Τεχνητή Νοημοσύνη

Μεθευρετικές Μέθοδοι

Δρ. Δημήτριος Κουτσομητρόπουλος

Αλγόριθμοι αναζήτησης λύσης

(Μεθ-) Ευρετικές Μέθοδοι (Metaheuristics)

- **Hill Climbing, Local Search** Αναρρίχηση Λόφων ή Τοπική αναζήτηση
- **Random-restart** Τυχαία Επανεκκίνηση
- **Iterative Local Search** Επαναληπτική Τοπική Αναζήτηση
- **Local Beam Search** Τοπική Ακτινική Αναζήτηση
- **Αναζήτηση Tabu**
- **Simulated Annealing** Προσομοιωμένη Ανόπτηση
- **Γενετικοί Αλγόριθμοι**
- **Αναζήτηση Tabu**
- ***PSO, ACO, BCO, …***

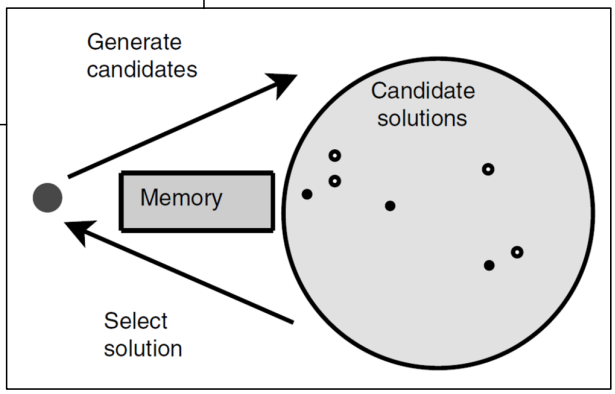
Μεθευρετικές μέθοδοι

- Πρότυπες μεθοδολογίες (templates) για επίλυση γενικευμένων κατηγοριών προβλημάτων, ιδίως βελτιστοποίησης
  - δεν εξαρτώνται από το εκάστοτε πρόβλημα
- Χρησιμοποιούν μια τοπική ευρετική για την δημιουργία νέων λύσεων
  - εξαρτάται από το πρόβλημα
- Δεν είναι ούτε συνεπείς ούτε πλήρεις
  - μπορούν να εντοπίσουν μια ικανοποιητική λύση σε σύντομο χρόνο
- Μπορεί να είναι:
  - *κατασκευαστικοί ή άπληστοι*, χτίζοντας σταδιακά τη λύση σε κάθε βήμα (βλ. BestFS)
  - *επαναληπτικοί*, που ξεκινούν από μια πλήρη λύση (ή πληθυσμό) και τη βελτιώνουν σταδιακά σε κάθε βήμα
    - έχουν ως βάση την **τοπική αναζήτηση (local search)**

Τοπική Αναζήτηση ή Αναρρίχηση Λόφων (Hill Climbing)

- Υπάρχει μια **αντικειμενική συνάρτηση** (objective function) ***f: S → R***, που θέλουμε να βελτιστοποιήσουμε
  - Συνάρτηση καταλληλότητας (fitness function)
  - Συνάρτηση κόστους (cost function)

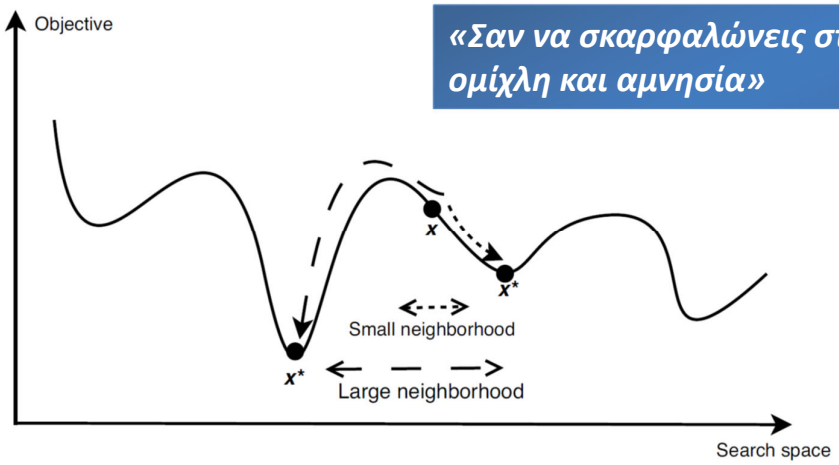
$s = s_0$; /* Generate an initial solution s_0 */
While not Termination_Criterion **Do**
  Generate ($N(s)$) ; /* Generation of candidate neighbors */
  If there is no better neighbor **Then** Stop ;
  $s = s'$; /* Select a better neighbor $s' \in N(s)$ */
Endwhile
Output Final solution found (local optima).



