Procura local
Cap 4 (4.3 e 4.4)

Parcialmente adaptado de

http://aima.eecs.berkeley.edu

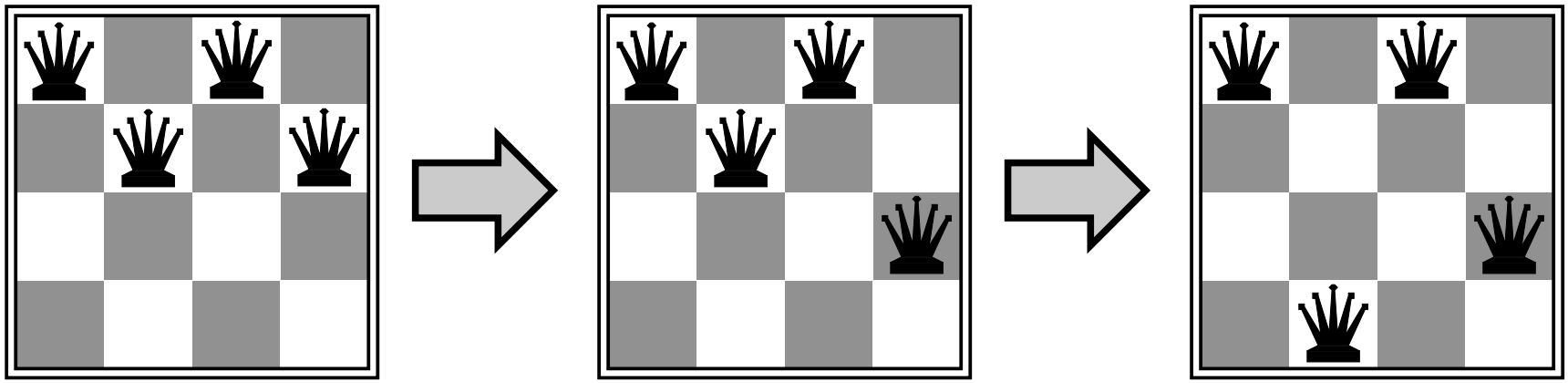
Algoritmos de procura local

- Em muitos problemas de optimização o caminho para a solução irrelevante. O estado objectivo é a própria solução.
- O espaço de estado = conjunto de configurações "completas" (soluções candidatas)
  - encontrar a configuração óptima, e.g., TSP ou,
  - encontrar configuração que obedece a certas restrições, e.g., horário
- Nestas situações, podem-se usar algoritmos de procural local: mantém-se um único estado "corrente", e tenta-se alterá-lo para melhorar a sua qualidade
- Espaço constante, apropriados para procura online e offline em espaços discretos e contínuos, assim como para resolução de problemas de optimização.

Problema das *n*-rainhas

- Colocar *n* rainhas num tabuleiro $n \times n$ sem que quaisquer duas rainhas se ataquem mutuamente

- Deslocar uma rainha para reduzir o número de conflitos



- Nota: este problema pode ser resolvido em tempo linear!

