μεθοδολογίες το μεγαλύτερο ποσοστό επιτυχίας οφείλεται στην σωστή εκτίμηση του υποκατάστατου των ατόμων που έχουν πραγματική τιμή προσαρμογής μικρότερη από του γονέα τους, όπως φαίνεται και από το Σχήμα 5.24 όπου οι περισσότερες εκτιμήσεις (πορτοκαλί κουκκίδες) βρίσκονται πιο ψηλά από τις ακριβείς αξιολογήσεις (μπλε κουκκίδες).

Συνάρτηση Ackley



Σχήμα 5.25: Αποτελέσματα επίλυσης του αλγόριθμου APSADE στην συνάρτηση Ackley, για την επιλογή της μεθόδου εκπαίδευσης ενός τοπικού υποκατάστατου μοντέλου. Από τα αριστερά προς τα δεξιά, χρήση των μεθόδων Newest, Best και Nearest Neighbors.

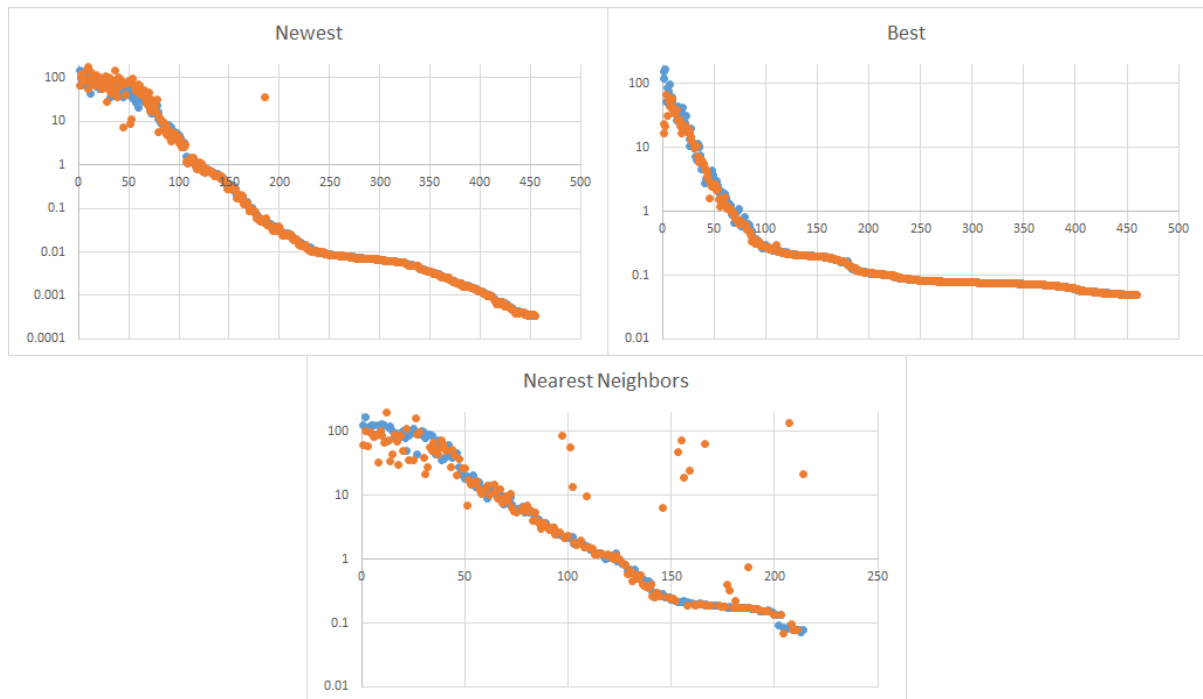
Πίνακας 5.7: Ποσοστό επιτυχίας του RBF δικτύου για κάθε μέθοδο εκπαίδευσης.

	Newest	Best	Nearest
Αξιολογήσεις	483	478	270
Επιτυχής	184	219	129
Ποσοστό Επιτυχίας	38.09524	45.8159	47.77778

Κατά την επίλυση της συνάρτησης Ackley, παρατηρούμε ότι και οι τρεις μεθοδολογίες ακολουθούν την εξελικτική αναζήτηση. Η μεθοδολογία Nearest Neighbors έχει το μεγαλύτερο ποσοστό επιτυχίας αλλά εμφανίζει μικρό αριθμό ακριβών αξιολογήσεων, όπως προηγουμένως. Η μεθοδολογία Best παρουσιάζει επίσης ένα μεγάλο ποσοστό επιτυχίας με μικρή διαφορά από την Nearest Neighbors.

Συνάρτηση De Jong

Στη συνάρτηση Rosenbrock παρατηρούμε από το Σχήμα 5.26, ότι και οι τρεις μεθοδολογίες ακολουθούν την εξελικτική αναζήτηση, με την Nearest Neighbors να εμφανίζει κάποιες εκτιμήσεις μακριά από τις πραγματικές τιμές. Αυτό παρατηρείται και από τα αποτελέσματα του Πίνακα 5.8, όπου εμφανίζει μικρότερο ποσοστό επιτυχίας από τις υπόλοιπες μεθόδους.



Σχήμα 5.26: Αποτελέσματα επίλυσης του αλγόριθμου APSADE στην συνάρτηση De Jong, για την επιλογή της μεθόδου εκπαίδευσης ενός τοπικού υποκατάστατου μοντέλου. Από τα αριστερά προς τα δεξιά, χρήση των μεθόδων Newest, Best και Nearest Neighbors.

Πίνακας 5.8: Ποσοστό επιτυχίας του RBF δικτύου για κάθε μέθοδο εκπαίδευσης.

	Newest	Best	Nearest
Αξιολογήσεις	455	459	214
Επιτυχής	292	287	127
Ποσοστό Επιτυχίας	64.17582	62.52723	59.34579

Αυτό που παρατηρούμε από την επίλυση και των τριών συναρτήσεων είναι ότι, κάνοντας χρήση της μεθόδου Nearest Neighbors, παρόλο που παρουσιάζει το μεγαλύτερο ποσοστό επιτυχίας στις περισσότερες συναρτήσεις, παρουσιάζει όμως και τον μικρότερο αριθμό ακριβών αξιολογήσεων σε όλες τις συναρτήσεις. Αυτό οφείλεται στην αυξημένη υπολογιστική απαίτηση για την κατασκευή ενός

υποκατάστατου μοντέλου σε κάθε κόμβο του συστήματος και οδηγεί σε μια σημαντική επιβράδυνση του αλγορίθμου. Παρακάτω παρουσιάζεται το μέσο ποσοστό επιτυχίας της κάθε μεθοδολογίας και για τις τρεις συναρτήσεις που χρησιμοποιήθηκαν.

Πίνακας 5.9: Ποσοστό επιτυχίας του RBF δικτύου για κάθε μέθοδο εκπαίδευσης.

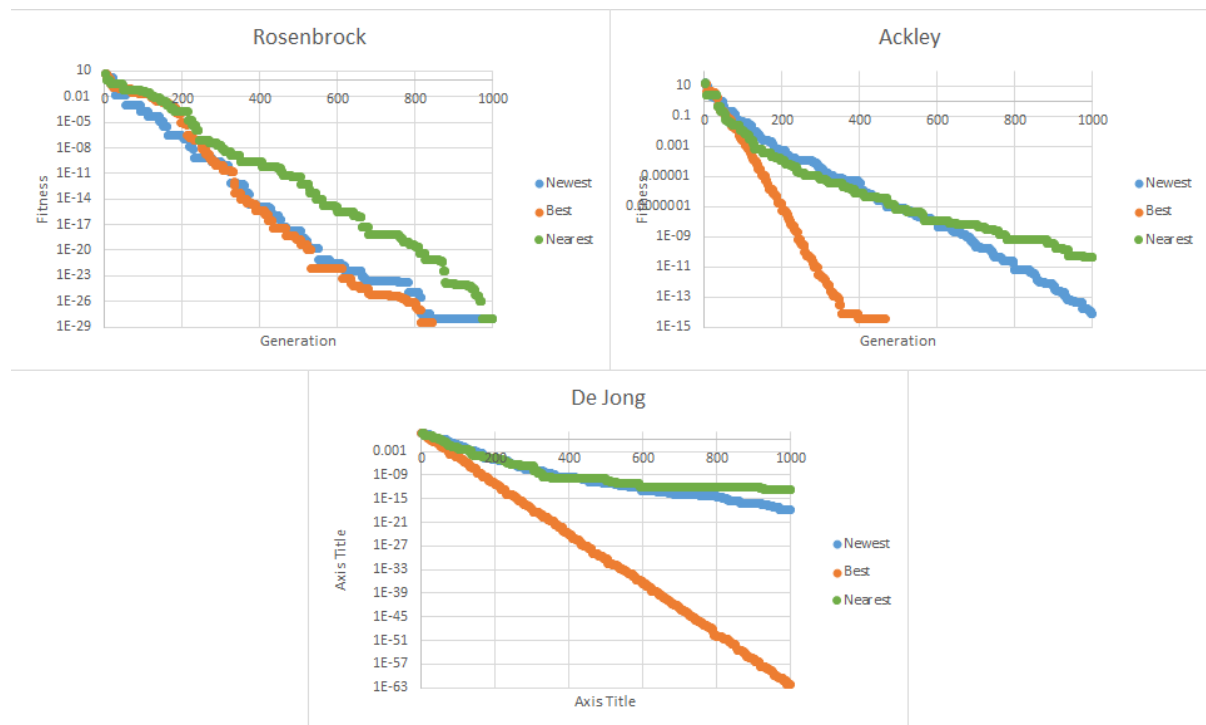
	Newest	Best	Nearest
Rosenbrock	37.20317	31.61765	41.74174
Ackley	38.09524	45.8159	47.77778
De Jong	64.17582	62.52723	59.34579
Mean	46.49141	46.65359	49.62177

Ο μέσος όρος του ποσοστού επιτυχίας των τριών μεθόδων εκπαίδευσης ενός τοπικού υποκατάστατου μοντέλου είναι παρόμοιος και για τις τρεις μεθοδολογίες, με μεγαλύτερο ποσοστό να παρουσιάζει η μεθοδολογία Nearest Neighbors. Αυτό όμως δεν είναι αρκετό για να βγάλουμε συμπέρασμα στο ποιά μεθοδολογία είναι η πιό κατάλληλη. Μια σύγκριση των αποτελεσμάτων λύνοντας τον αλγόριθμο APSADE με την προσθήκη της μεθόδου SASS (ενότητα 5.4.2) στα προβλήματα αναφοράς του παραρτήματος Β, θα μας οδηγήσει στο επιθυμητό αποτέλεσμα.

5.5.3 Επίλυση του APSADE-SASS για την επιλογή των κατάλληλων μεθόδων

Για την απόφαση της καταλληλότερης μεθοδολογίας για την εκπαίδευση του σφαιρικού και του τοπικού μοντέλου αντίστοιχα, θα κάνουμε επίλυση του αλγορίθμου APSADE με την προσθήκη της μεθόδου SASS στα προβλήματα αναφοράς Rosenbrock, Ackley και De Jong. Θα κάνουμε σύγκριση της σύγκλισης που επιτυγχάνει κάθε μεθοδολογία, καθώς και του υπολογιστικού χρόνου που απαιτήθηκε. Όλες οι εκτελέσεις θα γίνουν με πληθυσμό 10 ατόμων (10 κόμβοι) και με κριτήριο διακοπής τις 1000 γενιές.

Αρχικά θα κάνουμε σύγκριση των μεθοδολογιών εκπαίδευσης ενός τοπικού υποκατάστατου μοντέλου. Σαν μεθοδολογία εκπαίδευσης του MLP (σφαιρικό υποκατάστατο μοντέλο), θα χρησιμοποιήσουμε την Newest σε όλες τις εκτελέσεις.