- Τί γίνεται αν οι καλύτεροι γείτονες έχουν την ίδια τιμή με τον τρέχοντα;
  - **Πλατό** (plateau): Μια επίπεδη περιοχή στη συνάρτηση – επίπεδο τοπικό βέλτιστο
  - Μπορούμε να επιτρέψουμε στον αλγόριθμο να συνεχίσει, για κάποια βήματα

Τοπική Αναζήτηση: Η έννοια της γειτονιάς

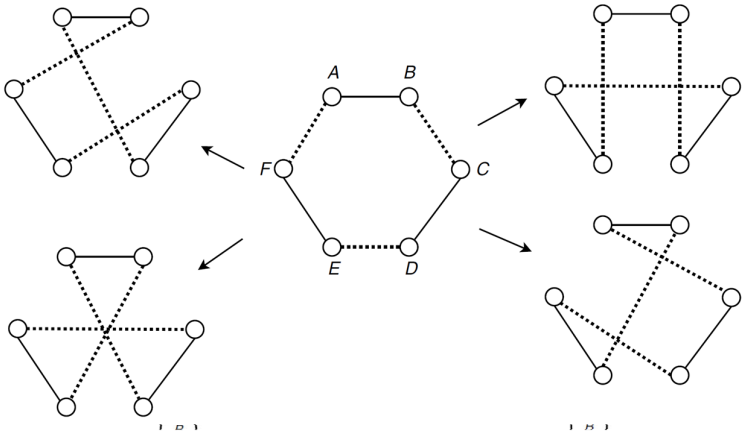
- Γειτονιά της *s*
  - Εξαρτάται από την αναπαράσταση
  - Τοπικότητα (locality): μικρές αλλαγές στην αναπαράσταση επιφέρουν μικρές αλλαγές στη λύση (αλλιώς *τυχαία αναζήτηση*)
  - Συνδετικότητα (connexity): Μπορούμε να φτάσουμε από μία κατάσταση σε οποιαδήποτε άλλη στο χώρο καταστάσεων
  - Τι μέγεθος/ακτίνα έχει; Μικρό μέγεθος για γρήγορη εξερεύνηση, μεγάλο για αποφυγή ***τοπικών βέλτιστων***

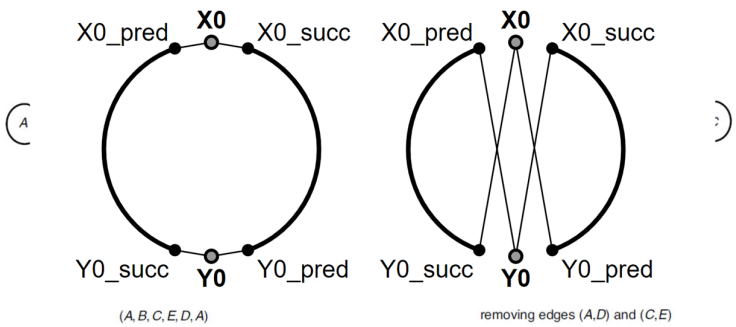


«Σαν να σκαρφαλώνεις στο Έβερεστ με πυκνή ομίχλη και αμνησία»

Τοπική Αναζήτηση: Τελεστές μετάβασης

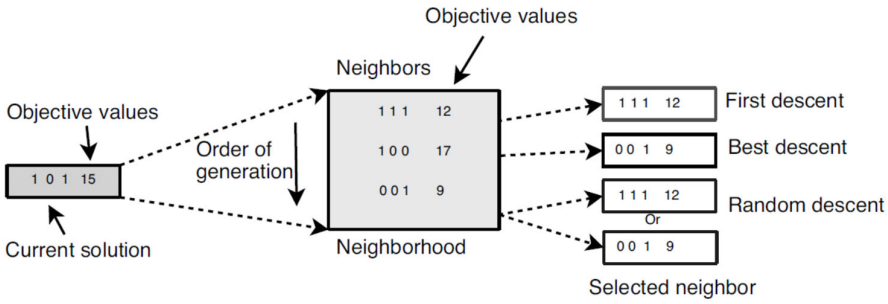
- Πώς προκύπτουν νέες λύσεις;
  - Τι τελεστές μετάβασης εφαρμόζονται;
  - Τοπικές ευρετικές (π.χ. TSP: swap, 2-opt, k-opt)