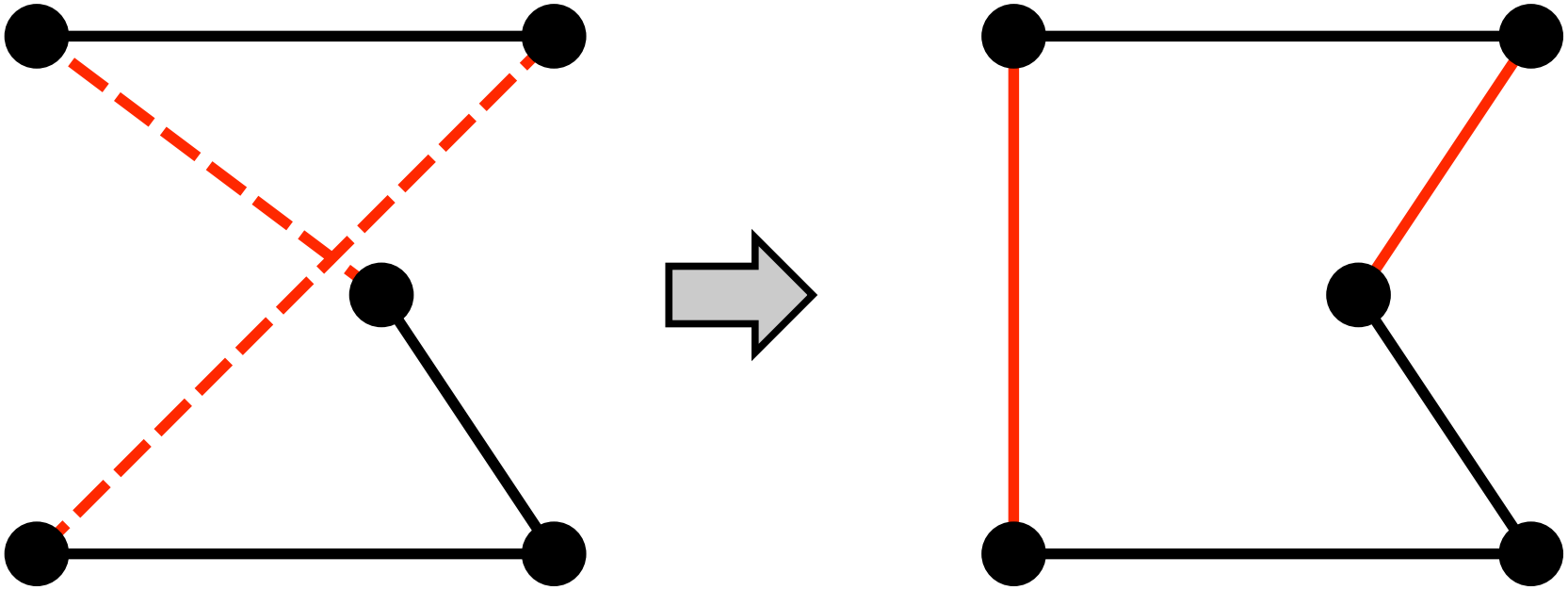
Problema da satisfatibilidade booleana

- Dado um conjunto de cláusulas proposicionais indicar se esse conjunto de cláusulas é satisfazível
  - Existe uma atribuição de valores lógicos a variáveis proposicionais que torna todas as cláusulas verdadeiras?
  - Método: atribuir valores aleatoriamente às variáveis e ir trocando o seu valor.
- Considere-se o conjunto de cláusulas:
  - ¬ A ∨ B
  - A ∨ ¬ B
  - ¬ A ∨ ¬ B ∨ ¬ C
  - A ∨ B
  - ¬ D ∨ C
  - ¬ E ∨ C
- Solução?
  - A=B=True,C=D=E=False

- Nota: este problema é NP-completo!

Problema do Caixeiro Viajante

- Começar com um circuito completo arbitrário, efectuar trocas aos pares



- Nota: problema NP-difícil!

Problemas combinatórios

- Problemas que tipicamente envolvem encontrar grupos, ordenações ou atribuições de um número finito de objectos discretos que satisfazem um conjunto de condições ou restrições.

- Habitualmente, o espaço de soluções candidatas para uma instância particular é pelo menos exponencial no tamanho dessa instância.

Tipos de problemas combinatórios

- Problemas de Decisão (têm resposta sim/não)
  - Variante de decisão: saber se existe ou não solução para o problema
  - Variante de procura: encontrar a solução, caso exista.
- Problemas de Optimização (encontrar solução que optimiza valor de função objectivo)
  - Variante de procura: encontrar a solução óptima
  - Variante de avaliação: indicar qual o valor mínimo/máximo da função objectivo
- Qualquer problema de optimização origina um problema de decisão associado, a partir de um limite *b* fornecido.
  - Se o problema é de minimização, saber se existe uma solução com valor inferior ou igual ao *b* dado.
  - Se o problema é de maximização, saber se existe uma solução com valor superior ou igual ao *b* dado.

