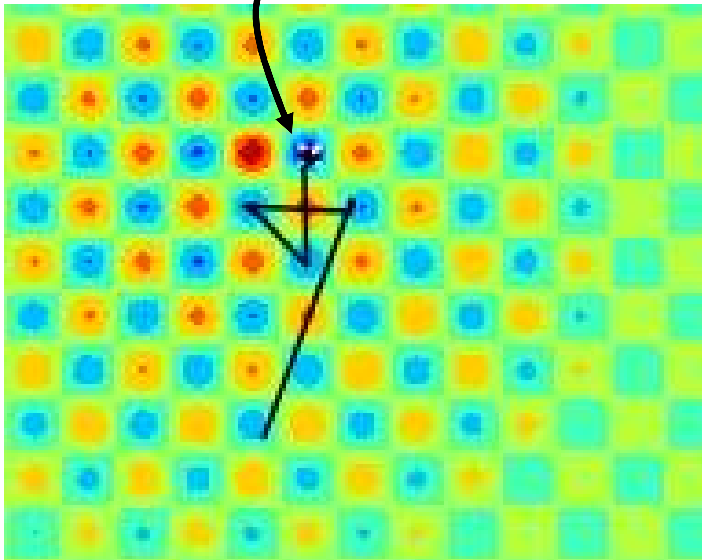
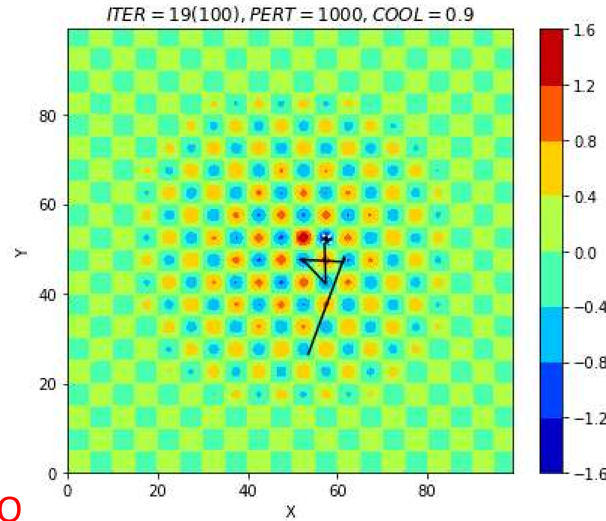
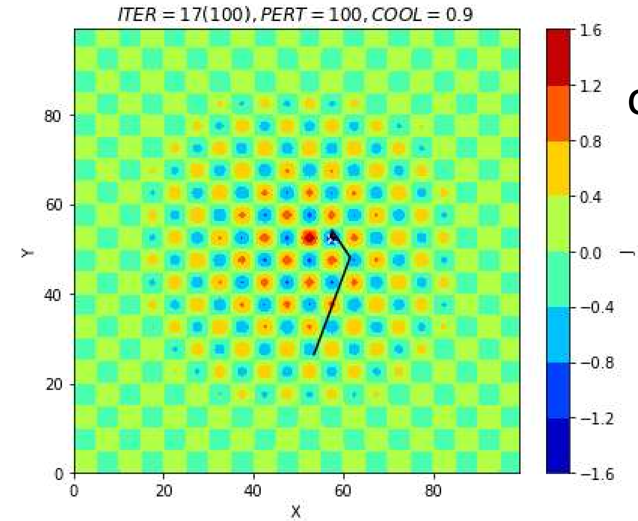
Função de custo com muitos mínimoc locais (mesmo first guess)

Também é sensível a outros parâmetros.



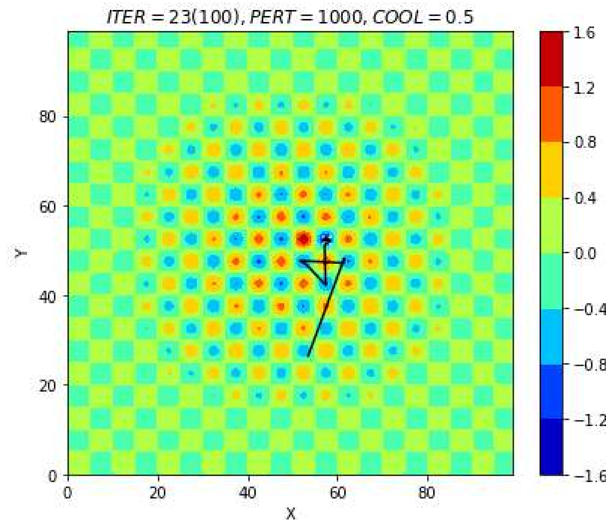
ok

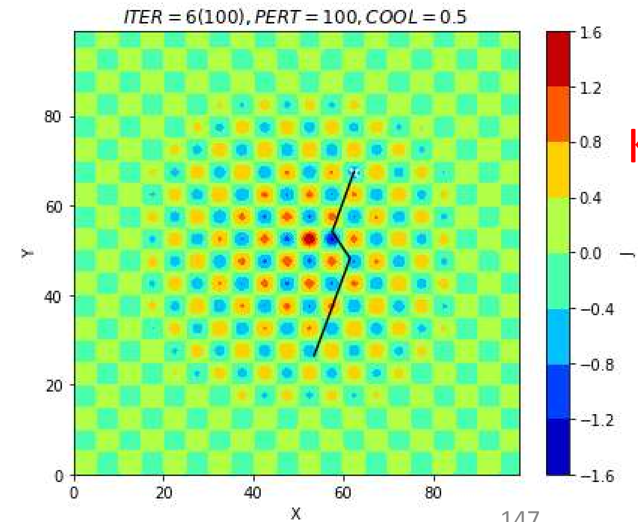




ok

ok



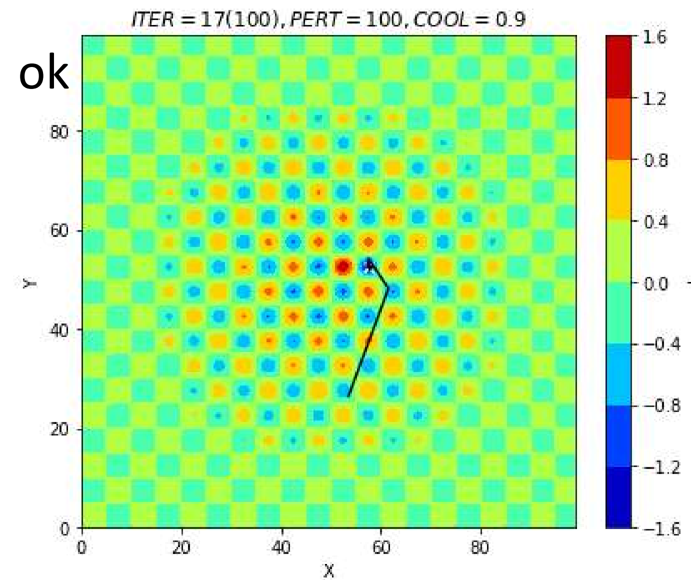


KO

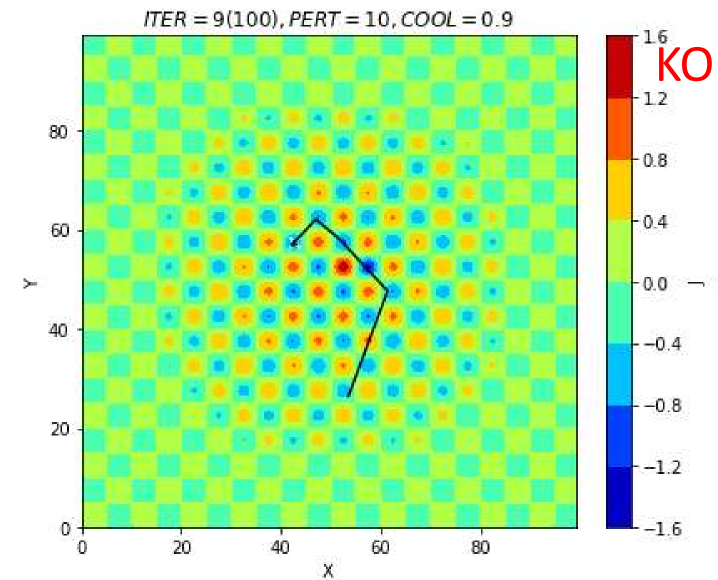
O ciclo interno (maxPERT) é mais importante que externo…

Porquê?

