

3. kapitola

Horolezecké algoritmy

3.1 Základné stochastické optimalizačné algoritmy: slepý algoritmus a horolezecký algoritmus

Uvedieme dva základné typy stochastických optimalizačných algoritmov, ktoré aj keď neobsahujú evolučné rysy, budú slúžiť ako základ pre formuláciu evolučných optimalizačných algoritmov. *Slepý algoritmus* je základný stochastický algoritmus, ktorý opakovane generuje náhodne riešenie z oblasti D a zapamätá si ho len vtedy, ak bolo získané lepšie riešenie ako to, ktoré už bolo zaznamenané v predchádzajúcej histórii algoritmu. Z dôvodov kompatibility tohto algoritmu s evolučnými algoritmami uvedieme jeho implementáciu pre binárnu reprezentáciu vektorov - riešení, pozri algoritmus 3.1.

```
procedure Blind_Algoritmus(input:  $t_{max}, k, n$ ; output:  $\alpha_{fin}, f_{fin}$ );  
begin  $f_{fin} := \infty$ ;  $t := 0$ ;  
  while  $t < t_{max}$  do  
    begin  $t := t + 1$ ;  
       $\alpha :=$  randomly generated binary vector of  
        the length  $kn$ ;  
      if  $f(\Gamma(\alpha)) < f_{fin}$  then  
        begin  $\alpha_{fin} := \alpha$ ;  $f_{fin} := f(\Gamma(\alpha))$  end;  
    end;  
end;
```

Algoritmus 3.1. Pseudopascalovská implementácia slepého algoritmu. Vstupné parametre procedúry sú t_{max} (maximálny počet iterácií) a konštanty k a n (dĺžka binárneho reťazca jednotlivej premennej resp. počet premenných optimalizovanej funkcie f). Algoritmus začína inicializáciou premennej f_{fin} (výsledná hodnota nájdeného minima funkcie f) a t (počítadlo iterácií). Algoritmus sa opakuje t_{max} -krát, potom je ukončený a výstupné parametre α_{fin} a f_{fin} obsahujú najlepšie hodnoty riešenia v binárnej reprezentácii a príslušnú najlepšiu funkčnú hodnotu.

Jednoduchými úvahami dá sa dokázať, že tento jednoduchý stochastický optimalizačný algoritmus poskytuje korektné globálne minimum optimalizačného problému (1.5) realizovaného nad ortogonálnou mriežkou bodov z oblasti D za predpokladu, že parameter procedúry t_{max} asymptoticky rastie do nekonečna

$$\lim_{k_{max} \rightarrow \infty} P(t_{max} | \alpha_{fin} = \alpha_{opt}) = 1 \quad (3.1)$$

kde $P(t_{max} | \alpha_{fin} = \alpha_{opt})$ je pravdepodobnosť toho, že slepý algoritmus po t_{max} iteračných krokoch poskytne výstupné riešenie, ktoré je totožné s presným riešením (globálne minimum).

Príklad 3.1. Napíšte program pre slepý algoritmus (pozri algoritmus 1.1) pre funkciu $f(x)$ z príkladu 1.1 ak dĺžka binárnej reprezentácie bude $k=10, 20, 30$. Zostrojte tabuľku výsledkov, v ktorej bude uvedené najlepšie zaznamenané minimum funkcie vzhľadom k počtu iteračných krokov $t_{max}=100, 1000, 10000$. Diskutujte získané výsledky vzhľadom k dĺžke "k" binárnej reprezentácie a počtu iteračných krokov t_{max} .

Príklad 3.2. Vykonajte zovšeobecnenie programu z príkladu 3.1 pre funkciu n premenných, pričom každá premenná je vyjadrená binárnym reťazcom rovnakej dĺžky "k" a všetky premenné sú z rovnakého intervalu. Ako testovaciu funkciu môžete použiť zovšeobecnenú funkciu z príkladu 1.1

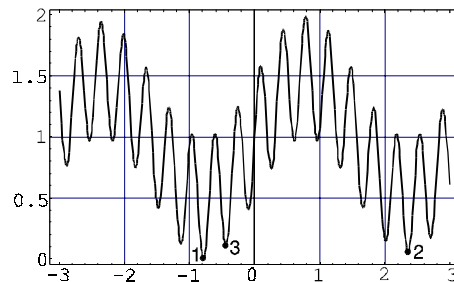
$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n f(x_i)$$

pre $\forall x_i \in [-10, 10]$. Aké je globálne minimum tejto funkcie? Koľko má lokálnych miním?

Príklad 3.3. Ako príklad vysoko multimodálnej funkcie budeme používať túto funkciu

$$f(x) = 0.993851231 + e^{-0.01x^2} \sin(10x) \cos(8x)$$

pre $x \in [-10, 10]$. Výsek jej priebehu pre $x \in [-3, 3]$ má tento tvar



Prvé tri minimá tejto funkcie sú: $x_1 = -0.7853024$, $f(x_1) = 5.69 \times 10^{-11}$ (globálne minimum), $x_2 = 2.3559072$, $f(x_2) = 0.047848$, $x_3 = -0.4402184$, $f(x_3) = 0.11277$. Konštanta δ , ktorá charakterizuje minimálnu vzdialenosť medzi dvoma minimami (pozri obr. 2.2) je približne rovná $\delta = 1/4$. To znamená, že neexistuje taká dvojica dvoch susedných miním, ktorých vzdialenosť by bola menšie ako $\delta = 1/4$. V nasledujúcich príkladoch táto funkcia bude často používaná tak v 1-rozmernej, ako aj v mnoho-rozmernej verzii pre testovanie schopnosti nájsť globálne minimum. Vykonajte verifikáciu uvedených údajov o tejto funkcii pomocou programu MAPLE [1] alebo MATHEMATICA [2]. Koľko lokálnych miním a lokálnych extrémov má táto funkcia?

Vo všeobecnosti môžeme povedať, že slepý algoritmus *neobsahuje žiadnu stratégiu* konštrukcie riešenia (t.j. binárnych vektorov dĺžky kn) na základe predchádzajúcej histórie algoritmu. Každé riešenie je zostrojené úplne nezávisle (t.j. plne náhodne) od predchádzajúcich riešení. Zaznamenáva sa to riešenie, ktoré v priebehu aktivácie procedúry poskytuje zatiaľ najnižšiu funkčnú hodnotu. Po ukončení aktivácie procedúry je toto riešenie výstupným parametrom.

Slepý algoritmus môže byť jednoducho zovšeobecnený na tzv. *horolezecký algoritmus* (hill climbing), kde sa iteračne hľadá najlepšie lokálne riešenie v určitom

okolí, a toto riešenie je v ďalšom kroku použité ako "stred" novej oblasti. K formalizácii horolezeckého algoritmu zavedieme niektoré základné pojmy, ktoré sú dôležité pre jeho jednoduchý popis. Operácia *mutácie* stochasticky transformuje binárny vektor α na nový binárny vektor α' , pričom stochastičnosť toho procesu je určená pravdepodobnosťou P_{mut}

$$\alpha' = O_{mut}(\alpha) \quad (3.2a)$$

kde α a α' sú dva binárne vektory rovnakej dĺžky kn

$$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{kn}) \quad \text{a} \quad \alpha' = (\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_{kn}) \quad (3.2b)$$

kde jednotlivé komponenty α' sú určené takto

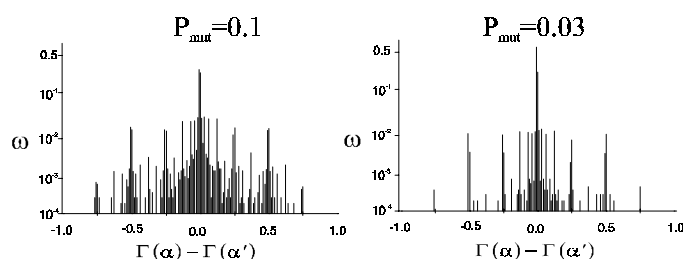
$$\alpha'_i = \begin{cases} 1 - \alpha_i & (\text{pre } random < P_{mut}) \\ \alpha_i & (\text{ostatné prípady}) \end{cases} \quad (3.2c)$$

kde *random* je náhodné číslo z intervalu [0,1) generované s rovnomernou distribúciou (pozri algoritmus 1.3). Pravdepodobnosť P_{mut} určuje stochastičnosť operátora mutácie, v limitnom prípade, ak $P_{mut} \rightarrow 0$, potom operátor O_{mut} nemení binárny vektor

