# Algoritmi de căutare locală și globală

- Motivație: optimizare locală vs. optimizare globală
- Structura generală a algoritmilor de optimizare locală
- Metaeuristici deterministe pentru căutare locală:
  - alg Pattern Search
  - alg Nelder Mead
- Metaeuristici aleatoare pentru căutare locală:
  - alg Matyas, Solis-Wets
- Metaeuristici pentru căutare globală:
  - Căutare locală cu restartare
  - Căutare locală iterată
  - Simulated Annealing

# Optimizare locală vs. optimizare globală

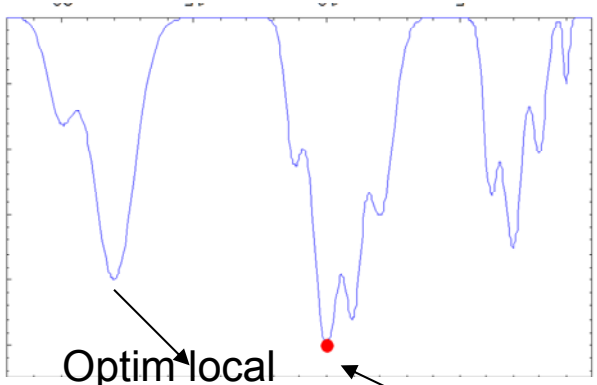
Optimizare locală: f(x*)<=f(x) pentru orice x in V(x*)

(V(x*)=vecinătate a lui x);

Obs: e necesară cunoașterea unei aproximații inițiale

Optimizare globală:

- identificarea optimului global al unei funcții: pentru o problemă de minimizare se caută x* cu proprietatea că f(x*)<=f(x), pentru orice x
- daca funcția obiectiv are și optime locale atunci metodele de căutare locală (cum este metoda gradientului) se pot bloca în punctele de optim local



# Optimizare locală

Spațiu de căutare discret:

- Vecinătatea unui element este o mulțime finită care poate fi explorată exhaustiv

Caz particular (soluții de tip permutare):

- $s=(s_1,s_2,...,s_n)$ $s_i$ din {1,....,n}
- V(s)={s'|s' poate fi obținută din s prin interschimbarea a două elemente}
- Card V(s)=n(n-1)/2

Exemplu (n=4)

s=(2,4,1,3)

s'=(1,4,2,3)

Spațiu de căutare continuu:

a) funcția obiectiv este derivabilă

- Metoda gradientului
- Metode de tip Newton

b) funcția obiectiv nu este derivabilă

- Metode bazate pe căutare directă (ex: Nelder Mead)
- Metode bazate pe perturbații aleatoare mici

# Căutare locală: structura generală

Notații:

S – spațiul de căutare

f – funcție obiectiv

$S_*$ - mulțimea optimelor locale/globale

$s=(s_1,s_2,..., s_n)$ : element din S/ configurație/ soluție candidat

$s_*$ = cel mai bun element descoperit până în etapa curentă

s* = soluție optimă

Algoritm de căutare locală:

s = aproximație inițială
repeat
  s'=perturbare(s)
  if f(s')<f(s) then
    s=s'
until <condiție de oprire>

Observații:

1. Aproximația inițială poate fi selectată aleator sau în baza unei euristici
2. Perturbarea poate fi deterministă (ex: metoda gradientului) sau aleatoare
3. Inlocuirea lui s cu s' se poate face și când f(s')<=f(s)
4. Condiția de oprire:
   (a) nu se mai obține îmbunătățire in estimarea soluției;
   (b) s-a atins numărul maxim de iterații (sau de evaluări ale funcției obiectiv)

# Căutare locală: variante (I)

Algoritm de căutare locală:

```
s = aproximație inițială
repeat
   s'=perturbare(s)
   if f(s')<f(s) then
      s=s'
until <condiție de oprire>
```

Mai mulți candidați:

```
s = aproximație inițială
repeat
   [s1,…, sm]=perturbareMultipla(s)
   s'=bestOf([s1,…, sm])
   if f(s')<f(s) then
      s=s'
until < condiție de oprire >
```

Observații:

1. căutarea e mai „agresivă" – la fiecare iterație se analizează mai mulți candidați dintre care se alege cel mai bun
2. fiecare evaluare a funcției obiectiv trebuie contorizată (dacă condiția de oprire folosește nr de evaluări)

# Căutare locală: variante (II)

Algoritm de căutare locală:

```
s = aproximație inițială
repeat
   s'=perturbare(s)
   if f(s')<f(s) then
      s=s'
until <condiție de oprire>
```

