Stochastické optimalizační algoritmy založené na hejnové inteligenci

Zadaný problém

- Hledání stabilních konfigurací molekulových/atomových soustav
- VSTUP : množina 'N' molekul/atomů
- VÝSTUP : množina stabilních konfigurací

Zadaný problém

- STABILNÍ KONFIGURACE :

  každá konfigurace zaujímá polohu v prostoru R^{3*N}

  každá konfigurace má jednoznačně určenou energii E funkcí : $R^{3*N} \to R$

  výpočet energie je realizován různými interakčními modely

  stabilní konfigurace jsou lokální minima energetické funkce

Multi-agentové systémy

- Evoluční systémy
- Stav reprezentován množinou tzv. agentů
- Agent funguje jako samostatná inteligentní jednotka (obsahuje vlastní stav, interface pro sběr dat a metody pro rozhodování o změně stavu)
- Vývoj systému je dán interakcí agentů

Hejnové optimalizační algoritmy

- Cílem algoritmu je nalézt řešení kvalitou co nejbližší globálnímu extrému zadané zkoumané funkce
- Algoritmus se dokáže vyhnout méně kvalitním lokálním extrémům
- Pracují s širokou třídou funkcí pomocí parametrů, které se nastavují “podle chuti”
- Téměř celé programování je založeno na intuici místo matematických pravidel
- Inspirovány postupy okoukanými z přírody

Hejnové optimalizační algoritmy

- Multi-agentové systémy
- Agenti uchovávají nalezená řešení
- Snaha najít pravidla, která vedou ke konvergenci a zároveň prohledávají dostatečně velkou část prostoru

Fitness funkce

- Funkce : (Omega) → R
- Hejnové algoritmy prohledávají (Omega) vzhledem k této fitness funkci
- Obecně neznáme počet lokálních extrémů, ani jejich rozmístění v prostoru

Hejnové optimalizační algoritmy
potíže

- Nikdy s jistotou nevíme, jestli jsme dosáhli globálního extrému
- Náročné je také identifikovat lokální extrémy nalezené v průběhu algoritmu
- Závislé na volbách parametrů

Post-processing

- Výstup hejnového algoritmu : globální (či jemu podobný) extrém
- Výstup zadaného algoritmu : množina lokálních extrémů
- Je třeba algoritmy upravit pro průběžnou extrakci kandidátů na lokální minima
- Tyto kandidáty podrobit dalšímu zkoumání

Některé principy hejnových (I jiných) stochastických algoritmů

- Elitismus
- Možnost přijetí horšího řešení
- Ruletová selekce
- Incidenční topologie
- Zahazování stagnujících řešení

Elitismus

- Záchovávání určitého procenta nejlepších řešení
- Nutno vyvážit s principem přijímání horších řešení pro optimální prohledávaní celého prostoru
- Ovlivňuje rychlost konvergence
- “Hledání dobré hospody”

Možnost přijetí horšího řešení

- Způsob, jak se vyhnout lokálním extrémům
- Přestože řešení v jednom kroku může mít horší vlastnosti, v dalším kroku může způsobit nalezení lepších řešení
- Ovlivňuje prohledávání prostoru
- “Místo do Alp do Beskyd”

Příklad – elitismus a přijímání horších řešení

Pro x nejlepších :

- vytvoř novou polohu
- pokud je lepší, nahraď jí dosavadní řešení

Pro zbytek

- vytvoř novou polohu
- nahraď jí dosavadní řešení

Ruletová selekce

- Náhodný výběr, kdy každý prvek je vybrán s nenulovou pravděpodobností a tyto nejsou příliš rozdílné
- Pravděpodobnost výběru je úměrná kvalitě prvku (např. fitness agenta)
- “Manželku jsem potkal na diskotéce”

Ruletová selekce

- Vyžaduje namapovat fitness funkci na omezenou kladnou funkci

1/(1+e^(x))

Incidenční topologie

- Množiny, ze kterých se vybírají agenti pro interakci
- Nejjednodušší je množina všech agentů
- Při rozdělení této množiny na podmnožiny můžeme zlepšit vlastnosti pro prohledávání prostoru
- “Vývoj civilizace v odlehlých oblastech”

Příklad – incidenční topologie

Vytvoř x populací P0-Px

OPAKUJ :

proveď y iterací každé populace

z každé populace 'a' vyber nejlepšího, odstraň jej a vlož do populace 'a'+1 (mod x+1)

Zahazování stagnujících řešení

- Pokud některý z agentů uvízl na dlouhou dobu ve stejném stavu, je někdy lepší jej nahradit novým agentem
- Může poskytnout kandidáty pro extrakci lokálních extrémů
- “TCN”

Příklad – stagnující řešení

Nechť každý má každý agent vnitřní počitadlo 'c'

Při iteraci :

pokud je agentovo řešení nahrazeno novým, 'c' = 0

jinak 'c' = 'c' + 1

V každém cyklu zkontrolovat :

pokud je 'c' vyšší, než předem stanovený limit, nahraď řešení novým řešením

Shrnutí

- Hejnové optimalizační algoritmy reprezentují širokou třídu metod pro prohledávání D(f), které jsou modifikovatelné pomocí nastavitelných parametrů
- Dokáží vyhledávat kvatliní řešení složitých optimalizačních problémů
- Založeny na heuristických postupech
- Kvalita ověřována experimenty
- Nutno upravit pro zadaný problém