Τοπική Αναζήτηση: αρχική λύση και επιλογή βελτίωσης

- Πώς φτιάχνεται η αρχική λύση;
  - Τυχαία επιλογή
  - Άπληστος αλγόριθμος
  - Η άπληστη προσέγγιση δεν είναι αναγκαστικά καλύτερη
    Στο TSP η ευρετική Clarke-Wright δίνει καλύτερη λύση από μια τυχαία επιλογή. Όμως η τοπική αναζήτηση θα οδηγηθεί σε χειρότερες λύσεις!
- Πώς επιλέγεται η *s΄;*
  - Είναι η **καλύτερη** που βρέθηκε; (TSP: εφαρμογή όλων των 2-opt κινήσεων)
  - Είναι η **πρώτη καλύτερη** που βρέθηκε; (εφαρμογή 2-opt διαδοχικά μέχρι να βρεθεί καλύτερη) – *δίνει την ίδια ποιότητα λύσεων στην πράξη!*
  - Είναι **τυχαία επιλογή** από τις καλύτερες;



Παράδειγμα: 8 βασίλισσες

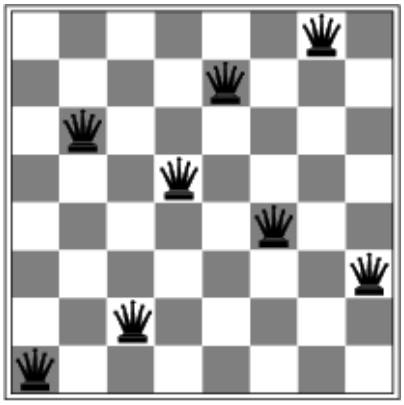
- Κάθε βασίλισσα σε *διαφορετική στήλη*, 8^8=17M **καταστάσεις**
- Αναπαράσταση κατάστασης ως **διάνυσμα** 8 θέσεων
- Τελεστής μετάβασης: ***Μεταβολή* μίας** θέσης στο διάστημα [1, 8]
  - Μέγεθος γειτονιάς: 8 X 7 = 56 (7+7+…)

<4, 3, 2, 5, 4, 3, 2, 3>, *f = 17*

- **Συνάρτηση αξιολόγησης**: Ο αριθμός των βασιλισσών που μπορεί να επιτίθενται η μια στην άλλη
- Ο καλύτερος γείτονας έχει κόστος 12

Παράδειγμα: 8 βασίλισσες – τοπικό ελάχιστο

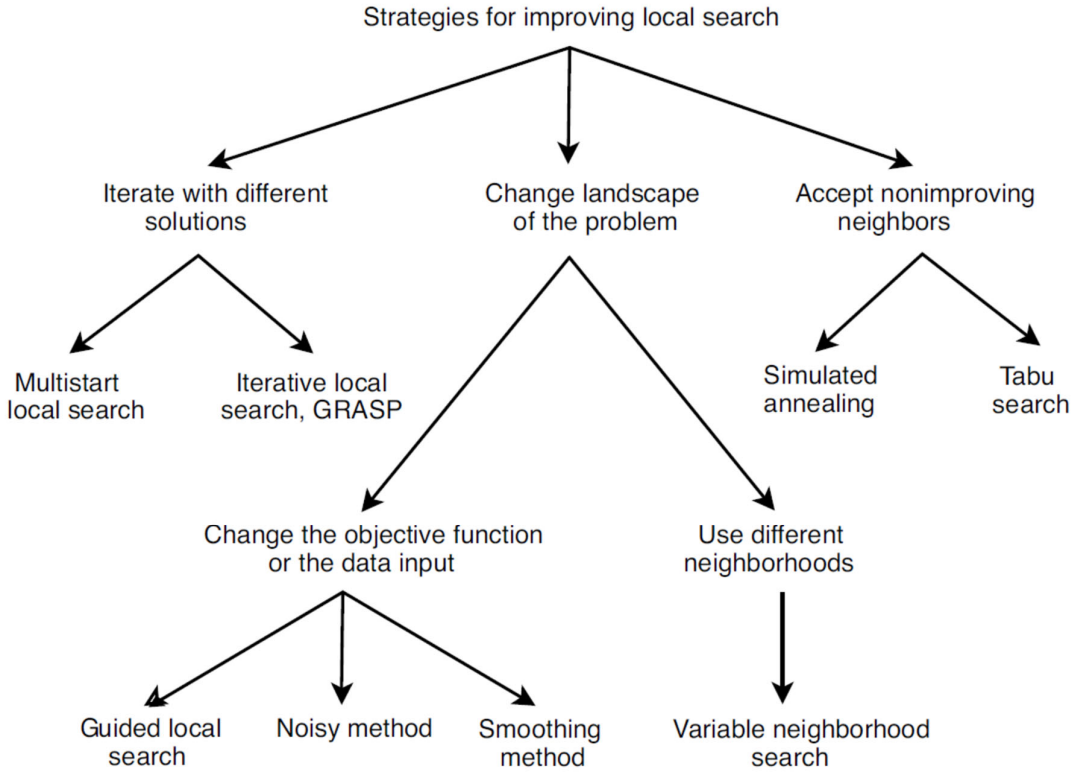
- Νέα κατάσταση με ***f =1*** σε 5 κινήσεις
- Όμως, **τοπικό ελάχιστο!**
  - Οποιαδήποτε μετάβαση δίνει χειρότερη λύση
  - Ο αλγόριθμος τερματίζει
  - 86% τοπικό ελάχιστο (σε 3 κινήσεις μ.ο.)
  - 14% ολικό ελάχιστο (*f = 0*, σε 4 κινήσεις μ.ο.)