More candidates:

```
s = aproximatie initiala
best = s
repeat
   [s1,…, sm]=perturbareMultipla(s)
   s=bestOf([s1,…, sm])
   if f(s)<f(best) then best=s
until < condiție de oprire >
```

Observații:

1. Cea mai bună dintre cele m soluții candidat este acceptată necondiționat
2. Cea mai bună soluție candidat obținută până în momentul curent al căutării este reținută (se asigură proprietatea de elitism = nu se pierde o soluție candidat bună)

# Căutare locală: variante de perturbare

- Scopul perturbării: construirea unei noi soluții candidat pornind de la soluția curentă

- Tipuri de perturbare (în funcție de natura perturbării):
  - Deterministă
  - Aleatoare

- Tipuri de perturbare (în funcție de intensitatea perturbării)
  - Locală
  - Globală

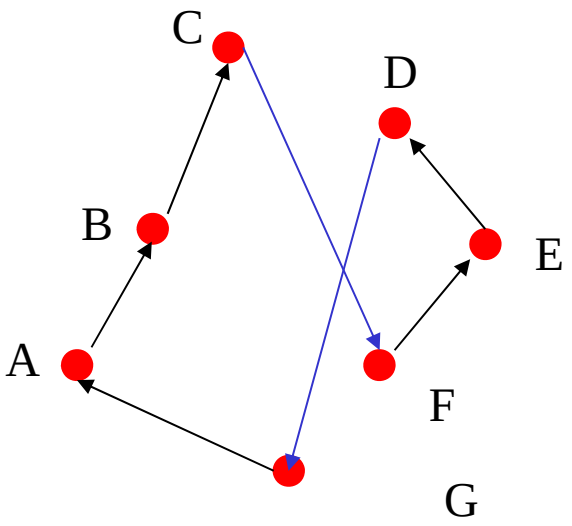
- Tipuri de perturbare (în funcție de spațiul de căutare)
  - Specifică spațiilor discrete de căutare (înlocuirea uneia sau a mai multor componente)
  - Specifică spațiilor continue de căutare (adăugarea unui termen perturbator)

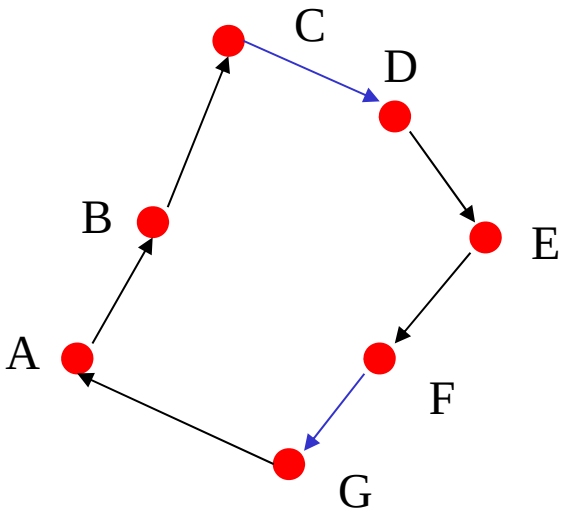
# Căutare locală: variante de perturbare

Probleme de optimizare combinatorială: noua configurație se alege în vecinătatea celei curente prin aplicarea unor transformări specifice problemei de rezolvat

Exemplu 1: TSP (Travelling Salesman Problem)

- Generarea unei noi configurații (transformare 2-opt)




Implementare:

1. Se aleg aleator două poziții
2. Se inversează ordinea elementelor din subtabloul delimitat de cele două poziții

ABCFEDG → ABCFEDG → ABCDEFG

# Căutare locală: variante de perturbare

Probleme de optimizare combinatorială: noua configurație se alege în vecinătatea celei curente prin aplicarea unor transformări specifice problemei de rezolvat

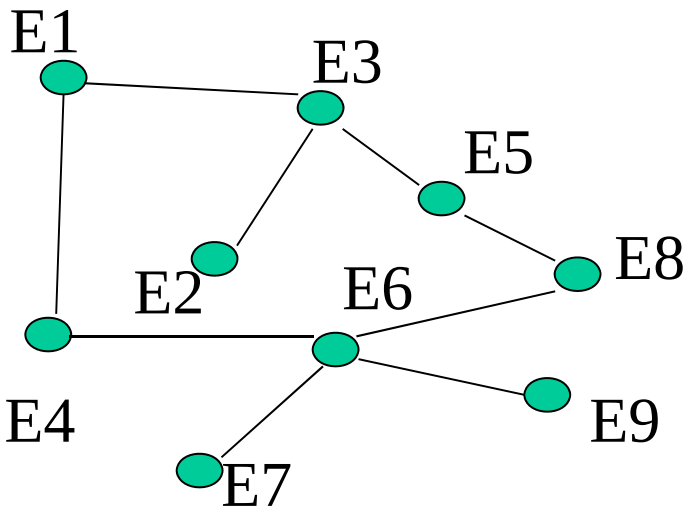
Exemplu 2: Generarea orarelor

- Eliminarea conflictelor prin mutare sau interschimbare

- Perturbarea unei configurații curente:
  - Transferul unui eveniment ce încalcă o restricție puternică într-o zonă liberă