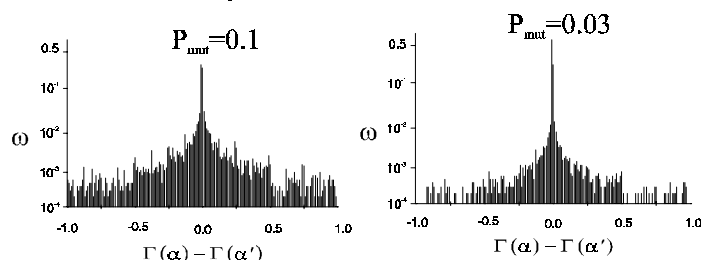
$$\lim_{P_{mut} \rightarrow 0} O_{mut}(\alpha) = \alpha \quad (3.2d)$$

Na obr. 3.1 je znázornený efekt mutácie (3.2) (pre dve pravdepodobnosti $P_{mut}=0.1$ a $P_{mut}=0.03$) na binárny vektor dĺžky $k=30$, ktorý reprezentuje reálne čísla z intervalu [0,1]. Sú použité dva rôzne prístupy ku kódovaniu, a to štandardné kódovanie a Grayovo kódovanie. Z obrázku je vidieť, že mutácia pre binárne vektory so štandardným kódovaním vytvára nové binárne vektory s číselnými hodnotami, ktoré sú rozdelené diskretným spôsobom okolo nulovej hodnoty. Ak sa použije Grayovo kódovanie, číselné hodnoty nových binárnych vektorov vytvárané mutáciou sú rozdelené pomerne "spojito" okolo nulovej hodnoty približne s Gaussovou distribúciou pravdepodobnosti. Môžeme teda povedať, že mutácia v rámci štandardného kódovania poskytuje nové binárne vektory, ktoré vzhľadom k pôvodným (t.j. nemutovaným) binárnym vektorom majú číselné hodnoty, ktoré sú relatívne diskretné rozdelené okolo nuly. Táto "diskrétnosť rozdelenia" je potlačená, ak sa použije Grayov kód pri binárnej reprezentácii reálnych čísel. Na základe tohto výsledku možno konštatovať, že Grayov kód je asi vhodnejší pre binárnu reprezentáciu reálnych premenných, mutáciou vytvorené binárne vektory sa vyskytujú "spojito" na celej oblasti prípustných hodnôt (pozri obr. 3.1).

Štandardné binárne kódovanie



Grayovo binárne kódovanie



Obrázok 3.1. Priebehy pravdepodobností číselných hodnôt binárnych vektorov, ktoré sú generované mutáciou pre štandardné a Grayovo kódovanie. Binárne vektory majú dĺžku $k=30$, pričom reprezentujú reálne čísla z intervalu $[0,1]$. Grafy sú zostrojené tak, že 10000 krát bol náhodne vygenerovaný bitový vektor α , aplikovaním mutácie s pravdepodobnosťou P_{mut} bol vytvorený nový binárny vektor $\alpha' = O_{mut}(\alpha)$. Na horizontálnej osi sa vynášajú rozdiely číselných hodnôt $-1 \leq \Gamma(\alpha) - \Gamma(\alpha') \leq 1$. Na vertikálnej osi sa vynášajú pravdepodobnosti ω výskytu rozdielu $\Gamma(\alpha) - \Gamma(\alpha')$.

Príklad 3.4. Zreprodukuje grafy z obr. 3.1. Zvolíme si dĺžku " k " binárnej reprezentácie reálnych čísel z intervalu $[a,b]$, kde $a < b$. Binárny reťazec α je náhodne generovaný, aplikovaním operátora mutácie O_{mut} dostaneme nový binárny reťazec α' , $\alpha' = O_{mut}(\alpha)$. Pôsobenie operátora mutácie je popísané vzťahmi (3.2a-c). Zostrojíme rozdiel $\Delta(\alpha, \alpha') = \Gamma(\alpha) - \Gamma(\alpha')$, ktorý je z intervalu $[a-b, b-a]$, pričom dĺžka tohto intervalu je $2(b-a)$. Výpočet reálneho čísla priradeného binárnemu reťazcu je realizovaný tak v štandardnej, ako aj v Grayovej reprezentácii. Nech tento interval je rozdelený na N podintervalov, pričom prvý (posledný) interval je indexovaný $1(N)$, pričom dĺžka týchto podintervalov je $\xi = 2(b-a) / N$. Reálnemu číslu $z \in [a-b, b-a]$ priradíme index podľa toho prepisu

$$index(z) = 1 + \left\lceil \frac{z - a + b}{\xi} \right\rceil$$

kde $\lceil x \rceil$ je celá časť reálneho čísla x . Ak položíme $z = \Delta(\alpha, \alpha')$, potom pre tento rozdiel dostaneme

$$index(\Delta(\alpha, \alpha')) = 1 + \left\lceil \frac{\Delta(\alpha, \alpha') - a + b}{\xi} \right\rceil$$

Frekvencie výskytu ω priradené rozdielom $\Delta(\alpha, \alpha')$ sa približne spočítajú tak, že miesto funkčnej hodnoty tohto rozdielu sa uvažuje index tohto rozdielu, t.j. interval možných funkčných hodnôt intervalu $[a-b, b-a]$ sa diskretizuje pomocou N bodov.

Algoritmus je inicializovaný tak, že všetky frekvencie výskytu sú nulové, v priebehu výpočtu sa obnovujú len tie frekvencie, ktoré sú určené indexom $\text{index}(\Delta(\alpha, \alpha'))$. Tento postup je vyjadrený nasledujúcim algoritmom

```

for i:=1 to N do  $\omega_i := 0$ ;
time:=0
while time<timemax do
begin time:=time+1;
 $\alpha :=$ randomly generated binary vector;
 $\alpha' := O_{\text{mut}}(\alpha)$ ;
 $\Delta(\alpha, \alpha') := \Gamma(\alpha) - \Gamma(\alpha')$ ;
index:= $1 + \left\lceil \frac{\Delta(\alpha, \alpha') - a + b}{\xi} \right\rceil$ ;
 $\omega_{\text{index}} := \omega_{\text{index}} + 1$ ;
end;
for i:=1 to N do  $\omega_i := \omega_i / N$ ;

```

Grafy z obr. 3.1 dostaneme tak, že pomocou vhodného softwaru vynesieme hodnoty frekvencií ω_i vzhľadom k indexom (pre lepšiu názornosť grafu sa miesto indexu používa príslušná reálna hodnota určená vzťahom

$$\text{real}(\text{index}) = a - b + (\text{index} - 1) \cdot \xi$$

Výpočty pomocou tohto algoritmu realizujte pre rôzne hodnoty k (dĺžky binárnych reťazcov) a P_{mut} (pravdepodobnosť jednobitovej mutácie). Pokúste sa diskutovať výsledky.

```

procedure Mutation_Bin(input: $\alpha$ ; output  $\alpha'$ );
begin for i:=1 to kn do
  if random< $P_{\text{mut}}$  then
     $\alpha'_i := 1 - \alpha_i$  else  $\alpha'_i := \alpha_i$ ;
end;

```

Algoritmus 3.2. Implementácia mutácie binárneho reťazca dĺžky kn . Pravdepodobnosť P_{mut} určuje 1-bitovú mutáciu, t.j. zmenu bitu na jeho komplement. Premenná random je náhodné číslo s rovnomernou distribúciou z intervalu $[0,1)$.

Základná idea horolezeckého algoritmu spočíva v tom, že vzhľadom k určitému zvolenému riešeniu zostrojíme náhodne predpísaný počet nových riešení tak, že vo zvolenom riešení sa náhodne menia bitové premenné (hovoríme, že zvolené riešenie je stred oblasti z neho náhodne generovaných riešení). Z tejto oblasti vyberieme najlepšie riešenie (t.j. s minimálnou funkčnou hodnotou nad bodmi z daného okolia), ktoré sa použije v nasledujúcom iteračnom kroku ako stred novej oblasti. Tento proces sa opakuje predpísaný počet-krát, pričom sa zaznamenáva najlepšie riešenie, ktoré sa vyskytlo v priebehu histórie algoritmu. (Možná modifikácia tohto algoritmu spočíva v prehľadávaní všetkých riešení, ktoré sa líšia v jednom bitu od aktuálneho riešenia.)

