UNIWERSYTET WARSZAWSKI

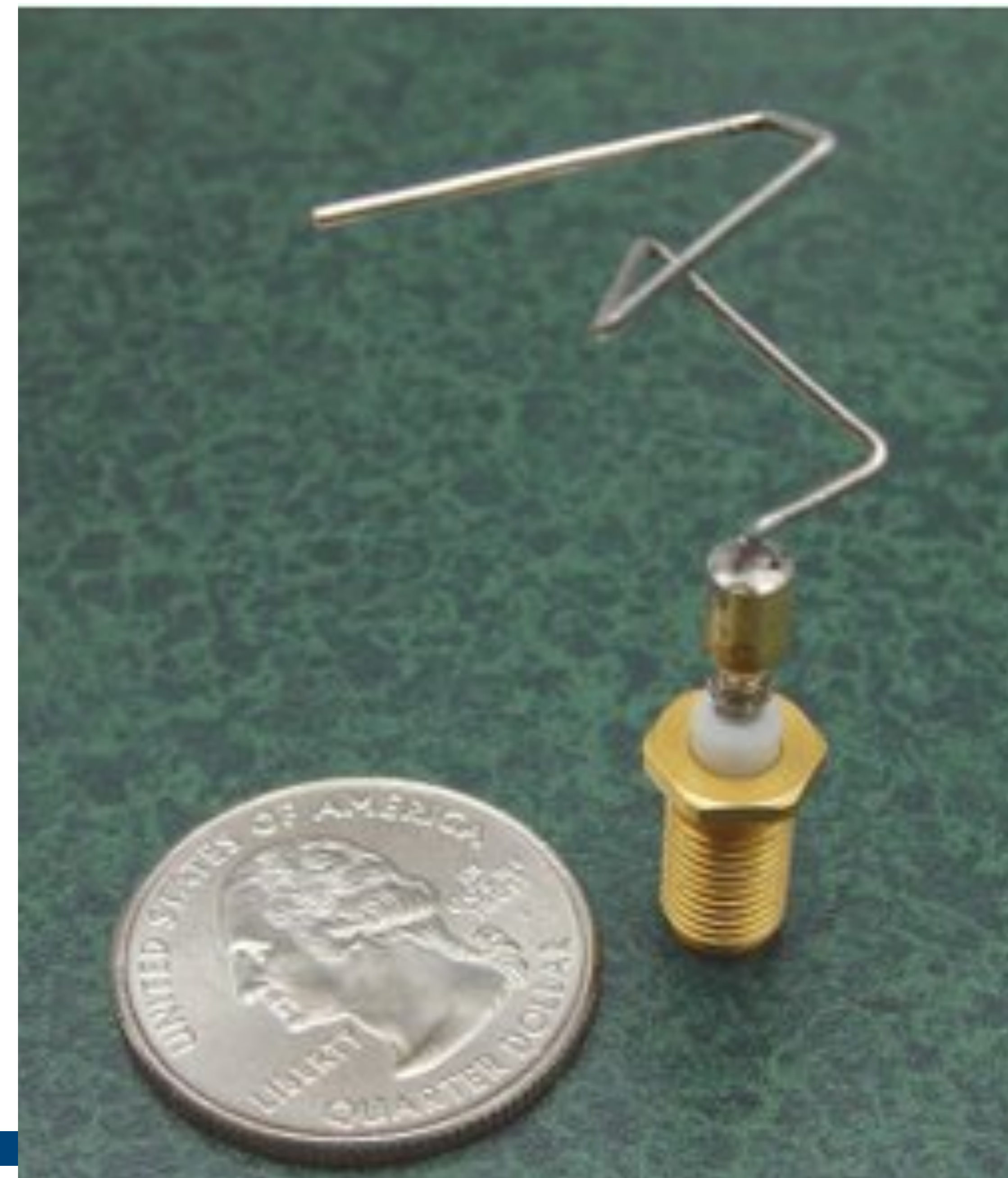
ŚLCJ

Algorytm genetyczny dla fizyków: przykład zastosowania w analizie wzbudzeń kulombowskich

Paweł J. Napiorkowski

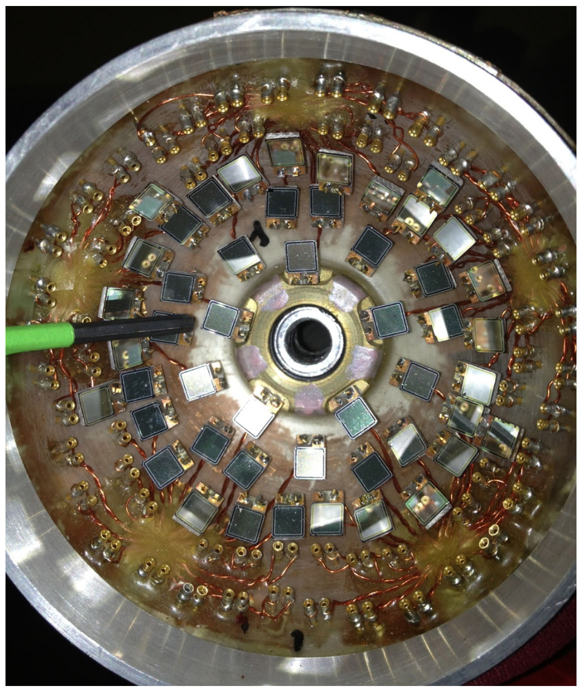
Program

- Motywacja.
  Czego szukamy
- Algorytm genetyczny.
  Jak to działa
- Implementacja.
  Co zroblilişmy
- Rozszerzenia.
  Co uzyskaliśmy dodatkowo

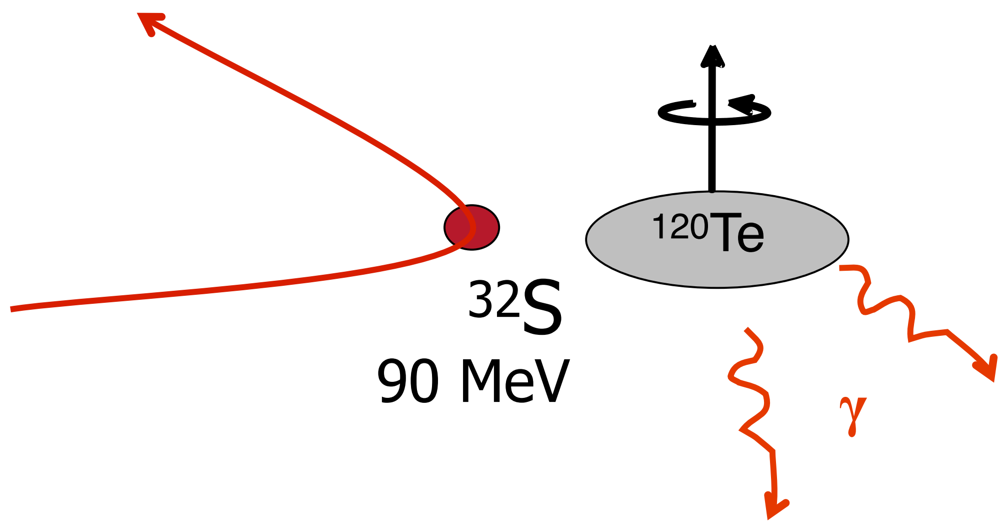


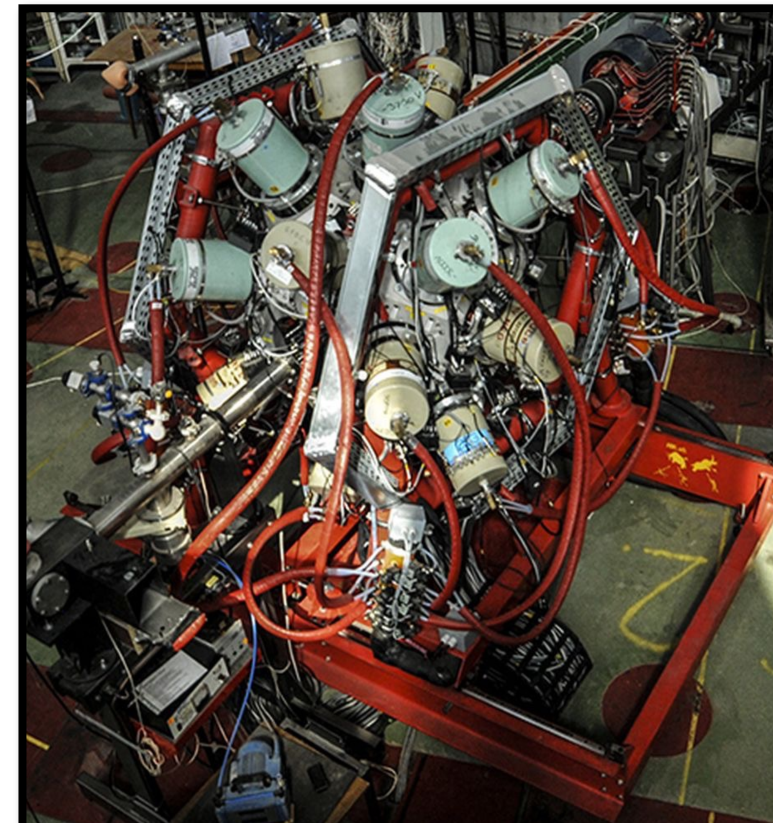
A. Basak and J. D. Lohn, 2013 IEEE Congress on Evolutionary Computation, Cancun, 2013, pp. 598-604, doi: 10.1109/CEC.2013.6557623.

Definicja problemu: wzbudzenia kulombowskie



Detektor cząstek.
np. zastaw PiN-diod
detektory Si 5×5 mm
θ: 110÷176 deg

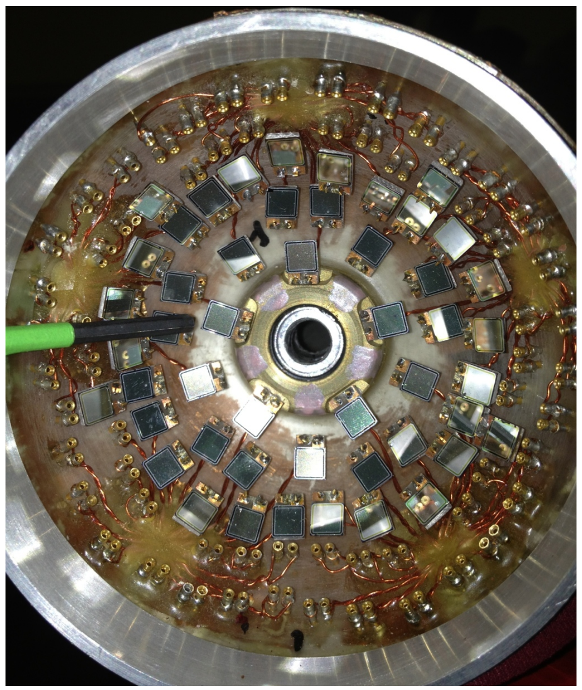




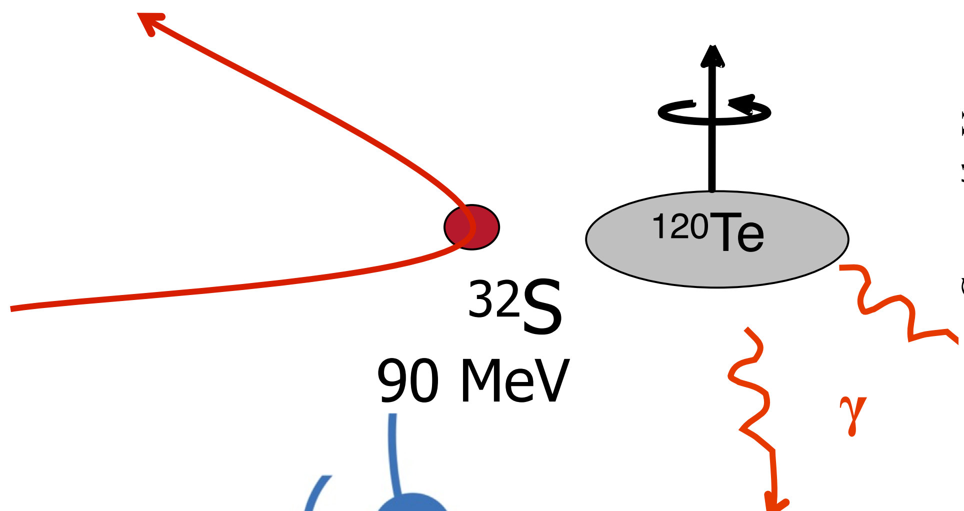
EAGLE
do 30 HPGe z ACS

$$E_{\max}(MeV) = 1.44\frac{A_1 + A_2}{A_2}\cdot\frac{Z_1 Z_2}{1.25(A_1^{1/3} + A_2^{1/3}) + 5}$$