| | S1 | S2 | S3 |
|---|---|---|---|
| T1 | E1 | E3 | E9 |
| T2 | E4 | | E8 |
| T3 | E6 | E5 | |
| T4 | E2 | | E7 |

| | S1 | S2 | S3 |
|---|---|---|---|
| T1 | E1 | | E9 |
| T2 | E4 | E3 | E8 |
| T3 | E6 | E5 | |
| T4 | E2 | | E7 |




Graful conflictelor

# Căutare locală: variante de perturbare

Probleme de optimizare combinatorială: noua configurație se alege în vecinătatea celei curente prin aplicarea unor transformări specifice problemei de rezolvat

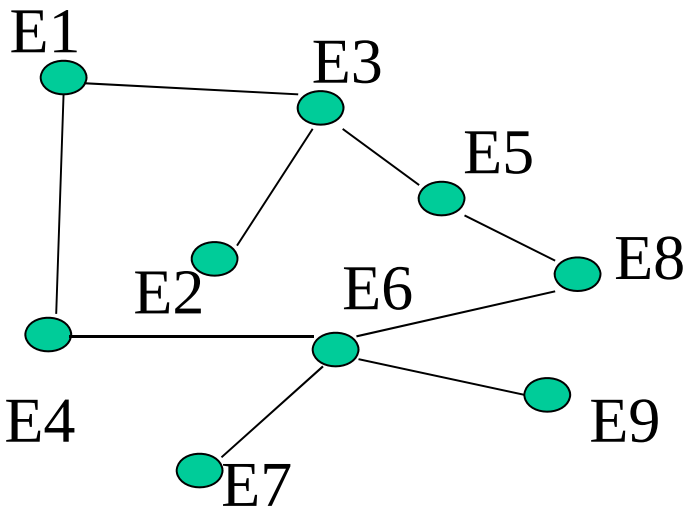
Exemplu 2: Generarea orarelor

- Eliminarea conflictelor prin mutare sau interschimbare

- Perturbarea unei configurații curente:
  - Interschimbarea a două evenimente

| | S1 | S2 | S3 |
|---|---|---|---|
| T1 | E1 | | E9 |
| T2 | E4 | E3 | E8 |
| T3 | E2 | E5 | |
| T4 | E6 | | E7 |

| | S1 | S2 | S3 |
|---|---|---|---|
| T1 | E1 | | E9 |
| T2 | E4 | E3 | E8 |
| T3 | E6 | E5 | |
| T4 | E2 | | E7 |




Graful conflictelor

# Căutare locală: variante de perturbare

Optimizare în domenii continue

Perturbare aleatoare

```
Perturb(s,p,inf,sup,r)
  for i=1:n
    if rand(0,1)<=p then
      repeat
        n=rand(-r,r)
      until inf<=s_i+n<=sup
      s_i=s_i+n
    end
  end
  return s
```

Perturbare deterministă prin căutare directă (nu se folosesc derivate)

- Pattern Search (Hooke -Jeeves)
- Nelder - Mead

Notații:

s=soluția candidat ce va fi perturbată (vector cu n componente)

