Fuentes de dificultad en optimización global con restricciones usando algoritmos evolutivos.[♦]

Efrén Mezura-Montes y Carlos A. Coello Coello[•]

Resumen

En este artículo se presenta un estudio empírico sobre las características de un problema de optimización global con restricciones que suponemos lo hacen difícil de resolver usando un algoritmo evolutivo, el cual haya demostrado ser competitivo al resolver el conjunto de trece problemas comúnmente utilizado en la literatura. Para ello, se propone un conjunto de once nuevas funciones de prueba tomadas de la literatura (tanto artificiales como del mundo real) que incluyen dichas características (varias restricciones de igualdad no lineales, un número elevado de restricciones de desigualdad no lineales, alta dimensionalidad). Los resultados preliminares usando un algoritmo del estado del arte en este nuevo conjunto de funciones son presentados y discutidos.

1. Introducción

En este artículo nuestro interés es resolver el problema general de programación no lineal en el que se quiere: Encontrar $\vec{x}$ que optimiza $f(\vec{x})$

Sujeta a:

$$g_i(\vec{x}) \le 0 \qquad i = 1, \ldots, m$$

$$h_j(\vec{x}) = 0 \qquad j = 1, \ldots, p$$

donde $\vec{x}$ es un vector de soluciones $\vec{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^T$, m es el número de restricciones de desigualdad y p el número de restricciones de igualdad (en ambos casos las restricciones pueden ser lineales o no lineales).

Los Algoritmos evolutivos (AEs) han sido ampliamente aplicados a la solución de diversos problemas de optimización [1]. Sin embargo, en su versión original, el AE carece de un mecanismo explícito para el manejo de las restricciones de un problema; de ahí que se haya generado una gran cantidad de técnicas para incorporar las restricciones a la función de aptitud de un AE [2,9]. Este trabajo describe un primer intento por determinar, de manera empírica, aquellos aspectos clave que hacen a un problema de optimización restringido difícil de resolver mediante un AE. Nuestro estudio toma como base la Estrategia Evolutiva Multimiembro Simple (SMES por sus siglas en inglés) [6] que ha demostrado ser competitivo en el conjunto de problemas típicamente utilizado en la literatura de AEs [9,12]. Nuestra hipótesis se basa en que dicho conjunto de soluciones carece de problemas cuyas características los hacen difíciles de resolver usando AEs. Para ello proponemos once nuevos problemas tomados de la literatura de optimización, los cuales tienen dichas características (un número mayor de restricciones de igualdad no lineales y una alta dimensionalidad). SMES fue utilizado para resolver las nuevas funciones de prueba con el objeto de corroborar aquellas características que nosotros suponemos causan dificultades y que deben tomarse en cuenta para diseñar AEs competitivos para resolver problemas con restricciones.

Este artículo está organizado de la siguiente manera: En la Sección 2 se describe el trabajo previo sobre el análisis de características de problemas de optimización con restricciones. En la Sección 3 mostramos nuestro estudio empírico y comentamos las características de los once nuevos problemas. Más adelante en la Sección 4 se presenta la discusión de resultados. Finalmente se presentan las conclusiones y el trabajo futuro en la Sección 5.

[♦] El primer autor agradece el apoyo de CONACyT mediante una estancia posdoctoral en el CINVESTAV-IPN. El segundo autor agradece el apoyo otorgado por CONACyT mediante el proyecto 42435-Y

[•] Grupo de Computación Evolutiva del CINVESTAV-IPN. Av. IPN # 2508 Col. San Pedro Zacatenco. México D.F México.
emezura@computacion.cs.cinvestav.mx
ccoello@cs.cinvestav.mx