Definicja problemu: wzbudzenia kulombowskie



Detektor cząstek.
np. zastaw PiN-diod
detektory Si 5×5 mm
θ: 110÷176 deg

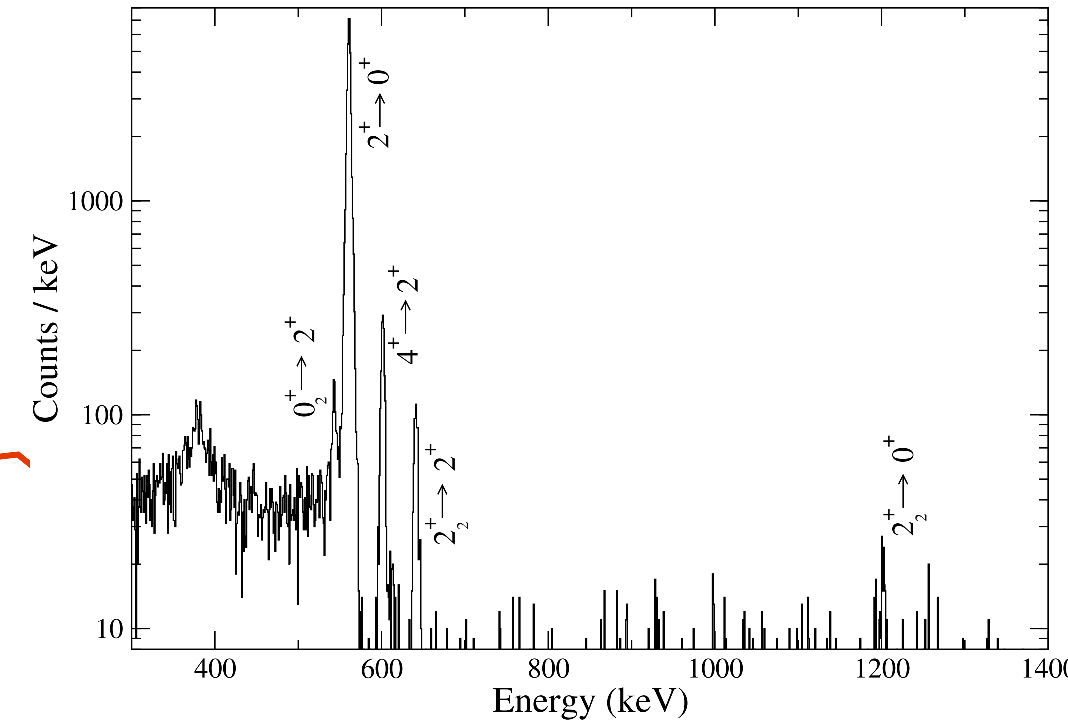


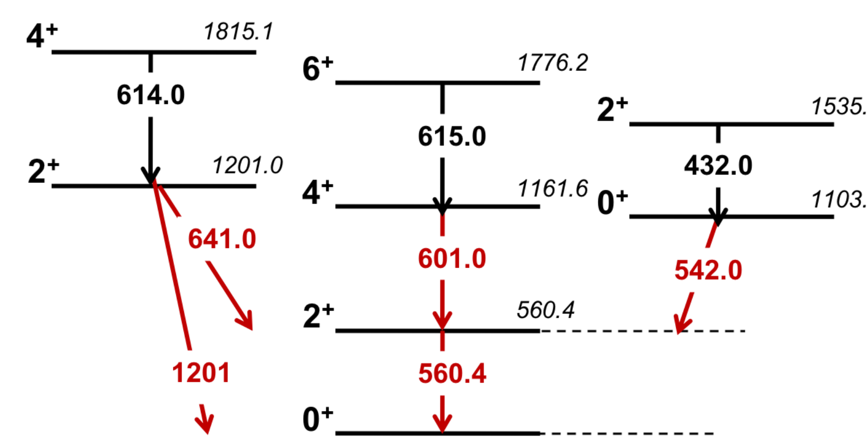
GOSIA

A semiclassical coupled-channel
Coulomb excitation least-squares search code,

T. Czosnyka, D. Cline, C.Y. Wu
Am. Phys. Soc. 28:745 (1983)

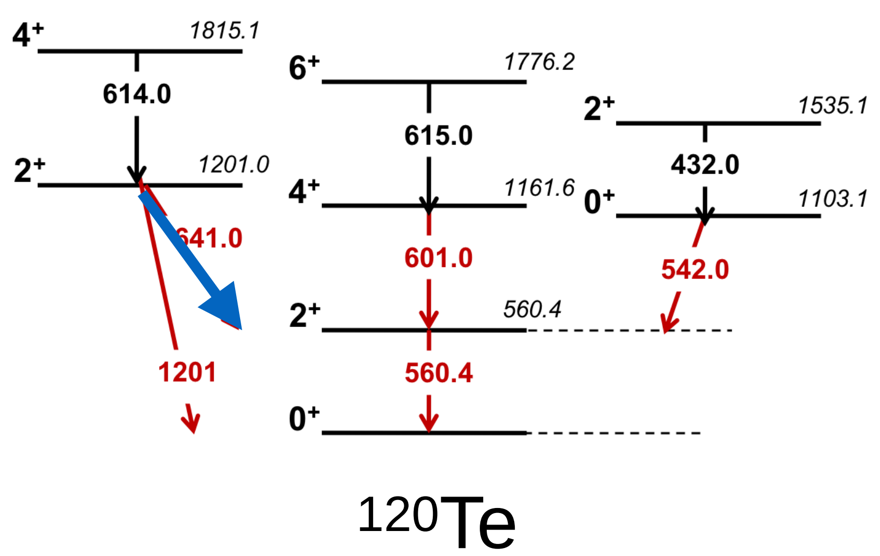
www.http://slcj.uw.edu.pl/pl/gosia/

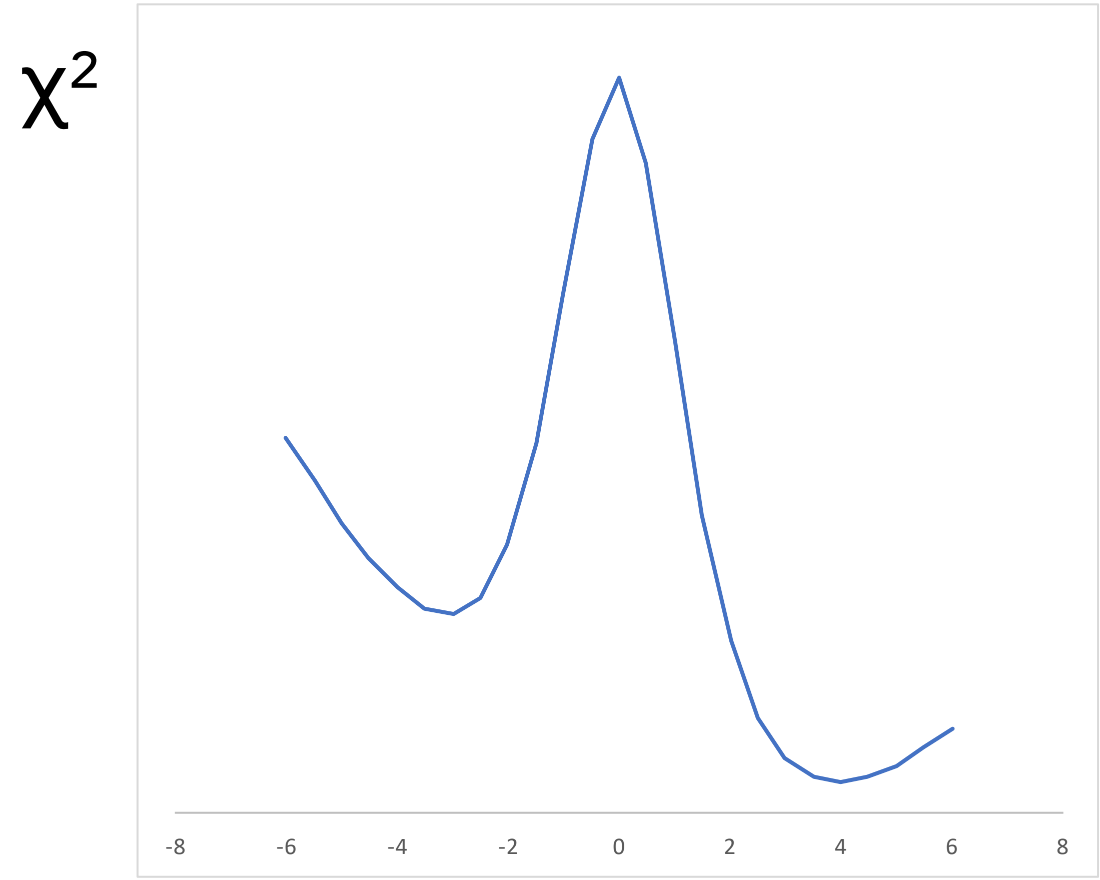




^{120}Te

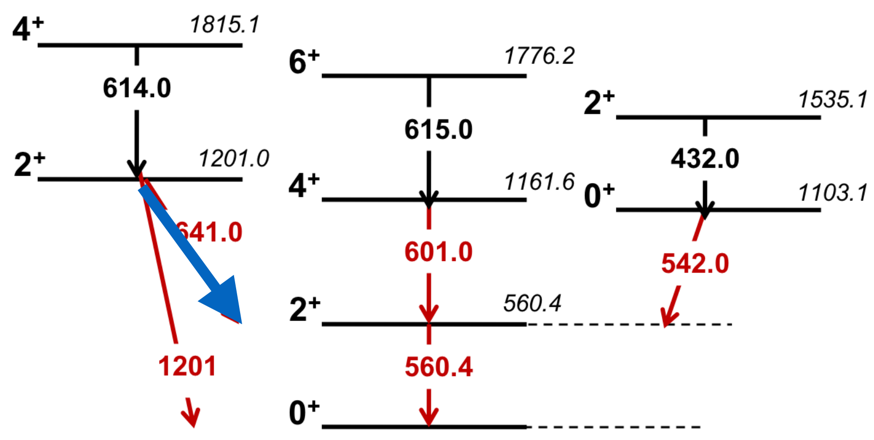
Definicja problemu minimalizacja χ^2



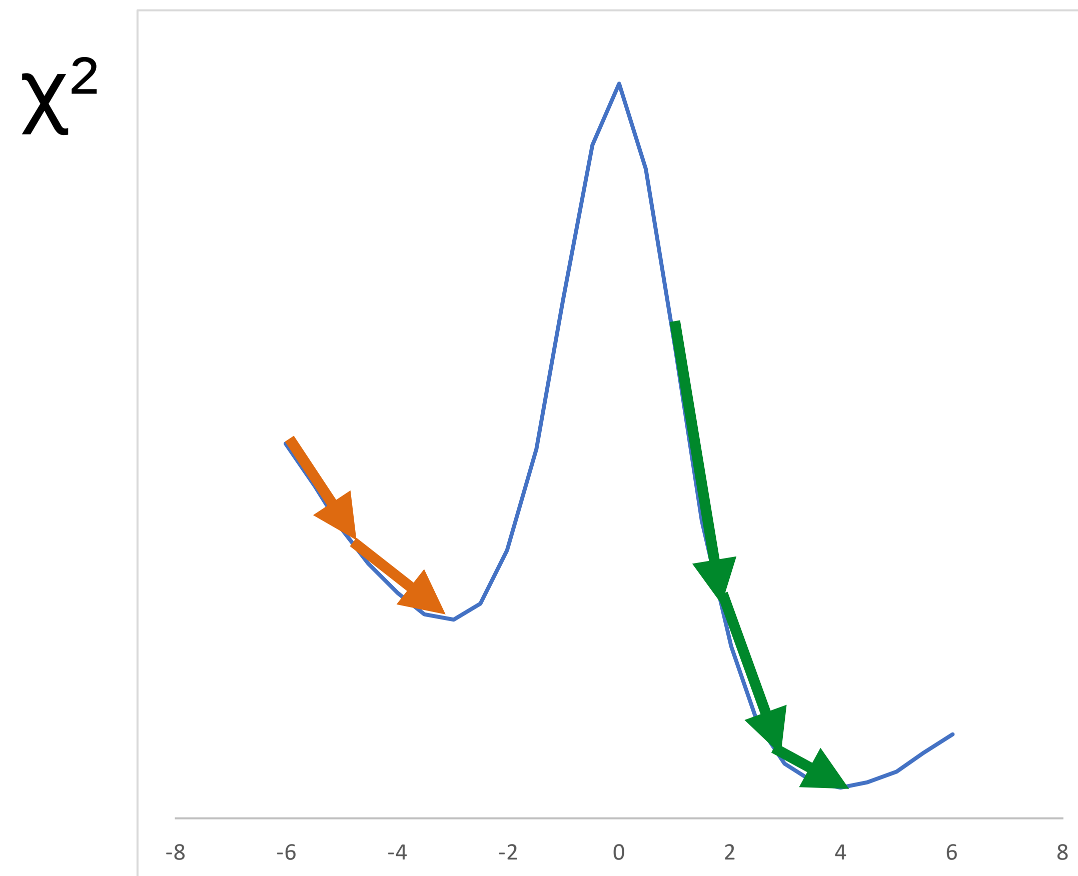


$\langle 2_1^+ \| E2 \| 2_2^+ \rangle$ [eb]

Minimalizacja χ^2
metoda gradientowa



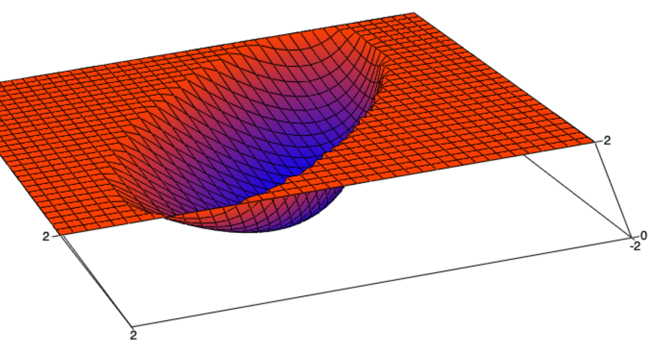
^{120}Te

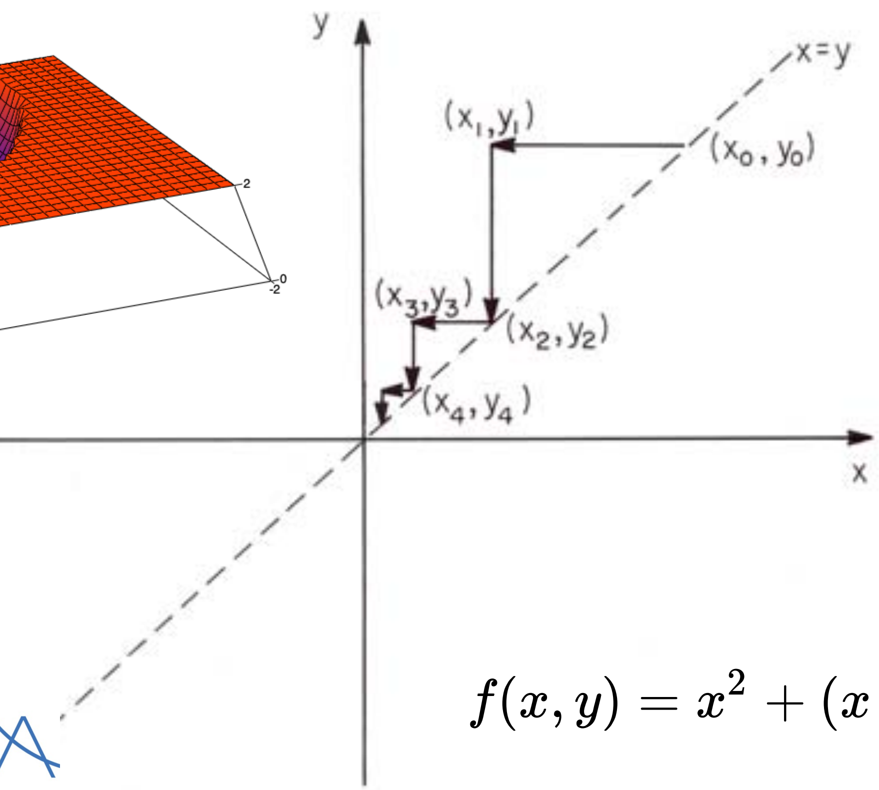


$\langle 2_1^+ \| E2 \| 2_2^+ \rangle$ [eb]

metoda najszybszego spadku

Minimalizacja χ²
metoda gradientowa

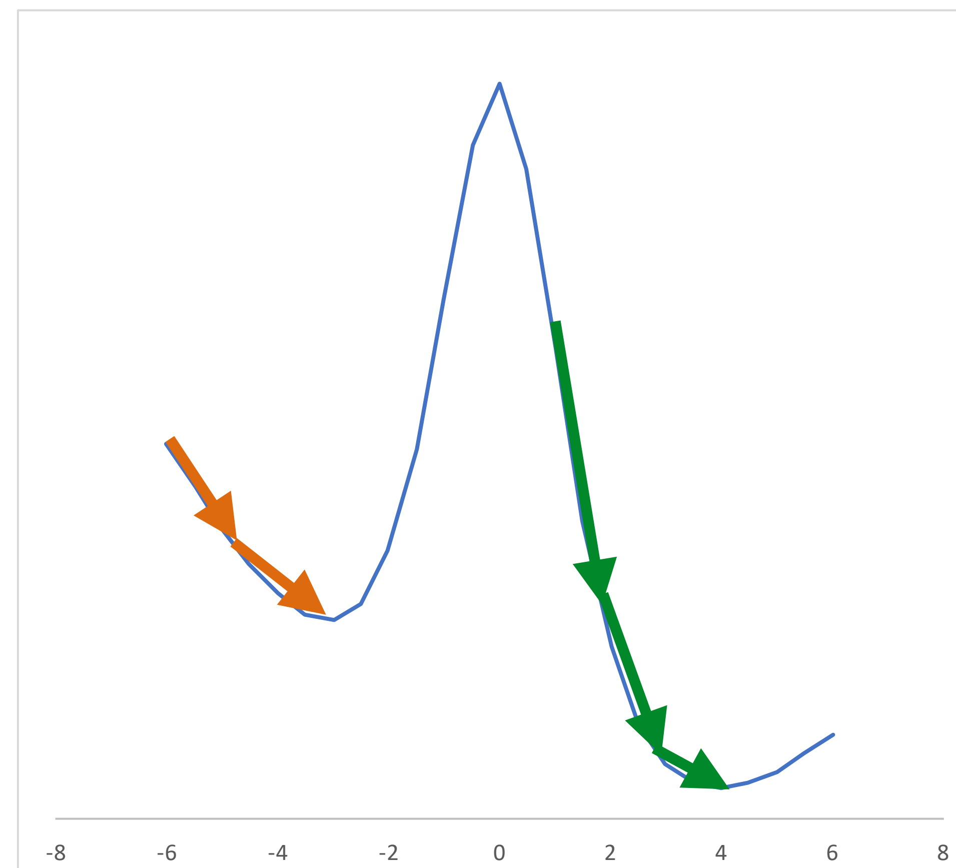




$$f(x,y) = x^2 + (x-y)^2$$

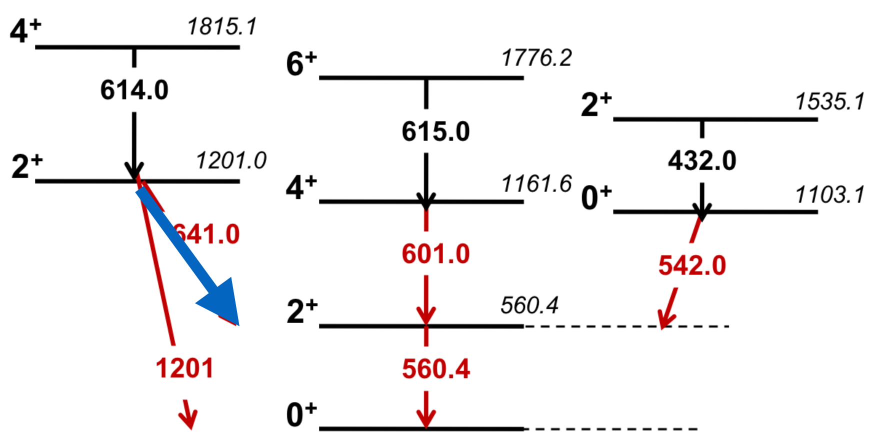
metoda najszybszego spadku

χ^2

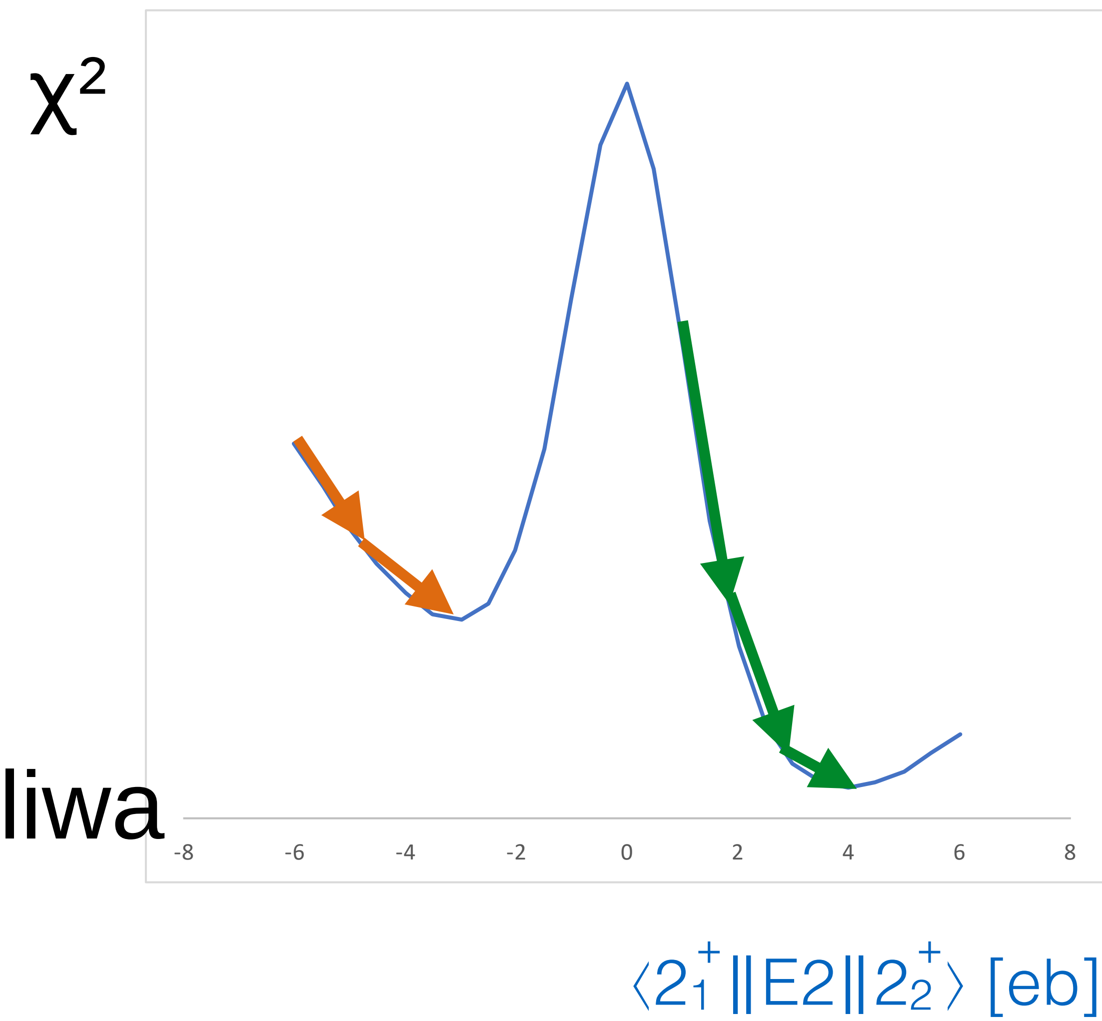


$\langle 2_1^+ \| E2 \| 2_2^+ \rangle$ [eb]