<1, 6, 2, 5, 7, 4, 8, 3>, *f = 1*

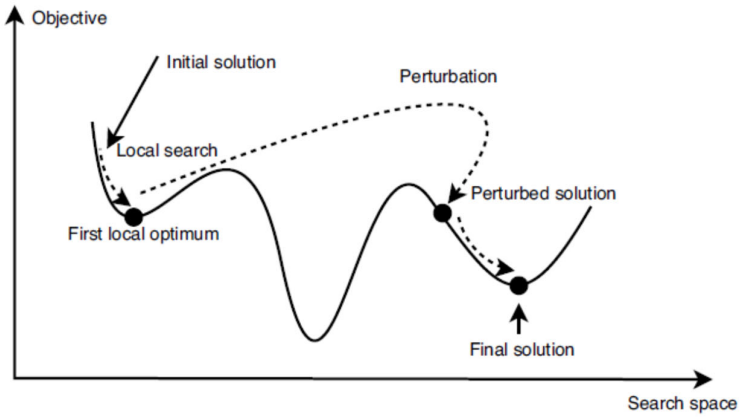
- Επιτρέπουμε κινήσεις σε πλατό;
  - Αν ναι, μπορεί να προκύψει ατέρμονος βρόχος
  - Όριο 100 κινήσεων: Ποσοστό επιτυχίας 94%, αλλά 21 ή 64 μ.ο. κινήσεων επιτυχίας/αποτυχίας

Βελτιώσεις στην τοπική αναζήτηση



Τυχαία επανεκκίνηση (Random-restart)

- Random restart ή *multistart* local search
  - Σε αποτυχία, η αναζήτηση δε σταματά, αλλά επανεκκινείται από τυχαίο σημείο
  - Σε ορισμένα προβλήματα απαιτούνται πάρα πολλές τέτοιες επανεκκινήσεις μέχρι να βρεθεί (ικανοποιητική) λύση (π.χ. διχοτόμηση γράφου)
  - Ο αριθμός τους αυξάνει εκθετικά με το μέγεθος του προβλήματος
  - Κεντρικό οριακό φαινόμενο:
    Όταν το μέγεθος του προβλήματος γίνει πολύ μεγάλο, τα τοπικά ελάχιστα που προκύπτουν από τυχαίες αρχικές λύσεις είναι παρεμφερή ως προς την ποιότητά τους
- Iterated local search (ILS)
  - Εφαρμόζεται μια ***διατάραξη*** (perturbation) στο τοπικό ελάχιστο και η αναζήτηση επανεκκινείται από εκεί (όχι από τυχαίο σημείο)



Τοπική ακτινική αναζήτηση (Local Beam Search)

- Αποθηκεύονται *k* διαφορετικές καταστάσεις, αντί για μόνο μία
  - Αρχικά *k* καταστάσεις επιλέγονται τυχαία
  - Εκτελείται 1 βήμα local search για κάθε μία
  - Δημιουργείται η γειτονιά τους
  - Επιλέγονται οι *k* καλύτεροι γείτονες *από όλες τις γειτονιές*
  - Συνεχίζεται local search για καθέναν από αυτούς
  - Σύγκριση με random-restart?
- Συχνά οι *k* καλύτεροι τείνουν να συγκεντρώνονται στην ίδια περιοχή (τοπικό ελάχιστο)
  - Απορρίπτονται νωρίς χειρότερες λύσεις που θα μπορούσαν να οδηγήσουν σε βελτίωση αργότερα
  - Εκμετάλλευση vs. εξερεύνηση
- Stochastic local beam search: *k* γείτονες επιλέγονται με πιθανότητα ανάλογη της καταλληλότητας

Αναζήτηση ταμπού (Tabu Search)