2. Trabajo previo

La idea de tener un conjunto de problemas con diferentes características para evaluar algoritmos evolutivos para resolver problemas con restricciones fue propuesto inicialmente por Michalewicz y Schoenauer [8]. Este conjunto consistía de once problemas con características como: restricciones de igualdad y desigualdad tanto lineales como no lineales (hasta 3 igualdades no lineales), baja y alta dimensionalidad (hasta 20 variables de decisión). Además, Michalewicz y Schoenauer [8] propusieron una medida para estimar el tamaño de la zona factible con respecto a todo el espacio de búsqueda y posteriormente agregaron una nueva función cuya principal diferencia es que cuenta con una zona factible disjunta. Runarsson y Yao [11] agregaron otra función, la cual tiene 3 restricciones de igualdad no lineales. De esta manera el conjunto de prueba se volvió más completo y su objetivo de ser un medio estándar de evaluación de técnicas evolutivas fue alcanzado. Sin embargo, se sabe por el teorema de No Free Lunch [12], que utilizar un número finito de funciones de prueba no garantiza de ninguna manera que un algoritmo que tenga un buen desempeño en ellas, será necesariamente competitivo en otro conjunto de prueba distinto. Esto nos motiva a identificar nuevas funciones de prueba para validar AEs que contengan características no cubiertas en los problemas de prueba actuales.

Recientemente, Michalewicz [9] propuso un generador de casos de prueba "TCG" para técnicas de optimización con restricciones, el cual permite construir problemas variando distintas características como lo son: dimensionalidad, multimodalidad, número de restricciones, qué tanto está conectada la zona factible, tamaño de la misma con respecto a todo el espacio de búsqueda, tipo de paisaje de aptitud de la función objetivo (unimodal o multimodal). Esta primera versión resultaba inadecuada ya que generaba problemas muy simétricos [9]. Por ello los autores propusieron una segunda versión "TCG-2" [10]. Ambas versiones fueron utilizadas para probar un algoritmo evolutivo de estado uniforme con codificación real y una función de penalización estática. Los resultados sugirieron que la alta dimensionalidad y la multimodalidad son claves en el pobre desempeño del AE. Para el primer TCG, el tener una zona factible altamente disjunta afectó también el buen desempeño del algoritmo. Para el TCG-2, el ancho de cada pico (vecindades de óptimos locales) de la función objetivo también afectó el desempeño del algoritmo. Entre los factores que no mostraron influencia alguna fue el tamaño de la zona factible con respecto a todo el espacio de búsqueda. Para el primer TCG tampoco mostró efecto alguno el número de restricciones y para el TCG-2, el número de restricciones activas.

3. Nuestro estudio empírico

La motivación de este trabajo es determinar aquellos aspectos claves que hacen difícil a un problema con restricciones para un algoritmo evolutivo y que obviamente no están cubiertos en el actual conjunto de problemas de prueba. Este conocimiento apoyará a los investigadores a desarrollar técnicas aún más robustas para resolver problemas en espacios restringidos. Nuestra hipótesis principal se basa en que el conjunto actual de funciones de prueba carece de dos características principales: funciones con alta dimensionalidad (más de veinte variables) y funciones con un número considerable (más de tres) restricciones de igualdad no lineales. Como aspectos secundarios importantes consideramos el número de restricciones de desigualdad no lineales (más de diez), la no linealidad de la función objetivo y la presencia de una zona factible disjunta. Las características de las funciones del conjunto de prueba original están resumidas en la tabla 1, donde *n* es el número de variables de decisión del problema, DL es el número de restricciones de desigualdad lineales, DN es el número de restricciones de desigualdad no lineales, IL es el número de restricciones de igualdad lineales y IN es el número de restricciones de igualdad no lineales.

Para estimar el tamaño de la zona factible con respecto a todo el espacio de búsqueda se calculó la métrica *r* propuesta por Michalewicz y Schoenauer [8]: r=|F|/|S|, donde |F| es el número de soluciones factibles y |S| es el número total de soluciones generadas aleatoriamente. En este trabajo, S =1,000,000 soluciones aleatorias.

A diferencia del TCG de Michalewicz, nosotros no intentamos proveer una guía al usuario para escoger el mejor AE para un problema con ciertas características, sino que queremos detectar fuentes de dificultad no incluidas en el conjunto de funciones de prueba actual y complementarlo con nuevos problemas.