Minimalizacja χ²
metoda gradientowa

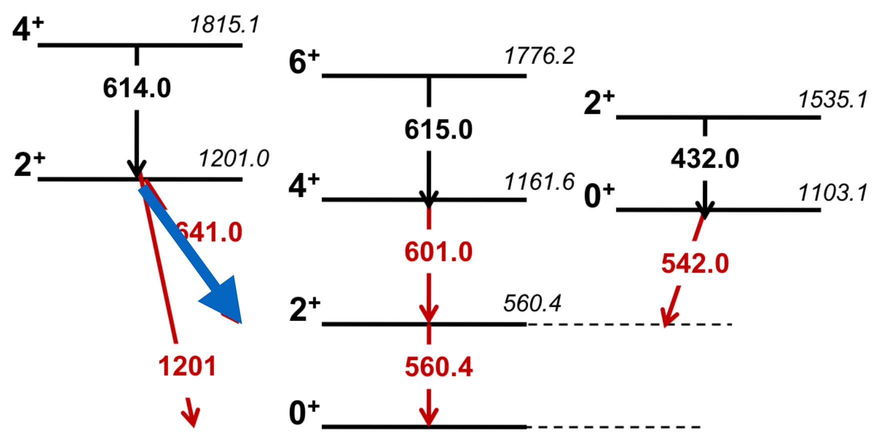


^{120}Te

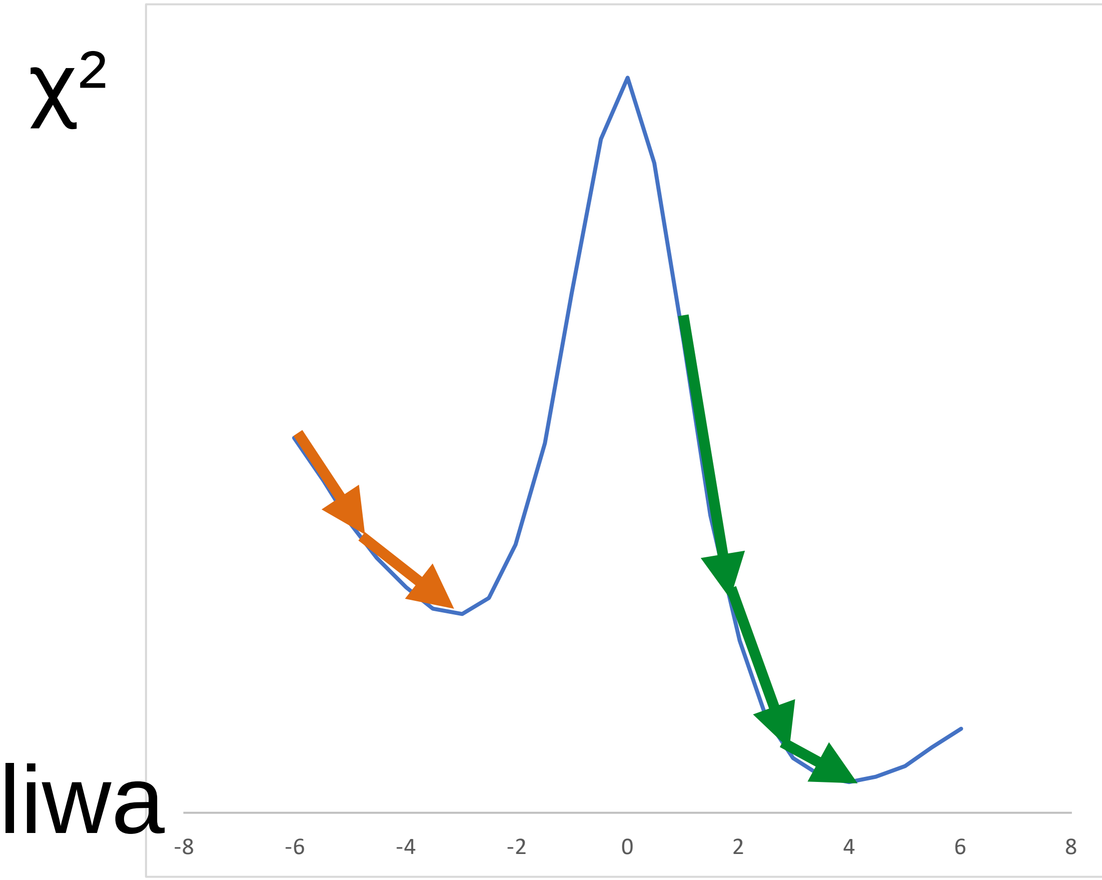


Podstawowy problem:
metoda gradientowa jest wrażliwa
na minima lokalne

Minimalizacja χ^2 metoda gradientowa



^{120}Te



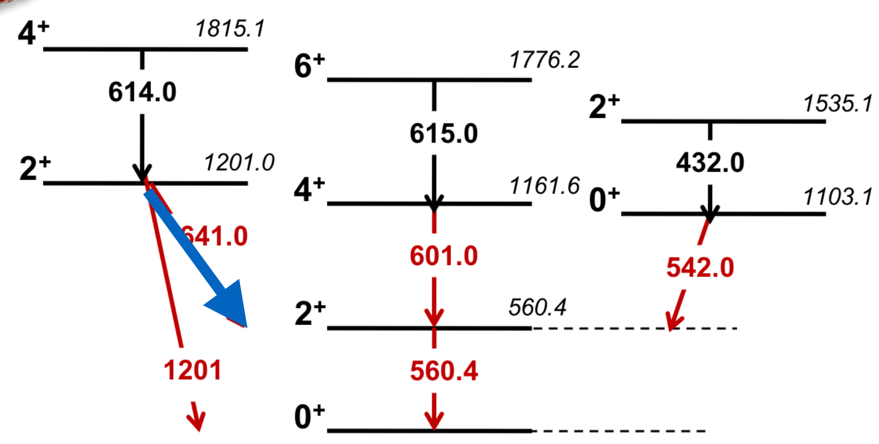
$\langle 2_1^+ \| E2 \| 2_2^+ \rangle$ [eb]

Podstawowy problem:
metoda gradientowa jest wrażliwa na minima lokalne

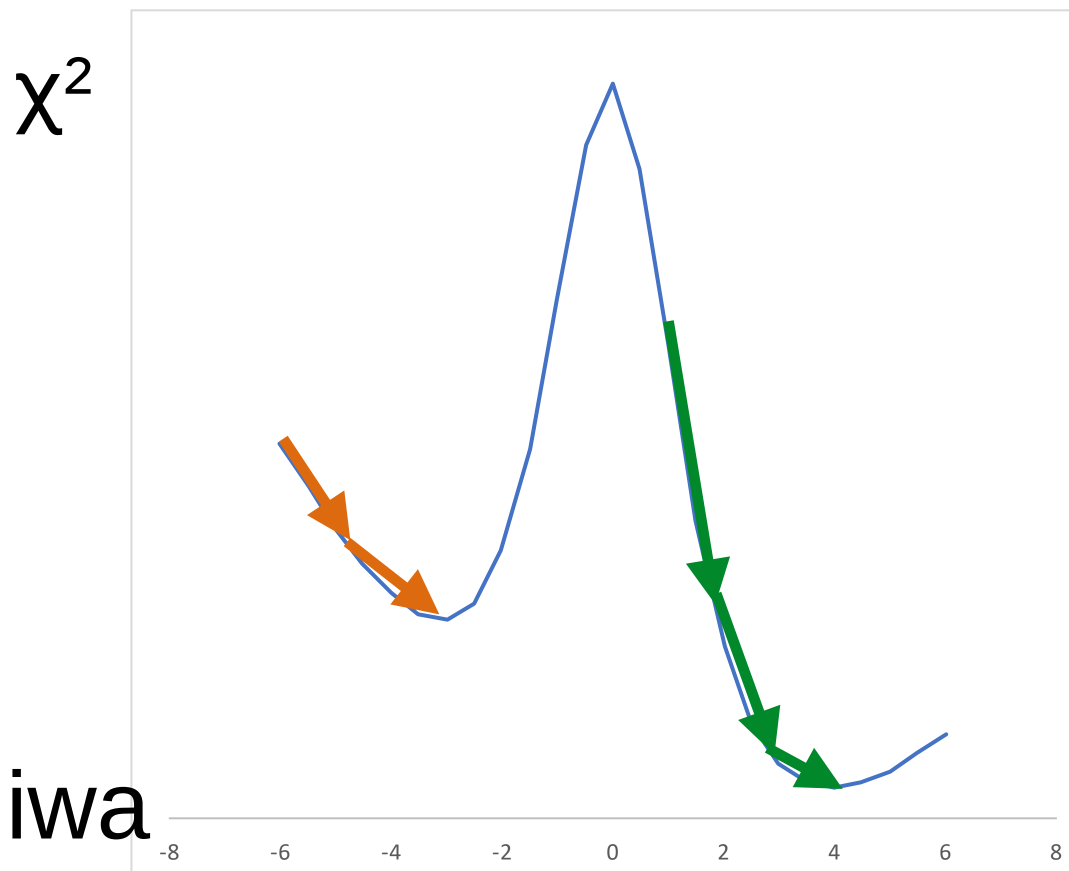
Rozwiązanie: random restart

Minimalizacja χ²
metoda gradientowa

31D



^{120}Te



$\langle 2_1^+ \| E2 \| 2_2^+ \rangle$ [eb]

Podstawowy problem:
metoda gradientowa jest wrażliwa
na minima lokalne

Rozwiązanie: random restart

Jednak mało efektywne w przypadkach wielowymiarowych

Minimalizacja χ^2 symulowane wyżarzanie

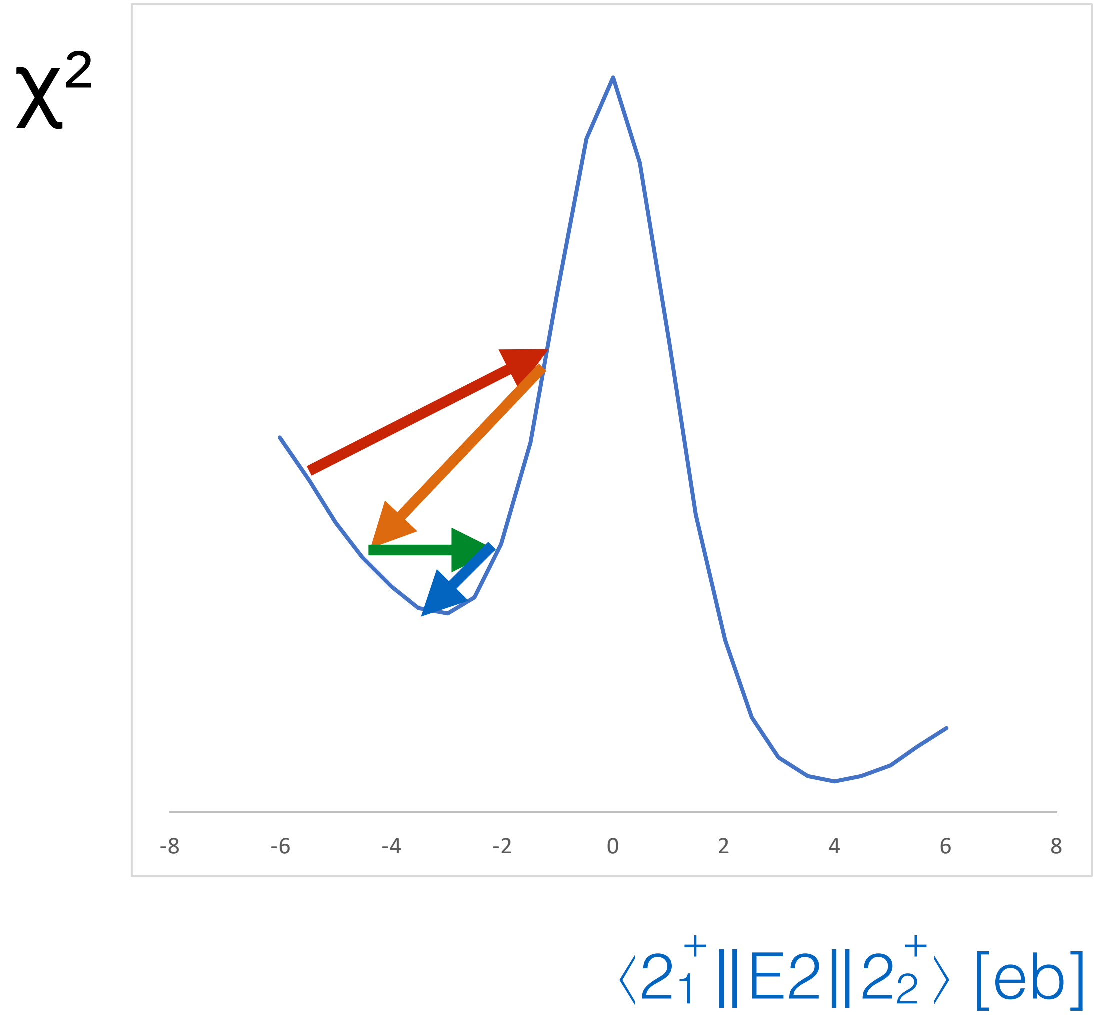
1. wyznacz x_0 i T

2. wybierz x (wylosuj lub wylicz)

3. wylicz $\Delta\chi^2 = \chi^2(x) - \chi^2(x_0)$

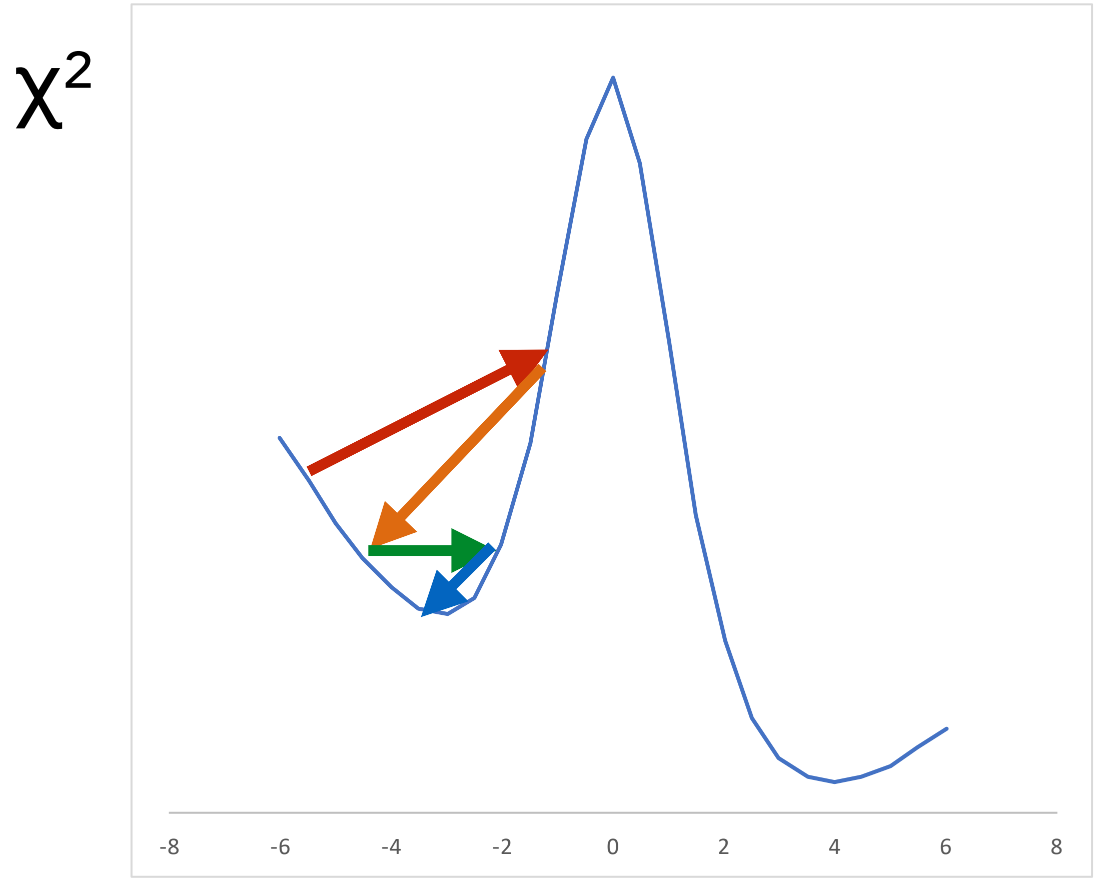
4. jeśli $\Delta\chi^2 < 0$ → idź do 2.
   jeśli $\Delta\chi^2 > 0$ wylicz $p = \exp(-\Delta\chi^2/T)$ i porównaj z liczbą losową (0,1)

5. jeśli p<r → idź do 2.
   jeśli p>r zaakceptuj nowe x, zredukuj T
   → idź do 2.



Minimalizacja χ^2 symulowane wyżarzanie

1. wyznacz x_0 i T
2. wybierz x (np. wylosuj lub wylicz)
3. wylicz $\Delta\chi^2 = \chi^2(x) - \chi^2(x_0)$
4. jeśli $\Delta\chi^2 < 0$ → idź do 2.
   jeśli $\Delta\chi^2 > 0$ wylicz $p = \exp(-\Delta\chi^2/T)$
   i porównaj z liczbą losową (0,1)
5. jeśli p<r → idź do 2.
   jeśli p>r zaakceptuj nowe x, zredukuj T
   → idź do 2.



