



ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ

Εθνικόν και Καποδιστριακόν
Πανεπιστήμιον Αθηνών

— ΙΔΡΥΘΕΝ ΤΟ 1837 —

Π.Μ.Σ Σχεδίαση και Κατασκευή Συστημάτων Αγωνιστικών Οχημάτων
Γενικό Τμήμα

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΜΙΚΤΟ ΣΧΗΜΑ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΤΕΧΝΗΤΗΣ ΕΥΦΥΙΑΣ
ΓΙΑ ΕΠΙΛΥΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ
(“COMPLEX ARTIFICIAL INTELLIGENCE
ALGORITHM SCHEME FOR OPTIMISATION
PROBLEMS”)

Λουκάς Αθανασάκος
Ιούνιος 2022, Αθήνα

Επιβλέπων Καθηγητής: Αγαθοκλής Κριμπένης



ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε στα πλαίσια του Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών με τίτλο Σχεδίαση και Κατασκευή Συστημάτων Αγωνιστικών Οχημάτων το οποίο ανήκει στο Γενικό Τμήμα του Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών. Θα ήθελα να ευχαριστήσω το σύνολο των διδασκόντων του Π.Μ.Σ για τις πολύτιμες γνώσεις τους, τη διάθεσή και την καθοδήγησή τους αλλά και το πρώην Τ.Ε.Ι Χαλκίδας για τη φιλοξενία του παρόντος Π.Μ.Σ , εισάγοντας το αντικείμενό του για πρώτη φορά στο χώρο των ελληνικών Πανεπιστημίων. Ακόμη, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή της παρούσας μελέτης, Αγαθοκλή Κριμπένη, για τη διορατικότητά του στις τεχνολογίες αιχμής του τομέα, την υπομονή του αλλά και την άψογη συνεργασία που είχαμε κατά την εκπόνηση της μεταπτυχιακής εργασίας. Θα ήθελα ακόμη να ευχαριστήσω τους Σπύρο, Γιάννη, Νίκο και Γιώργο, και τέλος την Κωνσταντίνα για τις πολύτιμες γνώσεις της και την υποστήριξή της.



ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία πραγματεύεται το ζήτημα των αλγορίθμων βελτιστοποίησης, το οποίο βρίσκει εφαρμογή σε όλους τους τομείς των θετικών επιστημών οι οποίοι παρουσιάζουν προβλήματα που χρίζουν βελτιστοποίηση, όπως η μηχανική και ο σχεδιασμός εξαρτημάτων υψηλής απόδοσης. Στόχος της εργασίας αυτής αποτελεί η δημιουργία ενός καινοτόμου μικτού σχήματος αλγορίθμων βελτιστοποίησης, το οποίο αποσκοπεί να αντιμετωπίζει ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με το μικρότερο δυνατό αριθμό αξιολογήσεων της αντικειμενικής συνάρτησης. Γίνεται ανάλυση μερικών από τους πιο διαδεδομένους αλγορίθμους βελτιστοποίησης με σκοπό τον καθορισμό των κατάλληλων παραμέτρων για τη χρήση τους μέσα σε ένα μικτό σχήμα, ενώ παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της απόδοσης των επιλεγμένων αλγορίθμων από τη μεμονωμένη χρήση τους σε συναρτήσεις αναφοράς, αλλά και της αντίστοιχης απόδοσης του μικτού σχήματος για το ίδιο πρόβλημα.

Στο Κεφάλαιο 1 γίνεται μια εισαγωγή στο αντικείμενο που αντιμετωπίζει η παρούσα μελέτη. Στο Κεφάλαιο 2 γίνεται μια ανάλυση της έννοιας της βελτιστοποίησης αλλά και των αλγορίθμων βελτιστοποίησης και των εφαρμογών τους, ενώ παρουσιάζονται και οι επιλεγμένοι προς χρήση αλγόριθμοι. Στο Κεφάλαιο 3 παρουσιάζεται ο τρόπος με τον οποίο οι αλγόριθμοι αυτοί παραμετροποιούνται για να αξιοποιηθούν από ένα μικτό σχήμα βελτιστοποίησης, ενώ καθορίζονται και οι αντικειμενικές συναρτήσεις αναφοράς, μαζί με τη δομή του μικτού σχήματος. Στο Κεφάλαιο 4 αναλύεται η μεθοδολογία εφαρμογής, ενώ στο Κεφάλαιο 5 παρουσιάζονται και αναλύονται τα αποτελέσματα που λαμβάνονται από τη μεμονωμένη εφαρμογή των αλγορίθμων, αλλά και από την εφαρμογή του μικτού σχήματος. Στο Κεφάλαιο 6, τέλος, καταλήγουμε σε τρόπους με τους οποίους μπορεί να αξιοποιηθεί το βέλτιστο αυτό σχήμα, σε θέματα μελλοντικής έρευνας αλλά και σε πιθανές βελτιώσεις που επιδέχεται η διαδικασία.



ABSTRACT

This thesis deals with the issue of optimization algorithms, which is applicable to all areas of science that present problems that require optimization, such as engineering and the design of high-performance components. The scope of this work is to create an innovative mixed scheme of optimization algorithms, which aims to address an optimization problem with the smallest possible number of evaluations of the objective function. Some of the most common optimization algorithms are analyzed in order to determine the appropriate parameters for their use in a mixed scheme, while the results of the performance of the selected algorithms from their individual use in reference functions, as well as the corresponding performance of the mixed format for the same problem are analyzed.

In Chapter 1 an introduction is made to the object space dealt with in the present study. Chapter 2 provides an analysis of the concept of optimization and optimization algorithms and their applications, while the selected algorithms are presented. Chapter 3 presents the way in which these algorithms are configured to be utilized by a mixed optimization scheme, while defining the objective reference functions, together with the structure of the mixed scheme. Chapter 4 analyzes the application methodology, while Chapter 5 presents and analyzes the results obtained from the stand-alone application of the algorithms, but also from the application of the mixed scheme. In Chapter 6, finally, we come to the ways in which this optimal scheme can be utilized, in matters of future research but also in possible improvements that can be made for the process.



ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΕΡΙΛΗΨΗ	3
ABSTRACT	4
ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ	5
1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ	7
2. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΚΑΙ ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ	8
2.1 Η έννοια της βελτιστοποίησης	8
Μεγιστοποίηση ή ελαχιστοποίηση	9
Τοπικό και Ολικό ελάχιστο	9
Βελτιστοποίηση συναρτήσεων με περιορισμούς.....	10
Γραμμικός και μη γραμμικός προγραμματισμός.....	11
2.2 Αλγόριθμοι βελτιστοποίησης	11
Στοχαστικοί και ντετερμινιστικοί αλγόριθμοι.....	12
Ευρετικές και μεταευρετικές μέθοδοι.....	13
2.3 Εφαρμογές και χρήσεις αλγορίθμων βελτιστοποίησης	15
Μηχανική	15
Οικονομικά και χρηματοοικονομικά	16
Προβλήματα στην επιστήμη του Ηλεκτρολόγου Μηχανικού.....	16
Προβλήματα στην επιστήμη του Πολιτικού Μηχανικού.....	16
Επιχειρησιακή έρευνα.....	16
Μηχανική ελέγχου	17
Γεωφυσική.....	17
Μοριακή μοντελοποίηση	17
Βιολογία υπολογιστικών συστημάτων	18
Μηχανική μάθηση	18
2.4 Περιγραφή επιλεγμένων αλγορίθμων	18
Γενετικοί Αλγόριθμοι (Genetic Algorithms)	18
Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα (Firefly Algorithm).....	23
Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας (Harmony Search Algorithm).....	25
Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας (Black Hole Algorithm).....	26
3. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΥΛΟΠΟΙΗΣΗΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ	30
3.1 Επιλογή αλγορίθμων και αδιαστατοποίηση αρχικών τιμών .	30
Γενετικός Αλγόριθμος (GA):.....	32
Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα (FA):.....	32
Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας (HSA):	33
3.2 Μικτό σχήμα αλγορίθμων βελτιστοποίησης	33
Αντικειμενικές Συναρτήσεις	34
Δομή μικτού σχήματος.....	36
Αρχικές τιμές.....	37
Ειδικές τιμές.....	37
Αξιολογήσεις αντικειμενικής συνάρτησης.....	38
4. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗΣ ΜΕΜΟΝΩΜΕΝΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΚΑΙ ΜΙΚΤΟΥ ΣΧΗΜΑΤΟΣ	38



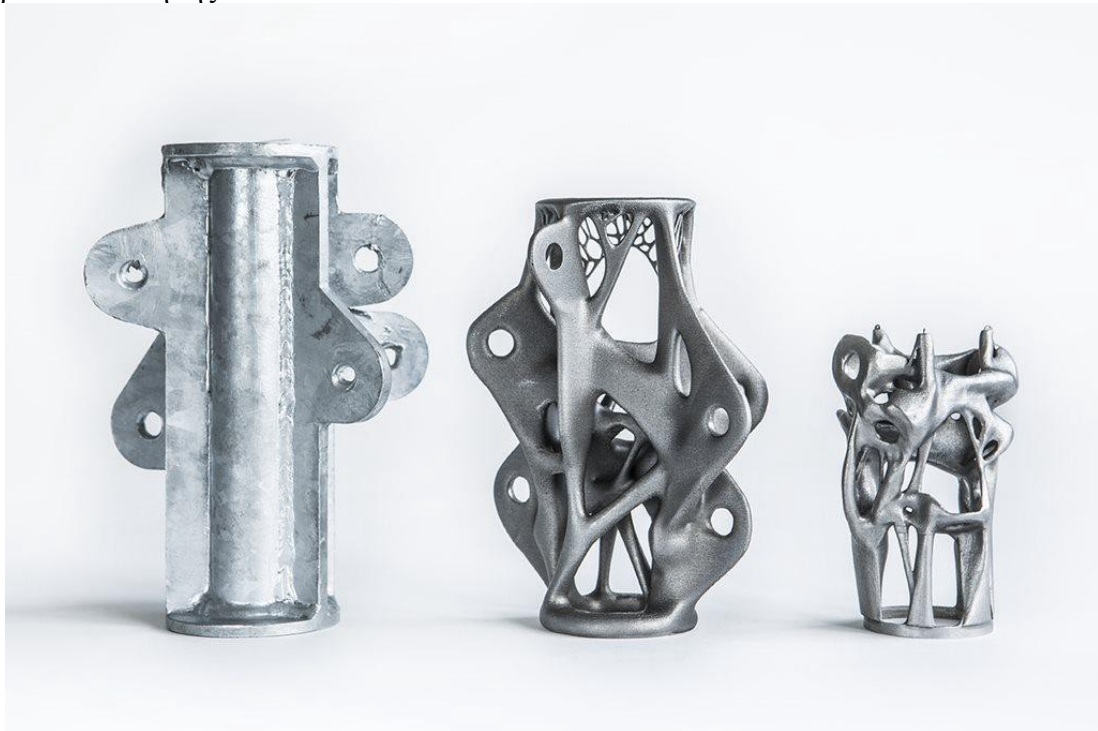
Περιβάλλον προγραμματισμού	38
5. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	41
5.1 Αξιολόγηση αλγορίθμων βελτιστοποίησης.....	41
Για τη συνάρτηση αναφοράς Σφαίρας:	41
Για τη συνάρτηση αναφοράς Schwefel:	43
Για τη συνάρτηση αναφοράς Alpine N.2:	44
Σχολιασμός αποτελεσμάτων από την επιμέρους αξιολόγηση των αλγορίθμων βελτιστοποίησης.....	46
5.2 Αξιολόγηση μικτού σχήματος.....	46
Συμπεράσματα.....	48
6. ΣΥΖΗΤΗΣΗ ΚΑΙ ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΕΥΝΑ.....	49
7. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	50



1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Στο χώρο του μηχανοκίνητου αθλητισμού, αλλά και της κατασκευής οχημάτων επιδόσεων γενικότερα, η ανάγκη να βρίσκεται η τεχνολογία σε επίπεδα αιχμής είναι επιτακτική. Από τα υλικά μέχρι τις διαδικασίες καταργασίας και τη σχεδίαση όλων των επιμέρους εξαρτημάτων, είναι απαραίτητο να επιτυγχάνεται το βέλτιστο δυνατό αποτέλεσμα στο βέλτιστο δυνατό χρόνο. Με αυτό τον τρόπο η απόδοση των οχημάτων μεγιστοποιείται ενώ η κατασκευάστρια εταιρία παραμένει ανταγωνιστική.

Η βελτιστοποίηση αποτελεί αναπόσπαστο κομμάτι της ανάπτυξης εξαρτημάτων για αγωνιστικά οχήματα. Πολλά λογισμικά σχεδίασης έχουν συμπεριλάβει εργαλεία βελτιστοποίησης στο πακέτο υπηρεσιών τους. Γνωρίζοντας τους περιορισμούς που έχει το κάθε τεμάχιο προς ανάπτυξη (πχ. γεωμετρικοί περιορισμοί, συντελεστές αντοχής, μηχανικές ιδιότητες, ελάχιστο βάρος) τα εργαλεία αυτά προσπαθούν να σχεδιάσουν το βέλτιστο δυνατό εξάρτημα, το οποίο να πληροί όλες τις προϋποθέσεις που έχουν τεθεί στον μέγιστο δυνατό βαθμό. Η τεχνολογία αυτή απέκτησε ενδιαφέρον όταν εμφανίστηκαν τεχνικές μηχανικής καταργασίας και τρισδιάστατης εκτύπωσης, οι οποίες επιτρέπουν την κατασκευή γεωμετριών που με συμβατικά μέσα θα ήταν αδύνατον. Πόσο μάλλον να σχεδιαστεί στο χέρι κάτι τόσο πολύπλοκο. Υπάρχουν πολλές μέθοδοι στη μαθηματική βελτιστοποίηση με τις οποίες μπορούν να επιτευχθούν τα παραπάνω. Οι μέθοδοι αυτές στηρίζονται πάνω στους αλγορίθμους βελτιστοποίησης.



Εικόνα 1: Τεμάχιο κατασκευασμένο με συμβατικές μεθόδους και με τη χρήση τεχνητής νοημοσύνης

Με τα παραπάνω ως βάση, στόχος είναι να μελετηθούν οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης και να καταστρωθεί ένα καινοτόμο σχήμα, το οποίο θα βελτιστοποιεί την ίδια τη διαδικασία της βελτιστοποίησης. Σκοπός αυτού του σχήματος είναι να θέσει τις βάσεις για την ανάπτυξη ενός εργαλείου βελτιστοποίησης, το οποίο θα μπορεί να είναι αξιοποιήσιμο στο χώρο της έρευνας για την επιτάχυνση της καινοτομίας, αλλά και από τη βιομηχανία για την κατασκευή τεμαχίων υψηλής ακρίβειας και απόδοσης. Οι βάσεις αυτές αποτελούν το αντικείμενο έρευνας της παρούσας μελέτης.

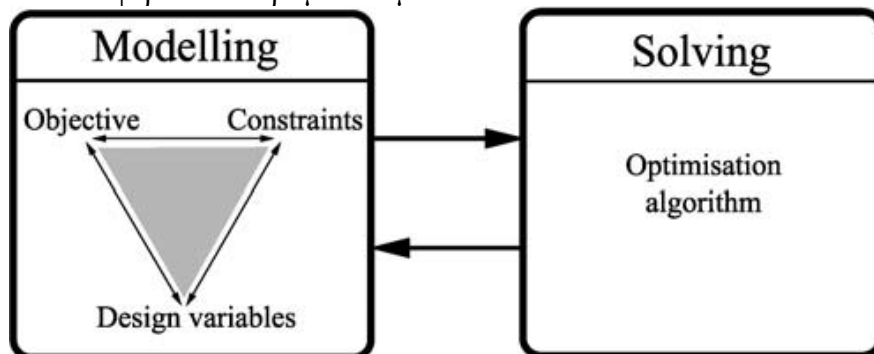


Το εργαλείο αυτό θα αποτελείται από έναν αλγόριθμο στον ρόλο του αρχηγού, ο οποίος θα χειρίζεται αλγορίθμους βελτιστοποίησης και τις παραμέτρους τους, ωθώντας τους να βελτιώνουν την αντικειμενική συνάρτηση ενός προβλήματος με τη χρήση μεθόδων τεχνητής νοημοσύνης στον ελάχιστο δυνατό χρόνο, με τη μεγαλύτερη δυνατή ευελιξία και ακρίβεια. Ένα τέτοιο εργαλείο μπορεί να αξιοποιηθεί όχι μόνο από τον τομέα της μηχανικής των οχημάτων, αλλά και από όλες τις επιστήμες οι οποίες αντιμετωπίζουν προβλήματα βελτιστοποίησης. Η διαδικασία μελέτης, σχεδιασμού και εφαρμογής περιγράφεται παρακάτω.

2. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΚΑΙ ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ

2.1 Η έννοια της βελτιστοποίησης

Στον ευρύ χώρο των θετικών επιστημών με τον όρο βελτιστοποίηση χαρακτηρίζεται η διαδικασία της μαθηματικής βελτιστοποίησης ή του μαθηματικού προγραμματισμού. Ως βελτιστοποίηση ορίζεται η επιλογή του καλύτερου δυνατού στοιχείου, με βάση κάποιο προκαθορισμένο αριθμό κριτηρίων, από ένα σύνολο διαθέσιμων εναλλακτικών λύσεων^[1]. Τα προβλήματα βελτιστοποίησης προκύπτουν σε όλους τους κλάδους που απαιτούν ποσοτική διαχείριση δεδομένων, από την επιστήμη των υπολογιστών και τη μηχανική^[2] έως την επιχειρησιακή έρευνα και τα οικονομικά. Η ανάπτυξη μεθόδων βελτιστοποίησης λύσεων έχει ενδιαφέρον για τα μαθηματικά εδώ και αιώνες^[3], με το ερευνητικό ενδιαφέρον να παραμένει αμείωτο.



Εικόνα 2: Η βασική δομή της μαθηματικής βελτιστοποίησης

Στην απλούστερη περίπτωση, ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης συνίσταται στη μεγιστοποίηση ή ελαχιστοποίηση μιας πραγματικής συνάρτησης επιλέγοντας συστηματικά τιμές εισόδου μέσα από ένα επιτρεπόμενο σύνολο και υπολογίζοντας τις τιμές εξόδου της συνάρτησης, προσπαθώντας να προσεγγίσει την ιδανική λύση. Γενικότερα, η βελτιστοποίηση περιλαμβάνει την εύρεση των "καλύτερων διαθέσιμων" τιμών κάποιας αντικειμενικής συνάρτησης δεδομένου ενός καθορισμένου πεδίου τιμών (ή εισόδων)^[4]. Οι καλύτερες τιμές μιας συνάρτησης μπορεί να αποτελούνται από ένα πλήθος τοπικών άκρων, με το στόχο της διαδικασίας βελτιστοποίησης να είναι να βρεθεί το ολικό βέλτιστο άκρο της. Για την εύρεση των ιδανικών ελαχίστων ή μεγίστων σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης, χρησιμοποιούνται ευρετικές μέθοδοι όπως οι Γενετικοί Αλγόριθμοι, ο Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα και πολλοί ακόμη άλλοι συναφείς υπολογιστικοί αλγόριθμοι βελτιστοποίησης.



Μεγιστοποίηση ή ελαχιστοποίηση

Στις περισσότερες περιπτώσεις προβλημάτων βελτιστοποίησης στόχος είναι η ελαχιστοποίηση ή η μεγιστοποίηση βαθμωτών συναρτήσεων^[5]. Για μια βαθμωτή συνάρτηση μιας ή περισσότερων μεταβλητών, $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ τότε το παρακάτω είναι ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης: Να βρεθούν τα x_1, x_2, \dots, x_n όπου η $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ είναι ελάχιστη. Καθώς τα περισσότερα προβλήματα βελτιστοποίησης αφορούν διανυσματικές συναρτήσεις, μια κατηγορία βαθμωτών συναρτήσεων, το ίδιο ακριβώς μοτίβο παρουσιάζεται και για εκείνες. Ως διανυσματική συνάρτηση $f(t)$ μιας μεταβλητής, ορίζεται η απεικόνιση της ως διάνυσμα χώρου, για κάθε πραγματική τιμή t ^[68]. Ακολούθως, ένα παράδειγμα διανυσματικής συνάρτησης μπορεί να συμβολιστεί ως:

$$\vec{F}(t) = x(t)\bar{i} + y(t)\bar{j} + z(t)\bar{k}$$

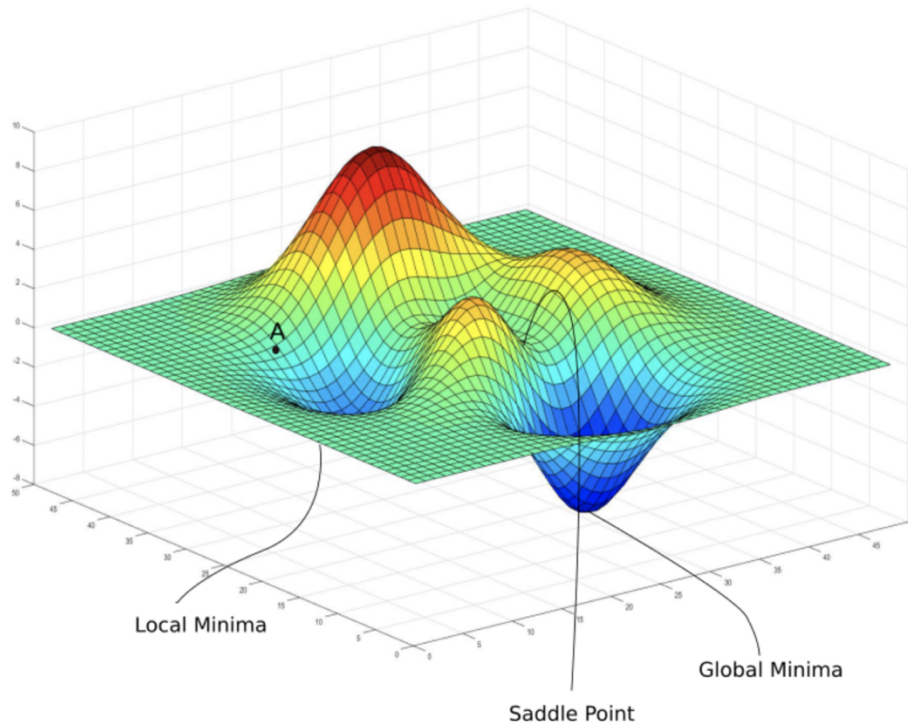
Η αντιστοιχία των x, y, z, \dots, n , δηλαδή των διαστάσεων μια διανυσματικής συνάρτησης, αφορά τα x_1, x_2, \dots, x_n όταν εκείνη ορίζεται ως βαθμωτή.

Όταν ορίζονται συναρτήσεις που ποσοτικοποιούν σφάλματα ή ποινές, εφαρμόζεται ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης. Αντίθετα, εάν ένας αλγόριθμος βελτιστοποίησης επεξεργάζεται μια συνάρτηση που μοντελοποιεί την ακρίβεια μιας μεθόδου, θα χρειαστεί να μεγιστοποιηθεί αυτή τη συνάρτηση. Πολλά αυτοματοποιημένα εργαλεία λογισμικού για βελτιστοποίηση, γενικά εφαρμόζουν είτε ένα πρόβλημα μεγιστοποίησης είτε μια εργασία ελαχιστοποίησης, αλλά όχι και τα δύο. Ως εκ τούτου, ένα πρόβλημα μεγιστοποίησης μπορεί να μετατραπεί σε πρόβλημα ελαχιστοποίησης (και αντίστροφα) προσθέτοντας ένα αρνητικό πρόσημο στον ορισμό της συνάρτησης μελέτης. Καθώς τα δύο προβλήματα είναι ισοδύναμα, οι ίδιοι κανόνες και ορισμοί ισχύουν και για τα δυο σενάρια.

Ακόμη, καθώς ο τρόπος με τον οποίο δουλεύουν οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης είναι στοχαστικός, μπορεί να γίνει η υπόθεση πως η εύρεση μεγίστου ή ελαχίστου εκφράζεται από τη θεωρία του Μέτωπου Pareto. Η αρχή Pareto (γνωστή επίσης ως κανόνας 80/20) δηλώνει ότι για πολλά γεγονότα περίπου το 80% των επιπτώσεων προέρχεται από το 20% των αιτιών ^[69]. Βασισμένο σε αυτή την αρχή, το Μέτωπο Pareto είναι ένα σύνολο μη ιεραρχημένων λύσεων, οι οποίες επιλέγονται ως βέλτιστες, εάν κανένας στόχος δεν μπορεί να βελτιωθεί χωρίς να θυσιαστεί τουλάχιστον ένας άλλος στόχος ^[70]. Έτσι, μια λύση x_1 αναφέρεται ότι κυριαρχείται από μια άλλη λύση x_2 αν, και μόνο εάν, η λύση x_2 είναι εξίσου καλή ή καλύτερη από το x_1 αναφορικά με όλους τους στόχους μιας αντικειμενικής συνάρτησης.

Τοπικό και Ολικό ελάχιστο

Σε εφαρμογές ολικής βελτιστοποίησης συναντώνται συχνά συναρτήσεις οι οποίες είναι εξαιρετικά μη γραμμικές με πολύπλοκο πεδίο λύσεων. Είναι πιθανό ότι υπάρχει ένα σημείο όπου η συνάρτηση έχει τη χαμηλότερη τιμή σε μια μικρή ή τοπική περιοχή γύρω από αυτό το σημείο. Ένα τέτοιο σημείο ονομάζεται τοπικό ελάχιστο σημείο. Αυτό έρχεται σε αντίθεση με το καθολικό ελάχιστο σημείο, το οποίο είναι ένα σημείο όπου η συνάρτηση έχει τη μικρότερη δυνατή τιμή για ολόκληρο το πεδίο πιθανών λύσεων. Το παρακάτω σχήμα παρουσιάζει οπτικά την ύπαρξη τοπικών και ολικών βέλτιστων τιμών στο σύνολο του πεδίου λύσεων μια συνάρτησης.



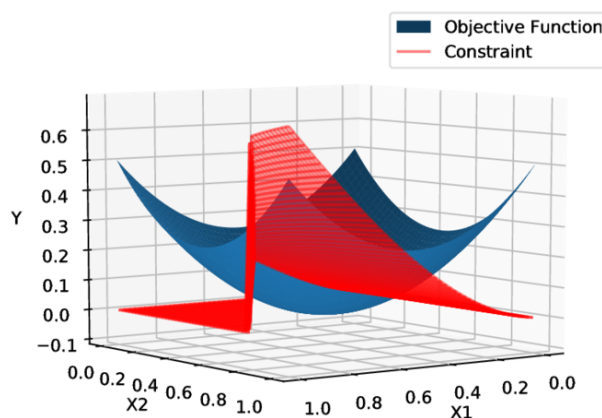
Εικόνα 3: Τοπικά και ολικά βέλτιστα σε μια συνάρτηση

Βελτιστοποίηση συναρτήσεων με περιορισμούς

Υπάρχουν πολλά προβλήματα που χρήζουν βελτιστοποίηση, όπου στόχος είναι να βρεθεί το καθολικό βέλτιστο σημείο, είτε χωρίς περιορισμούς είτε με περιορισμούς σε μια περιοχή του χώρου λύσεων. Για ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης που υπόκειται σε περιορισμούς, η συνάρτηση δεν θα αφορά ανεξάρτητα κάθε πιθανή τιμή x_i , αλλά θα έχει για παράδειγμα την παρακάτω μορφή:

$$F(x) = x^2 + y^2, \text{ για } x+y \leq 1$$

Σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης, ολόκληρος ο χώρος λύσεων είναι ταυτόχρονα και το πεδίο τιμών εξόδου της συνάρτησης. Αντιθέτως, για μια συνάρτηση με περιορισμούς, μόνο τα σημεία του χώρου όπου ισχύουν οι περιορισμοί στο πρόβλημα αποτελούν το χώρο λύσεων. Παράλληλα, οι περιορισμοί που επιβάλλονται σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης θα μπορούσαν να είναι είτε περιορισμοί ισότητας είτε περιορισμοί ανισότητας.

