

Wykład 4

Adaptacja parametrów

Niemonotoniczne heurystyki przeszukiwania

Kazimierz Grygiel



Home Page

Title Page



Page 1 of 24

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Problem parametryzacji

- Parametry operatorów mutacji
 - Bernoulliego: punktowe prawdopodobieństwo mutacji p
 - Gaussa: odchylenie standardowe σ
- Jak dobierać/kontrolować wartości parametrów?
 - statycznie? (jaka wartość?)
 - dynamicznie? (jaka funkcja?)
 - w sposób adaptacyjny? (jaki mechanizm sterujący?)
- Ogólnie brak dobrych odpowiedzi na te pytania; trzeba stosować podejście empiryczne (eksperymenty pilotażowe)
- Istnieją jednak gotowe schematy heurystyczne, dające niekiedy dobre wyniki



[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 2 of 24

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Przykład: adaptacja „centralna”

- Obserwacja: operator mutacji Gaussa „degeneruje się” do błędzenia przypadkowego w skali odległości rzędu σ
- Pomysł: schemat mutacji adaptacyjnej (prototyp *strategii ewolucyjnych*, I. Rechenberg):
 1. Mutacja parametru sterującego σ wg *reguły 1/5 sukcesów* ($0 < c < 1$):

$$\sigma' = \begin{cases} \sigma / \sqrt[n]{c}, & \text{jeżeli } p_a > 1/5 \\ \sigma \cdot \sqrt[n]{c}, & \text{jeżeli } p_a < 1/5 \\ \sigma, & \text{jeżeli } p_a = 1/5 \end{cases}$$

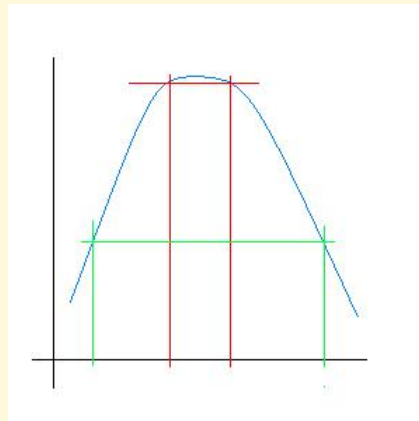
2. Mutacja rozwiązania $X = (x_1, x_2, \dots, x_m)$:

$$x'_i = x_i + \sigma' \xi_i, \quad \text{gdzie } \xi_i \sim N(0, 1)$$

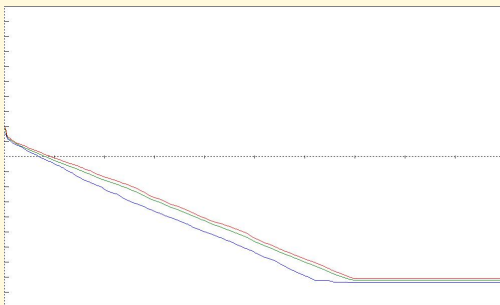
[Home Page](#)[Title Page](#)[Page 3 of 24](#)[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)

Reguła Rechenberga, objaśnienia

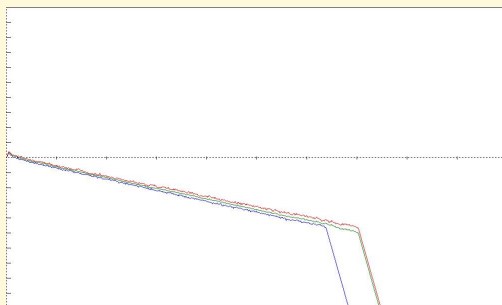
- Prawdopodobieństwo akceptacji nowego rozwiązania p_a obliczane empirycznie, przy użyciu *licznika sukcesów w ostatnich n krokach*
- $c = 0.85$ (Schwefel, na podstawie modelu teoretycznego)
- Sens reguły: gdy $p_a > 1/5$ – *zwiększ*, a gdy $p_a < 1/5$ – *zmniejsz* „zasięg” operatora mutacji

[Home Page](#)[Title Page](#)[Page 4 of 24](#)[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)

Reguła Rechenberga, symulacja



Wartości funkcji



Wartości sigma



[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 5 of 24

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Przykładowa implementacja

Parametry:

winsize: wielkość "okienka"
c: stała Rechenberga

Struktury danych:

buf[0..winsize-1]: "okienko" wyników (0 - porażka, 1 - sukces)
count: licznik sukcesów
q := $\exp(\ln(c)/winsize)$ // czynnik modyfikujący
level := winsize/5 // próg liczby sukcesów
sigma: odchylenie standardowe operatora mutacji gaussowskiej