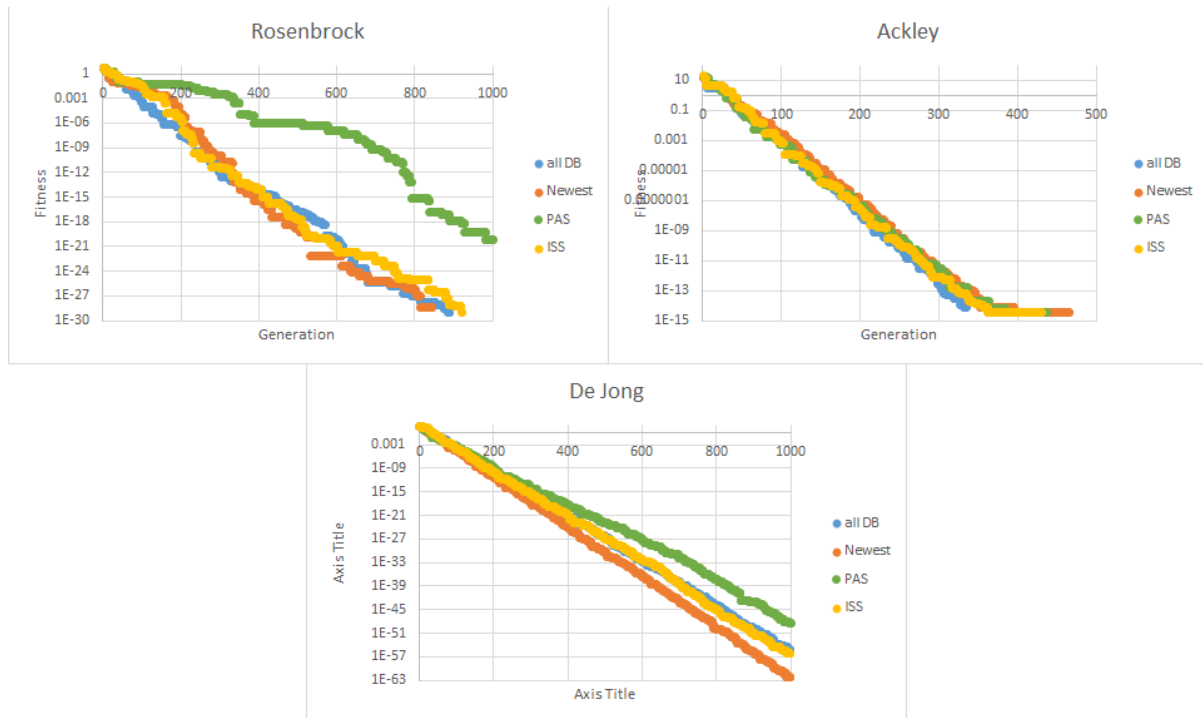


Σχήμα 5.27: Επίλυση των προβλημάτων αναφοράς Rosenbrock, Ackley και De Jong, με τις μεθοδολογίες εκπαίδευσης τοπικού υποκατάστατου μοντέλου Newest (μπλε), Best (πορτοκαλί) και Nearest Neighbors (πράσινο).

Στη συνάρτηση Rosenbrock, ο αλγόριθμος με την μέθοδο Best βρίσκει τη καλύτερη λύση στις 800 γενιές, ενώ οι μεθοδολογίες Newest και Nearest Neighbors συγκλίνουν σε μια λύση πολύ κοντά στη βέλτιστη. Στη συνάρτηση Ackley με την μέθοδο Best, ο αλγόριθμος βρίσκει την βέλτιστη λύση στις 450 γενιές περίπου. Με την μέθοδο Newest ο αλγόριθμος συγκλίνει σε μια πολύ κοντινή λύση στο βέλτιστο και με την Nearest Neighbors συγκλίνει σε μια ικανοποιητική λύση. Στη συνάρτηση De Jong, ο αλγόριθμος κάνοντας χρήση της Best μεθόδου συγκλίνει στις 1000 γενιές σε μια πολύ καλύτερη λύση σε σχέση με τις άλλες δύο μεθόδους.

Από τα παραπάνω μπορούμε να αποφανθούμε στο συμπέρασμα ότι η μέθοδος Best είναι η καταλληλότερη μέθοδος από τις παραπάνω για την εκπαίδευση ενός τοπικού υποκατάστατου μοντέλου.

Ακολουθεί σύγκριση των μεθοδολογιών εκπαίδευσης ενός σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου. Σαν μεθοδολογία εκπαίδευσης του RBF (τοπικό υποκατάστατο μοντέλο), θα χρησιμοποιήσουμε την Best σε όλες τις εκτελέσεις, αφού έχει βρεθεί ως η καλύτερη μέθοδος εκπαίδευσης ενός τοπικού υποκατάστατου μοντέλου.



Σχήμα 5.28: Επίλυση των προβλημάτων αναφοράς Rosenbrock, Ackley και De Jong, με τις μεθοδολογίες εκπαίδευσης σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου all DB (μπλε), Newest (πορτοκαλί), PAS (πράσινο) και ISS (κίτρινο).

Πίνακας 5.10: Καλύτερο σημείο και χρόνος επίλυσης των μεθοδόδων εκπαίδευσης στην συνάρτηση Rosenbrock.

<i>Rosenbrock</i>				
	<i>all DB</i>	<i>Newest</i>	<i>PAS</i>	<i>ISS</i>
<i>time</i>	62	44	45	62
<i>Best</i>	0.00E+00	0.00E+00	9.25E-21	0.00E+00

Πίνακας 5.11: Καλύτερο σημείο και χρόνος επίλυσης των μεθοδόδων εκπαίδευσης στην συνάρτηση Ackley.

<i>Ackley</i>				
	<i>all DB</i>	<i>Newest</i>	<i>PAS</i>	<i>ISS</i>
<i>time</i>	27	30	26	29
<i>Best</i>	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

Πίνακας 5.12: Καλύτερο σημείο και χρόνος επίλυσης των μεθοδόδων εκπαίδευσης στην συνάρτηση *De Jong*.

<i>De Jong</i>				
	<i>all DB</i>	<i>Newest</i>	<i>PAS</i>	<i>ISS</i>
<i>time</i>	299	242	184	329
<i>Best</i>	2.87E-56	8.16E-63	3.65E-49	5.87E-57

Από το Σχήμα 5.28 παρατηρούμε ότι στην επίλυση της συνάρτησης **Ackley**, όλες οι μεθοδολογίες εκπαίδευσης παρουσιάζουν παρόμοια συμπεριφορά. Όλες βρίσκουν την βέλτιστη λύση σε λιγότερες από 500 γενιές και με παρόμοιο χρόνο, όπως φαίνεται από τον Πίνακα 5.11. Κατά την επίλυση της συνάρτησης **Rosenbrock**, οι μεθοδολογίες *all DB*, *Newest* και *ISS* βρίσκουν την βέλτιστη λύση, ενώ η μεθοδολογία *PAS* αδυνατεί. Επίσης, η *Newest* έχει τον καλύτερο χρόνο επίλυσης στα 44 δευτερόλεπτα σε σχέση με τις άλλες δύο που έχουν στα 62. Στην συνάρτηση **De Jong** όλες οι μεθοδολογίες συγκλίνουν σε καλή τιμή, με την μέθοδο *Newest* να συγκλίνει στην καλύτερη (8.16E-63) και με καλύτερο χρόνο από τις *all DB* και *ISS*. Η *PAS* έχει τον μικρότερο χρόνο επίλυσης αλλά η τιμή στην οποία συγκλίνει είναι η μεγαλύτερη.

Από τα παραπάνω μπορούμε να καταλήξουμε στο συμπέρασμα ότι η μέθοδος *Newest* είναι η καταλληλότερη μέθοδος από τις παραπάνω για την εκπαίδευση ενός σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου.

Στο επόμενο κεφάλαιο θα πραγματοποιηθεί μια σύγκριση μεταξύ των μεθοδολογιών που προτείναμε (*TASEA*, *SASS* και *NBClass*), για την πρόταση της καλύτερης για την επιτάχυνση του αλγορίθμου μας. Μια σύγκριση θα ακολουθήσει με τον αρχικό αλγόριθμο εφαρμογής (*APSADE*) και τα αποτελέσματα αυτής θα αναλυθούν. Θα αναφέρουμε σε ποια θέματα υπερτερεί ο νέος αλγόριθμος και θα παρουσιάσουμε ένα γενικό πλαίσιο του νέου αλγορίθμου, το οποίο θα αποτελείται από όλες τις μεθόδους που προσθέσαμε και θα γίνεται αναφορά στο πως αλλάζουν οι μέθοδοι ανάλογα με την επιθυμία του χρήστη. Τέλος θα αναφέρουμε διάφορες βελτιώσεις ή προσθήκες για περαιτέρω επιτάχυνση του αλγορίθμου.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ & ΒΕΛΤΙΩΣΕΙΣ

Μια σύγκριση των μεθοδολογιών που προσθέσαμε στον αλγόριθμό μας (**TASEA**, **SASS** και **NBClass**), θα λάβει μέρος σε αυτό το κεφάλαιο. Θα προταθεί η καλύτερη και θα παρουσιαστεί ένα γενικό πλαίσιο του νέου αλγορίθμου, με τις επιπρόσθετες μεθοδολογίες επιτάχυνσης. Στην συνέχεια θα γίνει αναφορά σε διάφορες τεχνικές ή μεθοδολογίες για περαιτέρω επιτάχυνση του αλγορίθμου.

Οι συγκρίσεις θα διεξαχθούν με την επίλυση των προβλημάτων αναφοράς του παραρτήματος Β. Για κάθε πρόβλημα αναφοράς θα γίνουν 5 εκτελέσεις (λόγω της τυχαίας αρχικοποίησης των δειγματικών σημείων) και θα επιλεγεί η καλύτερη εκτέλεση προς απεικόνιση. Οι παράμετροι F και C_r για τους τελεστές μετάλλαξης και επιχιασμού, έχουν οριστεί ως 0.6 και 0.45 αντίστοιχα. Η εκπαίδευση του σφαιρικού υποκατάστατου μοντέλου (MLP) πραγματοποιείται με την μεθοδολογία Newest και η εκπαίδευση του τοπικού υποκατάστατου μοντέλου (RBF) με την μεθοδολογία Best. Ο πληθυσμός σε όλες τις εκτελέσεις αποτελείται από 12 άτομα (12 κόμβοι) και το κριτήριο διακοπής ικανοποιείται στις 1000 γενιές. Ο επεξεργαστής του συστήματος μας είναι ένας Ryzen 5 1600AF στα 3,6 GHz με 12 λογικούς πυρήνες.