p=probabilitate de perturbare

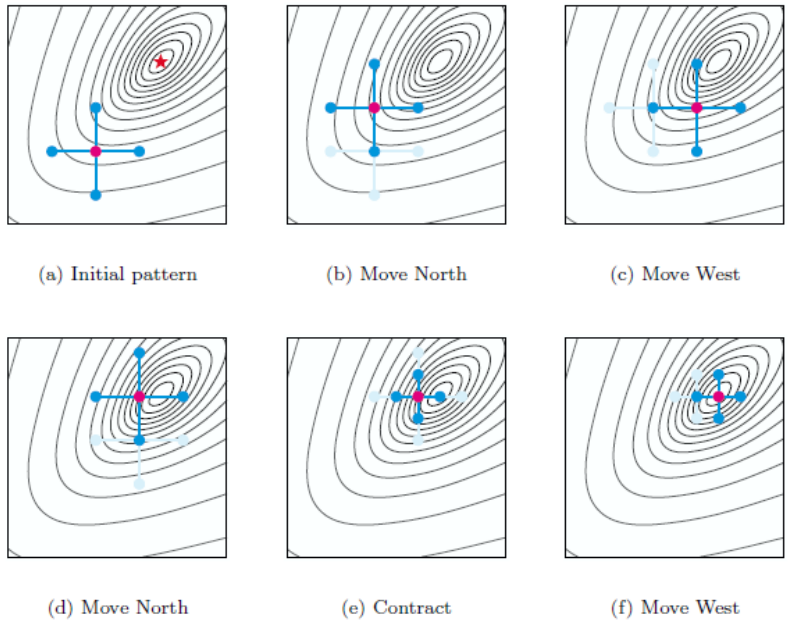
r=„raza” perturbării

rand(a,b) = valoare aleatoare uniform repartizată în [a,b]

# Căutare locală: pattern search

Idee: modificare succesivă a componentelor soluției curente

```
PatternSearch(s,r)
  s=aproximație inițială
  r=valoare inițială
  best=s
  repeat
    s'=s
    for i=1:n
      if f(s+r*e_i)< f(s') then s'=s+r*e_i end
      if f(s-r*e_i)< f(s') then s'=s-r*e_i end
    end
    if s==s' then r=r/2
             else s=s'
    end
    if f(s)<f(best) then best=s
  until <condiție de oprire>
```



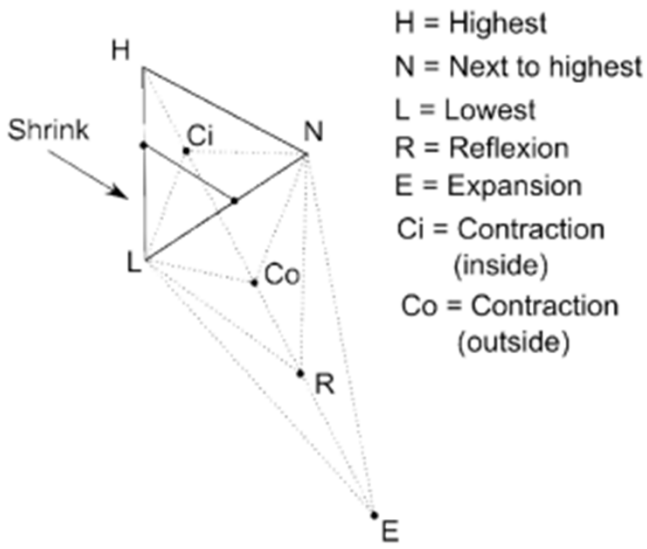

T.G. Kolda et al., Optimization by direct search: new perspectives on some classical and modern methods, SIAM Review, 45(3), 385-482, 2003

Obs:

1. $e_i$=(0,0,...,0,1,0,...,0) (1 se află pe poziția i)
2. la fiecare iterație se construiesc 2n candidați dintre care se alege cel mai bun
3. Algoritm cunoscut sub numele Hooke-Jeeves

# Căutare locală: algoritmul Nelder-Mead

Idee: căutarea se bazează pe utilizarea unui simplex în $R^n$ (set de (n+1) puncte din $R^n$) și aplicarea unor transformări asupra simplexului care permite „explorarea” domeniului soluțiilor




Transformările se bazează pe:

1. Ordonarea elementelor din simplex crescător după valoarea funcției obiectiv (pentru o problemă de minimizare)
2. Calculul mediei $M(x_1,...,x_n)$ a celor mai bune n elemente din simplex
3. Construirea succesivă a unor noi elemente prin: reflexie, expandare, contracție (interioară, exterioară), micșorare simplex

# Căutare locală: algoritmul Nelder-Mead

Selectează (n+1) puncte din $R^n$: $(x_1,x_2,..., x_{n+1})$

Repeat

calculează valorile funcției $(f_1,f_2,..., f_{n+1})$

sortează $(x_1,x_2,..., x_{n+1})$ astfel încât $f_1<=f_2<=...<=f_{n+1}$

$M=(x_1+x_2+...+x_n)/n$

Pas1 (reflexie - R):

