SMC-SA

Kamil Kisiel

Marzec 2023

Plan prezentacji

- SA
- SMC-SA
- Zakres błedu
- Porównanie z multi-start SA
- Eksperymenty numeryczne

SA - przypomnienie

Co to było SA?

Algorytm szukajacy rozwiazania danego problemu, którego działanie zaprezentuje na nastepujacym przykładzie:

Problem optymalizacyjny

Znalezienie maksimum danej funkcji:

Założenia

$\mathcal{X}$ - niepusty zbiór na $\mathbb{R}^n$
$H : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ (jest ograniczona i ciagła)

SA - Algorytm

1. Losujemy startowy punkt x_k
2. Generujemy y_k z rozkładu o gestości $g_k(y|x_k)$
3. Obliczamy prawdopodobieństwo $\rho_k = \min\{\frac{H(y_k)-H(x_k)}{T_k}, 1\}$
4. Generujemy losowe $u \in [0,\ 1]$
5. Ustalamy

$$x_{k+1} = \begin{cases} y_k, & u \geqslant \rho_k \\ x_k, & u < \rho_k \end{cases} \quad (1)$$

6. Sprawdzamy kryterium stopu, ewentualnie zwiekszamy k i zmiejszamy temperature

SMC-SA

Co to SMC-SA?

W skrócie jest to połaczenie SA oraz metody Monte Carlo, dzieki czemu jesteśmy w stanie pracować na wielu punktach na raz.

Start

1. Dostarczamy ciag wielkości próbek $\{N_k\}$ oraz ciag temperatur $\{T_k\}$
2. Inicjalizacja: generujemy $x_0^i \overset{\text{iid}}{\sim} Unif(X), i = 1, 2, ..., N_0$
3. Ustawiamy $k = 1$

SMC-SA - Algorytm

1. Importance updating: generujemy w_k^i z rozkładu:

$$\begin{cases} exp\{\frac{H(x_0^i)}{T_1}\}, & k = 1 \\ exp\{H(x_{k-1}^i)(\frac{1}{T_k} - \frac{1}{T_{k-1}})\}, & k > 1 \end{cases} \tag{2}$$

2. Resampling: generujemy $\{\tilde{x}_k^i\}_{i=1}^{N_k}$ z $\{x_{k-1}^i, w_k^i\}_{i=1}^{N_{k-1}}$
3. SA Move: generujemy x_k^i z $\tilde{x}_k^i$ dla $i = 1, .., N_k$, korzystajac z SA
4. Sprawdzamy kryterium stopu oraz ewentualnie zwiekszamy k

SMC-SA - zakres błedu

Przy naszych założeniach, rozkład Boltzmanna słabo sie zbiega do równomiernego rozkładu na zbiorze optymalnych rozwiazań.

Propozycja 1

Dla każdego $\xi > 0$:

$$\lim_{T_k \to 0} \pi_k(\mathcal{X}_\xi) = 1,$$

gdzie $\mathcal{X}_\xi = \{x \to \mathcal{X} : H(x) > H^* - \xi\}$
H^* - optymalna wartość funkcji H

Oznaczenia pomocnicze

$\mathcal{F}$ - σ-ciało na $(\mathcal{X})$
$\mathcal{B}(\mathcal{X})$ - zbiór mierzalnych i ograniczonych funkcji $\phi : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$
$\mathcal{B}_+(\mathcal{X})$ - zbiór mierzalnych i ograniczonych funkcji $\phi : \mathcal{X} \to \mathbb{R}_+$
$\langle \upsilon, \phi \rangle = \int \phi(x) \upsilon(dx), \quad \forall \phi(x) \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$

Definicje pomocnicze pt.1

Supremum normy

$$||\phi|| = \sup_{x \in \mathcal{X}} |\phi(x)|$$

Całkowity dystans zmienności

υ_1, υ_2 - miary probabilistyczne na $(\mathcal{X}, \mathcal{F})$

$$||\upsilon_1 - \upsilon_2||_{TV} = \sup_{A \in \mathcal{F}} ||\upsilon_1(A) - \upsilon_2(A)||$$