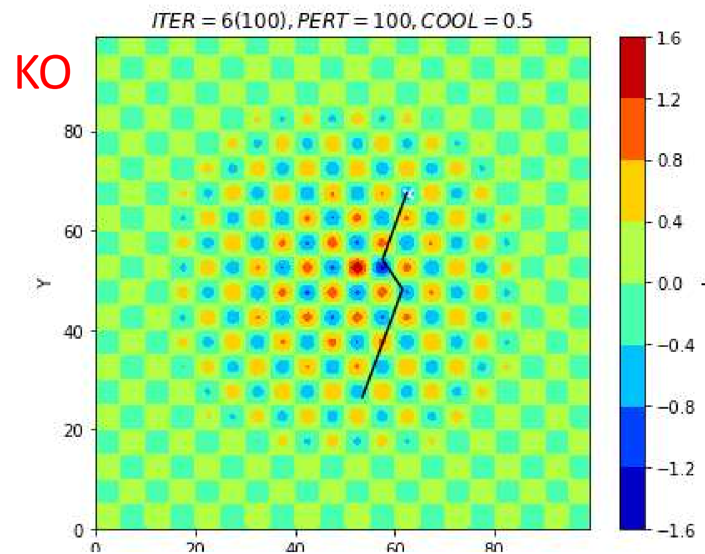
ok



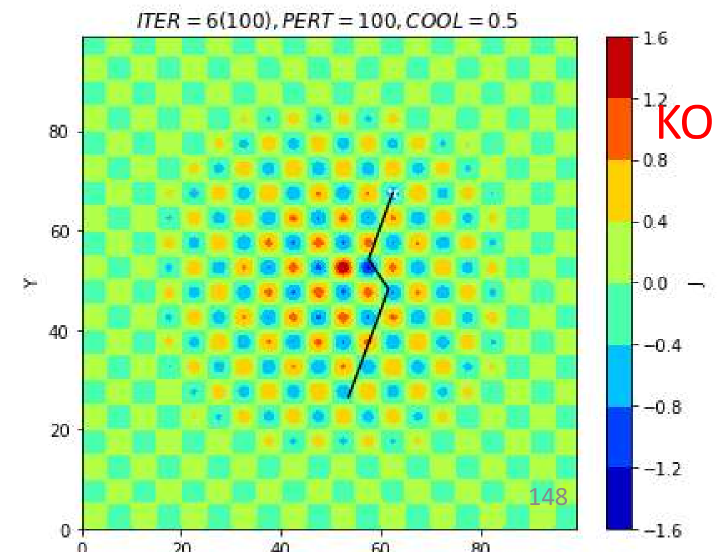
KO



KO



KO



Cálculo dos coefientes de um polinómio $y = ax^3 + bx^2 + cx + d$

```
…
def inipol(iseed=10,nE=1000):
    a=5;b=2;c=3;d=2 #SOLUÇÃO
    xmin=0;xmax=10 #domínio xE
    np.random.seed(iseed)
    xE=xmin+(xmax-xmin)*np.random.sample(nE)
    yO=a*xE**3+b*xE**2+c*xE+d
    return xE,yO
def cost(V):
    a,b,c,d=V
    custo=np.sum(((a*xE**3+b*xE**2+c*xE+d)-yO)**2)
    return custo
xE,yO=inipol() #observações
V=np.zeros((4));vnames=np.array(['a','b','c','d'])
vmin=np.zeros(V.shape);vmax=10*np.ones(V.shape) #domínio (a,b,c,d)
Jmin=-10.;minvstep=(vmax-vmin)/10000
kappa=np.float64(0.1);T=10.
maxITER=1000
maxPERT=100000
COOL=0.9
n,V,iTER,path=annealD(vmin,vmax,Jmin,minvstep,maxITER,maxPERT,COOL,kappa,T,outITER,iseed=2)
```

Solução direta:

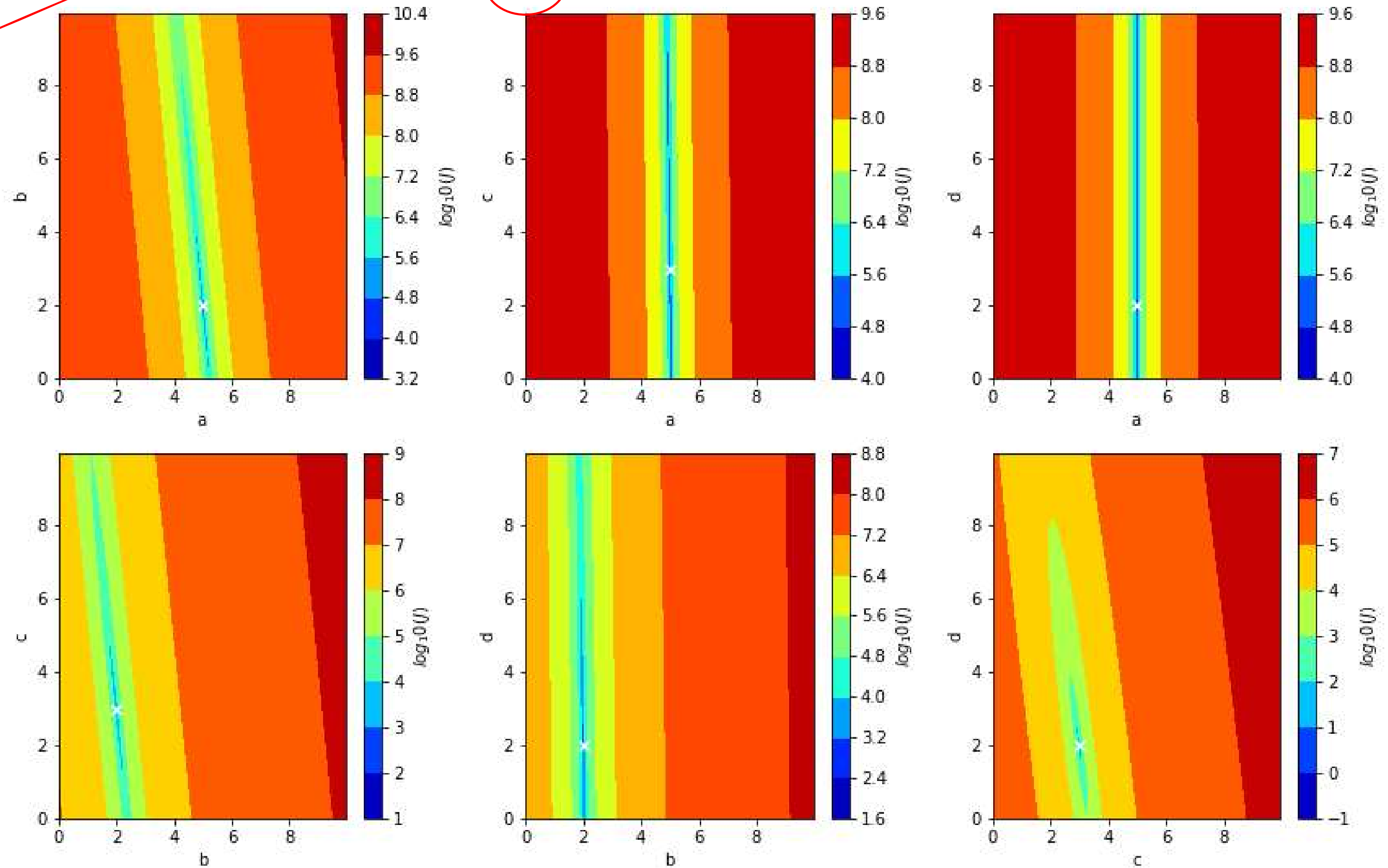
```
a,b,c,d=np.polyfit(xE,yO,3)
```

Otimização em 4 dimensões

5,2,3,2

Para explorar 4 dimensões são precisos muitos movimentos!