$xr=M+r(M-x_{n+1})$;

if $f_1<=f(xr)<f_n$ accept xr; continue;

else goto Pas 2

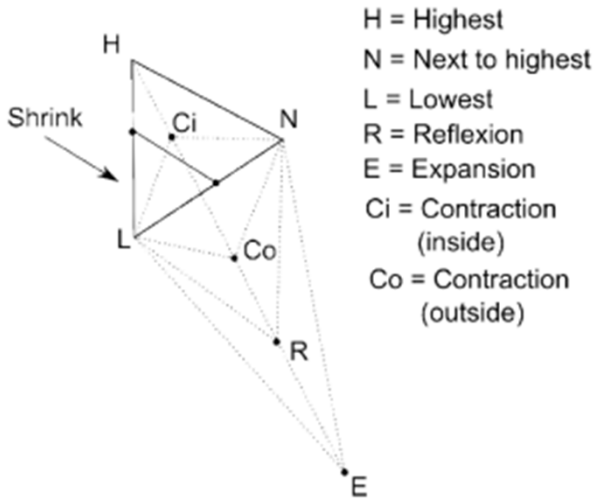
Pas 2 (expandare - E):

if $f(xr)< f_1$ then

$xe=M+e(xr-M)$

if $f(xe)<f(xr)$ then accept xe; continue

else goto Pas 3



# Căutare locală: algoritmul Nelder-Mead

Pas 4 (contracție exterioară/interioară – Co/Ci ):

if $f_n <= f(xr) < f_{n+1}$ then

xc=M+c(xr-M)

if f(xc)<f(xr) accept xc; continue

else goto Pas 5

if $f(xr) >= f_{n+1}$ then

$xcc=M-c(M-x_{n+1})$

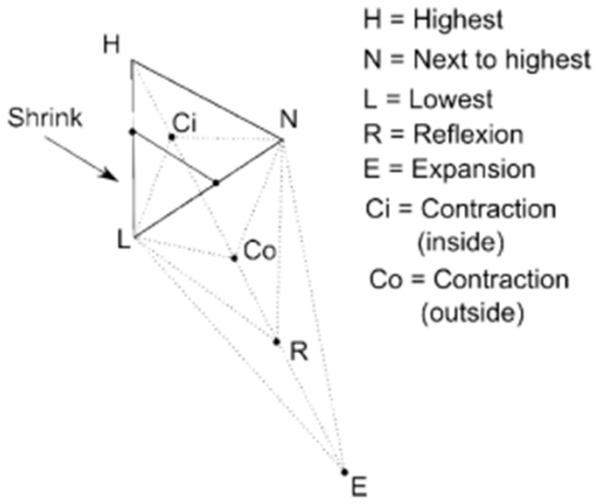
if $f(xcc) < f_{n+1}$ then accept xcc; continue

else goto Pas 5

Pas 5 (Micșorare - Shrink):

construiește un nou simplex:

$x_1, v_2, \ldots, v_{n+1}$ unde $v_i = x_i + s(x_i - x_1)$




Parametrii: r=1, e=2, c=1/2, s=1/2

# De la optimizare locală la optimizare globală

Perturbare: se introduc (ocazional) perturbații aleatoare mari

Exemplu: utilizare distribuție de probabilitate cu suport infinit (de exemplu repartiția normală sau repartiția Cauchy – algoritm Matyas, Solis-Wets)

Restartarea algoritmului: se reia procesul de căutare locală pornind de la altă configurație aleatoare (aleasă aleator)

Exemplu: căutare locală cu restartare (local search with random restarts)

Explorarea optimelor locale: optimul local curent e perturbat și folosit ca punct de pornire pentru căutarea altui optim

Exemplu: căutare locală iterată (iterated local search)

Selecție: se acceptă (ocazional) și configurații de calitate mai slabă

Exemplu: căutare bazată pe simularea procesului de călire (simulated annealing)

# Exemplu: algoritmul Matyas (1960)

s(0) = configurație inițială
k=0  // contor iteratie
e=0  // numar cazuri de esec
repeat
  generează un vector aleator cu componente normal repartizate ($z_1$,…$z_n$)
  IF f(s(k)+z)<f(s(k)) THEN s(k+1)=s(k)+z
    e=0
  ELSE s(k+1)=s(k)
    e=e+1
  k=k+1
UNTIL (k==kmax) OR (e==emax)

Obs. Perturbația aleatoare se aplică de regulă asupra unei singure componente (vectorul z are o singură componentă nenulă)

Problema: cum se aleg parametrii repartiției folosite pentru perturbarea valorii curente ?