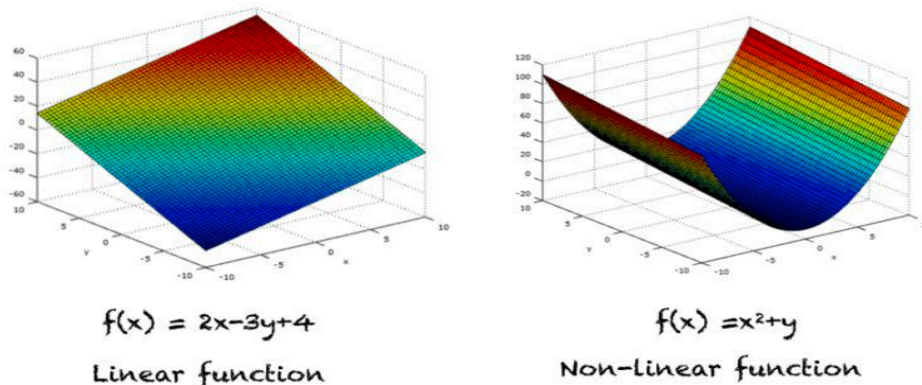


Εικόνα 4: Αναπαράσταση αντικειμενικής συνάρτησης και των περιορισμών της



Γραμμικός και μη γραμμικός προγραμματισμός

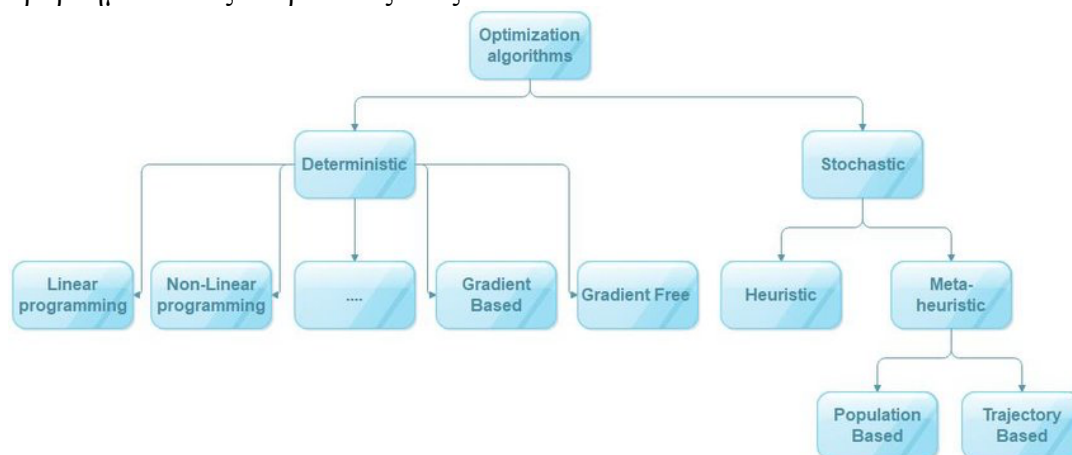
Ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης όπου η συνάρτηση είναι γραμμική και όλοι οι περιορισμοί είναι επίσης γραμμικοί ονομάζεται πρόβλημα γραμμικού προγραμματισμού. Σε αντίθετη περίπτωση εάν είτε η αντικειμενική συνάρτηση είναι μη γραμμική είτε ένας ή περισσότεροι από έναν περιορισμοί είναι μη γραμμικοί, τότε έχουμε πρόβλημα μη γραμμικού προγραμματισμού.



Εικόνα 5: Γραμμικό και μη γραμμικό γράφημα συνάρτησης

2.2 Αλγόριθμοι βελτιστοποίησης

Οι μέθοδοι βελτιστοποίησης διαφέρουν σε φιλοσοφία, προσπαθώντας να επιτύχουν το βέλτιστο αποτέλεσμα με διαφορετικούς τρόπους, ανάλογα από τον τομέα από τον οποίο αντλούν έμπνευση. Τις τελευταίες δεκαετίες, ένα αξιόλογο ενδιαφέρον έχει επικεντρωθεί στην εύρεση λύσεων για ένα ευρύ φάσμα δυσεπίλυτων προβλημάτων βελτιστοποίησης από επιστήμονες και ερευνητές από διαφορετικούς τομείς, όχι μόνο για ακαδημαϊκούς και ερευνητικούς σκοπούς, αλλά και λόγω της διεύρυνσης των αναγκών που έχουν δημιουργηθεί στην πραγματική ζωή. Η πιο διαδεδομένη πρακτική είναι η σύσταση αλγορίθμων οι οποίοι βασίζονται σε στοιχεία που παρατηρούνται στη φύση, έχοντας παρατηρήσει την αξιοσημείωτη ομοιότητα μεταξύ του τρόπου με τον οποίο αλληλοεπιδρούν φυσικοί νόμοι (όπως φυσικά φαινόμενα) αλλά και η συμπεριφορά έμβιων όντων (όπως τα γονίδια ή ένα σμήνος εντόμων) στην επίλυση προβλημάτων, αν γίνει σύγκριση με τον τρόπο με τον οποίο αντιμετωπίζει τα ίδια προβλήματα ένας ανθρώπινος νους.

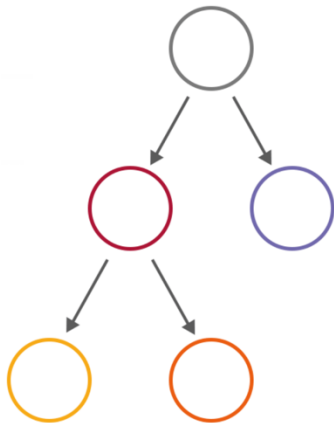


Εικόνα 6: Γράφημα κατηγοριοποίησης των αλγορίθμων βελτιστοποίησης



Στοχαστικοί και ντετερμινιστικοί αλγόριθμοι

Οι αλγόριθμοι καθολικής βελτιστοποίησης χωρίζονται συνήθως σε δυο μεγάλες κατηγορίες: ντετερμινιστικούς και στοχαστικούς [6]. Οι ντετερμινιστικές μέθοδοι παρέχουν σε θεωρητικό επίπεδο μια εγγύηση για τον εντοπισμό του ολικού βέλτιστου, δηλαδή του τοπικού βέλτιστου του οποίου η τιμή αντικειμενικής συνάρτησης διαφέρει το πολύ 'C' από την θεωρητική ιδανική για ένα δεδομένο 'C' > 0. Οι στοχαστικές μέθοδοι εγγυώνται μόνο την πιθανότητα πως οι αποδείξεις σύγκλισής τους συνήθως δηλώνουν ότι το συνολικό βέλτιστο θα προσδιοριστεί σε άπειρο χρόνο με πιθανότητα 1. Επιπλέον, οι στοχαστικές μέθοδοι προσαρμόζονται καλύτερα σε διατυπώσεις "μαύρου κουτιού" και ασταθές πεδίο λύσεων συναρτήσεων, ενώ οι ντετερμινιστικές μέθοδοι συνήθως στηρίζονται σε ορισμένες θεωρητικές υποθέσεις σχετικά με τη διατύπωση του προβλήματος και τις αναλυτικές του ιδιότητες.

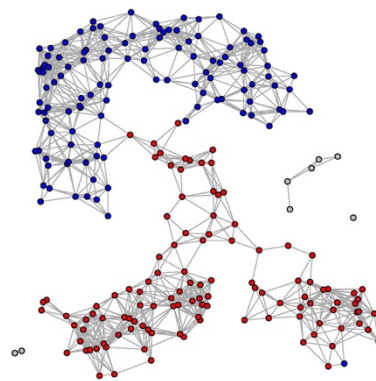


Εικόνα 7: Σχήμα ντετερμινιστικού αλγορίθμου

Στην ντετερμινιστική καθολική βελτιστοποίηση, όταν η μορφή του προβλήματος δεν είναι γνωστή εκ των προτέρων, οι αλγόριθμοι Branch-and-Bound φαίνεται να είναι το πιο πολλά υποσχόμενο εργαλείο για την αποτελεσματική εύρεση της συνολικής λύσης. Ο χώρος αναζήτησης λύσεων είναι το πλήρες πεδίο ορισμού όλων των ανεξάρτητων μεταβλητών. Σε κάθε βήμα, επιλέγεται το πεδίο τιμών μιας από τις μεταβλητές. Στη συνέχεια υπολογίζονται τα κάτω και τα άνω όρια της αντικειμενικής συνάρτησης σε σχέση με την τρέχουσα περιοχή. Εάν αυτά τα όρια βρίσκονται σε δεδομένη απόσταση μεταξύ τους, το άνω όριο γίνεται αποδεκτό ως το καλύτερο ελάχιστο στην τρέχουσα περιοχή. Εάν είναι καλύτερο από το τρέχον συνολικό καλύτερο ελάχιστο, το αντικαθιστά, διαφορετικά η περιοχή απορρίπτεται. Εάν τα όρια είναι πιο μακριά μεταξύ

τους, επιλέγεται μια μεταβλητή διακλάδωσης και ένα σημείο διακλάδωσης και η περιοχή χωρίζεται σε μικρότερες υποπεριοχές. Ο αλγόριθμος τερματίζεται όταν δεν υπάρχουν άλλες περιοχές προς εξέταση.

Η απλούστερη μορφή μιας στοχαστικής προσέγγισης για ολική βελτιστοποίηση μιας συνάρτησης, ονομάζεται Pure Random Search (PRS). Στο PRS, μια αντικειμενική συνάρτηση αξιολογείται σε τυχαία επιλεγμένα σημεία και η μικρότερη τιμή λαμβάνεται ως το συνολικό ελάχιστο. Η προσέγγιση PRS δεν είναι πολύ αποτελεσματική καθώς ο αναμενόμενος αριθμός επαναλήψεων για την επίτευξη μιας καθορισμένης ανοχής αυξάνεται εκθετικά αναφορικά με τη διάσταση του προβλήματος. Οι προηγμένες στοχαστικές τεχνικές χρησιμοποιούν στοχαστικές μεθόδους για να αναζητήσουν τη θέση των τοπικών ελαχίστων



Εικόνα 8: Σχήμα στοχαστικού αλγορίθμου

και στη συνέχεια χρησιμοποιούν ντετερμινιστικές μεθόδους για να λύσουν ένα πρόβλημα τοπικής ελαχιστοποίησης. Δύο φάσεις εξετάζονται: η ολική και η τοπική. Στην "ολική φάση", η συνάρτηση αξιολογείται με έναν αριθμό τυχαίων σημείων τα οποία προκύπτουν μέσα από μια ομοιόμορφη κατανομή. Στην "τοπική φάση", τα αντίστοιχα σημεία χρησιμοποιούνται ως σημεία εκκίνησης για μια αναζήτηση τοπικού



ελάχιστου. Η αποτελεσματικότητα των μεθόδων που αξιοποιούν αντίστοιχα πολλαπλά στάδια εξαρτάται τόσο από την απόδοση της συνολικής στοχαστικής όσο και από την αντίστοιχη της τοπικής φάσης ελαχιστοποίησης.

Στην πιο βασική μορφή της πολυσταδιακής αυτής προσέγγισης, εφαρμόζεται μια τοπική αναζήτηση σε κάθε σημείο-δείγμα. Αναπόφευκτα εντοπίζονται πολλές φορές κάποια τοπικά ελάχιστα. Δεδομένου ότι η τοπική αναζήτηση είναι το πιο χρονοβόρο στάδιο για μια κεντρική μονάδα επεξεργασίας (CPU), ιδανικά θα πρέπει να ξεκινά μόνο μία φορά σε κάθε περιοχή έλξης, αποτελώντας και την κεντρική ιδέα πίσω από διάφορες εκδόσεις των λεγόμενων μεθόδων ομαδοποίησης. Η αποτελεσματικότητα των στοχαστικών μεθόδων εξαρτάται από την ποιότητα των σημείων δειγματοληψίας. Έχει αναγνωριστεί μέσω της θεωρίας και της πρακτικής ότι οι ομοιόμορφα κατανομημένες ντετερμινιστικές ακολουθίες παρέχουν πιο ακριβή αποτελέσματα από τις καθαρά τυχαίες ακολουθίες. Οι ακολουθίες χαμηλών αποκλίσεων έχουν σχεδιαστεί ειδικά για να τοποθετούν τα σημεία όσο το δυνατόν πιο ομοιόμορφα. Αντίθετα με τη χρήση τυχαίων αριθμών, διαδοχικά σημεία χαμηλής απόκλισης «γνωρίζουν» τη θέση των προκατόχων τους και καλύπτουν τα κενά που είχαν μείνει προηγουμένως.

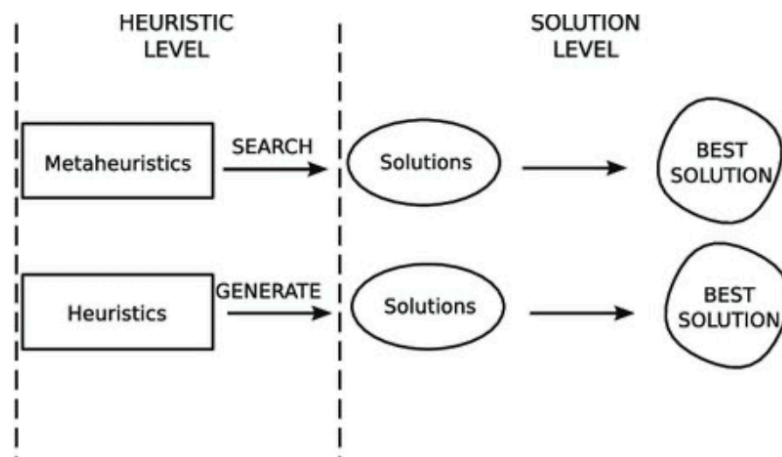
Ευρετικές και μεταευρετικές μέθοδοι

Παρόλο που οι άνθρωποι έχουν χρησιμοποιήσει ευρετικές μεθόδους σε όλη την ιστορία, και ο ανθρώπινος εγκέφαλος είναι εξοπλισμένος με μια τρομερή ευρετική ικανότητα για να λύσει μια τεράστια σειρά απαιτητικών προβλημάτων βελτιστοποίησης ^[7], η επιστημονική μελέτη της ευρετικής (και κατ' επέκταση της μεταευρετικής) είναι μια σχετικά νέα προσπάθεια. Δεν είναι υπερβολή να ισχυριστεί κανείς ότι το πεδίο της (μετά) ευρετικής, ειδικά σε σύγκριση με άλλα πεδία σπουδών, όπως η φυσική, η χημεία και τα μαθηματικά, δεν έχει ακόμη φτάσει σε ωριμότητα. Ωστόσο, έχει σημειωθεί τεράστια πρόοδος από τότε που καθιερώθηκαν οι πρώτες έννοιες της μεταευρετικής. Με μια πιο ευρεία οπτική στο πεδίο της μεταευρετικής, εύκολα βγαίνει το συμπέρασμα πως υπήρξε μια προοδευτική διορατικότητα ανά τα χρόνια. Επιπλέον, αυτή η διαρκής πρόοδος δεν έχει φτάσει ακόμη σε τέλος: ο τρόπος με τον οποίο οι ερευνητές και οι άνθρωποι στο χώρο της βιομηχανίας βλέπουν τη μεταευρετική εξακολουθεί να αλλάζει συνεχώς. Ακόμη και η απάντηση στο ερώτημα «τι είναι μεταευρετικό;» έχει αλλάξει αρκετά από τότε που πρωτοεμφανίστηκε η λέξη στο δεύτερο μισό της δεκαετίας του 1980.

Στους μεταευρετικούς αλγόριθμους, το “μετά” τους χαρακτηρίζει ως αλγορίθμους που βρίσκονται σε ένα επίπεδο υψηλότερο από αυτό των ευρετικών, γενικά αποδίδοντας καλύτερα από τα απλά ευρετικά σχήματα. Όλοι οι μεταευρετικοί αλγόριθμοι λειτουργούν αντισταθμίζοντας τον εστιασμό σε τοπική αναζήτηση λύσεων, με την εξερεύνηση όλου του πεδίου λύσεων ^[8]. Η ποικιλομορφία των λύσεων επιτυγχάνεται συχνά μέσω τυχαιοποίησης. Παρά τη δημοφιλία της μεταευρετικής, δεν υπάρχει συμφωνημένος ορισμός της ευρετικής και της μεταευρετικής στη βιβλιογραφία. Μερικοί ερευνητές χρησιμοποιούν την «ευρετική» και τη «μεταευρετική» αυθαίρετα, εναλλάσσοντας τους όρους συχνά αναφερόμενοι στον ίδιο τύπο αλγορίθμων. Ωστόσο, η ερευνητική κοινότητα συγκλίνει στο να ονομάζει όλους τους στοχαστικούς αλγόριθμους που λειτουργούν με τυχαιοποίηση τιμών εξερευνώντας όλο το χώρο λύσεων ως μεταευρετικούς. Η τυχαιοποίηση αποτελεί έναν καλό τρόπο για να περιορίζεται η τοπική αναζήτηση συγκριτικά με την αναζήτηση σε όλο το χώρο λύσεων. Με αυτό τον τρόπο, ελαχιστοποιούνται οι πιθανότητες ο αλγόριθμος να παγιδευτεί σε κάποιο τοπικό ελάχιστο. Σχεδόν όλοι οι μεταευρετικοί αλγόριθμοι είναι συνήθως κατάλληλοι για μη γραμμική μοντελοποίηση και ολική βελτιστοποίηση.

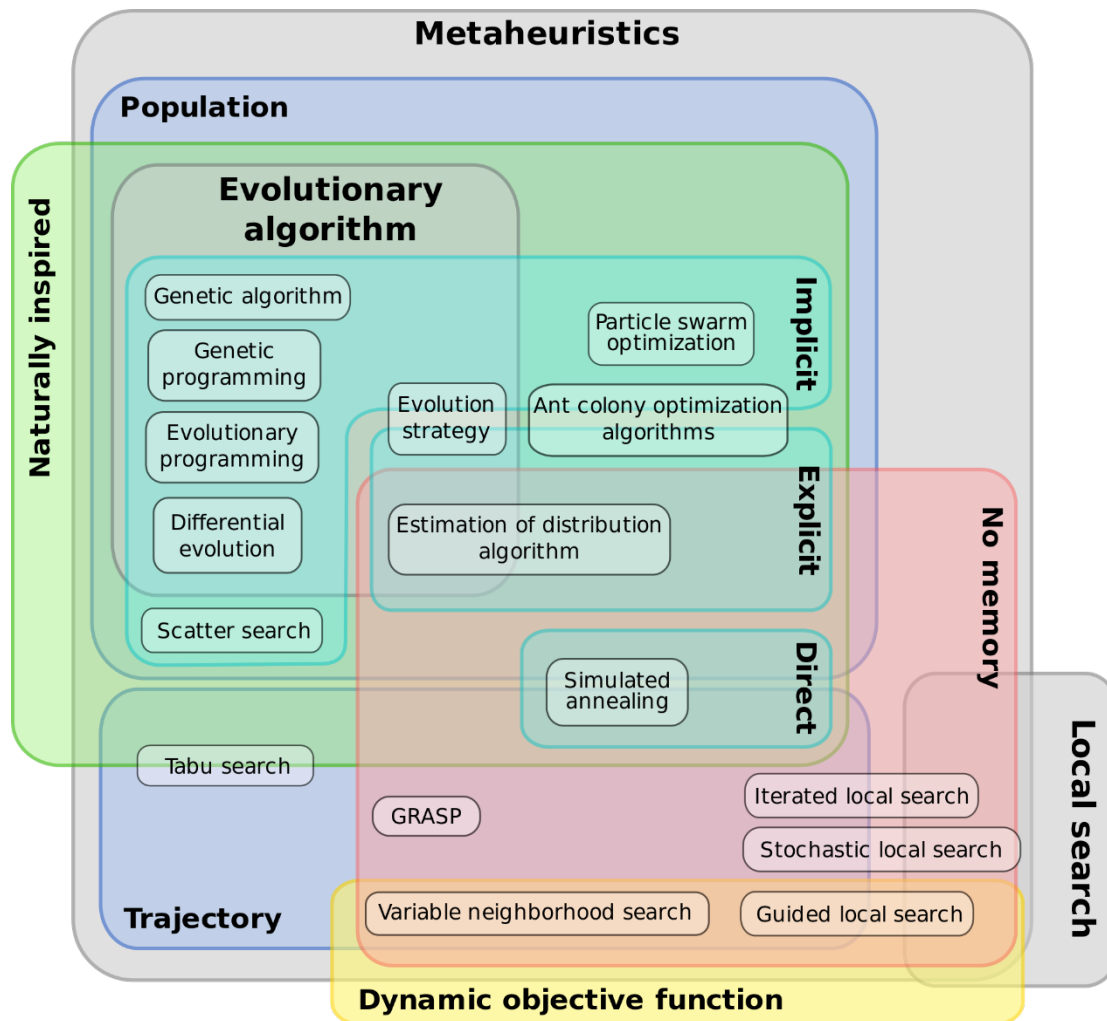


Η μεταερευτική είναι ένας αποτελεσματικός τρόπος να εφαρμοστεί η τεχνική της “δοκιμής και του λάθους” για την παραγωγή αποδεκτών λύσεων σε ένα σύνθετο πρόβλημα σε εύλογα σύντομο χρόνο. Η πιθανή πολυπλοκότητα του προβλήματος καθιστά αδύνατη την αναζήτηση όλων των πιθανών λύσεων αλλά και των συνδυασμών τους. Ο στόχος είναι να βρεθούν καλές, εφικτές λύσεις σε αποδεκτό χρονοδιάγραμμα. Δεν υπάρχει καμία εγγύηση ότι μπορούν να βρεθούν οι καλύτερες λύσεις, ενώ παράλληλα δεν είναι γνωστό αν ένας αλγόριθμος θα λειτουργήσει, ενώ ακόμη και αν λειτουργεί δεν μπορεί να είναι γνωστό το γιατί. Η ιδέα είναι να υπάρχει ένας αποτελεσματικός και πρακτικός αλγόριθμος που θα λειτουργεί τις περισσότερες φορές και θα είναι σε θέση να παράγει καλής ποιότητας λύσεις. Μεταξύ των ποιοτικών λύσεων που παράγονται, μπορεί να αναμένεται ότι ορισμένες από αυτές είναι σχεδόν βέλτιστες, αν και δεν υπάρχει καμία εγγύηση για αυτό.



Εικόνα 9: Ευρετικοί και Μεταερευτικοί Αλγόριθμοι ως προς τις λύσεις

Τα κύρια συστατικά οποιουδήποτε μεταερευτικού αλγορίθμου είναι η εντατικοποίηση (exploitation) και η διαφοροποίηση (exploration), ή εκμετάλλευση και εξερεύνηση αντίστοιχα. Διαφοροποίηση σημαίνει αναζήτηση διαφορετικών λύσεων σε βαθμό που να επιτρέπει την εξερεύνηση όσο μεγαλύτερου ποσοστού είναι εφικτό από το διαθέσιμο πεδίο τιμών, ενώ εντατικοποίηση σημαίνει εστίαση σε γειτονικές διαθέσιμες τιμές, αξιοποιώντας τις πληροφορίες ότι μια καλή λύση βρίσκεται σε αυτήν την περιοχή. Η επιλογή των καλύτερων διασφαλίζει ότι οι λύσεις θα συγκλίνουν στη βέλτιστη. Από την άλλη πλευρά, η διαφοροποίηση μέσω τυχαιοποίησης αυξάνει την ποικιλομορφία των λύσεων, ενώ βοηθά τους αλγορίθμους βελτιστοποίησης να μην παγιδευτούν σε κάποιο τοπικό βέλτιστο. Ο καλός συνδυασμός αυτών των δύο βασικών παραμέτρων συνήθως διασφαλίζει ότι είναι εφικτό το να βρεθεί η ολική βέλτιστη λύση. Οι μεταερευτικοί αλγόριθμοι μπορούν να ταξινομηθούν με πολλούς τρόπους. Για παράδειγμα, οι Γενετικοί Αλγόριθμοι και ο Γενετικός Προγραμματισμός βασίζονται σε πληθυσμό καθώς χρησιμοποιούν ένα σύνολο συμβολοσειρών ή “γονιδίων”, το οποίο ανανεώνεται από γενιά. Ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης “Σμήνος Σωματιδίων” (Particle Swarm Optimization, PSO), ο οποίος αντίστοιχα χρησιμοποιεί ένα σύνολο συμβολοσειρών ή “σωματίδια”, βασίζεται επίσης σε πληθυσμό. Από την άλλη πλευρά, η Προσομοίωση Ανόπτησης (Simulated Annealing, SA) χρησιμοποιεί μια ενιαία λύση που κινείται στον χώρο σχεδιασμού ή στον χώρο αναζήτησης, ενώ τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (Artificial Neural Networks, ANN) χρησιμοποιούν μια διαφορετική προσέγγιση.



Εικόνα 10: Ταξινόμηση μεταερευτικών αλγόριθμων

Η μοντελοποίηση και η βελτιστοποίηση μπορεί να εστιάζουν σε διαφορετικό στόχο, αλλά για την επίλυση πραγματικών προβλημάτων, συχνά πρέπει να χρησιμοποιούμε τόσο τη μοντελοποίηση όσο και τη βελτιστοποίηση. Η μοντελοποίηση διασφαλίζει ότι οι αντικειμενικές συναρτήσεις αξιολογούνται χρησιμοποιώντας το σωστό μαθηματικό/αριθμητικό μοντέλο για το πρόβλημα, ενώ η βελτιστοποίηση μπορεί να επιτύχει τις βέλτιστες ρυθμίσεις των ανεξάρτητων μεταβλητών εισόδου. Για τη βελτιστοποίηση, τα βασικά μέρη είναι οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης. Για το λόγο αυτό, η παρούσα μελέτη επικεντρώνεται στους αλγόριθμους, και ιδιαίτερα στους μεταερευτικούς αλγόριθμους.