P	**n**	**F**	r	**DL**	**DN**	**IL**	**IN**
G01	13	Cuadrática	0.003%	9	0	0	0
G02	20	No lineal	99.99%	1	1	0	0
G03	10	No lineal	0.003%	0	0	0	1
G04	5	Cuadrática	27.01%	0	6	0	0
G05	4	No lineal	0%	2	0	0	3
G06	2	No lineal	0.0057%	0	2	0	0
G07	10	Cuadrática	0%	3	5	0	0
G08	2	No lineal	0.8581%	0	2	0	0
g09	7	No lineal	0.5199%	0	4	0	0
g10	8	Lineal	0.002%	3	3	0	0
g11	2	Cuadrática	0.0973%	0	0	0	1
g12	3	Cuadrática	4.7697%	0	9[3]	0	0
g13	5	No lineal	0%	0	0	1	2

Tabla 1. Resumen de las 13 funciones de prueba originales

Nuestro experimento consistió en lo siguiente: El primer paso fue seleccionar funciones de prueba (artificiales o del mundo real) que tengan al menos una de las características mencionadas anteriormente. Seleccionamos siete funciones del libro de Himmelblau [5] (g14, g15, g16, g17, g18, g19 y g20), dos más fueron tomadas de problemas de redes de intercambio de calor detalladas en [3] (g21, g22). Una más fue propuesta por Xia [13] (g23) y la última fue tomada del Handbook de Floudas [4] (g24). Los problemas seleccionados con una alta dimensionalidad son: g19, g20 y g22. Las funciones de prueba con más de tres restricciones de igualdad no lineales son: g17, g20, g21 y g22. Con respecto a las características secundarias, los problemas con más de diez restricciones de desigualdad no lineales están g16 y g18. También incluimos problemas con funciones objetivo no lineales: g14, g16, g17 y g19. Finalmente, incluimos una función de prueba con una zona factible que consiste en dos sub-regiones desconectadas: g24. Finalmente agregamos dos funciones más: una que sólo tiene una restricción de igualdad no lineal y que tienen una función objetivo cuadrática y lineal respectivamente: g15 y g23.

Por cuestiones de espacio no se presentan los detalles de cada función, pero éstos pueden encontrarse en [7]. Las características de las nuevas once funciones propuestas están en la tabla 2. La nomenclatura de la tabla 2 es similar a la explicada para la tabla 1. El segundo paso de nuestro experimento fue el seleccionar un algoritmo en la literatura especializada que tuviera un desempeño competitivo en el conjunto tradicional de funciones.

P	**n**	**F**	r	**DL**	**DN**	**IL**	**IN**
g14	10	No lineal	0%	0	0	3	0
g15	3	Cuadrática	0%	0	0	1	1
g16	5	No lineal	0.0204%	4	34	0	0
g17	6	No lineal	0%	0	0	0	4
g18	9	Cuadrática	0%	0	13	0	0
g19	15	No lineal	33.48%	0	5	0	0
g20	24	Lineal	0%	0	6	2	12
g21	7	Lineal	0%	0	1	0	5
g22	22	Lineal	0%	0	1	8	11
g23	9	Lineal	0%	0	2	3	1
g24	2	Lineal	79.66%	0	2	0	0

Tabla 2. Resumen de las 11 nuevas funciones de prueba

El algoritmo seleccionado fue la Estrategia Evolutiva Multimiembro Simple (SMES) propuesta en [6]. Nuestro SMES utiliza un mecanismo de comparación basado en reglas de factibilidad y un mecanismo simple de diversidad que mantiene soluciones no factibles cercanas a los límites de la zona factible. Los resultados de SMES fueron comparados en [6] contra tres algoritmos del estado del arte. El siguiente paso fue probar el SMES utilizando exactamente los mismos valores para sus parámetros que los usados en el conjunto original de funciones, pero ahora en los once nuevos problemas.