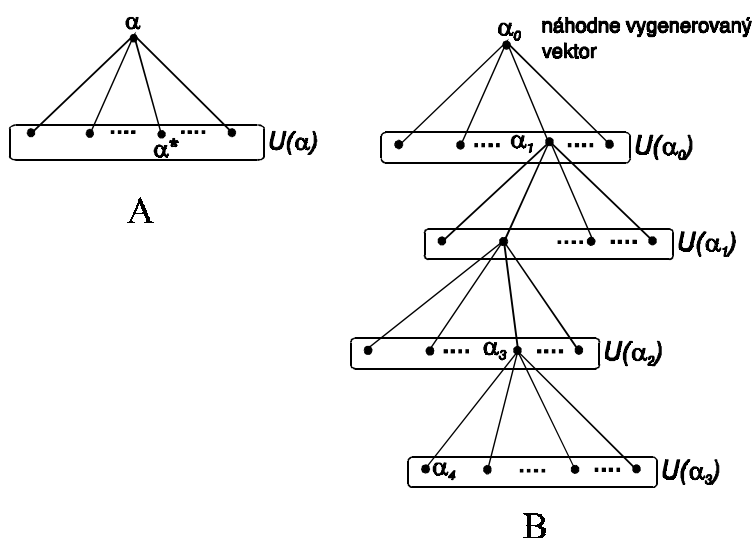
Okolie $U(\alpha)$ binárneho vektora α sa zostrojí pomocou vektorov $\alpha' = O_{mut}(\alpha)$

$$U(\alpha) = \{\alpha' = O_{mut}(\alpha)\} \quad (3.3)$$

pričom budeme predpokladať, že kardinalita (počet elementov) sa rovná predpísanej hodnote, $|U(\alpha)| = c_0$, kde c_0 je dané kladné celé číslo. Poznamenajme, že v dôsledku stochastičnosti aplikácie operácie mutácie na daný binárny vektor α má zloženie okolia $U(\alpha)$ tiež stochastický charakter. To, či nejaký vektor α' patrí alebo nepatrí do okolia $U(\alpha)$ je určené len pravdepodobnostne a nie deterministicky. Najlepšie riešenie v okolí $U(\alpha)$ je určené takto

$$\alpha^* = \arg \min_{\alpha' \in U(\alpha)} f(\Gamma(\alpha')) \quad (3.4)$$

V horolezeckom algoritme sa takto získané riešenie α^* použije ako "stred" v ďalšom iteračnom kroku algoritmu, pozri obr. 3.2. Implementácia horolezeckého algoritmu v pseudopascalu je uvedená v algoritme 3.3.



Obrázok 3.2. Schematické znázornenie generovania okolia binárneho vektora α a najlepšieho riešenia α^* v okolí $U(\alpha)$ (diagram A). Počet binárnych vektorov v okolí je konštantný, rovná sa c_0 . Horolezecký algoritmus je znázornený na diagrame B, tento algoritmus pozostáva z tvorby postupností okolí $U(1), U(2), U(3), \dots$. Stred okolia $U(i)$ je totožný s najlepším riešením z predchádzajúceho okolia $U(i-1)$. Algoritmus je inicializovaný riešením α_0 , ktoré je náhodne generované.

Analóg formule (3.1) zo slepeho algoritmu, ktorá hovorí, že tento jednoduchý algoritmus je asymptoticky schopný nájsť globálne minimum, platí aj v horolezeckom algoritme. V tomto prípade sa ale kardinalita okolia $c_0 = |U(\alpha)|$ musí asymptoticky zväčšovať do nekonečna

$$\lim_{c_0 \rightarrow \infty} P(c_0 | \alpha_{fin} = \alpha_{opt}) = 1 \quad (3.5)$$

Potom je ale zbytočné opakovať iteračné kroky horolezeckého algoritmu pre nové lokálne optimálne riešenia, už v rámci jedného iteračného kroku získame pre $c_0 \rightarrow \infty$ globálne riešenie.

Ako naznačujú jednoduché numerické aplikácie, horolezecký algoritmus, aj keď neobsahuje explicitne evolučnú stratégiu, je pomerne efektívny a robustný

stochastický optimalizačný algoritmus, ktorý je schopný pre jednoduchšie úlohy nájsť globálne minimum. V nasledujúcej časti tejto kapitoly -prednášky uvedieme dve jednoduché zovšeobecnenia horolezeckého algoritmu, ktoré sú už blízke evolučným algoritmom a môžu byť uvažované ako určitý prototyp týchto algoritmov.

```

procedure Hill_Climbing(input:  $t_{max}, c_0, P_{mut}$ ; output:  $f_{fin}, \alpha_{fin}$ );
begin  $\alpha :=$  randomly generated binary vector of the length  $kn$ ;
     $f_{fin} := \infty$ ;  $t := 0$ ;
    while  $t < t_{max}$  do
        begin  $t := t + 1$ ;
             $\alpha^* = \arg \min_{\alpha' \in U(\alpha)} f(\Gamma(\alpha'))$ 
            if  $f(\Gamma(\alpha^*)) < f_{fin}$  then begin  $f_{fin} := f(\Gamma(\alpha^*))$ ;  $\alpha_{fin} := \alpha^*$  end;
             $\alpha := \alpha^*$ ;
        end;
    end;

```

Algoritmus 3.3. Pseudopascalovská implementácia procedúry realizujúcej horolezecký algoritmus. Vstupnými parametrami sú konštanty t_{max} , c_0 a P_{mut} , ktoré popisujú maximálny počet iterácií horolezeckého algoritmu, kardinalitu okolia $U(\alpha)$, resp. pravdepodobnosť 1-bitovej mutácie. Algoritmus je inicializovaný náhodným generovaním binárneho vektora α , ktorého dĺžka je kn (kde k je dĺžka binárnej reprezentácia reálnej premennej a n je počet premenných optimalizovanej funkcie f). Binárny vektor α^* je najlepšie riešenie nájdené v okolí $U(\alpha)$, toto riešenie je v nasledujúcom kroku použité ako stred nového okolia. Najlepšie riešenie získané v priebehu celej histórie je uložené vo výstupných premenných f_{fin} a α_{fin} .

Príklad 3.5. *Napíšte program pre horolezecký algoritmus (pozri algoritmus 3.3) pre funkciu $f(x)$ definovanú v príklade 3.3 a jej n -rozmerné zovšeobecnenie (pozri príklad 3.2). Vektor reálnych premenných x je binárne reprezentovaný tak v štandardnom kódovaní, ako aj v Grayovom kódovaní. Pokúste sa pre $n=1$ optimalizovať parametre c_0 a P_{mut} tak, aby ste skoro so 100% istotou dostali globálne minimum s čo najmenším počtom iteračných krokov. Použite tieto optimálne hodnoty parametrov aj pre $n=2,3,4$. Zistíte, či dostávate so skoro 100% istotou globálne minimum? Pokúste sa pre tieto viacrozmerné prípady optimalizovať parametre c_0 a P_{mut} tak aby ste s vysokou pravdepodobnosťou dostali globálne minimum. Vyneste do tabuľky (alebo grafu) tieto optimálne hodnoty parametrov c_0 a P_{mut} pre $n=1,2,3,4$, diskutujte túto tabuľku.*

3.2 Horolezecký algoritmus s učením

Horolezecký algoritmus s učením [3-6] patrí medzi jednoduché modifikácie štandardného horolezeckého algoritmu. Táto modifikácia (podobne ako pri metóde zakázaného hľadania) sa dotýka konštrukcie okolia $U(\alpha)$. Pôvodná definícia okolia (3.3) využíva stochastický operátor mutácie O_{mut} , zo "stredy" α sa generujú nové binárne operátory pomocou tohto operátora, pričom pravdepodobnosť zmeny binárnej hodnoty na jej komplement je určená pravdepodobnosťou P_{mut} (pozri (3.2b-

c). V prípade, že pravdepodobnosť mutácie je malá ($P_{mut} \approx 0$), potom nové stavy generované mutačným operátorom sú veľmi blízke pôvodnému stavu α (t.j. stredú okolia $U(\alpha)$). Opačne, ak sa pravdepodobnosť P_{mut} blíži k $1/2$, potom okolie $U(\alpha)$ obsahuje binárne vektory, ktorú sú veľmi vzdialené "stredú" α . Táto jednoduchá úvaha nás vedie k myšlienke konštrukcie okolia tak, že pre každú polohu bitového vektora máme zadanú zvlášť pravdepodobnosť. Zavedieme dva nové koncepty, ktoré zaujímavým spôsobom umožňujú modifikovať horolezecký algoritmus

