

Globální minimum

- obecně

Obecné metody:

- Systematické prohledávání
- Náhodnostní metoda

Heuristické metody

- Simulované žíhání
- Genetické algoritmy
- Difuzní metody

Systematické prohledávání

Anglicky označováno **grid search**.

Princip:

Rozdělí vícerozměrný prostor, nad kterým je funkce definována na části pomocí vícerozměrné mřížky.

Vypočítá pro každou část funkční hodnoty.

Projde všechny funkční hodnoty a nalezne nejmenší z nich.

V některých implementacích této metody analogickým způsobem prohledá okolí minima, nalezeného v předchozím kroku atd.

Systematické prohledávání II

Zhodnocení:

Výhody:

Nalezne všechna minima.

Nevýhody:

Složitost $\theta(P_1 \cdot P_2 \cdot \dots \cdot P_N)$, kde P_i je počet dílů mřížky pro i -tou proměnnou a N je rozměr prostoru, nad kterým je studovaná funkce definována.

Náhodnostní metoda

Princip:

V rámci každého kroku výpočtu je vypočítáno mnoho hodnot studované funkce pro náhodně vybrané hodnoty proměnných (tyto hodnoty jsou ovšem náhodně vybrány z určitého regionu).

Poté je nalezena nejmenší hodnota funkce a ta se stane středem nového regionu (který má menší rozměry než původní region).

Zhodnocení:

Použitelné, ale pouze při dostatečně velkém počtu vypočítaných funkčních hodnot v každém kroku.

Nevýhodou je velká složitost metody.

Simulované žíhání

- obecně

Počátkem 80. let dostali Kirkpatrick, Gelatt, Vecchi a Černý nápad, že problém hledání globálního minima funkce může být realizovatelný podobným způsobem jako žíhání tuhého tělesa a nazvali ho metodou simulovaného žíhání.

Simulované žíhání

- fyzikální interpretace

Energie je funkcí uspořádání atomů zkoumaného tělesa v prostoru.

Před každou iterací simulace se hodnota energie tělesa nachází v lokálním minimu.

Simulované žíhání

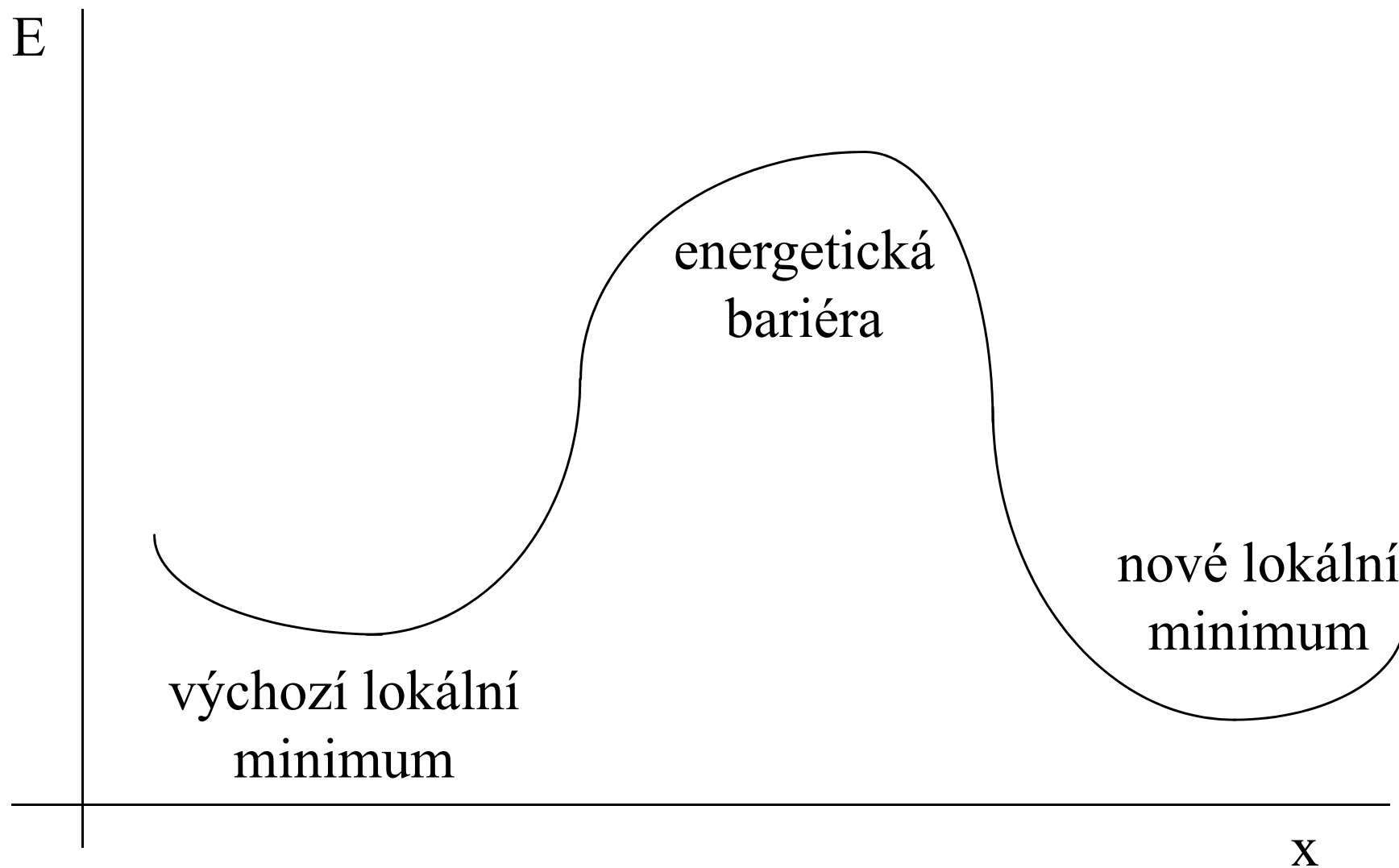
- fyzikální interpretace II

V průběhu simulace zahřejeme těleso na vysokou teplotu. Tím se jeho atomům v rámci každé iterace umožní překonat energetickou bariéru a dostat se z výchozího lokálního minima do dalšího lokálního (případně i globálního) minima.