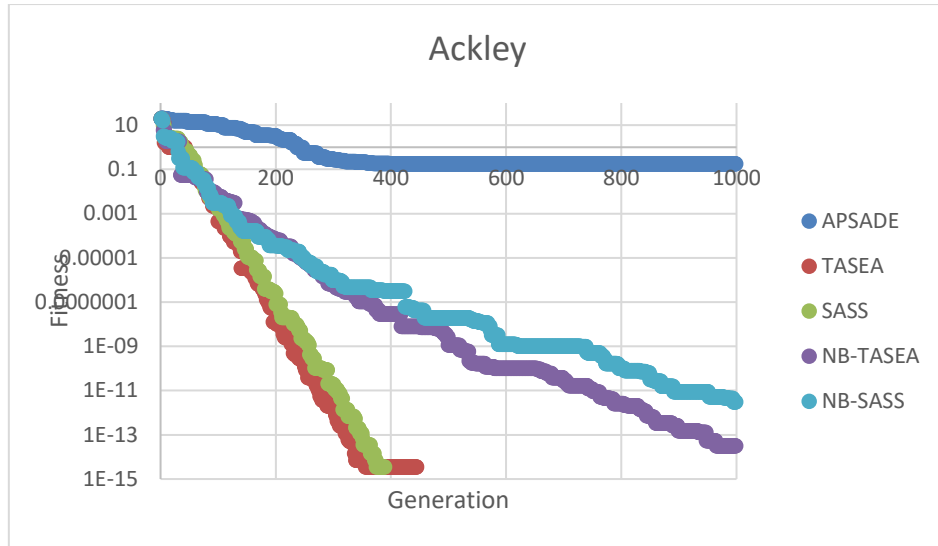
Με την μέθοδο Neighborhood Classification (NBClass), δύο αλγόριθμοι θα εξετασθούν που θα διαφέρουν στην εναλλαγή της στρατηγικής μετάλλαξης. Ο πρώτος είναι ο **NB-TASEA**, ο οποίος εναλλάσσει την στρατηγική μετάλλαξης όπως του προτεινόμενου TASEA (ενότητα 5.4.1) και ο δεύτερος είναι ο **NB-SASS** που εναλλάσσει την στρατηγική μετάλλαξης όπως του προτεινόμενου SASS (ενότητα 5.4.2).

Στον Πίνακα 6.1 παρουσιάζονται συνοπτικά οι στρατηγικές μετάλλαξης, οι μεθοδολογίες εκπαίδευσης και οι τεχνικές που χρησιμοποιούνται στον κάθε υπό εξέταση αλγόριθμο.

Πίνακας 6.1: Περιεχόμενα των υπό εξέταση αλγορίθμων

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ	ΤΕΧΝΙΚΕΣ	ΣΤΡΑΤΗΓΙΚΕΣ ΜΕΤΑΛΛΑΞΗΣ	MLP	RBF
APSADE		<i>DE/apsade</i>	Newest	Best
TASEA	Μηχανισμός ανάδρασης	<i>DE/hybrid/trigonometric DE/current-to-randbest/1 DE/best/1</i>	Newest	Best
SASS	Ρουλέτα	<i>DE/hybrid/trigonometric DE/apsade DE/best/1</i>	Newest	Best
NB-TASEA	Μηχανισμός ανάδρασης Ταξινόμηση γειτονιάς	<i>DE/hybrid/trigonometric DE/current-to-randbest/1 DE/best/1</i>	Newest	Nearest Neighbors
NB-SASS	Ρουλέτα Ταξινόμηση γειτονιάς	<i>DE/hybrid/trigonometric DE/apsade DE/best/1</i>	Newest	Nearest Neighbors

Παρακάτω παρουσιάζονται σε γραφήματα τα αποτελέσματα της επίλυσης των προαναφερόμενων αλγορίθμων στα προβλήματα αναφοράς Ackley, Griewank, Rastrigin, Rosenbrock και De Jong. Τα αποτελέσματα των αλγορίθμων θα συγκριθούν ως προς την αποδοτικότητα και την αποτελεσματικότητα. Δηλαδή ως προς την σύγκλιση που επιφέρουν και ως προς τον υπολογιστικό χρόνο που καταναλώνουν μέχρι να τερματίσουν.

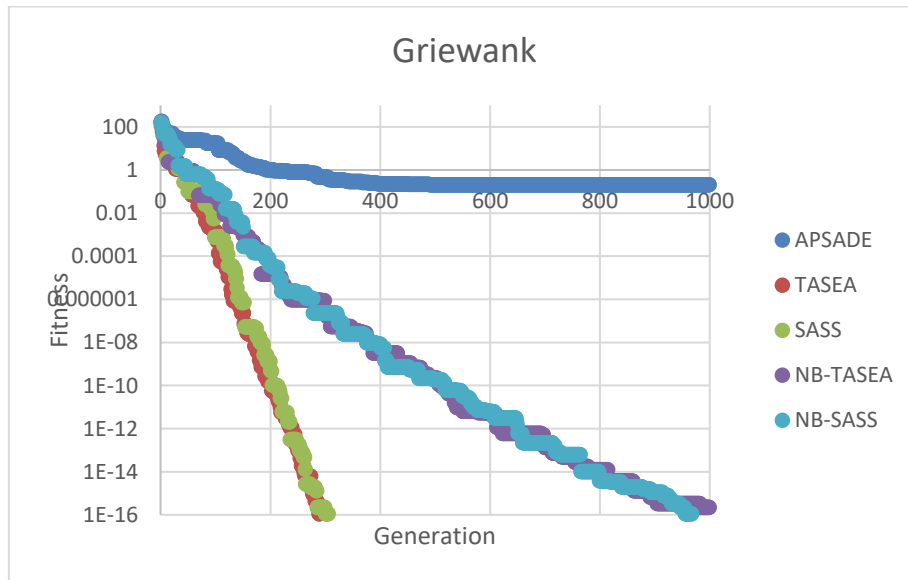


Σχήμα 6.1: Επίλυση του προβλήματος αναφοράς Ackley, με τους αλγόριθμους APSADE (μπλε), TASEA (κόκκινο), SASS (πράσινο), NB-TASEA (μωβ) και NB-SASS (γαλάζιο).

Πίνακας 6.2: Καλύτερο σημείο και χρόνος επίλυσης κάθε αλγόριθμου στην συνάρτηση Ackley.

	APSADE	TASEA	SASS	NB-TASEA	NB-SASS
<i>time (s)</i>	60	33	30	58	57
<i>Best</i>	0.175714	0.00E+00	0.00E+00	3.20E-14	3.01E-12

Στην συνάρτηση Ackley παρατηρούμε ότι ο αλγόριθμος μας με την χρήση των μεθοδολογιών TASEA και SASS βρίσκει την βέλτιστη λύση σε πολύ σύντομο χρονικό διάστημα (~400 γενιές). Η μεθοδολογία NBClass είναι ικανή και στις δύο εκδοχές της να βρει την βέλτιστη λύση αλλά σε παραπάνω από 1000 γενιές, με καλύτερα αποτελέσματα να παρουσιάζει η NB-TASEA. Ο αρχικός αλγόριθμος (APSADE) παγιδεύεται νωρίς σε ένα τοπικό ελάχιστο.

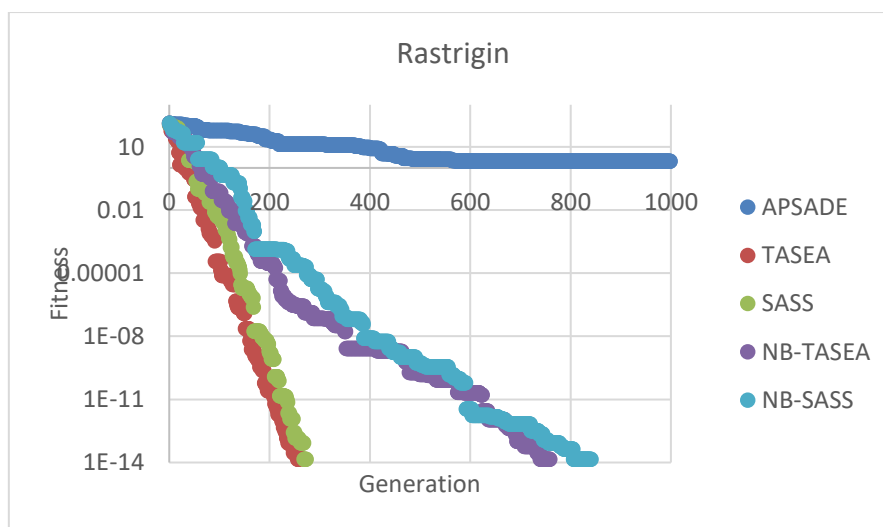


Σχήμα 6.2: Επίλυση του προβλήματος αναφοράς Griewank, με τους αλγόριθμους APSADE (μπλε), TASEA (κόκκινο), SASS (πράσινο), NB-TASEA (μωβ) και NB-SASS (γαλάζιο).

Πίνακας 6.3: Καλύτερο σημείο και χρόνος επίλυσης κάθε αλγόριθμου στην συνάρτηση Griewank.

	APSADE	TASEA	SASS	NB-TASEA	NB-SASS
<i>time (s)</i>	61	21	22	57	61
<i>Best</i>	0.207641	0.00E+00	0.00E+00	2.22E-16	0.00E+00

Κατά την επίλυση της συνάρτησης Griewank οι μεθοδολογίες TASEA και SASS βρίσκουν νωρίς την βέλτιστη λύση (~300 γενιές) και ακολουθούν οι NB-TASEA και NB-SASS με παρόμοια συμπεριφορά στις 1000 γενιές περίπου. Ο αρχικός αλγόριθμος αδυνατεί πάλι να βρεί την βέλτιστη λύση και συγκλίνει νωρίς σε ένα τοπικό ελάχιστο.

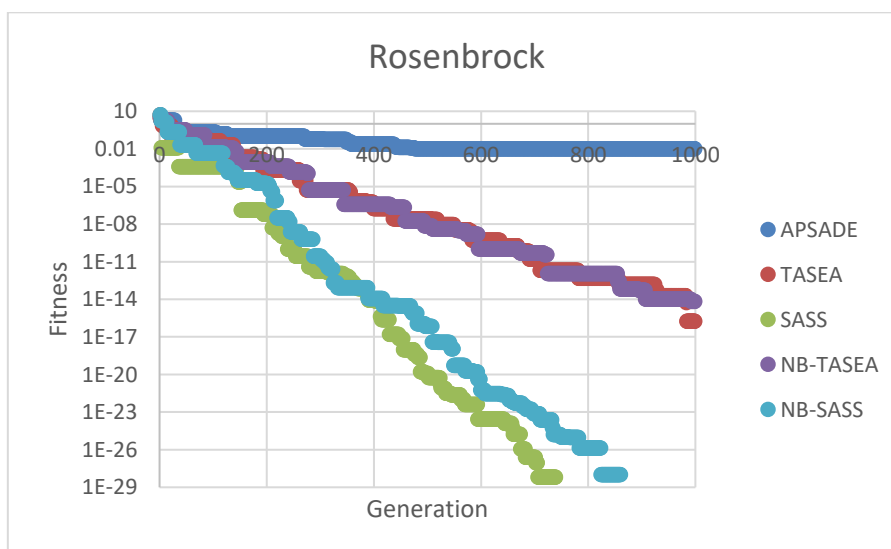


Σχήμα 6.3: Επίλυση του προβλήματος αναφοράς Rastrigin, με τους αλγόριθμους APSADE (μπλε), TASEA (κόκκινο), SASS (πράσινο), NB-TASEA (μωβ) και NB-SASS (γαλάζιο).

Πίνακας 6.4: Καλύτερο σημείο και χρόνος επίλυσης κάθε αλγόριθμου στην συνάρτηση Griewank.

	APSADE	TASEA	SASS	NB-TASEA	NB-SASS
time (s)	66	16	18	42	48
Best	2.03879	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

Όλες οι προτεινόμενες μεθοδολογίες κατά την επίλυση της συνάρτησης Rastrigin (Σχήμα 6.3), είναι ικανές να βρουν την βέλτιστη λύση σε λιγότερες από 1000 γενιές, με τα καλύτερα αποτελέσματα να παρουσιάζουν οι μεθοδολογίες TASEA και SASS (< 300 γενιές).