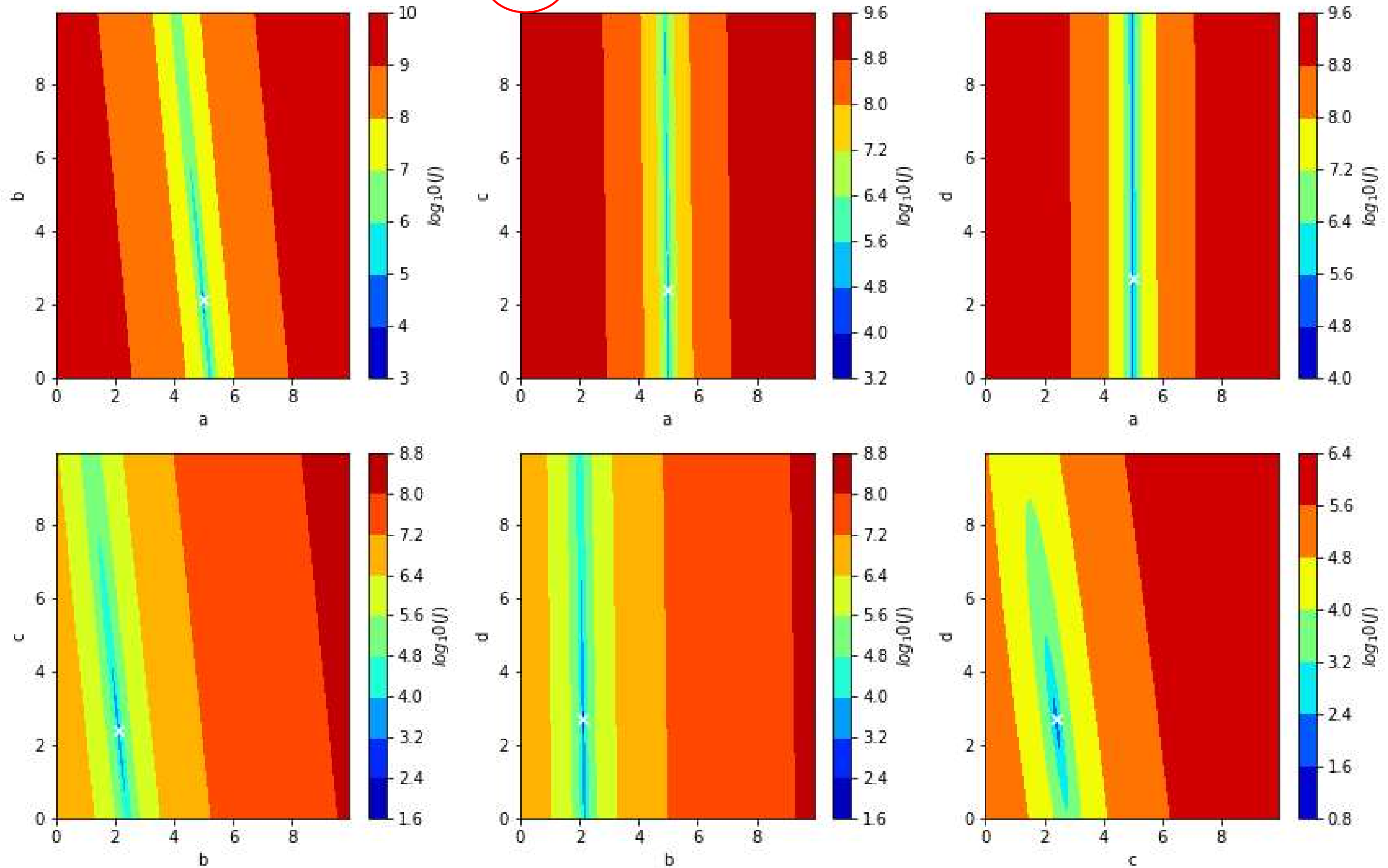
Otimização em 4 dimensões: 6 planos ortogonais Combinações(4,2)



5,2,3,2

Parece estar no mímino mas está LONGE!

Notar que se trata de um espaço a 4 dimensões e os planos passam pela “solução” obtida que não é a verdadeira…



Um outro algoritmo de otimização: Algoritmo genético

Neste algoritmo utilizam-se conceitos da genética para resolver um problema de otimização.

Cada iteração do algoritmo simula uma nova geração numa população de organismos em que existe diversidade genética.

A diversidade é produzida no início, de forma aleatória, e **reforçada** em cada geração com mutação.

A transição entre gerações inclui:

(1) Seleção do indivíduo com melhor desempenho (menor função de custo)

(2) Cruzamento aleatório para produzir os novos (N-2) membros

(3) Introdução de um **mutante global**

(4) Mutações locais

Questões

Como realizar mutações?

- Escolher um novo elemento aleatoriamente (= ao início)
- Perturbar um membro da geração anterior por uma “pequena” perturbação

Como selecionar os progenitores?

- Aleatoriamente (impedir autocruzamentos)

Como acasalar?

- Média aritmética dos parâmetros

Parâmetros ajustáveis

Domínio da solução (mínimo e máximo de cada variável a ajustar)

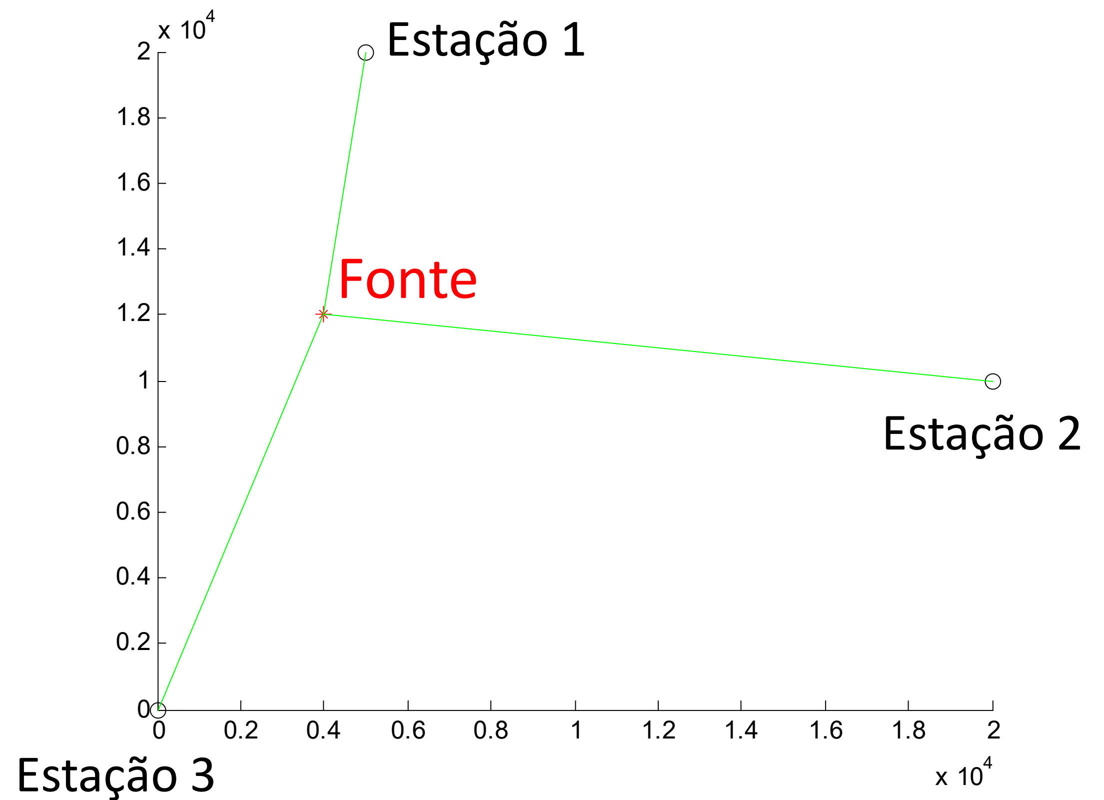
Dimensão da população (~10× Número de variáveis a ajustar)