Během simulace se energie lokálních minim snižuje.

Simulované žíhání

- fyzikální interpretace III



Simulované žíhání

- fyzikální interpretace IV

V průběhu simulace je také postupně snižována teplota, což má za následek, že se polohy atomů fixují. Takže při konečné teplotě žíhání (podstatně nižší než byla počáteční) jsou atomy tělesa rozmístěny tak, aby jejich energie byla globálním energetickým minimem.

Simulované žíhání

- matematická interpretace

Uvažujme hypotetický systém popsáný n -rozměrným stavem $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, kde x_i patří do nějakého intervalu.

Stavy tohoto systému jsou ohodnoceny funkcí f , která přiřadí každému hodnotu $y=f(x)$.

Simulované žíhání

- matematická interpretace II

Naší úlohou je najít takový stav x_{min} , ve kterém nabývá funkce f globálního minima.

Necht' x je přípustný stav systému, ten přejde do nového stavu x' .

Formálně zapsáno $x' = Opert(x)$, kde $Opert$ je “operátor” poruchy - perturbace.

Simulované žíhání

- matematická interpretace III

Otázka, zda bude nový stav akceptován do dalšího procesu, se řeší pomocí tzv. Metropolisova kritéria, které určuje pravděpodobnost nahrazení starého stavu novým. Celý tento vztah lze zapsat:

$$P(x \rightarrow x') = 1 \quad \text{pro } f(x') \leq f(x)$$

$$P(x \rightarrow x') = e^{-\frac{|f(x') - f(x)|}{T}} \quad \text{pro } f(x') > f(x)$$

kde T je parametr, interpretovaný jako teplota.

Simulované žíhání

- matematická interpretace IV

V případě, že nový stav x' má menší nebo stejnou funkční hodnotu jako původní stav x , provedeme záměnu stavu x stavem x' . V opačném případě je nový stav x' akceptován s pravděpodobností:

$$0 < P(x \rightarrow x') < 1$$

Simulované žíhání

- matematická interpretace V

Necht' R je náhodné číslo z intervalu $(0,1)$.

Potom je nový stav akceptován, pokud pro R platí:

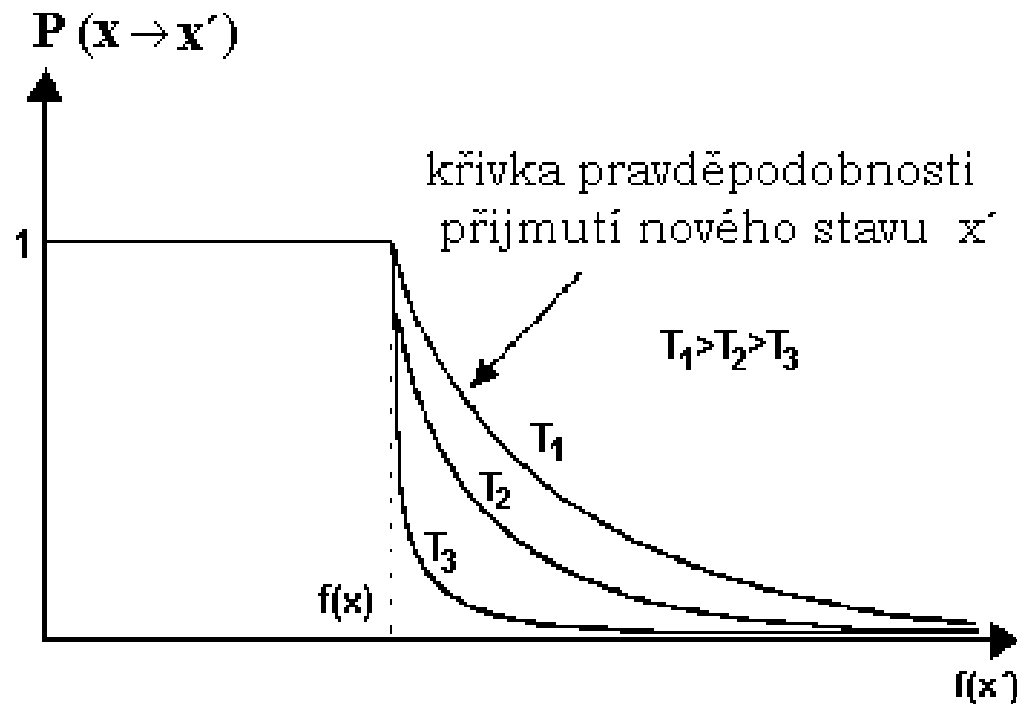
$$R < P(x \rightarrow x')$$

Jinak se proces opakuje s původním stavem x .

Simulované žíhání

- matematická interpretace VI

Závislost pravděpodobnosti přijetí nového stavu na teplotě T :



Simulované žíhání

- matematická interpretace VII

Hodnota parametru T podstatně ovlivňuje hodnotu pravděpodobnosti.

Pro velké hodnoty T je tato pravděpodobnost blízká jedné (tj. přijmou se téměř všechny nové stavy), ale blíží-li se T k nule, potom pravděpodobnost přijmutí je velmi nízká, téměř nulová.