2.3 Εφαρμογές και χρήσεις αλγορίθμων βελτιστοποίησης

Μηχανική

Τα προβλήματα στη δυναμική του άκαμπτου σώματος (ιδίως η δυναμική του αρθρωτού άκαμπτου σώματος) απαιτούν συχνά τεχνικές μαθηματικού προγραμματισμού, καθώς η δυναμική αυτή μπορεί να προσδιοριστεί ως προσπάθεια επίλυσης μιας συνηθισμένης διαφορικής εξίσωσης πολλαπλών περιορισμών. [9] Οι περιορισμοί συνήθως είναι διάφοροι μη γραμμικοί γεωμετρικοί περιορισμοί, όπως π.χ. «αυτά τα δύο σημεία πρέπει πάντα να συμπίπτουν», «αυτή η επιφάνεια δεν πρέπει να διεισδύει σε καμία άλλη», ή «αυτό το σημείο πρέπει πάντα να βρίσκεται κάπου σε αυτήν την καμπύλη». Πολλά



προβλήματα σχεδιασμού μπορούν επίσης να εκφραστούν ως προγράμματα βελτιστοποίησης. Αυτή η εφαρμογή τους ονομάζεται βελτιστοποίηση σχεδίασης. Ένα υποσύνολο είναι η μηχανική βελτιστοποίηση και ένα άλλο πρόσφατο και αυξανόμενο υποσύνολο αυτού του τομέα είναι η πολυεπιστημονική βελτιστοποίηση σχεδιασμού, η οποία, αν και χρήσιμη σε πολλά προβλήματα, έχει εφαρμοστεί ιδιαίτερα σε προβλήματα αεροδιαστημικής μηχανικής. Αυτή η προσέγγιση μπορεί να εφαρμοστεί επίσης στην κοσμολογία και την αστροφυσική.^[10]

Οικονομικά και χρηματοοικονομικά

Τα οικονομικά είναι αρκετά στενά συνδεδεμένα με τη βελτιστοποίηση των παραγόντων, έτσι ένας ισχυρός ορισμός που περιγράφει τα οικονομικά ως επιστήμη τα χαρακτηρίζει ως "μελέτη της ανθρώπινης συμπεριφοράς ως σχέση μεταξύ σκοπών και σπάνιων μέσων" με εναλλακτικές χρήσεις.^[11] Η σύγχρονη θεωρία βελτιστοποίησης περιλαμβάνει την παραδοσιακή θεωρία βελτιστοποίησης αλλά επίσης επικαλύπτει τη Θεωρία Παιγνίων και τη μελέτη των οικονομικών ισορροπιών. Στη Μικροοικονομία, το πρόβλημα μεγιστοποίησης της χρησιμότητας και το πρόβλημα ελαχιστοποίησης των δαπανών, είναι προβλήματα οικονομικής βελτιστοποίησης. Στο βαθμό που συμπεριφέρονται με συνέπεια, οι καταναλωτές θεωρείται ότι μεγιστοποιούν τη χρηστική ικανοποίησή τους, ενώ οι επιχειρήσεις συνήθως υποτίθεται ότι μεγιστοποιούν το κέρδος τους. Οι τιμές των περιουσιακών στοιχείων μοντελοποιούνται επίσης χρησιμοποιώντας τη θεωρία βελτιστοποίησης, αν και τα υποκείμενα μαθηματικά βασίζονται στη βελτιστοποίηση στοχαστικών διεργασιών και όχι στη στατική βελτιστοποίηση. Η θεωρία του διεθνούς εμπορίου χρησιμοποιεί επίσης τη βελτιστοποίηση για να εξηγήσει τα εμπορικά πρότυπα μεταξύ των εθνών. Η βελτιστοποίηση των χαρτοφυλακίων είναι ένα παράδειγμα βελτιστοποίησης πολλαπλών στόχων στα οικονομικά.

Προβλήματα στην επιστήμη του Ηλεκτρολόγου Μηχανικού

Ορισμένες κοινές εφαρμογές των τεχνικών βελτιστοποίησης στην ηλεκτρική μηχανική περιλαμβάνουν το σχεδιασμό ενεργών φίλτρων,^[12] μείωση του παρασιτικού πεδίου σε συστήματα αποθήκευσης υπεραγωγίσιμης μαγνητικής ενέργειας, σχεδιασμό χαρτογράφησης χώρου δομών μικροκυμάτων,^[13] κεραιές ακουστικών,^{[14][15][16]} ηλεκτρομαγνητική σχεδίαση. Η ηλεκτρομαγνητικά επικυρωμένη βελτιστοποίηση σχεδιασμού εξαρτημάτων και κεραιών μικροκυμάτων έχει κάνει εκτενή χρήση ενός κατάλληλου μοντέλου βασισμένου είτε στη φυσική ή σε ένα εμπειρικό υποκατάστατο και μεθοδολογιών χαρτογράφησης χώρου^{[17],[18]}.

Προβλήματα στην επιστήμη του Πολιτικού Μηχανικού

Η βελτιστοποίηση έχει χρησιμοποιηθεί ευρέως στην επιστήμη του πολιτικού μηχανικού. Η διαχείριση κατασκευών και η μηχανική μεταφορών είναι από τους κύριους κλάδους των Πολιτικών Μηχανικών που βασίζονται σε μεγάλο βαθμό στη βελτιστοποίηση. Τα πιο κοινά προβλήματα που επιλύονται με τη βελτιστοποίηση είναι η ανάλυση του κύκλου ζωής των κατασκευών και των υποδομών,^[19] η αξιοποίηση των υλικών πόρων,^{[20][21]} η κατανομή των υδάτινων πόρων, η διαχείριση της κυκλοφορίας^[22] και η βελτιστοποίηση των χρονοδιαγραμμάτων.

Επιχειρησιακή έρευνα

Ένα άλλο πεδίο που χρησιμοποιεί τεχνικές βελτιστοποίησης εκτενώς είναι η επιχειρησιακή έρευνα.^[23] Η επιχειρησιακή έρευνα χρησιμοποιεί επίσης στοχαστική



μοντελοποίηση και προσομοίωση για να υποστηρίξει τη βελτιωμένη λήψη αποφάσεων. Όλο και περισσότερο, η επιχειρησιακή έρευνα χρησιμοποιεί στοχαστικό προγραμματισμό για να μοντελοποιήσει δυναμικές αποφάσεις που προσαρμόζονται στα γεγονότα. Τέτοια προβλήματα μπορούν να λυθούν με μεθόδους βελτιστοποίησης μεγάλης κλίμακας και στοχαστικής βελτιστοποίησης.

Μηχανική ελέγχου

Η μαθηματική βελτιστοποίηση χρησιμοποιείται σε πολύ σύγχρονο σχεδιασμό ελεγκτών. Οι ελεγκτές υψηλού επιπέδου όπως ο προγνωστικός έλεγχος μοντέλων ή η βελτιστοποίηση σε πραγματικό χρόνο χρησιμοποιούν μαθηματική βελτιστοποίηση. Αυτοί οι αλγόριθμοι εκτελούνται online και καθορίζουν επανειλημμένα τιμές για μεταβλητές απόφασης, όπως τα ανοίγματα τσοκ σε μια εγκατάσταση διεργασίας, επιλύοντας επαναληπτικά ένα πρόβλημα μαθηματικής βελτιστοποίησης, συμπεριλαμβανομένων περιορισμών και ενός μοντέλου του συστήματος που πρόκειται να ελεγχθεί.

Γεωφυσική

Οι τεχνικές βελτιστοποίησης χρησιμοποιούνται τακτικά σε προβλήματα εκτίμησης γεωφυσικών παραμέτρων. Δεδομένου ενός συνόλου γεωφυσικών μετρήσεων, π.χ. σεισμικές καταγραφές, είναι σύνηθες να λυθούν οι φυσικές ιδιότητες και τα γεωμετρικά σχήματα των υποκείμενων πετρωμάτων και ρευστών. Η πλειοψηφία των προβλημάτων στη γεωφυσική είναι μη γραμμικά με ντετερμινιστικές και στοχαστικές μεθόδους να χρησιμοποιούνται ευρέως.

Μοριακή μοντελοποίηση

Η μοριακή βελτιστοποίηση στοχεύει στη βελτίωση του προφίλ ιδιοτήτων ενός αρχικού μορίου. Παίζει σημαντικό ρόλο στη διαδικασία ανακάλυψης και ανάπτυξης φαρμάκων. Ωστόσο, αυτό το πρόβλημα είναι απαιτητικό λόγω (i) της απαίτησης για ταυτόχρονη βελτιστοποίηση πολλαπλών, συχνά αντικρουόμενων ιδιοτήτων, π.χ. φυσικοχημικές ιδιότητες, ιδιότητες ADMET (chemical Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, and Toxicity), ασφάλεια και ισχύς έναντι του στόχου του και (ii) ο μεγάλος χημικός χώρος ^[24] προς εξερεύνηση. Παραδοσιακά, οι χημικοί χρησιμοποιούν τη γνώση, την εμπειρία και τη διαίσθησή τους ^[25] για να εφαρμόσουν χημικούς μετασχηματισμούς στο αρχικό μόριο, για να σχεδιάσουν βελτιωμένα μόρια που έχουν ισορροπία πολλαπλών ιδιοτήτων. Ωστόσο, βασίζεται σε μεγάλο βαθμό στη γνώση του χημικού και συχνά επηρεάζεται από τις προκαταλήψεις του ατόμου. Αυτό μπορεί να περιορίσει τη διαδικασία σχεδιασμού και τις ευκαιρίες εύρεσης βελτιωμένων μορίων σε εύλογο χρονικό διάστημα. Πρόσφατα, διάφορες μέθοδοι βαθιάς μάθησης έχουν χρησιμοποιηθεί και προταθεί για μοριακό σχεδιασμό, π.χ. επαναλαμβανόμενα νευρωνικά δίκτυα - Recurrent Neural Network (RNN) ^[26,27,28] μεταβλητοί αυτοκωδικοποιητές - Variational Autoencoders (VAEs) ^[29,30,31, 32, 33, 34] και δίκτυα γενετικής αντιπαράθεσης - Generative Adversarial Networks (GANs) ^[35, 36, 37, 38, 39]. Για να βελτιωθούν τα παραγόμενα μόρια προς επιθυμητές ιδιότητες, έχουν χρησιμοποιηθεί ενισχυτική μάθηση ^[40], εκπαίδευση σε αντίθεση ^[41,42,43], μάθηση μεταφοράς και διαφορετικές τεχνικές βελτιστοποίησης ^[44]. Τα μοντέλα παραγωγής υπό όρους ^[45] έχουν επίσης προταθεί όπου οι επιθυμητές ιδιότητες ενσωματώνονται ως προϋπόθεση για τον άμεσο έλεγχο της διαδικασίας παραγωγής.



Βιολογία υπολογιστικών συστημάτων

Οι τεχνικές βελτιστοποίησης χρησιμοποιούνται σε πολλές πτυχές της βιολογίας των υπολογιστικών συστημάτων, όπως η κατασκευή μοντέλων, ο βέλτιστος πειραματικός σχεδιασμός, η μεταβολική μηχανική και η συνθετική βιολογία. Ο γραμμικός προγραμματισμός έχει εφαρμοστεί για τον υπολογισμό των μέγιστων δυνατών αποδόσεων των προϊόντων ζύμωσης ^[46] και για να συναχθούν ρυθμιστικά δίκτυα γονιδίων από πολλαπλά σύνολα δεδομένων μικροσυστοιχιών ^[47] καθώς και μεταγραφικά ρυθμιστικά δίκτυα από δεδομένα υψηλής απόδοσης. ^[48] Ο μη γραμμικός προγραμματισμός έχει χρησιμοποιηθεί για την ανάλυση του ενεργειακού μεταβολισμού ^[49] και έχει εφαρμοστεί στη μεταβολική μηχανική και στην εκτίμηση παραμέτρων σε βιοχημικές οδούς. ^[50]

Μηχανική μάθηση

Η μηχανική μάθηση περιλαμβάνει τη χρήση ενός αλγορίθμου για τη μάθηση και τη γενίκευση από ιστορικά δεδομένα προκειμένου να γίνουν προβλέψεις για νέα δεδομένα. Αυτό το πρόβλημα μπορεί να περιγραφεί ως προσέγγιση μιας συνάρτησης που αντιστοιχίζει παραδείγματα εισόδων σε παραδείγματα εξόδων. Η προσέγγιση μιας συνάρτησης μπορεί να λυθεί πλαισιώνοντας το πρόβλημα ως βελτιστοποίηση συνάρτησης. Ένας αλγόριθμος μηχανικής εκμάθησης ορίζει μια παραμετροποιημένη συνάρτηση χαρτογράφησης (π.χ. ένα σταθμισμένο άθροισμα εισόδων) και ένας αλγόριθμος βελτιστοποίησης χρησιμοποιείται για την τροφοδότηση των τιμών των παραμέτρων (π.χ. συντελεστές μοντέλου) που ελαχιστοποιούν το σφάλμα της συνάρτησης όταν χρησιμοποιείται για τη χαρτογράφηση εισόδων στις εκροές. Αυτό σημαίνει ότι κάθε φορά που τοποθετείται ένας αλγόριθμος μηχανικής μάθησης σε ένα σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης, λύνεται ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης. ^[51]

2.4 Περιγραφή επιλεγμένων αλγορίθμων

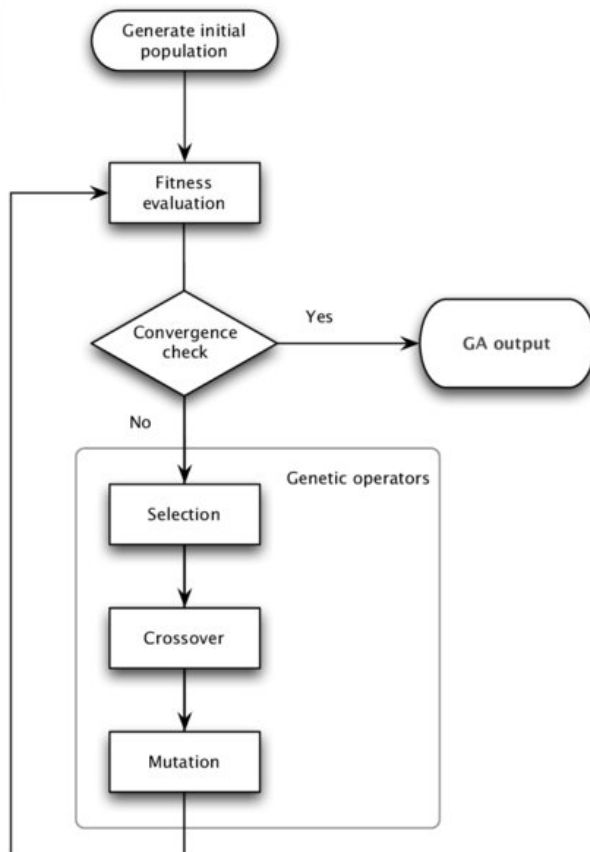
Το σύστημα που αναπτύσσεται στην παρούσα μελέτη αποτελεί ένα γενικό εργαλείο βελτιστοποιημένης βελτιστοποίησης το οποίο είναι εφαρμόσιμο σε οποιοδήποτε πρόβλημα απαιτεί την εύρεση ολικού βέλτιστου. Στη βιβλιογραφία υπάρχει πληθώρα μεταερευτικών αλγορίθμων βελτιστοποίησης οι οποίοι θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για τις ανάγκες μιας εφαρμογής σαν αυτή που παρουσιάζεται. Αναφορικά μερικοί από αυτούς με την αγγλική τους ορολογία είναι: Genetic Algorithms (GAs), Simulated Annealing algorithm (SA), Ant Colony Optimization (ACO), Particle Swarm Optimization (PSO), Gravitational Search Algorithm (GSA), Intelligent water drops algorithm, Firefly Algorithm (FA), Honey Bee Mating Optimization (HBMO), Bat Algorithm (BA), Harmony Search Optimization (HSA), Big Bang-Big Crunch optimization (Bb-By) και Black Hole algorithm (BH) ^[61]. Αν και το σύστημα προς ανάπτυξη είναι δυναμικό και παρέχει τη δυνατότητα να χρησιμοποιηθεί οποιοσδήποτε συνδυασμός αλγορίθμων, έχουν επιλεγθεί οι εξής τέσσερις αλγόριθμοι: Γενετικοί Αλγόριθμοι (Genetic Algorithms), Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα (Firefly Algorithm), Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας (Harmony Search Algorithm), Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας (Black Hole Algorithm).

Γενετικοί Αλγόριθμοι (Genetic Algorithms)

Οι Γενετικοί Αλγόριθμοι είναι μια ευρετική τεχνική αναζήτησης λύσεων ή βελτιστοποίησης, που αρχικά υποκινήθηκε από τη θεωρία του Δαρβίνου της εξέλιξης των ειδών μέσω φυσικής επιλογής. Ένας γενετικός αλγόριθμος χρησιμοποιεί μια



εξαιρετικά αφηρημένη έκδοση εξελικτικών διαδικασιών για να εντοπίσει λύσεις σε δεδομένα προβλήματα. Κάθε αλγόριθμος λειτουργεί σε έναν πληθυσμό τεχνητών χρωμοσωμάτων. Αυτές είναι σειρές ψηφίων σε ένα πεπερασμένο αλφάβητο (συνήθως δυαδικό). Κάθε χρωμόσωμα αντιπροσωπεύει μια λύση σε ένα πρόβλημα και έχει μια καταλληλότητα, δηλαδή έναν πραγματικό αριθμό ή ένα διάνυσμα που είναι ένα μέτρο για το πόσο καλή λύση είναι στο συγκεκριμένο πρόβλημα. Ξεκινώντας με έναν τυχαία δημιουργούμενο πληθυσμό χρωμοσωμάτων, ένας γενετικός αλγόριθμος πραγματοποιεί μια διαδικασία επιλογής και ανασυνδυασμού με βάση την καταλληλότητα για να δημιουργήσει έναν πληθυσμό διάδοχο, την επόμενη γενιά. Κατά τη διάρκεια του ανασυνδυασμού, επιλέγονται τα χρωμοσώματα των γονέων και το γενετικό τους υλικό επανασυνδυάζεται για να παραχθούν απόγονοι. Αυτά στη συνέχεια περνούν στον πληθυσμό διάδοχο. Καθώς αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται, μια ακολουθία διαδοχικών γενεών εξελίσσεται και η μέση καταλληλότητα των χρωμοσωμάτων τείνει να αυξάνεται μέχρι να επιτευχθεί κάποιο κριτήριο σύγκλισης. Με αυτόν τον τρόπο, ένας γενετικός αλγόριθμος “εξελίσσει” την καλύτερη λύση σε ένα δεδομένο πρόβλημα. Οι Γενετικοί Αλγόριθμοι προτάθηκαν για πρώτη φορά από τον John Holland ^[52] ως μέσο για την εύρεση καλών λύσεων σε προβλήματα που κατά τα άλλα ήταν υπολογιστικά δυσεπίλυτα. Το Θεώρημα Σχήματος του Holland, και η σχετική υπόθεση δομικών μονάδων ^[53], παρέχουν μια θεωρητική και εννοιολογική βάση για το σχεδιασμό αποτελεσματικών αλγορίθμων. Αποδείχθηκε επίσης απλή η εφαρμογή τους λόγω της εξαιρετικά αρθρωτής φύσης τους. Ως αποτέλεσμα, το πεδίο αναπτύχθηκε γρήγορα και η τεχνική εφαρμόστηκε με επιτυχία σε ένα ευρύ φάσμα πρακτικών προβλημάτων στην επιστήμη, τη μηχανική και τη βιομηχανία. Η θεωρία των γενετικών αλγορίθμων είναι μια ενεργή και αναπτυσσόμενη περιοχή, με μια σειρά προσεγγίσεων που χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν και να εξηγήσουν φαινόμενα που δεν αναμενόταν από παλαιότερη θεωρία ^[54]. Παράλληλα με αυτό, πιο εξελιγμένες προσεγγίσεις για την κατεύθυνση της εξέλιξης ενός πληθυσμού γενετικού αλγορίθμου στοχεύουν στη βελτίωση της απόδοσης σε κατηγορίες προβλημάτων που είναι γνωστό ότι είναι δύσκολες ^{[55], [56]}.



Εικόνα 11: Διάγραμμα ροής Γενετικού Αλγόριθμου

Ένας γενετικός αλγόριθμος κατασκευάζεται από έναν αριθμό διακριτών στοιχείων. Αυτό είναι ένα ιδιαίτερο πλεονέκτημα γιατί σημαίνει ότι τα τυπικά αυτά του στοιχεία μπορούν να επαναχρησιμοποιηθούν, με πολύ μικρή μεταβολή για την προσαρμογή τους σε πολλούς διαφορετικούς γενετικούς αλγορίθμους, διευκολύνοντας έτσι την εφαρμογή. Οι κύριοι τελεστές που χαρακτηρίζουν έναν Γενετικό Αλγόριθμο είναι η κωδικοποίηση του χρωμοσώματος, η συνάρτηση καταλληλότητας, η επιλογή, ο ανασυνδυασμός και το σχήμα εξέλιξης.

Κωδικοποίηση χρωμοσωμάτων

Ένας γενετικός αλγόριθμος χειρίζεται πληθυσμούς χρωμοσωμάτων, τα οποία είναι αναπαραστάσεις συμβολοσειρών λύσεων σε ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Ένα χρωμόσωμα είναι ένας παραλληλισμός ενός βιολογικού χρωμοσώματος DNA, το οποίο μπορεί να θεωρηθεί ως μια σειρά

γραμμάτων από το αλφάβητο. Μια συγκεκριμένη θέση σε ένα χρωμόσωμα αναφέρεται ως γονίδιο και το γράμμα που εμφανίζεται σε αυτό το σημείο του χρωμοσώματος αναφέρεται ως τιμή αλληλόμορφου ή απλώς αλληλόμορφο. Οποιαδήποτε συγκεκριμένη αναπαράσταση που χρησιμοποιείται για ένα δεδομένο πρόβλημα αναφέρεται ως κωδικοποίηση γενετικού αλγορίθμου του προβλήματος. Ο κλασικός γενετικός χρησιμοποιεί μια αναπαράσταση συμβολοσειράς bit για να κωδικοποιήσει λύσεις. Τα χρωμοσώματα συμβολοσειράς bit αποτελούνται από μια σειρά γονιδίων των οποίων οι τιμές αλληλόμορφων είναι αριθμητικοί χαρακτήρες με εύρος {0,1}. Για προβλήματα όπου συνήθως εφαρμόζονται Γενετικοί Αλγόριθμοι, τα σύνολα λύσεων είναι πεπερασμένα αλλά τόσο μεγάλα που η αξιολόγηση καταλληλότητας όλων των πιθανών λύσεων δεν είναι υπολογιστικά εφικτή. Δεν είναι ασυνήθιστο για έναν Γενετικό Αλγόριθμο να λειτουργεί σε συμβολοσειρές bit μήκους 100, δίνοντας ένα χώρο λύσης που αποτελείται από 100 άτομα. Μεγάλο μέρος της σημασίας ενός συγκεκριμένου χρωμοσώματος για μια συγκεκριμένη εφαρμογή κωδικοποιείται στο δεύτερο τελεστή ενός γενετικού αλγορίθμου, τη συνάρτηση καταλληλότητας.

Καταλληλότητα

Η συνάρτηση καταλληλότητας είναι ένας τελεστής που αξιολογεί την ποιότητα του χρωμοσώματος ως λύση σε ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Κατ' αναλογία με τη βιολογία, το χρωμόσωμα αναφέρεται ως γονότυπος, ενώ η κατάσταση που αντιπροσωπεύει είναι γνωστή ως φαινότυπος. Η διαδικασία μετάφρασης μπορεί να είναι αρκετά περίπλοκη. Κατά τον καθορισμό του προβλήματος προς επίλυση ενός



γενετικού αλγορίθμου, για παράδειγμα, ένα χρωμόσωμα μεταφράζεται σε ένα υποσύνολο καταλληλότητας. Ο υπολογισμός της καταλληλότητας του εκάστοτε χρωμοσώματος αξιολογεί ουσιαστικά την επιτυχία του με βάση διάφορα κριτήρια και στόχους όπως ο χρόνος ολοκλήρωσης και η ελαχιστοποίηση του κόστους. Αυτή η πολυπλοκότητα θυμίζει τη βιολογική εξέλιξη, όπου τα χρωμοσώματα σε ένα μόριο DNA είναι ένα σύνολο οδηγιών για την κατασκευή του φαινοτυπικού οργανισμού. Μια πολύπλοκη σειρά χημικών διεργασιών μετατρέπει μια μικρή συλλογή εμβρυϊκών κυττάρων που περιέχουν το DNA σε έναν πλήρως ανεπτυγμένο οργανισμό, ο οποίος στη συνέχεια «αξιολογείται» ως προς την επιτυχία του να ανταποκρίνεται σε μια σειρά περιβαλλοντικών παραγόντων και επιδράσεων.

Επιλογή

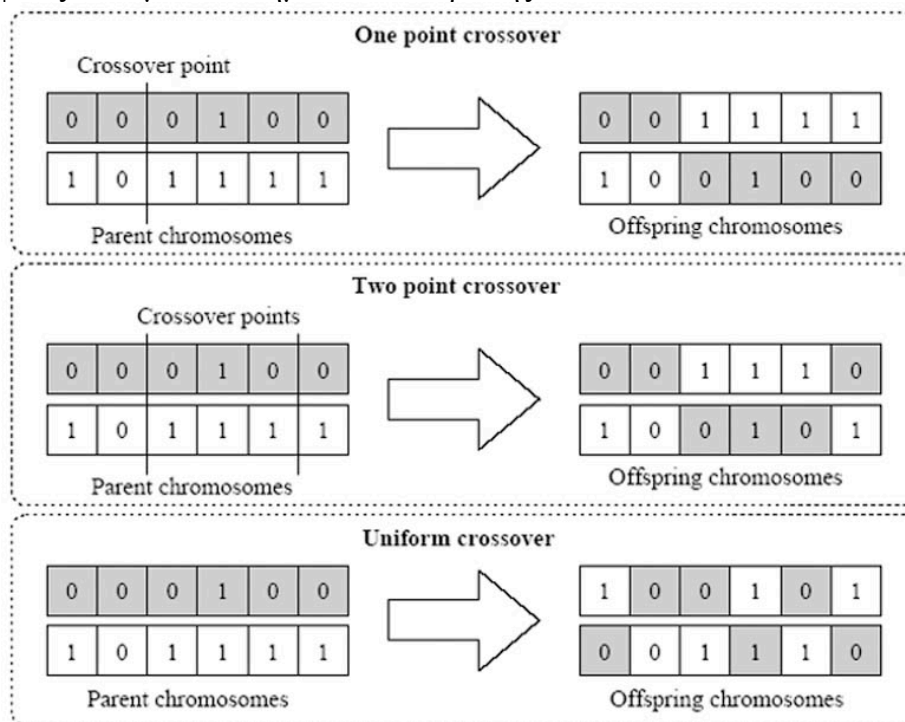
Ένας γενετικός αλγόριθμος χρησιμοποιεί την καταλληλότητα ως παράγοντα αξιολόγησης της ποιότητας των λύσεων που αντιπροσωπεύονται από τα χρωμοσώματα σε έναν πληθυσμό. Το στοιχείο επιλογής έχει σχεδιαστεί για να χρησιμοποιεί την καταλληλότητα για να καθοδηγεί την εξέλιξη των χρωμοσωμάτων με επιλεκτική εστίαση. Τα χρωμοσώματα επομένως επιλέγονται για ανασυνδυασμό με βάση την καταλληλότητα. Τα χρωμοσώματα εκείνα με υψηλότερη καταλληλότητα θα πρέπει να έχουν περισσότερες πιθανότητες επιλογής από τα αντίστοιχα με χαμηλότερη καταλληλότητα, δημιουργώντας έτσι μια επιλεκτικότητα προς τις καλύτερες λύσεις. Η επιλογή γίνεται συνήθως με αντικατάσταση, που σημαίνει ότι τα χρωμοσώματα υψηλής προσαρμογής έχουν την πιθανότητα να επιλεγούν περισσότερες από μία φορές ή ακόμη και να επανασυνδυαστούν με τον εαυτό τους. Η παραδοσιακή μέθοδος επιλογής που χρησιμοποιείται είναι η επιλογή Τροχού Ρουλέτας. Η διαδικασία αυτή εκχωρεί σε κάθε χρωμόσωμα μια πιθανότητα να επιλεγεί ανάλογη με τη σχετική καταλληλότητά του, που είναι η καταλληλότητά του ως ποσοστό του αθροίσματος των καταλληλοτήτων όλων των χρωμοσωμάτων στον πληθυσμό ^[53]. Υπάρχουν πολλά διαφορετικά σχήματα επιλογής. Η Τυχαία Στοχαστική Επιλογή επιλέγει ρητά κάθε χρωμόσωμα αρκετές φορές αντίστοιχα με την ικανότητα του να επιλεγεί βάσει της αναλογικής μεθόδου καταλληλότητας. Η Επιλογή Τουρνουά αρχικά επιλέγει δύο χρωμοσώματα με ομοιόμορφη πιθανότητα και στη συνέχεια επιλέγει αυτό με την υψηλότερη φυσική κατάσταση. Η επιλογή περικοπής απλώς επιλέγει τυχαία από τον πληθυσμό που έχει πρώτα εξαλείψει έναν σταθερό αριθμό από τα λιγότερο προσαρμοσμένα χρωμοσώματα. Για την πλήρη αξιολόγηση των διαφόρων σχημάτων επιλογής που χρησιμοποιούνται αλλά και για καθοδήγηση σχετικά με το πότε κάποιο σχήμα είναι καταλληλότερο να χρησιμοποιηθεί, μπορεί κανείς να ανατρέξει στη βιβλιογραφία ^[56].