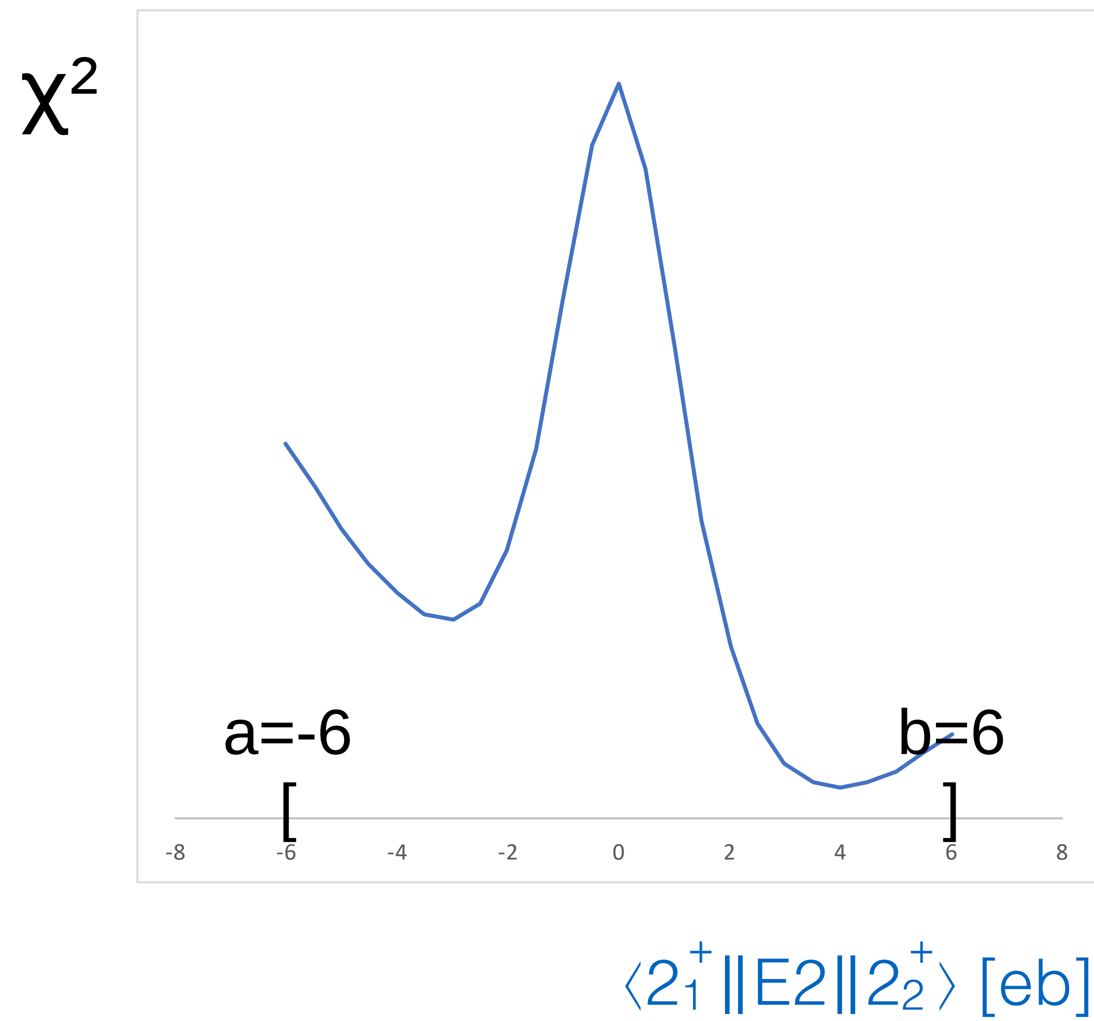
SA zaimplementowane w programie GOSIA w 1994 r.
nie w pełni spełniło oczekiwania

Minimalizacja χ^2
algorytm genetyczny

1. definiujemy $x=a+(I/2^n)*(b-a)$
   I - liczba całkowita o n-bitach

0	1	1	0	1	1	0	0

   ≡ -0.9375
2. losujemy pewną liczbę punktów x_i
3. obliczamy wartości $\chi^2(x_i)$
4. zostawiamy część liczb
   o najmniejszym χ^2
   pozostałe wymieniamy na nowe



Minimalizacja χ^2
algorytm genetyczny

1. definiujemy $x=a+(I/2^n)*(b-a)$
   I -liczba całkowita o n-bitach

   0 1 1 0 1 1 0 0 ≡ -0.9375
2. losujemy pewną liczbę punktów x_i

3. obliczamy wartości $\chi^2(x_i)$

4. zostawiamy część liczb
   o najmniejszym χ^2
   pozostałe zastępujemy nowymi

5. krzyżowanie:

   0 1 1 0 1 1 0 0   1 0 0 1 1 0 0 1

   -0.9375   *1.171875*

   0 1 1 0 1 0 0 1

   -1.078125

6. mutacja:

   0 1 **0** 0 1 0 0 1

   -2.578125

7. obliczamy wartości $\chi^2(x_i)$ dla nowych x_i

8. powtarzamy od 4.

Jest to kanoniczna postać algorytmu genetycznego Johna Hollanda

Minimalizacja χ^2
Podsumowanie

1. **Gradient**

   + znajduje szybko i dokładnie minimum lokalne

   - wymaga wielu testów, aby znaleźć prawdopodobne minimum globalne

2. **Symulowane wyżarzanie**

   + może znaleźć minimum globalne

   - nie radzi sobie z wysokimi barierami miedzy minimami

3. **Algorytm genetyczny**

   + przeszukuje cała przestrzeń lepiej niż algorytm Monte-Carlo

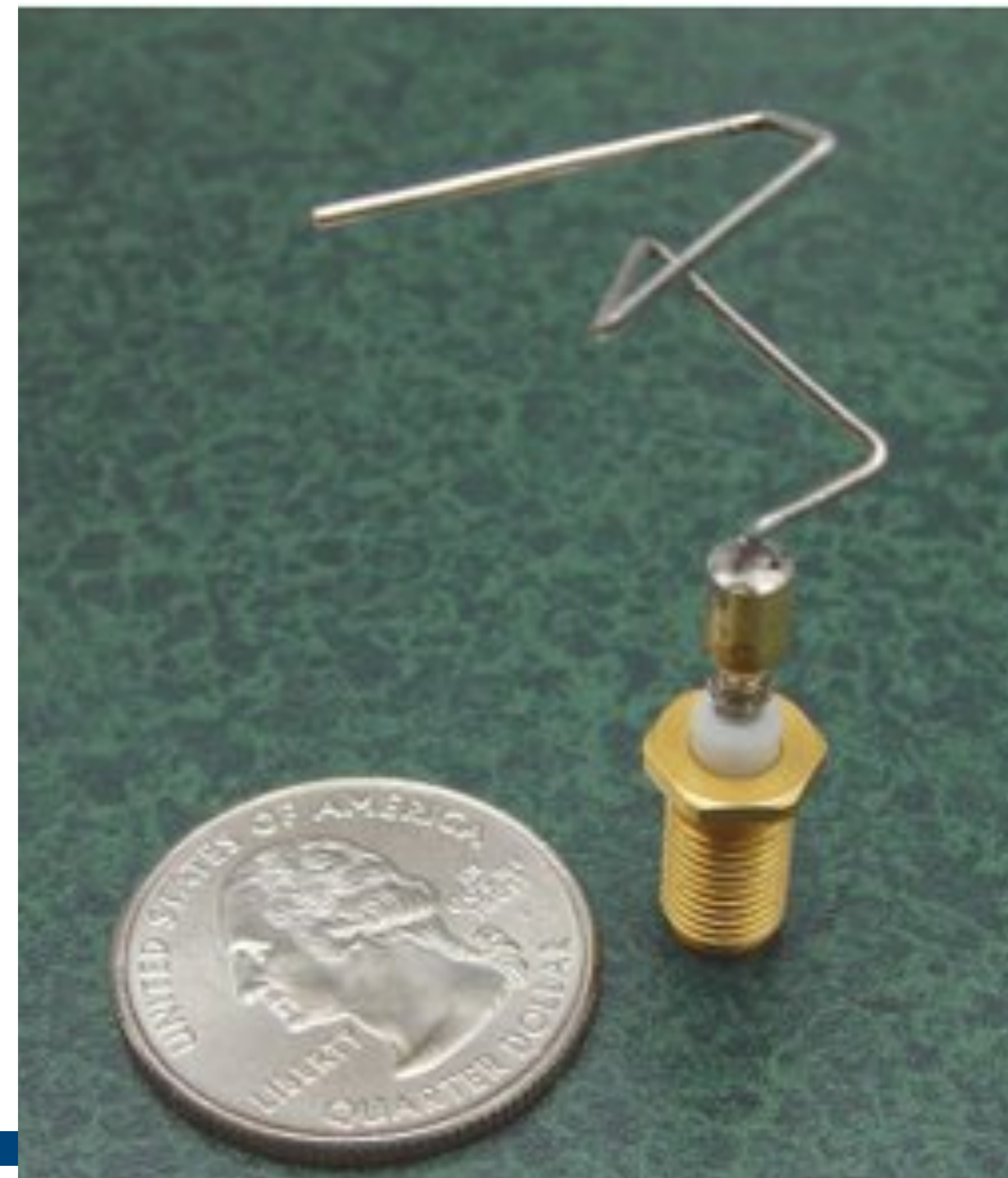
   +/- znajduje prawdopodobne minimum globalne (ale niedokładnie)

   +/- kosztowny obliczeniowo, ale łatwy do zrównoleglenia

   - brak dobrych kryteriów stopu i doboru parametrów algorytmu

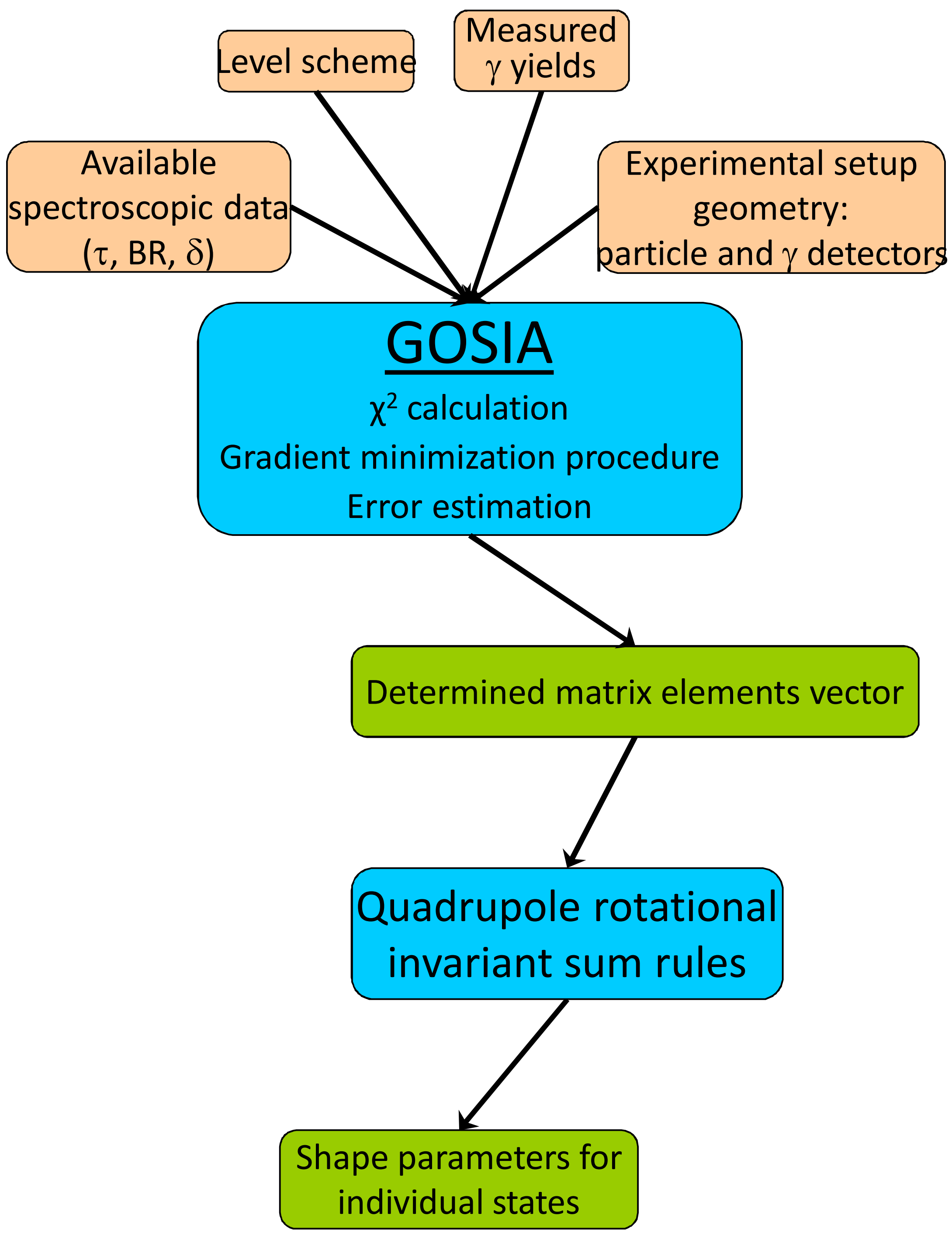
Zastosowanie algorytmów genetycznych

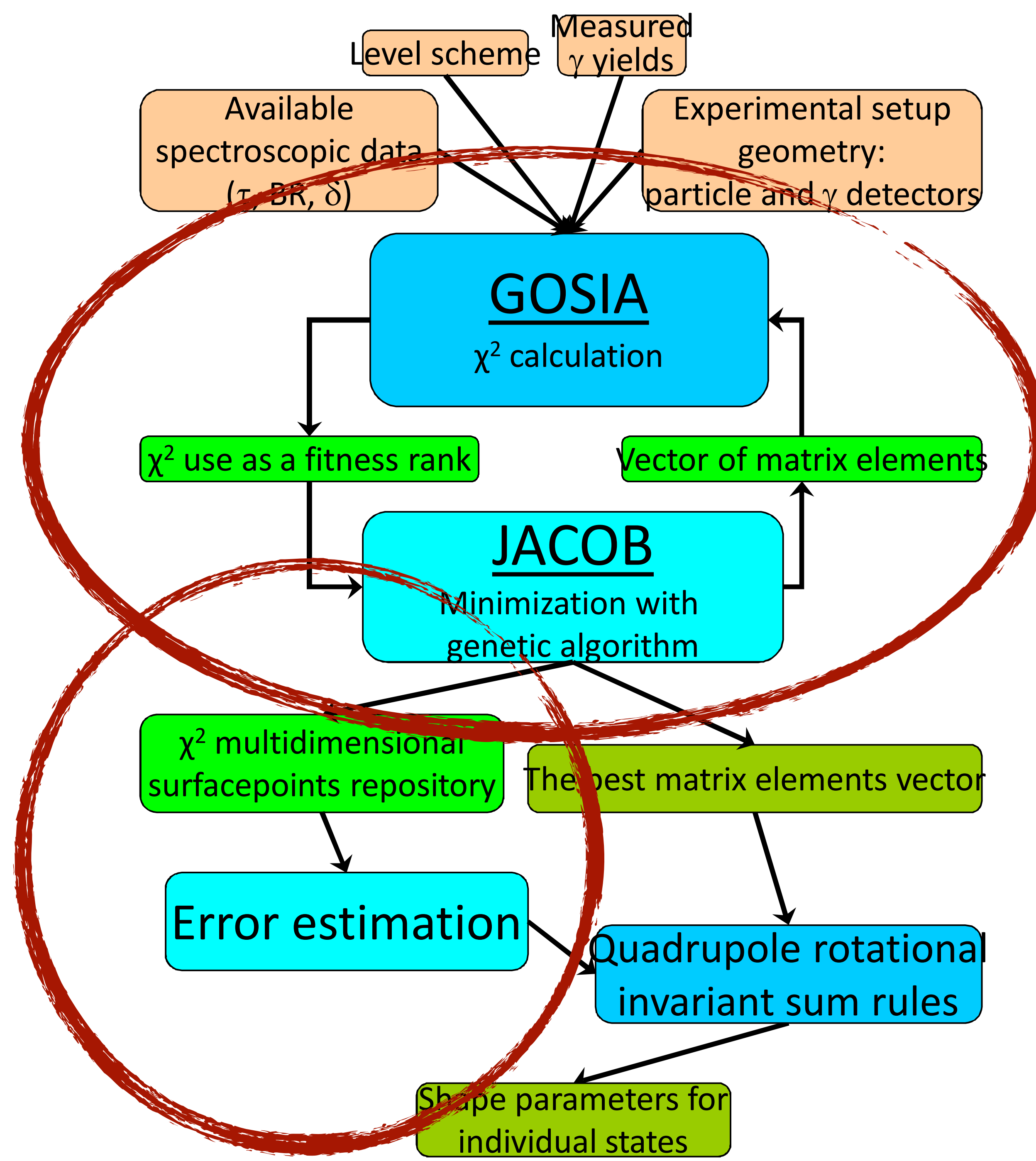
- **Optymalizacja wieloparametryczna**
  - Projektowanie obwodów elektronicznych
  - Szkolenie sieci neuronowych
- **Analiza eksperymentów wzbudzeń kulombowskich.**



A. Basak and J. D. Lohn, 2013 IEEE Congress on Evolutionary Computation, Cancun, 2013, pp. 598-604, doi: 10.1109/CEC.2013.6557623.

JACOB: algorytm genetyczny dla GOSIA





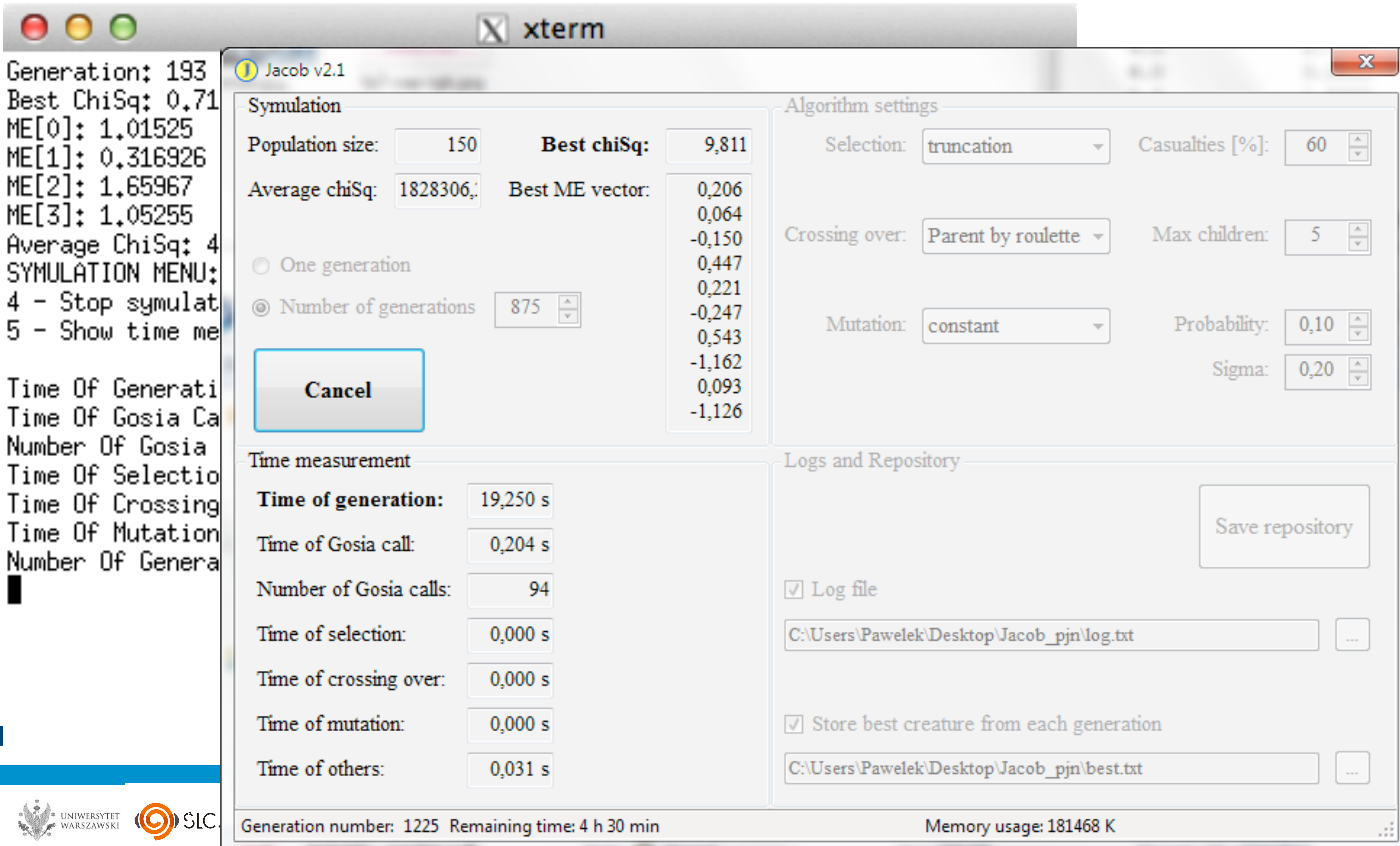
Jacob

xterm

```
Generation: 193
Best ChiSq: 0.711367
ME[0]: 1.01525
ME[1]: 0.316926
ME[2]: 1.65967
ME[3]: 1.05255
Average ChiSq: 43.5546
SYMULATION MENU:
4 - Stop symulation
5 - Show time measurement

Time Of Generation: 0.06 s
Time Of Gosia Call: 0.00142857 s
Number Of Gosia Calls: 35
Time Of Selection: 0 s
Time Of Crossing Over: 0 s
Time Of Mutation: 0 s
Number Of Generations: 193
```