Critérios de paragem:

- ✓ Número de gerações (Número máximo de iterações)
- ✓ Target para a função de custo J_{Min} (se for conhecido)

Problema anterior

Localizar uma fonte sísmica em 2 dimensões (x,y) com velocidade constante.



Algoritmo genético

```
def optim(vmin,vmax,Jmin,maxGEN,maxPOP,iseed=None):
    ndim=len(vmin)
    mutRANGE=1/100
    np.random.seed(iseed)
    P=np.zeros((ndim,maxPOP))
    for iP in range(maxPOP):
        P[:,iP]=vmin+(vmax-vmin)*np.random.random(ndim) #população inicial
    JP=cost(P)
    IS=np.argsort(JP) #ordena (melhor primeiro)
    J=JP[IS[0]];V=P[:,IS[0]] # melhor membro
    bestJ=J;bestV=V
    iGEN=0;kGEN=0;kMute=0
    Evolution=np.zeros((100,ndim+2)) #Evolução dos parâmetros
    Evolution[kGEN,0]=0       #Geração
    Evolution[kGEN,1]=0       #Custo
    Evolution[kGEN,2:]=V[:]   #Parâmetros
```

Algoritmo genético (2)

```
def optim(vmin,vmax,Jmin,maxGEN,maxPOP,iseed=None):
    …
    while iGEN<maxGEN and J>Jmin:
        P[:,0]=P[:,IS[0]] #save best
        for iP in range (1,maxPOP-1):
            rr1=int(np.random.random()*(maxPOP-1)) #progenitores
            rr2=int(np.random.random()*(maxPOP-1))
            while rr1==rr2:
                rr2=int(np.random.random()*(maxPOP-1))
            P[:,iP]=0.5*P[:,IS[rr1]]+0.5*P[:,IS[rr2]] #acasalamento
        P[:,maxPOP-1]=vmin+(vmax-vmin)*np.random.sample(ndim); #mutante

        JP=cost(P)
        IS=np.argsort(JP) #ordena melhores primeiro
```

Algoritmo genético (3)

```
def optim(vmin,vmax,Jmin,maxGEN,maxPOP,iseed=None):
    …
        #Mutações locais
        for iP in range(maxPOP):
            mute=1+mutRANGE*(np.random.random(ndim)-0.5)
            Pmute=P[:,iP]*mute
            Jmute=costONE(Pmute)
            Jori=costONE(P[:,0])
            if Jmute<Jori:
                P[:,iP]=Pmute
                kMute=kMute+1
                JP[iP]=Jmute
                kMute=kMute+1
        IS=np.argsort(JP) #ordena melhores primeiro
```

Algoritmo genético (4)

```
def optim(vmin,vmax,Jmin,maxGEN,maxPOP,iseed=None):
    …
        J=JP[IS[0]];V=P[:,IS[0]] #seleciona melhor
        iGEN=iGEN+1
        if J<bestJ: #Evolução (menor custo)
            bestJ=J
            bestV=V
            kGEN=kGEN+1
            print('iGEN=%3i,kGEN=%3i,kMute=%3i,J=%f,V=%f,V=%f’ %\
                 (iGEN,kGEN,kMute,J,V[0],V[1]))
            Evolution[kGEN,0]=iGEN
            Evolution[kGEN,1]=J
            Evolution[kGEN,2:]=V[:]

    return bestV,bestJ,kGEN,Evolution
```

Função de custo

```
def cost(V):
    [nd,num]=V.shape
    custo=np.zeros((num))
    for k in range(num):
        X=V[0,k];Y=V[1,k] #parameters to optimize
        dist=np.sqrt((X-xE)**2+(Y-yE)**2)
        erro=dist/cs-tE
        custo[k]=np.sum(abs(erro))
    return custo

def costONE(V):
    X=V[0];Y=V[1] #parameters to optimize
    dist=np.sqrt((X-xE)**2+(Y-yE)**2)
    erro=dist/cs-tE
    custo=np.sum(abs(erro))
    return custo
```