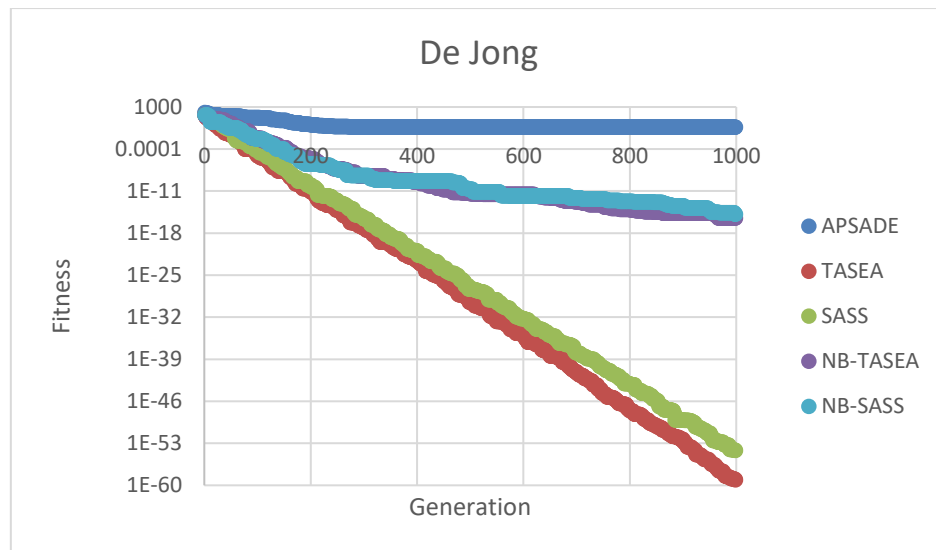


Σχήμα 6.4: Επίλυση του προβλήματος αναφοράς Rosenbrock, με τους αλγόριθμους APSADE (μπλε), TASEA (κόκκινο), SASS (πράσινο), NB-TASEA (μωβ) και NB-SASS (γαλάζιο).

Πίνακας 6.5: Καλύτερο σημείο και χρόνος επίλυσης κάθε αλγόριθμου στην συνάρτηση Rosenbrock.

	APSADE	TASEA	SASS	NB-TASEA	NB-SASS
time (s)	66	55	44	52	51
Best	1.01E-02	1.72E-16	0.00E+00	6.63E-15	0.00E+00

Παρατηρούμε ότι η μέθοδος SASS βρίσκει γρήγορα την βέλτιστη λύση (~700 γενιές) και ακολουθεί η NB-SASS (~800 γενιές), η οποία χρησιμοποιεί την ίδια στρατηγική εναλλαγής των στρατηγικών μετάλλαξης με την SASS μεθοδολογία. Οι υπόλοιπες μεθοδολογίες αδυνατούν να βρουν την βέλτιστη λύση στις 1000 γενιές, με τον αρχικό αλγόριθμο να συγκλίνει νωρίς σε μια μη βέλτιστη λύση.



Σχήμα 6.5: Επίλυση του προβλήματος αναφοράς De Jong, με τους αλγόριθμους APSADE (μπλε), TASEA (κόκκινο), SASS (πράσινο), NB-TASEA (μωβ) και NB-SASS (γαλάζιο).

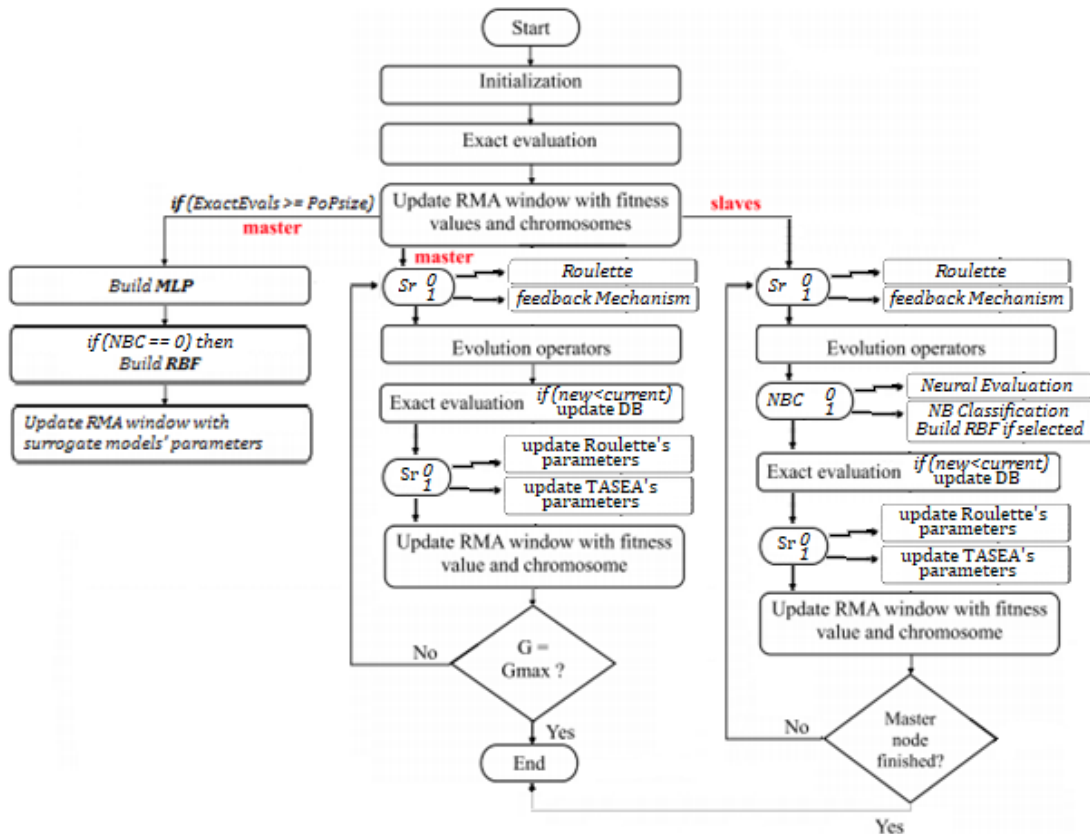
Πίνακας 6.6: Καλύτερο σημείο και χρόνος επίλυσης κάθε αλγόριθμου στην συνάρτηση De Jong.

	APSADE	TASEA	SASS	NB-TASEA	NB-SASS
time (s)	129	294	308	86	86
Best	0.420988	7.49E-60	6.24E-55	3.02E-16	1.29E-15

Στην συνάρτηση De Jong, ο αρχικός αλγόριθμος όπως και προηγουμένως συγκλίνει νωρίς σε μία μη βέλτιστη λύση. Οι δύο εκδοχές της μεθοδολογίας NBClass παρουσιάζουν παρόμοια αποτελέσματα και συγκλίνουν σε μια ικανοποιητική λύση. Οι μεθοδολογίες TASEA και SASS συγκλίνουν σε πολύ καλή λύση και οι δύο, με την TASEA να βρίσκει την καλύτερη λύση (7.49E-60) και συντομότερα από την SASS.

Παρατηρούμε ότι όλοι οι νέοι προτεινόμενοι αλγόριθμοι παρουσιάζουν καλύτερη σύγκλιση από τον αρχικό αλγόριθμο. Ο προτεινόμενος TASEA παρουσιάζει την καλύτερη και ταυτόχρονα ταχύτερη σύγκλιση στις περισσότερες συναρτήσεις αλλά παρουσιάζει μια δυσκολία στην συνάρτηση Rosenbrock. Ο προτεινόμενος NBClass παρουσιάζει παρόμοια σύγκλιση σε όλες τις συναρτήσεις και στις δύο εκδοχές του (NB-TASEA και NB-SASS), εκτός από την συνάρτηση Rosenbrock, στην οποία η κάθε εκδοχή ακολουθεί την σύγκλιση του αλγορίθμου από τον οποίο αντιγράφει την εναλλαγή της στρατηγικής μετάλλαξης. Γενικά όμως τα αποτελέσματα που παρουσιάζει ο NBClass δεν είναι τόσο καλά σε σχέση με τους αλγόριθμους SASS και TASEA. Σε αντίθεση ο SASS παρουσιάζει πολύ καλή σύγκλιση σε όλες τις συναρτήσεις, ακόμα και στην Rosenbrock, που οι περισσότεροι παρουσιάζουν μια δυσκολία στην εύρεση της βέλτιστης λύσης.

Από τα παραπάνω μπορούμε να αποφανθούμε στο συμπέρασμα ότι ο αλγόριθμος APSADE με την προσθήκη της μεθοδολογίας SASS που προτείναμε, είναι ικανός να παρουσιάσει μια πολύ καλή σύγκλιση και πιθανόν να βρει την βέλτιστη λύση στα περισσότερα τοπία σχεδίασης. Συνεπώς μπορούμε να πούμε ότι έχουμε επιτύχει την επιτάχυνση ενός Ασύγχρονα-Παράλληλου Υποκατάστατα-Βοηθούμενο Διαφορικού Εξελικτικού Αλγορίθμου.



Σχήμα 6.6: Διάγραμμα ροής του αλγόριθμου APSADE με την προσθήκη όλων των προτεινόμενων μεθοδολογιών για την επιτάχυνση του (TASEA, SASS και NBClass).

Το διάγραμμα ροής του νέου προτεινόμενου αλγόριθμου (**APSADE-SASS**), καθώς και η λειτουργία του παρουσιάζονται στην [ενότητα 5.4.2](#). Στο Σχήμα 6.6 παρουσιάζεται το διάγραμμα ροής του αλγόριθμου APSADE στον οποίο έχει γίνει προσθήκη όλων των μεθοδολογιών που προτείναμε και η επιλογή αυτών πραγματοποιείται από αρχεία κειμένου (txt files), όπως επιθυμεί ο χρήστης.

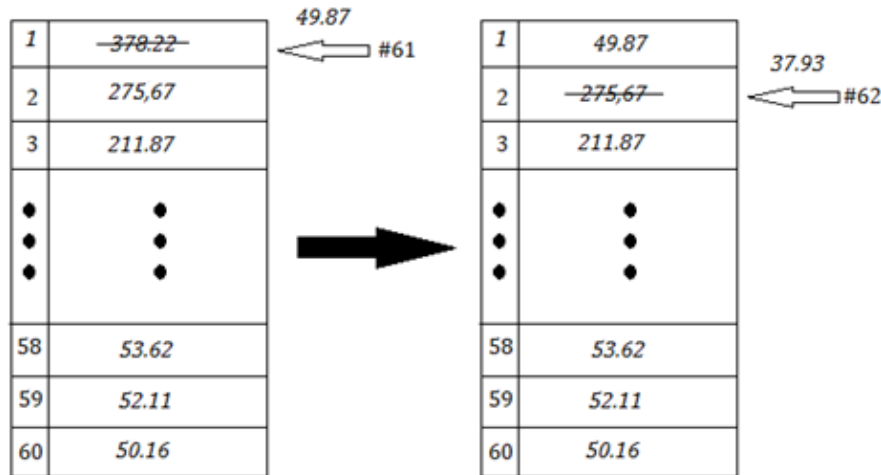
Οι παράμετροι NBC και Sr χρησιμοποιούνται για την επιλογή μιας από τις προτεινόμενες μεθοδολογίες για χρήση στον αλγόριθμο μας. Οι τιμές τους ορίζονται εξ'αρχής από τον χρήστη μέσα από αρχεία κειμένου. Εάν η τιμή της παραμέτρου **NBC** είναι 1, τότε γίνεται χρήση της μεθοδολογίας NBClass και αντίθετα αν είναι 0, τότε δεν γίνεται η χρήση της. Η τιμή 0 της παραμέτρου **Sr** δηλώνει την χρήση της μεθοδολογίας SASS και η τιμή 1 την χρήση της μεθόδου TASEA. Η ανανέωση της βάσης δεδομένων γίνεται εφόσον έχει πραγματοποιηθεί ακριβής αξιολόγηση και ο απόγονος έχει αξιολογηθεί ως καλύτερος από τον γονέα του. Η προεπιλογή αυτή μπορεί να αλλάξει εύκολα, ανάλογα με την επιθυμία του χρήστη στα άλλα δύο κριτήρια προεπιλογής που έχουμε αναφέρει στην [ενότητα 5.1](#).