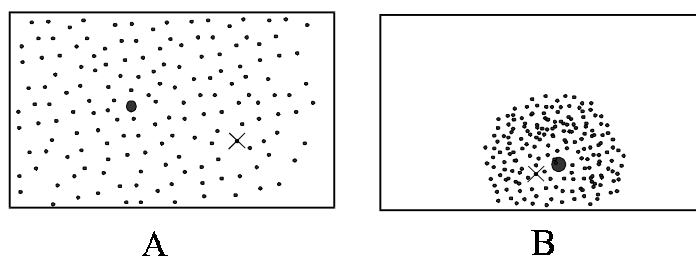
(1) *Pravdepodobnostný vektor* $\mathbf{w}=(w_1, w_2, \dots, w_{kn}) \in [0, 1]^{kn}$. Jednotlivé jeho komponenty $0 \leq w_i \leq 1$ určujú pravdepodobnosti výskytu premennej '1' v danej pozícii. Napr. ak $w_i=0(1)$, potom $\alpha_i=0(1)$, pre $0 < w_i < 1$, potom premenná α_i je náhodne určená vzťahom

$$\alpha_i = \begin{cases} 1 & (\text{ak } random < w_i) \\ 0 & (\text{opačný prípad}) \end{cases} \quad (3.6)$$

kde *random* je náhodné číslo z intervalu $[0, 1)$ s rovnomernou distribúciou. Tento stochastický prístup ku generovaniu bitového vektora α vyjadríme pomocou funkcie $\alpha=R(\mathbf{w})$. Potom, okolie $U(\mathbf{w})$ zostrojené z binárnych vektorov náhodne generovaných vzhľadom k pravdepodobnostnému vektoru \mathbf{w} je určené vzťahom

$$U(\mathbf{w}) = \{\alpha = R(\mathbf{w})\} \quad (3.7)$$

Budeme predpokladať, že kardinalita tohto okolia je konštantná, $c_0 = |U(\mathbf{w})|$. Ak všetky komponenty pravdepodobnostného vektora sú buď blízko nuly alebo jedničky, potom "priemer" okolia $U(\mathbf{w})$ je veľmi malý, každý element takéhoto okolia je tesne vztiahnutý k binárnemu vektoru α , ktorý je jednoznačne určený pravdepodobnostným vektorom \mathbf{w} zaokrúhlením jeho prvkov na 0 alebo 1. V opačnom prípade, ak komponenty pravdepodobnostného vektora sú všetky blízke $1/2$, potom bitové vektory α zostrojené predpisom (3.6) sú rozložené cez celý priestor $\{0, 1\}^{kn}$, pozri obr. 3.3.



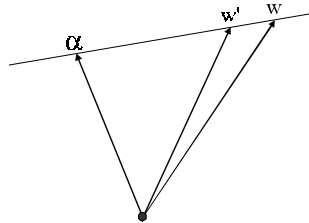
Obrázok 3.3. Schematické znázornenie okolia $U(\mathbf{w})$ pre daný pravdepodobnostný vektor \mathbf{w} . Za predpokladu, že všetky komponenty \mathbf{w} sú blízke $1/2$, potom binárne vektory okolia $U(\mathbf{w})$ sú "rozmiestnené" cez celý priestor binárnych vektorov $\{0, 1\}^{kn}$ (diagram A). V prípade, že komponenty \mathbf{w} sú blízke buď 1 alebo 0, potom binárne vektory okolia $U(\mathbf{w})$ sú rozložené blízko binárneho vektora, ktorý vznikne z \mathbf{w} zaokrúhlením jeho komponent (diagram B).

(2) *Učenie* pravdepodobnostného vektora \mathbf{w} . Nech $B(\mathbf{w})$ je množina s predpísanou kardinalitou $b=|B(\mathbf{w})|$, ktorá obsahuje b najlepších riešení z okolia $U(\mathbf{w})$, formálne

$$B(\mathbf{w}) = \arg \min_b \sum_{\alpha \in U(\mathbf{w})} f(\Gamma(\alpha)) \quad (3.8)$$

Pravdepodobnostný vektor je modifikovaný - učený pomocou Hebbovho pravidla (známeho z teórie neurónových sietí [7])

$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} + \lambda \sum_{\alpha \in B(\mathbf{w})} (\alpha - \mathbf{w}) \quad (3.9)$$



Obrázok 3.4. Geometrická interpretácia Hebbovho učiaceho pravidla (3.9). Nový pravdepodobnostný vektor $\mathbf{w}' = \lambda\alpha + (1-\lambda)\mathbf{w}$ je bližšie položený k najlepšiemu riešeniu α .

kde λ je koeficient učenia (malé kladné číslo) a sumácia beží cez b najlepších riešení z $B(\mathbf{w})$. Pravidlo učenia (3.9) má veľmi jednoduchú geometrickú interpretáciu. Pre jednoduchosť predpokladajme, že množina $B(\mathbf{w})$ obsahuje len jeden element, potom práva strana formuly (3.9) je konvexná kombinácia dvoch vektorov \mathbf{w} a α , môže byť prepísaná do tvaru $\mathbf{w} \leftarrow \lambda\alpha + (1-\lambda)\mathbf{w}$. To znamená, že výsledný vektor tejto konvexnej kombinácie musí ležať na úsečke, ktorá spája "body" \mathbf{w} a α (λ je malé kladné číslo, $0 < \lambda < 1$), pozri obr. 3.4. Učenie (3.9) posunie pravdepodobnostný vektor \mathbf{w} smerom k najlepším riešeniam z množiny $B(\mathbf{w})$.

Oba tieto nové koncepty (pravdepodobnostný vektor a učenie) môžu byť jednoducho inkorporované do štandardného horolezeckého algoritmu. Menovite, miesto náhodnej generácie vektorov okolia pomocou aplikácie mutačného operátora O_{mut} na fixný binárny vektor, teraz vektory okolia sú generované pomocou pravdepodobnostného vektora \mathbf{w} . Navyše, pravdepodobnostný vektor \mathbf{w} je systematicky obnovovaný pomocou Hebbovho učenia, ktoré ho posúva smerom k najlepším riešeniam $B(\mathbf{w})$ z množiny riešení $U(\mathbf{w})$, generovanej pomocou pravdepodobnostného vektora \mathbf{w} , $B(\mathbf{w}) \subset U(\mathbf{w})$, pozri algoritmus 3.4.

Na obr. 3.5 sú znázornené typické priebehy pravdepodobností vzhľadom k počtu iterácií. Vo všeobecnosti možno konštatovať, že hodnoty každej pravdepodobnosti v počiatočnej fáze algoritmu fluktuujú okolo 1/2, potom sa monotónne približujú buď k 0 alebo k 1. Po určitom počte iterácií všetky pravdepodobnosti sú rovné buď 0 alebo 1. V tejto etape už nemá zmysel pokračovať v algoritme a ten môže byť zastavený. Ako dobrú veličinu na postihnutie tejto skutočnosti sa používa parameter usporiadania

$$\chi(\mathbf{w}) = \frac{4}{n} \sum_{i=1}^n (w_i - 0.5)^2 \quad (3.10)$$

Pre počiatočný vektor pravdepodobností $\mathbf{w}^{(0)} = (1/2, 1/2, \dots, 1/2)$ je parameter usporiadania nulový. Pre pravdepodobnostné vektory s komponentmi odlišnými od 1/2 sú hodnoty parametru usporiadania kladné a menšie ako 1. Konečne, ak je