JACOB



xterm
Generation: 193
Best ChiSq: 0.71
ME[0]: 1.01525
ME[1]: 0.316926
ME[2]: 1.65967
ME[3]: 1.05255
Average ChiSq: 4
SYMULATION MENU:
4 - Stop symulat
5 - Show time me
Time Of Generati
Time Of Gosia Ca
Number Of Gosia
Time Of Selectio
Time Of Crossing
Time Of Mutation
Number Of Genera
Jacob v2.1
Symulation
Population size: 150
Best chiSq: 9,811
Average chiSq: 1828306,
Best ME vector:
0,206
0,064
-0,150
0,447
0,221
-0,247
0,543
-1,162
0,093
-1,126
One generation
Number of generations 875
Cancel
Algorithm settings
Selection: truncation
Casualties [%]: 60
Crossing over: Parent by roulette
Max children: 5
Mutation: constant
Probability: 0,10
Sigma: 0,20
Time measurement
Time of generation: 19,250 s
Time of Gosia call: 0,204 s
Number of Gosia calls: 94
Time of selection: 0,000 s
Time of crossing over: 0,000 s
Time of mutation: 0,000 s
Time of others: 0,031 s
Logs and Repository
Save repository
Log file
C:\Users\Pawelek\Desktop\Jacob_pjn\log.txt
Store best creature from each generation
C:\Users\Pawelek\Desktop\Jacob_pjn\best.txt
Generation number: 1225 Remaining time: 4 h 30 min
Memory usage: 181468 K
UNIWERSYTET WARSZAWSKI

Skuteczność algorytmu

Test z wykorzystaniem 6D funkcji testowej F7 - funkcji Schaffera

Przeprowadzono of 1 000 procesów minimalizacyjnych

$$F7(x_{1,\dots,6}) = \sum_{i=1}^{6} a_i x_i \sin\left(\sqrt{|a_i x_i|}\right)$$

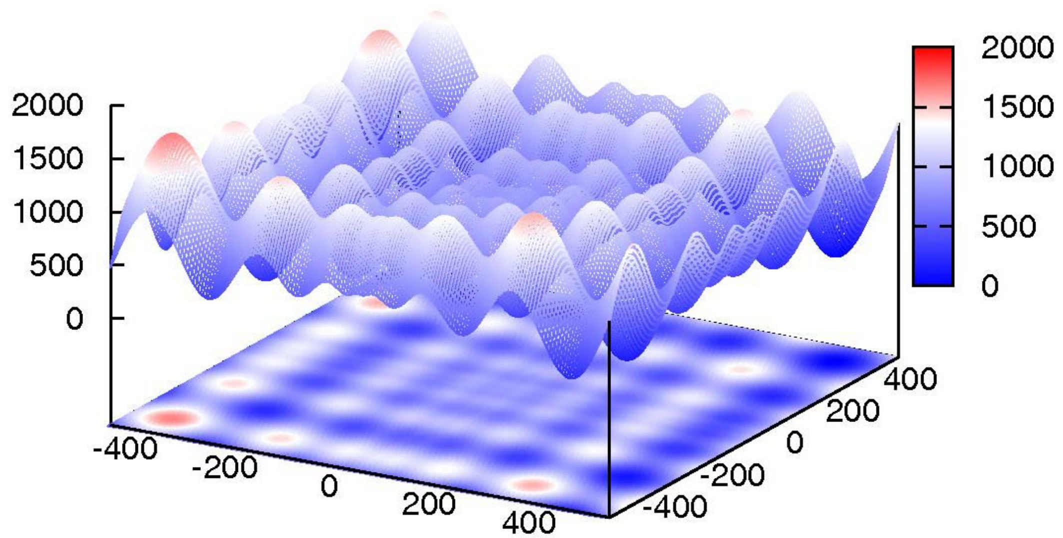
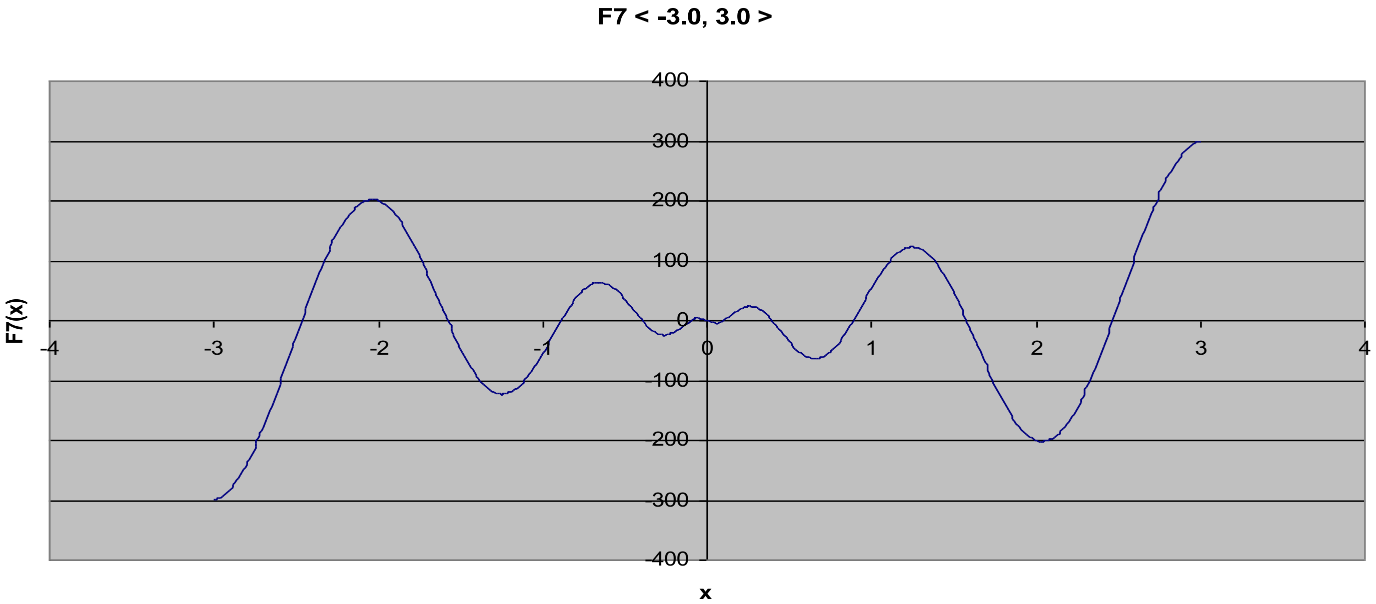
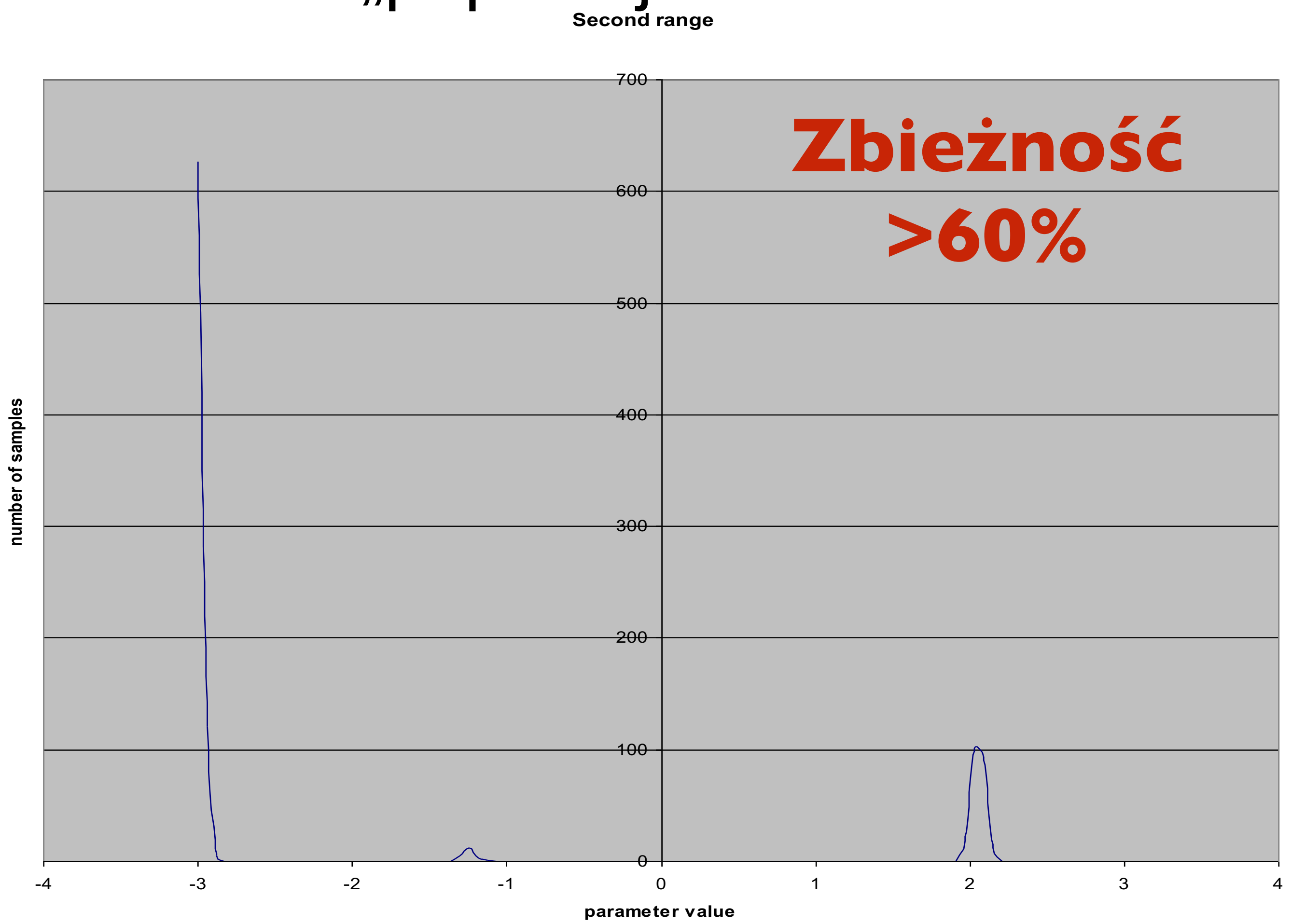


Figure 7. 2D plot of Schwefel's function.



Najlepszy „osobnik” w każdej z 1000 „populacji”



Zbieżność >60%

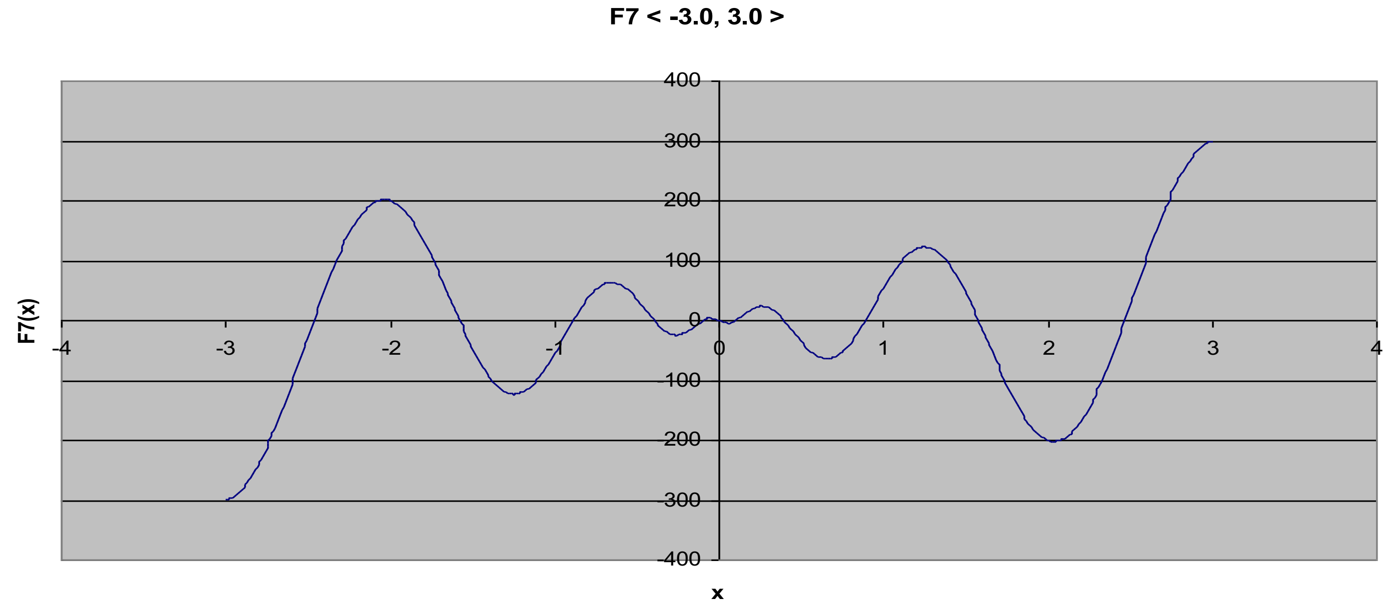
Gdzie są minima?

Najbardziej czasochłonne jest wyliczenie χ^2 →
zachowujemy obliczenia w każdym punkcie uzyskując informację o powierzchni χ^2

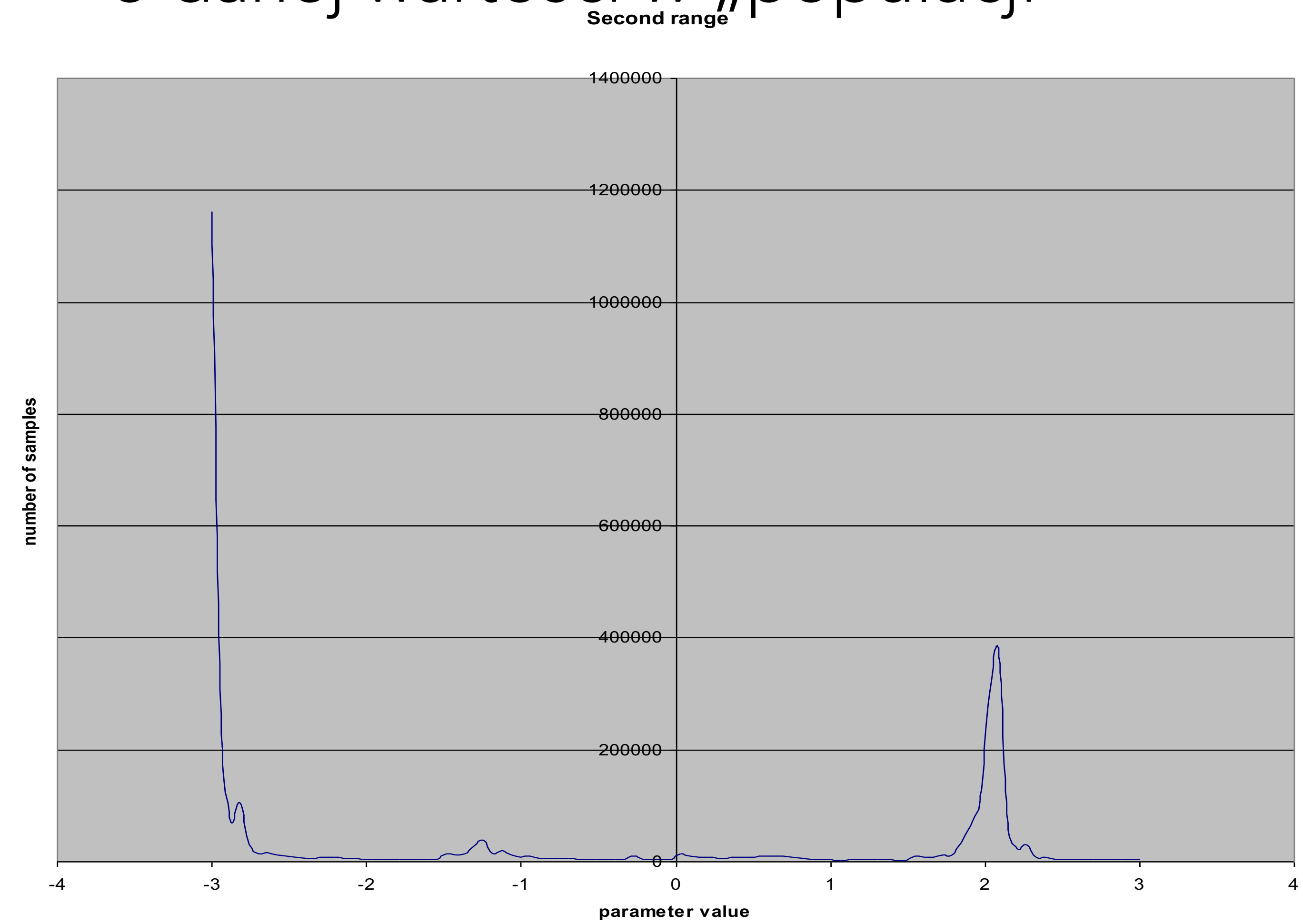
QRepScan:

- wyszukuje wynik - zestaw elementów macierzowych o najniższym χ^2

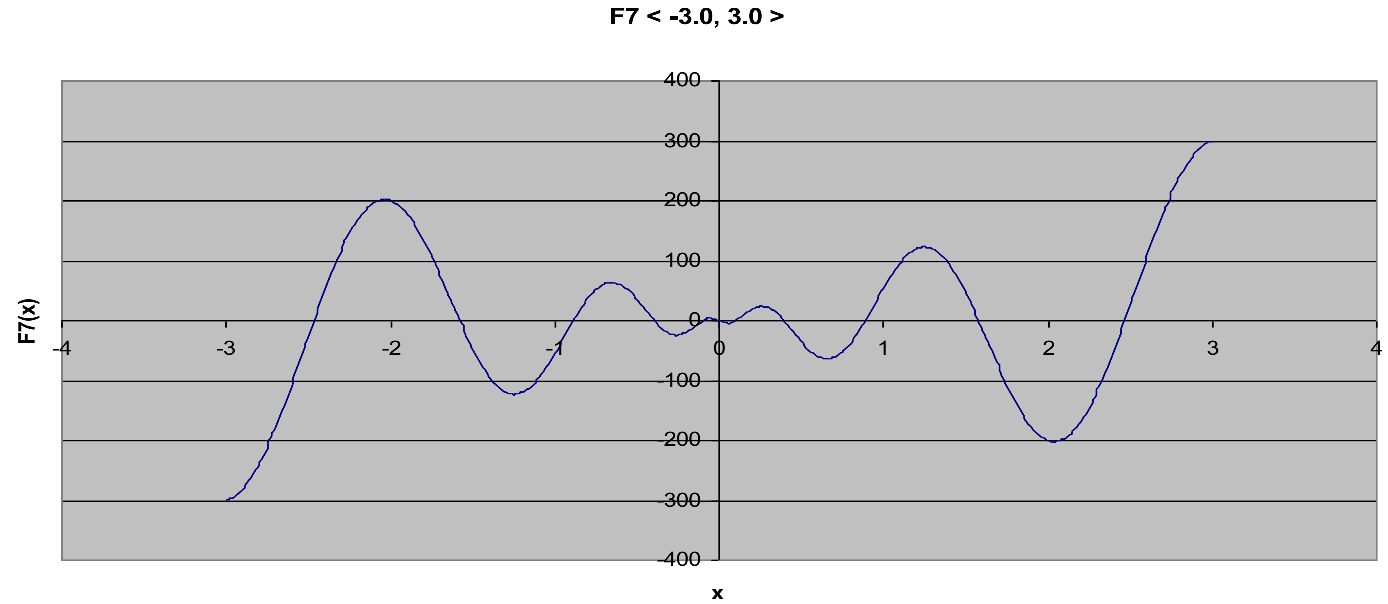
- poszukuje alternatywnych minimum



Liczba „osobników"
o danej wartości w „populacji"



Gdzie są minima?