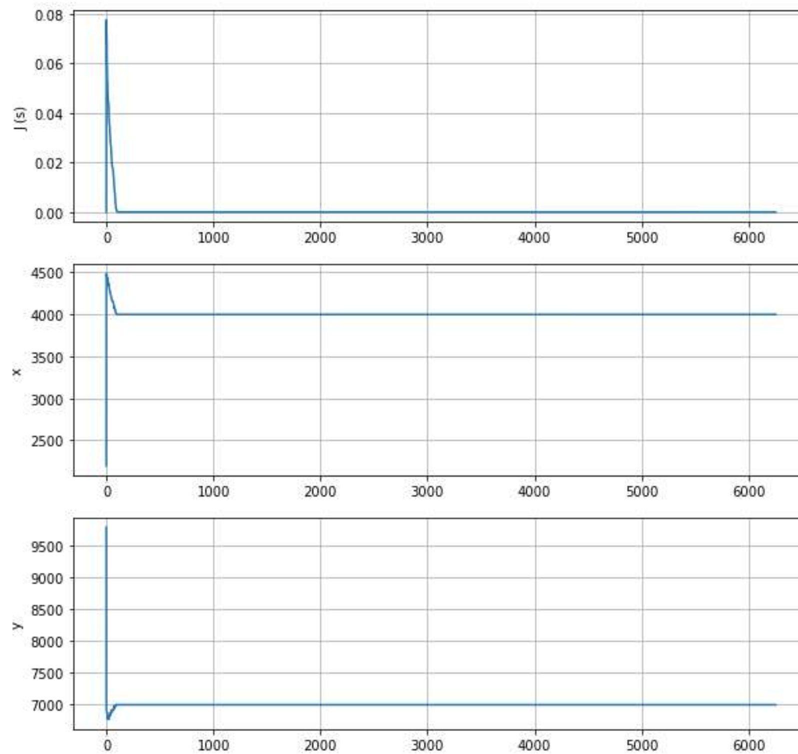
Inicialização

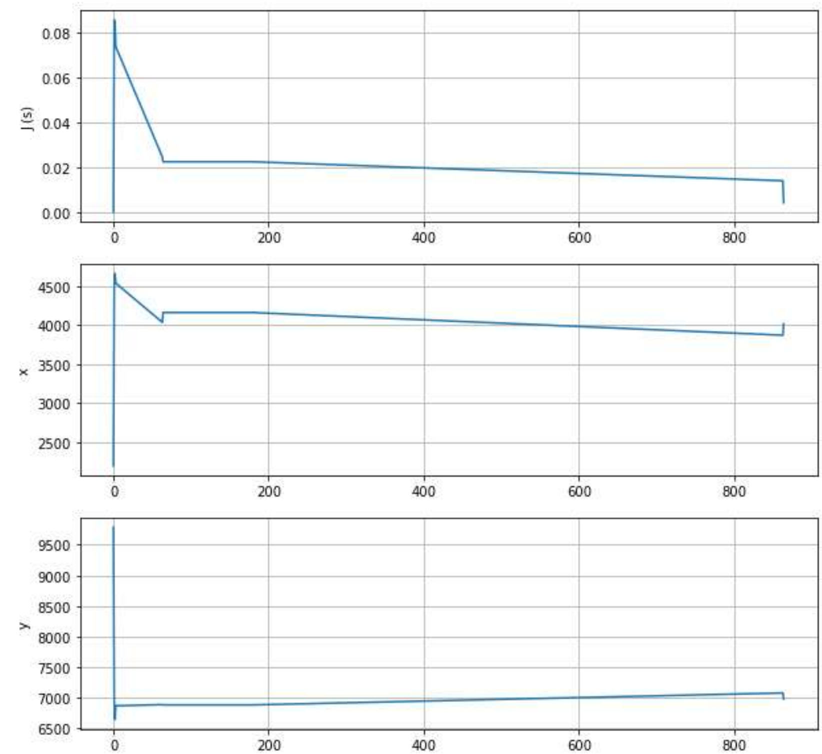
```
def dados():
    cs=8000 #velocidade da onda sismica
    xS=4000;yS=7000 #solução:posição da fonte
    xE=np.array([0,10000,5000])
    yE=np.array([0,10000,10000])
    distE=np.sqrt((xS-xE)**2+(yS-yE)**2)
    tE=distE/cs
    return xE,yE,tE,cs,xS,yS
```

```
maxITER=10000;maxPERT=10;Jmin=1e-20; #critérios de paragem
xmin=0;xmax=10000;ymin=0;ymax=10000 #domínio
vmin=np.array([xmin,ymin])
vmax=np.array([xmax,ymax])
xE,yE,tE,cs,xS,yS=dados()
plt.figure(figsize=(10,10))
V,J,kGEN,Evolution=optim(vmin,vmax,Jmin,maxITER,maxPERT,iseed=None)
for kP in range(1,4):
    plt.subplot(3,1,kP)
    plt.plot(Evolution[:kGEN+1,0],Evolution[:kGEN+1,kP]\
             ,label=r'S=%2.1f,Mut=%3i,J=%5.3f s' % (select,kGEN,J))
    plt.grid()

plt.suptitle('MaxGEN=%4i, Pop=%3i' % (maxITER,maxPERT))
```

Evolução





Algoritmo genético (n-dimensões)

```
def optim(vmin,vmax,Jmin,maxGEN,maxPOP,iseed=None,mutLocal=True):
    ndim=len(vmin)
    mutRANGE=10 #mutação local aditiva
    np.random.seed(iseed)
    P=np.zeros((ndim,maxPOP))
    for iP in range(maxPOP):
        P[:,iP]=vmin+(vmax-vmin)*np.random.random(ndim) #população
    JP=cost(P)
    IS=np.argsort(JP) #ordena (melhor primeiro)
    J=JP[IS[0]];V=P[:,IS[0]] # melhor membro
    bestJ=J;bestV=V
    iGEN=0;kGEN=0;kMute=0
    Evolution=np.zeros((2000,ndim+2))
    Evolution[kGEN,0]=0
    Evolution[kGEN,1]=0
    Evolution[kGEN,2:]=V[:]
```

Algoritmo genético (2)

```
def optim(vmin,vmax,Jmin,maxGEN,maxPOP,iseed=None,mutLocal=True):
…
    while iGEN<maxGEN and J>Jmin:
        P[:,0]=P[:,IS[0]] #save best
        for iP in range (1,maxPOP-1):
            rr1=int(np.random.random()*(maxPOP-1)) # progenitores
            rr2=int(np.random.random()*(maxPOP-1))
            while rr1==rr2: #rejeita clones
                rr2=int(np.random.random()*(maxPOP-1))
            P[:,iP]=0.5*P[:,rr1]+0.5*P[:,rr2] #acasalamento
        P[:,maxPOP-1]=vmin+(vmax-vmin)*np.random.sample(ndim);  #mutante

        JP=cost(P)
        IS=np.argsort(JP) #ordena melhores primeiro
```

Algoritmo genético (3)

```
def optim(vmin,vmax,Jmin,maxGEN,maxPOP,iseed=None,mutLocal=True):
…
        if mutLocal:
            for iP in range(maxPOP):
                mute=mutRANGE*(np.random.random(ndim)-0.5)
                Pmute=P[:,iP]+mute
                Jmute=costONE(Pmute)
                Jori=costONE(P[:,0])
                if Jmute<Jori: #aceita mutações positivas
                    P[:,iP]=Pmute
                    kMute=kMute+1
                    JP[iP]=Jmute
                kMute=kMute+1
        IS=np.argsort(JP) #ordena melhores primeiro
```

Algoritmo genético (4)

```
def optim(vmin,vmax,Jmin,maxGEN,maxPOP,iseed=None,mutLocal=True):
…
        J=JP[IS[0]];V=P[:,IS[0]] #seleciona melhor
        iGEN=iGEN+1
        if J<bestJ: #aceita melhoramentos
            bestJ=J
            bestV=V
            kGEN=kGEN+1
            print('iGEN=%3i,kGEN=%3i,kMute=%3i,J=%f,V=%f,V=%f,V=%f' \
                   % (iGEN,kGEN,kMute,J,V[0],V[1],V[2]))
            Evolution[kGEN,0]=iGEN #geração em que melhorou
            Evolution[kGEN,1]=J    #nova função de custo
            Evolution[kGEN,2:]=V[:]  #novos parâmetros
    return bestV,bestJ,kGEN,Evolution
```

Algoritmo genético (3)

```
def optim(vmin,vmax,Jmin,maxGEN,maxPOP,iseed=None,mutLocal=True):
…
        J=JP[IS[0]];V=P[:,IS[0]] #seleciona melhor
        iGEN=iGEN+1
        if J<bestJ: #aceita melhoramentos
            bestJ=J
            bestV=V
            kGEN=kGEN+1
            print('iGEN=%3i,kGEN=%3i,kMute=%3i,J=%f,V=%f,V=%f,V=%f' \
                   % (iGEN,kGEN,kMute,J,V[0],V[1],V[2]))
            Evolution[kGEN,0]=iGEN #geração em que melhorou
            Evolution[kGEN,1]=J    #nova função de custo
            Evolution[kGEN,2:]=V[:]  #novos parâmetros
    return bestV,bestJ,kGEN,Evolution
```

Dados 3d (com ruído)

```
def dados(noise=0,iseed=None):
    cs=8000 #velocidade da onda sismica
    xS=4000;yS=7000;zS=-3000 #solução:posição da fonte
    xE=np.array([0,10000,5000]) #posição das estações
    yE=np.array([0,10000,1000]) #posição das estações
    zE=np.array([-5000,-5000,-5000]) #posição das estações
    distE=np.sqrt((xS-xE)**2+(yS-yE)**2+(zS-zE)**2) #distâncias
    if noise>0:
        np.random.seed(iseed)
        tE=distE/cs*(1+noise*(np.random.random(distE.shape)-0.5))
    else:
        tE=distE/cs #observações
    return xE,yE,zE,tE,cs,xS,yS,zS
```

