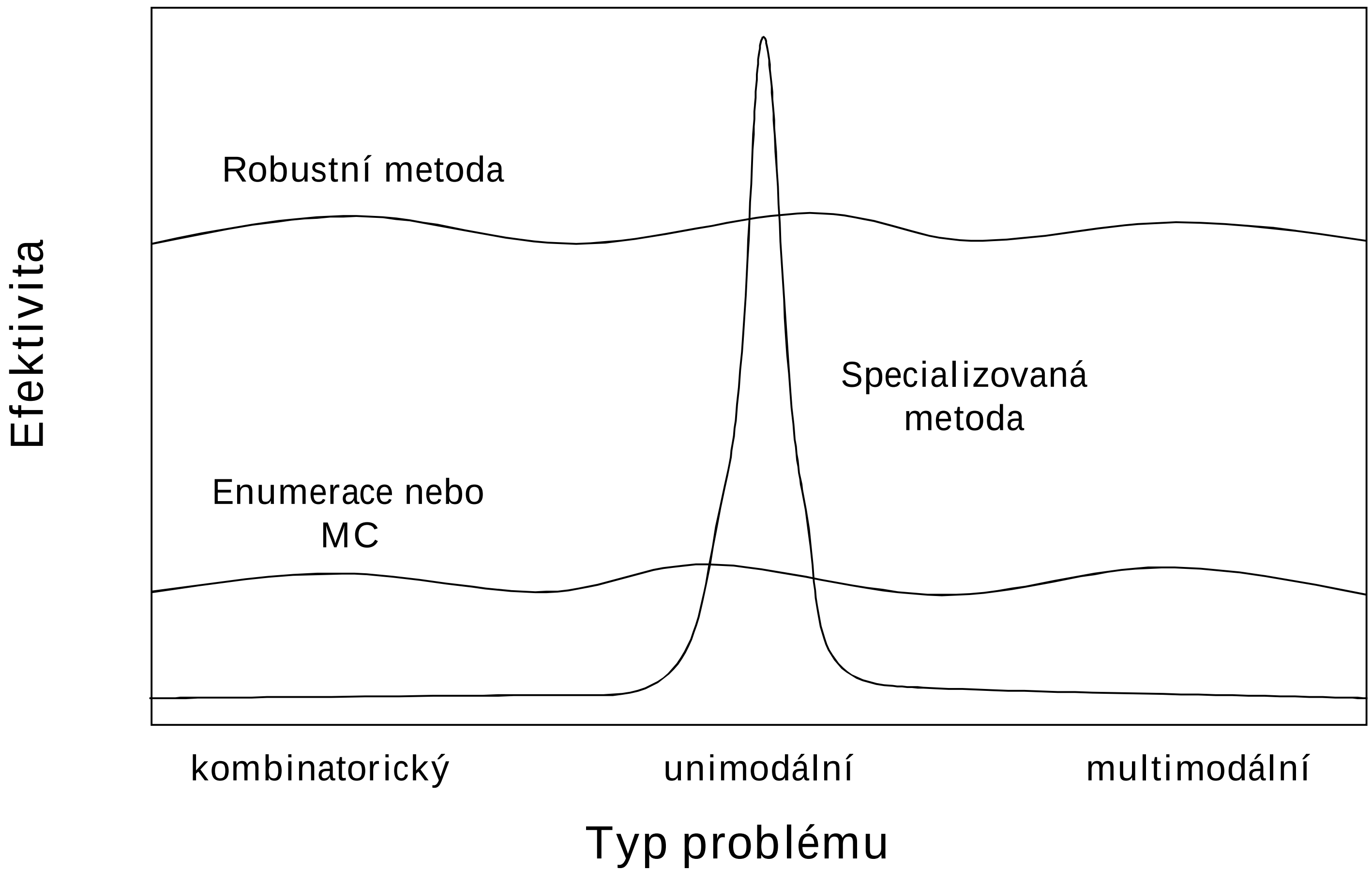
Úvod do stochastických optimalizačních metod (metaheuristik)

Efektivita optimalizačních metod



Klasifikace optimalizačních metod

Metody přímého vyhledávání

Heuristiky - většinou deterministické algoritmy

- Horolezecké algoritmy
- Simplexový algoritmus (Nelder-Mead)

Metaheuristiky - většinou stochastické algoritmy

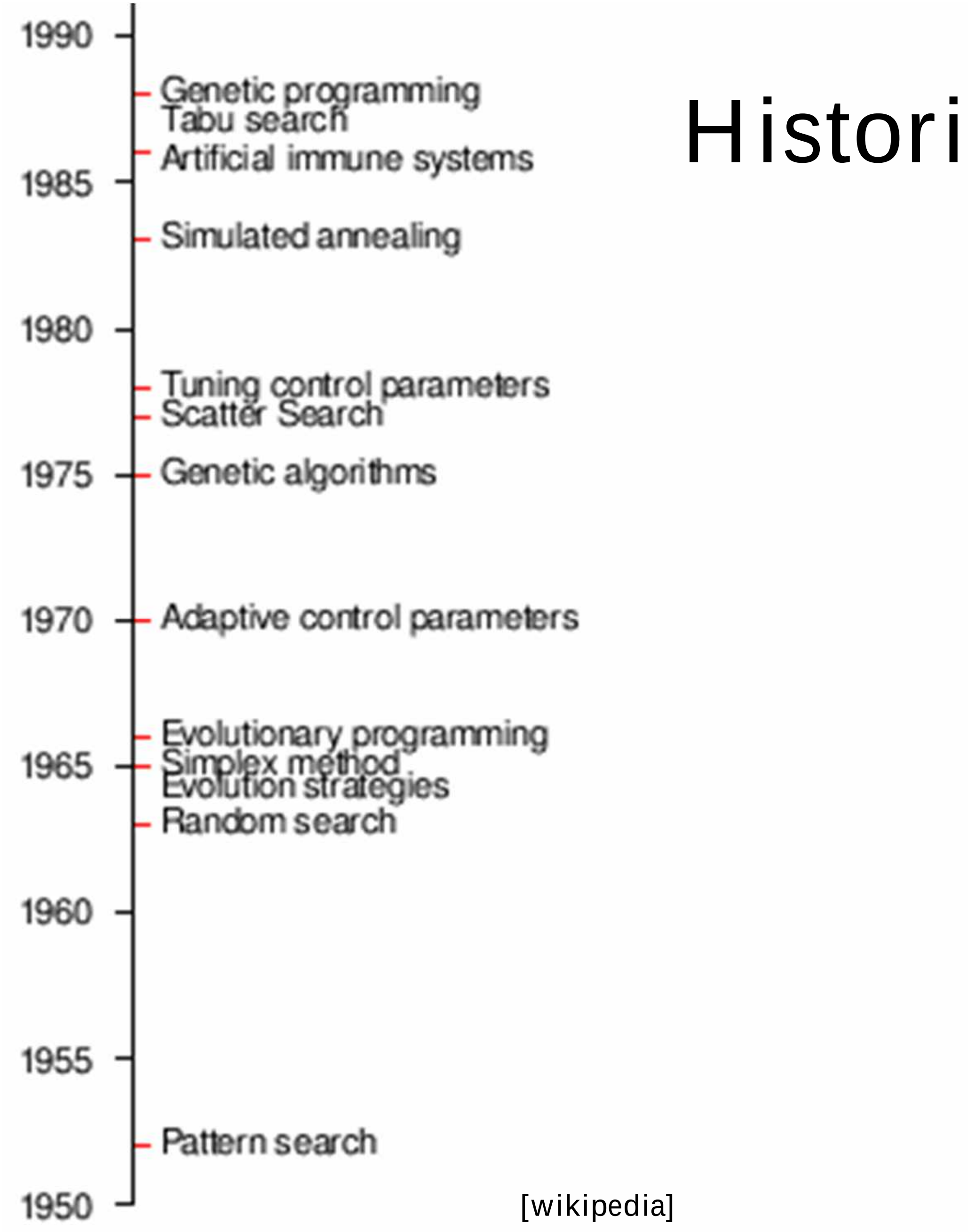
Inspirované přírodou

Inspirované fyzikálními zákony

- Simulované žíhání

Inspirované evolucí – Evoluční algoritmy

- Genetické algoritmy
- Evoluční strategie
- Evoluční programování



Historie metaheuristik

[wikipedia]