Ανασυνδυασμός

Ο ανασυνδυασμός είναι η διαδικασία με την οποία τα χρωμοσώματα που επιλέγονται από έναν αρχικό πληθυσμό επανασυνδυάζονται για να σχηματίσουν μέλη ενός διαδόχου πληθυσμού. Η ιδέα είναι να προσομοιωθεί η ανάμειξη γενετικού υλικού που μπορεί να συμβεί όταν οι οργανισμοί αναπαράγονται. Δεδομένου ότι η επιλογή για ανασυνδυασμό είναι προκατειλημμένη υπέρ της υψηλότερης καταλληλότητας, πιθανολογικά ως αποτέλεσμα θα εξελιχθούν πιο κατάλληλα χρωμοσώματα. Υπάρχουν δύο κύρια χαρακτηριστικά του ανασυνδυασμού, η διασταύρωση χρωμοσωμάτων και η μετάλλαξη. Οι γενετικοί τελεστές είναι στοχαστικοί στη συμπεριφορά τους. Κάθε ένας εφαρμόζεται με μια συγκεκριμένη πιθανότητα και το ακριβές αποτέλεσμα της διασταύρωσης ή της μετάλλαξης είναι επίσης στοχαστικό. Ο τελεστής διασταύρωσης αντιπροσωπεύει την ανάμειξη γενετικού υλικού από δύο επιλεγμένα γονικά



χρωμοσώματα για να παραχθούν ένα ή δύο χρωμοσώματα απόγονοι. Αφού επιλεγούν δύο χρωμοσώματα για ανασυνδυασμό, δημιουργείται ένας τυχαίος αριθμός στο πεδίο $[0,1]$ με ομοιόμορφη πιθανότητα και συγκρίνεται με έναν προκαθορισμένο «ρυθμό διασταύρωσης». Εάν ο τυχαίος αριθμός είναι μεγαλύτερος από το ποσοστό διασταύρωσης, δεν εμφανίζεται διασταύρωση και ο ένας ή και οι δύο γονείς περνούν αμετάβλητοι στο επόμενο στάδιο ή ανασυνδυασμό. Εάν ο ρυθμός διασταύρωσης είναι μεγαλύτερος ή ίσος με τον τυχαίο αριθμό, τότε εφαρμόζεται ο τελεστής διασταύρωσης. Ένας τελεστής διασταύρωσης που χρησιμοποιείται συνήθως είναι η διασταύρωση ενός σημείου. Ένα σημείο διασταύρωσης μεταξύ 0 και N, όπου N το μήκος του χρωμοσώματος, επιλέγεται με ομοιόμορφη πιθανότητα. Στη συνέχεια, τα χρωμοσώματα απόγονοι κατασκευάζονται από τα στοιχεία του πρώτου γονέα που εμφανίζονται πριν από το σημείο διασταύρωσης και τα στοιχεία του δεύτερου γονέα που εμφανίζονται μετά το σημείο διασταύρωσης.



Εικόνα 12: Διαφορετικοί τρόποι ανασυνδυασμού σε ένα χρωμόσωμα Γενετικού Αλγόριθμου

Υπάρχουν πολλές εναλλακτικές μορφές για τη διασταύρωση χρωμοσωμάτων. Η διασταύρωση ενός σημείου γενικεύεται ευθέως σε πράξεις διασταύρωσης 2 ή πολλών σημείων, όπου επιλέγεται μια ακολουθία σημείων διασταύρωσης κατά μήκος του χρωμοσώματος και τα χρωμοσώματα απόγονοι κατασκευάζονται από τις τιμές που προκύπτουν από τους δύο γονείς, ενώ εναλλάσσονται σε κάθε σημείο διασταύρωσης. Η ομοιόμορφη διασταύρωση κατασκευάζει έναν απόγονο επιλέγοντας ομοιόμορφα μεταξύ των τιμών των γονικών χρωμοσωμάτων σε κάθε θέση. Οι αλγόριθμοι διαφέρουν επίσης ως προς το εάν ένα ή περισσότερα παιδιά δημιουργούνται από τη λειτουργία διασταύρωσης. Μετά τη διασταύρωση, το προκύπτον χρωμόσωμα(α) θα περάσουν στο στάδιο της μετάλλαξης.

Οι τελεστές μετάλλαξης ενεργούν σε ένα μεμονωμένο χρωμόσωμα για να αναστρέψουν μία ή περισσότερες τιμές αλληλόμορφων. Στην περίπτωση των χρωμοσωμάτων με συμβολοσειρά bit, ο τελεστής κανονικής μετάλλαξης εφαρμόζεται σε κάθε θέση στο χρωμόσωμα. Ένας τυχαίος αριθμός στο διάστημα $[0,1]$ δημιουργείται με ομοιόμορφη πιθανότητα και συγκρίνεται με έναν προκαθορισμένο «ρυθμό μετάλλαξης». Εάν ο τυχαίος αριθμός είναι μεγαλύτερος από τον ρυθμό μετάλλαξης,

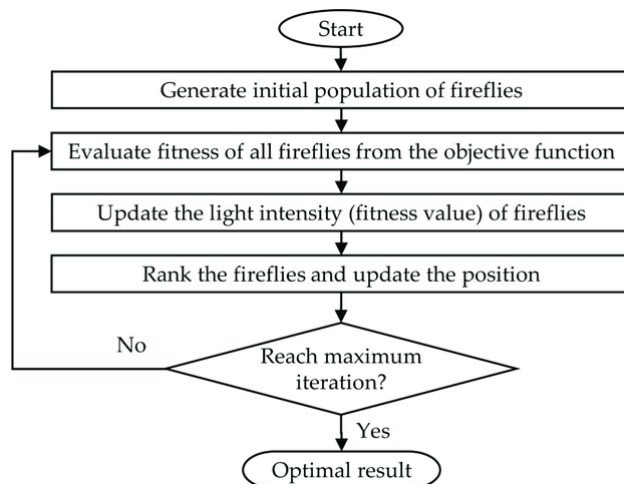


δεν εφαρμόζεται μετάλλαξη σε αυτή τη θέση. Εάν ο ρυθμός μετάλλαξης είναι μεγαλύτερος ή ίσος με τον τυχαίο αριθμό, τότε η τιμή του στοιχείου του εκάστοτε χρωμοσώματος αντιστρέφεται από το 0 στο 1 ή το αντίστροφο.

Εξέλιξη

Μετά τον ανασυνδυασμό, τα προκύπτοντα χρωμοσώματα περνούν στον διάδοχο πληθυσμό. Στη συνέχεια, οι διαδικασίες επιλογής και ανασυνδυασμού επαναλαμβάνονται μέχρι να παραχθεί ένας πλήρης διάδοχος πληθυσμός. Σε εκείνο το σημείο ο διάδοχος πληθυσμός γίνεται ο πληθυσμός αναφοράς (η επόμενη γενιά). Ο γενετικός αλγόριθμος επαναλαμβάνεται με κάθε επανάληψη να χαρακτηρίζεται ως γενιά, μέχρι να επιτευχθούν τα κατάλληλα κριτήρια σύγκλισης. Αυτά μπορεί να περιλαμβάνουν έναν σταθερό αριθμό γενεών που έχουν παρέλθει, παρατηρηθείσα σύγκλιση σε μια λύση καλύτερης καταλληλότητας ή τη δημιουργία μιας λύσης που ικανοποιεί πλήρως ένα σύνολο περιορισμών. Υπάρχουν πολλά εξελικτικά σχήματα που μπορούν να χρησιμοποιηθούν, ανάλογα με τον βαθμό στον οποίο τα χρωμοσώματα από τον πληθυσμό ανά χρονική στιγμή επιτρέπεται να περάσουν αμετάβλητα στον διάδοχο πληθυσμό. Αυτά κυμαίνονται από την πλήρη αντικατάσταση, όπου όλα τα μέλη του διαδόχου πληθυσμού παράγονται μέσω επιλογής και ανασυνδυασμού έως τη σταθερή κατάσταση, όπου ο διάδοχος πληθυσμός δημιουργείται δημιουργώντας ένα νέο χρωμόσωμα σε κάθε γενιά και χρησιμοποιώντας το για να αντικαταστήσει ένα λιγότερο κατάλληλο μέλος του πληθυσμού. Η επιλογή του εξελικτικού σχήματος είναι μια σημαντική πτυχή του σχεδιασμού των γενετικών αλγορίθμων και θα εξαρτηθεί από τη φύση του χώρου λύσης που αναζητείται. Ένα ευρέως χρησιμοποιούμενο σχήμα είναι η αντικατάσταση-με-ελιτισμό. Αυτή είναι σχεδόν πλήρης αντικατάσταση εκτός από το ότι τα καλύτερα ένα ή δύο άτομα από τον πληθυσμό προέλευσης διατηρούνται στον διάδοχο πληθυσμό. Αυτό το σχήμα αποτρέπει την απώλεια λύσεων της υψηλότερης σχετικής καταλληλότητας από την επόμενη γενιά μέσω της μη ντετερμινιστικής διαδικασίας επιλογής.

Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα (Firefly Algorithm)



Εικόνα 13: Διάγραμμα ροής για τον Αλγόριθμο Πυγολαμπίδα

Ο Αλγόριθμος πυγολαμπίδα παρουσιάστηκε για πρώτη φορά από τον Xin-She Yang ^[58]. Η έμπνευση για τον αλγόριθμο αυτό προήλθε από τις πυγολαμπίδες και τον τρόπο με τον οποίο χρησιμοποιούν το φως τους. Το φως που αναβοσβήνει παράγεται με μια διαδικασία βιοφωταύγειας και ο πραγματικός τρόπος λειτουργίας τέτοιων συστημάτων σηματοδότησης συζητείται ακόμη. Ωστόσο, δύο θεμελιώδεις λειτουργίες τέτοιων λειτουργιών φωτός είναι να διευκολύνουν το ζευγάρωμα (επικοινωνία), και να

προσελκύσουν πιθανά θηράματα. Επιπλέον, το γεγονός πως το φως τους αναβοσβήνει μπορεί επίσης να χρησιμεύσει ως προστατευτικός προειδοποιητικός μηχανισμός. Η ρυθμική εναλλαγή του φωτός, ο ρυθμός με τον οποίο αναβοσβήνει και ο χρόνος αποτελούν μέρος του συστήματος σήματος που φέρνει και τα δύο φύλα μαζί. Τα



θηλυκά ανταποκρίνονται στο μοναδικό μοτίβο ενός αρσενικού να αναβοσβήνει το οποίο ανήκει στο είδος τους, ενώ σε ορισμένα είδη όπως το *photuris*, οι θηλυκές πυγολαμπίδες μπορούν να μιμηθούν το μοτίβο ζευγαρώματος άλλων ειδών ώστε να δελεάσουν και να φάνε την αρσενική πυγολαμπίδα που μπορεί να μπερδέψει το φως ως πιθανό κατάλληλο σύντροφο.

Γνωρίζουμε ότι η ένταση του φωτός σε μια συγκεκριμένη απόσταση r από την πηγή φωτός υπακούει στο νόμο του αντίστροφου τετραγώνου. Δηλαδή η ένταση φωτός $I(r)$ μειώνεται, καθώς η απόσταση r αυξάνεται. Επιπλέον, ο αέρας απορροφά μέρος του φωτός, το οποίο γίνεται όλο και πιο αδύναμο όσο αυξάνεται η απόσταση. Ο συνδυασμός των δύο αυτών παραγόντων κάνει τις περισσότερες πυγολαμπίδες ορατές μόνο σε περιορισμένη απόσταση, συνήθως αρκετές εκατοντάδες μέτρα τη νύχτα, κάτι που συνήθως είναι αρκετά καλό για τις πυγολαμπίδες. Το φως που αναβοσβήνει μπορεί να διαμορφωθεί με τέτοιο τρόπο ώστε να συνδέεται με την αντικειμενική συνάρτηση προς βελτιστοποίηση, η οποία καθιστά δυνατή τη διαμόρφωση αλγορίθμων βελτιστοποίησης για την επίλυσή τους.

Μερικά από τα χαρακτηριστικά των πυγολαμπίδων που αναβοσβήνουν μπορούν να αξιοποιηθούν για την ανάπτυξη αλγορίθμων. Χάριν απλότητας στην περιγραφή του Αλγορίθμου Πυγολαμπίδας χρησιμοποιούνται οι ακόλουθοι τρεις εξιδανικευμένοι κανόνες:

- **Όλες οι πυγολαμπίδες μπορούν να έλκονται από άλλες πυγολαμπίδες ανεξάρτητα από το φύλο τους,**
- **Η ελκυστικότητα μεταξύ των πυγολαμπίδων είναι ανάλογη με τη φωτεινότητά τους,** άρα για οποιοσδήποτε δύο πυγολαμπίδες που αναβοσβήνουν, η λιγότερο φωτεινή θα κινηθεί προς τη φωτεινότερη. Η ελκυστικότητα είναι ανάλογη με τη φωτεινότητα και ελαττώνονται ανάλογα όσο η απόσταση αυξάνεται. Εάν δεν υπάρχει πιο φωτεινή από μια συγκεκριμένη πυγολαμπίδα ανάλογα και με την απόσταση, τότε όλες οι πυγολαμπίδες θα κινηθούν τυχαία.
- **Η φωτεινότητα μιας πυγολαμπίδας επηρεάζεται ή καθορίζεται από την προσαρμογή της σε μια αντικειμενική συνάρτηση.** Για πρόβλημα μεγιστοποίησης, η φωτεινότητα μπορεί απλώς να είναι ανάλογη με την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης. Άλλες μορφές της φωτεινότητας μπορούν να οριστούν με παρόμοιο τρόπο όπως η συνάρτηση καταλληλότητας στους γενετικούς αλγόριθμους.

Στον αλγόριθμο πυγολαμπίδας, υπάρχουν δύο σημαντικά ζητήματα: η διακύμανση της έντασης του φωτός και η διατύπωση της ελκυστικότητας. Μπορεί να γίνει η υπόθεση ότι η ελκυστικότητα μιας πυγολαμπίδας καθορίζεται από τη φωτεινότητά της η οποία με τη σειρά της σχετίζεται με την κωδικοποιημένη αντικειμενική συνάρτηση. Από τη στοιχειώδη φυσική είναι σαφές ότι η ένταση του φωτός είναι αντιστρόφως ανάλογη με το τετράγωνο της απόστασης από την πηγή ^[59]. Επιπλέον, όταν το φως διέρχεται από ένα μέσο με συντελεστή απορρόφησης φωτός, μεταβάλλεται ανάλογα με την απόσταση όπως δίνεται παρακάτω:

$$I(r) = I_0 e^{-\gamma r^2}$$

Όπου I_0 είναι η ένταση στο σημείο πηγής.

Ομοίως, η ελκυστικότητα μιας πυγολαμπίδας μπορεί να οριστεί ως εξής:

$$\beta(r) = \beta_0 e^{-\gamma r^2}$$



Όπου β_0 είναι η ελκυστικότητα στο $r = 0$.

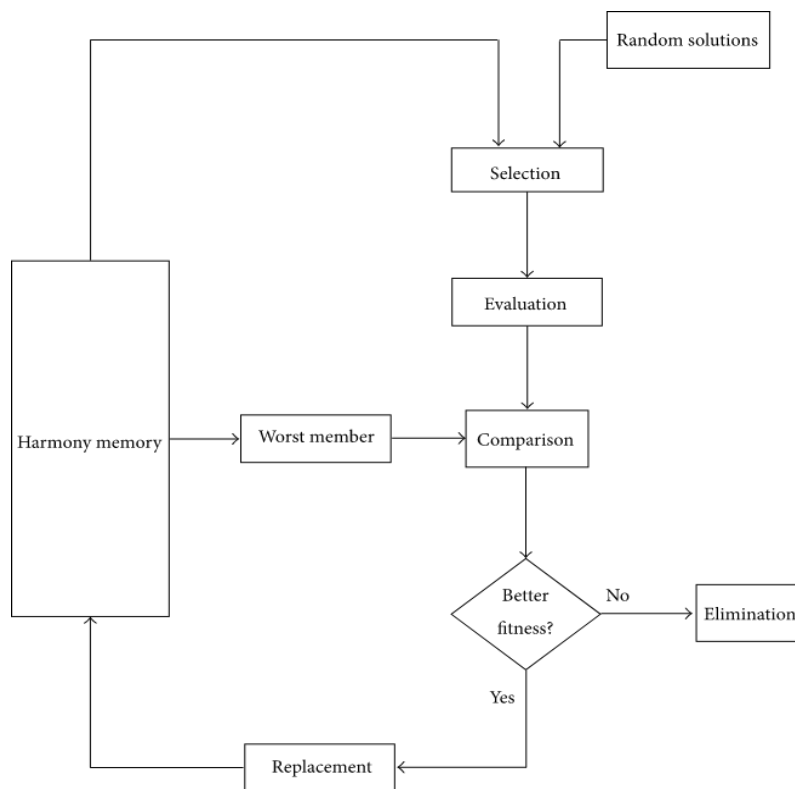
Εάν μια πυγολαμπίδα που βρίσκεται στο i είναι πιο φωτεινή από μια άλλη πυγολαμπίδα που βρίσκεται στο j , η πυγολαμπίδα που βρίσκεται στο i θα κινηθεί προς το j . Η ανανεωμένη θέση της πυγολαμπίδας που βρίσκεται στο i θα γίνει ως εξής:

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_i + \beta_0 e^{-\gamma r_{ij}^2} (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) + \alpha \left(\text{rand} - \frac{1}{2} \right)$$

Ο τελευταίος όρος είναι ένας όρος τυχαιοποίησης που είναι μια παράμετρος τυχαιοποίησης με βάση το α , ενώ ο δεύτερος όρος οφείλεται στην έλξη του προς το j . Σύμφωνα με το [58] για πρακτικές χρήσεις μπορεί να ληφθεί ως μονάδα.

Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας (Harmony Search Algorithm)

Αρχικά προτάθηκε από τους Geem et al. το 2001 [60], η μέθοδος Harmony Search (HS) είναι εμπνευσμένη από τις βασικές αρχές του μουσικού αυτοσχεδιασμού. Η εύρεση αρμονίας έχει τα διακριτικά χαρακτηριστικά της απλότητας ενός αλγορίθμου και της αποτελεσματικότητας αναζήτησης. Όπως είναι γνωστό, όταν οι μουσικοί συνθέτουν την αρμονία, συνήθως δοκιμάζουν διάφορους πιθανούς συνδυασμούς των μουσικών τόνων που είναι αποθηκευμένοι στη μνήμη τους. Αυτή



Εικόνα 14: Διάγραμμα ροής Αλγορίθμου Εύρεσης Αρμονίας

η αναζήτηση για την τέλεια αρμονία είναι πράγματι ανάλογη με τη διαδικασία εύρεσης των βέλτιστων λύσεων σε προβλήματα μηχανικής. Η μέθοδος Εύρεσης Αρμονίας είναι στην πραγματικότητα εμπνευσμένη από τις αρχές λειτουργίας του αυτοσχεδιασμού αρμονίας [60]. Η εικόνα 14 δείχνει το διάγραμμα ροής της βασικής μεθόδου Εύρεσης Αρμονίας, στην οποία εμπλέκονται τέσσερα κύρια βήματα.

Βήμα 1. Αρχικοποίηση της μνήμης (HM):

Η αρχική μνήμη αποτελείται από έναν ορισμένο αριθμό τυχαία δημιουργούμενων λύσεων στα υπό εξέταση προβλήματα βελτιστοποίησης. Για ένα πρόβλημα διαστάσεων N , μια HM με μέγεθος μπορεί να αναπαρασταθεί ως εξής:



$$HM = \begin{bmatrix} x_1^1, x_2^1, \dots, x_n^1 \\ x_1^2, x_2^2, \dots, x_n^2 \\ \vdots \\ x_1^{HMS}, x_2^{HMS}, \dots, x_n^{HMS} \end{bmatrix},$$

όπου:

$$[x_1^i, x_2^i, \dots, x_n^i] \quad (i = 1, 2, \dots, HMS)$$

είναι υποψήφια λύση.

Βήμα 2. Αυτοσχεδιασμός νέας λύσης μέσα από την HM:

Κάθε στοιχείο αυτής της λύσης λαμβάνεται με βάση τον ρυθμό συνεκτίμησης της μνήμης – Harmony Memory Consideration Rate (HMCR). Το HMCR ορίζεται ως η πιθανότητα επιλογής ενός στοιχείου από το σύνολο των αρμονιών στη μνήμη, με το 1-HMCR να είναι η πιθανότητα να δημιουργηθεί τυχαία. Εάν προέρχεται από την HM, επιλέγεται από τη διάσταση ενός τυχαίου μέλους HM και μεταλλάσσεται περαιτέρω σύμφωνα με το Pitching Adjust Rate (PAR). Το PAR καθορίζει την πιθανότητα να μεταλλαχθεί μια υποψήφια αρμονία-λύση από την HM. Όπως μπορούμε να δούμε, ο αυτοσχεδιασμός είναι μάλλον παρόμοιος με την παραγωγή απογόνων στους Γενετικούς Αλγόριθμους με τις λειτουργίες μετάλλαξης και διασταύρωσης. Ωστόσο, στους Γενετικούς Αλγόριθμους δημιουργούνται νέα χρωμοσώματα χρησιμοποιώντας μόνο ένα (μετάλλαξη) ή δύο (απλή διασταύρωση) υπάρχοντα, ενώ η δημιουργία νέων λύσεων στη μέθοδο HS κάνει πλήρη χρήση όλων των στοιχείων της HM.

Βήμα 3. Ενημέρωση της HM:

Αξιολογείται η νέα λύση από το Βήμα 2. Εάν έχει καλύτερη φυσική κατάσταση από αυτή του χειρότερου μέλους στο HM, θα το αντικαταστήσει. Διαφορετικά, εξαλείφεται.

Βήμα 4. Επανάληψη των βημάτων 2 και 3 μέχρι να ικανοποιηθεί ένα προκαθορισμένο κριτήριο τερματισμού, για παράδειγμα, ο μέγιστος αριθμός επαναλήψεων.

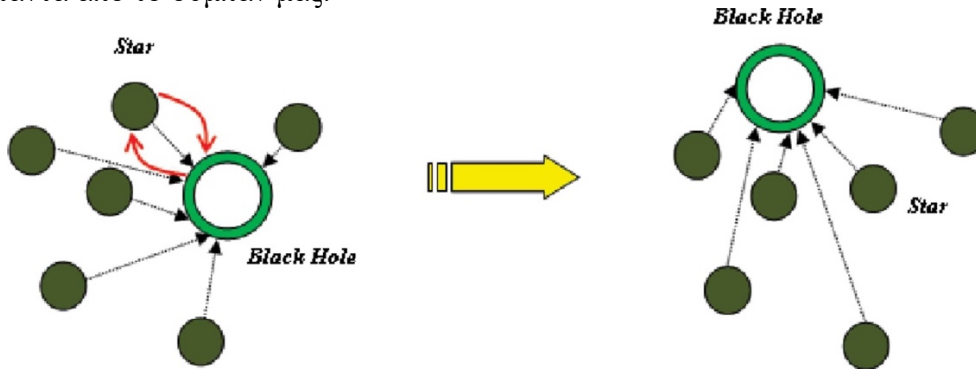
Παρόμοια με τους Γενετικούς Αλγόριθμους και τους μεταευρετικούς αλγόριθμους που βασίζονται σε σμήνη, η μέθοδος HS είναι μια τεχνική τυχαίας αναζήτησης. Δεν απαιτεί προηγούμενες γνώσεις, όπως οι πληροφορίες κλίσης των αντικειμενικών συναρτήσεων. Ωστόσο, διαφορετικά από αυτές τις προσεγγίσεις που βασίζονται στον πληθυσμό, χρησιμοποιεί μόνο μια μνήμη αναζήτησης για να εξελιχθεί. Επομένως, η μέθοδος HS έχει το χαρακτηριστικό γνώρισμα της υπολογιστικής απλότητας.

Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας (Black Hole Algorithm)

Μια μαύρη τρύπα είναι μια περιοχή του χωροχρόνου (x, y, z, t) της οποίας το βαρυντικό πεδίο είναι τόσο ισχυρό που τίποτα δεν μπορεί να ξεφύγει από αυτήν. Η θεωρία και η αρχή της γενικής σχετικότητας προβλέπει ότι μια αρκετά συμπαγής μάζα θα παραμορφώσει τον χωροχρόνο για να σχηματίσει μια μαύρη τρύπα. ^[61] Γύρω από μια μαύρη τρύπα, υπάρχει μια μαθηματικά καθορισμένη επιφάνεια που ονομάζεται ορίζοντας γεγονότων που σηματοδοτεί το σημείο μη επιστροφής. Εάν κάτι κινηθεί κοντά στον ορίζοντα γεγονότων ή διασχίσει την ακτίνα Schwarzschild, θα απορροφηθεί στη μαύρη τρύπα και θα εξαφανιστεί μόνιμα. Η ύπαρξη μαύρων οπών μπορεί να διακριθεί από την επίδρασή τους στα αντικείμενα που τις περιβάλλουν. Η τρύπα ονομάζεται μαύρη επειδή απορροφά όλο το φως που προσπίπτει στον ορίζοντα, χωρίς να αντανακλάται τίποτα, ακριβώς όπως ένα τέλειο μαύρο σώμα στη θερμοδυναμική. Μια μαύρη τρύπα έχει μόνο τρεις ανεξάρτητες φυσικές ιδιότητες: τη



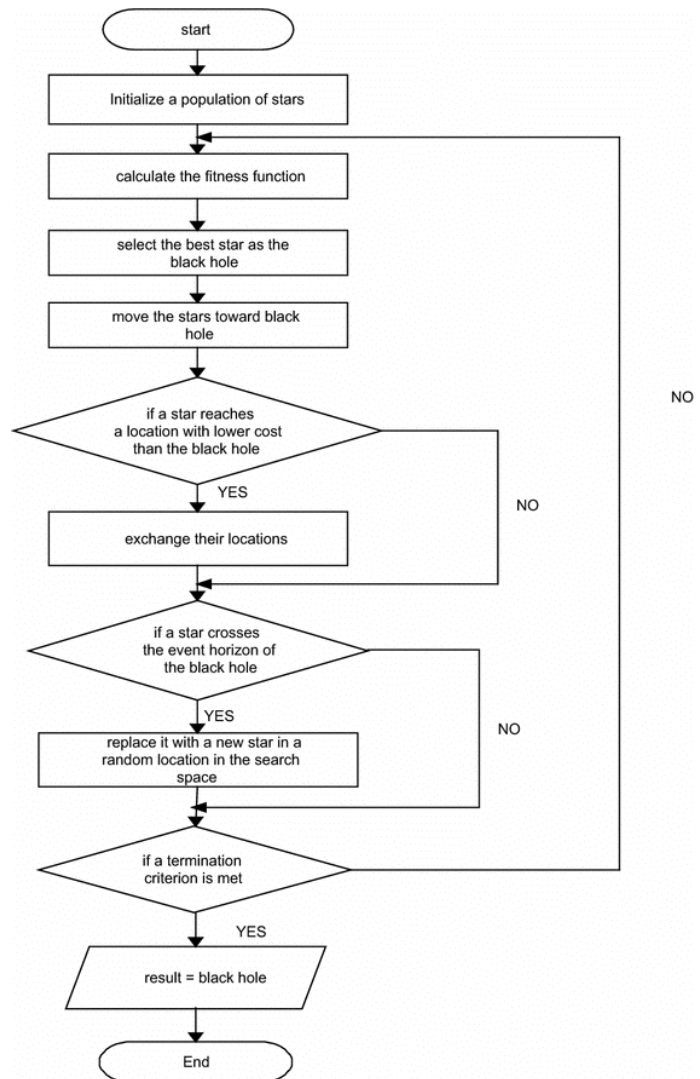
μάζα της μαύρης τρύπας (M), το φορτίο (Q) και τη στροφορμή (J). Μια φορτισμένη μαύρη τρύπα απωθεί τα φορτία όπως κάθε άλλο φορτισμένο αντικείμενο σε δεδομένο χώρο. Οι απλούστερες μαύρες τρύπες έχουν μάζα αλλά δεν έχουν ούτε ηλεκτρικό φορτίο ούτε στροφορμή [61]. Η βασική ιδέα μιας μαύρης τρύπας είναι απλώς μια περιοχή του διαστήματος που έχει τόσο μεγάλη μάζα συγκεντρωμένη σε αυτήν που δεν υπάρχει τρόπος για ένα κοντινό αντικείμενο να ξεφύγει από τη βαρυτική αυτή έλξη. Οτιδήποτε πέφτει σε μια μαύρη τρύπα, συμπεριλαμβανομένου του φωτός, έχει φύγει για πάντα από το σύμπαν μας.



Εικόνα 15: Αναπαράσταση της συσχέτισης των Αστεριών με τη Μαύρη τρύπα σε έναν αλγόριθμο Μαύρης Τρύπας

Για τη δημιουργία ενός αλγορίθμου βελτιστοποίησης του οποίου η δομή βασίζεται στις φυσικές αρχές οι οποίες διέπουν μια μαύρη τρύπα, τα βασικά στοιχεία που τον διέπουν επιμερίζονται σε: Μαύρη τρύπα, Αστέρια, Κίνηση.

- **Μαύρη τρύπα:** Στον αλγόριθμο της μαύρης τρύπας, ο καλύτερος υποψήφιος μεταξύ όλων των υποψηφίων για επανάληψη επιλέγεται ως μαύρη τρύπα.
- **Αστέρια:** Όλοι οι άλλοι υποψήφιοι σχηματίζουν τα κανονικά αστέρια. Η δημιουργία της μαύρης τρύπας είναι ένας από τους πραγματικούς υποψηφίους του πληθυσμού.
- **Κίνηση:** Στη συνέχεια, όλοι οι υποψήφιοι μετακινούνται προς τη μαύρη τρύπα με βάση την τρέχουσα θέση τους και έναν τυχαίο αριθμό.



Εικόνα 16: Διάγραμμα ροής Αλγόριθμου Μαύρης Τρύπας



Πορεία εξέλιξης για κάθε επανάληψη:

1. Ο αλγόριθμος μαύρης τρύπας ξεκινά με έναν αρχικό πληθυσμό υποψήφιων λύσεων σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης και μια αντικειμενική συνάρτηση που υπολογίζεται για αυτές.
2. Σε κάθε επανάληψη της Μαύρης Τρύπας, ο καλύτερος υποψήφιος επιλέγεται να είναι η μαύρη τρύπα και οι υπόλοιποι σχηματίζουν τα κανονικά αστέρια. Μετά τη διαδικασία αρχικοποίησης, η μαύρη τρύπα αρχίζει να τραβάει αστέρια γύρω της.
3. Εάν ένα αστέρι πλησιάσει πολύ τη μαύρη τρύπα, θα απορροφηθεί από αυτή και θα φύγει για πάντα. Σε μια τέτοια περίπτωση, ένα νέο αστέρι (υποψήφια λύση) δημιουργείται τυχαία και τοποθετείται στον χώρο αναζήτησης και ξεκινά μια νέα αναζήτηση.

Υπολογισμός της καταλληλότητας της λύσης

Έχοντας τον αρχικό πληθυσμό $P(x)=\{xt1,xt2,xt3,\dots,xtn\}$ τυχαία δημιουργημένων υποψήφιων λύσεων (τα αστέρια), και τοποθετημένων στον χώρο αναζήτησης κάποιου προβλήματος ή συνάρτησης υπολογίζεται η συνολική καταλληλότητα του πληθυσμού:

$$f_i = \sum_{i=1}^{pop_size} eval(p(t))$$

$$f_{BH} = \sum_{i=1}^{pop_size} eval(p(t))$$

Όπου f_i και f_{BH} είναι οι τιμές καταλληλότητας της μαύρης τρύπας και του αστέρα i στον αρχικοποιημένο πληθυσμό. Μετά τον υπολογισμό καταλληλότητας όλων των ατόμων του πληθυσμού επιλέγεται ο καλύτερος υποψήφιος (από τα υπόλοιπα αστέρια) ο οποίος έχει την καλύτερη τιμή καταλληλότητας, για να πάρει τη θέση της μαύρης τρύπας στο χώρο λύσεων. Αφού η μαύρη τρύπα έχει την ικανότητα να απορροφά τα αστέρια που την περιβάλλουν, μετά την προετοιμασία της πρώτης μαύρης τρύπας και των αστεριών, η μαύρη τρύπα αρχίζει να απορροφά τα αστέρια γύρω της και όλα τα αστέρια αρχίζουν να κινούνται προς τη μαύρη τρύπα στο χώρο λύσεων, με προκαθορισμένο διανυσματικό βήμα.

Ρυθμός απορρόφησης αστεριών

Η μαύρη τρύπα αρχίζει να απορροφά τα αστέρια γύρω της και όλα τα αστέρια αρχίζουν να κινούνται προς τη μαύρη τρύπα. Η απορρόφηση των άστρων από τη μαύρη τρύπα διατυπώνεται ως εξής:

$$X_i(t) = X_i(t) + rand \times (X_{BH} - X_i(t))$$

όπου $i = 1,2,3,\dots,n$, $X_i(t)$ και $X_i(t+1)$ είναι οι θέσεις του αστέρα i στις επαναλήψεις t και $t + 1$ αντίστοιχα. X_{BH} είναι η θέση της μαύρης τρύπας στο χώρο αναζήτησης και $rand$ τυχαίος αριθμός στο διάστημα $[0, 1]$. N είναι ο αριθμός των αστεριών (υποψήφιες λύσεις).

Ενώ κινείται προς τη μαύρη τρύπα, ένα αστέρι μπορεί να φτάσει σε μια τοποθεσία με χαμηλότερο κόστος από τη μαύρη τρύπα κατά αντιστοιχία με την αντικειμενική συνάρτηση. Σε μια τέτοια περίπτωση, η μαύρη τρύπα μετακινείται στη θέση αυτού του αστεριού και αντιστροφα. Στη συνέχεια, ο αλγόριθμος της μαύρης τρύπας θα συνεχίσει



με τη μαύρη τρύπα στη νέα θέση και στη συνέχεια τα αστέρια αρχίζουν να κινούνται προς αυτή τη νέα θέση.

Ορίζοντας γεγονότων

Στον αλγόριθμο μαύρης τρύπας, η πιθανότητα διέλευσης του ορίζοντα γεγονότων των κινούμενων αστεριών προς τη μαύρη τρύπα χρησιμοποιείται για τη συλλογή του βέλτιστου σημείου δεδομένων από τον χώρο αναζήτησης του προβλήματος. Κάθε αστέρι (υποψήφια λύση) που διασχίζει τον ορίζοντα γεγονότων της μαύρης τρύπας θα απορροφάται από τη μαύρη τρύπα και κάθε φορά που ο υποψήφιος (αστέρι) πεθαίνει, ένα άλλο υποψήφιο δείγμα λύσης (αστέρι) συμπληρώνεται και κατανέμεται τυχαία στο χώρο αναζήτησης του καθορισμένου προβλήματος για τη μετάβαση σε μια νέα αναζήτηση στο χώρο λύσης. Η αντικατάσταση αυτή πραγματοποιείται ώστε να παραμείνει σταθερός ο αριθμός των υποψήφιων λύσεων. Η επόμενη επανάληψη λαμβάνει χώρα αφού όλα τα αστέρια έχουν μετακινηθεί.



Εικόνα 17: Ορίζοντας γεγονότων μιας μαύρης τρύπας

Η ακτίνα του ορίζοντα γεγονότων στον αλγόριθμο της μαύρης τρύπας υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την ακόλουθη εξίσωση:

$$R = \frac{f_{BH}}{\sum_{i=1}^N f_i}$$

Όταν η διανυσματική απόσταση μεταξύ μιας υποψήφιας λύσης και της μαύρης τρύπας (καλύτερος υποψήφιος) είναι μικρότερη από R , αυτός ο υποψήφιος συμπύσσεται και ένας νέος υποψήφιος δημιουργείται και κατανέμεται τυχαία στον χώρο αναζήτησης.

Πλεονεκτήματα χρήσης των αλγορίθμων μαύρης τρύπας:

Ο αλγόριθμος μαύρης τρύπας έχει μια απλή δομή και είναι εύκολο να εφαρμοστεί για πλήθος προβλημάτων βελτιστοποίησης. Ακόμη, είναι απαλλαγμένος από ζητήματα εξειδικευμένων παραμέτρων συντονισμού, πέρα από τις βασικές που διέπουν τους μεταερευνητικούς αλγόριθμους. Αν γίνει μια σύγκριση, στον Γενετικό Αλγόριθμο, για τη βελτίωση των δυνατοτήτων μικρορύθμισης του αλγορίθμου, κάτι απαραίτητο για προβλήματα υψηλής ακρίβειας έναντι της παραδοσιακής αναπαράστασης δυαδικής σειράς χρωμοσωμάτων, χρειάζεται ένας νέος τελεστής μετάλλαξης έναντι του παραδοσιακού ο οποίος χρησιμοποιούσε μόνο τοπική γνώση, δηλαδή κολλούσε στην τοπική ελάχιστη βέλτιστη τιμή. Ο αλγόριθμος της Μαύρης Τρύπας συγκλίνει στο συνολικό βέλτιστο σε όλες τις εκτελέσεις, ενώ οι άλλοι ευρετικοί αλγόριθμοι μπορεί να παγιδευτούν σε τοπικές βέλτιστες λύσεις.

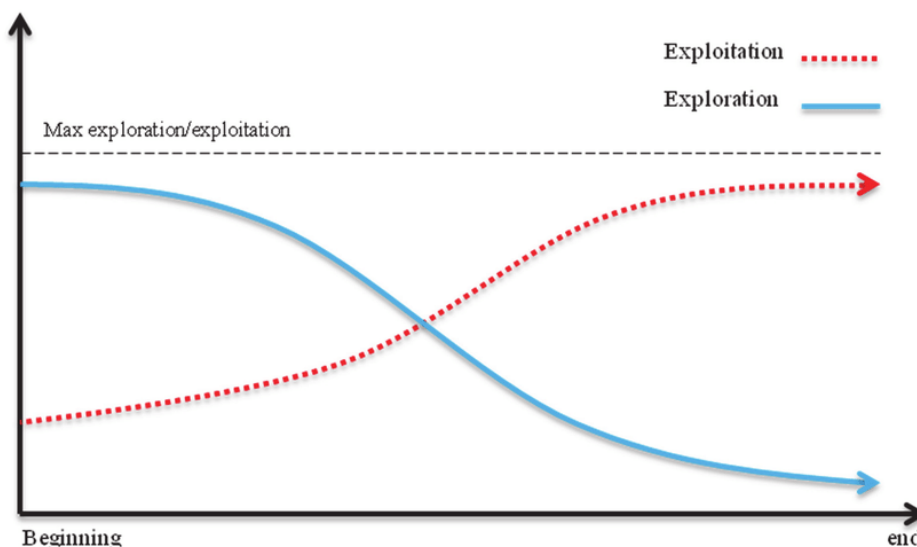


3. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΥΛΟΠΟΙΗΣΗΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ

Έχοντας καθορίσει το πεδίο έρευνας ως αυτό της χρήσης αλγορίθμων βελτιστοποίησης, ο στόχος της παρούσας μελέτης είναι η εξέλιξη του τρόπου αξιοποίησής τους. Όπως αναφέρεται και στη βιβλιογραφική ανασκόπηση, οι αλγόριθμοι αυτοί αξιοποιούνται σε ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών των θετικών επιστημών για την σχεδίαση αλλά και τη ρύθμιση των παραμέτρων σχεδιασμού. Εισάγοντας έναν νέο τρόπο αξιοποίησής τους, ο σκοπός είναι η δημιουργία ενός εργαλείου το οποίο θα βελτιστοποιεί όχι μόνο το πρόβλημα προς επίλυση, αλλά και την ίδια τη διαδικασία βελτιστοποίησης. Για την επίτευξη του παραπάνω στόχου, επιλέχθηκε ένα σύνολο αλγορίθμων βελτιστοποίησης με διαφορετικά χαρακτηριστικά, οι οποίοι αναλαμβάνουν να επιλύσουν το ίδιο πρόβλημα. Στη συνέχεια, μέσα από ένα καινοτόμο σχήμα εφαρμογής, οι αλγόριθμοι αυτοί συνεργάζονται με στόχο την επίλυση ενός προβλήματος βελτιστοποίησης, αποσκοπώντας σε μια βέλτιστη δυνατή λύση, στο μικρότερο δυνατό αριθμό αξιολόγησης μιας αντικειμενικής συνάρτησης, παρουσιάζοντας παράλληλα μεγιστοποίηση και της εξερεύνησης του πεδίου λύσεων και της εντατικοποίησης στην αναζήτηση τοπικών βέλτιστων.

3.1 Επιλογή αλγορίθμων και αδιαστατοποίηση αρχικών τιμών

Για τις ανάγκες της μελέτης επιλέχθηκαν τέσσερις στοχαστικοί αλγόριθμοι βελτιστοποίησης: Γενετικός Αλγόριθμος, Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα, Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας και Αλγόριθμος μαύρης τρύπας. Οι αλγόριθμοι αυτοί απαρτίζονται από έναν αριθμό παραμέτρων εισόδου, οι οποίες διαφοροποιούνται για κάθε αλγόριθμο, ανάλογα με την αρχή και τη φιλοσοφία λειτουργίας του. Για να δημιουργηθεί μια μέθοδος που θα μπορεί να τους καλεί ταυτόχρονα και συνεργατικά θα πρέπει αυτές οι τιμές να αναγνωριστούν και να αδιαστατοποιηθούν με βάση τη συσχέτισή τους. Όπως αναφέρεται και στη βιβλιογραφία, όλοι οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης διέπονται από δύο βασικά χαρακτηριστικά: Το βαθμό εξερεύνησης του χώρου λύσεων (exploration) και το βαθμό εντατικοποίησης συγκεκριμένων τοπικών περιοχών της λύσης (exploitation). Με βάση αυτή την αρχή, η αδιαστατοποίηση όλων των επιμέρους παραμέτρων εισόδου για το σύνολο των αλγορίθμων, θα γίνει εστιάζοντας στο ποιο από τα δύο αυτά βασικά χαρακτηριστικά επηρεάζουν.



Εικόνα 18: Συσχέτιση του Exploration με το Exploitation



Η διαδικασία ξεκινά με την αναγνώριση των παραμέτρων αυτών που είναι κοινές για όλους τους επιλεγμένους αλγορίθμους:

- **Αντικειμενική συνάρτηση:** Η συνάρτηση προς λύση είναι κοινή για όλους τους αλγορίθμους. Οι αλγόριθμοι αξιολογούν την ποιότητα των εκάστοτε λύσεων αναφορικά με την ικανότητά των λύσεων αυτών να ελαχιστοποιούν ή να μεγιστοποιούν την αντικειμενική συνάρτηση. Όλα τα στοιχεία σε κάθε επανάληψη της διαδικασίας των αλγορίθμων αξιολογούνται μέσα από την αντικειμενική συνάρτηση.
- **Διαστάσεις Προβλήματος:** Οι διαστάσεις οι οποίες χαρακτηρίζουν την αντικειμενική συνάρτηση είναι κοινές για όλους τους αλγορίθμους. Κάθε πρόβλημα μπορεί να είναι από 1 ως N διαστάσεις, με την κάθε διάσταση να αφορά μια ανεξάρτητη μεταβλητή, ανάλογα με τη μορφή της συνάρτησης και το στόχο επίλυσης.
- **Εύρος τιμών:** Το πεδίο λύσεων ανάλογα με την αντικειμενική συνάρτηση έχει ένα προκαθορισμένο εύρος στο οποίο θα πρέπει οι αλγόριθμοι να αναζητήσουν τις πιθανές λύσεις. Το εύρος αυτό καθορίζεται από τους περιορισμούς που τίθενται από την ίδια τη συνάρτηση και μπορεί να ποικίλει από ένα πολύ στενό πεδίο τιμών, έως το άπειρο. Το εύρος χαρακτηρίζεται από ένα σύνολο ελαχίστων και μεγίστων τιμών, με τις διαστάσεις του κάθε συνόλου να είναι ανάλογες των διαστάσεων της αντικειμενικής συνάρτησης του προβλήματος. Κάθε ανεξάρτητη μεταβλητή δηλαδή, έχει το δικό της δηλωμένο ελάχιστο και το δικό της δηλωμένο μέγιστο. Ακόμη, ανάλογα με το είδος του προβλήματος και των περιορισμών που θέτει, τα σύνολα ελαχίστων ή μεγίστων μπορεί να χαρακτηρίζονται και από διαφορετική τιμή ανά ανεξάρτητη μεταβλητή.
- **Πλήθος επαναλήψεων:** Από τις βασικότερες μεταβλητές εισόδου ενός αλγορίθμου βελτιστοποίησης είναι ο συνολικός αριθμός επαναλήψεων που θα πραγματοποιήσει ο αλγόριθμος μέχρι να σταματήσει και να επιστρέψει τις βέλτιστες τιμές που έχει αναγνωρίσει ως εκείνο το σημείο. Καθώς οι αλγόριθμοι αυτοί είναι στοχαστικοί, και τις περισσότερες φορές η ιδανική λύση δεν είναι γνωστή, ο αριθμός των επαναλήψεων είναι από τους πιο καθοριστικούς παράγοντες για την επιτυχία ενός αλγορίθμου να βρει την ολική βέλτιστη λύση (να συγκλίνει). Για την παρούσα μελέτη, είναι αναγκαίο όλοι οι αλγόριθμοι να εφαρμόζονται για τον ίδιο αριθμό επαναλήψεων. Λόγω της διαφορετικής δομής του κάθε αλγορίθμου, για να επιτευχθεί αυτό οι επαναλήψεις μετρώνται σε αριθμό αξιολόγησης της αντικειμενικής συνάρτησης.
- **Πληθυσμός λύσεων:** Κάθε αλγόριθμος αρχικοποιεί και διατηρεί ένα προκαθορισμένο πλήθος πιθανών λύσεων. Το πλήθος αυτό προκαθορίζεται και παρά τις μεταβολές που πραγματοποιούνται για τη σύγκλιση σε μια βέλτιστη λύση, το μέγεθος του διατηρείται σταθερό. Το πλήθος διατηρούμενων λύσεων αποτελεί εξίσου ιδιαίτερα σημαντική παράμετρο για έναν αλγόριθμο βελτιστοποίησης, διότι παρατηρείται μια συσχέτιση του πληθυσμού με την ταχύτητα και την ποιότητα σύγκλισης, ιδιαίτερα όσο το επίπεδο δυσκολίας που θέτει η αντικειμενική συνάρτηση αυξάνεται.

Εκτός από τις αρχικές τιμές εισόδου, οι οποίες είναι ίδιες για όλους τους αλγορίθμους βελτιστοποίησης που χρησιμοποιούνται, ο κάθε αλγόριθμος έχει ένα μοναδικό σύνολο παραμέτρων το οποίο διαμορφώνεται από τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά που τον διέπουν. Για να μπορούν οι αλγόριθμοι αυτοί να καλούνται με τις ίδιες αρχικές συνθήκες, θα πρέπει οι ιδιαίτερες αυτές παράμετροι για τον κάθε αλγόριθμο να



αντιστοιχηθούν με βάση την επιρροή που ασκούν είτε στο βαθμό εξερεύνησης (Exploration) είτε στο βαθμό εντατικοποίησης (Exploitation). Ακόμη, για την καλύτερη αντιστοίχισή τους, ιδιαίτερες μεταβλητές εισόδου οι οποίες χαρακτηρίζουν όχι μόνο το βαθμό αλλά και το ρυθμό παραμετροποίησης, έχουν ομαδοποιηθεί για την επιρροή τους στο “ρυθμό μετάλλαξης” (Mutation Rate). Οι μεταβλητές αυτές μπορούν να πάρουν τιμές από 0 έως 1 και αναφορικά με τον κάθε αλγόριθμο, η αντιστοίχιση των τιμών αυτών πραγματοποιείται ως εξής:

Γενετικός Αλγόριθμος (GA):

- **Beta:** Η τιμή αυτή καθορίζει το ρυθμό επιλογής ατόμων από το σύνολο λύσεων για μετάλλαξη. Λόγω της επιρροής που έχει στην διεύρυνση της αναζήτησης στο χώρο λύσεων, η τιμή αυτή αντιστοιχείται με το “Exploration”.
- **PC:** Ο όρος “PC” προέρχεται από τον όρο “Population to Children” ο οποίος μεταφράζεται ως τη συσχέτιση του συνολικού πληθυσμού με τον αριθμό των “απογόνων” ή νέων τιμών προκύπτουν για κάθε επανάληψη. Η μεταβλητή αυτή καθορίζει το ποσοστό διαφοροποίησης του συνόλου των τιμών, συνεπώς αντιστοιχίζεται με το “Exploitation”.
- **Gamma:** Με τη μεταβλητή Gamma καθορίζεται η ένταση της διασταύρωσης μεταξύ των τιμών που παραμετροποιούνται. Καθώς η παραμετροποίηση αυτή επηρεάζει τον τρόπο με τον οποίο αναζητείται ο χώρος λύσεων, ο όρος αυτός αντιστοιχείται με το “Exploration”.
- **MU:** Το MU καθορίζει το ποσοστό των χαρακτηριστικών που παραμετροποιούνται σε κάθε επανάληψη, σε κάθε χρωμόσωμα. Με άλλα λόγια, η τιμή αυτή καθορίζει το πόσο αλλάζει κάθε χρωμόσωμα που είναι να παραμετροποιηθεί. Η τιμή αυτή αντιστοιχίζεται με το “Mutation Rate”.
- **Sigma:** Η τελευταία παράμετρος που χαρακτηρίζει μόνο τους γενετικούς αλγόριθμους, είναι το Sigma. Η παράμετρος αυτή καθορίζει το μέγεθος παραμετροποίησης για κάθε χρωμόσωμα που παραμετροποιείται, ανάλογα και με το MU. Και αυτή η μεταβλητή αντιστοιχίζεται με το “Mutation Rate”.

Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα (FA):

- **Alpha:** Η μεταβλητή αυτή καθορίζει το βαθμό τυχαιοποίησης με τον οποίο κινούνται οι πυγολαμπίδες που δεν έχουν την μεγαλύτερη “ένταση” ή καταλληλότητα λύσης ως προς την αντικειμενική συνάρτηση. Έτσι, ο βαθμός μεταβολής τους καθορίζεται εν μέρει από την παράμετρο αυτή, και για το λόγο αυτό αντιστοιχίζεται με το “Mutation Rate”.
- **Beta:** Ο όρος αυτός καθορίζει τον βαθμό έλξης με τον οποίο έλκονται οι πυγολαμπίδες στην “ακτινοβολία” της “πιο φωτεινής”, ή με άλλα λόγια της καλύτερης λύσης. Όσο μεγαλύτερος είναι αυτός ο όρος, τόσο μεγαλύτερη έλξη εμφανίζουν οι βέλτιστες πυγολαμπίδες προς τις υπόλοιπες, δημιουργώντας την τάση να συγκεντρώσουν τις υπόλοιπες προς το μέρος τους, αυξάνοντας έτσι το χαρακτηριστικό του “Exploitation” του αλγορίθμου.
- **Gamma:** Ο όρος αυτός συνεργάζεται με την τιμή Beta και καθορίζει το βαθμό με τον οποίο οι υπόλοιπες πυγολαμπίδες αντιδρούν σε αυτή την έλξη ή το πόσο φως επιτρέπουν να απορροφηθεί και να τις επηρεάζει. Αντίστροφα λοιπόν, ο όρος αυτός καθορίζει το “Exploration”.



Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας (HSA):

- **Harmony Memory Considering Rate (HMRC):** Με τον όρο αυτό ο αλγόριθμος αποφασίζει πόσες από τις αποθηκευμένες τιμές (μελωδίες) που έχει υπό τη μορφή πληθυσμού λύσεων θα επιλέξει να χρησιμοποιήσει ανά επανάληψη, σε σύγκριση με νέες που θα δημιουργηθούν. Έτσι λοιπόν καθορίζεται το μέγεθος του χώρου λύσεων στο οποίο θα ψάξει ο αλγόριθμος για νέες λύσεις, συνεπώς ταυτίζεται με το “Exploration”.
- **Pitch Adjusting Rate (PAR):** Με τη μεταβλητή αυτή χαρακτηρίζεται η μέγιστη επιτρεπόμενη διαφοροποίηση που μπορεί να έχει μια υπάρχουσα λύση όταν κριθεί απαραίτητο να παραμετροποιηθεί. Εν ολίγοις, με τον όρο PAR καθορίζεται πόσο κοντά στην ήδη υπάρχουσα λύση θα εμφανιστεί μια επόμενη, συνεπώς καθορίζει το “Mutation Rate”.
- **Maximum Pitch Adjustment Proportion/Index (MPAP/MPAI):** Αυτές οι δύο παράμετροι έχουν ουσιαστικά την ίδια ακριβώς επιρροή σε έναν αλγόριθμο εύρεσης αρμονίας. Η μια χρησιμοποιείται όταν η συνάρτηση προς επίλυση είναι συνεχής, ενώ η άλλη όταν έχουμε συνάρτηση διακριτών τιμών. Στην πράξη οι μεταβλητές αυτές ορίζουν το εύρος μετατροπής που θα επιδέχονται όλες οι τιμές-μελωδίες οι οποίες παραμετροποιούνται για κάθε επανάληψη. Κατά συνέπεια επηρεάζεται άμεσα το “Exploitation”.