Simulované žíhání

- matematická interpretace VIII

Při vhodném nastavení počáteční “teploty”

T_{\max} (větší hodnota) metoda simulovaného žíhání prohledává nejprve prostor řešení silně stochasticky a přijímá i stavy s horším ohodnocením než má současné řešení. Tato vlastnost simulovaného žíhání je velmi důležitým rysem, protože poskytuje možnost snadno se dostat z lokálního extrému a prohledat i jiné oblasti v prostoru řešení.

Simulované žíhání

- matematická interpretace IX

Umožnost realizovat energeticky nevýhodné přechody se pak postupně snižuje úměrně se zmenšováním hodnoty T . Pro malé T připustí Metropolisovo kritérium akceptování už jen lepšího řešení než je současné.

Simulované žíhání

- příklad

Obchodní cestující

NP-úplný problém

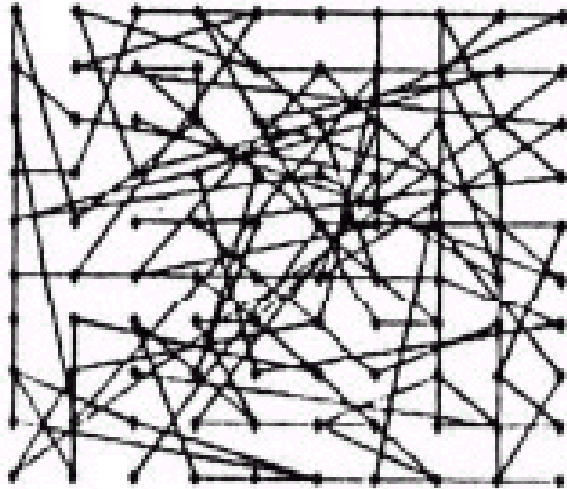
Čas nalezení řešení roste při zvětšování
dimenze přinejlepším exponenciálně

Simulované žíhání je schopno nalézt
neoptimálnější řešení i v případě takto
složité úlohy.

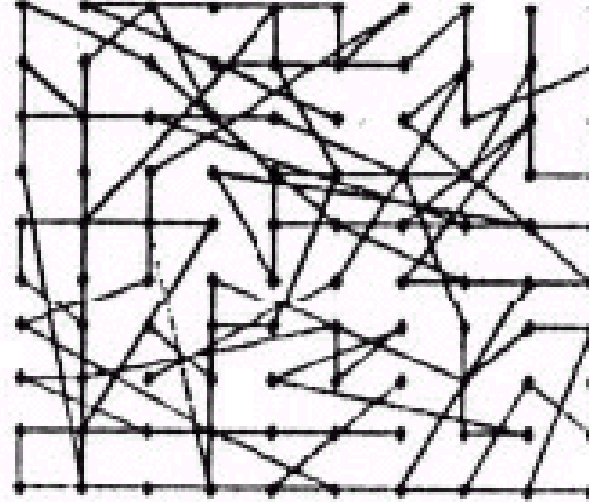
Simulované žíhání

- příklad II

Ukázky přechodů mezi lokálními minimy:



$I_{opt}=462, T=7,00$

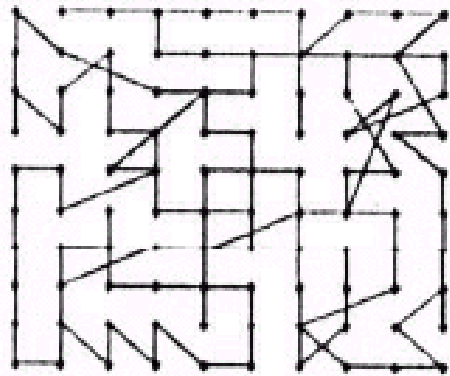


$I_{opt}=298, T=2,51$

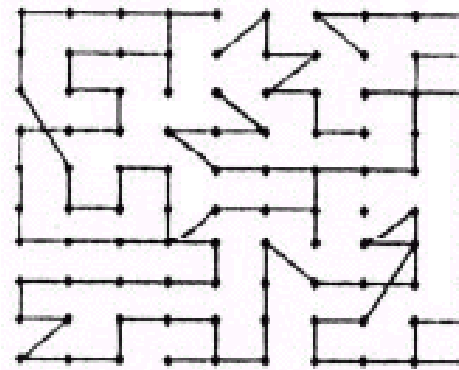
Simulované žíhání

- příklad III

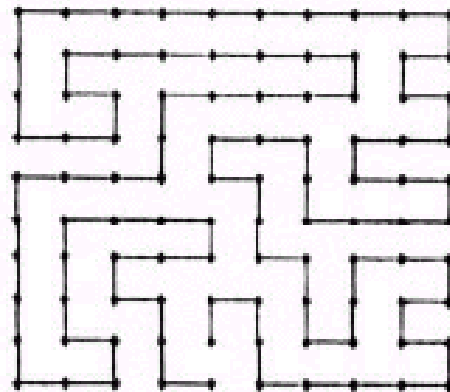
Ukázky přechodů mezi lokálními minimy:



$l_{opt}=164, T=0,86$



$l_{opt}=124, T=0,46$



$l_{opt}=100, T=0,01$

Simulované žíhání

- matematická interpretace VIII

Při vhodném nastavení počáteční “teploty”

T_{\max} (větší hodnota) metoda simulovaného žíhání prohledává nejprve prostor řešení silně stochasticky a přijímá i stavy s horším ohodnocením než má současné řešení. Tato vlastnost simulovaného žíhání je velmi důležitým rysem, protože poskytuje možnost snadno se dostat z lokálního extrému a prohledat i jiné oblasti v prostoru řešení.