Função de custo

```
def cost(V): #vetor custo de uma população
    [nd,num]=V.shape
    custo=np.zeros((num))
    for k in range(num):
        X=V[0,k];Y=V[1,k];Z=V[2,k] #parameters to optimize
        dist=np.sqrt((X-xE)**2+(Y-yE)**2+(Z-zE)**2)
        erro=dist/cs-tE
        custo[k]=np.sum(abs(erro))
    return custo

def costONE(V): #custo de uma solução
    X=V[0];Y=V[1];Z=V[2] #parameters to optimize
    dist=np.sqrt((X-xE)**2+(Y-yE)**2+(Z-zE)**2)
    erro=dist/cs-tE
    custo=np.sum(abs(erro))
    return custo
```

Main

```
maxITER=10000;maxPERT=10;Jmin=1e-4; #critérios de paragem
unitJ='s'
xmin=0;xmax=10000;ymin=0;ymax=10000;zmin=-5000;zmax=0 #domínio
vmin=np.array([xmin,ymin,zmin])
vmax=np.array([xmax,ymax,zmax])
ndim=len(vmin)
xE,yE,zE,tE,cs,xS,yS,zS=dados(noise=0) #geração das observações
```

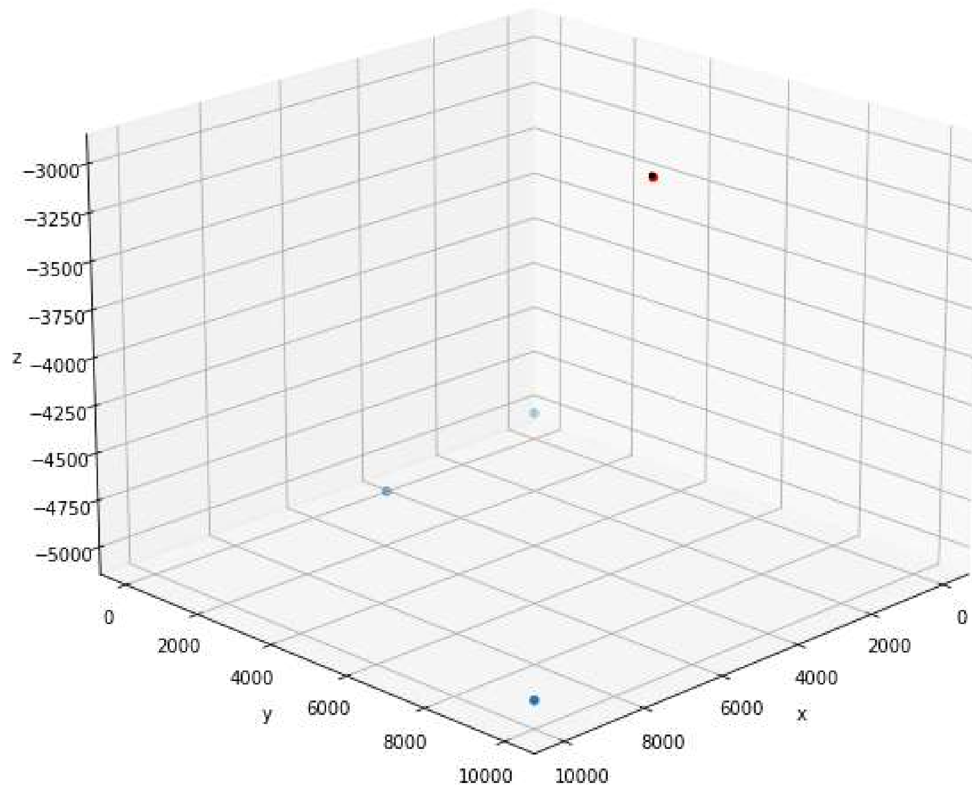
Main (2)

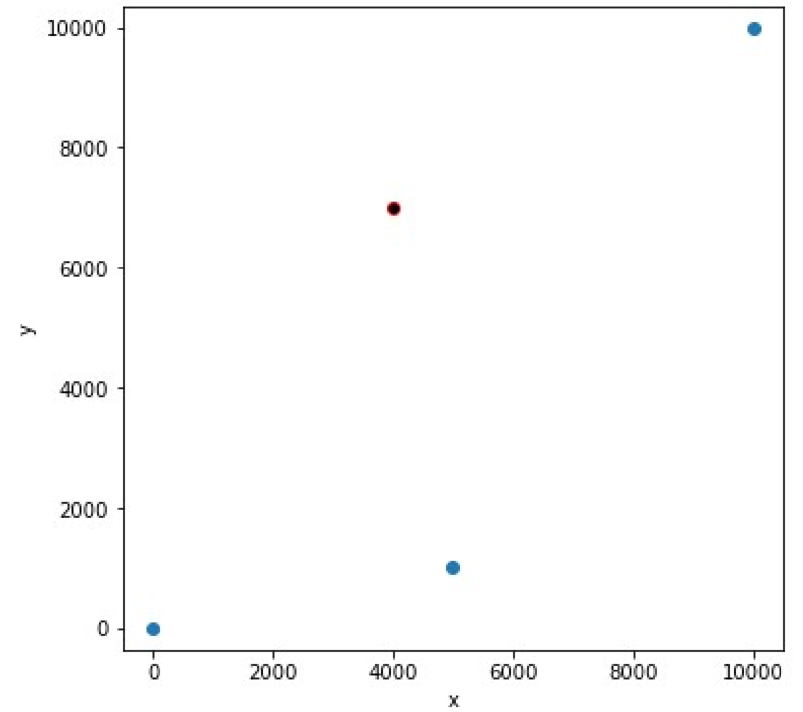
```
runs=10
plt.figure(2,figsize=(10,12))
mutLocal=True
hisJ=np.zeros(runs)
hisV=np.zeros((runs,ndim))
for run in range(runs):
    print(run)
    V,J,kGEN,Evolution=optim(vmin,vmax,Jmin,maxITER,maxPERT,iseed=None,mutLocal=mutLocal)
    hisJ[run]=J
    hisV[run,:]=V
    timespent=time.process_time()-timestart
    for kP in range(1,len(vmin)+2):
        plt.subplot(4,1,kP)
        plt.plot(Evolution[:kGEN+1,0],Evolution[:kGEN+1,kP])
        plt.grid()
```

Main (3)