Για τον Αλγόριθμο Μαύρης Τρύπας (BHA) **δεν υπάρχουν συγκεκριμένες προκαθορισμένες μεταβλητές** πέραν των κοινών αρχικών τιμών εισόδου που περιγράφονται παραπάνω.

Συνοψίζοντας, για να μπορέσουν οι τέσσερις επιλεγμένοι αλγόριθμοι να “τρέξουν” σε ένα μικτό σχήμα με τις ίδιες αρχικές τιμές, θα πρέπει οι επιμέρους μοναδικές μεταβλητές που διέπουν τη λειτουργία του κάθε αλγορίθμου να ομαδοποιηθούν με βάση κάποια κοινά γνωρίσματα που χαρακτηρίζουν όλους τους αλγόριθμους βελτιστοποίησης. Πιο συγκεκριμένα:

- **Βαθμός Εξερεύνησης (Exploration):**
 - Beta, Gamma (Γενετικός Αλγόριθμος)
 - Gamma (Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα)
 - HMRC (Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας)
- **Βαθμός Εντατικοποίησης (Exploitation):**
 - PC (Γενετικός Αλγόριθμος)
 - Beta (Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα)
 - MBAP/MPAI (Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας)
- **Ρυθμός Μετάλλαξης (Mutation Rate):**
 - MU, Sigma (Γενετικός Αλγόριθμος)
 - Alpha (Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα)
 - PAR (Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας)

Έχοντας ομαδοποιήσει τις παραπάνω μεταβλητές, σε συνδυασμό με τις κοινές παραμέτρους που εισάγονται σε κάθε αλγόριθμο, μπορεί να σχεδιαστεί το μικτό σχήμα με το οποίο θα κληθούν.

3.2 Μικτό σχήμα αλγορίθμων βελτιστοποίησης

Στόχος είναι να δημιουργηθεί ένα μικτό σχήμα αλγορίθμων βελτιστοποίησης, το οποίο θα καλεί αυτούς τους αλγόριθμους με στόχο την επίλυση μιας κοινής αντικειμενικής συνάρτησης. Για την επίτευξη αυτού του στόχου, θα δημιουργηθεί ένας πρωτότυπος αλγόριθμος, ο οποίος θα έχει το ρόλο του αρχηγού για αυτό το μικτό σχήμα. Αν



χαρακτηριστούν όλοι οι αλγόριθμοι παίκτες σε ένα συνεργατικό παιχνίδι επίλυσης ενός προβλήματος βελτιστοποίησης, τότε ο αλγόριθμος αρχηγός θα είναι αυτός που θα καθορίζει τις αρχικές τιμές τους, τις μεταβλητές εισόδου για κάθε επανάληψη, αλλά και τον τρόπο και το χρόνο που αυτοί θα σταματούν.

Ξεκινώντας, θα πρέπει να γίνει η επιλογή μιας αντικειμενικής συνάρτησης. Για την αξιολόγηση της απόδοσης του σχήματος, αλλά και για να μετρηθεί ο χρόνος που απαιτείται για το σχήμα να φτάσει σε προκαθορισμένα επίπεδα ακρίβειας για γνωστές λύσεις, θα αξιοποιηθούν συναρτήσεις αναφοράς από τη βιβλιογραφία. Αξιοποιώντας τις συναρτήσεις αυτές, είναι από την αρχή γνωστό το εύρος αναζήτησης λύσεων, η ελαστικότητα της συνάρτησης για χρήση με πολλαπλές τιμές ανεξαρτήτων μεταβλητών, το πλήθος των τοπικών βέλτιστων αλλά και το ολικό βέλτιστο, μαζί με την τιμή που εξάγει από την αντικειμενική αυτή συνάρτηση αναφοράς. Έχοντας όλο το πεδίο τιμών γνωστό, δίνεται η δυνατότητα να αξιολογηθεί πλήρως και ο κάθε αλγόριθμος βελτιστοποίησης ξεχωριστά, αλλά και η συνολική απόδοση του σχήματος, τόσο μεμονωμένα, όσο και σε σύγκριση με την εύρεση λύσης με κάθε αλγόριθμο ξεχωριστά, αν δεν αξιοποιηθεί το σχήμα.

Αντικειμενικές Συναρτήσεις

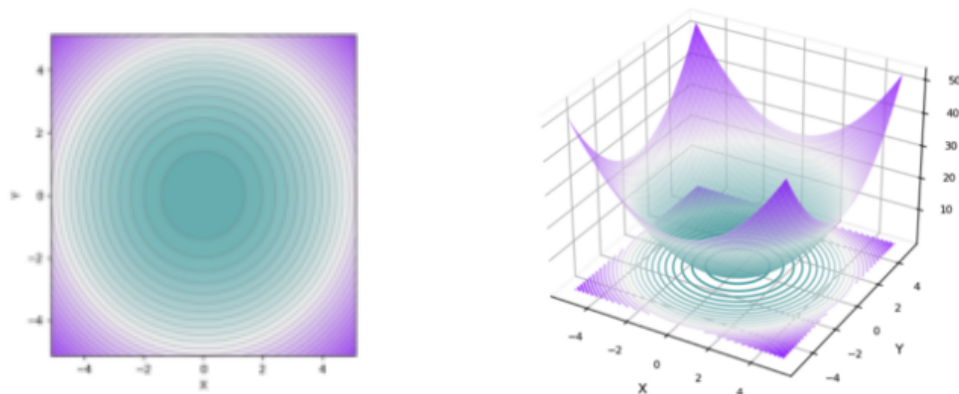
Για τον πειραματισμό θα αξιοποιηθούν τρεις διαφορετικές συναρτήσεις αναφοράς από τη βιβλιογραφία ^[62]. Η κάθε μια έχει το δικό της εύρος τιμών, το δικό της βέλτιστο σε δικό της σημείο, ενώ όλες επιλέχθηκαν με το να προσφέρουν λύση σε πολλαπλές επιλογές ανεξαρτήτων μεταβλητών, ανάλογα με την προεπιλογή που θα γίνει στην αρχικοποίηση των τιμών. Αυτό δίνει τη δυνατότητα στην ίδια συνάρτηση να δοκιμαστεί το σχήμα σε πολλές διαφορετικές διαστάσεις, αξιολογώντας έτσι την ποιότητα της λύσης όσο η πολυπλοκότητα ανεβαίνει. Για τη συγκεκριμένη μελέτη χρησιμοποιήθηκαν οι παρακάτω συναρτήσεις:

Σφαίρα:

Η συνάρτηση της σφαίρας ^[62] είναι από τις πιο διαδεδομένες, με χαρακτηριστική απλότητα στον ορισμό της. Στην πράξη, η συνάρτηση είναι το άθροισμα του τετραγώνου της θέσης για κάθε διάσταση:

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

Ενώ η οπτική της αναπαράσταση για 2 και 3 διαστάσεις είναι η παρακάτω:



Εικόνα 19: Διαγράμματα για 2(αριστερά) και 3(δεξιά) διαστάσεις της συνάρτησης σφαίρας



Το πεδίο ορισμού είναι άπειρο, καθώς όσο μεγαλύτερες είναι οι τιμές, τόσο μεγαλύτερη θα βγει είτε η επιφάνεια του κύκλου είτε το μέγεθος της σφαίρας.
Το βέλτιστο σημείο λύσης για κάθε διάσταση είναι το:

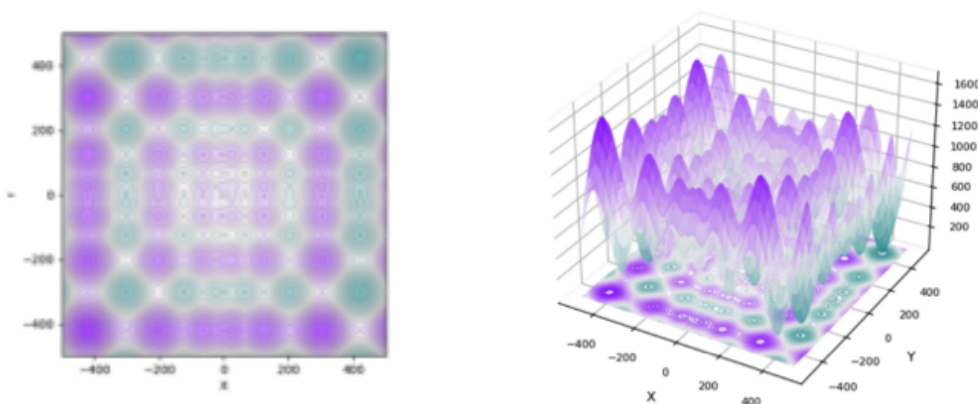
$$\mathbf{x}^* = f(0, \dots, 0), f(\mathbf{x}^*) = 0$$

Συνάρτηση Schwefel:

Η συνάρτηση του Schwefel [62] είναι μια συνεχής, μη κυρτή, μη τυχαία, και μη παραμετρική συνάρτηση, η οποία δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$f(\mathbf{x}) = 418.9829d - \sum_{i=1}^d x_i \sin(\sqrt{|x_i|})$$

όπου d ο αριθμός των ανεξάρτητων μεταβλητών και x_i το κάθε σημείο λύσης.
Ενώ η οπτική της αναπαράσταση για 2 και 3 διαστάσεις είναι η παρακάτω:



Εικόνα 20: Διαγράμματα για 2(αριστερά) και 3(δεξιά) διαστάσεις της συνάρτησης Schwefel

Το πεδίο ορισμού είναι:

$$-50 \leq x_i \leq 50$$

Όπου x_i η τιμή για κάθε σημείο.

Το βέλτιστο σημείο λύσης για κάθε ανεξάρτητη μεταβλητή είναι το:

$$F(420.9687, \dots, 420.9687) = 0$$

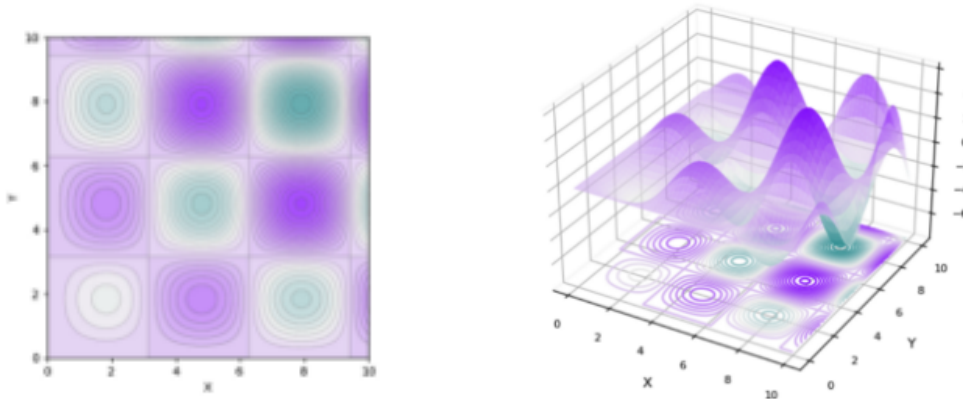
Συνάρτηση Alpine N.2:

Η συνάρτηση Alpine N.2 [62] είναι μια συνεχής, μη κυρτή, μη τυχαία, μη παραμετρική συνάρτηση, η οποία δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$f(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^D \sqrt{x_i} \sin(x_i)$$

όπου D η τιμή της διάστασης και x_i το κάθε σημείο λύσης.

Ενώ η οπτική της αναπαράσταση για 2 και 3 διαστάσεις είναι η παρακάτω:



Εικόνα 21: : Διαγράμματα για 2(αριστερά) και 3(δεξιά) διαστάσεις της συνάρτησης Alpine N.2

Το πεδίο επιτρεπόμενων τιμών είναι:

$$0 \leq x_i \leq 10$$

όπου x_i η τιμή για κάθε σημείο.

Το βέλτιστο σημείο λύσης για κάθε διάσταση είναι το:

$$\mathbf{x}^* = (7.917 \dots 7.917), f(\mathbf{x}^*) = 2.808^D$$

όπου D ο αριθμός των ανεξάρτητων μεταβλητών.

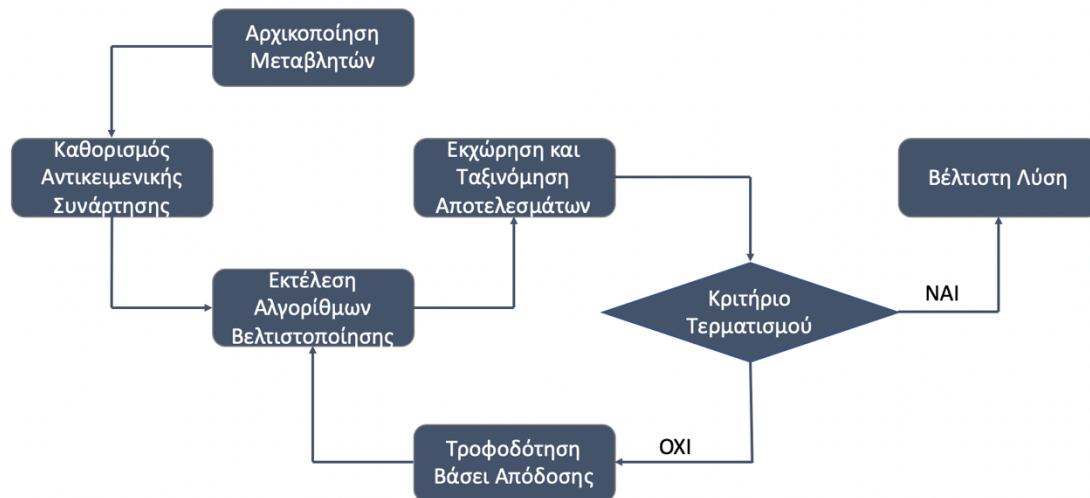
Δομή μικτού σχήματος

Έχοντας καθορίσει την αντικειμενική συνάρτηση προς βελτιστοποίηση, και έχοντας προετοιμάσει τους αλγόριθμους ως προς τις μεταβλητές εισόδου και την αντιστοίχισή τους με το αντίστοιχο στοιχείο επιρροής τους (Exploration, Exploitation, Mutation Rate), ο αλγόριθμος αρχηγός δίνει αρχικές τιμές για να τους τροφοδοτήσει. Αφού γίνει η πρώτη τροφοδότηση, όλοι οι αλγόριθμοι προσπαθούν να επιλύσουν το πρόβλημα έχοντας ίση αντιμετώπιση από τον αρχηγό. Για τη βελτιστοποίηση της βελτιστοποίησης, θα πρέπει με κάποιο τρόπο οι αλγόριθμοι να αλληλοεπιδρούν μεταξύ τους από επανάληψη σε επανάληψη. Αυτό επιτυγχάνεται θέτοντας σε όλους τους αλγόριθμους να βελτιστοποιήσουν ταυτόχρονα το ίδιο πρόβλημα για πεπερασμένο αριθμό επαναλήψεων, και αξιολογώντας τα αποτελέσματά τους μετά το πέρας κάθε επανάληψης. Ο αλγόριθμος που θα παρουσιάσει την καλύτερη απόδοση, θα τροφοδοτήσει όλους τους υπόλοιπους με τη βέλτιστη λύση, ενώ για την περίπτωση του χειρότερου σε απόδοση αλγόριθμου, αυτός θα τροφοδοτηθεί με το σύνολο του πληθυσμού λύσεων από τον καλύτερο, δίνοντας του έτσι μια υποβοήθηση με τη μέθοδο του ελιτισμού ώστε να αυξηθούν οι πιθανότητες να βρει ένα σημείο καλύτερο στην επόμενη επανάληψη. Για τους υπόλοιπους, εκτός από την τροφοδότησή τους με τη βέλτιστη λύση, ο υπόλοιπος πληθυσμός παραμένει σταθερός από την προηγούμενη επανάληψή τους. Κατ' αυτό τον τρόπο, θέτοντας ένα μικρό αριθμό επαναλήψεων για κάθε επιμέρους αλγόριθμο σε κάθε βήμα του μικτού σχήματος, επιδιώκεται η σύγκλιση στο ολικό βέλτιστο για όσο το δυνατόν λιγότερες αξιολογήσεις της αντικειμενικής συνάρτησης συνολικά.

Διατηρώντας τις τιμές για το βαθμό εξερεύνησης, το βαθμό εντατικοποίησης και το ρυθμό μετάλλαξης σταθερές και στο μέσο του εύρους τους, εξασφαλίζεται πως τα επίπεδα εξερεύνησης και εντατικοποίησης των αλγορίθμων θα παραμένουν στο μέσο όρο τους και ίσα για όλους τους παίκτες. Ο αρχηγός, τροφοδοτώντας το σύνολο των αλγορίθμων με πληροφορία από τον αλγόριθμο που έχει την καλύτερη απόδοση, επιχειρεί με έμμεσο τρόπο να μεγιστοποιήσει ταυτόχρονα και το βαθμό εξερεύνησης



αλλά και το βαθμό εντατικοποίησης για το σχήμα. Αυτό επιτυγχάνεται χωρίς να θυσιάζεται χρόνος για να αξιολογηθεί παραπάνω φορές η αντικειμενική συνάρτηση ενώ παράλληλα ελαχιστοποιείται η πιθανότητα το μικτό σχήμα να εγκλωβιστεί σε κάποιο τοπικό βέλτιστο.



Εικόνα 22: Διάγραμμα ροής μικτού σχήματος αλγορίθμων

Το μικτό σχήμα με την καθοδήγηση του αρχηγού θα επαναλαμβάνει την παραπάνω διαδικασία μέχρι να ικανοποιηθεί ένα κριτήριο τερματισμού. Το κριτήριο αυτό μπορεί να αφορά είτε το συνολικό βαθμό σύγκλισης (πχ. η τάξη μεγέθους της σύγκλισης αναφορικά με μια ιδανική τιμή τερματισμού) είτε ένα προκαθορισμένο, πεπερασμένο αριθμό επαναλήψεων για ένα πρόβλημα με άγνωστη ιδανική τιμή.

Αρχικές τιμές

Οι τιμές αυτές, όπως έχουν οριστεί από τη βιβλιογραφία των αλγορίθμων βελτιστοποίησης είναι:

- ⇒ **Διαστάσεις (ανεξάρτητες μεταβλητές) προβλήματος** (πχ. $d = 2$)
- ⇒ **Ελάχιστη τιμή** στο πεδίο ορισμού (όπου: $\text{Min} = [\text{τιμή}] * d$, για τη δημιουργία ελαχίστου για κάθε διάσταση)
- ⇒ **Μέγιστη τιμή** στο πεδίο ορισμού (όπου: $\text{Max} = [\text{τιμή}] * d$, για τη δημιουργία μεγίστου για κάθε διάσταση)
- ⇒ **Αριθμός επαναλήψεων** (πχ. $\text{iterations} = 20$)
- ⇒ **Μέγεθος πληθυσμού** (πχ. $\text{population} = 1000$)
- ⇒ **Βαθμός εξερεύνησης** (πχ. $\text{exploration} = 0.5$)
- ⇒ **Βαθμός εντατικοποίησης** (πχ. $\text{exploitation} = 0.5$)
- ⇒ **Ρυθμός μετάλλαξης** (πχ. $\text{mutation_rate} = 0.5$)

Οι αρχικές αυτές τιμές συμπιέζονται σε μια ενιαία μεταβλητή και τροφοδοτούνται σαν “πακέτο” εισόδου σε όλους τους αλγόριθμους βελτιστοποίησης, οι οποίοι με τη σειρά τους τις κατανέμουν αντίστοιχα στις επιμέρους αντιστοιχιζόμενες ειδικές παραμέτρους τους.

Ειδικές τιμές

Για να επιτύχει το μικτό σχήμα την απρόσκοπτη λειτουργία του, πρέπει να καθοριστούν και κάποιες περαιτέρω αρχικές τιμές, οι οποίες χαρακτηρίζονται ως ειδικές για τον αρχηγό. Οι τιμές αυτές βοηθούν τον αλγόριθμο αρχηγό να πάρει αποφάσεις σχετικά με



τη διανομή των αποτελεσμάτων ανά βήμα επανάληψης του μικτού σχήματος, αλλά και για να καθορίσει το κριτήριο με το οποίο θα τερματίσει την διαδικασία και θα εξάγει το βέλτιστο αποτέλεσμα. Οι τιμές αυτές καθορίζονται ως εξής:

- **Βέλτιστη λύση:** Η βέλτιστη λύση είναι η βέλτιστη τιμή που παρουσιάζει ο καλύτερος σε απόδοση αλγόριθμος, συγκριτικά με τους υπόλοιπους. (πχ. για πρόβλημα 2 ανεξάρτητων μεταβλητών το σημείο (1,1))
- **Καταλληλότητα βέλτιστης λύσης (Cost) :** Ως καταλληλότητα ορίζεται η τιμή που δίνεται στην έξοδο της αντικειμενικής συνάρτησης στο σημείο της βέλτιστης λύσης (πχ. Cost = 2, αφορά καταλληλότητα για σημείο (1,1) και συνάρτηση $F(x, y) = x+y$)
- **Δείκτης επιλογής:** Για να μπορέσει ο αρχηγός να καθορίσει ποιος παίκτης αποδίδει καλύτερα και ποιος χειρότερα, θα πρέπει να υπάρχει κάποιος λογικός δείκτης (αληθής/ψευδής) ο οποίος σε κάθε επανάληψη του μικτού σχήματος θα παίρνει την κατάλληλη τιμή αναφορικά με την επίδοση των παικτών. Ο δείκτης επιλογής αυτός προσαρμόζεται στην συμπιεσμένη ενιαία μεταβλητή που τροφοδοτείται στους αλγορίθμους. Κατά αυτόν τον τρόπο, οι αλγόριθμοι γνωρίζουν αν θα πρέπει να λάβουν υπόψη τους είτε μια καλύτερη λύση, είτε ένα ολόκληρο πληθυσμό για την επόμενη προσπάθεια βελτιστοποίησής τους.
- **Κατανεμημένη λίστα απόδοσης:** Για λόγους ανάδρασης προς το χρήστη κατά τη διάρκεια της εκτέλεσης του μικτού σχήματος, αλλά και για την επιστροφή της βέλτιστης λύσης σε όλα τα επίπεδα (βέλτιστο κόστος, βέλτιστη θέση), δημιουργείται μια κατανεμημένη λίστα απόδοσης. Αυτή η λίστα κατατάσσει τους αλγορίθμους από τον καλύτερο στο χειρότερο και επιστρέφει με τον δείκτη που αντιστοιχεί στον καθένα.

Αξιολογήσεις αντικειμενικής συνάρτησης

Εκτός από τις παραπάνω παραμέτρους, είναι κρίσιμο να εξισωθεί ο τρόπος με τον οποίο ο κάθε αλγόριθμος θα προσπαθήσει να βελτιώσει την αντικειμενική συνάρτηση. Σκοπός της συνολικής μελέτης είναι η βελτιστοποίηση της βελτιστοποίησης, συνεπώς για να είναι τα αποτελέσματα αξιόπιστα, θα πρέπει να υπάρχει ομοιογένεια μεταξύ των παικτών του μικτού σχήματος. Ο κάθε αλγόριθμος, για ένα σύνολο επαναλήψεων βελτιστοποίησης, εξετάζει μια πιθανή βέλτιστη λύση για έναν συγκεκριμένο, προκαθορισμένο αριθμό φορών. Αυτό σημαίνει πως, θα πρέπει να ληφθεί υπόψη κατά την εκχώρηση των αρχικών τιμών στους επιμέρους αλγορίθμους βελτιστοποίησης, πως για μια επανάληψη του μικτού σχήματος όλοι οι αλγόριθμοι θα έχουν αξιολογήσει την αντικειμενική συνάρτηση ίσες φορές.

4. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗΣ ΜΕΜΟΝΩΜΕΝΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΚΑΙ ΜΙΚΤΟΥ ΣΧΗΜΑΤΟΣ

Περιβάλλον προγραμματισμού

Για την υλοποίηση των παραπάνω, θα πρέπει να επιλεγθεί μια γλώσσα προγραμματισμού η οποία θα αναλάβει να μεταφέρει τις παραπάνω συσχετίσεις σε ένα ψηφιακό υπολογιστικό περιβάλλον. Οποιαδήποτε γλώσσα προγραμματισμού, στη θεωρία, μπορεί να ικανοποιήσει αυτή την ανάγκη. Για τις ανάγκες της παρούσας μελέτης έχει επιλεγθεί η γλώσσα Python.



Εικόνα 23: Το επίσημο λογότυπο της γλώσσας προγραμματισμού Python

Η Python είναι μια γλώσσα προγραμματισμού ευρέως διαδεδομένη στους κόλπους του ερευνητικού προγραμματισμού. Αποτελεί ένα από τα βασικότερα εργαλεία κατά την εκπαίδευση στον προγραμματισμό, ενώ είναι και η πιο διαδεδομένη για εφαρμογές μηχανικής μάθησης και τεχνητής νοημοσύνης. Αυτό πρακτικά συμβαίνει γιατί είναι μια γλώσσα ανοιχτού κώδικα (Open Source) η οποία υποστηρίζεται από την ίδια την κοινότητα

των προγραμματιστών. Η ιδιότητά της αυτή καθιστά πολύ εύκολο το να εκπαιδευτεί κάποιος στις βασικές της αρχές και είτε να αναπαράγει υπάρχουσα γνώση είτε να δημιουργήσει νέα. Ειδικά στο χώρο της βελτιστοποίησης, η Python αποτελεί αναπόσπαστο εργαλείο λόγω της χαμηλής πολυπλοκότητάς της, αλλά και της ευελιξίας που προσφέρει στο να μετατρέπονται μοντέλα και μαθηματικές σχέσεις εύκολα και γρήγορα σε κώδικα. Τέλος, η διαδικτυακή υποστήριξη της κοινότητας των προγραμματιστών, αλλά και οι πληθώρα δωρεάν διαθέσιμων βιβλιοθηκών την κάνει την πλέον δελεαστική πρόταση για αντίστοιχες εφαρμογές.

Για την παρούσα μελέτη, όλος ο κώδικας υλοποιήθηκε με τη χρήση της έκδοσης 3.7.10 της Python ^[63]σε ένα προγραμματιστικό περιβάλλον Anaconda ^[64]. Για τις ανάγκες επεξεργασίας του κώδικα χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό Sublime Text ^[65], ενώ η υλοποίηση και τα τρεξίματα του κώδικα πραγματοποιήθηκαν με τη χρήση της έκδοσης 5.0.0 του λογισμικού Spyder ^[66].

Όλη η ανάπτυξη, αλλά και οι δοκιμές πραγματοποιήθηκαν σε φορητό υπολογιστή MacBook Pro, με επεξεργαστή M1 Pro και 16GB μνήμης RAM.

Έχοντας καταστρώσει τη δομή των αλγορίθμων αλλά και του μικτού σχήματος σε θεωρητικό επίπεδο, το επόμενο βήμα είναι να περαστούν όλες αυτές οι γνώσεις σε ένα περιβάλλον υπολογισμού με τη χρήση της Python. Ξεκινώντας από τους αλγορίθμους βελτιστοποίησης, θα πρέπει όλοι να υλοποιηθούν σε κώδικα. Καθώς οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης είναι ένα ζήτημα που υπάρχει στη βιβλιογραφία για αρκετά χρόνια, και η γλώσσα Python είναι γλώσσα ανοιχτού κώδικα, υπάρχουν υλοποιήσεις τους έτοιμες προς χρήση από την κοινότητα προγραμματιστών. Οι υλοποιήσεις αυτές είναι ευρέως διαθέσιμες, αλλά χρειάζονται εκτεταμένη παραμετροποίηση για να προσαρμοστούν και να ενταχθούν στο μικτό σχήμα της παρούσας έρευνας.