Classes de Complexidade

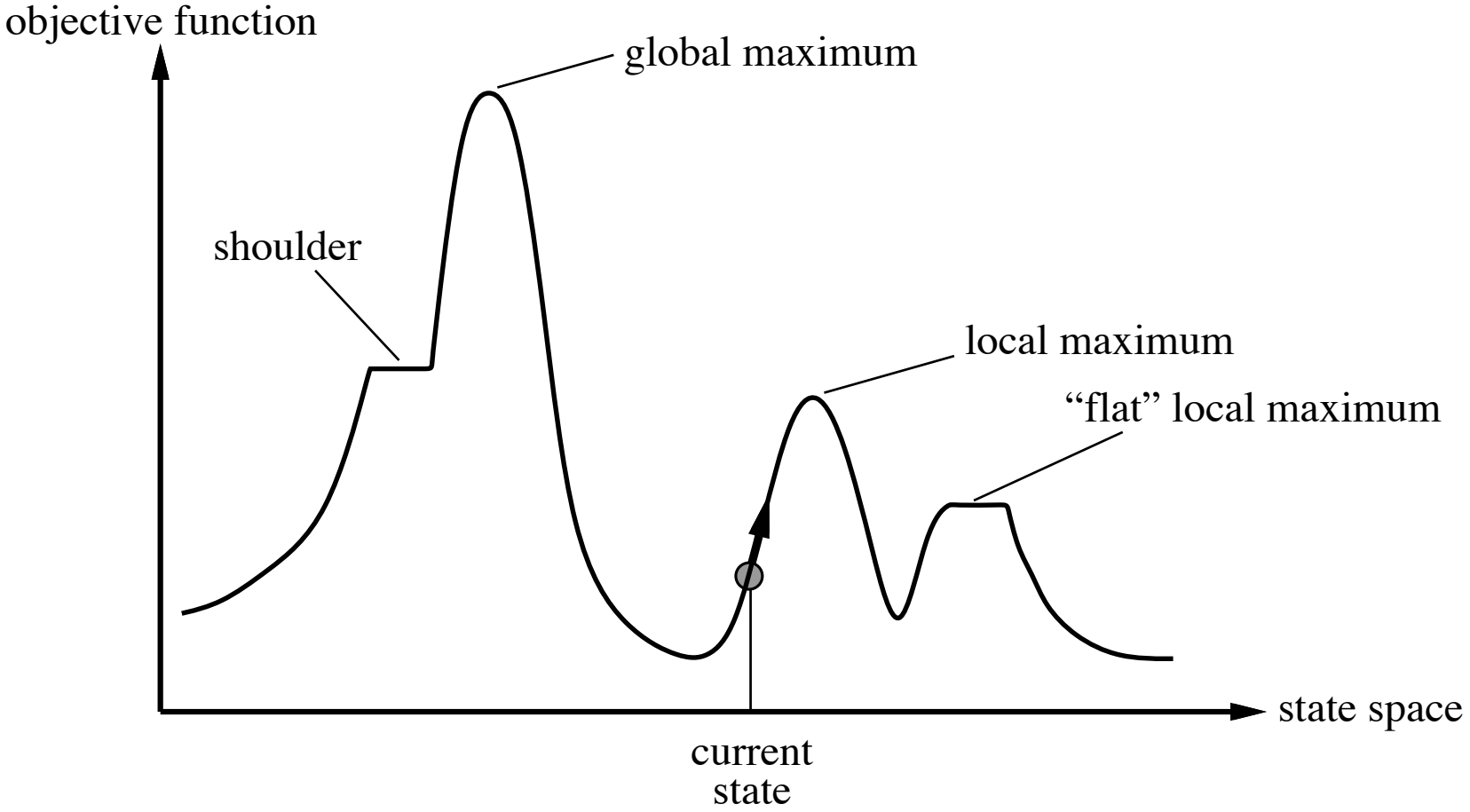
- Habitualmente definidas a partir de problemas de decisão e para o pior caso.

- Classe de problemas P
  - Problemas de decisão que podem ser resolvidos por uma máquina determinista em tempo polinomial no tamanho da instância
- Classe de problemas NP
  - Problemas de decisão que podem ser resolvidos por uma máquina não determinista em tempo polinomial no tamanho da instância
  - Equivalentemente, se “adivinhar” a solução consigo verificá-la em tempo polinomial. Logo P contido em NP.
- Classe de problemas NP-difíceis
  - Aqueles que são mais difíceis do que todos os problemas em NP
  - Se o problema pertencer a NP, então o problema diz-se NP-completo.
- Os problemas NP-completos são os mais difíceis da classe NP!

Como atacar problemas difíceis?

- Encontrar subclasses do problema que sejam interessantes e de resolução eficiente
- Usar algoritmos de aproximação eficientes
- Recorrer a aproximações estocásticas

A paisagem do espaço de estados



- Tanto podemos definir o problema como maximizar a função objectivo (proveito) ou minimizar o custo (heurística)

Trepa-colinas (Hill climbing)

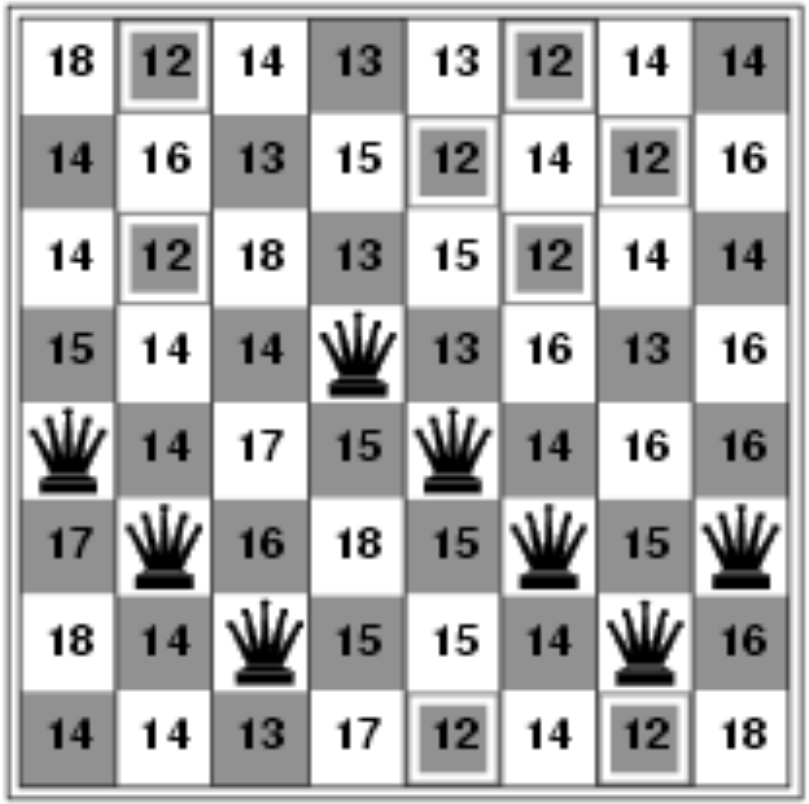
- Escalar o Evereste com nevoeiro denso e amnésia

```
function HILL-CLIMBING( problem) returns a state that is a local maximum
    inputs: problem, a problem
    local variables: current, a node
                     neighbor, a node

    current ← MAKE-NODE(INITIAL-STATE[problem])
    loop do
        neighbor ← a highest-valued successor of current
        if VALUE[neighbor] ≤ VALUE[current] then return STATE[current]
        current ← neighbor
```