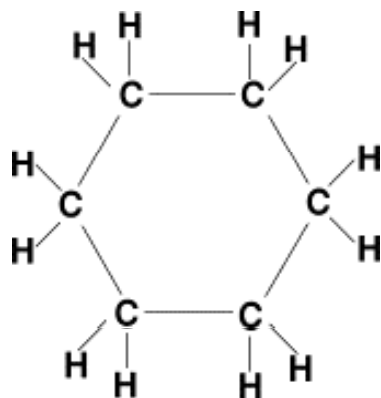
Simulované žíhání

- příklad aplikace

Úkol: Je dána molekula, urči konformace této molekuly, které jsou v definovaném chemickém prostředí nejstabilnější.

Konformace = uspořádání atomů v prostoru.

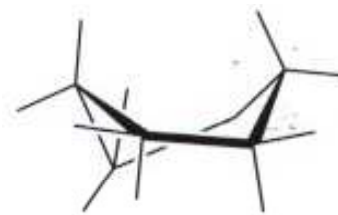
Strukturní vzorec:



Konformace:



Židličková



Zkřížená židličková



Vaničková

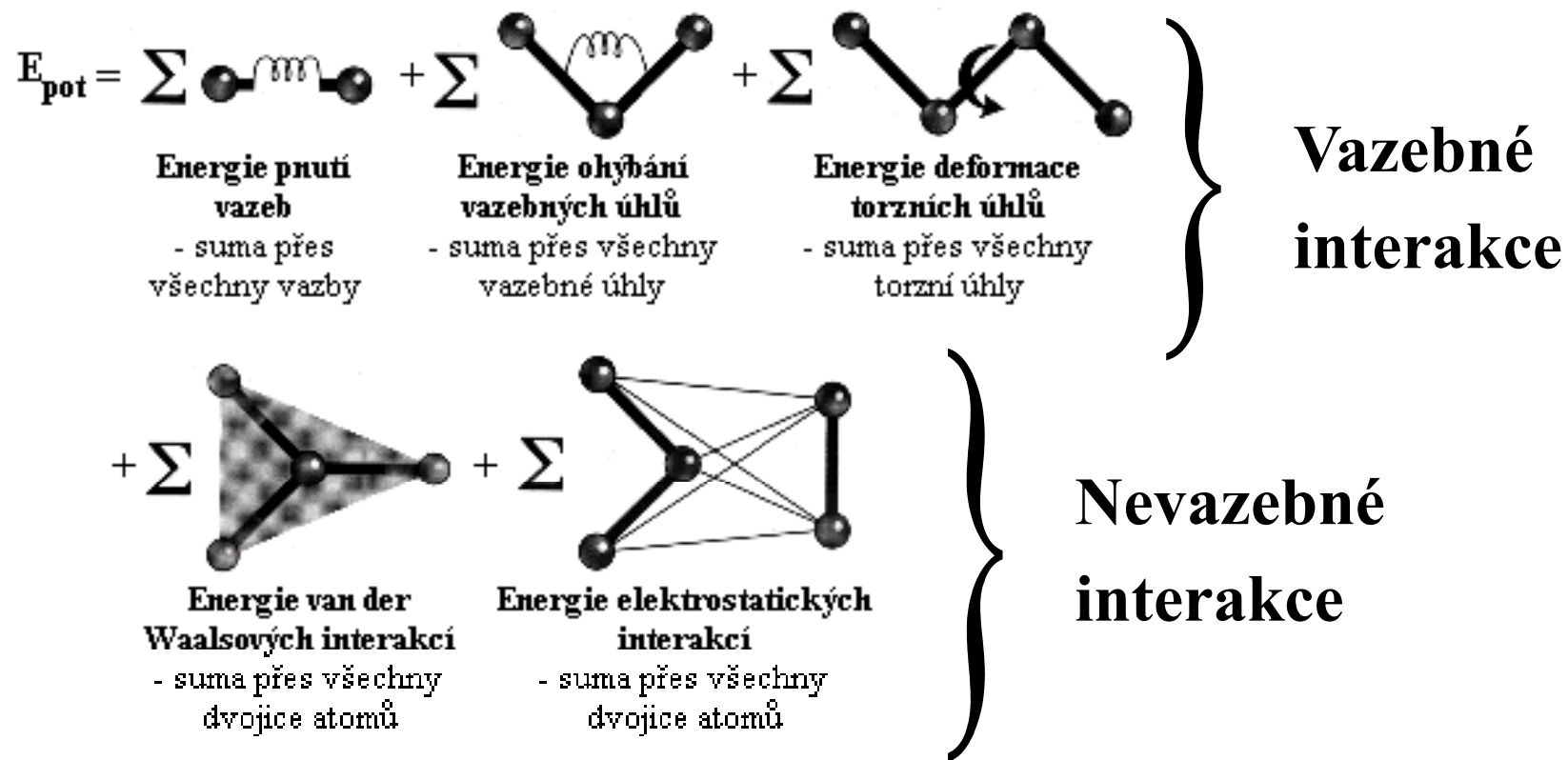


Poloviční židličková

Simulované žíhání

- příklad aplikace II

Popíšeme vztah mezi souřadnicemi a E_{pot} :