Metody přímého vyhledávání
(direct search methods)

- Bez využití znalosti gradientu (zero-order methods)
- Heuristiky:
  - „... a heuristic is an algorithm that ignores whether the solution to the problem can be proven to be correct, but which usually produces a good solution or solves a simpler problem that contains or intersects with the solution of the more complex problem. Heuristics are typically used when there is no known way to find an optimal solution, or when it is desirable to give up finding the optimal solution for an improvement in run time.“ [Wikipedia]
  - Např.: metoda pokusu a omylu nebo Nelder-Mead algoritmus
- Metaheuristiky:
  - „designates a computational method that optimizes a problem by iteratively trying to improve a candidate solution.“ [Wikipedia]

Nelderova-Meadova metoda

- Heuristická metoda
- Známá také jako *metoda simplexů*
- Vhodná pro Dim<10

Nelderova-Meadova metoda

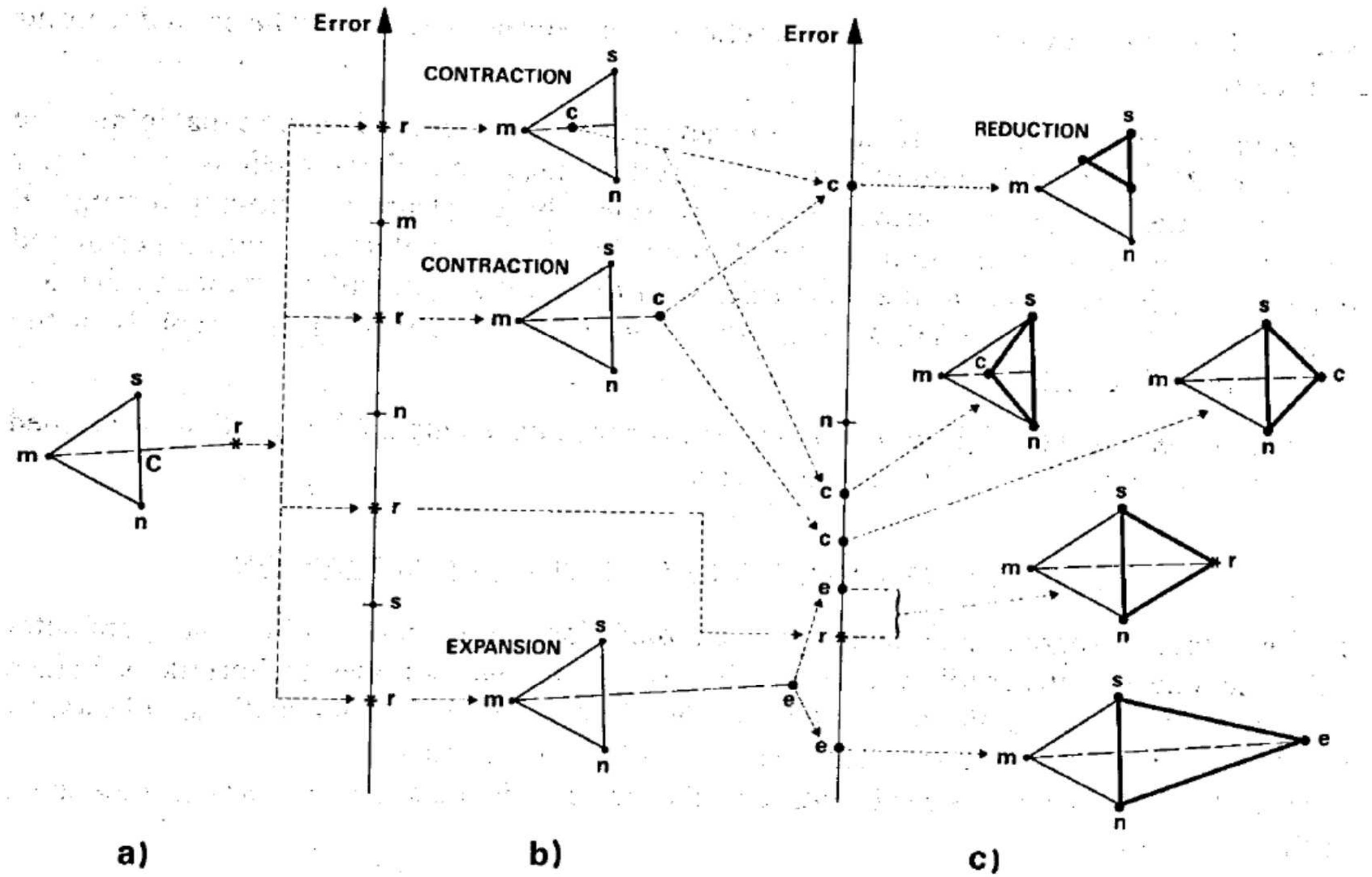
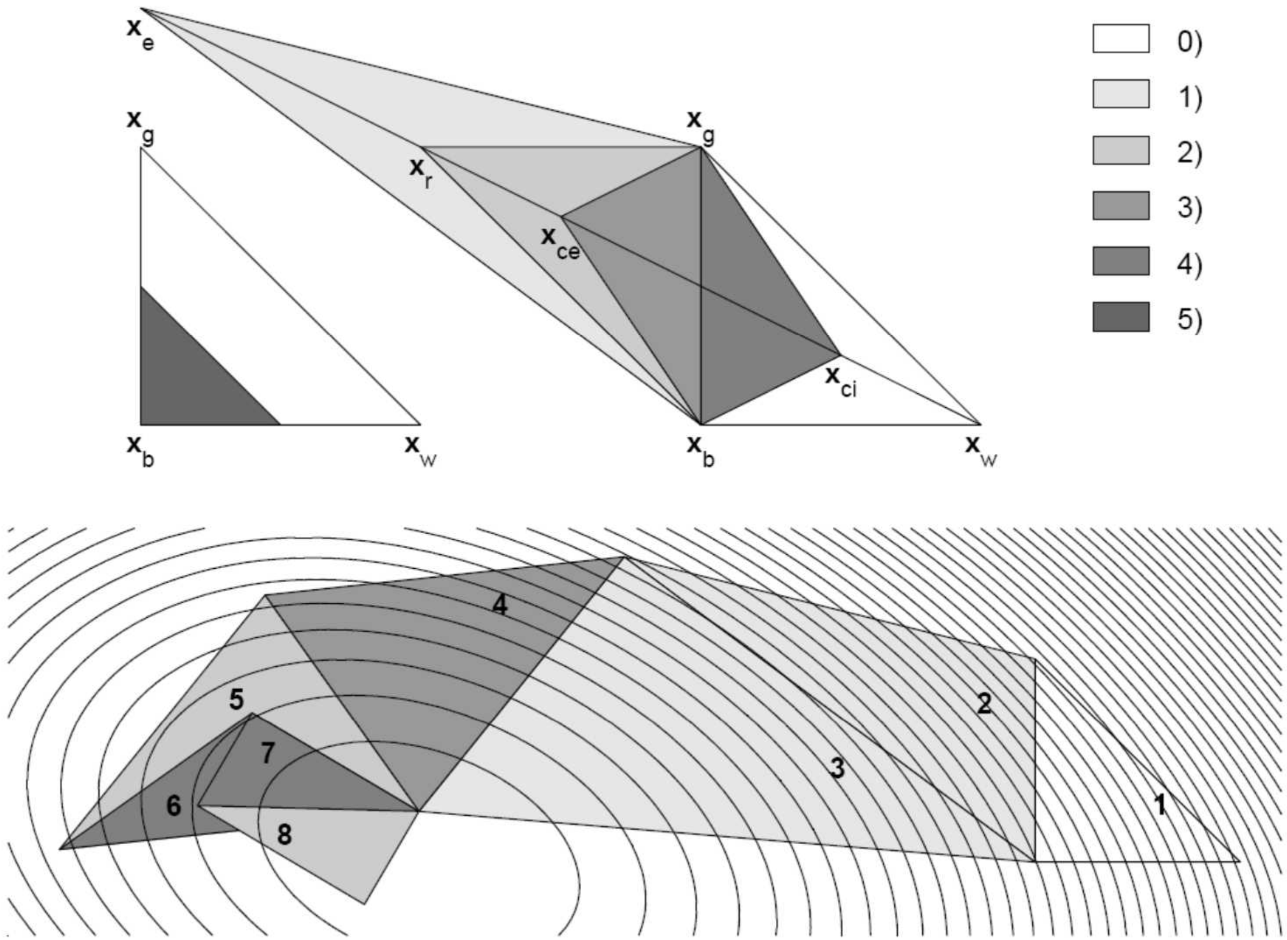