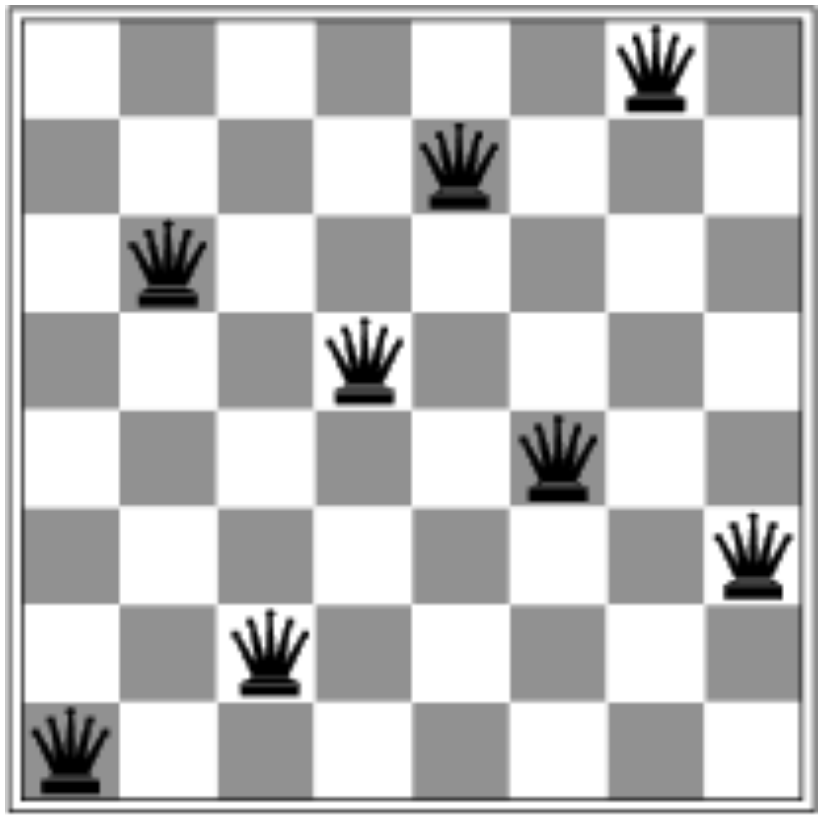
- A escolha é normalmente aleatória entre os sucessores com o mesmo valor para a função objectivo.

Trepa-colinas: problema das 8-rainhas



- *h* = número de pares de rainhas que se atacam mutuamente
- *h* = *17* para o estado apresentado

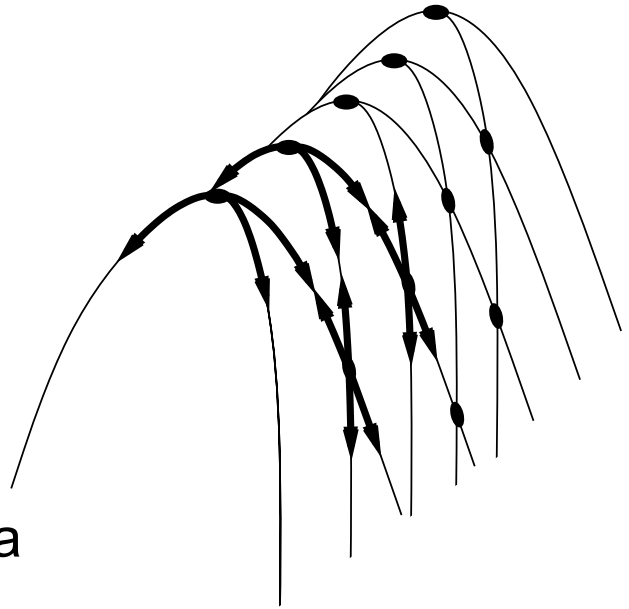
Trepa-colinas: problema das 8-rainhas



- Um mínimo local com *h* = *1*

Trepa-colinas

- Problemas:
  - pode ficar preso facilmente em máximos locais
  - travessia difícil em cristas de máximos locais
  - passeios aleatórios em planatos



- Em espaços contínuos, problemática na escolha do tamanho do passo, convergência lenta.