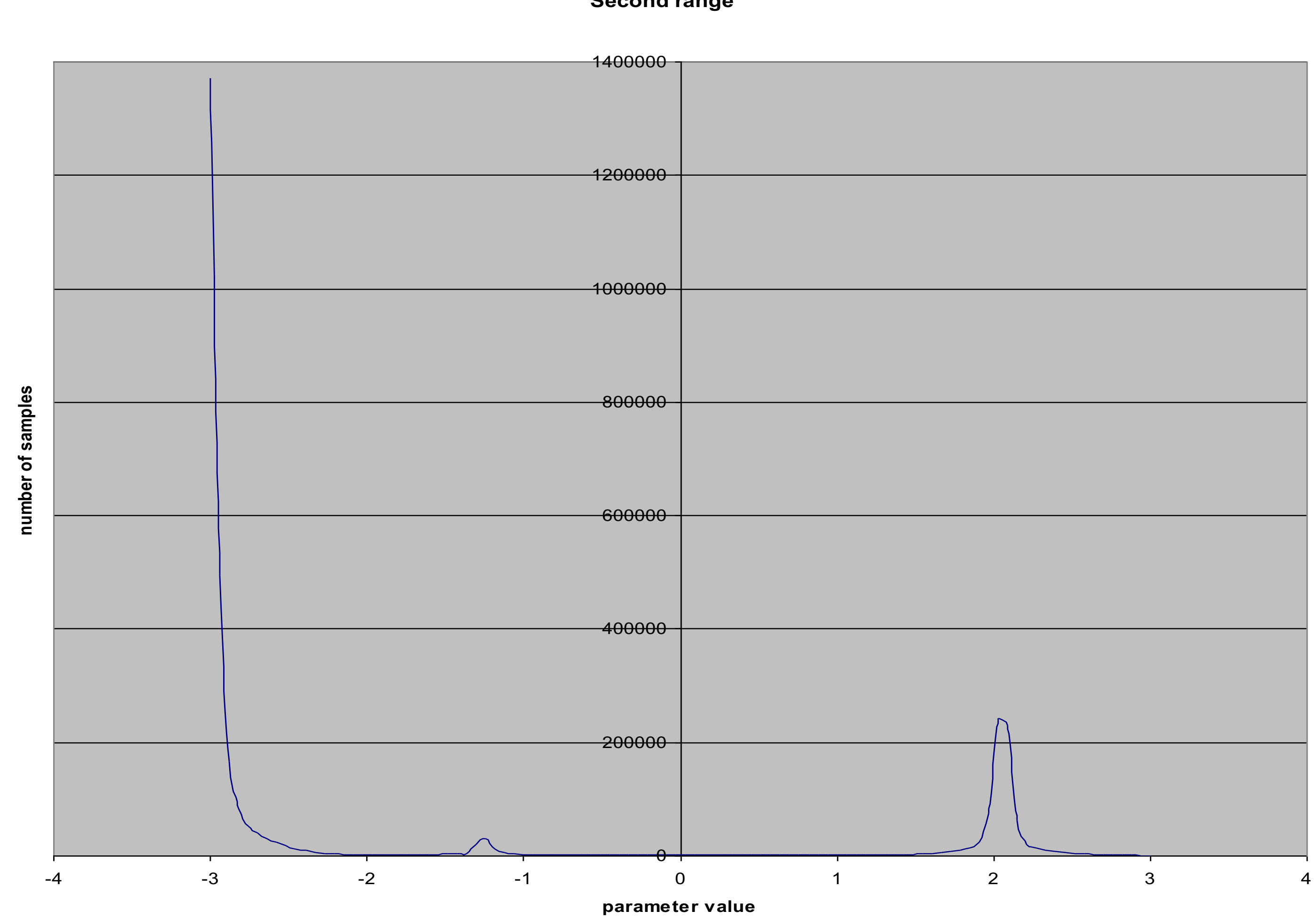
Najbardziej czasochłonne jest wyliczenie χ^2 → zachowujmy więc obliczenia w każdy punkcie uzyskując informacje o powierzchni χ^2

Liczba „osobników”
o danej wartości w „populacji”

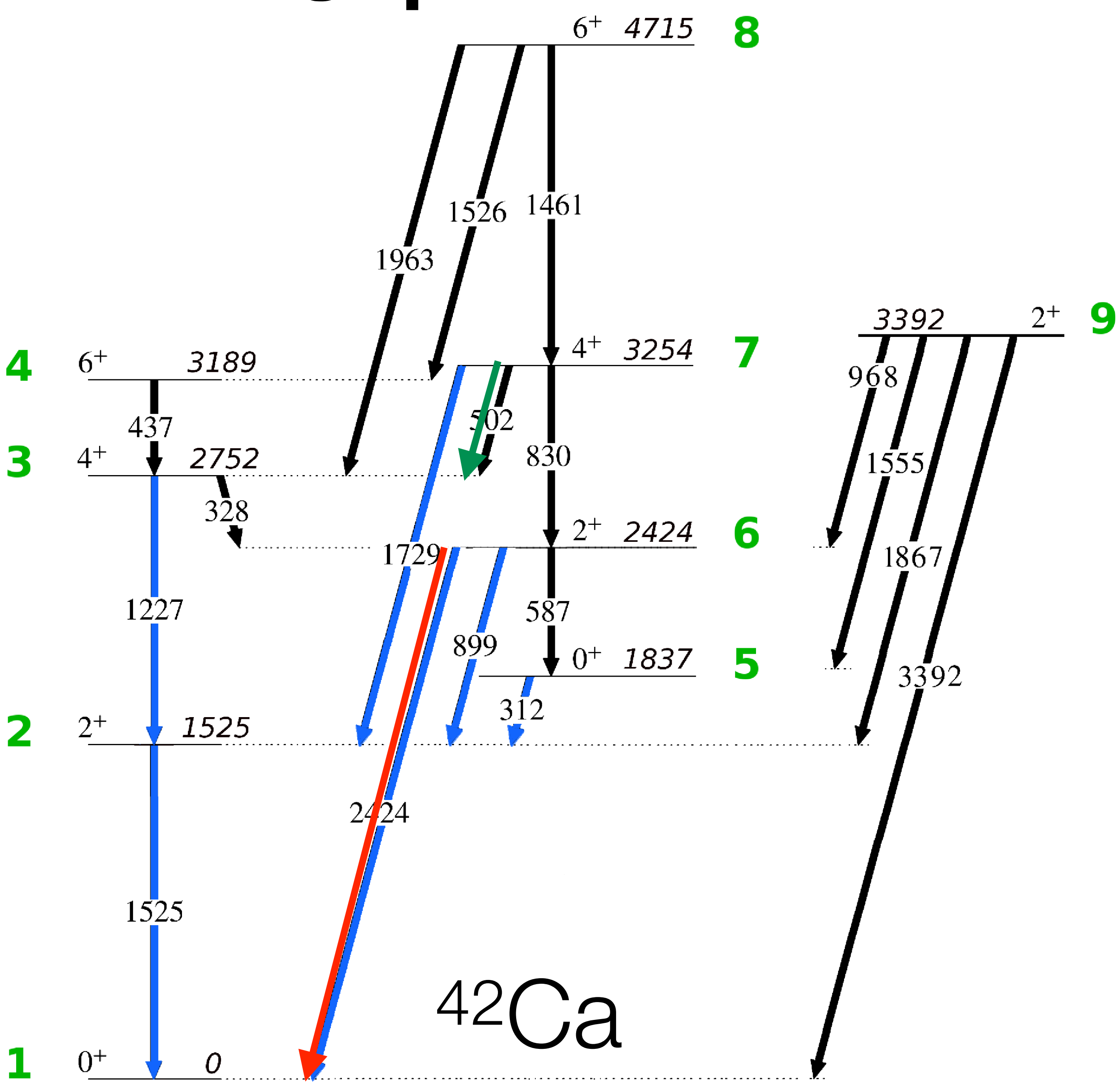
QRepScan:

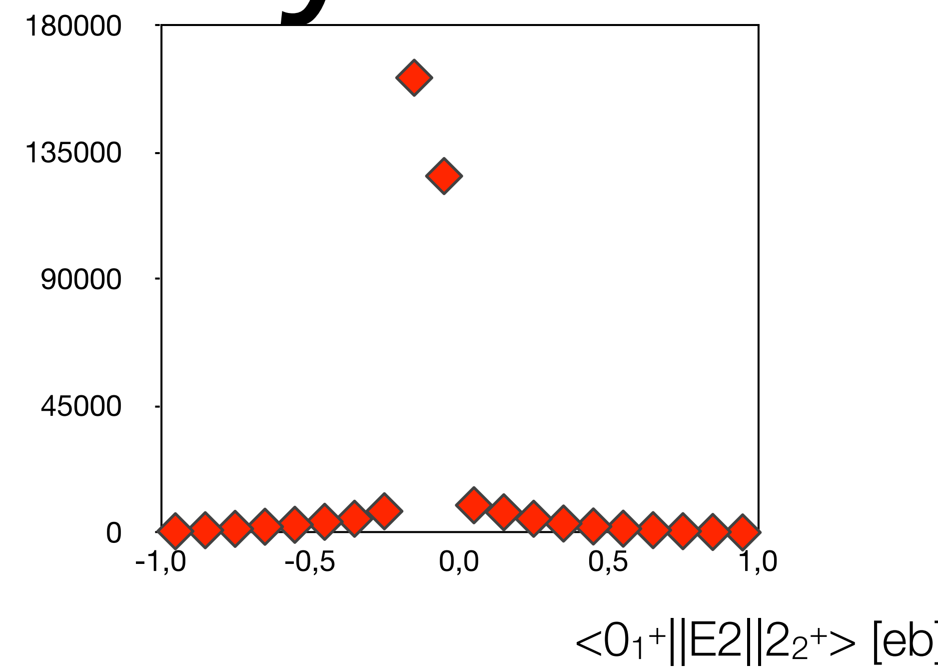
- wyszukuje wynik - zestaw elementów macierzowych o najniższym χ^2