Exemplu: N(0,sigma)

# Reminder: generare valori aleatoare cu repartiție normală

Pentru generarea valorilor aleatoare cu repartiție normală (N(0,1)) se poate folosi algoritmul Box-Muller

```
u=rand(0,1)   // valoare aleatoare uniform repartizată in (0,1)
v=rand(0,1)
r=sqrt(-2*ln(u));
z1=r*cos(2*PI*v)
z2=r*sin(2*PI*v)
RETURN z1,z2
    // valorile z1 si z2 pot fi considerate  ca fiind realizări a două variabile
    // aleatoare independente
```

# Reminder: generare valori aleatoare cu repartiție normală

Alta variantă a algoritmului Box-Muller:

repeat

  u=rand(0,1)  // valoare aleatoare uniform repartizată in (0,1)

  v=rand(0,1)

  $w=u^2+v^2$

until $0<w<1$

y=sqrt(-2ln(w)/w)

z1=u*y

z2=v*y

RETURN z1,z2

  // valorile z1 si z2 pot fi considerate ca fiind realizări a două variabile
  // aleatoare independente

Obs: pentru a obține valori corespunzătoare repartiției N(m,sigma) se aplică transformarea: m+z*sigma

# Exemplu: algoritmul Solis-Wets (1981)

s(0) = configurație inițială

k=0;  m(0)=0  // media vectorului perturbatie este ajustata in timp

repeat

generează un vector aleator ($z_1$,…$z_n$) cu  componente avand repartitia N(m(k),1)

IF  f(s(k)+z)<f(s(k)) THEN s(k+1)=s(k)+z;

m(k+1)=0.4*z+0.2*m(k)

IF f(s(k)-z)<min{f(s(k)),f(s(k)+z)}  THEN s(k+1)=s(k)-z;

m(k+1)=m(k)-0.4*z

IF f(s(k)-z)>f(s(k)) AND f(s(k)+z)>f(s(k)) THEN

s(k+1):=s(k)

m(k+1):=0.5*m(k)

k:=k+1

UNTIL (k==kmax)

# Căutare locală cu restartare

Idee:

- procesul de căutare se repetă de mai multe ori pornind de la configurații inițiale diferite
- se alege configurația cea mai bună

Observații:

- Condiția de oprire a căutării locale se poate baza pe o decizie aleatoare (ex: intervalul de timp alocat poate fi aleator)
- Etapele de căutare aleatoare sunt independente (noua configurație inițială este aleasă aleator) – nu se folosește informația colectată la etapa anterioară

Random Restart

```
s=configurație inițială
best=s
Repeat
    repeat
        r=perturb(s)
        if f(r)<=f(s) then s=r
    until <conditie oprire căutare
        locală>
    if f(s)<f(best) then best =s
    s=altă configurație inițială
until  <conditie oprire căutare>
return best
```

# Căutare locală iterată

Idee:

- Configurația inițială de la următoarea etapă se alege în vecinătatea optimului local identificat la etapa anterioară (eventual doar dacă acesta este mai bun decât cel identificat anterior)

Observații:

- Pentru generarea configurației inițiale corespunzătoare fiecărei iterații se utilizează o perturbare mai „agresivă” decât cea utilizată în etapa de căutare locală

Iterated Local Search (ILS)

```
s=configurație inițială
s0=s; best=s
Repeat
    repeat
       r=perturbSmall(s)
       if f(r)<=f(s) then s=r
    until <condiție oprire căutare
       locală>
    if f(s)<f(best) then best =s
    s0=alege(s0,s)
    s=perturbLarge(s0)
until  <conditie oprire căutare>
return best
```

# Simulated Annealing

Idee:

- se acceptă, cu o anumită probabilitate, și ajustari ale configurației curente care conduc la creșterea funcției obiectiv

Sursa de inspirație:

- procesul de reorganizare a structurii unui solid supus unui tratament termic:
  - Solidul este încălzit (topit): particulele sunt distribuite într-o manieră aleatoare
  - Solidul este răcit lent: particulele se reorganizează pentru a se ajunge la configurații de energie din ce în ce mai mică

Terminologie:

simulated annealing = tratament termic simulat = călire simulată

Istoric: Metropolis(1953), Kirkpatrick, Gelatt, Vecchi (1983), Cerny (1985)

# Simulated Annealing

Analogie:

| Proces fizic: | | Problemă de minimizare: |
|---|---|---|
| • Energia sistemului | → | Funcție obiectiv |
| • Starea sistemului | → | Configurație (soluție candidat) |
| • Modificarea stării sistemului | → | Perturbarea configurației curente |
| • Temperatura | → | Parametru de control a procesului de optimizare |

SA= metoda euristică inspirată de procese fizice

# Simulated Annealing

Puțină fizică:

- fiecare stare a unui sistem este caracterizată de o anumită probabilitate de apariție

- probabilitatea asociată unei stări depinde de energia stării și de temperatura sistemului (ex: distribuția Boltzmann)

$$P_T(s) = \frac{1}{Z(T)} \exp(-\frac{E(s)}{k_B T})$$

$$Z(T) = \sum_{s \in S} \exp(-\frac{E(s)}{k_B T})$$

E(s) = energia stării s
T = temperatura sistemului
$k_B$ = constanta Boltzmann
Z(T)=funcția de partiție
(factor de normalizare)