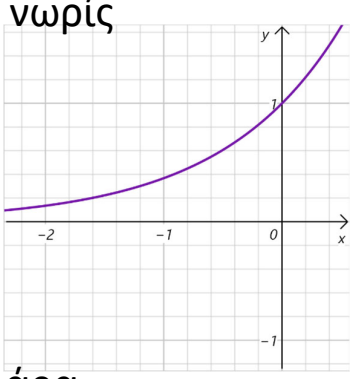
- Ύπαρξη μνήμης για αποθήκευση πληροφοριών σχετικών με τη διαδικασία αναζήτησης
- Όπως στην τοπική αναζήτηση, επιλέγεται ο καλύτερος γείτονας
- Τι γίνεται σε τοπικό βέλτιστο;
  - Η αναζήτηση συνεχίζει επιλέγοντας **χειρότερο** σημείο, δημιουργείται νέα γειτονιά, και επιλέγεται η καλύτερη λύση, ακόμα κι αν είναι χειρότερη από το τοπικό βέλτιστο
  - Μπορεί να δημιουργηθούν κύκλοι (επίσκεψη καταστάσεων που έχουν ήδη δημιουργηθεί)
- Λίστα *Ταμπού* (Tabu list): Αποθηκεύονται οι λύσεις (*ή οι τελεστές*) που έχουν ήδη ελεγχθεί
  - Οι *k* πιο πρόσφατες
  - Όχι ολόκληρες οι λύσεις, αλλά χαρακτηριστικά τους (attributes)
  - Π.χ. μια λίστα ακμών για το TSP

Προσομειωμένη Ανόπτηση (Simulated Annealing)

- Εμπνευσμένη από τη μεταλλουργία
  - **Ανόπτηση:** *Θέρμανση σε υψηλή θερμοκρασία και μετά σταδιακή ψύξη με συγκεκριμένο ρυθμό, ώστε το υλικό να αποκτήσει βέλτιστες ιδιότητες (σκλήρυνση)*
- Χειρότερες λύσεις μπορεί να γίνουν αποδεκτές από νωρίς
  - Επιλέγεται τυχαία μια γειτονική λύση
  - Αν είναι καλύτερη θα γίνει αποδεκτή
  - Αν είναι χειρότερη ($f(x')>f(x)$), θα γίνει αποδεκτή με πιθανότητα p:

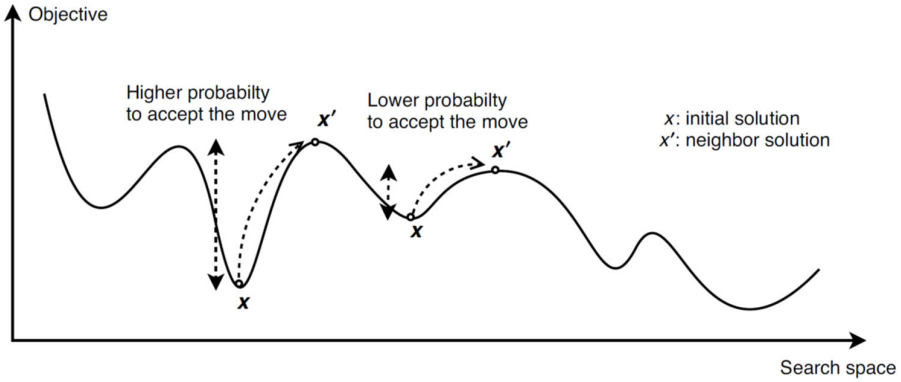
$$p = e^{-\frac{f(x')-f(x)}{T}}$$

  - x': γείτονας, T: θερμοκρασία



- Όσο πιο μεγάλο το Τ, τόσο πιο μικρός ο εκθέτης και άρα πιο κοντά στη μονάδα (αφού είναι πάντα αρνητικός).
  - Χειρότερες λύσεις θα επιλέγονται αρκετά συχνά
- Όσο μικραίνει το Τ, μεγαλώνει ο εκθέτης και απομακρυνόμαστε από την μονάδα προς το 0.
  - Χειρότερες λύσεις θα γίνουν πιο σπάνια αποδεκτές

Προσομειωμένη Ανόπτηση (Simulated Annealing)



- Σύγκλιση στη βέλτιστη λύση!
  - Αν η θερμοκρασία μειώνεται αρκετά αργά, ο αλγόριθμος θα βρει το **ολικό βέλτιστο** με πιθανότητα → 1
  - Όμως, *ασυμπτωτικά* (σύγκλιση μετά από άπειρα βήματα)
- Επιλογές παραμέτρων
  - Τι αρχική θερμοκρασία;
  - Τι πρόγραμμα ανόπτησης (ψύξης);
- Πολύ καλά (near optimal) αποτελέσματα για TSP, VLSI