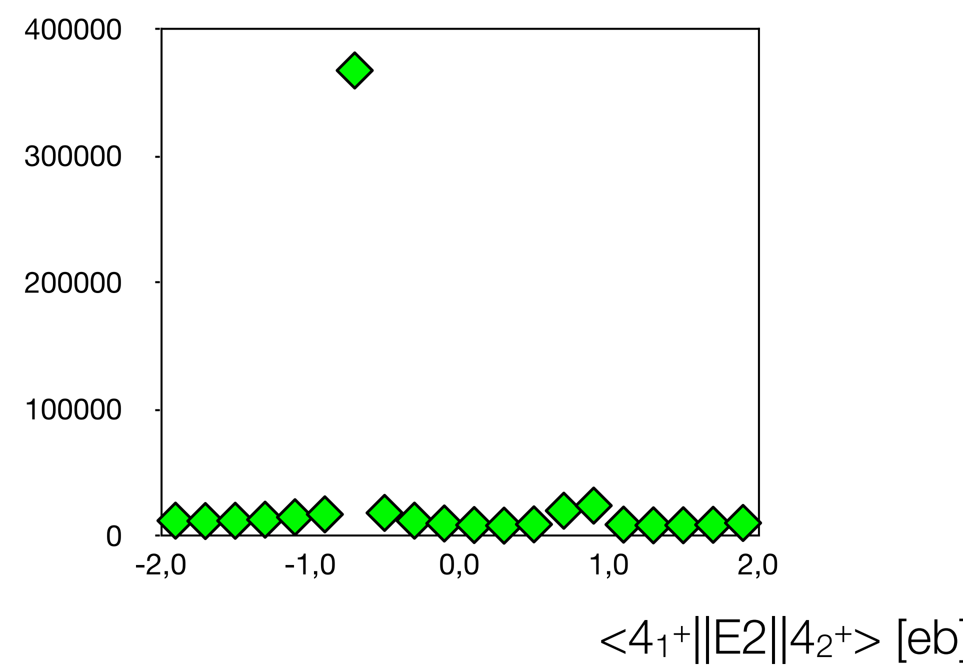
- poszukuje alternatywnych minimum



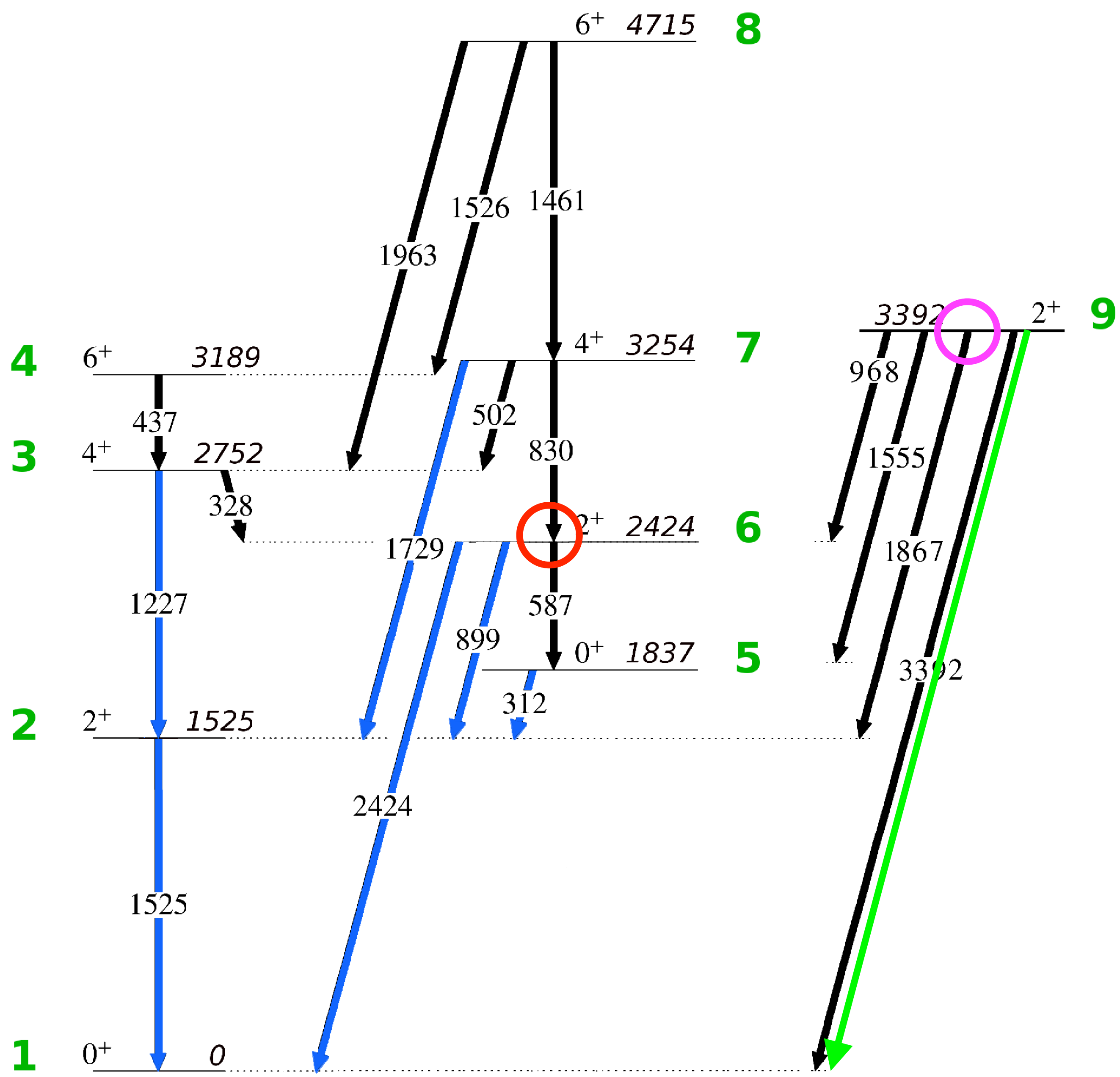
Przypadek fizyczny: ^{42}Ca

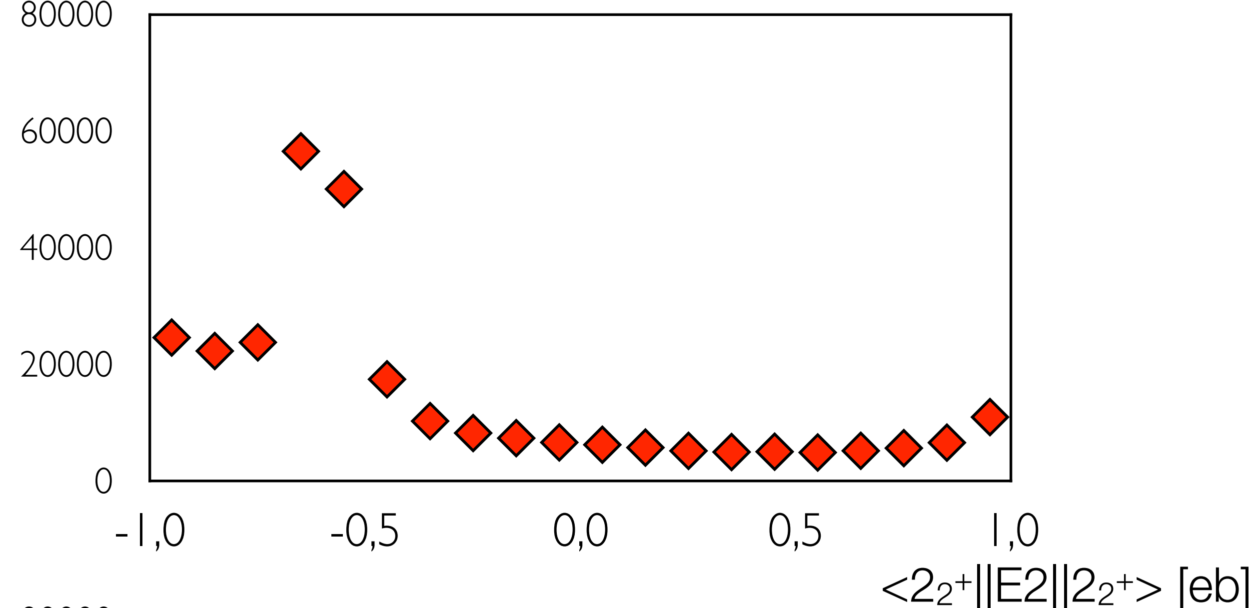


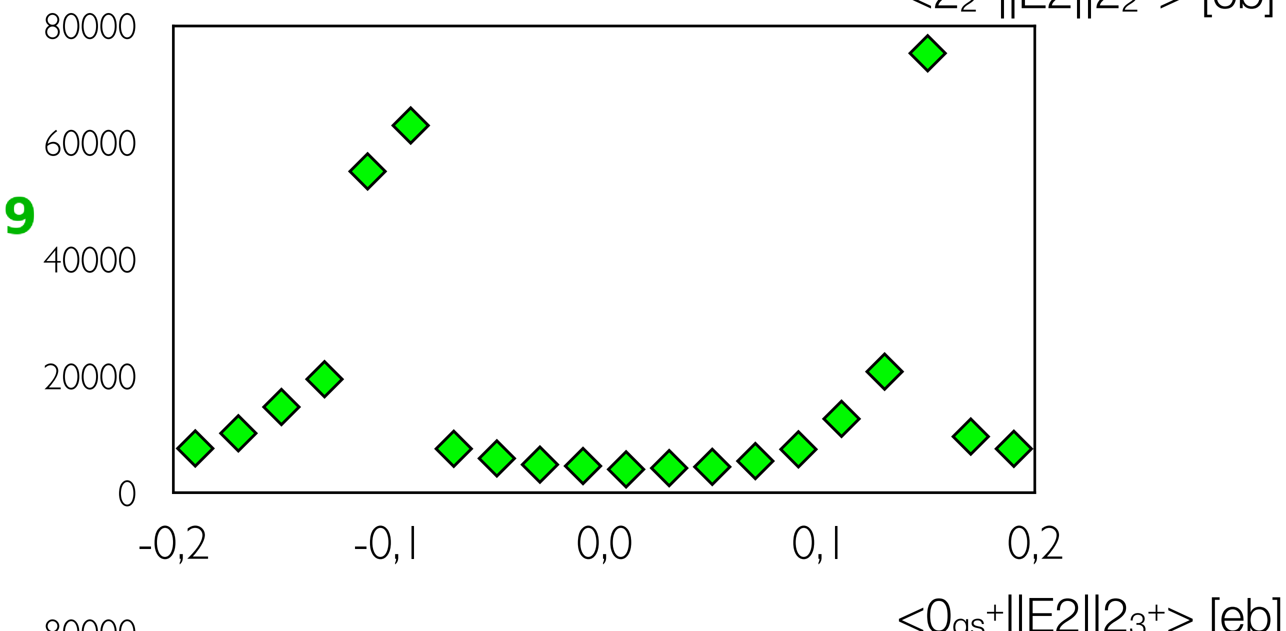


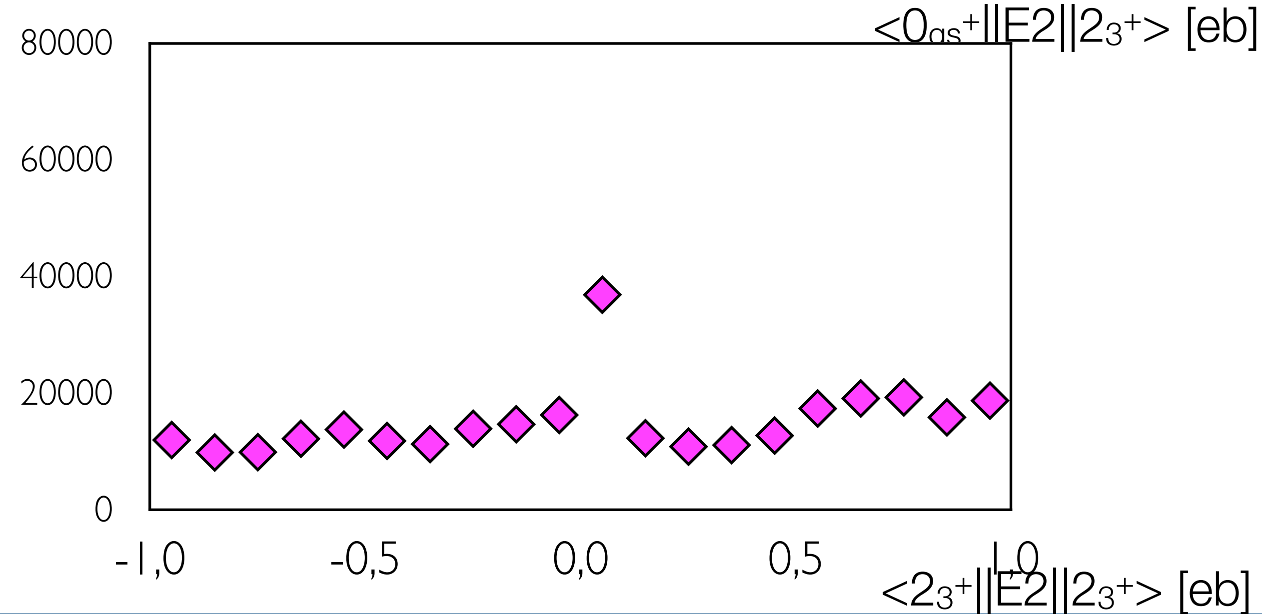


Przypadek fizyczny: ^{42}Ca









Wyznaczenie niepewność pomiarowej

GOSIA:

+ całkowanie funkcji
exp(- ½ χ^2(M))

- przybliżone uwzględnienie korelacji między elementami macierzowymi

Wykorzystajmy skanowanie powierzchni χ^2 do geometrycznego wyznaczenia niepewności pomiarowej: kontur χ_{min}^2+1

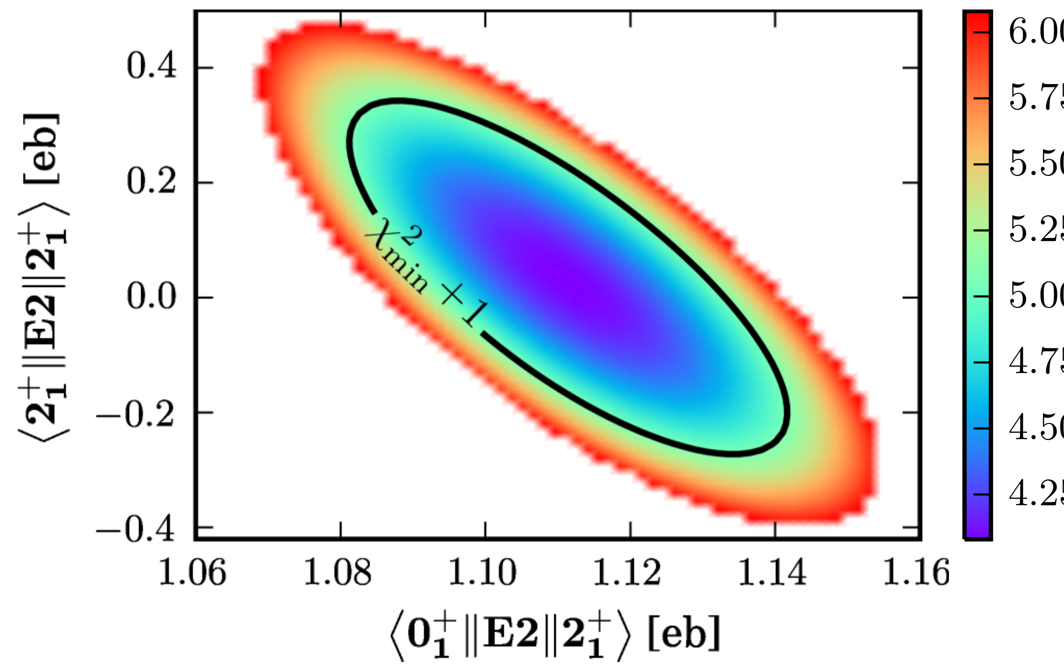


FIG. 9. Result of the χ^2 minimization for the $\langle 0_1^+ \| E2 \| 2_1^+ \rangle$ and $\langle 2_1^+ \| E2 \| 2_1^+ \rangle$ matrix elements in ^{140}Sm obtained after the last iteration of step 4 of the fitting procedure using target normalization. Note that the final uncertainties of all matrix elements were obtained after one more iteration of step 3.

M. Klintefjord et al.,
PHYSICAL REVIEW C **93**, 054303 (2016)

Jakie są minima?

Najbardziej czasochłonne jest wyliczenie χ^2 →zachowujmy obliczenia w każdy punkcie uzyskując informacje o powierzchni χ^2

QRepScan:

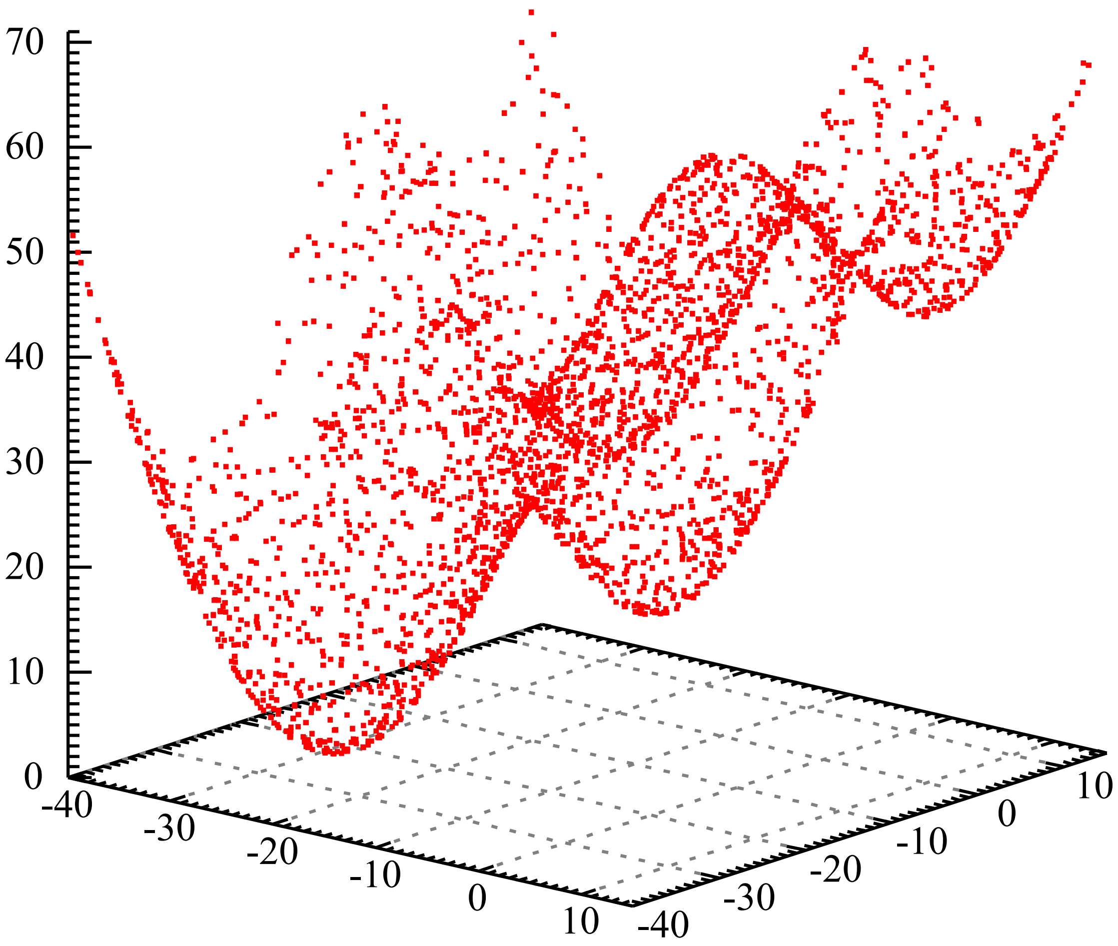
- wyszukuje wynik - zestaw elementów macierzowych o najniższym χ^2

- poszukuje alternatywnych minimum

- separuje minima - klasteryzacja NBC

- redukuje liczbę punktów - MDR

- wyznacza kontur niepewności - FLA



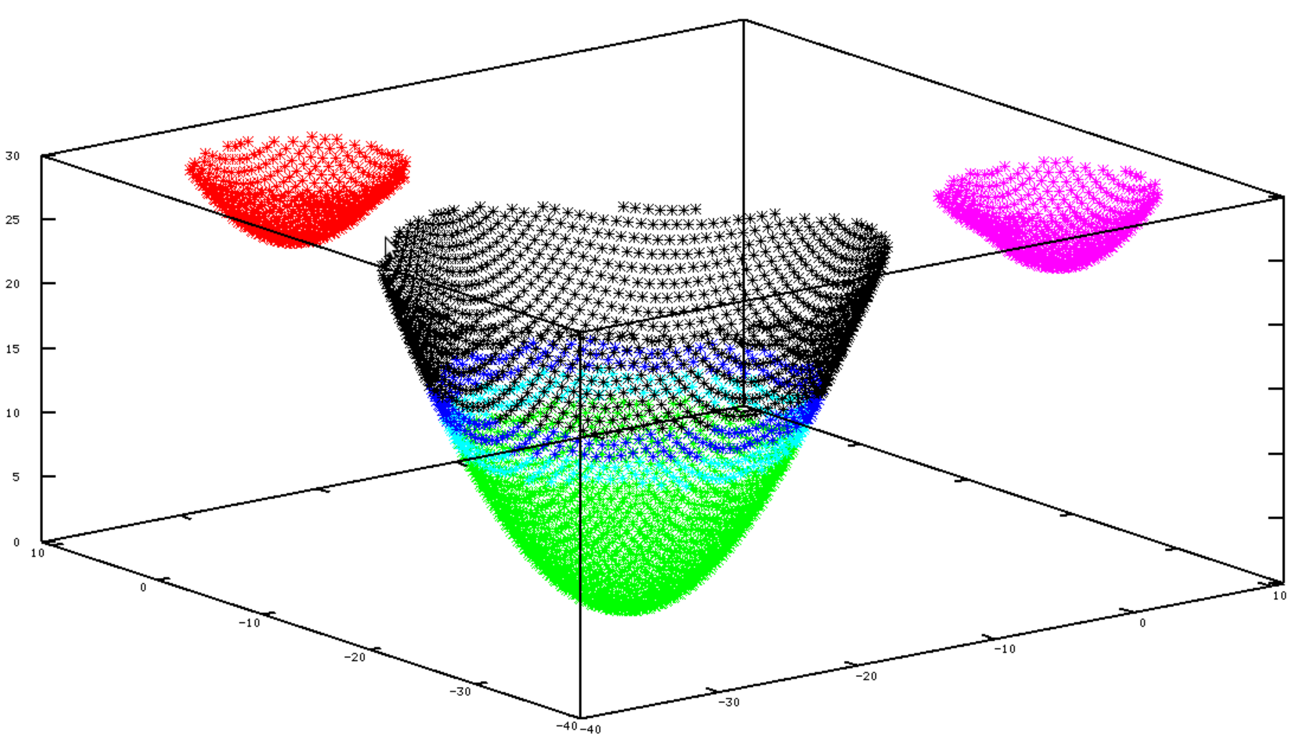
D.Piętak, Rozprawa doktorska, PW 2020

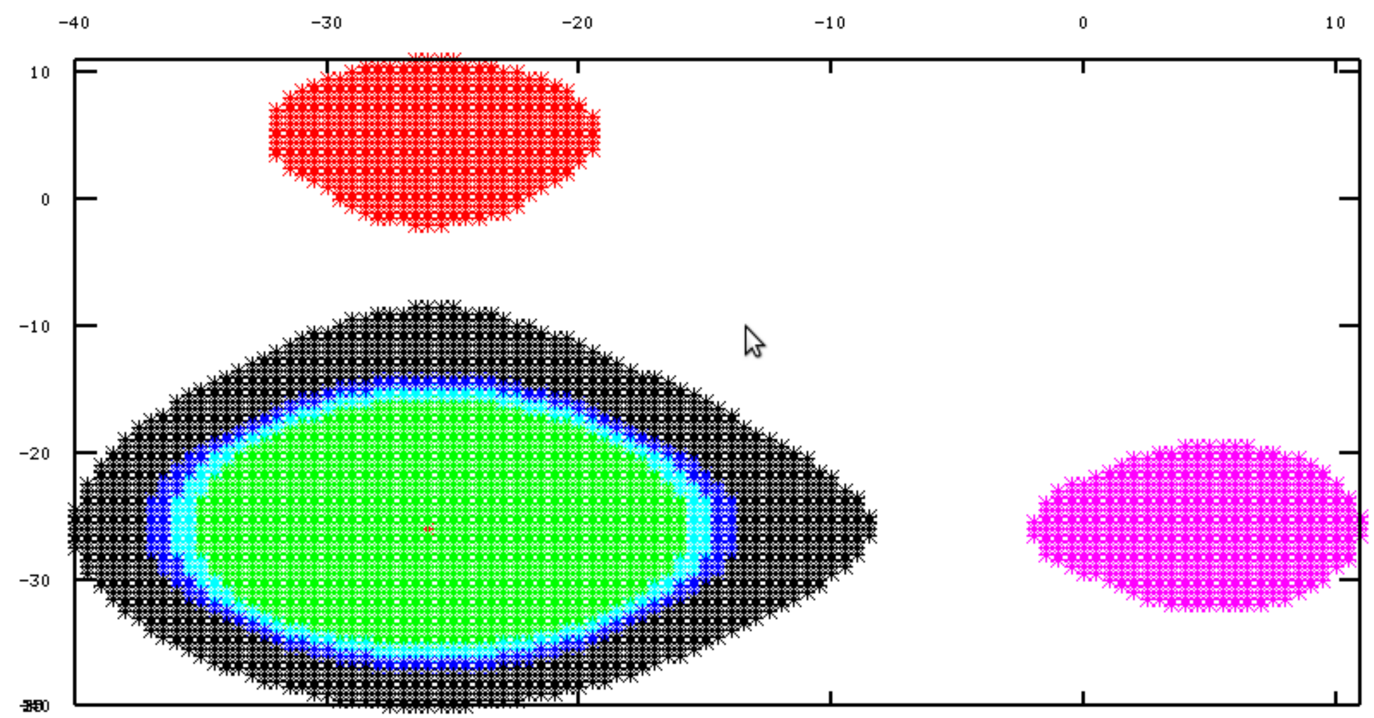
Shuigeng Zhou, Yue Zhao, Jihong Guan, Joshua Huang:
NBC: A Neighborhood-Based Clustering Algorithm.
Lecture Notes in Computer Science, Springer Berlin / Heidelberg, 2005