Definicje pomocnicze pt.2

Rozkłady prawdopodobieństwa w k-tej iteracji SMC-SA

$$\pi_k^d = \frac{exp(H(x)/T_k)}{\int exp(H(x)/T_k)dx}$$

$$\tilde{\mu}_k = \sum_{i=1}^{N_{k-1}} \omega_k^i \delta_{x_{k-1}^i}$$

$$\tilde{\mu}_k^{N_k} = \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^{N_k} \delta_{\tilde{x}_k^i}$$

$$\mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^{N_k} \delta_{\tilde{x}_k^i}$$

Defincje pomocnicze pt.3

$$\Psi_k = \frac{\pi_k^d}{\pi_{k-1}^d}$$

Zwiazki miedzy rozkładami

$$\mu_{k-1} \to \tilde{\mu}_k = \frac{\mu_{k-1}\Psi_k}{\langle \mu_{k-1}, \Psi_k \rangle} \to \tilde{\mu}_k^{N_k} \to \mu_k = \tilde{\mu}_k^{N_k} P_k$$

SMC-SA - zakres błedu c.d.

Założenie 1

Gestość zaproponowana w SA Move musi spełniać nastepujacy warunek:

$$g_k(y|x) \geqslant \epsilon_k > 0, \quad \forall x, y \in \mathcal{X}$$

Jednostajna ergodyczność

Twierdzenie 1

Rozważmy Łańcuch Markowa o kernelu przejściowym $P(x, dy)$ dla $x, y \in \mathcal{X}$ i stacjonarny rozkład prawdopodobieństwa π Wtedy przestrzeń $\mathcal{X}$ nazywamy mała jeśli istnieja:

- $n_0 \in \mathbb{Z}_+$
- Stała $\epsilon \in (0, 1)$
- Miara probabilistyczna υ na $\mathcal{X}$

takie, że spełniony jest warunek minoryzacji:

$$P^{n_0}(x, A) \leqslant \epsilon\upsilon(A), \quad \forall x \in \mathcal{X}, \forall A \in \mathcal{F}$$

Wtedy Łańcuch jest ergodyczny oraz:

$$||P^n(x) - \pi||_{TV} \leqslant (1 - \epsilon)^{\lfloor n/n_0 \rfloor}, \quad \forall x \in \mathcal{X}$$

Wnioski z Twierdzenia 1

Wniosek 1.1

Przy założeniu 1 Łańcuch Markowa zgodny z krokiem SA Move po każdej iteracji jest jednostajnie ergodyczny oraz:

$$\exists \epsilon_k \in (0,1) ||P_k^n(x) - \pi_k||_{TV} \leqslant (1-\epsilon_k)^n,$$

$$\epsilon_k = \varepsilon_k exp\{\frac{H_l - H_u}{T_k}\}\lambda(\mathcal{X})$$

Wnioski z Twierdzenia 1 c.d.

Wniosek 1.2

Rozważmy Łańcuch Markowa z poczatkowym rozkładem μ, kernelem przejść P oraz stacjonarnym rozkładem prawdopodobieństwa π. Załóżmy, że
$\forall \phi \in \mathcal{B}(\mathcal{X}) \quad |\langle \mu - \pi, \phi \rangle| \leqslant c||\phi||$, gdzie c jest dodatnia stała.
Wtedy jeśli łańuch jest jednostajnie ergodyczny, to:

$$|\langle \mu P^n - \pi, \phi \rangle| \leqslant (1 - \epsilon)^{\lfloor n/n_0 \rfloor} c||\phi||, \quad \forall \phi \in \mathcal{B}_+(\mathcal{X})$$

Lematy

Lemat 1

Weźmy zmienne losowe $x^1, ..., x^N$, które sa i.i.d. i maja (warunkowy) rozkład υ. Oznaczajac $\upsilon^N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta_{x^i}$ mamy:

$$E[|\langle \upsilon - \upsilon^N, \phi\rangle||\mathcal{F}] \leqslant \frac{||\phi||}{\sqrt{N}}, \quad \forall \phi \in \mathcal{B}(\mathcal{X}$$