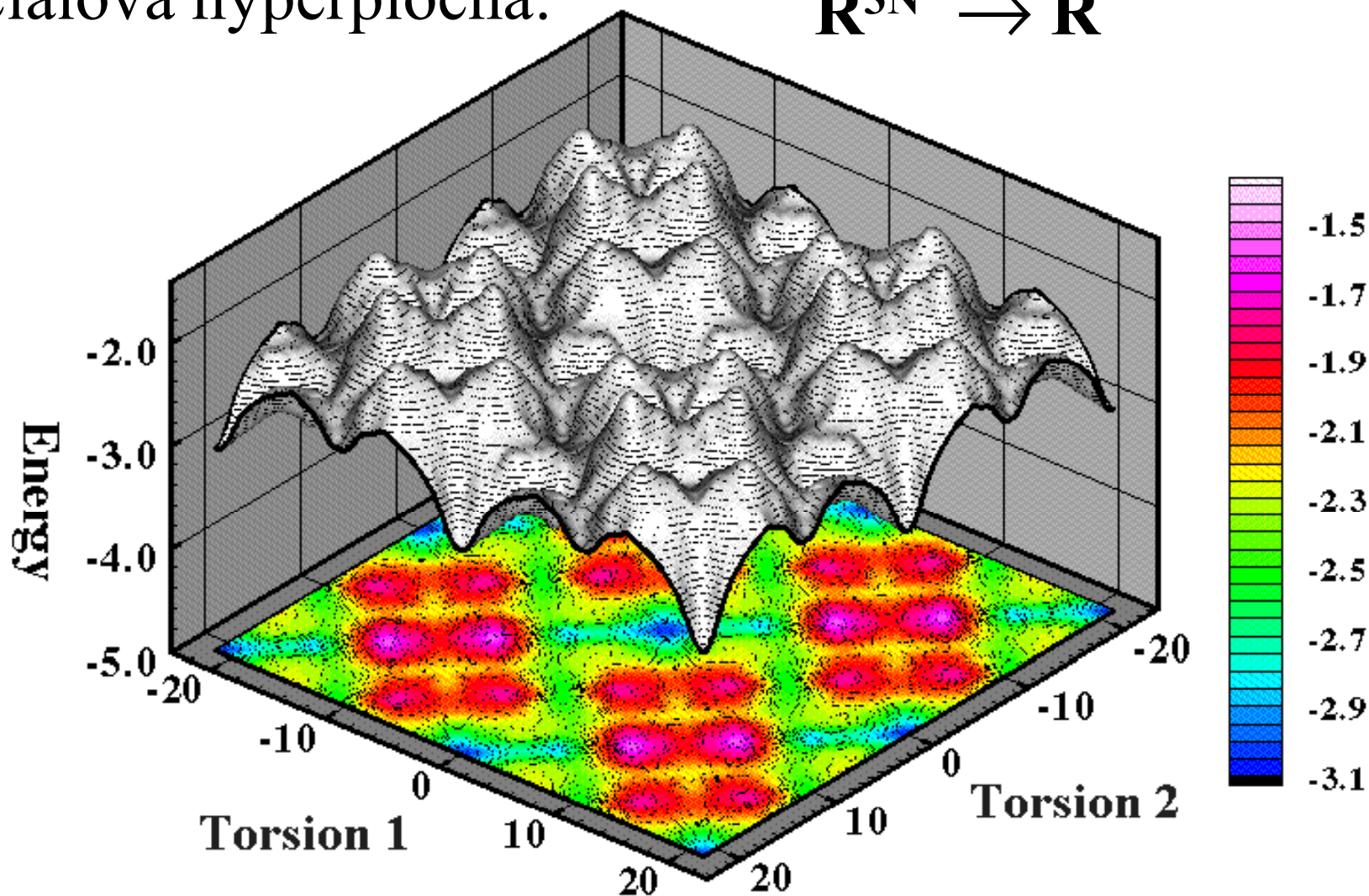
Simulované žíhání

- příklad aplikace III

Grafem potenciálové funkce
je potenciálová hyperplocha:

Potenciálová funkce:

$$\mathbf{R}^{3N} \rightarrow \mathbf{R}$$



Ukázka

CDK2

Simulované žíhání

- příklad aplikace IV

Hledáme globální minimum hyperplochy.

Simulujeme konformační chování molekuly v chemickém prostředí pomocí tzv. molekulové dynamiky:

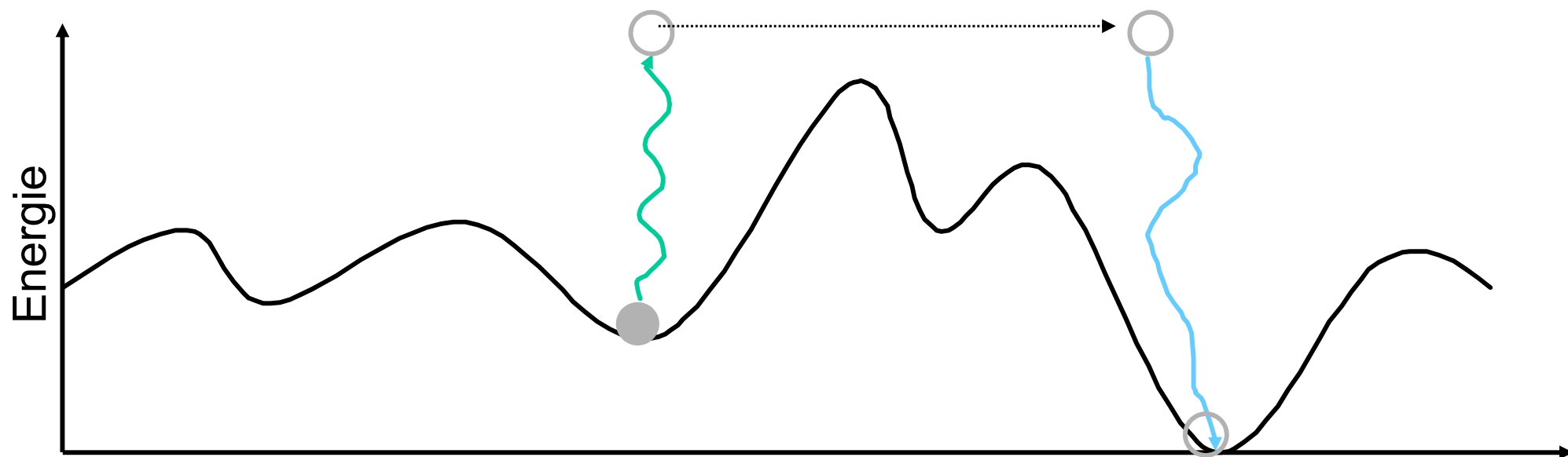
Každý atom molekuly se pohybuje jistou rychlostí. Z poloh a rychlostí atomů a sil působících v rámci systému v čase t určíme polohy atomů v čase $t + dt$ (a samozřejmě i rychlosti atomů a síly a tomto čase).