6.1 ΒΕΛΤΙΩΣΕΙΣ

Οι τεχνικές/μέθοδοι που προσθέσαμε στον APSADE επέφεραν σημαντική επιτάχυνση, ενισχύοντας τόσο την αποδοτικότητα όσο και την αποτελεσματικότητα του αλγορίθμου, όπως είδαμε από την παραπάνω ανάλυση. Παρ'όλα αυτά, ο χώρος για περαιτέρω βελτίωση είναι σημαντικός. Υπάρχει πληθώρα τεχνικών που χρησιμοποιούνται, ώστε να επιτευχθεί καλύτερη αποτελεσματικότητα και αποδοτικότητα στους EAs. Από χρήση διαφορετικών τελεστών εξέλιξης (που δημιουργούνται νέοι συνεχώς) (π.χ. οι στρατηγικές που πρότειναν οι [Dong et al., 2021]), μέχρι την συνδυασμένη χρήση του DE με άλλους εξελικτικούς αλγόριθμους (όπως ο **SAHO** [Pan et al., 2020] αλγόριθμος).

Παρακάτω παρουσιάζεται μια νέα ιδέα που ευελπιστούμε να προσφέρει περαιτέρω επιτάχυνση του αλγορίθμου. Η ιδέα είναι η χρήση ενός **σταθερού μεγέθους της βάσης δεδομένων**, αντί της διαρκώς

αύξησης του και συνεπώς επιβράδυνσης του αλγορίθμου, όπως παρατηρήσαμε από τα πειράματά μας. Βασίζεται στην ιδέα ότι τα περισσότερα σημεία της βάσης δεδομένων (έαν έχει μεγάλο μέγεθος), δεν χρησιμοποιούνται (βλέπε [ενότητα 5.3](#)), εκτός από την μέθοδο allDB, που και σε αυτήν πολλές φορές μπορεί να αποπροσανατολίσουν το υποκατάστατο μοντέλο. Μια σχετικά μικρή στο μέγεθος βάση δεδομένων (π.χ. 600 θέσεων), θα είναι ικανή να ακολουθάει την εξελικτική αναζήτηση και ταυτόχρονα να προσφέρει μια σχετικά «σφαιρική» απεικόνιση ενός ευρύτερου τοπίου από εκεί που βρίσκεται ο αλγόριθμος. Στο Σχήμα 6.7 απεικονίζεται η λειτουργία της προτεινόμενης μεθόδου.



Σχήμα 6.7: Ανανέωση της Βάσης Δεδομένων με προκαθορισμένο μέγεθος (60).

Ο χρήστης προκαθορίζει ένα μέγεθος πλαφόν της βάσης δεδομένων. Κάθε φορά που τα σημεία εισαγωγής στην βάση δεδομένων φτάνουν το πλαφόν μέγεθος που έχει ορίσει ο χρήστης (π.χ. 600 θέσεις), τα νέα εισαγόμενα δεδομένα θα εισάγονται από την 1^η σειρά του πίνακα της βάσης δεδομένων μέχρις ότου ξαναφτάσουν στην 600^η σειρά του πίνακα κ.ο.κ., θα αντικαθιστούν δηλαδή τα ήδη υπάρχον δεδομένα.

Το Σχήμα 6.7 απεικονίζει τις τιμές προσαρμογής των εισαγόμενων χρωμοσωμάτων στις θέσεις του πίνακα της βάσης δεδομένων, με ένα προκαθορισμένο μέγεθος του πίνακα ίσο με 60. Εφόσον έχουν συμπληρωθεί όλες οι θέσεις του πίνακα, τότε η τιμή προσαρμογής του νέου εισαγόμενου χρωμοσώματος (#61) στη βάση δεδομένων θα αντικαταστήσει αυτή της 1ης θέσης του πίνακα. Ομοίως γίνεται και για τα γονίδια των εισαγόμενων χρωμοσωμάτων στη βάση δεδομένων.

Το μέγεθος της βάσης δεδομένων δεν θα πρέπει να οριστεί ούτε πολύ μεγάλο, ώστε να μην υπάρχει σημαντική επιβράδυνση του αλγορίθμου, αλλά ούτε και πολύ μικρό, ώστε να μπορεί να υπάρχει μια υποτιθέμενη σφαιρική απεικόνιση του χώρου σχεδίασης από τα σημεία της βάσης δεδομένων.

Παρόλο που η υλοποίηση της παραπάνω μεθοδολογίας σε μια σειριακή επεξεργασία είναι πολύ εύκολη, σε μια παράλληλη επεξεργασία (όπως λειτουργεί ο αλγόριθμος APSADE) όμως είναι δύσκολη. Η εντολή εισαγωγής δεδομένων (MPI_PUT) σε ένα παράθυρο απομακρυσμένης μνήμης (RMA) λειτουργεί ταυτόχρονα σε όλους τους δευτερεύοντες κόμβους του συστήματος πλην του κύριου κόμβου, με αποτέλεσμα την πιθανή απώλεια δεδομένων κατά την εισαγωγή δεδομένων στη βάση δεδομένων όταν το προκαθορισμένο μέγεθος της ικανοποιείται.

Μια επιπλέον τεχνική για περαιτέρω βελτίωση της επιτάχυνσης του αλγορίθμου μας, είναι η κοινώς χρησιμοποιούμενη μέθοδος *Latin Hypercube Sampling* (LHS) για την αρχικοποίηση του δειγματικού χώρου, έναντι της τυχαίας αρχικοποίησης που χρησιμοποιείται στον APSADE, όπου σε συστήματα με μικρό αριθμό ατόμων πληθυσμού, όπως αυτό που χρησιμοποιείται στη παρούσα εργασία δεν συνίσταται. Η μέθοδος LHS δειγματίζει τον χώρο σχεδίασης πιο ομοιόμορφα και ως εκ τούτου, μπορεί να χρησιμοποιήσει λιγότερα δείγματα για να επιτύχει μια αποτελεσματικότερη δειγματοληψία [Liu et al., 2014].

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. M.O. Akinsolu, B. Liu, P.I. Lazaridis, K.K. Mistry, M.E. Mognaschi, P.D. Barba, and Z.D. Zaharis, "Efficient Design Optimization of High-Performance MEMS Based on a Surrogate-Assisted Self-Adaptive Differential Evolution," *IEEE Access*, vol. 8, pp. 80256-80267, 2020.
2. M.O. Akinsolu, B. Liu, V. Grout, P.I. Lazaridis, M.E. Mognaschi, and P.D. Barba, "A Parallel Surrogate Model Assisted Evolutionary Algorithm for Electromagnetic Design Optimization," *IEEE Trans. Comp. Intel.*, vol. 3, no. 2, pp. 93-105, 2019.
3. X. Lu, Ke Tang, and X. Yao, "Classification-Assisted Differential Evolution for Computationally Expensive Problems," *IEEE*, pp. 1986-1993, 2011.
4. G. Chen, K. Zhang, L. Zhang, X. Xue, D. Ji, C. Yao, J. Yao, and Y. Yang, "Global and Local Surrogate-Model-Assisted Differential Evolution for Waterflooding Production Optimization," *SPE 199357*, pp. 105-118, 2020.
5. Z. Zhou, Y.S. Ong, P.B. Nair, A.J. Keane, and K.Y. Lum, "Combining Global and Local Surrogate Models to Accelerate Evolutionary Optimization," *IEEE, Transactions on Systems, Man, and Cybernetics—part C: Applications and Reviews*, vol. 37, no. 1, pp. 66-76, 2007.
6. B. Liu, D. Zhao, and G.G.E. Gielen, "GASPAD: A General and Efficient mm-wave Integrated Circuit Synthesis Method Based on Surrogate Model Assisted Evolutionary Algorithm," *IEEE, Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, FEBRUARY 2014.
7. B. Liu, Q. Chen, Q. Zhang, G. Gielen and V. Grout, "Behavioral Study of the Surrogate Model-aware Evolutionary Search Framework," *IEEE, Congress on Evolutionary Computation*, pp. 715-722, JULY 2014.
8. B. Liu, Q. Zhang, and G.G.E. Gielen, "A Gaussian Process Surrogate Model Assisted Evolutionary Algorithm for Medium Scale Expensive Optimization Problems," *IEEE, Transactions on Evolutionary Computation*, vol. 18, no. 2, pp. 180-192, APRIL 2014.
9. N. Liu, J.-S. Pan, C. Sun, and S.-C. Chu, "An efficient surrogate-assisted quasi-affine transformation evolutionary algorithm for expensive optimization problems," *ELSEVIER, Knowledge-Based Systems* 209, 2020.
10. Q. Liu, X. Wu, Q. Lin, J. Ji, and K.-C. Wong, "A novel surrogate-assisted evolutionary algorithm with an uncertainty grouping based infill criterion," *ELSEVIER, Swarm and Evolutionary Computation* 60, 2021.
11. G. Chen, Y. Li, K. Zhang, X. Xue, J. Wang, Q. Luo, C. Yao, and J. Yao, "Efficient hierarchical surrogate-assisted differential evolution for high-dimensional expensive optimization," *ELSEVIER, Information Sciences* 542, pp. 228-246, 2021.
12. J.-S. Pan, N. Liu, S.-C. Chu, and T. Lai, "An Efficient Surrogate-Assisted Hybrid Optimization Algorithm for Expensive Optimization Problems," *ELSEVIER, Information Sciences*, vol. 521, 2020.
13. Y. Wang, D.-Q. Yin, S. Yang, and G. Sun, "Global and Local Surrogate-Assisted Differential Evolution for Expensive Constrained Optimization Problems with Inequality Constraints," *IEEE, Transactions on Cybernetics*, vol. 49, no. 5, pp. 1642-1656, MAY 2019.
14. H. Dong, X. Li, Z. Yang, L. Gao, and Y. Lu, "A two-layer surrogate-assisted differential evolution with better and nearest option for optimizing the spring of hydraulic series elastic actuator," *ELSEVIER, Applied Soft Computing Journal* 100, 2021.
15. Z. Yang, H. Qiu, L. Gao, C. Jiang, and J. Zhang, "Two-layer adaptive surrogate-assisted evolutionary algorithm for high-dimensional computationally expensive problems," *Springer Science+Business Media, LLC, Journal of Global Optimization* 74:327–359, 2019.
16. A. Syberfeldt, H. Grimm, Amos Ng, and R.I. John, "A Parallel Surrogate-Assisted Multi-Objective Evolutionary Algorithm for Computationally Expensive Optimization Problems," *IEEE Xplore, Congress on Evolutionary Computation*, 2008.
17. V.G. Asouti, I.C. Kampolis, and K.C. Giannakoglou, "A grid-enabled asynchronous metamodel-assisted evolutionary algorithm for aerodynamic optimization," *Springer Science+Business Media, LLC, Genet Program Evolvable Mach* (2009) 10:373–389, 2009.
18. H. Rakhshani, L. Idoumghar, J. Lepagnot, and M. Brevilliers, "Speed up differential evolution for computationally expensive protein structure prediction problems," *ELSEVIER, Swarm and Evolutionary Computation*, 2019.