Figure 3. An illustration of the flexible polyhedron strategy for $N = 2$ parameters. (a) Current simplex and reflection (of m with respect to C into r): m = vertex with max error; n = vertex with next to the max error, s = vertex with smallest error; C = centroid of the vertices except m. (b) Comparisons of error levels and consequent moves. (c) Second error comparisons and final moves

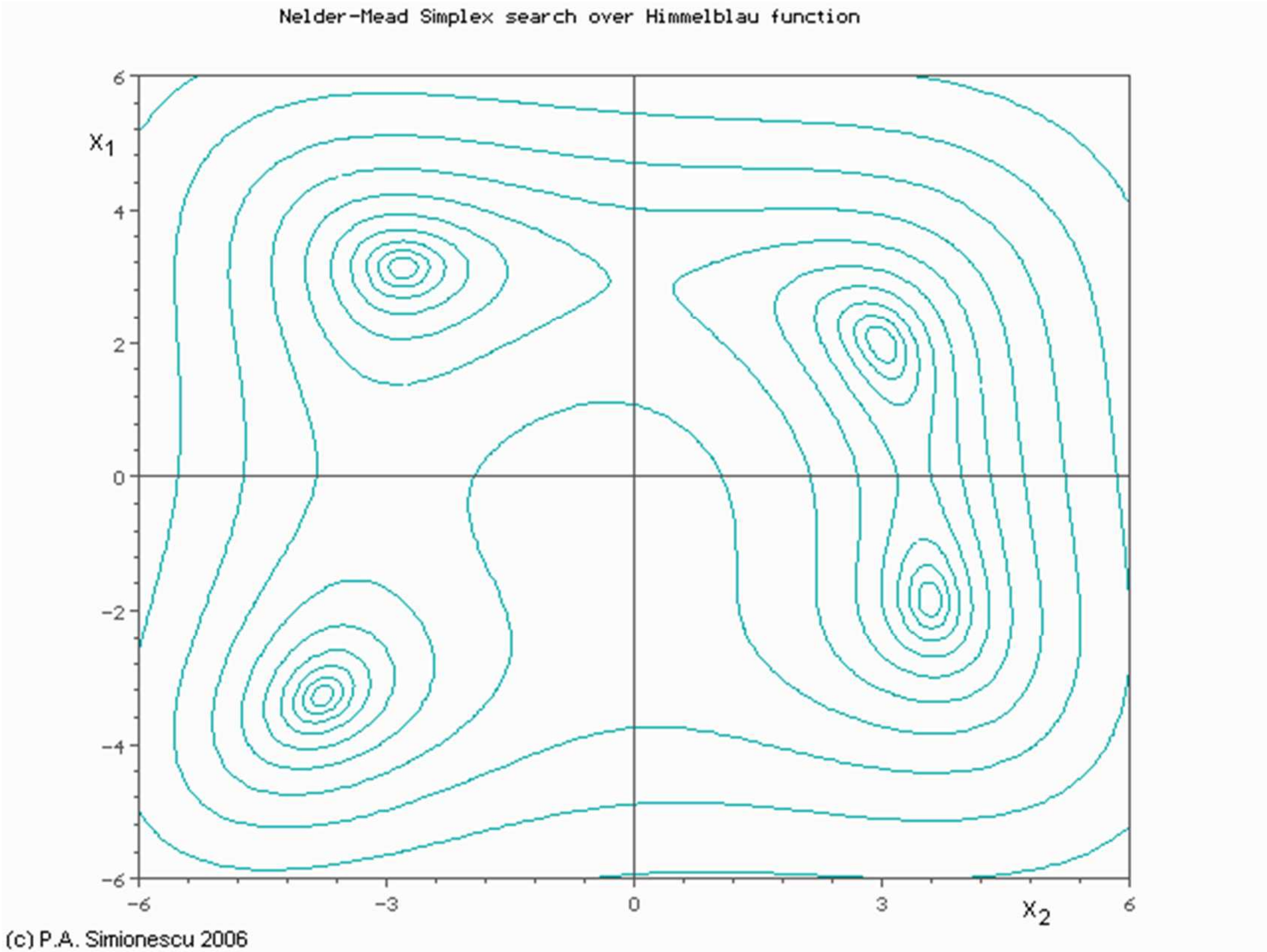
[Gioda & Maier, 1980]

Nelderova-Meadova metoda



Nelderova-Meadova metoda: 0) originální trojúhelník, 1) expanze, 2) reflexe, 3) vnější kontrakce, 4) vnitřní kontrakce, 5) redukce [Čermák & Hlavička, VUT, 2006]

Nelderova-Meadova metoda



Metaheuristiky

- Taktéž stochastické optimalizační metody – využívají náhodných čísel => náhodné chování
- Změna existujícího řešení lokální změnou
- Příklady metod:
  – Metoda Monte Carlo
  – Dynamický horolezecký algoritmus
  – Simulované žíhání
  – Tabu Search