- 6 em 7 tentativas no problema das 8-rainhas falha após 3 passos em média e 1 tem sucesso após 4 passos (espaço de procura 17 milhões de estados = 8^8

Trepa-colinas com recomeços aleatórios

- Pode-se utilizar um número limitado de movimentos laterais para se tentar sair de planaltos, mas não funciona para planaltos que correspondem a máximos locais (substituir teste de ≤ por < e contar sua utilização).
  - Para o problema das 8-rainhas a utilizaçãode movimentos laterais limitada a 100 aumenta a probabilidade de sucesso de 14% para 94% (21 passos no caso de sucesso e 64 no caso de insucesso).
- Para evitar ficarmos presos em máximos locais, tenta-se novamente com um novo estado inicial gerado aleatoriamente e guarda-se o melhor deles ao fim de um número determinado de iterações.
  - Permite resolver problemas das 3000000-rainhas em menos de 1 minuto.
- O sucesso deste algoritmo depende muito da paisagem do espaço de estados: poucos máximos locais e planaltos é a situação ideal.

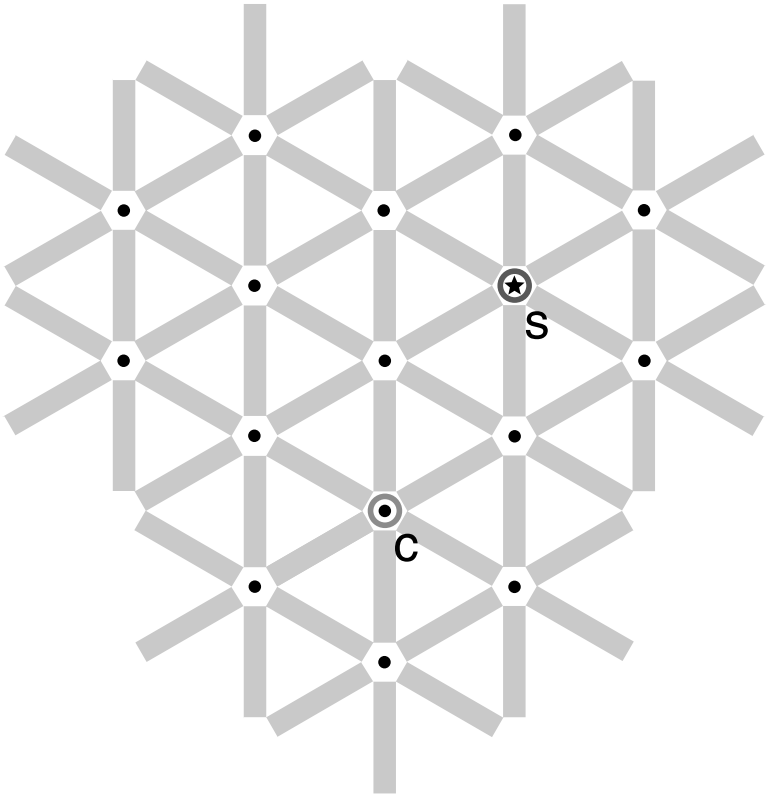
Variantes do Trepa-colinas

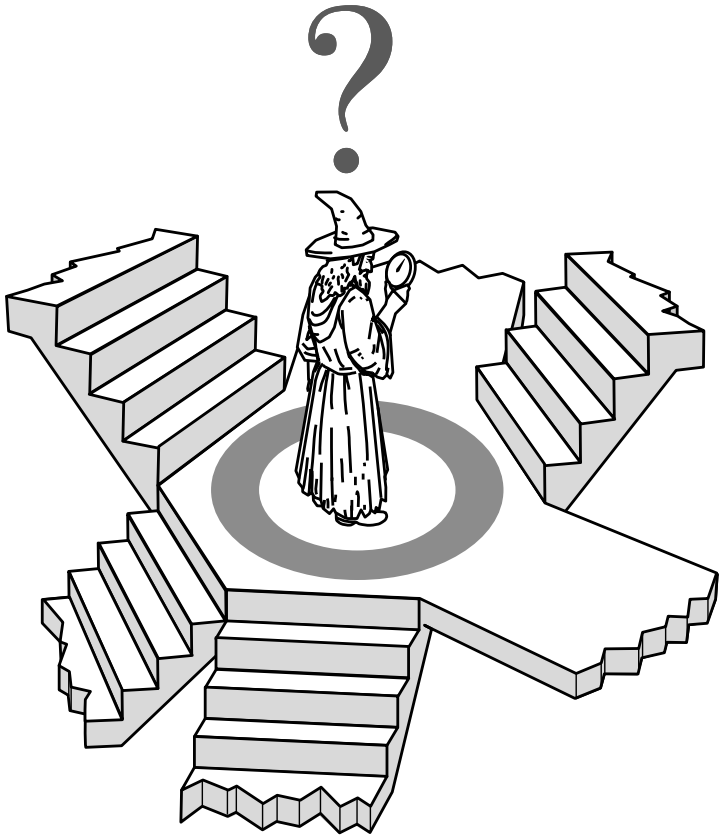
- Trepa-colinas estocástico
  - Selecciona o próximo sucessor aleatoriamente (e.g. dependendo da inclinação - melhoria). Mais lento mas pode devolver melhores soluções para alguns problemas.
- Trepa-colinas de primeira escolha
  - Vai gerando os sucessores aleatoriamente e escolhe o primeiro que melhore a função objectivo. Adequado em situações cuja vizinhança é muito grande (e.g. infinita em espaços contínuos)