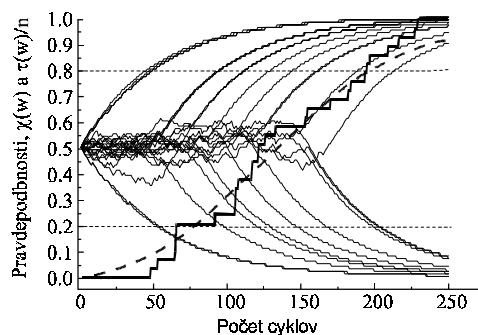
pravdepodobnostný vektor rovný binárnemu vektoru (t.j. jeho komponenty sú buď 0 alebo 1), parameter usporiadania sa rovná 1. Môžeme teda povedať, že ak v priebehu horolezeckého algoritmu je parameter usporiadania väčší než určitá prahová hodnota $1-\varepsilon$ (kde ε je malé kladné číslo), potom metóda je ukončená, pretože rezultujúci binárny vektor určený ako najlepšie riešenie z množiny $B(\mathbf{w})$ sa už nemení (pozri obr. 3.5).

```

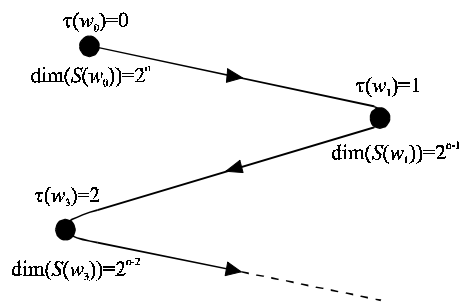
procedure HCwL(input:timemax,c0,b,λ;output:αfin);
begin for i:=1 to n do wi:=0.5;
    time:=0;
    while time<timemax do
    begin time:=time+1;
        B(w):=arg minb f(Γ(a))
            a∈U(w)
        w:=w+λ ∑α∈B(w) (α-w) ;
    end;
    αfin:=best solution of B(w);
end;

```

Algoritmus 3.4. Pseudopascalovská procedúra realizujúca horolezecký algoritmus s učením (HCwL, Hill Climbing with Learning). Algoritmus je inicializovaný tak, že pravdepodobnosti w_i sú rovné $1/2$. Vonkajší while-cyklus sa opakuje $time_{max}$ iterácií. V rámci tohto cyklu sa zostrojí množina $B(\mathbf{w})$ pre aktuálny pravdepodobnostný vektor \mathbf{w} , na základe znalosti tejto množiny sa adaptuje (učí) pravdepodobnostný vektor. Ako konečné (výstupné) riešenie sa berie najlepšie riešenie z množiny $B(\mathbf{w})$ po skončení iteračného procesu.



Obrázok 3.5. Priebeh jednotlivých pravdepodobností vzhľadom k počtu iterácií horolezeckého algoritmu s učením v rámci modelového príkladu optimalizácie reálnej funkcie s jednou reálnou premennou reprezentovanou binárnym reťazcom o dĺžke $k=30$. Prerušovaná sigmoidná čiara odpovedá veličine $\chi(\mathbf{w})$, schodová neprerušovaná čiara odpovedá veličine $\tau(\mathbf{w})/n$, kde n je počet premenných (v našom prípade $n=1$). Funkcie $\chi(\mathbf{w})$ a $\tau(\mathbf{w})$ sú definované vzťahmi (3.10) resp. (3.11), pričom $w_{eff}=0.2$.



$$S = S(w_0) \supset S(w_1) \supset \dots \supset S(w_n)$$

Obrázok 3.6. Schematické znázornenie trajektórie pravdepodobnostných vektorov v horolezeckom algoritme s učením. Body obratu zodpovedajú sekvencii pravdepodobnostných vektorov w_0, w_1, \dots, w_n , kde w_i je pravdepodobnostný vektor v ktorom i komponent je už fixovaných buď na 0 alebo 1. Na začiatku procesu vektor w_0 má všetky komponenty približne rovné $1/2$. To znamená, že odpovedajúci priestor riešení obsahuje všetkých možných 2^n binárnych vektorov dĺžky n , t.j. $S(w_0) = \{0,1\}^n$. Pre prechodný pravdepodobnostný vektor w_i (kde $0 < i < n$), ktorý obsahuje i zafixovaných komponent, dimenzia priestoru riešení je 2^{n-i} , kde exponent $n-i$ je priradený počtu ešte stále neurčených komponent pravdepodobnostného vektora. Symbol $S(w_i)$ označuje podpriestor zložený z vektorov s troma zafixovanými komponentmi, napr. $(\#\#011\#\#\#1\#\#)$, kde i symbolov $\#$ je zamenených buď za 0 alebo za 1, platí $\dim(S(w_i)) = 2^{n-i}$. Konečne, vektor w_n má všetky komponenty zafixované, preto dimenzia priestoru riešení je 1 (obsahuje práve jeden binárny vektor).

Priebeh horolezeckého algoritmu s učením a jeho interpretáciu podstatne uľahčuje tzv. *parameter nasýtenia*

$$\tau(\mathbf{w}) = \text{počet komponent } w_i \text{ pravdepodobnostného vektora } \mathbf{w}, \quad (3.11)$$

ktoré sú menšie ako w_{eff} alebo ak $(1 - w_{\text{eff}})$

kde w_{eff} je malé kladné číslo (napr. $w_{\text{eff}} = 0.2$). Na začiatku algoritmu všetky komponenty pravdepodobnostného vektora ležia v blízkosti $1/2$, preto hodnota parametru nasýtenia je $\tau(\mathbf{w}) = 0$. V priebehu histórie algoritmu sa tento parameter skokovo zvyšuje, na záver histórie algoritmu sa parameter nasýtenia rovná počtu komponent pravdepodobnostného vektora, $\tau(\mathbf{w}) = n$ (pozri obr. 3.5 a 3.6). Táto podmienka tiež môže byť uvažovaná ako alternatívne kritérium pre ukončenie horolezeckého algoritmu s učením.

Príklad 3.6. Napíšte program pre horolezecký algoritmus s učením (pozri algoritmus 3.4) pre hľadanie minima funkcie n -premenných, kde vektor premenných je reprezentovaný binárnym vektorom dĺžky kn . Vykonajte optimalizáciu parametrov time_{max} , c_0 , b a λ tak, aby pre danú funkciu $f(\mathbf{x})$ bola 95% pravdepodobnosť získania globálneho minima. Pomocou programu zreprodukuje obr. 1.14, kde sú vynesené pravdepodobnosti vs. počet iteračných krokov. Experimentujte s funkciami $\chi(\mathbf{w})$ a $\tau(\mathbf{w})$, ktoré sú definované vzťahmi (3.10) resp. (3.11), pre určenie vhodného kritéria na zastavenie metódy. Vykreslite priebehy týchto funkcií vs. počet iterácií.

3.3 Metóda zakázaného hľadania (tabu search)

Metóda *zakázaného hľadania (tabu search)* bola navrhnutá koncom 80-tých rokov Gloverom [8,9] ako určité zovšeobecnenie horolezeckého algoritmu pre riešenie zložitých optimalizačných úloh menovite z operačného výskumu. Základná myšlienka tohto prístupu je neobyčajne jednoduchá. Vychádza z horolezeckého algoritmu, kde sa pre dané aktuálne riešenie generuje pomocou konečnej množiny transformácií určité okolie a funkcia sa minimalizuje v tomto okolí. Získané lokálne riešenie sa použije ako "stred" nového okolia, v ktorom sa lokálna optimalizácia opakuje; tento proces sa opakuje predpísaný počet-krát. V priebehu celej histórie algoritmu sa zaznamenáva najlepšie riešenie, ktoré slúži ako výsledné optimálne riešenie. Základnou nevýhodou tohto algoritmu je, že sa po určitom počte iteračných krokov vracia k lokálnemu optimálnemu riešeniu, ktoré sa vyskytlo už v jeho predchádzajúcom priebehu (problém zacyklenia). Glover navrhol jednoduchú heuristiku ako odstrániť tento problém. Do horolezeckého algoritmu je zavedená tzv. *krátkodobá pamäť*, ktorá si pre určitý krátky interval predchádzajúcej histórie algoritmu pamätá inverzné transformácie k tým transformáciám riešení, ktoré poskytovali lokálne optimálne riešenia. Tieto inverzné transformácie sú zakázané (tabu) pri tvorbe nového okolia pre dané aktuálne riešenie. Týmto jednoduchým spôsobom je možné podstatne obmedziť výskyt zacyklenia. Takto modifikovaný horolezecký algoritmus systematicky prehľadáva celú oblasť riešení, v ktorej hľadáme globálne minimum funkcie.