En nuestros experimentos, realizamos 30 corridas independientes por cada función de prueba. Los factores de aprendizaje requeridos por SMES fueron calculados utilizando las fórmulas propuestas por Schwefel [1] (donde n es el número de variables de decisión del problema): $t = \sqrt{2\sqrt{\boldsymbol{n}}}^{-1}$ and $t' = \sqrt{2\boldsymbol{n}}^{-1}$. Los demás parámetros son los siguientes: (100+300)-ES, número de generaciones: 800, evaluaciones de la función objetivo: 240,000. El valor inicial de la tolerancia para restricciones de igualdad es de ε=0.001.

4. Resultados y discusión

Los resultados estadísticos obtenidos por el SMES para las primeras trece funciones de prueba se resumen en la tabla 3. Los resultados para las nuevas once funciones se presentan en la tabla 4. En ambas tablas se presenta en **negritas** aquellas soluciones obtenidas por SMES iguales a la mejor solución conocida.

Como puede verse en la tabla 3, para las 13 funciones tradicionales el SMES obtuvo la mejor solución conocida (u óptimo global en su caso) en siete de ellas (g01, g03, g04, g06, g08, g11 y g12) y encontró muy buenas aproximaciones en las restantes seis (g02, g05, g07, g09, g10 y g13). Estos resultados son discutidos y comparados a detalle en [6]. Sin embargo, los resultados obtenidos para las nuevas once funciones son contrastantes. SMES no tuvo problema en resolver el problema g16 a pesar de su pequeño valor de ρ y su considerable número de restricciones de desigualdad no lineales (34) combinadas con 4 restricciones de igualdad lineales, una función objetivo no lineal y una baja dimensionalidad (5 variables). SMES resolvió también con éxito los problemas g14 (función objetivo no lineal y 3 restricciones de igualdad lineales) y g18 (función objetivo cuadrática y 13 restricciones de desigualdad no lineales). Ambos problemas tienen un valor de ρ=0% (una zona factible muy pequeña) y una dimensionalidad de 10 y 9 variables respectivamente. Para el caso del problema g19, SMES no obtuvo buenos resultados; g19 tiene una función objetivo no lineal y 5 restricciones de desigualdad también no lineales. Es interesante que, a pesar de que tiene un valor de ρ=33.48% (que implica una región factible considerablemente grande) y ninguna restricción de igualdad no lineal, SMES no pudo encontrar la mejor solución conocida. Un punto clave para g19 es su dimensionalidad (15 variables). Otro caso interesante es g15, donde en 11 de las 30 corridas SMES no pudo encontrar soluciones factibles; g15 tiene 2 restricciones de igualdad, una lineal y la otra no lineal, la función objetivo es cuadrática y su valor de ρ=0% y sólo 3 variables de decisión; es decir, parece ser un problema que no presenta fuertes fuentes de dificultad, excepto su muy pequeña zona factible. Por otro lado, los problemas g17, g20, g21 y g22 tienen una característica común: tienen más restricciones de igualdad no lineales que cualquier otro problema del nuevo y del tradicional conjunto de problemas (4, 12, 5 y 11 respectivamente) y SMES no pudo encontrar soluciones factibles en ninguna corrida. La dimensionalidad en estos cuatro problemas es distinta (6, 24, 7 y 22 respectivamente). Para tres de estos problemas la función objetivo es lineal: g20, g21 y g22. Sólo g17 tiene una función objetivo no lineal. Esto sugiere que la fuente de dificultad proviene del número de restricciones de igualdad no lineales. Es importante recordar que ninguna de las 13 funciones del conjunto original tiene más de 3 restricciones de igualdad no lineales. Además, ningún problema con restricciones de igualdad no lineales en el conjunto de funciones original tiene más de 5 variables de decisión.