Algorytm (wykonywany przy każdej ewaluacji funkcji oceny):

```
ind := (ind+1) mod winsize;  
count := count - buf[ind];  
if SUKCES then begin  
    buf[ind] := 1;  
    inc(count)  
end  
else buf[ind] := 0;  
if count < level then sigma := sigma*q;  
else if count > level then sigma := sigma/q
```



[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 6 of 24

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Łagodzenie problemu optimów lokalnych

- Dwa kierunki:
- Efektywne poszerzanie sąsiedztwa przy zachowaniu monotoniczności (operatory stochastycznie lokalne)
- Odejście od zasady monotoniczności: akceptacja rozwiązań o niższej jakości
 - możliwe w ograniczonym zakresie
(brak ograniczeń = pełny przegląd / błędzenie przypadkowe)
 - podejście deterministyczne: groźba zacyklenia
(▷ *tabu search*)
 - podejście randomizacyjne: łatwiejsze w realizacji
(▷ *algorytm Metropolisa, symulowane wyżarzanie*)



[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 7 of 24

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Nicolas Metropolis (1915-1999)



- członek zespołu badawczego Projektu Manhattan
- współtwórca komputerów MANIAC (1952) i MANIAC II (1957)
- jeden z autorów *metod Monte Carlo* (wraz z S. Ulamem i J. von Neumannem)
- algorytm Metropolisa (1953) zaliczony do czołowych 10 algorytmów, które wywarły „największy wpływ na rozwój i praktykę nauki i techniki w XX wieku” (wg *Computing Science and Engineering*).

[Home Page](#)[Title Page](#)

Page 8 of 24

[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)

Algorytm Metropolisa (oryginalny)



- Otwarty układ termodynamiczny: E_i — energia stanu i
- Problem: wyznaczyć (statystyczne) właściwości układu w warunkach równowagi termodynamicznej
- Strategia:
 - startujemy od dowolnego stanu początkowego (na ogół dalekiego od równowagi termodynamicznej)
 - dla danego stanu i wykonujemy losowy „ruch” cząstki, otrzymując stan j
 - jeżeli $E_j - E_i \leq 0$, przechodzimy do stanu j bezwarunkowo
 - w p.p. przechodzimy do stanu j z prawdopodobieństwem

$$\exp\left(-\frac{E_j - E_i}{k_b \cdot T}\right)$$

k_b — stała Boltzmanna, T — temperatura bezwzględna

– itd.

- Można pokazać, że po pewnym czasie układ osiągnie równowagę termodynamiczną dla temperatury T (i teraz można wyznaczyć jego właściwości)

[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 9 of 24

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Algorytm Metropolisa: adaptacja

- Jak dostosować ten algorytm do dziedziny problemów optymalizacyjnych?
- Wystarczy dokonać następujących utożsamień:
 - rozwiązanie \leftrightarrow stan układu termodynamicznego
 - funkcja oceny \leftrightarrow energia układu
 - przekształcenie lokalne \leftrightarrow ruch cząstki
 - optimum globalne \leftrightarrow stan o minimalnej energii
- Zamiast „prawdziwej” temperatury i stałej Boltzmanna — parametr
- Im niższa temperatura, tym średnia wartość funkcji oceny bliższa optimum globalnemu
- Algorytm Metropolisa: zrandomizowana heurystyka przeszukiwania z *regułą akceptacji Metropolisa*



Home Page

Title Page



Page 10 of 24

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Schemat algorytmu Metropolisa

- Reguła akceptacji Metropolisa:

```
RM(x,y,f,T):  
  if  $x \prec_f y$  then RM := true  
  else if random  $\leq p(x,y,f,T)$  then RM := true  
  else RM := false
```

gdzie $p(x,y,f,T) = \exp\left(-\frac{|f(y)-f(x)|}{T}\right)$

- Algorytm Metropolisa:

```
begin  
  x := losowy element z S;  
  repeat  
    z :=  $\phi_\xi(x)$ ;  
    if RM(x,z,f,T) then x := z  
  until warunek zatrzymania;  
  return x  
end
```

[Home Page](#)[Title Page](#)

Page 11 of 24

[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)