Glover [8,9] navrhol ďalšie metódy intenzifikácie a diverzifikácie metódy zakázaného hľadania, menovite prístup tzv. dlhodobej pamäti, v ktorom sa pokutujú (znevýhodňujú) tie transformácie, ktoré síce nepatria do krátkodobej pamäti, ale často sa vyskytovali v predchádzajúcej histórii algoritmu. Glover a Laguna v knihe [10] naznačuje teoretické základy metódy. Avšak ich argumenty sú prezentované vo veľmi vágnej a všeobecnej rovine. Možno konštatovať, že táto metóda v súčasnosti ešte nemá solídne teoretické základy, ktoré by dávali odpoveď na dôležité otázky, za akých podmienok môže poskytovať riešenie, ktoré je totožné s globálnym alebo mu je veľmi blízke. Preto je snáď lepšie hovoriť o heuristike zakázaného hľadania a nie o metóde zakázaného hľadania. Ide totiž viac o súbor algoritmických trikov a heuristík, než o metódu so solídnym teoretickým základom. Súčasne však musíme konštatovať, že patrí medzi numericky veľmi efektívne metódy riešenia globálnej optimalizácie na diskretných oblastiach, výsledky poskytuje za zlomok času potrebného pri použití buď presných metód (typu napr. spätného prehľadávania - backtracking [11]) alebo stochastických optimalizačných metód. Práve v tomto nesúlade medzi neexistujúcim teoretickým základom a vysokou numerickou efektívnosťou vidíme "krásu" tejto metódy, v jej neobyčajnej flexibilitosti pri modifikovaní pre daný problém.

Definujme si množinu prípustných transformácií

$$S = \{t_1, t_2, \dots, t_p\} \quad (3.12)$$

Transformácia $t \in S$ zobrazuje binárny vektor $\alpha \in \{0,1\}^{kn}$ na iný binárny vektor $\alpha' \in \{0,1\}^{kn}$

$$t: \{0,1\}^{kn} \rightarrow \{0,1\}^{kn} \quad (3.13a)$$

pre $\forall t \in S$. Jednoduchá realizácia týchto transformácií je

$$t_i(\dots\alpha_i\dots) = (\dots 1 - \alpha_i \dots) \quad (3.13b)$$

pre $i=1,2,\dots,p=kn$. Operátor t_i zmení v i -tej polohe binárnu hodnotu na jej komplement. Vo všeobecnosti, transformácie z S sú ohraničené nasledujúcimi podmienkami:

- (1) Nech $t_1, t_2 \in S$ sú dve rôzne transformácie, $t_1 \neq t_2$, potom pre $\forall \alpha \in \{0,1\}^{kn}$ platí $t_1\alpha \neq t_2\alpha$.
- (2) Pre každú transformáciu $t \in S$ existuje taká transformácia $t^{-1} \in S$, ktorá je inverzná k t , $tt^{-1}\alpha = t^{-1}t\alpha = \alpha$, pre $\forall \alpha \in \{0,1\}^{kn}$.
- (3) Pre každú dvojicu $\alpha_1, \alpha_2 \in \{0,1\}^{kn}$ rôznych binárnych vektorov, $\alpha_1 \neq \alpha_2$, existuje taká postupnosť transformácií $t_{i_1}, t_{i_2}, \dots, t_{i_n} \in S$, že "východzí" vektor α_1 je postupne pretransformovaný na "konečný" vektor α_2

$$\alpha_1 = \beta'_1 \xrightarrow{t_{i_1}} \beta'_2 \xrightarrow{t_{i_2}} \dots \xrightarrow{t_{i_n}} \alpha_2 = \beta'_n \quad (3.14)$$

Okolie $U(\alpha)$ obsahuje obrazy α vytvorené transformáciami $t \in S$

$$U(\alpha) = \{t\alpha; \forall t \in S\} \quad (3.15)$$

Pôvodný horolezecký algoritmus bude teraz modifikovaný tak, že namiesto okolia (3.3) generovaného náhodne pomocou stochastického operátora mutácie, použijeme deterministicky definované okolie (3.15), generované pomocou prípustných transformácií z množiny S . Hlavné obmedzenie tejto jednoduchšej modifikácie horolezeckého algoritmu je, že po určitom počte iteračných krokov sa výsledné riešenia začnú cyklicky opakovať. Po konečnom počte krokov sa tento algoritmus vráti k riešeniu, ktoré sa už vyskytovalo ako lokálne riešenie v predchádzajúcom iteračnom kroku, pričom najlepšie zaznamenané riešenie je obvykle vzdialené od globálneho riešenia.

Metóda zakázaného hľadania [8,9] využíva jednoduchú heuristiku, ako pokračovať v hľadaní globálneho minima bez možnosti návratu do lokálneho minima, ktoré už bolo zaznamenané v predchádzajúcej histórii algoritmu. Hlavná myšlienka tejto heuristiky je *zakázaný zoznam* T (tabu list), majúci vlastnosť krátkodobej pamäti, ktorý dočasne obsahuje inverzné transformácie k použitým transformáciám v predchádzajúcich iteráciách. Zakázaný zoznam transformácií $T \subseteq S$, maximálnej kardinality s , $0 \leq |T| \leq s$, je zostrojený a systematicky obnovovaný v priebehu celého algoritmu. Ak transformácia t patrí pre danú iteráciu do zakázaného zoznamu, $t \in T$, potom sa nemôže používať v lokálnej minimalizácii v rámci okolia aktuálneho riešenia α . Pri inicializácii algoritmu je zakázaný zoznam prázdny, po každej iterácii sa do zakázaného zoznamu dodá transformácia, ktorá poskytla lokálne optimálne riešenie zostrojené z riešenia z predchádzajúcej iterácie. Po s iteráciách zakázaný zoznam už obsahuje s transformácií, zo zakázaného zoznamu sa vylúči transformácia, ktorá tam bola dodaná pred s iteráciami. To znamená, že po naplnení zakázaného zoznamu (t.j. po s iteráciách), každé dodanie novej transformácie je súčasne doprevádzané vylúčením "najstaršej" transformácie (dodanej práve pred s iteráciami), hovoríme, že zakázaný zoznam sa cyklicky obnovuje

$$T := \begin{cases} T \cup \{t^{*-1}\} & (\text{pre } |T| < s) \\ (T \cup \{t^{*-1}\}) \setminus \hat{t} & (\text{pre } |T| = s) \end{cases} \quad (3.16)$$

kde t^* je transformácia, ktorá vytvára lokálne minimálne riešenie, $\alpha^*=t^* \alpha$, a \hat{t} je "najstaršia" transformácia zavedená do zakázaného zoznamu práve pred s iteráciami.

Numerické skúsenosti s algoritmom zakázaného hľadania ukazujú, že veľkosť s zakázaného zoznamu je veľmi dôležitým parametrom pre prehľadávanie oblasti $\{0,1\}^{kn}$ s možnosťou vymaniť sa z lokálnych miním. Ak je parameter s malý, potom sa môže vyskytovať zacyklenie algoritmu, podobne ako pri klasickom horolezeckom algoritme s okolím zostrojeným podľa (3.3). Zacyklenie sa síce neopakuje v susedných dvoch krokoch, no riešenie sa môže opakovať po viacerých krokoch. V prípade, že parameter s je veľký, potom pri prehľadávaní oblasti $\{0,1\}^{kn}$ s veľkou pravdepodobnosťou "preskočíme" hlboké údolia minimalizovanej funkcie $f(\alpha)$, t.j. vynecháme nádejné lokálne minima, ktoré môžu byť globálnymi minimami.

Zakázaný zoznam T sa používa pre konštrukciu modifikovaného okolia $U_T(\alpha)$

$$U_T(\alpha) = \{\alpha'; \forall t \in S \setminus T: \alpha' = t\alpha\} \quad (3.17)$$

ktorého kardinalita je $p-s \leq |U_T(\alpha)| \leq p$, pričom $U_T(\alpha) = U(\alpha)$, pre $T = \emptyset$. Toto okolie obsahuje vektory $\alpha' \in \{0,1\}^{kn}$, ktoré sú vytvorené použitím transformácií z množiny S nepatriacich do zakázaného zoznamu T . Lokálna minimalizácia sa vykonáva v modifikovanom okolí $U_T(\alpha)$ s výnimkou tzv. *aspiračného kritéria*. Toto kritérium porušuje reštrikciu zakázaného zoznamu vtedy, ak existuje taká transformácia $t \in S$, že vektor $\alpha' = t\alpha$ poskytuje nižšiu funkčnú hodnotu, ako dočasne najlepšie riešenie. Pascalovský pseudokód metódy zakázaného hľadania je prezentovaný v algoritme 3.5. a jeho diagramatická vizualizácia je znázornená na obr. 3.7.