# Simulated Annealing

Puțină fizică:

- Valori mari ale lui T (T tinde la infinit): argumentul lui exp este aproape 0 => stările sunt echiprobabile

- Valori mici ale lui T (T tinde la 0): vor avea probabilitate nenulă doar stările cu energia nulă

$$P_T(s) = \frac{1}{Z(T)} \exp(-\frac{E(s)}{k_B T})$$

$$Z(T) = \sum_{s \in S} \exp(-\frac{E(s)}{k_B T})$$

E(s) = energia stării s
T = temperatura sistemului
$k_B$ = constanta Boltzmann
Z(T)=funcția de partiție
(factor de normalizare)

# Simulated Annealing

Cum folosim acest lucru pentru rezolvarea unei probleme de optimizare ?

- Ar fi suficient să generăm configurații în conformitate cu distribuția Boltzmann pentru valori din ce în ce mai mici ale temperaturii

- **Problema:** dificil de calculat Z(T) (presupune calculul unei sume pentru toate stările posibile, adică generarea tuturor configurațiilor spațiului de căutare - IMPOSIBIL de realizat practic dacă spațiul configurațiilor este mare)

- **Soluție:** se aproximează distribuția prin simularea evoluției unui proces stohastic (lanț Markov) a cărui distribuție staționară coincide cu distribuția Boltzmann => algoritmul Metropolis

# Simulated Annealing

Algoritmul Metropolis (1953)

s(0)=aproximație inițială

k=0

REPEAT

s'=perturb(s(k))

IF f(s')<f(s(k)) THEN s(k+1)=s' (necondiționat)

ELSE s(k+1)=s'

cu probabilitatea min{1,exp(-(f(s')-f(s(k))/T)}

k=k+1

UNTIL "este indeplinita o conditie de terminare"

# Simulated Annealing

## Algoritmul Metropolis – proprietăți

- Alta probabilitate de acceptare:

  $P(s(k+1)=s') = 1/(1+\exp((f(s')-f(s(k))/T))$

- Implementarea unei reguli de atribuire cu o anumită probabilitate

  u=rand(0,1)

  IF u<P(s(k+1)=x') THEN s(k+1)=s'

  ELSE s(k+1)=s(k)

- Valori mari pentru T -> probabilitate mare de acceptare a oricarei configurații (similar cu căutarea pur aleatoare)

  Valori mici pentru T -> probabilitate mare de acceptare doar pentru configurațiile care conduc la micșorarea funcției obiectiv (similar cu o metodă de descreștere sau căutare de tip greedy)

# Simulated Annealing

Algoritmul Metropolis – proprietăți

- Generarea unor noi configurații depinde de problema de rezolvat

Optimizare în domenii continue

$s'=s+z$

$s=(z_1,\ldots,z_n)$

$z_i$ : generata in cf. cu repartitia

- N(0,T)
- Cauchy(T) (Fast SA)
- altele

Optimizare combinatorială

Noua configurație se selectează determinist/aleator din vecinătatea configurației curente

Exemplu: TSP – transformare de tip 2-opt

# Simulated Annealing

Simulated Annealing = aplicare repetată a algoritmului Metropolis pentru valori din ce în ce mai mici ale temperaturii

Structura generală

Init s(0), T(0)

i=0

REPEAT

  aplică Metropolis (pentru una sau mai multe iteratii)

  calcul T(i+1)

  i=i+1

UNTIL T(i)<eps

Problema: alegerea schemei de modificare a temperaturii (“cooling scheme”)

# Simulated Annealing

Scheme de răcire:

$T(k)=T(0)/(k+1)$

$T(k)=T(0)/\ln(k+c)$

$T(k)=aT(k-1)$ $(a<1$, ex: $a=0.995)$

Obs. 1. T(0) se alege astfel încât la primele iterații să fie acceptate aproape toate configurațiile generate (pentru a asigura o bună explorare a spațiului soluțiilor)

2. Pe parcursul procesului iterativ este indicat să se rețină de fiecare dată cea mai bună valoare întâlnită

# Simulated Annealing

Proprietăți de convergență:

Dacă sunt satisfăcute proprietățile:

- Pg(s(k+1)=s'|s(k)=s)>0 pentru orice s și s' (probabilitatea de trecere între oricare două configurații este nenulă)
- Pa(s(k+1)=s'|s(k)=s)=min{1,exp(-(f(s')-f(s))/T)} (probabilitate de acceptare de tip Metropolis)
- T(k)=C/lg(k+c) (schema logaritmică de răcire)