Simulované žíhání

- příklad aplikace V

V rámci této simulace využíváme pro překonání vysokých energetických bariér simulované žíhání.

Díky simulovanému žíhání dodáme molekule tepelnou energii, díky které může molekula překonat danou energetickou bariéru.



Simulované žíhání

- příklad aplikace VI

Příklad snímků MD - dekamer alaninu

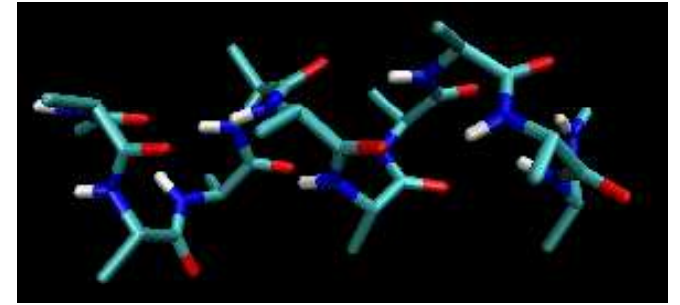
1. snímek:



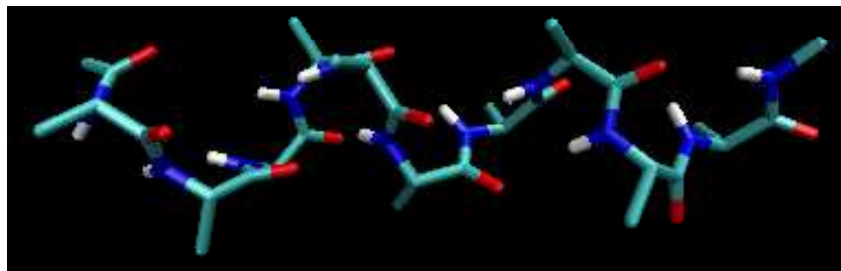
15. snímek:



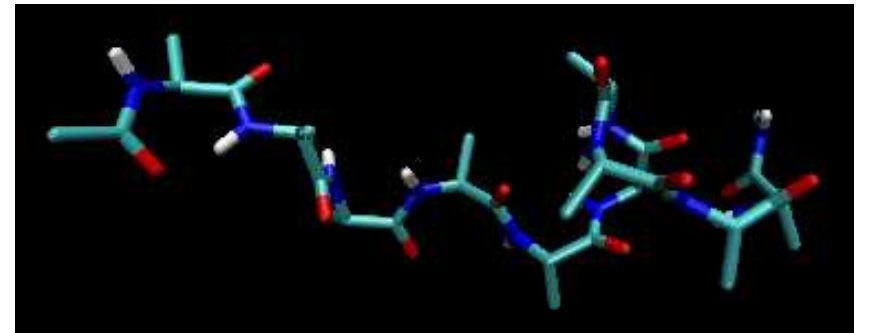
30. snímek:



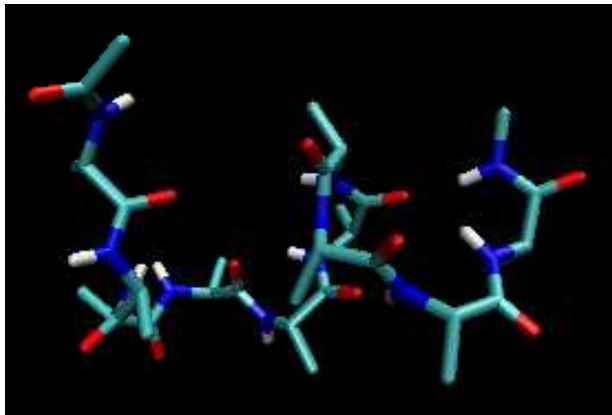
45. snímek:



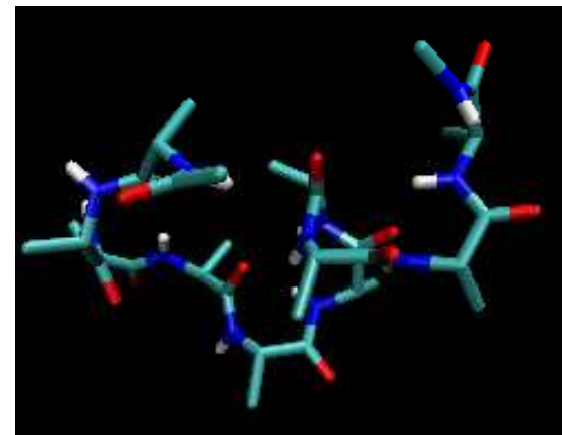
60. snímek:



75. snímek:



90. snímek:



Genetické algoritmy

- obecně

Jsou založeny na Darwinově evoluční teorii:

- a) Populace jsou variabilní, proměnlivost je náhodná vzhledem k prostředí a je dědičná.
- b) Populace mají neomezenou kapacitu růstu, ale potravní a prostorové zdroje jsou omezené => mezi jedinci musí existovat „**boj o přežití**“.
- c) Potomky plodí hlavně nejlépe vybavení jedinci, a tím přenášejí své genetické vlastnosti ve zvýšené míře do dalších generací => zastoupení genetických vlastností vhodných pro dané prostředí se tak stále zvyšuje.
- d) Díky tomuto **přírozenému výběru** se druhy přizpůsobují (adaptují) prostředí.