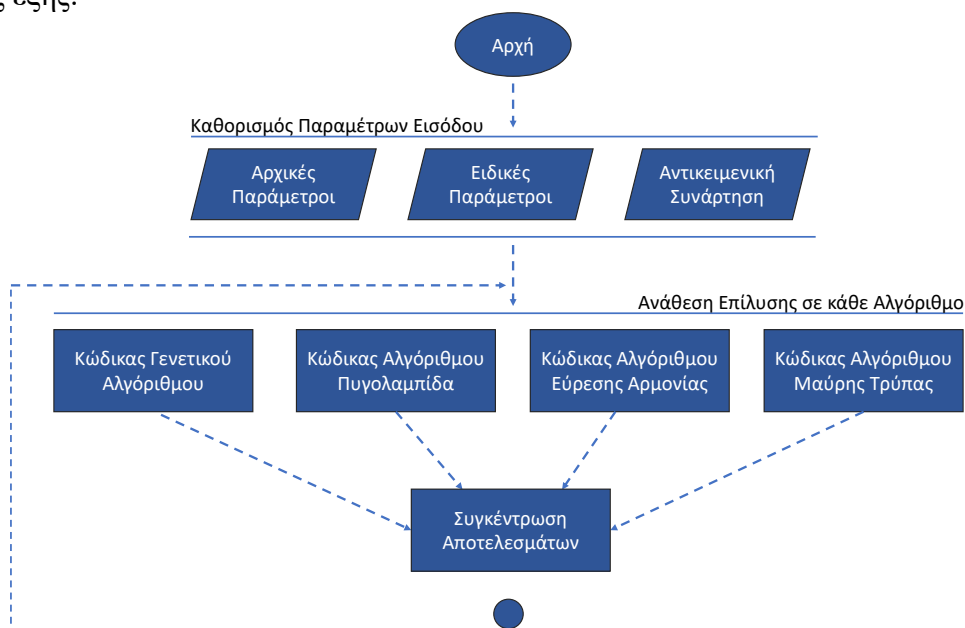
Για κάθε αλγόριθμο, επιλέχθηκε μια υλοποίηση που να ταιριάζει στους στόχους του μικτού σχήματος και παραμετροποιήθηκε με τους εξής κανόνες:

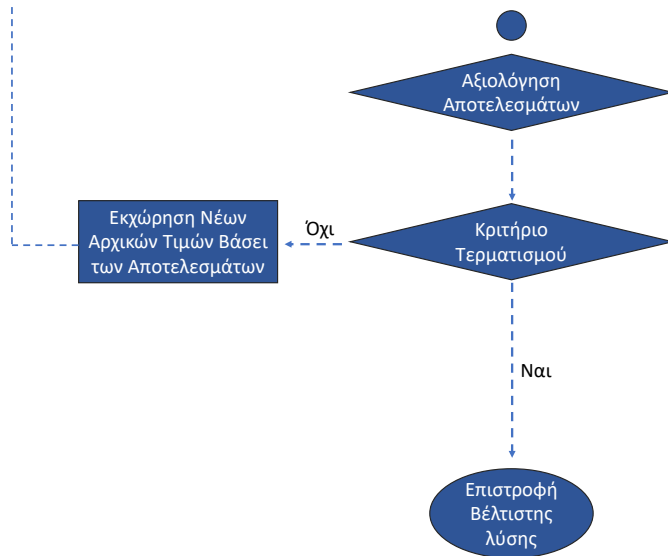
1. **Όλοι οι αλγόριθμοι θα πρέπει να “υποδέχονται” και να “αντιλαμβάνονται” τις τιμές του πεδίου ορισμού με τον ίδιο τρόπο.** Αυτό σημαίνει πως για κάθε συνάρτηση $F(x_i)$ που τροφοδοτείται στους αλγορίθμους, το x_i , δηλαδή η τιμή από το πεδίο ορισμού για κάθε χρονική στιγμή, θα πρέπει να έχει κοινή μορφή μεταβλητής και για τον αλγόριθμο αρχηγό αλλά και για τους παίκτες. Η μορφή αυτή επιλέχθηκε ως “NumPy Array”. Πρακτικά τα NumPy Arrays είναι αριθμητικές λίστες οι οποίες δημιουργούνται από τη βιβλιοθήκη “NumPy”^[67] η οποία ανήκει στις βιβλιοθήκες του πηγαίου κώδικα της Python. Η επιλογή αυτή έγινε για να υπάρχει ομοιομορφία εισόδου με βάση μια ανεξάρτητη, αυτοτελή βιβλιοθήκη από την ίδια τη γλώσσα προγραμματισμού.



2. Όλοι οι αλγόριθμοι θα πρέπει να δίνουν στην έξοδό τους την βέλτιστη τιμή από το πεδίο ορισμού, αλλά και το σύνολο του πληθυσμού λύσεων υπό τη μορφή λίστας, αποκωδικοποιημένης από την NumPy. Αυτή η επιλογή εξυπηρετεί τον αλγόριθμο αρχηγό να διαχειρίζεται, να συγκρίνει και να παρουσιάζει δεδομένα ανεξάρτητα με τον τρόπο που αυτά παράγονται στους επιμέρους αλγόριθμους παίκτες.
3. Όλοι οι αλγόριθμοι θα πρέπει να μπορούν να εκχωρούν τις αρχικές, αλλά και τις ειδικές, τιμές κατάλληλα, σύμφωνα και με τις αντιστοιχίσεις που έχουν γίνει στη θεωρητική μελέτη τους.
4. Όλοι οι αλγόριθμοι θα πρέπει να μπορούν να εξάγουν τις ίδιες παραμέτρους με την ίδια μορφή. Πιο συγκεκριμένα οι τιμές εξόδου για όλους τους αλγόριθμους είναι: i) Βέλτιστη τιμή εισόδου, ii) βέλτιστη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης και iii) συνολικός πληθυσμός κατά την τελευταία επανάληψη.
5. Όλοι οι αλγόριθμοι θα πρέπει να παραμετροποιούν την τιμή των μέγιστων επαναλήψεων που τους δίνεται, ανάλογα με τον αριθμό αξιολογήσεων της αντικειμενικής συνάρτησης που πραγματοποιούν συνολικά, ώστε όλοι οι αλγόριθμοι να αξιολογούν ίσες φορές την αντικειμενική συνάρτηση σε κάθε «κάλεσμά» τους.
6. Όλοι οι αλγόριθμοι θα πρέπει να μπορούν να δέχονται την αντικειμενική συνάρτηση κωδικοποιημένη με τον ίδιο τρόπο.
7. Οι αλγόριθμοι θα πρέπει να έχουν τη μορφή βιβλιοθήκης, η οποία θα εισάγεται από τον αρχηγό, ο οποίος με τη σειρά του θα μπορεί να καλεί τη μέθοδο τρεξίματος, δίνοντας σαν μεταβλητές εισόδου τις συμπιεσμένες αρχικές και ειδικές τιμές και την αντικειμενική συνάρτηση.

Έχοντας παραμετροποιήσει σχετικά τους αλγόριθμους, το επόμενο βήμα είναι η δόμηση του αλγορίθμου αρχηγού. Η δομή του αρχηγού περιγράφεται σε ψευδοκώδικα ως εξής:





Εικόνα 24: Διάγραμμα ροής του αλγορίθμου αρχηγού για τον έλεγχο του μικτού σχήματος

Η μορφή του αρχηγού μπορεί να είναι είτε ως συντονιστής του μικτού σχήματος, είτε απλά ως ενιαίος εντολέας των επιμέρους αλγορίθμων, χωρίς να δημιουργεί αλληλεπίδραση μεταξύ τους, για την μεμονωμένη αξιολόγησή τους. Το πρώτο στάδιο της παρούσας μελέτης είναι να δοκιμαστεί η απόδοση των αλγορίθμων για κάθε συνάρτηση αναφοράς ξεχωριστά, ώστε να εξαχθούν συμπεράσματα σε σχέση με την ικανότητα βελτιστοποίησης που έχει.

Αξιολογώντας την ποιότητα των λύσεων για κάθε αλγόριθμο βελτιστοποίησης ξεχωριστά, με βάση τις προαναφερθείσες συναρτήσεις αναφοράς, τότε εφαρμόζεται στο μικτό σχήμα επίλυση με το ίδιο πρόβλημα. Στόχος είναι να υπάρχουν εφάμιλλα ή καλύτερα αποτελέσματα από συνολικά λιγότερες αξιολογήσεις της αντικειμενικής συνάρτησης.

5. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

5.1 Αξιολόγηση αλγορίθμων βελτιστοποίησης

Για την αξιολόγηση των αλγορίθμων έγινε εφαρμογή προβλήματος λύσης για τις 3 συναρτήσεις αναφοράς, στις οποίες είναι γνωστή η τιμή του βέλτιστου από τη βιβλιογραφία για τον χρήστη, χωρίς όμως η γνώση αυτή να τροφοδοτείται με κάποιο τρόπο στους αλγόριθμους. Με αυτό τον τρόπο, μπορεί να πραγματοποιηθεί μια αντικειμενική αξιολόγηση της ικανότητας των αλγορίθμων να βελτιστοποιούν. Μεταβάλλοντας το συνολικό αριθμό επαναλήψεων, τις διαστάσεις προβλήματος και τον πληθυσμό λύσεων για κάθε δοκιμή, λαμβάνονται τα παρακάτω αποτελέσματα:

Για τη συνάρτηση αναφοράς Σφαίρας:

Η βέλτιστη λύση της συνάρτησης είναι το 0, στο σημείο $f(0,0)$. Θέτουμε σταθερό εύρος τιμών με ελάχιστο $[-10]$ και μέγιστο $[10]$ για κάθε διάσταση, και παίρνουμε τον παρακάτω πίνακα λύσεων:



Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 2									
Αξιολογήσεις Αντικειμενικής Συνάρτησης	Πληθυσμός	Γενετικός Αλγόριθμος	Απόκλιση	Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα	Απόκλιση	Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας	Απόκλιση	Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας	Απόκλιση
50	200	2,249x10 ⁻⁷	2,249x10 ⁻⁷	0,415	0,415	0,171	0,171	0,020	0,020
	400	2,990x10 ⁻⁷	2,990x10 ⁻⁷	0,340	0,340	0,018	0,018	0,343	0,343
	1000	2,599x10 ⁻⁸	2,599x10 ⁻⁸	0,318	0,318	0,096	0,096	0,082	0,082
240	200	1,868x10 ⁻²¹	1,868x10 ⁻²¹	0,010	0,010	0,407	0,407	0,247	0,247
	400	1,762x10 ⁻²¹	1,762x10 ⁻²¹	0,456	0,456	0,082	0,082	0,075	0,075
	1000	3,057x10 ⁻²³	3,057x10 ⁻²³	0,095	0,095	0,013	0,013	0,057	0,057
Σύγκλιση διαφοράς με ακρίβεια για την αναμενόμενη τιμή στο 10 ⁻²									
Αλγόριθμος			Αριθμός Αξιολογήσεων	Πληθυσμός			Βέλτιστη Τιμή Αντικειμενικής Συνάρτησης		
Γενετικός Αλγόριθμος			20	1000			1,880x10 ⁻⁵		
Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα			1200	1000			2,464x10 ⁻⁴		
Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας			1000	1000			4,654x10 ⁻³		
Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας			700	1000			1,455x10 ⁻³		
Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 3									
Αξιολογήσεις Αντικειμενικής Συνάρτησης	Πληθυσμός	Γενετικός Αλγόριθμος	Απόκλιση	Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα	Απόκλιση	Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας	Απόκλιση	Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας	Απόκλιση
50	200	7,241x10 ⁻⁵	7,241x10 ⁻⁵	2,209	2,209	1,702	1,702	0,488	0,488
	400	4,668x10 ⁻⁵	4,668x10 ⁻⁵	2,061	2,061	7,337	7,337	2,300	2,300
	1000	1,557x10 ⁻⁵	1,557x10 ⁻⁵	1,572	1,572	0,318	0,318	3,049	3,049
240	200	2,727x10 ⁻¹⁰	2,727x10 ⁻¹⁰	0,469	0,469	0,354	0,354	3,053	3,053
	400	1,009x10 ⁻¹⁰	1,009x10 ⁻¹⁰	1,600	1,600	0,635	0,635	3,828	3,828
	1000	5,415x10 ⁻¹¹	5,415x10 ⁻¹¹	0,512	0,512	3,337	3,337	3,256	3,256
Σύγκλιση διαφοράς με ακρίβεια για την αναμενόμενη τιμή στο 10 ⁻²									
Αλγόριθμος			Αριθμός Αξιολογήσεων	Πληθυσμός			Βέλτιστη Τιμή Αντικειμενικής Συνάρτησης		
Γενετικός Αλγόριθμος			20	1000			1,694x10 ⁻³		
Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα			2400	1000			1,130x10 ⁻³		
Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας			30000	1000			7,109x10 ⁻³		
Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας			-	-			Δεν συγκλίνει κάτω από 10 ⁻¹		



Για τη συνάρτηση αναφοράς Schwefel:

Η βέλτιστη λύση της συνάρτησης είναι το 0, στο σημείο $f(420.9687, \dots, 420.9687)$. Θέτουμε σταθερό εύρος τιμών με ελάχιστο $[-500]$ και μέγιστο $[500]$ για κάθε διάσταση, και παίρνουμε τον παρακάτω πίνακα λύσεων:

Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 2									
Αξιολογήσεις Αντικειμενικής Συνάρτησης	Πληθυσμός	Γενετικός Αλγόριθμος	Απόκλιση	Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα	Απόκλιση	Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας	Απόκλιση	Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας	Απόκλιση
50	200	$3,198 \times 10^{-5}$	$3,198 \times 10^{-5}$	44,615	44,615	131,036	131,036	101,910	101,910
	400	2.634×10^{-5}	2.634×10^{-5}	7,410	7,410	53,005	53,005	44,155	44,155
	1000	$2,589 \times 10^{-5}$	$2,589 \times 10^{-5}$	41,289	41,289	8,540	8,540	118,362	118,362
240	200	$2,545 \times 10^{-5}$	$2,545 \times 10^{-5}$	4,721	4,721	0,720	0,720	3,762	3,762
	400	$2,545 \times 10^{-5}$	$2,545 \times 10^{-5}$	48,525	48,525	31,229	31,229	196,613	196,613
	1000	$2,545 \times 10^{-5}$	$2,545 \times 10^{-5}$	43,090	43,090	97,473	97,473	60,672	60,672
Σύγκλιση διαφοράς με ακρίβεια για την αναμενόμενη τιμή στο 10^{-2}									
Αλγόριθμος			Αριθμός Αξιολογήσεων	Πληθυσμός	Βέλτιστη Τιμή Αντικειμενικής Συνάρτησης				
Γενετικός Αλγόριθμος			30	1000	$1,120 \times 10^{-4}$				
Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα			10000	1000	$7,456 \times 10^{-2}$				
Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας			10000	1000	$3,748 \times 10^{-2}$				
Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας			-	-	Δεν συγκλίνει				
Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 3									
Αξιολογήσεις Αντικειμενικής Συνάρτησης	Πληθυσμός	Γενετικός Αλγόριθμος	Απόκλιση	Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα	Απόκλιση	Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας	Απόκλιση	Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας	Απόκλιση
50	200	0,430	0,430	334,301	334,301	445,006	445,006	370,047	370,047
	400	0,013	0,013	101,121	101,121	114,760	114,760	270,679	270,679
	1000	0,001	0,001	338,982	338,982	153,056	153,056	152,497	152,497
240	200	$3,818 \times 10^{-5}$	$3,818 \times 10^{-5}$	128,789	128,789	136,208	136,208	306,345	306,345
	400	$3,818 \times 10^{-5}$	$3,818 \times 10^{-5}$	347,940	347,940	223,536	223,536	272,299	272,299
	1000	$3,818 \times 10^{-5}$	$3,818 \times 10^{-5}$	218,610	218,610	255,159	255,159	189,642	189,642
Σύγκλιση διαφοράς με ακρίβεια για την αναμενόμενη τιμή στο 10^{-2}									



Αλγόριθμος	Αριθμός Αξιολογήσεων	Πληθυσμός	Βέλτιστη Τιμή Αντικειμενικής Συνάρτησης
Γενετικός Αλγόριθμος	50	1000	$3,546 \times 10^{-3}$
Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα	-	-	Δεν συγκλίνει
Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας	150000	1000	$9,954 \times 10^{-2}$
Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας	-	-	Δεν συγκλίνει

Για τη συνάρτηση αναφοράς Alpine N.2:

Η βέλτιστη λύση της συνάρτησης είναι το 2.808^d , όπου d οι διαστάσεις, στο σημείο $f(7.917, \dots, 7.917)$.

Για 2 διαστάσεις η βέλτιστη τιμή είναι = **7,884764**, ενώ για 3 διαστάσεις είναι = **22,140698**.

Θέτουμε σταθερό εύρος τιμών με ελάχιστο [0] και μέγιστο [10] για κάθε διάσταση, και παίρνουμε τον παρακάτω πίνακα λύσεων:

Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 2									
Αξιολογήσεις Αντικειμενικής Συνάρτησης	Πληθυσμός	Γενετικός Αλγόριθμος	Απόκλιση	Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα	Απόκλιση	Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας	Απόκλιση	Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας	Απόκλιση
50	200	7,885	0,001	7,836	0,048	7,343	0,541	6,681	1,203
	400	7,885	0,001	7,795	0,089	7,872	0,012	7,759	0,125
	1000	7,885	0,001	7,710	0,174	7,846	0,038	7,865	0,019
240	200	7,885	0,001	7,871	0,013	7,753	0,131	7,678	0,206
	400	7,885	0,001	7,861	0,023	7,617	0,267	7,592	0,292
	1000	7,885	0,001	7,878	0,006	7,295	0,589	7,671	0,213
Σύγκλιση διαφοράς με ακρίβεια για την αναμενόμενη τιμή στο 10^{-2}									
Αλγόριθμος	Αριθμός Αξιολογήσεων	Πληθυσμός	Βέλτιστη Τιμή Αντικειμενικής Συνάρτησης						
Γενετικός Αλγόριθμος	3	1000	7,821						
Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα	300	1000	7,847						
Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας	300	1000	7,463						
Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας	200	1000	7,803						
Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 3									
Αξιολογήσεις Αντικειμενικής Συνάρτησης	Πληθυσμός	Γενετικός Αλγόριθμος	Απόκλιση	Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα	Απόκλιση	Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας	Απόκλιση	Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας	Απόκλιση
50	200	22,130	0,013	14,552	7,588	16,963	5,171	10,118	12,022
	400	22,141	0,001	16,225	5,915	19,221	2,919	20,047	2,093



	1000	22,143	0,003	18,846	3,294	20,776	1,364	21,504	0,636
240	200	22,143	0,003	21,433	0,707	19,410	2,730	9,617	12,523
	400	22,143	0,003	20,100	2,040	20,087	2,053	20,170	1,970
	1000	22,143	0,003	16,885	5,255	18,975	3,165	20,260	1,880
Σύγκλιση διαφοράς με ακρίβεια για την αναμενόμενη τιμή στο 10^{-2}									
Αλγόριθμος	Αριθμός Αξιολογήσεων		Πληθυσμός			Βέλτιστη Τιμή Αντικειμενικής Συνάρτησης			
Γενετικός Αλγόριθμος	30		1000			22,042			
Αλγόριθμος Πυγολαμπίδα	3000		1000			22,075			
Αλγόριθμος Εύρεσης Αρμονίας	13000		1000			22,055			
Αλγόριθμος Μαύρης Τρύπας	-		-			Δεν συγκλίνει			



Σχολιασμός αποτελεσμάτων από την επιμέρους αξιολόγηση των αλγορίθμων βελτιστοποίησης

Όλοι οι αλγόριθμοι συμπεριφέρονται διαφορετικά για την επίλυση του ίδιου προβλήματος. Παρατηρείται πως ο αριθμός των ατόμων του πληθυσμού είναι εξαιρετικά σημαντικός συγκριτικά με τον αριθμό των κλήσεων της αντικειμενικής συνάρτησης. Στις περιπτώσεις που ο αριθμός είναι εξαιρετικά χαμηλός, παρατηρείται πως η απόδοση των αλγορίθμων, εκτός του Γενετικού Αλγορίθμου, είναι πολύ χαμηλή και ασταθής, καθώς δεν προλαβαίνει να δημιουργηθεί ένα ικανοποιητικό επίπεδο σύγκλισης. Αντίστοιχα, όσο ανεβαίνει η πολυπλοκότητα σε διαστάσεις και εύρος τιμών, τα πράγματα γίνονται ακόμη πιο δύσκολα για τους αλγορίθμους. Οι λύσεις έχουν πολύ μεγάλο εύρος, ενώ η απόστασή τους από την ιδανική λύση έχει μεγάλες διακυμάνσεις ανάλογα με τη ρύθμιση των αρχικών παραμέτρων. Τέλος, παρατηρείται πως με εξαίρεση τους Γενετικούς Αλγόριθμους, όταν η σύγκλιση αφορά βέλτιστη τιμή στο 0, οι υπόλοιποι αλγόριθμοι δυσκολεύονται πάρα πολύ να προσεγγίσουν, ενώ μερικές φορές δεν συγκλίνουν καν. Αυτό ενισχύει το επιχείρημα πως διαφορετικοί αλγόριθμοι, είναι καταλληλότεροι για διαφορετικά προβλήματα. Μερικές ειδικές παρατηρήσεις περιλαμβάνουν:

- **Γενετικός Αλγόριθμος:** Εξαιρετική ικανότητα επίλυσης σε πολύ σύντομο χρονικό διάστημα για την πλειοψηφία των προβλημάτων βελτιστοποίησης.
- **Αλγόριθμος πυγολαμπίδα:** Καλή ικανότητα επίλυσης, αλλά παρουσιάζεται μεγάλη αστάθεια ανάλογα με τους συνδυασμούς αρχικών τιμών. Η ακρίβεια λύσης δύσκολα ξεπερνά το 10^{-2} ενώ για βέλτιστες τιμές στο 0 δυσκολεύεται να συγκλίνει.
- **Αλγόριθμος εύρεσης αρμονίας:** Ο αγνωστικός τρόπος, δηλαδή ο τρόπος που καθολικά αξιολογεί το σύνολο των τιμών του πεδίου ορισμού που διατηρεί ως πληθυσμό, με τον οποίο αντιμετωπίζει τα προβλήματα απαιτεί εξαιρετικά μεγάλο αριθμό επαναλήψεων για τη λύση ενός προβλήματος. Παρ' όλ' αυτά οι λύσεις συγκλίνουν με πολύ μεγάλη ακρίβεια στον επιθυμητό στόχο.
- **Αλγόριθμος Μαύρης τρύπας:** Η απουσία δυνατότητας να ρυθμιστεί ο τρόπος αντίδρασής του τον καθιστά εξαιρετικά ασταθή, σε σημείο που να μην μπορεί να συγκλίνει σε κάποιες περιπτώσεις, και τα αποτελέσματά του να έχουν μεγάλη τυχαιότητα, ανεξάρτητα από τις αρχικές τιμές παραμέτρων που του δίνονται. Όσο μεγαλώνει το πεδίο ορισμού, τόσο μεγαλύτερη και η αστάθεια που παρουσιάζει.

5.2 Αξιολόγηση μικτού σχήματος

Έχοντας εξετάσει τον τρόπο με τον οποίο ο κάθε αλγόριθμος ξεχωριστά αντιμετωπίζει ένα πρόβλημα, πρέπει να δοκιμαστεί η επίλυση του ίδιου προβλήματος από το μικτό σχήμα που περιγράφεται στο κεφάλαιο 3.2. Έχοντας ορίσει τις ίδιες αρχικές τιμές για όλους τους αλγορίθμους, αλλά και έχοντας ρυθμίσει τον τρόπο με τον οποίο θα τροφοδοτούνται οι τιμές, παίρνουμε τους παρακάτω πίνακες λύσεων για κάθε συνάρτηση αναφοράς:



Συνάρτηση αναφοράς Σφαίρας				
Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 2				
Αξιολογήσεις Αντικειμενικής Συνάρτησης για Κάθε Αλγόριθμο	Πληθυσμός για κάθε Αλγόριθμο	Πλήθος Επαναλήψεων σχήματος	Τιμή Αντικειμενικής Συνάρτησης	Συνολική Απόκλιση Σχήματος
10	50	2	$1,033 \times 10^{-3}$	0,001
	300		$1,267 \times 10^{-4}$	0,0001
20	50		$8,784 \times 10^{-6}$	10^{-6}
	300		$8,294 \times 10^{-6}$	10^{-6}
Σύγκλιση διαφοράς με την αναμενόμενη τιμή στο 10^{-2}				
7	50	2	$2,658 \times 10^{-2}$	
Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 3				
10	50	2	0,027	0,027
	300		0,012	0,012
20	50		$5,536 \times 10^{-4}$	10^{-4}
	300		$5,255 \times 10^{-4}$	10^{-4}
Σύγκλιση διαφοράς με την αναμενόμενη τιμή στο 10^{-2}				
10	50	2	$2,700 \times 10^{-2}$	

Συνάρτηση Αναφοράς Schwefel				
Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 2				
Αξιολογήσεις Αντικειμενικής Συνάρτησης για Κάθε Αλγόριθμο	Πληθυσμός για κάθε Αλγόριθμο	Πλήθος Επαναλήψεων σχήματος	Τιμή Αντικειμενικής Συνάρτησης	Συνολική Απόκλιση Σχήματος
10	50	2	3,939	3,939
	300		1,003	1,003
20	50		$3,044 \times 10^{-4}$	10^{-4}
	300		$1,284 \times 10^{-4}$	10^{-4}
Σύγκλιση διαφοράς με την αναμενόμενη τιμή στο 10^{-2}				
16	50	2	$5,532 \times 10^{-2}$	
Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 3				
10	50	2	90,644	90,644
	300		18,618	18,618
20	50		6,728	6,728
	300		$5,681 \times 10^{-3}$	10^{-3}
Σύγκλιση διαφοράς με την αναμενόμενη τιμή στο 10^{-2}				
20	300	2	$5,681 \times 10^{-3}$	



Συνάρτηση αναφοράς Alpine N.2				
Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 2				
Αξιολογήσεις Αντικειμενικής Συνάρτησης για Κάθε Αλγόριθμο	Πληθυσμός για κάθε Αλγόριθμο	Πλήθος Επαναλήψεων σχήματος	Τιμή Αντικειμενικής Συνάρτησης	Συνολική Απόκλιση Σχήματος
10	50	2	7,835	0,049
	300		7,885	0,001
20	50		7,883	-0,001
	300		7,885	0,001
Σύγκλιση διαφοράς με την αναμενόμενη τιμή στο 10^{-2}				
10	50	2	7,835	
Διαστάσεις – Ανεξάρτητες Μεταβλητές = 3				
10	50	2	20,000	2,140
	300		21,492	0,647
20	50		21,234	0,906
	300		22,142	0,002
Σύγκλιση διαφοράς με την αναμενόμενη τιμή στο 10^{-2}				
20	200	2	22,137	

Συμπεράσματα

Από την παραπάνω διαδικασία παρατηρούμε πως το μικτό σχήμα επίλυσης ενός προβλήματος βελτιστοποίησης έχει πολλαπλά οφέλη. Ξεκινώντας από τη σύγκριση της μεμονωμένης απόδοσης των αλγορίθμων, η κεντρική παρατήρηση είναι πως οι αλγόριθμοι απαιτούν κάποιο δεδομένο αριθμό αξιολογήσεων της αντικειμενικής συνάρτησης για να επιτύχουν συγκλίσεις αξιοπρεπούς ακρίβειας. Η καλύτερη απόδοση παρατηρήθηκε από τους Γενετικούς, οι οποίοι είχαν μια συνεπή συμπεριφορά ως προς την επίλυση όλων των προβλημάτων. Οι υπόλοιποι αλγόριθμοι χρειαζόνταν αρκετά περισσότερο χρόνο για να επιλύσουν το ίδιο πρόβλημα, ενώ ειδικά στις περιπτώσεις που οι διαστάσεις – ανεξάρτητες μεταβλητές του προβλήματος είναι περισσότερες από 2, τότε πολλοί αλγόριθμοι παρουσιάζουν μεγάλη δυσκολία στο να συγκλίνουν σε κάποιο ολικό βέλτιστο, ενώ σε μερικές περιπτώσεις, όπως στον Αλγόριθμο Μαύρης Τρύπας, η σύγκλιση δεν ήταν εφικτή.