Ako už bolo povedané, algoritmus zakázaného hľadania je veľmi podobný horolezeckému algoritmu. V zakázanom hľadaní okolie riešenia nie je zostrojené stochastickým spôsobom, ako v hore uvedenej verzii horolezeckého algoritmu pomocou operátora mutácia O_{mut} , ale systematickým deterministickým spôsobom pomocou prípustných transformácií z množiny S . Takto realizovaný horolezecký algoritmus má jedno vážne ohraničenie, a to cyklický výskyt riešení po určitom počte iteračných krokov. Základná myšlienka algoritmu zakázaného hľadania na odstránenie tohto problému zacyklenia je zavedenie tzv. zakázaného zoznamu, ktorý obsahuje určitý počet inverzných transformácií k tým transformáciám, ktoré boli použité v predchádzajúcej krátkej histórii algoritmu. Tento zoznam sa cyklicky obnovuje tak, že pri zavedení inverznej transformácie z aktuálneho iteračného kroku sa z neho odstráni tiež "najstaršia" inverzná transformácia. Tento jednoduchý algoritmický trik odstraňuje spoľahlivo problém zacyklenia horolezeckého algoritmu s deterministickým generovaním okolia pomocou množiny prípustných transformácií.

```

procedure Tabu_Search(input:timemax,s ; output: ffin,αfin);
begin α:=randomly generated binary vector of the length kn;
    ffin: =∞; time:=0; T:=∅;
    while t<timemax do
        begin time:=time+1; ffin-loc: =∞;
            for t∈S do
                begin α': =tα;
                    if (t∉T and f(Γ(α'))<ffin-loc) or
                        (f(Γ(α'))<ffin) then
                        begin α*:=α'; t*:=t; ffin-loc:=f(Γ(α')) end;
                    end;
                if ffin-loc<ffin then
                    begin ffin:=ffin-loc; αfin:=α* end;
                α:=α*;
                if |T|<s then T:=T∪{t*-1} else T:=(T∪{t*-1})\{t̂};
            end;
        end;
end;

```

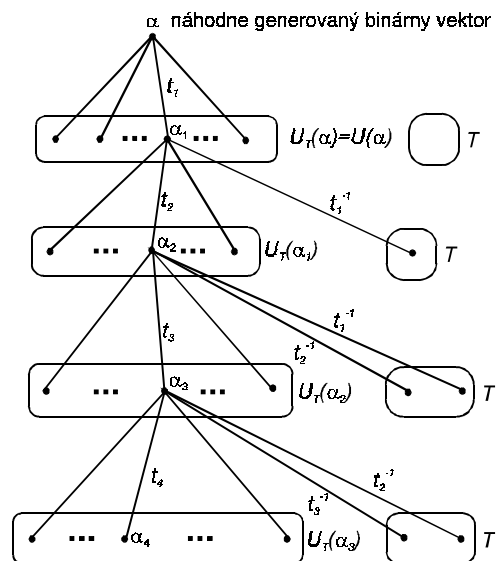
Algoritmus 3.5. Pseudopascalovská procedúra pre metódu zakázaného hľadania. Vstupnými parametrami sú $time_{max}$ a s , ktoré určujú maximálny počet iteračných krokov resp. veľkosť zakázaného zoznamu T . Procedúra obsahuje dva cykly: vonkajší while-cyklus realizuje iteračné kroky zakázaného hľadania, zatiaľ čo vnútorný for-cyklus slúži pre konštrukciu okolia $U(\alpha)$. Poznamenajme, že toto okolie nie je explicitne zostrojené, generujú sa len jeho elementy a tie sa hneď testujú, či ich funkčná hodnota nie je menšia ako lokálne najlepšia funkčná hodnota $f_{fin-loc}$. Vonkajší cyklus je ukončený operáciou obnovy zakázaného zoznamu.

Možnosti ďalšej sofistikácie metódy zakázaného hľadania sú široko diskutované v literatúre [8-10]. Prístup založený na koncepcii dlhodobej pamäti patrí medzi základné prostriedky intenzifikácie a diverzifikácie metódy zakázaného hľadania. Využíva možnosť odmietnutia (pomocou pokutovania) transformácií, ktoré sa v predchádzajúcej histórii algoritmu vyskytujú najčastejšie (tzv. dlhodobá pamäť). Hľadanie lokálneho minima v modifikovanom okolí $U_T(\alpha)$ je v tomto prístupe založené nielen na zmenách funkcie $f(\alpha)$, ale tiež aj na predchádzajúcej histórii algoritmu. Jednoduchá realizácia tejto všeobecnej idey je použitie frekvencií transformácií $\omega(t)$. Pri inicializácii algoritmu sú tieto frekvencie nulové, potom v každom iteračnom kroku s výslednou transformáciou t^* je odpovedajúca frekvencia zvýšená o jednotku, $\omega(t^*) \leftarrow \omega(t^*) + 1$. Po predpísanom počte krokov (obvykle rádovo väčšom ako veľkosť zakázaného zoznamu T), tieto frekvencie určujú, ako často boli jednotlivé transformácie z S použité v lokálnej minimalizácii. Frekvencie sa používajú ako pokutové funkcie pri hľadaní minima v okolí $U_T(\alpha)$. Vektor $\alpha' = t\alpha \in U_T(\alpha)$, kde $t \in S \setminus T$, je akceptovaný ako dočasne najlepšie riešenie ak je splnená nasledujúca podmienka

$$f(\alpha') + \chi\omega(t) < f(\alpha^*) \quad (3.18)$$

kde χ je empiricky určená malá kladná pokutová konštanta. Najčastejšie používané transformácie sú pokutované v dôsledku vysokých hodnôt frekvencií. Prístup dlhodobej pamäti dáva šancu aj iným transformáciám než tým, ktoré aj keď poskytujú

lokálne nižšiu funkčnú hodnotu $f(\alpha')$, sú v dôsledku ich frekventovaného výskytu v predchádzajúcej dlhodobej histórii algoritmu pokutované.



Obrázok 3.7. Diagramatická vizualizácia metódy zakázaného hľadania pre veľkosť zakázaného zoznamu $s=2$. Metóda je inicializovaná náhodne generovaným vektorom α . Pomocou transformácií t z množiny prípustných transformácií S je zostrojené prvé okolie $U(\alpha)$. Najlepšie riešenie z tohto okolia je označené α_1 , v nasledujúcom iteračnom kroku je toto riešenie použité ako "stred" pre konštrukciu nového okolia. Inverzná transformácia t_1^{-1} je zavedená do zakázaného zoznamu T , ktorý bol pôvodne prázdny. Menšie bloky v pravom stĺpci odpovedajú zakázaným zoznamom pre jednotlivé iteračné kroky.

Príklad 3.7. Napíšte program pre metódu zakázaného hľadania (pozri algoritmus 1.6). Nech je program určený pre hľadanie minima n -rozmernej funkcie (napr. špecifikovanej v príklade 1.8), pričom kódovanie binárnej reprezentácie nech je štandardné a podľa Graya. Transformačné operátory t z množiny S sú špecifikované vzťahmi (1.30a-b). Keď minimalizovaná funkcia obsahuje n premenných a každá premenná je reprezentovaná binárnym reťazcom dĺžky k , potom binárna reprezentácia vektora premenných má dĺžku kn , čo nám tiež určuje aj počet transformácií v množine S .

3.4 Evolučné programovanie

Evolučné programovanie [12] patrí medzi tie stochastické optimalizačné algoritmy, ktoré môže byť chápané ako jednoduché zovšeobecnenie horolezeckého algoritmu. V tejto kapitole budeme prezentovať zjednodušenú verziu evolučného programovania, ktorá ovšem pokrýva dostatočne všeobecne vlastnosti tejto metódy.