Genetické algoritmy

- obecně II

Genetické algoritmy se snaží využít modelů evolučních procesů, aby tak našly řešení náročných a rozsáhlých úloh. Veškeré takové modely mají několik společných rysů:

- 1) pracují zároveň s celou skupinou možných řešení zadaného problému
- 2) řešení postupně vylepšují zařazováním nových řešení, získaných kombinací těch původních
- 3) kombinace řešení jsou následovány náhodnými změnami (mutacemi) a vyřazováním nevýhodných řešení

Genetické algoritmy

- obecně III

Kvalita jedince neboli jeho **schopnost přežít** bývá také někdy označována **síla genů** případně v angličtině **fitness**.

V genetice je fitness funkcí struktury genů studovaného organismu.

Při aplikaci evolučních modelů pro hledání globálního minima funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, platí:

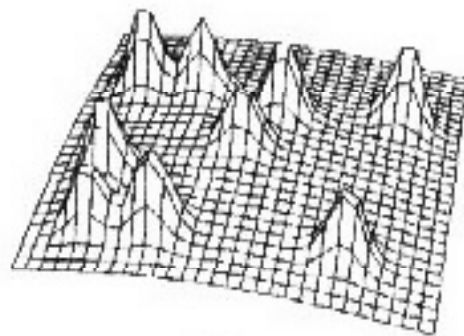
	matematika	genetika
x	bod v \mathbb{R}^n	geny studovaného jedince
f(x)	funkční hodnota funkce f v bodě x	fitness jedince s geny x

Genetické algoritmy

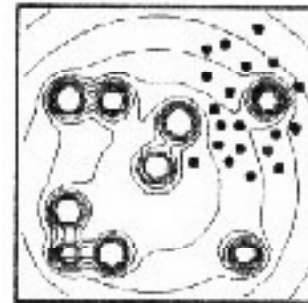
- příklad

Graf závislosti fitness jedinců na složení jejich genotypu (A).

V tomto jednoduchém případě se jedná o organismus s dvojgenovým chromozómem, přičemž jeho složky jsou reálná čísla. Konturový graf (B) odpovídá povrchu fitness, oblak bodů znázorňuje populaci jedinců.



A



B

Genetické algoritmy

- obecně IV

Základní myšlenkou genetických algoritmů je snaha napodobit evoluci živočišného druhu a takto vzniklý algoritmus použít při řešení úloh, které se vyskytují ve složitém, případně i měnícím se prostředí, kde programátor není schopen dopředu nadefinovat všechny vzniklé případy a správné reakce na ně.

Genetické algoritmy

- obecně V

V přírodě a tedy i v genetických algoritmech platí, že kvalitnější jedinci se častěji rozmnožují a také déle přežívají, proto zanechávají více potomků, kteří nesou dál část jejich genetické informace.

Přesto je tento výběr ovlivněn náhodou, neboť se i kvalitní řešení vybírají k dalšímu přežití úměrně své kvalitě, ale náhodně. V informatice pro tento tzv. kvazináhodný výběr podle kvality používáme zařízení nazývané **ruleta**.

Genetické algoritmy

- obecně VI

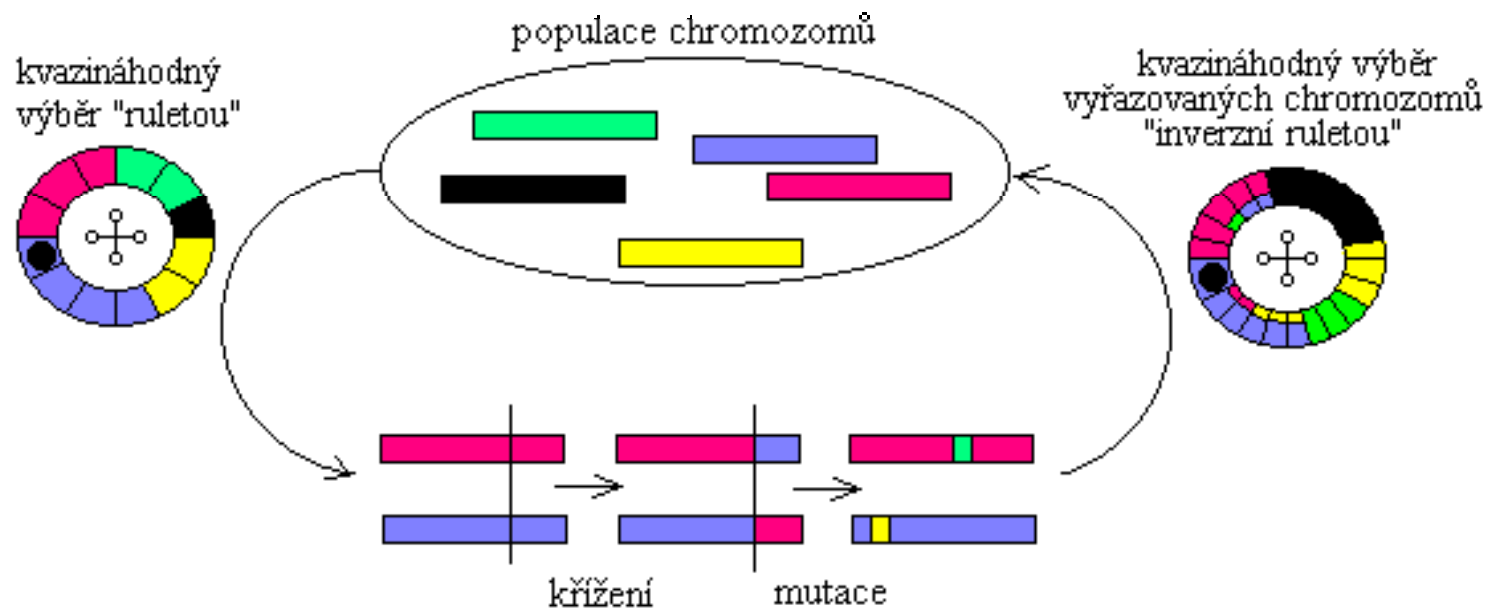
Situaci, kdy se většina jedinců natolik zkříží, že by další křížení produkovalo stejné jedince, a tudíž nemělo smysl, brání **mutace**.