Procura Local Estocástica

- O trepa-colinas é um exemplo elementar de um algoritmo de procura local estocástica:
  - A procura é efectuda no espaço de soluções candidatas
  - A procura inicia-se a partir de uma solução candidata
  - O processo continua movendo-se iterativamente de uma solução candidata para outra na sua vizinhança
  - A decisão em cada passo é tomada tendo em conta apenas informação local limitada.
  - A inicialização e a decisão podem ser aleatórias (probabilísticas)
  - Pode-se utilizar memória adicional, por exemplo para guardar um número limitado de soluções candidatas visitadas recentemente.

Procura Local Estocástica





SLS-Decision(π)

```
procedure SLS-Decision(π)
   input: problem instance π in Π
   output: feasible solution in S'(Π) or ∅
   (s,m) := init(π);
   while not terminate(π,s,m) do
       (s,m) := step(π,s,m);
   end
   if s in S'(Π) then
       return s
   else
       return ∅
   end
```

SLS-Maximisation(π)

```
procedure SLS-Maximisation(π)
   input: problem instance π in Π
   output: feasible solution in S'(Π) or ∅
   (s,m) := init(π);
   incumbent := s;
   while not terminate(π,s,m) do
        (s,m) := step(π,s,m);
        if f(π,s) > f(π,incumbent) then
           incumbent := s;
        end
   end
   if incumbent in S'(Π) then
        return incumbent
   else
        return ∅
   end
```

Problema central

- Como evitar ficar preso em mínimos/máximos locais?

- Exige um equilíbrio entre estratégias de
  - Intensificação: tentativa de melhoramento da solução na vizinhança da solução candidata corrente.
  - Diversificação: tenta evitar a estagnação em zonas do espaço de procura que não contêm soluções de alta qualidade
- As duas estratégias definem os inúmeros algoritmos existentes.

- Maiores vizinhanças contêm mais e melhores soluções candidatas mas requerem mais tempo para as encontrar (normalmente o tempo cresce exponencialmente…)

Outros exemplos

- Uninformed Random Picking
  - Inicia-se com uma solução candidata obtida aleatoriamente
  - Transita aleatoriamente para qualquer solução candidata com distribuição uniforme
  - Só diversificação
- Uninformed Random Walking
  - Inicia-se com uma solução candidata obtida aleatoriamente
  - Transita aleatoriamente para qualquer solução candidata na sua vizinhança
  - Só diversificação
- Randomised Iterative Improvement ()
  - Inicia-se com uma solução candidata obtida aleatoriamente
  - De acordo com um parâmetro fixado *wp*, opta entre melhorar a solução ou mover-se aleatoriamente para uma solução candidata na vizinhança.
  - Intensificação e diversificação controlados por *wp* (**walk probability**).

Recristalização simulada

- Fugir de máximos locais permitindo alguns movimentos "piores" mas reduzindo gradualmente o seu tamanho e frequência

```
function SIMULATED-ANNEALING( problem, schedule) returns a solution state
   inputs: problem, a problem
           schedule, a mapping from time to "temperature"
   local variables: current, a node
                    next, a node
                    T, a "temperature" controlling prob. of downward steps

   current ← MAKE-NODE(INITIAL-STATE[problem])
   for t ← 1 to ∞ do
       T ← schedule[t]
       if T = 0 then return current
       next ← a randomly selected successor of current
       ΔE ← VALUE[next] – VALUE[current]
       if ΔE > 0 then current ← next
       else current ← next only with probability e^(Δ E/T)
```

Recristalização Simulada

- Selecciona-se um movimento aleatoriamente em cada iteração
- Transita-se para esse estado se melhor do que o estado actual
- A probabilidade de se movimentar para um estado pior decresce exponencialmente com o valor da mudança, ou seja

$$e^{\frac{\Delta E}{T}}$$

- A temperatura *T* altera-se de acordo com o escalonamento definido
  - Temperatura inicial T_0 (pode depender das propriedades da instância)
  - Actualização da temperatura (e.g. arrefecimento geométrico T := α* T)
  - Número de passos a cada temperatura (normalmente múltiplo da dimensão da vizinhança)
- Terminação normalmente baseado no rácio entre estados propostos versus aceites.

Propriedades da recristalização simulada

- Se a temperatura for diminuída suficientemente devagar atinge-se o melhor estado, com probabilidade que se aproxima de 1.
- Desenvolvido por Metropolis et al., 1953, para modelaçãode processos físicos
- Muito utilizado no desenho de VLSI, escalonamento de viagens aéreas, etc.