P/ Mejor Solución	Mejor	Media	Peor	Desv. Est
g01/**-15.0**	**-15.0**	**-15.0**	**-15.0**	0
g02/**0.803619**	0.803601	0.785238	0.751322	1.67E-2
g03/ **1.0**	**1.0**	**1.0**	**1.0**	2.09E-4
g04/**-30665.5**	**-30665.5**	**-30665.5**	**-30665.5**	0
g05/**5126.498**	5126.599	5174.492	5304.167	50.06E+0
g06/**-6961.81**	**-6961.81**	-6961.28	-6952.48	1.85E+0
g07/**24.306**	24.327	24.475	24.843	1.32E-1
g08/**0.095825**	**0.095825**	**0.095825**	**0.095825**	0
g09/**680.63**	680.632	680.643	680.719	1.55E-2
g10/**7049.25**	7051.903	7253.047	7638.366	136.0E+0
g11/**0.75**	**0.75**	**0.75**	**0.75**	1.52E-4
g12/**1.0**	**1.0**	**1.0**	**1.0**	0
g13/**0.05395**	0.053986	0.166385	0.468294	1.77E-1

Tabla 3. Estadísticas obtenidas por el SMES para las primeras 13 funciones

Esto también refuerza la idea de que el incremento en el número de variables de decisión y del número de restricciones de igualdad no lineales, hacen al problema muy difícil de resolver para el SMES utilizando parámetros similares a los usados para obtener muy buenos resultados en el conjunto de problemas de prueba original. De hecho, sólo una de estas características puede ser suficiente para causar un desempeño pobre del algoritmo, como en el caso de g19 que no tiene restricciones de igualdad, pero sí 15 variables de decisión. Algo similar se observa en g17 que tiene sólo 6 variables de decisión pero 4 restricciones de igualdad no lineales. El desempeño tiende a degradarse aún más cuando se combinan ambos elementos (alta dimensionalidad y más de 3 restricciones de igualdad no lineales), como en los problemas g20 y g22. Es también importante remarcar que para los problemas g17, g20, g21 y g23, la suma de violación de restricciones es muy pequeña; caso contrario de g23 donde la mejor solución encontrada está muy lejos de ser factible.

P/Mejor Solución	Mejor	Media	Peor	Desv. Est
g14/**-47.656**	-47.535	-47.367	-47.053	1.33E-1
g15/**961.715**	961.698	963.922	967.787	1.79E+0
g16/**1.905**	**1.905**	**1.905**	**1.905**	0
g17/**8927.588**	*8890.183	*8954.136	*9163.677	40.83E+0
g18/**0.866**	**0.866**	0.716	0.648	8.19E-2
g19/**-32.386**	-34.223	-37.208	-41.251	2.10E+0
g20/**0.0967**	*0.211	*0.251	*0.252	2.33E-2
g21/**193.778**	*347.980	*678.392	*985.782	158.0E+0
g22/**12812.5**	*2340.61	*9438.26	*17671.54	4360E+0
g23/**-400.055**	*-1470.15	*-363.51	*177.25	316.0E+0
g24/**-5.508**	**-5.508**	**-5.508**	**-5.508**	1.0E-5

Tabla 4. Estadísticas obtenidas por el SMES para las nuevas 11 funciones. “*” significa no factible.

Otro punto de comparación que llamó la atención es entre g15 y g23, ambas funciones con sólo una restricción de igualdad no lineal y un valor de ρ=0%. Recordemos que en g15 SMES obtuvo resultados moderadamente aceptables y en g23 obtuvo los peores resultados. Aquí la diferencia parece radicar en que g23 tiene una mayor dimensionalidad (9 variables), combinada con 3 restricciones de igualdad lineales y 2 de desigualdad no lineales (g15 sólo agrega una restricción de igualdad lineal). Finalmente, el problema g24 que tiene una zona factible disjunta y considerablemente grande y con una baja dimensionalidad (2 variables) no representó problema para el SMES. Resumiendo, los resultados sugieren que los dos factores que afectaron el desempeño del SMES y que no están presentes en el conjunto de soluciones actual es la alta dimensionalidad (similar a la conclusión de Michalewicz para el enfoque basado en una función de penalización estática [10,11]) y el incremento en el número de restricciones de igualdad no lineales. Los factores que parecen no afectar al desempeño de SMES son: un alto número de restricciones de desigualdad lineales o no lineales e, inesperadamente, el tipo de la función objetivo (aunque esto puede explicarse porque el SMES busca minimizar la suma de violación de restricciones en primera instancia y, acto seguido, trata de optimizar el valor de la función objetivo). Finalmente, una zona factible disjunta y de tamaño considerable con respecto a todo el espacio de búsqueda y con una baja dimensionalidad parece no afectar el buen desempeño de SMES. Este estudio está muy lejos de ser concluyente, pero provee de algunas ideas de las fuentes de dificultad que no son incluidas en el conjunto de problemas de prueba actual. Esta información puede ayudar al diseño de AEs más robustos.