Atunci P(f(s(k))=f(s*)) -> 1 (s(k) tinde în probabilitate la minimul global s* când k tinde la infinit)

# Simulated Annealing

Variante: alte probabilități de acceptare (Tsallis)

$$P_a(s') = \begin{cases} 1, & \Delta f \le 0 \\ (1-(1-q)\Delta f / T)^{1/(1-q)}, & \Delta f > 0,\ (1\text{-}q)\Delta f \le 1 \\ 0, & \Delta f > 0,\ (1\text{-}q)\Delta f > 1 \end{cases}$$

$$\Delta f = f(s') - f(s)$$

$$q \in (0,1)$$

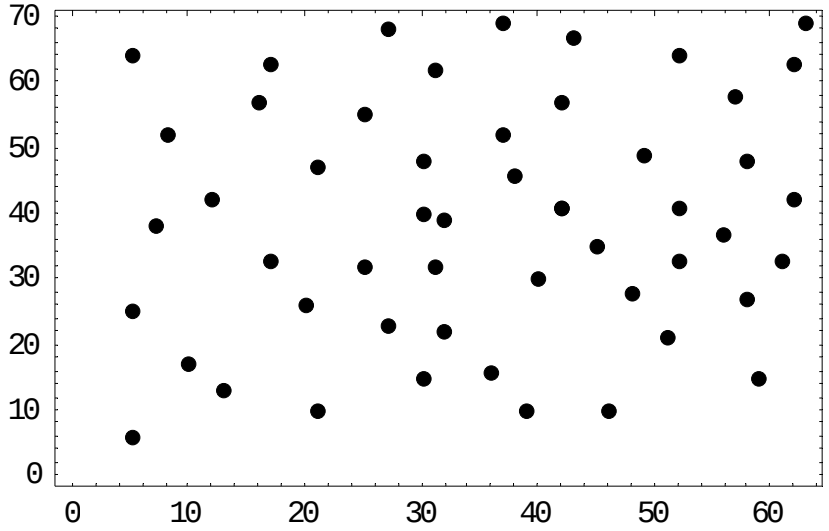
# Simulated Annealing

Exemplu: problema comis voiajorului
(TSPLib: http://comopt.ifi.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95)
Instanta test: eil51 – 51 orase

Parametrii:

- 5000 iterații cu modificarea parametrului T la fiecare 100 de iterații
- T(k)=T(0)/(1+log(k))

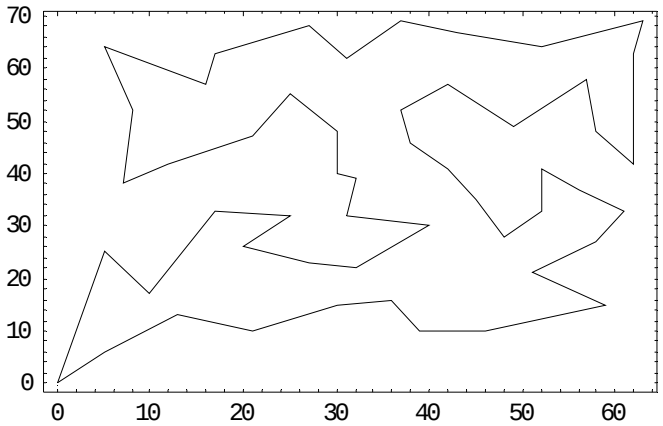
Distribuția oraselor



# Simulated Annealing

Exemplu: problema comis voiajorului

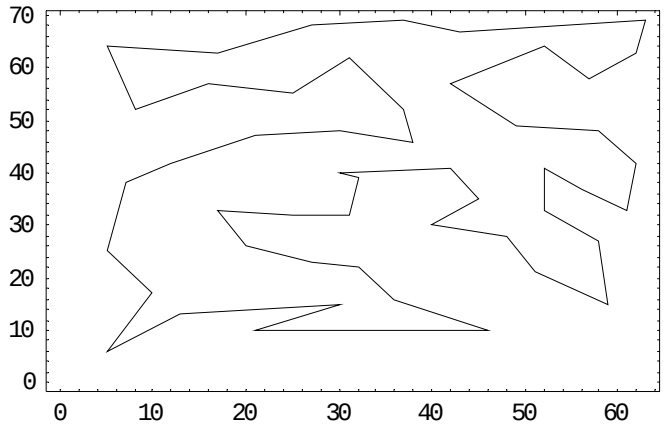
Instanta test: eil51 (TSPlib)




T(0)=10,cost=478.384

Cost minim: 426

T(0)=5, cost=474.178




T(0)=1, cost=481.32