Procura local em feixe

- Mantêm-se *k* soluções candidatas em vez de apenas 1
- Começa-se com *k* soluções geradas aleatoriamente
- Em cada iteração, as vizinhanças das k soluções candidatas são geradas
- Se alguma é o objectivo, parar; senão seleccionam-se as *k* melhores e repete-se.

Procura local em espaços contínuos

- Muitos problemas podem ser representados como maximização/ minimização de funções multi-dimensionais em R^n.
- Existem inúmeras técnicas mas iremos abordar brevemente aquelas baseadas no gradiente de uma função $f(x_1,\ldots, x_n)$ que se supõe diferenciável em R^n.
- O gradiente da função f, denotado por ∇f define-se por:

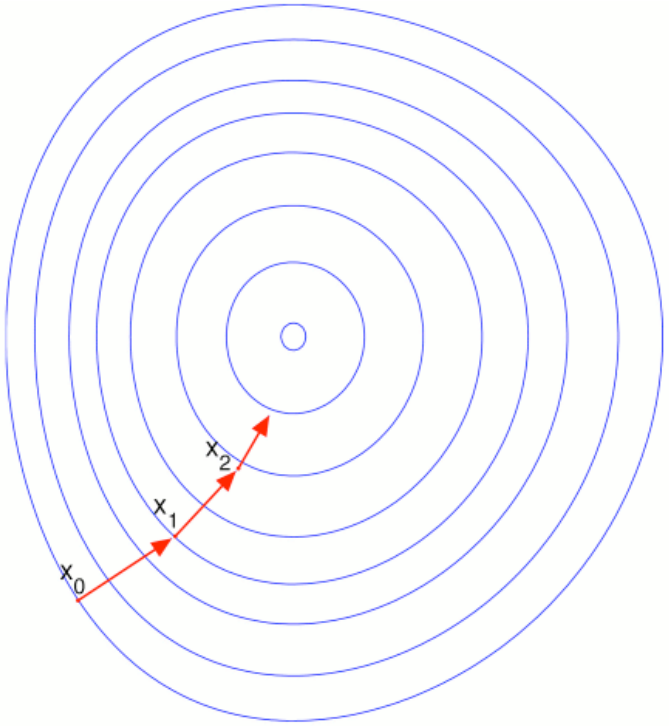
$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$$

Subida pelo gradiente

- Partindo de uma solução inicial x0
- Executa-se iterativamente o algoritmo

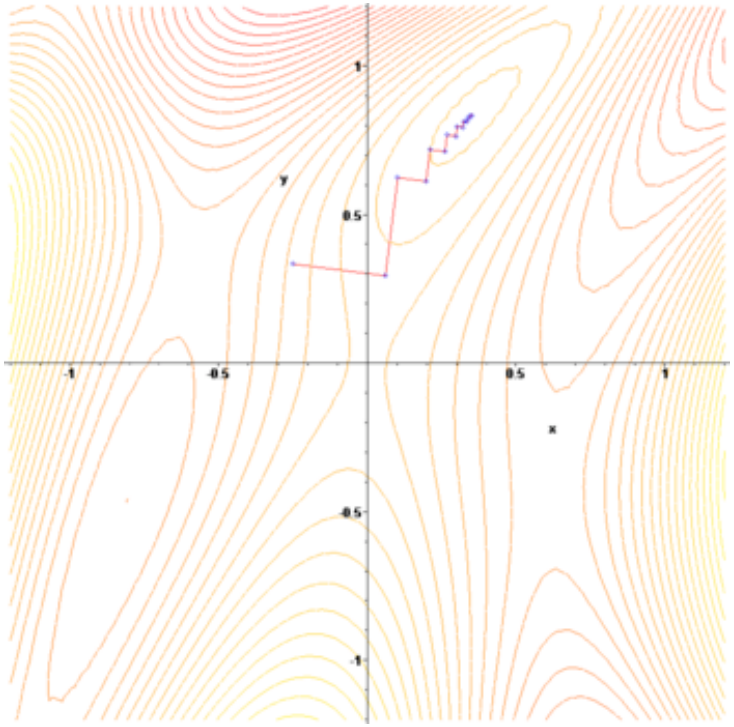
$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \gamma_n \nabla F(\mathbf{x}_n), \ n \geq 0.$$