19. B. Liu, H. Yang, and M.J. Lancaster, "Global Optimization of Microwave Filters Based on Surrogate Model-Assisted Evolutionary Algorithm," IEEE, Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. 65, no. 6, JUNE 2017.
20. B. Liu, V. Grout, and A. Nikolaeva, "Efficient Global Optimization of Actuator Based on a Surrogate Model Assisted Hybrid Algorithm," IEEE, Transactions on Industrial Electronics, vol. 65, no. 7, JULY 2018.
21. M. Emmerich, K. Giannakoglou, and B. Naujoks, "Single-and multi-objective evolutionary optimization assisted by Gaussian random field metamodels," IEEE Transactions on Evolutionary Computation, vol. 10, no. 4, pp. 421–439, 2006.
22. J. Sammon, Jr, "A nonlinear mapping for data structure analysis," IEEE Trans. Comput., vol. 100, no. 5, pp. 401–409, May 1969.
23. L. Maaten, E. Postma, and H. Herik, "Dimensionality reduction: A comparative review," Published Online, vol. 71, no. 1, pp. 2596–2603, 2008.
24. M. Avriel, Nonlinear Programming: Analysis and Methods. New York, NY, USA. Dover, 2003.
25. M. Stein, "Large sample properties of simulations using latin hypercube sampling," Technometrics, vol. 29, no. 2, pp. 143–151, 1987.
26. D.R. Jones, M. Schonlau, and W.J. Welch, "Efficient global optimization of expensive black-box functions," J. Global Optim., vol. 13, pp. 455–492, 1998.
27. K.C. Giannakoglou, "Design of optimal aerodynamic shapes using stochastic optimization methods and computational intelligence," Int. Rev. J. Progress Aerosp. Sci., vol. 38, no. 5, pp. 43–76, 2002.
28. N. Alexandrov, J.E. Dennis, R. M. Lewis, and V. Torczon, "A trust region framework for managing the use of approximation models in optimization," Struct. Optim., vol. 15, no. 1, pp. 16–23, 1998.
29. H. Yu, Y. Tan, C. Sun, and J. Zeng, "A generation-based optimal restart strategy for surrogate-assisted social learning particle swarm optimization," Knowl.-Based Syst. 163 (2019) 14–25.
30. V. Feoktistov, and S. Janaqi, "Generalization of the strategies in differential evolution," in Proc. 18th Int. Parallel Distrib. Process. Symp., pp. 165–170, Apr. 2004.
31. A.K. Qin, V.L. Huang, and P.N. Suganthan, "Differential evolution algorithm with strategy adaptation for global numerical optimization," IEEE Trans. Evol. Comput., vol. 13, no. 2, pp. 398–417, Apr. 2009.
32. H.-Y. Fan and J. Lampinen, "A trigonometric mutation operation to differential evolution," J. Global Optim., vol. 27, no. 1, pp. 105–129, 2003.
33. S. Koziel, S. Ogurtsov, J.W. Bandler, and Q.S. Cheng, "Reliable spacemapping optimization integrated with EM-based adjoint sensitivities," IEEE Trans. Microw. Theory Techn., vol. 61, no. 10, pp. 3493–3502, Oct. 2013.
34. J.E. Dennis and V. Torczon, "Managing approximation models in optimization," in Multidisciplinary Design Optimization: State of the Art. Hampton, pp. 330–347, 1997.
35. M. Jamil and X.-S. Yang, "A literature survey of benchmark functions for global optimization problems," Int. J. Math. Model. Numer. Optim., vol. 4, no. 2, pp. 150–194, 2013.
36. C.C. Coello, G.B. Lamont, and D.A. Van Veldhuizen, Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems. Springer, 2007.
37. X. Yao, Y. Liu, and G. Lin, "Evolutionary programming made faster," IEEE Trans. Evol. Comput., vol. 3, no. 2, pp. 82–102, Jul. 1999.
38. D.E. Goldberg and K. Deb, "A comparative analysis of selection schemes used in genetic algorithms," Found. Genetic Algorithms, vol. 1, pp. 69–93, 1991.
39. B. Liu, H. Aliakbarian, Z. Ma, G.A.E. Vandenbosch, G. Gielen, and P. Excell, "An Efficient Method for Antenna Design Optimization Based on Evolutionary Computation and Machine Learning Techniques," IEEE Trans. Anten. Propag., vol. 62, no. 1, pp. 7–18, January 2014.
40. D.R. Jones. "A Taxonomy of Global Optimization Methods Based on Response Surfaces", Journal of Global Optimization, pp. 345–383. 2001.
41. T.J. Santner et al, "The design and analysis of computer experiments," Springer. 2003.
42. B. Liu, Q. Zhang, F.V. Fernández, and G. Gielen, "Self-adaptive Lower Confidence Bound: A New General and Effective Prescreening Method for Gaussian Process Surrogate Model Assisted Evolutionary Algorithms," IEEE, World Congress on Computational Intelligence, 2012.
43. I.K. Nikolos, "Surrogate Modeling in Evolutionary Based Engineering Design Optimization," Saxe-Coburg, Soft Computing for Civil and Structural Engineering, chapter 8, pp. 173–203, 2011.
44. I.K. Nikolos, "On the use of multiple surrogates within a differential evolution procedure for high-lift airfoil design," Inderscience Enterprises, Advanced Intelligence Paradigms, Vol. 5, No. 4, 2013.
45. G.A. Strofylas, K.N. Porfyri, I.K. Nikolos, A.I. Delis, and M. Papageorgiou, "Using synchronous and asynchronous parallel Differential Evolution for calibrating a second-order traffic flow model," ELSEVIER, Advances in Engineering Software, 2018.

46. V. Picheny, T. Wagner, and D. Ginsbourger, "A benchmark of kriging-based infill criteria for noisy optimization," HAL, Structural and Multidisciplinary Optimization, 2012.
47. D. Graupe, "Principles of Artificial Neural Networks," Advanced Series in Circuits and Systems, Vol. 7, 2013.
48. W.F. Ganong, "Review of Medical Physiology," Lange Medical Publications, Los Altos, CA, 1973.
49. S. Haykin, "Neural Networks: A Comprehensive Foundation," 2nd edition, Prentice Hall, 1999.
50. B. Kroese and P. Van der Smagt, "An introduction to Neural Networks," The University of Amsterdam, 1996.
51. W.S. McCulloch and W. Pitts, "A Logical Calculus of the Ideas Immanent in Nervous Activity," The University of Illinois, Bulletin of Mathematical Biophysics, Vol. 5, 1943.
52. F. Rosenblatt, "The Perceptron: A Probabilistic Model for Information Storage and Organization in the Brain," Cornell Aeronautical Laboratory, Psychological Review, Vol. 65, No. 6, 1958.
53. P.J. Werbos, "Beyond Regression: New Tools for Prediction and Analysis in the Behavioral Sciences," Harvard University, Cambridge, Massachusetts, 1974.
54. Y. LeCun, B. Boser, J.S. Denker, D. Henderson, R.E. Howard, W. Hubbard, and L.D. Jackel, "Backpropagation Applied to Handwritten Zip Code Recognition," AT&T Bell Laboratories Holmdel, Neural Computation, Massachusetts Institute of Technology, 1989.
55. D.L. Chester, "Why two hidden layers are better than one," in Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks, Vol. 1, Washington, DC, pp. 265-268, 1990.
56. K.-I. Funahashi, "On the approximate realization of continuous mappings by neural networks," Neural Networks, Vol. 2, pp. 183-192, 1989.
57. E. Acar, and M. Rais-Rohani, "Ensemble of metamodels with optimized weight factors," Structural Multidisciplinary Optimization, 37(3), pp. 279-294, 2009.
58. N.V. Quiapo, R.T. Haftka, W. Shyy, T. Goel, R. Vaidyanathan, and P.K. Tucker, "Surrogate-based analysis and optimization," Progress in Aerospace Sciences, Vol. 41, pp. 1-28, 2005.
59. A.I.J. Forrester, A. Sobester, and A.J. Keane, "Multi-fidelity optimization via surrogate modelling," Proceedings of the Royal Society A, 463(2088), pp. 3251-3269, 2007.
60. A. Kattan, and E. Galvan, "Evolving radial basis function networks via GP for estimating fitness values using surrogate models," IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC), pp. 1-7, 2012.
61. H.J. Bremermann, "Optimization through evolution and recombination," in M.C. Yovits et al. (Eds.), Self-Organizing Systems, Washington, DC: Spartan, 1962.
62. R.M. Friedberg, "A learning Machine: Part I," IBM J., Vol. 2, no. 1, pp. 2-13, January 1958.
63. R.M. Friedberg, B. Dunham, and J. H. North, "A learning Machine: Part II," IBM J., Vol. 3, no. 7, pp. 282-287, July 1959.
64. G.E. Box, "Evolutionary Operation: A method for increasing industrial productivity," Appl. Statistics, Vol. 6, no. 2, pp. 81-101, 1957.
65. J.H. Holland, "Outline for a logical theory of adaptive systems," J. Assoc. Comput. Mach., Vol. 3, pp. 297-314, 1962.
66. I. Rechenberg, "Cybernetic solution path of an experimental problem," Royal Aircraft Establishment, Library translation No. 1122, Farnborough, Hants., U.K., August 1965.
67. H.-P. Schwefel, "Projekt MHD-Staustahlrohr: Experimentelle Optimierung einer Zweiphasenduse, Teil I, Technischer Bericht 11.034/68, 35 AEG Forschungsinstitut, Berlin, Germany, October 1968.
68. L. J. Fogel, "Autonomous automata," Ind. Res., Vol. 4, pp. 14-19, 1962.
69. T. Back, U. Hammel, and H.-P. Schwefel, "Evolutionary Computation: Comments on the History and Current State," IEEE Transactions on Evolutionary Computation, Vol. 1, no. 1, April 1997.
70. J.H. Holland, "Adaptation in Natural and Artificial Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology," Control and Artificial Intelligence, MIT, Press, 1992.
71. H.-P. Schwefel, "Evolutionsstrategie und numerische Optimierung," Ph. D. thesis, T.U. Berlin, 1975.
72. H.-P. Schwefel, "Numerische Optimierung von Computer-Modellen mittels der Evolutionsstrategie," Basel: Birkhauser, 1977.
73. F. Neri, and V. Tirronen, "Recent advances in differential evolution: a survey and experimental analysis," Artificial Intelligence Review, 33(1-2), pp. 61-106, 2010.
74. K.V. Price, R.M. Storn, and J.A. Lampinen, "Differential Evolution: A Practical Approach to Global Optimization," Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2005.
75. R.M. Storn, and K.V. Price, "DE – a Simple and Efficient Adaptive Scheme for Global Optimization over Continuous Space," ICSI, Technical Report TR-95-012, 1995.
76. V. Torczon, and M.W. Trosset, "Using Approximations to Accelerate Engineering Design Optimization," NASA/CR-1998-208460, ICASE Report No. 98-33, 1998.
77. R.H. Myers, and D.C. Montgomery, "Response Surface Methodology: Progress and Product in Optimization Using Designed Experiments," Wiley-Interscience, New York, 1995.