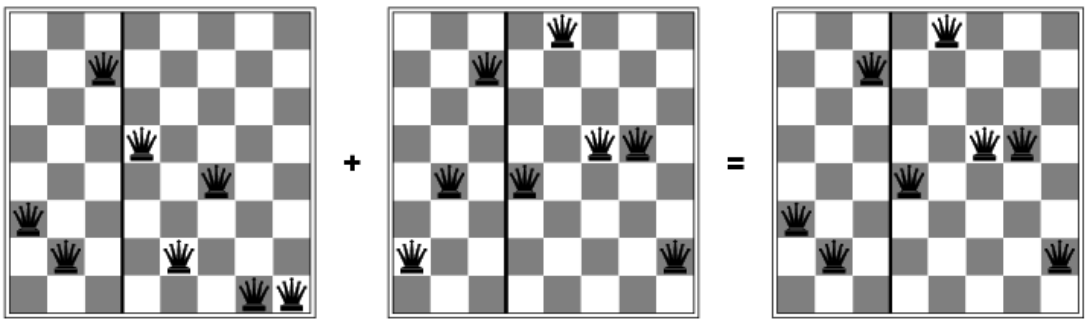
Γενετικοί Αλγόριθμοι

- Εμπνευσμένοι από τη θεωρία της εξέλιξης και της φυσικής επιλογής
  - *οι οργανισμοί που είναι περισσότερο προσαρμοσμένοι στο περιβάλλον τους επιβιώνουν και αναπαράγονται περισσότερο από τους λιγότερο προσαρμοσμένους*
- Μια διάδοχη κατάσταση προκύπτει συνδυάζοντας δύο καταστάσεις-γονείς
- Ξεκινά με *k* τυχαία επιλεγμένες καταστάσεις **(πληθυσμός)**
- Μια κατάσταση αναπαρίσταται ως *συμβολοσειρά* (0 και 1, ακέραιοι αριθμοί, κτλ)
- **Συνάρτηση καταλληλότητας:** Καλύτερες τιμές για καλύτερες λύσεις.
- Παραγωγή της επόμενης γενιάς χρησιμοποιώντας γενετικούς τελεστές
  - **Επιλογή** (selection)
  - **Διασταύρωση** (crossover)
  - **Μετάλλαξη** (mutation)
- Οι τελεστές εφαρμόζονται *στοχαστικά*

Γενετικοί Αλγόριθμοι

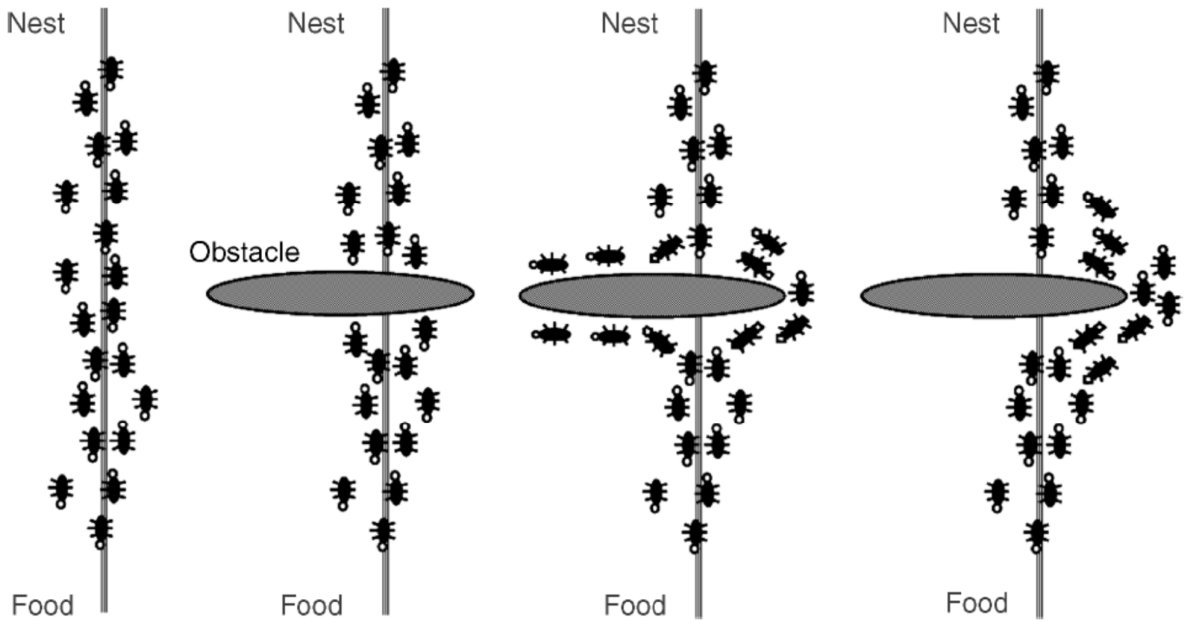
- Συνάρτηση καταλληλότητας: αριθμός ζευγαριών που δεν επιτίθενται (min = 0, max = 8 × 7/2 = 28)
- Επιλογή ανάλογη της απόδοσης (fitness proportionate selection):
  - 24/(24+23+20+11) = 31%
  - 23/(24+23+20+11) = 29% …