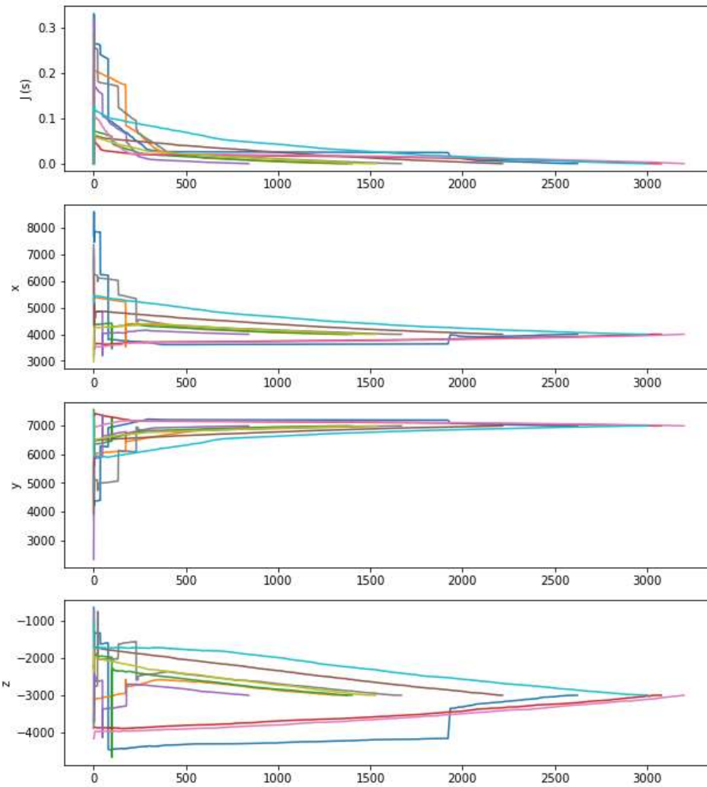
```
plt.suptitle(r'$MaxGEN=%4i, Pop=%3i, J_{min}=%2.1e%s, Time=%3.2fs, mutLocal=%s$'\
             % (maxITER,maxPERT,Jmin,unitJ,timespent,mutLocal))
plt.subplot(4,1,1);plt.ylabel('J (s)')
plt.subplot(4,1,2);plt.ylabel('x')
plt.subplot(4,1,3);plt.ylabel('y')
plt.subplot(4,1,4);plt.ylabel('z')
fig=plt.figure(figsize(=10,10)) #figura 3D
ax=fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.scatter(xs=xE,ys=yE,zs=zE)  #estações
ax.scatter(xs=xS,ys=yS,zs=zS,color='red') #fonte
ax.scatter(xs=hisV[:,0],ys=hisV[:,1],zs=hisV[:,2],marker='.',color='black') #solução
ax.view_init(elev=20., azim=45)
ax.set_xlabel('x');ax.set_ylabel('y');ax.set_zlabel('z')
plt.figure(figsize=(6,6)) #figura 2D
plt.scatter(xE,yE)
plt.scatter(xS,yS,color='red')
plt.scatter(hisV[:,0],hisV[:,1],color='black',marker='.')
plt.xlim(vmin[0],vmax[0]);plt.ylim(vmin[1],vmax[1])
plt.xlabel('x');plt.ylabel('y');plt.axis('equal')
```