Mutace také nabízejí možnost adaptovat populaci na měnící se prostředí, ale musí se provádět jen u malého procenta populace, protože často už dobré řešení spíše pokazí.

Genetické algoritmy

- implementace

Z populace se kvazináhodně vyberou dva chromozomy, které si křížením vymění část řetězců. Výsledné chromozomy se pak ještě podrobí mutaci, která překlopí náhodně zvolený bit. Tato dvojice se vrací do populace, kde vytěsní dvojici kvazináhodně vybraných chromozomů s malou silou.



Genetické algoritmy

- implementace II

Chromozom je nejčastěji implementován lineární posloupností symbolů, např. bitovým řetězcem. Každý chromozom je ohodnocen funkcí, která mu přiřadí tzv. sílu, vyjádřenou kladným reálným číslem. Čím má chromozom větší sílu, tím je kvalitnější.

Genetické algoritmy

- implementace III

Příklad implementace genetického algoritmu:

```
t := 0;  
P0 := náhodně vygenerovaná populace chromozomů;  
ohodnot' každý chromozom z populace P silou;  
while t < tmax do  
begin  
  t := t + 1;  
  Q := nové chromozomy vzniklé reprodukcí kvazináhodně  
  vybraných chromozomů z Pt-1 s největší silou;  
  ohodnot' každý chromozom z Q silou;  
  R := kvazináhodně vybrané chromozomy z Pt-1 s nejmenší silou;  
  Pt := (Pt-1 \ R) ∪ Q;  
end;
```

P_t ... populace chromozomů v čase t

Q ... subpopulace potomků

R ... subpopulace náhodně vybraných chromozomů s nejmenší silou

operátor \ zde znamená vyloučení (vypuštění) množiny R z množiny P_{t-1}

(množinová exkluze)

Genetické algoritmy

- evoluční strategie

Výběr potomků:

- Lepší potomek vytěsňuje horšího rodiče, který je odstraněn z populace. Pokud potomek není lepší než rodič, pak rodič zůstává v populaci. (původní implementace)
- Výběr nejsilnějších z rodičů i potomků (zbývající jsou vyřazeni)
- Strategie vyměření rodičů: Nejlepší jedinci se vybírají pouze z potomků.

Genetické algoritmy

- evoluční strategie II

Využití jedinců ze „slabší skupiny“:

Horší potomci mají ještě šanci, pokud jsou vybráni do slabší skupiny. Skupinky jsou náhodně vybrány z nových (tj. mutovaných) jedinců i z rodičů. Ve skupinkách pak dochází k “turnaji”, potomci jsou seřazeni podle síly a ti nejlepší jsou vybráni do další populace.

Genetické algoritmy

- evoluční strategie III

Křížení:

Evoluční strategie napodobuje vývoj jedinců v druhu, a proto i jejich křížení. Vzhledem k tomu, že jedinci představují zakódované řešení problému, tj. směs reálných čísel, celých čísel aj. parametrů, křížení je specificky definováno pro každý typ problému.

Genetické algoritmy

- evoluční strategie IV

Předpokládejme, že máme vybrány dva jedince charakterizované dvěma vektory reálných čísel.

Diskrétní křížení vytváří nového jedince, jehož vektor je tvořen hodnotami vzatými buď z jednoho, nebo z druhého vektoru. Tento výběr je náhodný.

Křížení průměrem vytváří jedince, jehož jednotlivé hodnoty vektoru jsou vždy průměrem odpovídajících složek vektorů rodičovských jedinců.

Genetické algoritmy

- evoluční strategie V

Mutace:

- Překlopením bitu na začátku kódu proměnné => velká změna hodnoty
- Přičtením náhodného malého čísla blízkého nule k původní hodnotě

Genetické algoritmy

- genetické programování

Na přelomu 80. a 90.let americký informatik John Koza ze Stanfordské univerzity navrhl originální modifikaci genetického algoritmu, kterou nazval **genetické programování**. Při tomto přístupu je původní reprezentace chromozomů znakovými řetězci nahrazena složitějšími funkcemi. V nejjednodušší verzi genetického programování se funkce rovnají výrazům obsahujícím proměnné, konstanty, základní aritmetické operace a elementární funkce.

Genetické algoritmy

- využití

Velké uplatnění nacházejí genetické algoritmy při vytváření rozvrhů práce pro stroje v továrnách, v teorii her, v managementu, pro řešení optimalizačních problémů multimodálních funkcí, při řízení robotů, v rozpoznávacích systémech a v úlohách umělého života.

Genetické algoritmy překvapivě dobře fungují při řešení problémů, kde téměř všechny ostatní algoritmy selhávají, např. pro NP-úplné problémy, tj. kde výpočetní čas je exponenciálně nebo faktoriálně závislý na počtu proměnných. Nemá však smysl je používat u relativně jednoduchých optimalizovaných funkcí nebo u funkcí, pro které existují specializované algoritmy.

Difuzní metody

Minimalizovaná funkce je postupně měněna tak, že ubývají lokální minima, až zaniknou všechna s výjimkou globálního.

Jsou prováděny například změny:

- příspěvky ve směru kolmém k hyperploše \Rightarrow pro minima vzrůstá energie a pro maxima a sedlové body energie klesá