Παράδειγμα διασταύρωσης

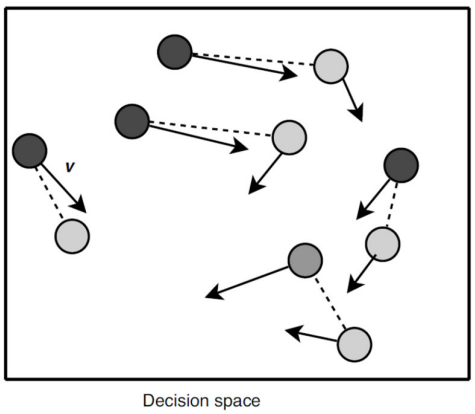


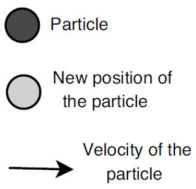
Άλλες μέθοδοι

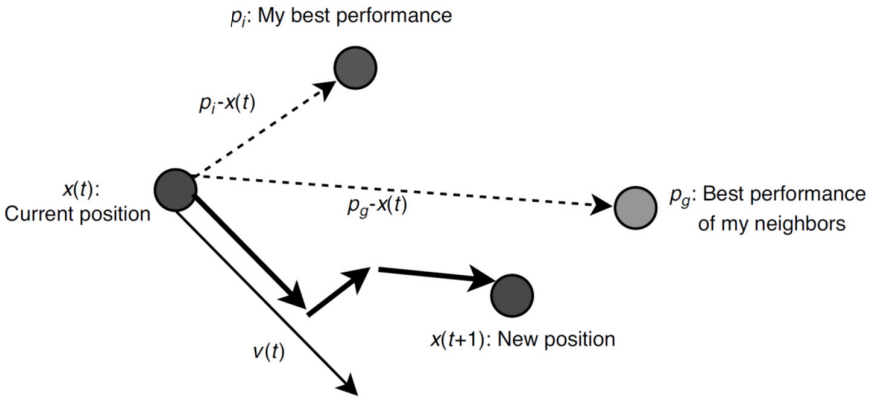
Ant Colony Optimization (ACO) - 1992



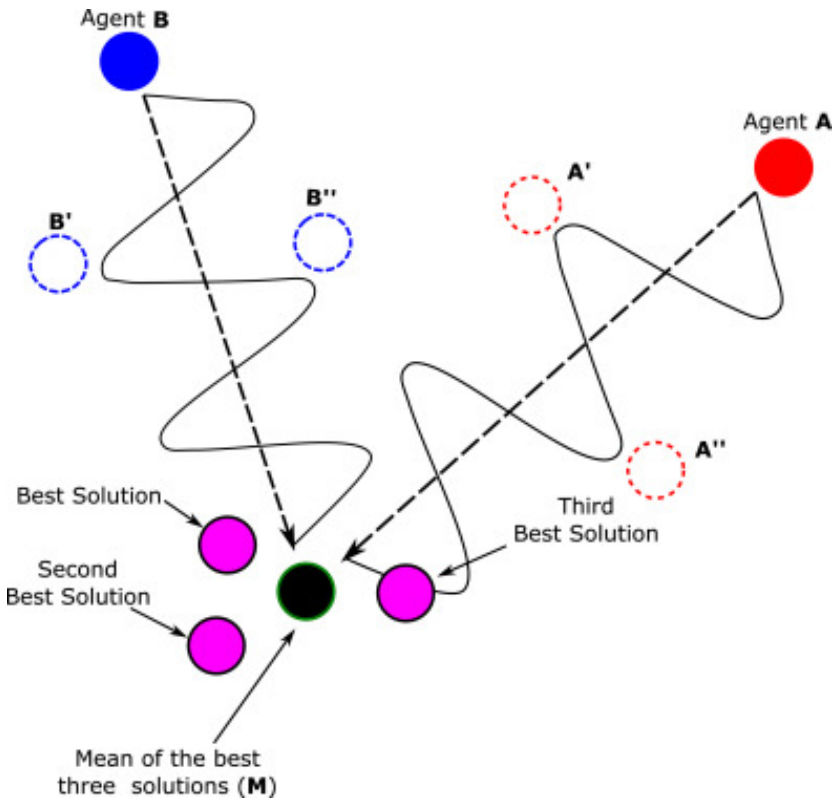
Particle Swarm Optimization (PSO) - 2001