78. W. Shyy, N. Papila, R. Vaidynathan, and K. Tucker, "Global design optimization for aerodynamics and rocket propulsion components," *Progress in Aerospace Sciences*, 37, pp. 59-118, 2001.
79. A. Ratle, "Optimal sampling strategies for learning a fitness model," In *Proceedings of the 1999 Congress on Evolutionary Computation (CEC99)*, Washington, DC, USA, 1999.
80. A.I.J. Forrester, and A.J. Keane, "Recent advances in surrogate-based optimization," *Progress in Aerospace Sciences*, 45, pp. 50-79, 2009.
81. D. Lim, Y. Jin, Y.-S. Ong, and B. Sendhoff, "Generalizing Surrogate-Assisted Evolutionary Computation," *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 14(3), pp. 329-354, 2010.
82. E. Alba, and M. Tomassini, "Parallelism and Evolutionary Algorithms," *IEEE, Transactions on Evolutionary Computation*, Vol. 6, no. 5, October 2002.
83. E. Cantú-Paz, "Designing Efficient and Accurate Parallel Genetic Algorithm," Ph. D. thesis, University of Illinois, 1999.
84. G. Syswerda, "A study of reproduction in generational and steady-state genetic algorithms," in G.J.E. Rawlins, (Ed.), *Foundations of Genetic Algorithms*, San Mateo, CA: Morgan Kaufmann, pp. 94-101, 1991.
85. G. Levine, "Users Guide to the PGAPack Parallel Genetic Algorithm Library," Argonne Nat. Lab. Math. Comput. Sci. Div., Tech. Rep. ANL-95/18, Jan. 31, 1995.
86. E. Alba, and J.M. Troya, "Asurvey of parallel distributed genetic algorithms," *Complexity*, Vol. 4, no. 4, pp. 31-52, 1999.
87. M.S. Dipteni, "Accelaration of Evolutionary Algorithms by using Parallel computing," MSc thesis, Technical University of Crete, August 2006.
88. E.O. Scott, and K.A. De Jong, "Evaluation-Time Bias in Asynchronous Evolutionary Algorithms," *Proceedings of the Companion Publication of the 17th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation*, 2005.
89. E.O. Scott, and K.A. De Jong, "Understanding Simple Asynchronous Evolutionary Algorithms," *Proceedings of the 2015 ACM Conference on Foundations of Genetic Algorithms XIII*, pp.85-98, 2015.
90. J.R. Cano, F. Herrera, and M. Lozano, "Using Evolutionary Algorithms as Instance Selection for Data Reduction in KDD: An Experimental Study," *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, Vol. 7, No.6, December 2003.
91. Y.S. Ong, P.B. Nair, A.J. Keane, and K.W. Wong, "Surrogate-assisted evolutionary optimization frameworks for high-fidelity engineering design problems," in *Knowledge Incorporation in Evolutionary Computation*, Springer, pp. 307-332, 2004.
92. H. Ulmer, F. Streichert, and A. Zell, "Evolution strategies assisted by gaussian processes with improved pre-selection criterion," in *Proc. IEEE Congress on Evolutionary Computation*, Canberra, Australia, pp. 692-699, December 2003.
93. J. Boesel, R.O. Bowden, F. Glover, J.P. Kelly, and E. Westwig, "Future of simulation optimization," in *Proc. Winter Simulation Conference*, Arlington, VA, USA, pp. 1466-1470, December 2001.
94. D. Chafeka, J. Xuan, and K. Rasheed, "Constrained multi-objective optimization using steady state genetic algorithms," in *Proc. Genetic and Evolutionary Computation Conference*, Springer-Verlag Germany, pp. 813-824, 2003.
95. K. Deb, "Multi-Objective Optimization using Evolutionary Algorithms," John Wiley & Sons Ltd, 2004.
96. Ι.Κ. Νικολός, Σημειώσεις του μαθήματος "Ευφυής Βέλτιστος Σχεδιασμός Προϊόντων," Τμήμα Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης, 2019.
97. Δ. Πήτας, "Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα και Εφαρμογή," Πτυχιακή Εργασία, Πανεπιστήμιο Αιγαίου, Οκτώβριος 2018.

Διαδίκτυο

- I. <https://towardsdatascience.com/introduction-to-evolutionary-algorithms-a8594b484ac>
- II. https://en.wikipedia.org/wiki/Artificial_neural_network
- III. <https://www.ibm.com/cloud/learn/neural-networks>
- IV. <https://www.sfu.ca/~ssurjano/ackley.html>
- V. <https://www.sfu.ca/~ssurjano/griewank.html>

- VI. <https://www.sfu.ca/~ssurjano/rastr.html>
- VII. <https://www.sfu.ca/~ssurjano/rosen.html>
- VIII. https://www.geatbx.com/ver_3_3/fcnfun1.html

ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗΣ (GP-MODEL)

Οι μέθοδοι προεπισκόπησης με χρήση ενός Gaussian Process (GP) υποκατάστατου μοντέλου, κατατάσσουν τους υποψηφίους σύμφωνα με τις ιδιότητες τους και επιλέγουν το κατάλληλο υποσύνολο για να πραγματοποιήσουν ακριβείς αξιολογήσεις συνάρτησης για επαλήθευση και ενημέρωση του μοντέλου. Οι υπάρχουσες μέθοδοι προεπισκόπησης είναι η αναμενόμενη βελτίωση (Expected Improvement - EI) [Jones et al., 1998], η πιθανότητα βελτίωσης (Probability of Improvement - PoI) [Jones, 2001], το χαμηλότερο όριο εμπιστοσύνης (Lower Confidence Bound - LCB) [Dennis et al., 1997] και η πιθανότερη βελτίωση (Most likely Improvement - MI) [Santner et al., 2003]. Οι EI, PoI και LCB ανταμείβουν την αβεβαιότητα πρόβλεψης του μοντέλου GP: οι υποσχόμενοι υποψήφιοι που επί του παρόντος χωρίς καλή προβλεπόμενη τιμή μπορούν να επιλεγούν στο υποσύνολο για ακριβείς αξιολογήσεις συνάρτησης. Αυτό αποτρέπει την παγίδευση της αναζήτησης σε μια τοπικά βέλτιστη περιοχή λόγω της αβεβαιότητας της πρόβλεψης. Με άλλα λόγια, η σφαιρική αναζήτηση δεν επιτυγχάνεται μόνο από τον EA, αλλά και από τις μεθόδους προεπισκόπησης [Jones et al., 1998].

Επειδή οι συγκεκριμένες μέθοδοι προεπισκόπησης είναι κατάλληλες μόνο για το Gaussian Process (GP) υποκατάστατο μοντέλο [Liu et al., 2012], θα αναφερθούμε εν συντομία σε αυτές τις μεθόδους. Λαμβάνοντας υπόψη ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης, ορίζονται ως εξής:

Most likely improvement (MI):

$$M(I(x)) = \begin{cases} 0, & \text{if } \hat{y}(x) > f_{min} \\ f_{min} - \hat{y}(x), & \text{otherwise} \end{cases}$$

όπου f_{min} είναι η καλύτερη τρέχουσα τιμή στον πληθυσμό και $\hat{y}(x)$ είναι η εκτιμώμενη τιμή ενός υποψηφίου. Το $I(x)$ δηλώνει τη συνάρτηση βελτίωσης σε σύγκριση με το f_{min} .

Expected improvement (EI):

$$E[I(x)] = (f_{min} - \hat{y}(x))\Phi\left(\frac{f_{min} - \hat{y}(x)}{\hat{s}(x)}\right) + \hat{s}(x)\varphi\left(\frac{f_{min} - \hat{y}(x)}{\hat{s}(x)}\right)$$

όπου $\varphi(\cdot)$ είναι η τυπική συνάρτηση κανονικής πυκνότητας και $\Phi(\cdot)$ είναι η τυπική συνάρτηση κανονικής κατανομής.

Probability of improvement (PoI):

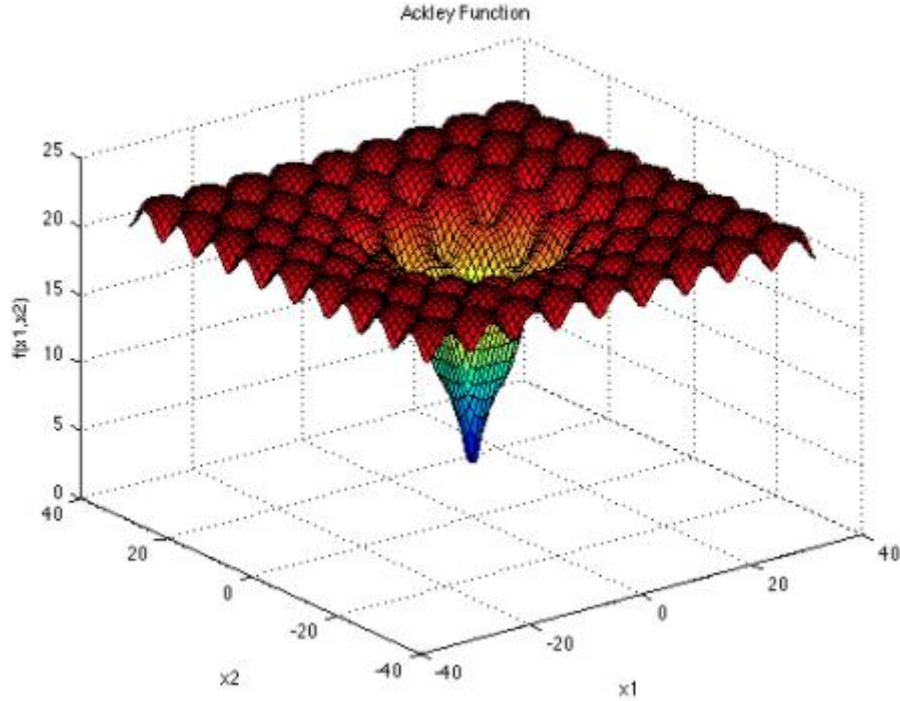
$$P[I(X)] = \Phi\left(\frac{f_{min} - \hat{y}(x)}{\hat{s}(x)}\right)$$

Lower confidence bound (LCB):

$$f_{lcb}(x) = \hat{y}(x) - \omega\hat{s}(x), \omega \in [0,3]$$

TEST PROBLEMS

ACKLEY FUNCTION



Χώρος σχεδίασης της Ackley σε διδιάστατη μορφή [sfu.ca/~ssurjano/ackley.html, 2021].

Η συνάρτηση Ackley χρησιμοποιείται ευρέως για τη δοκιμή αλγορίθμων βελτιστοποίησης. Στη διδιάστατη μορφή της, όπως φαίνεται στο παραπάνω διάγραμμα, χαρακτηρίζεται από μια σχεδόν επίπεδη εξωτερική περιοχή και μια μεγάλη τρύπα στο κέντρο. Η συνάρτηση στους αλγορίθμους βελτιστοποίησης, ενέχει κίνδυνο παγίδευσης σε ένα από τα πολλά τοπικά ελάχιστα. [sfu.ca/~ssurjano/ackley.html, 2021]:

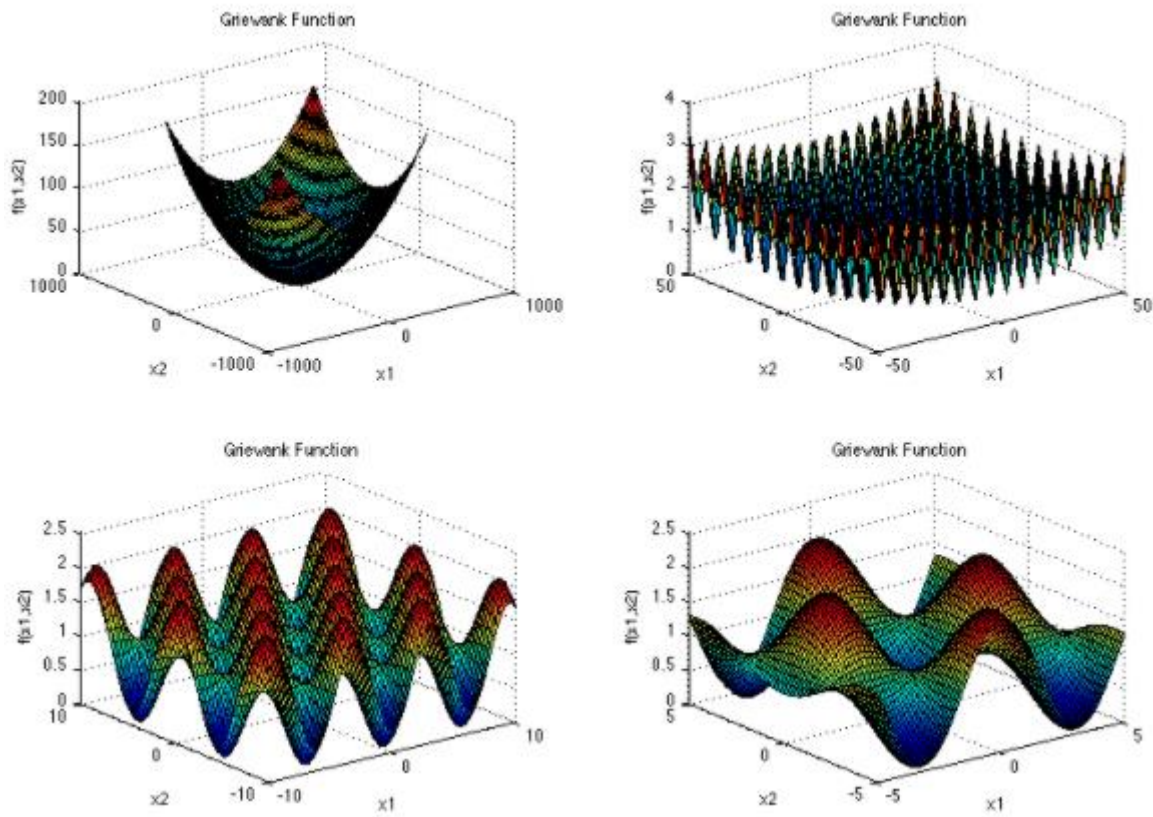
$$f(x) = -20 \exp \left(-0.2 \sqrt{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d x_i^2} \right) - \exp \left(\frac{1}{d \sqrt{\sum_{i=1}^d \cos(2\pi x_i)}} \right) + 20 + \exp(1)$$

Όπου, d οι διαστάσεις ή ο αριθμός των γονιδίων.

$$x_i \in [-32.768, 32.768], i = 1, 2, \dots, d$$

$$f_{min} = 0, \quad \text{όταν } x_i = 0 \text{ για κάθε } i$$

GRIEWANK FUNCTION



Χώρος σχεδίασης της Griewank σε διδιάστατη μορφή και σε διάφορες μεγεθύνσεις [sfu.ca/~ssurjano/ griewank.html, 2021].

Η συνάρτηση Griewank έχει πολλά τοπικά ελάχιστα διαδεδομένα σε όλο τον χώρο σχεδίασης, τα οποία διανέμονται τακτικά. Η πολυπλοκότητα φαίνεται στα μεγεθυμένα γραφήματα. [sfu.ca/~ssurjano/griewank.html, 2021]:

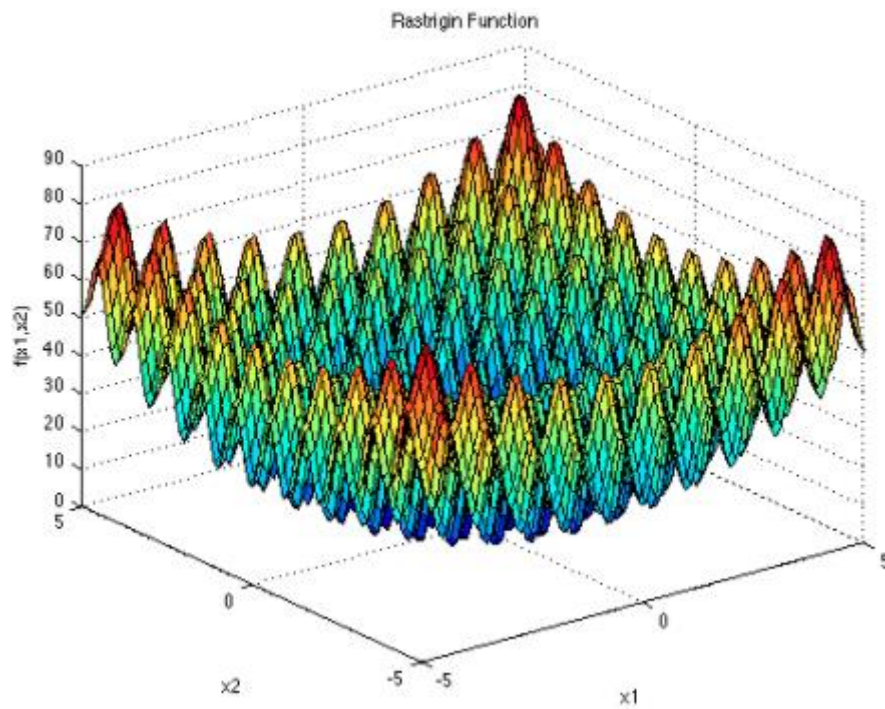
$$f(x) = \sum_{i=1}^d \frac{x_i^2}{4000} - \prod_{i=1}^d \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right) + 1$$

Όπου, d οι διαστάσεις ή ο αριθμός των γονιδίων.

$$x_i \in [-600, 600], i = 1, 2, \dots, d$$

$$f_{min} = 0, \quad \text{όταν } x_i = 0 \text{ για κάθε } i$$

RASTRIGIN FUNCTION



Χώρος σχεδίασης της Rastrigin σε διδιάστατη μορφή [sfu.ca/~ssurjano/rastr.html, 2021].

Η συνάρτηση Rastrigin έχει αρκετά τοπικά ελάχιστα. Είναι εξαιρετικά πολυτροπική, αλλά οι τοποθεσίες των ελαχίστων διανέμονται τακτικά. Εμφανίζεται στην παραπάνω γραφική παράσταση στη διδιάστατη μορφή της [sfu.ca/~ssurjano/rastr.html, 2021]:

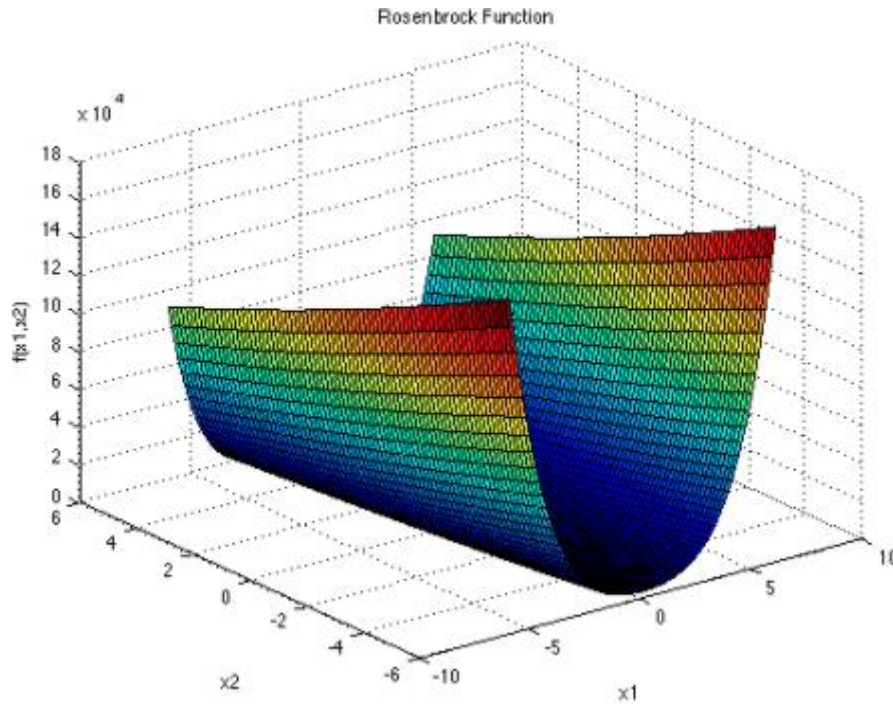
$$f(x) = 10d + \sum_{i=1}^d [x_i^2 - \cos(2\pi x_i)]$$

Όπου, d οι διαστάσεις ή ο αριθμός των γονιδίων.

$$x_i \in [-5.12, 5.12], i = 1, 2, \dots, d$$

$$f_{min} = 0, \quad \text{όταν } x_i = 0 \text{ για κάθε } i$$

ROSENBROCK FUNCTION



Χώρος σχεδίασης της Rosenbrock σε διδιάστατη μορφή [sfu.ca/~ssurjano/rosen.html, 2021].

Η συνάρτηση Rosenbrock, που αναφέρεται επίσης ως συνάρτηση Valley ή Banana, είναι ένα δημοφιλές πρόβλημα δοκιμής για gradient-based αλγόριθμους βελτιστοποίησης. Εμφανίζεται στην παραπάνω γραφική παράσταση στη διδιάστατη μορφή του. [sfu.ca/~ssurjano/rosen.html]

Η συνάρτηση είναι μονοτροπική και το ολικό ελάχιστο βρίσκεται σε μια στενή, παραβολική κοιλάδα. Ωστόσο, παρόλο που αυτή η κοιλάδα είναι εύκολο να βρεθεί, η σύγκλιση στο ελάχιστο είναι δύσκολη [Picheny et al., 2012]:

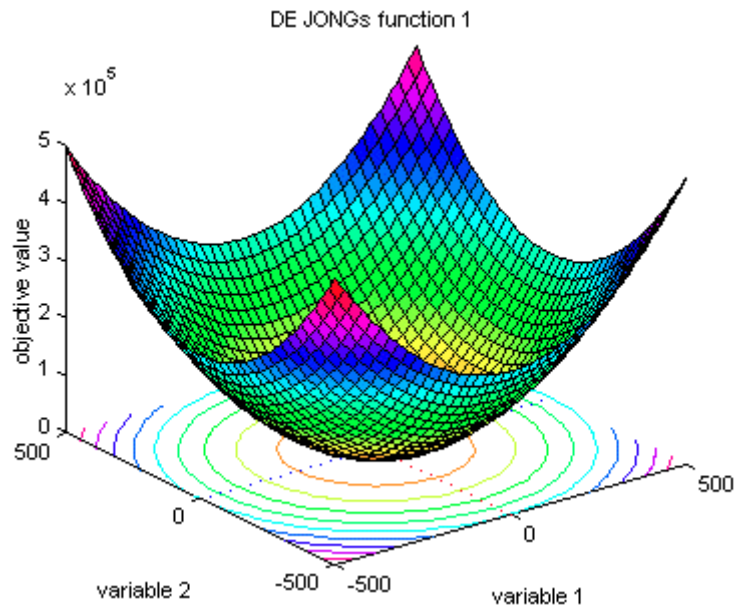
$$f(x) = \sum_{i=1}^{d-1} [100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2]$$

Όπου, d οι διαστάσεις ή ο αριθμός των γονιδίων.

$$x_i \in [-2.048, 2.048], i = 1, 2, \dots, d$$

$$f_{min} = 0, \text{ όταν } x_i = 1 \text{ για κάθε } i$$

DE JONG FUNCTION



Χώρος σχεδίασης της De Jong σε δι-διάστατη μορφή [geatbx.com/ver_3_3/fcnfun1.html, 2021].

Η απλούστερη συνάρτηση δοκιμής είναι η De Jong. Είναι συνεχής, κυρτή και μονοτροπική. [geatbx.com/ver_3_3/fcnfun1.html, 2021]:

$$f(x) = \sum_{i=1}^d x_i^2$$

Όπου, d οι διαστάσεις ή ο αριθμός των γονιδίων.

$$x_i \in [-5.12, 5.12], i = 1, 2, \dots, d$$

$$f_{min} = 0, \text{ όταν } x_i = 0 \text{ για κάθε } i$$