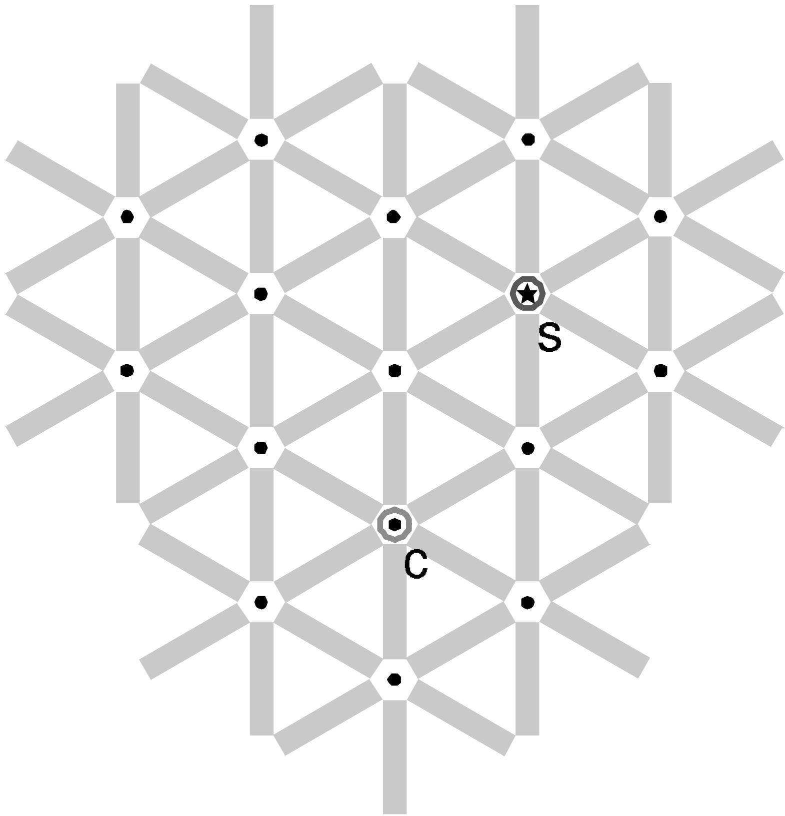
Metoda Monte Carlo

také (brute-force search = metoda hrubé síly)

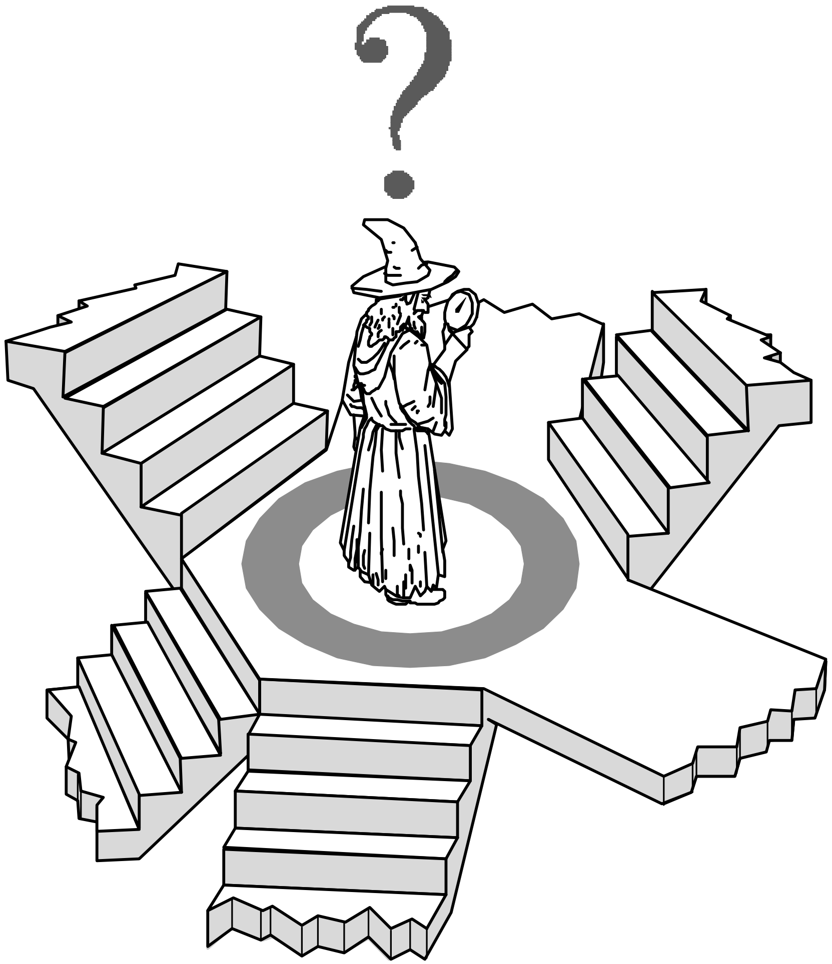
- Nebo též „slepý algoritmus“
- Slouží jako benchmark

```
t = 0
Vytvoř P, ohodnoť P
while (not zastavovací podmínka) {
t = t+1
Náhodně vytvoř N
Pokud je N lepší, pak nahradí P
}
```

Globální pohled na optimalizaci



Lokální pohled na optimalizaci



Horolezecký algoritmus

(Hill climbing)

- Zavádí prohledání okolí současného řešení

```
t = 0
Vytvoř P, ohodnoť P
while (not zastavovací podmínka) {
t = t+1
Náhodně nebo systematicky vytvoř N_i v okolí P, ohodnoť N_i
Nejlepší N_i nahradí P
}
```

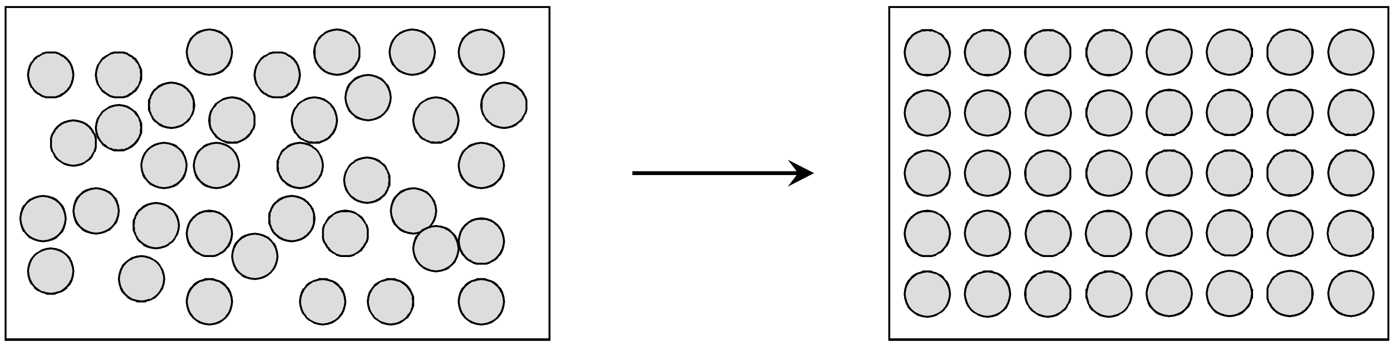
Simulované žíhání (SA)

(Simulated annealing)

- Objevena v 80. letech nezávisle dvěma autory [Kirkpatrick et al., 1983] a [Černý, 1985]
- Založena na fyzikálním základu, na myšlence žíhání kovů, kdy postupným pomalým ochlazováním se materiál dostane na svoji energeticky nejnižší hodnotu, která v optimalizaci odpovídá globálnímu minimu
- Existují pro ní matematické důkazy konvergence