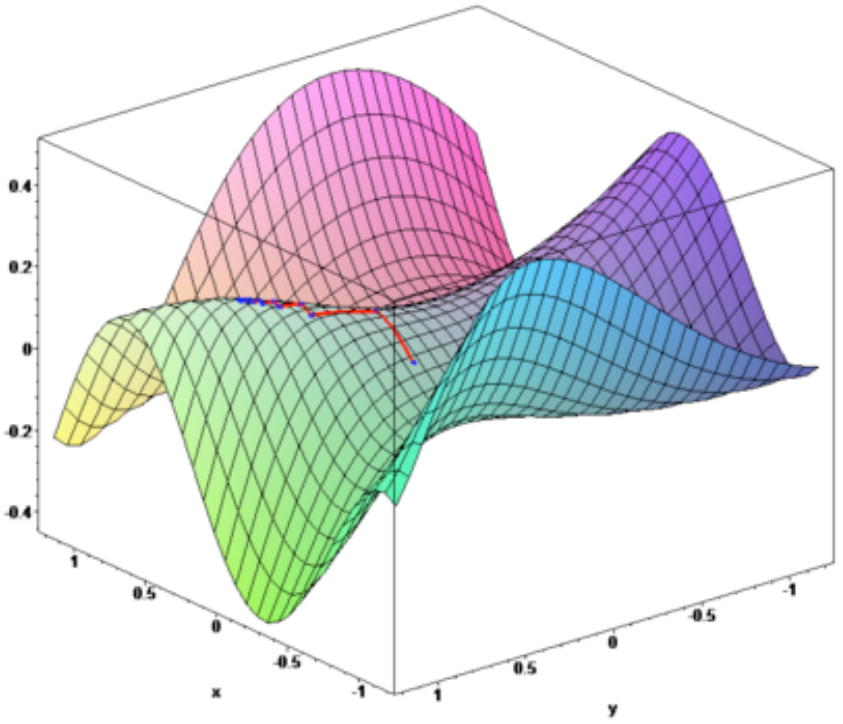
- Até que a variação entre $|x_{n+1} – x_n|$ atinja um erro predeterminado.
- Podemos variar em cada passo o parâmetro γ_n, que deve ser suficientemente pequeno



Exemplo: maximização de função

$$F(x,y) = \sin\left(\frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{4}y^2 + 3\right)\cos(2x + 1 - e^y)$$

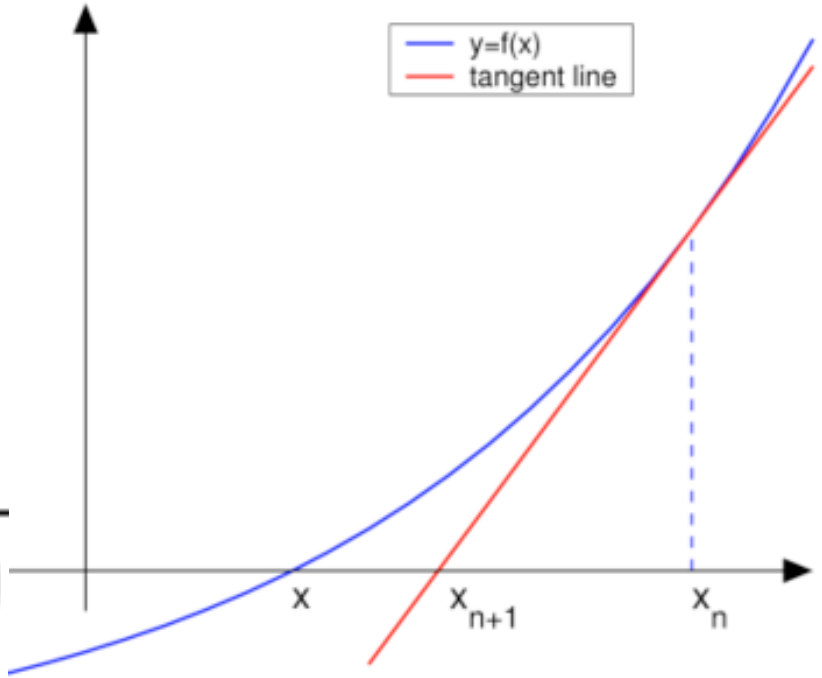




Método de Newton-Rampson

- O método de Newton-Raphson é utilizado para obter as raizes de f(x)=0.
- O método para funções reais corresponde a iterar

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$



- Para encontrar os extremos tem-se de resolver a equação f'(x) = 0

Optimização com método de Newton-Raphson

- Para o caso de funções reais, iterar

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)}, \ n \geq 0$$

- Para o caso de funções em R^n, generaliza-se a fórmula de aproximação para

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \gamma [H f(\mathbf{x}_n)]^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_n).$$

- A matriz Hessiana H_f contém as derivadas parciais de segunda ordem de f, isto é $H_{ij} = \partial^2 f / \partial x_i \partial x_j$

Bibliografia

- Capítulos 4.3 e 4.4 do AIMA (2ª edição) ou 4.1 e 4.2 (3ª edição)
- Capítulos 1 e 2 do livro Stochastic Local Search.
- Wikipedia
  - http://en.wikipedia.org/wiki/Gradient_descent
  - http://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s_method_in_optimization
- *This material is partially based on slides provided with the book 'Stochastic Local Search: Foundations and Applications' by Holger H. Hoos and Thomas Stützle (Morgan Kaufmann, 2004) - see www.sls-book.net for further information.*