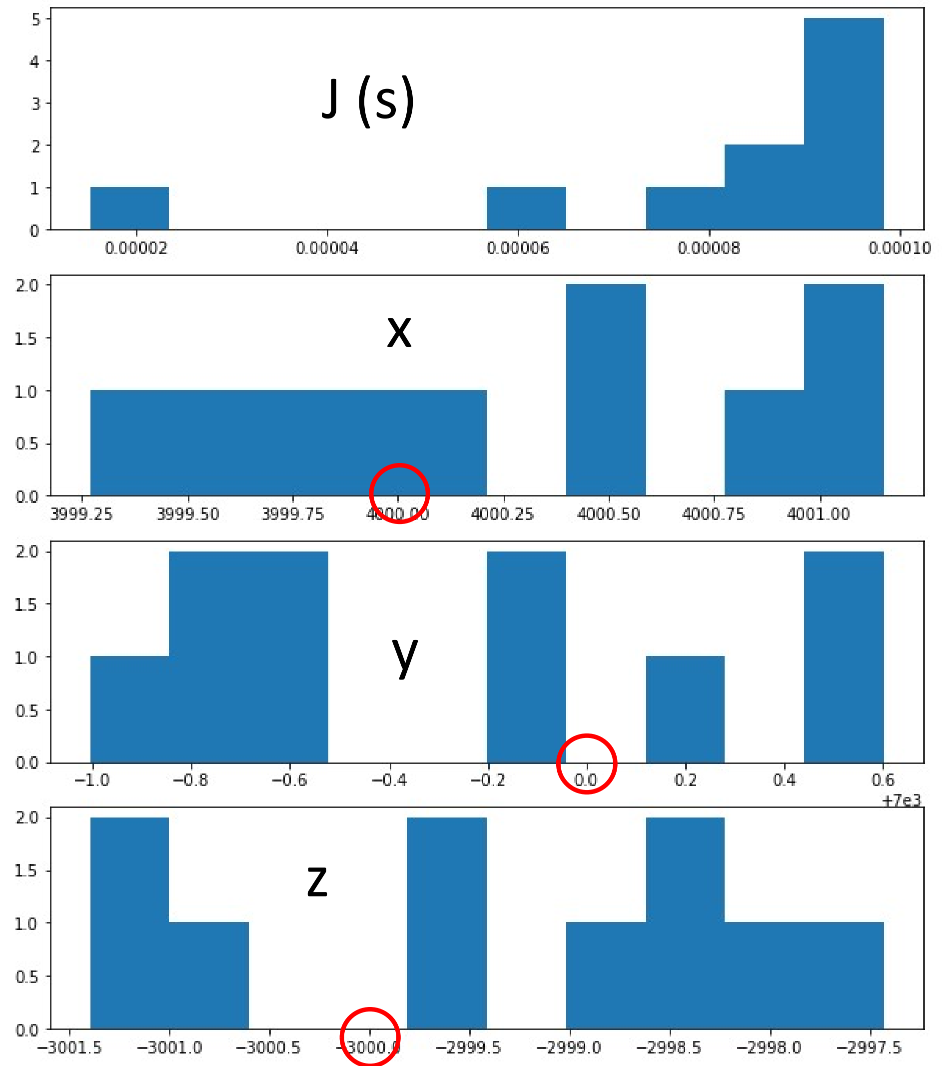
Caso 1 Jmin=$10^{-4}s$, noise=0



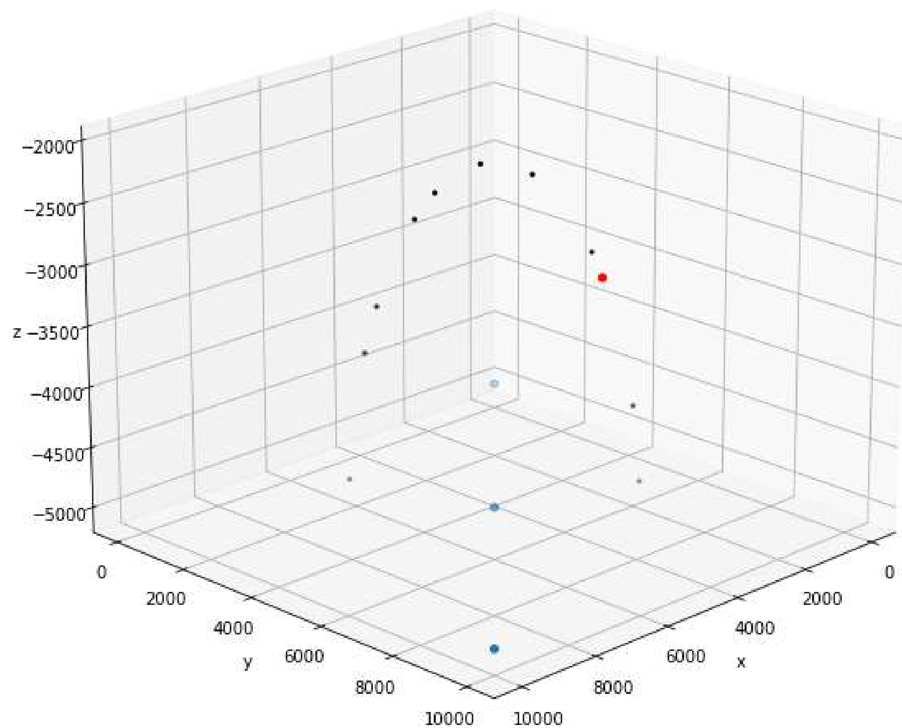


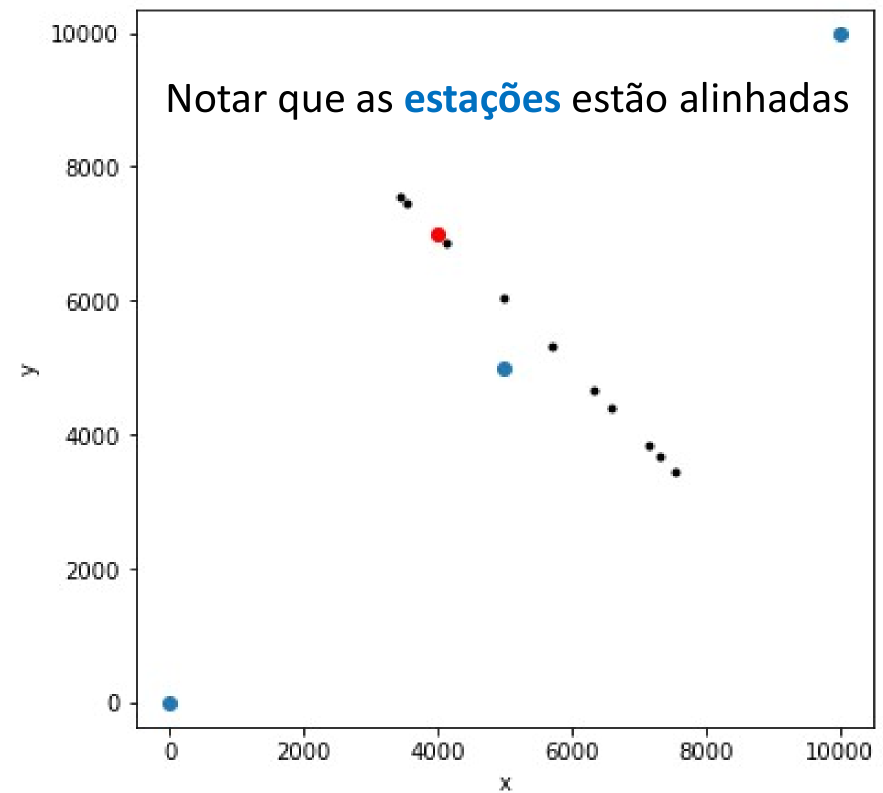
Caso 1 Jmin=$10^{-4}s$, noise=0





Caso 1 Jmin=$\mathbf{10^{-4}}\boldsymbol{s}$, noise=0: solução ambígua

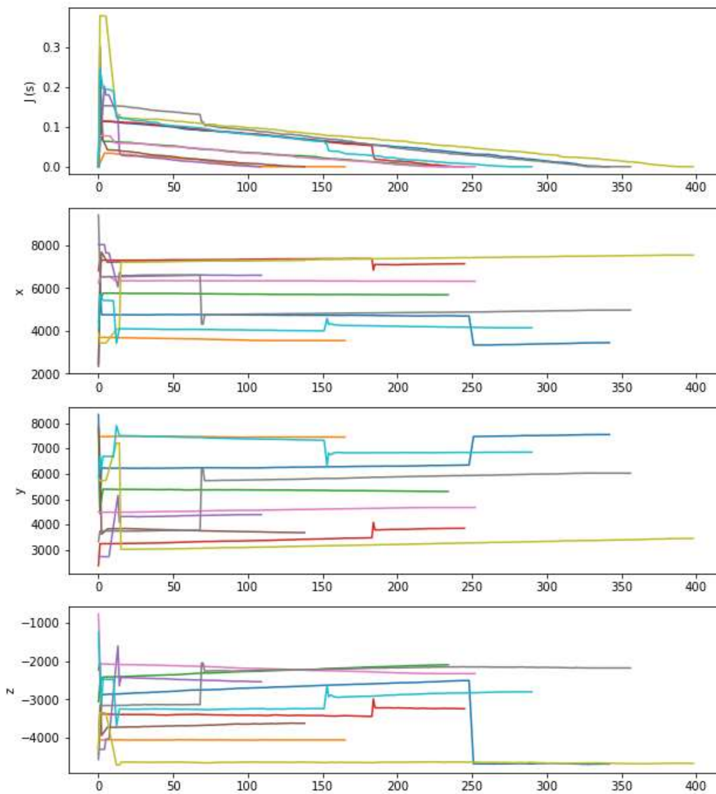


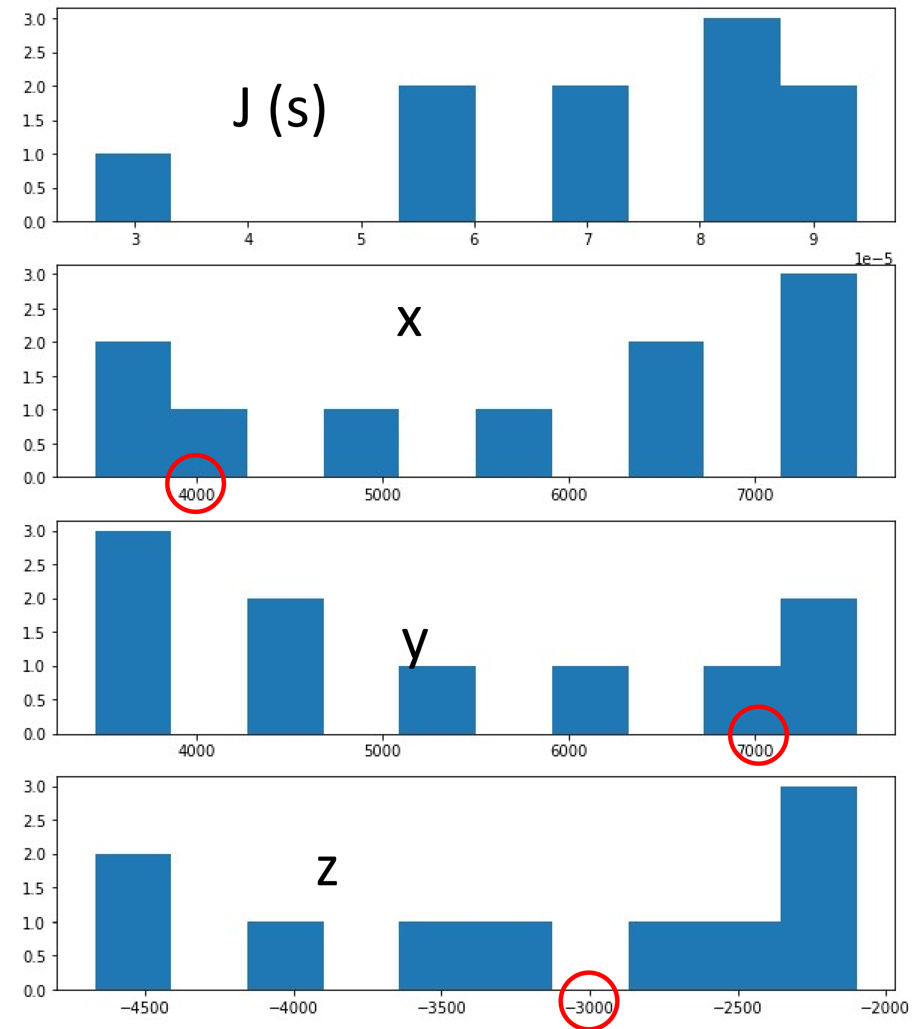


Caso 2 Jmin=$10^{-4}s$, noise=0

$MaxGEN = 10000, Pop = 10, J_{min} = 1.0e-04s, Time = 3.00s, mutLocal = True$

As várias soluções têm erro semelhante





Algoritmo de otimização

GitHub - pjmateus/monte-carlo-annealing: Monte-Carlo search for the minimum of the multidimensional "cost" function

Artigo correspondente:

Miranda, P. M. A., & Mateus, P. (2022). Improved GNSS water vapor tomography with modified mapping functions. Geophysical Research Letters, 49, e2022GL100140. https://doi.org/10.1029/2022GL100140ex