Fyzikální základy

- Teorie vychází z pozorování chování krystalů kovů v závislosti na teplotě

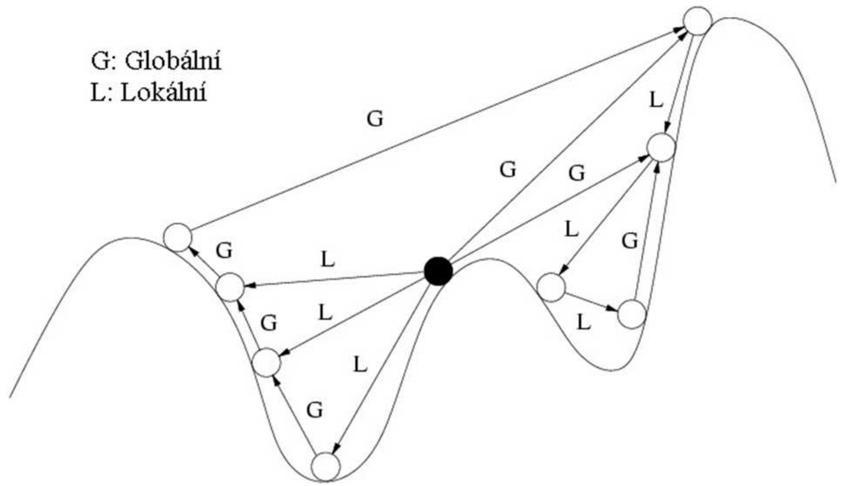


Vysoká teplota → Nízká teplota

Principy metody

- stochastická optimalizační metoda

- zvýšení možnosti úniku z lokálního extrému



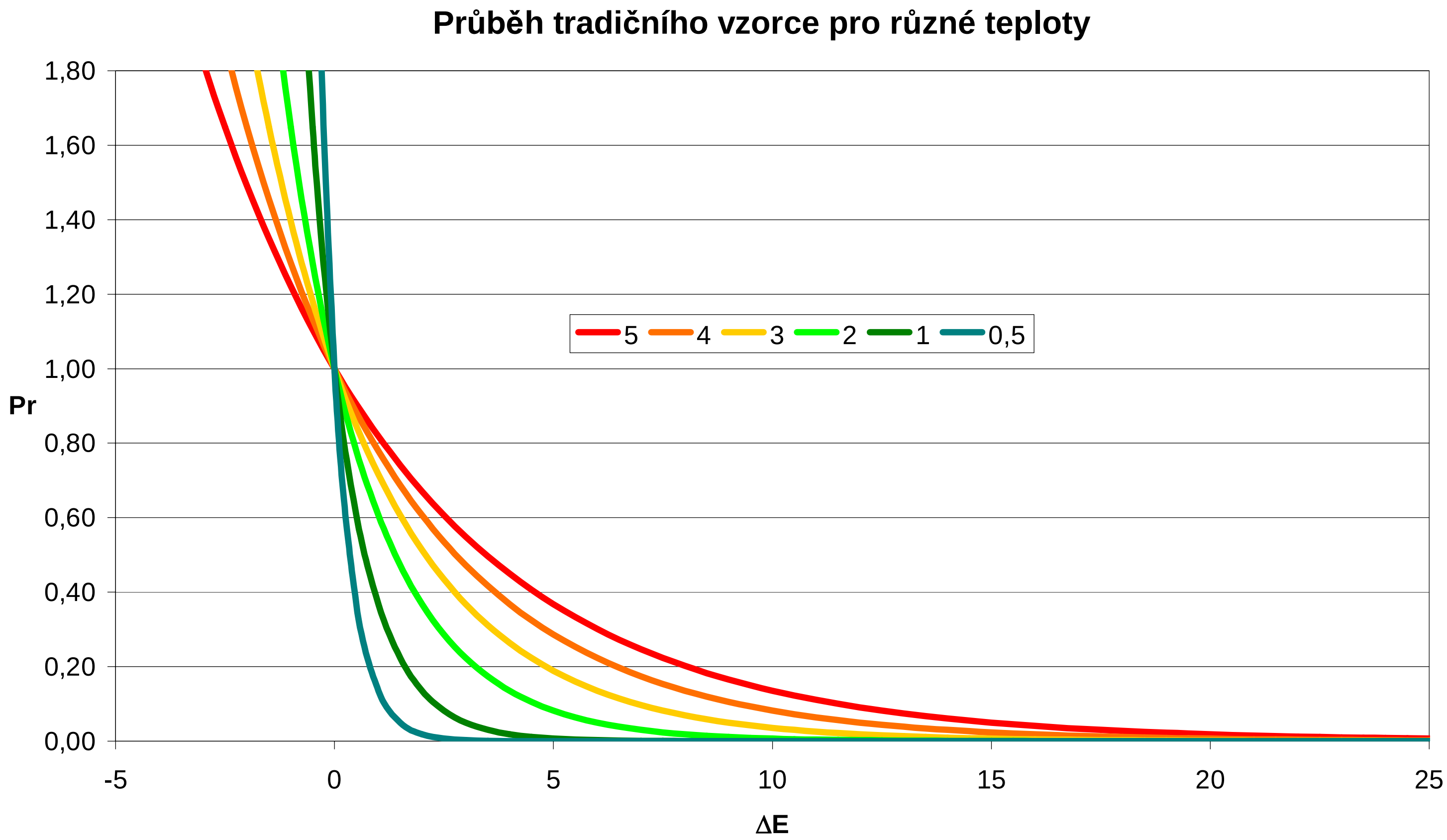
$$\Pr(E) = \exp\left(\frac{-\Delta E}{\kappa_B T}\right)$$

- postupné snižování teploty tzv. *cooling schedule* (ochlazování)

Vliv teploty

- Pravděpodobnost

$$\Pr(E) = \exp\left(\frac{-\Delta E}{\kappa_B T}\right)$$



Algoritmus

$T = T_{max}$, Vytvoř P, ohodnoť P
while (not zastavovací podmínka) {
count = *succ* = 0
while ($count < count_{max}$ & $succ < succ_{max}$) {
count = *count* + 1
změň P operátorem O, N je výsledek
$p = \exp((F(N) - F(P)) / T)$ (pravděpodobnost)
if (náhodné číslo u[0, 1] < p) {
succ = *succ* + 1
P=N
$\}_{if}\}_{while}$
Sniž T (ochlazení)
$\}_{while}$

Algoritmus

- Počáteční teplotu T_{max} je potřeba zvolit tak, aby poměr přijatých jedinců ke všem vytvořeným byl např. 50%. Nastavení této hodnoty vyžaduje experimentování metodou "pokusu a omylu"

- Parametr $count_{max}$ udává maximální počet všech iterací a $succ_{max}$ počet úspěšných iterací na dané teplotní hladině. Doporučený poměr těchto hodnot je $count_{max} = 10\ succ_{max}$

Algoritmus

- Zastavovací podmínka je obvykle dosažení maximálního počtu iterací
- Jako operátor „mutace“ se nejčastěji používá přičtení náhodného čísla s Gaussovským normálním rozdělením pravděpodobnosti s nulovou střední hodnotou, nebo-li

$$N = P + G(0,\sigma) \ ,$$

kde směrodatná odchylka σ je obvykle určena metodou pokus-omyl

Algoritmy ochlazování

- Tradiční: $T_{i+1} = T_{mult}T_i$
- Kde obvykle T_{mult} =0,99 nebo 0,999
- Existují i jiné typy ochlazování obvykle ve tvaru

  $$T \approx \frac{T_0}{\ln t}$$

  viz např. [Ingber]
- Tyto nastavení ale příliš neumožňují „ovládání“ algoritmu

Algoritmy ochlazování

- Navržena úprava v [Lepš, Dip. práce]

$$T_{mult} = \left(\frac{T_{min}}{T_{max}}\right)^{\frac{succ_{max}}{iter_{max}}}$$

- Tento vzorec zaručuje, aby algoritmus při zvoleném maximu počtu iterací $iter_{max}$ dosáhl minimální teploty T_{min}, jejíž doporučená hodnota je