Algorytm Metropolisa — dyskusja

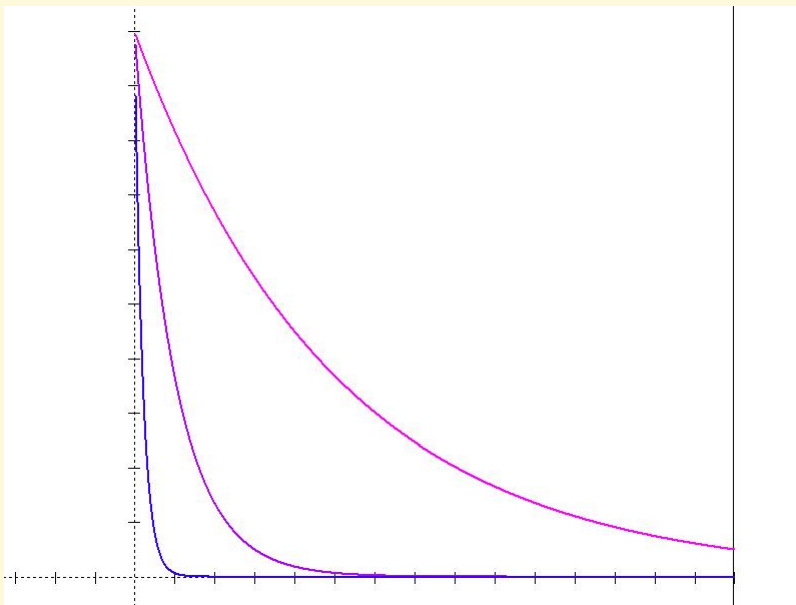


Fig. 1: Funkcja $e^{-x/T}$ dla $T = 0.2, 1.0, 5.0$



[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 12 of 24

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Algorytm Metropolisa — dyskusja

- Jaka jest rola „temperatury” w algorytmie Metropolisa?
- Rozważmy funkcję $g(x) = e^{-x/T}$ dla $x > 0$
 - (a) $T \rightarrow +\infty$
wtedy $x/T \rightarrow 0$, więc $e^{-x/T} \rightarrow 1$
— każde rozwiązanie akceptowane
 - (b) $T \rightarrow 0$
wtedy $x/T \rightarrow +\infty$, więc $e^{-x/T} \rightarrow 0$
— akceptowane tylko lepsze rozwiązania
- Dobierając wartość parametru $T > 0$ ustalamy „zakres tolerancji” dla gorszych rozwiązań
- Algorytm Metropolisa należy stosować w powiązaniu z wielostartem; działa jak „wzmacniacz prawdopodobieństwa” wylosowania dobrego rozwiązania



[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 13 of 24

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Symulowane wyżarzanie (simulated annealing)

- Autorzy: Kirkpatrick, Gelatt, Vecchi (1983)
(S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt, M.P. Vecchi: Optimization by Simulated Annealing. *Science* 220, 671-680)
- Inspiracja: proces technologiczny stosowany w metalurgii i hutnictwie szkła

WYŻARZANIE, operacja obróbki cieplnej polegająca na nagrzaniu przedmiotu z metalu lub stopu metali do określonej temperatury, wygrzaniu w tej temperaturze i ochłodzeniu z szybkością pozwalającą na utrzymanie struktury w określonym stopniu zbliżonej do stanu równowagi. [NEP]

- Ogólna charakterystyka: połączenie dwóch heurystyk
 - algorytm Metropolis'a
 - schemat chłodzenia
- W istocie: algorytm Metropolis'a ze zmienną temperaturą

[Home Page](#)[Title Page](#)

Page 14 of 24

[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)

Symulowane wyżarzanie (wersja „jednorodna”)

```
begin
  T :=  $\tau(0)$ ;
  k := 0;
  x := losowy element z S;
  repeat
    repeat
      z :=  $\phi_{\xi}(x)$ ;
      if RM(x,z,f,T) then x := z
    until warunek zatrzymania 2;
    k := k+1;
    T :=  $\tau(k)$ 
  until warunek zatrzymania 1;
  return x
end
```

[Home Page](#)[Title Page](#)

Page 15 of 24

[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)