5. Conclusiones y trabajo futuro

Hemos presentado un estudio empírico preliminar sobre las fuentes de dificultad no incluidas en el conjunto de funciones de prueba comúnmente usado en la literatura para optimización con restricciones. Los resultados obtenidos sugieren que el número de restricciones de igualdad no lineales y la alta dimensionalidad son las fuentes de dificultad mayores para un AE que ha demostrado ser competitivo en el referido conjunto de problemas actual. Aquellos factores que no mostraron influencia negativa en el desempeño del AE fueron: un alto número de restricciones de desigualdad no lineales y el tipo de función objetivo del problema. Obviamente se requieren de mayores estudios para establecer con mayor certidumbre las características que requieren mayor atención al diseñar AEs para optimización en espacios restringidos. El trabajo futuro consiste en analizar con mayor detenimiento características como el tamaño estimado de la zona factible y otras nuevas características tales como convexidad.

Referencias

[1] Bäck, T. Evolutionary Algorithms in Theory and Practice. Oxford University Press, New York (1996)

[2] Coello Coello, C.A. Theoretical and Numerical Constraint Handling Techniques used with Evolutionary Algorithms: A Survey of the State of the Art., Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 191 (2002) 1245—1287

[3] Epperly, T., Swaney, R. Branch and Bound for Global NLP: Iterative LP Algorithm & Results., In Grossman, I.E., ed., Global Optimization in Engineering Design. Nonconvex Optimization and its Applications. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, the Netherlands (1996) 37—73

[4] Floudas C.A. et al. Handbook of Test Problems in Local and Global Optimization. Nonconvex Optimization and its Applications. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, the Netherlands (1999)

[5] Himmelblau, D.M., Applied Nonlinear Programming., Mc-Graw-Hill, USA (1972)

[6] Mezura-Montes E. and Coello Coello C.A. An Improved Diversity Mechanism for Solving Constrained Optimization Problems Using a Multimembered Evolution Strategy. In Kalyanmoy Deb et al., editors, Proceedings of the GECCO'2004 Conference, pages 700-712, June 2004. Seattle, WA, Springer Verlag.

[7] Mezura-Montes E. and Coello Coello C.A. What Makes a Constrained Problem Difficult to Solve by an Evolutionary Algorithm. Technical Report EVOCINV-01-2004, Evolutionary Computation Group at CINVESTAV-IPN, 2004. Available at http://www.cs.cinvestav.mx/~constraint/.

[8] Michalewicz Z. and Schoenauer M. Evolutionary Algorithms for Constrained Parameter Optimization Problems. Evolutionary Computation, 4(1):1-32, 1996.

[9] Michalewicz Z., Deb K., Schmidt M., and Stidsen T. Test-Case Generator for Nonlinear Continuous Parameter Optimization Techniques. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 4(3):197-215, September 2000.

[10] Michalewicz Z. and Schmidt M. TCG-2: A Test-Case Generator for Non-linear Parameter Optimisation Techniques. In Ashish Ghosh et al., editors, Advances in Evolutionary Computing, Theory and Applications, pages 193-212. Springer, Heidelberg, Germany, 2003.

[11] Runarsson T.P. and Yao X. Stochastic Ranking for Constrained Evolutionary Optimization. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 4(3):284-294, September 2000.

[12] Wolpert, D.H., Macready, W.G. No Free Lunch Theorems for Optimization. IEEE Transactions on Evolutionary Computation 1 (1997) 67—82

[13] Xia, Q. Global optimization test problems (1996) Available at http://www.mat.univie.ac.at/~neum/glopt/xia.txt.