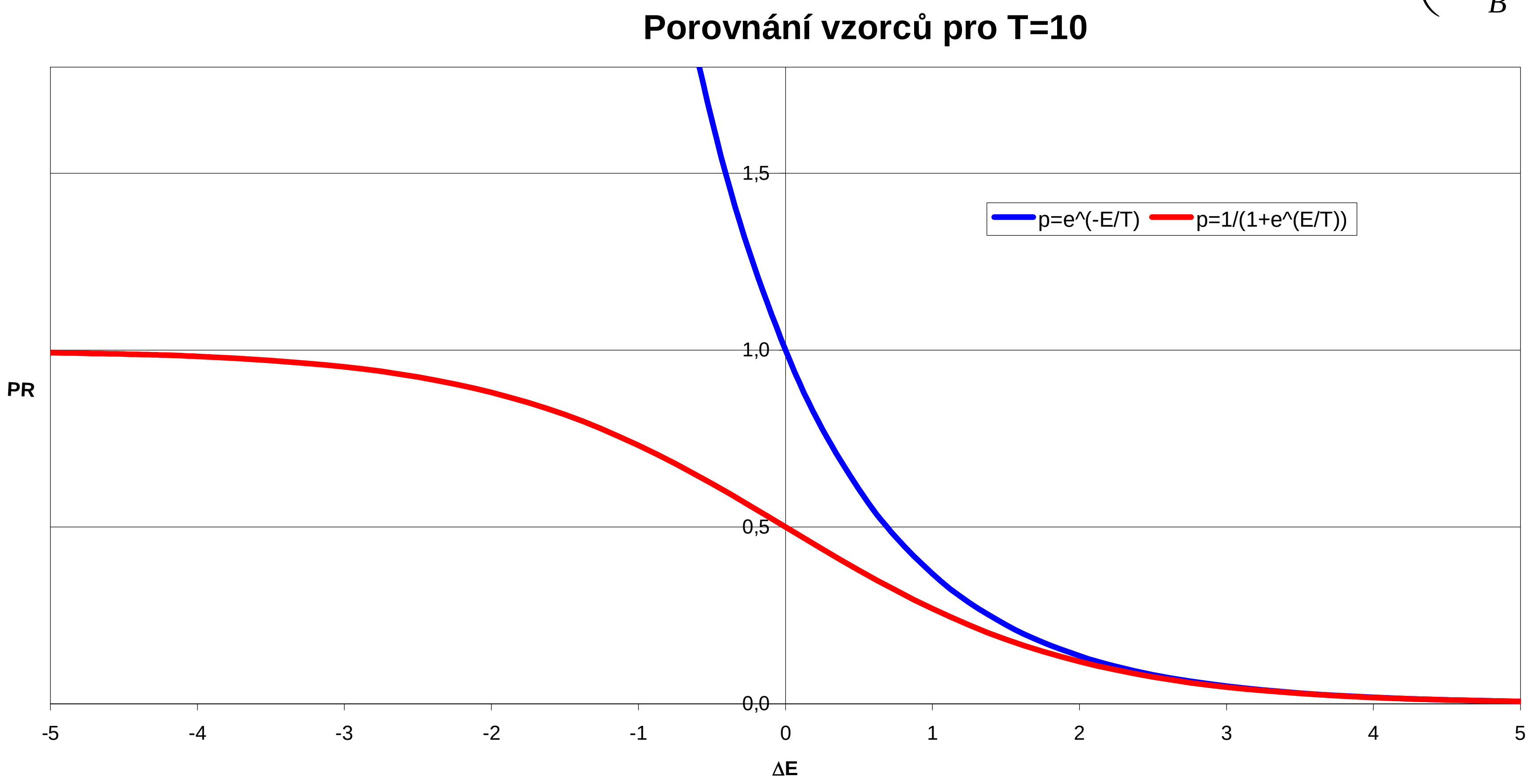
$$T_{min} = 0{,}01T_{max}$$

- Např. pro $succ_{max}$ / $iter_{max}$ = 0,001 je T_{mult}=0,995

Poznámka k pravděpodobnosti

- U populačních algoritmů

$$\Pr(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\Delta E}{\kappa_B T}\right)}$$



Konvergence SA

'Convergence' result for SA:

Under certain conditions (extremely slow cooling),
any sufficiently long trajectory of SA is guaranteed to end in
an optimal solution [Geman and Geman, 1984; Hajek, 1998].

Note:

- Practical relevance for combinatorial problem solving is very limited (impractical nature of necessary conditions)
- In combinatorial problem solving, *ending* in optimal solution is typically unimportant, but *finding* optimal solution during the search is (even if it is encountered only once)!

Threshold acceptance

(volně: Povolený práh)

- Jednodušší metoda než SA
- Namísto pravděpodobnosti zavádí tzv. práh, nebo-li hodnotu, o kterou nové řešení může být horší než původní aby ho přesto nahradilo
- Práh je snižován podobně jako teplota
- Existuje matematický důkaz, že tato metoda nezaručuje nalezení globálního minima

Reference

[1] Kvasnička, V. (1993). Stochastické metody optimalizace funkcií N premenných. In Analýza dat, Pardubice.

[2] V. Kvasnička, J. Pospíchal, P Tiňo (2000). Evolučné algoritmy. STU Bratislava.

[3] Kirkpatrick, S., Gelatt, Jr., C., and Vecchi, M. P. (1983). Optimization by Simulated Annealing. Science, 220:671–680.

[4] Černý, J. (1985). Thermodynamical approach to the traveling salesmanproblem: An efficient simulation algorithm. J. Opt. Theory Appl., 45:41–51.

Reference

[5] Ingber, L. (1993). Simulated annealing: Practice versus theory. Mathematical and Computer Modelling, 18(11):29–57.

[6] Ingber, L. (1995). Adaptive simulated annealing (ASA): Lessons learned. Control and Cybernetics, 25(1):33–54.

[7] Vidal, R. V. V. (1993). Applied Simulated Annealing, volume 396 of Notes in Economics and Mathematical Systems. Springer-Verlag.

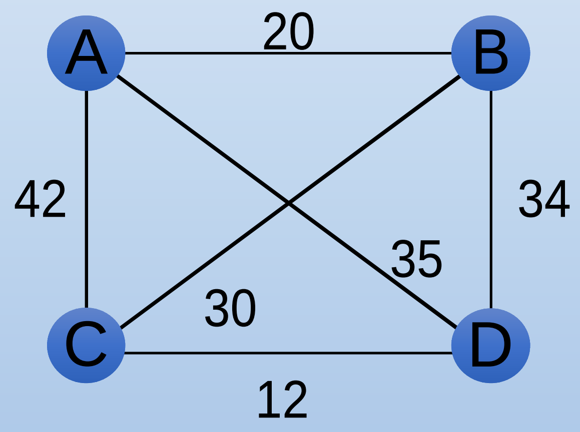
[8] J. Dréo, A. Pétrowski, P. Siarry, E. Taillard, A. Chatterjee (2005). Metaheuristics for Hard Optimization: Methods and Case Studies. Springer.

[9] Lepš, M. (2000). Optimalizace železobetonového spojitého nosníku, Diplomová práce, ČVUT v Praze.

Populární optimalizační problémy

- Problém obchodního cestujícího

Je dáno n měst, které mají mezi sebou známou vzdálenost. Cílem je najít nejkratší cestu mezi nimi tak, abychom navštívili všechna města právě jednou a vrátili se do výchozího bodu.