Lemat 2

Załóżmy, że $\forall \phi \in \mathcal{B}(\mathcal{X})|\langle \mu - \upsilon, \phi\rangle| \leqslant c||\phi||$ gdzie c to dodatnia stała oraz $\mu' = \frac{\mu\Psi}{\langle \mu, \Psi\rangle}$. Wtedy:

$$|\langle \mu' - \upsilon', \phi\rangle| \leqslant c||\Psi||||\phi||, \quad \forall \phi \in \mathcal{B}_+(\mathcal{X})$$

Twierdzenie 2

Bez straty ogólności zakładamy, że $\forall x \in \mathcal{X} \; H(x) > 0$. Ustalmy, że wstepny rozkład to υ, a jego gestość to υ^d, to przy założeniu 1:

$$E[|\langle \mu_k - \pi_k, \phi \rangle||\mathcal{F}] \leqslant c_k||\phi||, \quad \forall \phi \in \mathcal{B}_+(\mathcal{X})$$

, gdzie:

$$c_k = \begin{cases} \frac{||\pi_0^d/\upsilon^d||^2}{N_0}, & k = 0 \\ (1-\epsilon_k)(\frac{1}{\sqrt{N_k}}) + exp(H^*\Delta_k)ck_1, & k > 0 \end{cases} \tag{3}$$

Nastepstwo twierdzenia 2

Jeśli $T_k = T_0/log(k+1), \varepsilon_k \lambda(\mathcal{X}) = \varepsilon < 1$, gdzie, $\varepsilon > (1/2)^{1-\frac{H_u - H_l}{T_0}}$ oraz $\frac{H_u - H_l}{T_0} < 1$ i $\{N_k\}$ wzrasta wystarczajaca szybko wraz z wzrostem k, to:

$$k \to \infty \implies \{c_k\} \to 0$$

Porównanie SMC-SA do multi-start SA

Multi-start SA - co to?

SA, w którym korzystamy z wielu punktów które NIE WCHODZA w interakcje miedzy soba

Rozkłady

υ - startowy rozkład, a η_k^N - rozkład empiryczny generowany przy k-tej iteracji:

$$\upsilon \to \eta_0^N \to \eta_1^N = \eta_0^N P_1 \to \ldots \to \eta_k^N = \eta_{k-1}^N P_k$$

Lemat 3

Jeśli weźmiemy taki rozkład prawdopodobieństwa ζ, że spełnia $|\langle \zeta - \pi_{k-1}, \phi \rangle| = |\langle \mu_{k-1} - \pi_{k-1}, \phi \rangle| \leqslant c_{k-1} ||\phi||$, jeśli c_{k-1} jest wystarczajacy mały,, to:

$$|\langle \tilde{\mu}_k - \pi_k, \phi \rangle| < |\langle \zeta - \pi_k, \phi|$$

Ekperymenty numeryczne

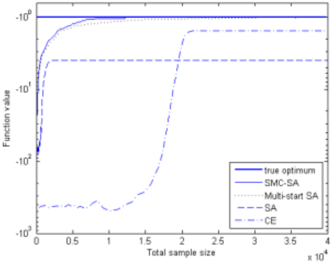
Problemy optymalizacyjne, których użyjemy do porównania

- 5. Funkcja Dejong'a (H_a)
- 20-wymiarowa funkcja Powel'a (H_b)

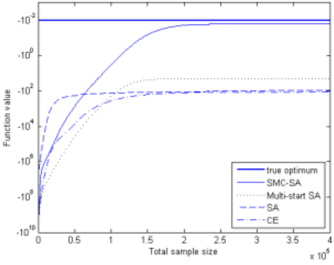
		SMC-SA		multi-start SA		standard SA	
	H^*	$\bar{H}^*(std\_err)$	M_ε	$\bar{H}^*(std\_err)$	M_ε	$\bar{H}^*(std\_err)$	M_ε
H_a	-0.998	-0.998(1.34E-7)	100	-1.0024(0.0014)	19	-3.999(0.2117)	4
H_b	-0.01	-0.0164(4.95E-4)	81	-20.46(4.26)	0	-89.63(1.277)	0

Wykresy

(a) 2-D Dejong's 5th function



(b) 20-D Powel function



Bibliografia

- Enlu Zhou i Xi Chen (2011) *Sequential Monte Carlo Simulated Annealing*, Springer Sciensce+Business Media
- H. E. Romeijn i R. L. Smith *Simulated annealing for constrained global optimization*, Journal of Global Optimization