Základná úloha je riešiť nasledujúci optimalizačný problém

$$\alpha_{opt} = \arg \min_{\alpha \in \{0,1\}^k} f(\alpha) \quad (3.19)$$

kde $f: \{0,1\}^k \rightarrow R$ je funkcia, ktorá zobrazuje binárne vektory dĺžky k na reálne čísla. Nech P je množina - populácia riešení tvaru

$$P = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p\} \subseteq \{0,1\}^k \quad (3.20)$$

Každý element α populácie z populácie P je ohodnotený funkčnou hodnotou $f(\alpha)$. Z populácie P vyberieme podmnožninu - podpopuláciu rodičov $Q \subseteq P$, ktorej kardinalita je menšia alebo nanajvýš rovná kardinalite pôvodnej populácie P , $|Q| \leq |P|$. Riešenia z podpopulácie Q sú transformované mutačným operátorom O_{mut} (pozri (1.19)) na podpopuláciu potomkov

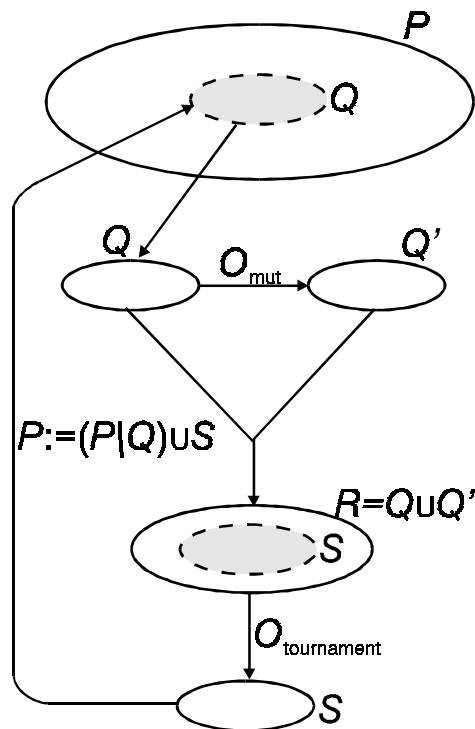
$$Q' = \{\alpha' = O_{mut}(\alpha); \alpha \in Q\} \quad (3.21)$$

pričom kardinality Q a Q' sú rovnaké, $|Q|=|Q'|$. Potomkovia z podpopulácie Q' sú ohodnotený funkčnými hodnotami $f(\alpha)$. Podpopulácie Q a Q' sú zjednotený do spoločnej množiny obsahujúcej všetkých rodičov a ich potomkov

$$R = Q \cup Q' \quad (3.22)$$

Z tejto zjednotenej podpopulácie vytvoríme novú podpopuláciu nasledovníkov S , pričom $|S|=|Q|=|Q'|$. Tento výber sa realizuje pomocou operátora "turnaja" $O_{tournament}$

$$S = O_{tournament}(R) \quad (3.23)$$



Obrázek 3.8. Schématické znázornenie evolučného programovania. Z populácie P je náhodne vybraná podpopulácia rodičov Q , ktorá je upravená pomocou operátora mutácie na podpopulácie potomkov Q' . Z týchto dvoch podpopulácií je vytvorená zjednotená podpopulácia R . Aplikovaním turnaja na túto podpopuláciu R dostaneme podpopuláciu následovníkov S . Podpopulácia následovníkov sa vracia do pôvodnej populácie P tak, že pôvodná rodičovská podpopulácia Q je vyleminovaná.

```

procedure Tournament(input R; output S);
begin S:=∅;
      while |R|>0 do
      begin select randomly from R two
            solutions  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$ ;
            R:=R\{\mathbf{\alpha}_1 , \mathbf{\alpha}_2\};
            if f( $\alpha_1$ )<f( $\alpha_2$ )then S:=S∪{\mathbf{\alpha}_1} else
                                     S:=S∪{\mathbf{\alpha}_2};
      end;
end;

```

Algoritmus 3.6. Implementácia turnaja pre výber nasledovníkov zo zjednotenej podpopulácie rodičov a potomkov. tento jednoduchý "párový turnaj" môže byť ľahko zovšeobecnený tak, že predpísaný počet krát náhodne vyberáme dvojice riešení a usporiadame medzi nimi "párový" turnaj, víťazovi zvýšime o jednotku skóre víťazstva. Potom množina nasledovníkov S je vytvorená z prvých |Q| riešení, ktoré majú najvyššie skóre.

Niekoľko poznámok k realizácii tohto operátora. Najjednoduchší prístup spočíva v usporiadaní elementov R podľa rastúcich funkčných hodnôt $f(\alpha)$, potom S je tvorená prvými |Q| elementami takto usporiadanej množiny R. Iný prístup je ten, že pre |Q| náhodne vybraných dvojíc $\alpha_1, \alpha_2 \in R$ sa realizuje malý "turnaj", ak platí $f(\alpha_1) < f(\alpha_2)$, potom riešenie α_1 sa presunie do množiny S, pozri algoritmus 3.6.

```

procedure Evolutionary_Programming(output:  $\alpha_{opt}$ );
begin P:=randomly generated population of chromosomes;
      stop_criterion:=false;
      while not stop_criterion do
      begin Q:=randomly selected subpopulation of P;
            Q':=Omut(Q); R:=Q∪Q'; S:=Otournament(R);
            P:=(P\Q)∪S;
            if convergence criteria are fulfilled then
                stop_criterion:=true;
      end;
       $\alpha_{opt} = \arg \min_{\alpha \in P} f(\alpha)$ ;
end;

```

Algoritmus 3.7. Implementácia evolučného programovania. Metóda je inicializovaná náhodným generovaním populácie P. While-cyklus sa opakuje tak dlho, pokiaľ neplatia podmienky konvergenencie (napr. populácia je dostatočne homogénna). Výsledné riešenie α_{opt} je určité ako najlepšie riešenie z výslednej populácie P.

Poznajúc množinu S nasledovníkov, obnovíme populáciu P takto

$$P \leftarrow (P \setminus Q) \cup S \quad (3.24)$$

to znamená, že v populácii P je množina rodičov Q nahradená množinou nasledovníkov S. Týmto je metóda evolučného programovania plne určená, pozri algoritmus 3.7 a obr. 3.8.

Príklad 3.8. *Napište program pre evolučné programovanie (pozri algoritmy 3.6 a 3.7). Program nech je určený pre optimalizáciu reálnej funkcie n -premenných, pričom premenné sú reprezentované binárnym reťazcom dĺžky k . Porovnajte efektívnosť programu s podobnými programami pre horolezecký algoritmus a metódu zakázaného hľadania.*

Literatura

- [1] B. Char, K.O. Geddes, G.H. Gonnet, B.L. Leong, M.B. Monagan, S. Watt: Maple V. Springer Verlag, Berlin 1992.
- [2] S. Wolfram: Mathematica. A System for Doing Mathematics by Computers. Addison Wesley, Reading, MA 1993.
- [3] S. Bajula: Population-Based Incremental Learning. A Method for Integrating Genetic Search Based Function Optimization and Competitive Learning. Technical Report CMU-CS-94-163. School of Computer Science, Carnegie Mellon University, Pittsburgh
- [4] S. Baluja and R. Caruana: Removing the Genetics from the Standard Genetic Algorithm. Technical Report CMU-CS-95-141. School of Computer Science, Carnegie Mellon University, Pittsburgh 1995 (preprinty referencii 3 a 4 su dostupne na anonymnom ftp serveri `reports.adm.cs.cmu.edu/usr/anon`).
- [5] V. Kvasnička, J. Pospíchal, and M. Pelikán: Hill Climbing with Learning (An Abstraction of Genetic Algorithm). Proceedings of Mendel'95, First International Conference on Genetic Algorithms, Brno, September 26-28, 1995, pp.65-70.
- [6] V. Kvasnička, J. Pospíchal, and M. Pelikán: Hill climbing with learning (an abstraction of genetic algorithm). Neural Network World 6(1996), 773.
- [7] V. Kvasnička, Ľ. Beňušková, J. Pospíchal, I. Farkaš, P. Tiňo, A. Král: Úvod do teórie neurónových sietí. IRIS, Bratislava, 1997.
- [8] F. Glover: Tabu Search - Part I. ORSA Journal of Operations Research, 1(1989),190.
- [9] F. Glover: Tabu Search - Part II. ORSA Journal of Operations Research, 2(1990),4.
- [10] F. Glover and M. Laguna: Tabu Search. Kluwer Academic Publishers, Dordrech, The Netherlands, 1997.
- [11] L. Kučera: Kombinatorické algoritmy. SNTL, Praha 1983.
- [12] D.B. Fogel: Evolutionary Computation. Toward a new Philosophy of Machine Intelligence. IEEE Press, New York 1995.