	A	B	C	D
A	0	20	42	35
B	20	0	30	34
C	42	30	0	12
D	35	34	12	0

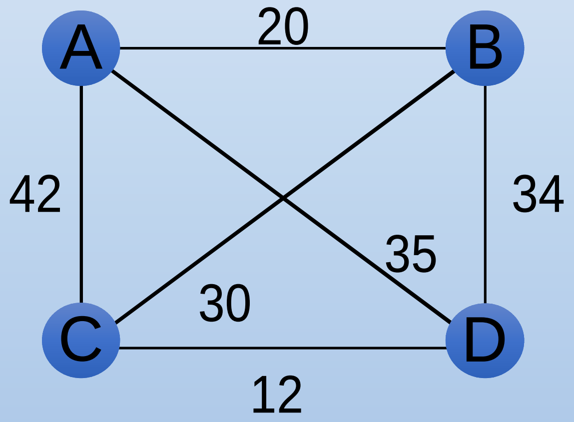
Vzdálenosti mezi místy

Formulace problému ovlivňuje náročnost výpočtu.
Zde uvažována varianta se symetrickou maticí vzdáleností měst.

Populární optimalizační problémy

- Problém obchodního cestujícího

Je dáno n měst, které mají mezi sebou známou vzdálenost. Cílem je najít nejkratší cestu mezi nimi tak, abychom navštívili všechna města právě jednou a vrátili se do výchozího bodu.



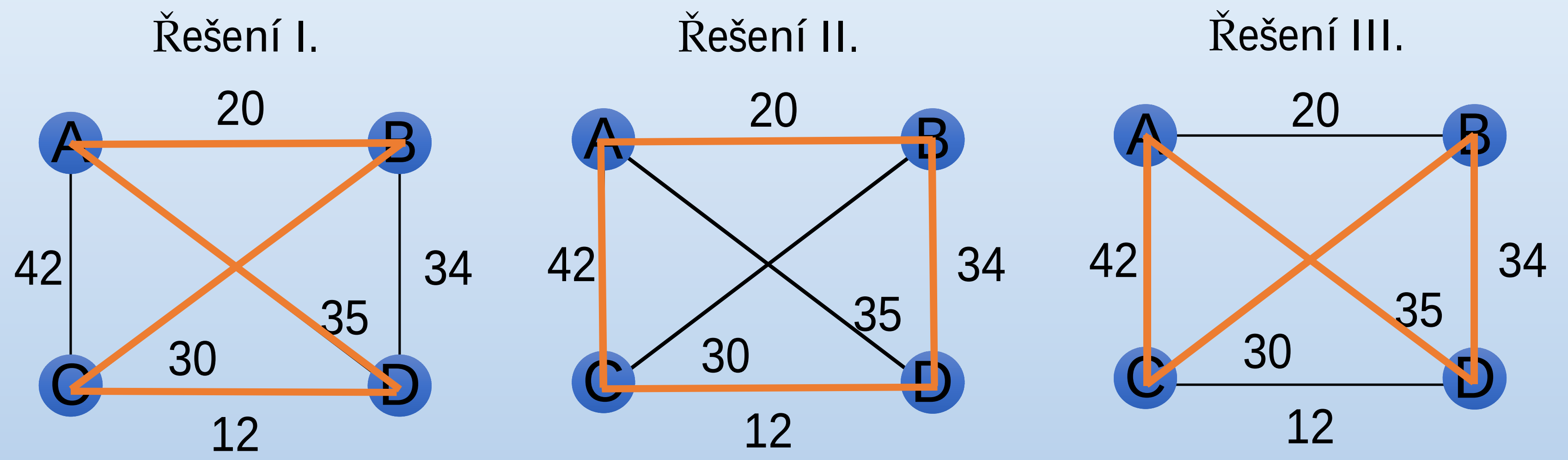
	A	B	C	D
A	0	20	42	35
B	20	0	30	34
C	42	30	0	12
D	35	34	12	0

Vzdálenosti mezi místy

Malý počet měst prohledatelný hrubou silou, projití všech permutace bez opakování (n-1)! / 2
Problém roste faktoriálně s rostoucím počtem měst n => NP-těžká úloha

Populární optimalizační problémy

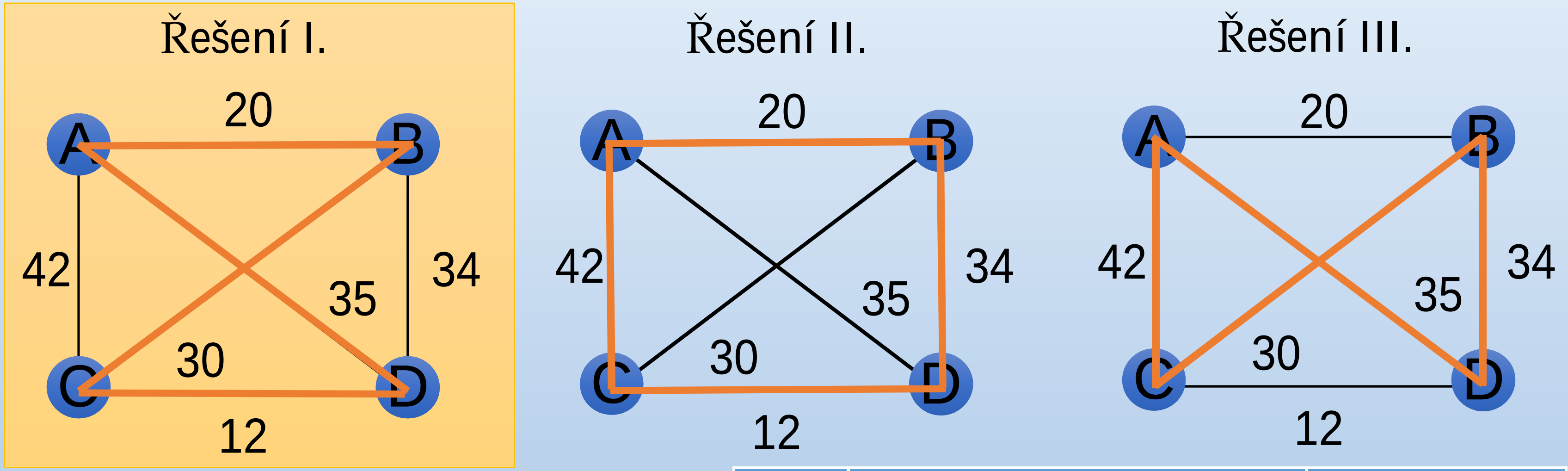
- Problém obchodního cestujícího



No.	Pořadí města v cestě				vzdálenost
	1	2	3	4	
I.	A	B	C	D	97
II.	A	B	D	C	108
III.	A	C	B	D	141

Populární optimalizační problémy

- Problém obchodního cestujícího



No.	Pořadí města v cestě				vzdálenost
	1	2	3	4	
I.	A	B	C	D	97
II.	A	B	D	C	108
III.	A	C	B	D	141