Το μικτό σύστημα βελτιστοποίησης που δημιουργήθηκε και χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα μελέτη, δείχνει να λύνει όλα τα επιμέρους προβλήματα που παρουσιάζουν οι αλγόριθμοι, χωρίς να θυσιάζει απόδοση σε κανέναν τομέα. Σε όλες τις περιπτώσεις, το σύστημα επιτυγχάνει σύγκλιση με δραστικά λιγότερες αξιολογήσεις της αντικειμενικής συνάρτησης. **Βάσει και των επιμέρους αξιολογήσεων που έγιναν για τον κάθε αλγόριθμο ξεχωριστά, η διαφορά στην απόδοση είναι κατ' ελάχιστο 3 φορές καλύτερη, δηλαδή το μικτό σχήμα χρειάζεται να αξιολογήσει την αντικειμενική συνάρτηση συνολικά το 1/3 του αριθμού που χρειάζεται ο καλύτερος σε απόδοση αλγόριθμος.** Επιπλέον, κατά τη χρήση του μικτού σχήματος, χρησιμοποιήθηκε ένας δείκτης ο οποίος μετά το πέρας της διαδικασίας βελτιστοποίησης, υποδείκνυε και τον αλγόριθμο ο οποίος πέτυχε τη βέλτιστη λύση. Αυτό έγινε για λόγους αξιολόγησης του ίδιου του σχήματος, καθώς ένα σχήμα που πάντα παίρνει τη βέλτιστη λύση από τον ίδιο αλγόριθμο ενέχει περιορισμούς στη χρήση του. Σύμφωνα με αυτή τη λογική, ενώ



στη μεμονωμένη αξιολόγηση παρατηρήθηκε πως η απόδοση του Γενετικού Αλγόριθμου ήταν σταθερή και καλύτερη από τους υπολοίπους, κατά τη χρήση του μικτού σχήματος, παρατηρήθηκε πως **τη βέλτιστη λύση δεν την έδινε πάντοτε ο Γενετικός, κάνοντας το σχήμα ευέλικτο απέναντι στην πολυμορφία των προβλημάτων βελτιστοποίησης.**

Το μεγάλο πλεονέκτημα που παρατηρείται στο μικτό σχήμα, είναι πως με πολύ λίγες επαναλήψεις κατά την πρώτη φορά που καλείται, ο αλγόριθμος με την καλύτερη απόδοση επιταχύνει δραματικά τους υπόλοιπους, δίνοντας τους μια πολύ σημαντική ώθηση προς το ολικό βέλτιστο, χωρίς όμως να τους παγιδεύει σε κάποιο τοπικό βέλτιστο. Έτσι, με μια μορφή ελιτισμού, ο καλύτερος σε απόδοση αλγόριθμος στο σχήμα συνεργατικά μοιράζεται τα ευρήματά του με την ομάδα, η οποία συχνά τον ξεπερνά σε απόδοση κατά τα επόμενα βήματα. Συνεπώς, αξιοποιώντας τις δυνατότητες των διαφορετικών αλγορίθμων, βρίσκεται το ολικό βέλτιστο σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης δραστικά πιο σύντομα, χωρίς παράλληλα το σχήμα να επηρεάζεται από την κακή απόδοση κάποιου αλγορίθμου-παίκτη, καθώς για να συμβεί αυτό, θα πρέπει όλοι οι αλγόριθμοι να παρουσιάσουν πολύ κακή απόδοση στο ίδιο πρόβλημα βελτιστοποίησης. **Η πολυμορφία που δίνει το σχήμα, εκμεταλλευόμενο την ποιότητα απόδοσης του κάθε αλγορίθμου για διαφορετικό πρόβλημα, βοηθάει την όλη διαδικασία της βελτιστοποίησης να συγκλίνει σε ένα ολικό βέλτιστο, σε καλύτερο χρόνο, ανεξάρτητα της μορφής της αντικειμενικής συνάρτησης του προβλήματος.** Αυτό πρακτικά σημαίνει πως μπορεί να αξιοποιηθεί οποιοσδήποτε αλγόριθμος βελτιστοποίησης, με το σχήμα να έχει δυναμικό μήκος, δηλαδή να είναι λειτουργικό από 2 αλγόριθμους έως N , όπου N το σύνολο των αλγορίθμων βελτιστοποίησης στη βιβλιογραφία!

6. ΣΥΖΗΤΗΣΗ ΚΑΙ ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΕΥΝΑ

Μέσα από την παρούσα έρευνα, έγινε μια προσπάθεια να δημιουργηθεί ένα καινοτόμο μικτό σχήμα επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης. Σκοπός ήταν το σχήμα αυτό να μπορεί να επιλύσει προβλήματα βελτιστοποίησης εκτελώντας τον μικρότερο δυνατό αριθμό αξιολογήσεων της αντικειμενικής συνάρτησης. Παρατηρώντας το σχήμα, βγαίνει το συμπέρασμα πως μια τέτοια μέθοδος μπορεί να εξελιχθεί σε ένα πανίσχυρο εργαλείο επίλυσης με δυνατότητα να εφαρμοστεί σε όλους τους τομείς όπου παρουσιάζονται προβλήματα βελτιστοποίησης.

Αν και η παρούσα μελέτη εστιάζει στο να αποδείξει πως η εφαρμογή ενός τέτοιου σχήματος είναι εφικτή, εφαρμόζοντας τον επιλύτη σε προβλήματα με γνωστά βέλτιστα, οι προοπτικές για μελλοντική εξέλιξη του σχήματος είναι εξαιρετικές. Ένα τρομερό πλεονέκτημα είναι η δυναμική χρήση αλγορίθμων. Το σχήμα αυτό μπορεί να αξιοποιήσει από δυο αλγορίθμους στην πιο βασική του μορφή, έως και όσους θέλει ο χρήστης να εισάγει. Έτσι, στη θεωρία, ένας χρήστης θα μπορεί να επιλύσει όλα τα δυνατά προβλήματα, για όλες τις δυνατές αντικειμενικές συναρτήσεις, με το σχήμα να προωθεί αυτόματα τον καλύτερο αλγόριθμο προς επίλυση, παίρνοντας τα αποτελέσματα στον μικρότερο δυνατό χρόνο, και απαιτώντας τον μικρότερο αριθμό παραμετροποιήσεων για κάθε διαφορετικό πρόβλημα. Ειδικά στον τομέα της σχεδίασης εξαρτημάτων απόδοσης για οχήματα σε ένα αγωνιστικό περιβάλλον, τον τομέα ενδιαφέροντος που ενέπνευσε και αυτή τη μελέτη, τα προβλήματα βελτιστοποίησης είναι όλο και πιο πολύπλοκα, με νέα υλικά, μεθόδους κατεργασίας και επαναστατικές μεθόδους σχεδίασης να παρουσιάζονται διαρκώς.



Τομείς στους οποίους το σχήμα επιδέχεται βελτίωση είναι:

Οι ίδιοι οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης: Η βιβλιογραφία είναι πλούσια σε σχήματα βελτιστοποίησης, αλλά και σε διαφορετικές εκδοχές για κάθε σχήμα, με τις επιλογές να είναι πολλές. Αξιολογώντας τη βιβλιογραφία συστηματικά, το σχήμα μπορεί δυναμικά να εξελίσσεται παράλληλα με την εξέλιξη των ίδιων των αλγορίθμων βελτιστοποίησης.

Το σχήμα και ο τρόπος με τον οποίο τροφοδοτεί τους αλγορίθμους σε κάθε επανάληψη: Ερευνητές που θα ήθελαν να βελτιώσουν το σχήμα αυτό θα μπορούσαν να πειραματιστούν με διαφορετικά κριτήρια τροφοδότησης των αλγορίθμων ανάμεσα σε κάθε επανάληψη του μικτού σχήματος. Θα μπορούσε ακόμη και το ίδιο το μικτό σχήμα να πάρει τη μορφή αλγορίθμου βελτιστοποίησης, κάνοντας την επίλυση πιο αποδοτική.

Η γλώσσα προγραμματισμού: Ακόμα και με τη χρήση της ίδια γλώσσας προγραμματισμού (Python) ένας έμπειρος προγραμματιστής θα μπορούσε να βελτιστοποιήσει δραματικά τον κώδικα, από τον τρόπο γραφής έως την κατανομή πόρων για την επίλυση, βελτιώνοντας δραματικά τον χρόνο που απαιτείται για την περάτωση της διαδικασίας. Επιπλέον, υπάρχουν γλώσσες προγραμματισμού οι οποίες είναι χαμηλότερου επιπέδου, άρα εν γένει πολύ ταχύτερες από την Python και με μεγαλύτερη ακρίβεια βέλτιστης κατανομής πόρων. Ένα παράδειγμα είναι η C++.

Εξειδίκευση σχήματος αναφορικά με το πεδίο ενδιαφέροντος: Ανάλογα με τον τομέα στον οποίο ανήκει ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης (πχ μηχανική, φυσική, βιολογία) τότε το σχήμα μπορεί να παραμετροποιηθεί από ειδικούς του τομέα ώστε να ταιριάζει καλύτερα στην αντιμετώπιση των προβλημάτων του εκάστοτε ερευνητικού κλάδου.

7. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] "The Nature of Mathematical Programming", 2014, Mathematical Programming Glossary, INFORMS Computing Society.
- [2] Martins, Joaquim R. R. A.; Ning, Andrew (2021-10-01). Engineering Design Optimization. Cambridge University Press. ISBN 978-1108833417
- [3] Du, D. Z.; Pardalos, P. M.; Wu, W. (2008). "History of Optimization". In Floudas, C.; Pardalos, P. (eds.). Encyclopedia of Optimization. Boston: Springer. pp. 1538–1542
- [4] El-Omari, Nidhal. (2021). Sea Lion Optimization Algorithm for Solving the Maximum Flow Problem.
- [5] Thomas, G. B., Weir, M. D., Hass, J. R., & Giordano, F. R. (2009). Thomas Calculus (11-th ed.). *Çeviri: Recep Korkmaz, Beta Yayınları, İstanbul.*
- [6] Liberti, L., & Kucherenko, S. (2005). Comparison of deterministic and stochastic approaches to global optimization. *International Transactions in Operational Research*, 12(3), 263-285.
- [7] Sörensen, K., Sevaux, M., Glover, F. (2018). A History of Metaheuristics. In: Martí, R., Pardalos, P., Resende, M. (eds) Handbook of Heuristics. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-319-07124-4_4



- [8] Gandomi, Amir & Yang, Xin-She & Talatahari, Siamak & Alavi, Amir. (2013). *Metaheuristic Algorithms in Modeling and Optimization*. 10.1016/B978-0-12-398364-0.00001-2.
- [9] Vereshchagin, A.F. (1989). "Modelling and control of motion of manipulation robots". *Soviet Journal of Computer and Systems Sciences*. 27 (5): 29–38.
- [10] Haggag, S.; Desokey, F.; Ramadan, M. (2017). "A cosmological inflationary model using optimal control". *Gravitation and Cosmology*. 23 (3): 236–239.
- [11] Lionel Robbins (1935, 2nd ed.) *An Essay on the Nature and Significance of Economic Science*, Macmillan, p. 16.
- [12] De, Bishnu Prasad; Kar, R.; Mandal, D.; Ghoshal, S.P. (2014-09-27). "Optimal selection of components value for analog active filter design using simplex particle swarm optimization". *International Journal of Machine Learning and Cybernetics*. 6 (4): 621–636. doi:10.1007/s13042-014-0299-0. ISSN 1868-8071. S2CID 13071135.
- [13] Koziel, Slawomir; Bandler, John W. (January 2008). "Space Mapping with Multiple Coarse Models for Optimization of Microwave Components". *IEEE Microwave and Wireless Components Letters*. 18 (1): 1–3. CiteSeerX 10.1.1.147.5407. doi:10.1109/LMWC.2007.911969. S2CID 11086218.
- [14] Tu, Sheng; Cheng, Qingsha S.; Zhang, Yifan; Bandler, John W.; Nikolova, Natalia K. (July 2013). "Space Mapping Optimization of Handset Antennas Exploiting Thin-Wire Models". *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. 61 (7): 3797–3807.
- [15] N. Friedrich, "Space mapping outpaces EM optimization in handset-antenna design," *microwaves&rf*, Aug. 30, 2013.
- [16] Cervantes-González, Juan C.; Rayas-Sánchez, José E.; López, Carlos A.; Camacho-Pérez, José R.; Brito-Brito, Zabdiel; Chávez-Hurtado, José L. (February 2016). "Space mapping optimization of handset antennas considering EM effects of mobile phone components and human body". *International Journal of RF and Microwave Computer-Aided Engineering*. 26 (2): 121–128. doi:10.1002/mmce.20945.
- [17] Bandler, J.W.; Biernacki, R.M.; Chen, Shao Hua; Grobelny, P.A.; Hemmers, R.H. (1994). "Space mapping technique for electromagnetic optimization". *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. 42 (12): 2536–2544.
- [18] Bandler, J.W.; Biernacki, R.M.; Shao Hua Chen; Hemmers, R.H.; Madsen, K. (1995). "Electromagnetic optimization exploiting aggressive space mapping". *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. 43 (12): 2874–2882.
- [19] Hegazy, Tarek (June 1999). "Optimization of Resource Allocation and Leveling Using Genetic Algorithms". *Journal of Construction Engineering and Management*. 125 (3): 167–175. doi:10.1061/(ASCE)0733-9364(1999)125:3(167)
- [20] Piryonesi, S. Madeh; Nasser, Mehran; Ramezani, Abdollah (9 July 2018). "Piryonesi, S. M., Nasser, M., & Ramezani, A. (2018). Resource leveling in construction projects with activity splitting and resource constraints: a simulated annealing optimization". *Canadian Journal of Civil Engineering*. 46: 81–86. doi:10.1139/cjce-2017-0670. hdl:1807/93364. S2CID 116480238.
- [21] Herty, M.; Klar, A. (2003-01-01). "Modeling, Simulation, and Optimization of Traffic Flow Networks". *SIAM Journal on Scientific Computing*. 25 (3): 1066–1087. doi:10.1137/S106482750241459X.
- [22] "New force on the political scene: the Seophonisten". December 2014. Retrieved 14 September 2013.



- [23] Papoutsakis, Eleftherios Terry (February 1984). "Equations and calculations for fermentations of butyric acid bacteria". *Biotechnology and Bioengineering*. 26 (2): 174–187. doi:10.1002/bit.260260210
- [24] Polishchuk PG, Madzhidov TI, Varnek A (2013) Estimation of the size of drug-like chemical space based on gdb-17 data. *J Comput Aided Mol Des* 27(8):675–679
- [25] Topliss JG (1972) Utilization of operational schemes for analog synthesis in drug design. *J Med Chem* 15(10):1006–1011
- [26] Segler MH, Kogej T, Tyrchan C, Waller MP (2018) Generating focused molecule libraries for drug discovery with recurrent neural networks. *ACS Central Sci* 4(1):120–131
- [27] Gupta A, Müller AT, Huisman BJ, Fuchs JA, Schneider P, Schneider G (2018) Generative recurrent networks for de novo drug design. *Mol Inform* 37(1–2):1700111
- [28] Bjerrum EJ, Threlfall R (2017) Molecular generation with recurrent neural networks (RNNs). arXiv preprint arXiv:1705.04612
- [29] Gómez-Bombarelli R, Wei JN, Duvenaud D, Hernández-Lobato JM, Sánchez-Lengeling B, Sheberla D, Aguilera-Iparraguirre J, Hirzel TD, Adams RP, Aspuru-Guzik A (2018) Automatic chemical design using a data-driven continuous representation of molecules. *ACS Central Sci* 4(2):268–276
- [30] Dai H, Tian Y, Dai B, Skiena S, Song L (2018) Syntax-directed variational autoencoder for molecule generation. In: *Proceedings of the international conference on learning representations*
- [31] Lim J, Ryu S, Kim JW, Kim WY (2018) Molecular generative model based on conditional variational autoencoder for de novo molecular design. *J Cheminform* 10(1):1–9
- [32] Jin W, Barzilay R, Jaakkola T (2018) Junction tree variational autoencoder for molecular graph generation. In: *International Conference on Machine Learning*, pp. 2323–2332
- [33] Liu Q, Allamanis M, Brockschmidt M, Gaunt A (2018) Constrained graph variational autoencoders for molecule design. In: *Advances in neural information processing systems*, pp. 7795–7804
- [34] Simonovsky M, Komodakis N (2018) Graphvae: Towards generation of small graphs using variational autoencoders. In: *International conference on artificial neural networks*, pp. 412–422. Springer
- [35] Guimaraes GL, Sanchez-Lengeling B, Outeiral C, Farias P.L.C., Aspuru-Guzik A (2017) Objective-reinforced generative adversarial networks (organ) for sequence generation models. arXiv preprint arXiv:1705.10843
- [36] Putin E, Asadulaev A, Ivanenkov Y, Aladinskiy V, Sanchez-Lengeling B, Aspuru-Guzik A, Zhavoronkov A (2018) Reinforced adversarial neural computer for de novo molecular design. *J Chem Inf Model* 58(6):1194–1204
- [37] Putin E, Asadulaev A, Vanhaelen Q, Ivanenkov Y, Aladinskaya AV, Aliper A, Zhavoronkov A (2018) Adversarial threshold neural computer for molecular de novo design. *Mol Pharm* 15(10):4386–4397
- [38] De Cao N, Kipf T (2018) MolGAN: An implicit generative model for small molecular graphs. In: *ICML 2018 workshop on theoretical foundations and applications of deep generative models*
- [39] Olivecrona M, Blaschke T, Engkvist O, Chen H (2017) Molecular de-novo design through deep reinforcement learning. *J Cheminform* 9(1):48
- [40] Jin W, Yang K, Barzilay R, Jaakkola T (2018) Learning multimodal graph-to-graph translation for molecule optimization. In: *International conference on learning representations*



- [41] Kadurin A, Nikolenko S, Khrabrov K, Aliper A, Zhavoronkov A (2017) druGAN: an advanced generative adversarial autoencoder model for de novo generation of new molecules with desired molecular properties in silico. *Mol Pharm* 14(9):3098–3104
- [42] Blaschke T, Olivecrona M, Engkvist O, Bajorath J, Chen H (2018) Application of generative autoencoder in de novo molecular design. *Mol Inform* 37(1–2):1700123
- [43] Winter R, Montanari F, Steffen A, Briem H, Noé F, Clevert D-A (2019) Efficient multi-objective molecular optimization in a continuous latent space. *Chem Sci* 10(34):8016–8024
- [44] Li Y, Zhang L, Liu Z (2018) Multi-objective de novo drug design with conditional graph generative model. *J Cheminform* 10(1):33
- [45] Kotsias P-C, Arús-Pous J, Chen H, Engkvist O, Tyrchan C, Bjerrum EJ (2020) Direct steering of de novo molecular generation with descriptor conditional recurrent neural networks. *Nat Mach Intell* 2(5):254–265
- [46] He J, Mattsson F, Forsberg M, Bjerrum E.J., Engkvist O, Tyrchan C, Czechtizky W, et al. (2021) Transformer neural network for structure constrained molecular optimization. In: *ICLR 2021 workshop: machine learning for preventing and combating pandemics*
- [47] Weininger D (1988) Smiles, a chemical language and information system. 1. introduction to methodology and encoding rules. *J Chem Inf Comput Sci* 28(1):31–36
- [48] Sutskever I, Vinyals O, Le Q.V. (2014) Sequence to sequence learning with neural networks. In: *Advances in neural information processing systems*, pp. 3104–3112
- [49] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, Uszkoreit J, Jones L, Gomez A.N., Kaiser Ł, Polosukhin I (2017) Attention is all you need. In: *Advances in neural information processing systems*, pp. 5998–6008
- [50] Kenny PW, Sadowski J (2005) Structure modification in chemical databases. *Chemoinform Drug Discov* 23:271–285
- [51] Jason Brownlee, (2021), *Why Optimization Is Important in Machine Learning, Machine Learning Mastery*
- [52] Holland, J. H. (1992). *Adaptation in natural and artificial systems: an introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence*. MIT press.
- [53] Goldberg, D. E. (2006). *Genetic algorithms*. Pearson Education India.
- [54] Mitchell, M. (1998). *An introduction to genetic algorithms*. MIT press.
- [55] Mühlenbein, H., & Paass, G. (1996, September). From recombination of genes to the estimation of distributions I. Binary parameters. In *International conference on parallel problem solving from nature* (pp. 178-187). Springer, Berlin, Heidelberg
- [56] Pelikan, M., Goldberg, D. E., & Lobo, F. G. (2002). A survey of optimization by building and using probabilistic models. *Computational optimization and applications*, 21(1), 5-20.
- [57] Bäck, T., Fogel, D. B., & Michalewicz, Z. (1997). *Handbook of evolutionary computation*. Release, 97(1), B1.
- [58] Yang, X.S. (2009). *Firefly Algorithms for Multimodal Optimization*. In: Watanabe, O., Zeugmann, T. (eds) *Stochastic Algorithms: Foundations and Applications*. SAGA 2009. *Lecture Notes in Computer Science*, vol 5792. Springer, Berlin, Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-04944-6_14
- [59] Surafel Lulseged Tilahun, Hong Choon Ong, "Modified Firefly Algorithm", *Journal of Applied Mathematics*, vol. 2012, Article ID 467631, 12 pages, 2012. <https://doi.org/10.1155/2012/467631>



- [60] X. Z. Gao, V. Govindasamy, H. Xu, X. Wang, K. Zenger, "Harmony Search Method: Theory and Applications", Computational Intelligence and Neuroscience, vol. 2015, Article ID 258491, 10 pages, 2015. <https://doi.org/10.1155/2015/258491>
- [61] Kumar, Santosh & Datta, Deepanwita & Singh, Sanjay. (2015). Black Hole Algorithm and Its Applications. Studies in Computational Intelligence. 575. 147-170. 10.1007/978-3-319-11017-2_7.
- [62] Momin Jamil and Xin-She Yang, (2013). A literature survey of benchmark functions for global optimization problems, Int. Journal of Mathematical Modelling and Numerical Optimisation, Vol. 4, No. 2, pp. 150–194. 10.1504/IJMMNO.2013.055204
- [69] Bunkley, Nick (2008). «Joseph Juran, 103, Pioneer in Quality Control, Dies». The New York Times
- [70] Ranajeet Mohanty, Shakti Suman, Sarat Kumar Das, (2017), Chapter 16 - Modeling the Axial Capacity of Bored Piles Using Multi-Objective Feature Selection, Functional Network and Multivariate Adaptive Regression Spline, Handbook of Neural Computation, Academic Press, ISBN 9780128113189

Links:

- [63] <https://www.python.org>
- [64] <https://anaconda.org>
- [65] <https://www.sublimetext.com>
- [66] <https://www.spyder-ide.org>
- [67] <https://numpy.org>
- [68] http://users.auth.gr/pyth/mathsI/NEO_PROGRAMMA_SPOUDON/4.%20DIANYS_MATIKOS_LOGISMOS/3_Dianyismatikes_Synartiseis_Paragogisi_Klisi_TMHEMA2.pdf

Εικόνες:

- [Εικόνα 1] <https://medium.com/intuitionmachine/the-alien-look-of-deep-learning-generative-design-5c5f871f7d10>
- [Εικόνα 2] Bonte, M.H.A. & Van den Boogaard, Ton & Huetink, J.. (2008). An optimisation strategy for industrial metal forming processes : MModelling, screening and solving of optimisation problems in metal forming. Structural and Multidisciplinary Optimization. 35. 10.1007/s00158-007-0206-3.
- [Εικόνα 3] <https://medium.com/analytics-vidhya/journey-of-gradient-descent-from-local-to-global-c851eba3d367>
- [Εικόνα 4] Hebbal, Ali & Brevault, Loïc & Balesdent, Mathieu & Talbi, El-Ghazali & Melab, Nouredine. (2018). Efficient Global Optimization using Deep Gaussian Processes.
- [Εικόνα 5] <https://machinelearningmastery.com/a-gentle-introduction-to-optimization-mathematical-programming/>
- [Εικόνα 7] <https://www.engati.com/glossary/non-deterministic-algorithm>
- [Εικόνα 8] <https://math.aalto.fi/~lleskela/SDLRG/>
- [Εικόνα 9] Barros, Rodrigo & de Carvalho, Andre & Freitas, Alex. (2015). Automatic Design of Decision-Tree Induction Algorithms. 10.1007/978-3-319-14231-9.
- [Εικόνα 10] https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Metaheuristics_classification_fr.svg
- [Εικόνα 11] Scrucca, Luca. (2013). GA: A Package for Genetic Algorithms in R. Journal of Statistical Software. 53. 1-37. 10.18637/jss.v053.i04.



- [Εικόνα 12] Senaratna, N.I. (2005). Genetic Algorithms: The Crossover-Mutation Debate.
- [Εικόνα 13] Selvaraj, Senthil Kumaran & Kaliappan, Jayakumar & Srinivasan, Kathiravan & Hu, Yuh-Chung & Sanjeevikumar, P. & Narayanan, Srinivasan. (2020). Realizing a Novel Friction Stir Processing Enabled FWTPET Process for Strength Enhancement Using Firefly and PSO Methods. *Materials*.
- [Εικόνα 14] X. Z. Gao, V. Govindasamy, H. Xu, X. Wang, K. Zenger, "Harmony Search Method: Theory and Applications", *Computational Intelligence and Neuroscience*, vol. 2015, Article ID 258491, 10 pages, 2015.
<https://doi.org/10.1155/2015/258491>
- [Εικόνα 15] Yaghoobi, S., & Mojallali, H. (2016). Modified black hole algorithm with genetic operators. *International Journal of Computational Intelligence Systems*, 9(4), 652-665.
- [Εικόνα 16] Hatamlou, Abdolreza. (2018). Solving travelling salesman problem using black hole algorithm. *Soft Computing*. 22. 10.1007/s00500-017-2760-y.
- [Εικόνα 17] <https://www.quora.com/Shouldnt-the-event-horizon-of-a-black-hole-be-spherical-rather-than-circular-as-shown-in-the-movie-Interstellar>
- [Εικόνα 18] Bidar, Mahdi & Sadaoui, Samira & Mouhoub, Malek & Bidar, Mohsen. (2018). Enhanced Firefly Algorithm Using Fuzzy Parameter Tuner.
- [Εικόνα 19,20,21] <https://towardsdatascience.com/optimization-eye-pleasure-78-benchmark-test-functions-for-single-objective-optimization-92e7ed1d1f12>
- [Εικόνα 23] Ref [63]