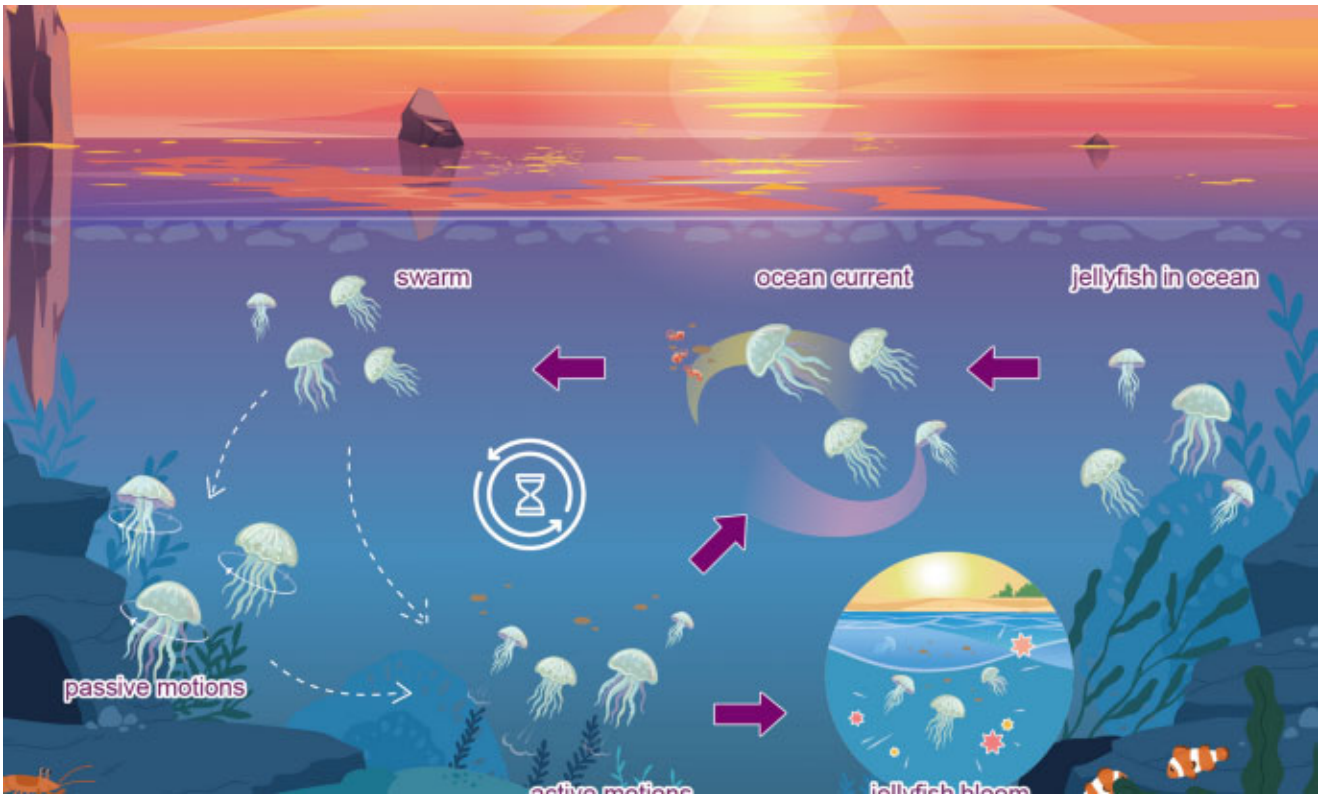




Social Ski Driver (SSD) - 2019



Jellyfish Swarm Optimization (JSO) - 2022



No free lunch theorem

- There's no such thing as free lunch!

«Δύο οποιοιδήποτε αλγόριθμοι βελτιστοποίησης είναι ισοδύναμοι ως προς τη μέση επίδοσή τους σε όλα τα πιθανά προβλήματα»
Wolpert&McReady, 2005

- *Δεν είναι όλες οι μέθοδοι βέλτιστες σε όλα τα προβλήματα*

Πηγές: G. Talbi "Metaheuristics", S. Russell, P. Norvig "Artificial Intelligence: A modern Approach" 3d ed.