D.A.Piętak, J. Wojciechowski, P. J.Napiorkowski
A Front Line Algorithm For Error Estimation In Data Sets With Nonuniform Sampling Distribution
20th European Conference on Circuit Theory and Design (ECCTD), 2011

Front Line Algorithm

test z funkcją F7 i próbkowaniem równomiernym

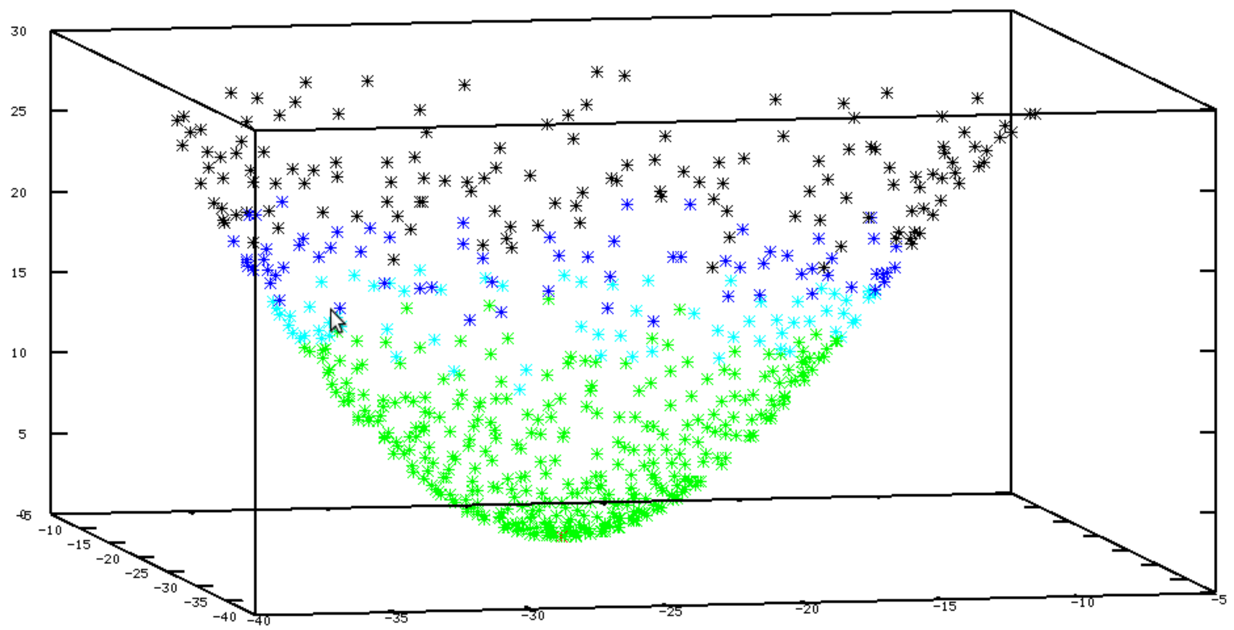


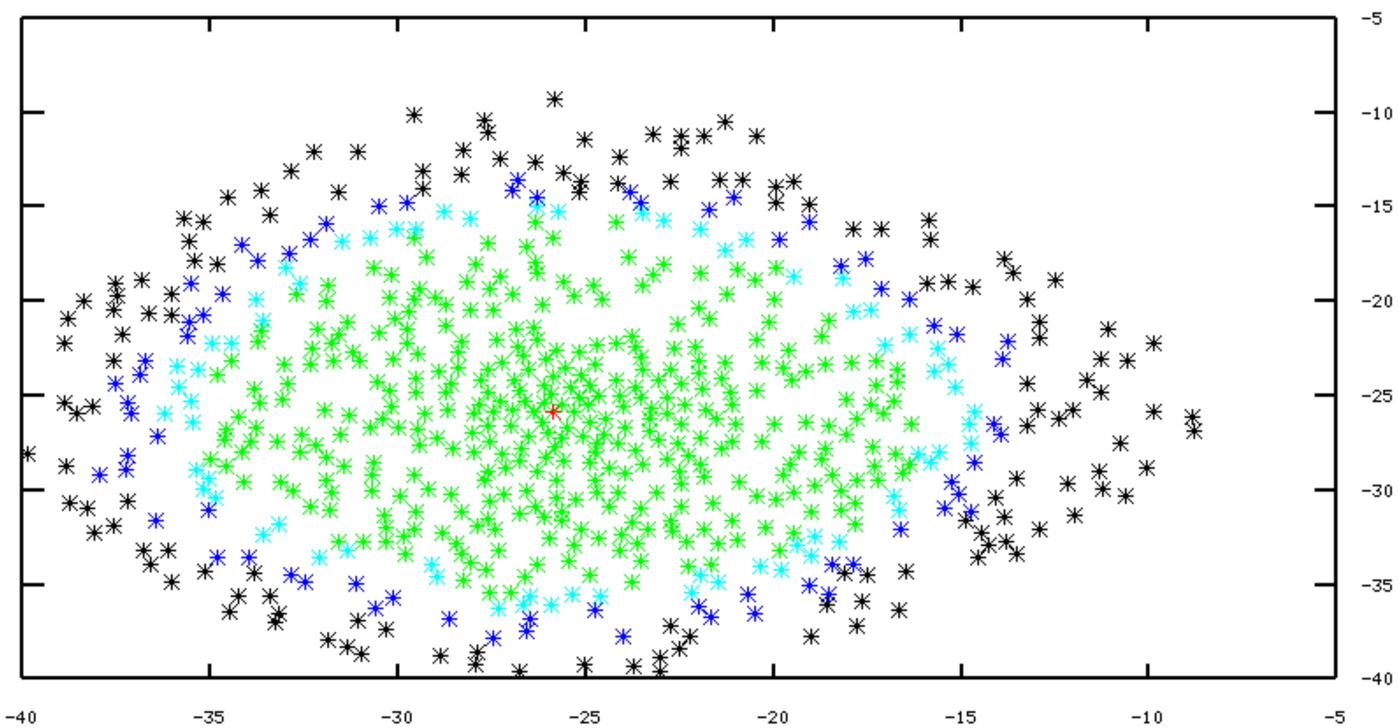


D.A.Piętak, J. Wojciechowski, P. J.Napiorkowski
A Front Line Algorithm For Error Estimation In Data Sets With Nonuniform Sampling Distribution
20th European Conference on Circuit Theory and Design (ECCTD), 2011

Front Line Algorithm

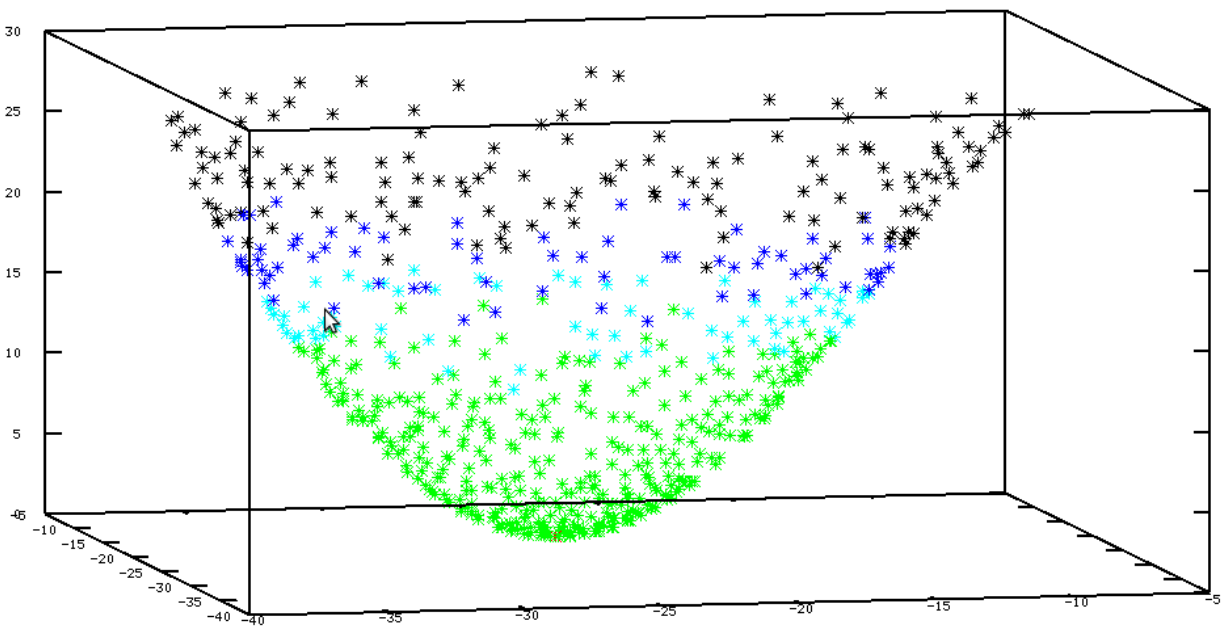
test z funkcją F7 i algorytmem genetycznym

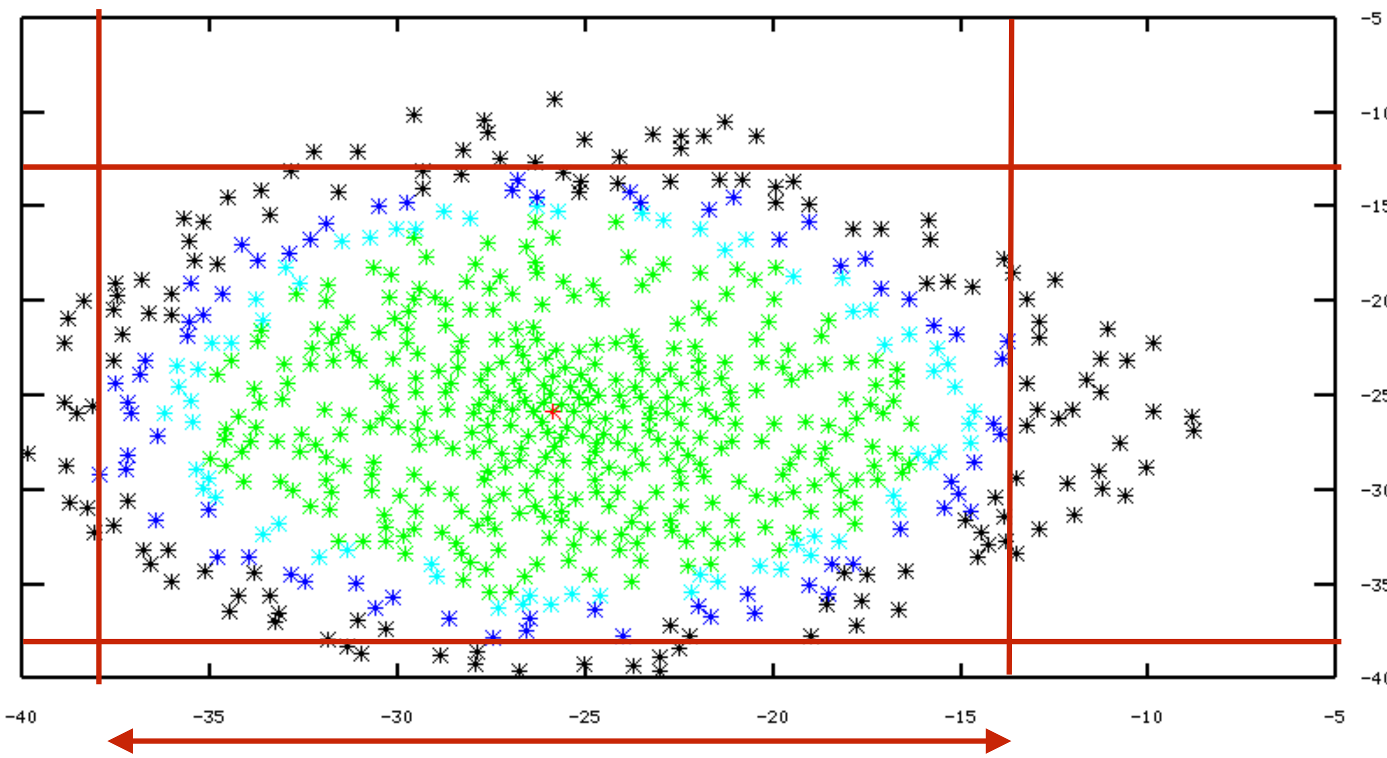




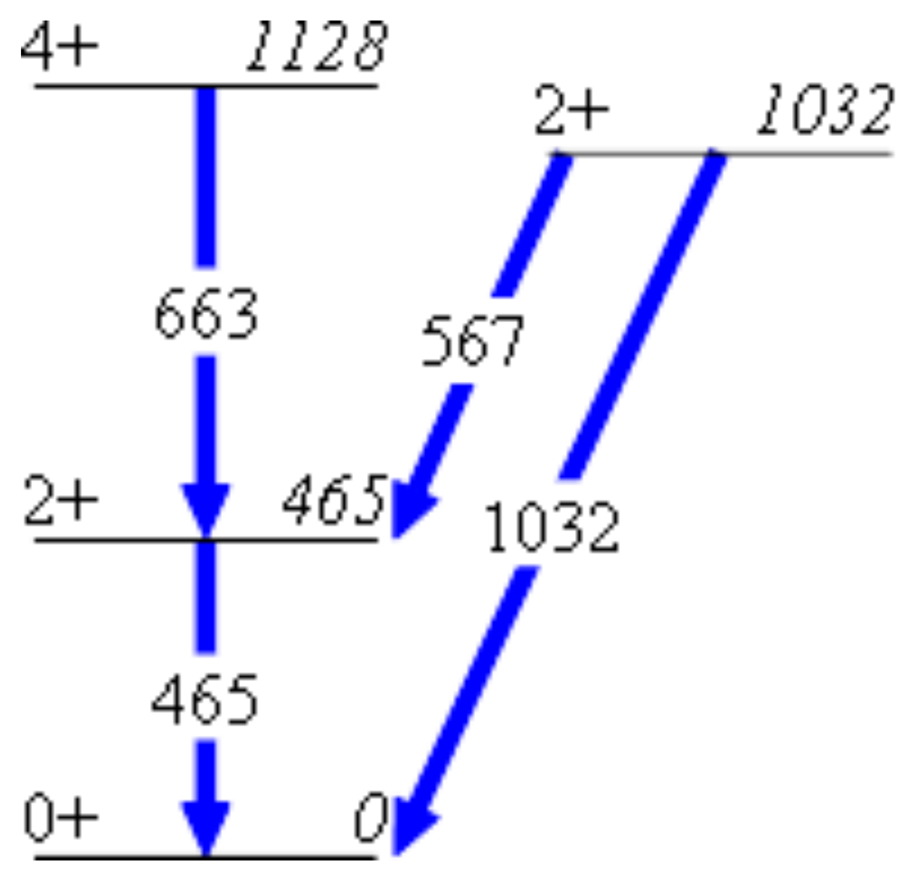
Front Line Algorithm

geometryczne wyznacznie niepewności





Porównanie:
GOSIA vs JACOB



^{132}Ba

- Przypadek ^{132}Ba ograniczony do 8 wymiarów (parametrów).
- **To nie jest jeszcze wynik fizyczny!**
- Jest to symulacja wykorzystująca rzeczywiste dane doświadczalne.

Porównanie:
GOSIA vs JACOB (AH)

Parametr Element macierzowy	Wartość	GOSIA	JACOB (AH)	
1	0,923	-3%,+4%	-2%,+2%	**OK**
2	0,267	STOP	STOP	**NO**
3	0,104	-	-	
4	1,235	-1%,+1%	-12%,+12%	**?**
5	1,033	-2%,+2%	-17%,+16%	**?**
6	0,021	-	-	
7	-1.495	STOP	STOP	**NO**
8	0,648	-6%,+7%	-10%,+10%	**OK**

Algorytm genetyczny dla wzbudzeń kulombowskich

Podsumowanie

- W analizie wzbudzeń kulombowskich zaimplementowano metodę minimalizacji z elementami „sztucznej inteligencji".

- Połączenie algorytmu genetycznego i metody gradientowej daje najlepsze wyniki.

- Algorytm genetyczny oferuje dodatkowe funkcjonalności dla użytkownika i z niektórych już umiemy korzystać.

- Wyznaczanie niepewności pomiarowej wymaga dalszej walidacji na dobrych (niezbyt skomplikowanych) przypadkach fizycznych.

- Zastosowanie algorytmu genetycznego do wzbudzeń kulombowskich jest interesującym problemem badawczym także dla informatyków.

Ludzie …

Wydział Elektroniki i Technik Informacyjnych Politechniki Warszawskiej

- mgr inż. Daniel Andrzej Piętak
- prof. dr hab. Jacek Wojciechowski
- dr hab. Piotr Bilski, prof. PW
- dr inż. Andrzej Pająk

SLCJ

- lic. Wojciech Piątek

… i ich dzieła

- D. A. Piętak,
  Implementacja algorytmu genetycznego do analizy danych z pomiarów wzbudzeń kulombowskich, Praca dyplomowa, Politechnika Warszawska, 2008
- D.A.Piętak, P.J.Napiorkowski, Z.Walczak, J.Wojciechowski
  Application of Genetic Algorithm with Real Representation to COULEX Data Analysis, Proceedings of the Conference on Evolutionary Computation and Global Optimization
  Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, 2009
- Wojciech Piątek i Aleksandra Rubin
  Projekt dyplomowy, Uniwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego, 2010
  W.Piątek, A.Rubin, J.Górecki, D.A.Piętak, P.J.Napiorkowski, HIL Annual Report 2010
- D.A.Piętak, J. Wojciechowski, P. J.Napiorkowski
  A Front Line Algorithm For Error Estimation In Data Sets With Nonuniform Sampling Distribution
  20th European Conference on Circuit Theory and Design (ECCTD), 2011
- D.A.Piętak
  Metody oceny jakości wyników eksperymentów wzbudzeń kulombowskich z wykorzystaniem algorytmu genetycznego.
  Rozprawa doktorska, Politechnika Warszawska, Warszawa 2020