Symulowane wyżarzanie: objaśnienia

- *warunek zatrzymania 1*: osiągnięcie końcowej temperatury, przekroczenie limitu czasu
- *warunek zatrzymania 2*: osiągnięcie *równowagi termicznej* dla bieżącej temperatury T (mało konstruktywny!)
- Idea: w efekcie „mieszania” stan otrzymany na tym etapie powinien być niezależny od stanu początkowego i podlegać rozkładowi Boltzmanna-Gibbsa dla bieżącej temperatury (▷ wyżarzanie!)
- $\tau(\cdot)$: funkcja odpowiadająca schematowi chłodzenia
- Model matematyczny: *niejednorodny* łańcuch Markowa z zależną od czasu (poprzez temperaturę) macierzą przejścia

$$Q(t) = \|q_{xy}(t)\|$$

[Home Page](#)[Title Page](#)[Page 16 of 24](#)[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)

Symulowane wyżarzanie (wersja „niejednorodna”)

```
begin
  T :=  $\tau(0)$ ;
  k := 0;
  x := losowy element z S;
  repeat
    z :=  $\phi_{\xi}(x)$ ;
    if RM(x,z,f,T) then x := z
    k := k+1;
    T :=  $\tau(k)$ 
  until warunek zatrzymania 1;
  return x
end
```

[Home Page](#)[Title Page](#)

Page 17 of 24

[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)

Schematy chłodzenia

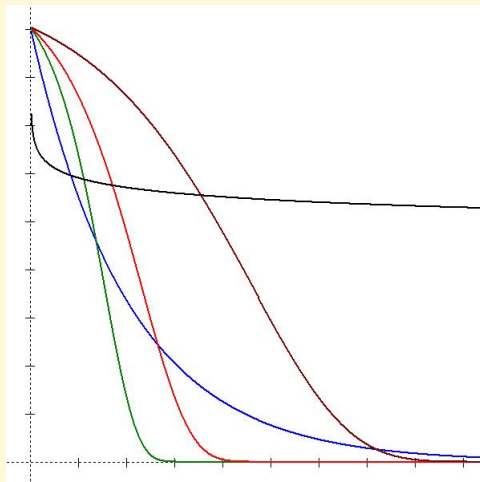
- Schemat logarytmiczny (Boltzmann): $\tau(k) = \frac{T_0}{a + b \log k}$
- Schemat liniowy (Cauchy'ego): $\tau(k) = \frac{T_0}{a + bk}$
- Schemat geometryczny: $\tau(k) = a^k T_0$, gdzie $0 < a < 1$
- Schemat logarytmiczny (w przeciwieństwie do pozostałych) *gwarantuje* (przy pewnych naturalnych założeniach) znalezienie optimum globalnego z prawdopodobieństwem 1, jednak średni czas potrzebny do jego osiągnięcia jest porównywalny z rozmiarem przestrzeni rozwiązań
- Badania empiryczne sugerują, że największą przydatność praktyczną ma schemat geometryczny (najszybszy)
- Parametry: temperatura początkowa, tempo chłodzenia
- Można też stosować podejście *oscylacyjne*

[Home Page](#)[Title Page](#)

Page 18 of 24

[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)