Populární optimalizační problémy

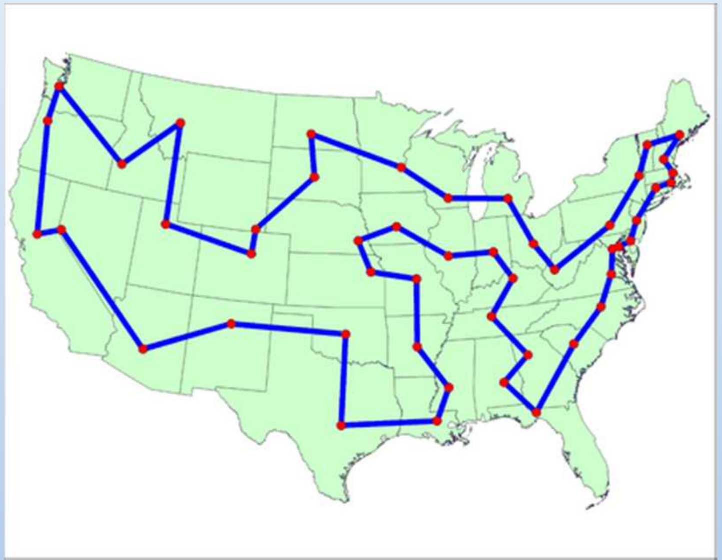
- Problém obchodního cestujícího

Počet měst	Počet možných cest	Výpočetní náročnost
4	3	$3{,}0 \cdot 10^{-09}$ vteřiny
5	12	$1{,}2 \cdot 10^{-08}$ vteřiny
6	60	$6{,}0 \cdot 10^{-08}$ vteřiny
7	360	$3{,}6 \cdot 10^{-07}$ vteřiny
8	2520	$2{,}5 \cdot 10^{-06}$ vteřiny
9	20160	$2{,}0 \cdot 10^{-05}$ vteřiny
10	181440	$1{,}8 \cdot 10^{-04}$ vteřiny
20	$6{,}1 \cdot 10^{16}$	19,3 let
50	$3{,}0 \cdot 10^{62}$	$9{,}6 \cdot 10^{46}$ let
100	$4{,}7 \cdot 10^{157}$	$1{,}5 \cdot 10^{140}$ let

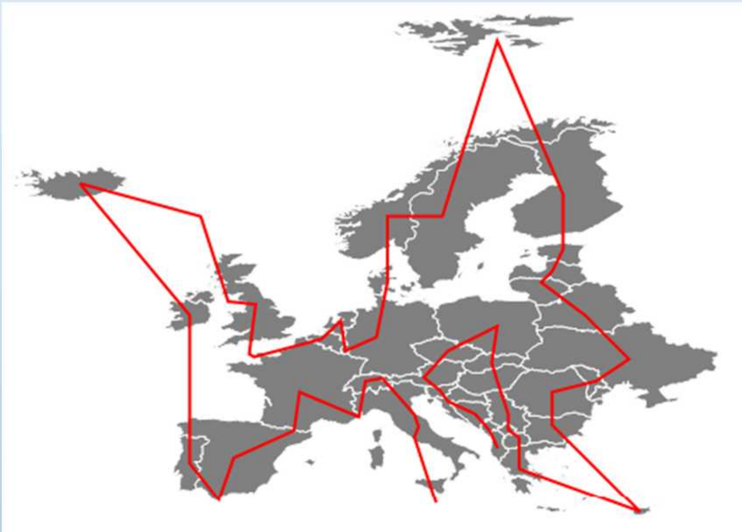
Výpočetní náročnost hrubé síly pro TSP při rychlosti počítače 10^9 operací za 1 sekundu

Populární optimalizační problémy

- Problém obchodního cestujícího



The OPTNET Procedure [1]



Mathematica software [2]

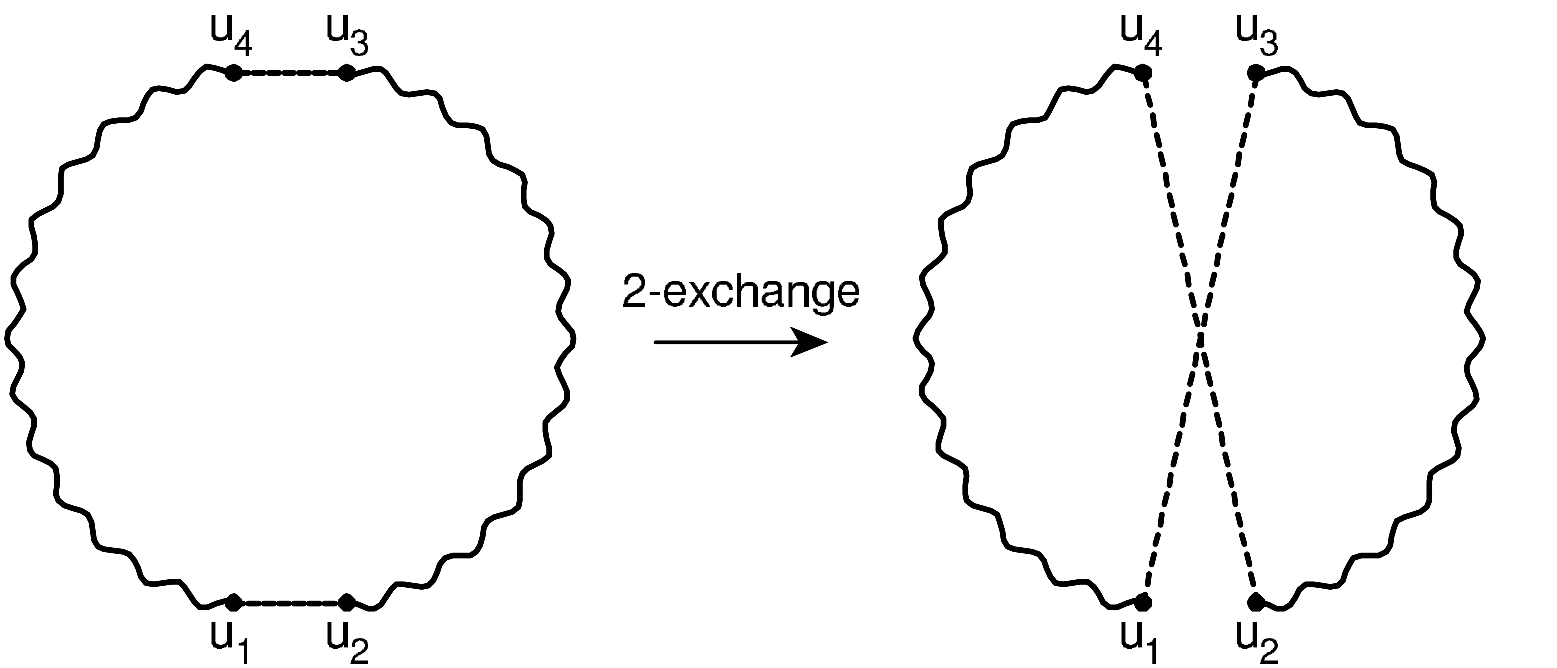
http://gebweb.net/optimap/

[1] http://support.sas.com/documentation/cdl/en/ornoaug/65289/HTML/default/viewer.htm#ornoaug_optnet_examples07.htm
[2] http://mathematica.stackexchange.com/questions/15985/solving-the-travelling-salesman-problem

Příklad

- tsp.m

Lokální operátor



Při přípravě této přednášky byla použita řada materiálů laskavě poskytnutých Ing. Adélou Pospíšilovou ze Stavební fakulty ČVUT.

Prosba. V případě, že v textu objevíte nějakou chybu nebo budete mít námět na jeho vylepšení, ozvěte se prosím na **`matej.leps@fsv.cvut.cz`**.

Oprava 17.3.2008: Strana 19, teplota nahrazena pravděpodobností v TA
Novinky 21.10.2008: Přidány slidy 3-8
Novinka 9.11.2010: Přidána animace na Nelder-Mead
Novinka 17.10.2012: Předělána klasifikace, přidána časová osa

Datum poslední revize: 17.10.2012
Verze: 003