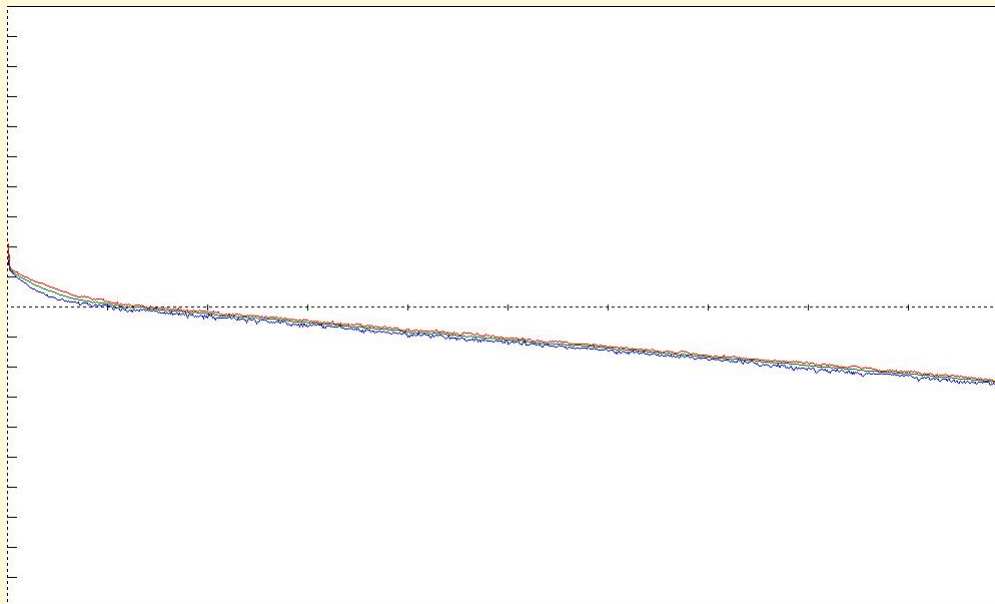
Schematy chłodzenia — właściwości



Prawdopodobieństwo akceptacji rozwiązania o jakości gorszej o $d = 0, 1$ w zależności od czasu dla różnych schematów chłodzenia. Kolor czarny: schemat logarytmiczny; niebieski: schemat liniowy; pozostałe: schematy geometryczne o różnych wykładnikach (0,9997, 0,9998 i 0,9999). Temperatura początkowa $T_0 = 1$. Zakres czasowy: 0..50 000.

[Home Page](#)[Title Page](#)[Page 19 of 24](#)[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)

Przykładowy przebieg



Home Page

Title Page



Page 20 of 24

Go Back

Full Screen

Close

Quit

DODATEK:

Analiza probabilistyczna algorytmu Metropolisa



Home Page

Title Page



Page 21 of 24

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Algorytm Metropolisa — analiza (1)



- Założenia na temat operatora mutacji
 - symetria: $p_{xy} = p_{yx}$, gdzie $p_{xy} = \mathbf{P} \{ \phi_{\xi}(x) = y \}$ dla $x, y \in S$
 - istnienie mutacji „zerowej”: $p_{xx} > 0$
- Wariant optymalizacji: minimalizacja (dla ustalenia uwagi)
- Niech q_{xy} : prawdopodobieństwo przejścia ze stanu x do stanu y w algorytmie Metropolisa. Wtedy:

(a) $f(y) < f(x)$:

$$q_{xy} = p_{xy}$$

$$q_{yx} = p_{yx} e^{-\frac{1}{T}(f(x) - f(y))}$$

(b) $f(y) \geq f(x)$:

$$q_{xy} = p_{xy} e^{-\frac{1}{T}(f(y) - f(x))}$$

$$q_{yx} = p_{yx}$$

[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 22 of 24

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Algorytm Metropolisa — analiza (2)

- W obu przypadkach

$$\frac{q_{xy}}{q_{yx}} = \frac{p_{xy}}{p_{yx}} e^{-\frac{1}{T}(f(y)-f(x))} = e^{-\frac{\Delta f(x)}{T}}$$

- Model matematyczny procesu: skończony, jednorodny, ergodyczny łańcuch Markowa z macierzą przejścia

$$Q = \| q_{xy} \|$$

- Łańcuch *ergodyczny*: nieprzywiedlny, aperiodyczny
- Rozkład prawdopodobieństwa łańcucha Markowa w chwili t :

$$\pi_x(t) = \mathbf{P} \{ X(t) = x \}$$

- Dla łańcucha ergodycznego $\pi_x(t) \rightarrow \pi_x$ przy $t \rightarrow \infty$ (niezależnie od stanu początkowego)
- Rozkład $\{ \pi_x, x \in S \}$ to *rozkład stacjonarny*

[Home Page](#)[Title Page](#)[Page 23 of 24](#)[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)

Algorytm Metropolisa — analiza(3)



- Rozkład stacjonarny spełnia układ równań *równowagi globalnej*

$$\pi_x \sum_{y \in N(x)} q_{xy} = \sum_{y \in N(x)} \pi_y q_{yx}$$

gdzie $N(x)$ — zbiór sąsiadów stanu x

- Jaki jest rozkład stacjonarny dla naszego łańcucha?
- Jest to rozkład „równowagi termicznej” Boltzmann-Gibbsa:

$$\pi_x = \frac{e^{-f(x)/T}}{\sum_{z \in S} e^{-f(z)/T}}$$

- Dowód:

$$\frac{\pi_y}{\pi_x} = e^{-\frac{\Delta f(x)}{T}} = \frac{q_{xy}}{q_{yx}}$$

$$\text{skąd } \pi_y q_{yx} = \pi_x q_{xy}$$

a zatem spełniony jest również układ równań równowagi globalnej \square

[Home Page](#)[Title Page](#)

Page 24 of 24

[Go Back](#)[Full Screen](#)[Close](#)[Quit](#)